

UWAGA – w przypadku publikowania wyników MS w czasopismach z IF - proszę o kontakt w celu podania/sprawdzenia dokładnych danych pomiarowych

### METODA AuNPET (“złotowa”)

**LDI MS analysis.** Laser desorption/ionization (LDI) time-of-flight (ToF) mass spectrometry experiments were performed using a Bruker Autoflex Speed reflectron time-of-flight mass spectrometer, equipped with a SmartBeam II laser (352 nm) in 80-2000 m/z range. The laser impulse energy was approximately 60–120  $\mu$ J, the laser repetition rate was 1000 Hz, and the deflection value was set on  $m/z < 80$  Da. The first accelerating voltage was held at 19 kV, and the second ion-source voltage was held at 16.7 kV. The reflector voltages used were 21 kV (first) and 9.55 kV (second). The data was recorded and analyzed using the software provided with the Autoflex instrument (FlexAnalysis version 3.3). Mass calibration (typically cubic calibration based on five to seven points) was performed using internal standards (gold ions and clusters from  $Au^+$  to  $Au_{10}^+$  depending on  $m/z$  range).

#### Wykonanie:

##### A. bez dodatkowej matrycy:

**LDI MS sample preparation.** Sample solution (ca. 5 mg/ml in  $H_2O$ ) was placed on AuNPET (0.5  $\mu$ L). Sum of ca. 7000 scans was collected for each sample.

A. z dodatkową matrycą (w nazwie pliku jest zawsze zaznaczona obecność matrycy, zwykle CHCA lub DHB; stosowane raczej w zakresach powyżej 2-3kDa):

**LDI MS sample preparation.** Sample solution (ca. 5 mg/ml in  $H_2O$ ) was placed on AuNPET (0.5  $\mu$ L) with 0.5  $\mu$ L standard CHCA solution (1:1 water:acetonitrile with 0.2% TFA). Sum of ca. 7000 scans was collected for each sample.

Z komentarzem [t1]: wstawic zaokrąglony do dziesiątek zakres pomiarowy

Z komentarzem [t2]: wstawic zaokrągloną do dziesiątek dolną wartość zakresu m/z (zwykle 80, 30, albo 100)

Z komentarzem [t3]: można odczytać z plików widma, zwykle dajemy 5000

Z komentarzem [t4]: jw

Proszę zacytować:

J. Sekuła, J. Nizioł, W. Rode and T. Ruman, “Gold nanoparticle-enhanced target (AuNPET) as universal solution for laser desorption/ionization mass spectrometry analysis and imaging of low molecular weight compounds”, *Analytica Chimica Acta* 875, 2015, 61–72.

UWAGA – w przypadku publikowania wyników MS w czasopismach z IF - proszę o kontakt w celu podania/sprawdzenia dokładnych danych pomiarowych

## Opis po polsku:

Próbki analizowano przy pomocy spektrometru mas Bruker Autoflex Speed z analizatorem typu ToF w trybie dodatnim z reflektorem w zakresie  $m/z$  od 60 do 1500. Instrument wyposażony był w laser SmartBeam II, 355 nm; energia impulsu lasera ok. 100 – 190  $\mu\text{J}$ ; częstotliwość lasera 1000 Hz; Zastosowano deflekcję jonów poniżej  $m/z$  60. Instrument kalibrowano na pikach emitowanych przez AuNPET (kalibracja wewnętrzna) tj.:  $\text{Au}^+$  (196,9666 Da),  $\text{Au}_2^+$  (393,9331 Da),  $\text{Au}_3^+$  (590.8997 Da),  $\text{Au}_4^+$  (787.8662 Da),  $\text{Au}_5^+$  (984.8328 Da),  $\text{Au}_6^+$  (1181.799 Da),  $\text{Au}_7^+$  (1378.766 Da),  $\text{Au}_8^+$  (1575.732 Da),  $\text{Au}_9^+$  (1772.699 Da),  $\text{Au}_{10}^+$  (1969.666 Da).

Płytki AuNPET wykonana została przez zespół pracowników Pracowni Chemii Bioorganicznej PRZ. Teoretyczne wartości  $m/z$  obliczono z wykorzystaniem (on-line) kalkulatora pod adresem <http://www.chemcalc.org/analyse>

### Wykonanie:

#### A. bez dodatkowej matrycy:

**Wykonanie próbek do badań LDI MS.** Roztwór próbki badanej (ok. 5 mg/ml w  $\text{H}_2\text{O}$ ) naniesiono na powierzchnię płytki AuNPET (0,5  $\mu\text{L}$ ). Do uzyskania finalnego widma MS użyto wyniku sumowania widm z 7000 strzałów lasera.

A. z dodatkową matrycą (w nazwie pliku jest zawsze zaznaczona obecność matrycy, zwykle CHCA lub DHB; stosowane raczej w zakresach powyżej 2-3kDa):

**Wykonanie próbek do badań LDI MS.** Roztwór próbki badanej (ok. 5 mg/ml w  $\text{H}_2\text{O}$ ) naniesiono na powierzchnię płytki AuNPET (0,5  $\mu\text{L}$ ) wraz z 0,5  $\mu\text{L}$  standardowego roztworu CHCA (1:1 woda:acetonitryl z 0,2% TFA). Do uzyskania finalnego widma MS użyto wyniku sumowania widm z 7000 strzałów lasera.

Proszę zacytować:

J. Sekuła, J. Nizioł, W. Rode and T. Ruman, “Gold nanoparticle-enhanced target (AuNPET) as universal solution for laser desorption/ionization mass spectrometry analysis and imaging of low molecular weight compounds”, *Analytica Chimica Acta* 875, 2015, 61–72.

TFA = kwas trifluorooctowy; CHCA = kwas  $\alpha$ -cyjanocynamonowy; DHB = kwas 2,5-dihydroksybenzoesowy

Z komentarzem [t5]: jw

Z komentarzem [t6]: jak w wer ang