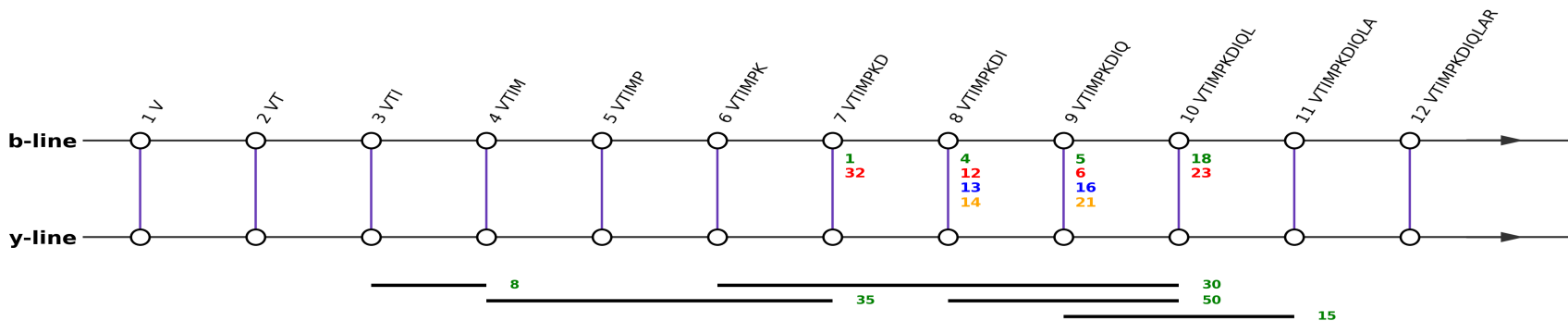


[VTIMPK(Me)3DIQLAR+2H]²⁺

Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR

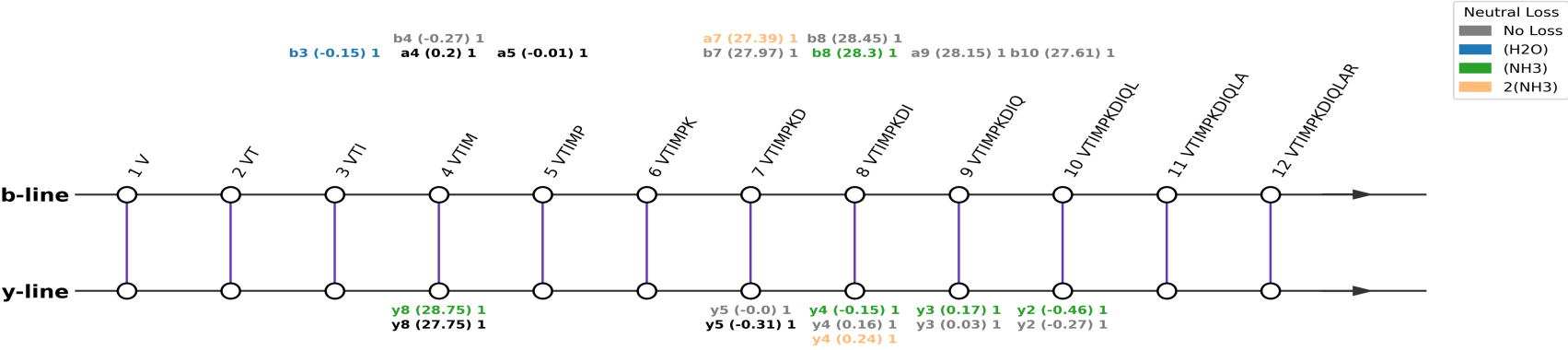


	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count
Parent	--	--	--	--	--	--	(b7,y5) (1+ , 1+) 28.1 (1.0)	(b8,y4) (1+ , 1+) 27.86 (4.0)	(b9,y3) (1+ , 1+) 28.61 (5.0)	(b10,y2) (1+ , 1+) 27.91 (18.0)	--	4
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(b8,(NH3)) (1+ , 1+) 28.63 (13.0)	(b9,(NH3)) (1+ , 1+) 27.93 (6.0)	(b10,(NH3)) (1+ , 1+) 27.15 (23.0)	--	3
(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0
(NH3) + (H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0
a	--	--	--	--	--	--	--	(a8,y4) (1+ , 1+) 28.17 (12.0)	(a9,y3) (1+ , 1+) 28.24 (16.0)	--	--	2
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(b8,2(NH3)) (1+ , 1+) 28.69 (14.0)	--	--	--	1
Col_Count	0	0	0	0	0	0	1	4	3	2	0	10



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

Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR



Detailed Data - Table 1

b3	b4	b5	b7	b8	b9	b10
nan	a4-2(H ₂ O)-(HCOH) (0.2) (1 , 1)	a5-2(H ₂ O)-(HCOH) (-0.01) (1 , 1)	nan	nan	nan	nan
nan	nan	nan	nan	b8-(NH ₃) (28.3) (1 , 1)	nan	nan
b3-(H ₂ O) (-0.15) (1 , 1)	nan	nan	nan	nan	nan	nan
nan	b4 (-0.27) (1 , 1)	nan	b7 (27.97) (1 , 1)	b8 (28.45) (1 , 1)	a9 (28.15) (1 , 1)	b10 (27.61) (1 , 1)
nan	nan	nan	a7-2(NH ₃) (27.39) (1 , 1)	nan	nan	nan

Detailed Data - Table 2

y2	y3	y4	y5	y8
y2-(NH3) (-0.46) (1 , 1)	y3-(NH3) (0.17) (1 , 1)	y4-(NH3) (-0.15) (1 , 1)	nan	y8-(NH3) (28.75) (1 , 1)
y2 (-0.27) (1 , 1)	y3 (0.03) (1 , 1)	y4 (0.16) (1 , 1)	y5 (-0.0) (1 , 1)	nan
nan	nan	y4-2(NH3) (0.24) (1 , 1)	nan	nan
nan	nan	nan	y5-(HN=C=NH) (-0.31) (1 , 1)	y8-(HN=C=NH) (27.75) (1 , 1)

Detailed Data - Table 3

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y5	nan	600.27	600.38	-0.11	b7	nan	827.65	799.44	28.21	1427.92
2	unclear	???	nan	697.53	nan	nan	???	nan	730.63	nan	nan	1428.16
3	unclear	???	nan	610.4	nan	nan	???	nan	730.69	nan	nan	1341.09
4	usable	y4	nan	487.19	487.3	-0.11	b8	nan	940.49	912.52	27.97	1427.68
5	usable	y3	nan	359.15	359.24	-0.09	b9	nan	1069.28	1040.58	28.7	1428.43
6	usable	y3	(NH3)	341.99	342.21	-0.22	b9	nan	1068.73	1040.58	28.15	1410.72
7	unclear	???	nan	680.91	nan	nan	???	nan	730.47	nan	nan	1411.38
8	non_complementary	b3	(H2O)	295.96	296.2	-0.24	y8	(NH3)	966.0	937.55	28.45	1261.96
9	unclear	???	nan	310.05	nan	nan	???	nan	969.16	nan	nan	1279.21
10	unclear	???	nan	328.0	nan	nan	???	nan	968.5	nan	nan	1296.5
11	unclear	???	nan	487.37	nan	nan	???	nan	881.61	nan	nan	1368.98
12	usable	y4	nan	487.46	487.3	0.16	a8	nan	912.52	884.51	28.01	1399.98
13	usable	y4	(NH3)	470.12	470.27	-0.15	b8	nan	941.3	912.52	28.78	1411.42
14	usable	y4	2(NH3)	453.49	453.25	0.24	b8	nan	940.97	912.52	28.45	1394.46
15	internal_acid	bi(9-11)	(NH3)	295.86	295.15	0.71	b8	(NH3)	923.3	895.5	27.8	1515.02

16	usable	y3	nan	359.27	359.24	0.03	a9	nan	1040.78	1012.57	28.21	1400.05
17	unclear	???	nan	369.36	nan	nan	???	nan	923.41	nan	nan	1292.77
18	usable	y2	nan	245.89	246.16	-0.27	b10	nan	1181.84	1153.66	28.18	1427.73
19	unclear	???	nan	600.91	nan	nan	???	nan	755.88	nan	nan	1356.79
20	unclear	???	nan	470.01	nan	nan	???	nan	913.7	nan	nan	1383.71
21	usable	y3	(NH3)	342.38	342.21	0.17	a9	nan	1040.72	1012.57	28.15	1383.1
22	unclear	???	nan	313.79	nan	nan	???	nan	924.21	nan	nan	1551.79
23	usable	y2	(NH3)	228.67	229.13	-0.46	b10	nan	1181.27	1153.66	27.61	1409.94
24	rare_mode	b4	2(H2O)	409.07	409.23	-0.16	y8	(HN=C=NH)	940.3	912.55	27.75	1349.37
25	rare_mode	a4	2(H2O)-(HCOH)	351.41	351.21	0.2	y8	(NH3)	966.3	937.55	28.75	1317.71
26	unclear	???	nan	324.31	nan	nan	???	nan	1069.06	nan	nan	1393.37
27	unclear	???	nan	683.34	nan	nan	???	nan	1109.18	nan	nan	1792.52
28	unclear	???	nan	280.47	nan	nan	???	nan	1252.19	nan	nan	1532.66
29	internal_acid	y5	(HN=C=NH)	558.05	558.36	-0.31	ai(3-7)	(NH3)	582.86	553.28	29.58	1140.91
30	internal_acid	a5	2(H2O)-(HCOH)	448.25	448.26	-0.01	bi(6-10)	(HCOH)	610.04	581.35	28.69	1506.54
31	unclear	???	nan	647.27	nan	nan	???	nan	656.15	nan	nan	1303.42
32	usable	y5	nan	600.38	600.38	-0.0	a7	2(NH3)	764.76	737.37	27.39	1365.14
33	unclear	???	nan	462.31	nan	nan	???	nan	1084.08	nan	nan	1546.39
34	unclear	???	nan	211.99	nan	nan	???	nan	1253.06	nan	nan	1465.05
35	internal_acid	b3	(H2O)	296.05	296.2	-0.15	bi(4-7)	(H2O)	496.54	467.22	29.32	1289.13
36	unclear	???	nan	605.73	nan	nan	???	nan	1068.72	nan	nan	1674.45
37	unclear	???	nan	922.69	nan	nan	???	nan	1166.93	nan	nan	2089.62
38	unclear	???	nan	808.99	nan	nan	???	nan	1068.29	nan	nan	1877.28
39	unclear	???	nan	213.93	nan	nan	???	nan	684.09	nan	nan	1582.11
40	unclear	???	nan	445.68	nan	nan	???	nan	502.54	nan	nan	1393.9
41	unclear	???	nan	484.94	nan	nan	???	nan	577.5	nan	nan	1547.38
42	unclear	???	nan	939.81	nan	nan	???	nan	1153.35	nan	nan	2093.16
43	unclear	???	nan	601.11	nan	nan	???	nan	891.25	nan	nan	1492.36

44	internal_acid	ai(9-11)	2(NH3)	250.74	250.12	0.62	b8	(NH3)	923.8	895.5	28.3	1425.28
45	unclear	???	nan	654.55	nan	nan	???	nan	1053.22	nan	nan	1707.77
46	unclear	???	nan	395.84	nan	nan	???	nan	626.72	nan	nan	1418.4
47	internal_acid	b4	nan	444.98	445.25	-0.27	ai(5-11)	2(NH3)-(HCOH)	715.93	687.38	28.55	1605.89
48	unclear	???	nan	503.28	nan	nan	???	nan	1055.98	nan	nan	1559.26
49	unclear	???	nan	617.91	nan	nan	???	nan	1055.86	nan	nan	1673.77
50	internal_acid	bi(8-10)	nan	354.83	354.23	0.6	b7	nan	827.41	799.44	27.97	1537.07