

## Česká terminologie hmotnostní spektrometrie

© IUPAC 2016

*Redakce:* Jan Havliš, Michal Holčapek, Michael Volný

*Překlad:* Jan Havliš, Michal Holčapek, Jan Preisler, Patrik Španěl, Michael Volný

*Odborná spolupráce:* Josef Cvačka, Karel Lemr, Lucie Nováková, Jaroslav Pól, Miroslav Ryska, Marek Šebela, František Tureček  
a Český komitét pro chemii

*Jazyková spolupráce:* Ivana Bozděchová (Ústav českého jazyka a teorie komunikace FF UK)

Projekt vznikl a vyvíjel se pod záštitou **České společnosti pro hmotnostní spektrometrii** a **Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci**.

*Obecné poznámky k českému překladu:*

Základem hmotnostně spektrometrického terminologického slovníku je překlad hesel z anglického originálu práce Murray *a kol.*, *Pure Appl Chem*, 85 (2013) 1515. Překlady hesel jsou v několika málo případech v české verzi upřesněny a doplněny poznámkou oproti verzi anglické tam, kde jsme to shledali vhodným. Předpokládáme, že heslář se bude rozrůstat za rámec tohoto základu o příspěvky uživatelů po jejich akceptování redakcí.

Snažíme se vycházet především z českých termínů již užívaných. U některých doporučených termínů navrhuje varianty, především tam, kde existuje obvyklá, ale jazykově méně nevhodná varianta, a varianta jazykově vhodnější.

Termíny *srážka* nebo *kolize* jsou považovány za rovnocenný překlad anglického termínu *collision*. V textu je uváděn výhradně termín *kolize*.

Termíny *kolizí indukovaná* a *kolizně indukovaná* jsou vzájemně zaměnitelné, v textu důsledně uvádíme termín *kolizně indukovaná*.

Termíny *bombardování* a *ostřelování* jsou vzájemně zaměnitelné, v textu důsledně uvádíme termín *ostřelování*.

Termíny *elektroforetogram*, *elektroforegram* a *elektroferogram* jsou vzájemně zaměnitelné, v textu důsledně uvádíme termín *elektroferogram*.

Termíny *molekulární* a *molekulový*, *atomární* a *atomový* jsou často užívány jako synonyma, i když v mnoha případech to není jazykově správné neboť u koncovky *-ární* jde o anglicismus. Rozhodli jsme se překládat tyto termíny jako *molekulový/atomový* v případě, že se týkají molekul/atomů (molekulový ion, atomový poloměr; lze nahradit genitivem – poloměr atomu) a *molekulární/atomární* tehdy, mají-li popisované skutečnosti vlastnosti/velikost molekuly/atomu (atomární kyslík, molekulární částice) a vycházíme z jazykové analýzy Pavly Loucké (Vesmír 7, 1998, str. 416).

### 1. absolute quantitation of proteins (AQUA)

Method for absolute quantitation of proteins via measurements on constituent proteolytic peptides using chemically synthesized isotope-labeled peptides as surrogate internal standards for mass spectrometry. From [22].

#### 1. absolutní kvantifikace proteinů (AQUA)

Metoda absolutní kvantifikace proteinů měřením jejich proteolytických peptidů s použitím chemicky syntetizovaných, izotopově značených peptidů jako chemicky podobných vnitřních standardů pro hmotnostní spektrometrii. Citace [22].

### 2. abundance sensitivity

Ratio of the maximum *ion* current recorded at a specified *m/z* value to the maximum *ion* current arising from the same species recorded at a neighboring *m/z* value.

*Note:* The *abundance sensitivity* is a measure of the contribution of the peak “tail” of a major isotope (with a certain *m/z* value) to an adjacent *m/z* value which in some cases might be more than 1 *m/z* removed. Its value is dependent on the *resolving power* of the *mass spectrometer*.

Revised from [5,6] using additional information from [23].

#### 2. citlivost k izotopovému zastoupení

Poměr maximálního iontového proudu zaznamenaného na dané hodnotě *m/z* k maximálnímu iontovému proudu zaznamenanému na sousedním *m/z* pocházejícímu ze stejné částice.

*Poznámka:* *Citlivost k izotopovému zastoupení* je měřítkem příspěvku tzv. chvostu píku hlavního izotopu (s určitou hodnotou *m/z*) k sousednímu píku na hodnotě *m/z*, která může být v některých případech vzdálená i o více než *m/z* 1. Tato veličina závisí na rozlišovací schopnosti hmotnostního spektrometru.

Upraveno podle [5, 6] s použitím doplňujících informací z [23].

### 3. accelerating potential

Electrical potential difference used to impart translational energy to *ions*.

*Note:* *Accelerating voltage* is often used as a synonym, but the terms are equivalent only in the case of a static *accelerating potential*. From [24].

#### 3. urychlovací potenciál

Rozdíl elektrických potenciálů sloužící k udělení translační energie iontům.

*Poznámka:* *Urychlovací napětí* bývá používáno jako synonymum, ale pojmy jsou ekvivalentní pouze v případě statického *urychlovacího potenciálu*. Citace [24].

### 4. accelerating voltage

This term is deprecated. See *accelerating potential*.

#### 4. urychlovací napětí

Tento termín se nedoporučuje. Viz *urychlovací potenciál*.

### 5. accelerator mass spectrometry (AMS)

*Mass spectrometry* technique in which atoms and molecules from a sample are ionized, accelerated to MeV energies and separated according to their momentum, charge, and energy, allowing high discrimination for measurement

of isotope abundances. From [4].

### 5. hmotnostní spektrometrie s urychlovačem (AMS)

Technika hmotnostní spektrometrie využívající urychlení ionizovaných atomů a molekul vzorku na velmi vysoké energie v řádu MeV a jejich následnou separaci podle hybnosti, náboje a energie. Tato technika dosahuje vysokého rozsahu pro měření izotopového zastoupení. Citace [4].

### 6. accurate mass

Experimentally determined mass of an *ion* of known charge.

*Note 1:* Can be used to determine elemental composition to within limits defined by both the accuracy and precision of the measurement.

*Note 2:* *Accurate mass* and *exact mass* are not synonymous. *Accurate mass* refers to a measured mass, and *exact mass* refers to a calculated mass. See also *exact mass*. From [10,25].

### 6. přesná hmotnost

Experimentálně určená hmotnost iontu se známým nábojem.

*Poznámka 1:* Je z ní možno odvodit sumární vzorec (molekulový vzorec) chemického složení iontu v mezích daných správností a přesností měření.

*Poznámka 2:* *Přesná hmotnost* a *správná hmotnost* nejsou synonyma. Přesná hmotnost je určena měřením na rozdíl od teoreticky vypočtené *správné hmotnosti*. Citace [10, 25].

### 7. accurate mass tag

Value of the mass of a peptide from a protein that has been chemically or enzymatically cleaved into fragments. The mass is recorded with sufficiently high accuracy and precision that it can be used in identification of the protein. See also *peptide mass fingerprinting (PMF)*. From [26,27].

### 7. peptidová značka se správnou hmotností

Hmotnost peptidu z proteinu chemicky nebo enzymově rozštěpeného na fragmenty. Hmotnost je zaznamenána s takovou správností a přesností, že je možno ji použít pro identifikaci proteinu. Viz také *peptidové hmotnostní mapování*. Citace [26, 27].

### 8. acyl cation

See *acylium ion*.

### 8. acylový kation

Viz *acyliový ion*.

### 9. acylium ion (acyl cation)

*Even-electron ion* of general formula  $R-C\equiv O^+$  or its resonance form  $R-C^+=O$ . From [6].

### 9. acyliový ion (acylový kation)

*Ion se sudým počtem* elektronů s obecným vzorcem  $R-C\equiv O^+$  nebo jeho rezonanční struktura  $R-C^+=O$ . Citace [6].

### 10. adiabatic ionization

Removal of an electron from an atom, radical, or molecule in its lowest energy state, thus producing an *ion* in its lowest energy state. From [5,6].

### 10. adiabatická ionizace

Ionizační proces, při kterém je elektron odejmut z atomu, iontu nebo molekuly v základním energetickém stavu tak, že vzniklý ion se také nachází v základním energetickém stavu. Citace [5,6].

### 11. adduct ion

*Ion* formed by the interaction of a *precursor ion* with one or more atoms or molecules to form an ion containing all the constituent atoms of the precursor ion as well as the additional atoms from the associated atoms or molecules.

*Note:* For example, a  $\text{Na}^+$  adduct of a molecule (M) that is represented as  $[\text{M} + \text{Na}]^+$ . See also *anionized molecule*, *cationized molecule*, *protonated molecule*. From [5,6].

### 11. aduktový ion adukt

Ion vzniklý spojením *prekurzorového iontu* s jedním nebo více atomy či molekulami. Aduktový ion obsahuje všechny atomy prekurzorového iontu a současně všechny navázané atomy či všechny atomy navázaných molekul.

*Poznámka:* Například aduktový ion  $\text{Na}^+$  sloučený s molekulou M je zapsán jako  $[\text{M} + \text{Na}]^+$ . Viz také *anionovaná molekula*, *kationovaná molekula*, *protonovaná molekula*. Citace [5,6].

### 12. after mass analysis

This term is obsolete.

Term used to describe the *total ion current* measured as the sum of all the separate *ion* currents carried by the different ions of the same sign contributing to the *mass spectrum*. See also *before mass analysis*. From [5,6].

### 12. po hmotnostní analýze (ve spojení s celkovým iontovým proudem)

Pojem je zastaralý.

Používal se pro upřesnění způsobu měření *celkového iontového proudu* jako součtu jednotlivých iontových proudů odpovídajících různým iontům stejného znaménka náboje přispívajících k hmotnostnímu spektru. Viz také *před hmotnostní analýzou*. Citace [5,6].

### 13. a-ion

*Fragment ion* containing the peptide N-terminus formed upon dissociation of a peptide *ion* at the peptide backbone C-C bond. From [28].

### 13. ion typu a

*Fragmentový ion* obsahující N-konec peptidu vzniklý po disociaci  $\text{C}_\alpha\text{-C}$  vazby peptidového řetězce. Citace [28].

### 14. $\alpha$ -cleavage

Homolytic cleavage where the bond fission occurs between the atom adjacent to the atom at the apparent charge site and an atom removed from the apparent charge site by two bonds.

*Note:* In the case of a *distonic ion*, it is important to distinguish between fragmentation adjacent to the charge site and fragmentation adjacent to the radical site. See also *β-cleavage*. From [5,6].

#### 14. α-štěpení

Homolytické štěpení, při kterém dojde k přerušení vazby mezi atomem sousedícím s atomem na místě patrné polohy náboje a atomem odděleným dvěma vazbami od tohoto místa patrné polohy náboje.

*Poznámka:* V případě *distonického iontu* je důležité rozlišovat mezi fragmentací vazby přilehlé k místu polohy náboje a fragmentací vazby u radikálové skupiny. Viz také β-štěpení. Citace [5,6].

#### 15. alkylideneaminylium ion

See *iminylium ion*.

#### 15. alkylidenaminylový ion

Viz *iminylový ion*.

#### 16. alkyl cation

Even-electron positively charged saturated hydrocarbon *ion* containing no aromatic groups, a special case of *carbenium ions*. From [29,30].

#### 16. alkylový kation

Kladně nabitý *ion* nasyceného uhlovodíku se sudým počtem elektronů neobsahující aromatické skupiny, jedná se o zvláštní případ *karbeniových iontů*. Citace [29,30].

#### 17. all-glass heated inlet system (AGHIS)

All-glass inlet system for *ion sources* operating under vacuum that can be heated to about 500 °C and allows low vapor pressure materials to be introduced into the *mass spectrometer* without breaking vacuum. From [31].

#### 17. celoskleněný vyhříváný vstupní systém (AGHIS)

Celoskleněný vstupní systém pro *iontové zdroje* pracující za vakua, který může být vyhříván na teplotu kolem 500 °C a umožňuje zavádět materiály s nízkou tenzí par do hmotnostního spektrometru bez porušení vakua. Citace [31].

#### 18. allyl cation

*Even-electron ion* formulated as  $R^1R^2C=CR^3C^+R^4R^5$  and its resonance forms. From [32,33].

#### 18. allylový kation

Ion se *sudým počtem elektronů* s obecným vzorcem  $R^1R^2C=CR^3C^+R^4R^5$  a jeho rezonanční struktury. Citace [32,33].

#### 19. ambient ionization

Desorption of molecules and formation of *ions* outside the *mass spectrometer* directly from samples in their native environment with no or minimal sample preparation. Examples are *desorption electrospray ionization (DESI)* and *direct analysis in real time (DART)*.

*Note:* "Direct analysis in real time" is a proprietary term indicating the formation

of *ions* from a solid or liquid sample at atmospheric pressure through the interaction of a gas stream containing internally excited atoms or molecules with the surface. The excited-state species are typically formed in a glow discharge in helium or nitrogen. The term should only be used to describe the commercial product.

From [34].

### 19. ambientní ionizace

Tvorba iontů z desorbovaných molekul vně *hmotnostního spektrometru* přímo ze vzorků v jejich přirozeném (ambientním) prostředí bez nutnosti přípravy nebo s minimální přípravou vzorku. Příklady jsou *desorpční ionizace elektrosprejem* (DESI) a *přímá analýza v reálném čase* (DART).

*Poznámka: Přímá analýza v reálném čase* je právně chráněný termín označující vznik iontů z pevného nebo kapalného vzorku za atmosférického tlaku na základě jeho interakce s proudem plynu obsahujícím vnitřně vzbuzené atomy nebo molekuly s povrchem. Částice ve vzbuzeném stavu vznikají obvykle v doutnavém výboji v heliu nebo dusíku. Pojem lze používat pouze k popisu konkrétního komerčního výrobku.

Citace [34].

### 20. ambient mass spectrometry

*Mass spectrometry analysis performed using an ambient ionization technique.*

From [34].

### 20. ambientní hmotnostní spektrometrie

Hmotnostně spektrometrická analýza využívající *ambientní ionizaci*. Citace [34].

### 21. analyte

Component of a sample being analyzed; typically a specific chemical compound. Revised from [5,6] using additional information from [35,36].

### 21. analyt

Složka analyzovaného vzorku, obvykle konkrétní chemická sloučenina. Upraveno podle [5,6] s použitím doplňujících informací z [35,36].

### 22. angle resolved mass spectrometry

Technique used to investigate details of the collisional excitation process by studying trends relating scattering angle of the *precursor ion*, internal energy transferred, and the masses of the ion and its collision partner. From [37].

### 22. úhlově rozlišená hmotnostní spektrometrie

Technika používaná pro zkoumání detailů procesů kolizní excitace na základě studia úhlových závislostí rozptylu prekurzorového iontu, velikosti předané vnitřní energie při známé hmotnosti *prekurzorového iontu* a jeho kolizního partnera. Citace [37].

### 23. anionized molecule

*Ion* formed by the association of an anion with a molecule, M.

*Note 1:* For example,  $[M + Cl]^-$ .

*Note 2:* The terms *quasi-molecular ion* and *pseudo-molecular ion* are

deprecated and should not be used in place of *anionized molecule*. See also *adduct ion*. From [38].

### 23. anionovaná molekula

*Ion* vytvořený asociací záporného iontu s molekulou (M).

*Poznámka 1:* Například  $[M + Cl]^-$ .

*Poznámka 2:* Výrazy *kvazimolekulový ion* a *pseudomolekulový ion* se nedoporučují a neměly by být používány místo pojmu *anionovaná molekula*. Viz také *aduktový ion*. Citace [38].

### 24. appearance energy (AE)

Deprecated: appearance potential.

Minimum energy that must be imparted to an atom or molecule to produce a detectable amount of a specified *ion*. In *electron ionization mass spectrometry*, minimum electron energy necessary for the detection of a given *fragment ion*.

*Note:* This experimental quantity can vary with the detection sensitivity of the instrument used, reflecting different *kinetic shifts*. Revised from [5,6].

### 24. prahová energie vzniku iontu (AE)

Nedoporučuje se: prahový potenciál pro vznik iontu.

Minimální energie, která musí být dodána atomu nebo molekule, aby vznikl daný ion v detekovatelném množství. Při *elektronové ionizaci* (EI) odpovídá minimální energii elektronů potřebné pro detekci daného fragmentového iontu.

*Poznámka:* Tato experimentální veličina se může měnit s citlivostí detekce použitého přístroje, kterou ovlivňují různé kinetické posuvy na různých přístrojích. Upraveno podle [5,6].

### 25. appearance potential

This term is deprecated. See *appearance energy*.

### 25 prahový potenciál vzniku iontu

Tento termín se nedoporučuje. Viz *prahová energie vzniku iontu*.

### 26. array detector

Detector comprising several *ion* collection elements, arranged in a line or grid where each element is an individual detector. From [39,40].

### 26. detektorové pole

Detektor složený z několika prvků pro sběr iontů uspořádaných do řady nebo mřížky, přičemž každý prvek funguje jako samostatný detektor. Citace [39,40].

### 27. association reaction (associative ion/molecule reaction)

Reaction of a (slow-moving) *ion* with a neutral in which the reactants combine to form a single ionized species with no further dissociation. Revised from [5,6] using additional information from [41].

### 27. asociační reakce (asociační iontově-molekulové reakce)

Reakce (pomaleho) iontu s molekulou, při které se reaktanty sloučí do jediného iontového produktu, který dále nedisociuje.

Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [41].

*Pozn. překl.* Reakce probíhá jako tříčásticová v prostředí inertního plynu, anebo

*jako radiační, kdy je energie uvolněná sloučením vyzářena v podobě fotonu.*

### **28. associative ionization**

Ionization process in which two atoms or molecules, one or both of which is in an excited state, react to form a single positive *ion* and an electron. See also *dissociative ionization*, *Penning ionization*. From [5,6].

### **28. asociační ionizace**

Ionizační proces, při kterém se dva neutrální atomy nebo molekuly, z nichž je alespoň jeden vzbuzený, slučují za vzniku jediného kationtu a volného elektronu. Viz také *disociační ionizace* a *Penningova ionizace*. Citace [5,6].

### **29. associative ion/molecule reaction**

See *association reaction*.

### **29. asociační iontově-molekulové reakce**

Viz *asociační reakce*.

### **30. atmospheric pressure ionization (API)**

Ionization process in which *ions* are formed from atoms or molecules at atmospheric pressure.

*Note:* Atmospheric pressure ionization is not a synonym for *atmospheric pressure chemical ionization*. Revised from [6] using additional information from [42,43].

### **30. ionizace za atmosférického tlaku (API)**

Ionizační proces, při kterém ionty vznikají z atomů nebo molekul za atmosférického tlaku.

*Poznámka:* Ionizace za atmosférického tlaku (API) není synonymem pro *chemickou ionizaci za atmosférického tlaku* (APCI). Upraveno podle [6] s pomocí doplňujících informací z [42,43].

### **31. atmospheric pressure chemical ionization (APCI)**

*Chemical ionization* of a sample that is a gas or nebulized liquid, using an atmospheric pressure *corona discharge* or beta emitter such as  $^{63}\text{Ni}$ . From [43].

### **31. chemická ionizace za atmosférického tlaku (APCI)**

*Chemická ionizace* vzorku v podobě plynu nebo aerosolu probíhající za atmosférického tlaku s použitím reakčních iontů vytvořených *koronovým výbojem* nebo beta zářičem jako je  $^{63}\text{Ni}$ . Citace [43].

### **32. atmospheric pressure matrix-assisted laser desorption/ionization (AP MALDI)**

*Matrix-assisted laser desorption/ionization* in which the sample target is at atmospheric pressure. From [44].

### **32. laserová desorpce a ionizace za účasti matrice za atmosférického tlaku (AP MALDI)**

Varianta MALDI, při které je terčik se vzorkem vystaven atmosférickém tlaku. Citace [44].



### 33. atmospheric pressure photoionization (APPI)

Direct ionization of molecules at atmospheric pressure by electron detachment induced by photons forming  $M^{+}$ , or *atmospheric pressure chemical ionization* in which the reactant *ions* are generated by *photoionization* of suitable dopant species and subsequent *ion/molecule reactions* of their *molecular ions*. From [45].

### 33. fotoionizace za atmosférického tlaku (APPI)

Přímá fotoionizace molekul za atmosférického tlaku, kdy fotony uvolňují elektrony za vzniku  $M^{+}$ , nebo *chemická ionizace za atmosférického tlaku*, při které jsou reagující ionty vytvářeny *fotoionizací* vhodných dopantů a následnými *iontově-molekulovými reakcemi* jejich *molekulových iontů*. Citace [45].

### 34. atomic mass unit, amu

See *unified atomic mass unit*. Revised from [6] using additional information from [46].

### 34. atomová hmotnostní jednotka, amu

Viz *unifikovaná atomová hmotnostní jednotka*. Upraveno podle [6] s pomocí doplňujících informací z [46].

### 35. autodetachment

Process whereby a negative *ion* in a discrete state with energy greater than the detachment threshold loses an electron spontaneously without further interaction with an energy source. See also *autoionization*. From [47].

### 35. samovolné uvolnění elektronu

Proces ztráty elektronu ze záporného iontu, který se nachází nad energetickým prahem stability atomu nebo molekuly. Ke ztrátě dojde spontánně bez interakce s vnějším zdrojem energie. Viz také *autoionizace*. Citace [47].

### 36. autoionization

Formation of an *ion* when an atom or molecule in a discrete state with an internal energy greater than the ionization threshold loses an electron spontaneously without further interaction with an energy source. See also *autodetachment*. Revised from [5] using additional information from [48].

### 36. autoionizace

Tvorba iontu z neutrální molekuly nebo atomu v diskrétním energetickém stavu nacházejícím se nad ionizační prahovou energií, ke které dojde spontánně bez interakce s vnějším zdrojem energie. Viz také *samovolné uvolnění elektronu*. Upraveno podle [5] s použitím doplňujících informací z [48].

### 37. auxiliary gas

Gas used in a spray *ion source* in addition to the *nebulizing gas* to aid in solvent removal. From [49,50].

### 37. pomocný plyn

Plyn používaný ve sprejovém *iontovém zdroji* navíc ke *zmlžovacímu plynu*, který napomáhá odstraňovat rozpouštědlo. Citace [49,50].

### 38. average mass

Mass of an *ion* or molecule weighted for its isotopic composition. See also *monoisotopic mass*, *nominal mass*. Revised from [5] using additional information from [51].

### 38. střední (relativní) molekulová hmotnost

Hmotnost iontu nebo molekuly vypočtená jako aritmetický průměr hmotností jednotlivých izotopologů vážený jejich poměrným zastoupením. Viz také *monoizotopová hmotnost*, *nominální hmotnost*. Upraveno podle [5] s použitím doplňujících informací z [51].

### 39. axial ejection

Ejection of an *ion* from an *ion trap* in a direction parallel to the longitudinal axis of the trap. From [52].

### 39. axiální vypuzení

Vypuzení iontu z *iontové pasti* ve směru rovnoběžném s podélnou osou pasti. Citace [52].

### 40. axialization

Technique used in *Fourier-transform ion cyclotron resonance mass spectrometers* to limit the translational motion of the trapped *ions* so that they occupy a small volume near the trap center, thus optimizing performance criteria including *resolving power*. From [53,54].

### 40. axializace

Technika užívaná v *hmotnostních spektrometrech pracujících na principu iontové cyklotronové resonance s Fourierovou transformací* pro omezení translačního pohybu zachycených iontů tak, aby se nacházely v malém objemu v blízkosti středu pasti, čímž dochází ke zlepšení pracovních parametrů včetně rozlišovací schopnosti. Citace [53,54].

### 41. background mass spectrum

*Mass spectrum* observed when no analyte is introduced into the *mass spectrometer*. See also *residual spectrum*. Revised from [5,6] using additional information from [11].

### 41. hmotnostní spektrum pozadí

Hmotnostní spektrum pozorované v nepřítomnosti analytu v hmotnostním spektrometru. Viz také *zbytkové spektrum*. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [11].

### 42. base peak (BP)

Peak in a *mass spectrum* that has the greatest intensity.

*Note:* This term may be applied to the *mass spectra* of pure substances or mixtures. From [5,6].

### 42. základní pík

Pík s největší intenzitou mezi všemi píky v *hmotnostním spektru*.

*Poznámka:* Termín je možné použít při popisu hmotnostního spektra čisté látky i pro spektra směsí. Citace [5,6].

#### 43. base peak chromatogram (BPC)

##### base peak ion chromatogram

Chromatogram obtained by plotting the signal of the *ions* represented by the *base peak* detected in each of a series of *mass spectra* recorded as a function of retention time.

*Note:* This term should be used for samples introduced following a chromatographic separation. From [55].

#### 43. chromatogram základního píku (BPC)

##### iontový chromatogram základního píku

Chromatogram získaný vynesemím iontového signálu představovaného základním píkem detekovaným v každém jednotlivém hmotnostním spektru z řady spekter zaznamenaných jako funkce retenčního času.

*Poznámka:* Tento termín se používá pro vzorky zavedené do hmotnostního spektrometru po chromatografické separaci. Citace [55].

#### 44. base peak ion chromatogram

See *base peak chromatogram (BPC)*.

#### 44. iontový chromatogram základního píku

Viz *chromatogram základního píku (BPC)*.

#### 45. bath gas

See *buffer gas*.

#### 45. plynová lázeň

Viz *tlumivý plyn*.

#### 46. beam mass spectrometer

*Mass spectrometer* in which an *ion beam* accelerated from the *ion source* is transmitted through a *m/z analyzer*, or analyzers, to the detector. From [56].

#### 46. svazkový hmotnostní spektrometr

Hmotnostní spektrometr, ve kterém je iontový svazek urychlený z iontového zdroje přenášen přes hmotnostní analyzátor (nebo několik analyzátorů) na detektor. Citace [56].

#### 47. before mass analysis

This term is obsolete.

*Total ion current* measured as the sum of all the separate *ion currents* for ions of the same sign prior to mass analysis. See also *after mass analysis*. From [5,6].

#### 47. (celkový iontový proud) před hmotnostní analýzou

Pojem je zastaralý.

Používal se pro upřesnění způsobu měření *celkového iontového proudu* jako součtu jednotlivých iontových proudů odpovídajících různým iontům stejného znaménka náboje před hmotnostní analýzou. Viz také *po hmotnostní analýze*. Citace [5,6].

#### 48. benzyl ion

*Even-electron ion*  $C_7H_7^+$  with the same carbon skeleton as toluene that has lost a hydrogen atom from the methyl side-chain that carries the positive charge. See also *tropylium ion*, *tolyl ion*. From [57].

#### **48. benzylový ion**

Ion  $C_7H_7^+$  se *sudým počtem elektronů* a stejným uhlíkovým skeletem jako toluen po ztrátě atomu vodíku z postranního methylového řetězce nesoucího kladný náboj. Viz také *tropyliový ion*, *tolylový ion*. Citace [57].

#### **49. $\beta$ -cleavage**

Homolytic cleavage where the bond fission occurs between an atom removed from the apparent charge site atom by two bonds and an atom adjacent to that atom and removed from the apparent charge site by three bonds. See also  *$\alpha$ -cleavage*. From [5,6].

#### **49. $\beta$ -štěpení**

Homolytické štěpení, při kterém dojde k přerušení vazby mezi dvěma atomy, z nichž ten bližší k místu patrné polohy náboje je od toho místa oddělen dvěma vazbami. Viz také  *$\alpha$ -štěpení*. Citace [5,6].

#### **50. b-ion**

*Fragment ion* containing the peptide N-terminus formed upon dissociation of a peptide *ion* at the peptide backbone C-N bond. From [28].

#### **50. ion typu b**

Fragmentový ion obsahující N-konec peptidu vzniklý disociací peptidové vazby (C-N) peptidového řetězce. Citace [28].

#### **51. blackbody infrared radiative dissociation (BIRD)**

Special case of *infrared multiphoton dissociation* wherein excitation of the reactant *ion* is caused by absorption of infrared photons radiating from heated blackbody surroundings, which are usually the walls of a vacuum chamber. See also *infrared multiphoton dissociation (IRMPD)*. From [58].

#### **51. infračervená fotodisociace zářením černého tělesa (BIRD)**

Varianta *infračervené multifotonové fotodisociace*, při které je iont excitován absorpcí fotonů vyzařovaných vyhřívaným okolím černého tělesa, např. stěnami vakuové komory. Viz také *infračervená multifotonová fotodisociace (IRMPD)*. Citace [58].

#### **52. bottom-up proteomics**

Method of protein identification that uses proteolytic digestion before analysis by liquid chromatography and *mass spectrometry*. Proteins can be isolated by gel electrophoresis prior to digestion or, in *shotgun proteomics*, the protein mixture is digested and the resulting peptides are separated by liquid chromatography. See also *top-down proteomics*. From [59,60].

#### **52. proteomika zdola**

Způsob identifikace proteinu, který používá proteolytického štěpení před analýzou pomocí kapalinové chromatografie a hmotnostní spektrometrie. Proteiny mohou být před štěpením izolovány gelovou elektroforézou, anebo

v takzvané *necílené proteomice* se provádí štěpení směsi mnoha proteinů a výsledné peptidy se separují kapalinovou chromatografií. Viz také *proteomika shora*. Citace [59,60].

### 53. Brubaker lens (Brubaker pre-filter)

Additional set of four short, cylindrical electrodes, mounted co-linearly with a *transmission quadrupole mass spectrometer* that is excited with some fraction of the AC potential but not the DC potential applied to the main quadrupole. The Brubaker lens thus acts as a high-pass filter for *ion m/z*, but the resulting delay in application of the DC potential component also results in a reduction in defocusing by *fringe fields* and thus significantly improves overall ion *transmission efficiency at a given mass resolution*. From [61].

### 53. Brubakerova čočka (Brubakerův předfiltr)

Přídavná sada čtyř krátkých válcových elektrod, připojených kolineárně k transmisnímu kvadrupólovému hmotnostnímu spektrometru buzená pouze určitým zlomkem střídavého napětí hlavního kvadrupólu bez vložení stejnosměrného napětí. Brubakerova čočka pracuje nejen jako horní propust pro *m/z*, ale jí způsobené zpoždění zavedení stejnosměrné složky napětí má také za následek snížení rozostření svazku v okrajových oblastech pole, a tím významně zlepšuje celkovou účinnost transmise iontů při daném rozlišení. Citace [61].

### 54. Brubaker pre-filter

See *Brubaker lens*.

### 54. Brubakerův předfiltr

Viz *Brubakerova čočka*.

### 55. buffer gas (bath gas)

Inert gas used for collisional reduction of the internal or translational energy of *ions*, such as in *ion traps*. See also *collision gas*. From [62].

### 55. tlumivý plyn (plynová lázeň)

Inertní plyn použitý pro kolizní deaktivaci vnitřně nebo translačně vzbuzených iontů například v *iontové pasti* nebo v *driftové trubici*. Viz také *kolizní plyn*. Citace [62].

### 56. capillary exit fragmentation

This term is deprecated. See *in-source collision-induced dissociation*.

### 56. fragmentace na výstupu z kapiláry

Tento termín se nedoporučuje. Viz *kolizně indukovaná disociace ve zdroji*.

### 57. carbanion

Even-electron anion with a significant portion of the excess negative charge located on a carbon atom that usually has three substituent groups and an unshared pair of electrons for a total of eight valence electrons, with general formula  $R^1R^2R^3C^-$  where the R groups are any organic structure. From [6].

### 57. karboanion

### karbanion

Záporný ion se sudým počtem elektronů s obecným vzorcem  $R^1R^2R^3C^-$ , kde R představuje libovolné organické struktury. Významná část záporného náboje je lokalizována na atomu uhlíku vázajícího obvykle tři substituenty a který formálně nese nevazebný elektronový pár (má tedy osm valenčních elektronů). Citace [6].

### 58. carbenium ion

*Carbocation* that has at least one important contributing structure containing a trivalent carbon atom with a vacant p-orbital. Common examples are even-electron hypovalent ions with the charge formally localized on a carbon atom, with general formula  $R^1R^2R^3C^+$  where the R groups are any monovalent organic structure.

*Note:* In earlier literature, such *ions* were referred to as *carbonium ions*. Both types are collectively referred to as *carbocations*. Revised from [6].

### 58. karbeniový ion

*Karbokation*, který má alespoň jednu důležitou přispívající strukturu obsahující třívalenční atom uhlíku s neobsazeným p-orbitalem. Běžnými příklady jsou hypovalentní ionty se sudým počtem elektronů s nábojem formálně umístěným na atomu uhlíku a s obecným vzorcem  $R^1R^2R^3C^+$ , kde R jsou libovolné monovalentní organické substituenty.

*Poznámka:* V dřívější literatuře se takové ionty označovaly jako *karboniové ionty*. Oba typy jsou společně nazývány *karbokationty*. Upraveno podle [6].

### 59. carbocation

Cation containing an even number of electrons with the excess positive charge formally located on a carbon atom. This is a general term embracing *carbenium ions*, *carbonium ions*, and cations derived from corresponding carbon-centred free radicals by removal of the unpaired electron.

*Note:* Such carbocations may be named by adding the word “cation” to the name of the corresponding radical, but such names do not imply structure (e.g., whether three- or five-coordinated carbon atoms are present).

From [5,6].

### 59. karbokation

Kation se sudým počtem elektronů s přebytkem kladného náboje formálně umístěným na atomu uhlíku. Jedná se o obecný pojem zahrnující karbeniové ionty, karboniové ionty a kladné ionty odvozené z odpovídajících uhlíkatých volných radikálů odstraněním nepárového elektronu.

*Poznámka:* Názvy karbokationtů mohou být odvozeny přidáním slova *kation* za název odpovídajícího radikálu, ale tyto názvy nemusí popisovat strukturu (např. koordinační číslo atomů uhlíku).

Citace [5,6].

### 60. carbonium ion

Even-electron hypervalent *carbocation* in which the charge is located on a carbon atom that carries a fifth covalent bond (e.g.,  $H_5C^+$ ), the most abundant *reagent ion* formed in *chemical ionization* using methane as *reagent gas*.

*Note:* This term was formerly used to describe *ions* of the type now referred to as *carbenium ions*. From [6].

### 60. karboniový ion

Hypervalentní *karbokation* se sudým počtem elektronů, ve kterém se nachází náboj na atomu uhlíku, který se účastní tvorby páté kovalentní vazby (např.  $\text{H}_5\text{C}^+$ , nejhojnější reakční ion vytvářený při chemické ionizaci za použití metanu jako *reakčního plynu*).

*Poznámka:* Tento pojem byl dříve používán pro ionty nyní označované jako *karbeniové ionty*. Citace [6].

### 61. cationized molecule

*Ion* formed by the association of a cation with a molecule M.

*Note 1:* For example,  $[\text{M} + \text{Na}]^+$ ,  $[\text{M} + \text{K}]^+$ , and  $[\text{M} + \text{NH}_4]^+$ .

*Note 2:* The terms *quasi-molecular ion* and *pseudo-molecular ion* are deprecated and should not be used in place of cationized molecule. See also *adduct ion*. From [62].

### 61. kationovaná molekula

Ion vytvořený asociací molekuly M s kationem

*Poznámka 1:* Např.  $[\text{M} + \text{Na}]^+$  (sodný adukt),  $[\text{M} + \text{K}]^+$  (draselný adukt) a  $[\text{M} + \text{NH}_4]^+$  (amonný adukt).

*Poznámka 2:* Pojmy *kvazimolekulový ion* a *pseudomolekulový ion* se nedoporučují a nemají být používány místo pojmu *kationovaná molekula*. Viz také *aduktový ion*. Citace [62].

### 62. centroid acquisition

Procedure of recording *mass spectra* in which an automated computer-based system detects peaks, calculates the centroid based on the average *m/z* value weighted by the intensity, and assigns *m/z* values based on a calibration file. Only the centroid *m/z* value and the peak magnitude are stored. See also *profile mode*. From [63].

### 62. záznam centroidů

Procedura záznamu hmotnostních spekter, kdy automatizovaný počítačový systém detekuje píky, vypočítá centroidy na základě průměrné hodnoty *m/z* vážené podle intenzity, a přiřadí hodnoty *m/z* na základě kalibračního souboru. Pouze centroidy jako hodnoty *m/z* jsou spolu s odpovídající intenzitou píku zaznamenány. Viz také *profilový režim*. Citace [63].

### 63. channel electron multiplier (CEM)

See *continuous dynode particle multiplier*.

### 63. kanálkový násobič elektronů (CEM)

Viz *násobič částic s kontinuální dynodou*.

### 64. channel electron multiplier array (CEMA)

See *microchannel plate*.

### 64. pole kanálkových násobičů elektronů (CEMA)

Viz *mikrokanálková destička*.

### 65. charged residue model

Theoretical model for production of highly charged macromolecules by *electrospray ionization* in which the excess charges on electrosprayed droplets are transferred to and remain on molecules enclosed within the droplets after solvent evaporation. See also *ion evaporation model*. From [64].

### 65. model zbytkového náboje

Teoretický model vzniku vícenásobně nabitých makromolekul při ionizaci elektrosprem. Přebytek náboje v kapkách je přenesen na molekuly analytu, na kterých zůstává i po odpaření rozpouštědla. Viz také *model odpařování iontů*. Citace [64].

### 66. charge exchange ionization (CEI)

Interaction of an *ion* with an atom or molecule in which the charge on the ion is transferred to the neutral species without the dissociation of either species. From [5,6].

### 66. ionizace výměnou náboje (CEI)

Interakce reakčního iontu s atomem nebo molekulou, při které dochází k přenosu náboje na neutrální atom či molekulu, aniž by docházelo k disociaci. Citace [5,6].

### 67. charge exchange reaction

See *charge-transfer reaction (in mass spectrometry)*.

### 67. reakce výměny náboje

Viz *reakce s přenosem náboje (v hmotnostní spektrometrii)*.

### 68. charge inversion mass spectrum

Plot of the relative abundances of *ions* that result from a *charge inversion reaction* as a function of  $m/z$ . From [5,6].

### 68. hmotnostní spektrum s inverzí náboje

Graf závislosti relativního zastoupení iontů pocházejících z reakce s inverzí náboje jako funkce  $m/z$ . Citace [5,6].

### 69. charge inversion reaction

Reaction of an *ion* with a neutral, surface, or ion of opposite polarity, in which the charge on the *product ion* is reversed in sign with respect to the reactant ion. See also *charge inversion mass spectrum*. Revised from [5] using additional information from [65].

### 69. reakce s inverzí náboje

Reakce iontu s neutrální částicí, povrchem nebo iontem opačné polarity, při které má náboj produktového iontu opačné znaménko vzhledem k reagujícímu, výchozímu iontu. Viz také *hmotnostní spektrum s inverzí náboje*. Upraveno podle [5] s použitím doplňujících informací z [65].

### 70. charge-mediated fragmentation (heterolytic fragmentation; inductive cleavage)



Fragmentation of an *ion* in which the cleavage of one of its bonds is induced by the charge site. The cleaved bond is adjacent to the apparent charge site, and its cleavage involves movement of the electron pair forming that bond to the original charge site and thus migration of the charge to the released fragment. See also *charge remote fragmentation (CRF)*. From [66].

#### **70. fragmentace zprostředkovaná nábojem (heterolytická fragmentace, induktivní štěpení)**

Fragmentace iontu, při které je štěpení vazby vyvoláno polohou náboje. Štěpená vazba sousedí s místem patrné polohy náboje a její štěpení zahrnuje posun elektronového páru tvořícího tuto vazbu na toto místo. Dochází k migraci náboje na odštěpující se fragment. Viz také *fragmentace s odlehlým nábojem (CRF)*. Citace [66].

#### **71. charge number, z**

Absolute value of charge of an *ion* divided by the value of the elementary charge (*e*) rounded to the nearest integer. See also *m/z*. Revised from [5,6].

#### **71. nábojové číslo, z**

Absolutní hodnota celkového náboje iontu vydělená velikostí elementárního náboje (*e*) zaokrouhlená na nejbližší celé číslo. Viz také *m/z*. Citace [5,6].

#### **72. charge permutation reaction**

Reaction of an *ion* with a neutral with a resulting change in the magnitude or sign of the charge on the reactant ion. See also *charge stripping reaction*. From [5,6].

#### **72. reakce s obměnou náboje**

Reakce iontu s neutrální částicí vedoucí ke změně velikosti nebo znaménka náboje na reagujícím iontu. Viz také *reakce s odnětím náboje*. Citace [5,6].

#### **73. charge remote fragmentation (CRF)**

Fragmentation of an *ion* in which the cleaved bond is isolated from the apparent charge site by a distance of several bond lengths. See also *charge-mediated fragmentation*. From [67,68].

#### **73. fragmentace s odlehlým nábojem**

Fragmentace iontu, při které je štěpená vazba vzdálená od patrné polohy náboje na vzdálenost několika vazeb. Viz také *fragmentace zprostředkovaná nábojem*. Citace [67, 68].

#### **74. charge site derivatization**

Chemical derivatization of molecules to introduce a fixed charge site, thus improving *ionization efficiency* by *electrospray ionization* or *matrix-assisted laser desorption/ionization* and directing subsequent *ion* fragmentation in a manner that facilitates structure identification.

*Note:* Examples are quaternary ammonium or phosphonium derivatization. From [69].

#### **74. derivatizace zavádějící stálý náboj**

Chemická derivatizace molekuly se zavedením náboje na určité místo, čímž se

zlepší účinnost *ionizace elektrosprejem* nebo *MALDI* a může tak usměrnit následující fragmentaci iontu způsobem usnadňujícím identifikaci struktury.

*Poznámka:* Příklady jsou kvarterní amoniové nebo fosfoniové derivatizace. Citace [69]. –

### 75. charge stripping reaction (CSR)

Reaction of an *ion* with a neutral or collision partner ion in which a free electron is stripped from the ion, resulting in the charge on the product ion being more positive than that of the reactant ion.

*Note:* A particular example of an *ionizing collision*. See also *charge permutation reaction*, *ionizing collision*. Revised from [5,6] using additional information from [70].

#### 75. reakce s odnětím náboje

Reakce iontu s neutrální částicí nebo kolizním iontem, při které je iontu odňat volný elektron a výsledkem je, že náboj produktového iontu je kladnější, než byl náboj reagujícího iontu.

*Poznámka:* Konkrétním příkladem je *ionizující kolize*. Viz také *reakce s obměnou náboje*, *ionizační kolize*. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [70].

### 76. charge-transfer reaction (in mass spectrometry) charge exchange reaction

Reaction of an *ion* with a neutral or collision partner ion in which some or all of the charge on the reactant ion is transferred to the neutral or collision partner ion. Revised from [5,6] using additional information from [71].

#### 76. reakce s přenosem náboje

Reakce iontu s neutrální částicí nebo kolizním iontem, při které je náboj reagujícího iontu zcela nebo částečně přenesen na neutrální částici nebo kolizní ion. Upraveno podle [5,6] s použitím doplňujících informací z [71].

### 77. chemical ionization (CI)

Formation of a new *ion* in the gas phase by the reaction of a neutral with an ion. The process may involve transfer of an electron, a proton, or other charged species between the reactants.

*Note 1:* When a positive ion results from *chemical ionization*, the term may be used without qualification. When a negative ion results, the term *negative ion chemical ionization* should be used.

*Note 2:* This term is not synonymous with *chemi-ionization*. See also *atmospheric pressure chemical ionization*. From [5,6].

#### 77 chemická ionizace (CI)

Tvorba nového iontu v plynné fázi reakcí neutrální částice s iontem. Proces může zahrnovat přenos elektronu, protonu nebo iontu mezi reaktanty.

*Poznámka 1:* Když chemickou ionizací vznikne kladný ion, termín může být použit bez dalších přívlasků. Když vznikne záporný ion, správný termín je *negativní chemická ionizace*.

*Poznámka 2:* Tento termín není synonymní pojmu *chemiionizace*. Viz také

*chemická ionizace za atmosférického tlaku*. Citace [5,6].

### 78. chemi-ionization

Ionization of an atom or molecule by interaction with another internally excited atom or molecule.

*Note 1:* This term is not synonymous with *chemical ionization*.

*Note 2:* *Chemi-ionization* differs from *Penning ionization* in that chemical change is not excluded. Revised from [5,6] using additional information from [72].

### 78. chemiionizace

Ionizace atomu či molekuly reakcí s jiným vnitřně vzbuzeným atomem či jinou vnitřně vzbuzenou molekulou.

*Poznámka 1:* tento termín není synonymem *chemické ionizace*.

*Poznámka 2:* od *Penningovy ionizace* se chemiionizace liší tím, že může dojít k chemické změně. Upraveno podle [5,6] s použitím doplňujících informací z [72].

### 79. c-ion

*Fragment ion* containing the peptide N-terminus formed upon dissociation of a peptide *ion* at the peptide backbone N-C bond. From [28].

### 79 ion typu c

Fragmentový ion obsahující N-konec peptidu vzniklý disociací N-C<sub>α</sub> vazby peptidového řetězce. Citace [28].

### 80. cluster ion

*Ion* formed by the combination via noncovalent forces of two or more atoms or molecules of one or more chemical species with an ion.

*Note:* For example, [(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>H]<sup>+</sup>, [(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH<sub>3</sub>OH)<sub>m</sub>H]<sup>+</sup>, [(NaCl)<sub>n</sub>Na]<sup>+</sup>, Au<sub>10</sub><sup>-</sup>, or [M + Na + CH<sub>3</sub>OH]<sup>+</sup> where M represents a molecule.

Revised from [5,6].

### 80. klastrový ion

Ion tvořený nekovalentní vazbou iontu s alespoň dvěma atomy či molekulami stejného či různého chemického složení.

*Poznámka:* Například [(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>H]<sup>+</sup>, [(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>(CH<sub>3</sub>OH)<sub>m</sub>H]<sup>+</sup>, [(NaCl)<sub>n</sub>Na]<sup>+</sup>, Au<sub>10</sub><sup>-</sup> nebo [M + Na + CH<sub>3</sub>OH]<sup>+</sup>, kde M představuje molekulu.

Upraveno podle [5,6].

### 81. coaxial reflectron

*Reflectron* that is arranged such that its main axis is coaxial with the *ion source* and first stage of the *time-of-flight analyzer*. From [73].

### 81. koaxiální reflektron

#### koaxiální iontové zrcadlo

Reflektron, který je uspořádán tak, že jeho hlavní osa je koaxiální s iontovým zdrojem a prvním stupněm analyzátoru doby letu. Citace [73].

### 82. collector slit

Slit installed in a *magnetic sector mass spectrometer* to allow only those *m/z*

separated *ions* with a specific  $m/z$  into the detector system. From [74,75].

### **82. kolektorová štěrbina**

Štěrbina instalovaná v magnetickém sektoru hmotnostního spektrometru propouštějící do detekčního systému pouze ionty s určitým  $m/z$ . Citace [74,75].

### **83. collisional activation (CA)**

See *collisional excitation*.

### **83. kolizní aktivace**

Viz *kolizní excitace*.

### **84. collisional excitation (collisional activation)**

Interaction of an *ion* with another gas-phase species in which part of the relative translational energy of the collision partners is converted into internal energy. From [5,6].

### **84. kolizní excitace (kolizní aktivace)**

Interakce iontu s jinou částicí v plynné fázi, ve které je část relativní translační energie kolizních partnerů přeměněna na jejich vnitřní energii. Citace [5,6].

### **85. collisional focusing**

Effect where collisions with a *buffer gas* in a radio-frequency *ion trap* or *transmission quadrupole* causes *ions* to lose translational energy and concentrate at the center of the trap or axis of the linear quadrupole. The effect increases with gas pressure up to a point where ion scattering becomes the dominant process. From [76].

### **85. kolizní fokusace**

Jev, při kterém srážky iontů s *tlumivým plynem* ve vysokofrekvenční iontové pasti nebo transmisním kvadrupólu vedou ke ztrátě jejich translační energie, a ionty se tak koncentrují ve středu pasti nebo v ose lineárního kvadrupólu. Efekt se zvyšuje s tlakem plynu až do bodu, kdy začne převažovat rozptyl iontů. Citace [76].

### **86. collisionally activated dissociation (CAD)**

See *collision-induced dissociation (CID)*.

### **86. kolizně aktivovaná disociace (CAD)**

Viz *kolizně indukovaná disociace (CID)*.

### **87. collision cell**

Chamber in the *ion* path between  $m/z$  separation elements, or between *ion source* acceleration region and the first analyzer, in *tandem mass spectrometry in space* configurations. See also *collision reaction cell*. From [77].

### **87. kolizní cela**

Komora na dráze iontů mezi analyzátory  $m/z$  nebo mezi urychlovací zónou iontového zdroje a prvním analyzátorem (v tandemové hmotnostní spektrometrii v prostoru). Viz také *kolizní reakční cela*. Citace [77].

### **88. collision gas**

Deprecated: target gas.

Inert gas used for *collisional excitation* or a reactive gas used for *ion/molecule reactions*. See also *buffer gas*. From [78].

### **88. kolizní plyn**

Nedoporučuje se: terčový plyn.

Inertní plyn použitý pro kolizní excitaci nebo reakční plyn pro *iontově-molekulové reakce*. Viz také *tlumící plyn*. Citace [78].

### **89. collision-induced dissociation (CID)**

Dissociation of an *ion* after *collisional excitation*.

*Note*: The terms *collision-induced dissociation (CID)* and *collisionally activated dissociation (CAD)* can be used interchangeably. From [5,6].

### **89. kolizně indukovaná disociace (CID)**

Disociace iontu následkem *kolizní excitace*.

*Poznámka*: Termíny *kolizně indukovaná disociace (CID)* a *kolizně aktivovaná disociace (CAD)* jsou vzájemně zaměnitelné. Citace [5,6].

### **90. collision quadrupole**

*Transmission quadrupole* to which an oscillating radio frequency potential is applied so as to focus a beam of *ions* through a *collision gas* or *buffer gas* with no *m/z* separation other than low *m/z* cut-off.

*Note*: Higher-order multipoles can also be used in this manner. See also *RF-only quadrupole*. From [79,80].

### **90. kolizní kvadrupól**

*Transmisní kvadrupól*, na který je vloženo oscilující radiofrekvenční napětí tak, aby docházelo k fokusaci svazku iontů procházejících *kolizním* nebo *tlumícím plynem*. Nechozí k žádné separaci iontů podle *m/z* mimo těch pod nízkým limitem hodnot *m/z*.

*Poznámka*: Multipóly vyšších řádů se dají používat tímto způsobem. Viz také *kvadrupól pouze s radiofrekvenčním potenciálem*. Citace [79,80].

### **91. collision reaction cell (CRC)**

*Collision cell* for removal of interfering *ions* by *ion/neutral reactions* in *inductively coupled plasma-mass spectrometry*. From [81].

### **91 kolizní reakční cela**

*Kolizní cela* sloužící k odstranění interferujících iontů pomocí *iontově-neutrálových reakcí* v *hmotnostní spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem*. Citace [81].

### **92. concentric nebulizer**

Pneumatic nebulizer in which the liquid flows through a central capillary and dispersion gas flows through a surrounding outer tube. From [82].

### **92. koncentrický zmlžovač**

Pneumatický zmlžovač, ve kterém kapalina proudí středovou kapilárou a dispersní plyn proudí vnější trubicí obklopující kapiláru. Citace [82].

### 93. cone voltage dissociation

This term is deprecated.

See *in-source collision-induced dissociation*.

### 93. disociace napětím na kuželu

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *kolizně indukovaná disociace ve zdroji*.

### 94. consecutive reaction monitoring (CRM)

Multiple-stage mass spectrometry experiment with three or more stages of  $m/z$  separation in which products of sequential fragmentation or bimolecular reactions are selected for detection.

See also *multiple reaction monitoring*.

From [83].

### 94. monitorování následných reakcí

Vícestupňový hmotnostně spektrometrický experiment, který zahrnuje tři nebo více separací podle  $m/z$ , při nichž jsou zvoleny pro detekci produkty fragmentace nebo bimolekulové reakce.

Viz také *monitorování více reakcí*.

Citace [83].

### 95. constant neutral mass gain spectrum

fixed neutral gain spectrum

fixed neutral mass gain spectrum

Spectrum formed of all precursor ions that have undergone a selected  $m/z$  increase corresponding to the mass of a particular neutral species divided by the charge number of the precursor. The ions detected are the product ions produced by gain of a preselected neutral species mass following ion/molecule reactions of the precursor ions with a reactant gas in a collision cell.

See also *constant neutral mass loss spectrum*.

From [5,6].

### 95. spektrum konstantních neutrálních hmotnostních přírůstků

Spektrum zahrnující všechny prekurzorové ionty, které mají stejné navýšení hodnoty  $m/z$  odpovídající hmotnosti určité neutrální částice dělené nábojovým číslem prekurzoru. Detekované ionty jsou produktové ionty (se získáním hmotnosti předem zvolené neutrální částice) vzniklé následkem iontově-molekulových reakcí reakčního plynu v kolizní cele.

Viz *spektrum konstantních neutrálních hmotnostních ztrát*.

Citace [5,6]

### 96. constant neutral mass loss spectrum

fixed neutral loss spectrum

fixed neutral mass loss spectrum

Spectrum of all precursor ions that have undergone a selected  $m/z$  decrement corresponding to the mass of a particular neutral divided by the charge number of the precursor. The ions detected are the product ions produced by loss of a

preselected neutral mass following collision-induced dissociation of the precursor ions in a collision cell.

See also *constant neutral mass gain spectrum*.

From [5,6].

#### **96. spektrum konstantních neutrálních hmotnostních ztrát**

Spektrum zahrnující všechny prekurzorové ionty, které vykazují stejné snížení hodnoty  $m/z$  odpovídající hmotnosti neutrální částice dělené nábojovým číslem prekurzoru. Detekované ionty jsou produktové ionty vzniklé ztrátou neutrální částice o předem dané hmotnosti v důsledku kolizně indukované disociace prekurzorových iontů v kolizní cele.

Viz *spektrum konstantních neutrálních hmotnostních přírůstků*.

Citace [5,6].

#### **97. continuous dynode particle multiplier channel electron multiplier**

Ion-to-electron detector in which the ion strikes the inner surface of a continuous tube device and induces the production of secondary electrons that, in turn, impinge on the inner surfaces of the device to produce more secondary electrons. This avalanche effect produces an increase in the final measured current pulse.

See also *discrete dynode particle multiplier*.

From [84].

#### **97. násobič částic s kontinuální dynodou kanálový elektronový násobič**

Detektor na principu přeměny iontů na elektrony, ve kterém ion dopadne na vnitřní povrch zařízení a tím způsobí produkci sekundárních elektronů, které následně také dopadnou na povrch detektoru a produkují tak další sekundární elektrony. Tento lavinový efekt vede k zesílení měřeného signálu výsledného proudového pulzu.

Viz *násobič částic s diskrétním dynodovým polem*.

Citace [84].

#### **98. continuous-flow fast atom bombardment (CF-FAB)**

Variant of fast atom bombardment in which the mixture of analyte and liquid matrix is continuously supplied to the sample probe tip. From [85,86].

#### **98 ostřelování rychlými atomy s kontinuálním tokem vzorku (CF-FAB)**

Způsob provedení ostřelování rychlými atomy, při kterém je směs analytu a kapalná matrice kontinuálně dávkována na sondu. Citace [85,86].

#### **99. continuous-flow matrix-assisted laser desorption/ionization (CF-MALDI)**

Variant of matrix-assisted laser desorption/ionization in which the analyte is dissolved in a liquid matrix that is continuously supplied to the sample probe tip.

From [87].

#### **99. laserová desorpce a ionizace za účasti matrice s kontinuálním tokem vzorku (CF-MALDI)**

Způsob provedení MALDI, při kterém je analyt rozpuštěn v kapalné matrici a kontinuálně dávkován na sondu. Citace [87].

### 100. conversion dynode

Surface that is held at high potential so that ions striking the surface produce secondary charged particles that are subsequently detected.

*Note:* For positive ions, the potential is negative and the secondary particles are electrons and negative ions. For negative ions, the potential is positive and the secondary particles are positive ions. From [88,90].

### 100. konverzní dynoda

Povrch, který je na vysokém potenciálu, takže ionty na něj dopadající produkují sekundární nabitě částice, jež jsou následně detekovány.

*Poznámka:* Pro kladné ionty je potenciál záporný a sekundární částice jsou elektrony a záporně nabitě ionty. Pro záporně nabitě ionty je potenciál kladný a sekundární částice jsou kladně nabitě ionty. Citace [88,90].

### 101. corona discharge

Electric discharge generated in a gas, usually at atmospheric pressure, surrounding a conductor carrying a sufficiently high potential that the electric field around it ionizes the gas so as to form a plasma in the immediate vicinity of the conductor without causing complete electric breakdown or arcing.

*Note:* A corona discharge can also be sustained in a liquid.

See also *glow discharge ionization*.

From [91].

### 101. koronový výboj

Elektrický výboj vzniklý v plynu, obvykle při atmosférickém tlaku, v okolí vodiče o potenciálu dostatečně vysokém, aby elektrické pole v jeho okolí bylo schopno ionizovat plyn a vytvořit plasma v bezprostřední blízkosti vodiče, aniž by došlo k úplnému elektrickému průrazu nebo oblouku.

*Poznámka:* Koronový výboj může být udržován i v kapalině.

Viz také *ionizace doutnavým výbojem*.

Citace [91].

### 102. corona discharge ionization

Formation of ions in a corona discharge.

From [92].

### 102. ionizace koronovým výbojem

Vytváření iontů v koronovém výboji.

Citace [92].

### 103. counter-current gas

Stream of inert gas, often heated, that is used in an electrospray or other spray ionization source to aid in the evaporation of solvent from the sprayed particles. The flow of the gas is in the direction opposite to that of the spray.

*Note:* *Curtain gas* is a proprietary term used to indicate a flow of counter-current gas emanating from between two closely spaced plates each with a central



orifice along the axis of a spray ionization source. The term should only be used to describe the commercial device.

See also *drying gas*.

From [82,93,94]

### **103. protiproudý plyn**

Proud inertního plynu, často vyhřívaného, používaného v elektrospreji nebo v jiných sprejových zdrojích ke zlepšení vypařování rozpouštědla ze sprejovaných částic. Směr proudu plynu je opačný vůči směru spreje.

*Poznámka:* Anglický termín *curtain gas* je právně chráněný termín, označující tok protiproudého plynu zprostředkovanou dvěma navzájem velmi blízce umístěnými deskami, každá se středovým otvorem v ose se sprejovým ionizačním zdrojem. Termín by měl být používán pouze pro popis příslušného komerčního řešení.

Viz také *sušící plyn*.

Citace [82, 93, 94].

### **104. counter electrode**

Counter electrode in an electrospray ionization ion source is one of two electrodes between which the high electric potential is applied, the other electrode being the electrospray needle. From [95].

### **104. protielektroda**

Protielektroda v elektrosprejovém iontovém zdroji je jedna ze dvou elektrod, mezi které je vloženo vysoké elektrické napětí. Druhou elektrodou je elektrosprejová jehla. Citace [95].

### **105. crossed electric and magnetic fields**

Electric and magnetic fields with the electric field direction at right angles to the magnetic field direction.

See also *Wien filter*.

From [5,6].

### **105. zkřížené elektrické a magnetické pole**

Elektrické a magnetické pole se směrem elektrického pole kolmým na směr magnetického pole.

Viz také *Wienův filtr*.

Citace [5,6].

### **106. cross-flow nebulizer**

Pneumatic nebulizer in which the dispersion gas flows at an angle, usually 90°, with respect to the column of liquid emerging from a capillary. From [95,96].

### **106. zmlžovač se zkříženým proudem**

Pneumatický zmlžovač, ve kterém disperzní plyn proudí pod úhlem vzhledem ke sloupci kapaliny vytékající z kapiláry (obvykle 90°). Citace [95,96].

### **107. curved field reflectron**

Reflectron designed to provide a decelerating field strength that varies with depth of ion penetration and thus with ion translational energy, permitting energy

focusing of ions with a range of translational energies such as those formed as product ions from post-source decay of metastable ions. From [97].

### **107. reflektron se zakřiveným polem**

#### **iontové zrcadlo se zakřiveným polem**

Reflektron navržený tak, aby poskytoval zpomalovací pole, jehož intenzita se mění s hloubkou, do které ion prostupuje, a tedy s jeho translační energií, což umožňuje zaostřování iontů s různou počáteční translační energií, například produktů rozkladu metastabilních iontů. Citace [97].

### **108. cycloidal mass spectrometer**

This term is deprecated.

See *prolate trochoidal mass spectrometer*.

### **108. cykloidní hmotnostní spektrometr**

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *prodloužený cykloidní hmotnostní spektrometr*.

### **109. cyclotron motion**

Circular motion of a charged particle moving perpendicularly to the direction of a magnetic field that results from the Lorentz force. From [15].

### **109. cyklotronový pohyb**

Kruhový pohyb nabité částice pohybující se kolmo na směr magnetického pole, který je výsledkem působení Lorentzovy síly. Citace [15].

### **110. dalton, Da**

See *unified atomic mass unit*.

### **110 dalton, Da**

Viz *unifikovaná atomová hmotnostní jednotka*.

### **111. Daly detector**

Detector consisting of an off-axis conversion dynode, scintillator, and photomultiplier. The dynode at high potential emits secondary electrons when ions impinge on the surface. The secondary electrons are accelerated onto the scintillator that produces light that is then detected by the photomultiplier detector, which can be outside the vacuum system.

See also *ion-to-photon detector*.

From [98].

### **111. Dalyho detektor**

Detektor skládající se z konverzní dynody uložené mimo osu, scintilátoru a fotonásobiče. Dynoda s vysokým vloženým napětím emituje sekundární elektrony v důsledku dopadu iontů na její povrch. Sekundární elektrony jsou urychleny na scintilátor, který produkuje světlo následně detekované fotonásobičem, jenž může být umístěn mimo vakuový systém.

Viz též *iontově-fotonový detektor*.

Citace [98].

### **112. data-dependent acquisition**

Mode of data collection in tandem mass spectrometry in which a fixed number of precursor ions whose  $m/z$  values were recorded in a survey scan are selected using predetermined rules and are subjected to a second stage of mass selection in an MS/MS analysis. From [99].

### **112. datově závislé měření**

Mód sběru dat v tandemové hmotnostní spektrometrii, ve kterém je pevně daný počet prekurzorových iontů, jejichž hodnoty  $m/z$  byly zaznamenány v předskenu, vybrán podle předem stanovených pravidel pro MS/MS analýzu. Citace [99].

### **113. daughter ion**

This term is deprecated.

See *product ion*.

### **113. dceřiný ion**

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *produktový ion*.

### **114. daughter ion analysis**

This term is deprecated.

See *product ion analysis*.

### **114. analýza dceřiných iontů**

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *analýza produktových iontů*.

### **115. deconvoluted mass spectrum**

Mass spectrum processed with an algorithm designed to extract a desired signal or signals from raw experimental data in which the desired signals have been complicated (convolved) by some interferences or in some other way.

*Note:* Examples of deconvoluted mass spectra include mass spectra corrected for instrumental mass bias, or extraction of spectra for pure components from the spectrum of a mixture, or a mass (not  $m/z$ ) spectrum of a biopolymer from an electrospray ionization spectrum containing peaks corresponding to several charge states. From [100,101].

### **115. dekonvoluované hmotnostní spektrum**

Hmotnostní spektrum zpracované algoritmem na extrakci požadovaného signálu nebo signálů ze surových experimentálních dat, ve kterých byly původní signály skryty interferencí nebo jiným způsobem.

*Poznámka:* Příklady dekonvoluovaných spekter zahrnují spektra korigovaná o přístrojový hmotnostní posun nebo extrakci spektra čisté komponenty ze spektra směsi nebo hmotnost (nikoliv  $m/z$ ) biopolymeru z elektrosprejového spektra, které obsahuje píky odpovídající několika nábojovým stavům. Citace [100,101].

### **116. delayed extraction (DE)**

Application of the accelerating voltage pulse after a time delay in desorption ionization from a surface.

*Note:* The extraction delay can produce energy focusing in a time-of-flight mass spectrometer.

See also *time-lag focusing*.

From [102,103].

### **116. zpožděná extrakce iontů**

Použití pulzu urychlovacího napětí následující s časovou prodlevou po desorpční ionizaci z povrchu.

*Poznámka:* Zpožděná extrakce iontů je schopna poskytnout zaostřování iontů podle energie v hmotnostním spektrometru s analyzátozem doby letu.

Viz též *fokusace časovou prodlevou*.

Citace [102,103].

### **117. delta notation**

See *relative isotope-ratio difference*.

### **117. změnová notace**

Viz *relativní rozdíl izotopových poměrů*.

### **118. deprotonated molecule**

Deprecated: pseudo-molecular ion, quasi-molecular ion.

Ion formed by the removal of a proton from a molecule M to produce an anion represented as  $[M - H]^-$ .

See also protonated molecule.

From [104].

### **118. deprotonovaná molekula**

Nedoporučuje se: pseudomolekulový ion, kvazimolekulový ion.

Ion utvořený odebráním protonu z molekuly M za vzniku aniontu označovaného jako  $[M - H]^-$ .

Viz též *protonovaná molekula*.

Citace [104].

### **119. desorption chemical ionization (DCI)**

Formation of gas-phase ions by chemical ionization of gaseous molecules produced by the rapid heating and desorption of a solid or low vapour pressure liquid. From [105,106].

### **119. desorpční chemická ionizace (DCI)**

Vytvoření iontu v plynné fázi chemickou ionizací plynné molekuly vzniklé rychlým ohřevem a desorpcí pevné látky nebo kapaliny s nízkou tenzí par.

Citace [105,106].

### **120. desorption electrospray ionization (DESI)**

Formation of gas-phase ions from a solid or liquid sample at atmospheric pressure through the interaction of electrosprayed droplets with the sample surface.

See also *ambient ionization*.

From [107].

### **120. desorpční ionizace elektrosprem (DESI)**

Vznik iontu v plynné fázi z pevného nebo kapalného vzorku za atmosférického tlaku v důsledku působení nabitých kapiček vytvořených elektrosprejem na vzorkovaný povrch.

Viz též *ambientní ionizace*.

Citace [107].

### **121. desorption ionization**

Formation of gas phase ions from a solid or liquid sample surface upon activation by heat, strong electric field, particles, droplets, or photon bombardment. From [108].

### **121. desorpční ionizace**

Vznik iontu v plynné fázi z pevného nebo kapalného povrchu následkem aktivace teplem, silným elektrickým polem, ostřelováním částicemi, nabitými kapičkami nebo fotony. Citace [108].

### **122. desorption ionization on silicon (DIOS)**

Soft ionization alternative to matrix-assisted desorption/ionization involving laser desorption ionization of a sample deposited on a porous silicon surface.

See also *matrix-assisted laser desorption/ionization*.

From [109].

### **122. desorpční ionizace na křemíku (DIOS)**

Měkký způsob ionizace alternativní k desorpci a ionizaci za účasti matrice spočívající v laserové desorpční ionizaci vzorku deponovaného na porézním křemíkovém povrchu.

Viz také *laserová desorpce a ionizace za účasti matrice*.

Citace [109].

### **123. detection limit**

See *relative detection limit*.

### **123. mez detekce**

Viz *relativní mez detekce*.

### **124. diagnostic ion**

Product ion whose formation reveals structural or compositional information about its precursor ion.

*Note:* For example, the phenyl cation in an electron ionization mass spectrum is a diagnostic ion for benzene and derivatives. From [110].

### **124. diagnostický ion**

Produktový ion, jehož vznik odhaluje informaci o struktuře a složení jeho prekurzorového iontu.

*Poznámka:* Například fenylový kation v hmotnostním spektru elektronové ionizace je diagnostickým iontem pro benzen a jeho deriváty. Citace [110].

### **125. dielectric barrier discharge ionization**

Atmospheric pressure chemical ionization in which the low-temperature plasma is not generated by a corona discharge but by a device consisting of two

electrodes with at least one dielectric layer that separates the electrode from the plasma. From [111].

### 125. ionizace výbojem s dielektrickou bariérou

Chemická ionizace za atmosférického tlaku, při které je nízkoteplotní plazma generována nikoliv koronovým výbojem, nýbrž zařízením, které tvoří dvě elektrody, z nichž alespoň jedna je od plazmatu oddělena dielektrickou bariérou. Citace [111].

### 126. dimeric ion

Ion formed by ionization of a dimer or by the association of an ion such as  $[M]^{+}$ ,  $[M + H]^{+}$ , or  $[M - H]^{-}$  with its neutral counterpart M.

See also *adduct ion*.

From [5,6].

### 126. dimerní ion

Ion vytvořený buď ionizací dimeru, nebo asociací iontu jako je například  $[M]^{+}$ ,  $[M + H]^{+}$ , nebo  $[M - H]^{-}$  s odpovídajícím neutrálním protějškem M.

Viz *aduktový ion*.

Citace [5,6].

*Pozn. překl. Příkladem takového dimerního iontu je třeba  $[2M + H]^{+}$ .*

### 127. d-ion

High-energy *product ion* of a protonated peptide formally equivalent to a fragment ion formed by homolytic cleavage of a peptide C-N bond together with the part of the C-terminal side-chain starting at the  $\gamma$ -carbon (if any). From [112].

### 127. ion typu d

*Produktový ion* protonovaného peptidu vzniklý vysokoenergetickou kolizí, formálně odpovídající fragmentovému iontu vzniklému homolytickým štěpením peptidové C-N vazby s částí C-koncového řetězce začínajícího na  $\gamma$ -uhlíku (je-li přítomen). Citace [112].

### 128. direct analysis of daughter ions (DADI)

This term is deprecated.

See *mass-analyzed ion kinetic energy spectrometry* (MIKES).

### 128. přímá analýza dceřiných iontů (DADI)

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *hmotnostní spektrometrie analýzou kinetické energie iontů* (MIKES).

### 129. direct exposure probe (DEP)

Device based on a modification of a direct insertion probe for exposing an involatile sample directly to the electron beam (in an electron ionization source) or to a chemical ionization plasma as in desorption chemical ionization.

*Note:* The sample can be deposited on an inert surface or on a heater filament for rapid heating.

From [105,113].

### 129. zaváděcí sonda s přímým vystavením (vzorku)

Zařízení založené na modifikaci přímé zaváděcí sondy tak, aby byl netěkavý vzorek přímo vystaven elektronovému svazku (ve zdroji s elektronovou ionizací) nebo chemickému plazmatu jako při desorpční chemické ionizaci.

*Poznámka:* Vzorek může být deponován na inertním povrchu nebo na vyhřívaném vlákně pro rychlý ohřev.

Citace [105,113].

### 130. direct infusion

Method of liquid sample introduction in which the sample is continuously flowed into a mass spectrometer ion source. From [114].

#### 130. přímé zavádění vzorku

Způsob zavedení kapalného vzorku, při kterém je vzorek dávkován za konstantního toku do iontového zdroje hmotnostního spektrometru. Citace [114].

### 131. direct insertion probe (DIP)

Device for introducing a single sample of a solid or liquid, usually contained in a quartz or other nonreactive sample holder, into a mass spectrometer ion source. See also *direct exposure probe*.

From [115].

#### 131. přímá zaváděcí sonda (DIP)

Zařízení sloužící k zavedení pevného či kapalného vzorku, obvykle umístěného v křemenném nebo jiném inertním držáku, do iontového zdroje hmotnostního spektrometru.

Viz také *zaváděcí sonda pro přímé vystavení (vzorku)*.

Citace [115].

### 132. direct liquid introduction (DLI)

Direct delivery of a liquid sample at a low solvent flow rate into the chemical ionization ion source of a mass spectrometer. The solvent vapour can act as the reagent gas. From [116].

#### 132. přímé zavedení kapaliny (DLI)

Přímé zavedení kapalného vzorku nízkou průtokovou rychlostí do iontového zdroje hmotnostního spektrometru s chemickou ionizací. Páry rozpouštědla mohou sloužit jako reakční plyn. Citace [116].

### 133. discrete dynode particle multiplier

Ion-to-electron detector in which the ion strikes the surface of an electrode and induces the production of secondary electrons. In turn, these impinge in sequence on dynodes at a more positive electric potential to produce more secondary electrons. This avalanche effect produces an amplification of several orders of magnitude in the final measured current pulse.

See also *continuous dynode particle multiplier*.

From [117].

#### 133. násobič částic s diskretním dynodovým polem

Detektor založený na převodu iontů na elektrony, ve kterém ionty dopadají na povrch elektrody a indukují tak vznik sekundárních elektronů. Ty dopadají

postupně na oddělené sériově zapojené dynody s pozitivnějším potenciálem, což vede k produkci dalších sekundárních elektronů. Výsledný lavinový efekt má za následek zesílení signálu o několik řádů.

Viz též *násobič částic s kontinuální dynodou*.

Citace [117].

#### **134. dissociative electron capture**

Ionization mechanism in which capture of a low-energy electron by a molecule leads directly to a dissociative state of the nascent anion, an example of dissociative ionization. From [118].

#### **134. disociační záchyt elektronu**

Ionizační mechanismus, ve kterém záchyt nízkoenergetického elektronu molekulou vede přímo k disociaci nově vzniklého aniontu (příklad disociační ionizace). Citace [118].

#### **135. dissociative ionization**

Reaction of a gas-phase molecule that results in its decomposition to form products, one of which is an ion.

See also *associative ionization*.

From [5,6].

#### **135. disociační ionizace**

Reakce molekuly v plynné fázi, která vede k rozkladu za vzniku produktů, z nichž jeden je ion.

Viz též *asociační ionizace*.

Citace [5,6]

#### **136. distonic ion**

Radical ion whose charge and radical sites are neither at the same atom nor in conjugation with each other.

*Note 1:* For example,  $\cdot\text{CH}_2\text{-OH}_2^+$  is a distonic ion, whereas the molecular ion of methanol,  $\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot}$  is a conventional radical cation.

*Note 2:* In a valence bond description,  $\alpha$ -distonic ions have the charge and radical sites on adjacent atoms,  $\beta$ -distonic ions are separated by one atom,  $\gamma$ -distonic ions by two atoms, and so forth.

From [119,120].

#### **136. distonický ion**

Radikálový ion, jehož nábojové a radikálové místo není na stejném atomu ani v konjugaci.

*Poznámka 1:* Kupříkladu  $\cdot\text{CH}_2\text{-OH}_2^+$  je distonický ion, zatímco molekulový ion metanolu  $\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot}$  je běžný radikálový ion.

*Poznámka 2:* Vyjádřeno pomocí představy valenční vazby,  $\alpha$ -distonické ionty mají nábojové a radikálové místo na sousedních atomech,  $\beta$ -distonické ionty oddělené jedním atomem,  $\gamma$ -distonické ionty dvěma atd.

Citace [119,120].

#### **137. double-focusing mass spectrometer**



Mass spectrometer that incorporates a magnetic sector and an electric sector connected in series in such a way that ions with the same  $m/z$  but with distributions in both the direction and the translational energy of their motion are brought to a focus. From [5,6].

### **137. hmotnostní spektrometr s dvojitou fokusací iontů**

Hmotnostní spektrometr používající sériově spojený magnetický a elektrostatický sektor tak, že ionty o stejném  $m/z$ , ale s rozdíly ve směru pohybu a v translační energii, jsou vždy zaostřeny do ohniska. Citace [5,6].

### **138. drift tube**

Cylindrical chamber containing a buffer gas. Ions introduced at one end are caused to move to the other end by either a flow of the buffer gas or by a uniform longitudinal electric field. From [121].

### **138. driftová trubice**

Válcová komora obsahující tlumivý plyn. Ionty jsou zavedeny na jednom konci a pohybují se na druhý konec buď působením toku nosného plynu, nebo v důsledku podélného homogenního elektrického pole. Citace [121].

### **139. drying gas**

Inert gas that is used to promote the removal of solvent from aerosol particles in spray ionization.

See also *counter-current gas*.

From [122].

### **139. sušící plyn**

Inertní plyn, který je používán k podpoře odpařování rozpouštědla z kapiček aerosolu ve sprejové ionizaci.

Viz *protiproudý plyn*.

Citace [122].

### **140. dynamic exclusion**

Software method used to minimize repeat selections of identical precursor ions for collision-induced dissociation in replicate chromatography-tandem mass spectrometry analyses of complex mixtures.

See also *data-dependent acquisition*.

From [123].

### **140. dynamické vyloučení**

Softwarová metoda používaná k minimalizaci opakovaného výběru stejného prekurzorového iontu pro kolizně indukovanou disociaci při opakované chromatografické analýze složitých směsí s tandemovou hmotnostně spektrometrickou detekcí.

Viz též *datově závislé měření*.

Citace [123].

### **141. dynamic field mass spectrometer**

Mass spectrometer in which  $m/z$  separation is achieved using one or more electric fields that vary with time. From [5,6].

#### **141. hmotnostní spektrometr s proměnným polem**

Hmotnostní spektrometr, který dosahuje separace dle  $m/z$  použitím jednoho či více elektrických polí proměnných v čase. Citace [5,6].

#### **142. dynamic secondary ion mass spectrometry (DSIMS)**

Secondary ion mass spectrometry analysis with primary ion current density sufficiently high for use in analysis of sample surface layers in the depth direction. From [124].

#### **142. dynamická hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (DSIMS)**

Hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů s proudovou hustotou primárních iontů natolik vysokou, aby mohlo dojít k analýze hloubkového profilu zkoumaného povrchu. Citace [124].

#### **143. einzel lens**

Three-element charged particle lens in which the first and third elements are maintained at the same electric potential. Such a lens produces focusing without changing the translational energy of the particle. From [125].

#### **143. unipotenciální čočka**

Čočka pro práci s nabitými částicemi skládající se ze tří prvků, z nichž první a třetí mají stejný elektrický potenciál. Tento druh čoček umožňuje fokusaci bez změny translační energie částice. Citace [125].

#### **144. elastic scattering**

Interaction between two particles (atom, molecule, or ion) wherein there is an exchange of translational energy between the collision partners but no conversion of translational energy into internal energy. Both the magnitudes and directions of the particle speeds can change.

See also *inelastic scattering*.

Revised from [5,6].

#### **144. pružný rozptyl**

Interakce mezi dvěma částicemi (atomy, molekulami nebo ionty), při které dochází k výměně translační energie mezi kolizními partnery, ale ne k přeměně translační energie na interní. Jak velikost, tak i směr vektoru rychlosti se může změnit.

Viz též *nepružný rozptyl*.

Upraveno podle [5,6].

#### **145. electric sector**

See *electrostatic energy analyzer*.

#### **145. elektrostatický sektor elektrický sektor**

Viz *elektrostatický analyzátor energie*.

#### **146. electrohydrodynamic ionization**

Ionization process that produces charged droplets and gas-phase ions from a liquid under vacuum with the application of an electric field.

*Note:* The process is formally equivalent to sub-ambient pressure electrospray ionization. From [126,128].

#### **146. elektrohydrodynamická ionizace**

Ionizační proces, který produkuje nabitě kapičky a ionty v plynné fázi z kapaliny ve vakuu pomocí aplikace elektrického pole.

*Poznámka:* Proces je formálně ekvivalentní ionizaci elektrosprejem za sníženého tlaku. Citace [126,128].

#### **147. electron affinity, EA**

Minimum energy required for a species M to be formed in the process  $M^- \rightarrow M + e^-$ , where  $M^-$  and M are in their ground rotational, vibrational, and electronic states and the electron has zero translational energy. From [5,6].

#### **147. elektronová afinita, EA**

Elektronová afinita částice M je minimální energie potřebná k uskutečnění procesu  $M^- \rightarrow M + e^-$ , kde  $M^-$  a M jsou v základním rotačním, vibračním a elektronovém stavu a elektron má nulovou translační energii. Citace [5,6].

#### **148. electron attachment ionization**

This term is deprecated.

See *electron capture ionization*.

#### **148. ionizace připojením elektronu**

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *ionizace záchytem elektronu*.

#### **149. electron capture dissociation (ECD)**

Process in which multiply protonated molecules interact with low-energy electrons followed by fragmentation. The capture of an electron by the even-electron cation  $[M + nH]^{n+}$  liberates energy and reduces its charge state, thus producing the corresponding  $[M + nH]^{(n-1)+}$  odd-electron ion, which readily fragments. From [129].

#### **149. disociace záchytem elektronu (ECD)**

Proces, při kterém vícenásobně protonované molekuly interagují s elektrony o nízké energii. Záchyt elektronu kationtem se sudým počtem elektronů vede k uvolnění energie a redukci nábojového stavu iontu, což má za následek vznik iontu s lichým počtem elektronů,  $[M + nH]^{(n-1)+}$ , který snadno fragmentuje. Citace [129].

#### **150. electron capture ionization (ECI)**

##### **electron capture negative ionization**

Deprecated: *electron attachment ionization*.

Ionization of a gas-phase atom or molecule by attachment of a free electron to form molecular ions of the  $M^-$  type.

From [130].

#### **150. ionizace záchytem elektronu (ECI)**

Nedoporučuje se: *ionizace připojením elektronu*.

Ionizace atomu nebo molekuly v plynné fázi záchytem volného elektronu za vzniku molekulového iontu typu  $M^{-\bullet}$ .

Citace [130].

### 151. electron capture negative ionization (ECNI)

See *electron capture ionization (ECI)*.

### 151. negativní ionizace záchytem elektronu (ECNI)

Viz *ionizace záchytem elektronu*.

### 152. electron energy

Translational energy that electrons acquire when accelerated in an electric field. From [5,6].

### 152. energie elektronu

Translační energie, kterou elektron získá urychlením v elektrickém poli. Citace [5,6].

### 153. electron impact ionization

This term is deprecated.

See *electron ionization (EI)*.

### 153. ionizace nárazem elektronu

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *elektronová ionizace (EI)*.

### 154. electron ionization (EI)

Deprecated: *electron impact ionization*.

Ionization that removes one or more electrons from an atom or molecule through interactions with electrons that are typically accelerated to energies between 10 and 150 eV. From [5,6].

### 154. elektronová ionizace (EI)

Nedoporučuje se: *ionizace nárazem elektronu*.

Ionizace, která odstraňuje jeden nebo více elektronů z atomu nebo molekuly prostřednictvím interakce s elektrony, které jsou typicky urychleny na energie mezi 10 a 150 eV. Citace [5,6].

### 155. electron transfer dissociation

Process in which multiply protonated molecules accept an electron from an anion with relatively low electron affinity. Capture of the electron leads to the liberation of energy and a reduction in charge of the ion with the production of the  $[M + nH]^{(n-1)+\bullet}$ , odd-electron ion, which is readily fragmented by collision-induced dissociation.

See also *electron capture dissociation (ECD)*.

From [131].

### 155. disociace přenosem elektronu (ETD)

Proces, při kterém vícenásobně protonované molekuly přijmou elektron z aniontu s relativně nízkou elektronovou afinitou. Přenos elektronu vede k uvolnění energie a redukci náboje iontu za vzniku iontu s lichým počtem

elektronů  $[M + nH]^{(n-1)+}$ , který snadno fragmentuje kolizně indukovanou disociací.

Viz též *disociace záchytem elektronu*.

Citace [131].

### 156. electronvolt, eV

Non-SI unit of energy (symbol eV) defined as the energy acquired by a particle containing charge equal to elementary charge accelerated through a potential difference of one volt.

*Note:* An electronvolt is equal to  $1.60217733(49) \times 10^{-19}$  J, where the digits in parentheses indicate the estimated uncertainty in the final two digits of the value.

Revised from [6] using additional information from [46].

### 156. elektronvolt, eV

Jednotka energie (symbol eV) definovaná jako energie, kterou získá částice o jednotkovém náboji urychlená potenciálovým rozdílem jednoho voltu. Tato jednotka není součástí SI.

*Poznámka:* Jeden elektronvolt je roven  $1,60217733(49) \times 10^{-19}$  J, přičemž čísla v závorce označují odhadovanou nejistotu v hodnotě posledních dvou číslic.

Upraveno podle [6] s použitím doplňujících informací z [46].

### 157. electrospray emitter

See *electrospray needle*.

### 157. elektrosprejový emitör

Viz *elektrosprejová jehla*.

### 158. electrospray ionization (ESI)

Spray ionization process in which either cations or anions in solution are transferred to the gas phase via formation and desolvation at atmospheric pressure of a stream of highly charged droplets that result from applying a potential difference between the tip of the electrospray needle containing the solution and a counter electrode.

*Note:* When a pressurized gas is used to aid in the formation of a stable spray, the term pneumatically assisted electrospray ionization is used. The term ionspray is deprecated unless describing the commercial product.

From [132,133].

### 158. ionizace elektrosprejem (ESI)

#### elektrosprejová ionizace

Sprejově ionizační proces, při němž jsou kationty nebo anionty z roztoku při atmosférickém tlaku převedeny do plynné fáze prostřednictvím tvorby a desolvatace proudu vysoce nabitých kapiček, které vznikly v důsledku potenciálového rozdílu vloženého mezi špičku elektrosprejové jehly s roztokem a protielektrodou.

*Poznámka:* Pokud je ke snazšímu vzniku stabilního spreje použit stlačený plyn, používá se termín pneumaticky asistovaný elektrosprej. Termín *iontový sprej* (*ionspray*) se nedoporučuje, pokud není popisován konkrétní komerční produkt.

Citace [132,133].

**159. electropray needle**  
**electrospray emitter**

Narrow bore tube from which highly charged droplets are emitted in electropray ionization. From [95,133].

**159. elektrosprejová jehla**  
**elektrosprejový emitör**

Trubice s úzkým průměrem, ze které jsou emitovány kapičky nabité při ionizaci elektrosprejem. Citace [95,133].

**160. electrostatic energy analyzer (ESA)**  
**electric sector**

Device consisting of pairs of parallel conducting plates, concentric cylinders, or concentric spheres that separate charged particles according to their ratio of translational energy to charge by means of a potential difference applied between the pair. From [134].

**160. elektrostatický analyzátor energie**  
**elektrostatický sektor**

Zařízení skládající se z vodivých rovnoběžných desek, soustředných válců nebo soustředných koulí, které pomocí potenciálového rozdílu na nich vloženém odděluje nabité částice podle poměru jejich translační energie vůči jejich náboji. Citace [134].

**161. even-electron ion**

Ion containing no unpaired electrons in its ground electronic state. From [5,6].

**161. ion se sudým počtem elektronů**

Ion neobsahující nepárové elektrony v základním elektronovém stavu. Citace [5,6].

**162. even-electron rule**

Rule that states that even-electron ions tend to form even-electron fragment ions whereas odd-electron ions tend to dissociate to form either odd- or even-electron ions. From [135].

**162. pravidlo sudého počtu elektronů**

Pravidlo, podle kterého mají ionty se sudým počtem elektronů tendenci tvořit fragmentové ionty se sudým počtem elektronů, zatímco ionty s lichým počtem elektronů disociují za tvorby iontů s lichým či sudým počtem elektronů. Citace [135].

**163. exact mass**

Calculated mass of an ion or molecule with specified isotopic composition. See also *accurate mass*. From [136].

**163 správná hmotnost**

Vypočtená hmotnost iontu nebo molekuly s daným izotopovým složením. Viz také *přesná hmotnost*. Citace [136].

**164. extracted ion chromatogram**  
**mass chromatogram**  
**reconstructed ion chromatogram**

Chromatogram created by plotting the intensity of the signal observed at a chosen  $m/z$  value or set of values in a series of mass spectra recorded as a function of retention time. From [137,138].

**164. chromatogram extrahovaných iontů (XIC)**  
**hmotnostní chromatogram**  
**rekonstruovaný iontový chromatogram**

Chromatogram vytvořený jako závislost intenzity signálu pozorovaného při zvolené hodnotě  $m/z$  nebo sérii hodnot ve skupině hmotnostních spekter získaných jako funkce retenčního času. Citace [137, 138].

**165. extracted ion electropherogram**  
**extracted ion electrophorogram**

Electropherogram created by plotting the intensity of the signal observed at a chosen  $m/z$  value or set of values in a series of mass spectra recorded as a function of electrophoresis time. From [139,140].

**165. elektroferogram extrahovaných iontů**

Elektroferogram vytvořený jako závislost intenzity signálu pozorovaného při zvolené hodnotě  $m/z$  nebo sérii hodnot  $m/z$  ve skupině hmotnostních spekter získaných jako funkce migračního času. Citace [139, 140].

**166. extracted ion electrophorogram**

See *extracted ion electropherogram*.

**166. elektroferogram extrahovaných iontů**

Sporná varianta v češtině neexistuje.

Viz *elektroferogram extrahovaných iontů*

**167. extracted ion profile**

Any plot of signal intensity observed at a chosen  $m/z$  value or set of values in a series of mass spectra recorded as a function of time, including extracted ion chromatogram, extracted ion electropherogram, or from flow injection analysis or any other time-dependent sampling.

See also *total ion current profile*.

From [141].

**167. profil extrahovaných iontů**

Jakýkoliv záznam vytvořený jako závislost intenzity signálu pozorovaného při zvolené hodnotě  $m/z$  nebo sérii hodnot  $m/z$  ve skupině hmotnostních spekter na čase. Zahrnuje chromatogram extrahovaných iontů, elektroferogram extrahovaných iontů nebo záznam průtokové injekční analýzy nebo jakékoliv časově závislého dávkování.

Viz také *profil celkového iontového proudu*.

Citace [141].

### 168. Faraday cup

Conducting cup or chamber that intercepts a charged particle beam and is electrically connected to a current measuring device. From [5,6].

### 168. Faradayův pohár

Vodivý pohár nebo komůrka, která přerušuje svazek nabitých částic a je elektricky spojena se zařízením pro měření elektrického proudu. Citace [5,6].

### 169. fast atom bombardment ionization (FAB)

Ionization of molecules initiated by a beam of neutral atoms with translational energies in the keV range. Labile molecules susceptible to dissociation are dissolved in an involatile liquid matrix that absorbs the energy of the bombarding atoms to form a selvedge region above the liquid surface in which ionization of the molecules occurs.

*Note:* Positive ions (e.g., protonated or cationized molecules) or negative ions (e.g., deprotonated molecules) are formed depending on the polarity of ionization.

See also *liquid secondary ionization*.

Revised from [5,6] using additional information from [142].

### 169. ionizace ostřelováním urychlenými atomy (FAB)

Ionizace molekul iniciovaná svazkem neutrálních atomů s translační energií v řádu keV. Nestabilní molekuly náchylné k disociaci jsou rozpuštěny v těkavé kapalně matrici, která absorbuje energii ostřelujících atomů za vzniku hraniční (mezifázové) oblasti nad kapalným povrchem, kde dochází k ionizaci molekul.

*Poznámka:* Kladné ionty (protonované nebo kationované molekuly) nebo záporné ionty (např. deprotonované molekuly) vznikají v závislosti na polaritě ionizace.

Viz také *sekundární ionizace v kapalně fázi*.

Upraveno podle [5,6] s pomocí doplňujících informací z [142].

### 170. fast ion bombardment (FIB)

Ionization of any species by the interaction of a focused beam of ions, with a translational energy of several thousand eV, with a solid or liquid sample.

*Note:* For a liquid sample, fast ion bombardment is the same as liquid secondary ionization.

From [143].

### 170. ionizace ostřelováním urychlenými ionty (FIB)

Ionizace jakékoliv částice z pevného nebo kapalného vzorku pomocí interakce se zaostřeným svazkem iontů o translační energii několika tisíc eV.

*Poznámka:* Pro kapalně vzorek jde o identický děj jako při *sekundární ionizaci v kapalně fázi*.

Citace [143].

### 171. field desorption (FD)

Deprecated: *field desorption ionization*.

Formation of gas-phase ions from a material deposited on a solid surface (known as an "emitter") in the presence of an electric field.



*Note:* Because this process probably encompasses ionization by field ionization in conjugation with other mechanisms of ionization, the term field desorption ionization, despite its widespread use, is imprecise and therefore not recommended.

From [5,6].

### **171. desorpce polem (FD)**

Nedoporučuje se: *desorpce a ionizace polem*.

Tvorba iontů v plynné fázi za přítomnosti elektrického pole z materiálu naneseného na pevném povrchu (označovaném jako tzv. emitor).

*Poznámka:* Protože proces je velmi pravděpodobně doprovázen ionizací polem ve spojení s dalšími ionizačními mechanismy, termín desorpce a ionizace polem se i přes jeho značné rozšíření nedoporučuje kvůli nepřesnosti.

Citace [5,6].

### **172. field desorption ionization**

This term is deprecated.

See *field ionization*.

### **172. desorpce a ionizace polem**

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *ionizace polem*.

### **173. field-free region (FFR)**

Section of a mass spectrometer in which there are no electric or magnetic fields.

From [144].

### **173. oblast bez pole (FFR)**

Část hmotnostního spektrometru, ve které není žádné elektrické ani magnetické pole. Citace [144].

### **174. field ionization (FI)**

Ionization by the removal of electrons from any gas-phase species via the action of a high electric field.

See also *field desorption*.

From [5,6].

### **174. ionizace elektrickým polem**

Ionizace jakékoliv částice v plynné fázi, při které dochází k odstranění elektronů působením silného elektrického pole.

Viz také *desorpce polem*.

Citace [5,6].

### **175. first stability region**

Stability region of a Mathieu stability diagram closest to the origin.

*Note:* Ions within this region can traverse the full length of a transmission quadrupole or can be trapped in a Paul ion trap.

From [145].

### **175. první oblast stability**

Stabilní oblast Mathieuova stabilitního diagramu nejbližší počátku.

*Poznámka:* Ionty z této oblasti mohou překonat celou délku transmisního kvadrupólu nebo mohou být udrženy v Paulově iontové pasti.  
Citace [145].

**176. fission fragment ionization**

See *plasma desorption ionization*

**176. ionizace štěpnými fragmenty**

Viz *desorpce a ionizace plazmatem*.

**177. fixed neutral gain spectrum**

See *constant neutral mass gain spectrum*

**177. spektrum fixních neutrálních přírůstků**

Viz *spektrum konstantních neutrálních hmotnostních přírůstků*.

**178. fixed neutral loss spectrum**

See *constant neutral mass loss spectrum*

**178. spektrum fixních neutrálních ztrát**

Viz *spektrum konstantních neutrálních hmotnostních ztrát*.

**179. fixed neutral mass gain spectrum**

See *constant neutral mass gain spectrum*

**179. spektrum fixních neutrálních hmotnostních přírůstků**

Viz *spektrum konstantních neutrálních hmotnostních přírůstků*.

**180. fixed neutral mass loss spectrum**

See *constant neutral mass loss spectrum*

**180. spektrum fixních neutrálních hmotnostních ztrát**

Viz *spektrum konstantních neutrálních hmotnostních ztrát*.

**181. fixed precursor ion scan**

Scan that determines, in a single experiment, the  $m/z$  values of product ions that are produced by the reaction of a selected precursor ion with a user-specified  $m/z$  value.

From [5,6].

**181. sken iontů fixního prekurzoru**

Záznam, který během jediného experimentu určí hodnoty  $m/z$  produktových iontů vytvořených reakcí vybraného prekurzorového iontu s předem zadanou hodnotou  $m/z$ .

Citace [5,6].

**182. fixed precursor ion spectrum**

Spectrum obtained when data are acquired that determine the  $m/z$  values of product ions produced by the reaction of a selected precursor ion with a user-specified  $m/z$  value. From [5,6].

**182. spektrum iontů fixního prekurzoru**

Spektrum získané z dat, která ukazují hodnoty  $m/z$  produktových iontů vytvořených reakcí vybraného prekurzorového iontu s předem zadanou hodnotou  $m/z$ . Citace [5,6].

### 183. fixed product ion scan

Scan that determines, in a single experiment, the  $m/z$  values of precursor ions that react to produce a product ion with a user-selected  $m/z$  value. From [5,6].

#### 183. sken fixního produktového iontu

Sken, který během jediného experimentu určí hodnoty  $m/z$  prekurzorových iontů, které reagovaly za tvorby produktového iontu s předem zadanou hodnotou  $m/z$ . Citace [5,6].

### 184. flow injection analysis mass spectrometry

See *flow injection mass spectrometry*

#### 184. analýza hmotnostní spektrometrií s průtokovou injekční analýzou

Viz *hmotnostní spektrometrie s průtokovou injekční analýzou*.

### 185. flow injection mass spectrometry

#### flow injection analysis mass spectrometry

Method of flow injection analysis in which an aliquot of sample is injected, without chromatographic separation, into a liquid carrier stream for on-line *mass spectrometry*. From [146,147].

#### 185. průtoková injekční hmotnostní spektrometrie

##### hmotnostní spektrometrie s průtokovou injekční analýzou

Metoda průtokové injekční analýzy, ve které je poměrná část vzorku nadávkována bez chromatografické separace do proudu nosné kapaliny pro přímou analýzu hmotnostní spektrometrií. Citace [146,147].

### 186. focal plane detector

Detector for  $m/z$  spatially dispersed *ion* beams in which all ions simultaneously impinge on the detector plane to produce spatially defined signals. From [148].

#### 186. detektor se zobrazením v ohniskové rovině

Detektor pro svazky iontů s prostorově rozptýleným  $m/z$ , ve kterých všechny ionty simultánně dopadnou na rovinu detektoru tak, že vytvoří prostorově rozlišený signál. Citace [148].

### 187. forward geometry

#### normal geometry

*Double-focusing mass spectrometer* configuration in which the ion beam traverses the *electric sector* before the *magnetic sector*. See also *reverse geometry*. From [149].

#### 187. přímá geometrie

##### normální geometrie

Uspořádání *hmotnostního spektrometru s dvojitou fokusací iontů*, ve kterém iontový svazek prochází *elektrostatickým sektorem* před *sektorem magnetickým*. Viz také *obrácená geometrie*. Citace [149].

### 188. forward library search

Procedure of comparing a *mass spectrum* of an unknown compound with a *mass spectral library* so that the unknown spectrum is compared in turn with the library spectra, considering only the *m/z* peaks that have intensities greater than a specific threshold in the unknown.

*Note:* In a *forward library search*, a higher similarity index indicates the extent to which the library spectrum resembles the unknown spectrum. See also *reverse library search*. From [150].

### 188. přímé vyhledávání v knihovně spekter

Postup porovnání *hmotnostního spektra* neznámé sloučeniny oproti *knihovně hmotnostních spekter*, přičemž spektrum neznámé sloučeniny je porovnáno s knihovními spektry tak, že jsou uvažována pouze *m/z*, pro něž je intenzita větší, než určitý práh pro neznámou sloučeninu.

*Poznámka:* Při *přímém vyhledávání* vyšší index podobnosti ukazuje na míru, s jakou se neznámé spektrum podobá spektru knihovnímu. Viz také *nepřímé vyhledávání v knihovně spekter*. Citace [150].

### 189. Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometer (FT-ICR-MS)

*Mass spectrometer* based on the principle of *ion cyclotron resonance* in which an *ion* in a magnetic field moves in a circular orbit at the cyclotron frequency that is characteristic of its *m/z* value. Ions are coherently excited to a larger radius orbit using a pulse of radio frequency electric field, and their image charge is detected on receiver plates as a time domain signal. Fourier transformation of the time domain signal results in a frequency domain signal that is converted to a *mass spectrum* based on the inverse relationship between cyclotron frequency and *m/z*. See also *ion cyclotron resonance mass spectrometer*. From [5,6].

### 189. hmotnostní spektrometr s iontovou cyklotronovou rezonancí a Fourierovou transformací (FT-ICR)

Hmotnostní spektrometr založený na principu *iontové cyklotronové rezonance*, kde se *ion* v magnetickém poli pohybuje po kruhových orbitálních drahách s charakteristickou cyklotronovou frekvencí závislou na hodnotě *m/z*. Ionty jsou koherentně excitovány na orbitální dráhy s větším poloměrem pomocí pulzu vysokofrekvenční energie a jejich nábojový obraz je detekován na deskách přijímače jako signál v časové doméně. Signál v časové doméně je pomocí Fourierovy transformace převeden do frekvenční domény, čímž je získáno *hmotnostní spektrum* na základě nepřímé úměrnosti mezi cyklotronovou frekvencí a hodnotou *m/z*. Viz také *hmotnostní spektrometr s iontovou cyklotronovou rezonancí*. Citace [5,6].

*Pozn. překl.* U slovesa detekovat se podle originálu latinského detegere zdá být správnější varianta detegovat. Do naší mateřštiny však sloveso proniklo skrze podstatná jména detekce a detektor, a ty jsou tudíž základem pro ono sloveso. Slovníky spisovného jazyka obsahují dokonce tři varianty tohoto slovesa (s klesající frekvencí užívání): detekovat, detegovat, detektovat. My jsme se

rozhodli pro detekovat jako pro nejfrekventovanější. [ÚJČ AV ČR, v.v.i.]

### 190. Fourier transform mass spectrometry

*Mass spectrometry* technique in which  $m/z$  values are represented by frequencies of *ion* motion and *mass spectra* are generated by Fourier transform mathematical operations from time domain transients produced by image current detection.

Fourier transform mass spectrometry is typically carried out using *Fourier transform ion cyclotron resonance-mass spectrometers* or *Kingdon traps*. From [151].

### 190. hmotnostní spektrometrie s Fourierovou transformací

*Hmotnostně spektrometrická* technika, ve které jsou hodnoty  $m/z$  představovány frekvencemi pohybu iontů a hmotnostní spektra jsou generována matematickými operacemi Fourierových transformací přechodů získaných detekcí indukovaného proudu v časové doméně.

Hmotnostní spektrometrie s Fourierovou transformací je typicky prováděna pomocí *hmotnostního spektrometru s iontovou cyklotronovou rezonancí a Fourierovou transformací* nebo *Kingdonovou pastí*. Citace [151].

### 191. fragmentation reaction (in mass spectrometry)

Reaction of an *ion* that results in two or more fragments of which at least one is an *ion*. Revised from [6].

### 191. fragmentační reakce (v hmotnostní spektrometrii)

Reakce iontu, jejímž výsledkem jsou dva nebo více fragmentů, ze kterých alespoň jeden je *iontem*. Upraveno podle [6].

### 192. fragment ion

*Product ion* that results from the dissociation of a *precursor ion*. Revised from [5,6] using additional information from [152,153].

### 192. fragmentový ion

*Produktový ion*, který vzniká v důsledku disociace *prekurzorového iontu*. Upraveno podle [5,6] s pomocí doplňujících informací z [152, 153].

### 193. fringe field

Electric or magnetic field that extends from the edge of an *electric sector*, *magnetic sector*, lens, or other *ion optics* element. From [154].

### 193. okrajové pole

Elektrické nebo magnetické pole, které přesahuje okraj *elektrostatického* nebo *magnetického sektoru*, čoček nebo jiného *iontově-optického* prvku. Citace [154].

### 194. gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS)

Technique by which a mixture is separated into individual components by gas chromatography, followed by detection with a mass spectrometer.

*Note 1:* Either a hyphen or slash can be used to indicate combined instruments.

*Note 2:* The *mass spectrum* is typically obtained on a time scale that allows

resolution of the component in a single chromatographic peak. See also *liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS)*, *supercritical fluid chromatography-mass spectrometry (SFC-MS)*, *thin layer chromatography-mass spectrometry (TLC-MS)*. From [18,155].

#### **194. plynová chromatografie s hmotnostní spektrometrií (GC-MS)**

Technika, při které je směs separována na jednotlivé složky pomocí plynové chromatografie, a ty jsou následně detekovány hmotnostním spektrometrem.

*Poznámka 1:* Ve zkratce se používá označení GC-MS, čeština nezná využití lomítka v tomto kontextu, tedy nikoliv GC/MS.

*Poznámka 2:* Hmotnostní spektrum je obvykle získáno v takovém časovém rozsahu, aby bylo možné rozlišit složky v jednotlivém chromatografickém píku. Viz také *kapalinová chromatografie s hmotnostní spektrometrií (LC-MS)*, *superkritická fluidní chromatografie s hmotnostní spektrometrií (SFC-MS)*, *tenkovrstvá chromatografie s hmotnostní spektrometrií (TLC-MS)*. Citace [18,155].

#### **195. glow discharge ionization**

Formation of *ions* from gaseous atoms or molecules or from the vapor of a solid sample at the cathode by applying a potential difference between two electrodes immersed in a low-pressure inert gas environment. From [156,157].

#### **195. ionizace doutnavým výbojem**

Tvorba iontů z atomů či molekul v plynné fázi, z par pevných vzorků na katodě s použitím potenciálového rozdílu vloženého mezi dvě elektrody v inertoním plynu za nízkého tlaku. Citace [156,157].

#### **196. granddaughter ion**

This term is deprecated. See *n<sup>th</sup>-generation product ion*.

#### **196. vnučkovský ion**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *produktový ion n-té generace*.

#### **197. gridless reflectron**

*Reflectron* design in which the decelerating/accelerating field is produced without the use of wire-mesh grids.

*Note:* This design improves *ion* transmission but at the cost of a less homogeneous field and thus reduced *resolution*.

#### **197. reflektron bez mřížky iontové zrcadlo bez mřížky**

Konstrukce *reflektronu*, ve které je urychlovací/brzdné pole generováno bez použití drátěné mřížky.

*Poznámka:* Tato konstrukce zlepšuje iontovou průchodnost za cenu méně homogenního pole, tedy snížením rozlišení.

#### **198. hard ionization**

Formation of gas-phase *ions* accompanied by extensive fragmentation. See also *soft ionization*. From [24].

#### **198. tvrdá ionizace**

Tvorba iontů v plynné fázi doprovázená rozsáhlou fragmentací. Viz také *měkká ionizace*. Citace [24].

### 199. high-energy collision-induced dissociation

*Collision-induced dissociation* process wherein the projectile *ion* has laboratory-frame translational energy greater than a given value, often taken to be 1 keV. See also *low-energy collision-induced dissociation*. From [159,160].

### 199. vysokoenergetická kolizně indukovaná disociace

*Kolizně indukovaný disociační* proces, při kterém je translační energie prekurzorového iontu v laboratorním souřadném systému vyšší než daná hodnota, obvykle uváděná jako 1 keV. Viz také *nízkoenergetická kolizně indukovaná disociace*. Citace [159,160].

### 200. high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry (FAIMS) RF-DC ion mobility spectrometry

Separation of *ions* at atmospheric pressure between two electrodes due to simultaneous application of a high potential asymmetric waveform, whereby ions migrate towards one of the two electrodes depending on the ratio of the high- to low-field mobility of the ion. A variable compensating DC potential is used to selectively transmit ions of interest. From [161,162].

### 200. iontová mobilní spektrometrie s vysokonapěťovou asymetrickou vlnovou funkcí iontová mobilní spektrometrie s aplikací RF-DC

Separace iontů za atmosférického tlaku mezi dvěma elektrodami, na které je vložena vysokonapěťová asymetrická vlnová funkce. Jejím působením dochází k pohybu iontů k jedné z elektrod v závislosti na poměru mobilit iontu v elektrickém poli o vysoké a nízké intenzitě. Nastavitelné kompenzační stejnosměrné napětí umožňuje selektivně propouštět vybrané ionty. Citace [161,162].

### 201. hybrid mass spectrometer

*Mass spectrometer* that combines *m/z* analyzers of different types to perform *tandem mass spectrometry* or higher-order  $MS^n$  experiment. From [5].

### 201. hybridní hmotnostní spektrometr

Hmotnostní spektrometr, který kombinuje hmotnostní analyzátory různých typů, aby bylo možné provádět *tandemovou hmotnostní spektrometrii* nebo vyšší řády  $MS^n$  experimentů. Citace [5].

### 202. hydride ion

See *hydron*.

### 202. kation vodíku

Viz *hydron*.

*Pozn. překl.* Nelze překládat jako hydridový ion, protože tento termín na rozdíl od *angličtiny* má jasný význam anion vodíku.

### 203. hydrogen/deuterium exchange (HDX)

Exchange of hydrogen atoms with deuterium atoms in a chemical species in solution prior to introduction into a *mass spectrometer*, or by *ion/molecule reaction* with a *neutral gas* inside a *mass spectrometer*. From [163,164].

### 203. vodíko-deuteriová výměna

Výměna atomů vodíku za atomy deuteria v chemické částici v roztoku před zavedením do *hmotnostního spektrometru* nebo před *iontově-molekulovými reakcemi s neutrálním plynem* uvnitř *hmotnostního spektrometru*. Citace [163,164].

### 204. hydrogen shifts

Sigmatropic reactions of *ions* in which the  $\sigma$ -bonds broken and formed involve hydrogen atoms, and are subject to the Woodward-Hoffmann rules resulting from orbital symmetry considerations. From [165].

### 204. přesmyky vodíku

Sigmatropní reakce iontů, ve kterých se přeskupují  $\sigma$ -vazby obsahující vodíkové atomy, podrobují se Woodwardovým-Hoffmannovým pravidlům vyplývajícím ze zohlednění orbitální symetrie. Citace [165].

### 205. hydron hydride ion

General name for the cation  $H^+$ .

*Note 1:* The species  $H^-$  is the hydride anion, and H is the hydro group.

*Note 2:* These are general names to be used without regard to the nuclear mass of the hydrogen entity, either for hydrogen in its *natural isotopic abundance* or where it is not desired to distinguish among the isotopes.

From [6].

### 205. hydron vodíkový kation

Obecné pojmenování pro kation  $H^+$ .

*Poznámka 1:* Částice  $H^-$  je hydridový anion, H je vodíková skupina.

*Poznámka 2:* Tato obecná jména se používají bez ohledu na hmotnost jádra vodíkové částice, buď pro vodík v jeho *přirozeném izotopovém zastoupení*, nebo kde není potřeba mezi těmito izotopy rozlišovat.

Citace [6].

### 206. hyphenated mass spectrometry technique

Analytical technique in which *mass spectrometry* is interfaced with a pretreatment step, most often chromatographic separation but many other combinations are possible.

*Note:* Despite the use of the term “hyphenated” in the name of the general category, a slash separator as in *gas chromatography/mass spectrometry* may also be used.

From [166,167].

### 206. kombinovaná hmotnostně spektrometrická technika

Analytická instrumentální technika, v níž je *hmotnostní spektrometrie* kombinována s předchozím analytickým krokem, nejčastěji chromatografickou



separací, ale možné jsou i jiné kombinace.

*Poznámka:* Poznámka se v češtině neuplatňuje.

Citace [166,167].

### 207. image current detection

Method of *ion* detection by measuring the current that results from the image charge induced by a coherent motion of ions passing near a conductor.

*Note:* In *Fourier transform mass spectrometers* or *Kingdon traps*, the coherent orbital motion of ions between a pair of electrodes induces a radio frequency image charge in the electrodes and an alternating image current in the detection circuit connecting to the electrodes.

From [168,169].

### 207. detekce indukovaného proudu

Metoda detekce iontu měřením proudu, jenž pochází z náboje indukovaného koherentní pohybem iontů v okolí vodiče.

*Poznámka:* V *hmotnostní spektrometrii s Fourierovou transformací* a v *Kingdonových pastech* indukuje koherentní orbitální pohyb iontů mezi páry elektrod radiofrekvenční náboj v elektrodách a střídavý proud v detekčním obvodu napojeném na elektrody.

Citace [168,169].

### 208. imaging mass spectrometry

Procedure used to form chemically selective images of an object based on the *mass spectrometric detection of ions* desorbed from its surface. From [170].

### 208. zobrazovací hmotnostní spektrometrie

Postup používaný k tvorbě chemicky selektivního zobrazení objektů na základě *hmotnostně spektrometrické* detekce iontů desorbovaných z jeho povrchu.

Citace [170].

### 209. iminium ion

#### alkylideneaminylium ion

Deprecated: imonium ion, immonium ion.

Cation with the structure  $R_1C=N^+R_2$ .

*Note:* The terms *imonium ion* and *immonium ion* are irregularly formed and should not be used. From [6].

### 209. iminiový ion

#### alkylidenaminyliový ion

Nedoporučuje se: imoniový ion, immoniový ion.

Kation se strukturou  $R_1C=N^+R_2$ .

*Poznámka:* Pojmy *imoniový ion* a *immoniový ion* nejsou tvořeny podle standardního názvosloví a neměly by být používány. Citace [6].

### 210. imonium ion

This term is deprecated. See *iminium ion*.

### 210. imoniový ion

Tento termín se nedoporučuje. Viz *iminiový ion*.

### 211. immonium ion

This term is deprecated. See *iminium ion*.

### 210. immoniový ion

Tento termín se nedoporučuje. Viz *iminiový ion*.

### 212. impact parameter

Distance of closest approach of two particles if they had continued in their original directions of motion at their original speeds without the influence of intermolecular forces. From [5,6].

### 212. parametr srážky

Vzdálenost největšího přiblížení dvou částic, které by pokračovaly v pohybu ve svých původních směrech při svých původních rychlostech, nebýt vlivu mezimolekulových sil. Citace [5, 6].

### 213. iminylium ion

#### alkylideneaminylium ion

Cation having the structure  $R^1R^2C=N^+$ .

*Note 1:* A contraction of *alkaniminylium ion*.

*Note 2:* A subclass of *nitrenium ions*.

From [6].

### 213. iminylový ion

#### alkylideneaminyliový ion

Kationt se strukturou  $R^1R^2C=N^+$ .

*Poznámka 1:* Zkrácený výraz *alkaniminyliový ion*.

*Poznámka 2:* Podtřída *nitreniových iontů*.

Citace [6].

### 214. inductively coupled plasma (ICP)

Gas discharge *ion source* in which the energy is supplied to the *plasma* by electromagnetic induction. From [171].

### 214. indukčně vázané plazma (ICP)

*Iontový zdroj* s výbojem v plynné fázi, kde elektromagnetická indukce dodává *plazmatu* energii. Citace [171].

### 215. inductively coupled plasma-mass spectrometry (ICP-MS)

*Mass spectrometry* technique based on coupling a *mass spectrometer* with an *inductively coupled plasma* as an *ion source* that both atomizes samples into their constituent atoms and ionizes them to form atomic cations.

*Note:* The technique is highly sensitive for a range of metals and several non-metals, and provides information on isotopic distributions. From [171,172].

### 215. hmotnostní spektrometrie s ionizací indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS)

Hmotnostně spektrometrická technika založená na spojení hmotnostního spektrometru s indukčně vázaným plazmatem jako iontovým zdrojem, který

vzorek zároveň atomizuje na jednotlivé atomy a ty ionizuje na kationty.

*Poznámka:* Tato technika je vysoce citlivá pro mnoho různých kovů a několik nekovů, a poskytuje informace o izotopové distribuci. Citace [171,172].

### 216. inelastic scattering

Interaction between two particles (atom, molecule, or *ion*) wherein there is both an exchange of translational energy between the collision partners and a conversion of translational energy into internal energy. Both the magnitudes and directions of the particle speeds can change. See also *elastic scattering*. Revised from [5,6].

### 216. nepružný rozptyl

Interakce mezi dvěma částicemi (atom, molekula nebo *ion*), při které dochází jak k výměně translační energie mezi kolidujícími partnery, tak i konverzi translační energie na energii vnitřní. Změnit se může velikost i směr vektoru rychlosti částice. Viz také *pružný rozptyl*. Upraveno podle [5,6].

### 217. infrared multiphoton dissociation (IRMPD)

Dissociation of a reactant *ion* as a result of the absorption of multiple infrared photons. See also *Blackbody infrared radiative dissociation (BIRD)*. From [173-175].

### 217. infračervená multifotonová disociace (IRMPD)

Disociace reagujícího iontu v důsledku absorpce několika infračervených fotonů. Viz také *infračervená fotodisociace zářením černého tělesa (BIRD)*. Citace [173-175].

### 218. in-source collisionally activated dissociation

See *in-source collision-induced dissociation*.

### 218. kolizně aktivovaná disociace ve zdroji

Viz *kolizně indukovaná disociace ve zdroji*.

### 219. in-source collision-induced dissociation

#### in-source collisionally activated dissociation

Deprecated: capillary exit fragmentation, cone voltage dissociation.

Dissociation of an *ion* as a result of *collisional excitation* during ion transfer from an atmospheric pressure *ion source* to the vacuum chamber of the *mass spectrometer*.

*Note 1:* This process is similar to *ion desolvation* but uses higher collision energy.

*Note 2:* Terms such as *cone voltage dissociation* and *capillary exit fragmentation* are design-specific versions of this term, and are deprecated. From [176].

### 219. kolizně indukovaná disociace ve zdroji

Nedoporučuje se: fragmentace na konci kapiláry, disociace napětím na kuželu.

Disociace iontu jako důsledek *kolizní excitace* v průběhu přenosu iontu z oblasti iontového zdroje s normálním tlakem do vakuové komory *hmotnostního spektrometru*.

*Poznámka 1:* Tento proces je podobný *iontové desolvaci*, ale využívá vyšších

kolizních energií.

*Poznámka 2:* Pojmy jako *disociace napětím na kuželu* a *fragmentace na konci kapiláry* jsou odvozeny od konstrukčních prvků a nedoporučují se. Citace [176].

## 220. intensity relative to base peak (in mass spectrometry) relative intensity (in mass spectrometry)

Ratio of intensity of a resolved *peak* to the intensity of the resolved peak that has the greatest intensity (*base peak*). This ratio is generally measured as the normalized ratio of the heights of the respective *peaks* in the *mass spectrum*, with the height of the base peak taken as 100.

*Note:* Intensity is a measure of detector response and should not be used to describe the abundance of ions.

From [5,6].

### 220. relativní intenzita (v hmotnostní spektrometrii)

Poměr intenzity rozlišeného *píku* ku intenzitě rozlišeného píku, který má ve spektru nejvyšší intenzitu (*základní pík*). Tento poměr je obecně měřen jako normalizovaný poměr výšek obou píků v *hmotnostním spektru* s tím, že výška základního píku je brána jako 100.

*Poznámka:* Intenzita je mírou odpovědi detektoru a neměla by být používána k popisu zastoupení iontů (iontočtu).

Citace [5,6].

## 221. interaction distance

Farthest distance of approach of two particles at which it is discernable that they will not pass at the *impact parameter*. From [5,6].

### 221. interakční vzdálenost

Nejzazší vzdálenost přiblížení dvou částic, při které je zřejmé, že se neminou v *parametru srážky*. Citace [5,6].

## 222. interference

Systematic error in the measurement of a signal caused by the presence of contaminants in a sample. From [5,6].

### 222. interference

Systematická chyba v měření signálu způsobená přítomností nečistoty ve vzorku. Citace [5,6].

*Pozn. překl.* Takto je chápán termín interference v hmotnostní spektrometrii. Interference může v optice či v akustice znamenat skládání vlnění.

## 223. internal fragment

*Fragment ion* of a peptide *ion* precursor formed by a double backbone cleavage that contains neither the original C- or N-terminal residues. Typically a combination of b- and y-type cleavages or occasionally an a- and y-type combination. From [177].

### 223. vnitřní fragment

*Fragmentový ion* vzniklý z peptidového prekurzorového iontu dvojitým štěpením hlavního řetězce, který neobsahuje ani původní C- či N-konec. Typicky

kombinace štěpení na ionty typu b a y nebo v některých případech kombinace štěpení na ionty typu a a y. Citace [177].

#### 224. internal standard

See *surrogate internal standard*.

#### 224. vnitřní standard

Viz *chemicky podobný vnitřní standard*.

#### 225. ion

Atomic, molecular, or radical species with a non-zero net electric charge. From [6].

#### 225. ion

Atomární, molekulární nebo radikálová částice nesoucí celkový nenulový elektrický náboj. Citace [6].

#### 226. ion collector

Device for the capture of selected *ions* such as a *Faraday cup collector* or an *electron multiplier*. From [6].

#### 226. iontový kolektor

Zařízení pro záchyt vybraných iontů, např. *Faradayův pohár* nebo *elektronový násobič*. Citace [6].

#### 227. ion cyclotron resonance-mass spectrometer (ICR-MS)

*Mass spectrometer* in which the *ions* to be detected, with a selected value of  $m/z$ , absorb energy through the effect of a high-frequency electric field and a constant magnetic field perpendicular to the electric field. Maximum energy is gained by the ions that satisfy the cyclotron resonance condition and as a result they are separated from ions of different  $m/z$ . See also *Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometer (FT-ICR-MS)*. From [5,6].

#### 227. hmotnostní spektrometr s iontovou cyklotronovou rezonancí (ICR-MS)

Hmotnostní spektrometr, ve kterém detekované ionty se zvolenou  $m/z$  absorbují energii prostřednictvím působení vysokofrekvenčního elektrického pole a konstantního magnetického pole kolmého na pole elektrické. Ionty, které splňují podmínky cyklotronové rezonance, získají maximum energie a ve výsledku jsou odděleny od iontů s jiným  $m/z$ . Viz také *hmotnostní spektrometr s iontovou cyklotronovou rezonancí s Fourierovou transformací (FT-ICR)*. Citace [5,6].

#### 228. ion desolvation (in mass spectrometry)

Removal of solvent molecules clustered around a gas-phase *ion* by means of heating and/or collisions with gas molecules. From [176].

#### 228. desolvatace iontů (v hmotnostní spektrometrii)

Odstranění molekul rozpouštědla tvořících klastr okolo iontu v plynné fázi působením tepla anebo kolizemi s molekulami plynu. Citace [176].

#### 229. ion energy loss spectrum

Spectrum that shows the loss of translational energy of *ions* involved in

*ion/neutral reactions*. See also *ion kinetic energy spectrometry (IKES)*, *mass-analyzed ion kinetic energy spectrometry (MIKES)*. From [5,6].

### **229. spektrum ztrát iontové energie**

Spektrum, které ukazuje ztráty translační energie iontů při *iontově-neutrálových reakcích*. Viz také *spektrum kinetických energií iontů (IKES)*, *spektrometrie hmotnostní analýzy kinetických energií iontů (MIKES)*. Citace [5,6].

### **230. ion enhancement ionization enhancement**

Phenomenon in which the *ionization efficiency* of a compound is increased by the presence of another compound.

*Note*: The effect is most significant in *electrospray ionization* but is also observed in *atmospheric pressure chemical ionization* and to a lesser extent in other ionization methods. See also *ion suppression*, *matrix effects*. From [178].

### **230. zesílení ionizace**

Jev, při kterém je *účinnost ionizace* sloučeniny zvýšena přítomností jiné sloučeniny.

*Poznámka*: Tento efekt je nejvýraznější při *ionizaci elektrosprejem*, ale je také pozorován při *chemické ionizaci za atmosférického tlaku* a v menším rozsahu při jiných ionizačních metodách. Viz také *potlačení ionizace*, *matricové efekty*. Citace [178].

### **231. ion evaporation model**

Mechanism for production of gas-phase *ions* from highly charged fine liquid droplets as in *electrospray ionization* that involves direct ejection of the ions from the droplet surface.

*Note*: This mechanism is thought to be dominant for smaller molecules. See also *charged residue model*. From [179,180].

### **231. model odpařování iontů**

Mechanismus vzniku iontů v plynné fázi z vysoce nabitých kapiček kapaliny jako u ionizace elektrosprejem, který zahrnuje přímé vypuzování iontů z povrchu kapek.

*Poznámka*: Tento mechanismus je pravděpodobně dominantní pro malé molekuly. Viz také *model zbytkového náboje*. Citace [179,180].

### **232. ion funnel**

Series of stacked ring electrodes with progressively decreasing inner diameter to which a combined radio frequency and fixed potential is applied. The resulting field focuses *ions* travelling along the central axis. From [181].

### **232. iontová nálevková čočka**

Sada za sebou uspořádaných kruhových elektrod s progresivně klesajícím vnitřním průměrem, na kterou je vložena kombinace radiofrekvenčního a fixního napětí. Výsledné pole zaostřuje ionty putující podél středové osy. Citace [181].

### **233. ion gate**

Set of plates or grid of wires in an *ion mobility spectrometer*, *time-of-flight mass*

*spectrometer*, or other *mass spectrometer* that is used to apply a pulsed electric field with the purpose of selectively deflecting charged particles. See also *mass gate*. From [182].

### **233. iontový selektor** **iontová brána**

Sada destiček či drátěných mřížek v *iontovém mobilním spektrometru*, *hmotnostním spektrometru s analyzátozem doby letu* nebo v jiném *hmotnostním spektrometru*, která slouží k aplikaci pulzu elektrického pole za účelem odklonění nabitých částic. Viz *hmotnostní selektor*. Citace [182].

### **234. ionic dissociation**

Dissociation of an *ion* into another ion of lower mass and one or more neutral or ions with a lower charge. From [5,6].

### **234. disociace iontů**

Disociace iontu na další *ion* s nižší hmotností a jednu nebo více neutrálních částic nebo iontů s nižším nábojem. Citace [5,6].

### **235. ion/ion reaction**

Reaction between two *ions*, generally of opposite polarity.

*Note:* The hyphenated term *ion-ion reaction* is superseded. From [183].

### **235. iontově-iontová reakce**

Reakce mezi dvěma ionty, obvykle opačné polarity.

*Poznámka:* Sporná varianta v češtině neexistuje, čeština používá lomítko i spojovník jinak. Citace [183].

### **236. ionization efficiency**

Ratio of the number of *ions* generated to the number of molecules consumed in the *ion source* of a *mass spectrometer*.

*Note 1:* The method for estimating the number of molecules consumed must always be clearly stated.

*Note 2:* In some older literature the ionization efficiency is defined as the fraction of electrons or photons that ionize a fixed number of molecules. The *ionization efficiency* varies with both the energy and the number of the ionizing entities, and in such cases an *ionization efficiency curve* can provide useful thermochemical information.

*Note 3:* The ionization efficiency strictly refers to the ionization events in the ion source. The fraction of molecules that are ionized and are subsequently detected also depends on the detection sensitivity of the instrument used.

Revised from [5,6] using additional information from [26,184].

### **236. účinnost ionizace**

Poměr počtu vzniklých iontů k počtu molekul spotřebovaných se v *iontovém zdroji hmotnostního spektrometru*.

*Poznámka 1:* Metoda použitá k určení počtu vyskytujících se molekul musí být vždy jasně definována.

*Poznámka 2:* V některé starší literatuře je účinnost ionizace definována jako podíl elektronů či fotonů, které ionizují daný počet molekul. *Účinnost ionizace* se

mění jak s energií, tak i s počtem ionizujících se entit, a v takových případech *křivka ionizační účinnosti* může poskytnout užitečné termochemické informace.

*Poznámka 3:* Účinnost ionizace odpovídá pouze ionizačním jevům v iontovém zdroji. Podíl molekul, které jsou ionizovány a následně detekovány, také záleží na citlivosti detekce použitého přístroje.

Upraveno podle [5,6] s pomocí doplňujících informací z [26, 184].

### 237. ionization efficiency curve

*Ionization efficiency as a function of the energy of the electrons or photons used to produce ionization of a fixed number of molecules. From [5,6].*

### 237. křivka ionizační účinnosti

*Účinnost ionizace* jako funkce energie elektronů nebo fotonů užitých k ionizaci daného počtu molekul. Citace [5,6].

### 238. ionization energy, $E_i$

Deprecated: ionization potential.

Minimum energy required to remove an electron from a neutral atom or molecule in its ground state.

*Note 1:* *Adiabatic ionization energy* refers to the formation of the *molecular ion* in its ground vibrational state and *vertical ionization energy* applies to the transition to the molecular ion without change in geometry.

*Note 2:* This quantity was formerly called *ionization potential*.

*Note 3:* Second ionization energy is the energy required to remove the second electron from the singly charged *ion*. From [5,6].

### 238. ionizační energie, $E_i$

Nedoporučené: ionizační potenciál.

Minimální energie potřebná pro odebrání elektronu z neutrálního atomu nebo molekuly v základním stavu.

*Poznámka 1:* Adiabatická ionizační energie se vztahuje k tvorbě molekulového iontu v základním vibračním stavu a vertikální ionizační energie k přechodu na molekulový ion beze změny geometrie.

*Poznámka 2:* Tato veličina se dříve nazývala *ionizační potenciál*.

*Poznámka 3:* Druhotná ionizační energie je energie potřebná k odstranění druhého elektronu z jedenkrát nabitého iontu. Citace [5,6].

### 239. ionization enhancement

*See ion enhancement.*

239. Sporná varianta v češtině neexistuje.

### 240. ionization potential

*This term is deprecated. See ionization energy.*

### 240. ionizační potenciál

Tento termín se nedoporučuje. Viz *ionizační energie*.

### 241. ionization suppression

*See ion suppression.*



**241.** Sporná varianta v češtině neexistuje.

**242. ionizing collision** (in mass spectrometry)

Reaction of an *ion* with a neutral in which one or more electrons are removed from either the *ion* or neutral to form free electrons.

*Note 1:* This term has come to be used to describe collisions of fast-moving ions with a neutral in which the neutral is ionized with no change in the number of charges carried by the ion.

*Note 2:* Care should be taken when this term is used to emphasize whether or not *charge stripping* of the ion has taken place. See also *charge stripping reaction*.

From [5,6].

**242. ionizující kolize (v hmotnostní spektrometrii)**

Reakce iontu s neutrální částicí, při které dojde k odnětí jednoho či více elektronů ať už z iontu nebo neutrální částice za vzniku volných elektronů.

*Poznámka 1:* Tento pojem se začal používat k popisu srážek rychle se pohybujících iontů s neutrálními částicemi, při kterých se neutrální částice ionizuje beze změny počtu nábojů nesených iontem.

*Poznámka 2:* Je třeba dávat pozor, je-li tento pojem používán ke zdůraznění toho, zda došlo k *odnětí náboje* iontu. Viz také *reakce s odnětím náboje*.

Citace [5,6].

**243. ion kinetic energy spectrum (IKES)**

Spectrum obtained when a beam of *ions* is separated according to the translational energy-to-charge ratios of the ions contained in it.

*Note 1:* A radial electric field ( $E$ ) achieves separation of the various ionic species in this way.

*Note 2:* In this context, kinetic energy is interpreted as translational, rather than vibrational or rotational kinetic energy. See also *ion energy loss spectrum, mass-analyzed ion kinetic energy spectrometry (MIKES)*.

From [5,6].

**243. spektrum kinetických energií iontů (IKES)**

Spektrum získané separací proudu iontů podle poměru jejich translační energie ku nábojovému číslu těchto iontů.

*Poznámka 1:* Radiální elektrické pole ( $E$ ) dosahuje touto cestou separace různých iontových částic.

*Poznámka 2:* V těchto souvislostech je kinetická energie chápána jako translační spíše než jako vibrační nebo rotační. Viz také *spektrum ztrát iontové energie, spektrometrie hmotnostní analýzy kinetických energií iontů (MIKES)*.

Citace [5,6].

**244. ion mobility spectrometry (IMS)**

Separation of *ions* according to their velocity through a *buffer gas* under the influence of an electric field. From [185,186]. See also *high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry (FAIMS)*.

**244. iontová mobilitní spektrometrie (IMS)**

Separace iontů podle jejich rychlosti průletu *tlumivým plynem* v elektrickém poli. Citace [185,186]. Viz také *iontová mobilitní spektrometrie s vysokonapěťovou asymetrickou vlnovou funkcí (FAIMS)*.

#### 245. ion/molecule reaction

*Ion/neutral reaction* in which the neutral is a molecule.

*Note:* The hyphenated formulation of this term, *ion-molecule reaction*, is deprecated; the hyphen suggests a reaction of a species that is both an ion and a molecule and is not the intended meaning.

See also *ion/neutral reaction*.

From [5,6].

#### 245. iontově-molekulová reakce

Iontově-neutrálková reakce, ve které jsou neutrální částice molekulou.

*Poznámka:* Sporná varianta v češtině neexistuje. V češtině se nedoporučuje používat pojem *ion-molekulová reakce*, protože jde o anglicismus. Nedoporučuje se ani *reakce ion/molekula*, neboť čeština užívá lomítko k označení alternativ, ani *reakce ion-molekula*, protože spojovník se v tomto případě používá k vyjádření ekvivalence.

Viz také *iontově-neutrálková reakce*.

Citace [5,6].

#### 246. ion/neutral complex

Weakly bound species formed from an *ion* and neutral.

*Note 1:* In the context of some unimolecular ion dissociations, these complexes are particular types of transition states or local energy minima that lie between *precursor ions* and *product ions* on the reaction coordinate.

*Note 2:* The hyphenated formulation of this term, *ion-neutral complex*, is deprecated; the hyphen suggests a reaction of a species that is both an ion and a molecule and is not the intended meaning.

See also *adduct ion*.

From [187].

#### 246. iontově-neutrálkový komplex

Slabě vázaná částice tvořená *iontem* a neutrální částicí.

*Poznámka 1:* V kontextu některých monomolekulových disociací iontů, tyto komplexy jsou určitým druhem tranzitního stavu, který se nachází u některých iontových reakcí na reakční koordinátě mezi *prekurzorem* a *produktovým iontem*.

*Poznámka 2:* Sporná varianta v češtině neexistuje.

Viz také *aduktový ion*.

Citace [187].

#### 247. ion/neutral reaction

Process wherein an ion interacts with a neutral reactant to produce either chemically different species or changes in the internal energy of one or both of the reactants. See also *ion/molecule reaction*. From [5,6].

#### 247. iontově-neutrálková reakce

Proces, ve kterém ion interaguje s neutrální částicí za tvorby buď chemicky jiné částice, nebo změny vnitřní energie jedné nebo obou reaktantů. Viz také *iontově-molekulové reakce*. Citace [5,6].

#### 248. ion/neutral exchange reaction

Reaction of a gas-phase *ion* with a neutral to produce a different neutral and ion as the products. See also *ion/neutral reaction*. From [5,6].

#### 248. iontově-neutrállová záměnná reakce

Reakce iontu v plynné fázi s neutrální částicí za vytvoření jiné neutrální částice a iontu jako produktů. Viz také *iontově-neutrállová reakce*. Citace [5,6].

#### 249. ion optics

Devices designed to control the formation, focusing, and deflection of charged particle beams in a vacuum under the influence of electric and magnetic fields. See also *mass spectrometer focusing system*. From [188].

#### 249. iontová optika

Zařízení navržené k regulaci tvorby, zaostření a odklonění svazků nabitých částic ve vakuu využívající elektrických a magnetických polí. Viz také *hmotnostně spektrometrický fokusační systém*. Citace [188].

#### 250. ion pair formation (in mass spectrometry)

Gas-phase reaction of a molecule to form both positive *ion* and negative ion fragments among the products. From [5,6].

#### 250. tvorba iontového páru (v hmotnostní spektrometrii)

Molekulová reakce v plynné fázi, při níž se mezi produkty mimo jiné nacházejí jak kladně nabitě, tak i záporně nabitě iontové fragmenty. Citace [5,6].

#### 251. ion source

Region in a *mass spectrometer* where gas-phase *ions* are produced. Revised from [6] using additional information from [189].

#### 251. iontový zdroj

Část *hmotnostního spektrometru*, ve které jsou produkovány ionty v plynné fázi. Upraveno podle [6] s pomocí doplňujících informací z [189].

#### 252. ion suppression ionization suppression

Phenomenon in which the *ionization efficiency* of a species is lowered by the presence of a different species.

*Note:* The effect is most significant in *electrospray ionization* but is also observed in *atmospheric pressure chemical ionization* and to a lesser extent in other ionization methods. See also *ion enhancement*, *matrix effects*. From [178].

#### 252. vzájemné potlačení ionizace

Jev, při kterém je snížena *účinnost ionizace* částice přítomností jiných částic.

*Poznámka:* Tento efekt je nejvýznamnější při *ionizaci elektrosprejem*, ale uplatňuje se také při *chemické ionizaci za atmosférického tlaku* a v menším rozsahu při jiných ionizačních metodách. Viz také *zesílení ionizace*, *matricové*

efekty. Citace [178].

### 253. ion-to-photon detector

Detector in which *ions* strike a *conversion dynode* to produce electrons that in turn strike a phosphor and the resulting photons are detected by a photomultiplier. See also *Daly detector*. From [190].

### 253. iontově-fotonový detektor

Detektor, ve kterém ionty dopadnou na *konverzní dynodu* a vyprodukují elektrony, které poté zasáhnou fotocitlivou vrstvu, a vzniklé fotony jsou detekovány fotonásobičem. Viz též *Dalyho detektor*. Citace [190].

### 254. ion trap (IT)

Device for spatially confining *ions* using electric and magnetic fields alone or in combination. Revised from [5,6] using additional information from [15,191].

### 254. iontová past (IT)

Zařízení, které uzavírá ionty v prostoru pomocí elektrických či magnetických polí nebo jejich kombinací. Upraveno podle [5,6] s pomocí doplňujících informací z [15,191].

### 255. isobar (in mass spectrometry)

Atomic or molecular species with the same *nominal mass* but different *exact masses*.

*Note 1:* In the case of atoms, this is equivalent to different nuclides of equal *mass number*.

*Note 2:* *Isobaric ions* are *isobars* that all carry an electric charge.

*Note 3:* This term is used in meteorology to denote lines connecting points of equal atmospheric pressure. Revised from [6].

### 255. izobar (v hmotnostní spektrometrii)

Atomární nebo molekulární částice se stejnou *nominální hmotností*, ale s rozdílnými *přesnými hmotnostmi*.

*Poznámka 1:* V případě atomů odpovídá různým nuklidům se stejným *nukleonovým číslem*.

*Poznámka 2:* *Izobarické ionty* jsou izobary, které nesou elektrický náboj.

*Poznámka 3:* V češtině je homonymem k pojmu, označujícím skupiny nuklidů různých prvků (také mužský rod), které mají stejný počet nukleonů; není homonymem k meteorologickému pojmu izobara (ženský rod). Upraveno podle [6].

### 256. isobaric ion

See *isobar (in mass spectrometry)*.

### 256. izobarický ion

Viz *izobar (v hmotnostní spektrometrii)*.

### 257. isobaric tag for relative and absolute quantitation (iTRAQ)

Chemical labeling reagents used for relative or absolute quantitation in proteomics, based on covalent labeling of the N-terminus and side-chain amines

of peptides from protein digestions with tags of varying mass. From [192,193].

### **257. izobarické značky pro relativní a absolutní kvantifikaci (iTRAQ)**

Chemické značící reagenty používané pro relativní i absolutní kvantifikaci v proteomice, založené na kovalentním značení N-konce a aminoskupin v postranních řetězcích peptidů vzniklých proteolýzou se značkami s proměnnou hmotností. Citace [192,193].

### **258. isotope cluster**

Group of peaks representing *ions* of the same elemental composition, but different isotopic compositions. See also *isotope pattern*. From [24].

### **258. izotopový klastr**

Skupina píků představující ionty stejného prvkového složení, ale různých izotopových složení. Viz také *izotopový vzor*. Citace [24].

### **259. isotope coded affinity tag (ICAT)**

Chemical labeling reagents used for relative quantitation in proteomics, consisting of a reactive group capable of labeling a defined amino acid side-chain, an isotopically coded linker, and a tag for the affinity isolation of labeled proteins and peptides. From [194].

### **259. afinitní značka s izotopovým tříděním (ICAT)**

Chemická značící činidla používaná pro relativní kvantifikaci v proteomice, sestávající se z reaktivní skupiny schopné označit postranní řetězec určité aminokyseliny, spojky izotopovými značkami a afinitního ligandu pro izolaci označených proteinů a peptidů. Citace [194].

### **260. isotope delta**

See *relative isotope-ratio difference*.

### **260. izotopová změna**

Viz *relativní rozdíl izotopových poměrů*.

### **261. isotope dilution mass spectrometry (IDMS)**

Quantitative *mass spectrometry* technique in which an isotopically enriched compound is used as a *surrogate internal standard*. From [195].

### **261. izotopová zředovací hmotnostní spektrometrie (ID-MS)**

Kvantitativní *hmotnostně spektrometrická* technika, ve které je izotopově obohacená sloučenina použita jako *chemicky podobný vnitřní standard*. Citace [195].

### **262. isotope-number ratio**

See *isotope ratio*.

### **262. poměrné izotopové číslo**

Viz *izotopový poměr*.

### **263. isotope pattern**

Set of peaks related to *ions* with the same chemical formula but containing different isotopes that has a particular pattern associated with the relative

abundance of the isotopes. See also *isotope cluster*. From [5,6].

### **263. izotopový vzor**

Sada píků vztahujících se k iontům se stejným chemickým vzorcem, ale obsahujících různé izotopy, které mají určitý vzor spojený s relativním zastoupením izotopů. Viz také *izotopový klastr*. Citace [5,6].

### **264. isotope ratio, *R* isotope-number ratio**

Ratio of the number of atoms of one isotope to the number of atoms of another isotope of the same chemical element in the same system.

*Note:* Usually the minor, less abundant isotope to the major, most abundant isotope, for example,  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ . From [196,197].

### **264. izotopový poměr, *R* poměrné izotopové číslo**

Poměr počtu atomů jednoho izotopu k počtu atomů jiného izotopu stejného chemického prvku ve stejném systému.

*Poznámka:* Obvykle se vyjadřuje jako poměr menšinového, méně hojného izotopu, k většinovému, nejhojnějšímu izotopu, např.  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ . Citace [196,197].

### **265. isotope ratio mass spectrometry (IRMS) stable isotope mass spectrometry**

Measurement and study of the relative abundances of the different isotopes of an element in a material using a *mass spectrometer*. From [198].

### **265. hmotnostní spektrometrie izotopových poměrů**

Měření a studium relativního zastoupení různých izotopů prvku v materiálu pomocí *hmotnostního spektrometru*. Citace [198].

### **266. isotopically enriched ion**

*Ion* enriched in an isotope in which the abundance of the particular nuclide is increased above the abundance at which it occurs in a reference, usually a naturally occurring sample. From [5,6].

### **266. izotopově obohacený ion**

*Ion*, obohacený o izotop, ve kterém je zastoupení určitého nuklidu zvýšeno nad jeho zastoupení v referenci, obvykle v přirozeně se vyskytujícím vzorku. Citace [5,6].

### **267. isotopic ion**

Any *ion* containing one or more of the less abundant naturally occurring isotopes of the elements that make up its structure.

*Note:* For example,  $\text{CH}_2\text{D}^+$ . From [5,6].

### **267. izotopový ion**

Jakýkoliv *ion* obsahující v prvcích, jež tvoří jeho strukturu, jeden nebo více izotopů s nízkým přirozeným zastoupením.

*Poznámka:* Například  $\text{CH}_2\text{D}^+$ . Citace [5,6].

### **268. isotopic scrambling**

Complete random mixing of isotopes between specified positions in an *ion* or neutral to achieve an equilibrium distribution of isotopes.

*Note:* In *mass spectrometry*, this term usually refers to the random mixing of isotopes in isolated ions that were formed with a fixed isotopic composition. See also *partial isotopic scrambling*. From [5,6].

### **268. izotopová redistribuce**

Zcela náhodná redistribuce izotopů mezi specifickými pozicemi v iontu nebo neutrální molekule s výsledným rovnovážným rozdělením izotopů.

*Poznámka:* V *hmotnostní spektrometrii* je tento pojem obvykle používán ve smyslu náhodné redistribuce izotopů v izolovaných iontech, které byly vytvořeny s fixním izotopovým složením. Viz také *částečná izotopová redistribuce*. Citace [5,6].

### **269. isotopolog ions**

*Ions* that differ only in the isotopic composition of one or more of the constituent atoms.

*Note 1:* For example,  $\text{CH}_4^{+}$  and  $\text{CH}_3\text{D}^{+}$  or  $^{10}\text{BF}_3^{+}$  and  $^{11}\text{BF}_3^{+}$ , or the ions forming an *isotope cluster* corresponding to the *natural isotopic abundances* of the constituent atoms.

*Note 2:* Isotopolog is an abbreviation of *isotopic homolog*. From [6,10].

### **269. izotopologní ionty**

Ionty, jež se liší v izotopovém složení jednoho či více konstituujících atomů.

*Poznámka 1:* Například  $\text{CH}_4^{+}$  a  $\text{CH}_3\text{D}^{+}$  nebo  $^{10}\text{BF}_3^{+}$  a  $^{11}\text{BF}_3^{+}$  nebo ionty tvořící *izotopový klastr* odpovídající *přirozenému zastoupení izotopů* u konstituujících atomů.

*Poznámka 2:* Pojem izotopolog je zkratkou z *izotopový homolog*. Citace [6,10].

### **270. isotopomeric ion**

Isomeric *ions* having the same numbers of each isotopic atom but differing in their positions within the ion.

*Note 1:* Examples are  $\text{D}_2\text{C}=\text{CH}_2^{+}$  and  $\text{HDC}=\text{CHD}^{+}$ .

*Note 2:* Isotopomeric ions can be either configurational isomers in which two atomic isotopes exchange positions or isotopic stereoisomers.

*Note 3:* Isotopomer is an abbreviation of isotopic isomer. From [6,10].

### **270. izotopomerní ionty**

Izomerní ionty mající stejné zastoupení všech izotopů prvků, ale lišící se v jejich poloze.

*Poznámka 1:* Například  $\text{D}_2\text{C}=\text{CH}_2^{+}$  a  $\text{HDC}=\text{CHD}^{+}$ .

*Poznámka 2:* Izotopomerní ionty mohou být buď konfiguračními izomery, ve kterých si dva atomy izotopů vymění polohu, nebo izotopové stereoizomery.

*Poznámka 3:* Pojem izotopomer je zkratkou z *izotopový izomer*. Citace [6,10].

### **271. jet separator**

Gas chromatograph-to-mass spectrometer interface where the gas chromatography effluent expands into a lower-pressure region and then through a downstream orifice. The low mass carrier gas molecules diffuse from the jet

axis, leaving the sample stream enriched in the heavier analyte molecules. See also *momentum separator*. From [199,200].

### **271. tryskový separátor**

Rozhraní mezi plynovým chromatografem a *hmotnostním spektrometrem*, ve kterém efluent z plynové chromatografie expanduje do oblasti s nízkým tlakem a pokračuje do vstupního otvoru spektrometru. Lehké částice nosného plynu difundují z osy proudu částic, zanechávajíce vzorek obohacený o těžší molekuly analytu. Viz také *hybnostní separátor*. Citace [199,200].

### **272. kinetic energy release (KER)**

Translational energy of fragments resulting from dissociation of a *metastable ion* measured relative to the center-of-mass.

*Note:* In this context, kinetic energy is interpreted as translational, rather than vibrational or rotational, kinetic energy. See also *kinetic energy release distribution (KERD)*. From [201].

### **272. uvolnění kinetické energie (KER)**

Translační kinetická energie fragmentů vzniklá disociací *metastabilního iontu* měřená poměrně k barycentru reakčního systému.

*Poznámka:* V těchto souvislostech je kinetická energie chápána jako translační spíše než jako vibrační nebo rotační. Viz též *distribuce uvolnění kinetické energie (KERD)*. Citace [201].

### **273. kinetic energy release distribution (KERD)**

Distribution of values of translational energies in the center-of-mass reference for an ensemble of *metastable ions* undergoing a specific dissociation reaction.

*Note:* In this context, kinetic energy is interpreted as translational, rather than vibrational or rotational, kinetic energy. See also *mass-analyzed ion kinetic energy spectrometry (MIKES)*. From [201].

### **273. distribuce uvolnění kinetické energie (KERD)**

Distribuce hodnot translační kinetické energie ve vztahu k barycentru uvolněné uskupení *metastabilních iontů* podrobených určité disociační reakci.

*Poznámka:* V těchto souvislostech je kinetická energie chápána jako translační spíše než jako vibrační nebo rotační. Viz též *spektrometrie hmotnostní analýzy kinetických energií iontů (MIKES)*. Citace [201].

### **274. kinetic method**

Method for the determination of *ion* thermodynamic quantities by a procedure in which the relative probabilities of competing *ionic dissociations* are measured via the relative abundances of the reaction products.

*Note:* The extended kinetic method takes the associated entropy changes into account. Revised from [6].

### **274. kinetická metoda**

Metoda ke stanovení *iontových* termodynamických veličin postupem, ve kterém jsou měřeny relativní pravděpodobnosti soutěžících *iontových fragmentací* pomocí relativních zastoupení reakčních produktů.

*Poznámka:* Rozšířená kinetická metoda uvažuje navíc příslušné změny



entropie. Upraveno podle [6].

### 275. kinetic shift

Excess energy above the thermochemical threshold required to observe dissociation of a *precursor ion* within the timeframe of a particular *mass spectrometry* experiment.

*Note:* Kinetic shifts are important when thermochemical quantities are deduced from *appearance energy* measurements. From [203].

### 275. kinetický posun

Energie překračující termochemickou prahovou hodnotu požadovanou pro pozorování fragmentace *prekurzorového iontu* v časovém horizontu konkrétního *hmotnostně spektrometrického* experimentu.

*Poznámka:* Kinetické posuny jsou důležité při odvozování termochemických hodnot z měření *prahové energie pro vznik iontu*. Citace [203].

### 276. Kingdon trap

*Ion* trapping device that consists of an outer barrel-like electrode and a coaxial inner spindle-like electrode that form an electrostatic field with a quadrupolar logarithmic potential distribution.

*Note 1:* The frequency of harmonic oscillations of the orbitally trapped ions along the axis of the electrostatic field is independent of the ion velocity and is inversely proportional to the square root of  $m/z$  so that the trap can be operated as a mass analyzer using *image current detection* and Fourier transformation of the time domain signal.

*Note 2:* The trademarked term *Orbitrap* has been used to describe a Kingdon trap used as a *mass spectrometer*. From [203].

### 276. Kingdonova past orbitální past

Zařízení typu iontové pasti, které se sestává z vnější sudovité elektrody a vnitřní koaxiální vřetenovité elektrody, které formují elektrostatické pole s kvadrilogarithmickou distribucí potenciálu.

*Poznámka 1:* Frekvence harmonických oscilací iontů v orbitální iontové pasti podél osy elektrostatického pole je nezávislá na rychlosti iontu a je nepřímo úměrná druhé odmocnině z  $m/z$ , takže past může být používána jako hmotnostní analyzátor s použitím Fourierovy transformace indukovaného proudu v časové doméně.

*Poznámka 2:* Obchodní značka *Orbitrap* je využívána jako označení Kingdonovy pasti používané jako hmotnostní spektrometr. Citace [203].

### 277. label-free quantitation

Method for determining the concentration of proteins through a combination of protein digestion and *liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS)* without relying on stable isotope labeling. Protein quantification is achieved by measuring the signal intensity of peptide ions corresponding to a protein or by counting and comparing the number of fragment *mass spectra* identifying peptides of a given protein. From [204].

### **277. přímá kvantifikace**

Metoda stanovení koncentrace proteinů pomocí kombinace jejich štěpení a spojení *kapalinové chromatografie-hmotnostní spektrometrie* (LC-MS) bez značení pomocí stabilních izotopů. Kvantifikace proteinu se provádí měřením intenzity signálu peptidových iontů pocházejících z proteinu nebo počítáním a porovnáním počtu *hmotnostních spekter* fragmentů identifikujících peptidy daného proteinu. Citace [204].

### **278. laser ablation**

Removal of material from a solid or liquid sample using energy delivered by a short laser pulse to form gas-phase species and particles. See also *laser desorption*. From [205].

### **278. laserová ablace**

Odstranění materiálu z pevného nebo kapalného vzorku pomocí energie dodané krátkým laserovým pulsem za vzniku plynných částic. Viz také *laserová desorpce*. Citace [205].

### **279. laser desorption (LD)**

Formation of gas-phase species from a solid or liquid sample surface upon activation using a short pulse of photons from a laser. See also *laser ablation*. From [206].

### **279. laserová desorpce (LD)**

Tvorba plynných částic z povrchu pevného nebo kapalného vzorku po aktivaci pomocí krátkého pulzu fotonů z laseru. Viz také *laserová ablace*. Citace [206].

### **280. laser desorption ionization (LDI)**

Formation of gas-phase *ions* by the interaction of a laser with a solid or liquid material. See also *matrix-assisted laser desorption/ionization*. From [207].

### **280. laserová desorpce a ionizace (LDI)**

Tvorba iontů v plynné fázi interakcí laseru s pevným nebo kapalným materiálem. Viz také *laserová desorpce a ionizace za účasti matrice*. Citace [207].

### **281. laser ionization (LI)**

Formation of *ions* through the interaction of photons from a laser with solid or liquid materials or with gas-phase atoms or molecules. See also *laser desorption ionization (LDI)*, *photoionization*. From [5,6].

### **281. laserová ionizace (LI)**

Tvorba iontů interakcí fotonů z laseru s pevnými nebo kapalnými látkami nebo s atomy či molekulami v plynné fázi. Viz také *laserová desorpce a ionizace (LDI)*, *fotoionizace*. Citace [5,6].

### **282. laser microprobe mass spectrometry (LMMS)**

*Laser desorption ionization mass spectrometry*, particularly emphasizing spatially resolved composition information. From [208].

### **282. hmotnostní spektrometrie s laserovou mikrosondou (LMMS)**

*Hmotnostní spektrometrie s laserovou desorpcí a ionizací* se zvláštním důrazem

na prostorově rozlišené informace o složení. Citace [208].

### 283. linear ion trap (LIT)

Two-dimensional *Paul ion trap* in which *ions* are confined in the axial dimension by means of a static electric potential. From [209].

### 283. lineární iontová past (LIT)

Dvourozměrná *Paulova iontová past*, ve které jsou ionty udržovány ve směru osy pomocí statického elektrického potenciálu. Citace [209].

### 284. linked scan

Scan in a *tandem mass spectrometer* with two or more *m/z* analyzers or in a *sector mass spectrometer* that incorporates at least one *magnetic sector* and one *electric sector*. The analyzers and/or other electric fields are scanned simultaneously so as to preserve a predetermined relationship between scan parameters to produce a *product ion spectrum*, *precursor ion spectrum*, *constant neutral loss spectrum*, or *constant neutral mass gain spectrum*. From [5,6].

### 284. spojený sken

Záznam v *tandemovém hmotnostním spektrometru* se dvěma nebo více hmotnostními analyzátory nebo pomocí *sektorového hmotnostního spektrometru* s alespoň jedním *magnetickým* a jedním *elektrostatickým sektorem*. Analyzátory anebo jiná elektrická pole jsou snímána současně tak, aby byl zachován předem stanovený vztah mezi parametry skenu a získána *spektra produktového iontu*, *iontů prekursoru* nebo *spektra konstantních neutrálních hmotnostních ztrát či přírůstků*. Citace [5,6].

### 285. liquid chromatography-mass spectrometry (LC-MS)

#### liquid chromatography/mass spectrometry (LC/MS)

Technique by which a mixture of analytes is separated into individual components by liquid chromatography (typically high-performance liquid chromatography), followed by detection with a *mass spectrometer*.

*Note:* Either a hyphen or slash can be used to indicate combined instruments. From [210,211].

### 285. kapalinová chromatografie s hmotnostní spektrometrií (LC-MS)

Technika, kterou se směs analytů rozdělí na jednotlivé složky pomocí kapalinové chromatografie (obvykle vysokoúčinná kapalinová chromatografie), následované detekcí pomocí hmotnostního spektrometru.

*Poznámka:* Ve zkratce se používá označení LC-MS, čeština nezná využití lomítka v tomto kontextu, tedy nikoliv LC/MS. Citace [210,211].

### 286. liquid ion evaporation

*Spray ionization* interface in which droplets are dispersed from a pneumatic nebulizer toward a high potential electrode that produces a static charge on the droplets leading to *ion* formation after solvent evaporation. From [94].

### 286. tvorba iontů odpařením kapaliny

Rozhraní *sprejové ionizace*, ve kterém jsou kapičky rozptýlené z pneumického zmlžovače směrem k elektrodě s vysokým potenciálem, jež vytváří statický

náboj na kapičkách vedoucí k tvorbě iontů po odpaření rozpouštědla. Citace [94].

### 287. liquid junction interface

Means of coupling capillary electrophoresis to a *mass spectrometer* in which a liquid reservoir surrounds the separation capillary and transfer capillary to the mass spectrometer and provides electric contact for the capillary electrophoresis. From [212,213].

### 287. kapalinový spoj

Způsob spojení kapilární elektroforézy s *hmotnostním spektrometrem*, ve kterém zásobník kapaliny obklopuje separační kapiláru a převodní kapiláru vedoucí do hmotnostního spektrometru a zajišťuje elektrický kontakt pro kapilární elektroforézu. Citace [212,213].

### 288. liquid secondary ionization (LSI)

Ionization of any species by the interaction of a focused beam of *ions* or atoms with a sample that is dissolved in a solvent matrix. See also *fast atom bombardment ionization (FAB)*. From [214].

### 288. sekundární ionizace v kapalině (LSI)

Ionizace částic interakcí zaostřeného svazku iontů nebo atomů se vzorkem rozpuštěným v kapalně matrici. Viz také *ionizace ostřelováním urychlenými atomy (FAB)*. Citace [214].

### 289. liquid sheath

Flow of make-up liquid in a *sheath flow interface*. From [215-217].

### 289. přídavná kapalina

Tok přídavné kapaliny v *rozhraní s přídavným tokem*. Citace [215-217].

### 290. lock mass

Mass of an *ion* of known  $m/z$  value, derived from a suitable standard compound introduced into an *ion source* together with the sample to be analyzed, which permits real-time recalibration by correction of  $m/z$  shifts arising from instrumental drift. From [218].

### 290. kotvící $m/z$

Hmotnost iontu o známé hodnotě  $m/z$ , vytvořeného z vhodné standardní sloučeniny zaváděné do *iontového zdroje* spolu s analyzovaným vzorkem, která umožňuje v reálném čase kalibraci korekcí posunů hodnot  $m/z$  způsobených driftem hmotnostního analyzátoru. Citace [218].

### 291. low-energy collision-induced dissociation

*Collision-induced dissociation* process wherein the *precursor ion* has laboratory-frame translational energy lower than a given value, often taken to be 1 keV.

*Note:* This process can be carried out under single collision conditions but typically requires multiple collisions and the *collisional excitation* is cumulative. See also *high-energy collision-induced dissociation*. From [219].

### 291. nízkoenergetická kolizně indukovaná disociace

Kolizně indukovaný disociační proces, při kterém je translační energie *prekurzorového iontu* v laboratorním souřadném systému nižší než daná hodnota, obvykle uváděná jako 1 keV.

*Poznámka:* Tento postup se může provádět za podmínek jedné srážky, ale zpravidla vyžaduje vícenásobné srážky a kolizní excitace je kumulativní. Viz také *vysokoenergetická kolizně indukovaná disociace*. Citace [219].

## 292. lyonium ion

Cation produced by addition of a *hydron* to a solvent molecule.

*Note:* For example,  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$  and  $\text{CH}_3\text{OHD}^+$  are both lyonium ions of methanol.

See also *onium compounds*. From [6].

## 292. lyoniový ion

Kation vytvořený přidáním *hydronu* k molekule rozpouštědla.

*Poznámka:* Například  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$  i  $\text{CH}_3\text{OHD}^+$  jsou lyoniové ionty methanolu. Viz také oniové sloučeniny. Citace [6].

## 293. magnetic deflection

Deflection of an *ion* beam as a result of the motion of the ions in a magnetic field.

*Note 1:* An example is a *magnetic sector*.

*Note 2:* Generally, the direction of deflection of the ions is perpendicular to both the direction of the magnetic field and to that of the ion beam. From [5,6].

## 293. magnetické vychýlení

Vychýlení *iontového svazku* v důsledku pohybu iontů v magnetickém poli.

*Poznámka 1:* Příkladem je *magnetický sektor*.

*Poznámka 2:* Obecně platí, že směr vychýlení iontů je kolmý jak ke směru magnetického pole, tak i ke směru *iontového svazku*. Citace [5,6].

## 294. magnetic field scan

Method of producing a mass spectrum from a mono-energetic *ion* beam by varying the strength of the magnetic field in a *sector mass spectrometer*.

*Note 1:* The magnetic field scan is sometimes called B-scan, but this is a misnomer since the symbol *B* denotes the magnetic flux density. The magnetic field strength *H* in a vacuum is defined in SI units as  $H = (1/\mu_0) B - M$  where  $\mu_0$  is the magnetic constant or permeability of the vacuum and *M* the magnetization. *B* is often wrongly referred to as “magnetic field strength.”

*Note 2:* A sector magnetic field produces a momentum/charge spectrum of an ion beam, but if all ions have the same translational energy this is equivalent to a mass spectrum. The force *F* on a particle with charge *q* and velocity *v* is  $F = q(v \times B)$ .

From [5,6].

## 294. sken magnetickým polem

Způsob získání hmotnostního spektra z monoenergetického svazku iontů změnou intenzity magnetického pole v *sektorovém hmotnostním spektrometru*.

*Poznámka 1:* Záznam magnetickým polem se někdy nazývá B-sken; jde však o

nesprávný termín, jelikož symbol  $B$  označuje magnetickou indukci. Intenzita magnetického pole  $H$  je ve vakuu definována v jednotkách SI jako  $H = (1/\mu_0) B - M$ , kde  $\mu_0$  je magnetická konstanta neboli permeabilita vakua a  $M$  magnetizace.  $B$  je často nesprávně označován jako tzv. intenzita magnetického pole.

*Poznámka 2:* Sektorové magnetické pole generuje spektrum poměru hybnosti částic a náboje iontového svazku, které je ekvivalentní hmotnostnímu spektru, pokud všechny ionty mají stejnou translační energii. Síla  $F$  působící na částici s nábojem  $q$  a rychlosti  $v$  je  $F = q (v \times B)$ .

Citace [5,6].

### 295. magnetic sector

Device that produces a magnetic field perpendicular to a charged particle beam that deflects the beam to an extent that is proportional to the ratio of particle momentum and charge.

*Note:* For a mono-energetic beam, the deflection is proportional to  $m/z$ . From [5].

### 295. magnetický sektor

Zařízení, které produkuje magnetické pole kolmé na svazek nabitých částic a zakřivuje dráhu svazku. Toto zakřivení je přímo úměrné poměru hybnosti částice a náboje.

*Poznámka:* Pro monoenergetický svazek je zakřivení dráhy úměrné  $m/z$ . Citace [5].

### 296. magnetron motion

Slow rotation of the center of *cyclotron motion* around the central axis of a *Penning ion trap* that results from a drift of the cyclotron center along the electric equipotential lines perpendicular to the magnetic field direction.

*Note:* The characteristic frequency of this motion is called the magnetron frequency. From [220,221].

### 296. magnetronový pohyb

Pomalé otáčení středu *cyklotronového pohybu* kolem centrální osy *Penningovy iontové pasti*, které je způsobeno driftem středu cyklotronu podél elektrických ekvipotenciálních čar kolmých ke směru magnetického pole.

*Poznámka:* Charakteristická frekvence tohoto pohybu se nazývá magnetronová frekvence. Citace [220,221].

### 297. make-up liquid

Solvent that is mixed with the sample flow in a liquid introduction *mass spectrometry* interface in order to adjust the flow rate or solvent characteristics of the system, for example, to promote *ionization efficiency*.

From [217].

### 297. přídavná kapalina

Rozpouštědlo, které se mísí s tokem vzorku v rozhraní pro vstup tekutiny do *hmotnostního spektrometru* za účelem úpravy rychlosti průtoku nebo povahy rozpouštědlového systému, například k podpoře *ionizační účinnosti*.

Citace [217].

### 298. mass analysis

Process by which a mixture of ionic or neutral species is identified according to their  $m/z$  values (*ions*), or their aggregate atomic masses (neutrals), and their relative abundances. The analysis may be qualitative and/or quantitative. From [5,6].

### 298. hmotnostní analýza

Proces, při kterém je směs iontů nebo neutrálních částic identifikována podle jejich hodnot  $m/z$  (ionty) nebo souhrnných atomových hmotností (neutrální částice) a relativních zastoupení. Analýza může být kvalitativní anebo kvantitativní. Citace [5,6].

### 299. mass-analyzed ion kinetic energy spectrometry (MIKES)

Deprecated: direct analysis of daughter ions (DADI).

Procedure by which translational energy spectra are obtained from a *sector mass spectrometer* that incorporates at least one *magnetic sector* plus one *electric sector in reverse geometry* (a magnetic sector followed by an electric sector).

*Note 1:* In this context, kinetic energy is interpreted as translational rather than vibrational or rotational kinetic energy.

*Note 2:* The *accelerating potential*,  $V$ , and the magnetic flux density,  $B$ , are set at fixed values to  $m/z$  select the precursor *ions*, which are then allowed to dissociate or to react in a *field-free region* between the two sectors. The translational energy-to-charge ratios of the various *product ions* are analyzed by scanning the electric sector field  $E$ . The width of a product ion spectral peak is related to the *kinetic energy release distribution* for the dissociation process.

From [222].

### 299. hmotnostní spektrometrie analýzou kinetické energie iontů (MIKES)

Nedoporučuje se: přímá analýza dceřiných iontů (DADI).

Postup, ve kterém jsou hmotnostní spektra získávána pomocí *sektorového hmotnostního spektrometru* s alespoň jedním *magnetickým sektorem* následovaným jedním *elektrostatickým sektorem v obrácené geometrii* (magnetický sektor je následován elektrostatickým).

*Poznámka 1:* V této souvislosti je kinetická energie interpretována jako translační spíše než vibrační nebo rotační kinetická energie.

*Poznámka 2:* *Urychlovací potenciál*,  $V$ , magnetická indukce,  $B$ , jsou konstantní, aby byly vybrány *prekurzorové ionty* podle jejich  $m/z$ ; ty se potom rozpadnou nebo reagují v *oblasti bez pole* mezi dvěma sektory. Poměry translační energie k náboji různých *produktových iontů* jsou analyzovány skenováním intenzity elektrického pole  $E$  v elektrostatickém sektoru. Šířka píku produktového iontu souvisí s *distribucí uvolnění kinetické energie* disociačního procesu. Citace [222].

### 300. mass calibration

Means of determining  $m/z$  values of *ions* from experimentally detected signals using a theoretical or empirical relational equation.

*Note:* Most commonly this is accomplished using a computer-based data system

and a calibration file obtained from a *mass spectrum* of a compound that produces ions of known *m/z* values.

From [223]

### **300. hmotnostní kalibrace**

Způsoby stanovení hodnot *m/z* iontů z experimentálně získaných signálů pomocí teoretické nebo empirické vztažné rovnice.

*Poznámka:* Nejčastěji se provádí pomocí výpočetní techniky; kalibrační soubor je získán z *hmotnostního spektra* látek, které vytvářejí ionty o známých hodnotách *m/z*.

Citace [223].

### **301. mass chromatogram**

See *extracted ion chromatogram*.

### **301. hmotnostní chromatogram**

Viz *extrahovaný iontový chromatogram*.

### **302. mass defect (in mass spectrometry)**

Deprecated: mass excess. Difference between the nominal *mass* and the *monoisotopic mass* of an atom, molecule, or *ion*.

*Note:* *Mass defect* can be a positive or negative value dependent upon the elemental composition. From [224].

### **302. hmotnostní schodek (v hmotnostní spektrometrii)**

Nedoporučuje se: hmotnostní přebytek. Rozdíl mezi nominální *hmotností* a *monoisotopovou hmotností* atomu, molekuly nebo iontu.

*Poznámka:* *Hmotnostní schodek* může nabývat pozitivních nebo negativních hodnot v závislosti na prvkovém složení. Citace [224].

### **303. mass discrimination**

Differences in overall detection sensitivities for ions of different *m/z* values in a mass spectrum, caused by variations in *ionization efficiency*, *transmission efficiency* through the interface between the ion source and the analyzer vacuum system, analyzer, and detector response. From [225].

### **303. hmotnostní diskriminace**

Rozdíly v celkových detekčních citlivostech pro ionty o různých hodnotách *m/z* v hmotnostním spektru, způsobené změnami *ionizační účinnosti*, *transmisní účinnosti* přes rozhraní mezi iontovým zdrojem a vakuovým systémem analyzátoru, analyzátozem a odezvou detektoru. Citace [225].

### **304. mass excess**

This term is deprecated. See *mass defect*.

### **304. hmotnostní přebytek**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *hmotnostní schodek*.

### **305. mass fragmentography**

This term is deprecated. See *selected ion monitoring*.

### **305. hmotnostní fragmentografie**



Tento termín se nedoporučuje. Viz *monitorování vybraných iontů*.

### 306. mass gate

*Ion gate used to transmit ions in a given  $m/z$  range.*

*See also ion gate. From [226].*

### 306. hmotnostní selektor

*Iontový selektor používaný k přenosu iontů v daném rozsahu  $m/z$ .*

*Viz také iontový selektor. Citace [226].*

### 307. mass limit

*Value of  $m/z$  above or below which ions cannot be detected in a mass spectrometer. From [227].*

### 307. hmotnostní limit

*Hodnota  $m/z$ , nad níž nebo pod níž nemohou být ionty v hmotnostním spektrometru detekovány. Citace [227].*

### 308. mass mapping

*See peptide mass fingerprinting.*

### 308. hmotnostní mapování

*Viz peptidové hmotnostní mapování.*

### 309. mass number, $A$

*Sum of the numbers of protons and neutrons in an atom, molecule, or ion.*

*Note: When expressed as a mass in daltons, mass number is equivalent to nominal mass. From [5,6].*

### 309. nukleonové číslo, $A$ hmotnostní číslo

*Součet počtu protonů a neutronů v atomu, molekule nebo iontu.*

*Poznámka: Pokud je vyjádřeno jako hmotnost v daltonech, pak je hmotnostní číslo rovno nominální hmotnosti. Citace [5,6].*

### 310. mass peak

**peak** (in mass spectrometry)

*Localized region of relatively intense detector response in a mass spectrum when ions of a specified  $m/z$  are detected. If resolving power is insufficient two or more components of similar  $m/z$  may contribute to one unresolved mass peak.*

*Note 1: Although mass peaks are often associated with particular ions, the terms peak and ion should not be used interchangeably.*

*Note 2: Care should be used to distinguish mass spectrum peaks from chromatographic peaks in GC-MS and LC-MS. Revised from [5,6].*

### 310. hmotnostní pík

**pík (v hmotnostní spektrometrii)**

*Lokalizovaná oblast relativně intenzivní odezvy detektoru v hmotnostním spektru, kde jsou zjištěny ionty o určité hodnotě  $m/z$ . Není-li k dispozici dostatečná rozlišovací schopnost, dvě i více složek s podobnou hodnotou  $m/z$*

mohou přispět k jednomu nerozlišenému hmotnostnímu píku.

*Poznámka 1:* Ačkoli hmotnostní píky jsou často spojovány s určitými ionty, termíny *pík* a *ion* by neměly být zaměňovány.

*Poznámka 2:* Je třeba pečlivě rozlišovat mezi *hmotnostními píky* a píky chromatografickými z GC-MS a LC-MS. Upraveno podle [5,6].

### 311. mass range

Range of mass over which a *mass spectrometer* can detect *ions* or is operated to record a *mass spectrum*.

*Note:* When indicating a range of *m/z* instead of mass, this should be specified explicitly. From [6].

#### 311. hmotnostní rozsah

Rozsah hmotností, v němž může hmotnostní spektrometr detekovat ionty nebo zaznamenat hmotnostní spektrum.

*Poznámka:* Výslovně by mělo být uvedeno, je-li míněn rozsah *m/z* místo rozsahu hmotností. Citace [6].

### 312. mass resolution

See *resolution (in mass spectrometry)*.

#### 312. hmotnostní rozlišení

Viz *rozlišení* (v hmotnostní spektrometrii).

### 313. mass resolving power

See *resolving power (in mass spectrometry)*.

#### 313. hmotnostní rozlišovací schopnost

Viz *rozlišovací schopnost* (v hmotnostní spektrometrii).

### 314. mass selective axial ejection

Use of *mass selective instability* to eject *ions* of selected *m/z* values from an *ion trap* along the trap axis. From [228].

#### 314. hmotnostně selektivní axiální vypuzení

Použití *hmotnostně selektivní nestability* k vypuzení iontů o vybraných hodnotách *m/z* z *iontové pasti* podél její osy. Citace [228].

### 315. mass selective instability (MSI)

Unstable trajectories in an ion trap for *ions* within a particular range of *m/z* values caused by an appropriate combination of oscillating electric fields. See also *mass selective axial ejection*. From [229].

#### 315. hmotnostně selektivní nestabilita (MSI)

Nestabilní trajektorie v iontové pasti pro ionty v určitém rozmezí hodnot *m/z* způsobená vhodnou kombinací oscilujících elektrických polí. Viz také *hmotnostně selektivní axiální vypuzení*. Citace [229].

### 316. mass spectral library

Collection of *mass spectra* of different compounds, usually represented as arrays of signal intensity vs. the *m/z* values. From [230].

### 316. knihovna hmotnostních spekter

Soubor *hmotnostních spekter* různých sloučenin, obvykle představovaný tabulkami intenzit signálu oproti hodnotám  $m/z$ . Citace [230].

### 317. mass spectrograph

*Mass spectrometer* in which the *ions* are directed onto a *focal plane detector* such as a photographic plate. From [5,6].

### 317. hmotnostní spektrograf

Hmotnostní spektrometr, ve kterém jsou ionty nasměrovány na *detektor s ohniskovou rovinou zobrazení*, například fotografickou desku. Citace [5,6].

### 318. mass spectrometer

Instrument that measures the  $m/z$  values and abundances of gas-phase *ions*. From [5,6].

### 318. hmotnostní spektrometr

Přístroj měřící hodnoty  $m/z$  a zastoupení iontů v plynné fázi. Citace [5,6].

*Pozn. překl. V češtině se nedoporučuje používat termín hmotový spektrometr, protože měřená veličina je hmotnost, nikoliv hmota; hmotnost je vlastností hmoty stejně jako např. elektrický náboj.*

### 319. mass spectrometer focusing system (deflection system)

This term is obsolete.

Assembly in a *sector mass spectrometer* permitting the separation of *ions* according to their ratios of mass-to-charge. See also *ion optics*. From [6].

### 319. fokusační systém hmotnostního spektrometru (vychylovací systém)

Tento pojem je zastaralý.

Uspořádání v *sektorovém hmotnostním spektrometru* umožňující separaci iontů podle jejich poměru  $m/z$ . Viz také *iontová optika*. Citace [6].

### 320. mass spectrometry

Obsolete: mass spectroscopy Study of matter through the formation of gas-phase *ions* that are characterized using *mass spectrometers* by their mass, charge, structure, and/or physico-chemical properties.

*Note 1:* The term is a misnomer because it is  $m/z$  rather than mass that is the independent variable in a *mass spectrum*.

*Note 2:* *Mass spectroscopy* is an obsolete synonym for *mass spectrometry* that should not be used to avoid confusion with spectroscopies in which the measured quantity is the absorption or emission of electromagnetic radiation.

From [5,6].

### 320. hmotnostní spektrometrie

Zastaralé: hmotnostní spektroskopie

Studium hmoty prostřednictvím tvorby iontů v plynné fázi, které jsou charakterizovány jejich hmotností, nábojem, strukturou anebo fyzikálně-chemickými vlastnostmi pomocí hmotnostních spektrometrů.

*Poznámka 1:* Termín není úplně správný, protože jde o poměr  $m/z$  spíše než o

hmotnost, jenž je nezávislou proměnnou v hmotnostním spektru.

*Poznámka 2: Hmotnostní spektroskopie je zastaralým synonymem pro hmotnostní spektrometrii, který by neměl být používán, aby se zabránilo záměně se spektroskopii, v níž je měřenou veličinou absorpce nebo emise elektromagnetického záření.*

Citace [5,6].

*Pozn. překl. V češtině se nedoporučuje používat termín hmotová spektrometrie, protože měřená veličina je hmotnost, nikoliv hmota; hmotnost je vlastností hmoty stejně jako např. elektrický náboj.*

### **321. mass spectrometry/mass spectrometry (MS/MS) tandem mass spectrometry**

Acquisition and study of the spectra of the *product ions* or *precursor ions* of *m/z* selected *ions*, or of precursor ions of a selected neutral mass loss.

*Note:* MS/MS can be accomplished using instruments incorporating more than one analyzer (*tandem mass spectrometry in space*) or in trap instruments (*tandem mass spectrometry in time*).

### **321. tandemová hmotnostní spektrometrie (MS/MS)**

Záznam a studium spekter *produktových iontů* nebo *prekurzorových iontů* pro ionty o vybrané hodnotě *m/z*, nebo prekurzorových iontů pro vybrané neutrální ztráty.

*Poznámka:* MS/MS lze provést pomocí přístrojů obsahujících více než jeden analyzátor (*tandemová hmotnostní spektrometrie v prostoru*) nebo v iontových pastech (*tandemová hmotnostní spektrometrie v čase*).

### **322. mass spectroscopy**

This term is obsolete. See *mass spectrometry*.

### **322. hmotnostní spektroskopie**

Tento pojem je zastaralý. Viz *hmotnostní spektrometrie*.

*Pozn. překl. Stejně zastaralý je i pojem hmotnostní spektrografie a hmotnostní spektrograf. Hmotnostní spektrografie poskytuje trvalý záznam hmotnostního spektra, nejčastěji fotografický.*

### **323. mass spectrum**

Plot of the relative abundances of *ions* forming a beam or other collection as a function of their *m/z* values.

*Note:* The term is a misnomer because it is *m/z* rather than mass that is the independent variable in a *mass spectrum*. From [5,6].

### **323. hmotnostní spektrum**

Graf závislosti relativního zastoupení iontů jako funkce jejich hodnot *m/z*.

*Poznámka:* Termín není úplně správný, protože jde o poměr *m/z* spíše než o hmotnost, jenž je nezávislou proměnnou v hmotnostním spektru. Citace [5,6].

### **324. mass-to-charge ratio**

This term is deprecated. The term “ratio of mass to charge” should be used for the quantity expressed in  $\text{kg C}^{-1}$  in SI units. See *m/z*.

### **324. poměr hmotnosti k náboji**

Tento termín se nedoporučuje. Termín *poměr hmotnosti k náboji* by měl být použit pro veličinu vyjádřenou v  $\text{kg.C}^{-1}$ , v jednotkách SI. Viz *m/z*.

### **325. Mathieu stability diagram stability diagram**

Graphical representation expressed in terms of dimensionless reduced coordinates that describes the stability or instability of charged particle motion in a *transmission quadrupole mass spectrometer* or *Paul ion trap*, based on an appropriate form of the Mathieu differential equation. From [231].

### **325. Mathieuův diagram stability diagram stability**

Grafické znázornění stability nebo nestability pohybu nabitých částic v *transmisním kvadrupólovém hmotnostním spektrometru* nebo *Paulově iontové pasti* vyjádřené v bezrozměrných redukováných souřadnicích. Vychází z odpovídající formy Mathieuovy diferenciální rovnice. Citace [231].

### **326. matrix-assisted laser desorption/ionization (MALDI)**

Formation of gas-phase *ions* from molecules present in a solid or liquid matrix that is irradiated with a laser. The matrix is a material that absorbs the laser energy and promotes ionization. From [232].

### **326. laserová desorpce a ionizace za účasti matrice (MALDI)**

Tvorba iontů v plynné fázi z molekul přítomných v pevné nebo kapalné matici, jež je ozářena laserem. Matrice je materiál, který absorbuje energii laseru a podporuje ionizaci. Citace [232].

### **327. matrix effects**

In quantitative analysis, especially with *atmospheric pressure ionization* techniques, matrix components co-extracted and co-eluting with the analytes can alter the *ionization efficiency* resulting in poor analytical accuracy, linearity, and reproducibility. These effects can be either *ionization suppression* or *ionization enhancement*.

From [233].

### **327. matricové jevy**

V kvantitativní analýze, zejména u ionizačních technik za atmosférického tlaku, mohou složky matrice (extrahované a) eluované společně s analyty změnit *ionizační účinnost*, což vede ke snížení správnosti, linearity a reprodukovatelnosti analýzy. Tyto jevy mohou být buď *potlačení ionizace* nebo *zesílení ionizace*.

Citace [233].

### **328. Mattauch-Herzog geometry**

Arrangement for a *double-focusing mass spectrograph* in which a deflection of  $\pi/(4\sqrt{2})$  rad in a radial *electrostatic energy analyzer* is followed by a magnetic

deflection of  $\pi/2$  rad. See also *Nier-Johnson geometry*. From [5,6].

### **328. Mattauchova-Herzogova geometrie**

Uspořádání *hmotnostního spektrometru s dvojitou fokusací*, ve kterém je výchylka  $\pi/(4\sqrt{2})$  rad v radiálním *elektrostatickém energetickém analyzátoru* následována vychýlením o  $\pi/2$  rad v magnetickém poli. Viz také *Nierova-Johnsonova geometrie*. Citace [5,6].

*Pozn. překl.* V originálním textu je patrně chyba v záměně pojmů spectrograph za spectrometer.

### **329. McLafferty rearrangement**

Rearrangement reaction involving transfer of a hydrogen atom via a six-member transition state to the formal radical/charge site from a carbon atom four atoms distant from the charge/radical site (the  $\gamma$ -carbon); subsequent rearrangement of electron density can lead to expulsion of an olefin molecule.

*Note:* Originally applied to ketone molecular *ions* where the charge/radical site is the carbonyl oxygen, but is now more widely applied. Revised from [5,6].

### **329. McLaffertyho přesmyk**

Přesmyk zahrnující přenos atomu vodíku přes šestistupňový přechodový stav k formálnímu radikálovému/nabitému místu z uhlíkového atomu vzdáleného o čtyři atomy od radikálového/nabitého místa ( $\gamma$ -uhlíku); následné přeskupení elektronové hustoty může vést k fragmentační ztrátě molekuly olefinu.

*Poznámka:* Tento termín byl původně použit pro molekulové ionty ketonů, kde je nabitým/radikálovým místem karbonylový kyslík, ale nyní je užíván obecněji.

Upraveno dle [5,6].

### **330. membrane inlet mass spectrometry**

See *membrane introduction mass spectrometry (MIMS)*.

### **330. hmotnostní spektrometrie se vstupní membránou**

Viz *hmotnostní spektrometrie s membránovým vstupem (MIMS)*.

### **331. membrane interface mass spectrometry**

See *membrane introduction mass spectrometry (MIMS)*.

### **331. hmotnostní spektrometrie s membránovým rozhraním**

Viz *hmotnostní spektrometrie s membránovým vstupem (MIMS)*.

### **332. membrane introduction mass spectrometry (MIMS) membrane inlet mass spectrometry membrane interface mass spectrometry**

*Mass spectrometry* measurement that uses a semi-permeable membrane separator that permits the passage of analytes directly from solutions or ambient air to the *mass spectrometer ion* source. From [234].

### **332. hmotnostní spektrometrie s membránovým vstupem (MIMS), hmotnostní spektrometrie se vstupní membránou, hmotnostní spektrometrie s membránovým rozhraním**

*Hmotnostní spektrometrie*, která k měření využívá separátor z polopropustné membrány umožňující průchod analytů přímo z roztoků nebo okolního vzduchu

do *iontového zdroje hmotnostního spektrometru*. Citace [234].

### 333. membrane separator

*GC-MS interface with a polymer membrane that selectively passes analyte molecules in preference to the carrier gas thereby enriching the analyte in the gas stream. From [200].*

### 333. membránový separátor

Rozhraní pro *GC-MS* s polymerní membránou, kterou selektivně prochází molekuly analytu přednostně před nosným plynem, čímž je obohacen analyt v proudu plynu. Citace [200].

### 334. metastable ion

*Ion formed with internal energy higher than the threshold for dissociation but with a lifetime great enough to allow it to exit the ion source and enter the mass analyzer region where it dissociates before detection. From [5,6].*

### 334. metastabilní ion

*Ion, který je vytvořen s vnitřní energií vyšší, než je prahová hodnota pro disociaci, ale s dobou života dostatečně dlouhou na to, aby mohl opustit iontový zdroj a vstoupit do hmotnostního analyzátoru, kde se rozpadne ještě před detekcí. Citace [5,6].*

### 335. microchannel plate (MCP) channel electron multiplier array

*Thin plate that contains a closely spaced array of channels each of which acts as a continuous dynode particle multiplier. A fast charged or neutral particle, or a photon, that strikes the plate causes a cascade of secondary electrons that ultimately exits the opposite side of the plate. See also continuous dynode particle multiplier. From [235].*

### 335. mikrokanálková destička (MCP) pole kanálkových elektronových násobičů

Tenká destička s těsně uspořádaným polem kanálků, z nichž se každý chová jako *násobič částic s kontinuální dynodou*. Rychlá nabitá nebo neutrální částice nebo foton dopadající na destičku vyvolají kaskádovou emisi *sekundárních elektronů*, které nakonec opustí destičku na opačné straně. Viz také *násobič částic s kontinuální dynodou*. Citace [235].

### 336. microelectrospray

*Electrospray ionization at a low solvent flow rate, typically several microliters per minute or lower, where a pump is used to provide the sample flow. See also nanoelectrospray. From [236].*

### 336. mikroelektrosprej

*Ionizaci elektrosprejem* při nízkém průtoku rozpouštědla, typicky několik mikrolitrů za minutu nebo nižším, kde k zajištění průtoku vzorku slouží čerpadlo. Viz také *nanoelektrosprej*. Citace [236].

### 337. molar mass, *M*

Mass of an element or chemical compound divided by its amount of substance.  
*Note:* Amount of substance has historically been referred to as number of moles.  
From [6,7].

### **337. molární hmotnost $M$**

Hmotnost prvku nebo chemické sloučeniny dělená svým látkovým množstvím.

*Poznámka:* Množství látky je historicky definováno jako počet molů. Citace [6,7].

### **338. molecular anion**

See also *molecular ion*. From [5,6].

### **338. molekulový anion**

Viz také *molekulový ion*. Citace [5,6].

### **339. molecular beam mass spectrometry**

*Mass spectrometry* measurement in which the sample is introduced into the *ion source* of the *mass spectrometer* as a collimated beam of molecules with a narrow velocity distribution. From [237].

### **339. hmotnostní spektrometrie molekulového svazku**

*Hmotnostní spektrometrie*, ve které je vzorek zaveden do *iontového zdroje hmotnostního spektrometru* jako kolimovaný svazek molekul s úzkou rychlostní distribucí. Citace [237].

### **340. molecular cation**

See also *molecular ion*. From [5,6].

### **340. molekulový kation**

Viz také *molekulový ion*. Citace [5,6].

### **341. molecular effusion separator**

*GC-MS* interface that subjects the *GC* effluent to effusive flow through a porous glass tube. The lighter carrier gas passes out of the tube, leaving the gas within the tube enriched in analyte. From [200,238].

### **341. molekulový efúzní separátor**

Rozhraní pro *GC-MS*, v němž je effluent z *GC* vystaven efúznímu proudění skrz porézní skleněnou trubici. Lehčí nosný plyn prochází ven z trubice zanechávaje v trubici plyn obohacený analytem. Citace [200,238].

### **342. molecular ion**

*Ion* formed by the removal of one or more electrons from a molecule to form a positive ion or the addition of one or more electrons to a molecule to form a negative ion.

*Note:* *Pseudo-molecular ion* and *quasi-molecular ion* are deprecated; *molecular ion* is reserved for the intact ionized molecule with no component added or removed other than electrons.

From [5,6].

### **342. molekulový ion**

*Ion* vytvořený odstraněním jednoho či více elektronů z molekuly za vzniku kladného iontu nebo přidáním jednoho či více elektronů do molekuly za vzniku



záporného iontu.

*Poznámka: Pseudomolekulový ion a kvazimolekulový ion se nedoporučují, molekulový ion je vyhrazen pro intaktní ionizovanou molekulu, k níž nejsou přidány nebo od níž nejsou odebrány jiné složky než elektrony.*

Citace [5,6].

### **343. momentum separator**

Mass spectrometer interface to inlets including chromatography and spray-based *ion sources* that enriches the sample by selecting the central part of the effluent or spray using an orifice or skimmer. Particles with a higher forward momentum diverge less from the spray axis for a given radial momentum. See also *jet separator*. From [239,240].

### **343. hybnostní separátor**

Rozhraní hmotnostního spektrometru pro vstupy zahrnující chromatografii a sprejové *iontové zdroje*, kde je vzorek obohacen výběrem prostřední části efluentu nebo spreje s použitím otvoru nebo odlučovače. Částice s vyšší hybností ve směru vpřed se od osy spreje odchyľují méně pro danou radiální hybnost. Viz také *tryskový separátor*. Citace [239,240].

### **344. monodisperse aerosol generating interface for chromatography (MAGIC)**

Particle beam interface that incorporates a monodisperse aerosol generator. From [96].

### **344. rozhraní generující monodisperzní aerosol pro chromatografii (MAGIC)**

Rozhraní svazku částic, které obsahuje monodisperzní generátor aerosolu. Citace [96].

### **345. monoisotopic mass**

*Exact mass* of an *ion* or molecule calculated using the mass of the most abundant isotope of each element. See also *accurate mass*. From [51].

### **345. monoizotopová hmotnost**

*Správná hmotnost* iontu nebo molekuly vypočítaná z hmotnosti nejhojnějšího izotopu každého prvku. Viz také *přesná hmotnost*. Citace [51].

### **346. monoisotopic mass spectrum**

*Mass spectrum* containing only *ions* made up of the principal isotopes of atoms of the original molecules. See also *monoisotopic mass*. From [5,6].

### **346. monoizotopové hmotnostní spektrum**

*Hmotnostní spektrum* obsahující pouze ionty tvořené dominantními izotopy atomů původních molekul. Viz také *monoizotopová hmotnost*. Citace [5,6].

### **347. moving belt interface**

Liquid sample *mass spectrometer* interface that uses two or more pulleys and a continuous loop of material. Samples are sprayed or deposited from solution onto the belt where they are transported into the vacuum system for vaporization

or desorption and ionization. From [241].

### **347. pohyblivé pásové rozhraní**

Rozhraní pro vstup kapalného vzorku do *hmotnostního spektrometru*, které používá alespoň dvě kladky a nepřerušovanou smyčku materiálu. Vzorky jsou sprejovány nebo nanесeny z roztoku na pás, kterým jsou přepravovány do vakuového systému pro odpaření nebo desorpci a ionizaci. Citace [241].

### **348. MS/MS spectrum**

*Mass spectrum obtained using tandem mass spectrometry.* From [242].

### **348. spektrum MS/MS**

*Hmotnostní spektrum získané pomocí tandemové hmotnostní spektrometrie.* Citace [242].

### **349. MS<sup>n</sup>**

Symbol for *multiple-stage mass spectrometry* experiments designed to record *product ion spectra* where *n* is the number of *product ion stages* (*n<sup>th</sup>-generation product ions*). From [243].

### **349. MS<sup>n</sup>**

Symbol pro experimenty *vícetupňové hmotnostní spektrometrie* navržené s cílem zaznamenat spektra *produktových iontů*, kde *n* je počet stupňů *produktových iontů* (*ionty n-té generace*). Citace [243].

### **350. multicollector mass spectrometer**

*Mass spectrograph based on a double-focusing magnetic analyzer that spatially disperses ions of different *m/z* values on to an array of Faraday cup detectors, generally used with inductively coupled plasma ion sources for isotopic composition measurements.* From [244].

### **350. multikolektorový hmotnostní spektrometr**

*Hmotnostní spektrometr založený na magnetickém analyzátoru s dvojitou fokusací s prostorovou disperzí iontů různých hodnot *m/z* na pole detektorů Faradayových pohárů, které se obvykle používají s iontovými zdroji využívajícími indukčně vázané plazma pro měření izotopového zastoupení.* Citace [244].

*Pozn. překl. V originálním textu je patrně chyba v záměně pojmů spectrograph za spectrometer.*

### **351. multidimensional protein identification technology (MudPIT)**

Variant of *shotgun proteomics* in which proteins are first digested and then separated by a combination of strong cation exchange and reversed-phase liquid chromatography followed by *mass spectrometry* detection. From [245].

### **351. multidimenzionální technologie identifikace proteinů (MudPIT)**

Varianta *nečílené proteomiky*, ve které jsou proteiny nejprve štěpeny a poté separovány kombinací kapalinových chromatografií na silném katexu a obrácených fázích s následnou detekcí *hmotnostní spektrometrií*. Citace [245].

### 352. multiphoton ionization (MPI)

*Photoionization* of an atom or molecule in which two or more photons are absorbed. From [5,6].

### 352. multifotonová ionizace (MPI)

*Fotoionizace* atomu nebo molekuly, při které jsou absorbovány alespoň dva fotony. Citace [5,6].

### 353. multiple ion detection (MID)

This term is deprecated. See *selected ion monitoring*.

### 353. detekce více iontů (MID)

Tento termín se nedoporučuje. Viz *monitorování vybraných iontů*.

### 354. multiple reaction monitoring (MRM)

Application of *selected reaction monitoring* to multiple *product ions* from one or more *precursor ions*.

*Note:* This term should not be confused with *consecutive reaction monitoring*, which involves the serial application of three or more stages of selected reaction monitoring.

From [246].

### 354. monitorování více reakcí (MRM)

Použití *monitorování vybraných reakcí* pro více produktových iontů z jednoho nebo více *prekurzorových iontů*.

*Poznámka:* Tento termín by neměl být zaměňován s *postupným monitorováním reakcí*, jež zahrnuje sériové použití tří nebo více stupňů *monitorování vybraných reakcí*.

Citace [246].

### 355. multiple-stage mass spectrometry

Multiple stages of *precursor ion m/z* selection followed by *product ion* detection for successive  $n^{\text{th}}$ -*generation product ions*. See also  $MS^n$ . From [243].

### 355. vícestupňová hmotnostní spektrometrie

Více stupňů výběru *hodnot m/z* *prekurzorových iontů* následované detekcí *produktových iontů* výsledné  $n$ -té generace. Viz také  $MS^n$ . Citace [243].

### 356. $m/z$

Deprecated: mass-to-charge ratio, thomson.

Abbreviation representing the dimensionless quantity formed by dividing the ratio of the mass of an *ion* to the *unified atomic mass unit*, by its *charge number* (regardless of sign). The abbreviation is written in italicized lowercase letters with no spaces.

*Note 1:* *Mass-to-charge ratio* is deprecated. Mass-to-charge ratio has been used occasionally for the horizontal axis in a plot of a *mass spectrum*, although the quantity measured is not the ion's mass divided by its electric charge (SI units  $\text{kg C}^{-1}$ ). However,  $m/z$  is recommended as an abbreviation to represent the dimensionless quantity that is used almost universally as the independent variable in a mass spectrum.

*Note 2:* The abbreviation  $m/z$  should not be used as a variable in a mathematical equation. Instead, the variables  $m$  (in kg) and  $q$  (in C) should be used to denote mass and charge.

*Note 3:* The *thomson* (*Th*) unit [13] is deprecated. From [5,6].

### **356. $m/z$**

Nedoporučuje se: poměr hmotnosti k náboji, thomson.

Zkratka představující bezrozměrnou veličinu vypočtenou podělením poměru hmotnosti iontu ku *unifikované atomové hmotnostní jednotce* počtem jeho nábojů (bez ohledu na znaménko). Zkratka se píše kurzívou malými písmeny bez mezer.

*Poznámka 1:* Poměr hmotnosti k náboji se nedoporučuje. Poměr hmotnosti k náboji býval příležitostně používán na vodorovné ose grafu *hmotnostního spektra*, ačkoliv měřená veličina není hmotnost iontu dělená jeho elektrickým nábojem (SI jednotky  $\text{kg}\cdot\text{C}^{-1}$ ). Nicméně,  $m/z$  se doporučuje jako zkratka k prezentování bezrozměrné veličiny, jež se používá téměř všeobecně jako nezávislá proměnná v hmotnostním spektru.

*Poznámka 2:* Zkratka  $m/z$  by neměla být použita jako proměnná v matematické rovnici. Místo ní by měly být použity k označení hmotnosti a náboje proměnné  $m$  (kg) a  $q$  (C).

*Poznámka 3:* Jednotka *thomson* (*Th*) [13] se nedoporučuje. Citace [5,6].

### **357. nanoelectrospray**

*Electrospray ionization* at a very low solvent flow rate, typically hundreds of nanoliters per minute of sample solution or lower, often without the use of an external solvent delivery system.

*Note:* *Nanospray* should only be used to describe the commercial product. See also *microelectrospray*. From [247].

### **357. nanoelektrosprej**

Ionizaci elektrosprejem při velmi nízkém průtoku rozpouštědla, typicky stovky nanolitřů roztoku vzorku za minutu nebo méně, běžně bez použití externího čerpadla.

*Poznámka:* *Nanosprej* by měl být používán pouze k popisu komerčního produktu. Viz také *mikroelektrosprej*. Citace [247].

### **358. natural isotopic abundance**

Of a specified isotope of an element, the isotopic abundance in the element as found in nature, either an average value on planet Earth or from a specified location. From [5,6].

### **358. přirozené izotopové zastoupení**

Zastoupení konkrétního izotopu v rámci prvku tak, jak je přítomen v přírodě, a to buď jako jeho průměrná hodnota na Zemi, nebo na určitém místě. Citace [5,6].

### **359. needle voltage**

See *nozzle-skimmer voltage*.

### **359. napětí na jehle**

Viz *napětí mezi vstříkovací tryskou a odlučovačem*.

### 360. negative ion

Atomic or molecular species having a net negative electric charge; an anion. From [5,6].

### 360. záporný ion

Atomární nebo molekulární částice s celkovým záporným elektrickým nábojem; anion. Citace [5,6].

### 361. negative ion chemical ionization (NICI)

*Chemical ionization* that results in the formation of negative *ions*. From [5].

### 361. negativní chemická ionizace (NICI)

Chemická ionizace vedoucí k tvorbě záporných iontů. Citace [5].

### 362. neutralization-reionization mass spectrometry (NRMS)

Procedure by which neutral species are formed from *m/z* selected *ions* by charge transfer to a collision gas or by dissociation. The neutral species are separated from the remaining *ions* and ionized through collisions with a second gas. From [248].

### 362. neutralizační reionizační hmotnostní spektrometrie (NRMS) neutralizačně reionizační hmotnostní spektrometrie

Postup, kterým jsou z iontů o vybrané hodnotě *m/z* generovány neutrální částice přenosem náboje na kolizní plyn nebo disociací. Tyto neutrální částice jsou odděleny od ostatních iontů a ionizovány kolizemi s dalším plynem. Citace [248].

### 363. neutral loss

Loss of an uncharged species from an *ion* during dissociation. From [5,6].

### 363. neutrální ztráta

Ztráta nenabitě částice z iontu během jeho rozpadu. Citace [5,6].

### 364. neutral loss scan

Scan used to generate a *constant neutral loss spectrum*. From [249].

### 364. sken neutrální ztráty

Záznam vedoucí k skenu *spektra konstantních neutrálních ztrát*. Citace [249].

### 365. Nier-Johnson geometry

Arrangement for a *double-focusing mass spectrometer* in which a deflection of  $\pi/2$  rad in a radial electro static energy analyzer is combined with a magnetic deflection of  $\pi/3$  rad, thus providing a single point of focus for *ions* of the same *m/z* but with spreads in both trajectory direction and translational energy. See also *Mattauch-Herzog geometry*. Revised from [5,6] using additional information from [250].

### 365. Nierova-Johnsonova geometrie

Uspořádání pro *hmotnostní spektrometr s dvojitou fokusací iontů*, ve kterém je vychýlení  $\pi/2$  rad v radiálním elektrostatickém energetickém analyzátoru kombinováno s magnetickým vychýlením o  $\pi/3$  rad, výsledkem čehož je bodová fokusace pro ionty o stejné hodnotě *m/z*, ale s rozšířením jak ve směru

trajektorie, tak translační energie. Viz také *Mattauchova-Herzogova geometrie*. Upraveno dle [5,6] s využitím doplňujících informací z [250].

### 366. nitrenium ion

Reactive intermediate based on nitrogen with both an electron lone pair and a positive charge and with two substituents ( $R_2N^+$ ).

*Note:* The alkylidene derivatives of ( $H_2N^+$ ), ( $R_2C=N^+$ ), still belong to the class nitrenium ions but are more precisely designated by the term *iminylium ions*. From [6].

### 366. nitreniový ion

Reaktivní meziprodukt na bázi dusíku s volným elektronovým párem, kladným nábojem a dvěma substituenty ( $R_2N^+$ ).

*Poznámka:* Alkylidenové deriváty ( $H_2N^+$ ), ( $R_2C=N^+$ ), stále patří k třídě nitreniových iontů, ale jsou přesněji označeny termínem *iminyliové ionty*. Citace [6].

### 367. nitrogen rule

Rule stating that a neutral organic molecule containing one or more atoms of the elements C, H, O, N, S, P, or any halogen has an odd *nominal mass* if it contains an odd number of nitrogen atoms. From [24].

### 367. dusíkové pravidlo

Pravidlo uvádějící, že neutrální organická molekula obsahující jeden nebo více atomů prvků C, H, O, N, S, P nebo jakýkoliv halogen má lichou nominální hmotnost, pokud obsahuje lichý počet atomů dusíku. Citace [24].

### 368. nominal mass

Mass of a molecular *ion* or molecule calculated using the isotope mass of the most abundant constituent element isotope of each element rounded to the nearest integer value and multiplied by the number of atoms of each element. See also *monoisotopic mass*. From [51].

### 368. nominální hmotnost

Hmotnost *molekulového iontu* nebo molekuly vypočítaná z izotopové hmotnosti nejhojněji se vyskytujícího izotopu prvku pro každý prvek zaokrouhlené na nejbližší celé číslo a vynásobené počtem atomů každého prvku. Viz také *monoizotopová hmotnost*. Citace [51].

### 369. normal geometry

See *forward geometry*.

### 369. normální geometrie

Viz *přímá geometrie*.

### 370. nozzle-skimmer dissociation

#### in-source collision-induced dissociation

*Collisionally activated dissociation* that is caused by collisions in the region between the nozzle and skimmer of an *atmospheric pressure ionization* source such as *electrospray* or *atmospheric pressure chemical ionization*.

*Note:* The process can be induced by a higher than typical *nozzle-skimmer voltage*. From [251,252].

### **370. disociace mezi vstřikovací tryskou a odlučovačem kolizně indukovaná disociace ve zdroji**

*Kolizně aktivovaná disociace*, která je způsobena kolizí v oblasti mezi vstřikovací tryskou a odlučovačem v *iontovém zdroji za atmosférického tlaku*, jako jsou *elektrosprej* nebo *chemická ionizace za atmosférického tlaku*.

*Poznámka:* Proces může být nastartován napětím vyšším, než je obvyklé *napětí mezi vstřikovací tryskou a odlučovačem*. Citace [251,252].

### **371. nozzle-skimmer voltage needle voltage**

Electric potential difference applied between the *electrospray needle* and the *skimmer*, which is typically held at the same potential as the *counter electrode*. From [252,253].

### **371. napětí mezi vstřikovací tryskou a odlučovačem napětí na sprejovací jehle**

Elektrické napětí vložené mezi *sprejovací jehlu* a *odlučovač*, zpravidla udržované na stejné hodnotě jako na *protielektrodě*. Citace [252,253].

### **372. $n^{\text{th}}$ -generation product ion**

Deprecated: granddaughter ion.

Serial *product ions* from dissociation or bimolecular reaction of selected *precursor ions* where *n* refers to the number of stages of dissociation or bimolecular reaction in a series of consecutive reactions that involve successive *product ions*.

*Note 1:* Given the sequential fragmentation scheme:



$M_4^+$  is the precursor ion of  $M_5^+$ , a 1<sup>st</sup>-generation product ion of  $M_3^+$ , a 2<sup>nd</sup>-generation + product ion of  $M_2^+$ , and a 3<sup>rd</sup>-generation product ion of  $M_1$ . See also  *$n^{\text{th}}$ -generation product ion spectrum*. From [8,152,153].

### **372. produktový ion n-té generace**

Nedoporučuje se: vnučkovský ion.

Sekvenční *produktový ion* disociace nebo bimolekulové reakce vybraných *prekurzorových iontů*, kde *n* udává počet stupňů disociace nebo bimolekulových reakcí v sekvenci následujících reakcí, které zahrnují následné *produktové ionty*.

*Poznámka 1:* Je-li sekvenční fragmentační schéma:



pak  $M_4^+$  je prekurzovým iontem iontu  $M_5^+$ , produktovým iontem první generace iontu  $M_3^+$ , produktovým iontem druhé generace iontu  $M_2^+$ , a produktovým iontem třetí generace iontu  $M_1$ . Viz také *spektrum n-té generace produktových iontů*. Citace [8,152,153].

### **373. $n^{\text{th}}$ -generation product ion spectrum**

*Mass spectrum* recorded from any *mass spectrometer* in which the appropriate scan function can be set to record the appropriate generation *product ion* or *ions*

of  $m/z$  selected *precursor ions*. See also *n<sup>th</sup>-generation product ion*. From [152,153].

### 373. spektrum n-té generace produktových iontů

*Hmotnostní spektrum* zaznamenané jakýmkoli *hmotnostním spektrometrem*, ve kterém může být nastavena vhodná skenovací funkce pro záznam odpovídajícího generovaného *produktového iontu* nebo iontů z vybraných *prekurzorových iontů* o hodnotě  $m/z$ . Viz také *produktový ion n-té generace*. Citace [152,153].

### 374. odd-electron ion

See *radical ion*. From [5,6].

### 374. ion s lichým počtem elektronů

Viz *radikálový ion*. Citace [5,6].

### 375. onium compounds

Cations derived by addition of a  $H^+$  to a mononuclear parent hydride of the nitrogen, chalcogen, and halogen families.

*Note*: Examples are ammonium ( $NH_4^+$ ), oxonium ( $H_3O^+$ ), and fluoronium ( $H_2F^+$ ) ions. See also *lyonium ion*. From [6].

### 375. oniové sloučeniny

Kationty odvozené od adice  $H^+$  na jednojaderné základní hydridy dusíku, chalkogenů či halogenů.

*Poznámka*: Příkladem jsou amoniový ion ( $NH_4^+$ ), oxoniový ion ( $H_3O^+$ ), a fluoroniový ion ( $H_2F^+$ ). Viz také *lyoniový ion*. Citace [6].

### 376. orthogonal acceleration

See *orthogonal extraction*.

### 376. ortogonální urychlení

Viz *ortogonální extrakce*.

### 377. orthogonal electrospray

Configuration for *electrospray* ionization in which the axis of the spray is at a right angle to the axis of the *sampling cone*. From [254].

### 377. ortogonální elektrosprej

Konfigurace ionizace *elektrosprejem*, při které je osa spreje kolmá na osu *vzorkovacího kužele*. Citace [254].

### 378. orthogonal extraction

#### orthogonal acceleration

Pulsed acceleration of *ions* perpendicular to their original direction of travel into a *mass spectrometer*, typically *time-of-flight*.

*Note*: *Ions* may be extracted from a directional *ion source*, drift tube, or  $m/z$  separation stage. From [252].

### 378. ortogonální extrakce

#### ortogonální urychlení

Pulzní urychlení iontů kolmo k původnímu směru jejich letu do *hmotnostního*



*spektrometru, převážně na principu doby letu.*

*Poznámka: Ionty mohou být extrahovány ze směrového iontového zdroje, driftové trubice nebo hmotnostně-separačního stupně. Citace [252].*

### **379. parent ion**

*This term is deprecated. See precursor ion.*

### **379. rodičovský ion**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *prekurzorový ion*.

### **380. parent ion spectrum**

*This term is deprecated. See precursor ion spectrum.*

### **380. spektrum rodičovského iontu**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *spektrum prekurzorového iontu*.

### **381. partial charge exchange reaction**

*See partial charge transfer reaction.*

### **381. reakce částečné výměny náboje**

Viz *Reakce částečného přenosu náboje*.

### **382. partial charge transfer reaction partial charge exchange reaction**

Reaction of an *ion* with a neutral species in which some but not all of the ion charge is transferred to the neutral. From [5,6].

### **382. reakce částečného přenosu náboje reakce částečné výměny náboje**

Reakce iontu s neutrální částicí, při které část, ale ne všechen náboj reakčního iontu, je přenesena na neutrální částici. Citace [5,6].

### **383. partial isotopic scrambling**

Partial random mixing of isotopes among specified atom positions in an ion or neutral species.

*Note: In mass spectrometry, this term usually refers to the partial random mixing of isotopes in isolated ions that were formed with a fixed isotopic composition. Revised from [5,6] using additional information from [255].*

### **383. částečná izotopová redistribuce**

Částečná náhodná redistribuce izotopů mezi specifickými pozicemi v iontu nebo neutrální částici.

*Poznámka: V hmotnostní spektrometrii tento pojem odkazuje k částečné náhodné redistribuce izotopů u izolovaných iontů, které se vytvořily s daným izotopovým složením. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [255].*

### **384. particle beam interface**

Method for coupling liquid chromatography to *mass spectrometry* in which the effluent is passed through a heated capillary to form an expanding jet of vapour and aerosol particles. After passing through a skimmer that acts as a

momentum separator, the beam impinges on a heated surface to form *ions* through *chemical ionization* at the surface or ionization of the resulting vapour in a *chemical ionization* or *electron ionization* source. From [256,257].

#### **384. rozhraní částicového svazku**

Metoda pro spojení kapalinové chromatografie a hmotnostní spektrometrie, ve které efluent prochází vyhřívanou kapilárou za účelem tvorby rozpínajícího se proudu par a částic aerosolu. Poté, co projde odlučovačem, který funguje jako hybnostní separátor, svazek naráží do vyhřívaného povrchu za tvorby iontů prostřednictvím chemické ionizace na povrchu nebo ionizuje vznikající páry v iontovém zdroji pro chemickou ionizaci či elektronovou ionizací. Citace [256,257].

#### **385. Paul ion trap**

##### **quadropole ion trap**

##### **quadropole ion storage trap**

*Ion* trapping device that depends on the application of radio frequency potentials between a ring electrode and two end-cap electrodes to confine the ion motion to a cyclic path described by an appropriate form of the Mathieu equation. The choice of these potentials determines the  $m/z$  value below which ions are not trapped. From [10,52,62].

#### **385. Paulova iontová past**

##### **kvadrupólová iontová past**

*Iontová* past, které umožňuje aplikovat radiofrekvenčních potenciálů mezi prstencovou a dvě koncové elektrody tak, aby zachycovaly pohyb iontů po cyklických drahách, jak je popsán příslušnou formou Mathieuovy rovnice. Volba těchto potenciálů určuje hodnotu  $m/z$ , pod níž nejsou ionty zachyceny. Citace [10,52,62].

#### **386. peak (in mass spectrometry)**

See *mass peak*.

#### **386. pík (v hmotnostní spektrometrii)**

Viz *hmotnostní pík*.

#### **387. peak height**

Height of a recorded *peak* in a *mass spectrum*. From [5].

#### **387. výška píku**

Výška zaznamenaného píku v *hmotnostním spektru*. Citace [5].

#### **388. peak matching**

Procedure for measuring the *accurate mass* of an *ion* using scanning *mass spectrometers*, in which the *peak* corresponding to the unknown ion and that for a *reference ion* of known  $m/z$  are displayed alternately and caused to overlap by adjusting appropriate electric fields. From [258].

#### **388. přiřazování píků**

Postup pro měření *přesné hmotnosti* iontu s použitím skenujících hmotnostních spektrometrů, ve kterém jsou *pík* odpovídající neznámému iontu a *pík*

referenčního iontu o známém  $m/z$  zobrazovány jako alternující, a následně zobrazeny v překryvu nastavením příslušných elektrických polí. Citace [258].

### 389. peak parking

Method used to extend the amount of time available for *mass spectrometric* analysis of the components in a narrow chromatographic peak. The eluent flow rate is reduced to an ultra-low level at the leading edge of the peak and held at this low flow rate for the duration of compound elution, thus enabling collection of sufficient data for reliable statistical analysis. From [259].

### 389. zadržení píku

Metoda používaná pro prodloužení času dostupného pro hmotnostně spektrometrickou analýzu složek úzkého chromatografického píku. Průtok je extrémně snížen na začátku píku a udržován po dobu eluce sloučeniny, umožňuje tak záznam dostačující pro spolehlivou statistickou analýzu. Citace [259].

### 390. peak stripping

Data analysis technique used in elemental *mass spectrometry* to correct the intensity of an unresolved multiplet peak monitored for a specific element for contributions from a multi-isotopic contaminant. The correction is calculated from the measured intensity of a different isotopic peak of the contaminant and the known *natural isotopic abundance* ratio. From [260].

### 390. korekce intenzity píku

Technika analýzy dat používaná v prvkové hmotnostní spektrometrii ke korekci intenzity nerozlišeného multipletu píku sledovaného kvůli vybranému prvku pro identifikaci příspěvků multiizotopového kontaminantu. Korekce je počítána z experimentální hodnoty intenzity jiného izotopového píku daného kontaminantu a známého poměru přirozeného zastoupení izotopů. Citace [260].

### 391. Penning ionization

Ionization via electron removal that occurs through the energy transfer from a neutral species (N) internally excited to a metastable state (such as a high Rydberg state) to a neutral species (M) with lower *ionization energy*, as represented by the following reaction:  $N^* + M \rightarrow N + M^{++} + e^-$ .

*Note:* Penning ionization differs from *chemi-ionization* in that no chemical change is involved. From [5].

### 391. Penningova ionizace

Ionizace prostřednictvím odnětí elektronu, ke kterému dochází pomocí přenosu energie z neutrální částice (N) vnitřně excitované do metastabilního stavu (např. vysoký Rydbergův stav) na neutrální částici (M) s nižší *ionizační energií*, jak je znázorněno následující rovnicí:  $N^* + M \rightarrow N + M^{++} + e^-$ .

*Poznámka:* Penningova ionizace se liší od *chemiionizace* v tom, že nedochází k žádné chemické přeměně. Citace [5].

### 392. Penning ion trap

*Ion* trapping device using a static magnetic field and a static electric potential

well. The magnetic field confines the ion motion to circular orbits around the magnetic force line direction, which aligns with the direction of the trap axis, whereas the electric potential well confines the ion motion axially.

*Note:* This device is used for the mass analyzer of *Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometers*. From [261].

### **392. Penningova iontová past**

Zařízení pro záchyt iontů využívající statické magnetické pole a elektrostatickou potenciálovou jámu. Magnetické pole omezuje pohyb iontů na kruhových orbitech okolo přímky směru magnetické síly, která je ve shodě se směrem osy pasti a elektrostatická potenciálová jáma zachycuje iontový pohyb osově.

*Poznámka:* Toto zařízení se používá v hmotnostních analyzátoch *hmotnostních spektrometrů s iontovou cyklotronovou rezonancí a Fourierovou transformací*. Citace [261].

### **393. peptide mass fingerprinting (PMF) peptide mass mapping**

Method for protein analysis where an unknown protein is chemically or enzymatically cleaved into peptide fragments whose masses are determined by *mass spectrometry*. The peptide masses are compared to peptide masses calculated for known proteins in a database and analyzed statistically to determine the best match. See also *accurate mass tag*. From [262].

### **393. peptidové hmotnostní mapování**

Metoda proteinové analýzy, při které je neznámý protein chemicky nebo enzymaticky rozštěpen na peptidové fragmenty, jejichž hmotnosti jsou stanoveny hmotnostní spektrometrií. Hmotnosti peptidů jsou pak srovnávány s vypočítanými hmotnostmi peptidů pocházejících ze známých proteinů v databázi a statisticky analyzovány za účelem nalezení nejlepší shody. Viz také *peptidová značka se správnou hmotností*. Citace [262].

### **394. peptide sequence tag**

Sequence of peptide ion fragment masses that can be used to aid in the identification of the amino acid sequence.

*Note:* *Sequence tags* are often obtained in *tandem mass spectrometry* analysis of peptides from an unknown protein that has been chemically or enzymatically cleaved into peptide fragments.

From [263].

### **394. peptidová sekvenční značka**

Sekvence získaná z hmotností fragmentů peptidových iontů, která se používá jako pomocný nástroj při identifikaci aminokyselinové sekvence.

*Poznámka:* *Sekvenční značky* jsou často získávány pomocí analýzy *tandemovou hmotnostní spektrometrií* peptidů neznámého proteinu, který byl chemicky nebo enzymově naštěpen na peptidové fragmenty.

Citace [263].

### **395. photodissociation**

Process wherein the reactant *ion* or molecule is dissociated as a result of

absorption of one or more photons. From [264].

### 395. fotodisociace

Proces, ve kterém jsou reagující ion nebo molekula disociovány v důsledku absorpce jednoho nebo více fotonů. Citace [264].

### 396. photographic plate recording

Recording of *ion* currents by allowing them to strike a photographic plate, which is subsequently developed.

*Note:* This technique is typically associated with *ion*-beams that have been spatially separated by *m/z* and focused across a focal plane as in a *Mattauch-Herzog geometry magnetic sector* instrument.

From [5].

### 396. záznam na fotografickou desku

Záznam *iontových* proudů zachycený na fotografickou desku, která je potom vyvolána.

*Poznámka:* Tato technika je převážně spojována s *iontovými* svazky, které byly prostorově separovány podle *m/z* a zaostřeny na ohniskovou rovinu jako v případě zařízení *magnetického sektoru s Mattauchova-Herzogovou geometrií*. Citace [5].

*Pozn. překl.* V tomto případě se jedná o spektrografii.

### 397. photoionization (PI)

Deprecated: photon impact.

Ionization of an atom or molecule by a photon, written  $M + h\nu \rightarrow M^{+} + e^{-}$ . See also *multiphoton ionization*. From [5,6].

### 397. fotoionizace (PI)

Nedoporučeno: ionizace nárazem fotonu.

Ionizace atomu či molekuly fotonem, vyjádřeno jako  $M + h\nu \rightarrow M^{+} + e^{-}$ . Viz také *multifotonová ionizace*. Citace [5,6].

### 398. photon impact

This term is deprecated. See *photoionization*.

### 398. ionizace nárazem fotonu

Tento termín se nedoporučuje. Viz *fotoionizace*.

### 399. $\pi/n$ rad ( $180^{\circ}/n$ ) magnetic sector

Arrangement in which an ion beam is deflected magnetically through  $\pi/n$  rad, where  $n > 1$ . From [5].

### 399. magnetický sektor s deflekcí $\pi/n$ rad ( $180^{\circ}/n$ )

Uspořádání, při kterém je *iontový* svazek magneticky odkloněn o úhel  $\pi/n$  rad, kde  $n > 1$ . Citace [5].

### 400. plasma (in spectrochemistry)

Gas that is at least partly ionized and contains particles of various types: electrons, atoms, *ions*, and molecules. The plasma as a whole is electrically

neutral. From [5,6].

**400. plazma** (ve spektrochemii)

Částečně ionizovaný plyn, obsahující částice různých typů: elektrony, atomy, ionty a molekuly. Plazma jako celek je elektricky neutrální. Citace [5,6].

**401. plasma desorption ionization (PDI)  
fission fragment ionization**

Ionization of material in a solid sample by bombarding it with *ions* and/or neutral atoms formed as a result of the fission of a suitable nuclide, typically <sup>252</sup>Cf. From [5,6].

**401. ionizace a desorpce plazmatem  
ionizace rozpadovými produkty**

Ionizace pevných vzorků ostřelováním ionty anebo neutrálními atomy vzniklými jako rozpadové produkty vhodného nuklidu, např. <sup>252</sup>Cf. Citace [5,6].

**402. pneumatically assisted electrospray ionization**

*Electrospray ionization* in which the nebulization of the liquid stream is assisted by a concentric stream of gas.

*Note: Ionspray* should only be used to describe the commercial product. From [265].

**402. ionizace elektrosprejem za pomoci proudu plynu**

*Ionizace elektrosprejem*, při které je zmlžování proudem kapaliny napomáháno koncentrickým proudem plynu.

*Poznámka: Ionspray* se jako komerční název produktu do češtiny nepřekládá. Citace [265].

**403. point detector**

Detector in which the ion beam is focused onto a small area, for example, defined by a *collector slit*, rather than dispersed by *m/z* spatially across a focal plane. From [266].

**403. bodový detektor**

Detektor, ve kterém je iontový svazek zaostřen na malou plochu, např. danou *kolektorovou štěrbinou*, spíše než rozptýlený prostorově podle *m/z* přes ohniskovou rovinu. Citace [266].

**404. positive ion**

Atomic or molecular species having a net positive electric charge; a cation. From [5,6].

**404. kladný ion**

Atomární či molekulární částice, která má celkový kladný elektrický náboj; kation. Citace [5,6].

**405. post-acceleration detector (PAD)**

Detector in which a high potential is applied after *m/z* separation to accelerate the *ions* and produce an improved signal. See also *conversion dynode*. From [267].

#### 405. detektor s urychlením (PAD)

Detektor, ve kterém je kvůli urychlení iontů za účelem zlepšení signálu po hmotnostní analýze aplikováno vysoké napětí. Viz také *konverzní dynoda*. Citace [267].

#### 406. post-source decay (PSD)

Technique specific to *reflectron time-of-flight mass spectrometers* where *product ions* of metastable transitions or *collision-induced dissociations* generated in the flight tube prior to entering the reflectron are separated according to *m/z* to yield *product ion spectra*. From [268].

#### 406. fragmentace za zdrojem (PSD)

Technika specifická pro *reflektronový hmotnostní spektrometr s analyzátozem doby letu*, ve kterém jsou produktové ionty z metastabilních nebo kolizně indukovaných fragmentací produkovány v letové trubici před vstupem do reflektoru, kde jsou následně separovány dle *m/z*, za získání *produktového hmotnostního spektra*. Citace [268].

#### 407. precursor ion progenitor ion

Deprecated: parent ion.

*Ion* that reacts to form particular *product ions* or undergoes specified *neutral losses*. The reaction can be of different types including *unimolecular dissociation*, *ion/molecule reaction*, change in charge state, possibly preceded by isomerization. Revised from [5,6] using additional information from [8,16,17].

#### 407. prekurzorový ion původní ion

Nedoporučuje se: rodičovský ion.

*Ion*, který reaguje za vzniku určitého *produktového iontu* nebo podstupuje *neutrální ztrátu*. Reakce může být různého druhu včetně *monomolekulové disociace*, *iontově-molekulové reakce*, změny nábojového stavu, pravděpodobně s předcházející izomerizací. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [8,16,17].

#### 408. precursor ion spectrum

Deprecated: parent ion spectrum.

*Mass spectrum* in which the appropriate *m/z* separation function records the *precursor ions* of selected *product ions* or specified neutral loss.

*Note*: The *ion current* recorded by the detector is that from the product ion but the *m/z* values corresponding to the peaks in the resulting spectrum are those of precursor ions that fragmented in the fashion specified by the *m/z* separation function of the *tandem mass spectrometer*.

See also *product ion spectrum*. From [8,16,17].

#### 408. spektrum prekurzorových iontů

Nedoporučuje se: spektrum rodičovského iontu.

*Hmotnostní spektrum*, ve kterém příslušný princip hmotnostní analýzy umožňuje záznamu iontu či iontů prekurzoru pro zvolené produktové ionty nebo určitou

neutrální ztrátu.

*Poznámka: Iontový proud zaznamenaný detektorem pochází z produktového iontu, ale hodnoty  $m/z$  odpovídající píkům ve výsledném spektru pochází z prekurzorových iontů, které byly fragmentovány v závislosti na separačním principu hmotnostního analyzátoru daného tandemového hmotnostního spektrometru.*

Viz také spektrum produktových iontů. Citace [8,16,17].

#### 409. pre-ionization state

Electronic state capable of undergoing *autoionization*. From [5,6].

#### 409. autoionizační stav

Elektronový stav umožňující *autoionizaci*. Citace [5,6].

#### 410. principal ion

Most abundant *ion* of an *isotope cluster*.

*Note 1: An example is the  $^{11}\text{B}^{79}\text{Br}_2^{81}\text{Br}^{+}$  ion of  $m/z$  250 of the cluster of isotopolog molecular ions of  $\text{BBr}_3$ .*

*Note 2: Principal ion has also been used to describe ions that have been artificially isotopically enriched in one or more positions such as  $^{13}\text{CH}_3^{+}$  or  $\text{CH}_2\text{D}_2^{+}$ , but those are best defined as *isotopolog ions*.*

From [5,6].

#### 410. hlavní ion

Nejhojnější *ion* *izotopového klastru*.

*Poznámka 1: Příkladem je  $^{11}\text{B}^{79}\text{Br}_2^{81}\text{Br}^{+}$  ion s  $m/z$  250 klastru *izotopologů molekulových iontů*  $\text{BBr}_3$ .*

*Poznámka 2: Termín *hlavní ion* se také používá pro popis iontů, které byly uměle izotopově obohaceny v jedné nebo více polohách, jako např.  $^{13}\text{CH}_3^{+}$  nebo  $\text{CH}_2\text{D}_2^{+}$ , avšak ty jsou lépe definovány jako *izotopologní ionty*.*

Citace [5,6].

#### 411. probability-based matching

Automated system for computer examination of the *mass spectrum* of an unknown mixture for the presence of a specific compound for which a standard spectrum is available in a library. The probability that the compound is present is given by a confidence index  $K$  such that  $2^K$  is the average number of randomly selected compounds whose *mass spectra* would have to be examined to find data which match the target spectrum to the same degree as does the unknown. From [269].

#### 411. přiřazování signálů na základě pravděpodobnosti

Automatický systém počítačového vyhodnocení *hmotnostního spektra* neznámé směsi za účelem nalezení specifické sloučeniny, jejíž standardní spektrum se nachází v knihovně spekter. Pravděpodobnost, že sloučenina je přítomna, je dána indexem spolehlivosti  $K$  tak, že  $2^K$  je průměrný počet náhodně vybraných sloučenin, jejichž *hmotnostní spektra* musí být prověřena, aby byla nalezena data, která je možné přiřadit cílovému spektru ve stejném rozsahu jako spektru neznámému. Citace [269].



#### 412. product ion

Deprecated: daughter ion.

*Ion* formed as the product of a reaction involving a particular *precursor ion*.

*Note:* The reaction can be of different types including *unimolecular dissociation* to form *fragment ions*, an *ion/molecule reaction*, or simply involve a change in the number of charges.

Revised from [5,6] using additional information from [8,16,17].

#### 412. produktový ion

Nedoporučuje se: dceřiný ion.

*Ion* vytvořený jako produkt reakce vybraného *iontu prekurzoru*.

*Poznámka:* Reakce může být různých typů včetně *monomolekulové disociace* za tvorby *fragmentových iontů*, *iontově-molekulová reakce*, nebo jednoduše zahrnuje změnu v počtu nábojů. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [8,16,17].

#### 413. product ion analysis

Deprecated: daughter ion analysis.

Process whereby a *precursor ion* of a particular *m/z* is selected by *m/z*, fragmentation is induced, and the *mass spectrum* of the resulting *product ions* is recorded. Revised from [5] using additional information from [152,153].

#### 413. analýza produktových iontů

Nedoporučuje se: analýza dceřiných iontů.

Proces, ve kterém je vybrán *prekurzorový ion* o určité hodnotě *m/z* podle *m/z*, je indukována fragmentace a je zaznamenáno *hmotnostní spektrum* vzniklých *produktových iontů*. Upraveno podle [5] s využitím doplňujících informací z [152,153].

#### 414. product ion spectrum

*Mass spectrum* in which the appropriate *m/z* separation analysis function is set to record the *product ions* of a selected *precursor ion* selected by *m/z*. See also *precursor ion spectrum*. From [8,16,17].

#### 414. spektrum produktových iontů

*Hmotnostní spektrum*, ve kterém příslušný princip hmotnostní analýzy umožňuje záznam produktových iontů pro zvolený prekurzorový ion vybraný podle hodnoty *m/z*. Viz také *spektrum iontů prekurzoru*. Citace [8,16,17].

#### 415. profile mode

Method for acquiring a *mass spectrum* where each *peak* is displayed as a curve, with the data points defining the curve corresponding to the signal intensities at each particular *m/z* value. See also *centroid acquisition*. From [270,271].

#### 415. profilový mód

Metoda získávání hmotnostního spektra, při které je každý pík zobrazen jako křivka, body této křivky odpovídají intenzitě signálu při každé určité hodnotě *m/z*. Viz také *záznam centroidů*. Citace [270,271].

#### 416. progenitor ion

See *precursor ion*. From [5,6].

#### 416. původní ion

Viz *prekurzorový ion*. Citace [5,6].

#### 417. prolate trochoidal mass spectrometer

Deprecated: cycloidal mass spectrometer.

Mass spectrometer in which the *ions* of different *m/z* are separated by means of crossed electric and magnetic fields in such a way that the selected ions follow a prolate trochoidal path. From [5,6].

#### 417. prodloužený cykloidní hmotnostní spektrometr

Nedoporučuje se: Sporná varianta v češtině neexistuje. *Trochoida* je obecný pojem, *prodloužená cykloida* je variantou trochoidy.

Hmotnostní spektrometr, ve kterém jsou ionty s různými hodnotami *m/z* separovány pomocí zkříženého elektrického a magnetického pole takovým způsobem, že vybrané ionty se pohybují po dráze prodloužené cykloidy. Citace [5,6].

#### 418. proton affinity (PA)

For a species M, the negative of the enthalpy change for the gas phase reaction  $M + H^+ \rightarrow [M + H]^+$  at a specified temperature, usually 298 K. From [5,6].

#### 418. protonová afinita (PA)

Záporně vzatá hodnota změny entalpie částice M pro reakci v plynné fázi  $M + H^+ \rightarrow [M + H]^+$  za dané teploty, obvykle 298 K. Citace [5,6].

#### 419. protonated molecular ion

This term is deprecated. See *protonated molecule*.

#### 419. protonovaný molekulový ion

Tento termín se nedoporučuje. Viz *protonovaná molekula*.

#### 420. protonated molecule

Deprecated: protonated molecular ion, pseudo-molecular ion, quasi-molecular ion.

*Adduct ion*, represented by  $[M + H]^+$ , formed by the interaction of a molecule with a proton (*hydron*).

*Note 1:* Multiply protonated molecules are represented by  $[M + nH]^{n+}$  where *n* is the number of protons.

*Note 2:* *Protonated molecular ion* is deprecated; for example, for a molecular ion  $M^+$  this would correspond to a species carrying two positive charges plus an unpaired electron.

*Note 3:* *Pseudo-molecular ion* and *quasi-molecular ion* are deprecated; a specific term such as *protonated molecule*, or a chemical description such as  $[M + H]^+$  should be used. See also *adduct ion*. Revised from [5,6] using additional information from [16].

#### 420. protonovaná molekula

Nedoporučuje se: protonovaný molekulový ion, pseudomolekulový ion,

kvazimolekulový ion.

*Aduktový ion*, který je popsán symbolem  $[M + H]^+$ , vzniklý interakcí molekuly s protonem (*hydronem*).

*Poznámka 1:* Vícenásobně protonované molekuly se popisují jako  $[M + nH]^{n+}$ , kde  $n$  je počet protonů.

*Poznámka 2:* Termín *protonovaný molekulový ion* se nedoporučuje, protože např. pro molekulový ion  $M^{2+}$  by to znamenalo částici nesoucí 2 náboje a jeden nepárový elektron.

*Poznámka 3:* Termíny *pseudomolekulový ion* nebo *kvazimolekulový ion* se nedoporučují; měl by se používat specifický termín jako *protonovaná molekula* nebo chemický zápis jako  $[M + H]^+$ . Viz také *aduktový ion*. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [16].

#### 421. proton-bound dimer

*Dimeric ion* consisting of two similar or dissimilar molecules bound together by hydrogen bonding with a shared proton. From [272,273].

#### 421. protonem spojený dimer

Dimerní ion sestávající se ze dvou stejných či nestejných molekul spojených dohromady vodíkovou vazbou se sdíleným protonem. Citace [272,273].

#### 422. pseudo-molecular ion

This term is deprecated. See *protonated molecule*.

#### 422. pseudomolekulový ion

Tento termín se nedoporučuje. Viz *protonovaná molekula*.

#### 423. pyrolysis mass spectrometry (PyMS)

Mass spectrometry technique in which the sample is heated to the point of decomposition and the gas-phase decomposition products are characterized by mass spectrometry. From [274].

#### 423. pyrolýzní hmotnostní spektrometrie (PyMS)

Hmotnostně spektrometrická technika, při které je vzorek zahřát na rozkladnou teplotu a plynné rozkladné produkty jsou hmotnostně spektrometricky charakterizovány. Citace [274].

#### 424. quadratic field reflectron

*Reflectron* in which the electric field varies with the square of the distance from the entrance and compensates for kinetic energy spread to all orders. From [275].

#### 424. reflektrom s kvadratickým polem

##### iontové zrcadlo s kvadratickým polem

*Reflektrom* se změnou elektrického pole v závislosti na druhé mocnině vzdálenosti od vstupu a kompenzací translační kinetické energie rozložené na všechny řády. Citace [275].

#### 425. quadrupolar axialization

Technique for *axialization* in *Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass*

*spectrometers in which magnetron motion is converted into cyclotron motion by subjecting the trapped ions to a quadrupolar excitation field while they undergo collisions. From [276,277].*

**425. axializace kvadrupólovým polem**

Technika axializace v *hmotnostních spektrometrech s iontovou cyklotronovou rezonancí a Fourierovou transformací*, při které je magnetronový pohyb přeměněn na *cyklotronový pohyb* expozicí zachycených iontů kvadrupólovým excitačním polem, zatímco procházejí kolizemi. Citace [276,277].

**426. quadrupole ion storage trap (QUISTOR)**

See *Paul ion trap*.

**426. kvadrupólová akumulární iontová past (QUISTOR)**

Viz *Paulova iontová past*

**427. quadrupole ion trap (QIT)**

See *Paul ion trap*.

**427. kvadrupólová iontová past (QIT)**

Viz *Paulova iontová past*.

**428. quadrupole mass analyzer**

See *transmission quadrupole mass spectrometer*.

**428. kvadrupólový hmotnostní analyzátor**

Viz *transmisní kvadrupólový hmotnostní spektrometr*.

**429. quadrupole mass filter (QMF)**

See *transmission quadrupole mass spectrometer*.

**429. kvadrupólový hmotnostní filtr (QMF)**

Viz *transmisní kvadrupólový hmotnostní spektrometr*.

**430. quadrupole mass spectrometer (QMS)**

See *transmission quadrupole mass spectrometer*.

**430. kvadrupólový hmotnostní spektrometr (QMS)**

Viz *transmisní kvadrupólový hmotnostní spektrometr*.

**431. quadrupole time-of-flight (QTOF)**

*Hybrid mass spectrometer consisting of a transmission quadrupole mass spectrometer coupled to an orthogonal acceleration time-of-flight mass spectrometer. A collision quadrupole is typically inserted between the two mass spectrometers.*

From [278].

**431. kvadrupól s analyzátozem doby letu (QTOF)**

*Hybridní hmotnostní spektrometr skládající se z transmisního kvadrupólového hmotnostního spektrometru spojeného s hmotnostním spektrometrem doby letu s ortogonálním urychlením iontů. Kolizní kvadrupól je obvykle umístěn mezi těmito dvěma hmotnostními spektrometry.*

Citace [278].

### 432. quantitation by concatenated tryptic peptides (QCAT)

Method for absolute quantitation of a protein or proteins in a multiplexed fashion using isotope-labeled peptides as *surrogate internal standards*. The labeled peptides are produced by synthesizing a gene coding for all desired peptides, expressing this gene in *E. coli* culture containing appropriately labeled substrate, and digesting with trypsin the expressed protein composed of the desired concatenated peptides.

From [279].

### 432. kvantifikace pomocí tryptických peptidů z konkatemeru (QCAT)

Metoda pro absolutní kvantifikaci proteinu či proteinů s použitím izotopově značených peptidů jako *chemicky podobný vnitřních standardů*. Značené peptidy jsou vytvářeny sestavením genetického kódu pro všechny požadované peptidy, expresí tohoto genu v kultuře *E. coli* obsahující příslušný značený substrát a štěpení trypsinem příslušného rekombinantního proteinu obsahujícího všechny požadované konkatemerované peptidy.

Citace [279].

### 433. quasi-equilibrium theory (QET)

Statistical theory of unimolecular reaction rates (isomerization or fragmentation) of molecular species that assumes that reaction occurs from the ground electronic state of the reactant regardless of its mode of formation, at a rate determined by the free statistical redistribution of internal energy into those vibrational and rotational modes that must be activated sufficiently to reach the appropriate transition state for the specified reaction to occur. The QET applies to isolated molecular species in the absence of collisions, as for *ion* fragmentations in a *mass spectrometer*. Early formulations assumed the reactant contained  $s$  identical harmonic oscillators of frequency  $\nu$ , with a transition state corresponding to just one critical oscillator containing at least  $m$  quanta corresponding to the critical energy for reaction  $\varepsilon^* = m\nu$ . A further assumption that  $m \gg s$  leads to an ultra-simple expression for the unimolecular rate constant at total internal energy  $\varepsilon$ :  $k(\varepsilon) = \nu [(\varepsilon - \varepsilon^*)/\varepsilon]^{(s-1)}$ . Elimination of most of these simplifying assumptions followed development of the *Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM) theory*.

See also *Rice-Ramsperger-Kassel (RRK) theory*.

Revised from [6] using additional information from [280,281].

### 433. kvazirovnovážná teorie (QET)

Statistická teorie rychlostí monomolekulových reakcí (izomerizace nebo fragmentace) molekulových částic, která předpokládá, že reakce nastává ze základního elektronového stavu reaktantu neohledě na způsob jeho vzniku, rychlostí určenou volnou statistickou redistribucí vnitřní energie do těch vibračních a rotačních módů, které musí být dostatečně aktivovány k dosažení příslušného přechodového stavu tak, aby reakce mohla nastat. QET platí pro izolované molekuly v nepřítomnosti kolizí, stejně jako pro fragmentaci iontů v hmotnostním spektrometru. Dřívější formulace předpokládaly, že reaktant obsahuje  $s$  identických harmonických oscilátorů s frekvencí  $\nu$ , s přechodovým

stavem odpovídajícím právě jednomu kritickému oscilátoru, obsahujícímu minimálně  $m$  kvant, odpovídající kritické energii reakce  $\varepsilon^* = mv$ . Následný předpoklad, že  $m \gg s$  vede k velmi jednoduchému vyjádření rychlostní konstanty monomolekulové reakce při celkové vnitřní energii  $\varepsilon$ :  $k(\varepsilon) = v [(\varepsilon - \varepsilon^*)/\varepsilon]^{(s-1)}$ . Odstranění většiny těchto zjednodušujících předpokladů umožnilo vývoj *Riceovy-Ramspergerovy-Kasselovy-Marcusovy* (RRKM) teorie. Viz také *Riceova-Ramspergerova-Kasselova* (RRKM) teorie. Přepracováno z [6] s využitím doplňujících informací z [280,281].

#### 434. quasi-molecular ion

This term is deprecated.

See *protonated molecule*.

#### 434. kvazimolekulový ion

Tento termín se nedoporučuje.

Viz *protonovaná molekula*.

#### 435. radial ejection

Ejection of an *ion* from an *ion trap* in a direction perpendicular to the longitudinal axis of the trap.

From [282].

#### 435. radiální vypuzení

Vypuzení iontu z *iontové pasti* v kolmém směru k podélné ose iontové pasti.

Citace [282].

#### 436. radial electrostatic field analyzer

Arrangement of two conducting sheets forming a capacitor and giving a radial electrostatic field which is used to deflect and focus *ion* beams. The degree of deflection varies with the ratio of translational energy to charge. The capacitor may be cylindrical, spherical, or toroidal.

Revised from [5,6].

#### 436. radiální analyzátor s elektrostatickým polem

Uspořádání dvou vodivých desek tvořících kondenzátor a poskytující radiální elektrostatické pole, které se používá k vychýlení iontů a fokusaci iontového svazku. Stupeň vychýlení iontů závisí na poměru translační energie a náboje. Kondenzátor může být válcový, kulový nebo toroidní.

Upraveno podle [5,6].

#### 437. radical ion

##### odd-electron ion

Cation or anion containing unpaired electrons in its ground state. An unpaired electron is denoted by a superscript dot following the superscript symbol for charge, such as for the *molecular ion* of a molecule M, that is,  $M^{\cdot+}$ . Radical *ions* with more than one charge and/or more than one unpaired electron are denoted using parentheses, for example, as  $M^{(2+)(2\cdot)}$ .

*Note 1:* Unless the positions of the unpaired electron and charge can be associated with specific atoms, superscript charge designation should be placed

before the superscript dot designation.

*Note 2:* The order of the unpaired electron and charge are reversed from that recommended for organic and inorganic chemistry in which the dot representing the unpaired electron precedes the symbol for the charge. This convention is widely used in the *mass spectrometry* field and has been in place for many decades, and is retained here for that reason.

*Note 3:* It is not recommended that the charge designation be placed directly above the centrally placed dot because of the difficulty of extending it to ions bearing more than one charge and/or more than one unpaired electron.

From [6].

### 437. radikálový ion

#### ion s lichým počtem elektronů

Kation nebo anion obsahující nepárový elektron v jeho základním stavu. Nepárový elektron je označen jako tečka v horním indexu následující symbol náboje, jako např. pro *molekulový ion* molekuly M, který je označen M<sup>•+</sup>. Radikálové ionty s více jak jedním nábojem anebo více jak jedním nepárovým elektronem jsou označovány pomocí závorek, například M<sup>(2+)(2•)</sup>.

*Poznámka 1:* Pokud není pozice nepárového elektronu a náboje příslušná konkrétnímu atomu, náboj označený v horním indexu by měl být umístěn před označení radikálu tečkou.

*Poznámka 2:* Pořadí nepárového elektronu a náboje je tu obráceno oproti záznamu doporučovanému pro organickou a anorganickou chemii, ve kterém tečka představuje nepárový elektron a předchází symbol pro náboj. Tato konvence je v oboru hmotnostní spektrometrie často používaná, používá se dlouhá desetiletí a z toho důvodu se stále používá.

*Poznámka 3:* Nedoporučuje se umísťovat označení náboje nad tečku umístěnou ve středu (výšky znaku) kvůli obtížnosti použití tohoto zápisu na ionty nesoucí více jak jeden náboj anebo více než jeden nepárový elektron.

Citace [6].

### 438. Rayleigh limit

Limiting droplet size at which self-fragmentation will occur for charged droplets generated in *electrospray* or other *ionization* processes. Self-fragmentation occurs when the electrostatic repulsion force generated by the excess charge exceeds the surface tension that maintains the integrity of the droplet.

From [283].

### 438. Rayleighův limit

#### Rayleighův poloměr

Mezní rozměr kapky, při kterém nastane rozpad nabitých kapek tvořených v *elektrospreji* nebo jiném ionizačním procesu. Rozpad nastává v důsledku elektrostatické repulze vytvářené přebytkem náboje, přesahujícím povrchové napětí, které udržuje celistvost kapky.

Citace [283].

### 439. reagent gas

Gas that reacts with *ions* to produce *product ions* through *ion/molecule*

*reactions*; for example, a gas such as methane, ammonia, or isobutane used in *chemical ionization* to create *reagent ions* or a gas used in *ion traps* or *collision cells* to perform gas-phase ion/molecule reactions.

From [284].

#### **439. reakční plyn**

Plyn, který reaguje s ionty za vzniku *produktových iontů* při *iontově-molekulových reakcích*; například plyn jako metan, amoniak nebo izobutan používaný při *chemické ionizaci* kvůli vzniku *reakčních iontů* nebo plyn používaný v *iontových pastech* či *kolizních celách* při provádění *iontově-molekulových reakcích* v plynném stavu.

Citace [284].

#### **440. reagent ion**

*Ion* that reacts with a neutral to produce an ionized form of such species through an *ion/molecule reaction*, for example, as in *chemical ionization*.

From [284].

#### **440. reakční ion**

Ion, který reaguje s neutrální částicí za účelem produkce ionizované formy takových částic skrze *iontově-molekulové reakce*, jako například při chemické ionizaci.

Citace [284].

#### **441. rearrangement ion**

*Ion* that results from molecular rearrangement, in which its atoms or groups of atoms have transferred from one portion of the molecule to another during or following ionization.

From [5,6].

#### **441. přesmykový ion**

Ion, který vznikl molekulovým přesmykem, ve kterém jeho atomy nebo skupiny atomů byly přesunuty z jedné části molekuly na jinou v průběhu či po ionizaci.

Citace [5,6].

#### **442. recombination energy**

Energy released when an electron is added to an ionized molecule or atom.

*Note:* This is the energy required for the reverse process of *vertical ionization*.

From [285].

#### **442. rekombinační energie**

Energie uvolněná při přidání elektronu k ionizované molekule či atomu.

*Poznámka:* Je to energie potřebná k procesu reverznímu k *vertikální ionizaci*.

Citace [285].

#### **443. reconstructed ion chromatogram**

See *extracted ion chromatogram*.

#### **443. rekonstruovaný iontový chromatogram**

Viz *chromatogram extrahovaných iontů*.



#### 444. reconstructed total ion current chromatogram

See *total ion current chromatogram*.

#### 444. rekonstruovaný chromatogram celkového iontového proudu

Viz *chromatogram celkového iontového proudu*.

#### 445. rectilinear ion trap

*Quadrupole ion trap* whose electrodes form a rectilinear polygon, the simplest form of which consists of two pairs of rectangular electrodes supplied with radio frequency (RF) potentials and a pair of electrodes to which a DC potential is applied. Slits or apertures in the electrodes allow injection and ejection of charged particles.

From [286].

#### 445. rektilineární iontová past

*Kvadrupólová iontová past*, jejíž elektrody vytvářejí rektilineární mnohoúhelník, jehož nejjednodušší tvar se sestává ze dvou párů pravoúhlých elektrod, na nichž je vložen radiofrekvenční potenciál, a pár elektrod s vloženým stejnosměrným napětím. Štěrbiny nebo otvory v elektrodách umožňují vstup a výstup nabitých částic.

Citace [286].

#### 446. reference ion

Stable *ion* whose structure or elemental formula is known with certainty. These ions are formed by direct ionization of a molecule of known structure or elemental formula, and are used to verify by comparison the structure or thermochemistry of an unknown ion or to calibrate the *m/z* scale of the *mass spectrometer*.

From [287-289].

#### 446. referenční ion

Stabilní ion, jehož struktura nebo prvkové složení jsou známy s jistotou. Tyto ionty jsou obvykle vytvářeny přímou ionizací molekuly o známé struktuře či prvkovém složení a jsou používány pro ověřování struktury neznámého iontu srovnáním jejich struktury nebo termochemie nebo pro kalibraci škály *m/z* hmotnostního spektrometru.

Citace [287-289].

#### 447. reflectron

Component of a *time-of-flight mass spectrometer* that uses a static electric field to reverse the direction of travel of the *ions* and improves mass resolution by assuring that ions of the same *m/z* but different translational energy arrive at the detector at the same time.

From [290].

#### 447. reflekttron

##### iontové zrcadlo

Součást *hmotnostního spektrometru s analyzátorem doby letu*, která používá statické elektrické pole na obrácení směru dráhy iontů, které do něj vstoupí.

Reflektron zlepšuje hmotnostní rozlišení zajištěním toho, že ionty o stejném  $m/z$  ale rozdílné kinetické energii dopadnou na detektor ve stejném čase.

Citace [290].

#### 448. relative detection limit detection limit

Smallest amount of material detectable in a matrix relative to the amount of material analyzed, given in atomic, mole, or weight fractions.

*Note 1:* The meaning of “detectable” must be specified, for example, three times the standard deviation of the measurement ( $3\sigma$  criterion).

*Note 2:* Often incorrectly referred to as sensitivity.

From [6]

#### 448. relativní mez detekce mez detekce

Nejmenší množství materiálu detekovatelného v matici v poměru k analyzovanému množství materiálu, vyjádřeno v atomových, molárních či hmotnostních zlomcích.

*Poznámka 1:* Význam pojmu *detekovatelný* musí být upřesněn, například třikrát standardní odchylka měření (kritérium  $3\sigma$ ).

*Poznámka 2:* Často nesprávně označováno jako citlivost.

Citace [6].

#### 449. relative difference of isotope ratios

See *relative isotope-ratio difference*.

#### 449. relativní rozdíl izotopových poměrů

Sporná varianta v češtině neexistuje.

#### 450. relative intensity (in mass spectrometry)

See *intensity relative to base peak (in mass spectrometry)*.

From [8].

#### 450. relativní intenzita (v hmotnostní spektrometrii)

Viz *intenzita poměrná k základnímu píku (v hmotnostní spektrometrii)*.

Převzato z [8].

#### 451. relative isotope-ratio difference, $\delta$ delta notation

isotope delta

relative difference of isotope ratios

Measure of an isotope ratio in a sample of interest relative to a reference defined by the relation

$$\delta = (R_{\text{sample}} - R_{\text{standard}})/R_{\text{standard}}$$

where  $R$  is the *isotope ratio* of the element.

*Note 1:* The reference is often an international measurement standard.

*Note 2:* The same relative differences are used to calculate delta values from the abundance of *isotopomers* and *isotopologs*, ion currents, frequencies, or optical extinctions.

*Note 3:* Relative isotope ratio differences are usually small and are therefore often expressed in units of parts per mil with symbol ‰.

*Note 4:* Units of parts per thousand (ppt,  $10^{-3}$ ) or parts per million (ppm,  $10^{-6}$ ) are deprecated [7].

From [196,197].

**451. relativní rozdíl izotopových poměrů,  $\delta$   
změnová notace  
izotopová změna  
relativní izotopově poměrný rozdíl**

Hodnota izotopového poměru ve vzorku poměrná k referenci definovaná vztahem

$$\delta = (R_{\text{vzorek}} - R_{\text{standard}}) / R_{\text{standard}}$$

kde R je *izotopový poměr* prvku.

*Poznámka 1:* Referencí bývá často mezinárodní měřící standard.

*Poznámka 2:* Stejně relativní změny jsou využívány k výpočtu hodnot rozdílů ze zastoupení izotopomerů a izotopologů, iontových proudů, frekvencí a optických extinkcí.

*Poznámka 3:* Relativní rozdíly izotopových poměrů jsou obvykle malé, a proto jsou často vyjadřovány v promilech symbolem ‰.

*Poznámka 4:* Jednotky *dílů na tisíc* (ppt,  $10^{-3}$ ) nebo *dílů na milion* (ppm,  $10^{-6}$ ) se nedoporučují [7].

Citace [196,197].

**452. residual gas analyzer (RGA)**

*Mass spectrometer used to measure the composition and pressure of gases in an evacuated chamber and to test for leaks in pressurized systems.*

From [291].

**452. analyzátor zbytkového plynu (RGA)**

Hmotnostní spektrometr používaný pro měření složení a tlaku plynů v evakuované komoře a k testování úniků v tlakových systémech.

Citace [291].

**453. residual spectrum**

*Mass spectrum with peaks recorded in the absence of sample and due either to small air leaks or to the presence of molecules desorbed from the walls of the introduction device, the ion source, or from vacuum pump fluids.*

See also *background mass spectrum*.

From [11].

**453. zbytkové spektrum**

Hmotnostní spektrum s píky zaznamenané v nepřítomnosti vzorku a v důsledku buď malých netěsností, nebo díky přítomnosti molekul desorbovaných ze stěn dávkovacího zařízení, iontového zdroje nebo z kapalin vakuových pump.

Viz také *hmotnostní spektrum pozadí*.

Citace [11].

**454. resolution (in mass spectrometry)**

### mass resolution

In a *mass spectrum*, the observed  $m/z$  value divided by the smallest difference  $\Delta(m/z)$  for two *ions* that can be separated:  $(m/z)/\Delta(m/z)$ .

*Note 1:* The  $m/z$  value at which the measurement was made should be reported.

*Note 2:* The definition and method of measurement of  $\Delta(m/z)$  should be reported. Commonly this is performed using *peak width* measured at a specified percentage of *peak height*.

*Note 3:* Alternatively  $\Delta(m/z)$  is defined as the separation between two adjacent equal magnitude peaks such that the valley between them is a specified fraction of the *peak height*, for example as measured by *peak matching*.

See also *resolving power (in mass spectrometry)*.

Revised from [5,10] using additional information from [292,293].

#### 454. rozlišení (v hmotnostní spektrometrii)

##### hmotnostní rozlišení

Hodnota  $m/z$  pozorovaná v hmotnostním spektru dělená nejmenším rozdílem  $\Delta(m/z)$  pro dva ionty, které lze oddělit:  $(m/z)/\Delta(m/z)$ .

*Poznámka 1:* Hodnota  $m/z$ , při které bylo měření provedeno, musí být uvedena.

*Poznámka 2:* Definice a způsob měření  $\Delta(m/z)$  musí být uvedeny. Běžně je to prováděno využitím šířky píku měřené v příslušném procentu výšky píku.

*Poznámka 3:* Jinou možností definovat  $\Delta(m/z)$  je jako oddělení dvou sousedících stejně vysokých píků za podmínky, že sedlo mezi nimi je příslušnou částí jejich výšky, například při měření *přířazováním píků*.

Viz také *rozlišovací schopnost (v hmotnostní spektrometrii)*.

Upraveno podle [5,10] s využitím doplňujících informací z [292,293].

#### 455. resolution: 10 per cent valley definition

Value of  $(m/z)/\Delta(m/z)$  measured for two *peaks* of equal height in a *mass spectrum* at  $m/z$  and  $m/z \pm \Delta(m/z)$  that are separated by a valley which at its lowest point is 10 % of the height of either *peak*. For *peaks* of similar height separated by a valley, let the height of the valley at its lowest point be 10 % of the lower *peak*. Then the resolution (10 % valley definition) is  $(m/z)/\Delta(m/z)$  and should be given for a number of values of  $m/z$ .

See also *resolution: peak width definition*.

From [5,6].

#### 455. rozlišení: definice pomocí 10% sedla

Hodnota  $(m/z)/\Delta(m/z)$  měřená pro dva píky o stejné výšce v hmotnostním spektru při  $m/z$  a  $m/z \pm \Delta(m/z)$ , které jsou odděleny sedlem, které je ve svém nejnižším bodě rovno 10 % výšky těchto píků. Pro píky o podobné výšce oddělené sedlem, nechť je výška tohoto sedla ve svém nejnižším bodě rovna 10 % výšky nižšího píku. Potom rozlišení (definice pomocí 10% sedla) je  $(m/z)/\Delta(m/z)$  a mělo by být dané pro řadu hodnot  $m/z$ .

Viz také *rozlišení: definice pomocí šířky píku*.

Citace [5,6].

#### 456. resolution: peak width definition

For a single *peak* corresponding to singly charged *ions* at mass  $m$  in a *mass*

*spectrum*, the resolution may be expressed as  $(m/z)/\Delta(m/z)$ , where  $\Delta(m/z)$  is the width of the *peak* at a height which is a specified fraction of the maximum peak height. It is recommended that one of three values 50, 5, or 0.5 % should always be used.

*Note:* For an isolated symmetrical peak recorded with a system which is linear in the range between 5 % and 10 % levels of the peak, the 5 % peak width definition is equivalent to the 10 % *valley definition*. A common standard is the definition of resolution based upon  $\Delta m$  being full width of the peak at half its maximum (FWHM) height.

See also *resolution: 10 per cent valley definition*.

From [5,6].

#### **456. rozlišení: definice pomocí šířky píku**

Pro jednotlivý pík odpovídající jednonásobně nabitým iontům o hmotnosti  $m$  v hmotnostním spektru, lze rozlišení můžeme vyjádřit jako  $(m/z)/\Delta(m/z)$ , kde  $\Delta(m/z)$  je šířka píku ve výšce, která je určitou částí maximální výšky píku. Doporučuje se vždy využívat jednu ze tří hodnot 50, 5 či 0.5 %.

*Poznámka:* Definice pomocí šířky píku v 5 % výšky je ekvivalentní definici pomocí 10% sedla pro izolovaný symetrický pík zaznamenaný v systému, který je lineární v rozpětí mezi 5 % a 10 % výšky píku. Běžným standardem je definice rozlišení založená na  $\Delta m$ , které je plnou šířkou píku v polovině jeho výšky (FWHM).

Viz také *rozlišení: definice pomocí 10% sedla*.

Citace [5,6].

#### **457. resolving power (in mass spectrometry) mass resolving power**

Measure of the ability of a *mass spectrometer* to provide a specified value of *mass resolution*.

*Note:* The procedure by which  $\Delta(m/z)$  was defined and measured, and the  $m/z$  value at which the measurement was made, should be reported.

Revised from [5,6].

#### **457. rozlišovací schopnost (v hmotnostní spektrometrii) hmotnostní rozlišovací schopnost**

Míra schopnosti hmotnostního spektra poskytnout určitou hodnotu *hmotnostního rozlišení*.

*Poznámka:* Způsob, jakým bylo  $\Delta(m/z)$  definováno a získáno, a hodnota  $m/z$ , při které bylo měření provedeno, musí být vždy uvedeno.

Upraveno podle [5,6].

#### **458. resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI) resonance ionization**

*Multiphoton ionization* in which the ionization cross section is significantly enhanced because the energy of the incident photons is resonant with an intermediate excited state of the neutral.

From [294,295].

#### **458. rezonančně zvýhodněná multifotonová ionizace (REMPI)**

### **rezonanční ionizace**

*Multifotonová ionizace*, při které je ionizační průřez výrazně zvětšen díky tomu, že energie dopadajících fotonů je v rezonanci s intermediálním excitovaným stavem neutrální částice.

Citace [294,295].

### **459. resonance ion ejection**

Mode of *ion* ejection in an *ion trap* that relies on an auxiliary radio frequency potential that is applied to the end-cap or trapping electrodes. The potential is tuned to the classical oscillation frequency of a particular ion to eject it.

From [296].

### **459. rezonanční vypuzení iontu**

Mód *vypuzení iontu* v *iontové pasti*, který závisí na pomocném radiofrekvenčním napětí aplikovaném na koncové elektrody. Napětí je naladěno na sekulární frekvenci iontu, který chceme vypudit.

Citace [296].

### **460. resonance ionization (RI)**

See *resonance-enhanced multiphoton ionization*.

### **460. rezonanční ionizace (RI)**

Viz *rezonančně zvýhodněná multifotonová ionizace*.

### **461. retro Diels-Alder reaction**

Ion fragmentation mechanism in which the *molecular ion*  $M^{+}$  of a cyclic alkene fragments to form a neutral diene and an alkene radical cation or a diene radical cation and an alkene. The reaction is the reverse of the Diels-Alder reaction of organic synthesis. From [297].

### **461. retro Diels-Alderova reakce**

Fragmentační mechanismus, ve kterém *molekulový ion*  $M^{+}$  cyklického alkenu fragmentuje za vzniku neutrálního dienu a alken radikál-kationtu nebo dien radikál-kationtu a alken. Tato reakce je opakem Diels-Alderovy reakce v organické syntéze. Citace [297].

### **462. reverse geometry**

*Double-focusing mass spectrometer* configuration in which the *ion beam* traverses the *magnetic sector* prior to the *electric sector*. See also *forward geometry*. From [149].

### **462. obrácená geometrie**

Konfigurace *hmotnostního spektrometru* s *dvojitou fokusací iontů*, ve které svazek iontů prochází *magnetickým sektorem* před *elektrickým sektorem*. Viz také *přímá geometrie*. Citace [149].

### **463. reverse library search**

Process of comparing a subset of the *peaks* in the *mass spectrum* of an unknown compound with peaks present in the library mass spectrum. Any peaks in the mass spectrum of the unknown compound that are not in the library

spectrum are disregarded.

*Note:* A reverse library search measures the extent to which the peaks in a spectrum are present in the unknown spectrum and is more effective than a *forward library search* when peaks arising from two or more components are present in the unknown spectrum.

See also *forward library search*. From [230].

#### **463. obrácené prohledávání knihovny**

Proces porovnání skupiny píků v *hmotnostním spektru* neznámé sloučeniny s píky přítomnými v knihovním hmotnostním spektru. Jakékoliv píky v hmotnostním spektru neznámé sloučeniny, které se nevyskytují v knihovním spektru, se neberou v úvahu.

*Poznámka:* Obrácené prohledávání knihovny zjišťuje stupeň, ve kterém se píky z referenčního spektra objevují ve spektru neznámé sloučeniny, a je efektivnější než *přímé prohledávání knihovny*, když jsou píky vznikající ze dvou nebo více sloučenin přítomny v neznámém spektru. Viz také termín *přímé prohledávání knihovny*. Citace [230].

#### **464. RF-DC ion mobility spectrometry**

See *high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry*.

#### **464. iontová mobilní spektrometrie s aplikací RF-DC**

Viz *iontová mobilní spektrometrie s vysokonapěťovou asymetrickou vlnovou funkcí*.

#### **465. RF-only quadrupole**

*Transmission quadrupole* device in which a sinusoidal radio frequency (RF) potential is applied between the connected pairs of opposite rod electrodes in a linear quadrupole, providing a transmission device for all *ions* with  $m/z$  values above a cut-off value.

*Note:* Higher-order multipoles can also be used in this manner. See also *collision quadrupole*. From [78].

#### **465. vysokofrekvenční kvadrupól**

*Transmisní kvadrupól*, ve kterém je sinusoidní radiofrekvenční (RF) napětí vloženo mezi spojené páry protilehlých tyčových elektrod v lineárním kvadrupólu, poskytující transmisní zařízení pro všechny ionty s  $m/z$  hodnotami nad mezní hodnotou.

*Poznámka:* Multipóly vyššího řádu mohou být použity tímto způsobem. Viz také *kolizní kvadrupól*. Citace [78].

#### **466. Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM) theory**

Statistical theory of unimolecular reaction rates of gas-phase molecular species that removes most of the simplifying assumptions in the *Rice-Ramsperger-Kassel (RRK) theory*. Account is taken of the way in which the different normal-mode vibrations and rotations contribute to reaction, and allowance is made for the zero-point energies. The total internal energy is partitioned into active and inactive components, such that only the active component can flow freely among the internal modes and thus contribute to reaction. The assumed equilibrium

ratio of active-to-inactive components is evaluated using partition functions. In applications where gas-phase collisions are important, the rates of activation and deactivation take into account their energy dependence, and in the high-pressure limit the transition state is in equilibrium with non-activated reactants and RRKM reduces to conventional transition-state theory.

*Note:* The theory is also used (with some modification) for reactions in condensed phases.

Revised from [6] using additional information from [298-300].

#### **466. Riceova-Ramspergerova-Kasselova-Marcusova (RRKM) teorie**

Statistická teorie rychlosti monomolekulových reakcí molekulárních částic v plynné fázi, ve které je odstraněna většina zjednodušujících předpokladů *Riceovy-Ramspergerovy-Kasselovy (RRK) teorie*. V úvahu je vzat způsob, jakým různé vibrace a rotace v normálním módu přispívají k reakci a příspěvek je také proveden pro energii nulového bodu. Celková vnitřní energie je rozdělena na aktivní a inaktivní komponenty, takže pouze aktivní komponenta se může volně přenášet mezi interními módy a přispívat tak k reakci. Předpokládaný rovnovážný poměr aktivní a inaktivní komponenty je vyhodnocen pomocí partičních funkcí. V aplikacích, kde jsou důležité srážky v plynné fázi, rychlosti aktivací a deaktivací berou v úvahu jejich energetickou závislost a ve vysokotlakém limitu je přechodný stav v rovnováze s neaktivovanými reaktanty se RRKM redukuje na konvenční teorii tranzitního stavu.

*Poznámka:* Teorie se používá (s některými modifikacemi) také pro reakce v pevné fázi. Upraveno podle [6] s využitím doplňujících informací z [298-300].

#### **467. Rice-Ramsperger-Kassel (RRK) theory**

Statistical theory of unimolecular reaction rates of gas-phase molecular species that is equivalent to the *quasi-equilibrium theory*, but with the added consideration that the effects of gas-phase collisions in activation to and deactivation from the transition state are taken into account.

*Note:* Elimination of most of the simplifying assumptions led to development of the *Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM) theory*. Revised from [6] using additional information from [281,301,302].

#### **467. Riceova-Ramspergerova-Kasselova (RRK) teorie**

Statistická teorie rychlosti monomolekulových reakcí molekulárních částic v plynné fázi, která je ekvivalentní *kvazirównovážné teorii*, avšak s dalším zohledněním efektů srážek v plynné fázi k aktivaci do přechodného stavu a deaktivaci z přechodného stavu.

*Poznámka:* Odstranění většiny zjednodušujících předpokladů vedlo k vývoji *Riceovy-Ramspergerovy-Kasselovy-Marcusovy (RRKM) teorie*. Upraveno podle [6] s využitím doplňujících informací z [281,301,302].

#### **468. ring and double bond equivalent**

Deprecated: rings plus double bonds.

Conventional measure of the degree of unsaturation of an organic molecule given by  $X - Y/2 + Z/2 + 1$  where  $X$  is the number of carbon atoms,  $Y$  is the number of hydrogen or halogen atoms and  $Z$  is the number of nitrogen and



phosphorus atoms. From [24,303].

#### **468 ekvivalent počtu cyklů a dvojných vazeb**

Nedoporučuje se: cykly plus dvojně vazby.

Konvenční vyjádření stupně nenasycenosti organických molekul je dáno vztahem  $X - Y/2 + Z/2 + 1$ , kde  $X$  je počet atomů uhlíku,  $Y$  je počet atomů vodíku nebo halogenů a  $Z$  je počet atomů dusíku nebo fosforu. Citace [24,303].

#### **469. rings plus double bonds**

This term is deprecated. See *ring and double bond equivalent*.

#### **469. cykly plus dvojně vazby**

Tento termín se nedoporučuje. Viz termín *ekvivalent počtu cyklů a dvojných vazeb*.

#### **470. saddle field gun**

Compact *ion* and fast atom sources for use when small size and high beam intensity are required, as in *fast atom bombardment mass spectrometry*. The discharge is produced by electrons oscillating between two cold cathodes in an electric field that possesses a single saddle point. To produce and intensify the *plasma* the electrons must have long path lengths, achieved by allowing the electrons to have an oscillatory motion in the saddle-shaped electric field between the cathodes separated by the anode. From [304].

#### **470. iontové dělo se sedlovým polem**

Kompaktní zdroje iontů a urychlených atomů pro použití svazků malých rozměrů a vysoké intenzity, jako např. *hmotnostní spektrometrie s ostřelováním urychlenými atomy*. Výboj je produkován elektrony oscilujícími mezi dvěma chlazenými katodami v elektrickém poli, které mají jednotný sedlový bod. Pro tvorbu a zesílení *plazmatu* musí mít elektrony dlouhou dráhu letu, které se dosáhne oscilačním pohybem elektronů v elektrickém poli se sedlovým tvarem mezi katodami separovanými anodou. Citace [304].

#### **471. sampling cone**

Component of a *spray ionization* interface that consists of a cone with a small orifice through which the spray passes into a differentially pumped chamber.

*Note 1:* In interfaces that have both a sampling cone and *skimmer*, the spray passes first through the sampling cone and then through the skimmer.

*Note 2:* A capillary can also be used in place of a cone. From [49,254,305].

#### **471. vzorkovací kužel**

Součást rozhraní pro *sprejové ionizační techniky* složená z kužele s malým otvorem, kterým sprej prochází do diferenciatně čerpané komory.

*Poznámka 1:* U rozhraní, která mají jak vzorkovací kužel, tak i odlučovací šterbinou, prochází sprej nejdříve kuželem a pak odlučovačem.

*Poznámka 2:* Kapilára může být také použita místo kužele. Citace [49,254,305].

#### **472. scan cycle time**

Time required to obtain a *mass spectrum* (or other mass spectrometric data quantity) such as in a separation coupled to *mass spectrometry*. From [137,306].

#### **472. čas skenovacího cyklu**

Čas potřebný pro získání *hmotnostního spektra* (nebo jiného typu hmotnostně spektrometrického záznamu), jako např. ve spojení separačních technik s hmotnostní spektrometrií. Citace [137,306].

#### **473. secondary electron**

Electrons ejected from a sample surface as a result of bombardment by a primary beam of atoms, *ions*, electrons, or photons. From [307].

#### **473. sekundární elektron**

Elektrony uvolněné z povrchu vzorku v důsledku ostřelování primárním svazkem atomů, iontů, elektronů nebo fotonů. Citace [307].

#### **474. secondary ionization**

Process in which *ions* are ejected from a sample surface as a result of bombardment by a primary beam of atoms or *ions*. See also *secondary ion mass spectrometry (SIMS)*.

From [6].

#### **474. sekundární ionizace**

Proces, ve kterém jsou ionty vyražené z povrchu vzorku výsledkem ostřelování primárním svazkem atomů nebo iontů. Viz také *hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (SIMS)*.

Citace [6].

#### **475. secondary ion mass spectrometry (SIMS)**

Technique in which a focused beam of primary *ions* produces secondary ions by sputtering from a solid surface. The secondary ions are analyzed by *mass spectrometry*. See also *dynamic secondary ion mass spectrometry (DSIMS)*, *static secondary ion mass spectrometry (SSIMS)*. From [308].

#### **475. hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (SIMS)**

Technika, u které zaostřený svazek primárních iontů produkuje sekundární ionty pomocí rozprašování z pevného povrchu. Sekundární ionty jsou analyzovány hmotnostní spektrometrií. Viz také *dynamická hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (DSIMS)*, *statická hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (SSIMS)*. Citace [308].

#### **476. secondary neutral mass spectrometry (SNMS)**

*Mass spectrometry* technique in which neutral species ejected from a sample surface as a result of bombardment by a primary beam of atoms or *ions* are ionized, most often by *photoionization*, prior to analysis. See also *secondary ion mass spectrometry (SIMS)*. From [309,310].

#### **476. hmotnostní spektrometrie sekundárních neutrálních částic (SNMS)**

Hmotnostně spektrometrická technika, ve které jsou neutrální částice vyražené z povrchu vzorku v důsledku ostřelování primárním svazkem atomů nebo iontů jsou před jejich analýzou ionizovány, nejčastěji pomocí *fotoionizace*. Viz také *hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů*. Citace [309,310].

#### 477. sector mass spectrometer

*Mass spectrometer* consisting of one or more *magnetic sectors* for recording a *mass spectrum* of a monoenergetic beam of *ions*. Such instruments may also have one or more *electric sectors* for energy dispersion that can be arranged for velocity-focusing by compensating for dispersion by the magnetic sector if the beam is not truly monoenergetic. Such a combination provides double focusing of ions of the same  $m/z$ , i.e. focusing with respect to both direction and speed. From [311].

#### 477. sektorový hmotnostní spektrometr

Hmotnostní spektrometr složený z jednoho nebo více *magnetických sektorů* pro záznam *hmotnostního spektra* monoenergetického svazku iontů. Takové přístroje mají také jeden nebo více elektrostatických sektorů kvůli energetické disperzi, které mohou být uspořádány pro rychlostní fokusaci s kompenzací pro disperzi magnetického sektoru, jestliže svazek není zcela monoenergetický. Taková kombinace poskytuje dvojí fokusaci iontů stejné hodnoty  $m/z$ , tedy fokusaci s ohledem na směr i rychlost pohybu. Citace [311].

#### 478. selected ion flow tube (SIFT)

Device in which  $m/z$  selected *ions* are entrained in an inert carrier gas and subsequently undergo *ion/molecule reactions* with molecules introduced into the gas flow. See also *drift tube*. From [312].

#### 478. proudová trubice s vybranými ionty (SIFT)

Zařízení, ve kterém ionty se zvolenou hodnotou  $m/z$  vstupují do inertního nosného plynu a následně podstupují *iontově-molekulové reakce* přivedenými do toku plynu. Viz také *driftová trubice*. Citace [312].

#### 479. selected ion monitoring (SIM)

Deprecated: multiple ion detection, mass fragmentography, selected ion recording.

Operation of a *mass spectrometer* in which the abundances of *ions* of one or more specific  $m/z$  values are recorded rather than the entire *mass spectrum*. See also *selected reaction monitoring (SRM)*. Revised from [5,6] using additional information from [313].

#### 479. monitorování vybraných iontů (SIM)

Nedoporučuje se: násobná detekce iontů, hmotnostní fragmentografie, selektivní záznam iontů.

Pracovní režim hmotnostního spektrometru, při kterém je zastoupení iontů jedné nebo více specifických hodnot  $m/z$  zaznamenáno místo celého *hmotnostního spektra*. Viz také *monitorování vybraných reakcí (SRM)*. Upraveno podle [5, 6] s využitím doplňujících informací z [313].

#### 480. selected ion recording (SIR)

This term is deprecated. See *selected ion monitoring (SIM)*.

#### 480. selektivní záznam iontů (SIR)

Tento termín se nedoporučuje. Viz *monitorování vybraných iontů (SIM)*.

#### 481. selected reaction monitoring (SRM)

Data acquired from one or more specific *product ions* corresponding to *m/z* selected *precursor ions* recorded via two or more stages of *mass spectrometry*.

*Note 1:* Selected reaction monitoring in multiple-stage mass spectrometry is known as consecutive reaction monitoring.

*Note 2:* Selected reaction monitoring applied to multiple product ions from one or more precursor ions is known as multiple reaction monitoring.

See also *selected ion monitoring (SIM)*. From [314].

#### 481. monitorování vybraných reakcí (SRM)

Data získaná pro jeden nebo více specifických *produktových iontů* odpovídajících *prekurzorovým iontům* vybraným dle *m/z* pomocí dvou nebo více stupňové hmotnostní spektrometrie.

*Poznámka 1:* Monitorování vybraných reakcí ve více stupňové hmotnostní spektrometrii se popisuje jako následné monitorování reakcí.

*Poznámka 2:* Monitorování vybraných reakcí použité pro více produktových iontů z jednoho nebo více iontů prekurzoru se popisuje jako monitorování více reakcí.

Viz také *monitorování vybraných iontů (SIM)*. Citace [314].

#### 482. self-chemical ionization (self-CI)

*Chemical ionization* of an analyte where the *reagent ion* is an ionized form of the *analyte* or one of its *product ions*. From [315].

#### 482. chemická samoionizace

*Chemická ionizace* analytu, při které je *reakční ion* ionizovaná forma *analytu* nebo jeden z jeho *produktových iontů*. Citace [315].

#### 483. sensitivity, A

Slope of the calibration curve.

*Note 1:* If the curve is not a straight line, sensitivity will be a function of *analyte* concentration or amount.

*Note 2:* If sensitivity is to be a unique performance characteristic, it must depend only on the chemical measurement process, not upon scale factors.

From [5,6].

#### 483. citlivost, A

Směrnice kalibrační křivky.

*Poznámka 1:* Jestliže křivka není přímka, pak je citlivost funkcí koncentrace nebo množství *analytu*.

*Poznámka 2:* Má-li být citlivost unikátní charakteristikou výkonu, pak musí záviset pouze na procesu chemického měření, nikoliv na měřítku stupnice.

Citace [5,6].

#### 484. sheath flow interface

Capillary electrophoresis to *electrospray ionization* interface that uses a coaxial flow of *make-up liquid* that is introduced through a tube that is concentric with the separation capillary. From [216,217].

#### 484. rozhraní s přidavným tokem

Rozhraní kapilární elektroforézy s *ionizací elektrosprejem*, které používá koaxiální tok *přídavné kapaliny* přivedené kapilárou soustřednou se separační kapilárou. Citace [216,217].

#### 485. sheath gas

Gas introduced through a tube that is coaxial with the *electrospray emitter* to pneumatically assist the formation of the sprayed droplets. From [316].

#### 485. přídavný plyn

Plyn přivedený skrz kapiláru, která je koaxiální k *elektrosprejovému emitoru* pro pneumatickou podporu tvorby sprejovaných kapiček. Citace [316].

#### 486. sheath liquid

*Make-up liquid in a sheath flow interface*. From [26].

#### 486. přídavná kapalina

Přídavná kapalina v *rozhraní s přídavným tokem*. Citace [26].

#### 487. shotgun proteomics

Protein identification using a combination of high-performance liquid chromatography and *mass spectrometry* in which the proteins in a mixture are digested, usually by a specific enzyme, and the resulting peptides are separated by liquid chromatography and identified by *tandem mass spectrometry*. See also *bottom-up proteomics*. From [317].

#### 487. necílená proteomika

Identifikace proteinů s použitím kombinace vysokoúčinné kapalinové chromatografie a hmotnostní spektrometrie, kde proteiny ve směsi jsou enzymově rozštěpeny, obvykle za pomoci specifického enzymu, a vzniklé peptidy jsou rozděleny kapalinovou chromatografií a identifikovány *tandemovou hmotnostní spektrometrií*. Viz také *proteomika zdola*. Citace [317].

#### 488. skimmer

Cone with a central orifice that intercepts the center of a spray or jet expansion to sample the central portion of the expansion, for example, as in a *momentum separator*. From [253].

#### 488. odlučovací štěrbina odlučovač

Kužel s otvorem uprostřed, který rozděluje střed spreje nebo tryskové expanze pro vzorkování střední části expanze, např. jako v *hybnostním separátoru*. Citace [253].

#### 489. soft ionization

Formation of gas-phase *ions* without extensive fragmentation. See also *hard ionization*. From [318].

#### 489. měkká ionizace

Tvorba iontů v plynné fázi bez rozsáhlé fragmentace. Viz také *tvrdá ionizace*. Citace [318].

#### 490. sonic spray ionization (SSI)

Process in which both anions and cations are produced at atmospheric pressure from an ionic solution due to a statistically unbalanced charge distribution in the minute droplets formed by the action of a sonic atomizer. See also *spray ionization*. From [319].

#### 490. ionizace ultrazvukovým sprejem (SSI)

Proces, při kterém jsou anionty a kationty produkovány za atmosférického tlaku z iontového roztoku díky statisticky nevyvážené nábojové distribuci během tvorby kapiček ultrazvukovou sprejovou ionizací. Viz také *sprejová ionizace*. Citace [319].

#### 491. space charge effect

Result of mutual repulsion of particles of like charge (*ions*, electrons, etc.) that can limit the current in a charged-particle beam and can also cause some motion of ions in a beam or packet in addition to that caused by external fields.

*Note:* Space charge effects on ion trajectories are most noticeable in *ion trap* instruments that confine large numbers of ions in a small volume.

From [320].

#### 491. efekt prostorového náboje

Výsledek vzájemného odpuzování částic s nábojem (ionty, elektrony, apod.), který může omezovat proud ve svazku nabitých částic a také může způsobit určitý pohyb iontů ve svazku nebo svazku navíc k pohybu způsobenému externími silami.

*Poznámka:* Efekty prostorového náboje na trajektorie iontů jsou nejvýznamnější v přístrojích typu *iontové pastí*, kde je lokalizováno velké množství iontů v malém objemu.

Citace [320].

#### 492. spark ionization

Formation of *ions* from a solid material by an intermittent electric discharge. From [5,6].

#### 492. ionizace jiskrovým výbojem

Tvorba iontů z pevného materiálu pomocí přerušovaného elektrického výboje. Citace [5,6].

#### 493. spectral skewing

Deviation of the *peak* intensities in a *mass spectrum* from their expected values that occurs when the relative concentration of the various *analytes* change during acquisition of the mass spectrum. From [321].

#### 493. spektrální zkreslení

Odchylka intenzity *píků* v *hmotnostním spektru* od jejich očekávaných hodnot vyskytujících se v důsledku změn relativních koncentrací různých *analytů* v průběhu měření hmotnostních spekter. Citace [321].

#### 494. spray ionization

General term used to describe a range of ionization techniques for *analytes* in solution that involve dispersing the liquid into fine droplets as a component step. *Note:* Most of these techniques are examples of *atmospheric pressure ionization*.

From [322].

#### **494. sprejová ionizace**

Obecný termín označující techniky ionizace rozpuštěných *analytů*, které využívají rozprášení kapaliny na jemné kapičky jako základní krok.

*Poznámka:* Většina těchto technik jsou příklady *ionizací za atmosférického tlaku*.

Citace [322].

#### **495. stable ion**

*Ion* with internal energy sufficiently low that it does not rearrange or dissociate prior to detection in a *mass spectrometer*. From [5,6].

#### **495. stabilní ion**

Ion s natolik nízkou vnitřní energií, že nedochází k jeho přesmyku nebo disociaci před detekcí v hmotnostním spektrometru. Citace [5,6].

#### **496. stable isotope mass spectrometry**

See *isotope ratio mass spectrometry*.

#### **496. hmotnostní spektrometrie stabilních izotopů**

Viz *hmotnostní spektrometrie izotopových poměrů*.

#### **497. stable isotope ratio analysis of amino acids in cell culture (SILAC)**

Proteomics technique that detects differences in protein abundance between cultured cell samples using stable isotopic labeling achieved with labeled amino acids in one cell culture and unlabeled ones in a separate culture. From [323-325].

#### **497. analýza stabilních izotopových poměrů aminokyselin v buněčných kulturách (SILAC)**

Proteomická technika, kterou se měří rozdíly v zastoupení proteinů mezi vzorky buněčných kultur s použitím izotopového značení pomocí značených aminokyselin v jedné buněčné kultuře a bez izotopového značení ve druhé buněčné kultuře. Citace [323-325].

#### **498. stable isotope standards and capture by anti-peptide antibodies (SISCAPA)**

Method for absolute quantitation of a protein or proteins in a multiplexed fashion using isotope-labeled peptides as *surrogate internal standards*. The labeled peptides are produced by synthesizing a gene coding for each desired peptide, cell-free transcription, and translation of this gene in a medium containing  $^{13}\text{C}_6$ -labeled lysine, and digesting with trypsin the expressed protein composed of the desired concatenated peptides. For low-abundance proteins the sensitivity is increased by selective enrichment of the target peptides by antibody capture. From [326].

#### **498. stabilní izotopové standardy a záchyt pomocí protilátek proti peptidům (SISCAPA)**

Metoda pro absolutní kvantifikaci proteinu nebo proteinů v multiplexním režimu s pomocí izotopově značených peptidů jako *chemicky podobný vnitřních standardů*. Značené peptidy se připravují syntézou genové informace pro každý vybraný peptid, bezbuněčnou transkripcí, translací tohoto genu v médiu obsahujícím lysin značený  $^{13}\text{C}_6$  a trypsinovým štěpením se exprimovaného proteinu složeného z vybraných řetězců peptidů. Pro proteiny s nízkým zastoupením se citlivost zvyšuje pomocí selektivního obohacení cílového peptidu záchytem protilátkou. Citace [326].

#### **499. stability diagram**

See *Mathieu stability diagram*.

#### **499. stabilitní diagram**

Viz *Mathieuův stabilitní diagram*.

#### **500. static field**

Electric or magnetic field that does not change in time. From [327].

#### **500. statické pole**

Elektrické nebo magnetické pole, které se nemění v závislosti na čase. Citace [327].

#### **501. static secondary ion mass spectrometry (SSIMS)**

Method of *secondary ion mass spectrometry* using low current densities for analysis of sample surface components, in contrast with *dynamic secondary ion mass spectrometry*, which is used for analysis of components in the depth direction.

*Note:* When the sample is an organic molecule in solid form the term is often changed to organic SIMS or molecular SIMS.

From [124].

#### **501. statická hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (SSIMS)**

Metoda *hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů* s použitím nízké proudové hustoty pro analýzu povrchových vzorků, na rozdíl od *dynamické hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů*, která se používá pro hloubkovou analýzu komponent.

*Poznámka:* Když je vzorek organická molekula v pevné fázi, termín se často mění na organická SIMS nebo molekulový SIMS.

Citace [124].

#### **502. Stevenson's rule**

Rule stating that in competing fragmentations the *product ion* formed from its neutral species counterpart with the lower *ionization energy* will usually be the more abundant.

*Note:* The original version of this rule referred to reliability of determination of thermochemical data obtained for an *ion* produced by fragmentation of a single



$\sigma$ -bond in an *odd-electron ion* X-Y<sup>+</sup>, but was later extended to the version in more common use since then.

From [328-330].

### **502. Stevensonovo pravidlo**

Pravidlo, které říká, že při konkurenčních fragmentacích jsou mezi produktovými ionty hojnější ty, které vznikají z neutrálních prekurzorů s nižší ionizační energií.

*Poznámka:* Původní verze tohoto pravidla popisovala spolehlivost stanovení termochemických dat pro ion získaný fragmentací jedné sigma vazby v *iontu s lichým počtem elektronů* X-Y<sup>+</sup>, avšak později bylo pravidlo rozšířeno do obecnější formy.

Citace [328-330].

### **503. stored waveform inverse Fourier transform (SWIFT)**

Technique to create excitation waveforms for *ions* in *Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometers* or *Paul ion traps*. An excitation waveform in the time-domain is generated by taking the inverse Fourier transform of an appropriate frequency-domain programmed excitation spectrum, in which the resonance frequencies of ions to be excited are included.

*Note:* This procedure may be used for selection of *precursor ions* in *MS<sup>n</sup>* experiments.

From [331].

### **503. vložená vlnová funkce s inverzní Fourierovou transformací (SWIFT)**

Technika pro tvorbu excitačních vlnových funkcí pro ionty v *hmotnostních spektrometrech s Fourierovou transformací – iontové cyklotronové rezonance* nebo *Paulovy iontové pastí*. Excitační vlnová funkce v časové doméně je generována za použití inverzní Fourierovy transformace příslušné frekvenční domény pro programování excitačního spektra, ve kterém je zahrnuta rezonanční frekvence iontů pro excitace.

*Poznámka:* Tento postup může být použit pro výběr *prekurzorových iontů* v *MS<sup>n</sup>* experimentech.

Citace [331].

### **504. supercritical fluid chromatography-mass spectrometry (SFC-MS) supercritical fluid chromatography/mass spectrometry (SFC/MS)**

Combined technique in which a mixture of *analytes* is separated into solutions of individual components by chromatography that uses a supercritical fluid as mobile phase, followed by the ionization of the separation effluent in the *ion source of a mass spectrometer*. From [332].

### **504. superkritická fluidní chromatografie s hmotnostní spektrometrií (SFC-MS, SFC/MS)**

#### **nadkritická tekutinová chromatografie s hmotnostní spektrometrií**

Kombinovaná technika, ve které je směs *analytů* separována na roztoky jednotlivých komponent pomocí chromatografie s použitím nadkritické tekutiny jako mobilní fáze, následovaná ionizací chromatografického efluentu v iontovém zdroji hmotnostního spektrometru. Citace [332].

### **505. surface-assisted laser desorption/ionization (SALDI)**

Class of matrix-free *laser desorption ionization* techniques for biological macromolecules.

*Note:* An example is *desorption ionization on silicon (DIOS)*. From [333].

### **505. ionizace a desorpce laserem za asistence povrchu (SALDI)**

Skupina *laserových desorpčních ionizačních* technik bez přítomnosti matrice pro biologické makromolekuly.

*Poznámka:* Příklad je *desorpční ionizace na křemíku (DIOS)*. Citace [333].

### **506. surface-enhanced affinity capture (SEAC)**

See *surface-enhanced laser desorption/ionization (SELDI)*

### **506. povrchem zlepšený afinitní záchyt (SEAC)**

Viz *povrchem zlepšená laserová desorpce a ionizace (SELDI)*.

### **507. surface-enhanced laser desorption/ionization (SELDI)**

Variant of *matrix-assisted laser desorption/ionization (MALDI)* in which the matrix is replaced by a surface coating of a chromatographic stationary phase designed to selectively retain different subsets of proteins or peptides from a mixture depending on their physico-chemical properties or biochemical affinity characteristics.

*Note:* Originally this technique was named *surface-enhanced affinity capture (SEAC)* to distinguish it from *surface-enhanced neat desorption (SEND)* where the surface coating is designed to increase the efficiency of *laser desorption*.

From [334,335].

### **507. povrchem zlepšená laserová desorpce a ionizace (SELDI)**

Varianta *ionizace a desorpce laserem za účasti matrice (MALDI)*, u které je matrice nahrazena povrchem pokrytým chromatografickou stacionární fází upravenou pro selektivní záchyt různých podskupin proteinů nebo peptidů z jejich směsi na základě jejich fyzikálně-chemických nebo biochemicky afinitních vlastností.

*Poznámka:* Původně byla tato technika pojmenována *povrchem zlepšený afinitní záchyt (SEAC)* pro rozlišení od *povrchem zlepšené čisté desorpce (SEND)*, kde je pokrytí povrchu vytvořeno za účelem zvýšení účinnosti *laserové desorpce*.

Citace [334,335].

### **508. surface-enhanced neat desorption (SEND)**

See *surface-enhanced laser desorption/ionization (SELDI)*.

### **508. povrchem zlepšená čistá desorpce (SEND)**

Viz *povrchem zlepšená laserová desorpce a ionizace (SELDI)*.

### **509. surface-induced dissociation (SID)**

Fragmentation that results from the collision of an *ion* with a surface. From [336].

### **509. povrchem indukovaná disociace (SID)**

Fragmentace, která je důsledkem kolize iontů s povrchem. Citace [336].

### 510. surface-induced reaction (SIR)

Process wherein a reactant *ion* interacts with a surface to produce either chemically different species or a change in the internal energy of the reactant ion. From [337].

### 510. povrchem indukovaná reakce (SIR)

Proces, ve kterém reagující ion interaguje s povrchem za tvorby chemicky rozdílné částice nebo změny vnitřní energie reagujícího iontu. Citace [337].

*Pozn. překl. Změna vnitřní energie se obecně nepovažuje za reakci.*

### 511. surface ionization (SI)

Ionization of a neutral when it interacts with a solid surface with an appropriate work function and temperature. From [5,6].

### 511. povrchová ionizace (SI)

Ionizace neutrální částice, která interaguje s pevným povrchem s přiměřenou výstupní prací a teplotou. Citace [5,6].

### 512. surrogate internal standard internal standard

Compound added in accurately known amounts to a sample to be analyzed for a specified *analyte*. The surrogate internal standard is chemically similar to the analyte so that losses in the analytical procedure are the same for both and thus the analyte concentration can be determined relative to that of the standard.

*Note 1:* In quantitative *mass spectrometry* the preferred type is an isotope-labeled version of the analyte.

*Note 2:* The abbreviated term *internal standard* is often used.

See also *volumetric internal standard*. From [338].

### 512. chemicky podobný vnitřní standard vnitřní standard

Sloučenina přidaná v přesně definovaném množství ke vzorku na analýzu specifického *analytu*. Chemicky podobný vnitřní standard je tak chemicky podobný *analytu*, takže ztráty v analytickém postupu jsou stejné pro obě sloučeniny, a proto koncentrace analytu může být stanovena relativně k tomuto standardu.

*Poznámka 1:* V kvantitativní hmotnostní spektrometrii je preferován izotopově značený analog analytu.

*Poznámka 2:* Často se používá zkrácený termín *vnitřní standard*.

Viz také *odměrný vnitřní standard*. Citace [338].

*Pozn. překl. Anglické surrogate označuje látku chemicky podobnou analytu.*

### 513. sustained off-resonance irradiation (SORI)

Procedure associated with *Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometers* to facilitate *ion/neutral reactions* such as *low-energy collision-induced dissociation* in which a radio-frequency electric field, slightly off-resonance with respect to the cyclotron frequency of the reactant *ion*, cyclically accelerates and decelerates the reactant ion that is confined in the *Penning ion trap*. As a consequence, the orbit does not exceed the dimensions of the ion

trap but maintains a high average translational energy for an extended time that activates an ion/neutral process. From [339].

#### **513. nepřetržité ozařování mimo rezonanci (SORI)**

Postup spojený s *hmotnostními spektrometry typu iontové cyklotronové rezonance s Fourierovou transformací* pro umožnění *iontově-neutrálových reakcí jako nízkenergetické kolizně indukované disociace*, kde radiofrekvenční pole, mírně mimo rezonanci s ohledem na cyklotronovou frekvenci reagujícího iontu, cyklicky urychluje a zpomaluje reagující ion, který je lokalizován v *Penningově iontové pasti*. V důsledku toho orbit nepřekračuje rozměry iontové pasti, ale zachovává vysokou průměrnou translační energii po dlouhou dobu, takže aktivuje proces interakce iontu s neutrální částicí. Citace [339].

#### **514. tandem mass spectrometer**

*Mass spectrometer designed for mass spectrometry/mass spectrometry*. From [5,6].

#### **514. tandemový hmotnostní spektrometr**

Hmotnostní spektrometr určený pro *tandemovou hmotnostní spektrometrii (MS/MS)*. Citace [5,6].

#### **515. tandem mass spectrometry**

See *mass spectrometry/mass spectrometry (MS/MS)*.

#### **515. tandemová hmotnostní spektrometrie**

Viz *MS/MS*.

#### **516. tandem mass spectrometry in space**

*Tandem mass spectrometry procedure in which product ion spectra are recorded for ion beams in  $m/z$  analyzers separated in space. Specific  $m/z$  separation functions are designed so that in one section of the instrument ions are selected, dissociated in an intermediate region, and the product ions are then transmitted to another analyzer for  $m/z$  separation and data acquisition. From [340].*

#### **516. tandemová hmotnostní spektrometrie v prostoru**

Postup *tandemové hmotnostní spektrometrie*, při němž jsou *produktová hmotnostní spektra* zaznamenána pro iontové svazky v prostorově odlišených hmotnostních analyzátoch. Specifická separační funkce  $m/z$  je využita tak, aby v jedné části přístroje byly ionty vybrány, následně v přechodové oblasti disociovány a vzniklé produktové ionty převedeny do dalšího analyzátoru pro další separaci podle hodnot  $m/z$  a záznam dat. Citace [340].

#### **517. tandem mass spectrometry in time**

*Tandem mass spectrometry procedure in which product ion spectra are recorded in a single  $m/z$  analyzer (such as a Paul ion trap, linear ion trap, or Fourier transform-ion cyclotron resonance-mass spectrometer) in discrete steps over time. Ions in a specific  $m/z$  range are selected, dissociated, and the product ions analyzed sequentially in time.*

*Note: Mass spectrometers that can perform tandem mass spectrometry in time can also perform MS<sup>n</sup>.*

From [340].

#### **517. tandemová hmotnostní spektrometrie v čase**

Postup *tandemové hmotnostní spektrometrie*, u kterého jsou produktová hmotnostní spektra zaznamenána v jednom hmotnostním analyzátoru (jako např. *Paulova iontová past*, *lineární iontová past* nebo *iontová cyklotronová rezonance s Fourierovou transformací*) v časově rozlišených krocích. Ionty ve specifickém rozsahu *m/z* hodnot jsou vybrány, disociovány a *produktové ionty* analyzovány v časové sekvenci.

*Poznámka:* Hmotnostní spektrometry, které umožňují tandemovou hmotnostní spektrometrii v čase, také umožňují MS<sup>n</sup>.

Citace [340].

#### **518. target gas**

This term is deprecated. See *collision gas*.

#### **518. terčový plyn**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *kolizní plyn*.

#### **519. Taylor cone**

Conical shape of the liquid emanating from a capillary under high potential, as in *electrospray* or other electrohydrodynamic spray processes. From [341,342].

#### **519. Taylorův kužel**

Kuželový tvar kapaliny proudící z kapiláry pod vysokým napětím, jako v případě *elektrospreje* nebo dalších elektrohydrodynamických sprejovacích procesů. Citace [341,342].

#### **520. thermal ionization (TI)**

Ionization of a neutral through contact with a high-temperature surface. From [5,6].

#### **520. termální ionizace (TI)**

Ionizace neutrálních částic pomocí kontaktu s vysokoteplotním povrchem. Citace [5,6].

#### **521. thermospray ionization**

*Spray ionization* in which a liquid is flowed through a heated capillary to produce a spray of droplets and solvent vapor. *Ions* are formed due to the statistical imbalance of charges in the droplets or by a heated filament. From [343,344].

#### **521. termosprejová ionizace**

*Sprejová ionizace*, u které kapalina protéká ohřátou kapilárou za tvorby spreje kapiček a par rozpouštědla. Ionty se tvoří díky statistické nerovnováze nábojů v kapičkách nebo pomocí vyhřívání vlákna. Citace [343,344].

#### **522. thin layer chromatography-mass spectrometry (TLC-MS)**

**thin layer chromatography/mass spectrometry (TLC/MS)**

Technique by which a mixture of *analytes* is separated into individual components by liquid chromatography, followed by the ionization of the separated species by an *ion source* of a *mass spectrometer*. From [345].

### **522. tenkovrstvá chromatografie s hmotnostní spektrometrií (TLC-MS)**

Technika, pomocí které je směs *analytů* separována na jednotlivé složky pomocí tenkovrstvé chromatografie, následovaná ionizací separovaných částic v iontovém zdroji hmotnostního spektrometru. Citace [345].

### **523. thomson, Th**

This term is deprecated. See *m/z*.

### **523. thomson, Th**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *m/z*.

### **524. time-lag focusing (TLF)**

Energy focusing of *ions* formed in the gas phase in a *time-of-flight mass spectrometer* that is accomplished by introducing a time delay between the formation of the ions and the application of the *accelerating potential* pulse. See also *delayed extraction*. From [346].

### **524. fokusace časovou prodlevou**

Energetické zosřtení iontů vznikajících v plynné fázi v *hmotnostním spektrometru s analyzátozem doby letu*, což je dosaženo časovým zpožděním mezi tvorbou iontů a aplikací *urychlovacího potenciálového* pulzu. Viz také *zpožděná extrakce*. Citace [346].

### **525. time-of-flight mass spectrometer (TOF-MS)**

*Mass spectrometer* that separates *ions* by *m/z* in a *field-free region* after acceleration through a fixed *accelerating potential*. Ions of the same initial translational energy and different *m/z* require different times to traverse a given distance in the field-free region. From [5,6].

### **525. hmotnostní spektrometr s analyzátozem doby letu (TOF-MS)**

Hmotnostní spektrometr, který separuje ionty podle *m/z* v *oblasti bez pole* po akceleraci konstantním *urychlovacím potenciálem*. Ionty se stejnou počáteční translační energií a různou hodnotou *m/z* vyžadují různé časy pro překonání dané vzdálenosti v *oblasti bez pole*. Citace [5,6].

### **526. tolyl ion**

Even-electron  $C_7H_7^+$  *ion* with the same carbon skeleton as toluene that has lost a hydrogen atom from one of the ring carbons that carries the positive charge. See also *tropylium ion*, *benzyl ion*.

From [57].

### **526. tolylový ion**

Kation  $C_7H_7^+$  se sudým počtem elektronů a stejným uhlíkovým skeletem jako toluen, který ztratil atom vodíku z některého aromatického atomu uhlíku. Viz také *tropyliový ion*, *benzyllový ion*. Citace [57].

### **527. top-down proteomics**

Method of protein identification that uses the  $m/z$  selection of intact proteins followed by fragmentation and  $m/z$  separation in a second stage of *mass spectrometry*. Mixtures of proteins must first be separated by liquid chromatography or other separation method prior to analysis by mass spectrometry. From [347,348].

### **527. proteomika shora**

Metoda identifikace proteinů, která používá výběr  $m/z$  intaktních proteinů následovaný fragmentací a separací  $m/z$  ve druhém stupni hmotnostní spektrometrie. Směsi proteinů musí být nejdříve separovány pomocí kapalinové chromatografie nebo jiné separační metody před analýzou pomocí hmotnostní spektrometrie. Citace [347,348].

### **528. toroidal ion trap**

*Ion trapping device based on the three-dimensional structure formed by rotating the cross-section of a quadrupole ion trap about the edge perpendicular to the plane of the ring electrode. The resulting trapping region is toroidal. From [349].*

### **528. toroidní iontová past**

Zařízení pro záchyt iontů na základě trojrozměrné struktury vytvořené rotací srážkového průměru *kvadrupólové iontové pasti* v kolmé rovině k rovině kruhové elektrody. Výsledná oblast záchytu je toroidní. Citace [349].

### **529. total ion chromatogram**

*This term is deprecated. See total ion current chromatogram (TICC).*

### **529. celkový iontový chromatogram**

Tento termín se nedoporučuje. Viz *chromatogram celkového iontového proudu (TICC)*.

### **530. total ion current (TIC)**

*Obsolete: after mass analysis, before mass analysis.*

*Sum of all the separate ion currents carried by the ions of different  $m/z$  contributing to a complete mass spectrum or in a specified  $m/z$  range of a mass spectrum. From [5,6].*

### **530. celkový iontový proud (TIC)**

Zastaralé: celkový proud po hmotnostní analýze, celkový proud před hmotnostní analýzou.

Suma všech separovaných iontových proudů, kterými ionty různých hodnot  $m/z$  přispívají k celkovému hmotnostnímu spektru nebo k jeho části ve specifickém rozsahu  $m/z$  hodnot. Citace [5,6].

*Pozn. překl. V angličtině se původně rozlišovaly dva typy TIC: celkový proud po hmotnostní analýze (after mass analysis), vypočtený jako součet všech jednotlivých iontových proudů různých iontů obsažených ve spektru a celkový proud před hmotnostní analýzou (before mass analysis), vypočtený jako součet všech jednotlivých iontových proudů iontů stejné polarity.*

### **531. total ion current chromatogram (TICC)**

**reconstructed total ion current chromatogram**

Deprecated: total ion chromatogram.

Chromatogram created by plotting the *total ion current* in a series of *mass spectra* recorded as a function of retention time. From [350].

**531. chromatogram celkového iontového proudu (TICC)**

**rekonstruovaný chromatogram celkového iontového proudu**

Nedoporučuje se: celkový iontový chromatogram.

Chromatogram zkonstruovaný jako závislost *celkového iontového proudu* v sérii hmotnostních spekter na retenčním času. Citace [350].

**532. total ion current electropherogram**

**total ion current electropherogram**

Plot of the *total ion current* in each of a series of *mass spectra* that are recorded as a function of electrophoresis time. From [351].

**532. elektroferogram celkového iontového proudu**

Závislost *celkového iontového proudu* série hmotnostních spekter, která jsou zaznamenána jako funkce migračního času. Citace [351].

**533. total ion current electropherogram**

See *total ion current electropherogram*.

**533. elektroferogram celkového iontového proudu**

Sporná varianta v češtině neexistuje.

Viz *elektroferogram celkového iontového proudu*.

**534. total ion current profile**

Any plot of *total ion current* in a series of *mass spectra* recorded as a function of time, including *total ion current chromatogram*, *total ion current electropherogram*, *flow injection mass spectrometry*, or any other time dependent sampling. See also *extracted ion profile*. From [352].

**534. profil celkového iontového proudu**

Jakákoliv záznam *celkového iontového proudu* série hmotnostních spekter zaznamenaný jako časová funkce, zahrnuje *chromatogram celkového iontového proudu*, *elektroferogram celkového iontového proudu*, *injekční průtokovou hmotnostní spektrometrii* nebo jakékoliv jiné časově závislé způsoby dávkování. Viz také *profil extrahovaného iontu*. Citace [352].

**535. transmission efficiency**

Ratio of the number of *ions* leaving a region of a *mass spectrometer* to the number entering that region. From [5,6].

**535. transmisní účinnost**

Poměr počtu iontů opouštějících oblast hmotnostního spektrometru k počtu iontů vstupujících do této oblasti. Citace [5,6].

**536. transmission quadrupole mass spectrometer**

**quadrupole mass analyzer**

**quadrupole mass filter**

**quadrupole mass spectrometer**



*Mass spectrometer* that consists of an array of four parallel rod electrodes whose centers form the corners of a square and whose opposing electrode pairs are connected. The electric potential applied between the connected pairs of rods is a superposition of a static potential and a sinusoidal radio frequency potential. The motion of an *ion* in the *x-y* plane perpendicular to the length direction of the rod electrodes is described by the Mathieu equation whose solutions show that ions in a particular *m/z* range can be transmitted along the *z*-axis. Revised from [5,6] using additional information from [353].

### **536. transmisní kvadrupólový hmotnostní spektrometr**

**kvadrupólový hmotnostní analyzátor**

**kvadrupólový hmotnostní filtr**

**kvadrupólový hmotnostní spektrometr**

Hmotnostní spektrometr, který se skládá z pole čtyř paralelních tyčových elektrod, jejichž středy tvoří rohy čtverce a jejichž protilehlé elektrodové páry jsou elektricky spojeny. Elektrické napětí vložené mezi spojené páry tyčí je superpozicí statického potenciálu a sinusoidního radiofrekvenčního napětí. Pohyb iontu v rovině *x-y* kolmé ke směru délky tyčových elektrod je popsán Mathieuovou rovnicí, jejíž řešení ukazuje, že ionty nastaveného *m/z* rozsahu jsou propuštěny podél osy *z*. Upraveno podle [5,6] s využitím doplňujících informací z [353].

### **537. transport region**

Region in a *mass spectrometer* in which an ion beam is transported from the ion source to the *ion optics* or from one ion optical element to the next. From [354].

### **537. transportní oblast**

Oblast hmotnostního spektrometru, ve které je svazek iontů převáděn z iontového zdroje do *iontové optiky* nebo z jedné části iontové optiky do další. Citace [354].

### **538. triple quadrupole mass spectrometer**

*Tandem mass spectrometer* comprising two *transmission quadrupole mass spectrometers* in series, with a (non-selecting) *RF-only quadrupole* (or other multipole) between them to act as a *collision cell*. From [78].

### **538. trojitý kvadrupólový hmotnostní spektrometr**

*Tandemový hmotnostní spektrometr* skládající se ze dvou *transmisních kvadrupólových hmotnostních spektrometrů* v sériovém zapojení, s (neselektujícím) *vysokofrekvenčním kvadrupólem* (nebo jiným multipólem) mezi nimi sloužícím jako kolizní cela bez selekce iontů. Citace [78].

### **539. tropylium ion**

Delocalized *carbenium ion*, cycloheptatrienylium,  $C_7H_7^+$ , derived formally by detachment of one *hydride ion* from the  $CH_2$  group of cyclohepta-1,3,5-triene and substitution derivatives thereof. See also *benzyl ion*, *tolyl ion*. From [6].

### **539. tropyliový ion**

Delokalizovaný karbeniový ion, cykloheptatrienylium,  $C_7H_7^+$ , odvozený formálně odtržením jednoho hydridového aniontu z  $CH_2$  skupiny cyklohepta-1,3,5-trienu a jeho substitučních derivátů. Viz také *benzylový ion*, *tolylový ion*. Citace [6].

*Pozn. překl.* V originálu je patrně chyba vyplývající se záměny pojmů hydride ion a hydride anion, ačkoliv v originální verzi vstupu o hydronu je to jasně vysvětleno.

#### 540. unified atomic mass unit, u dalton

Non-SI unit of mass defined as one-twelfth of the mass of one atom of  $^{12}C$  at rest in its ground state and equal to  $1.660\,538\,921\,(73)\,10^{-27}$  kg where the digits in parentheses indicate the estimated uncertainty in the final two digits of the value. Equivalent to the dalton (Da) unit.

*Note:* The abbreviation *amu* for *atomic mass unit* is deprecated; it has been used to denote atomic masses measured relative to a single atom of  $^{16}O$ , or to the isotope-averaged mass of an oxygen atom, or to a single atom of  $^{12}C$ .

Revised from [6] using additional information from [46].

#### 540. unifikovaná atomová hmotnostní jednotka, u dalton

Jednotka hmotnosti, která nepatří do SI, definovaná jako 1/12 hmotnosti jednoho atomu  $^{12}C$  v základním stavu, která je rovna  $1.660\,538\,921\,(73)\,10^{-27}$  kg, kde číslice v závorce ukazují odhadovanou nejistotu posledních 2 číslic uvedené hodnoty. Ekvivalent jednotky je dalton (Da).

*Poznámka:* Zkratka *amu* pro *atomovou hmotnostní jednotku* se nedoporučuje. Používala se pro označení atomové hmotnosti měřené relativně vůči jednomu atomu  $^{16}O$  nebo k izotopově zprůměrované hmotnosti atomu kyslíku nebo k jednomu atomu  $^{12}C$ .

Upraveno podle [6] s využitím doplňujících informací z [46].

#### 541. unimolecular dissociation

*Fragmentation reaction* in which the molecularity of the reaction system is unity. The dissociation may arise from the extra energy acquired by a *metastable ion* produced in the *ion source* or that provided by *collisional excitation* of a *stable ion*. From [355].

#### 541. monomolekulová disociace

*Fragmentační reakce*, při níž je molekularita reakčního systému jednotková. K disociaci může docházet díky dodatečné energii získané *metastabilním iontem* vytvořeným v *iontovém zdroji* nebo vytvořeným *kolizní excitací stabilního iontu*. Citace [355].

*Pozn. překl.* Přesněji „monomolekularita reakce“.

#### 542. unit mass resolution

*Mass resolution* such that it is possible to clearly distinguish a *peak* corresponding to a singly charged *ion* from its neighbors 1 u away, usually with no more than 5–10 % overlap.

*Note:* This term is most frequently used to describe resolution obtained using a *Paul ion trap* or a *transmission quadrupole mass spectrometer*.

From [356].

#### **542. jednotkové hmotnostní rozlišení**

*Hmotnostní rozlišení*, které umožňuje jasně rozlišit *pík* odpovídající jedenkrát nabitému iontu od jeho sousedních *píků* lišících se o jednotku, obvykle s překryvem méně než 5-10 %.

*Poznámka:* Tento termín se nejčastěji používá pro popis rozlišení získaného na *Paulově iontové pasti* nebo na *transmisním kvadrupólovém hmotnostním spektrometru*.

Citace [356].

#### **543. unstable ion**

Nascent *ion* that is either inherently unstable or formed with sufficient energy to dissociate within the region of formation such as the *ion source* or *collision cell*.

Revised from [5,6].

#### **543. nestabilní ion**

*Ion* ve stavu zrodu, který je buď ze své podstaty nestabilní, nebo vznikl s dostatečnou energií pro disociaci v zóně vzniku, např. v *iontovém zdroji* nebo v *kolizní cele*. Upraveno podle [5,6].

#### **544. vertical ionization**

Process in which one or more electrons are removed from or added to a molecule without a change in the positions of the atoms.

*Note 1:* The resulting *ion* is typically in an excited vibrational state.

*Note 2:* Such a “frozen nuclei” process is called a Franck-Condon process in optical spectroscopy.

From [5,6].

#### **544. vertikální ionizace**

Proces, při němž jeden nebo více elektronů jsou odebrány nebo přidány k molekule bez změny polohy jejích atomů.

*Poznámka 1:* Vznikající *ion* je obvykle ve vibračně excitovaném stavu.

*Poznámka 2:* Tento tzv. proces zmrzlého jádra je v optické spektroskopii nazýván Franckův-Condonův proces.

Citace [5,6].

#### **545. v-ion**

High-energy *product ion* of a protonated peptide formally equivalent to a *y-ion* with the ionizing proton on the N-terminus, but with elimination of HR from the N-terminus where R is the side-chain on the C-atom of the N-terminal residue, to give a  $(\text{H}_2\text{N}^+=\text{CH}-\text{CO}^-)$  structure. From [112].

#### **545. ion typu v**

Energeticky bohatý *produktový ion* protonovaného peptidu formálně odpovídající *iontu typu y* s ionizujícím protonem na N-konci, avšak s eliminací HR z N-konce, kde R je boční řetězec na C-atomu N-konce, a to za vzniku struktury  $(\text{H}_2\text{N}^+=\text{CH}-\text{CO}^-)$ . Citace [112].

#### 546. volumetric internal standard

Compound added in a fixed reproducible amount to a solution to be analyzed by gas chromatography to permit corrections for uncontrolled variations in injected volumes. See also *surrogate internal standard*. From [357].

#### 546. odměrný vnitřní standard

Sloučenina přidaná v konstantním reprodukovatelném množství do roztoku analyzovaného plynovou chromatografií, která umožňuje korigovat neočekávané variace dávkovaných objemů. Viz také *chemicky podobný vnitřní standard*. Citace [357].

#### 547. Wahrhaftig diagram

Diagram illustrating the relative contributions in *unimolecular dissociation* of an *ion*, for example, by homolytic cleavage of a single bond, and fragmentation following rearrangement. The diagram is in two parts with a common horizontal axis representing the internal energy of the *ion*. The vertical axis in one part of the diagram shows the two types of rate constant on a logarithmic scale, and that for the other portion of the diagram indicates the distribution function for internal energy of the ion. From [24,358].

#### 547. Wahrhaftigův diagram

Diagram ukazující relativní příspěvky k *monomolekulové disociaci iontu*, např. homolytickým štěpením jednoduché vazby a fragmentací následující po přesmyku. Tento diagram má dvě části se společnou vodorovnou osou představující vnitřní energii iontu. Svislá osa v jedné části diagramu ukazuje dva typy rychlostních konstant v logaritmickém měřítku, zatímco v jeho druhé části ukazuje rozdělovací funkci pro vnitřní energii iontu. Citace [24,358].

#### 548. Wien filter

*Mass spectrometer* in which *m/z* separation is achieved using *crossed electric and magnetic fields*.

*Note:* It can also be operated as a charged particle energy analyzer or monochromator.

From [359].

#### 548. Wienův filtr

Hmotnostní spektrometr, u kterého je *m/z* separace dosaženo pomocí *zkříženého elektrického a magnetického pole*.

*Poznámka:* Může také pracovat jako energetický analyzátor nabitých částic nebo jako monochromátor.

Citace [359].

#### 549. w-ion

High-energy *product ion* of a protonated peptide formally equivalent to a *z-ion* that has lost the part of the N-terminal side-chain starting at the  $\gamma$ -carbon (if any). From [112].

#### 549. ion typu w

Energeticky bohatý *produktový ion* protonovaného peptidu formálně odpovídající *iontu typu z*, který ztratil část N-koncového bočního řetězce vycházejícího z  $\gamma$ -uhlíku (je-li přítomen). Citace [112].

#### 550. x-ion

*Fragment ion* containing the peptide C-terminus formed upon dissociation of a peptide *ion* at the peptide backbone C-C bond. From [28].

#### 550. ion typu x

*Fragmentový ion* obsahující C-konec peptidu vzniklý disociací C-C vazby peptidového řetězce. Citace [28].

*Pozn. překl.* Jde o vazbu  $C_{\alpha}$ -C peptidového řetězce.

#### 551. y-ion

*Fragment ion* containing the peptide C-terminus formed upon dissociation of a peptide *ion* at the peptide backbone C-N bond. From [28].

#### 551. ion typu y

*Fragmentový ion* obsahující C-konec peptidu vzniklý disociací peptidové vazby (C-N) peptidového řetězce. Citace [28].

#### 552. z-ion

*Fragment ion* containing the peptide C-terminus formed upon dissociation of a peptide *ion* at the peptide backbone N-C bond. From [28].

#### 552. ion typu z

*Fragmentový ion* obsahující C-konec peptidu vzniklý disociací N- $C_{\alpha}$  vazby peptidového řetězce. Citace [28].

Literatura (převzato z originální publikace)

1. J. F. J. Todd. *Pure Appl. Chem.* **63**, 1541 (1991).
2. J. F. J. Todd. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **142**, 211 (1995).
3. K. Biemann. *Pure Appl. Chem.* **65**, 1021 (1993).
4. Y.-F. Liu, Z.-Y. Guo, X.-Q. Liu, T. Qu, J.-L. Xie. *Pure Appl. Chem.* **66**, 305 (1994).
5. IUPAC. *Compendium of Analytical Nomenclature*, 3<sup>rd</sup> ed. (the "Orange Book"). Prepared for publication by J. Inczédy, T. Lengyel, A. M. Ure, Blackwell Science, Oxford (1998).
6. IUPAC. *Compendium of Chemical Terminology*, 2<sup>nd</sup> ed. (the "Gold Book"). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). XML on-line corrected version: <http://dx.doi.org/10.1351/goldbook> (2006–) created by M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; updates compiled by A. Jenkins.
7. IUPAC. *Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*, 3<sup>rd</sup> ed. (the "Green Book"). Prepared for publication by E. R. Cohen, T. Cvitaš, J. G. Frey, B. Holmström, K. Kuchitsu, R. Marquardt, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H. L. Strauss, M. Takami, A. J. Thor, RSC Publishing, Cambridge, UK (2007).
8. P. Price. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **2**, 336 (1991).
9. American Society for Mass Spectrometry: <http://www.asms.org/>.
10. O. D. Sparkman. *Mass Spec Desk Reference*, Global View Publishing, Pittsburgh (2006).
11. A. I. Mallet, S. Down. *Dictionary of Mass Spectrometry*, John Wiley, Chichester (2010).
12. K. K. Murray. *J. Chromatogr., A* **1217**, 3922 (2010).
13. R. G. Cooks, A. L. Rockwood. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **5**, 93 (1991).
14. J. Beynon. *Pure Appl. Chem.* **50**, 65 (1978).
15. A. G. Marshall, C. L. Hendrickson, G. S. Jackson. *Mass Spectrom. Rev.* **17**, 1 (1998).
16. M. Bursey. *Mass Spectrom. Rev.* **10**, 1 (1991).
17. J. Adams. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **3**, 473 (1992).
18. J. Lederberg, M. Wightman. *Anal. Chem.* **36**, 2362 (1964).
19. F. W. Karasek, R. J. Smythe. *Anal. Chem.* **43**, 2008 (1971).
20. T. Hirschfeld. *Anal. Chem.* **52**, 297A (1980).
21. Conventions adopted by RCM in Advice to Authors. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **17**, Issue 1 (2003).
22. S. A. Gerber, J. Rush, O. Stemman, M. W. Kirschner, S. P. Gygi. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **100**, 6940 (2003).
23. F. White, T. Collins. *Appl. Spectrosc.* **8**, 169 (1954).
24. F. W. McLafferty, F. Turecek. *Interpretation of Mass Spectra*, University Science Books, Mill Valley, CA (1993).
25. A. W. T. Bristow, K. S. Webb. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **14**, 1086 (2003).
26. R. D. Smith, J. A. Loo, C. G. Edmonds, C. J. Barinaga, H. R. Udseth. *Anal. Chem.* **62**, 882 (1990).
27. T. P. Conrads, G. A. Anderson, T. D. Veenstra, L. Paša-Tolić, R. D. Smith. *Anal. Chem.* **72**, 3349 (2000).
28. P. Roepstorff, J. Fohlman. *Biomed. Mass Spectrom.* **11**, 601 (1984).
29. R. Houriet, T. Gäumann. *Helvetica Chim. Acta* **59**, 119 (1976).
30. E. Klufft, N. M. M. Nibbering. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **92**, 171 (1989).
31. H. E. Lumpkin, G. E. Taylor. *Anal. Chem.* **33**, 476 (1961).
32. R. Houriet, T. A. Elwood, J. H. Futrell. *J. Am. Chem. Soc.* **100**, 2320 (1978).
33. N. S. Shuman, W. R. Stevens, K. Lower, T. Baer. *J. Phys. Chem. A* **113**, 10710 (2009).
34. R. G. Cooks, Z. Ouyang, Z. Takats, J. M. Wiseman. *Science* **311**, 1566 (2006).
35. T. M. Annesley. *Clin. Chem.* **49**, 1041 (2003).
36. B. Gulbakan, E. Yasun, M. I. Shukoor, Z. Zhu, M. You, X. Tan, H. Sanchez, D. H. Powell, H. Dai, W. Tan. *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 17408 (2010).
37. P. H. Hemberger, J. A. Laramée, A. R. Hubik, R. G. Cooks. *J. Phys. Chem.* **85**, 2335 (1981).

38. L. Van Vaeck, H. Struyf, W. V. Roy, F. Adams. *Mass Spectrom. Rev.* **13**, 209 (1994).
39. J. A. Hill, S. A. Martin, J. E. Biller, K. Biemann. *Biomed. Env. Mass Spectrom.* **17**, 147 (1988).
40. L. C. Taylor, D. A. Brent, J. S. Cottrell. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **145**, 542 (1987).
41. D. K. Bohme, D. B. Dunkin, F. C. Fehsenfeld, E. E. Ferguson. *J. Chem. Phys.* **51**, 863 (1969).
42. D. I. Carroll, I. Dzidic, R. N. Stillwell, K. D. Haegele, E. C. Horning. *Anal. Chem.* **47**, 2369 (1975).
43. E. Rosenberg. *J. Chromatogr., A* **1000**, 841 (2003).
44. V. V. Laiko, M. A. Baldwin, A. L. Burlingame. *Anal. Chem.* **72**, 652 (2000).
45. D. B. Robb, T. R. Covey, A. P. Bruins. *Anal. Chem.* **72**, 3653 (2000).
46. P. J. Mohr, B. N. Taylor, D. B. Newell. *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1527 (2012).
47. B. H. Bransden, A. Dalgarno. *Proc. Phys. Soc., London A* **69**, 65 (1956).
48. S. Singh, R. K. Boyd, F. M. Harris, J. H. Beynon. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **373** (1985).
49. I. Manisali, D. Chen, B. Schneider. *Trends Anal. Chem.* **25**, 243 (2006).
50. C. Pan, G. Zhu, R. F. Browner. *J. Anal. At. Spectrom.* **7**, 1231 (1992).
51. J. Yergey, D. Heller, G. Hansen, R. J. Cotter, C. Fenselau. *Anal. Chem.* **55**, 353 (1983).
52. R. E. March. *J. Mass Spectrom.* **32**, 351 (1997).
53. J. A. Marto, S. Guan, A. G. Marshall. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **8**, 615 (1994).
54. C. L. Hendrickson, D. A. Laude. *Anal. Chem.* **67**, 1717 (1995).
55. W. M. A. Niessen. In *The Encyclopedia of Mass Spectrometry*, M. L. Gross, R. M. Caprioli (Eds.), Elsevier (2006).
56. T. P. J. Izod, J. M. Tedder. *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **337**, 333 (1974).
57. T. Baer, J. C. Morrow, J. D. Shao, S. Olesik. *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 5633 (1988).
58. R. C. Dunbar. *Mass Spectrom. Rev.* **23**, 127 (2004).
59. N. L. Kelleher, H. Y. Lin, G. A. Valaskovic, D. J. Aaserud, E. K. Fridriksson, F. W. McLafferty. *J. Am. Chem. Soc.* **121**, 806 (1999).
60. B. T. Chait. *Science* **314**, 65 (2006).
61. D. J. Douglas. *Mass Spectrom. Rev.* **28**, 937 (2009).
62. J. F. J. Todd. *Mass Spectrom. Rev.* **10**, 3 (1991).
63. J. Meija, J. A. Caruso. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **15**, 654 (2004).
64. C. J. Hogan, J. A. Carroll, H. W. Rohrs, P. Biswas, M. L. Gross. *Anal. Chem.* **81**, 369 (2009).
65. B. Gologan, J. R. Green, J. Alvarez, J. Laskin, R. G. Cooks. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 1490 (2005).
66. C. Cheng, D. Giblin, M. L. Gross. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **9**, 216 (1998).
67. A. Savagnac, H. Aurelle, C. Casas, F. Couderc, P. Gavard, D. Prome, J. C. Prome. *Chem. Phys. Lipids* **51**, 31 (1989).
68. K. B. Tomer, N. J. Jensen, M. L. Gross, J. Whitney. *Biomed. Environ. Mass Spectrom.* **13**, 265 (1986).
69. X. Czeszak, W. Morelle, G. Ricart, D. Tétaert, J. Lemoine. *Anal. Chem.* **76**, 4320 (2004).
70. M. Rabrenović, C. J. Proctor, T. Ast, C. G. Herbert, A. G. Brenton, J. H. Beynon. *J. Phys. Chem.* **87**, 3305 (1983).
71. P. S. Rudolph, C. E. Melton. *J. Chem. Phys.* **32**, 586 (1960).
72. J. M. Dyke, A. M. Shaw, T. G. Wright. *J. Phys. Chem.* **98**, 6327 (1994).
73. T. J. Cornish, R. J. Cotter. *Rapid. Commun. Mass Spectrom.* **8**, 781 (1994).
74. B. L. Schram, B. Adamczyks, A. J. H. Boerboom. *J. Sci. Instrum.* **43**, 638 (1966).
75. J. M. Miller, J. Ross, J. Rustenburg, G. L. Wilson. *Anal. Chem.* **45**, 627 (1973).
76. D. J. Douglas, J. B. French. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **3**, 398 (1992).
77. R. K. Boyd, P. A. Bott, B. R. Beer, D. J. Harvan, J. R. Hass. *Anal. Chem.* **59**, 189 (1987).
78. A. K. Shukla, J. H. Futrell. *Mass Spectrom. Rev.* **12**, 211 (1993).

79. S. A. McLuckey, G. L. Glish, R. G. Cooks. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **39**, 219 (1981).
80. R. A. Yost, C. G. Enke. *J. Am. Chem. Soc.* **100**, 2274 (1978).
81. S. D. Tanner, V. I. Baranov, D. R. Bandura. *Spectrochim. Acta, Part B* **57**, 1361 (2002).
82. A. P. Bruins, T. R. Covey, J. D. Henion. *Anal. Chem.* **59**, 2642 (1987).
83. K. B. Tomer, C. R. Guenat, L. J. Deterding. *Anal. Chem.* **60**, 2232 (1988).
84. S. S. Brenner, J. T. McKinney. *Rev. Sci. Instrum.* **43**, 1264 (1972).
85. R. M. Caprioli. *Trends Anal. Chem.* **7**, 328 (1988).
86. R. M. Caprioli, T. Fan, J. S. Cottrell. *Anal. Chem.* **58**, 2949 (1986).
87. L. Li, A. P. L. Wang, L. D. Coulson. *Anal. Chem.* **65**, 493 (1993).
88. R. J. Beuhler, L. Friedman. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **23**, 81 (1977).
89. G. C. Stafford. *Environ. Health Perspect.* **36**, 85 (1980).
90. K. Rinn, A. Muller, H. Eichenauer, E. Salzborn. *Rev. Sci. Instrum.* **53**, 829 (1982).
91. F. W. Peek. *Dielectric Phenomena in High-Voltage Engineering*, McGraw-Hill (1929).
92. E. C. Huang, T. Wachs, J. J. Conboy, J. D. Henion. *Anal. Chem.* **62**, 713 (1990).
93. C. M. Whitehouse, R. N. Dreyer, M. Yamashita, J. B. Fenn. *Anal. Chem.* **57**, 675 (1985).
94. B. Thomson, J. Iribarne, P. Dziedzic. *Anal. Chem.* **54**, 2219 (1982).
95. W. M. A. Niessen, A. P. Tinke. *J. Chromatogr., A* **703**, 37 (1995).
96. R. C. Willoughby, R. F. Browner. *Anal. Chem.* **56**, 2626 (1984).
97. M. M. Cordero, T. J. Cornish, R. J. Cotter, I. A. Lys. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **9**, 1356 (1995).
98. W. K. Van Asselt, B. Poelsema, A. L. Boers. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **11**, L107 (1978).
99. M. Mann, R. C. Hendrickson, A. Pandey. *Ann. Rev. Biochem.* **70**, 437 (2001).
100. H. S. Gadgil, G. D. Pipes, T. M. Dillon, M. J. Treuheit, P. V. Bondarenko. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **17**, 867 (2006).
101. B. N. Colby. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **3**, 558 (1992).
102. R. J. Cotter. *Time-of-Flight Mass Spectrometry: Instrumentation and Applications in Biological Research*, American Chemical Society, Washington, DC (1997).
103. M. L. Vestal, P. Juhasz, S. A. Martin. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **9**, 1044 (1995).
104. M. Takayama. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **8**, 309 (1994).
105. M. Vincenti. *Int. J. Mass Spectrom.* **212**, 505 (2001).
106. U. Schade, R. Stoll, F. W. Röllgen. *Org. Mass Spectrom.* **16**, 441 (1981).
107. Z. Takats, I. Cotte-Rodriguez, N. Talaty, H. Chen, R. G. Cooks. *Chem. Commun.* 1950 (2005).
108. K. L. Busch, S. E. Unger, A. Vincze, R. G. Cooks, T. Keough. *J. Am. Chem. Soc.* **104**, 1507 (1982).
109. J. Wei, J. M. Buriak, G. Siuzdak. *Nature* **399**, 243 (1999).
110. S. A. Carr, M. J. Huddleston, M. F. Bean. *Protein Sci.* **2**, 183 (1993).
111. H. Hayen, A. Michels, J. Franzke. *Anal. Chem.* **81**, 10239 (2009).
112. R. S. Johnson, S. A. Martin, K. Biemann. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **86**, 137 (1988).
113. R. J. Cotter. *Anal. Chem.* **51**, 317 (1979).
114. E. Gelpí. *J. Chromatogr., A* **1000**, 567 (2003).
115. A. E. Ashcroft. *Ionization Methods in Organic Mass Spectrometry*, Royal Society of Chemistry (1997).
116. J. D. Henion, G. A. Maylin. *Biomed. Mass Spectrom.* **7**, 115 (1980).
117. W. Sandner, R. Kachru, K. A. Safinya, F. Gounand, W. E. Cooke, T. F. Gallagher. *Phys. Rev. A* **27**, 1717 (1983).
118. L. Song, A. D. Wellman, H. Yao, J. E. Bartmess. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **18**, 1789 (2007).
119. T. M. Sack, R. L. Cerny, M. L. Gross. *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 4562 (1985).
120. S. Hammerum. *Mass Spectrom. Rev.* **7**, 123 (1988).
121. P. C. Price, H. S. Swofford, S. E. Buttrill. *Anal. Chem.* **49**, 1487 (1977).
122. S. F. Wong, C. K. Meng, J. B. Fenn. *J. Phys. Chem.* **92**, 546 (1988).



123. B. M. Kohli, J. K. Eng, R. M. Nitsch, U. Konietzko. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **19**, 589 (2005).
124. H. A. Donsig, J. C. Vickerman. *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **93**, 2755 (1997).
125. A. Adams, F. H. Read. *J. Phys. E* **5**, 150 (1972).
126. B. N. Colby, C. A. Evans. *Anal. Chem.* **45**, 1884 (1972).
127. C. A. Evans, C. D. Hendricks. *Rev. Sci. Instrum.* **43**, 1527 (1972).
128. D. S. Simons, B. N. Colby, J. C. A. Evans. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **15**, 291 (1974).
129. R. A. Zubarev, N. L. Kelleher, F. W. McLafferty. *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 3265 (1998).
130. H. K. Lim, D. Andrenyak, P. Francom, R. L. Foltz, R. T. Jones. *Anal. Chem.* **60**, 1420 (1988).
131. J. E. Syka, J. J. Coon, M. J. Schroeder, J. Shabanowitz, D. F. Hunt. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101**, 9528 (2004).
132. J. B. Fenn, M. Mann, C. K. Meng, S. F. Wong, C. M. Whitehouse. *Science* **246**, 64 (1989).
133. M. Dole, L. L. Mack, R. L. Hines, R. C. Mobley, L. D. Ferguson, M. B. Alice. *J. Chem. Phys.* **49**, 2240 (1968).
134. J. H. Moore, C. C. Davis, M. A. Coplan. *Building Scientific Apparatus*, Westview Press (2002).
135. M. Karni, A. Mandelbaum. *Org. Mass Spectrom.* **15**, 53 (1980).
136. S. Kim, R. P. Rodgers, A. G. Marshall. *Int. J. Mass Spectrom.* **251**, 260 (2006).
137. J. J. Vrbanac, W. E. Braselton, J. F. Holland, C. C. Sweeley. *J. Chromatogr.* **239**, 265 (1982).
138. V. T. Vu, F. P. Abramson. *Biomed. Mass Spectrom.* **5**, 686 (1978).
139. M. Pelzing, C. Neuss. *Electrophoresis* **26**, 2717 (2005).
140. X. Zhao, Y. Lu, D. R. Phillips, H.-M. Hwang, I. R. Hardin. *J. Chromatogr., A* **1159**, 217 (2007).
141. P. Mauri, M. Minoggio, P. Simonetti, C. Gardana, P. Pietta. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **16**, 743 (2002).
142. H. R. Morris, M. Panico, M. Barber, R. S. Bordoli, R. D. Sedgwick, A. N. Tyler. *Biochem. Biophys. Res. Comm.* **101**, 623 (1981).
143. M. Hamdan. *Org. Mass Spectrom.* **27**, 759 (1992).
144. R. A. Klein. *J. Lipid Res.* **12**, 628 (1971).
145. P. H. Dawson. *Quadrupole Mass Spectrometry and Its Applications*, Elsevier, New York (1976).
146. L. O. G. Weidolf, E. D. Lee, J. D. Henion. *Biol. Mass Spectrom.* **15**, 283 (1988).
147. H. F. Schröder. *J. Chromatogr., A* **647**, 219 (1993).
148. J. A. Hill, J. E. Biller, S. A. Martin, K. Biemann, K. Yoshidome, K. Sato. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **92**, 211 (1989).
149. M. J. Farncombe, R. S. Mason, K. R. Jennings, J. Scrivens. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **44**, 91 (1982).
150. D. H. Smith, W. J. Yeager, T. C. Rindfleisch. *Anal. Chem.* **50**, 1585 (1978).
151. M. Scigelova, M. Hornshaw, A. Giannakopoulos, A. Makarov. *Mol. Cell. Proteomics* **10**, 1 (2011).
152. G. Glish. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **2**, 349 (1991).
153. G. C. Thorne, K. D. Ballard, S. J. Gaskell. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **1**, 249 (1990).
154. W. M. Brubaker. *Adv. Mass Spectrom.* **4**, 293 (1968).
155. R. S. Gohlke, F. W. McLafferty. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **4**, 367 (1993).
156. J. Coburn, W. Harrison. *Appl. Spectrosc. Rev.* **17**, 95 (1981).
157. F. L. King, J. Teng, R. E. Steiner. *J. Mass Spectrom.* **30**, 1061 (1995).
158. R. P. Schmid, C. Weickhardt. *Int. J. Mass Spectrom.* **206**, 181 (2001).
159. D. L. Bricker, T. A. Adams, D. H. Russell. *Anal. Chem.* **55**, 2417 (1983).

160. N. C. Blais, D. G. Truhlar. *Astrophys. J.* **258**, L79 (1982).
161. R. Purves, R. Guevremont, S. Day, C. Pipich, M. Matyjaszczyk. *Rev. Sci. Instrum.* **69**, 4094 (1998).
162. G. E. Spangler. *Int. J. Ion Mobility Spectrom.* **4**, 71 (2001).
163. W. Blum, E. Schlumpf, J. G. Liehr, W. J. Richter. *Tetrahedron Lett.* **17**, 565 (1976).
164. S. Sethi, D. Smith, J. McCloskey. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **112**, 126 (1983).
165. R. B. Woodward, R. Hoffmann. *The Conservation of Orbital Symmetry*, Verlag Chemie Academic Press (2004).
166. J. van der Greef, W. M. A. Niessen. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc.* **118/119**, 857 (1992).
167. M. Kamruddin, P. K. Ajikumar, S. Dash, A. K. Tyagi, B. Raj. *Bull. Mater. Sci.* **26**, 449 (2003).
168. M. B. Comisarow. *J. Chem. Phys.* **69**, 4097 (1978).
169. S. D. Fuerstenau, W. H. Benner. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **9**, 1528 (1995).
170. D. Kingham, A. Bayly, D. Fathers, P. Vohralik, J. Walls, A. Waugh. *Scan. Microsc.* **1**, 463 (1987).
171. R. S. Houk, V. A. Fassel, G. D. Flesch, H. J. Svec, A. L. Gray, C. E. Taylor. *Anal. Chem.* **52**, 2283 (1980).
172. H. E. Taylor. *Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry*, Academic Press, Boston (2001).
173. D. S. Bomse, D. W. Berman, J. Beauchamp. *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 3967 (1981).
174. C. H. Watson, G. Baykut, M. A. Battiste, J. R. Eyler. *Anal. Chim. Acta* **178**, 125 (1985).
175. G. Baykut, C. H. Watson, R. R. Weller, J. R. Eyler. *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 8036 (1985).
176. J. Josephs. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **9**, 1270 (1995).
177. S. Sekiya, Y. Wada, K. Tanaka. *Anal. Chem.* **76**, 5894 (2004).
178. C. R. Mallet, Z. Lu, J. R. Mazzeo. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **18**, 49 (2004).
179. J. V. Iribarne, B. A. Thomson. *J. Chem. Phys.* **64**, 2287 (1976).
180. V. Znamenskiy, I. Marginean, A. Vertes. *J. Phys. Chem. A* **107**, 7406 (2003).
181. S. A. Shaffer, K. Q. Tang, G. A. Anderson, D. C. Prior, H. R. Udseth, R. D. Smith. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **11**, 1813 (1997).
182. A. B. Kanu, P. Dwivedi, M. Tam, L. Matz, H. H. Hill. *J. Mass Spectrom.* **43**, 1 (2008).
183. S. A. McLuckey, J. L. Stephenson Jr. *Mass Spectrom. Rev.* **17**, 369 (1998).
184. K. Dreisewerd. *Chem. Rev.* **103**, 395 (2003).
185. J. N. Brownlee. *J. Atmos. Terr. Phys.* **37**, 1139 (1975).
186. G. E. Spangler, J. P. Carrico. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **52**, 267 (1983).
187. R. D. Bowen. *Acc. Chem. Res.* **24**, 364, (1991).
188. T. Matsuo, M. Toyoda, T. Sakurai, M. Ishihara. *J. Mass Spectrom.* **32**, 1179 (1997).
189. E. de Hoffmann, J. Charette, V. Stroobant, J. Trotter. *Mass Spectrometry: Principles and Applications*, John Wiley, Chichester (1996).
190. F. Dubois, R. Knochenmuss, R. Zenobi. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **169**, 89 (1997).
191. J. P. Holder, L. Gruber, H. E. DeWitt, B. R. Beck, D. A. Church, D. Schneider. *Phys. Scr., T* **92**, 158 (2001).
192. P. L. Ross, Y. N. Huang, J. N. Marchese, B. Williamson, K. Parker, S. Hattan, N. Khainovski, S. Pillai, S. Dey, S. Daniels, S. Purkayastha, P. Juhasz, S. Martin, M. Bartlet-Jones, F. He, A. Jacobson, D. J. Pappin. *Mol. Cell Proteomics* **3**, 1154 (2004).
193. L. R. Zieske. *J. Exp. Bot.* **57**, 1501 (2006).
194. S. P. Gygi, B. Rist, S. A. Gerber, F. Turecek, M. H. Gelb, R. Aebersold. *Nat. Biotech.* **17**, 994 (1999).
195. L. J. Moore, L. A. Machlan. *Anal. Chem.* **44**, 2291 (1972).
196. T. B. Copen. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **25**, 2538 (2011).
197. W. A. Brand, S. S. Assonov, T. B. Copen. *Pure Appl. Chem.* **82**, 1719 (2010).
198. W. A. Brand. *J. Mass Spectrom.* **31**, 225 (1996).
199. R. Ryhage. *Anal. Chem.* **36**, 759 (1964).

200. G. A. Junk. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **8**, 1 (1972).
201. J. Laskin, C. Lifshitz. *J. Mass Spectrom.* **36**, 459 (2001).
202. C. Lifshitz. *Eur. J. Mass Spectrom.* **8**, 85 (2002).
203. A. Makarov. *Anal. Chem.* **72**, 1156 (2000).
204. M. Bantscheff, M. Schirle, G. Sweetman, J. Rick, B. Kuster. *Anal. Bioanal. Chem.* **389**, 1017 (2007).
205. R. E. Russo. *Appl. Spectrosc.* **49**, 14A (1995).
206. J. M. Chen, C. C. Chang. *J. Appl. Phys.* **43**, 3884 (1972).
207. E. D. Hardin, M. L. Vestal. *Anal. Chem.* **53**, 1492 (1981).
208. E. Denoyer, R. Van Grieken, F. Adams, D. F. S. Natusch. *Anal. Chem.* **54**, 26A (1982).
209. G. R. Janik, J. D. Prestage, L. Maleki. *J. Appl. Phys.* **67**, 6050 (1990).
210. M. A. Baldwin, F. W. McLafferty. *Org. Mass Spectrom.* **7**, 1111 (1973).
211. P. J. Arpino, B. G. Dawkins, F. W. McLafferty. *J. Chromatogr. Sci.* **12**, 574 (1974).
212. N. J. Reinhoud, W. M. A. Niessen, U. R. Tjaden, L. G. Gramberg, E. R. Verheij, J. van der Greef. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **3**, 348 (1989).
213. E. D. Lee, W. Muck, J. D. Henion, T. R. Covey. *Biol. Mass Spectrom.* **18**, 253 (1989).
214. A. M. Falick, F. C. Walls, R. A. Laine. *Anal. Biochem.* **159**, 132 (1986).
215. C. G. Edmonds, J. A. Loo, C. J. Barinaga, H. R. Udseth, R. D. Smith. *J. Chromatogr., A* **474**, 21 (1989).
216. R. D. Smith, J. A. Olivares, N. T. Nguyen, H. R. Udseth. *Anal. Chem.* **60**, 436 (2002).
217. K. B. Tomer. *Chem. Rev.* **101**, 297 (2001).
218. J. V. Olsen, L. M. F. de Godoy, G. Li, B. Macek, P. Mortensen, R. Pesch, A. Makarov, O. Lange, S. Horning, M. Mann. *Mol. Cell Proteomics* **4**, 2010 (2005).
219. A. Weisz, A. Mandelbaum, J. Shabanowitz, D. F. Hunt. *Org. Mass Spectrom.* **19**, 238 (1984).
220. R. L. Hunter, M. G. Sherman, R. T. McIver. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **50**, 259 (1983).
221. J. B. Jeffries, S. E. Barlow, G. H. Dunn. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **54**, 169 (1983).
222. J. H. Beynon, R. G. Cooks. *Res. Dev.* **22**, 26 (1971).
223. J. H. Beynon, S. Clough. *J. Sci. Instrum.* **35**, 289 (1958).
224. E. Kendrick. *Anal. Chem.* **35**, 2146 (1963).
225. K. V. Wood, A. H. Grange, J. W. Taylor. *Anal. Chem.* **50**, 1652 (1978).
226. L.-S. Zheng, C. M. Karner, P. J. Brucat, S. H. Yang, C. L. Pettiette, M. J. Craycraft, R. E. Smalley. *J. Chem. Phys.* **85**, 1681 (1986).
227. M. L. Gross, D. L. Rempel. *Science* **226**, 261 (1984).
228. F. A. Londry, J. W. Hager. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **14**, 1130 (2003).
229. G. C. Stafford, P. E. Kelley, J. E. P. Syka, W. E. Reynolds, J. F. J. Todd. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **60**, 85 (1984).
230. F. P. Abramson. *Anal. Chem.* **47**, 45 (1975).
231. P. H. Dawson, N. R. Whetten. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **2**, 45 (1969).
232. M. Karas, D. Bachman, U. Bahr, F. Hillenkamp. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **78**, 53 (1987).
233. A. Cappiello, G. Famiglini, P. Palma, E. Pierini, V. Termopoli, H. Trufelli. *Anal. Chem.* **80**, 9343 (2008).
234. R. C. Johnson, R. G. Cooks, T. M. Allen, M. E. Cisper, P. H. Hemberger. *Mass Spectrom. Rev.* **19**, 1 (2000).
235. V. I. Dukhanov, A. G. Zelenkov, A. A. Kurashov, I. B. Mazurov, Y. F. Rodionov, I. N. Serikov, V. P. Tarasevich. *J. Radioanal. Chem.* **58**, 161 (1980).
236. M. R. Emmett, P. E. Andren, R. M. Caprioli. *J. Neurosci. Meth.* **62**, 141 (1995).
237. D. R. Olander, W. W. Waddel. *Anal. Chem.* **40**, 1687 (1968).
238. W. Fock. *Anal. Chem.* **47**, 2447 (2002).
239. P. Arpino. *Fresenius' J. Anal. Chem.* **337**, 667 (1990).

240. P. O. Edlund, J. D. Henion. *J. Chromatogr. Sci.* **27**, 274 (1989).
241. W. H. McFadden, H. L. Schwarz, S. Evans. *J. Chromatogr., A* **122**, 389 (1976).
242. D. Zakett, A. Schoen, R. Cooks, P. Hemberger. *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 1295 (1981).
243. G. L. Glish. *Analyst* **119**, 533 (1994).
244. C. B. Douthitt. *Anal. Bioanal. Chem.* **390**, 437 (2008).
245. D. A. Wolters, M. P. Washburn, J. R. Yates. *Anal. Chem.* **73**, 5683 (2001).
246. D. Zakett, R. G. A. Flynn, R. G. Cooks. *J. Phys. Chem.* **82**, 2359 (1977).
247. M. Wilm, M. Mann. *Anal. Chem.* **68**, 1 (1996).
248. F. W. McLafferty. *Science* **247**, 925 (1990).
249. D. Zakett, A. E. Schoen, R. W. Kondrat, R. G. Cooks. *J. Am. Chem. Soc.* **101**, 6781 (1979).
250. W. H. Johnson, A. O. Nier. *Phys. Rev.* **105**, 1014 (1957).
251. M. W. Senko, S. C. Beu, F. W. McLafferty. *Anal. Chem.* **66**, 415 (1994).
252. J. A. Loo, H. R. Udseth, R. D. Smith. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **2**, 207 (1988).
253. M. Yamashita, J. B. Fenn. *J. Phys. Chem.* **88**, 4451 (1984).
254. W. M. A. Niessen. *J. Chromatogr., A* **856**, 179 (1999).
255. F. L. Wiseman, F. Ozturk, M. C. Zerner, J. R. Eyler. *Int. J. Chem. Kin.* **22**, 1189 (1990).
256. C. Blakley, J. Carmody, M. Vestal. *Clin. Chem.* **26**, 1467 (1980).
257. A. Cappiello. *Mass Spectrom. Rev.* **15**, 283 (1996).
258. C. G. Hammar, G. Pettersson, P. T. Carpenter. *Biomed. Mass Spectrom.* **1**, 397 (1974).
259. F. Li, J. Maguigad, M. Pelzer, X. Jiang, Q. C. Ji. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **22**, 486 (2008).
260. P. Z. Vroon, B. van der Wagt, J. M. Koornneef, G. R. Davies. *Anal. Bioanal. Chem.* **390**, 465 (2008).
261. K. P. Wanczek. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **95**, 1 (1989).
262. D. J. C. Pappin, P. Hojrup, A. J. Bleasby. *Curr. Biol.* **3**, 327 (1993).
263. M. Mann, M. Wilm. *Anal. Chem.* **66**, 4390 (1994).
264. I. W. Griffiths, E. S. Mukhtar, R. E. March, F. M. Harris, J. H. Beynon. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **39**, 125 (1981).
265. T. R. Covey, E. C. Huang, J. D. Henion. *Anal. Chem.* **63**, 1193 (1991).
266. A. M. Falick, K. F. Medzihradzky, F. C. Walls. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **4**, 318 (1990).
267. G. H. Wang, W. Aberth, A. M. Falick. *Int. J. Mass. Spectrom. Ion Processes* **69**, 233 (1986).
268. B. Spengler, D. Kirsch, R. Kaufmann. *J. Phys. Chem.* **96**, 9678 (1992).
269. F. W. McLafferty, R. H. Hertel, R. D. Villwock. *Org. Mass Spectrom.* **9**, 690 (1974).
270. C. Sweeley, W. Elliott, I. Fries, R. Ryhage. *Anal. Chem.* **38**, 1549 (1966).
271. S. A. Martin, K. Biemann. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **78**, 213 (1987).
272. J. W. Larson, R. L. Clair, T. B. McMahon. *Can. J. Chem.* **60**, 542 (1982).
273. R. G. Ewing, G. A. Eiceman, C. S. Harden, J. A. Stone. *Int. J. Mass Spectrom.* **255–256**, 76 (2006).
274. I. Lüderwald. *Pure Appl. Chem.* **54**, 255 (1982).
275. A. W. Colburn, A. E. Giannakopoulos, P. J. Derrick, M. Von Raumer. *Eur. J. Mass Spectrom.* **6**, 523 (2000).
276. J. P. Speir, G. S. Gorman, C. C. Pitsenberger, C. A. Turner, P. P. Wang, I. J. Amster. *Anal. Chem.* **65**, 1746 (1993).
277. S. Guan, M. Wahl, T. Wood, A. Marshall. *Anal. Chem.* **65**, 1753 (1993).
278. G. L. Glish, D. E. Goeringer. *Anal. Chem.* **56**, 2291 (1984).
279. R. J. Beynon, M. K. Doherty, J. M. Pratt, S. J. Gaskell. *Nature Meth.* **2**, 587 (2005).
280. H. M. Rosenstock, M. B. Wallenstein, A. L. Wahrhaftig, H. Eyring. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **38**, 667 (1952).
281. T. Baercoor, P. M. Mayer. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **8**, 103 (1997).

282. R. E. March, A. W. McMahon, E. T. Allinson, F. A. Londry, R. L. Alfred, J. F. J. Todd, F. Vedel. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **99**, 109 (1990).
283. L. Tang, P. Kebarle. *Anal. Chem.* **65**, 3654 (1993).
284. B. Munson. *Int. J. Mass. Spectrom.* **200**, 243 (2000).
285. A. G. Harrison. *Chemical Ionization Mass Spectrometry*, CRC Press, Boca Raton (1992).
286. Z. Ouyang, G. Wu, Y. Song, H. Li, W. R. Plass, R. G. Cooks. *Anal. Chem.* **76**, 4595 (2004).
287. J. M. Wilson. *Annu. Rep. Prog. Chem.* **63**, 270 (1966).
288. Y. G. C. Lifshitz, A. Ioffe, J. Laskin, S. Shaik. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **125**, R7 (1993).
289. K. M. Ervin. *Chem. Rev.* **101**, 391 (2001).
290. B. A. Mamyurin, V. I. Karataev, D. V. Shmikk, V. A. Zagulin. *Sov. Phys. JETP* **37**, 45 (1973).
291. J. F. O'Hanlon. *A User's Guide to Vacuum Technology*, John Wiley, New York (2003).
292. G. L. Glish, D. J. Burinsky. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **19**, 161 (2008).
293. J. Laskin, J. H. Futrell. *Mass Spectrom. Rev.* **24**, 135 (2005).
294. L. Zandee, R. B. Bernstein. *J. Chem. Phys.* **71**, 1359 (1979).
295. J. D. Fassett, L. J. Moore, J. C. Travis, F. E. Lytle. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **54**, 201 (1983).
296. J. E. Fulford, D.-N. Hoa, R. J. Hughes, R. E. March, R. F. Bonner, G. J. Wong. *J. Vac. Sci. Technol.* **17**, 829 (1980).
297. K. Biemann. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1**, 98 (1962).
298. R. A. Marcus, O. K. Rice. *J. Phys. Colloid Chem.* **55**, 894 (1951).
299. R. A. Marcus. *J. Chem. Phys.* **20**, 359 (1952).
300. S. C. Tucker. *Theor. Chem. Acc.* **103**, 209 (2000).
301. O. K. Rice, H. C. Ramsperger. *J. Am. Chem. Soc.* **50**, 617 (1928).
302. L. S. Kassel. *J. Phys. Chem.* **32**, 225 (1928).
303. E. Schymanski, C. Meinert, M. Meringer, W. Brack. *Anal. Chim. Acta* **615**, 136 (2008).
304. J. Franks. *J. Vac. Sci. Technol.* **16**, 181 (1979).
305. M. H. Lamoree, U. R. Tjaden, J. van der Greef. *J. Chromatogr., A* **712**, 219 (1995).
306. J. F. Anacleto, R. K. Boyd, M. A. Quilliam. *J. High Res. Chromatogr.* **16**, 85 (1993).
307. M. Van Gorkom, R. E. Glick. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **4**, 203 (1970).
308. A. Benninghoven, B. Hagenhoff, E. Niehuis. *Anal. Chem.* **65**, 630A (1993).
309. H. Oechsner, W. Gerhard. *Phys. Lett. A* **40**, 211 (1972).
310. D. Lipinsky, R. Jede, O. Ganschow, A. Benninghoven. *J. Vac. Sci. Technol.* **3**, 2007 (1985).
311. A. O. Nier. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **100**, 1 (1990).
312. N. G. Adams, D. Smith. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **21**, 349 (1976).
313. J. T. Watson. *Introduction to Mass Spectrometry*, Lippincott-Raven, Philadelphia (1997).
314. E. de Hoffmann. *J. Mass Spectrom.* **31**, 129 (1996).
315. S. Ghaderi, P. S. Kulkarni, E. B. Ledford, C. L. Wilkins, M. L. Gross. *Anal. Chem.* **53**, 428 (1981).
316. S. J. Gaskell. *J. Mass Spectrom.* **32**, 677 (1997).
317. M. L. Fournier, J. M. Gilmore, S. A. Martin-Brown, M. P. Washburn. *Chem. Rev.* **107**, 3654 (2007).
318. D. E. Games. *Chem. Phys. Lipids* **21**, 389 (1978).
319. A. Hirabayashi, M. Sakairi, H. Koizumi. *Anal. Chem.* **66**, 4557 (1994).
320. J. F. J. Todd, R. M. Waldren, R. E. Mather. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **34**, 325 (1980).
321. R. M. Smith. *Understanding Mass Spectra*, Wiley-Interscience, Hoboken (2004).
322. M. Sakairi, H. Kambara. *Anal. Chem.* **61**, 1159 (1989).
323. H. Jiang, A. M. English. *J. Proteome Res.* **1**, 345 (2002).

324. S. E. Ong, B. Blagoev, I. Kratchmarova, D. B. Kristensen, H. Steen, A. Pandey, M. Mann. *Mol. Cell Proteomics* **1**, 376 (2002).
325. H. Zhu, S. Pan, S. Gu, E. M. Bradbury, X. Chen. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **16**, 2115 (2002).
326. L. Anderson, C. L. Hunter. *Mol. Cell Proteomics* **5**, 573 (2006).
327. M. Oron. *Nucl. Instrum. Meth.* **139**, 235 (1976).
328. D. P. Stevenson. *Disc. Faraday Soc.* **10**, 35 (1951).
329. M. M. Bursley, E. S. Wolfe. *Org. Mass Spectrom.* **1**, 543 (1968).
330. A. G. Harrison, C. D. Finney, J. A. Sherk. *Org. Mass Spectrom.* **5**, 1313 (1971).
331. S. Guan, A. G. Marshall. *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **157/158**, 5 (1996).
332. L. G. Randall, A. L. Wahrhaftig. *Rev. Sci. Instrum.* **52**, 1283 (1981).
333. A. M. Dattelbaum, S. Iyer. *Exp. Rev. Proteomics* **153** (2006).
334. T. W. Hutchens, T. T. Yip. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **7**, 576 (1993).
335. T. C. W. Poon. *Exp. Rev. Proteomics* **4**, 51 (2007).
336. R. G. Cooks, D. T. Terwilliger, T. Ast, J. H. Beynon, T. Keough. *J. Am. Chem. Soc.* **97**, 1583 (1995).
337. V. Grill, R. Wörgötter, J. H. Futrell, T. D. Mark. *Z. Phys. D* **40**, 111 (1997).
338. A. Fischer, P. Werner. *Fresenius' J. Anal. Chem.* **368**, 424 (2000).
339. J. W. Gauthier, T. R. Trautman, D. B. Jacobson. *Anal. Chim. Acta* **246**, 211 (1991).
340. J. V. Johnson, R. A. Yost, P. E. Kelley, D. C. Bradford. *Anal. Chem.* **62**, 2162 (1990).
341. G. Taylor. *Proc. Roy. Soc. Lond. Ser. A* **280**, 383 (1964).
342. S. J. Gaskell. *J. Mass Spectrom.* **32**, 677 (1997).
343. C. R. Blakley, J. J. Carmody, M. L. Vestal. *Anal. Chem.* **52**, 1636 (1980).
344. C. R. Blakley, M. L. Vestal. *Anal. Chem.* **55**, 750 (1983).
345. O. S. Ovchinnikova, G. J. Van Berkel. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **24**, 1721 (2010).
346. W. C. Wiley, I. H. McLaren. *Rev. Sci. Instrum.* **26**, 1150 (1955).
347. S. K. Sze, Y. Ge, H. Oh, F. W. McLafferty. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **99**, 1774 (2002).
348. N. L. Kelleher. *Anal. Chem.* **76**, 197A (2004).
349. S. A. Lammert, A. A. Rockwood, M. Wang, M. L. Lee, E. D. Lee, S. E. Tolley, J. R. Oliphant, J. L. Jones, R. W. Waite. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **17**, 916 (2006).
350. T. Mizuno, N. Abe, H. Teshima, E. Yamauchi, Y. Itagaki, I. Matsumoto, T. Kuhara, T. Shinka. *Biomed. Mass Spectrom.* **8**, 593 (1981).
351. J. A. Olivares, N. T. Nguyen, C. R. Yonker, R. D. Smith. *Anal. Chem.* **59**, 1230 (1997).
352. J. T. Watson. *Annu. Rev. Pharmacol.* **13**, 391 (1973).
353. R. M. Smith. *Understanding Mass Spectra: A Basic Approach*, John Wiley, New York (2004).
354. R. D. Voyksner, T. Pack. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* **5**, 263 (1991).
355. P. J. Robinson, K. A. Holbrook. *Unimolecular Reactions*, John Wiley, New York (1972).
356. C. F. Robinson. *Rev. Sci. Instrum.* **27**, 88 (1956).
357. T. Staaf, C. Östman. *J. Environ. Monitor.* **7**, 344 (2005).
358. A. G. Brenton, R. P. Morgan, J. H. Beynon. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **30**, 51 (1979).
359. H. H. Rose. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9**, 014107 (2008).