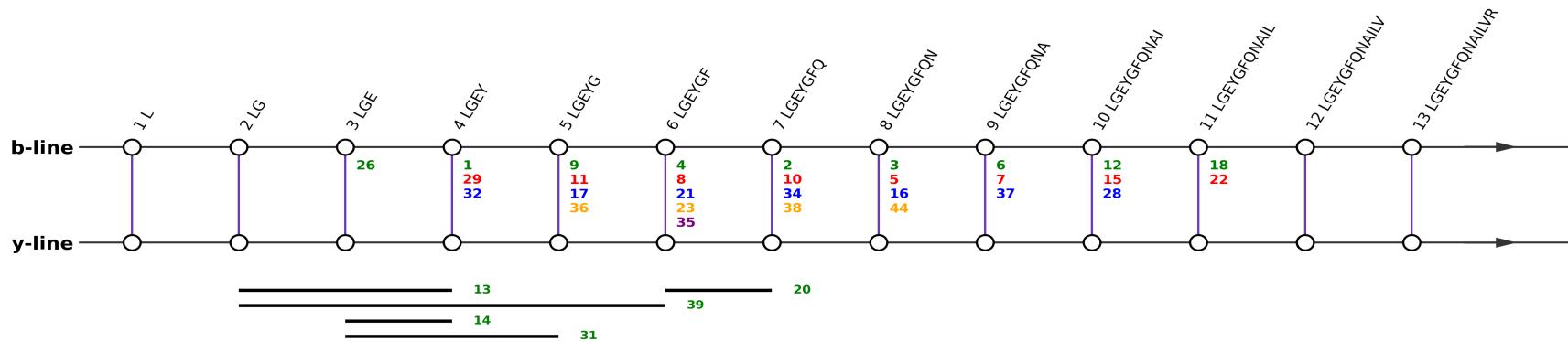


	Name	Sequence	Binary	Total	Unexplained
0	ME4_2+	[LGE(nitro)YGFQNAILVR+2H]2+	000111111101	9	1
1	ME4_3+	[LGE(nitro)YGFQNAILVR+3H]3+	0000011111011	7	1
2	ME8_2+	[GGNFSGR(Me)GGFGGSR+2H]2+	00000011100001	4	1
3	ME8_3+	[GGNFSGR(Me)GGFGGSR+3H]3+	00011011101101	9	2
4	ME9_2+	[GWGR(Me2)EENLFWSK+2H]2+	000111111101	8	1
5	ME9_3+	[GWGR(Me2)EENLFWSK+3H]3+	011011110101	7	0
6	ME14_2+	[VTIMPK(Ac)DIQLAR+2H]2+	000110111101	6	0
7	ME14_3+	[VTIMPK(Ac)DIQLAR+3H]3+	010111111111	9	0
8	ME16_2+	[VTIMPKDIQLAR+2H]2+	000010111001	4	0
9	ME16_3+	[VTIMPKDIQLAR+3H]3+	010111111001	7	0
10	ME17_2+	[TWR(Me2)GGEEK+2H]2+	01111101	5	0
11	ME17_3+	[TWR(Me2)GGEEK+3H]3+	00111111	6	1
12	PH15_2+	[SApTPEALAFVR+2H]2+	00111111101	7	0
13	UN14_2+	[GSNKGAIIGLM+2H]2+	00011111101	6	0
14	UN15_2+	[MLGIIAGKNSG+2H]2+	011101111101	7	0

ME4_2+:[LGE(nitro)YGFQNAILVR+2H]2+

Fragmentation Diagram for: LGEYGFQNAILVR



	b1y12	b2y11	b3y10	b4y9	b5y8	b6y7	b7y6	b8y5	b9y4	b10y3	b11y2	b12y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	--	--	(b4,y9) (1+, 1+) (-0.05, 0.16)	(b5,y8) (1+, 1+) (0.05, 0.15)	(b6,y7) (1+, 1+) (0.05, 0.03)	(b7,y6) (1+, 1+) (0.04, 0.07)	(b8,y5) (1+, 1+) (0.03, 0.0)	(b9,y4) (1+, 1+) (0.03, -0.01)	(b10,y3) (1+, 1+) (0.19, -0.19)	(b11,y2) (1+, 1+) (-0.31, -0.19)	--	8	1	0.2	-0.3(26)
(NH3)	--	--	--	(b4,(NH3)) (1+, 1+) (-0.09, -0.16)	(b5,(NH3)) (1+, 1+) (-0.03, 0.24)	(b6,(NH3)) (1+, 1+) (-0.06, -0.05)	--	(b7,y5) (1+, 1+) (0.03, 0.0)	((NH3),y5) (1+, 1+) (0.03, 0.0)	((NH3),y4) (1+, 1+) (0.01, -0.05)	((NH3),y3) (1+, 1+) (-0.13, -0.38)	--	7	0	0.22	
(H2O)	--	--	--	--	(H2O),y8) (1+, 1+) (0.09, -0.07)	(H2O),y7) (1+, 1+) (0.08, 0.14)	((H2O),y6) (1+, 1+) (0.38, 0.36)	--	--	--	--	--	3	0	0.37	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	0.31(24)
a	--	--	--	(a4,y9) (1+, 1+) (-0.12, 0.42)	(a5,y8) (1+, 1+) (0.07, 0.18)	(a6,y7) (1+, 1+) (-0.4, -0.16)	--	--	--	--	--	--	3	0	0.45	
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	(2(H2O),y6) (1+, 1+) (0.17, 0.68)	--	--	--	--	--	1	0	0.85	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(2(NH3),y5) (1+, 1+) (0.17, -0.35)	--	(2(NH3),y3) (1+, 1+) (-0.09, -0.72)	--	--	2	0	0.67	
Col_Count	0	0	0	3	4	4	3	3	2	3	2	0	24	2	0.39	nan
Ion Mass	(114.09, 1411.7)	(171.11, 1354.67)	(345.14, 1180.65)	(508.2, 1017.58)	(565.23, 960.56)	(712.29, 813.49)	(840.35, 685.44)	(954.4, 571.39)	(1025.43, 500.36)	(1138.52, 387.27)	(1251.6, 274.19)	(1350.67, 175.12)	0	0	0.0	0



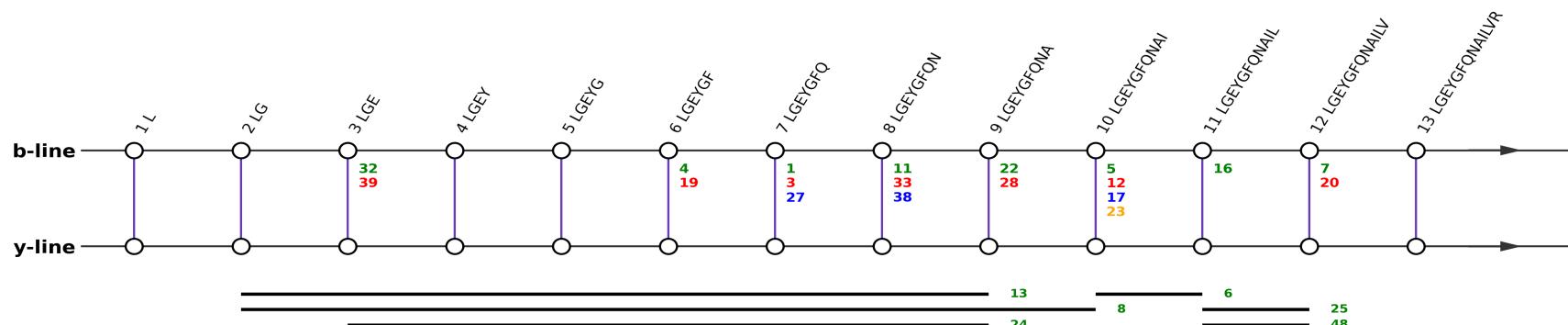
Table ME4_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b4	nan	508.15	508.2	-0.05	y9	nan	1017.74	1017.58	0.16	1525.89
2	usable	y6	nan	685.48	685.44	0.04	b7	nan	840.42	840.35	0.07	1525.9
3	usable	y5	nan	571.42	571.39	0.03	b8	(NH3)	937.37	937.37	0.0	1508.79
4	usable	b6	nan	712.4	712.29	0.11	y7	nan	813.52	813.49	0.03	1525.92
5	usable	y5	nan	571.42	571.39	0.03	b8	nan	954.4	954.4	0.0	1525.82
6	usable	y4	nan	500.37	500.36	0.01	b9	(NH3)	1008.36	1008.41	-0.05	1508.73
7	usable	y4	nan	500.39	500.36	0.03	b9	nan	1025.42	1025.43	-0.01	1525.81
8	usable	b6	(H2O)	694.36	694.28	0.08	y7	nan	813.63	813.49	0.14	1507.99
9	usable	a5	nan	537.28	537.21	0.07	y8	nan	960.74	960.56	0.18	1498.02
10	usable	y6	nan	685.82	685.44	0.38	b7	(H2O)	822.7	822.34	0.36	1508.52
11	usable	b5	nan	565.28	565.23	0.05	y8	nan	960.71	960.56	0.15	1525.99
12	usable	y3	nan	387.08	387.27	-0.19	b10	nan	1138.33	1138.52	-0.19	1525.41
13	internal_acid	bi(2-4)	nan	395.03	394.11	0.92	y9	nan	1018.21	1017.58	0.63	1413.24
14	internal_acid	bi(3-4)	nan	337.89	337.09	0.8	y9	nan	1017.5	1017.58	-0.08	1693.28
15	usable	y3	nan	387.14	387.27	-0.13	b10	(NH3)	1121.11	1121.49	-0.38	1508.25
16	usable	y5	nan	571.56	571.39	0.17	b8	2(NH3)	919.99	920.34	-0.35	1491.55
17	usable	b5	(H2O)	547.3	547.21	0.09	y8	nan	960.49	960.56	-0.07	1507.79
18	usable	y2	nan	273.88	274.19	-0.31	b11	nan	1251.41	1251.6	-0.19	1525.29
19	rare_mode	b5	(HCOOH)	519.66	519.22	0.44	y8	nan	960.68	960.56	0.12	1480.34
20	non_complementary	b6	2(H2O)	676.15	676.27	-0.12	y6	nan	685.45	685.44	0.01	1361.6
21	usable	a6	nan	683.88	684.28	-0.4	y7	nan	813.33	813.49	-0.16	1497.21
22	usable	y2	nan	274.1	274.19	-0.09	b11	(NH3)	1234.37	1234.57	-0.2	1508.47
23	usable	b6	nan	712.35	712.29	0.06	y7	(NH3)	796.42	796.47	-0.05	1508.77
24	unclear	???	nan	500.62	nan	nan	???	nan	990.44	nan	nan	1491.06
25	unclear	???	nan	486.13	nan	nan	???	nan	813.76	nan	nan	1299.89

26	usable	b3	nan	299.82	345.14	-45.32	y10	nan	1225.67	1180.65	45.02	1525.49
27	rare_mode	a6	2(H2O)-(HCOH)	619.0	618.25	0.75	y6	nan	685.46	685.44	0.02	1304.46
28	usable	y3	nan	387.18	387.27	-0.09	b10	2(NH3)	1103.74	1104.46	-0.72	1490.92
29	usable	a4	nan	480.07	480.19	-0.12	y9	nan	1018.0	1017.58	0.42	1498.07
30	unclear	???	nan	526.05	nan	nan	???	nan	813.33	nan	nan	1339.38
31	internal_acid	bi(3-5)	(NH3)	378.02	377.09	0.93	y8	nan	960.46	960.56	-0.1	1338.48
32	usable	b4	nan	508.11	508.2	-0.09	y9	(NH3)	1000.4	1000.56	-0.16	1508.51
33	non_complementary	a4	(NH3)	462.96	463.17	-0.21	y8	nan	960.49	960.56	-0.07	1423.45
34	usable	y6	nan	685.37	685.44	-0.07	a7	(NH3)	795.36	795.32	0.04	1480.73
35	usable	a6	(NH3)	666.95	667.26	-0.31	y7	nan	813.56	813.49	0.07	1480.51
36	usable	b5	nan	565.2	565.23	-0.03	y8	(NH3)	943.78	943.54	0.24	1508.98
37	usable	y4	nan	500.53	500.36	0.17	a9	(NH3)	980.73	980.4	0.33	1481.26
38	usable	y6	nan	685.61	685.44	0.17	b7	2(H2O)	805.01	804.33	0.68	1490.62
39	internal_acid	bi(2-6)	nan	599.13	598.2	0.93	y7	nan	813.58	813.49	0.09	1412.71
40	unclear	???	nan	583.17	nan	nan	???	nan	813.29	nan	nan	1396.46
41	unclear	???	nan	609.65	nan	nan	???	nan	813.45	nan	nan	1423.1
42	rare_mode	a6	(NH3)-(HCOH)	636.87	637.25	-0.38	y7	nan	813.97	813.49	0.48	1450.84
43	unclear	???	nan	435.94	nan	nan	???	nan	960.7	nan	nan	1396.64
44	usable	y5	nan	571.39	571.39	-0.0	a8	(NH3)	909.63	909.36	0.27	1481.02
45	rare_mode	y4	nan	500.31	500.36	-0.05	a8	(NH3)-(HCOH)	879.37	879.35	0.02	1379.68
46	unclear	???	nan	293.79	nan	nan	???	nan	960.22	nan	nan	1547.8
47	unclear	???	nan	658.15	nan	nan	???	nan	685.42	nan	nan	1343.57
48	unclear	???	nan	386.96	nan	nan	???	nan	952.17	nan	nan	1339.13
49	unclear	???	nan	600.89	nan	nan	???	nan	685.34	nan	nan	1286.23
50	internal_acid	ai(3-5)	(NH3)	349.78	349.08	0.7	y8	nan	960.77	960.56	0.21	1660.33

ME4_3+:[LGE(nitro)YGFQNAILVR+3H]3+

Fragmentation Diagram for: LGEYGFQNAILVR



	b1y12	b2y11	b3y10	b4y9	b5y8	b6y7	b7y6	b8y5	b9y4	b10y3	b11y2	b12y1	Row_Count	Unexplained_Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained_Pairs						
Parent	--	--	--	--	--	(b6,y7) (1+, 2+) (0.06, 0.08)	4	(b7,y6) (1+, 2+) (-0.04, 0.05)	3	(b8,y5) (1+, 2+) (-0.14, -0.06)	33	(b9,y4) (1+, 2+) (-0.34, -0.03)	22	(b10,y3) (2+, 1+) (-0.12, -0.05)	5	--	6	1	0.24	0.56(32)		
(NH3)	--	--	--	--	--	(b6,(NH3)) (1+, 2+) (-0.07, 0.11)	19	--	(t(NH3),y4) (1+, 2+) (-0.14, 0.02)	38	(t(NH3),y4) (1+, 2+) (-0.18, -0.3)	28	(t(NH3),y3) (2+, 1+) (-0.17, -0.02)	17	(t(NH3),y2) (2+, 1+) (-0.12, -0.02)	16	(t(NH3),y1) (2+, 1+) (-0.52, 0.08)	20	6	1	0.34	-0.16(39)
(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	((H2O),y6) (1+, 2+) (-0.05, 0.29)	27	--	--	--	--	--	--	1	1	0.34	0.31(35)			
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0						
a	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0						
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0						
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0						
Col_Count	0	0	0	0	0	2	2	2	2	2	2	1	2	13	3	0.13	nan					
Ion Mass	(114.09, 1411.7)	(171.11, 1354.67)	(345.14, 1180.65)	(508.2, 1017.58)	(565.23, 960.56)	(712.29, 813.49)	(840.35, 685.44)	(954.4, 571.39)	(1025.43, 500.36)	(1138.52, 387.27)	(1251.6, 274.19)	(1350.67, 175.12)	0	0	0	0	0					



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

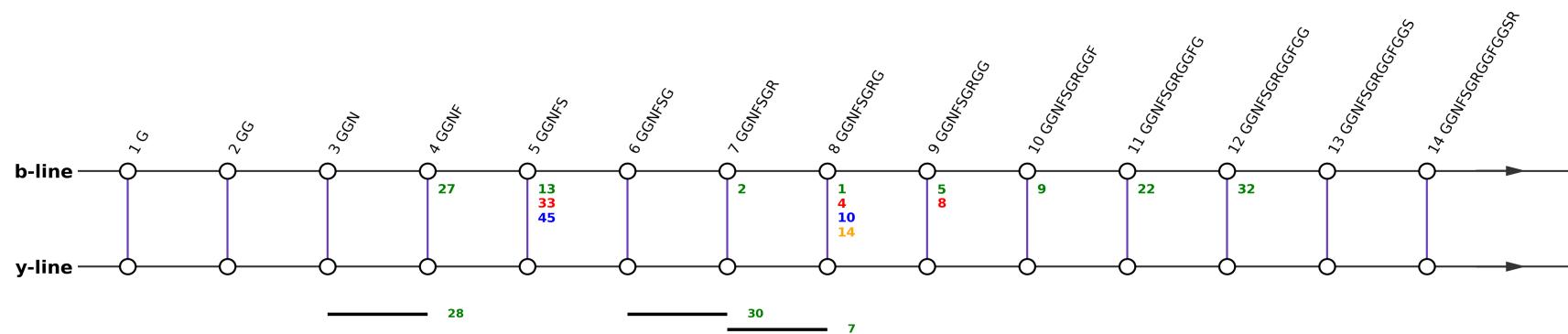
Table ME4_3+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b7	nan	420.68	420.68	0.0	y6	nan	685.47	685.44	0.03	1526.83
2	rare_mode	b5	(H ₂ O)	274.0	274.11	-0.11	y6	(NH ₃)-(HN=C=NH)	626.38	626.39	-0.01	1526.76
3	usable	y6	nan	343.18	343.22	-0.04	b7	nan	840.4	840.35	0.05	1526.76
4	usable	y7	nan	407.31	407.25	0.06	b6	nan	712.37	712.29	0.08	1526.99
5	usable	y3	nan	387.15	387.27	-0.12	b10	nan	569.71	569.76	-0.05	1526.57
6	non_complementary	y2	nan	273.94	274.19	-0.25	b10	nan	1138.46	1138.52	-0.06	1412.4
7	usable	y1	nan	174.65	175.12	-0.47	b12	nan	675.8	675.84	-0.04	1526.25
8	internal_acid	y3	nan	387.19	387.27	-0.08	bi(2-10)	nan	1025.41	1024.43	0.98	1412.6
9	non_complementary	y6	nan	685.52	685.44	0.08	b6	nan	712.65	712.29	0.36	1398.17
10	unclear	???	nan	685.6	nan	nan	???	nan	729.52	nan	nan	1415.12
11	usable	b8	nan	477.67	477.7	-0.03	y5	nan	571.75	571.39	0.36	1527.09
12	usable	y3	nan	193.8	194.14	-0.34	b10	(NH ₃)	1121.15	1121.49	-0.34	1508.75
13	internal_acid	y4	nan	500.2	500.36	-0.16	bi(2-9)	nan	912.43	911.34	1.09	1412.63
14	internal_acid	bi(7-8)	nan	242.83	242.1	0.73	b6	nan	712.35	712.29	0.06	1667.53
15	non_complementary	y4	nan	500.36	500.36	0.0	b8	nan	954.34	954.4	-0.06	1454.7
16	usable	y2	nan	274.07	274.19	-0.12	b11	(NH ₃)	617.77	617.79	-0.02	1509.61
17	usable	y3	nan	387.1	387.27	-0.17	b10	(NH ₃)	561.23	561.25	-0.02	1509.56
18	internal_acid	ai(7-10)	(NH ₃)	382.53	381.19	1.34	b6	nan	712.44	712.29	0.15	1477.5
19	usable	y7	(NH ₃)	398.67	398.74	-0.07	b6	nan	712.4	712.29	0.11	1509.74
20	usable	y1	nan	174.6	175.12	-0.52	b12	(NH ₃)	667.4	667.32	0.08	1509.4
21	internal_acid	bi(6-11)	(H ₂ O)-(HCOH)	319.86	319.68	0.18	b5	(NH ₃)-(HCOH)	518.11	518.19	-0.08	1356.08
22	usable	y4	nan	250.34	250.68	-0.34	b9	nan	1025.4	1025.43	-0.03	1526.08
23	usable	y3	nan	387.14	387.27	-0.13	a10	(NH ₃)	547.28	547.24	0.04	1481.7
24	internal_acid	y4	nan	500.38	500.36	0.02	bi(3-9)	nan	855.2	854.32	0.88	1355.58
25	non_complementary	y1	nan	174.67	175.12	-0.45	b11	nan	1251.44	1251.6	-0.16	1600.78

26	internal_acid	bi(7-8)	(NH3)	225.78	225.07	0.71	b6	nan	712.2	712.29	-0.09	1650.18
27	usable	y6	nan	343.17	343.22	-0.05	b7	(H2O)	822.63	822.34	0.29	1508.97
28	usable	y4	nan	250.5	250.68	-0.18	b9	(NH3)	1008.11	1008.41	-0.3	1509.11
29	internal_acid	bi(8-10)	nan	298.93	298.16	0.77	b7	nan	840.47	840.35	0.12	1438.33
30	internal_acid	y4	nan	500.18	500.36	-0.18	bi(3-9)	(H2O)	837.58	836.31	1.27	1337.76
31	internal_acid	bi(6-7)	nan	275.79	275.13	0.66	b5	nan	565.2	565.23	-0.03	1406.19
32	usable	b3	nan	299.81	345.14	-45.33	y10	nan	613.77	590.83	22.94	1527.35
33	usable	y5	nan	286.06	286.2	-0.14	b8	nan	954.34	954.4	-0.06	1526.46
34	non_complementary	b5	nan	565.38	565.23	0.15	y6	nan	685.7	685.44	0.26	1251.08
35	unclear	???	nan	325.64	nan	nan	???	nan	857.81	nan	nan	1509.09
36	unclear	???	nan	480.44	nan	nan	???	nan	561.71	nan	nan	1522.59
37	non_complementary	y3	(NH3)	185.67	185.63	0.04	b7	nan	840.79	840.35	0.44	1212.13
38	usable	y5	nan	286.06	286.2	-0.14	b8	(NH3)	937.39	937.37	0.02	1509.51
39	usable	b3	nan	299.81	345.14	-45.33	y10	(NH3)	604.9	582.31	22.59	1509.61
40	unclear	???	nan	291.85	nan	nan	???	nan	518.15	nan	nan	1328.15
41	internal_acid	y4	nan	500.42	500.36	0.06	bi(5-9)	nan	518.33	517.23	1.1	1519.17
42	internal_acid	ai(8-10)	(NH3)	253.8	253.13	0.67	b7	nan	840.43	840.35	0.08	1348.03
43	rare_mode	b6	(H2O)-(HCOH)	332.86	332.64	0.22	y6	nan	685.32	685.44	-0.12	1351.04
44	internal_acid	ai(10-11)	nan	198.67	198.16	0.51	y2	nan	273.99	274.19	-0.2	746.65
45	unclear	???	nan	337.82	nan	nan	???	nan	447.1	nan	nan	1232.02
46	unclear	???	nan	239.79	nan	nan	???	nan	633.99	nan	nan	1507.77
47	internal_acid	y2	nan	274.17	274.19	-0.02	bi(5-11)	nan	744.47	743.4	1.07	1292.81
48	non_complementary	y1	nan	174.58	175.12	-0.54	b11	nan	626.04	626.3	-0.26	1426.66
49	internal_acid	y4	nan	500.6	500.36	0.24	bi(4-9)	nan	726.26	680.29	45.97	1727.46
50	rare_mode	y4	nan	500.5	500.36	0.14	b8	(HCOH)-(HCOH)	894.41	894.37	0.04	1394.91

ME8_2+:[GGNFSGR(Me)GGFGGSR+2H]2+

Fragmentation Diagram for: GGNFSGRGFGGGSR



	b1y13	b2y12	b3y11	b4y10	b5y9	b6y8	b7y7	b8y6	b9y5	b10y4	b11y3	b12y2	b13y1	Row_Count	Unexplained_Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained_Pairs			
Parent	--	--	--	--	--	(b7,y7) (1+, 1+) (0.08, 0.03)	2	(b8,y6) (1+, 1+) (0.11, 0.08)	1	(b9,y5) (1+, 1+) (-0.0, -0.0)	5	--	--	--	3	1	0.1	0.43(12)		
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(b8,(NH3)) (1+, 1+) (-0.39, 0.42)	10	(b9,(NH3)) (1+, 1+) (-0.15, 0.13)	8	(b10,(NH3)) (1+, 1+) (-0.06, -0.31)	9	--	--	--	3	1	0.39	0.31(17)
(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0				
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	-0.25(38)			
a	--	--	--	--	--	--	--	(a8,y6) (1+, 1+) (0.29, 0.12)	14	--	--	--	--	1	0	0.4				
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	(b12,2(H2O)) (1+, 1+) (0.67, 0.29)	32	--	1	0	0.96			
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0				
Col_Count	0	0	0	0	0	0	1	3	2	1	0	1	0	8	3	0.26	nan			
Ion Mass	(58.03, 1269.61)	(115.05, 1212.59)	(229.09, 1098.54)	(376.16, 951.48)	(463.19, 864.44)	(520.22, 807.42)	(690.33, 637.31)	(747.35, 580.28)	(804.37, 523.26)	(951.44, 376.19)	(1008.46, 319.17)	(1065.49, 262.15)	(1152.52, 175.12)	0	0	0.0	0	0		



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

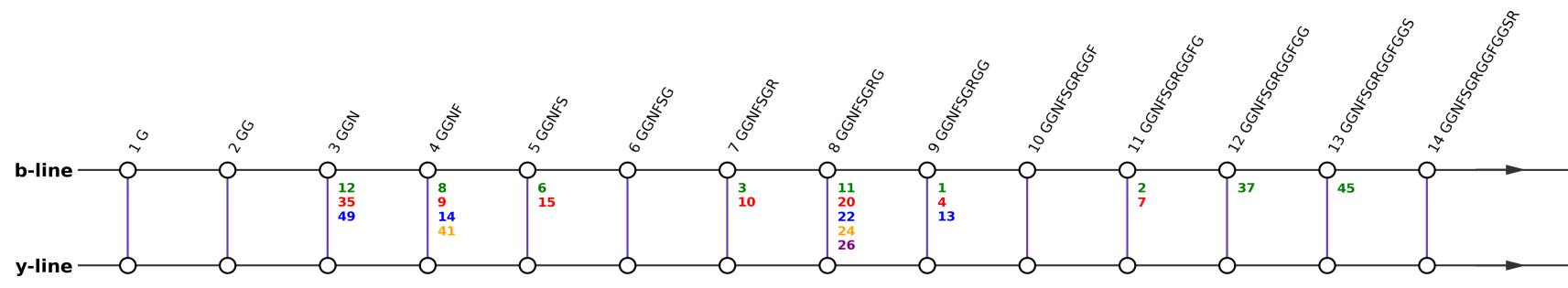
Table ME8_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y6	nan	580.39	580.28	0.11	b8	nan	747.43	747.35	0.08	1327.82
2	usable	y7	nan	637.39	637.31	0.08	b7	nan	690.36	690.33	0.03	1327.75
3	unclear	???	nan	527.34	nan	nan	???	nan	534.38	nan	nan	1589.06
4	usable	y6	nan	580.37	580.28	0.09	b8	(NH3)	730.35	730.33	0.02	1310.72
5	usable	y5	nan	523.26	523.26	-0.0	b9	nan	804.37	804.37	-0.0	1327.63
6	rare_mode	y6	nan	580.59	580.28	0.31	b8	(H2O)-(HCOH)	699.38	699.33	0.05	1279.97
7	non_complementary	y6	nan	580.43	580.28	0.15	b7	(NH3)	673.04	673.31	-0.27	1253.47
8	usable	y5	(NH3)	506.09	506.24	-0.15	b9	nan	804.5	804.37	0.13	1310.59
9	usable	y4	(NH3)	359.11	359.17	-0.06	b10	nan	951.13	951.44	-0.31	1310.24
10	usable	y6	(NH3)	562.87	563.26	-0.39	b8	nan	747.77	747.35	0.42	1310.64
11	unclear	???	nan	347.81	nan	nan	???	nan	895.4	nan	nan	1243.21
12	unclear	???	nan	562.31	nan	nan	???	nan	765.76	nan	nan	1328.07
13	usable	b5	(NH3)	446.02	446.17	-0.15	y9	(NH3)	847.45	847.42	0.03	1293.47
14	usable	y6	nan	580.57	580.28	0.29	a8	nan	719.46	719.34	0.12	1300.03
15	unclear	???	nan	323.13	nan	nan	???	nan	951.13	nan	nan	1274.26
16	rare_mode	a4	nan	348.05	348.15	-0.1	y10	(HCOH)	921.04	921.46	-0.42	1269.09
17	unclear	???	nan	301.75	nan	nan	???	nan	1009.17	nan	nan	1310.92
18	unclear	???	nan	490.22	nan	nan	???	nan	804.33	nan	nan	1294.55
19	rare_mode	b6	2(NH3)	485.61	486.16	-0.55	y8	(CH3NH2)	776.68	776.38	0.3	1262.29
20	rare_mode	b5	2(H2O)	427.77	427.17	0.6	y9	(CH3NH2)	833.18	833.4	-0.22	1260.95
21	unclear	???	nan	428.27	nan	nan	???	nan	847.25	nan	nan	1275.52
22	usable	y3	(NH3)	301.89	302.15	-0.26	b11	(NH3)	992.02	991.44	0.58	1293.91
23	unclear	???	nan	400.18	nan	nan	???	nan	833.18	nan	nan	1233.36
24	internal_acid	y6	(NH3)-(HCOH)	533.28	533.25	0.03	ai(3-8)	2(NH3)-(HCOH)	540.6	540.23	0.37	1073.88
25	unclear	???	nan	428.1	nan	nan	???	nan	816.84	nan	nan	1244.94

26	unclear	???	nan	240.79	nan	nan	???	nan	1008.62	nan	nan	1249.41
27	usable	a4	(NH3)	330.69	331.12	-0.43	y10	(NH3)	934.52	934.45	0.07	1265.21
28	non_complementary	b3	nan	228.71	229.09	-0.38	y10	(NH3)	934.85	934.45	0.4	1392.27
29	rare_mode	b5	(NH3)	446.11	446.17	-0.06	y9	(CH3NH2)	833.6	833.4	0.2	1279.71
30	non_complementary	b6	(NH3)	503.15	503.19	-0.04	y7	nan	637.6	637.31	0.29	1140.75
31	rare_mode	y5	nan	523.15	523.26	-0.11	b9	(H2O)-(HCOH)	755.7	756.35	-0.65	1278.85
32	usable	y2	2(H2O)	226.8	226.13	0.67	b12	nan	1065.78	1065.49	0.29	1292.58
33	usable	a5	(NH3)	418.1	418.16	-0.06	y9	(NH3)	847.79	847.42	0.37	1265.89
34	rare_mode	y5	nan	523.25	523.26	-0.01	b9	(CH3NH2)	773.13	773.33	-0.2	1296.38
35	unclear	???	nan	620.15	nan	nan	???	nan	691.33	nan	nan	1311.48
36	rare_mode	b3	nan	228.66	229.09	-0.43	y10	(HCOH)-(HCOH)	891.57	891.45	0.12	1348.89
37	rare_mode	b5	nan	463.4	463.19	0.21	y9	(CH3NH2)	833.1	833.4	-0.3	1296.5
38	unclear	???	nan	341.21	nan	nan	???	nan	951.14	nan	nan	1292.35
39	rare_mode	a5	(NH3)	418.01	418.16	-0.15	y9	(CH3NH2)	833.67	833.4	0.27	1251.68
40	unclear	???	nan	297.46	nan	nan	???	nan	952.06	nan	nan	1249.52
41	rare_mode	a4	(NH3)	330.79	331.12	-0.33	y10	(HCOH)-(HCOH)	891.45	891.45	-0.0	1222.24
42	unclear	???	nan	348.45	nan	nan	???	nan	877.52	nan	nan	1225.97
43	unclear	???	nan	635.64	nan	nan	???	nan	842.71	nan	nan	1478.35
44	rare_mode	a4	(NH3)	331.37	331.12	0.25	y10	(CH3NH2)	920.56	920.43	0.13	1251.93
45	usable	a5	2(NH3)	400.54	401.13	-0.59	y9	(NH3)	847.08	847.42	-0.34	1247.62
46	unclear	???	nan	485.31	nan	nan	???	nan	637.07	nan	nan	1122.38
47	rare_mode	b4	nan	376.09	376.16	-0.07	y10	(H2O)-(HCOH)	903.38	903.45	-0.07	1279.47
48	unclear	???	nan	266.61	nan	nan	???	nan	618.7	nan	nan	1151.92
49	unclear	???	nan	576.69	nan	nan	???	nan	816.92	nan	nan	1393.61
50	rare_mode	b4	nan	376.36	376.16	0.2	y10	(HCOH)	921.76	921.46	0.3	1298.12

ME8_3+:[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	Abs Average Mass Difference	Unexplained_Pairs
Parent	--	--	--	(b4,y10) (1+, 2+) (-0.29, 0.1) 14	(b5,y9) (1+, 2+) (0.04, -0.03) 6	--	(b7,y7) (2+, 1+) (-0.04, 0.07) 10	(b8,y6) (1+, 2+) (-0.16, 0.1) 22	(b9,y5) (2+, 1+) (0.02, 0.1) 4	--	(b11,y3) (2+, 1+) (-0.14, 0.08) 7	(b12,y2) (2+, 1+) (-0.28, 0.01) 37	--	7	2	0.21	-0.13(25) 0.09(31)
(NH3)	--	--	--	(b4,(NH3)) (2+, 1+) (-0.48, 0.02) 41	((NH3),y9) (1+, 2+) (0.07, -0.03) 15	--	((NH3),y7) (2+, 1+) (-0.15, 0.09) 3	((NH3),y6) (1+, 2+) (-0.18, 0.04) 26	((NH3),y5) (2+, 1+) (-0.06, 0.11) 1	--	((NH3),y3) (2+, 1+) (-0.11, -0.06) 2	--	--	6	0	0.23	
(H2O)	--	--	(H2O),y11 (1+, 2+) (-0.3, 0.16) 12	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	2	1	0.48	-0.34(50)
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
a	--	--	(a3,y11) (1+, 2+) (0.19, -0.07) 35	(a4,y10) (1+, 2+) (-0.12, 0.14) 8	--	--	--	--	--	--	--	--	--	2	0	0.26	
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	(2(NH3),y6) (2+, 1+) (-0.46, 0.09) 24	(2(NH3),y5) (2+, 1+) (-0.46, 0.13) 13	--	--	--	2	0	0.57	
Col_Count	0	0	2	3	2	0	2	3	3	0	2	1	1	19	3	0.25	nan
Ion Mass	(58.03, 1269.61)	(115.05, 1212.59)	(229.09, 1098.54)	(376.16, 951.48)	(463.19, 864.44)	(520.22, 807.42)	(690.33, 637.31)	(747.35, 580.28)	(804.37, 523.26)	(951.44, 376.19)	(1008.46, 319.17)	(1065.49, 262.15)	(1152.52, 175.12)	0	0	0.0	0



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

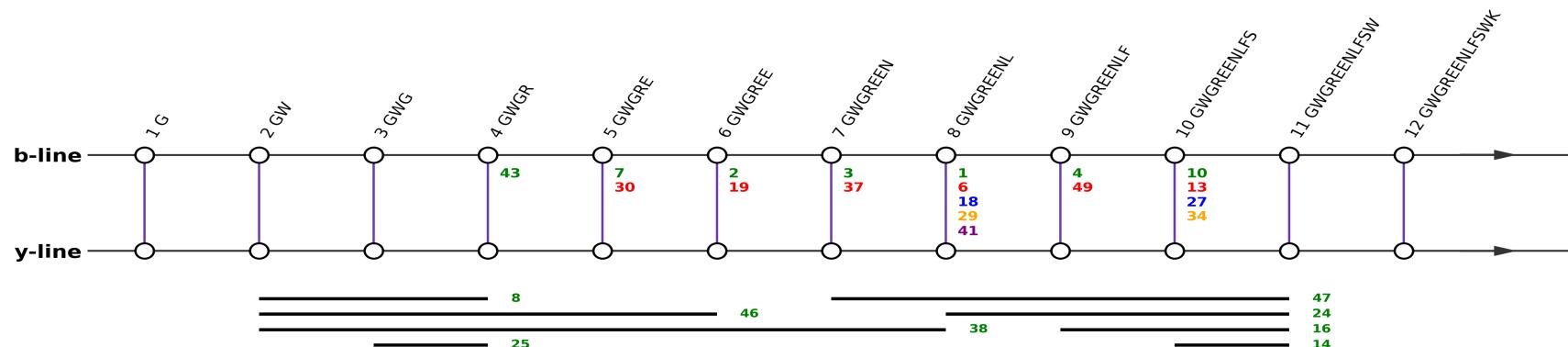
Table ME8_3+

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

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 (light 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 (dark grey), a (dark red)

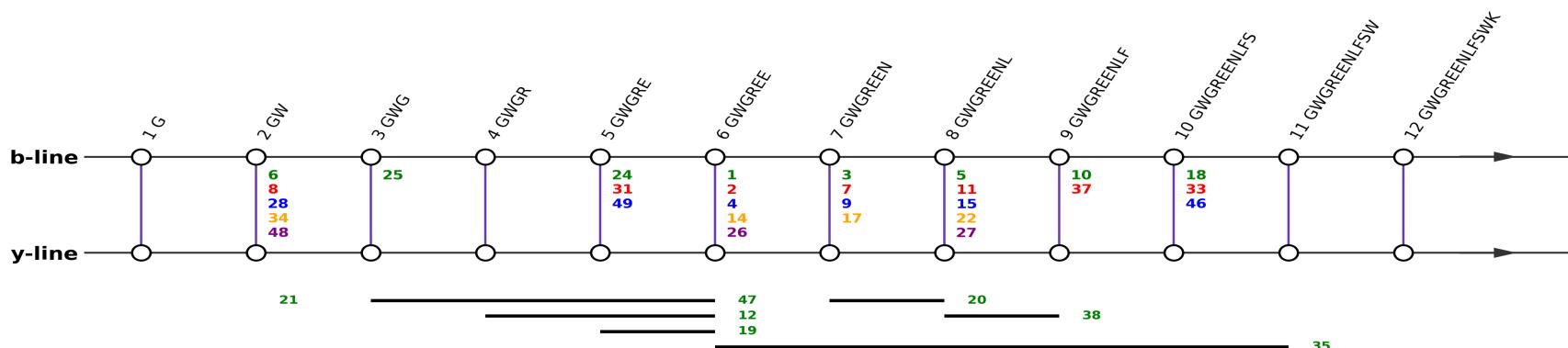
Table ME9_2+

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

ME9_3+:[GWGR(Me2)EENLFSWK+3H]3+

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	--	(b2,y10) (1+,2+) (-0.33,0.31)	(b3,y9) (1+,2+) (-0.11,0.24)	--	(b5,y7) (2+,1+) (-0.13,0.4)	(b6,y6) (1+,2+) (0.03,0.05)	(b7,y5) (1+,2+) (0.04,0.04)	(b8,y4) (1+,2+) (-0.07,0.23)	--	(b10,y2) (2+,1+) (-0.2,0.21)	--	7	0	0.27		
(NH3)	--	(b2,(NH3)) (1+,2+) (-0.31,0.12)	--	--	(b5,(NH3)) (1+,2+) (-0.1,-0.14)	(b6,(NH3)) (1+,2+) (0.1,-0.19)	((NH3),y5) (2+,1+) (0.03,0.11)	((NH3),y4) (1+,2+) (-0.16,-0.05)	((NH3),y3) (2+,1+) (-0.11,0.18)	((NH3),y2) (2+,1+) (-0.16,0.04)	--	7	0	0.24		
(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
a	--	(a2,y10) (1+,2+) (-0.38,0.14)	--	--	(a5,y7) (2+,1+) (-0.1,0.19)	(a6,y6) (2+,1+) (-0.02,0.08)	--	--	--	--	--	3	0	0.3		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	(2(H2O),y4) (2+,1+) (0.24,-0.25)	--	--	--	1	0	0.49		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	(2(NH3),y5) (2+,1+) (-0.49,0.06)	--	--	--	--	1	0	0.56		
Col_Count	0	3	1	0	3	3	3	1	2	0	19	0	0	0.27	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



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

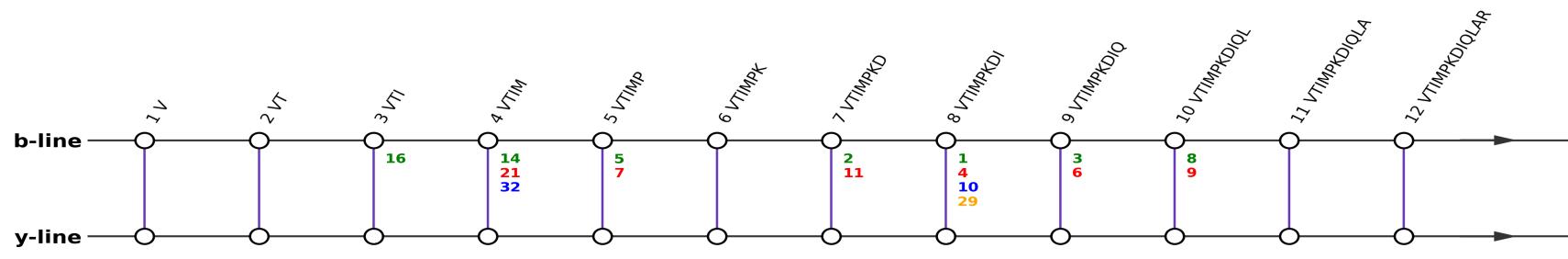
Table ME9_3+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b6	nan	372.13	372.18	-0.05	y6	nan	794.48	794.42	0.06	1538.74
2	usable	a6	nan	358.15	358.17	-0.02	y6	nan	794.5	794.42	0.08	1510.8
3	usable	b7	nan	429.31	429.2	0.11	y5	nan	680.44	680.38	0.06	1539.06
4	usable	y6	nan	397.74	397.71	0.03	b6	nan	743.4	743.35	0.05	1538.88
5	usable	b8	(NH3)	477.27	477.23	0.04	y4	nan	567.19	567.29	-0.1	1521.73
6	usable	a2	nan	215.72	216.1	-0.38	y10	nan	647.47	647.33	0.14	1510.66
7	usable	y5	nan	340.73	340.69	0.04	b7	nan	857.43	857.39	0.04	1538.89
8	usable	b2	nan	243.78	244.11	-0.33	y10	nan	647.64	647.33	0.31	1539.06
9	usable	b7	2(NH3)	411.68	412.17	-0.49	y5	nan	680.44	680.38	0.06	1503.8
10	usable	y3	nan	420.11	420.22	-0.11	b9	(NH3)	550.94	550.76	0.18	1521.99
11	usable	y4	nan	283.99	284.15	-0.16	b8	(NH3)	953.4	953.45	-0.05	1521.38
12	internal_acid	bi(4-6)	(H2O)-(CH3NHCH3)	380.45	379.15	1.3	y6	2(NH3)	760.33	760.37	-0.04	1521.23
13	rare_mode	y2	(NH3)	158.49	158.59	-0.1	a7	(CH3NHCH3)	784.36	784.32	0.04	1727.21
14	usable	a6	(H2O)	349.07	349.17	-0.1	y6	nan	794.91	794.42	0.49	1493.05
15	usable	b8	nan	485.73	485.74	-0.01	y4	nan	567.34	567.29	0.05	1538.8
16	internal_acid	y4	nan	567.37	567.29	0.08	ai(2-8)	(CH3NHCH3)	840.47	839.38	1.09	1407.84
17	usable	b7	(NH3)	420.72	420.69	0.03	y5	nan	680.49	680.38	0.11	1521.93
18	usable	y2	nan	333.03	333.19	-0.16	b10	(NH3)	594.32	594.28	0.04	1521.67
19	non_complementary	b5	(H2O)	596.32	596.29	0.03	y6	nan	794.51	794.42	0.09	1390.83
20	internal_acid	bi(7-8)	nan	227.68	227.13	0.55	b6	nan	743.35	743.35	0.0	1714.38
21	internal_acid	bi(2-2)	(H2O)	169.35	168.07	1.28	y10	nan	647.73	647.33	0.4	1464.81
22	usable	y4	nan	284.08	284.15	-0.07	b8	nan	970.7	970.47	0.23	1538.86
23	internal_acid	b4	2(NH3)-(CH3NH2)	420.11	420.17	-0.06	ai(5-9)	(HCOOH)	559.55	558.26	1.29	1539.21
24	usable	b5	nan	307.53	307.66	-0.13	y7	nan	923.86	923.46	0.4	1538.92
25	usable	b3	nan	301.02	301.13	-0.11	y9	nan	619.06	618.82	0.24	1539.14

26	usable	y6	(NH3)	389.3	389.2	0.1	b6	nan	743.16	743.35	-0.19	1521.76
27	usable	b8	2(H2O)	467.97	467.73	0.24	y4	nan	567.04	567.29	-0.25	1502.98
28	usable	b2	nan	243.8	244.11	-0.31	y10	(NH3)	638.94	638.82	0.12	1521.68
29	internal_acid	ai(7-10)	2(H2O)	199.71	199.1	0.61	b6	nan	743.49	743.35	0.14	1686.69
30	internal_acid	ai(2-5)	2(NH3)-(CH3NH2)	232.69	232.09	0.6	y7	2(H2O)-(HCOH)	857.42	857.43	-0.01	1322.8
31	usable	a5	nan	293.55	293.65	-0.1	y7	nan	923.65	923.46	0.19	1510.75
32	rare_mode	y4	nan	567.35	567.29	0.06	a7	(CH3NHCH3)	784.36	784.32	0.04	1351.71
33	usable	y2	nan	332.99	333.19	-0.2	b10	nan	603.0	602.79	0.21	1538.99
34	usable	a2	(H2O)	198.41	198.09	0.32	y10	nan	647.43	647.33	0.1	1493.27
35	internal_acid	bi(6-11)	2(H2O)	371.1	370.67	0.43	b5	(CH3NH2)	582.47	583.26	-0.79	1536.04
36	unclear	???	nan	241.79	nan	nan	???	nan	581.32	nan	nan	1404.43
37	usable	y3	nan	420.13	420.22	-0.09	a9	(NH3)	536.83	536.76	0.07	1493.79
38	non_complementary	y3	nan	420.2	420.22	-0.02	b8	(NH3)	953.42	953.45	-0.03	1373.62
39	unclear	???	nan	241.95	nan	nan	???	nan	483.97	nan	nan	1209.89
40	unclear	???	nan	557.35	nan	nan	???	nan	794.41	nan	nan	1351.76
41	rare_mode	y2	(NH3)	158.65	158.59	0.06	a7	(NH3)-(CH3NHCH3)	767.46	767.3	0.16	1693.57
42	rare_mode	y4	(NH3)-(HCOH)	260.84	260.63	0.21	b7	nan	857.43	857.39	0.04	1379.11
43	unclear	???	nan	228.71	nan	nan	???	nan	647.46	nan	nan	1523.63
44	unclear	???	nan	183.73	nan	nan	???	nan	619.13	nan	nan	1421.99
45	internal_acid	ai(4-7)	2(H2O)-(CH3NH2)	462.33	461.19	1.14	y5	2(H2O)-(HCOH)	614.47	614.34	0.13	1539.13
46	usable	y2	nan	333.2	333.19	0.01	a10	(NH3)	580.36	580.27	0.09	1493.92
47	internal_acid	bi(3-6)	(H2O)	241.69	241.12	0.57	y6	nan	794.36	794.42	-0.06	1277.74
48	usable	a2	nan	215.84	216.1	-0.26	y10	(NH3)	638.76	638.82	-0.06	1493.36
49	usable	y7	(NH3)	453.62	453.72	-0.1	b5	nan	614.16	614.3	-0.14	1521.4
50	internal_acid	ai(2-6)	(CH3NH2)	313.84	313.64	0.2	y6	nan	794.64	794.42	0.22	1422.32

ME14_2+:[VTIMPK(Ac)DIQLAR+2H]2+

Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR



	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+) (-0.47, -0.12) 14	(b5,y7) (1+, 1+) (0.04, -0.07) 5	--	(b7,y5) (1+, 1+) (0.03, -0.07) 2	(b8,y4) (1+, 1+) (0.03, -0.06) 1	(b9,y3) (1+, 1+) (-0.14, 0.12) 3	(b10,y2) (1+, 1+) (-0.19, -0.17) 8	--	6	0	0.25		
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(b8,(NH3)) (1+, 1+) (-0.27, -0.13) 10	--	--	--	1	0	0.4		
(H2O)	--	--	(H2O),y9 (1+, 1+) (-0.43, -0.19) 16	(H2O),y8 (1+, 1+) (-0.39, 0.33) 32	(H2O),y7 (1+, 1+) (-0.1, 0.13) 7	--	(H2O),y5 (1+, 1+) (0.13, 0.01) 11	(H2O),y4 (1+, 1+) (0.03, -0.02) 4	(H2O),y3 (1+, 1+) (-0.16, 0.12) 6	(H2O),y2 (1+, 1+) (-0.25, 0.25) 9	--	7	0	0.36		
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	-0.33(19)	
a	--	--	--	(a4,y8) (1+, 1+) (-0.45, -0.26) 21	--	--	--	(a8,y4) (1+, 1+) (0.06, -0.09) 29	--	--	--	2	0	0.43		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	0.53(41)	
Col_Count	0	0	1	3	2	0	2	4	2	2	0	16	2	0.21	nan	
Ion Mass	(100.08, 1327.74)	(201.12, 1226.69)	(314.21, 1113.61)	(445.25, 982.57)	(542.3, 885.52)	(712.41, 715.41)	(827.43, 600.38)	(940.52, 487.3)	(1068.58, 359.24)	(1181.66, 246.16)	(1252.7, 175.12)	0	0	0.0	0	



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

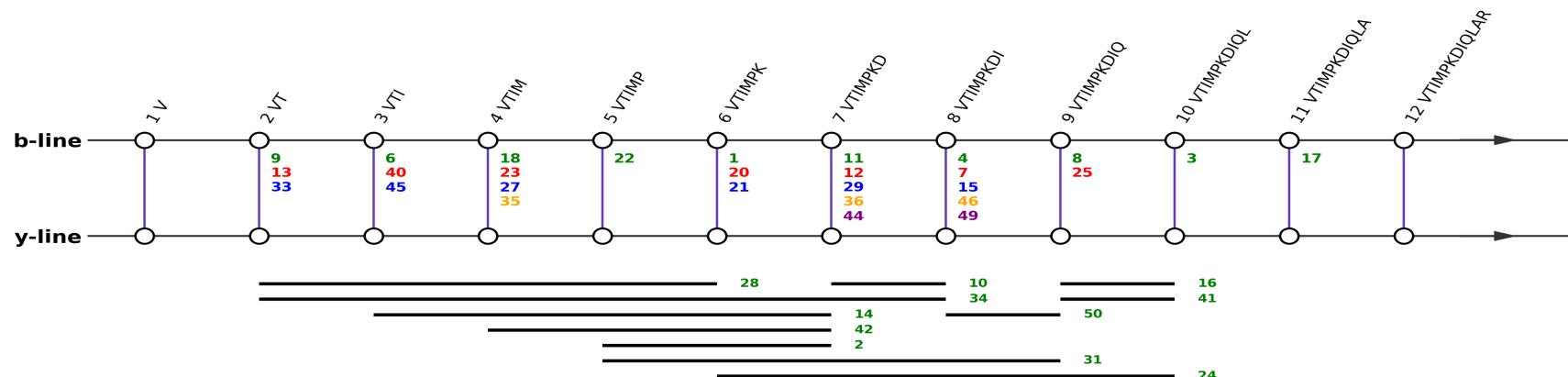
Table ME14_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y4	nan	487.33	487.3	0.03	b8	nan	940.46	940.52	-0.06	1427.79
2	usable	y5	nan	600.41	600.38	0.03	b7	nan	827.36	827.43	-0.07	1427.77
3	usable	y3	nan	359.1	359.24	-0.14	b9	nan	1068.7	1068.58	0.12	1427.8
4	usable	y4	nan	487.33	487.3	0.03	b8	(H ₂ O)	922.49	922.51	-0.02	1409.82
5	usable	b5	nan	542.34	542.3	0.04	y7	nan	885.45	885.52	-0.07	1427.79
6	usable	y3	nan	359.08	359.24	-0.16	b9	(H ₂ O)	1050.69	1050.57	0.12	1409.77
7	usable	b5	(H ₂ O)	524.19	524.29	-0.1	y7	nan	885.65	885.52	0.13	1409.84
8	usable	y2	nan	245.97	246.16	-0.19	b10	nan	1181.49	1181.66	-0.17	1427.46
9	usable	y2	nan	245.91	246.16	-0.25	b10	(H ₂ O)	1163.9	1163.65	0.25	1409.81
10	usable	y4	(NH ₃)	470.0	470.27	-0.27	b8	nan	940.39	940.52	-0.13	1410.39
11	usable	y5	nan	600.51	600.38	0.13	b7	(H ₂ O)	809.43	809.42	0.01	1409.94
12	internal_acid	bi(5-7)	nan	383.02	382.19	0.83	y5	nan	600.43	600.38	0.05	1366.47
13	non_complementary	y5	nan	600.46	600.38	0.08	b6	(H ₂ O)	694.37	694.4	-0.03	1294.83
14	usable	b4	nan	444.78	445.25	-0.47	y8	nan	982.45	982.57	-0.12	1427.23
15	rare_mode	b5	(CH ₃ CH ₂ SCH ₃)	466.06	466.27	-0.21	y7	nan	885.51	885.52	-0.01	1351.57
16	usable	b3	(H ₂ O)	295.77	296.2	-0.43	y9	nan	1113.42	1113.61	-0.19	1409.19
17	internal_acid	y3	nan	359.17	359.24	-0.07	bi(5-9)	nan	624.25	623.33	0.92	1342.59
18	unclear	???	nan	514.19	nan	nan	???	nan	886.54	nan	nan	1400.73
19	unclear	???	nan	324.07	nan	nan	???	nan	1068.38	nan	nan	1392.45
20	unclear	???	nan	490.83	nan	nan	???	nan	981.88	nan	nan	1472.71
21	usable	a4	nan	416.79	417.24	-0.45	y8	nan	982.31	982.57	-0.26	1399.1
22	internal_acid	y5	nan	600.57	600.38	0.19	ai(2-7)	(HCOH)-(HCOH)	640.34	639.33	1.01	1240.91
23	non_complementary	b3	nan	313.63	314.21	-0.58	y8	nan	982.26	982.57	-0.31	1295.89
24	rare_mode	a4	2(H ₂ O)-(HCOH)	351.88	351.21	0.67	y8	nan	982.78	982.57	0.21	1334.66
25	non_complementary	a5	nan	514.27	514.29	-0.02	y5	nan	600.67	600.38	0.29	1629.21

26	rare_mode	b4	(CH3CH2SCH3)	368.88	369.21	-0.33	y8	nan	982.58	982.57	0.01	1351.46
27	unclear	???	nan	491.24	nan	nan	???	nan	556.18	nan	nan	1538.66
28	unclear	???	nan	981.89	nan	nan	???	nan	1112.54	nan	nan	2094.43
29	usable	y4	nan	487.36	487.3	0.06	a8	nan	912.42	912.51	-0.09	1399.78
30	rare_mode	y5	nan	600.53	600.38	0.15	b7	(HCOOH)	781.43	781.43	0.0	1381.96
31	internal_acid	y5	nan	600.61	600.38	0.23	bi(3-7)	nan	626.8	626.31	0.49	1227.41
32	usable	b4	(H2O)	426.85	427.24	-0.39	y8	nan	982.9	982.57	0.33	1409.75
33	internal_acid	y3	nan	359.11	359.24	-0.13	bi(3-9)	nan	868.21	867.45	0.76	1586.43
34	internal_acid	ai(3-5)	2(NH3)	279.86	279.11	0.75	y7	nan	886.17	885.52	0.65	1445.89
35	internal_acid	y4	nan	486.69	487.3	-0.61	bi(4-8)	2(H2O)	591.54	590.29	1.25	1564.92
36	unclear	???	nan	343.87	nan	nan	???	nan	984.03	nan	nan	1327.9
37	unclear	???	nan	210.81	nan	nan	???	nan	983.9	nan	nan	1405.52
38	unclear	???	nan	453.78	nan	nan	???	nan	1181.59	nan	nan	1635.37
39	unclear	???	nan	983.36	nan	nan	???	nan	1146.31	nan	nan	2129.67
40	unclear	???	nan	295.3	nan	nan	???	nan	982.36	nan	nan	1572.96
41	unclear	???	nan	470.01	nan	nan	???	nan	924.28	nan	nan	1394.29
42	unclear	???	nan	487.0	nan	nan	???	nan	1252.55	nan	nan	1739.55
43	unclear	???	nan	359.39	nan	nan	???	nan	683.49	nan	nan	1402.27
44	rare_mode	a3	(NH3)-(HCOH)	238.82	239.16	-0.34	y8	nan	982.64	982.57	0.07	1460.28
45	unclear	???	nan	1069.09	nan	nan	???	nan	1234.24	nan	nan	2303.33
46	unclear	???	nan	565.35	nan	nan	???	nan	1114.42	nan	nan	1679.77
47	unclear	???	nan	286.96	nan	nan	???	nan	1113.99	nan	nan	1400.95
48	unclear	???	nan	331.63	nan	nan	???	nan	417.17	nan	nan	1165.97
49	unclear	???	nan	754.3	nan	nan	???	nan	1113.39	nan	nan	1867.69
50	unclear	???	nan	491.47	nan	nan	???	nan	633.42	nan	nan	1616.36

ME14_3+:[VTIMPK(Ac)DIQLAR+3H]3+

Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR



	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs	
Parent	--	(b2,y10) (1+, 2+) (-0.41, 0.23) 9	--	(b4,y8) (1+, 2+) (-0.27, -0.03) 18	(b5,y7) (1+, 2+) (0.08, 0.03) 22	(b6,y6) (2+, 1+) (-0.05, 0.03) 1	(b7,y5) (2+, 1+) (-0.19, -0.01) 12	(b8,y4) (1+, 2+) (-0.18, -0.12) 15	(b9,y3) (2+, 1+) (-0.1, -0.03) 8	(b10,y2) (2+, 1+) (-0.34, 0.05) 3	(b11,y1) (2+, 1+) (-0.54, 0.14) 17	9	0	0.29		
(NH3)	--	--	--	--	--	(b6,(NH3)) (2+, 1+) (-0.07, 0.01) 21	(b7,(NH3)) (1+, 2+) (-0.21, 0.17) 36	--	--	--	--	2	0	0.23		
(H2O)	--	(b2,(H2O)) (1+, 2+) (-0.43, 0.18) 33	((H2O),y9) (1+, 2+) (-0.19, 0.11) 6	((H2O),y8) (1+, 2+) (-0.17, 0.16) 35	--	((H2O),y6) (2+, 1+) (-0.06, 0.13) 20	((H2O),y5) (1+, 2+) (-0.08, 0.4) 44	((H2O),y4) (1+, 2+) (-0.34, -0.34) 46	((H2O),y3) (2+, 1+) (-0.09, -0.08) 25	--	--	7	0	0.36		
(NH3)-(H2O)	--	--	((H2O),(NH3)) (1+, 2+) (-0.12, -0.01) 45	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
a	--	(a2,y10) (1+, 2+) (-0.48, 0.23) 13	--	(a4,y8) (1+, 2+) (-0.14, 0.03) 23	--	--	--	(a8,y4) (2+, 1+) (-0.01, -0.08) 4	--	--	--	3	0	0.32		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
Col_Count	0	3	2	3	1	3	3	3	2	1	1	22	0	0.17	nan	
Ion Mass	(100.08, 1327.74)	(201.12, 1226.69)	(314.21, 1113.61)	(445.25, 982.57)	(542.3, 885.52)	(712.41, 715.41)	(827.43, 600.38)	(940.52, 487.3)	(1068.58, 359.24)	(1181.66, 246.16)	(1252.7, 175.12)	0	0	0.0	0	



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

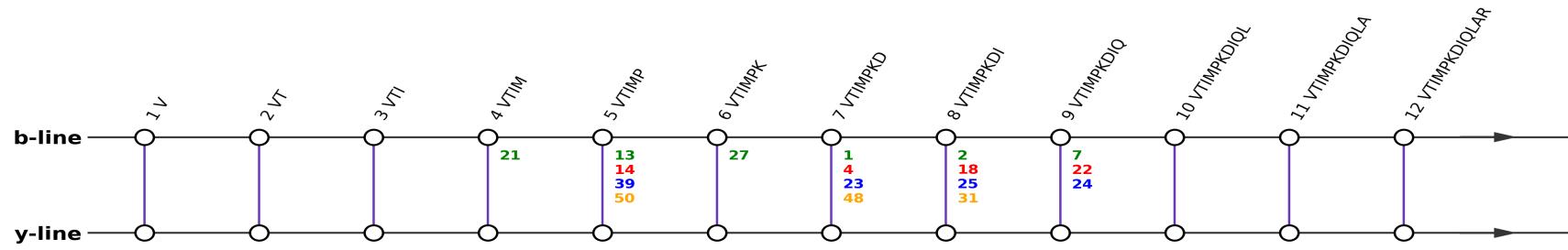
Table ME14_3+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b6	nan	356.66	356.71	-0.05	y6	nan	715.44	715.41	0.03	1428.76
2	internal_acid	bi(5-7)	nan	383.1	382.19	0.91	y5	nan	600.46	600.38	0.08	1366.66
3	usable	y2	nan	245.82	246.16	-0.34	b10	nan	591.38	591.33	0.05	1428.58
4	usable	a8	nan	456.75	456.76	-0.01	y4	nan	487.22	487.3	-0.08	1431.19
5	rare_mode	y3	nan	359.18	359.24	-0.06	a6	(CH3COOH)	624.4	624.37	0.03	1342.76
6	usable	b3	(H2O)	296.01	296.2	-0.19	y9	nan	557.42	557.31	0.11	1410.85
7	usable	y4	(H2O)	234.85	235.15	-0.3	b8	nan	940.45	940.52	-0.07	1410.15
8	usable	y3	nan	359.14	359.24	-0.1	b9	nan	534.76	534.79	-0.03	1428.66
9	usable	b2	nan	200.71	201.12	-0.41	y10	nan	614.08	613.85	0.23	1428.87
10	non_complementary	y4	nan	487.33	487.3	0.03	b7	nan	827.44	827.43	0.01	1314.77
11	usable	b7	nan	414.18	414.22	-0.04	y5	nan	600.38	600.38	-0.0	1428.74
12	usable	y5	nan	300.5	300.69	-0.19	b7	nan	827.42	827.43	-0.01	1428.42
13	usable	a2	nan	172.63	173.11	-0.48	y10	nan	614.08	613.85	0.23	1400.79
14	internal_acid	bi(3-7)	(CH3CH2SCH3)-(CH3COOH)	245.81	245.63	0.18	y5	(H2O)	582.49	582.37	0.12	1410.79
15	usable	y4	nan	243.97	244.15	-0.18	b8	nan	940.4	940.52	-0.12	1428.34
16	non_complementary	y2	nan	245.79	246.16	-0.37	b9	nan	1068.42	1068.58	-0.16	1314.21
17	usable	y1	nan	174.58	175.12	-0.54	b11	nan	626.99	626.85	0.14	1428.56
18	usable	b4	nan	444.98	445.25	-0.27	y8	nan	491.76	491.79	-0.03	1428.5
19	unclear	???	nan	559.34	nan	nan	???	nan	715.45	nan	nan	1274.79
20	usable	b6	(H2O)	347.64	347.7	-0.06	y6	nan	715.54	715.41	0.13	1410.82
21	usable	b6	nan	356.64	356.71	-0.07	y6	(NH3)	698.39	698.38	0.01	1411.67
22	usable	y7	nan	443.34	443.26	0.08	b5	nan	542.33	542.3	0.03	1429.01
23	usable	a4	nan	417.1	417.24	-0.14	y8	nan	491.82	491.79	0.03	1400.74
24	non_complementary	y2	(H2O)	228.63	228.15	0.48	b6	nan	712.43	712.41	0.02	1653.49
25	usable	y3	nan	359.15	359.24	-0.09	b9	(H2O)	525.71	525.79	-0.08	1410.57

26	rare_mode	b4	(CH3CH2SCH3)	369.04	369.21	-0.17	y8	nan	491.96	491.79	0.17	1352.96
27	usable	b4	nan	445.11	445.25	-0.14	y8	(H2O)	483.01	482.78	0.23	1411.13
28	internal_acid	bi(2-6)	(CH3SH)-(HCOH)	267.85	267.66	0.19	y6	nan	715.66	715.41	0.25	1251.36
29	usable	b7	(H2O)	405.31	405.21	0.1	y5	nan	600.32	600.38	-0.06	1410.94
30	rare_mode	b4	nan	445.09	445.25	-0.16	y8	(NH3)-(HCOH)	468.13	468.27	-0.14	1381.35
31	internal_acid	b4	nan	444.93	445.25	-0.32	bi(5-9)	nan	624.41	623.33	1.08	1514.27
32	internal_acid	ai(5-8)	nan	468.09	467.26	0.83	y4	nan	487.09	487.3	-0.21	1423.27
33	usable	b2	nan	200.69	201.12	-0.43	y10	(H2O)	605.02	604.84	0.18	1410.73
34	internal_acid	y4	nan	487.14	487.3	-0.16	bi(2-8)	nan	841.49	840.44	1.05	1328.63
35	usable	b4	(H2O)	427.07	427.24	-0.17	y8	nan	491.95	491.79	0.16	1410.97
36	usable	y5	(NH3)	291.97	292.18	-0.21	b7	nan	827.6	827.43	0.17	1411.54
37	rare_mode	y2	nan	245.92	246.16	-0.24	b7	(CH3COOH)-(HCOH)	737.3	737.4	-0.1	1229.14
38	internal_acid	ai(9-10)	(H2O)	195.81	195.12	0.69	b8	nan	940.89	940.52	0.37	1332.51
39	internal_acid	b2	nan	200.73	201.12	-0.39	ai(3-8)	nan	712.31	711.38	0.93	1625.35
40	usable	a3	2(H2O)	250.74	250.18	0.56	y9	nan	557.39	557.31	0.08	1365.52
41	non_complementary	y2	nan	245.81	246.16	-0.35	b9	(NH3)	1051.61	1051.55	0.06	1543.23
42	internal_acid	bi(4-7)	nan	514.24	513.23	1.01	y5	nan	600.44	600.38	0.06	1628.92
43	internal_acid	ai(4-6)	2(H2O)	335.69	334.17	1.52	y6	nan	715.27	715.41	-0.14	1386.65
44	usable	y5	nan	300.61	300.69	-0.08	b7	(H2O)	809.82	809.42	0.4	1411.04
45	usable	b3	(H2O)	296.08	296.2	-0.12	y9	(NH3)	548.78	548.79	-0.01	1393.64
46	usable	y4	nan	243.81	244.15	-0.34	b8	(H2O)	922.17	922.51	-0.34	1409.79
47	rare_mode	y4	nan	487.01	487.3	-0.29	b5	(CH2S)	496.41	496.31	0.1	1470.43
48	unclear	???	nan	216.78	nan	nan	???	nan	983.52	nan	nan	1417.08
49	usable	y4	(H2O)	234.83	235.15	-0.32	b8	(H2O)	922.4	922.51	-0.11	1392.06
50	internal_acid	bi(8-9)	nan	241.91	241.14	0.77	b7	nan	827.88	827.43	0.45	1311.7

ME16_2+:[VTIMPKDIQLAR+2H]2+

Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR



	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs	Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	--	--	--	(b5,y7) (1+, 1+) (-0.1, 0.23) 14	--	(b7,y5) (1+, 1+) (0.03, 0.01) 1	(b8,y4) (1+, 1+) (0.03, -0.03) 2	(b9,y3) (1+, 1+) (-0.18, -0.13) 7	--	--	4	0	0.18		
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(b8,(NH3)) (1+, 1+) (-0.11, 0.06) 31	(NH3),y3 (1+, 1+) (-0.21, -0.46) 22	--	--	2	0	0.42		
(H2O)	--	--	--	--	((H2O),y7) (1+, 1+) (-0.16, 0.78) 13	((H2O),y6) (1+, 1+) (-0.16, 0.63) 27	((H2O),y5) (1+, 1+) (0.08, 0.05) 4	((H2O),y4) (1+, 1+) (-0.17, 0.14) 18	((H2O)) (1+, 1+) (0.38, 0.11) 24	--	--	5	0	0.53		
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
a	--	--	--	(a4,y8) (1+, 1+) (-0.13, 0.49) 21	(a5,y7) (1+, 1+) (0.01, -0.28) 39	--	--	(a8,y4) (1+, 1+) (0.04, 0.47) 25	--	--	--	3	0	0.48		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	(2(H2O),y5) (1+, 1+) (0.26, 0.62) 23	--	--	--	--	1	0	0.88		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
Col_Count	0	0	0	1	3	1	3	4	3	0	0	15	0	0.36	nan	
Ion Mass	(100.08, 1285.73)	(201.12, 1184.68)	(314.21, 1071.6)	(445.25, 940.56)	(542.3, 843.5)	(670.4, 715.41)	(785.42, 600.38)	(898.51, 487.3)	(1026.57, 359.24)	(1139.65, 246.16)	(1210.69, 175.12)	0	0	0.0	0	0



1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50

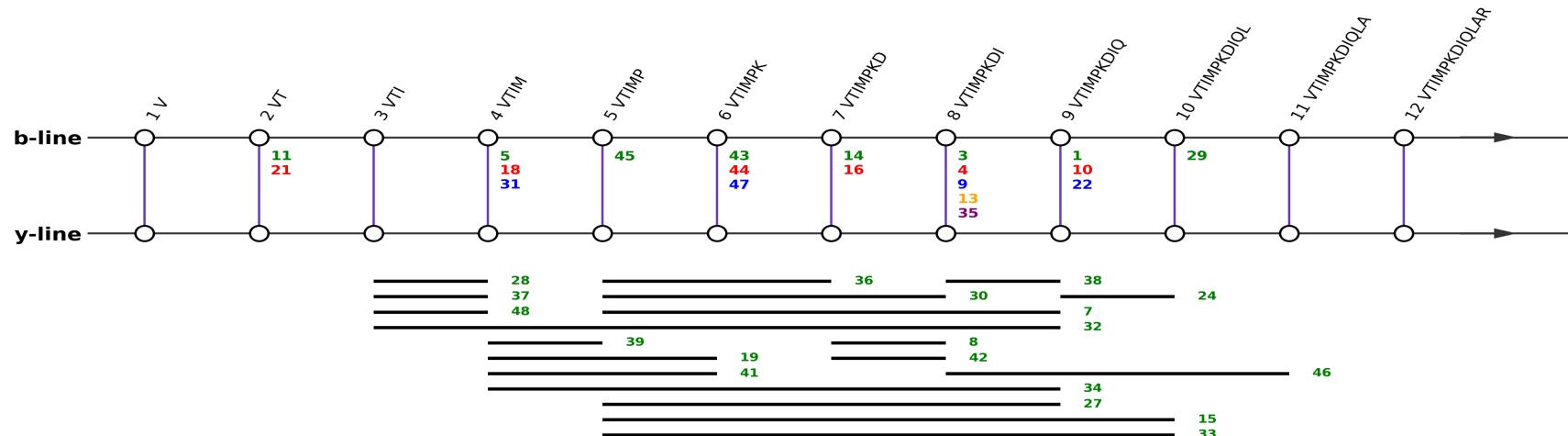
Table ME16_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y5	nan	600.41	600.38	0.03	b7	nan	785.43	785.42	0.01	1385.84
2	usable	y4	nan	487.33	487.3	0.03	b8	nan	898.48	898.51	-0.03	1385.81
3	internal_acid	bi(5-6)	nan	225.83	225.15	0.68	y6	nan	715.46	715.41	0.05	1167.12
4	usable	y5	nan	600.46	600.38	0.08	b7	(H ₂ O)	767.46	767.41	0.05	1367.92
5	non_complementary	b4	2(NH ₃)	411.13	411.19	-0.06	y7	nan	843.26	843.5	-0.24	1254.39
6	internal_acid	bi(5-7)	nan	341.13	340.17	0.96	y5	nan	600.41	600.38	0.03	1282.67
7	usable	y3	nan	359.06	359.24	-0.18	b9	nan	1026.44	1026.57	-0.13	1385.5
8	non_complementary	b3	(H ₂ O)	296.04	296.2	-0.16	y8	nan	940.16	940.56	-0.4	1532.24
9	internal_acid	bi(5-8)	nan	454.36	453.26	1.1	y4	nan	487.51	487.3	0.21	1396.23
10	rare_mode	b5	(CH ₂ S)-(HCOH)	466.3	466.3	-0.0	y7	nan	843.62	843.5	0.12	1309.92
11	internal_acid	y3	nan	359.18	359.24	-0.06	bi(5-9)	nan	582.33	581.32	1.01	1300.69
12	unclear	???	nan	393.13	nan	nan	???	nan	843.93	nan	nan	1237.06
13	usable	b5	(H ₂ O)	524.13	524.29	-0.16	y7	nan	844.28	843.5	0.78	1368.41
14	usable	b5	nan	542.2	542.3	-0.1	y7	nan	843.73	843.5	0.23	1385.93
15	internal_acid	bi(4-6)	nan	357.07	356.19	0.88	y6	nan	715.91	715.41	0.5	1430.05
16	rare_mode	a3	(NH ₃)-(HCOH)	238.73	239.16	-0.43	y8	nan	940.7	940.56	0.14	1418.16
17	rare_mode	b4	(CH ₂ S)-(HCOH)	369.45	369.25	0.2	y8	nan	940.64	940.56	0.08	1310.09
18	usable	y4	nan	487.13	487.3	-0.17	b8	(H ₂ O)	880.64	880.5	0.14	1367.77
19	internal_acid	ai(3-5)	2(NH ₃)	280.08	279.11	0.97	y7	nan	843.39	843.5	-0.11	1403.55
20	internal_acid	bi(5-7)	(H ₂ O)	323.03	322.16	0.87	y5	nan	600.7	600.38	0.32	1524.43
21	usable	a4	nan	417.11	417.24	-0.13	y8	nan	941.05	940.56	0.49	1358.16
22	usable	y3	nan	359.03	359.24	-0.21	b9	(NH ₃)	1009.08	1009.54	-0.46	1368.11
23	usable	y5	nan	600.64	600.38	0.26	b7	2(H ₂ O)	750.02	749.4	0.62	1350.66
24	usable	y3	(H ₂ O)	341.61	341.23	0.38	b9	nan	1026.68	1026.57	0.11	1368.29
25	usable	y4	nan	487.34	487.3	0.04	a8	nan	870.97	870.5	0.47	1358.31

26	unclear	???	nan	426.88	nan	nan	???	nan	844.57	nan	nan	1271.45
27	usable	b6	(H2O)	652.23	652.39	-0.16	y6	nan	716.04	715.41	0.63	1368.27
28	internal_acid	bi(2-4)	nan	345.84	345.17	0.67	y8	nan	940.76	940.56	0.2	1286.6
29	internal_acid	bi(2-4)	(NH3)	329.65	328.15	1.5	y8	nan	940.32	940.56	-0.24	1269.97
30	unclear	???	nan	225.96	nan	nan	???	nan	1139.5	nan	nan	1365.46
31	usable	y4	(NH3)	470.16	470.27	-0.11	b8	nan	898.57	898.51	0.06	1368.73
32	unclear	???	nan	385.09	nan	nan	???	nan	487.2	nan	nan	1359.49
33	non_complementary	b3	nan	313.53	314.21	-0.68	y8	nan	940.36	940.56	-0.2	1253.89
34	unclear	???	nan	210.37	nan	nan	???	nan	715.12	nan	nan	1135.86
35	non_complementary	a3	2(H2O)	250.78	250.18	0.6	y8	nan	940.84	940.56	0.28	1442.4
36	unclear	???	nan	786.32	nan	nan	???	nan	1123.13	nan	nan	1909.45
37	unclear	???	nan	865.24	nan	nan	???	nan	1071.87	nan	nan	1937.11
38	unclear	???	nan	446.56	nan	nan	???	nan	923.81	nan	nan	1370.37
39	usable	a5	nan	514.3	514.29	0.01	y7	nan	843.22	843.5	-0.28	1357.52
40	unclear	???	nan	695.21	nan	nan	???	nan	1184.78	nan	nan	1879.99
41	unclear	???	nan	268.71	nan	nan	???	nan	941.43	nan	nan	1478.85
42	unclear	???	nan	258.91	nan	nan	???	nan	940.04	nan	nan	1457.86
43	unclear	???	nan	357.04	nan	nan	???	nan	923.99	nan	nan	1281.03
44	internal_acid	ai(3-6)	2(NH3)-(CH3CH2SCH3)	331.97	331.17	0.8	y6	nan	716.15	715.41	0.74	1380.09
45	internal_acid	ai(8-11)	(NH3)-(HCOH)	351.35	350.22	1.13	b7	(H2O)	767.28	767.41	-0.13	1469.98
46	internal_acid	y4	(NH3)	470.87	470.27	0.6	bi(4-8)	2(H2O)	549.64	548.28	1.36	1491.38
47	unclear	???	nan	600.73	nan	nan	???	nan	712.87	nan	nan	1313.6
48	usable	y5	nan	600.14	600.38	-0.24	a7	2(NH3)	723.48	723.36	0.12	1323.62
49	unclear	???	nan	470.84	nan	nan	???	nan	1026.91	nan	nan	1497.75
50	usable	a5	(H2O)	496.12	496.28	-0.16	y7	nan	843.38	843.5	-0.12	1339.5

ME16_3+:[VTIMPKDIQLAR+3H]3+

Fragmentation Diagram for: VTIMPKDIQLAR



	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass	Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	(b2,y10) (1+, 2+) (-0.49, 0.16) 11	--	(b4,y8) (1+, 2+) (-0.19, 0.19) 5	(b5,y7) (1+, 2+) (0.18, 0.01) 45	(b6,y6) (2+, 1+) (-0.04, 0.03) 47	(b7,y5) (1+, 2+) (-0.1, 0.19) 16	(b8,y4) (1+, 2+) (-0.29, 0.25) 13	(b9,y3) (2+, 1+) (-0.12, 0.18) 1	--	--	7	0	0.35		
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
(H2O)	--	--	--	(H2O),y8) (1+, 2+) (-0.07, 0.02) 31	--	((H2O),y6) (2+, 1+) (-0.02, 0.19) 43	((H2O),y5) (2+, 1+) (-0.04, 0.01) 14	((H2O),y4) (1+, 2+) (-0.14, -0.1) 9	((H2O),y3) (2+, 1+) (-0.06, 0.22) 10	((H2O),y2) (2+, 1+) (-0.4, 0.15) 29	--	6	0	0.23		
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
a	--	(a2,y10) (1+, 2+) (-0.58, 0.4) 21	--	(a4,y8) (1+, 2+) (-0.18, 0.22) 18	--	--	--	(a8,y4) (2+, 1+) (0.11, 0.08) 3	--	--	--	3	0	0.52		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	(b8,2(H2O)) (1+, 2+) (-0.23, 0.24) 35	--	--	--	1	0	0.48		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	(2,(NH3),y3) (2+, 1+) (-0.47, 0.07) 22	--	--	1	0	0.54		
Col_Count	0	2	0	3	1	2	2	4	3	1	0	18	0	0.3	nan	
Ion Mass	(100.08, 1285.73)	(201.12, 1184.68)	(314.21, 1071.6)	(445.25, 940.56)	(542.3, 843.5)	(670.4, 715.41)	(785.42, 600.38)	(898.51, 487.3)	(1026.57, 359.24)	(1139.65, 246.16)	(1210.69, 175.12)	0	0	0.0	0	



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

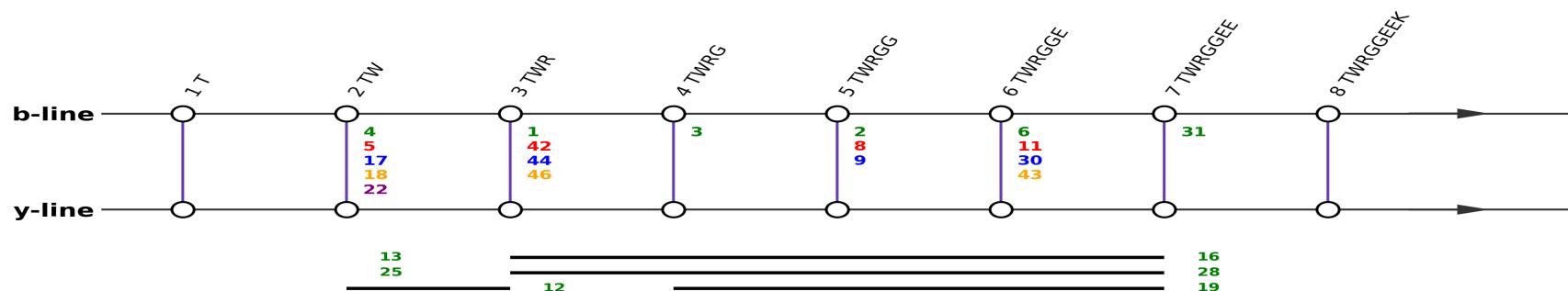
Table ME16_3+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y3	nan	359.12	359.24	-0.12	b9	nan	513.97	513.79	0.18	1387.06
2	internal_acid	ai(5-7)	(NH3)	296.03	295.14	0.89	y5	2(NH3)-(HCOH)	536.45	536.32	0.13	1368.93
3	usable	a8	nan	435.86	435.75	0.11	y4	nan	487.38	487.3	0.08	1410.62
4	usable	b8	nan	449.78	449.76	0.02	y4	nan	487.39	487.3	0.09	1386.95
5	usable	b4	nan	445.06	445.25	-0.19	y8	nan	470.97	470.78	0.19	1387.0
6	internal_acid	ai(3-7)	2(H2O)-(HCOH)	245.99	245.63	0.36	y5	(HCOH)	570.5	570.37	0.13	1386.99
7	internal_acid	y3	nan	359.08	359.24	-0.16	bi(5-9)	nan	582.21	581.32	0.89	1300.37
8	non_complementary	y4	nan	487.4	487.3	0.1	b7	nan	785.66	785.42	0.24	1273.06
9	usable	y4	(H2O)	235.01	235.15	-0.14	b8	nan	898.41	898.51	-0.1	1368.43
10	usable	y3	nan	359.18	359.24	-0.06	b9	(H2O)	505.0	504.78	0.22	1369.18
11	usable	b2	nan	200.63	201.12	-0.49	y10	nan	593.0	592.84	0.16	1386.63
12	rare_mode	a3	2(H2O)	250.93	250.18	0.75	y5	2(NH3)-(HCOH)	536.45	536.32	0.13	1323.83
13	usable	y4	nan	243.86	244.15	-0.29	b8	nan	898.76	898.51	0.25	1386.48
14	usable	b7	(H2O)	384.17	384.21	-0.04	y5	nan	600.39	600.38	0.01	1368.73
15	internal_acid	y2	nan	246.0	246.16	-0.16	bi(5-10)	nan	695.38	694.4	0.98	1187.38
16	usable	y5	nan	300.59	300.69	-0.1	b7	nan	785.61	785.42	0.19	1386.79
17	rare_mode	a5	2(NH3)-(HCOH)	225.81	225.62	0.19	y6	nan	715.47	715.41	0.06	1167.09
18	usable	a4	nan	417.06	417.24	-0.18	y8	nan	471.0	470.78	0.22	1359.06
19	non_complementary	b4	nan	445.1	445.25	-0.15	y6	nan	715.61	715.41	0.2	1605.81
20	rare_mode	b4	(CH3CH2SCH3)	369.1	369.21	-0.11	y8	nan	470.87	470.78	0.09	1310.84
21	usable	a2	nan	172.53	173.11	-0.58	y10	nan	593.24	592.84	0.4	1359.01
22	usable	y3	nan	358.77	359.24	-0.47	b9	2(NH3)	496.83	496.76	0.07	1352.43
23	internal_acid	ai(3-4)	nan	216.79	216.11	0.68	y8	nan	470.88	470.78	0.1	1158.55
24	non_complementary	y2	nan	245.81	246.16	-0.35	b9	nan	1026.5	1026.57	-0.07	1272.31
25	internal_acid	a4	(CH2S)-(HCOH)	341.25	341.24	0.01	ai(5-10)	2(H2O)-(HCOH)	600.92	600.36	0.56	1283.42

26	rare_mode	a3	(H ₂ O)	268.36	268.19	0.17	y5	2(NH ₃)-(HCOH)	536.64	536.32	0.32	1341.64
27	internal_acid	b4	nan	445.13	445.25	-0.12	bi(5-9)	nan	582.23	581.32	0.91	1472.49
28	internal_acid	bi(3-4)	nan	244.83	244.12	0.71	y8	nan	470.96	470.78	0.18	1186.75
29	usable	y2	nan	245.76	246.16	-0.4	b10	(H ₂ O)	561.47	561.32	0.15	1368.7
30	internal_acid	b4	nan	445.05	445.25	-0.2	bi(5-8)	nan	454.11	453.26	0.85	1353.27
31	usable	b4	(H ₂ O)	427.17	427.24	-0.07	y8	nan	470.8	470.78	0.02	1368.77
32	internal_acid	y3	nan	359.15	359.24	-0.09	bi(3-9)	nan	826.51	825.44	1.07	1544.81
33	internal_acid	b4	nan	444.9	445.25	-0.35	bi(5-10)	nan	695.16	694.4	0.76	1584.96
34	internal_acid	y3	nan	359.1	359.24	-0.14	bi(4-9)	nan	713.54	712.36	1.18	1431.74
35	usable	y4	2(H ₂ O)	225.91	226.14	-0.23	b8	nan	898.75	898.51	0.24	1350.57
36	internal_acid	bi(5-7)	nan	340.93	340.17	0.76	b4	nan	444.88	445.25	-0.37	1230.69
37	non_complementary	b3	nan	313.87	314.21	-0.34	y8	nan	470.8	470.78	0.02	1255.47
38	non_complementary	y3	nan	359.97	359.24	0.73	b8	nan	898.28	898.51	-0.23	1258.25
39	non_complementary	b4	nan	445.53	445.25	0.28	y7	nan	843.15	843.5	-0.35	1288.68
40	internal_acid	ai(4-7)	2(NH ₃)-(HCOOH)	182.72	182.08	0.64	y5	2(NH ₃)-(HCOH)	536.47	536.32	0.15	1255.66
41	non_complementary	b4	(H ₂ O)	427.14	427.24	-0.1	y6	nan	715.45	715.41	0.04	1569.73
42	non_complementary	b7	nan	393.49	393.21	0.28	y4	nan	487.9	487.3	0.6	1369.29
43	usable	b6	(H ₂ O)	326.68	326.7	-0.02	y6	nan	715.6	715.41	0.19	1368.96
44	usable	y6	nan	358.51	358.21	0.3	b6	nan	670.08	670.4	-0.32	1387.1
45	usable	y7	nan	422.44	422.26	0.18	b5	nan	542.31	542.3	0.01	1387.19
46	non_complementary	y1	nan	174.88	175.12	-0.24	b8	nan	898.77	898.51	0.26	1248.53
47	usable	b6	nan	335.66	335.7	-0.04	y6	nan	715.44	715.41	0.03	1386.76
48	internal_acid	bi(3-4)	(CH ₃ CH ₂ SCH ₃)	168.77	168.09	0.68	y8	nan	471.2	470.78	0.42	1111.17
49	non_complementary	a4	nan	416.71	417.24	-0.53	y6	nan	715.32	715.41	-0.09	1548.74
50	unclear	???	nan	369.44	nan	nan	???	nan	717.0	nan	nan	1455.88

ME17_2+:[TWR(Me2)GGEEK+2H]2+

Fragmentation Diagram for: TWRGGEEK



	b1y7	b2y6	b3y5	b4y4	b5y3	b6y2	b7y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	(b2,y6) (1+, 1+) (-0.25, 0.05) 4	(b3,y5) (1+, 1+) (-0.15, 0.09) 1	(b4,y4) (1+, 1+) (0.1, 0.12) 3	(b5,y3) (1+, 1+) (-0.13, -0.07) 8	(b6,y2) (1+, 1+) (-0.57, 0.17) 11	--	5	0	0.34	
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
(H2O)	--	((H2O),y6) (1+, 1+) (-0.12, 0.29) 18	(b3,(H2O)) (1+, 1+) (-0.12, 0.22) 44	--	(b5,(H2O)) (1+, 1+) (-0.03, 0.06) 2	--	((H2O),y1) (1+, 1+) (-0.5, 0.15) 31	4	1	0.34	0.06(38)
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
a	--	(a2,y6) (1+, 1+) (-0.02, -0.05) 17	--	--	--	(a6,y2) (1+, 1+) (-0.51, 0.44) 43	--	2	0	0.51	
2(H2O)	--	(b2,2(H2O)) (1+, 1+) (-0.25, 0.02) 22	--	--	(b5,2(H2O)) (1+, 1+) (-0.05, -0.18) 9	--	--	2	0	0.25	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
Col_Count	0	4	2	1	3	2	1	13	1	0.21	nan
Ion Mass	(102.05, 889.45)	(288.13, 703.37)	(472.27, 519.24)	(529.29, 462.22)	(586.31, 405.2)	(715.35, 276.16)	(844.39, 147.11)	0	0	0.0	0



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

Table ME17_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b3	nan	472.12	472.27	-0.15	y5	nan	519.33	519.24	0.09	991.45
2	usable	y3	(H ₂ O)	387.16	387.19	-0.03	b5	nan	586.37	586.31	0.06	973.53
3	usable	y4	nan	462.32	462.22	0.1	b4	nan	529.41	529.29	0.12	991.73
4	usable	b2	nan	287.88	288.13	-0.25	y6	nan	703.42	703.37	0.05	991.3
5	usable	b2	nan	288.02	288.13	-0.11	y6	(H ₂ O)	685.47	685.36	0.11	973.49
6	usable	y2	(H ₂ O)	257.58	258.14	-0.56	b6	nan	714.87	715.35	-0.48	972.45
7	unclear	???	nan	324.56	nan	nan	???	nan	603.2	nan	nan	927.76
8	usable	y3	nan	405.07	405.2	-0.13	b5	nan	586.24	586.31	-0.07	991.31
9	usable	y3	2(H ₂ O)	369.13	369.18	-0.05	b5	nan	586.13	586.31	-0.18	955.26
10	rare_mode	b2	nan	287.89	288.13	-0.24	y6	(CH ₃ NHCH ₃)	658.28	658.32	-0.04	946.17
11	usable	y2	nan	275.59	276.16	-0.57	b6	nan	715.52	715.35	0.17	991.11
12	non_complementary	b2	nan	288.12	288.13	-0.01	y5	nan	519.22	519.24	-0.02	1095.46
13	internal_acid	bi(2-2)	nan	187.0	186.08	0.92	y6	nan	703.71	703.37	0.34	1077.71
14	unclear	???	nan	487.29	nan	nan	???	nan	604.19	nan	nan	1091.48
15	unclear	???	nan	402.33	nan	nan	???	nan	519.27	nan	nan	921.6
16	internal_acid	b2	nan	287.84	288.13	-0.29	bi(3-7)	nan	557.08	556.26	0.82	1132.76
17	usable	a2	nan	260.1	260.12	-0.02	y6	nan	703.32	703.37	-0.05	963.42
18	usable	b2	(H ₂ O)	270.0	270.12	-0.12	y6	nan	703.66	703.37	0.29	973.66
19	internal_acid	bi(4-7)	nan	373.06	372.13	0.93	b3	nan	472.29	472.27	0.02	845.35
20	unclear	???	nan	453.15	nan	nan	???	nan	518.97	nan	nan	972.12
21	unclear	???	nan	287.68	nan	nan	???	nan	615.96	nan	nan	903.64
22	usable	b2	nan	287.88	288.13	-0.25	y6	2(H ₂ O)	667.37	667.35	0.02	955.25
23	unclear	???	nan	800.31	nan	nan	???	nan	818.33	nan	nan	1618.64
24	unclear	???	nan	221.73	nan	nan	???	nan	715.89	nan	nan	937.62
25	internal_acid	bi(2-2)	nan	186.43	186.08	0.35	y6	(H ₂ O)	685.46	685.36	0.1	1058.32

26	unclear	???	nan	380.42	nan	nan	???	nan	729.32	nan	nan	1109.74
27	unclear	???	nan	239.3	nan	nan	???	nan	715.34	nan	nan	954.64
28	internal_acid	a2	nan	260.16	260.12	0.04	bi(3-7)	nan	557.32	556.26	1.06	1077.64
29	rare_mode	b2	nan	287.78	288.13	-0.35	y6	(H2O)-(CH3NHCH3)	640.67	640.3	0.37	928.45
30	usable	y2	nan	275.74	276.16	-0.42	a6	(NH3)	670.9	670.32	0.58	946.64
31	usable	y1	nan	146.61	147.11	-0.5	b7	(H2O)	826.53	826.38	0.15	973.14
32	unclear	???	nan	699.79	nan	nan	???	nan	733.51	nan	nan	1433.3
33	unclear	???	nan	477.61	nan	nan	???	nan	801.07	nan	nan	1278.68
34	unclear	???	nan	456.83	nan	nan	???	nan	816.67	nan	nan	1273.5
35	internal_acid	ai(2-2)	nan	158.77	158.07	0.7	y6	nan	703.53	703.37	0.16	1021.07
36	unclear	???	nan	240.41	nan	nan	???	nan	316.55	nan	nan	873.51
37	unclear	???	nan	633.94	nan	nan	???	nan	844.98	nan	nan	1478.92
38	unclear	???	nan	427.15	nan	nan	???	nan	546.41	nan	nan	973.56
39	unclear	???	nan	456.67	nan	nan	???	nan	640.65	nan	nan	1097.32
40	unclear	???	nan	628.49	nan	nan	???	nan	863.01	nan	nan	1491.5
41	unclear	???	nan	809.02	nan	nan	???	nan	862.16	nan	nan	1671.18
42	usable	a3	(NH3)	427.76	427.23	0.53	y5	nan	519.17	519.24	-0.07	946.93
43	usable	y2	nan	275.65	276.16	-0.51	a6	nan	687.78	687.34	0.44	963.43
44	usable	b3	nan	472.15	472.27	-0.12	y5	(H2O)	501.45	501.23	0.22	973.6
45	unclear	???	nan	251.34	nan	nan	???	nan	486.63	nan	nan	989.31
46	usable	b3	nan	472.91	472.27	0.64	y5	2(NH3)	485.54	485.19	0.35	958.45
47	unclear	???	nan	362.26	nan	nan	???	nan	843.57	nan	nan	1205.83
48	unclear	???	nan	221.66	nan	nan	???	nan	808.87	nan	nan	1030.53
49	unclear	???	nan	716.16	nan	nan	???	nan	891.51	nan	nan	1607.67
50	unclear	???	nan	352.44	nan	nan	???	nan	817.82	nan	nan	1170.26

ME17_3+:[TWR(Me2)GGEEK+3H]3+

Fragmentation Diagram for: TWRGGEEK

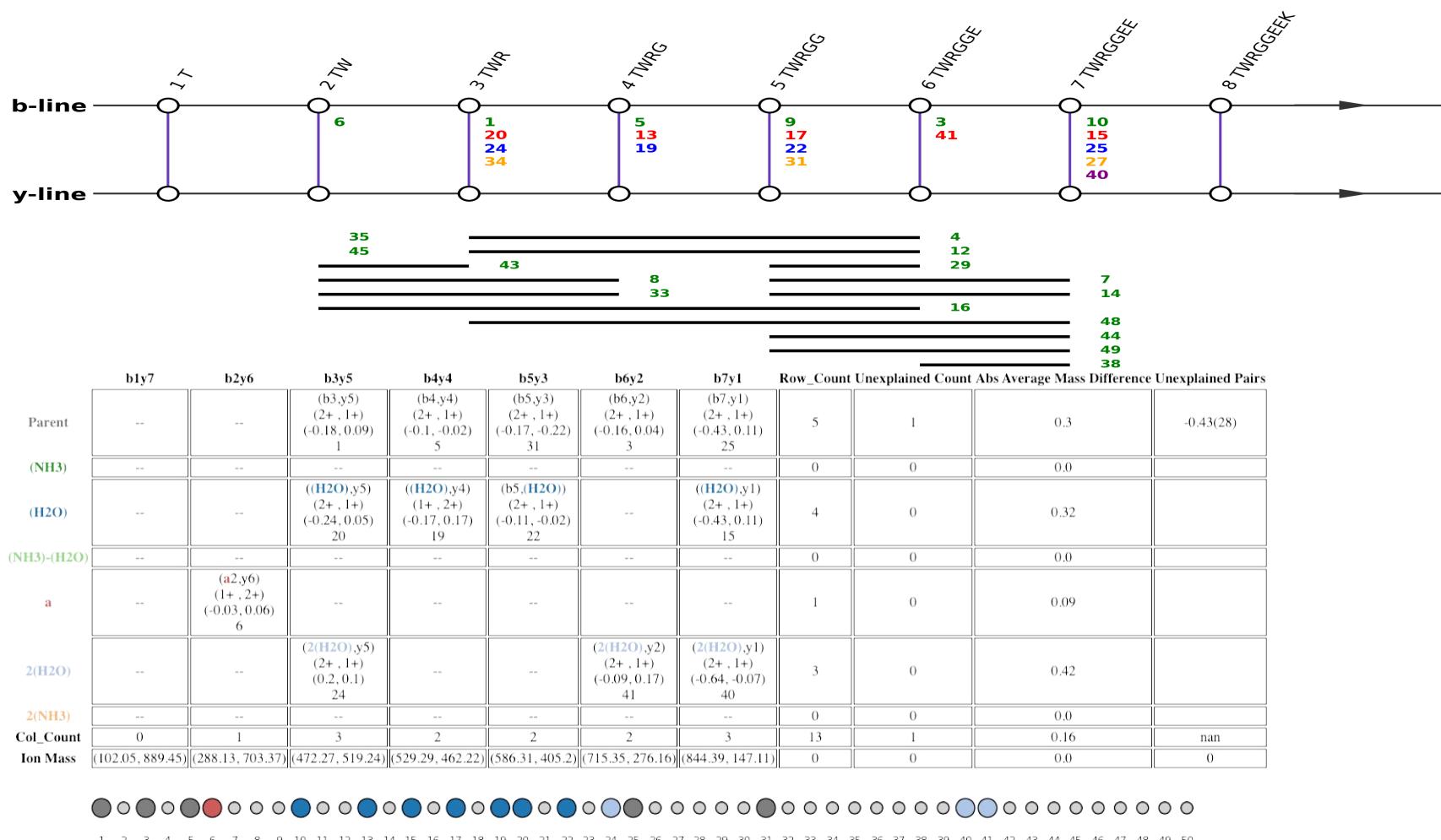


Table ME17_3+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b3	nan	236.46	236.64	-0.18	y5	nan	519.33	519.24	0.09	992.25
2	internal_acid	b2	nan	287.97	288.13	-0.16	ai(3-6)	(NH3)-(CH3NH2)	352.17	351.14	1.03	992.31
3	usable	y2	nan	276.0	276.16	-0.16	b6	nan	358.22	358.18	0.04	992.44
4	internal_acid	y2	nan	275.96	276.16	-0.2	bi(3-6)	2(NH3)-(CH3NHCH3)	349.12	348.11	1.01	974.2
5	usable	b4	nan	265.05	265.15	-0.1	y4	nan	462.2	462.22	-0.02	992.3
6	usable	a2	nan	260.09	260.12	-0.03	y6	nan	352.25	352.19	0.06	964.59
7	internal_acid	bi(5-7)	nan	158.68	158.06	0.62	b4	nan	529.34	529.29	0.05	846.7
8	internal_acid	bi(2-4)	2(NH3)	197.76	197.09	0.67	y4	2(H2O)-(HCOOH)	379.75	380.19	-0.44	957.26
9	usable	b5	(H2O)	284.5	284.65	-0.15	y3	(H2O)	387.08	387.19	-0.11	956.08
10	usable	y1	(H2O)	129.42	129.1	0.32	b7	nan	422.56	422.7	-0.14	974.54
11	unclear	???	nan	343.97	nan	nan	???	nan	351.1	nan	nan	1039.04
12	internal_acid	y2	nan	276.01	276.16	-0.15	bi(3-6)	nan	428.14	427.22	0.92	980.16
13	usable	b4	(H2O)	256.0	256.14	-0.14	y4	nan	462.15	462.22	-0.07	974.15
14	internal_acid	bi(5-7)	nan	158.67	158.06	0.61	b4	(H2O)	511.25	511.28	-0.03	828.59
15	usable	y1	nan	146.68	147.11	-0.43	b7	(H2O)	413.81	413.7	0.11	974.3
16	internal_acid	y2	nan	276.05	276.16	-0.11	bi(2-6)	nan	614.19	613.3	0.89	890.24
17	usable	b5	(H2O)	284.45	284.65	-0.2	y3	nan	405.15	405.2	-0.05	974.05
18	internal_acid	ai(2-3)	nan	343.18	342.2	0.98	y5	nan	519.31	519.24	0.07	862.49
19	usable	y4	nan	231.44	231.61	-0.17	b4	(H2O)	511.45	511.28	0.17	974.33
20	usable	b3	(H2O)	227.39	227.63	-0.24	y5	nan	519.29	519.24	0.05	974.07
21	internal_acid	ai(2-2)	nan	158.65	158.07	0.58	y6	(CH3NHCH3)	658.39	658.32	0.07	975.69
22	usable	b5	nan	293.55	293.66	-0.11	y3	(H2O)	387.17	387.19	-0.02	974.27
23	unclear	???	nan	258.02	nan	nan	???	nan	360.25	nan	nan	978.52
24	usable	b3	2(H2O)	218.83	218.63	0.2	y5	nan	519.34	519.24	0.1	957.0
25	usable	y1	nan	146.68	147.11	-0.43	b7	nan	422.81	422.7	0.11	992.3

26	unclear	???	nan	243.89	nan	nan	???	nan	583.42	nan	nan	1071.2
27	usable	y1	(H ₂ O)	129.36	129.1	0.26	b7	(H ₂ O)	413.81	413.7	0.11	956.98
28	unclear	???	nan	128.46	nan	nan	???	nan	431.81	nan	nan	992.08
29	internal_acid	bi(5-6)	nan	186.59	186.06	0.53	b4	(H ₂ O)	511.38	511.28	0.1	884.56
30	internal_acid	ai(2-5)	(H ₂ O)-(CH ₃ NHCH ₃)	197.72	197.09	0.63	y3	2(NH ₃)	370.81	371.14	-0.33	939.34
31	usable	b5	nan	293.49	293.66	-0.17	y3	nan	404.98	405.2	-0.22	991.96
32	unclear	???	nan	117.43	nan	nan	???	nan	352.16	nan	nan	821.75
33	non_complementary	b2	nan	287.75	288.13	-0.38	y4	2(NH ₃)	428.11	428.17	-0.06	1003.61
34	usable	a3	2(NH ₃)	205.31	205.61	-0.3	y5	nan	519.35	519.24	0.11	929.97
35	internal_acid	bi(2-2)	nan	186.66	186.08	0.58	y6	(CH ₃ NHCH ₃)	658.42	658.32	0.1	1031.74
36	unclear	???	nan	275.92	nan	nan	???	nan	654.37	nan	nan	930.29
37	non_complementary	a2	(H ₂ O)	242.05	242.11	-0.06	y4	nan	462.22	462.22	0.0	946.32
38	non_complementary	y1	nan	147.54	147.11	0.43	b6	nan	715.4	715.35	0.05	1010.48
39	rare_mode	a2	(HCOH)	230.81	230.11	0.7	y5	2(NH ₃)	485.42	485.19	0.23	947.04
40	usable	y1	nan	146.47	147.11	-0.64	b7	2(H ₂ O)	404.62	404.69	-0.07	955.71
41	usable	y2	nan	276.07	276.16	-0.09	b6	2(H ₂ O)	340.34	340.17	0.17	956.75
42	rare_mode	b3	(H ₂ O)-(HCOH)	212.85	212.63	0.22	y5	2(NH ₃)	485.29	485.19	0.1	910.99
43	internal_acid	bi(2-3)	(NH ₃)	177.74	177.1	0.64	y5	nan	519.0	519.24	-0.24	874.48
44	internal_acid	bi(5-7)	2(NH ₃)-(HCOOH)	118.33	118.03	0.3	a4	2(NH ₃)-(HCOH)	436.7	437.21	-0.51	991.73
45	internal_acid	bi(2-2)	nan	186.67	186.08	0.59	y6	nan	352.4	352.19	0.21	891.47
46	rare_mode	b2	(HCOH)	129.47	129.57	-0.1	y5	nan	519.11	519.24	-0.13	1167.69
47	rare_mode	y1	(H ₂ O)	129.46	129.1	0.36	b6	(CH ₃ NH ₂)	342.89	342.66	0.23	815.24
48	internal_acid	y1	nan	146.75	147.11	-0.36	bi(3-7)	nan	557.2	556.26	0.94	850.7
49	internal_acid	bi(5-7)	nan	158.49	158.06	0.43	b4	2(H ₂ O)	493.18	493.27	-0.09	1144.85
50	rare_mode	a2	nan	259.95	260.12	-0.17	y5	(NH ₃)-(HCOH)	472.14	472.2	-0.06	992.04

PH15_2+:[SApTPEALAFVR+2H]2+

Fragmentation Diagram for: SATPEALAFVR



	b1y10	b2y9	b3y8	b4y7	b5y6	b6y5	b7y4	b8y3	b9y2	b10y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	--	(b3,y8) (1+, 1+) (-0.23, 0.23) 3	(b4,y7) (1+, 1+) (-0.08, 0.22) 19	(b5,y6) (1+, 1+) (-0.04, 0.12) 2	(b6,y5) (1+, 1+) (0.04, -0.03) 6	(b7,y4) (1+, 1+) (-0.06, 0.07) 11	(b8,y3) (1+, 1+) (-0.09, 0.06) 7	(b9,y2) (1+, 1+) (-0.26, 0.03) 9	--	7	0	0.22	
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
(H2O)	--	--	((H2O),y8) (1+, 1+) (-0.42, -0.34) 41	--	--	--	((H2O),y4) (1+, 1+) (-0.22, 0.02) 24	((H2O),y3) (1+, 1+) (-0.07, 0.04) 12	((H2O),y2) (1+, 1+) (0.4, 0.12) 30	--	4	0	0.41	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
a	--	--	(a3,y8) (1+, 1+) (-0.47, -0.1) 36	--	--	--	--	(a9,y2) (1+, 1+) (-0.47, 0.04) 42	--	2	0	0.54		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
Col_Count	0	0	3	1	1	1	2	2	3	0	13	0	0.17	nan
Ion Mass	(88.04, 1154.56)	(239.04, 1003.56)	(340.09, 902.51)	(437.14, 805.46)	(566.19, 676.41)	(637.22, 605.38)	(750.31, 492.29)	(821.34, 421.26)	(968.41, 274.19)	(1067.48, 175.12)	0	0	0.0	0



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

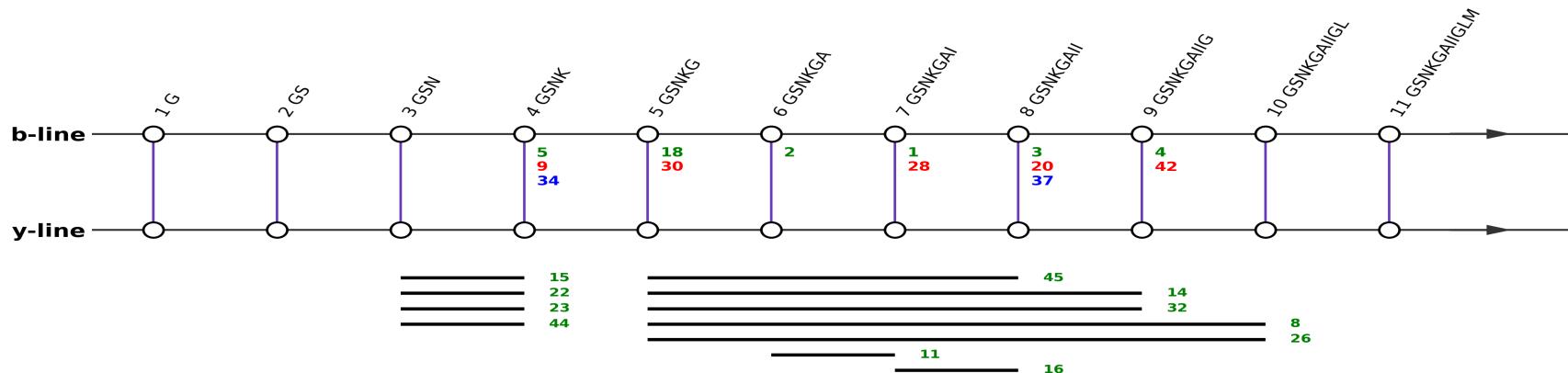
Table PH15_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	rare_mode	y3	nan	421.15	421.26	-0.11	b8	(H3PO4)	723.45	723.37	0.08	1144.6
2	usable	b5	nan	566.15	566.19	-0.04	y6	nan	676.53	676.41	0.12	1242.68
3	usable	b3	nan	339.86	340.09	-0.23	y8	nan	902.74	902.51	0.23	1242.6
4	rare_mode	b6	(H3PO4)	539.32	539.25	0.07	y5	nan	605.48	605.38	0.1	1144.8
5	rare_mode	y4	nan	492.13	492.29	-0.16	b7	(H3PO4)	652.41	652.33	0.08	1144.54
6	usable	y5	nan	605.42	605.38	0.04	b6	nan	637.19	637.22	-0.03	1242.61
7	usable	y3	nan	421.17	421.26	-0.09	b8	nan	821.4	821.34	0.06	1242.57
8	rare_mode	y2	nan	273.87	274.19	-0.32	b9	(H3PO4)	870.5	870.44	0.06	1144.37
9	usable	y2	nan	273.93	274.19	-0.26	b9	nan	968.44	968.41	0.03	1242.37
10	rare_mode	b5	(H3PO4)	468.17	468.21	-0.04	y6	nan	676.64	676.41	0.23	1144.81
11	usable	y4	nan	492.23	492.29	-0.06	b7	nan	750.38	750.31	0.07	1242.61
12	usable	y3	nan	421.19	421.26	-0.07	b8	(H2O)	803.37	803.33	0.04	1224.56
13	usable	y2	nan	273.83	274.19	-0.36	b9	(H2O)	950.46	950.4	0.06	1224.29
14	internal_acid	y3	nan	421.13	421.26	-0.13	ai(2-8)	nan	705.85	705.29	0.56	1126.98
15	rare_mode	b3	(H3PO4)	241.7	242.11	-0.41	y8	nan	902.95	902.51	0.44	1144.65
16	internal_acid	bi(3-6)	(H3PO4)	380.98	300.2	80.78	y5	nan	605.44	605.38	0.06	1367.4
17	non_complementary	a5	(NH3)	521.16	521.15	0.01	y5	nan	605.48	605.38	0.1	1126.64
18	internal_acid	bi(3-4)	nan	278.81	198.1	80.71	y7	nan	805.49	805.46	0.03	1363.11
19	usable	b4	nan	437.06	437.14	-0.08	y7	nan	805.68	805.46	0.22	1242.74
20	internal_acid	bi(4-6)	nan	297.85	297.13	0.72	y5	nan	605.48	605.38	0.1	1201.18
21	internal_acid	y2	nan	273.91	274.19	-0.28	ai(2-9)	nan	852.72	852.36	0.36	1126.63
22	internal_acid	y2	nan	273.8	274.19	-0.39	bi(3-9)	(H3PO4)	712.59	631.39	81.2	1260.19
23	internal_acid	bi(4-5)	nan	226.66	226.1	0.56	y6	nan	676.49	676.41	0.08	1129.81
24	usable	y4	nan	492.07	492.29	-0.22	b7	(H2O)	732.32	732.3	0.02	1224.39
25	rare_mode	a5	(HCOOH)	492.17	492.17	0.0	y6	(HN=C=NH)	634.36	634.39	-0.03	1126.53

26	rare_mode	b3	(HCOH)	309.86	310.08	-0.22	y6	nan	676.51	676.41	0.1	1296.23
27	rare_mode	b4	(H3PO4)	338.82	339.17	-0.35	y7	nan	805.7	805.46	0.24	1144.52
28	internal_acid	bi(3-4)	(H3PO4)	180.41	100.12	80.29	y7	nan	805.55	805.46	0.09	1166.37
29	rare_mode	y2	(H2O)	256.56	256.18	0.38	b9	(H3PO4)	870.49	870.44	0.05	1127.05
30	usable	y2	(H2O)	256.58	256.18	0.4	b9	nan	968.53	968.41	0.12	1225.11
31	internal_acid	bi(3-5)	nan	407.82	327.14	80.68	y6	nan	676.5	676.41	0.09	1084.32
32	rare_mode	y5	2(NH3)-(HCOH)	541.56	541.31	0.25	b6	2(H2O)-(HCOH)	571.53	571.19	0.34	1113.09
33	unclear	???	nan	223.82	nan	nan	???	nan	903.26	nan	nan	1350.9
34	unclear	???	nan	571.54	nan	nan	???	nan	901.55	nan	nan	1473.09
35	rare_mode	a4	(H3PO4)	311.0	311.16	-0.16	y7	2(H2O)	768.7	769.44	-0.74	1390.7
36	usable	a3	nan	311.61	312.08	-0.47	y8	nan	902.41	902.51	-0.1	1214.02
37	rare_mode	y2	(H2O)-(HN=C=NH)	214.1	214.15	-0.05	b9	nan	968.09	968.41	-0.32	1182.19
38	unclear	???	nan	274.53	nan	nan	???	nan	879.45	nan	nan	1153.98
39	internal_acid	bi(3-5)	(H2O)	389.91	309.13	80.78	y6	nan	676.63	676.41	0.22	1066.54
40	internal_acid	bi(3-6)	(H2O)	460.77	380.17	80.6	y5	nan	606.05	605.38	0.67	1066.82
41	usable	b3	(H2O)	321.66	322.08	-0.42	y8	nan	902.17	902.51	-0.34	1223.83
42	usable	y2	nan	273.72	274.19	-0.47	a9	nan	940.44	940.4	0.04	1214.16
43	unclear	???	nan	491.56	nan	nan	???	nan	901.93	nan	nan	1393.49
44	internal_acid	y3	nan	421.1	421.26	-0.16	bi(3-8)	nan	663.51	582.3	81.21	1084.61
45	rare_mode	y2	2(H2O)	238.81	238.17	0.64	b9	(H3PO4)	870.26	870.44	-0.18	1347.88
46	rare_mode	y2	2(NH3)-(HN=C=NH)	197.62	198.11	-0.49	b9	2(H2O)-(HCOH)	902.35	902.38	-0.03	1297.59
47	rare_mode	y4	(HN=C=NH)-(HCOH)	420.57	420.26	0.31	b6	2(H2O)-(HCOH)	571.51	571.19	0.32	1412.65
48	internal_acid	bi(3-6)	nan	478.72	398.18	80.54	y5	nan	605.19	605.38	-0.19	1083.91
49	rare_mode	b3	(H3PO4)-(HCOH)	211.72	212.1	-0.38	y8	nan	902.98	902.51	0.47	1326.42
50	rare_mode	b3	(HCOH)	309.65	310.08	-0.43	y5	nan	605.4	605.38	0.02	1224.7

UN14_2+:[GSNKGAIIGLM+2H]2+

Fragmentation Diagram for: GSNKGAIIGLM



	b1y10	b2y9	b3y8	b4y7	b5y6	b6y5	b7y4	b8y3	b9y2	b10y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs	
Parent	--	--	--	(b4,y7) (1+, 1+) (-0.12, -0.07) 5	(b5,y6) (1+, 1+) (-0.16, -0.06) 18	(b6,y5) (1+, 1+) (-0.05, 0.02) 2	(b7,y4) (1+, 1+) (-0.12, 0.03) 1	(b8,y3) (1+, 1+) (-0.32, -0.05) 3	(b9,y2) (1+, 1+) (-0.35, 0.01) 4	--	6	0	0.23		
(NH3)	--	--	--	--	((NH3),y6) (1+, 1+) (0.29, -0.59) 30	--	--	--	((NH3),y2) (1+, 1+) (-0.3, -0.13) 42	--	2	0	0.65		
(H2O)	--	--	--	(b4,(H2O)) (1+, 1+) (-0.38, -0.09) 34	--	--	((H2O),y4) (1+, 1+) (0.15, 0.09) 28	((H2O),y3) (1+, 1+) (-0.22, -0.05) 37	--	--	3	1	0.29	0.08(12)	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	2	0.0	-0.15(24) -0.14(40)	
a	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0		
Col_Count	0	0	0	2	2	1	2	2	2	0	11	3	0.17	nan	
Ion Mass	(58.03, 1003.56)	(145.06, 916.53)	(259.1, 802.49)	(387.2, 674.39)	(444.22, 617.37)	(515.26, 546.33)	(628.34, 433.25)	(741.43, 320.16)	(798.45, 263.14)	(911.53, 150.06)	0	0	0.0	0	



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

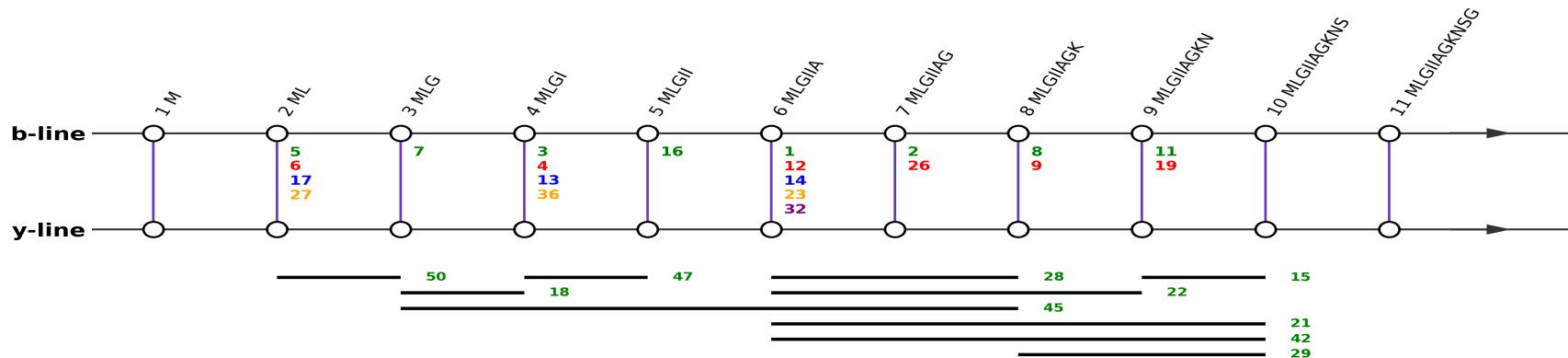
Table UN14_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	y4	nan	433.13	433.25	-0.12	b7	nan	628.37	628.34	0.03	1061.5
2	usable	b6	nan	515.21	515.26	-0.05	y5	nan	546.35	546.33	0.02	1061.56
3	usable	y3	nan	319.84	320.16	-0.32	b8	nan	741.38	741.43	-0.05	1061.22
4	usable	y2	nan	262.79	263.14	-0.35	b9	nan	798.46	798.45	0.01	1061.25
5	usable	b4	nan	387.08	387.2	-0.12	y7	nan	674.32	674.39	-0.07	1061.4
6	unclear	???	nan	355.01	nan	nan	???	nan	557.2	nan	nan	912.21
7	internal_acid	b4	nan	387.13	387.2	-0.07	ai(5-10)	nan	497.39	496.32	1.07	884.52
8	internal_acid	b4	nan	387.09	387.2	-0.11	bi(5-10)	(H ₂ O)	507.37	506.32	1.05	894.46
9	usable	b4	(H ₂ O)	369.36	369.19	0.17	y7	nan	674.37	674.39	-0.02	1043.73
10	unclear	???	nan	370.24	nan	nan	???	nan	542.16	nan	nan	912.4
11	non_complementary	y4	2(H ₂ O)	397.1	397.23	-0.13	b6	nan	515.35	515.26	0.09	912.45
12	unclear	???	nan	355.08	nan	nan	???	nan	688.58	nan	nan	1043.66
13	unclear	???	nan	327.02	nan	nan	???	nan	557.37	nan	nan	1211.41
14	internal_acid	b4	nan	387.07	387.2	-0.13	bi(5-9)	nan	412.11	411.25	0.86	1186.25
15	internal_acid	bi(3-4)	nan	242.73	242.14	0.59	y7	nan	674.14	674.39	-0.25	1159.6
16	non_complementary	y3	2(H ₂ O)	283.7	284.14	-0.44	b7	nan	628.38	628.34	0.04	1195.78
17	unclear	???	nan	330.1	nan	nan	???	nan	582.34	nan	nan	912.44
18	usable	b5	nan	444.06	444.22	-0.16	y6	nan	617.31	617.37	-0.06	1061.37
19	rare_mode	y2	(NH ₃)-(CH ₃ CH ₂ SCH ₃)	170.59	170.08	0.51	b8	nan	741.37	741.43	-0.06	1082.55
20	usable	y3	(H ₂ O)	302.36	302.15	0.21	b8	nan	741.47	741.43	0.04	1043.83
21	unclear	???	nan	241.75	nan	nan	???	nan	557.61	nan	nan	1041.11
22	internal_acid	bi(3-4)	(NH ₃)	225.8	225.11	0.69	y7	nan	674.39	674.39	-0.0	1125.99
23	non_complementary	b3	nan	258.72	259.1	-0.38	y7	nan	674.46	674.39	0.07	933.18
24	unclear	???	nan	352.08	nan	nan	???	nan	674.32	nan	nan	1026.4
25	internal_acid	ai(2-5)	(H ₂ O)	341.12	340.17	0.95	y6	(CH ₂ S)	571.6	571.38	0.22	912.72

26	internal_acid	b4	(NH3)	369.82	370.17	-0.35	bi(5-10)	(H2O)	507.37	506.32	1.05	877.19
27	internal_acid	ai(2-6)	(H2O)	412.16	411.21	0.95	y5	(CH2S)	500.03	500.34	-0.31	912.19
28	usable	y4	nan	433.4	433.25	0.15	b7	(H2O)	610.42	610.33	0.09	1043.82
29	internal_acid	b4	nan	386.85	387.2	-0.35	ai(5-10)	(NH3)	480.25	479.3	0.95	1253.95
30	usable	b5	(NH3)	427.48	427.19	0.29	y6	nan	616.78	617.37	-0.59	1044.26
31	unclear	???	nan	226.45	nan	nan	???	nan	686.98	nan	nan	1139.88
32	internal_acid	b4	(H2O)	368.83	369.19	-0.36	bi(5-9)	nan	412.48	411.25	1.23	1150.14
33	unclear	???	nan	496.92	nan	nan	???	nan	520.83	nan	nan	1017.75
34	usable	b4	nan	386.82	387.2	-0.38	y7	(H2O)	656.29	656.38	-0.09	1043.11
35	unclear	???	nan	355.06	nan	nan	???	nan	537.15	nan	nan	892.21
36	unclear	???	nan	696.3	nan	nan	???	nan	741.36	nan	nan	1437.66
37	usable	y3	nan	319.94	320.16	-0.22	b8	(H2O)	723.36	723.41	-0.05	1043.3
38	unclear	???	nan	340.81	nan	nan	???	nan	798.15	nan	nan	1138.96
39	rare_mode	y4	2(H2O)-(CH3CH2SCH3)	320.72	321.19	-0.47	b7	(HCOH)	597.82	598.33	-0.51	918.54
40	unclear	???	nan	319.96	nan	nan	???	nan	706.45	nan	nan	1026.41
41	unclear	???	nan	196.63	nan	nan	???	nan	670.41	nan	nan	1063.67
42	usable	y2	nan	262.84	263.14	-0.3	b9	(NH3)	781.29	781.42	-0.13	1044.13
43	unclear	???	nan	151.02	nan	nan	???	nan	911.57	nan	nan	1062.59
44	internal_acid	bi(3-4)	2(NH3)	209.11	208.08	1.03	y7	nan	674.37	674.39	-0.02	1092.59
45	internal_acid	y3	(H2O)	302.03	302.15	-0.12	bi(5-8)	(H2O)-(NH3)	320.68	317.04	3.64	943.39
46	unclear	???	nan	238.47	nan	nan	???	nan	629.88	nan	nan	1106.82
47	rare_mode	y2	(CH3SH)	215.72	215.14	0.58	b9	nan	798.35	798.45	-0.1	1014.07
48	unclear	???	nan	741.0	nan	nan	???	nan	826.87	nan	nan	1567.87
49	unclear	???	nan	433.52	nan	nan	???	nan	824.31	nan	nan	1257.83
50	unclear	???	nan	302.02	nan	nan	???	nan	546.22	nan	nan	1150.26

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)	(b3,y8) (1+, 1+) (-0.15, 0.0)	(b4,y7) (1+, 1+) (-0.21, -0.05)	--	(b6,y5) (1+, 1+) (-0.08, -0.04)	(b7,y4) (1+, 1+) (-0.11, 0.03)	(b8,y3) (1+, 1+) (-0.29, -0.04)	(b9,y2) (1+, 1+) (-0.42, 0.16)	--	7	0	0.31	
(NH3)	--	(b2,(NH3)) (1+, 1+) (-0.37, -0.04)	--	(b4,(NH3)) (1+, 1+) (-0.22, -0.01)	--	(b6,(NH3)) (1+, 1+) (0.12, -0.2)	--	--	((NH3),y2) (1+, 1+) (-0.62, 0.09)	--	4	0	0.41	
(H2O)	--	--	--	--	--	((H2O),y5) (1+, 1+) (-0.09, -0.15)	((H2O),y4) (1+, 1+) (-0.14, -0.16)	(b8,(H2O)) (1+, 1+) (-0.0, -0.03)	--	--	3	0	0.19	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	-0.28(33)
a	--	(a2,y9) (1+, 1+) (-0.34, 0.01)	--	(a4,y7) (1+, 1+) (-0.16, -0.0)	--	(a6,y5) (1+, 1+) (0.05, 0.03)	--	--	--	--	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