

Supporting Information

Cooperative adsorption behavior of phosphopeptides on TiO₂ leads to biased enrichment, detection and quantification

Anna I. K. Eriksson, Katarina Edwards and Víctor Agmo Hernández

Department of Chemistry – BMC, Uppsala University, Uppsala, Sweden

Table of contents

Appendix A. Raw data and significance tests: steel target vs. TiO₂ spot

Appendix B. Raw data and significance tests: TiO₂ non-washed vs. washed with salicylic acid

Appendix C. Raw data and significance tests: TiO₂ non-washed vs. washed with buffer pH 8

Appendix D. Raw data and significance tests: TiO₂ non-washed vs. washed with buffer pH 9

Appendix E. Raw data and significance tests: TiO₂ non-washed vs. washed with buffer pH 1.3

Appendix F. Raw data and significance tests: TiO₂ non-washed vs. washed with 10 mM phosphate

Appendix A

Raw data and significance tests

Steel target vs. TiO₂ spot

Steel target

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	1878	1321	3683	2957
2	3772	2475	6968	4717
3	2617	1765	4462	3147
4	754	391	1666	892
5	2520	1635	5181	3500
6	1380	777	2591	1550
7	2583	1906	5703	4355
8	1627	878	3624	2173
9	8663	6040	12406	8839
10	1802	933	3500	1928
11	4458	3136	7290	5295
12	4491	2985	8007	5266
13	2137	1204	4220	2682
14	967	538	1897	1145
15	5106	2988	8556	5522
16	4295	2414	7893	4937
17	2280	1341	3995	2534
18	2888	1835	5047	3520
Average	3012.111	1920.111	5371.611	3608.833
Stdev	1899.411	1333.141	2726.765	1961.43
SEM	447.6954	314.2242	642.7048	462.3134

Enriched

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3102	1118	4080	1086
2	1497	972	3370	1755
3	869	429	2735	788
4	1219	1196	2482	1712
5	530	461	1245	665
6	2603	741	4347	797
7	5549	3568	12181	6507
8	3722	2850	7000	5412
9	2580	689	6227	1292
10	2118	2640	4632	5398
11	4258	2712	11499	6440
12	5030	2047	9804	3752
13	2657	1655	8280	3483
14	3409	1499	7932	2954
15	1939	904	3642	1660
16	2029	980	3272	1625
17	1957	892	3556	1502
18	1406	645	2655	1171
19	2122	976	4093	1847
20	847	340	1921	728
21	1546	932	3230	1716
22	2495	1058	3189	1275
23	1928	1123	3698	2125
Average	2409.217	1322.913	5003.043	2421.304
Stdev	1293.283	864.8099	3031.676	1845.683
SEM	269.6681	180.3253	632.1481	384.8516

TiO2/Steel ratios

mod-S-R		Steel																	
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Experiment	TiO2	1878	3772	2617	754	2520	1380	2583	1627	8663	1802	4458	4491	2137	967	5106	4295	2280	2888
1	3102	1.65	0.82	1.19	4.11	1.23	2.25	1.20	1.91	0.36	1.72	0.70	0.69	1.45	3.21	0.61	0.72	1.36	1.07
2	1497	0.80	0.40	0.57	1.99	0.59	1.08	0.58	0.92	0.17	0.83	0.34	0.33	0.70	1.55	0.29	0.35	0.66	0.52
3	869	0.46	0.23	0.33	1.15	0.34	0.63	0.34	0.53	0.10	0.48	0.19	0.19	0.41	0.90	0.17	0.20	0.38	0.30
4	1219	0.65	0.32	0.47	1.62	0.48	0.88	0.47	0.75	0.14	0.68	0.27	0.27	0.57	1.26	0.24	0.28	0.53	0.42
5	530	0.28	0.14	0.20	0.70	0.21	0.38	0.21	0.33	0.06	0.29	0.12	0.12	0.25	0.55	0.10	0.12	0.23	0.18
6	2603	1.39	0.69	0.99	3.45	1.03	1.89	1.01	1.60	0.30	1.44	0.58	0.58	1.22	2.69	0.51	0.61	1.14	0.90
7	5549	2.95	1.47	2.12	7.36	2.20	4.02	2.15	3.41	0.64	3.08	1.24	1.24	2.60	5.74	1.09	1.29	2.43	1.92
8	3722	1.98	0.99	1.42	4.94	1.48	2.70	1.44	2.29	0.43	2.07	0.83	0.83	1.74	3.85	0.73	0.87	1.63	1.29
9	2580	1.37	0.68	0.99	3.42	1.02	1.87	1.00	1.59	0.30	1.43	0.58	0.57	1.21	2.67	0.51	0.60	1.13	0.89
10	2118	1.13	0.56	0.81	2.81	0.84	1.53	0.82	1.30	0.24	1.18	0.48	0.47	0.99	2.19	0.41	0.49	0.93	0.73
11	4258	2.27	1.13	1.63	5.65	1.69	3.09	1.65	2.62	0.49	2.36	0.96	0.95	1.99	4.40	0.83	0.99	1.87	1.47
12	5030	2.68	1.33	1.92	6.67	2.00	3.64	1.95	3.09	0.58	2.79	1.13	1.12	2.35	5.20	0.99	1.17	2.21	1.74
13	2657	1.41	0.70	1.02	3.52	1.05	1.93	1.03	1.63	0.31	1.47	0.60	0.59	1.24	2.75	0.52	0.62	1.17	0.92
14	3409	1.82	0.90	1.30	4.52	1.35	2.47	1.32	2.10	0.39	1.89	0.76	0.76	1.60	3.53	0.67	0.79	1.50	1.18
15	1939	1.03	0.51	0.74	2.57	0.77	1.41	0.75	1.19	0.22	1.08	0.43	0.43	0.91	2.01	0.38	0.45	0.85	0.67
16	2029	1.08	0.54	0.78	2.69	0.81	1.47	0.79	1.25	0.23	1.13	0.46	0.45	0.95	2.10	0.40	0.47	0.89	0.70
17	1957	1.04	0.52	0.75	2.60	0.78	1.42	0.76	1.20	0.23	1.09	0.44	0.44	0.92	2.02	0.38	0.46	0.86	0.68
18	1406	0.75	0.37	0.54	1.86	0.56	1.02	0.54	0.86	0.16	0.78	0.32	0.31	0.66	1.45	0.28	0.33	0.62	0.49
19	2122	1.13	0.56	0.81	2.81	0.84	1.54	0.82	1.30	0.24	1.18	0.48	0.47	0.99	2.19	0.42	0.49	0.93	0.73
20	847	0.45	0.22	0.32	1.12	0.34	0.61	0.33	0.52	0.10	0.47	0.19	0.19	0.40	0.88	0.17	0.20	0.37	0.29
21	1546	0.82	0.41	0.59	2.05	0.61	1.12	0.60	0.95	0.18	0.86	0.35	0.34	0.72	1.60	0.30	0.36	0.68	0.54
22	2495	1.33	0.66	0.95	3.31	0.99	1.81	0.97	1.53	0.29	1.38	0.56	0.56	1.17	2.58	0.49	0.58	1.09	0.86
23	1928	1.03	0.51	0.74	2.56	0.77	1.40	0.75	1.19	0.22	1.07	0.43	0.43	0.90	1.99	0.38	0.45	0.85	0.67

mod-S-2R		Steel																	
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
TiO2		1321	2475	1765	391	1635	777	1906	878	6040	933	3136	2985	1204	538	2988	2414	1341	1835
1	1118	0.85	0.45	0.63	2.86	0.68	1.44	0.59	1.27	0.19	1.20	0.36	0.37	0.93	2.08	0.37	0.46	0.83	0.61
2	972	0.74	0.39	0.55	2.49	0.59	1.25	0.51	1.11	0.16	1.04	0.31	0.33	0.81	1.81	0.33	0.40	0.72	0.53
3	429	0.32	0.17	0.24	1.10	0.26	0.55	0.23	0.49	0.07	0.46	0.14	0.14	0.36	0.80	0.14	0.18	0.32	0.23
4	1196	0.91	0.48	0.68	3.06	0.73	1.54	0.63	1.36	0.20	1.28	0.38	0.40	0.99	2.22	0.40	0.50	0.89	0.65
5	461	0.35	0.19	0.26	1.18	0.28	0.59	0.24	0.53	0.08	0.49	0.15	0.15	0.38	0.86	0.15	0.19	0.34	0.25
6	741	0.56	0.30	0.42	1.90	0.45	0.95	0.39	0.84	0.12	0.79	0.24	0.25	0.62	1.38	0.25	0.31	0.55	0.40
7	3568	2.70	1.44	2.02	9.13	2.18	4.59	1.87	4.06	0.59	3.82	1.14	1.20	2.96	6.63	1.19	1.48	2.66	1.94
8	2850	2.16	1.15	1.61	7.29	1.74	3.67	1.50	3.25	0.47	3.05	0.91	0.95	2.37	5.30	0.95	1.18	2.13	1.55
9	689	0.52	0.28	0.39	1.76	0.42	0.89	0.36	0.78	0.11	0.74	0.22	0.23	0.57	1.28	0.23	0.29	0.51	0.38
10	2640	2.00	1.07	1.50	6.75	1.61	3.40	1.39	3.01	0.44	2.83	0.84	0.88	2.19	4.91	0.88	1.09	1.97	1.44
11	2712	2.05	1.10	1.54	6.94	1.66	3.49	1.42	3.09	0.45	2.91	0.86	0.91	2.25	5.04	0.91	1.12	2.02	1.48
12	2047	1.55	0.83	1.16	5.24	1.25	2.63	1.07	2.33	0.34	2.19	0.65	0.69	1.70	3.80	0.69	0.85	1.53	1.12
13	1655	1.25	0.67	0.94	4.23	1.01	2.13	0.87	1.88	0.27	1.77	0.53	0.55	1.37	3.08	0.55	0.69	1.23	0.90
14	1499	1.13	0.61	0.85	3.83	0.92	1.93	0.79	1.71	0.25	1.61	0.48	0.50	1.25	2.79	0.50	0.62	1.12	0.82
15	904	0.68	0.37	0.51	2.31	0.55	1.16	0.47	1.03	0.15	0.97	0.29	0.30	0.75	1.68	0.30	0.37	0.67	0.49
16	980	0.74	0.40	0.56	2.51	0.60	1.26	0.51	1.12	0.16	1.05	0.31	0.33	0.81	1.82	0.33	0.41	0.73	0.53
17	892	0.68	0.36	0.51	2.28	0.55	1.15	0.47	1.02	0.15	0.96	0.28	0.30	0.74	1.66	0.30	0.37	0.67	0.49
18	645	0.49	0.26	0.37	1.65	0.39	0.83	0.34	0.73	0.11	0.69	0.21	0.22	0.54	1.20	0.22	0.27	0.48	0.35
19	976	0.74	0.39	0.55	2.50	0.60	1.26	0.51	1.11	0.16	1.05	0.31	0.33	0.81	1.81	0.33	0.40	0.73	0.53
20	340	0.26	0.14	0.19	0.87	0.21	0.44	0.18	0.39	0.06	0.36	0.11	0.11	0.28	0.63	0.11	0.14	0.25	0.19
21	932	0.71	0.38	0.53	2.38	0.57	1.20	0.49	1.06	0.15	1.00	0.30	0.31	0.77	1.73	0.31	0.39	0.70	0.51
22	1058	0.80	0.43	0.60	2.71	0.65	1.36	0.56	1.21	0.18	1.13	0.34	0.35	0.88	1.97	0.35	0.44	0.79	0.58
23	1123	0.85	0.45	0.64	2.87	0.69	1.45	0.59	1.28	0.19	1.20	0.36	0.38	0.93	2.09	0.38	0.47	0.84	0.61

mod-Y-R		Steel																	
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
TiO2		3683	6968	4462	1666	5181	2591	5703	3624	12406	3500	7290	8007	4220	1897	8556	7893	3995	5047
1	4080	1.11	0.59	0.91	2.45	0.79	1.57	0.72	1.13	0.33	1.17	0.56	0.51	0.97	2.15	0.48	0.52	1.02	0.81
2	3370	0.92	0.48	0.76	2.02	0.65	1.30	0.59	0.93	0.27	0.96	0.46	0.42	0.80	1.78	0.39	0.43	0.84	0.67
3	2735	0.74	0.39	0.61	1.64	0.53	1.06	0.48	0.75	0.22	0.78	0.38	0.34	0.65	1.44	0.32	0.35	0.68	0.54
4	2482	0.67	0.36	0.56	1.49	0.48	0.96	0.44	0.68	0.20	0.71	0.34	0.31	0.59	1.31	0.29	0.31	0.62	0.49
5	1245	0.34	0.18	0.28	0.75	0.24	0.48	0.22	0.34	0.10	0.36	0.17	0.16	0.30	0.66	0.15	0.16	0.31	0.25
6	4347	1.18	0.62	0.97	2.61	0.84	1.68	0.76	1.20	0.35	1.24	0.60	0.54	1.03	2.29	0.51	0.55	1.09	0.86
7	12181	3.31	1.75	2.73	7.31	2.35	4.70	2.14	3.36	0.98	3.48	1.67	1.52	2.89	6.42	1.42	1.54	3.05	2.41
8	7000	1.90	1.00	1.57	4.20	1.35	2.70	1.23	1.93	0.56	2.00	0.96	0.87	1.66	3.69	0.82	0.89	1.75	1.39
9	6227	1.69	0.89	1.40	3.74	1.20	2.40	1.09	1.72	0.50	1.78	0.85	0.78	1.48	3.28	0.73	0.79	1.56	1.23
10	4632	1.26	0.66	1.04	2.78	0.89	1.79	0.81	1.28	0.37	1.32	0.64	0.58	1.10	2.44	0.54	0.59	1.16	0.92
11	11499	3.12	1.65	2.58	6.90	2.22	4.44	2.02	3.17	0.93	3.29	1.58	1.44	2.72	6.06	1.34	1.46	2.88	2.28
12	9804	2.66	1.41	2.20	5.88	1.89	3.78	1.72	2.71	0.79	2.80	1.34	1.22	2.32	5.17	1.15	1.24	2.45	1.94
13	8280	2.25	1.19	1.86	4.97	1.60	3.20	1.45	2.28	0.67	2.37	1.14	1.03	1.96	4.36	0.97	1.05	2.07	1.64
14	7932	2.15	1.14	1.78	4.76	1.53	3.06	1.39	2.19	0.64	2.27	1.09	0.99	1.88	4.18	0.93	1.00	1.99	1.57
15	3642	0.99	0.52	0.82	2.19	0.70	1.41	0.64	1.00	0.29	1.04	0.50	0.45	0.86	1.92	0.43	0.46	0.91	0.72
16	3																		

TiO2/Steel signal ratios

mod-Y-2R		Steel																	
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
TiO2		2957	4717	3147	892	3500	1550	4355	2173	8839	1928	5295	5266	2682	1145	5522	4937	2534	3520
1	1086	0.37	0.23	0.35	1.22	0.31	0.70	0.25	0.50	0.12	0.56	0.21	0.21	0.40	0.95	0.20	0.22	0.43	0.31
2	1755	0.59	0.37	0.56	1.97	0.50	1.13	0.40	0.81	0.20	0.91	0.33	0.33	0.65	1.53	0.32	0.36	0.69	0.50
3	788	0.27	0.17	0.25	0.88	0.23	0.51	0.18	0.36	0.09	0.41	0.15	0.15	0.29	0.69	0.14	0.16	0.31	0.22
4	1712	0.58	0.36	0.54	1.92	0.49	1.10	0.39	0.79	0.19	0.89	0.32	0.33	0.64	1.50	0.31	0.35	0.68	0.49
5	665	0.22	0.14	0.21	0.75	0.19	0.43	0.15	0.31	0.08	0.34	0.13	0.13	0.25	0.58	0.12	0.13	0.26	0.19
6	797	0.27	0.17	0.25	0.89	0.23	0.51	0.18	0.37	0.09	0.41	0.15	0.15	0.30	0.70	0.14	0.16	0.31	0.23
7	6507	2.20	1.38	2.07	7.29	1.86	4.20	1.49	2.99	0.74	3.38	1.23	1.24	2.43	5.68	1.18	1.32	2.57	1.85
8	5412	1.83	1.15	1.72	6.07	1.55	3.49	1.24	2.49	0.61	2.81	1.02	1.03	2.02	4.73	0.98	1.10	2.14	1.54
9	1292	0.44	0.27	0.41	1.45	0.37	0.83	0.30	0.59	0.15	0.67	0.24	0.25	0.48	1.13	0.23	0.26	0.51	0.37
10	5398	1.83	1.14	1.72	6.05	1.54	3.48	1.24	2.48	0.61	2.80	1.02	1.03	2.01	4.71	0.98	1.09	2.13	1.53
11	6440	2.18	1.37	2.05	7.22	1.84	4.15	1.48	2.96	0.73	3.34	1.22	1.22	2.40	5.62	1.17	1.30	2.54	1.83
12	3752	1.27	0.80	1.19	4.21	1.07	2.42	0.86	1.73	0.42	1.95	0.71	0.71	1.40	3.28	0.68	0.76	1.48	1.07
13	3483	1.18	0.74	1.11	3.90	1.00	2.25	0.80	1.60	0.39	1.81	0.66	0.66	1.30	3.04	0.63	0.71	1.37	0.99
14	2954	1.00	0.63	0.94	3.31	0.84	1.91	0.68	1.36	0.33	1.53	0.56	0.56	1.10	2.58	0.53	0.60	1.17	0.84
15	1660	0.56	0.35	0.53	1.86	0.47	1.07	0.38	0.76	0.19	0.86	0.31	0.32	0.62	1.45	0.30	0.34	0.66	0.47
16	1625	0.55	0.34	0.52	1.82	0.46	1.05	0.37	0.75	0.18	0.84	0.31	0.31	0.61	1.42	0.29	0.33	0.64	0.46
17	1502	0.51	0.32	0.48	1.68	0.43	0.97	0.34	0.69	0.17	0.78	0.28	0.29	0.56	1.31	0.27	0.30	0.59	0.43
18	1171	0.40	0.25	0.37	1.31	0.33	0.76	0.27	0.54	0.13	0.61	0.22	0.22	0.44	1.02	0.21	0.24	0.46	0.33
19	1847	0.62	0.39	0.59	2.07	0.53	1.19	0.42	0.85	0.21	0.96	0.35	0.35	0.69	1.61	0.33	0.37	0.73	0.52
20	728	0.25	0.15	0.23	0.82	0.21	0.47	0.17	0.34	0.08	0.38	0.14	0.14	0.27	0.64	0.13	0.15	0.29	0.21
21	1716	0.58	0.36	0.55	1.92	0.49	1.11	0.39	0.79	0.19	0.89	0.32	0.33	0.64	1.50	0.31	0.35	0.68	0.49
22	1275	0.43	0.27	0.41	1.43	0.36	0.82	0.29	0.59	0.14	0.66	0.24	0.24	0.48	1.11	0.23	0.26	0.50	0.36
23	2125	0.72	0.45	0.68	2.38	0.61	1.37	0.49	0.98	0.24	1.10	0.40	0.40	0.79	1.86	0.38	0.43	0.84	0.60

Significance test

TiO₂/Steel signal area ratio

	Average	SEM
mod-S-R	1.13	0.05
mod-S-2R	1.06	0.06
mod-Y-R	1.21	0.05
mod-Y-2R	0.93	0.05

Paired t-test

TiO₂ vs Steel

p-values for all pairs

	mod-S-R	mod-S-2R	mod-Y-R	mod-Y-2R
mod-S-R		0.007	6.78E-06	1.07E-11
mod-S-2R	0.007		1.01E-07	4.82E-21
mod-Y-R	6.78E-06	1.01E-07		1.50E-25
mod-Y-2R	1.07E-11	4.82E-21	1.50E-25	

Significant difference between peptides

Not significant difference between peptides

Appendix B

Raw data and significance tests

TiO₂: non-washed vs. washed with salicylic acid

TiO2

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3102	1118	4080	1086
2	1497	972	3370	1755
3	869	429	2735	788
4	1219	1196	2482	1712
5	530	461	1245	665
6	2603	741	4347	797
7	5549	3568	12181	6507
8	3722	2850	7000	5412
9	2580	689	6227	1292
10	2118	2640	4632	5398
11	4258	2712	11499	6440
12	5030	2047	9804	3752
13	2657	1655	8280	3483
14	3409	1499	7932	2954
15	1939	904	3642	1660
16	2029	980	3272	1625
17	1957	892	3556	1502
18	1406	645	2655	1171
19	2122	976	4093	1847
20	847	340	1921	728
21	1546	932	3230	1716
22	2495	1058	3189	1275
23	1928	1123	3698	2125
Average	2409.217	1322.913	5003.043	2421.304
Stdev	1293.283	864.8099	3031.676	1845.683
SEM	269.6681	180.3253	632.1481	384.8516

Salycilic acid

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3307	1720	6405	3581
2	1422	495	2963	1205
3	4457	1882	10017	4173
4	2945	1485	5614	2591
5	1376	697	3280	1446
6	825	255	1668	537
7	2848	1571	4155	2005
8	558	236	1537	632
9	5015	2482	11936	6013
10	9498	4392	21660	8995
11	5656	2879	12586	5516
12	4508	2583	9259	5474
13	8590	4355	18591	7447
14	5158	3138	10658	6089
15	1428	952	4113	2797
16	9160	4402	19217	7774
17	5373	2752	12203	5637
18	5648	3405	12116	6485
19	8515	4753	15009	7594
20	3584	1791	7312	3454
Average	4493.55	2311.25	9514.95	4472.25
Stdev	2798.351	1444.797	5981.448	2583.961
SEM	625.7304	323.0664	1337.492	577.7912

Significance test

SA/TiO₂ signal area ratio

	Average	SEM
mod-S-R	2.56	0.12
mod-S-2R	2.50	0.11
mod-Y-R	2.60	0.11
mod-Y-2R	2.90	0.12

Paired t-test

TiO₂ vs SA

p-values for all pairs

	mod-S-R	mod-S-2R	mod-Y-R	mod-Y-2R
mod-S-R		0.323	0.263	1.13E-06
mod-S-2R	0.323		0.119	6.10E-18
mod-Y-R	0.263	0.119		1.49E-06
mod-Y-2R	1.13E-06	6.10E-18	1.49E-06	

Significant difference between peptides

Not significant difference between peptides

Appendix C

Raw data and significance tests

TiO₂: non-washed vs. washed with buffer pH 8

Raw data (signal area)

TiO2

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3102	1118	4080	1086
2	1497	972	3370	1755
3	869	429	2735	788
4	1219	1196	2482	1712
5	530	461	1245	665
6	2603	741	4347	797
7	5549	3568	12181	6507
8	3722	2850	7000	5412
9	2580	689	6227	1292
10	2118	2640	4632	5398
11	4258	2712	11499	6440
12	5030	2047	9804	3752
13	2657	1655	8280	3483
14	3409	1499	7932	2954
15	1939	904	3642	1660
16	2029	980	3272	1625
17	1957	892	3556	1502
18	1406	645	2655	1171
19	2122	976	4093	1847
20	847	340	1921	728
21	1546	932	3230	1716
22	2495	1058	3189	1275
23	1928	1123	3698	2125
Average	2409.217	1322.913	5003.043	2421.304
Stdev	1293.283	864.8099	3031.676	1845.683
SEM	269.6681	180.3253	632.1481	384.8516

pH 8

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	659	504	1034	678
2	260	202	687	305
3	383	28	547	39
4	738	367	1412	561
5	485	312	1077	578
6	452	145	781	180
7	741	482	1194	692
8	377	183	714	321
9	431	158	894	218
10	248		439	153
11	262	185	514	363
Average	457.8182	256.6	844.8182	371.6364
Stdev	182.8359	154.6424	307.3528	223.7839
SEM	55.1271	48.90222	92.67037	67.4734

pH 8 / TiO2 signal ratios

mod-S-R		TiO2																						
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Experiment	pH8	3102	1497	869	1219	530	2603	5549	3722	2580	2118	4258	5030	2657	3409	1939	2029	1957	1406	2122	847	1546	2495	1928
1	659	0.21	0.44	0.76	0.54	1.24	0.25	0.12	0.18	0.26	0.31	0.15	0.13	0.25	0.19	0.34	0.32	0.34	0.47	0.31	0.78	0.43	0.26	0.34
2	260	0.08	0.17	0.30	0.21	0.49	0.10	0.05	0.07	0.10	0.12	0.06	0.05	0.10	0.08	0.13	0.13	0.13	0.18	0.12	0.31	0.17	0.10	0.13
3	383	0.12	0.26	0.44	0.31	0.72	0.15	0.07	0.10	0.15	0.18	0.09	0.08	0.14	0.11	0.20	0.19	0.20	0.27	0.18	0.45	0.25	0.15	0.20
4	738	0.24	0.49	0.85	0.61	1.39	0.28	0.13	0.20	0.29	0.35	0.17	0.15	0.28	0.22	0.38	0.36	0.38	0.52	0.35	0.87	0.48	0.30	0.38
5	485	0.16	0.32	0.56	0.40	0.92	0.19	0.09	0.13	0.19	0.23	0.11	0.10	0.18	0.14	0.25	0.24	0.25	0.34	0.23	0.57	0.31	0.19	0.25
6	452	0.15	0.30	0.52	0.37	0.85	0.17	0.08	0.12	0.18	0.21	0.11	0.09	0.17	0.13	0.23	0.22	0.23	0.32	0.21	0.53	0.29	0.18	0.23
7	741	0.24	0.49	0.85	0.61	1.40	0.28	0.13	0.20	0.29	0.35	0.17	0.15	0.28	0.22	0.38	0.37	0.38	0.53	0.35	0.87	0.48	0.30	0.38
8	377	0.12	0.25	0.43	0.31	0.71	0.14	0.07	0.10	0.15	0.18	0.09	0.07	0.14	0.11	0.19	0.19	0.19	0.27	0.18	0.45	0.24	0.15	0.20
9	431	0.14	0.29	0.50	0.35	0.81	0.17	0.08	0.12	0.17	0.20	0.10	0.09	0.16	0.13	0.22	0.21	0.22	0.31	0.20	0.51	0.28	0.17	0.22
10	248	0.08	0.17	0.29	0.20	0.47	0.10	0.04	0.07	0.10	0.12	0.06	0.05	0.09	0.07	0.13	0.12	0.13	0.18	0.12	0.29	0.16	0.10	0.13
11	262	0.08	0.18	0.30	0.21	0.49	0.10	0.05	0.07	0.10	0.12	0.06	0.05	0.10	0.08	0.14	0.13	0.13	0.19	0.12	0.31	0.17	0.11	0.14

mod-S-2R		TiO2																						
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
	pH8	1118	972	429	1196	461	741	3568	2850	689	2640	2712	2047	1655	1499	904	980	892	645	976	340	932	1058	1123
1	504	0.45	0.52	1.17	0.42	1.09	0.68	0.14	0.18	0.73	0.19	0.19	0.25	0.30	0.34	0.56	0.51	0.57	0.78	0.52	1.48	0.54	0.48	0.45
2	202	0.18	0.21	0.47	0.17	0.44	0.27	0.06	0.07	0.29	0.08	0.07	0.10	0.12	0.13	0.22	0.21	0.23	0.31	0.21	0.59	0.22	0.19	0.18
3	28	0.03	0.03	0.07	0.02	0.06	0.04	0.01	0.01	0.04	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.04	0.03	0.08	0.03	0.03	0.02
4	367	0.33	0.38	0.86	0.31	0.80	0.50	0.10	0.13	0.53	0.14	0.14	0.18	0.22	0.24	0.41	0.37	0.41	0.57	0.38	1.08	0.39	0.35	0.33
5	312	0.28	0.32	0.73	0.26	0.68	0.42	0.09	0.11	0.45	0.12	0.12	0.15	0.19	0.21	0.35	0.32	0.35	0.48	0.32	0.92	0.33	0.29	0.28
6	145	0.13	0.15	0.34	0.12	0.31	0.20	0.04	0.05	0.21	0.05	0.05	0.07	0.09	0.10	0.16	0.15	0.16	0.22	0.15	0.43	0.16	0.14	0.13
7	482	0.43	0.50	1.12	0.40	1.05	0.65	0.14	0.17	0.70	0.18	0.18	0.24	0.29	0.32	0.53	0.49	0.54	0.75	0.49	1.42	0.52	0.46	0.43
8	183	0.16	0.19	0.43	0.15	0.40	0.25	0.05	0.06	0.27	0.07	0.07	0.09	0.11	0.12	0.20	0.19	0.21	0.28	0.19	0.54	0.20	0.17	0.16
9	158	0.14	0.16	0.37	0.13	0.34	0.21	0.04	0.06	0.23	0.06	0.06	0.08	0.10	0.11	0.17	0.16	0.18	0.24	0.16	0.46	0.17	0.15	0.14
10																								
11	185	0.17	0.19	0.43	0.15	0.40	0.25	0.05	0.06	0.27	0.07	0.07	0.09	0.11	0.12	0.20	0.19	0.21	0.29	0.19	0.54	0.20	0.17	0.16

mod-Y-R		TiO2																						
Exp		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
	pH8	4080	3370	2735	2482	1245	4347	12181	7000	6227	4632	11499	9804	8280	7932	3642	3272	3556	2655	4093	1921	3230	3189	3698
1	1034	0.25	0.31	0.38	0.42	0.83	0.24	0.08	0.15	0.17	0.22	0.09	0.11	0.12	0.13	0.28	0.32	0.29	0.39	0.25	0.54	0.32	0.32	0.28
2	687	0.17	0.20	0.25	0.28	0.55	0.16	0.06	0.10	0.11	0.15	0.06	0.07	0.08	0.09	0.19	0.21	0.19	0.26	0.17	0.36	0.21	0.22	0.19
3	547	0.13	0.16	0.20	0.22	0.44	0.13	0.04	0.08	0.09	0.12	0.05	0.06	0.07	0.07	0.15	0.17	0.15	0.21	0.13	0.28	0.17	0.17	0.15
4	1412	0.35	0.42	0.52	0.57	1.13	0.32	0.12	0.20	0.23	0.30	0.12	0.14	0.17	0.18	0.39	0.43	0.40	0.53	0.34	0.74	0.44	0.44	0.38
5	1077	0.26	0.32	0.39	0.43	0.87	0.25	0.09	0.15	0.17	0.23	0.09	0.11	0.13	0.14	0.30	0.33	0.30	0.41	0.26	0.56	0.33	0.34	0.29
6	781	0.19	0.23	0.29	0.31	0.63	0.18	0.06	0.11	0.13	0.17	0.07	0.08	0.09	0.10	0.21	0.24	0.22	0.29	0.19	0.41	0.24	0.24	0.21
7	1194	0.29	0.35	0.44	0.48	0.96	0.27	0.10	0.17	0.19	0.26	0.10	0.12	0.14	0.15	0.33	0.36	0.34	0.45	0.29	0.62	0.37	0.37	0.32
8	714	0.18	0.21	0.26	0.29	0.57	0.16	0.06	0.10	0.11	0.15	0.06	0.07	0.09	0.09	0.20	0.22	0.20	0.27	0.17	0.37	0.22	0.22	0.19
9	894	0.22	0.27	0.33	0.36	0.72	0.21	0.07	0.13	0.14	0.19	0.08	0.09	0.11	0.11	0.25	0.27	0.25	0.34	0.22	0.47	0.28	0.28	0.24
10	439	0.11	0.13	0.16	0.18	0.35	0.10	0.04	0.06	0.07	0.09	0.04	0.04	0.05	0.06	0.12	0.13	0.12	0.17	0.11	0.23	0.14	0.14	0.12
11	514	0.13	0.15	0.19	0.21	0.41	0.12	0.04	0.07	0.08	0.11	0.04	0.05	0.06	0.06	0.14	0.16	0.14	0.19	0.13	0.27	0.16	0.16	0.14

pH 8 / TiO2 signal ratios

	mod-Y-2R	TiO2																						
	Exp	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18					
	pH8	1086	1755	788	1712	665	797	6507	5412	1292	5398	6440	3752	3483	2954	1660	1625	1502	1171	1847	728	1716	1275	2125
1	678	0.62	0.39	0.86	0.40	1.02	0.85	0.10	0.13	0.52	0.13	0.11	0.18	0.19	0.23	0.41	0.42	0.45	0.58	0.37	0.93	0.40	0.53	0.32
2	305	0.28	0.17	0.39	0.18	0.46	0.38	0.05	0.06	0.24	0.06	0.05	0.08	0.09	0.10	0.18	0.19	0.20	0.26	0.17	0.42	0.18	0.24	0.14
3	39	0.04	0.02	0.05	0.02	0.06	0.05	0.01	0.01	0.03	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.02	0.05	0.02	0.03	0.02
4	561	0.52	0.32	0.71	0.33	0.84	0.70	0.09	0.10	0.43	0.10	0.09	0.15	0.16	0.19	0.34	0.35	0.37	0.48	0.30	0.77	0.33	0.44	0.26
5	578	0.53	0.33	0.73	0.34	0.87	0.73	0.09	0.11	0.45	0.11	0.09	0.15	0.17	0.20	0.35	0.36	0.38	0.49	0.31	0.79	0.34	0.45	0.27
6	180	0.17	0.10	0.23	0.11	0.27	0.23	0.03	0.03	0.14	0.03	0.03	0.05	0.05	0.06	0.11	0.11	0.12	0.15	0.10	0.25	0.10	0.14	0.08
7	692	0.64	0.39	0.88	0.40	1.04	0.87	0.11	0.13	0.54	0.13	0.11	0.18	0.20	0.23	0.42	0.43	0.46	0.59	0.37	0.95	0.40	0.54	0.33
8	321	0.30	0.18	0.41	0.19	0.48	0.40	0.05	0.06	0.25	0.06	0.05	0.09	0.09	0.11	0.19	0.20	0.21	0.27	0.17	0.44	0.19	0.25	0.15
9	218	0.20	0.12	0.28	0.13	0.33	0.27	0.03	0.04	0.17	0.04	0.03	0.06	0.06	0.07	0.13	0.13	0.15	0.19	0.12	0.30	0.13	0.17	0.10
10	153	0.14	0.09	0.19	0.09	0.23	0.19	0.02	0.03	0.12	0.03	0.02	0.04	0.04	0.05	0.09	0.09	0.10	0.13	0.08	0.21	0.09	0.12	0.07
11	363	0.33	0.21	0.46	0.21	0.55	0.46	0.06	0.07	0.28	0.07	0.06	0.10	0.10	0.12	0.22	0.22	0.24	0.31	0.20	0.50	0.21	0.28	0.17

Significance test

pH 8/TiO2 signal area ratio

	Average	SEM
mod-S-R	0.26	0.01
mod-S-2R	0.28	0.02
mod-Y-R	0.23	0.01
mod-Y-2R	0.24	0.01

Paired t-test

TiO2 vs pH 8

p-values for all pairs

	mod-S-R	mod-S-2R	mod-Y-R	mod-Y-2R
mod-S-R		0.660	5.04E-08	0.065
mod-S-2R	0.660		0.002	0.001
mod-Y-R	5.04E-08	0.002		0.242
mod-Y-2R	0.065	0.001	0.242	

Significant difference between peptides

Not significant difference between peptides

Appendix D

Raw data and significance tests

TiO₂: non-washed vs. washed with buffer pH 9

Raw data (signal area)

TiO2

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3102	1118	4080	1086
2	1497	972	3370	1755
3	869	429	2735	788
4	1219	1196	2482	1712
5	530	461	1245	665
6	2603	741	4347	797
7	5549	3568	12181	6507
8	3722	2850	7000	5412
9	2580	689	6227	1292
10	2118	2640	4632	5398
11	4258	2712	11499	6440
12	5030	2047	9804	3752
13	2657	1655	8280	3483
14	3409	1499	7932	2954
15	1939	904	3642	1660
16	2029	980	3272	1625
17	1957	892	3556	1502
18	1406	645	2655	1171
19	2122	976	4093	1847
20	847	340	1921	728
21	1546	932	3230	1716
22	2495	1058	3189	1275
23	1928	1123	3698	2125
Average	2409.217	1322.913	5003.043	2421.304
Stdev	1293.283	864.8099	3031.676	1845.683
SEM	269.6681	180.3253	632.1481	384.8516

pH 9

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	83		118	29
2	72		47	18
3	61		47	
4	55		47	
5	256	51	266	
6	107		82	
7	590		861	
8	20		52	
9	94	25	116	22
Average	148.6667	38	181.7778	23
Stdev	178.2638	18.38478	264.1315	5.567764
SEM	59.42128	13	88.04383	3.21455

mod-S-R		TiO2																						
Exp	pH 9	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Experiment		3102	1497	869	1219	530	2603	5549	3722	2580	2118	4258	5030	2657	3409	1939	2029	1957	1406	2122	847	1546	2495	1928
1	83	0.027	0.055	0.096	0.068	0.157	0.032	0.015	0.022	0.032	0.039	0.019	0.017	0.031	0.024	0.043	0.041	0.042	0.059	0.039	0.098	0.054	0.033	0.043
2	72	0.023	0.048	0.083	0.059	0.136	0.028	0.013	0.019	0.028	0.034	0.017	0.014	0.027	0.021	0.037	0.035	0.037	0.051	0.034	0.085	0.047	0.029	0.037
3	61	0.020	0.041	0.070	0.050	0.115	0.023	0.011	0.016	0.024	0.029	0.014	0.012	0.023	0.018	0.031	0.030	0.031	0.043	0.029	0.072	0.039	0.024	0.032
4	55	0.018	0.037	0.063	0.045	0.104	0.021	0.010	0.015	0.021	0.026	0.013	0.011	0.021	0.016	0.028	0.027	0.028	0.039	0.026	0.065	0.036	0.022	0.029
5	256	0.083	0.171	0.295	0.210	0.483	0.098	0.046	0.069	0.099	0.121	0.060	0.051	0.096	0.075	0.132	0.126	0.131	0.182	0.121	0.302	0.166	0.103	0.133
6	107	0.034	0.071	0.123	0.088	0.202	0.041	0.019	0.029	0.041	0.051	0.025	0.021	0.040	0.031	0.055	0.053	0.055	0.076	0.050	0.126	0.069	0.043	0.055
7	590	0.190	0.394	0.679	0.484	1.113	0.227	0.106	0.159	0.229	0.279	0.139	0.117	0.222	0.173	0.304	0.291	0.301	0.420	0.278	0.697	0.382	0.236	0.306
8	20	0.006	0.013	0.023	0.016	0.038	0.008	0.004	0.005	0.008	0.009	0.005	0.004	0.008	0.006	0.010	0.010	0.010	0.014	0.009	0.024	0.013	0.008	0.010
9	94	0.030	0.063	0.108	0.077	0.177	0.036	0.017	0.025	0.036	0.044	0.022	0.019	0.035	0.028	0.048	0.046	0.048	0.067	0.044	0.111	0.061	0.038	0.049

mod-S-2R		TiO2																						
Exp	pH 9	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
1		1118	972	429	1196	461	741	3568	2850	689	2640	2712	2047	1655	1499	904	980	892	645	976	340	932	1058	1123
2																								
3																								
4																								
5	51	0.046	0.052	0.119	0.043	0.111	0.069	0.014	0.018	0.074	0.019	0.019	0.025	0.031	0.034	0.056	0.052	0.057	0.079	0.052	0.150	0.055	0.048	0.045
6																								
7																								
8																								
9	25	0.022	0.026	0.058	0.021	0.054	0.034	0.007	0.009	0.036	0.009	0.009	0.012	0.015	0.017	0.028	0.026	0.028	0.039	0.026	0.074	0.027	0.024	0.022

mod-Y-R		TiO2																						
Exp	pH 9	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
1		4080	3370	2735	2482	1245	4347	12181	7000	6227	4632	11499	9804	8280	7932	3642	3272	3556	2655	4093	1921	3230	3189	3698
2	118	0.029	0.035	0.043	0.048	0.095	0.027	0.010	0.017	0.019	0.025	0.010	0.012	0.014	0.015	0.032	0.036	0.033	0.044	0.029	0.061	0.037	0.037	0.032
3	47	0.012	0.014	0.017	0.019	0.038	0.011	0.004	0.007	0.008	0.010	0.004	0.005	0.006	0.006	0.013	0.014	0.013	0.018	0.011	0.024	0.015	0.015	0.013
4	47	0.012	0.014	0.017	0.019	0.038	0.011	0.004	0.007	0.008	0.010	0.004	0.005	0.006	0.006	0.013	0.014	0.013	0.018	0.011	0.024	0.015	0.015	0.013
5	266	0.065	0.079	0.097	0.107	0.214	0.061	0.022	0.038	0.043	0.057	0.023	0.027	0.032	0.034	0.073	0.081	0.075	0.100	0.065	0.138	0.082	0.083	0.072
6	82	0.020	0.024	0.030	0.033	0.066	0.019	0.007	0.012	0.013	0.018	0.007	0.008	0.010	0.010	0.023	0.025	0.023	0.031	0.020	0.043	0.025	0.026	0.022
7	861	0.211	0.255	0.315	0.347	0.692	0.198	0.071	0.123	0.138	0.186	0.075	0.088	0.104	0.109	0.236	0.263	0.242	0.324	0.210	0.448	0.267	0.270	0.233
8	52	0.013	0.015	0.019	0.021	0.042	0.012	0.004	0.007	0.008	0.011	0.005	0.005	0.006	0.007	0.014	0.016	0.015	0.020	0.013	0.027	0.016	0.016	0.014
9	116	0.028	0.034	0.042	0.047	0.093	0.027	0.010	0.017	0.019	0.025	0.010	0.012	0.014	0.015	0.032	0.035	0.033	0.044	0.028	0.060	0.036	0.036	0.031

mod-Y-2R		TiO2																						
Exp	pH 9	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18					
1	29	1086	1755	788	1712	665	797	6507	5412	1292	5398	6440	3752	3483	2954	1660	1625	1502	1171	1847	728	1716	1275	2125
2	18	0.03	0.017	0.037	0.017	0.044	0.036	0.004	0.005	0.022	0.005	0.005	0.008	0.008	0.010	0.017	0.018	0.019	0.025	0.016	0.040	0.017	0.023	0.014
3																								
4																								
5																								
6																								
7																								
8																								
9	22	0.02	0.013	0.028	0.013	0.033	0.028	0.003	0.004	0.017	0.004	0.003	0.006	0.006	0.007	0.013	0.014	0.015	0.019	0.012	0.030	0.013	0.017	0.010

Significance test

pH 9/TiO2 signal area ratio

	Average	SEM
mod-S-R	0.08	0.01
mod-S-2R	0.04	0.00
mod-Y-R	0.05	0.01
mod-Y-2R	0.01	0.00

Paired t-test

TiO2 vs pH 9

p-values for all pairs

	mod-S-R	mod-S-2R	mod-Y-R	mod-Y-2R
mod-S-R		1.88E-07	9.33E-18	3.12E-15
mod-S-2R	1.88E-07		0.002	1.60E-06
mod-Y-R	9.33E-18	0.002		1.41E-09
mod-Y-2R	3.12E-15	1.60E-06	1.41E-09	

Significant difference between peptides

Not significant difference between peptides

Appendix E

Raw data and significance tests

TiO₂: non-washed vs. washed with buffer pH 1.3

Raw data (signal areas)

TiO2

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3102	1118	4080	1086
2	1497	972	3370	1755
3	869	429	2735	788
4	1219	1196	2482	1712
5	530	461	1245	665
6	2603	741	4347	797
7	5549	3568	12181	6507
8	3722	2850	7000	5412
9	2580	689	6227	1292
10	2118	2640	4632	5398
11	4258	2712	11499	6440
12	5030	2047	9804	3752
13	2657	1655	8280	3483
14	3409	1499	7932	2954
15	1939	904	3642	1660
16	2029	980	3272	1625
17	1957	892	3556	1502
18	1406	645	2655	1171
19	2122	976	4093	1847
20	847	340	1921	728
21	1546	932	3230	1716
22	2495	1058	3189	1275
23	1928	1123	3698	2125
Average	2409.217	1322.913	5003.043	2421.304
Stdev	1293.283	864.8099	3031.676	1845.683
SEM	269.6681	180.3253	632.1481	384.8516

pH 1.33

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	6429	4025	13255	8608
2	6282	3700	13307	7324
3	3881	2585	8589	6237
4	4391	2306	9858	5271
5	10090	3904	16341	5777
6	6661	3254	12917	6375
7	5211	3289	11946	7947
8	5758	2915	11765	5248
9	4347	2658	9402	5936
10	7507	3047	13710	6848
11	5869	2179	11426	4613
12	2341	981	5786	3051
13	2780	580	9788	1750
14	2014	1081	5335	3244
15	1489	619	6093	1949
16	1308	297	4904	679
17	2803	469	7240	1097
18	1013	299	2925	445
19	1172	336	2974	1115
20	3718	688	8937	1852
21	1857	492	5194	1338
22	2261	858	6044	2221
23	4704	1423	10057	2666
24	3097	1285	6715	2754
25	229	14	568	28
26	335	113	551	102
27	230	17	1004	21
28	112	20	420	26
29	173	23	250	28
30	42	6	108	1
31	175	35	258	85
32	251	81	799	156
33	312	63	717	144
34	202	19	381	20
35	400	39	244	45
36	54	1	146	1
37	7211	2072	16614	4466
38	1456	280	3858	1007
39	1361	433	6515	1189
40	2015	755	7267	2149
41	1462	829	5308	2628
42	1542	442	4544	1421
43	5441	1686	12388	4213
44	1943	1120	8599	2077
45	4410	1402	12065	4167
46	1702	545	5733	2239
47	1414	323	4857	1402
48	2616	564	5764	1407
49	3535	1297	8320	3168
50	2914	880	6533	2190
51	3417	997	8037	1548
52	594	357	2210	819
53	3628	1499	7830	2729
54	2784	460	5854	1213
55	2829	1122	7227	3273
56	4106	1180	9255	3137
Average	2783.536	1106.14286	6584.5	2525.786
Stdev	2302.346	1125.01719	4496.22	2302.853
SEM	307.664	150.336746	600.8327	307.7317

pH 1.3 / TiO2 signal ratios

		mod-S-R	TiO2																						
		Exp	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Experiment	pH 1.3		3102	1497	869	1219	530	2603	5549	3722	2580	2118	4258	5030	2657	3409	1939	2029	1957	1406	2122	847	1546	2495	1928
1	6429	2.07	4.29	7.40	5.27	12.13	2.47	1.16	1.73	2.49	3.04	1.51	1.28	2.42	1.89	3.32	3.17	3.29	4.57	3.03	7.59	4.16	2.58	3.33	
2	6282	2.03	4.20	7.23	5.15	11.85	2.41	1.13	1.69	2.43	2.97	1.48	1.25	2.36	1.84	3.24	3.10	3.21	4.47	2.96	7.42	4.06	2.52	3.26	
3	3881	1.25	2.59	4.47	3.18	7.32	1.49	0.70	1.04	1.50	1.83	0.91	0.77	1.46	1.14	2.00	1.91	1.98	2.76	1.83	4.58	2.51	1.56	2.01	
4	4391	1.42	2.93	5.05	3.60	8.28	1.69	0.79	1.18	1.70	2.07	1.03	0.87	1.65	1.29	2.26	2.16	2.24	3.12	2.07	5.18	2.84	1.76	2.28	
5	10090	3.25	6.74	11.61	8.28	19.04	3.88	1.82	2.71	3.91	4.76	2.37	2.01	3.80	2.96	5.20	4.97	5.16	7.18	4.75	11.91	6.53	4.04	5.23	
6	6661	2.15	4.45	7.67	5.46	12.57	2.56	1.20	1.79	2.58	3.14	1.56	1.32	2.51	1.95	3.44	3.28	3.40	4.74	3.14	7.86	4.31	2.67	3.45	
7	5211	1.68	3.48	6.00	4.27	9.83	2.00	0.94	1.40	2.02	2.46	1.22	1.04	1.96	1.53	2.69	2.57	2.66	3.71	2.46	6.15	3.37	2.09	2.70	
8	5758	1.86	3.85	6.63	4.72	10.86	2.21	1.04	1.55	2.23	2.72	1.35	1.14	2.17	1.69	2.97	2.84	2.94	4.10	2.71	6.80	3.72	2.31	2.99	
9	4347	1.40	2.90	5.00	3.57	8.20	1.67	0.78	1.17	1.68	2.05	1.02	0.86	1.64	1.28	2.24	2.14	2.22	3.09	2.05	5.13	2.81	1.74	2.25	
10	7507	2.42	5.01	8.64	6.16	14.16	2.88	1.35	2.02	2.91	3.54	1.76	1.49	2.83	2.20	3.87	3.70	3.84	5.34	3.54	8.86	4.86	3.01	3.89	
11	5869	1.89	3.92	6.75	4.81	11.07	2.25	1.06	1.58	2.27	2.77	1.38	1.17	2.21	1.72	3.03	2.89	3.00	4.17	2.77	6.93	3.80	2.35	3.04	
12	2341	0.75	1.56	2.69	1.92	4.42	0.90	0.42	0.63	0.91	1.11	0.55	0.47	0.88	0.69	1.21	1.15	1.20	1.67	1.10	2.76	1.51	0.94	1.21	
13	2780	0.90	1.86	3.20	2.28	5.25	1.07	0.50	0.75	1.08	1.31	0.65	0.55	1.05	0.82	1.43	1.37	1.42	1.98	1.31	3.28	1.80	1.11	1.44	
14	2014	0.65	1.35	2.32	1.65	3.80	0.77	0.36	0.54	0.78	0.95	0.47	0.40	0.76	0.59	1.04	0.99	1.03	1.43	0.95	2.38	1.30	0.81	1.04	
15	1489	0.48	0.99	1.71	1.22	2.81	0.57	0.27	0.40	0.58	0.70	0.35	0.30	0.56	0.44	0.77	0.73	0.76	1.06	0.70	1.76	0.96	0.60	0.77	
16	1308	0.42	0.87	1.51	1.07	2.47	0.50	0.24	0.35	0.51	0.62	0.31	0.26	0.49	0.38	0.67	0.64	0.67	0.93	0.62	1.54	0.85	0.52	0.68	
17	2803	0.90	1.87	3.23	2.30	5.29	1.08	0.51	0.75	1.09	1.32	0.66	0.56	1.05	0.82	1.45	1.38	1.43	1.99	1.32	3.31	1.81	1.12	1.45	
18	1013	0.33	0.68	1.17	0.83	1.91	0.39	0.18	0.27	0.39	0.48	0.24	0.20	0.38	0.30	0.52	0.50	0.52	0.72	0.48	1.20	0.66	0.41	0.53	
19	1172	0.38	0.78	1.35	0.96	2.21	0.45	0.21	0.31	0.45	0.55	0.28	0.23	0.44	0.34	0.60	0.58	0.60	0.83	0.55	1.38	0.76	0.47	0.61	
20	3718	1.20	2.48	4.28	3.05	7.02	1.43	0.67	1.00	1.44	1.76	0.87	0.74	1.40	1.09	1.92	1.83	1.90	2.64	1.75	4.39	2.40	1.49	1.93	
21	1857	0.60	1.24	2.14	1.52	3.50	0.71	0.33	0.50	0.72	0.88	0.44	0.37	0.70	0.54	0.96	0.92	0.95	1.32	0.88	2.19	1.20	0.74	0.96	
22	2261	0.73	1.51	2.60	1.85	4.27	0.87	0.41	0.61	0.88	1.07	0.53	0.45	0.85	0.66	1.17	1.11	1.16	1.61	1.07	2.67	1.46	0.91	1.17	
23	4704	1.52	3.14	5.41	3.86	8.88	1.81	0.85	1.26	1.82	2.22	1.10	0.94	1.77	1.38	2.43	2.32	2.40	3.35	2.22	5.55	3.04	1.89	2.44	
24	3097	1.00	2.07	3.56	2.54	5.84	1.19	0.56	0.83	1.20	1.46	0.73	0.62	1.17	0.91	1.60	1.53	1.58	2.20	1.46	3.66	2.00	1.24	1.61	
25	229	0.07	0.15	0.26	0.19	0.43	0.09	0.04	0.06	0.09	0.11	0.05	0.05	0.09	0.07	0.12	0.11	0.12	0.16	0.11	0.27	0.15	0.09	0.12	
26	335	0.11	0.22	0.39	0.27	0.63	0.13	0.06	0.09	0.13	0.16	0.08	0.07	0.13	0.10	0.17	0.17	0.17	0.24	0.16	0.40	0.22	0.13	0.17	
27	230	0.07	0.15	0.26	0.19	0.43	0.09	0.04	0.06	0.09	0.11	0.05	0.05	0.09	0.07	0.12	0.11	0.12	0.16	0.11	0.27	0.15	0.09	0.12	
28	112	0.04	0.07	0.13	0.09	0.21	0.04	0.02	0.03	0.04	0.05	0.03	0.02	0.04	0.03	0.06	0.06	0.06	0.08	0.05	0.13	0.07	0.04	0.06	
29	173	0.06	0.12	0.20	0.14	0.33	0.07	0.03	0.05	0.07	0.08	0.04	0.03	0.07	0.05	0.09	0.09	0.09	0.12	0.08	0.20	0.11	0.07	0.09	
30	42	0.01	0.03	0.05	0.03	0.08	0.02	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01	0.01	0.02	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.05	0.03	0.02	0.02	
31	175	0.06	0.12	0.20	0.14	0.33	0.07	0.03	0.05	0.07	0.08	0.04	0.03	0.07	0.05	0.09	0.09	0.09	0.12	0.08	0.21	0.11	0.07	0.09	
32	251	0.08	0.17	0.29	0.21	0.47	0.10	0.05	0.07	0.10	0.12	0.06	0.05	0.09	0.07	0.13	0.12	0.13	0.18	0.12	0.30	0.16	0.10	0.13	
33	312	0.10	0.21	0.36	0.26	0.59	0.12	0.06	0.08	0.12	0.15	0.07	0.06	0.12	0.09	0.16	0.15	0.16	0.22	0.15	0.37	0.20	0.13	0.16	
34	202	0.07	0.13	0.23	0.17	0.38	0.08	0.04	0.05	0.08	0.10	0.05	0.04	0.08	0.06	0.10	0.10	0.10	0.14	0.10	0.24	0.13	0.08	0.10	
35	400	0.13	0.27	0.46	0.33	0.75	0.15	0.07	0.11	0.16	0.19	0.09	0.08	0.15	0.12	0.21	0.20	0.20	0.28	0.19	0.47	0.26	0.16	0.21	
36	54	0.02	0.04	0.06	0.04	0.10	0.02	0.01	0.01	0.02	0.03	0.01	0.01	0.02	0.02	0.03	0.03	0.03	0.04	0.03	0.06	0.03	0.02	0.03	
37	7211	2.32	4.82	8.30	5.92	13.61	2.77	1.30	1.94	2.79	3.40	1.69	1.43	2.71	2.12	3.72	3.55	3.68	5.13	3.40	8.51	4.66	2.89	3.74	
38	1456	0.47	0.97	1.68	1.19	2.75	0.56	0.26	0.39	0.56	0.69	0.34	0.29	0.55	0.43	0.75	0.72	0.74	1.04	0.69	1.72	0.94	0.58	0.76	
39	1361	0.44	0.91	1.57	1.12	2.57	0.52	0.25	0.37	0.53	0.64	0.32	0.27	0.51	0.40	0.70	0.67	0.70	0.97	0.64	1.61	0.88	0.55	0.71	
40	2015	0.65	1.35	2.32	1.65	3.80	0.77	0.36	0.54	0.78	0.95	0.47	0.40	0.76	0.59	1.04	0.99	1.03	1.43	0.95	2.38	1.30	0.81	1.05	
41	1462	0.47	0.98	1.68	1.20	2.76	0.56	0.26	0.39	0.57	0.69	0.34	0.29	0.55	0.43	0.75	0.72	0.75	1.04	0.69	1.73	0.95	0.59	0.76	
42	1542	0.50	1.03	1.77	1.26	2.91	0.59	0.28	0.41	0.60	0.73	0.36	0.31	0.58	0.45	0.80	0.76	0.79	1.10	0.73	1.82	1.00	0.62	0.80	
43	5441	1.75	3.63	6.26	4.46	10.27	2.09	0.98	1.46	2.11	2.57	1.28	1.08	2.05	1.60	2.81	2.68	2.78	3.87	2.56	6.42	3.52	2.18	2.82	
44	1943	0.63	1.30	2.24	1.59	3.67	0.75	0.35	0.52	0.75	0.92	0.46	0.39	0.73	0.57	1.00	0.96	0.99	1.38	0.92	2.29	1.26	0.78	1.01	
45	4410	1.42	2.95	5.07	3.62	8.32	1.69	0.79	1.18	1.71	2.08	1.04	0.88	1.66	1.29	2.27	2.17	2.25	3.14	2.08	5.21	2.85	1.77	2.29	
46	1702	0.55	1.14	1.96	1.40	3.21	0.65	0.31	0.46	0.66	0.80	0.40	0.34	0.64	0.50	0.88	0.84	0.87	1.21	0.80	2.01	1.10	0.68	0.88	
47	1414	0.46	0.94	1.63	1.16	2.67	0.54	0.25	0.38	0.55	0.67	0.33	0.28	0.53	0.41	0.73	0.70	0.72	1.01	0.67	1.67	0.91	0.57	0.73	
48	2616	0.84	1.75	3.01	2.15	4.94	1.00	0.47	0.70	1.01	1.24	0.61	0.52	0.98	0.77	1.35	1.29	1.34	1.86	1.23	3.09	1.69	1.05	1.36	
49	3535	1.14	2.36	4.07	2.90	6.67	1.36	0.64	0.95	1.37	1.67	0.83	0.70	1.33	1.04	1.82	1.74	1.81	2.51	1.67	4.17	2.29	1.42	1.83	
50	2914	0.94	1.95	3.35	2.39	5.50	1.12	0.53	0.78	1.13	1.38	0.68	0.58	1.10	0.85	1.50	1.44	1.49	2.07	1.37	3.44	1.88	1.17	1.51	
51	3417	1.10	2.28	3.93	2.80	6.45	1.31	0.62	0.92	1.32	1.61	0.80	0.68	1.29	1.00	1.76	1.68	1.75	2.43	1.61	4.03	2.21	1.37	1.77	
52	594	0.19	0.40	0.68	0.49	1.12	0.23	0.11	0.16	0.23	0.28	0.14	0.12	0.22	0.17	0.31	0.29	0.30	0.42	0.28	0.70	0.38	0.24	0.31	

pH 1.3 / TiO2 signal ratios

	mod-S-2R	TiO2																						
	Exp	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
	pH 1.3	1118	972	429	1196	461	741	3568	2850	689	2640	2712	2047	1655	1499	904	980	892	645	976	340	932	1058	1123
1	4025	3.60	4.14	9.38	3.37	8.73	5.43	1.13	1.41	5.84	1.52	1.48	1.97	2.43	2.69	4.45	4.11	4.51	6.24	4.12	11.84	4.32	3.80	3.58
2	3700	3.31	3.81	8.62	3.09	8.03	4.99	1.04	1.30	5.37	1.40	1.36	1.81	2.24	2.47	4.09	3.78	4.15	5.74	3.79	10.88	3.97	3.50	3.29
3	2585	2.31	2.66	6.03	2.16	5.61	3.49	0.72	0.91	3.75	0.98	0.95	1.26	1.56	1.72	2.86	2.64	2.90	4.01	2.65	7.60	2.77	2.44	2.30
4	2306	2.06	2.37	5.38	1.93	5.00	3.11	0.65	0.81	3.35	0.87	0.85	1.13	1.39	1.54	2.55	2.35	2.59	3.58	2.36	6.78	2.47	2.18	2.05
5	3904	3.49	4.02	9.10	3.26	8.47	5.27	1.09	1.37	5.67	1.48	1.44	1.91	2.36	2.60	4.32	3.98	4.38	6.05	4.00	11.48	4.19	3.69	3.48
6	3254	2.91	3.35	7.59	2.72	7.06	4.39	0.91	1.14	4.72	1.23	1.20	1.59	1.97	2.17	3.60	3.32	3.65	5.04	3.33	9.57	3.49	3.08	2.90
7	3289	2.94	3.38	7.67	2.75	7.13	4.44	0.92	1.15	4.77	1.25	1.21	1.61	1.99	2.19	3.64	3.36	3.69	5.10	3.37	9.67	3.53	3.11	2.93
8	2915	2.61	3.00	6.79	2.44	6.32	3.93	0.82	1.02	4.23	1.10	1.07	1.42	1.76	1.94	3.22	2.97	3.27	4.52	2.99	8.57	3.13	2.76	2.60
9	2658	2.38	2.73	6.20	2.22	5.77	3.59	0.74	0.93	3.86	1.01	0.98	1.30	1.61	1.77	2.94	2.71	2.98	4.12	2.72	7.82	2.85	2.51	2.37
10	3047	2.73	3.13	7.10	2.55	6.61	4.11	0.85	1.07	4.42	1.15	1.12	1.49	1.84	2.03	3.37	3.11	3.42	4.72	3.12	8.96	3.27	2.88	2.71
11	2179	1.95	2.24	5.08	1.82	4.73	2.94	0.61	0.76	3.16	0.83	0.80	1.06	1.32	1.45	2.41	2.22	2.44	3.38	2.23	6.41	2.34	2.06	1.94
12	981	0.88	1.01	2.29	0.82	2.13	1.32	0.27	0.34	1.42	0.37	0.36	0.48	0.59	0.65	1.09	1.00	1.10	1.52	1.01	2.89	1.05	0.93	0.87
13	580	0.52	0.60	1.35	0.48	1.26	0.78	0.16	0.20	0.84	0.22	0.21	0.28	0.35	0.39	0.64	0.59	0.65	0.90	0.59	1.71	0.62	0.55	0.52
14	1081	0.97	1.11	2.52	0.90	2.34	1.46	0.30	0.38	1.57	0.41	0.40	0.53	0.65	0.72	1.20	1.10	1.21	1.68	1.11	3.18	1.16	1.02	0.96
15	619	0.55	0.64	1.44	0.52	1.34	0.84	0.17	0.22	0.90	0.23	0.23	0.30	0.37	0.41	0.68	0.63	0.69	0.96	0.63	1.82	0.66	0.59	0.55
16	297	0.27	0.31	0.69	0.25	0.64	0.40	0.08	0.10	0.43	0.11	0.11	0.15	0.18	0.20	0.33	0.30	0.33	0.46	0.30	0.87	0.32	0.28	0.26
17	469	0.42	0.48	1.09	0.39	1.02	0.63	0.13	0.16	0.68	0.18	0.17	0.23	0.28	0.31	0.52	0.48	0.53	0.73	0.48	1.38	0.50	0.44	0.42
18	299	0.27	0.31	0.70	0.25	0.65	0.40	0.08	0.10	0.43	0.11	0.11	0.15	0.18	0.20	0.33	0.31	0.34	0.46	0.31	0.88	0.32	0.28	0.27
19	336	0.30	0.35	0.78	0.28	0.73	0.45	0.09	0.12	0.49	0.13	0.12	0.16	0.20	0.22	0.37	0.34	0.38	0.52	0.34	0.99	0.36	0.32	0.30
20	688	0.62	0.71	1.60	0.58	1.49	0.93	0.19	0.24	1.00	0.26	0.25	0.34	0.42	0.46	0.76	0.70	0.77	1.07	0.70	2.02	0.74	0.65	0.61
21	492	0.44	0.51	1.15	0.41	1.07	0.66	0.14	0.17	0.71	0.19	0.18	0.24	0.30	0.33	0.54	0.50	0.55	0.76	0.50	1.45	0.53	0.47	0.44
22	858	0.77	0.88	2.00	0.72	1.86	1.16	0.24	0.30	1.25	0.33	0.32	0.42	0.52	0.57	0.95	0.88	0.96	1.33	0.88	2.52	0.92	0.81	0.76
23	1423	1.27	1.46	3.32	1.19	3.09	1.92	0.40	0.50	2.07	0.54	0.52	0.70	0.86	0.95	1.57	1.45	1.60	2.21	1.46	4.19	1.53	1.34	1.27
24	1285	1.15	1.32	3.00	1.07	2.79	1.73	0.36	0.45	1.87	0.49	0.47	0.63	0.78	0.86	1.42	1.31	1.44	1.99	1.32	3.78	1.38	1.21	1.14
25	14	0.01	0.01	0.03	0.01	0.03	0.02	0.00	0.00	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.01	0.02	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.01
26	113	0.10	0.12	0.26	0.09	0.25	0.15	0.03	0.04	0.16	0.04	0.04	0.06	0.07	0.08	0.13	0.12	0.13	0.18	0.12	0.33	0.12	0.11	0.10
27	17	0.02	0.02	0.04	0.01	0.04	0.02	0.00	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.05	0.02	0.02	0.02
28	20	0.02	0.02	0.05	0.02	0.04	0.03	0.01	0.01	0.03	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.06	0.02	0.02	0.02
29	23	0.02	0.02	0.05	0.02	0.05	0.03	0.01	0.01	0.03	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.03	0.02	0.03	0.04	0.02	0.07	0.02	0.02	0.02
30	6	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01
31	35	0.03	0.04	0.08	0.03	0.08	0.05	0.01	0.01	0.05	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.04	0.04	0.04	0.05	0.04	0.10	0.04	0.03	0.03
32	81	0.07	0.08	0.19	0.07	0.18	0.11	0.02	0.03	0.12	0.03	0.03	0.04	0.05	0.05	0.09	0.08	0.09	0.13	0.08	0.24	0.09	0.08	0.07
33	63	0.06	0.06	0.15	0.05	0.14	0.09	0.02	0.02	0.09	0.02	0.02	0.03	0.04	0.04	0.07	0.06	0.07	0.10	0.06	0.19	0.07	0.06	0.06
34	19	0.02	0.02	0.04	0.02	0.04	0.03	0.01	0.01	0.03	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.06	0.02	0.02	0.02
35	39	0.03	0.04	0.09	0.03	0.08	0.05	0.01	0.01	0.06	0.01	0.01	0.02	0.02	0.03	0.04	0.04	0.04	0.06	0.04	0.11	0.04	0.04	0.03
36	1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
37	2072	1.85	2.13	4.83	1.73	4.49	2.80	0.58	0.73	3.01	0.78	0.76	1.01	1.25	1.38	2.29	2.11	2.32	3.21	2.12	6.09	2.22	1.96	1.85
38	280	0.25	0.29	0.65	0.23	0.61	0.38	0.08	0.10	0.41	0.11	0.10	0.14	0.17	0.19	0.31	0.29	0.31	0.43	0.29	0.82	0.30	0.26	0.25
39	433	0.39	0.45	1.01	0.36	0.94	0.58	0.12	0.15	0.63	0.16	0.16	0.21	0.26	0.29	0.48	0.44	0.49	0.67	0.44	1.27	0.46	0.41	0.39
40	755	0.68	0.78	1.76	0.63	1.64	1.02	0.21	0.26	1.10	0.29	0.28	0.37	0.46	0.50	0.84	0.77	0.85	1.17	0.77	2.22	0.81	0.71	0.67
41	829	0.74	0.85	1.93	0.69	1.80	1.12	0.23	0.29	1.20	0.31	0.31	0.40	0.50	0.55	0.92	0.85	0.93	1.29	0.85	2.44	0.89	0.78	0.74
42	442	0.40	0.45	1.03	0.37	0.96	0.60	0.12	0.16	0.64	0.17	0.16	0.22	0.27	0.29	0.49	0.45	0.50	0.69	0.45	1.30	0.47	0.42	0.39
43	1686	1.51	1.73	3.93	1.41	3.66	2.28	0.47	0.59	2.45	0.64	0.62	0.82	1.02	1.12	1.87	1.72	1.89	2.61	1.73	4.96	1.81	1.59	1.50
44	1120	1.00	1.15	2.61	0.94	2.43	1.51	0.31	0.39	1.63	0.42	0.41	0.55	0.68	0.75	1.24	1.14	1.26	1.74	1.15	3.29	1.20	1.06	1.00
45	1402	1.25	1.44	3.27	1.17	3.04	1.89	0.39	0.49	2.03	0.53	0.52	0.68	0.85	0.94	1.55	1.43	1.57	2.17	1.44	4.12	1.50	1.33	1.25
46	545	0.49	0.56	1.27	0.46	1.18	0.74	0.15	0.19	0.79	0.21	0.20	0.27	0.33	0.36	0.60	0.56	0.61	0.84	0.56	1.60	0.58	0.52	0.49
47	323	0.29	0.33	0.75	0.27	0.70	0.44	0.09	0.11	0.47	0.12	0.12	0.16	0.20	0.22	0.36	0.33	0.36	0.50	0.33	0.95	0.35	0.31	0.29
48	564	0.50	0.58	1.31	0.47	1.22	0.76	0.16	0.20	0.82	0.21	0.21	0.28	0.34	0.38	0.62	0.58	0.63	0.87	0.58	1.66	0.61	0.53	0.50
49	1297	1.16	1.33	3.02	1.08	2.81	1.75	0.36	0.46	1.88	0.49	0.48	0.63	0.78	0.87	1.43	1.32	1.45	2.01	1.33	3.81	1.39	1.23	1.15
50	880	0.79	0.91	2.05	0.74	1.91	1.19	0.25	0.31	1.28	0.33	0.32	0.43	0.53	0.59	0.97	0.90	0.99	1.36	0.90	2.59	0.94	0.83	0.78
51	997	0.89	1.03	2.32	0.83	2.16	1.35	0.28	0.35	1.45	0.38	0.37	0.49	0.60	0.67	1.10	1.02	1.12	1.55	1.02	2.93	1.07	0.94	0.89
52	357	0.32	0.37	0.83	0.30	0.77	0.48	0.10	0.13	0.52	0.14	0.13	0.17	0.22	0.24	0.39	0.36	0.40	0.55	0.37	1.05	0.38	0.34	0.32
53	1499</																							

Significance test

pH 1.3/TiO₂ signal area ratio

	Average	SEM
mod-S-R	1.58	0.05
mod-S-2R	1.20	0.04
mod-Y-R	1.80	0.05
mod-Y-2R	1.64	0.06

Paired t-test

TiO₂ vs pH 1.3

p-values for all pairs

	mod-S-R	mod-S-2R	mod-Y-R	mod-Y-2R
mod-S-R		2.19E-38	1.25E-30	0.114
mod-S-2R	2.19E-38		1.30E-74	8.12E-85
mod-Y-R	1.25E-30	1.30E-74		3.92E-06
mod-Y-2R	0.114	8.12E-85	3.92E-06	

Significant difference between peptides

Not significant difference between peptides

Appendix F

Raw data and significance tests

TiO₂: non-washed vs. washed with 10 mM
phosphate

Raw data (signal areas)

TiO2

Phosphate 10 mM

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	3102	1118	4080	1086
2	1497	972	3370	1755
3	869	429	2735	788
4	1219	1196	2482	1712
5	530	461	1245	665
6	2603	741	4347	797
7	5549	3568	12181	6507
8	3722	2850	7000	5412
9	2580	689	6227	1292
10	2118	2640	4632	5398
11	4258	2712	11499	6440
12	5030	2047	9804	3752
13	2657	1655	8280	3483
14	3409	1499	7932	2954
15	1939	904	3642	1660
16	2029	980	3272	1625
17	1957	892	3556	1502
18	1406	645	2655	1171
19	2122	976	4093	1847
20	847	340	1921	728
21	1546	932	3230	1716
22	2495	1058	3189	1275
23	1928	1123	3698	2125
Average	2409.217	1322.913	5003.043	2421.304
Stdev	1293.283	864.8099	3031.676	1845.683
SEM	269.6681	180.3253	632.1481	384.8516

	S-R	S-2R	Y-R	Y-2R
1	804	649	1685	1219
2	2077	1866	3649	3047
3	743	661	1243	1080
4	49	39	217	140
5	94	94	335	286
6	149	170	489	375
7	819	674	1607	1107
8	99	99	291	300
9	87	74	214	188
10	121	115	425	610
11	131	124	418	482
12	80	62	183	171
13	34	24	147	118
14	211	190	458	328
15	76	65	323	268
16	96	51	449	217
17	175	87	611	330
18	122	89	444	329
19	52	27	206	95
20	102	33	303	107
21	341	372	769	770
22	192	88	386	140
23	738	1040	1733	1738
24	933	977	1720	1305
25	411	257	1085	455
26	704	725	1912	1429
27	440	511	1057	837
28	724	692	1772	1394
29	410	272	956	431
30	1562	946	3587	1885
31	450	61	456	36
32	1052	1002	2535	1981
33	1671	1119	3197	2159
34	146	36	184	30
35	740	772	1855	1693
36	2734	1929	6306	4001
37	2912	2916	5607	4562
38	2047	2071	4331	3689
39	2760	2457	5566	3913
40	2999	2249	6289	3921
41	1962	1818	3712	3295
42	2651	2338	5134	3852
Average	826.1905	710.5	1758.2381	1293.167
Stdev	931.6271	818.3781	1868.45349	1367.183
SEM	143.7532	126.2785	288.308632	210.9609

Phosphate 10 mM / TiO2 signal ratios

mod-Y-2R		TiO2																						
Exp	Phosphate 10 mM	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	1847	728	1716	1275	2125
1	1219	1.12	0.69	1.55	0.71	1.83	1.53	0.19	0.23	0.94	0.23	0.19	0.32	0.35	0.41	0.73	0.75	0.81	1.04	0.66	1.67	0.71	0.96	0.57
2	3047	2.81	1.74	3.87	1.78	4.58	3.82	0.47	0.56	2.36	0.56	0.47	0.81	0.87	1.03	1.84	1.88	2.03	2.60	1.65	4.19	1.78	2.39	1.43
3	1080	0.99	0.62	1.37	0.63	1.62	1.36	0.17	0.20	0.84	0.20	0.17	0.29	0.31	0.37	0.65	0.66	0.72	0.92	0.58	1.48	0.63	0.85	0.51
4	140	0.13	0.08	0.18	0.08	0.21	0.18	0.02	0.03	0.11	0.03	0.02	0.04	0.04	0.05	0.08	0.09	0.09	0.12	0.08	0.19	0.08	0.11	0.07
5	286	0.26	0.16	0.36	0.17	0.43	0.36	0.04	0.05	0.22	0.05	0.04	0.08	0.08	0.10	0.17	0.18	0.19	0.24	0.15	0.39	0.17	0.22	0.13
6	375	0.35	0.21	0.48	0.22	0.56	0.47	0.06	0.07	0.29	0.07	0.06	0.10	0.11	0.13	0.23	0.23	0.25	0.32	0.20	0.52	0.22	0.29	0.18
7	1107	1.02	0.63	1.40	0.65	1.66	1.39	0.17	0.20	0.86	0.21	0.17	0.30	0.32	0.37	0.67	0.68	0.74	0.95	0.60	1.52	0.65	0.87	0.52
8	300	0.28	0.17	0.38	0.18	0.45	0.38	0.05	0.06	0.23	0.06	0.05	0.08	0.09	0.10	0.18	0.18	0.20	0.26	0.16	0.41	0.17	0.24	0.14
9	188	0.17	0.11	0.24	0.11	0.28	0.24	0.03	0.03	0.15	0.03	0.03	0.05	0.05	0.06	0.11	0.12	0.13	0.16	0.10	0.26	0.11	0.15	0.09
10	610	0.56	0.35	0.77	0.36	0.92	0.77	0.09	0.11	0.47	0.11	0.09	0.16	0.18	0.21	0.37	0.38	0.41	0.52	0.33	0.84	0.36	0.48	0.29
11	482	0.44	0.27	0.61	0.28	0.72	0.60	0.07	0.09	0.37	0.09	0.07	0.13	0.14	0.16	0.29	0.30	0.32	0.41	0.26	0.66	0.28	0.38	0.23
12	171	0.16	0.10	0.22	0.10	0.26	0.21	0.03	0.03	0.13	0.03	0.03	0.05	0.05	0.06	0.10	0.11	0.11	0.15	0.09	0.23	0.10	0.13	0.08
13	118	0.11	0.07	0.15	0.07	0.18	0.15	0.02	0.02	0.09	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.07	0.07	0.08	0.10	0.06	0.16	0.07	0.09	0.06
14	328	0.30	0.19	0.42	0.19	0.49	0.41	0.05	0.06	0.25	0.06	0.05	0.09	0.09	0.11	0.20	0.20	0.22	0.28	0.18	0.45	0.19	0.26	0.15
15	268	0.25	0.15	0.34	0.16	0.40	0.34	0.04	0.05	0.21	0.05	0.04	0.07	0.08	0.09	0.16	0.16	0.18	0.23	0.15	0.37	0.16	0.21	0.13
16	217	0.20	0.12	0.28	0.13	0.33	0.27	0.03	0.04	0.17	0.04	0.03	0.06	0.06	0.07	0.13	0.13	0.14	0.19	0.12	0.30	0.13	0.17	0.10
17	330	0.30	0.19	0.42	0.19	0.50	0.41	0.05	0.06	0.26	0.06	0.05	0.09	0.09	0.11	0.20	0.20	0.22	0.28	0.18	0.45	0.19	0.26	0.16
18	329	0.30	0.19	0.42	0.19	0.49	0.41	0.05	0.06	0.25	0.06	0.05	0.09	0.09	0.11	0.20	0.20	0.22	0.28	0.18	0.45	0.19	0.26	0.15
19	95	0.09	0.05	0.12	0.06	0.14	0.12	0.01	0.02	0.07	0.02	0.01	0.03	0.03	0.03	0.06	0.06	0.06	0.08	0.05	0.13	0.06	0.07	0.04
20	107	0.10	0.06	0.14	0.06	0.16	0.13	0.02	0.02	0.08	0.02	0.02	0.03	0.03	0.04	0.06	0.07	0.07	0.09	0.06	0.15	0.06	0.08	0.05
21	770	0.71	0.44	0.98	0.45	1.16	0.97	0.12	0.14	0.60	0.14	0.12	0.21	0.22	0.26	0.46	0.47	0.51	0.66	0.42	1.06	0.45	0.60	0.36
22	140	0.13	0.08	0.18	0.08	0.21	0.18	0.02	0.03	0.11	0.03	0.02	0.04	0.04	0.05	0.08	0.09	0.09	0.12	0.08	0.19	0.08	0.11	0.07
23	1738	1.60	0.99	2.21	1.02	2.61	2.18	0.27	0.32	1.35	0.32	0.27	0.46	0.50	0.59	1.05	1.07	1.16	1.48	0.94	2.39	1.01	1.36	0.82
24	1305	1.20	0.74	1.66	0.76	1.96	1.64	0.20	0.24	1.01	0.24	0.20	0.35	0.37	0.44	0.79	0.80	0.87	1.11	0.71	1.79	0.76	1.02	0.61
25	455	0.42	0.26	0.58	0.27	0.68	0.57	0.07	0.08	0.35	0.08	0.07	0.12	0.13	0.15	0.27	0.28	0.30	0.39	0.25	0.63	0.27	0.36	0.21
26	1429	1.32	0.81	1.81	0.83	2.15	1.79	0.22	0.26	1.11	0.26	0.22	0.38	0.41	0.48	0.86	0.88	0.95	1.22	0.77	1.96	0.83	1.12	0.67
27	837	0.77	0.48	1.06	0.49	1.26	1.05	0.13	0.15	0.65	0.16	0.13	0.22	0.24	0.28	0.50	0.52	0.56	0.71	0.45	1.15	0.49	0.66	0.39
28	1394	1.28	0.79	1.77	0.81	2.10	1.75	0.21	0.26	1.08	0.26	0.22	0.37	0.40	0.47	0.84	0.86	0.93	1.19	0.75	1.91	0.81	1.09	0.66
29	431	0.40	0.25	0.55	0.25	0.65	0.54	0.07	0.08	0.33	0.08	0.07	0.11	0.12	0.15	0.26	0.27	0.29	0.37	0.23	0.59	0.25	0.34	0.20
30	1885	1.74	1.07	2.39	1.10	2.83	2.37	0.29	0.35	1.46	0.35	0.29	0.50	0.54	0.64	1.14	1.16	1.25	1.61	1.02	2.59	1.10	1.48	0.89
31	36	0.03	0.02	0.05	0.02	0.05	0.05	0.01	0.01	0.03	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.05	0.02	0.03	0.02
32	1981	1.82	1.13	2.51	1.16	2.98	2.49	0.30	0.37	1.53	0.37	0.31	0.53	0.57	0.67	1.19	1.22	1.32	1.69	1.07	2.72	1.15	1.55	0.93
33	2159	1.99	1.23	2.74	1.26	3.25	2.71	0.33	0.40	1.67	0.40	0.34	0.58	0.62	0.73	1.30	1.33	1.44	1.84	1.17	2.97	1.26	1.69	1.02
34	30	0.03	0.02	0.04	0.02	0.05	0.04	0.00	0.01	0.02	0.01	0.00	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.04	0.02	0.02	0.01
35	1693	1.56	0.96	2.15	0.99	2.55	2.12	0.26	0.31	1.31	0.31	0.26	0.45	0.49	0.57	1.02	1.04	1.13	1.45	0.92	2.33	0.99	1.33	0.80
36	4001	3.68	2.28	5.08	2.34	6.02	5.02	0.61	0.74	3.10	0.74	0.62	1.07	1.15	1.35	2.41	2.46	2.66	3.42	2.17	5.50	2.33	3.14	1.88
37	4562	4.20	2.60	5.79	2.66	6.86	5.72	0.70	0.84	3.53	0.85	0.71	1.22	1.31	1.54	2.75	2.81	3.04	3.90	2.47	6.27	2.66	3.58	2.15
38	3689	3.40	2.10	4.68	2.15	5.55	4.63	0.57	0.68	2.86	0.68	0.57	0.98	1.06	1.25	2.22	2.27	2.46	3.15	2.00	5.07	2.15	2.89	1.74
39	3913	3.60	2.23	4.97	2.29	5.88	4.91	0.60	0.72	3.03	0.72	0.61	1.04	1.12	1.32	2.36	2.41	2.61	3.34	2.12	5.38	2.28	3.07	1.84
40	3921	3.61	2.23	4.98	2.29	5.90	4.92	0.60	0.72	3.03	0.73	0.61	1.05	1.13	1.33	2.36	2.41	2.61	3.35	2.12	5.39	2.28	3.08	1.85
41	3295	3.03	1.88	4.18	1.92	4.95	4.13	0.51	0.61	2.55	0.61	0.51	0.88	0.95	1.12	1.98	2.03	2.19	2.81	1.78	4.53	1.92	2.58	1.55
42	3852	3.55	2.19	4.89	2.25	5.79	4.83	0.59	0.71	2.98	0.71	0.60	1.03	1.11	1.30	2.32	2.37	2.56	3.29	2.09	5.29	2.24	3.02	1.81

Significance test

Phosphate/TiO₂ signal area ratio

	Average	SEM
mod-S-R	0.47	0.02
mod-S-2R	0.77	0.04
mod-Y-R	0.48	0.02
mod-Y-2R	0.84	0.04

Paired t-test

TiO₂ vs Phosphate 10 mM

p-values for all pairs

	mod-S-R	mod-S-2R	mod-Y-R	mod-Y-2R
mod-S-R		9.02E-51	0.101	6.52E-65
mod-S-2R	9.02E-51		4.59E-41	1.78E-10
mod-Y-R	0.101	4.59E-41		1.50E-60
mod-Y-2R	6.52E-65	1.78E-10	1.50E-60	

Significant difference between peptides

Not significant difference between peptides