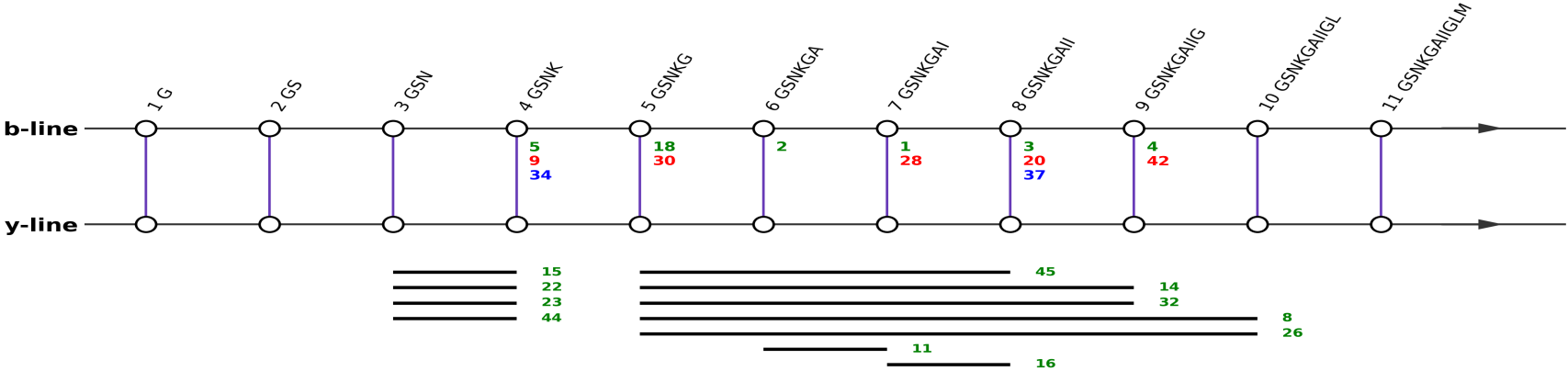


UN14\_2+: [GSNKGAIIGLM+2H]2+

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)	(H2O)	507.37	506.32	1.05	894.46
9	usable	b4	(H2O)	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(H2O)	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(H2O)	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	(NH3)-(CH3CH2SCH3)	170.59	170.08	0.51	b8	nan	741.37	741.43	-0.06	1082.55
20	usable	y3	(H2O)	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)	(NH3)	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)	(H2O)	341.12	340.17	0.95	y6	(CH2S)	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