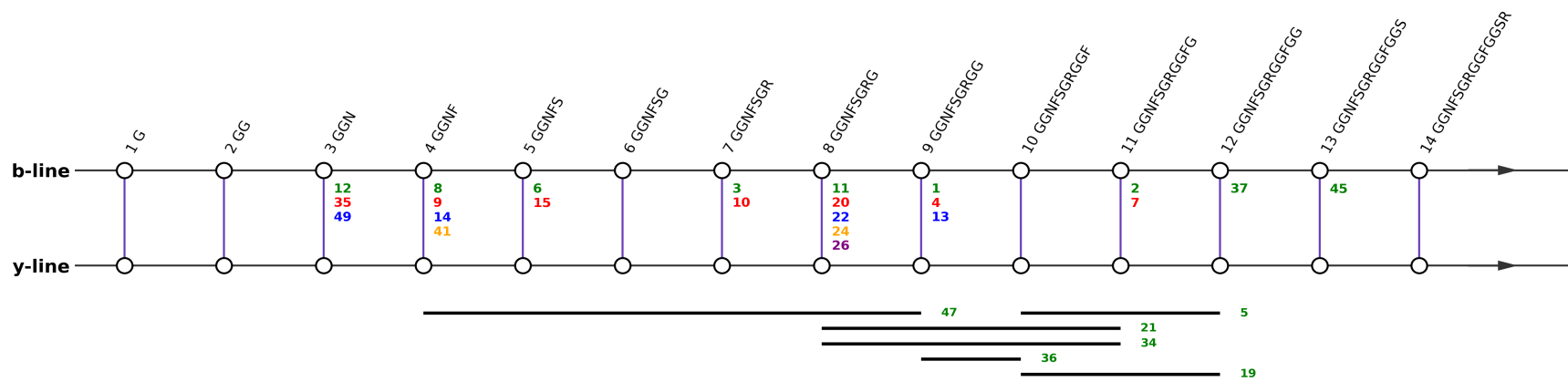


[GGNFSGR(Me)GGFGGSR+3H]3+

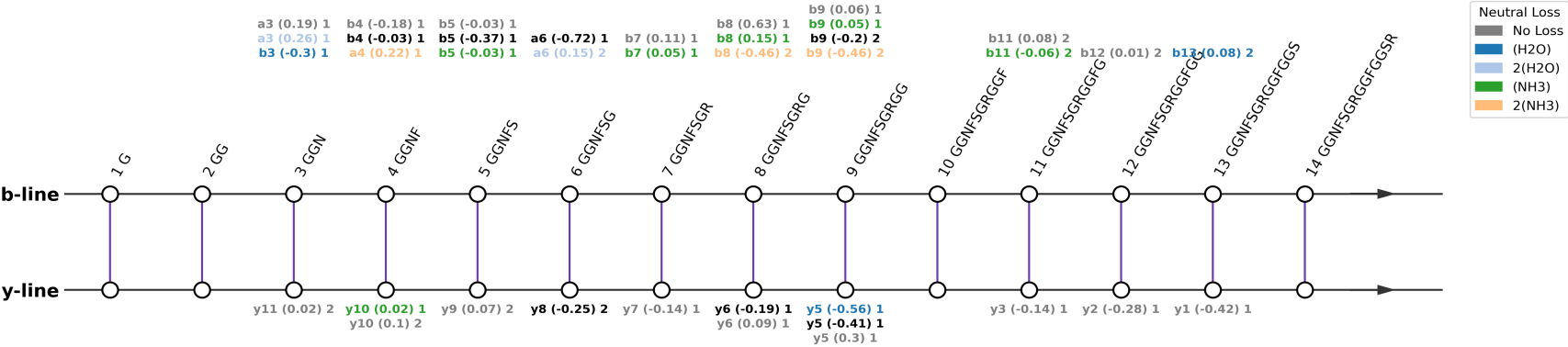
Fragmentation Diagram for: GGNFSGRGGFGGSR



|             | b1y13 | b2y12 | b3y11                                   | b4y10                                  | b5y9                                  | b6y8 | b7y7                                  | b8y6                                    | b9y5                                    | b10y4 | b11y3                                 | b12y2                                  | b13y1 | Row_Count | Unexplained_Count |
|-------------|-------|-------|---|--|---------------------------------------|------|---------------------------------------|---|---|-------|---------------------------------------|--|-------|-----------|-------------------|
| Parent      | --    | --    | --                                      | (b4,y10)<br>(1+ , 2+)<br>-0.19<br>14   | (b5,y9)<br>(1+ , 2+)<br>0.01<br>6     | --   | (b7,y7)<br>(2+ , 1+)<br>0.04<br>10    | (b8,y6)<br>(1+ , 2+)<br>-0.06<br>22     | (b9,y5)<br>(2+ , 1+)<br>0.12<br>4       | --    | (b11,y3)<br>(2+ , 1+)<br>-0.06<br>7   | (b12,y2)<br>(2+ , 1+)<br>-0.27<br>37   | --    | 7         | 2                 |
| (NH3)       | --    | --    | --                                      | (b4,(NH3))<br>(2+ , 1+)<br>-0.46<br>41 | ((NH3),y9)<br>(1+ , 2+)<br>0.05<br>15 | --   | ((NH3),y7)<br>(2+ , 1+)<br>-0.05<br>3 | ((NH3),y6)<br>(1+ , 2+)<br>-0.13<br>26  | ((NH3),y5)<br>(2+ , 1+)<br>0.05<br>1    | --    | ((NH3),y3)<br>(2+ , 1+)<br>-0.18<br>2 | --                                     | --    | 6         | 0                 |
| (H2O)       | --    | --    | ((H2O),y11)<br>(1+ , 2+)<br>-0.14<br>12 | --                                     | --                                    | --   | --                                    | --                                      | --                                      | --    | --                                    | ((H2O),y1)<br>(2+ , 1+)<br>-0.34<br>45 | --    | 2         | 1                 |
| (NH3)-(H2O) | --    | --    | --                                      | --                                     | --                                    | --   | --                                    | --                                      | --                                      | --    | --                                    | --                                     | --    | 0         | 0                 |
| a           | --    | --    | (a3,y11)<br>(1+ , 2+)<br>0.12<br>35     | (a4,y10)<br>(1+ , 2+)<br>0.02<br>8     | --                                    | --   | --                                    | --                                      | --                                      | --    | --                                    | --                                     | --    | 2         | 0                 |
| 2(H2O)      | --    | --    | --                                      | --                                     | --                                    | --   | --                                    | --                                      | --                                      | --    | --                                    | --                                     | --    | 0         | 0                 |
| 2(NH3)      | --    | --    | --                                      | --                                     | --                                    | --   | --                                    | (2(NH3),y6)<br>(2+ , 1+)<br>-0.38<br>24 | (2(NH3),y5)<br>(2+ , 1+)<br>-0.34<br>13 | --    | --                                    | --                                     | --    | 2         | 0                 |
| Col_Count   | 0     | 0     | 2                                       | 3                                      | 2                                     | 0    | 2                                     | 3                                       | 3                                       | 0     | 2                                     | 1                                      | 1     | 19        | 3                 |



Fragmentation Diagram for: GGNFSGRGGFGGSR



Detailed Data - Table 1

| b3                       | b4                              | b5                        | b6                        | b7                      | b8                        | b9                              | b11                       | b12 | b13                      |
|--------------------------|---------------------------------|---------------------------|---------------------------|-------------------------|---------------------------|---------------------------------|---------------------------|-----|--------------------------|
| b3-(H2O) (-0.3) (1 , 2)  | nan                             | nan                       | nan                       | nan                     | nan                       | nan                             | nan                       | nan | b13-(H2O) (0.08) (2 , 1) |
| nan                      | a4-2(NH3) (0.22) (1 , 1)        | nan                       | nan                       | nan                     | b8-2(NH3) (-0.46) (2 , 1) | b9-2(NH3) (-0.46) (2 , 1)       | nan                       | nan | nan                      |
| nan                      | nan                             | nan                       | nan                       | nan                     | nan                       | b9-2(NH3)-(HCOH) (-0.2) (2 , 1) | nan                       | nan | nan                      |
| a3-2(H2O) (0.26) (1 , 2) | nan                             | nan                       | a6-2(H2O) (0.15) (2 , 1)  | nan                     | nan                       | nan                             | nan                       | nan | nan                      |
| nan                      | nan                             | b5-(NH3) (-0.03) (1 , 2)  | nan                       | b7-(NH3) (0.05) (1 , 1) | b8-(NH3) (0.15) (1 , 1)   | b9-(NH3) (0.05) (1 , 1)         | b11-(NH3) (-0.06) (2 , 1) | nan | nan                      |
| nan                      | b4-(H2O)-(HCOH) (-0.03) (1 , 1) | nan                       | nan                       | nan                     | nan                       | nan                             | nan                       | nan | nan                      |
| nan                      | nan                             | b5-(HCOH) (-0.37) (1 , 2) | a6-(HCOH) (-0.72) (1 , 2) | nan                     | nan                       | nan                             | nan                       | nan | nan                      |

|                   |                    |                    |     |                   |                   |                   |                    |                    |     |
|-------------------|--------------------|--------------------|-----|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------|--------------------|-----|
| a3 (0.19) (1 , 2) | b4 (-0.18) (1 , 2) | b5 (-0.03) (1 , 2) | nan | b7 (0.11) (1 , 1) | b8 (0.63) (1 , 1) | b9 (0.06) (1 , 1) | b11 (0.08) (2 , 1) | b12 (0.01) (2 , 1) | nan |
|-------------------|--------------------|--------------------|-----|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------|--------------------|-----|

Detailed Data - Table 2

| y1                 | y2                 | y3                 | y5                               | y6                        | y7                 | y8                        | y9                | y10                      | y11                |
|--------------------|--------------------|--------------------|----------------------------------|---------------------------|--------------------|---------------------------|-------------------|--------------------------|--------------------|
| nan                | nan                | nan                | y5-(H2O) (-0.56) (1 , 2)         | nan                       | nan                | nan                       | nan               | nan                      | nan                |
| nan                | nan                | nan                | y5-2(NH3)-(HCOH) (-0.41) (1 , 1) | nan                       | nan                | nan                       | nan               | nan                      | nan                |
| nan                | nan                | nan                | nan                              | nan                       | nan                | nan                       | nan               | y10-(NH3) (0.02) (1 , 2) | nan                |
| nan                | nan                | nan                | nan                              | y6-(HCOH) (-0.19) (1 , 1) | nan                | y8-(HCOH) (-0.25) (2 , 1) | nan               | nan                      | nan                |
| y1 (-0.42) (1 , 2) | y2 (-0.28) (1 , 2) | y3 (-0.14) (1 , 2) | y5 (0.3) (1 , 2)                 | y6 (0.09) (1 , 2)         | y7 (-0.14) (1 , 1) | nan                       | y9 (0.07) (2 , 1) | y10 (0.1) (2 , 1)        | y11 (0.02) (2 , 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         | b9        | (NH3) | 394.12 | 394.18        | -0.06            | y5   | nan   | 523.37 | 523.26        | 0.11             | 1311.61    |
| 2  | usable         | y3        | nan   | 319.06 | 319.17        | -0.11            | b11  | (NH3) | 496.16 | 496.22        | -0.06            | 1311.38    |
| 3  | usable         | b7        | (NH3) | 337.01 | 337.16        | -0.15            | y7   | nan   | 637.4  | 637.31        | 0.09             | 1311.42    |
| 4  | usable         | b9        | nan   | 402.71 | 402.69        | 0.02             | y5   | nan   | 523.36 | 523.26        | 0.1              | 1328.78    |
| 5  | internal_acid  | bi(10-12) | nan   | 262.01 | 261.11        | 0.9              | b9   | nan   | 804.43 | 804.37        | 0.06             | 1328.45    |
| 6  | usable         | y9        | nan   | 432.77 | 432.73        | 0.04             | b5   | nan   | 463.16 | 463.19        | -0.03            | 1328.7     |
| 7  | usable         | y3        | nan   | 319.03 | 319.17        | -0.14            | b11  | nan   | 504.82 | 504.74        | 0.08             | 1328.67    |
| 8  | usable         | a4        | nan   | 348.03 | 348.15        | -0.12            | y10  | nan   | 476.38 | 476.24        | 0.14             | 1300.79    |
| 9  | usable         | b4        | nan   | 376.1  | 376.16        | -0.06            | y10  | (NH3) | 467.68 | 467.73        | -0.05            | 1311.46    |
| 10 | usable         | b7        | nan   | 345.63 | 345.67        | -0.04            | y7   | nan   | 637.38 | 637.31        | 0.07             | 1328.64    |
| 11 | usable         | b8        | (NH3) | 365.48 | 365.67        | -0.19            | y6   | nan   | 580.38 | 580.28        | 0.1              | 1311.34    |

|    |               |           |               |        |        |       |         |                 |        |        |       |         |
|----|---------------|-----------|---------------|--------|--------|-------|---------|-----------------|--------|--------|-------|---------|
| 12 | usable        | b3        | (H2O)         | 210.78 | 211.08 | -0.3  | y11     | nan             | 549.94 | 549.78 | 0.16  | 1310.66 |
| 13 | usable        | b9        | 2(NH3)        | 385.2  | 385.66 | -0.46 | y5      | nan             | 523.39 | 523.26 | 0.13  | 1293.79 |
| 14 | usable        | b4        | nan           | 375.87 | 376.16 | -0.29 | y10     | nan             | 476.34 | 476.24 | 0.1   | 1328.55 |
| 15 | usable        | y9        | nan           | 432.8  | 432.73 | 0.07  | b5      | (NH3)           | 446.14 | 446.17 | -0.03 | 1325.08 |
| 16 | rare_mode     | b4        | (H2O)-(HCOH)  | 328.11 | 328.14 | -0.03 | y7      | nan             | 637.42 | 637.31 | 0.11  | 1293.64 |
| 17 | internal_acid | y7        | nan           | 319.11 | 319.16 | -0.05 | ai(3-7) | (CH3NH2)-(HCOH) | 487.37 | 486.22 | 1.15  | 1293.85 |
| 18 | rare_mode     | a6        | 2(H2O)        | 228.75 | 228.6  | 0.15  | y6      | (HCOH)          | 549.99 | 550.27 | -0.28 | 1328.73 |
| 19 | internal_acid | bi(10-12) | nan           | 262.01 | 261.11 | 0.9   | b9      | (NH3)           | 787.4  | 787.35 | 0.05  | 1311.42 |
| 20 | usable        | b8        | nan           | 374.08 | 374.18 | -0.1  | y6      | nan             | 580.37 | 580.28 | 0.09  | 1328.53 |
| 21 | internal_acid | bi(8-11)  | nan           | 319.1  | 318.13 | 0.97  | b7      | nan             | 690.45 | 690.33 | 0.12  | 1328.65 |
| 22 | usable        | y6        | nan           | 290.49 | 290.65 | -0.16 | b8      | nan             | 747.45 | 747.35 | 0.1   | 1328.43 |
| 23 | rare_mode     | b4        | nan           | 376.12 | 376.16 | -0.04 | y5      | 2(NH3)-(HCOH)   | 458.79 | 459.2  | -0.41 | 1293.7  |
| 24 | usable        | b8        | 2(NH3)        | 356.69 | 357.15 | -0.46 | y6      | nan             | 580.37 | 580.28 | 0.09  | 1293.75 |
| 25 | unclear       | ???       | nan           | 171.69 | nan    | nan   | ???     | nan             | 578.41 | nan    | nan   | 1328.51 |
| 26 | usable        | y6        | nan           | 290.47 | 290.65 | -0.18 | b8      | (NH3)           | 730.37 | 730.33 | 0.04  | 1311.31 |
| 27 | rare_mode     | y8        | (HN=C=NH)     | 383.03 | 383.2  | -0.17 | b5      | (HCOH)          | 432.81 | 433.18 | -0.37 | 1248.65 |
| 28 | unclear       | ???       | nan           | 376.09 | nan    | nan   | ???     | nan             | 450.06 | nan    | nan   | 1276.21 |
| 29 | rare_mode     | a9        | (HCOH)-(HCOH) | 358.7  | 358.68 | 0.02  | y5      | (NH3)-(HCOH)    | 476.38 | 476.23 | 0.15  | 1311.46 |
| 30 | internal_acid | ai(9-10)  | nan           | 176.75 | 176.08 | 0.67  | b8      | (NH3)           | 730.48 | 730.33 | 0.15  | 1083.98 |
| 31 | unclear       | ???       | nan           | 285.75 | nan    | nan   | ???     | nan             | 521.49 | nan    | nan   | 1328.73 |
| 32 | internal_acid | ai(9-10)  | nan           | 176.71 | 176.08 | 0.63  | b8      | nan             | 747.42 | 747.35 | 0.07  | 1100.84 |
| 33 | unclear       | ???       | nan           | 366.07 | nan    | nan   | ???     | nan             | 595.38 | nan    | nan   | 1327.52 |
| 34 | internal_acid | bi(8-11)  | nan           | 319.08 | 318.13 | 0.95  | b7      | (NH3)           | 673.36 | 673.31 | 0.05  | 1311.52 |
| 35 | usable        | a3        | nan           | 201.27 | 201.08 | 0.19  | y11     | nan             | 549.71 | 549.78 | -0.07 | 1300.69 |
| 36 | internal_acid | bi(9-10)  | nan           | 204.8  | 204.09 | 0.71  | b8      | nan             | 747.98 | 747.35 | 0.63  | 1157.58 |
| 37 | usable        | y2        | nan           | 261.87 | 262.15 | -0.28 | b12     | nan             | 533.26 | 533.25 | 0.01  | 1328.39 |
| 38 | internal_acid | ai(7-8)   | (NH3)         | 183.55 | 182.1  | 1.45  | y6      | (HCOH)          | 550.02 | 550.27 | -0.25 | 1283.59 |
| 39 | rare_mode     | b3        | 2(H2O)        | 193.53 | 193.07 | 0.46  | y6      | (HCOH)          | 550.08 | 550.27 | -0.19 | 1293.69 |

|    |                   |         |               |        |        |       |     |        |        |        |       |         |
|----|-------------------|---------|---------------|--------|--------|-------|-----|--------|--------|--------|-------|---------|
| 40 | unclear           | ???     | nan           | 402.58 | nan    | nan   | ??? | nan    | 504.37 | nan    | nan   | 1309.53 |
| 41 | usable            | b4      | nan           | 188.1  | 188.58 | -0.48 | y10 | (NH3)  | 934.47 | 934.45 | 0.02  | 1310.67 |
| 42 | internal_acid     | ai(5-9) | (H2O)-(HCOH)  | 176.6  | 176.59 | 0.01  | b4  | nan    | 375.98 | 376.16 | -0.18 | 928.56  |
| 43 | rare_mode         | y4      | 2(H2O)-(HCOH) | 310.27 | 310.16 | 0.11  | b7  | nan    | 690.44 | 690.33 | 0.11  | 1310.98 |
| 44 | rare_mode         | y8      | (HCOH)        | 388.96 | 389.21 | -0.25 | a6  | (HCOH) | 461.47 | 462.19 | -0.72 | 1311.9  |
| 45 | usable            | y1      | nan           | 174.7  | 175.12 | -0.42 | b13 | (H2O)  | 567.84 | 567.76 | 0.08  | 1310.38 |
| 46 | non_complementary | a4      | 2(NH3)        | 314.32 | 314.1  | 0.22  | y7  | nan    | 637.17 | 637.31 | -0.14 | 1265.81 |
| 47 | internal_acid     | bi(4-9) | (HCOH)        | 273.97 | 273.14 | 0.83  | y5  | (H2O)  | 504.69 | 505.25 | -0.56 | 1283.35 |
| 48 | rare_mode         | b9      | 2(NH3)-(HCOH) | 370.46 | 370.66 | -0.2  | y5  | nan    | 523.56 | 523.26 | 0.3   | 1264.48 |
| 49 | usable            | a3      | 2(H2O)        | 165.32 | 165.06 | 0.26  | y11 | nan    | 549.8  | 549.78 | 0.02  | 1264.92 |
| 50 | unclear           | ???     | nan           | 131.57 | nan    | nan   | ??? | nan    | 589.36 | nan    | nan   | 1310.29 |