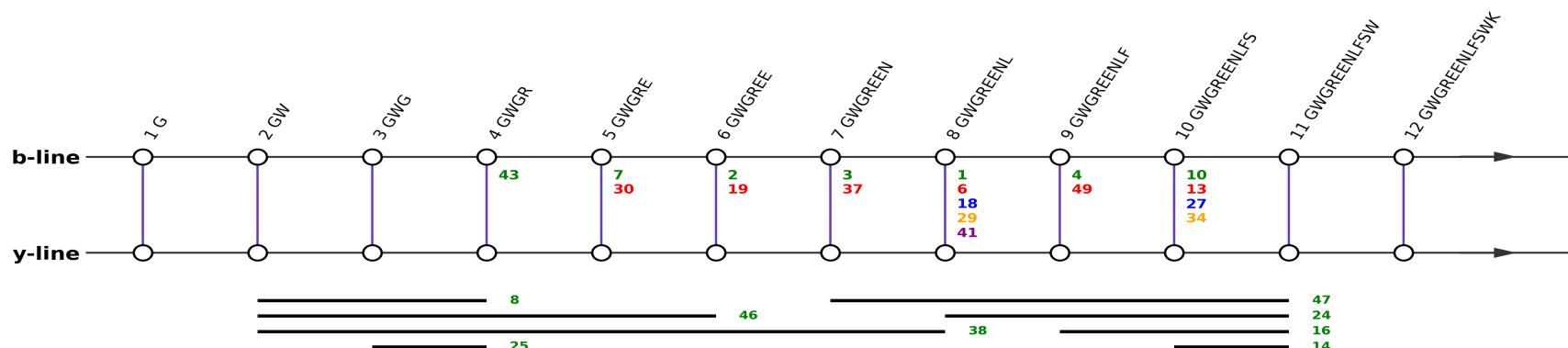


ME9_2+:[GWGR(Me2)EENLFSWK+2H]2+

Fragmentation Diagram for: GWGREENLFSWK



	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count	Unexplained_Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained_Pairs	
Parent	--	--	--	(b4,y8) (1+, 1+) (0.18, 0.06)	(b5,y7) (1+, 1+) (0.08, 0.19)	(b6,y6) (1+, 1+) (0.1, 0.04)	(b7,y5) (1+, 1+) (0.0, 0.33)	(b8,y4) (1+, 1+) (0.08, 0.02)	(b9,y3) (1+, 1+) (-0.12, 0.39)	(b10,y2) (1+, 1+) (-0.16, 0.17)	--	7	1	0.27	0.36(12)	
(NH3)	--	--	--	--	(b5,(NH3)) (1+, 1+) (0.04, -0.32)	(b6,(NH3)) (1+, 1+) (-0.17, -0.2)	--	--	((NH3),y3) (1+, 1+) (-0.14, 0.1)	--	--	3	0	0.32		
(H2O)	--	--	--	--	--	--	(b7,(H2O)) (1+, 1+) (0.09, 0.25)	(b8,(H2O)) (1+, 1+) (-0.13, 0.23)	--	((H2O),y2) (1+, 1+) (-0.17, -0.0)	--	3	1	0.37	0.14(11)	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	((NH3),(H2O)) (1+, 1+) (0.43, -0.23)	--	1	1	0.66	-0.46(22)		
a	--	--	--	--	--	--	--	(a8,y4) (1+, 1+) (0.07, 0.23)	--	--	1	0	0.29			
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	(b8,2(H2O)) (1+, 1+) (0.55, -0.1)	--	--	1	0	0.65		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
Col_Count	0	0	0	1	2	2	2	4	2	3	0	16	3	0.37	nan	
Ion Mass	(58.03, 1479.74)	(244.11, 1293.66)	(301.13, 1236.64)	(485.26, 1052.5)	(614.3, 923.46)	(743.35, 794.42)	(857.39, 680.38)	(970.47, 567.29)	(1117.54, 420.22)	(1204.57, 333.19)	(1390.65, 147.11)	0	0	0.0	0	0



Legend: Not Highlighted (Grey) (H2O) (Blue) (H2O)-(NH3) (Light Green) (NH3) (Dark Green) (NH3)-(H2O) (Medium Green) 2(H2O) (Light Blue) 2(NH3) (Orange) CH3-NH2 (Red) Parent (Grey) a (Maroon)

Table ME9_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y4	nan	567.37	567.29	0.08	b8	nan	970.49	970.47	0.02	1537.86
2	usable	b6	nan	743.45	743.35	0.1	y6	nan	794.46	794.42	0.04	1537.91
3	usable	y5	nan	680.38	680.38	0.0	b7	nan	857.72	857.39	0.33	1538.1
4	usable	y3	nan	420.1	420.22	-0.12	b9	nan	1117.93	1117.54	0.39	1538.03
5	unclear	???	nan	415.13	nan	nan	???	nan	1052.45	nan	nan	1467.58
6	usable	y4	nan	567.36	567.29	0.07	a8	nan	942.69	942.46	0.23	1510.05
7	usable	b5	nan	614.38	614.3	0.08	y7	nan	923.65	923.46	0.19	1538.03
8	internal_acid	bi(2-4)	(CH3NH2)	397.02	396.19	0.83	y8	nan	1052.43	1052.5	-0.07	1449.45
9	rare_mode	y3	nan	420.1	420.22	-0.12	b9	(CH3NH2)	1086.66	1086.5	0.16	1506.76
10	usable	y2	nan	333.03	333.19	-0.16	b10	nan	1204.74	1204.57	0.17	1537.77
11	unclear	???	nan	385.12	nan	nan	???	nan	1134.78	nan	nan	1519.9
12	unclear	???	nan	503.45	nan	nan	???	nan	1034.68	nan	nan	1538.13
13	usable	y2	(H2O)	315.62	315.18	0.44	b10	nan	1204.4	1204.57	-0.17	1520.02
14	internal_acid	bi(10-11)	nan	273.97	273.11	0.86	b9	nan	1117.69	1117.54	0.15	1665.63
15	rare_mode	b6	(CH3NH2)	712.08	712.3	-0.22	y6	nan	794.43	794.42	0.01	1506.51
16	internal_acid	bi(9-11)	(H2O)	403.11	402.17	0.94	b8	nan	970.64	970.47	0.17	1373.75
17	unclear	???	nan	544.27	nan	nan	???	nan	923.73	nan	nan	1468.0
18	usable	y4	(H2O)	549.15	549.28	-0.13	b8	nan	970.7	970.47	0.23	1519.85
19	usable	b6	nan	743.18	743.35	-0.17	y6	(NH3)	777.19	777.39	-0.2	1520.37
20	unclear	???	nan	568.31	nan	nan	???	nan	900.48	nan	nan	1468.79
21	unclear	???	nan	267.7	nan	nan	???	nan	1053.19	nan	nan	1588.59
22	rare_mode	y2	(H2O)-(NH3)	297.95	296.01	1.94	b10	nan	1204.32	1204.57	-0.25	1502.27
23	rare_mode	y2	nan	332.85	333.19	-0.34	b10	(HCOH)	1174.07	1174.56	-0.49	1506.92
24	internal_acid	bi(8-11)	(NH3)	516.8	516.24	0.56	b7	nan	857.79	857.39	0.4	1374.59
25	non_complementary	b3	nan	300.73	301.13	-0.4	y8	nan	1052.61	1052.5	0.11	1654.07

26	internal_acid	ai(4-7)	(NH3)-(CH3NH2)	481.17	480.18	0.99	y5	2(H2O)-(HCOH)	613.78	614.34	-0.56	1576.12
27	usable	y2	nan	333.02	333.19	-0.17	b10	(H2O)	1186.56	1186.56	-0.0	1519.58
28	rare_mode	y5	nan	680.46	680.38	0.08	b7	(CH3NH2)	826.49	826.35	0.14	1506.95
29	usable	y4	(H2O)	549.37	549.28	0.09	a8	nan	942.14	942.46	-0.32	1491.51
30	usable	b5	nan	614.34	614.3	0.04	y7	(NH3)	906.12	906.44	-0.32	1520.46
31	rare_mode	y2	(H2O)-(NH3)	297.95	296.01	1.94	b10	(H2O)	1186.58	1186.56	0.02	1484.53
32	unclear	???	nan	734.08	nan	nan	???	nan	1234.06	nan	nan	1968.14
33	internal_acid	y4	(NH3)-(HCOH)	520.41	520.26	0.15	ai(4-8)	(HCOH)	612.8	611.32	1.48	1653.62
34	usable	y2	(H2O)	315.61	315.18	0.43	b10	(NH3)	1187.32	1187.55	-0.23	1502.93
35	unclear	???	nan	245.68	nan	nan	???	nan	1119.2	nan	nan	1610.56
36	unclear	???	nan	1052.79	nan	nan	???	nan	1475.04	nan	nan	2527.83
37	usable	y5	(H2O)	662.46	662.37	0.09	b7	nan	857.64	857.39	0.25	1520.1
38	internal_acid	y4	nan	567.39	567.29	0.1	bi(2-8)	(CH3NH2)	882.37	881.4	0.97	1449.76
39	unclear	???	nan	588.65	nan	nan	???	nan	922.98	nan	nan	1511.63
40	rare_mode	y2	(H2O)	315.32	315.18	0.14	b10	(HCOH)	1174.46	1174.56	-0.1	1489.78
41	usable	y4	2(H2O)	531.82	531.27	0.55	b8	nan	970.37	970.47	-0.1	1502.19
42	rare_mode	y4	nan	567.01	567.29	-0.28	a8	(CH3NH2)	911.28	911.42	-0.14	1478.29
43	usable	b4	nan	485.44	485.26	0.18	y8	nan	1052.56	1052.5	0.06	1538.0
44	unclear	???	nan	568.17	nan	nan	???	nan	953.11	nan	nan	1521.28
45	unclear	???	nan	455.61	nan	nan	???	nan	1052.5	nan	nan	1508.11
46	non_complementary	b2	(NH3)	227.55	227.08	0.47	y6	2(NH3)	760.94	760.37	0.57	1749.43
47	internal_acid	bi(7-11)	(H2O)	630.44	629.3	1.14	a6	(HCOOH)-(CH3NH2)	638.64	638.29	0.35	1269.08
48	unclear	???	nan	664.26	nan	nan	???	nan	905.34	nan	nan	1569.6
49	usable	y3	nan	420.08	420.22	-0.14	b9	(NH3)	1100.62	1100.52	0.1	1520.7
50	unclear	???	nan	548.21	nan	nan	???	nan	656.7	nan	nan	1753.12