A MALDI TOF/TOF based approach for the identification of D-amino acids in biologically active peptides and proteins

Johannes Köhbach, Christian W. Gruber, Christian Becker, David P. Kreil and Alexander Jilek

Supplemental material

Fig. S-1: R matrices calculated for designated model peptides with or without CID. Upper values represent $R_{i,j}$ (i,j were chosen to give an $R_{chiral} \geq 1$), lower values represent the standard deviation.

Fig. S-1-1

Peptide: **IIGPVLCa** no CID applied

i,j	z6	z5	y6	y5	y4	y2	b7	b6	b5	b2	a7	a6	a5
z5	**1.37** 0.07												
y6	**1.12** 0.03	**1.53** 0.10											
y5	**1.18** 0.04	**1.62** 0.14	**1.05** 0.05										
y4	**1.57** 0.05	**2.15** 0.17	**1.40** 0.05	**1.33** 0.01									
y2	**1.10** 0.04	**1.51** 0.09	**1.02** 0.05	**1.07** 0.04	**1.43** 0.04								
b7	**1.35** 0.09	**1.85** 0.11	**1.21** 0.11	**1.15** 0.09	**1.16** 0.09	**1.23** 0.10							
b6	**1.26** 0.04	**1.73** 0.13	**1.12** 0.05	**1.07** 0.02	**1.25** 0.01	**1.15** 0.03	**1.08** 0.07						
b5	**1.14** 0.05	**1.56** 0.13	**1.02** 0.04	**1.04** 0.02	**1.38** 0.02	**1.04** 0.03	**1.19** 0.09	**1.11** 0.03					
b2	**1.13** 0.03	**1.21** 0.08	**1.26** 0.05	**1.33** 0.02	**1.77** 0.03	**1.24** 0.03	**1.53** 0.12	**1.42** 0.02	**1.28** 0.03				
a7	**1.24** 0.04	**1.69** 0.12	**1.11** 0.06	**1.05** 0.06	**1.27** 0.07	**1.13** 0.07	**1.09** 0.09	**1.02** 0.06	**1.09** 0.07	**1.40** 0.07			
a6	**1.21** 0.03	**1.13** 0.06	**1.36** 0.02	**1.43** 0.05	**1.91** 0.06	**1.33** 0.05	**1.64** 0.14	**1.53** 0.05	**1.38** 0.04	**1.08** 0.03	**1.50** 0.08		
a5	**1.17** 0.02	**1.17** 0.06	**1.31** 0.03	**1.38** 0.07	**1.83** 0.09	**1.28** 0.07	**1.58** 0.13	**1.47** 0.07	**1.33** 0.08	**1.03** 0.04	**1.44** 0.04	**1.04** 0.03	
a2	**1.66** 0.14	**1.22** 0.12	**1.86** 0.17	**1.96** 0.18	**2.60** 0.24	**1.82** 0.14	**2.25** 0.33	**2.09** 0.19	**1.89** 0.20	**1.47** 0.12	**2.06** 0.20	**1.37** 0.12	**1.42** 0.10

Fig. S-1-2

Peptide: **GIGPVLCa** no CID applied

	z6	z5	y6	y5	y4	y2	b7	b6	b5	b2	a7	a6	a5
z5	**1.02** 0.30												
y6	**1.18** 0.30	**1.21** 0.07											
y5	**1.03** 0.31	**1.05** 0.05	**1.15** 0.07										
y4	**1.09** 0.31	**1.10** 0.04	**1.09** 0.05	**1.05** 0.04									
y2	**1.17** 0.31	**1.14** 0.03	**1.37** 0.04	**1.20** 0.06	**1.26** 0.02								
b7	**1.22** 0.34	**1.19** 0.09	**1.43** 0.06	**1.25** 0.08	**1.31** 0.07	**1.04** 0.06							
b6	**1.13** 0.34	**1.10** 0.06	**1.33** 0.07	**1.16** 0.02	**1.22** 0.03	**1.03** 0.05	**1.08** 0.06						
b5	**1.01** 0.30	**1.03** 0.03	**1.18** 0.06	**1.02** 0.02	**1.08** 0.02	**1.17** 0.04	**1.22** 0.08	**1.13** 0.02					
b2	**1.11** 0.38	**1.08** 0.11	**1.30** 0.15	**1.13** 0.18	**1.19** 0.14	**1.06** 0.11	**1.11** 0.12	**1.03** 0.14	**1.10** 0.14				
a7	**1.02** 0.28	**1.04** 0.03	**1.16** 0.04	**1.01** 0.04	**1.06** 0.02	**1.19** 0.03	**1.24** 0.07	**1.15** 0.03	**1.02** 0.02	**1.12** 0.14			
a6	**1.44** 0.40	**1.41** 0.07	**1.70** 0.05	**1.48** 0.06	**1.55** 0.03	**1.23** 0.04	**1.18** 0.05	**1.27** 0.04	**1.44** 0.05	**1.31** 0.17	**1.46** 0.03		
a5	**1.82** 0.50	**1.77** 0.03	**2.14** 0.11	**1.86** 0.10	**1.96** 0.05	**1.56** 0.04	**1.49** 0.11	**1.61** 0.07	**1.82** 0.07	**1.65** 0.15	**1.85** 0.06	**1.26** 0.06	
a2	**1.16** 0.55	**1.22** 0.31	**1.01** 0.25	**1.16** 0.28	**1.10** 0.29	**1.39** 0.35	**1.44** 0.42	**1.34** 0.34	**1.19** 0.29	**1.32** 0.43	**1.17** 0.28	**1.71** 0.42	**2.16** 0.58

Fig. S-1-3

Peptide: **KIGPVLCa** no CID applied

	z5	Y7	Y6	y5	y4	y2	IGPVL	IGPV	GPV	b7	b6	b5	a7	a6	a5
Y7	**3.36** 1.56														
Y6	**1.75** 0.07	**5.83** 2.48													
y5	**1.01** 0.02	**3.38** 1.50	**1.72** 0.04												
y4	**1.12** 0.01	**3.74** 1.72	**1.57** 0.05	**1.10** 0.02											
y2	**1.18** 0.02	**2.86** 1.37	**2.06** 0.10	**1.20** 0.03	**1.32** 0.02										
IGPVL	**1.02** 0.05	**3.44** 1.43	**1.71** 0.08	**1.01** 0.06	**1.09** 0.05	**1.20** 0.07									
IGPV	**1.20** 0.03	**2.83** 1.37	**2.09** 0.14	**1.21** 0.06	**1.33** 0.05	**1.01** 0.03	**1.22** 0.10								
GPV	**1.35** 0.03	**2.51** 1.24	**2.36** 0.15	**1.37** 0.06	**1.51** 0.05	**1.14** 0.02	**1.38** 0.10	**1.13** 0.02							
b7	**1.08** 0.09	**3.05** 1.25	**1.88** 0.12	**1.09** 0.07	**1.20** 0.08	**1.10** 0.09	**1.10** 0.12	**1.11** 0.12	**1.26** 0.13						
b6	**1.09** 0.06	**3.05** 1.45	**1.91** 0.08	**1.11** 0.05	**1.22** 0.06	**1.08** 0.07	**1.12** 0.08	**1.09** 0.09	**1.23** 0.10	**1.02** 0.07					
b5	**1.06** 0.02	**3.17** 1.44	**1.85** 0.04	**1.07** 0.02	**1.18** 0.01	**1.12** 0.03	**1.08** 0.05	**1.13** 0.05	**1.28** 0.05	**1.02** 0.06	**1.04** 0.04				
a7	**1.01** 0.05	**3.38** 1.65	**1.74** 0.14	**1.01** 0.06	**1.11** 0.06	**1.19** 0.07	**1.01** 0.10	**1.21** 0.06	**1.36** 0.08	**1.09** 0.09	**1.10** 0.10	**1.06** 0.06			
a6	**1.36** 0.02	**2.47** 1.15	**2.39** 0.08	**1.38** 0.04	**1.52** 0.02	**1.16** 0.02	**1.39** 0.06	**1.14** 0.04	**1.01** 0.03	**1.27** 0.10	**1.24** 0.07	**1.29** 0.03	**1.38** 0.07		
a5	**1.45** 0.03	**2.32** 1.10	**2.54** 0.12	**1.47** 0.05	**1.62** 0.04	**1.23** 0.03	**1.48** 0.10	**1.21** 0.03	**1.08** 0.03	**1.35** 0.11	**1.32** 0.09	**1.37** 0.04	**1.46** 0.05	**1.06** 0.02	
a4	**1.09** 0.01	**3.08** 1.45	**1.92** 0.09	**1.11** 0.03	**1.22** 0.03	**1.08** 0.01	**1.12** 0.06	**1.09** 0.02	**1.23** 0.02	**1.02** 0.09	**1.00** 0.07	**1.04** 0.03	**1.10** 0.06	**1.25** 0.02	**1.32** 0.03

Fig. S-1-4

Peptide: **EIGPVLCa** no CID applied

	z5	y6	Y6	y5	y4	y2	b7	b6	b5	a7	a6
y6	**1.01** 0.02										
Y6	**1.25** 0.08	**1.25** 0.10									
y5	**1.56** 0.06	**1.55** 0.08	**1.94** 0.07								
y4	**1.33** 0.06	**1.32** 0.07	**1.66** 0.15	**1.18** 0.10							
y2	**1.21** 0.13	**1.20** 0.13	**1.51** 0.22	**1.31** 0.20	**1.11** 0.07						
b7	**1.61** 0.76	**1.62** 0.75	**1.28** 0.57	**2.49** 1.16	**2.18** 1.05	**2.04** 1.03					
b6	**1.34** 0.06	**1.33** 0.07	**1.66** 0.06	**1.17** 0.03	**1.01** 0.09	**1.12** 0.18	**2.12** 0.96				
b5	**1.00** 0.04	**1.01** 0.05	**1.24** 0.10	**1.57** 0.12	**1.33** 0.01	**1.21** 0.09	**1.64** 0.79	**1.34** 0.11			
a7	**1.10** 0.08	**1.11** 0.10	**1.14** 0.12	**1.72** 0.17	**1.46** 0.06	**1.32** 0.09	**1.51** 0.79	**1.48** 0.17	**1.10** 0.04		
a6	**1.66** 0.05	**1.67** 0.03	**1.33** 0.09	**2.59** 0.15	**2.20** 0.12	**2.00** 0.22	**1.44** 0.94	**2.21** 0.13	**1.65** 0.10	**1.51** 0.15	
a5	**2.24** 0.13	**2.25** 0.14	**1.80** 0.16	**3.50** 0.30	**2.97** 0.09	**2.69** 0.21	**1.99** 1.34	**2.99** 0.26	**2.23** 0.07	**2.03** 0.13	**1.35** 0.07

Fig. S-1-5

Peptide: **FIGPVLCa** no CID applied

	z5	y6	y5	y4	IGPVL	IGPV	GPV	b7	b6	b5	a7	a6	a5Y4
y6	**1.27** 0.10												
y5	**1.28** 0.12	**1.00** 0.04											
y4	**1.53** 0.13	**1.20** 0.04	**1.20** 0.02										
IGPVL	**1.07** 0.06	**1.36** 0.03	**1.37** 0.07	**1.64** 0.07									
IGPV	**1.08** 0.07	**1.37** 0.05	**1.38** 0.05	**1.65** 0.06	**1.01** 0.03								
GPV	**1.11** 0.06	**1.15** 0.04	**1.15** 0.05	**1.38** 0.05	**1.19** 0.02	**1.19** 0.01							
b7	**1.35** 0.17	**1.06** 0.06	**1.06** 0.04	**1.13** 0.06	**1.45** 0.11	**1.46** 0.10	**1.22** 0.09						
b6	**1.24** 0.12	**1.03** 0.04	**1.03** 0.01	**1.23** 0.03	**1.33** 0.06	**1.34** 0.04	**1.12** 0.04	**1.09** 0.04					
b5	**1.24** 0.12	**1.03** 0.04	**1.03** 0.01	**1.24** 0.01	**1.33** 0.06	**1.33** 0.05	**1.12** 0.04	**1.09** 0.05	**1.00** 0.01				
a7	**1.21** 0.09	**1.05** 0.02	**1.06** 0.04	**1.27** 0.04	**1.29** 0.02	**1.30** 0.03	**1.09** 0.02	**1.12** 0.07	**1.03** 0.03	**1.03** 0.03			
a6	**1.18** 0.08	**1.50** 0.04	**1.50** 0.06	**1.80** 0.05	**1.10** 0.02	**1.09** 0.03	**1.31** 0.03	**1.59** 0.10	**1.46** 0.05	**1.46** 0.05	**1.42** 0.02		
a5Y4	**1.25** 0.08	**1.59** 0.05	**1.59** 0.05	**1.91** 0.05	**1.16** 0.03	**1.16** 0.01	**1.38** 0.01	**1.68** 0.10	**1.55** 0.04	**1.54** 0.05	**1.51** 0.03	**1.06** 0.02	
a3	**1.30** 0.10	**1.02** 0.02	**1.02** 0.02	**1.18** 0.02	**1.39** 0.04	**1.40** 0.03	**1.17** 0.03	**1.04** 0.05	**1.05** 0.02	**1.05** 0.02	**1.08** 0.02	**1.53** 0.03	**1.62** 0.03

Fig. S-1-6

Peptide: **SIGPVLCa** no CID applied

	z5	y5	y4	y2	IGPV	b7-18	b7	b6-18	b6	b5-18	b5	a7	a6
y5	**1.23** 0.06												
y4	**1.06** 0.05	**1.16** 0.04											
y2	**1.05** 0.05	**1.17** 0.08	**1.01** 0.04										
IGPV	**1.11** 0.07	**1.36** 0.14	**1.17** 0.09	**1.17** 0.08									
b7-18	**1.09** 0.09	**1.12** 0.09	**1.03** 0.05	**1.04** 0.07	**1.21** 0.11								
b7	**1.33** 0.16	**1.64** 0.14	**1.41** 0.13	**1.41** 0.19	**1.20** 0.16	**1.46** 0.12							
b6-18	**1.05** 0.07	**1.29** 0.08	**1.11** 0.03	**1.10** 0.03	**1.06** 0.08	**1.14** 0.05	**1.27** 0.13						
b6	**1.13** 0.05	**1.38** 0.03	**1.19** 0.03	**1.19** 0.06	**1.02** 0.09	**1.23** 0.09	**1.18** 0.10	**1.07** 0.05					
b5-18	**1.00** 0.07	**1.22** 0.13	**1.06** 0.08	**1.05** 0.04	**1.11** 0.09	**1.09** 0.12	**1.33** 0.25	**1.05** 0.08	**1.13** 0.10				
b5	**1.08** 0.04	**1.32** 0.05	**1.14** 0.02	**1.13** 0.04	**1.03** 0.07	**1.17** 0.06	**1.24** 0.13	**1.03** 0.04	**1.05** 0.03	**1.08** 0.08			
a7	**1.08** 0.03	**1.32** 0.10	**1.14** 0.04	**1.13** 0.03	**1.03** 0.05	**1.18** 0.08	**1.24** 0.15	**1.03** 0.05	**1.05** 0.06	**1.08** 0.06	**1.00** 0.03		
a6	**1.86** 0.05	**2.28** 0.13	**1.97** 0.05	**1.96** 0.08	**1.68** 0.09	**2.03** 0.12	**1.39** 0.13	**1.78** 0.08	**1.65** 0.07	**1.86** 0.15	**1.73** 0.04	**1.73** 0.04	
a5	**2.71** 0.12	**3.32** 0.30	**2.87** 0.14	**2.85** 0.10	**2.45** 0.09	**2.96** 0.19	**2.03** 0.25	**2.59** 0.11	**2.40** 0.18	**2.71** 0.14	**2.52** 0.11	**2.51** 0.04	**1.46** 0.05

Fig. S-1-7

Peptide: **AIGPVLCa** no CID applied

	z5	y6	y5	y4	y2	IGPV	GPV	b7	b6	b5	b4	a7	a6
y6	**1.43** 0.08												
y5	**1.71** 0.11	**1.20** 0.06											
y4	**1.85** 0.18	**1.29** 0.06	**1.08** 0.07										
y2	**1.32** 0.12	**1.09** 0.09	**1.30** 0.10	**1.40** 0.06									
IGPV	**1.05** 0.04	**1.50** 0.07	**1.80** 0.12	**1.95** 0.17	**1.39** 0.15								
GPV	**1.08** 0.03	**1.32** 0.06	**1.58** 0.11	**1.71** 0.15	**1.22** 0.10	**1.14** 0.05							
b7	**1.04** 0.14	**1.38** 0.17	**1.65** 0.22	**1.79** 0.30	**1.28** 0.27	**1.09** 0.11	**1.04** 0.16						
b6	**1.73** 0.11	**1.21** 0.08	**1.01** 0.04	**1.07** 0.08	**1.32** 0.15	**1.82** 0.10	**1.60** 0.12	**1.67** 0.18					
b5	**1.55** 0.14	**1.09** 0.06	**1.10** 0.05	**1.19** 0.03	**1.18** 0.03	**1.64** 0.14	**1.44** 0.11	**1.50** 0.27	**1.12** 0.09				
b4	**1.02** 0.06	**1.40** 0.07	**1.68** 0.12	**1.81** 0.08	**1.30** 0.06	**1.07** 0.08	**1.06** 0.05	**1.02** 0.18	**1.70** 0.16	**1.52** 0.07			
a7	**1.35** 0.11	**1.07** 0.07	**1.27** 0.10	**1.38** 0.15	**1.03** 0.16	**1.42** 0.06	**1.25** 0.11	**1.30** 0.07	**1.29** 0.07	**1.16** 0.14	**1.33** 0.16		
a6	**1.18** 0.06	**1.69** 0.04	**2.02** 0.10	**2.18** 0.11	**1.56** 0.11	**1.12** 0.05	**1.27** 0.06	**1.23** 0.17	**2.05** 0.15	**1.83** 0.10	**1.20** 0.05	**1.59** 0.14	
a5	**1.52** 0.03	**2.18** 0.11	**2.60** 0.15	**2.82** 0.23	**2.01** 0.17	**1.45** 0.05	**1.64** 0.06	**1.58** 0.21	**2.64** 0.15	**2.36** 0.19	**1.55** 0.09	**2.05** 0.15	**1.29** 0.04

Fig. S-1-8

Peptide: **IKGPVLCa** no CID applied

	z6	z5	y6	y5	y4	Y2	b7	b6	b5	b2c	a7	a6	a5	a4
z5	**1.10** 0.04													
y6	**1.03** 0.04	**1.07** 0.02												
y5	**1.04** 0.07	**1.06** 0.04	**1.01** 0.03											
y4	**1.09** 0.06	**1.20** 0.04	**1.13** 0.03	**1.13** 0.02										
Y2	**1.10** 0.04	**1.00** 0.03	**1.07** 0.02	**1.06** 0.05	**1.20** 0.05									
b7	**1.05** 0.05	**1.05** 0.04	**1.01** 0.04	**1.01** 0.06	**1.14** 0.05	**1.05** 0.05								
b6	**1.05** 0.07	**1.05** 0.05	**1.02** 0.03	**1.01** 0.01	**1.15** 0.02	**1.05** 0.05	**1.00** 0.06							
b5	**1.01** 0.06	**1.09** 0.03	**1.02** 0.02	**1.02** 0.02	**1.11** 0.01	**1.09** 0.04	**1.03** 0.06	**1.04** 0.02						
b2	**1.16** 0.07	**1.05** 0.07	**1.13** 0.05	**1.12** 0.06	**1.27** 0.08	**1.05** 0.05	**1.11** 0.10	**1.11** 0.06	**1.15** 0.06					
a7	**1.01** 0.05	**1.09** 0.04	**1.02** 0.04	**1.03** 0.06	**1.10** 0.05	**1.09** 0.03	**1.04** 0.06	**1.04** 0.07	**1.00** 0.05	**1.15** 0.07				
a6	**1.08** 0.02	**1.02** 0.04	**1.05** 0.03	**1.04** 0.06	**1.18** 0.06	**1.02** 0.02	**1.03** 0.05	**1.03** 0.06	**1.06** 0.05	**1.08** 0.06	**1.07** 0.04			
a5	**1.12** 0.03	**1.02** 0.05	**1.09** 0.03	**1.08** 0.06	**1.22** 0.06	**1.02** 0.03	**1.07** 0.07	**1.07** 0.06	**1.10** 0.05	**1.04** 0.04	**1.11** 0.05	**1.04** 0.03		
a4	**1.15** 0.05	**1.04** 0.03	**1.11** 0.02	**1.11** 0.05	**1.25** 0.04	**1.04** 0.01	**1.10** 0.05	**1.09** 0.05	**1.13** 0.03	**1.01** 0.05	**1.14** 0.03	**1.06** 0.03	**1.02** 0.03	
a2	**1.09** 0.07	**1.02** 0.06	**1.05** 0.07	**1.05** 0.10	**1.19** 0.10	**1.02** 0.05	**1.04** 0.09	**1.04** 0.10	**1.07** 0.09	**1.07** 0.10	**1.08** 0.06	**1.01** 0.05	**1.03** 0.05	**1.06** 0.05

Fig. S-1-9

Peptide: **IEGPVLCa** no CID applied

	z6	**z5**	**y6**	**y5**	**y4**	**y2**	**b7**	**b6**	**b5**	**b2m**	**a7**	**a6**	**a5**
z5	**1.21** 0.04												
y6	**1.18** 0.04	**1.43** 0.04											
y5	**1.21** 0.13	**1.46** 0.13	**1.02** 0.08										
y4	**1.42** 0.07	**1.72** 0.06	**1.20** 0.02	**1.18** 0.07									
y2	**1.50** 0.04	**1.81** 0.02	**1.27** 0.02	**1.24** 0.11	**1.05** 0.03								
b7	**1.30** 0.07	**1.57** 0.10	**1.10** 0.06	**1.08** 0.12	**1.09** 0.06	**1.15** 0.06							
b6	**1.29** 0.14	**1.56** 0.14	**1.09** 0.08	**1.07** 0.01	**1.10** 0.07	**1.16** 0.11	**1.01** 0.11						
b5	**1.21** 0.11	**1.46** 0.11	**1.02** 0.06	**1.00** 0.01	**1.18** 0.05	**1.24** 0.09	**1.08** 0.10	**1.07** 0.02					
b2	**1.10** 0.06	**1.10** 0.06	**1.30** 0.09	**1.33** 0.19	**1.56** 0.13	**1.64** 0.10	**1.43** 0.15	**1.42** 0.20	**1.33** 0.17				
a7	**1.16** 0.07	**1.40** 0.08	**1.02** 0.05	**1.04** 0.10	**1.23** 0.06	**1.29** 0.06	**1.12** 0.05	**1.12** 0.11	**1.04** 0.09	**1.27** 0.14			
a6	**1.20** 0.03	**1.00** 0.02	**1.43** 0.04	**1.46** 0.12	**1.71** 0.05	**1.80** 0.02	**1.57** 0.08	**1.56** 0.14	**1.46** 0.10	**1.10** 0.07	**1.40** 0.06		
a5	**1.00** 0.05	**1.21** 0.07	**1.18** 0.08	**1.21** 0.16	**1.42** 0.11	**1.49** 0.08	**1.30** 0.10	**1.29** 0.18	**1.21** 0.14	**1.10** 0.08	**1.16** 0.07	**1.21** 0.06	
a2	**1.29** 0.20	**1.07** 0.20	**1.52** 0.24	**1.54** 0.26	**1.82** 0.31	**1.92** 0.34	**1.67** 0.28	**1.65** 0.28	**1.54** 0.28	**1.17** 0.20	**1.49** 0.31	**1.07** 0.19	**1.30** 0.26

Fig. S-1-10

Peptide: **IAGPVLCa** no CID applied

	z6	**z5**	**y6**	**y5**	**y4**	**y2**	**b7z7**	**b6**	**b5**	**a7**	**a6**
z5	**1.14** 0.03										
y6	**1.03** 0.06	**1.11** 0.06									
y5	**1.13** 0.09	**1.29** 0.12	**1.16** 0.04								
y4	**1.04** 0.10	**1.10** 0.11	**1.01** 0.05	**1.17** 0.04							
y2	**1.07** 0.12	**1.08** 0.13	**1.04** 0.07	**1.20** 0.05	**1.02** 0.03						
b7z7	**1.28** 0.13	**1.12** 0.09	**1.24** 0.15	**1.44** 0.22	**1.23** 0.17	**1.20** 0.18					
b6	**1.12** 0.09	**1.28** 0.12	**1.15** 0.05	**1.01** 0.01	**1.16** 0.04	**1.19** 0.06	**1.43** 0.23				
b5	**1.07** 0.09	**1.23** 0.12	**1.10** 0.05	**1.05** 0.02	**1.11** 0.02	**1.14** 0.04	**1.37** 0.20	**1.04** 0.02			
a7	**1.02** 0.04	**1.17** 0.03	**1.05** 0.04	**1.10** 0.08	**1.06** 0.08	**1.09** 0.11	**1.31** 0.11	**1.09** 0.08	**1.05** 0.08		
a6	**1.09** 0.06	**1.05** 0.07	**1.06** 0.02	**1.23** 0.03	**1.05** 0.04	**1.03** 0.06	**1.17** 0.15	**1.22** 0.03	**1.17** 0.04	**1.12** 0.05	
a5	**1.10** 0.07	**1.04** 0.07	**1.07** 0.02	**1.24** 0.03	**1.06** 0.04	**1.04** 0.06	**1.16** 0.15	**1.23** 0.04	**1.18** 0.04	**1.13** 0.05	**1.01** 0.02

Fig. S-1-11

Peptide: **ISGPVLCa** no CID applied

	z6	z5	y6	y5	y4	y2	b7c	b6c	b5	b2m	a7	a6
z5	**1.12** 0.05											
y6	**1.20** 0.03	**1.34** 0.03										
y5	**1.29** 0.09	**1.44** 0.09	**1.07** 0.06									
y4	**1.42** 0.04	**1.58** 0.05	**1.18** 0.03	**1.10** 0.06								
y2	**1.89** 0.06	**2.11** 0.05	**1.57** 0.03	**1.46** 0.10	**1.33** 0.02							
b7	**1.39** 0.05	**1.55** 0.11	**1.16** 0.06	**1.08** 0.06	**1.02** 0.05	**1.36** 0.08						
b6	**1.39** 0.09	**1.55** 0.08	**1.16** 0.05	**1.08** 0.05	**1.02** 0.04	**1.36** 0.07	**1.00** 0.09					
b5	**1.30** 0.07	**1.45** 0.06	**1.08** 0.04	**1.01** 0.04	**1.09** 0.03	**1.45** 0.06	**1.07** 0.08	**1.07** 0.01				
b2	**1.22** 0.09	**1.09** 0.08	**1.46** 0.08	**1.57** 0.12	**1.72** 0.12	**2.30** 0.15	**1.69** 0.07	**1.69** 0.16	**1.58** 0.14			
a7	**1.18** 0.03	**1.31** 0.09	**1.02** 0.05	**1.09** 0.09	**1.20** 0.06	**1.60** 0.08	**1.18** 0.03	**1.18** 0.11	**1.10** 0.09	**1.44** 0.07		
a6	**1.24** 0.08	**1.11** 0.06	**1.49** 0.06	**1.60** 0.13	**1.75** 0.11	**2.33** 0.13	**1.72** 0.13	**1.72** 0.12	**1.61** 0.10	**1.01** 0.05	**1.46** 0.09	
a5	**1.09** 0.06	**1.02** 0.04	**1.31** 0.05	**1.41** 0.13	**1.54** 0.07	**2.06** 0.05	**1.51** 0.11	**1.52** 0.10	**1.42** 0.09	**1.12** 0.08	**1.28** 0.08	**1.14** 0.07

Fig. S-1-12

Peptide: **IFGPVLCa** no CID applied

	z6	z5	y6	y5	b7z7	b6	b5	b2m	a7	a6	a5	a3
z5	**1.19** 0.08											
y6	**1.22** 0.04	**1.45** 0.08										
y5	**1.27** 0.08	**1.50** 0.08	**1.04** 0.03									
b7z7	**1.50** 0.08	**1.78** 0.10	**1.23** 0.03	**1.18** 0.01								
b6	**1.42** 0.11	**1.69** 0.09	**1.17** 0.05	**1.12** 0.02	**1.05** 0.03							
b5	**1.28** 0.06	**1.51** 0.06	**1.05** 0.02	**1.01** 0.02	**1.17** 0.02	**1.11** 0.03						
b2	**1.06** 0.08	**1.26** 0.08	**1.15** 0.05	**1.19** 0.04	**1.41** 0.05	**1.34** 0.05	**1.20** 0.05					
a7	**1.31** 0.03	**1.56** 0.12	**1.07** 0.02	**1.03** 0.05	**1.15** 0.05	**1.09** 0.07	**1.03** 0.04	**1.23** 0.07				
a6	**1.05** 0.04	**1.13** 0.07	**1.28** 0.02	**1.33** 0.05	**1.57** 0.04	**1.49** 0.08	**1.34** 0.04	**1.11** 0.04	**1.37** 0.04			
a5	**1.59** 0.11	**1.88** 0.08	**1.30** 0.05	**1.25** 0.01	**1.06** 0.02	**1.11** 0.01	**1.24** 0.03	**1.50** 0.06	**1.21** 0.07	**1.66** 0.07		
a3	**1.42** 0.06	**1.68** 0.07	**1.16** 0.04	**1.12** 0.04	**1.06** 0.04	**1.00** 0.06	**1.11** 0.03	**1.34** 0.08	**1.08** 0.06	**1.49** 0.06	**1.12** 0.05	
a2	**1.45** 0.08	**1.22** 0.06	**1.76** 0.05	**1.83** 0.06	**2.17** 0.06	**2.06** 0.11	**1.85** 0.05	**1.53** 0.05	**1.89** 0.09	**1.38** 0.04	**2.29** 0.10	**2.05** 0.06

Fig. S-1-13

Peptide: **IIFPVLCa** no CID applied

	z6	y6	y5	y4	y2	PVL	FPVL	b7z7	b6	b5	b4z4	b3z3	a7	a6
y6	**2.52** 0.13													
y5	**2.09** 0.13	**5.27** 0.18												
y4	**2.25** 0.14	**5.68** 0.17	**1.08** 0.02											
y2	**1.33** 0.07	**3.35** 0.13	**1.57** 0.07	**1.70** 0.05										
PVL	**1.12** 0.06	**2.82** 0.10	**1.87** 0.11	**2.01** 0.09	**1.19** 0.03									
FPVL	**1.00** 0.04	**2.53** 0.11	**2.08** 0.15	**2.25** 0.13	**1.32** 0.04	**1.12** 0.04								
b7z7	**2.66** 0.65	**6.66** 1.49	**1.26** 0.30	**1.17** 0.26	**1.99** 0.47	**2.35** 0.52	**2.64** 0.66							
b6	**2.87** 0.17	**7.25** 0.21	**1.37** 0.01	**1.28** 0.02	**2.16** 0.09	**2.57** 0.14	**2.86** 0.18	**1.15** 0.31						
b5	**1.82** 0.12	**4.58** 0.13	**1.15** 0.03	**1.24** 0.01	**1.37** 0.04	**1.62** 0.07	**1.81** 0.10	**1.45** 0.33	**1.58** 0.03					
b4z4	**1.88** 0.13	**4.74** 0.09	**1.11** 0.04	**1.20** 0.03	**1.41** 0.05	**1.68** 0.05	**1.87** 0.11	**1.40** 0.30	**1.53** 0.04	**1.03** 0.02				
b3z3	**1.30** 0.06	**3.28** 0.12	**1.61** 0.08	**1.73** 0.06	**1.02** 0.01	**1.16** 0.02	**1.30** 0.04	**2.03** 0.48	**2.21** 0.09	**1.40** 0.05	**1.45** 0.06			
a7	**2.28** 0.08	**5.75** 0.13	**1.09** 0.04	**1.01** 0.03	**1.72** 0.07	**2.04** 0.11	**2.27** 0.07	**1.16** 0.28	**1.26** 0.04	**1.26** 0.04	**1.22** 0.05	**1.76** 0.07		
a6	**1.89** 0.08	**4.76** 0.22	**1.11** 0.08	**1.19** 0.07	**1.42** 0.09	**1.69** 0.09	**1.88** 0.11	**1.40** 0.33	**1.52** 0.10	**1.04** 0.07	**1.00** 0.07	**1.45** 0.07	**1.21** 0.05	
a5	**1.38** 0.05	**3.49** 0.07	**1.51** 0.07	**1.63** 0.06	**1.04** 0.02	**1.24** 0.03	**1.38** 0.04	**1.91** 0.44	**2.08** 0.08	**1.31** 0.05	**1.36** 0.05	**1.07** 0.02	**1.65** 0.04	**1.36** 0.06

Fig. S-1-14

Peptide: **IIAPVLCa** no CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	PVL	b7	b6	b5	b4	b3	APVL	a7	a6
z5	**1.06** 0.09															
z4	**1.73** 0.06	**1.83** 0.08														
y6	**2.49** 0.04	**2.36** 0.17	**4.30** 0.14													
y5	**2.13** 0.20	**2.25** 0.15	**1.23** 0.10	**5.29** 0.41												
y4	**2.52** 0.19	**2.66** 0.17	**1.46** 0.09	**6.27** 0.37	**1.18** 0.03											
y2	**1.45** 0.03	**1.53** 0.11	**1.19** 0.03	**3.60** 0.03	**1.47** 0.13	**1.74** 0.11										
PVL	**1.06** 0.04	**1.00** 0.06	**1.83** 0.06	**2.35** 0.05	**2.25** 0.19	**2.66** 0.17	**1.53** 0.03									
b7	**2.04** 0.58	**2.13** 0.57	**1.17** 0.33	**5.05** 1.33	**1.12** 0.24	**1.33** 0.27	**1.40** 0.39	**2.14** 0.61								
b6	**2.78** 0.28	**2.94** 0.22	**1.61** 0.14	**6.90** 0.57	**1.31** 0.02	**1.10** 0.03	**1.92** 0.17	**2.93** 0.26	**1.46** 0.31							
b5	**1.76** 0.11	**1.86** 0.12	**1.02** 0.05	**4.38** 0.19	**1.21** 0.05	**1.43** 0.03	**1.22** 0.06	**1.86** 0.09	**1.14** 0.28	**1.57** 0.06						
b4	**1.49** 0.09	**1.58** 0.14	**1.16** 0.08	**3.71** 0.18	**1.42** 0.09	**1.69** 0.07	**1.03** 0.06	**1.58** 0.10	**1.35** 0.34	**1.86** 0.09	**1.18** 0.03					
b3	**1.02** 0.03	**1.08** 0.08	**1.70** 0.05	**2.53** 0.11	**2.09** 0.24	**2.48** 0.23	**1.43** 0.05	**1.08** 0.04	**2.01** 0.63	**2.73** 0.32	**1.73** 0.13	**1.47** 0.14				
APVL	**1.55** 0.04	**1.47** 0.10	**2.69** 0.09	**1.60** 0.03	**3.30** 0.27	**3.91** 0.24	**2.25** 0.04	**1.47** 0.03	**3.15** 0.88	**4.31** 0.36	**2.74** 0.14	**2.31** 0.14	**1.58** 0.05			
a7	**2.12** 0.12	**2.24** 0.12	**1.22** 0.06	**5.27** 0.20	**1.00** 0.07	**1.19** 0.06	**1.46** 0.06	**2.24** 0.06	**1.12** 0.28	**1.31** 0.09	**1.20** 0.05	**1.42** 0.08	**2.08** 0.12	**3.29** 0.10		
a6	**1.71** 0.06	**1.81** 0.11	**1.01** 0.03	**4.25** 0.13	**1.24** 0.11	**1.47** 0.11	**1.18** 0.03	**1.81** 0.03	**1.19** 0.36	**1.62** 0.15	**1.03** 0.06	**1.15** 0.09	**1.68** 0.06	**2.65** 0.07	**1.24** 0.03	
a5	**1.19** 0.08	**1.26** 0.04	**1.45** 0.04	**2.96** 0.19	**1.79** 0.12	**2.12** 0.13	**1.22** 0.07	**1.26** 0.08	**1.70** 0.49	**2.33** 0.17	**1.48** 0.08	**1.25** 0.10	**1.17** 0.07	**1.85** 0.11	**1.78** 0.11	**1.44** 0.07

Fig. S-1-15

Peptide: **IIKPVLCa** no CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	PVL	KPVL	KPV	IK	b7z7	b6	b5	b4	b3	b2	a7	a6	a5
z5	**1.37** 0.07																			
z4	**1.35** 0.09	**1.85** 0.07																		
y6	**3.46** 0.28	**4.74** 0.11	**2.56** 0.12																	
y5	**1.41** 0.09	**1.93** 0.10	**1.04** 0.08	**2.46** 0.09																
y4	**1.20** 0.08	**1.65** 0.06	**1.13** 0.08	**2.88** 0.07	**1.17** 0.02															
y2	**1.65** 0.08	**2.26** 0.03	**1.22** 0.03	**2.10** 0.07	**1.17** 0.07	**1.37** 0.07														
PVL	**1.93** 0.09	**2.65** 0.04	**1.43** 0.05	**1.79** 0.06	**1.37** 0.06	**1.61** 0.06	**1.17** 0.02													
KPVL	**1.25** 0.07	**1.09** 0.01	**1.70** 0.08	**4.35** 0.09	**1.77** 0.07	**1.51** 0.04	**2.07** 0.05	**2.43** 0.04												
KPV	**1.03** 0.07	**1.32** 0.04	**1.40** 0.04	**3.58** 0.12	**1.46** 0.08	**1.24** 0.05	**1.71** 0.05	**2.00** 0.05	**1.21** 0.03											
IK	**3.88** 0.23	**5.31** 0.08	**2.87** 0.11	**1.12** 0.03	**2.75** 0.16	**3.23** 0.15	**2.35** 0.04	**2.00** 0.06	**4.87** 0.10	**4.01** 0.15										
b7z7	**1.24** 0.18	**1.70** 0.15	**1.09** 0.12	**2.78** 0.18	**1.13** 0.10	**1.03** 0.08	**1.33** 0.13	**1.55** 0.14	**1.56** 0.13	**1.28** 0.13	**3.11** 0.28									
b6	**1.29** 0.12	**1.77** 0.13	**1.05** 0.11	**2.69** 0.15	**1.09** 0.03	**1.07** 0.04	**1.28** 0.11	**1.50** 0.11	**1.62** 0.10	**1.34** 0.10	**3.01** 0.25	**1.04** 0.09								
b5	**1.52** 0.12	**2.09** 0.12	**1.13** 0.09	**2.27** 0.12	**1.08** 0.05	**1.27** 0.05	**1.08** 0.07	**1.27** 0.06	**1.91** 0.10	**1.58** 0.08	**2.54** 0.18	**1.23** 0.07	**1.18** 0.06							
b4	**1.39** 0.10	**1.91** 0.04	**1.03** 0.03	**2.49** 0.07	**1.01** 0.05	**1.16** 0.05	**1.19** 0.03	**1.39** 0.04	**1.75** 0.03	**1.44** 0.02	**2.79** 0.06	**1.12** 0.10	**1.08** 0.09	**1.10** 0.07						
b3	**2.40** 0.15	**3.29** 0.12	**1.78** 0.10	**1.44** 0.03	**1.71** 0.04	**2.00** 0.04	**1.46** 0.06	**1.24** 0.04	**3.02** 0.07	**2.49** 0.08	**1.61** 0.07	**1.93** 0.15	**1.87** 0.09	**1.58** 0.06	**1.73** 0.05					
b2	**1.86** 0.09	**2.54** 0.05	**1.37** 0.04	**1.86** 0.07	**1.32** 0.09	**1.55** 0.09	**1.12** 0.01	**1.04** 0.03	**2.33** 0.07	**1.92** 0.06	**2.09** 0.03	**1.49** 0.15	**1.44** 0.14	**1.22** 0.09	**1.34** 0.04	**1.29** 0.07				
a7	**1.12** 0.20	**1.20** 0.18	**1.52** 0.23	**3.90** 0.47	**1.59** 0.21	**1.35** 0.18	**1.85** 0.27	**2.17** 0.30	**1.10** 0.15	**1.09** 0.13	**4.35** 0.62	**1.40** 0.13	**1.45** 0.21	**1.72** 0.18	**1.56** 0.20	**2.71** 0.31	**2.08** 0.32			
a6	**1.19** 0.09	**1.15** 0.05	**1.61** 0.11	**4.13** 0.21	**1.68** 0.14	**1.43** 0.09	**1.97** 0.10	**2.31** 0.13	**1.05** 0.05	**1.15** 0.09	**4.63** 0.17	**1.48** 0.12	**1.54** 0.15	**1.82** 0.18	**1.66** 0.10	**2.87** 0.19	**2.22** 0.10	**1.05** 0.20		
a5	**1.17** 0.05	**1.60** 0.03	**1.16** 0.03	**2.97** 0.10	**1.21** 0.06	**1.03** 0.04	**1.42** 0.02	**1.66** 0.02	**1.47** 0.04	**1.21** 0.03	**3.32** 0.10	**1.06** 0.11	**1.11** 0.09	**1.31** 0.07	**1.19** 0.04	**2.06** 0.07	**1.59** 0.04	**1.31** 0.18	**1.39** 0.08	
a2	**1.77** 0.08	**2.42** 0.14	**1.31** 0.07	**1.95** 0.15	**1.25** 0.14	**1.47** 0.14	**1.07** 0.05	**1.09** 0.07	**2.22** 0.15	**1.83** 0.13	**2.19** 0.11	**1.42** 0.19	**1.37** 0.18	**1.16** 0.13	**1.27** 0.08	**1.36** 0.13	**1.05** 0.04	**1.98** 0.39	**2.11** 0.12	**1.52** 0.09

Fig. S-1-16

Peptide: **IIDPVLCa** no CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	PVL	DPVL	DPV	b7z7	b6	b5	b4	b3	a7	a6
z5	**1.85** 0.10																
z4	**1.46** 0.04	**1.26** 0.07															
y6	**3.31** 0.05	**1.79** 0.08	**2.26** 0.07														
y5	**1.05** 0.03	**1.94** 0.13	**1.54** 0.08	**3.48** 0.13													
y4	**1.14** 0.03	**2.10** 0.15	**1.66** 0.09	**3.76** 0.14	**1.08** 0.02												
y2	**1.06** 0.03	**1.95** 0.16	**1.55** 0.09	**3.50** 0.16	**1.00** 0.02	**1.07** 0.03											
PVL	**2.20** 0.07	**1.19** 0.09	**1.50** 0.08	**1.50** 0.07	**2.32** 0.07	**2.50** 0.08	**2.33** 0.03										
DPVL	**2.25** 0.10	**1.21** 0.10	**1.53** 0.11	**1.47** 0.07	**2.37** 0.07	**2.55** 0.04	**2.38** 0.10	**1.02** 0.05									
DPV	**1.79** 0.07	**1.03** 0.06	**1.22** 0.08	**1.85** 0.08	**1.89** 0.04	**2.03** 0.04	**1.90** 0.07	**1.23** 0.06	**1.25** 0.03								
b7z7	**1.82** 0.11	**1.02** 0.07	**1.25** 0.09	**1.82** 0.10	**1.92** 0.13	**2.07** 0.10	**1.93** 0.13	**1.21** 0.08	**1.23** 0.06	**1.02** 0.06							
b6	**1.13** 0.03	**2.09** 0.15	**1.65** 0.09	**3.74** 0.14	**1.07** 0.02	**1.01** 0.01	**1.07** 0.02	**2.49** 0.06	**2.54** 0.06	**2.02** 0.05	**2.06** 0.11						
b5	**1.01** 0.03	**1.83** 0.13	**1.45** 0.08	**3.28** 0.13	**1.06** 0.02	**1.15** 0.01	**1.07** 0.02	**2.18** 0.05	**2.23** 0.05	**1.78** 0.05	**1.81** 0.09	**1.14** 0.00					
b4	**1.07** 0.05	**1.98** 0.09	**1.56** 0.10	**3.54** 0.13	**1.02** 0.06	**1.06** 0.06	**1.01** 0.07	**2.35** 0.16	**2.40** 0.16	**1.92** 0.11	**1.95** 0.17	**1.06** 0.07	**1.08** 0.06				
b3	**2.10** 0.04	**1.14** 0.07	**1.44** 0.06	**1.57** 0.04	**2.22** 0.03	**2.39** 0.05	**2.23** 0.05	**1.05** 0.03	**1.07** 0.03	**1.17** 0.04	**1.15** 0.08	**2.38** 0.04	**2.09** 0.04	**2.25** 0.11			
a7	**1.70** 0.28	**3.13** 0.60	**2.49** 0.35	**5.62** 0.98	**1.61** 0.29	**1.49** 0.28	**1.60** 0.26	**3.73** 0.58	**3.80** 0.80	**3.03** 0.63	**3.10** 0.63	**1.50** 0.27	**1.71** 0.31	**1.58** 0.32	**3.57** 0.62		
a6	**1.15** 0.04	**2.12** 0.17	**1.68** 0.10	**3.80** 0.20	**1.09** 0.03	**1.01** 0.04	**1.08** 0.02	**2.52** 0.03	**2.58** 0.14	**2.05** 0.11	**2.09** 0.17	**1.02** 0.03	**1.16** 0.04	**1.07** 0.08	**2.41** 0.07	**1.48** 0.22	
a5	**1.09** 0.03	**2.01** 0.12	**1.59** 0.07	**3.60** 0.12	**1.03** 0.04	**1.05** 0.05	**1.03** 0.04	**2.39** 0.07	**2.44** 0.15	**1.95** 0.11	**1.98** 0.13	**1.04** 0.04	**1.10** 0.04	**1.02** 0.05	**2.29** 0.08	**1.56** 0.23	**1.06** 0.03

Fig. S-1-17

Peptide: **IISPVLCa** no CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	SPV L	SPV	b7z7	b6	b5	b4	b3	a7	a6
z5	**1.32** 0.06															
z4	**1.01** 0.06	**1.33** 0.03														
y6	**2.70** 0.09	**2.05** 0.10	**2.73** 0.20													
y5	**1.57** 0.08	**2.07** 0.09	**1.55** 0.06	**4.25** 0.16												
y4	**1.77** 0.06	**2.34** 0.06	**1.75** 0.07	**4.79** 0.16	**1.13** 0.02											
y2	**1.46** 0.04	**1.92** 0.03	**1.44** 0.05	**3.94** 0.16	**1.08** 0.05	**1.22** 0.03										
SPV L	**1.71** 0.10	**1.30** 0.07	**1.73** 0.09	**1.58** 0.11	**2.69** 0.13	**3.03** 0.13	**2.49** 0.12									
SPV	**1.03** 0.05	**1.29** 0.03	**1.04** 0.05	**2.63** 0.10	**1.61** 0.06	**1.82** 0.03	**1.49** 0.05	**1.67** 0.10								
b7z7	**2.02** 0.06	**2.66** 0.18	**1.99** 0.16	**5.45** 0.30	**1.28** 0.08	**1.14** 0.06	**1.38** 0.07	**3.45** 0.25	**2.07** 0.15							
b6	**2.03** 0.10	**2.67** 0.12	**2.00** 0.10	**5.47** 0.22	**1.29** 0.01	**1.14** 0.03	**1.39** 0.06	**3.46** 0.15	**2.08** 0.09	**1.00** 0.07						
b5	**1.34** 0.05	**1.76** 0.06	**1.32** 0.04	**3.61** 0.17	**1.18** 0.03	**1.33** 0.03	**1.09** 0.03	**2.28** 0.05	**1.37** 0.05	**1.51** 0.09	**1.52** 0.04					
b4	**1.31** 0.09	**1.72** 0.16	**1.29** 0.15	**3.53** 0.21	**1.20** 0.10	**1.36** 0.11	**1.11** 0.09	**2.24** 0.28	**1.34** 0.09	**1.55** 0.08	**1.55** 0.14	**1.02** 0.10				
b3	**1.25** 0.07	**1.06** 0.03	**1.26** 0.02	**2.16** 0.13	**1.96** 0.06	**2.21** 0.06	**1.82** 0.07	**1.37** 0.07	**1.22** 0.05	**2.52** 0.19	**2.53** 0.09	**1.67** 0.05	**1.63** 0.19			
a7	**1.69** 0.10	**2.23** 0.08	**1.67** 0.09	**4.56** 0.16	**1.07** 0.05	**1.05** 0.04	**1.16** 0.05	**2.89** 0.23	**1.73** 0.04	**1.20** 0.10	**1.20** 0.06	**1.27** 0.07	**1.29** 0.09	**2.11** 0.11		
a6	**1.31** 0.04	**1.73** 0.05	**1.30** 0.06	**3.55** 0.08	**1.20** 0.04	**1.35** 0.02	**1.11** 0.02	**2.25** 0.12	**1.35** 0.03	**1.54** 0.09	**1.54** 0.06	**1.02** 0.03	**1.00** 0.07	**1.64** 0.07	**1.29** 0.03	
a5	**1.15** 0.04	**1.52** 0.05	**1.14** 0.06	**3.11** 0.10	**1.36** 0.08	**1.54** 0.06	**1.26** 0.03	**1.98** 0.13	**1.18** 0.04	**1.75** 0.11	**1.76** 0.11	**1.16** 0.05	**1.13** 0.08	**1.44** 0.09	**1.46** 0.03	**1.14** 0.02

Fig. S-1-18

Peptide: **IIIPVLCa** no CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	b7z7	b6	b5	b4	b3	b2	a7	a6	a5
z5	**1.21** 0.08															
z4	**2.38** 0.13	**1.97** 0.17														
y6	**2.39** 0.10	**2.89** 0.16	**5.69** 0.25													
y5	**2.48** 0.13	**2.05** 0.18	**1.04** 0.06	**5.92** 0.27												
y4	**2.86** 0.15	**2.36** 0.17	**1.20** 0.07	**6.84** 0.23	**1.15** 0.02											
y2	**1.32** 0.06	**1.09** 0.05	**1.80** 0.08	**3.16** 0.04	**1.88** 0.09	**2.16** 0.07										
b7z7	**3.95** 1.08	**3.25** 0.76	**1.66** 0.39	**9.42** 2.15	**1.60** 0.36	**1.38** 0.31	**2.98** 0.66									
b6	**3.91** 0.24	**3.23** 0.31	**1.64** 0.11	**9.35** 0.51	**1.58** 0.02	**1.37** 0.03	**2.96** 0.17	**1.01** 0.22								
b5	**1.91** 0.11	**1.57** 0.14	**1.25** 0.09	**4.56** 0.23	**1.30** 0.02	**1.50** 0.03	**1.44** 0.08	**2.07** 0.47	**2.05** 0.05							
b4	**2.27** 0.21	**1.87** 0.11	**1.05** 0.08	**5.42** 0.32	**1.09** 0.05	**1.26** 0.05	**1.72** 0.08	**1.74** 0.32	**1.73** 0.08	**1.19** 0.07						
b3	**1.90** 0.12	**1.57** 0.19	**1.25** 0.08	**4.55** 0.31	**1.30** 0.04	**1.50** 0.07	**1.44** 0.10	**2.08** 0.47	**2.06** 0.06	**1.00** 0.04	**1.19** 0.09					
b2	**2.30** 0.19	**2.77** 0.17	**5.48** 0.46	**1.04** 0.05	**5.69** 0.28	**6.57** 0.24	**3.03** 0.14	**9.03** 1.78	**8.99** 0.53	**4.38** 0.23	**5.20** 0.15	**4.38** 0.36				
a7	**4.12** 0.57	**3.41** 0.32	**1.74** 0.21	**9.86** 1.03	**1.67** 0.22	**1.44** 0.18	**3.12** 0.30	**1.08** 0.23	**1.05** 0.14	**2.16** 0.31	**1.82** 0.17	**2.17** 0.32	**9.47** 1.04			
a6	**3.18** 0.27	**2.63** 0.27	**1.33** 0.04	**7.59** 0.54	**1.28** 0.10	**1.11** 0.08	**2.41** 0.17	**1.25** 0.26	**1.23** 0.09	**1.66** 0.15	**1.40** 0.12	**1.67** 0.11	**7.31** 0.80	**1.30** 0.13		
a5	**2.23** 0.07	**1.84** 0.16	**1.07** 0.05	**5.33** 0.20	**1.11** 0.07	**1.28** 0.07	**1.69** 0.08	**1.77** 0.45	**1.75** 0.13	**1.17** 0.07	**1.02** 0.10	**1.17** 0.07	**5.12** 0.41	**1.85** 0.27	**1.42** 0.11	
a2	**1.38** 0.59	**1.70** 0.73	**3.26** 1.35	**1.92** 0.72	**3.42** 1.69	**3.97** 1.92	**1.84** 0.84	**5.65** 3.38	**5.40** 2.71	**2.64** 1.35	**3.18** 1.65	**2.61** 1.30	**1.87** 0.78	**5.78** 2.73	**4.35** 1.81	**3.07** 1.36

Fig. S-1-19

Peptide: **IIGPVLCa** CID applied

	z6	z5	y6	y5	y4	y2	GPVL	GPV	GP	b7	b6	b5	a7	a6
z5	**1.35** 0.09													
y6	**1.15** 0.03	**1.55** 0.11												
y5	**1.19** 0.06	**1.61** 0.14	**1.04** 0.05											
y4	**1.56** 0.07	**2.11** 0.16	**1.36** 0.05	**1.31** 0.02										
y2	**1.03** 0.05	**1.40** 0.09	**1.11** 0.04	**1.15** 0.05	**1.51** 0.05									
GPVL	**1.35** 0.04	**1.00** 0.05	**1.55** 0.04	**1.61** 0.08	**2.11** 0.08	**1.39** 0.02								
GPV	**1.15** 0.07	**1.17** 0.10	**1.32** 0.06	**1.37** 0.06	**1.80** 0.07	**1.19** 0.04	**1.17** 0.05							
GP	**1.13** 0.10	**1.19** 0.12	**1.30** 0.09	**1.35** 0.10	**1.77** 0.12	**1.17** 0.04	**1.19** 0.06	**1.02** 0.03						
b7	**1.46** 0.08	**1.96** 0.13	**1.27** 0.09	**1.23** 0.08	**1.07** 0.07	**1.41** 0.10	**1.97** 0.14	**1.68** 0.11	**1.65** 0.13					
b6	**1.28** 0.07	**1.73** 0.17	**1.12** 0.06	**1.08** 0.01	**1.22** 0.02	**1.24** 0.06	**1.73** 0.10	**1.48** 0.06	**1.45** 0.10	**1.14** 0.07				
b5	**1.16** 0.05	**1.56** 0.13	**1.01** 0.04	**1.03** 0.01	**1.35** 0.01	**1.12** 0.04	**1.56** 0.07	**1.34** 0.05	**1.31** 0.09	**1.26** 0.08	**1.11** 0.01			
a7	**1.22** 0.04	**1.65** 0.09	**1.07** 0.03	**1.03** 0.07	**1.28** 0.07	**1.18** 0.05	**1.65** 0.04	**1.41** 0.09	**1.38** 0.11	**1.19** 0.09	**1.05** 0.08	**1.06** 0.06		
a6	**1.20** 0.02	**1.13** 0.08	**1.37** 0.04	**1.43** 0.07	**1.87** 0.08	**1.24** 0.06	**1.13** 0.04	**1.04** 0.06	**1.06** 0.08	**1.75** 0.10	**1.54** 0.08	**1.39** 0.06	**1.47** 0.06	
a5	**1.11** 0.03	**1.22** 0.09	**1.27** 0.04	**1.32** 0.06	**1.73** 0.07	**1.15** 0.03	**1.22** 0.03	**1.04** 0.04	**1.02** 0.06	**1.62** 0.11	**1.42** 0.08	**1.28** 0.05	**1.36** 0.05	**1.08** 0.03

Fig. S-1-20

Peptide: **GIGPVLCa** CID applied

	y5	**y4**	**y2**	**IGP VL**	**GPV**	**b7**	**b6**	**b5**	**a7**	**a6**
y4	**1.08** 0.04									
y2	**1.13** 0.05	**1.21** 0.04								
IGPVL	**1.01** 0.06	**1.07** 0.05	**1.13** 0.05							
GPV	**1.04** 0.05	**1.04** 0.05	**1.17** 0.02	**1.03** 0.05						
b7	**1.27** 0.11	**1.37** 0.08	**1.13** 0.07	**1.28** 0.06	**1.32** 0.10					
b6	**1.13** 0.02	**1.22** 0.04	**1.00** 0.03	**1.14** 0.05	**1.17** 0.04	**1.13** 0.09				
b5	**1.00** 0.01	**1.08** 0.03	**1.12** 0.04	**1.01** 0.05	**1.04** 0.04	**1.27** 0.10	**1.13** 0.01			
a7	**1.04** 0.05	**1.12** 0.02	**1.08** 0.03	**1.05** 0.04	**1.08** 0.05	**1.23** 0.05	**1.09** 0.04	**1.04** 0.04		
a6	**1.33** 0.16	**1.44** 0.11	**1.18** 0.11	**1.34** 0.09	**1.38** 0.14	**1.04** 0.04	**1.18** 0.13	**1.33** 0.15	**1.28** 0.09	
a5	**1.72** 0.05	**1.86** 0.03	**1.53** 0.04	**1.73** 0.09	**1.79** 0.07	**1.35** 0.08	**1.53** 0.04	**1.72** 0.04	**1.66** 0.03	**1.29** 0.11

Fig. S-1-21

Peptide: **KIGPVLCa** CID applied

	z5	Y7	Y6	y5	y4	y2	IGPVL	IGPV	GPV	b7	b6	b5	a7	a6	a5
Y7	**2.95** 0.99														
Y6	**1.72** 0.06	**5.04** 1.61													
y5	**1.03** 0.04	**2.84** 0.84	**1.78** 0.04												
y4	**1.11** 0.04	**3.25** 1.03	**1.55** 0.02	**1.15** 0.02											
y2	**1.19** 0.01	**2.49** 0.86	**2.04** 0.09	**1.15** 0.06	**1.32** 0.06										
IGPVL	**1.03** 0.11	**3.03** 0.74	**1.66** 0.13	**1.07** 0.08	**1.07** 0.09	**1.23** 0.15									
IGPV	**1.23** 0.06	**2.38** 0.99	**2.11** 0.14	**1.19** 0.10	**1.36** 0.10	**1.03** 0.05	**1.27** 0.18								
GPV	**1.26** 0.02	**2.33** 0.79	**2.17** 0.05	**1.22** 0.05	**1.40** 0.04	**1.06** 0.02	**1.30** 0.13	**1.03** 0.05							
b7	**1.14** 0.07	**2.57** 0.76	**1.96** 0.08	**1.10** 0.03	**1.26** 0.04	**1.05** 0.08	**1.17** 0.11	**1.08** 0.12	**1.11** 0.07						
b6	**1.16** 0.06	**2.52** 0.74	**2.00** 0.05	**1.12** 0.01	**1.29** 0.02	**1.02** 0.06	**1.20** 0.09	**1.06** 0.10	**1.09** 0.05	**1.02** 0.03					
b5	**1.11** 0.03	**2.66** 0.83	**1.90** 0.04	**1.07** 0.01	**1.23** 0.02	**1.08** 0.04	**1.14** 0.10	**1.11** 0.08	**1.14** 0.03	**1.03** 0.04	**1.05** 0.02				
a7	**1.06** 0.03	**2.79** 0.82	**1.82** 0.09	**1.02** 0.05	**1.17** 0.06	**1.12** 0.04	**1.09** 0.11	**1.16** 0.09	**1.19** 0.04	**1.08** 0.08	**1.10** 0.06	**1.05** 0.04			
a6	**1.39** 0.04	**2.13** 0.74	**2.39** 0.16	**1.34** 0.09	**1.54** 0.09	**1.17** 0.03	**1.43** 0.21	**1.13** 0.07	**1.10** 0.05	**1.22** 0.10	**1.19** 0.09	**1.26** 0.07	**1.31** 0.06		
a5	**1.47** 0.02	**2.01** 0.65	**2.52** 0.08	**1.42** 0.04	**1.63** 0.04	**1.24** 0.03	**1.52** 0.15	**1.19** 0.08	**1.16** 0.02	**1.29** 0.06	**1.26** 0.04	**1.33** 0.02	**1.39** 0.04	**1.06** 0.04	
a4	**1.11** 0.01	**2.65** 0.89	**1.91** 0.06	**1.08** 0.04	**1.24** 0.04	**1.07** 0.02	**1.15** 0.13	**1.10** 0.06	**1.13** 0.02	**1.02** 0.06	**1.04** 0.05	**1.01** 0.02	**1.05** 0.03	**1.25** 0.04	**1.32** 0.02

Fig. S-1-22

Peptide: **EIGPVLCa** CID applied

	z5	y6	Y6	y5	y4	y2	IGPV	GPV	b7-18	b7	b6-18	b6	b5-18	b5	a7	a6	a5
y6	**1.10** 0.11																
Y6	**1.15** 0.14	**1.26** 0.06															
y5	**1.65** 0.11	**1.50** 0.06	**1.90** 0.13														
y4	**1.41** 0.10	**1.28** 0.04	**1.62** 0.09	**1.18** 0.02													
y2	**1.31** 0.11	**1.19** 0.04	**1.50** 0.07	**1.26** 0.04	**1.07** 0.02												
IGPV	**1.04** 0.10	**1.15** 0.05	**1.10** 0.06	**1.73** 0.08	**1.47** 0.06	**1.37** 0.08											
GPV	**1.03** 0.11	**1.14** 0.05	**1.11** 0.06	**1.72** 0.13	**1.46** 0.08	**1.36** 0.06	**1.01** 0.09										
b7-18	**1.04** 0.10	**1.06** 0.07	**1.20** 0.10	**1.59** 0.09	**1.35** 0.06	**1.25** 0.05	**1.09** 0.09	**1.08** 0.04									
b7	**3.02** 0.40	**3.34** 0.37	**2.64** 0.31	**5.02** 0.55	**4.27** 0.44	**3.97** 0.35	**2.90** 0.43	**2.93** 0.17	**3.17** 0.18								
b6-18	**1.14** 0.14	**1.04** 0.11	**1.31** 0.19	**1.46** 0.10	**1.25** 0.10	**1.16** 0.11	**1.19** 0.12	**1.18** 0.16	**1.09** 0.13	**3.45** 0.58							
b6	**1.52** 0.12	**1.38** 0.07	**1.75** 0.11	**1.09** 0.02	**1.08** 0.03	**1.16** 0.04	**1.59** 0.04	**1.58** 0.12	**1.45** 0.10	**4.60** 0.60	**1.34** 0.11						
b5-18	**1.13** 0.08	**1.25** 0.05	**1.01** 0.06	**1.88** 0.04	**1.60** 0.01	**1.49** 0.02	**1.09** 0.05	**1.10** 0.06	**1.18** 0.05	**2.67** 0.27	**1.29** 0.11	**1.73** 0.04					
b5	**1.19** 0.09	**1.08** 0.04	**1.37** 0.07	**1.39** 0.03	**1.18** 0.01	**1.10** 0.02	**1.25** 0.05	**1.24** 0.07	**1.14** 0.05	**3.62** 0.38	**1.06** 0.09	**1.27** 0.03	**1.36** 0.01				
a7	**1.11** 0.10	**1.23** 0.05	**1.03** 0.05	**1.84** 0.08	**1.57** 0.04	**1.46** 0.02	**1.06** 0.07	**1.07** 0.03	**1.16** 0.05	**2.73** 0.20	**1.27** 0.13	**1.69** 0.08	**1.02** 0.03	**1.33** 0.04			
a6	**1.45** 0.10	**1.61** 0.11	**1.27** 0.09	**2.41** 0.08	**2.05** 0.08	**1.91** 0.09	**1.39** 0.06	**1.40** 0.12	**1.52** 0.12	**2.08** 0.27	**1.65** 0.12	**2.21** 0.07	**1.28** 0.04	**1.74** 0.06	**1.31** 0.08		
a5	**1.99** 0.13	**2.20** 0.12	**1.74** 0.13	**3.31** 0.08	**2.81** 0.07	**2.62** 0.08	**1.91** 0.12	**1.93** 0.10	**2.08** 0.09	**1.52** 0.13	**2.27** 0.18	**3.04** 0.13	**1.76** 0.04	**2.39** 0.07	**1.80** 0.05	**1.37** 0.06	
a2	**1.19** 0.10	**1.32** 0.06	**1.04** 0.09	**1.98** 0.12	**1.68** 0.08	**1.57** 0.08	**1.14** 0.07	**1.15** 0.03	**1.25** 0.05	**2.54** 0.20	**1.36** 0.15	**1.82** 0.11	**1.05** 0.05	**1.43** 0.07	**1.08** 0.05	**1.22** 0.08	**1.67** 0.09

Fig. S-1-23

Peptide: **FIGPVLCa** CID applied

	z5	y6	y5	y4	IGPVL	IGPV	GPV	GP	b7	b6	b5	b3	a7	a6	a5Y4	a3
y6	**1.24** 0.04															
y5	**1.28** 0.02	**1.03** 0.02														
y4	**1.49** 0.04	**1.20** 0.04	**1.16** 0.01													
IGPVL	**1.05** 0.02	**1.30** 0.02	**1.34** 0.01	**1.56** 0.03												
IGPV	**1.05** 0.02	**1.31** 0.05	**1.35** 0.02	**1.57** 0.02	**1.00** 0.02											
GPV	**1.10** 0.04	**1.13** 0.04	**1.16** 0.04	**1.36** 0.06	**1.15** 0.03	**1.16** 0.04										
GP	**1.08** 0.04	**1.15** 0.04	**1.19** 0.04	**1.38** 0.06	**1.13** 0.03	**1.14** 0.04	**1.02** 0.01									
b7	**1.44** 0.05	**1.16** 0.03	**1.13** 0.04	**1.03** 0.05	**1.51** 0.04	**1.52** 0.07	**1.31** 0.05	**1.34** 0.06								
b6	**1.27** 0.03	**1.02** 0.03	**1.01** 0.01	**1.17** 0.01	**1.33** 0.02	**1.34** 0.02	**1.16** 0.05	**1.18** 0.05	**1.14** 0.05							
b5	**1.24** 0.03	**1.00** 0.02	**1.03** 0.01	**1.20** 0.02	**1.30** 0.01	**1.31** 0.02	**1.13** 0.03	**1.15** 0.03	**1.16** 0.04	**1.02** 0.01						
b3	**1.12** 0.02	**1.10** 0.04	**1.14** 0.02	**1.33** 0.03	**1.18** 0.03	**1.18** 0.03	**1.02** 0.02	**1.04** 0.02	**1.28** 0.06	**1.13** 0.03	**1.11** 0.03					
a7	**1.17** 0.04	**1.06** 0.04	**1.09** 0.03	**1.27** 0.05	**1.23** 0.04	**1.23** 0.06	**1.06** 0.07	**1.09** 0.07	**1.23** 0.04	**1.09** 0.04	**1.06** 0.04	**1.04** 0.05				
a6	**1.21** 0.03	**1.49** 0.02	**1.54** 0.02	**1.79** 0.04	**1.15** 0.01	**1.14** 0.03	**1.32** 0.05	**1.30** 0.05	**1.74** 0.05	**1.53** 0.03	**1.50** 0.03	**1.35** 0.03	**1.41** 0.04			
a5Y4	**1.20** 0.01	**1.49** 0.04	**1.54** 0.02	**1.79** 0.04	**1.15** 0.02	**1.14** 0.03	**1.32** 0.05	**1.30** 0.04	**1.74** 0.05	**1.53** 0.03	**1.49** 0.03	**1.35** 0.02	**1.41** 0.04	**1.00** 0.01		
a3	**1.22** 0.03	**1.01** 0.03	**1.05** 0.03	**1.22** 0.04	**1.28** 0.03	**1.29** 0.04	**1.11** 0.02	**1.14** 0.02	**1.18** 0.04	**1.04** 0.04	**1.01** 0.02	**1.09** 0.02	**1.05** 0.05	**1.47** 0.04	**1.47** 0.03	
a2	**1.09** 0.03	**1.14** 0.04	**1.17** 0.05	**1.37** 0.07	**1.14** 0.04	**1.15** 0.05	**1.01** 0.02	**1.01** 0.02	**1.32** 0.05	**1.17** 0.06	**1.14** 0.04	**1.03** 0.03	**1.07** 0.06	**1.31** 0.06	**1.31** 0.05	**1.12** 0.02

Fig. S-1-24

Peptide: **SIGPVLCa** CID applied

	z5	y5	y4	y2	IGPV	GPV	GP	b7-18	b7	b6-18	b6	b5-18	b5	a7	a6	a5
y5	**1.18** 0.04															
y4	**1.01** 0.04	**1.17** 0.04														
y2	**1.05** 0.05	**1.24** 0.05	**1.06** 0.02													
IGPV	**1.20** 0.03	**1.42** 0.05	**1.21** 0.04	**1.14** 0.05												
GPV	**1.08** 0.05	**1.27** 0.04	**1.09** 0.02	**1.02** 0.02	**1.11** 0.05											
GP	**1.13** 0.05	**1.33** 0.05	**1.14** 0.02	**1.08** 0.02	**1.06** 0.06	**1.05** 0.02										
b7-18	**1.03** 0.07	**1.14** 0.09	**1.02** 0.07	**1.09** 0.09	**1.24** 0.10	**1.11** 0.08	**1.17** 0.09									
b7	**1.35** 0.21	**1.60** 0.30	**1.37** 0.22	**1.29** 0.23	**1.13** 0.19	**1.26** 0.23	**1.20** 0.21	**1.40** 0.15								
b6-18	**1.19** 0.09	**1.41** 0.16	**1.20** 0.11	**1.14** 0.12	**1.01** 0.09	**1.11** 0.12	**1.06** 0.11	**1.23** 0.10	**1.13** 0.09							
b6	**1.12** 0.04	**1.33** 0.01	**1.14** 0.04	**1.07** 0.04	**1.06** 0.04	**1.05** 0.03	**1.00** 0.03	**1.16** 0.10	**1.20** 0.23	**1.06** 0.12						
b5-18	**1.12** 0.05	**1.32** 0.06	**1.13** 0.03	**1.06** 0.03	**1.07** 0.03	**1.04** 0.04	**1.01** 0.04	**1.16** 0.11	**1.21** 0.21	**1.07** 0.11	**1.01** 0.04					
b5	**1.12** 0.04	**1.33** 0.01	**1.13** 0.03	**1.07** 0.03	**1.07** 0.04	**1.04** 0.03	**1.00** 0.03	**1.16** 0.10	**1.20** 0.24	**1.06** 0.13	**1.00** 0.01	**1.01** 0.04				
a7	**1.14** 0.04	**1.35** 0.07	**1.16** 0.04	**1.09** 0.05	**1.04** 0.05	**1.06** 0.05	**1.01** 0.04	**1.18** 0.07	**1.18** 0.15	**1.04** 0.06	**1.02** 0.06	**1.02** 0.06	**1.02** 0.06			
a6	**1.94** 0.06	**2.29** 0.09	**1.96** 0.05	**1.85** 0.05	**1.62** 0.03	**1.80** 0.06	**1.72** 0.07	**2.01** 0.15	**1.44** 0.22	**1.63** 0.14	**1.72** 0.07	**1.73** 0.03	**1.73** 0.06	**1.69** 0.07		
a5	**2.46** 0.06	**2.91** 0.16	**2.49** 0.10	**2.34** 0.13	**2.05** 0.08	**2.29** 0.13	**2.18** 0.10	**2.54** 0.14	**1.83** 0.22	**2.07** 0.11	**2.19** 0.13	**2.20** 0.11	**2.19** 0.13	**2.15** 0.06	**1.27** 0.05	
a2	**1.23** 0.07	**1.46** 0.08	**1.24** 0.04	**1.17** 0.03	**1.03** 0.07	**1.15** 0.06	**1.09** 0.03	**1.28** 0.13	**1.10** 0.20	**1.04** 0.10	**1.09** 0.06	**1.10** 0.04	**1.10** 0.05	**1.08** 0.05	**1.57** 0.07	**2.00** 0.11

Fig. S-1-25

Peptide: **AIGPVLCa** CID applied

	z5	y6	y5	y4	y2	IGPV	GPV	GPV-28	GP	b7	b6	b5	b4	b3	a7	a6	a5
y6	**1.37** 0.09																
y5	**1.78** 0.07	**1.31** 0.09															
y4	**1.82** 0.14	**1.33** 0.12	**1.02** 0.06														
y2	**1.24** 0.10	**1.10** 0.11	**1.44** 0.12	**1.46** 0.05													
IGPV	**1.08** 0.06	**1.48** 0.09	**1.93** 0.14	**1.96** 0.11	**1.34** 0.06												
GPV	**1.12** 0.15	**1.54** 0.25	**2.00** 0.24	**2.03** 0.14	**1.39** 0.10	**1.04** 0.13											
GPV-28	**1.13** 0.19	**1.55** 0.26	**2.02** 0.29	**2.05** 0.17	**1.40** 0.12	**1.04** 0.14	**1.01** 0.04										
GP	**1.08** 0.14	**1.48** 0.20	**1.93** 0.21	**1.95** 0.11	**1.33** 0.07	**1.01** 0.10	**1.04** 0.03	**1.05** 0.04									
b7	**1.07** 0.15	**1.28** 0.10	**1.67** 0.17	**1.72** 0.25	**1.18** 0.20	**1.16** 0.17	**1.21** 0.28	**1.22** 0.28	**1.16** 0.25								
b6	**1.73** 0.07	**1.27** 0.07	**1.03** 0.02	**1.05** 0.06	**1.40** 0.13	**1.87** 0.14	**1.95** 0.25	**1.96** 0.28	**1.87** 0.22	**1.62** 0.15							
b5	**1.49** 0.08	**1.09** 0.09	**1.20** 0.06	**1.22** 0.03	**1.20** 0.05	**1.61** 0.06	**1.67** 0.14	**1.68** 0.18	**1.61** 0.11	**1.41** 0.21	**1.16** 0.07						
b4	**1.05** 0.10	**1.44** 0.21	**1.88** 0.21	**1.90** 0.12	**1.30** 0.06	**1.03** 0.10	**1.07** 0.04	**1.07** 0.07	**1.03** 0.03	**1.13** 0.26	**1.82** 0.23	**1.56** 0.10					
b3	**1.08** 0.13	**1.48** 0.19	**1.93** 0.22	**1.96** 0.12	**1.34** 0.05	**1.01** 0.08	**1.04** 0.04	**1.04** 0.05	**1.00** 0.02	**1.17** 0.25	**1.87** 0.24	**1.61** 0.12	**1.03** 0.03				
a7	**1.37** 0.16	**1.00** 0.08	**1.31** 0.14	**1.34** 0.18	**1.11** 0.19	**1.49** 0.21	**1.56** 0.34	**1.57** 0.35	**1.50** 0.29	**1.28** 0.10	**1.27** 0.12	**1.10** 0.14	**1.46** 0.31	**1.50** 0.31			
a6	**1.16** 0.05	**1.58** 0.03	**2.07** 0.11	**2.11** 0.17	**1.45** 0.13	**1.07** 0.07	**1.05** 0.14	**1.04** 0.16	**1.09** 0.13	**1.24** 0.12	**2.01** 0.10	**1.73** 0.10	**1.12** 0.13	**1.09** 0.13	**1.59** 0.13		
a5	**1.50** 0.05	**2.05** 0.09	**2.68** 0.14	**2.73** 0.17	**1.87** 0.13	**1.39** 0.06	**1.35** 0.16	**1.35** 0.19	**1.40** 0.15	**1.60** 0.20	**2.60** 0.14	**2.24** 0.09	**1.44** 0.13	**1.40** 0.14	**2.06** 0.22	**1.29** 0.03	
a2	**1.11** 0.20	**1.52** 0.26	**1.98** 0.33	**2.00** 0.21	**1.37** 0.13	**1.02** 0.14	**1.02** 0.05	**1.02** 0.04	**1.02** 0.05	**1.20** 0.29	**1.92** 0.33	**1.65** 0.21	**1.05** 0.08	**1.02** 0.06	**1.54** 0.38	**1.07** 0.18	**1.38** 0.21

Fig. S-1-26

Peptide: **IKGPVLCa** CID applied

	z6	z5	y6	y5	y4	Y2	y1	PVL	PV	KGPV	GPVL-18	GPV-28	GPV	GP-28	GP	b7	b6	b5	b2	a7	a6	a5
z5	**1.11** 0.05																					
y6	**1.03** 0.06	**1.08** 0.02																				
y5	**1.05** 0.06	**1.06** 0.05	**1.02** 0.04																			
y4	**1.10** 0.06	**1.22** 0.04	**1.13** 0.02	**1.15** 0.02																		
Y2	**1.08** 0.08	**1.02** 0.03	**1.06** 0.01	**1.04** 0.03	**1.19** 0.02																	
y1	**1.06** 0.07	**1.05** 0.02	**1.03** 0.01	**1.01** 0.04	**1.17** 0.03	**1.02** 0.01																
PVL	**1.01** 0.04	**1.12** 0.03	**1.03** 0.02	**1.05** 0.02	**1.09** 0.01	**1.09** 0.03	**1.07** 0.03															
PV	**1.09** 0.07	**1.02** 0.04	**1.06** 0.04	**1.04** 0.02	**1.20** 0.02	**1.00** 0.03	**1.03** 0.04	**1.10** 0.03														
KGPV	**1.04** 0.05	**1.15** 0.01	**1.07** 0.02	**1.08** 0.04	**1.06** 0.02	**1.13** 0.03	**1.10** 0.02	**1.03** 0.02	**1.13** 0.03													
GPVL-18	**1.17** 0.07	**1.05** 0.02	**1.14** 0.03	**1.12** 0.04	**1.29** 0.03	**1.08** 0.03	**1.10** 0.03	**1.18** 0.03	**1.08** 0.03	**1.21** 0.02												
GPV-28	**1.08** 0.05	**1.03** 0.04	**1.05** 0.04	**1.03** 0.02	**1.19** 0.02	**1.00** 0.04	**1.02** 0.04	**1.09** 0.02	**1.01** 0.02	**1.12** 0.03	**1.08** 0.02											
GPV	**1.12** 0.07	**1.01** 0.03	**1.09** 0.02	**1.07** 0.01	**1.23** 0.01	**1.03** 0.02	**1.06** 0.03	**1.13** 0.02	**1.03** 0.01	**1.16** 0.03	**1.05** 0.02	**1.04** 0.03										
GP-28	**1.08** 0.08	**1.03** 0.04	**1.05** 0.04	**1.03** 0.03	**1.19** 0.03	**1.01** 0.04	**1.02** 0.04	**1.08** 0.04	**1.01** 0.01	**1.12** 0.04	**1.09** 0.02	**1.00** 0.03	**1.04** 0.02									
GP	**1.09** 0.07	**1.02** 0.05	**1.06** 0.04	**1.04** 0.01	**1.20** 0.02	**1.00** 0.03	**1.02** 0.04	**1.10** 0.03	**1.00** 0.01	**1.13** 0.04	**1.08** 0.03	**1.01** 0.03	**1.03** 0.01	**1.01** 0.02								
b7	**1.02** 0.10	**1.09** 0.05	**1.00** 0.05	**1.02** 0.07	**1.13** 0.07	**1.06** 0.05	**1.04** 0.04	**1.03** 0.06	**1.06** 0.06	**1.06** 0.05	**1.14** 0.04	**1.05** 0.06	**1.09** 0.07	**1.05** 0.04	**1.06** 0.07							
b6	**1.04** 0.08	**1.07** 0.06	**1.02** 0.06	**1.00** 0.03	**1.15** 0.04	**1.04** 0.05	**1.02** 0.06	**1.05** 0.05	**1.04** 0.02	**1.08** 0.05	**1.12** 0.05	**1.04** 0.04	**1.07** 0.04	**1.03** 0.03	**1.04** 0.02	**1.02** 0.07						
b5	**1.01** 0.06	**1.10** 0.04	**1.01** 0.02	**1.03** 0.02	**1.11** 0.01	**1.07** 0.02	**1.05** 0.02	**1.02** 0.01	**1.07** 0.02	**1.05** 0.02	**1.16** 0.03	**1.07** 0.03	**1.11** 0.01	**1.06** 0.03	**1.07** 0.02	**1.01** 0.06	**1.03** 0.04					
b2	**1.07** 0.08	**1.04** 0.03	**1.04** 0.04	**1.02** 0.05	**1.17** 0.04	**1.02** 0.04	**1.00** 0.04	**1.07** 0.04	**1.02** 0.03	**1.10** 0.02	**1.10** 0.01	**1.01** 0.03	**1.05** 0.04	**1.01** 0.02	**1.02** 0.04	**1.04** 0.03	**1.02** 0.05	**1.05** 0.04				
a7	**1.01** 0.05	**1.09** 0.03	**1.01** 0.04	**1.03** 0.07	**1.12** 0.06	**1.07** 0.05	**1.05** 0.04	**1.02** 0.05	**1.07** 0.07	**1.05** 0.04	**1.15** 0.05	**1.06** 0.06	**1.10** 0.06	**1.06** 0.07	**1.07** 0.07	**1.01** 0.07	**1.03** 0.09	**1.00** 0.06	**1.05** 0.05			
a6	**1.07** 0.06	**1.04** 0.03	**1.04** 0.03	**1.02** 0.07	**1.17** 0.06	**1.02** 0.04	**1.01** 0.03	**1.07** 0.05	**1.02** 0.07	**1.11** 0.04	**1.10** 0.05	**1.01** 0.07	**1.05** 0.06	**1.01** 0.07	**1.02** 0.07	**1.04** 0.04	**1.02** 0.09	**1.05** 0.05	**1.00** 0.06	**1.05** 0.04		
a5	**1.05** 0.07	**1.06** 0.03	**1.02** 0.01	**1.00** 0.05	**1.15** 0.03	**1.03** 0.02	**1.01** 0.01	**1.06** 0.03	**1.04** 0.04	**1.09** 0.02	**1.12** 0.03	**1.03** 0.04	**1.07** 0.03	**1.03** 0.04	**1.04** 0.04	**1.03** 0.04	**1.01** 0.06	**1.04** 0.03	**1.01** 0.04	**1.03** 0.05	**1.02** 0.02	
a4	**1.13** 0.07	**1.02** 0.02	**1.10** 0.01	**1.09** 0.03	**1.25** 0.02	**1.05** 0.01	**1.07** 0.01	**1.14** 0.02	**1.04** 0.03	**1.18** 0.02	**1.03** 0.02	**1.05** 0.03	**1.01** 0.02	**1.05** 0.03	**1.04** 0.03	**1.11** 0.05	**1.09** 0.05	**1.12** 0.02	**1.07** 0.03	**1.12** 0.05	**1.06** 0.04	**1.08** 0.01

Fig. S-1-27

Peptide: **IEGPVLCa** CID applied

	z6	**z5**	**y6**	**y5**	**y4**	**y2**	**GPVL**	**GPV**	**EGPV**	**b7**	**b6**	**b5**	**a7**	**a6**
z5	**1.16** 0.05													
y6	**1.24** 0.04	**1.45** 0.03												
y5	**1.30** 0.10	**1.51** 0.11	**1.04** 0.07											
y4	**1.45** 0.08	**1.69** 0.03	**1.17** 0.04	**1.12** 0.08										
y2	**1.40** 0.05	**1.63** 0.04	**1.13** 0.03	**1.08** 0.09	**1.03** 0.05									
GPVL	**1.39** 0.04	**1.20** 0.06	**1.73** 0.05	**1.81** 0.16	**2.02** 0.12	**1.95** 0.10								
GPV	**1.13** 0.03	**1.03** 0.03	**1.41** 0.05	**1.47** 0.11	**1.64** 0.07	**1.59** 0.05	**1.23** 0.06							
EGPV	**1.28** 0.07	**1.10** 0.04	**1.60** 0.08	**1.66** 0.13	**1.86** 0.06	**1.80** 0.07	**1.09** 0.08	**1.13** 0.07						
b7	**1.40** 0.11	**1.63** 0.06	**1.13** 0.06	**1.09** 0.11	**1.03** 0.03	**1.00** 0.06	**1.96** 0.16	**1.59** 0.11	**1.80** 0.08					
b6	**1.41** 0.10	**1.64** 0.12	**1.13** 0.08	**1.09** 0.02	**1.03** 0.07	**1.00** 0.07	**1.96** 0.19	**1.59** 0.10	**1.80** 0.13	**1.00** 0.10				
b5	**1.26** 0.07	**1.47** 0.08	**1.01** 0.05	**1.03** 0.02	**1.15** 0.06	**1.11** 0.06	**1.76** 0.12	**1.43** 0.07	**1.62** 0.11	**1.11** 0.09	**1.12** 0.04			
a7	**1.23** 0.07	**1.43** 0.04	**1.01** 0.04	**1.05** 0.08	**1.18** 0.03	**1.14** 0.05	**1.72** 0.11	**1.40** 0.08	**1.58** 0.02	**1.14** 0.05	**1.14** 0.08	**1.02** 0.07		
a6	**1.16** 0.05	**1.00** 0.01	**1.44** 0.05	**1.50** 0.10	**1.68** 0.03	**1.63** 0.05	**1.20** 0.07	**1.03** 0.04	**1.11** 0.02	**1.63** 0.06	**1.63** 0.10	**1.46** 0.07	**1.43** 0.03	
a5	**1.06** 0.04	**1.23** 0.02	**1.17** 0.01	**1.22** 0.10	**1.37** 0.04	**1.32** 0.05	**1.48** 0.05	**1.20** 0.04	**1.36** 0.06	**1.32** 0.06	**1.33** 0.11	**1.19** 0.07	**1.16** 0.04	**1.23** 0.04

Fig. S-1-28

Peptide: **IAGPVLCa** CID applied

	z6	**z5**	**y6**	**y5**	**y4**	**y2**	**GPVL**	**GPV**	**b7z7**	**b6**	**b5**	**AGPV**	**a7**	**a6**
z5	**1.15** 0.04													
y6	**1.03** 0.03	**1.12** 0.02												
y5	**1.14** 0.03	**1.32** 0.04	**1.18** 0.03											
y4	**1.06** 0.02	**1.09** 0.05	**1.03** 0.04	**1.21** 0.04										
y2	**1.14** 0.02	**1.01** 0.04	**1.11** 0.04	**1.31** 0.02	**1.08** 0.03									
GPVL	**1.16** 0.08	**1.01** 0.04	**1.12** 0.07	**1.32** 0.09	**1.09** 0.09	**1.01** 0.07								
GPV	**1.36** 0.04	**1.18** 0.04	**1.31** 0.05	**1.55** 0.05	**1.28** 0.02	**1.18** 0.04	**1.17** 0.08							
b7z7	**1.21** 0.12	**1.05** 0.12	**1.18** 0.11	**1.39** 0.12	**1.14** 0.09	**1.06** 0.09	**1.05** 0.15	**1.12** 0.09						
b6	**1.16** 0.03	**1.33** 0.04	**1.19** 0.03	**1.01** 0.01	**1.23** 0.05	**1.32** 0.03	**1.34** 0.08	**1.57** 0.07	**1.40** 0.14					
b5	**1.07** 0.03	**1.24** 0.03	**1.11** 0.03	**1.06** 0.02	**1.14** 0.04	**1.23** 0.02	**1.24** 0.07	**1.45** 0.04	**1.30** 0.12	**1.08** 0.02				
AGPV	**1.26** 0.03	**1.09** 0.04	**1.22** 0.05	**1.43** 0.05	**1.18** 0.04	**1.10** 0.03	**1.08** 0.05	**1.08** 0.03	**1.03** 0.11	**1.45** 0.05	**1.35** 0.02			
a7	**1.03** 0.03	**1.12** 0.03	**1.00** 0.02	**1.18** 0.03	**1.03** 0.04	**1.11** 0.04	**1.12** 0.07	**1.31** 0.06	**1.18** 0.12	**1.19** 0.04	**1.11** 0.05	**1.22** 0.06		
a6	**1.11** 0.02	**1.03** 0.02	**1.08** 0.02	**1.27** 0.03	**1.05** 0.03	**1.03** 0.03	**1.04** 0.06	**1.22** 0.03	**1.09** 0.10	**1.29** 0.03	**1.20** 0.03	**1.13** 0.03	**1.08** 0.02	
a5	**1.22** 0.03	**1.06** 0.04	**1.19** 0.04	**1.40** 0.02	**1.15** 0.03	**1.07** 0.01	**1.06** 0.07	**1.11** 0.03	**1.01** 0.09	**1.41** 0.02	**1.31** 0.01	**1.03** 0.02	**1.19** 0.05	**1.10** 0.02

Fig. S-1-29

Peptide: **ISGPVLCa** CID applied

	z6	**z5**	**y6**	**y5**	**y4**	**y2**	**SGPV**	**GP**	**b7-18**	**b7**	**b6-18**	**b6**	**b5**	**a7**	**a6**
z5	**1.23** 0.07														
y6	**1.18** 0.01	**1.45** 0.07													
y5	**1.22** 0.04	**1.49** 0.12	**1.03** 0.03												
y4	**1.38** 0.04	**1.69** 0.12	**1.17** 0.03	**1.14** 0.06											
y2	**1.71** 0.03	**2.09** 0.12	**1.45** 0.02	**1.40** 0.05	**1.24** 0.03										
SGPV	**1.29** 0.04	**1.05** 0.09	**1.52** 0.07	**1.57** 0.08	**1.79** 0.09	**2.21** 0.10									
GP	**1.08** 0.04	**1.13** 0.11	**1.27** 0.06	**1.31** 0.06	**1.49** 0.04	**1.84** 0.08	**1.20** 0.05								
b7-18	**1.35** 0.07	**1.65** 0.16	**1.14** 0.07	**1.11** 0.06	**1.03** 0.07	**1.27** 0.07	**1.74** 0.06	**1.46** 0.10							
b7	**1.30** 0.03	**1.59** 0.12	**1.10** 0.04	**1.07** 0.06	**1.06** 0.04	**1.31** 0.04	**1.68** 0.03	**1.40** 0.07	**1.04** 0.03						
b6-18	**2.21** 0.26	**2.70** 0.43	**1.87** 0.24	**1.82** 0.24	**1.60** 0.21	**1.29** 0.17	**2.85** 0.25	**2.39** 0.28	**1.64** 0.19	**1.70** 0.17					
b6	**1.28** 0.03	**1.57** 0.12	**1.09** 0.03	**1.05** 0.04	**1.08** 0.04	**1.33** 0.04	**1.66** 0.04	**1.39** 0.05	**1.05** 0.05	**1.01** 0.03	**1.72** 0.17				
b5	**1.22** 0.01	**1.49** 0.10	**1.03** 0.02	**1.00** 0.03	**1.13** 0.04	**1.40** 0.03	**1.58** 0.05	**1.32** 0.05	**1.11** 0.05	**1.07** 0.03	**1.81** 0.20	**1.05** 0.02			
a7	**1.15** 0.02	**1.41** 0.10	**1.02** 0.03	**1.06** 0.05	**1.20** 0.05	**1.48** 0.04	**1.49** 0.05	**1.24** 0.07	**1.17** 0.07	**1.13** 0.04	**1.92** 0.20	**1.11** 0.02	**1.06** 0.02		
a6	**1.25** 0.06	**1.02** 0.08	**1.48** 0.06	**1.52** 0.10	**1.73** 0.07	**2.14** 0.08	**1.03** 0.08	**1.16** 0.07	**1.69** 0.12	**1.63** 0.10	**2.78** 0.48	**1.61** 0.11	**1.53** 0.09	**1.44** 0.09	
a5	**1.04** 0.03	**1.18** 0.09	**1.22** 0.04	**1.26** 0.07	**1.43** 0.02	**1.77** 0.05	**1.25** 0.07	**1.04** 0.03	**1.40** 0.08	**1.35** 0.05	**2.30** 0.32	**1.33** 0.05	**1.26** 0.05	**1.19** 0.06	**1.21** 0.04

Fig. S-1-30

Peptide: **IFGPVLCa** CID applied

	z6	z5	y6	y5	GPVL	GPV	b7z7	b6	b5	b3	a7	a6	a5	a3
z5	**1.06** 0.03													
y6	**1.25** 0.04	**1.32** 0.06												
y5	**1.29** 0.05	**1.36** 0.07	**1.03** 0.02											
GPVL	**1.24** 0.03	**1.17** 0.03	**1.55** 0.04	**1.60** 0.04										
GPV	**1.00** 0.05	**1.06** 0.08	**1.25** 0.03	**1.29** 0.03	**1.24** 0.05									
b7z7	**1.57** 0.17	**1.67** 0.18	**1.26** 0.09	**1.22** 0.09	**1.95** 0.18	**1.57** 0.12								
b6	**1.41** 0.07	**1.50** 0.08	**1.13** 0.04	**1.10** 0.01	**1.75** 0.06	**1.41** 0.05	**1.11** 0.08							
b5	**1.27** 0.06	**1.34** 0.07	**1.02** 0.03	**1.02** 0.03	**1.57** 0.05	**1.27** 0.06	**1.24** 0.09	**1.11** 0.02						
b3	**1.33** 0.08	**1.41** 0.09	**1.06** 0.04	**1.03** 0.02	**1.65** 0.07	**1.33** 0.02	**1.19** 0.10	**1.06** 0.02	**1.05** 0.04					
a7	**1.32** 0.07	**1.40** 0.09	**1.06** 0.03	**1.03** 0.03	**1.64** 0.08	**1.32** 0.04	**1.19** 0.06	**1.07** 0.04	**1.04** 0.05	**1.00** 0.04				
a6	**1.02** 0.03	**1.04** 0.05	**1.27** 0.02	**1.31** 0.02	**1.22**0 .02	**1.02** 0.02	**1.60** 0.13	**1.44** 0.04	**1.29** 0.03	**1.35** 0.04	**1.34** 0.04			
a5	**1.57** 0.05	**1.66** 0.07	**1.26** 0.03	**1.22** 0.02	**1.95** 0.04	**1.56** 0.05	**1.00** 0.08	**1.11** 0.02	**1.24** 0.02	**1.18** 0.03	**1.19** 0.05	**1.59** 0.02		
a3	**1.30** 0.04	**1.38** 0.06	**1.04** 0.02	**1.01** 0.01	**1.62** 0.03	**1.30** 0.03	**1.21** 0.09	**1.09** 0.02	**1.03** 0.03	**1.02** 0.03	**1.02** 0.03	**1.32** 0.02	**1.20** 0.02	
a2	**1.27** 0.07	**1.20** 0.07	**1.59** 0.05	**1.64** 0.05	**1.03** 0.04	**1.27** 0.04	**2.00** 0.18	**1.80** 0.07	**1.61** 0.08	**1.69** 0.07	**1.68** 0.07	**1.25** 0.04	**1.99** 0.08	**1.66** 0.04

Fig. S-1-31

Peptide: **IIFPVLCa** CID applied

	z6	y6	y5	y4	y2	PVL	PV	FPVL	b7z7	b6	b5	b4z4	b3z3	b2	a7	a6	a5
y6	**2.69** 0.12																
y5	**1.93** 0.09	**5.18** 0.08															
y4	**2.04** 0.12	**5.48** 0.15	**1.06** 0.03														
y2	**1.12** 0.06	**3.00** 0.05	**1.73** 0.03	**1.83** 0.03													
PVL	**1.05** 0.06	**2.81** 0.06	**1.84** 0.03	**1.95** 0.05	**1.07** 0.02												
PV	**1.15** 0.06	**2.33** 0.08	**2.22** 0.06	**2.35** 0.08	**1.29** 0.03	**1.20** 0.04											
FPVL	**1.03** 0.07	**2.61** 0.08	**1.99** 0.06	**2.10** 0.05	**1.15** 0.02	**1.08** 0.01	**1.12** 0.05										
b7z7	**2.29** 0.68	**6.10** 1.51	**1.18** 0.30	**1.11** 0.28	**2.03** 0.49	**2.17** 0.52	**2.60** 0.67	**2.33** 0.53									
b6	**2.65** 0.12	**7.11** 0.19	**1.37** 0.03	**1.30** 0.05	**2.37** 0.08	**2.53** 0.09	**3.05** 0.09	**2.72** 0.13	**1.22** 0.30								
b5	**1.69** 0.06	**4.53** 0.06	**1.14** 0.02	**1.21** 0.03	**1.51** 0.04	**1.61** 0.03	**1.94** 0.08	**1.74** 0.05	**1.35** 0.35	**1.57** 0.05							
b4z4	**1.87** 0.07	**5.02** 0.10	**1.03** 0.01	**1.09** 0.03	**1.67** 0.04	**1.79** 0.03	**2.15** 0.06	**1.93** 0.06	**1.21** 0.31	**1.42** 0.03	**1.11** 0.02						
b3z3	**1.36** 0.09	**3.65** 0.09	**1.42** 0.05	**1.50** 0.04	**1.22** 0.02	**1.30** 0.04	**1.56** 0.05	**1.40** 0.04	**1.67** 0.39	**1.95** 0.09	**1.24** 0.04	**1.38** 0.05					
b2	**1.01** 0.08	**2.66** 0.16	**1.94** 0.12	**2.06** 0.13	**1.13** 0.06	**1.06** 0.07	**1.14** 0.04	**1.02** 0.07	**2.28** 0.57	**2.67** 0.16	**1.70** 0.11	**1.89** 0.12	**1.37** 0.06				
a7	**2.15** 0.08	**5.78** 0.27	**1.12** 0.06	**1.05** 0.06	**1.93** 0.11	**2.05** 0.10	**2.48** 0.18	**2.22** 0.11	**1.07** 0.29	**1.23** 0.08	**1.27** 0.05	**1.15** 0.05	**1.58** 0.10	**2.17** 0.23			
a6	**1.77** 0.11	**4.76** 0.26	**1.09** 0.08	**1.15** 0.07	**1.59** 0.10	**1.70** 0.12	**2.04** 0.17	**1.83** 0.12	**1.29** 0.34	**1.49** 0.12	**1.05** 0.06	**1.06** 0.08	**1.31** 0.07	**1.79** 0.15	**1.21** 0.07		
a5	**1.29** 0.06	**3.46** 0.19	**1.49** 0.09	**1.58** 0.06	**1.15** 0.06	**1.23** 0.07	**1.48** 0.11	**1.33** 0.07	**1.77** 0.49	**2.05** 0.13	**1.31** 0.05	**1.45** 0.07	**1.05** 0.05	**1.30** 0.13	**1.67** 0.07	**1.38** 0.07	
a2	**1.01** 0.04	**2.70** 0.09	**1.92** 0.04	**2.03** 0.06	**1.11** 0.03	**1.04** 0.02	**1.16** 0.03	**1.04** 0.03	**2.25** 0.58	**2.63** 0.08	**1.68** 0.05	**1.86** 0.03	**1.35** 0.06	**1.02** 0.06	**2.14** 0.12	**1.76** 0.16	**1.28** 0.08

Fig. S-1-32

Peptide: **IIAPVLCa** CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	y1	PVL	b7	b6	b5	b4	b3	b2	APVL	APV	a7	a6	a5
z5	**1.11** 0.06																			
z4	**1.64** 0.02	**1.81** 0.10																		
y6	**2.60** 0.15	**2.35** 0.23	**4.26** 0.26																	
y5	**2.07** 0.15	**2.30** 0.19	**1.27** 0.08	**5.39** 0.43																
y4	**2.45** 0.16	**2.72** 0.22	**1.50** 0.09	**6.36** 0.42	**1.18** 0.02															
y2	**1.27** 0.05	**1.40** 0.11	**1.29** 0.04	**3.29** 0.15	**1.64** 0.06	**1.94** 0.06														
y1	**1.02** 0.05	**1.13** 0.07	**1.61** 0.07	**2.65** 0.20	**2.04** 0.06	**2.41** 0.08	**1.24** 0.05													
PVL	**1.02** 0.05	**1.13** 0.09	**1.61** 0.09	**2.64** 0.09	**2.04** 0.11	**2.41** 0.10	**1.25** 0.03	**1.00** 0.06												
b7	**1.96** 0.70	**2.19** 0.78	**1.19** 0.42	**5.06** 1.67	**1.12** 0.29	**1.32** 0.35	**1.54** 0.52	**1.91** 0.57	**1.92** 0.65											
b6	**2.67** 0.20	**2.96** 0.23	**1.63** 0.11	**6.93** 0.51	**1.29** 0.03	**1.09** 0.02	**2.11** 0.09	**2.62** 0.11	**2.62** 0.12	**1.44** 0.37										
b5	**1.70** 0.10	**1.89** 0.13	**1.04** 0.06	**4.43** 0.31	**1.22** 0.03	**1.44** 0.03	**1.35** 0.04	**1.67** 0.06	**1.68** 0.07	**1.14** 0.35	**1.57** 0.02									
b4	**1.72** 0.08	**1.90** 0.13	**1.05** 0.04	**4.46** 0.25	**1.21** 0.04	**1.43** 0.03	**1.36** 0.03	**1.69** 0.07	**1.69** 0.04	**1.13** 0.37	**1.55** 0.05	**1.01** 0.02								
b3	**1.25** 0.04	**1.38** 0.11	**1.31** 0.05	**3.24** 0.11	**1.66** 0.08	**1.96** 0.07	**1.01** 0.02	**1.23** 0.06	**1.23** 0.03	**1.56** 0.51	**2.14** 0.09	**1.37** 0.05	**1.38** 0.03							
b2	**1.10** 0.07	**1.22** 0.09	**1.49** 0.08	**2.85** 0.21	**1.89** 0.02	**2.23** 0.04	**1.15** 0.03	**1.08** 0.03	**1.08** 0.05	**1.77** 0.55	**2.43** 0.05	**1.55** 0.02	**1.56** 0.03	**1.14** 0.05						
APVL	**1.35** 0.04	**1.22** 0.10	**2.22** 0.07	**1.92** 0.06	**2.80** 0.14	**3.31** 0.12	**1.71** 0.03	**1.38** 0.06	**1.38** 0.04	**2.63** 0.87	**3.61** 0.16	**2.31** 0.09	**2.32** 0.07	**1.69** 0.01	**1.48** 0.07					
APV	**1.32** 0.07	**1.46** 0.11	**1.24** 0.05	**3.43** 0.26	**1.57** 0.04	**1.86** 0.05	**1.04** 0.03	**1.29** 0.03	**1.30** 0.06	**1.47** 0.48	**2.03** 0.09	**1.29** 0.04	**1.30** 0.03	**1.06** 0.04	**1.20** 0.03	**1.78** 0.08				
a7	**2.13** 0.11	**2.36** 0.20	**1.30** 0.08	**5.53** 0.21	**1.03** 0.10	**1.15** 0.10	**1.69** 0.13	**2.10** 0.19	**2.10** 0.12	**1.16** 0.34	**1.25** 0.11	**1.25** 0.10	**1.24** 0.09	**1.71** 0.10	**1.94** 0.17	**2.89** 0.18	**1.62** 0.16			
a6	**1.63** 0.05	**1.80** 0.08	**1.01** 0.04	**4.23** 0.23	**1.27** 0.07	**1.51** 0.08	**1.29** 0.05	**1.60** 0.08	**1.60** 0.06	**1.21** 0.42	**1.64** 0.10	**1.05** 0.05	**1.06** 0.04	**1.31** 0.05	**1.48** 0.07	**2.20** 0.10	**1.24** 0.07	**1.31** 0.06		
a5	**1.19** 0.05	**1.32** 0.10	**1.38** 0.06	**3.08** 0.23	**1.74** 0.11	**2.06** 0.13	**1.06** 0.05	**1.17** 0.06	**1.17** 0.08	**1.64** 0.52	**2.24** 0.14	**1.43** 0.08	**1.44** 0.08	**1.05** 0.05	**1.08** 0.06	**1.61** 0.07	**1.11** 0.07	**1.80** 0.12	**1.37** 0.08	
a2	**1.10** 0.10	**1.22** 0.14	**1.49** 0.15	**2.85** 0.12	**1.89** 0.12	**2.23** 0.13	**1.15** 0.08	**1.08** 0.10	**1.08** 0.05	**1.77** 0.56	**2.43** 0.13	**1.55** 0.09	**1.57** 0.09	**1.14** 0.07	**1.00** 0.06	**1.49** 0.10	**1.20** 0.09	**1.94** 0.15	**1.48** 0.11	**1.08** 0.12

Fig. S-1-33

Peptide: **IIKPVLCa** CID applied

	z5	z4	y6	y5	y4	y2	y1	PVL	KPVL	KPV	IK	b7z7	b6	b5	b4	b3	b2	a6	a5
z4	**1.83** 0.02																		
y6	**4.64** 0.20	**2.53** 0.09																	
y5	**1.93** 0.05	**1.05** 0.02	**2.40** 0.09																
y4	**1.68** 0.04	**1.09** 0.02	**2.76** 0.10	**1.15** 0.02															
y2	**2.20** 0.01	**1.20** 0.02	**2.11** 0.09	**1.14** 0.03	**1.31** 0.04														
y1	**2.32** 0.02	**1.26** 0.03	**2.00** 0.11	**1.20** 0.03	**1.38** 0.04	**1.05** 0.01													
PVL	**2.50** 0.11	**1.37** 0.05	**1.85** 0.05	**1.30** 0.07	**1.49** 0.08	**1.14** 0.05	**1.08** 0.06												
KPVL	**1.15** 0.03	**1.59** 0.03	**4.02** 0.14	**1.67** 0.06	**1.46** 0.06	**1.90** 0.04	**2.01** 0.07	**2.17** 0.06											
KPV	**1.46** 0.03	**1.25** 0.03	**3.17** 0.14	**1.32** 0.03	**1.15** 0.03	**1.50** 0.02	**1.58** 0.04	**1.71** 0.09	**1.27** 0.04										
IK	**3.73** 0.12	**2.03** 0.05	**1.24** 0.04	**1.93** 0.03	**2.22** 0.04	**1.70** 0.06	**1.61** 0.07	**1.49** 0.07	**3.23** 0.12	**2.55** 0.08									
b7z7	**1.84** 0.17	**1.01** 0.09	**2.52** 0.19	**1.05** 0.09	**1.10** 0.11	**1.20** 0.10	**1.26** 0.12	**1.36** 0.08	**1.60** 0.13	**1.26** 0.09	**2.03** 0.19								
b6	**1.75** 0.08	**1.05** 0.05	**2.65** 0.22	**1.10** 0.06	**1.04** 0.06	**1.26** 0.06	**1.32** 0.06	**1.43** 0.11	**1.51** 0.10	**1.19** 0.05	**2.13** 0.14	**1.05** 0.09							
b5	**2.10** 0.11	**1.15** 0.06	**2.20** 0.15	**1.09** 0.04	**1.25** 0.04	**1.04** 0.06	**1.10** 0.06	**1.19** 0.10	**1.82** 0.13	**1.44** 0.05	**1.77** 0.07	**1.15** 0.11	**1.20** 0.06						
b4	**1.74** 0.05	**1.05** 0.02	**2.66** 0.08	**1.11** 0.03	**1.04** 0.04	**1.26** 0.03	**1.33** 0.05	**1.44** 0.03	**1.51** 0.03	**1.19** 0.04	**2.14** 0.08	**1.06** 0.07	**1.00** 0.06	**1.21** 0.08					
b3	**3.24** 0.09	**1.77** 0.03	**1.43** 0.05	**1.68** 0.06	**1.93** 0.08	**1.47** 0.04	**1.40** 0.05	**1.29** 0.03	**2.81** 0.02	**2.21** 0.08	**1.15** 0.05	**1.76** 0.14	**1.85** 0.12	**1.54** 0.11	**1.86** 0.03				
b2	**2.40** 0.04	**1.31** 0.03	**1.93** 0.07	**1.24** 0.02	**1.43** 0.04	**1.09** 0.02	**1.04** 0.02	**1.04** 0.04	**2.08** 0.06	**1.64** 0.04	**1.55** 0.03	**1.31** 0.12	**1.37** 0.08	**1.14** 0.06	**1.38** 0.05	**1.35** 0.04			
a6	**1.12** 0.04	**1.64** 0.06	**4.16** 0.30	**1.73** 0.10	**1.50** 0.09	**1.97** 0.08	**2.08** 0.07	**2.24** 0.14	**1.03** 0.04	**1.31** 0.07	**3.34** 0.20	**1.65** 0.20	**1.56** 0.10	**1.88** 0.17	**1.56** 0.09	**2.90** 0.12	**2.15** 0.10		
a5	**1.58** 0.09	**1.16** 0.06	**2.93** 0.05	**1.22** 0.06	**1.06** 0.05	**1.39** 0.08	**1.46** 0.10	**1.58** 0.06	**1.37** 0.07	**1.08** 0.06	**2.36** 0.09	**1.16** 0.08	**1.10** 0.09	**1.33** 0.07	**1.10** 0.05	**2.05** 0.10	**1.52** 0.08	**1.42** 0.12	
a2	**2.08** 0.03	**1.14** 0.02	**2.23** 0.09	**1.08** 0.03	**1.24** 0.04	**1.06** 0.02	**1.11** 0.03	**1.20** 0.05	**1.80** 0.04	**1.42** 0.04	**1.79** 0.05	**1.13** 0.10	**1.19** 0.07	**1.01** 0.06	**1.19** 0.04	**1.56** 0.05	**1.15** 0.02	**1.87** 0.07	**1.32** 0.07

Fig. S-1-34

Peptide: **IIDPVLCa** CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	PVL	DPVL	DPV	b7z7	b6	b5	b4	b3	a7	a6	a5
z5	**1.71** 0.16																	
z4	**1.54** 0.06	**1.11** 0.07																
y6	**3.09** 0.33	**1.80** 0.04	**2.00** 0.17															
y5	**1.09** 0.02	**1.86** 0.14	**1.68** 0.05	**3.36** 0.31														
y4	**1.02** 0.09	**1.70** 0.31	**1.52** 0.19	**3.07** 0.60	**1.12** 0.12													
y2	**1.17** 0.03	**1.46** 0.10	**1.32** 0.02	**2.64** 0.22	**1.28** 0.03	**1.16** 0.13												
PVL	**2.28** 0.07	**1.34** 0.12	**1.48** 0.07	**1.35** 0.15	**2.49** 0.13	**2.25** 0.20	**1.95** 0.06											
DPVL	**2.17** 0.07	**1.28** 0.10	**1.41** 0.05	**1.42** 0.15	**2.37** 0.13	**2.14** 0.21	**1.86** 0.05	**1.05** 0.02										
DPV	**1.81** 0.09	**1.07** 0.12	**1.18** 0.07	**1.71** 0.24	**1.98** 0.14	**1.78** 0.11	**1.55** 0.08	**1.26** 0.05	**1.20** 0.05									
b7z7	**1.47** 0.39	**1.29** 0.51	**1.14** 0.41	**2.34** 0.98	**1.61** 0.46	**1.42** 0.28	**1.26** 0.35	**1.67** 0.50	**1.59** 0.50	**1.32** 0.39								
b6	**1.05** 0.13	**1.67** 0.38	**1.49** 0.25	**3.02** 0.74	**1.15** 0.16	**1.03** 0.04	**1.13** 0.18	**2.20** 0.30	**2.09** 0.30	**1.74** 0.18	**1.37** 0.23							
b5	**1.11** 0.06	**1.55** 0.21	**1.40** 0.11	**2.81** 0.42	**1.21** 0.09	**1.09** 0.05	**1.06** 0.07	**2.07** 0.10	**1.96** 0.10	**1.64** 0.03	**1.32** 0.31	**1.06** 0.09						
b4	**1.16** 0.07	**1.99** 0.23	**1.79** 0.11	**3.60** 0.49	**1.07** 0.09	**1.18** 0.07	**1.36** 0.07	**2.65** 0.10	**2.52** 0.08	**2.10** 0.03	**1.69** 0.41	**1.22** 0.12	**1.28** 0.02					
b3	**1.91** 0.12	**1.13** 0.14	**1.24** 0.09	**1.63** 0.25	**2.09** 0.17	**1.88** 0.08	**1.64** 0.11	**1.19** 0.06	**1.14** 0.06	**1.06** 0.03	**1.39** 0.37	**1.83** 0.16	**1.73** 0.02	**2.22** 0.04				
a7	**1.27** 0.08	**2.17** 0.31	**1.95** 0.18	**3.93** 0.62	**1.16** 0.10	**1.29** 0.07	**1.48** 0.12	**2.89** 0.14	**2.75** 0.18	**2.29** 0.09	**1.84** 0.39	**1.33** 0.12	**1.40** 0.03	**1.09** 0.03	**2.42** 0.04			
a6	**1.10** 0.06	**1.87** 0.08	**1.69** 0.04	**3.38** 0.21	**1.00** 0.04	**1.13** 0.15	**1.28** 0.03	**2.50** 0.15	**2.38** 0.11	**1.99** 0.15	**1.63** 0.49	**1.16** 0.19	**1.22** 0.11	**1.06** 0.08	**2.11** 0.19	**1.16** 0.12		
a5	**1.00** 0.08	**1.72** 0.23	**1.54** 0.10	**3.10** 0.49	**1.09** 0.10	**1.02** 0.07	**1.17** 0.08	**2.28** 0.13	**2.17** 0.11	**1.81** 0.04	**1.45** 0.38	**1.05** 0.12	**1.11** 0.03	**1.16** 0.02	**1.91** 0.06	**1.26** 0.06	**1.10** 0.10	
a2	**1.86** 0.26	**1.10** 0.20	**1.21** 0.16	**1.70** 0.38	**2.04** 0.32	**1.82** 0.08	**1.59** 0.21	**1.24** 0.15	**1.18** 0.13	**1.02** 0.10	**1.33** 0.29	**1.77** 0.09	**1.68** 0.14	**2.16** 0.18	**1.03** 0.08	**2.34** 0.21	**2.05** 0.30	**1.86** 0.15

Fig. S-1-35

Peptide: **IISPVLCa** CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	SPVL	SPV	b7z7	b6	b5	b4	b3	b2	a7	a6	a5
z5	**1.31** 0.04																	
z4	**1.03** 0.08	**1.27** 0.07																
y6	**2.72** 0.05	**2.07** 0.06	**2.62** 0.19															
y5	**1.51** 0.05	**1.98** 0.05	**1.56** 0.11	**4.10** 0.13														
y4	**1.70** 0.06	**2.23** 0.04	**1.76** 0.09	**4.61** 0.11	**1.13** 0.02													
y2	**1.16** 0.07	**1.53** 0.06	**1.20** 0.07	**3.16** 0.21	**1.30** 0.06	**1.46** 0.07												
SPVL	**1.58** 0.05	**1.20** 0.01	**1.53** 0.09	**1.72** 0.06	**2.38** 0.06	**2.69** 0.07	**1.84** 0.07											
SPV	**1.09** 0.06	**1.20** 0.04	**1.05** 0.06	**2.49** 0.15	**1.65** 0.07	**1.85** 0.08	**1.27** 0.03	**1.45** 0.04										
b7z7	**2.11** 0.21	**2.76** 0.36	**2.17** 0.39	**5.72** 0.60	**1.40** 0.17	**1.24** 0.16	**1.81** 0.28	**3.33** 0.42	**2.30** 0.35									
b6	**1.99** 0.04	**2.60** 0.08	**2.05** 0.14	**5.39** 0.10	**1.32** 0.03	**1.17** 0.02	**1.71** 0.10	**3.14** 0.11	**2.16** 0.11	**1.06** 0.12								
b5	**1.29** 0.06	**1.69** 0.04	**1.33** 0.06	**3.50** 0.13	**1.17** 0.03	**1.32** 0.02	**1.11** 0.05	**2.03** 0.05	**1.40** 0.06	**1.63** 0.23	**1.54** 0.04							
b4	**1.27** 0.08	**1.67** 0.09	**1.31** 0.09	**3.45** 0.24	**1.19** 0.08	**1.34** 0.09	**1.09** 0.05	**2.01** 0.11	**1.38** 0.05	**1.66** 0.28	**1.57** 0.10	**1.01** 0.07						
b3	**1.21** 0.05	**1.08** 0.03	**1.17** 0.07	**2.24** 0.12	**1.83** 0.09	**2.06** 0.08	**1.41** 0.07	**1.31** 0.03	**1.11** 0.04	**2.55** 0.37	**2.40** 0.14	**1.56** 0.05	**1.54** 0.10					
b2	**1.30** 0.09	**1.01** 0.06	**1.26** 0.12	**2.09** 0.16	**1.97** 0.14	**2.21** 0.16	**1.51** 0.07	**1.22** 0.06	**1.19** 0.04	**2.75** 0.42	**2.59** 0.19	**1.68** 0.12	**1.65** 0.08	**1.07** 0.06				
a7	**1.63** 0.08	**2.14** 0.07	**1.69** 0.11	**4.43** 0.24	**1.08** 0.07	**1.04** 0.05	**1.40** 0.09	**2.58** 0.10	**1.78** 0.07	**1.29** 0.18	**1.22** 0.07	**1.27** 0.07	**1.29** 0.08	**1.98** 0.05	**2.12** 0.11			
a6	**1.27** 0.08	**1.67** 0.08	**1.31** 0.04	**3.45** 0.14	**1.19** 0.07	**1.34** 0.06	**1.09** 0.05	**2.01** 0.11	**1.38** 0.08	**1.66** 0.24	**1.56** 0.07	**1.01** 0.04	**1.00** 0.06	**1.54** 0.10	**1.65** 0.15	**1.29** 0.08		
a5	**1.03** 0.05	**1.35** 0.06	**1.07** 0.06	**2.80** 0.11	**1.46** 0.05	**1.65** 0.05	**1.13** 0.09	**1.63** 0.08	**1.13** 0.08	**2.04** 0.27	**1.92** 0.08	**1.25** 0.04	**1.23** 0.11	**1.25** 0.07	**1.35** 0.13	**1.58** 0.10	**1.23** 0.07	
a2	**1.19** 0.09	**1.11** 0.07	**1.14** 0.10	**2.29** 0.18	**1.79** 0.12	**2.02** 0.15	**1.38** 0.07	**1.33** 0.08	**1.09** 0.04	**2.50** 0.39	**2.36** 0.16	**1.53** 0.11	**1.51** 0.06	**1.02** 0.07	**1.10** 0.02	**1.93** 0.11	**1.51** 0.13	**1.23** 0.13

Fig. S-1-36

Peptide: **IIIPVLCa** CID applied

	z6	z5	z4	y6	y5	y4	y2	y1	IPVL	IPV	b7z7	b6	b5	b4	b3	b2	a7	a6
z5	**1.16** 0.04																	
z4	**2.15** 0.16	**1.86** 0.12																
y6	**2.45** 0.26	**2.85** 0.22	**5.29** 0.34															
y5	**2.26** 0.23	**1.95** 0.17	**1.05** 0.08	**5.57** 0.61														
y4	**2.64** 0.28	**2.28** 0.20	**1.23** 0.10	**6.50** 0.63	**1.17** 0.03													
y2	**1.32** 0.12	**1.14** 0.10	**1.62** 0.10	**3.26** 0.35	**1.70** 0.07	**1.99** 0.09												
y1	**1.39** 0.32	**1.20** 0.26	**1.52** 0.25	**3.46** 0.83	**1.60** 0.20	**1.87** 0.25	**1.06** 0.12											
IPVL	**1.62** 0.14	**1.89** 0.15	**3.50** 0.18	**1.51** 0.16	**3.68** 0.13	**4.30** 0.22	**2.16** 0.09	**2.28** 0.28										
IPV	**1.60** 0.22	**1.38** 0.16	**1.34** 0.14	**3.94** 0.53	**1.41** 0.05	**1.65** 0.05	**1.21** 0.05	**1.14** 0.11	**2.61** 0.17									
b7z7	**5.14** 0.60	**4.43** 0.37	**2.39** 0.23	**12.6** 1.18	**2.27** 0.16	**1.94** 0.09	**3.87** 0.24	**3.64** 0.56	**8.37** 0.60	**3.21** 0.19								
b6	**3.60** 0.44	**3.11** 0.31	**1.68** 0.16	**8.88** 1.04	**1.60** 0.04	**1.37** 0.03	**2.72** 0.10	**2.56** 0.30	**5.87** 0.36	**2.25** 0.04	**1.42** 0.09							
b5	**1.76** 0.23	**1.52** 0.17	**1.22** 0.12	**4.33** 0.53	**1.29** 0.04	**1.50** 0.03	**1.33** 0.07	**1.25** 0.16	**2.86** 0.18	**1.10** 0.02	**2.92** 0.19	**2.05** 0.03						
b4	**2.38** 0.27	**2.06** 0.22	**1.11** 0.08	**5.88** 0.75	**1.05** 0.03	**1.11** 0.05	**1.80** 0.07	**1.69** 0.16	**3.88** 0.10	**1.49** 0.06	**2.16** 0.14	**1.51** 0.07	**1.35** 0.07					
b3	**1.96** 0.21	**1.69** 0.14	**1.10** 0.08	**4.82** 0.52	**1.15** 0.06	**1.35** 0.06	**1.48** 0.03	**1.39** 0.16	**3.19** 0.19	**1.23** 0.04	**2.62** 0.15	**1.84** 0.06	**1.11** 0.05	**1.22** 0.06				
b2	**1.46** 0.29	**1.26** 0.23	**1.45** 0.23	**3.62** 0.73	**1.53** 0.12	**1.78** 0.16	**1.11** 0.10	**1.05** 0.05	**2.40** 0.27	**1.08** 0.06	**3.46** 0.42	**2.44** 0.17	**1.19** 0.09	**1.61** 0.14	**1.33** 0.10			
a7	**3.86** 0.32	**3.32** 0.30	**1.79** 0.28	**9.43** 1.03	**1.70** 0.31	**1.45** 0.25	**2.89** 0.52	**2.70** 0.83	**6.26** 1.09	**2.39** 0.49	**1.33** 0.20	**1.06** 0.20	**2.18** 0.43	**1.61** 0.32	**1.95** 0.35	**2.57** 0.70		
a6	**2.99** 0.23	**2.58** 0.21	**1.39** 0.11	**7.37** 0.97	**1.32** 0.07	**1.13** 0.09	**2.25** 0.21	**2.10** 0.35	**4.86** 0.27	**1.86** 0.17	**1.72** 0.20	**1.21** 0.10	**1.70** 0.13	**1.25** 0.08	**1.52** 0.16	**2.01** 0.27	**1.29** 0.21	
a2	**1.61** 0.41	**1.39** 0.33	**1.31** 0.27	**3.99** 1.01	**1.38** 0.17	**1.61** 0.21	**1.22** 0.17	**1.16** 0.06	**2.64** 0.41	**1.01** 0.10	**3.14** 0.49	**2.21** 0.24	**1.08** 0.11	**1.46** 0.17	**1.20** 0.14	**1.10** 0.05	**2.32** 0.74	**1.82** 0.30
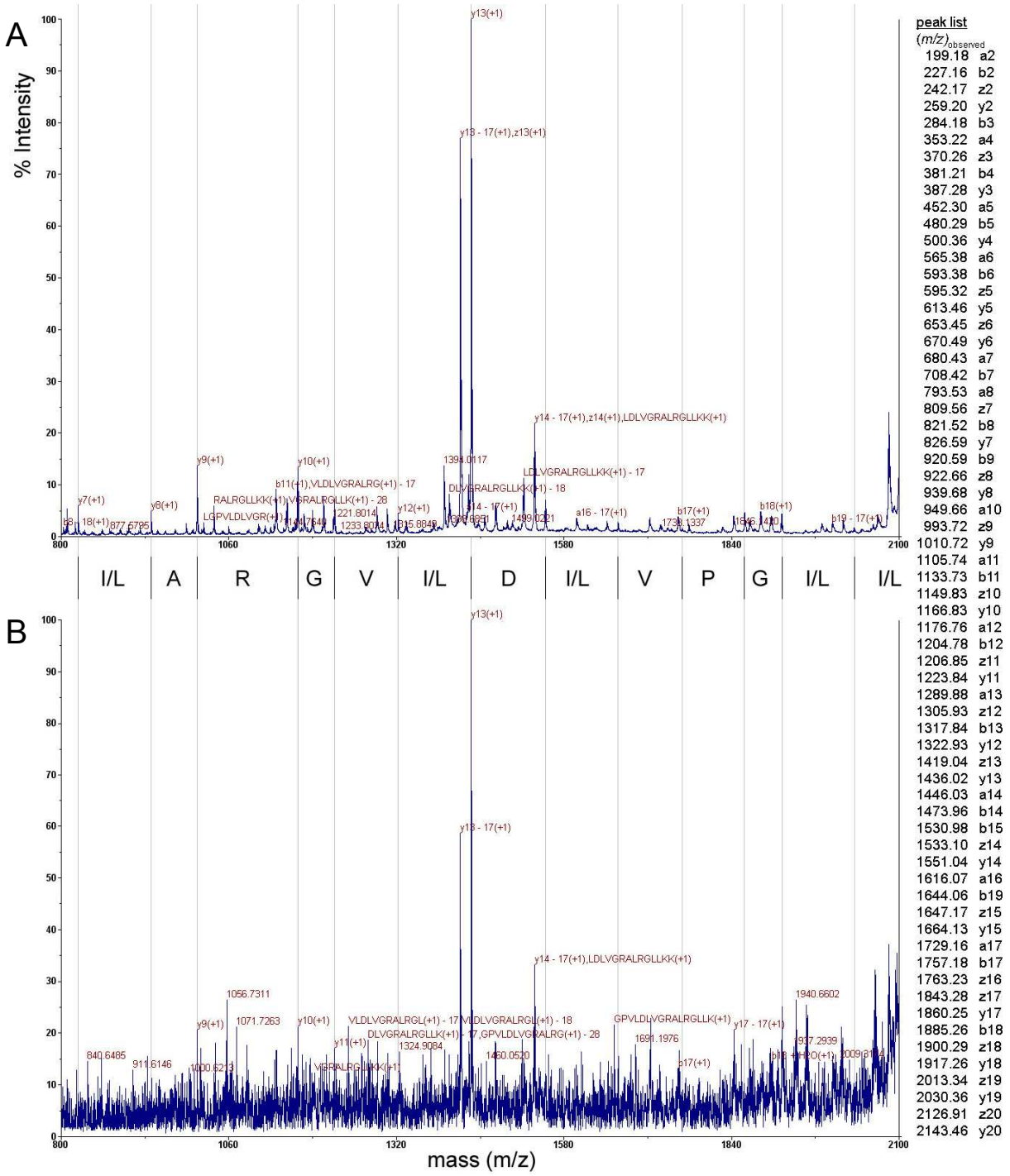
Fig. S-2: MALDI-MS/MS spectra of (A) synthetic and (B) natural (fraction 27.2 min in chromatogram Fig.2A) [D-Leu2]-GH-2 peptide.