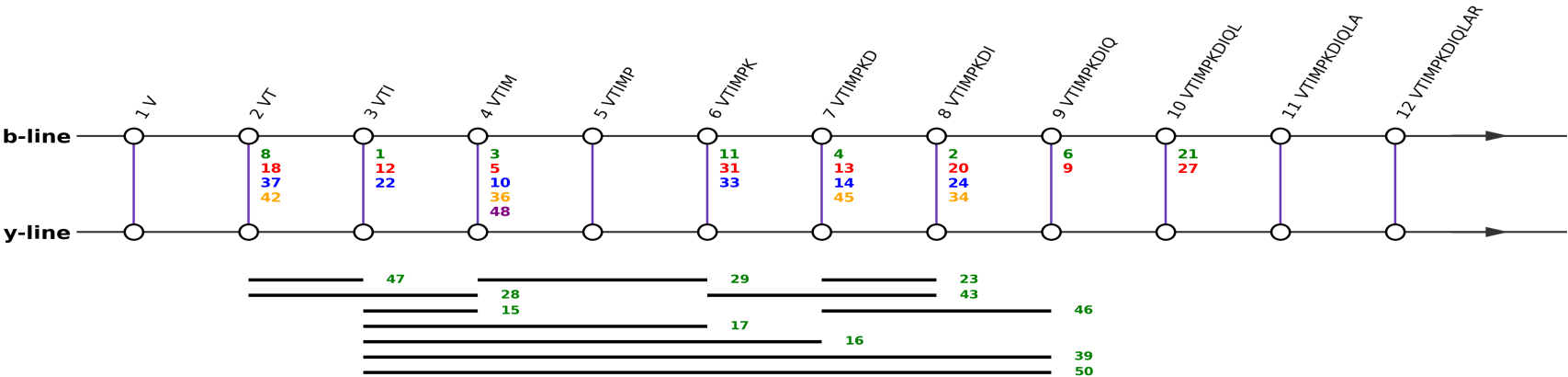
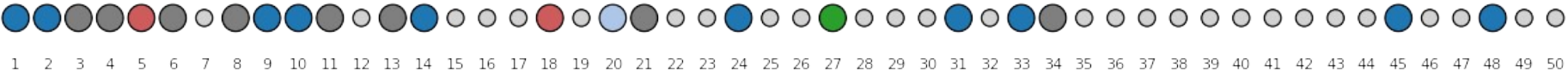


[VTIMPK(Me)3DIQLAR+3H]3+

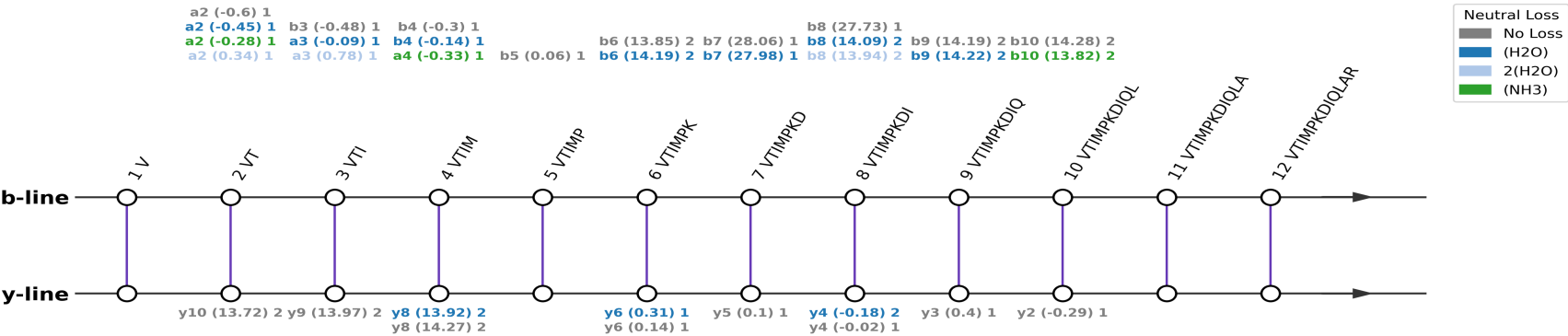
Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR



	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count
Parent	--	(b2,y10) (1+ , 2+) 13.52 (8.0)	--	(b4,y8) (1+ , 2+) 13.9 (3.0)	--	(b6,y6) (2+ , 1+) 14.11 (11.0)	(b7,y5) (1+ , 2+) 28.47 (13.0)	(b8,y4) (1+ , 2+) 27.65 (34.0)	(b9,y3) (2+ , 1+) 14.08 (6.0)	(b10,y2) (2+ , 1+) 13.94 (21.0)	--	7
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	((NH3),y2) (2+ , 1+) 13.53 (27.0)	--	1
(H2O)	--	--	((H2O),y9) (1+ , 2+) 13.98 (1.0)	(b4,(H2O)) (1+ , 2+) 13.62 (48.0)	--	((H2O),y6) (2+ , 1+) 14.65 (33.0)	((H2O),y5) (1+ , 2+) 27.8 (45.0)	(b8,(H2O)) (1+ , 2+) 28.53 (24.0)	((H2O),y3) (2+ , 1+) 14.09 (9.0)	--	--	6
(NH3) + (H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0
a	--	(a2,y10) (1+ , 2+) 13.64 (18.0)	--	(a4,y8) (1+ , 2+) 13.9 (5.0)	--	--	--	--	--	--	--	2
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	(2(H2O),y4) (2+ , 1+) 13.92 (20.0)	--	--	--	1
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0
Col_Count	0	2	1	3	0	2	2	3	2	2	0	17



Fragmentation Diagram for: VTIMPKDQLAR



Detailed Data - Table 1

b2	b3	b4	b5	b6	b7	b8	b9	b10
a2-2(H ₂ O) (0.34) (1, 2)	a3-2(H ₂ O) (0.78) (1, 2)	nan	nan	nan	nan	b8-2(H ₂ O) (13.94) (2, 1)	nan	nan
a2-(NH ₃) (-0.28) (1, 2)	nan	a4-(NH ₃) (-0.33) (1, 2)	nan	nan	nan	nan	nan	b10-(NH ₃) (13.82) (2, 1)
a2-(H ₂ O) (-0.45) (1, 2)	a3-(H ₂ O) (-0.09) (1, 2)	b4-(H ₂ O) (-0.14) (1, 2)	nan	b6-(H ₂ O) (14.19) (2, 1)	b7-(H ₂ O) (27.98) (1, 2)	b8-(H ₂ O) (14.09) (2, 1)	b9-(H ₂ O) (14.22) (2, 1)	nan
a2 (-0.6) (1, 2)	b3 (-0.48) (1, 2)	b4 (-0.3) (1, 2)	b5 (0.06) (1, 1)	b6 (13.85) (2, 1)	b7 (28.06) (1, 1)	b8 (27.73) (1, 2)	b9 (14.19) (2, 1)	b10 (14.28) (2, 1)

Detailed Data - Table 2

y2	y3	y4	y5	y6	y8	y9	y10
nan	nan	y4-(H2O) (-0.18) (2 , 1)	nan	y6-(H2O) (0.31) (1 , 2)	y8-(H2O) (13.92) (2 , 1)	nan	nan
y2 (-0.29) (1 , 2)	y3 (0.4) (1 , 1)	y4 (-0.02) (1 , 2)	y5 (0.1) (1 , 1)	y6 (0.14) (1 , 1)	y8 (14.27) (2 , 1)	y9 (13.97) (2 , 1)	y10 (13.72) (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	b3	(H2O)	296.01	296.2	-0.19	y9	nan	557.48	543.31	14.17	1410.97
2	usable	b8	(H2O)	461.85	447.76	14.09	y4	nan	487.38	487.3	0.08	1411.08
3	usable	b4	nan	445.09	445.25	-0.16	y8	nan	491.85	477.79	14.06	1382.03
4	usable	b7	nan	414.33	400.22	14.11	y5	nan	600.45	600.38	0.07	1429.11
5	usable	a4	nan	417.07	417.24	-0.17	y8	nan	491.86	477.79	14.07	1400.79
6	usable	y3	nan	359.13	359.24	-0.11	b9	nan	534.98	520.79	14.19	1429.09
7	rare_mode	b4	(CH3CH2SCH3)	369.06	369.21	-0.15	y8	nan	492.02	477.79	14.23	1353.1
8	usable	b2	nan	200.55	201.12	-0.57	y10	nan	613.95	599.85	14.1	1428.45
9	usable	y3	nan	359.11	359.24	-0.13	b9	(H2O)	526.01	511.79	14.22	1411.13
10	usable	b4	(H2O)	427.1	427.24	-0.14	y8	nan	491.95	477.79	14.16	1411.0
11	usable	b6	nan	356.73	342.71	14.02	y6	nan	715.5	715.41	0.09	1428.96
12	usable	a3	2(H2O)	250.96	250.18	0.78	y9	nan	557.48	543.31	14.17	1365.92
13	usable	y5	nan	300.67	300.69	-0.02	b7	nan	827.93	799.44	28.49	1429.27
14	usable	b7	(H2O)	405.2	391.22	13.98	y5	nan	600.46	600.38	0.08	1410.86
15	non_complementary	b3	nan	313.73	314.21	-0.48	y8	nan	492.05	477.79	14.26	1297.83
16	internal_acid	y5	nan	600.43	600.38	0.05	bi(3-7)	nan	627.44	598.31	29.13	1227.87
17	internal_acid	bi(3-6)	nan	512.42	483.29	29.13	y6	nan	715.55	715.41	0.14	1227.97
18	usable	a2	nan	172.51	173.11	-0.6	y10	nan	614.1	599.85	14.25	1400.71
19	unclear	???	nan	600.51	nan	nan	???	nan	738.45	nan	nan	1338.96

20	usable	b8	2(H2O)	452.69	438.75	13.94	y4	nan	487.28	487.3	-0.02	1392.66
21	usable	y2	nan	245.81	246.16	-0.35	b10	nan	591.62	577.34	14.28	1429.05
22	usable	a3	(H2O)	268.1	268.19	-0.09	y9	nan	557.35	543.31	14.04	1382.8
23	non_complementary	y4	nan	487.18	487.3	-0.12	b7	(H2O)	809.38	781.43	27.95	1296.56
24	usable	y4	(H2O)	234.97	235.15	-0.18	b8	nan	941.23	912.52	28.71	1411.17
25	internal_acid	ai(4-7)	(CH3CH2SCH3)-(HCOOH)	182.72	168.09	14.63	y5	(HN=C=NH)	557.89	558.36	-0.47	1298.5
26	non_complementary	a4	2(NH3)	383.09	383.18	-0.09	y5	nan	600.45	600.38	0.07	1366.63
27	usable	y2	nan	245.87	246.16	-0.29	b10	(NH3)	582.64	568.82	13.82	1411.15
28	internal_acid	bi(2-4)	nan	345.79	345.17	0.62	y8	nan	492.16	477.79	14.37	1330.11
29	internal_acid	bi(4-6)	nan	399.1	370.2	28.9	y6	nan	715.45	715.41	0.04	1513.65
30	unclear	???	nan	444.1	nan	nan	???	nan	542.05	nan	nan	1430.25
31	usable	b6	nan	356.56	342.71	13.85	y6	(H2O)	697.71	697.4	0.31	1410.83
32	non_complementary	a5	nan	514.37	514.29	0.08	y5	nan	600.48	600.38	0.1	1629.22
33	usable	b6	(H2O)	347.89	333.7	14.19	y6	nan	715.87	715.41	0.46	1411.65
34	usable	y4	nan	244.08	244.15	-0.07	b8	nan	940.25	912.52	27.73	1428.41
35	unclear	???	nan	300.46	nan	nan	???	nan	628.95	nan	nan	1558.36
36	usable	a4	(NH3)	399.88	400.21	-0.33	y8	nan	491.81	477.79	14.02	1383.5
37	usable	a2	(H2O)	154.65	155.1	-0.45	y10	nan	614.01	599.85	14.16	1382.67
38	unclear	???	nan	359.36	nan	nan	???	nan	626.58	nan	nan	1345.3
39	internal_acid	y3	nan	359.19	359.24	-0.05	bi(3-9)	nan	434.69	420.23	14.46	1228.57
40	internal_acid	ai(3-4)	nan	216.66	216.11	0.55	y8	nan	492.06	477.79	14.27	1200.78
41	rare_mode	a3	(HCOH)	256.39	256.19	0.2	y6	nan	715.55	715.41	0.14	1228.33
42	usable	a2	2(H2O)	137.43	137.09	0.34	y10	nan	613.57	599.85	13.72	1364.57
43	internal_acid	bi(6-8)	nan	399.13	370.22	28.91	b5	nan	542.36	542.3	0.06	1340.62
44	unclear	???	nan	355.68	nan	nan	???	nan	492.14	nan	nan	1339.96
45	usable	y5	nan	300.51	300.69	-0.18	b7	(H2O)	809.41	781.43	27.98	1410.43
46	non_complementary	y3	nan	359.64	359.24	0.4	b7	nan	827.5	799.44	28.06	1546.78
47	internal_acid	bi(2-3)	(H2O)	196.36	196.12	0.24	y9	nan	557.28	543.31	13.97	1310.92

48	usable	b4	nan	444.95	445.25	-0.3	y8	(H2O)	482.7	468.78	13.92	1410.35
49	unclear	???	nan	664.29	nan	nan	???	nan	756.22	nan	nan	1420.51
50	internal_acid	a2	(NH3)	155.81	156.09	-0.28	bi(3-9)	2(H2O)	416.95	402.22	14.73	989.71