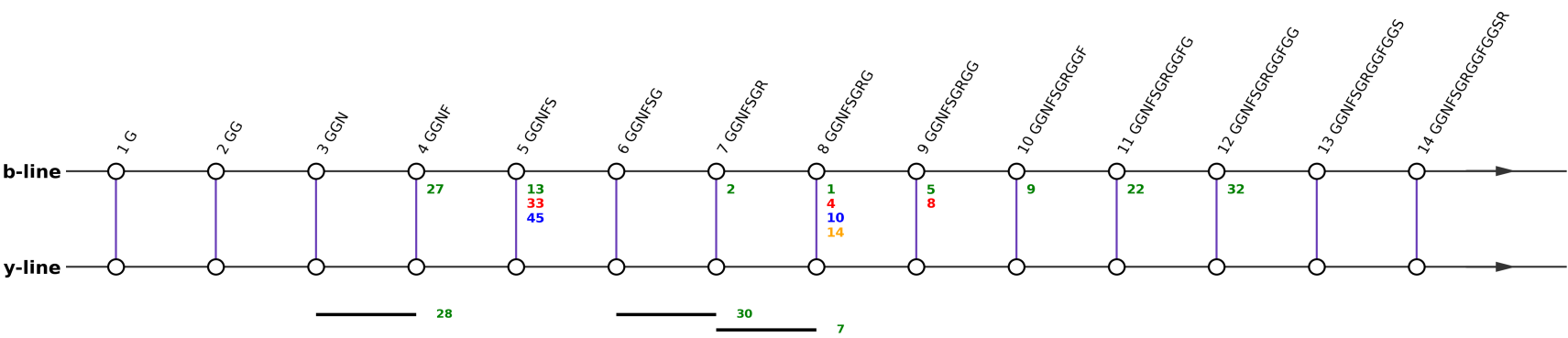


ME8_2+: [GGNFSGR(Me)GGFGGSR+2H]2+

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	--	--	--	--	--	--	(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



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