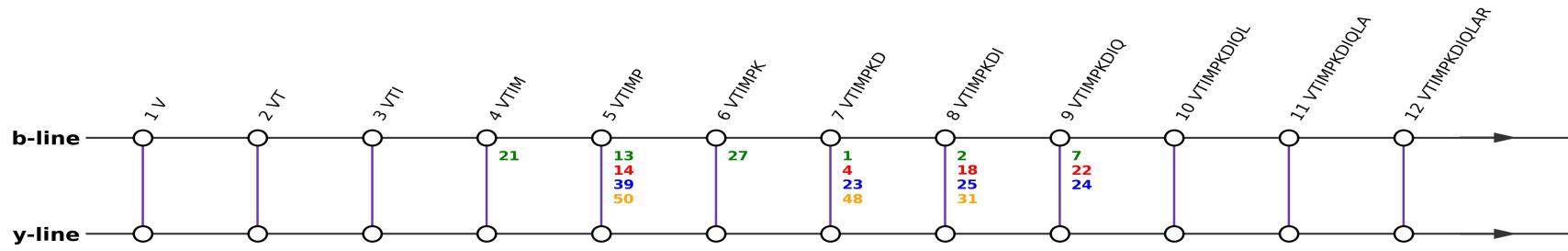


ME16_2+:[VTIMPKDIQLAR+2H]2+

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