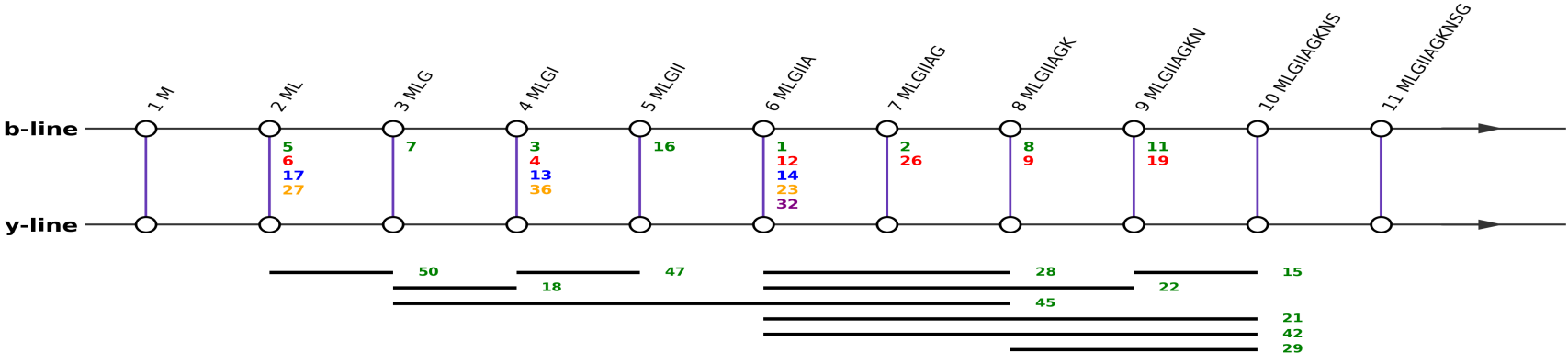


UN15_2+: [MLGIIAGKNSG+2H]2+

Fragmentation Diagram for: MLGIIAGKNSG



	b1y10	b2y9	b3y8	b4y7	b5y6	b6y5	b7y4	b8y3	b9y2	b10y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	(b2,y9) (1+ , 1+) (-0.39, 0.17) 6	(b3,y8) (1+ , 1+) (-0.15, 0.0) 7	(b4,y7) (1+ , 1+) (-0.21, -0.05) 4	--	(b6,y5) (1+ , 1+) (-0.08, -0.04) 1	(b7,y4) (1+ , 1+) (-0.11, 0.03) 2	(b8,y3) (1+ , 1+) (-0.29, -0.04) 9	(b9,y2) (1+ , 1+) (-0.42, 0.16) 11	--	7	0	0.31	
(NH3)	--	(b2,(NH3)) (1+ , 1+) (-0.37, -0.04) 17	--	(b4,(NH3)) (1+ , 1+) (-0.22, -0.01) 13	--	(b6,(NH3)) (1+ , 1+) (0.12, -0.2) 14	--	--	((NH3),y2) (1+ , 1+) (-0.62, 0.09) 19	--	4	0	0.41	
(H2O)	--	--	--	--	--	((H2O),y5) (1+ , 1+) (-0.09, -0.15) 32	((H2O),y4) (1+ , 1+) (-0.14, -0.16) 26	(b8,(H2O)) (1+ , 1+) (-0.0, -0.03) 8	--	--	3	0	0.19	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	-0.28(33)
a	--	(a2,y9) (1+ , 1+) (-0.34, 0.01) 5	--	(a4,y7) (1+ , 1+) (-0.16, -0.0) 3	--	(a6,y5) (1+ , 1+) (0.05, 0.03) 12	--	--	--	--	3	0	0.2	
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
Col_Count	0	3	1	3	0	4	2	2	2	0	17	1	0.16	nan
Ion Mass	(132.05, 929.54)	(245.13, 816.46)	(302.15, 759.44)	(415.24, 646.35)	(528.32, 533.27)	(599.36, 462.23)	(656.38, 405.21)	(784.47, 277.11)	(898.52, 163.07)	(985.55, 76.04)	0	0	0.0	0



Not Highlighted (H2O) (H2O)-(NH3) (NH3) (NH3)-(H2O) 2(H2O) 2(NH3) CH3-NH2 Parent a

Table UN15_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y5	nan	462.15	462.23	-0.08	b6	nan	599.32	599.36	-0.04	1061.47
2	usable	y4	nan	405.1	405.21	-0.11	b7	nan	656.41	656.38	0.03	1061.51
3	usable	a4	nan	387.07	387.23	-0.16	y7	nan	646.35	646.35	-0.0	1033.42
4	usable	b4	nan	415.03	415.24	-0.21	y7	nan	646.3	646.35	-0.05	1061.33
5	usable	a2	nan	216.78	217.12	-0.34	y9	nan	816.47	816.46	0.01	1033.25
6	usable	b2	nan	244.74	245.13	-0.39	y9	nan	816.63	816.46	0.17	1061.37
7	usable	b3	nan	302.0	302.15	-0.15	y8	nan	759.44	759.44	0.0	1061.44
8	usable	y3	(H2O)	259.1	259.1	-0.0	b8	nan	784.44	784.47	-0.03	1043.54
9	usable	y3	nan	276.82	277.11	-0.29	b8	nan	784.43	784.47	-0.04	1061.25
10	rare_mode	a4	(NH3)	370.09	370.2	-0.11	y7	(HCOH)	616.39	616.34	0.05	986.48
11	usable	y2	nan	162.65	163.07	-0.42	b9	nan	898.68	898.52	0.16	1061.33
12	usable	y5	nan	462.28	462.23	0.05	a6	nan	571.38	571.35	0.03	1033.66
13	usable	b4	nan	415.02	415.24	-0.22	y7	(NH3)	629.32	629.33	-0.01	1044.34
14	usable	y5	(NH3)	445.32	445.2	0.12	b6	nan	599.16	599.36	-0.2	1044.48
15	internal_acid	bi(9-10)	nan	201.71	201.07	0.64	b8	nan	784.29	784.47	-0.18	986.0
16	usable	a5	nan	500.18	500.31	-0.13	y6	(NH3)	515.89	516.24	-0.35	1016.07
17	usable	b2	nan	244.76	245.13	-0.37	y9	(NH3)	799.39	799.43	-0.04	1044.15
18	non_complementary	b3	nan	301.85	302.15	-0.3	y7	nan	646.66	646.35	0.31	948.51
19	usable	y2	nan	162.45	163.07	-0.62	b9	(NH3)	881.58	881.49	0.09	1044.03
20	rare_mode	a2	(CH2S)	171.61	171.13	0.48	y9	nan	816.51	816.46	0.05	988.12
21	internal_acid	bi(6-10)	nan	458.17	457.23	0.94	a5	nan	500.19	500.31	-0.12	958.36
22	internal_acid	bi(6-9)	(NH3)	353.87	353.17	0.7	a5	nan	500.24	500.31	-0.07	1207.98
23	usable	y5	nan	462.07	462.23	-0.16	a6	(NH3)	554.35	554.32	0.03	1016.42
24	non_complementary	y4	2(NH3)	371.13	371.16	-0.03	a5	nan	500.07	500.31	-0.24	1242.33
25	rare_mode	a5	(CH3SH)	452.32	452.31	0.01	y6	(NH3)	516.12	516.24	-0.12	968.44

26	usable	y4	nan	405.07	405.21	-0.14	b7	(H2O)	638.21	638.37	-0.16	1043.28
27	usable	a2	nan	216.67	217.12	-0.45	y9	(NH3)	799.18	799.43	-0.25	1015.85
28	internal_acid	bi(6-8)	nan	256.83	256.15	0.68	a5	nan	500.48	500.31	0.17	1014.14
29	internal_acid	bi(8-10)	nan	329.93	329.17	0.76	b7	nan	656.43	656.38	0.05	986.36
30	rare_mode	a3	(NH3)	257.02	257.12	-0.1	y8	(HCOH)	729.39	729.43	-0.04	986.41
31	unclear	???	nan	405.09	nan	nan	???	nan	543.19	nan	nan	948.28
32	usable	y5	nan	462.14	462.23	-0.09	b6	(H2O)	581.2	581.35	-0.15	1043.34
33	unclear	???	nan	242.11	nan	nan	???	nan	784.16	nan	nan	1026.27
34	unclear	???	nan	339.17	nan	nan	???	nan	647.51	nan	nan	986.68
35	unclear	???	nan	201.79	nan	nan	???	nan	501.19	nan	nan	1204.17
36	usable	a4	nan	387.41	387.23	0.18	y7	(NH3)	629.75	629.33	0.42	1017.16
37	rare_mode	y5	nan	462.35	462.23	0.12	a6	(H2O)-(CH2S)	507.05	507.35	-0.3	969.4
38	rare_mode	b5	(H2O)-(CH3SH)	462.02	462.31	-0.29	y6	(NH3)-(HCOH)	486.44	486.23	0.21	948.46
39	unclear	???	nan	185.99	nan	nan	???	nan	799.81	nan	nan	985.8
40	unclear	???	nan	283.96	nan	nan	???	nan	647.4	nan	nan	931.36
41	unclear	???	nan	244.72	nan	nan	???	nan	760.23	nan	nan	1004.95
42	internal_acid	bi(6-10)	(H2O)	440.39	439.22	1.17	a5	nan	500.61	500.31	0.3	941.0
43	unclear	???	nan	324.15	nan	nan	???	nan	816.27	nan	nan	1140.42
44	unclear	???	nan	493.23	nan	nan	???	nan	535.48	nan	nan	1028.71
45	internal_acid	b2	nan	245.06	245.13	-0.07	bi(3-8)	(H2O)-(NH3)	505.17	502.16	3.01	995.29
46	rare_mode	y4	nan	405.32	405.21	0.11	b5	(CH3CH2SCH3)	452.1	452.29	-0.19	1262.74
47	non_complementary	b4	(H2O)	396.71	397.23	-0.52	y6	2(NH3)	499.27	499.21	0.06	895.98
48	rare_mode	a3	(NH3)	256.84	257.12	-0.28	y8	(NH3)-(HCOH)	712.22	712.4	-0.18	969.06
49	unclear	???	nan	217.02	nan	nan	???	nan	857.93	nan	nan	1074.95
50	non_complementary	b2	nan	245.57	245.13	0.44	y8	(NH3)	742.79	742.41	0.38	988.36