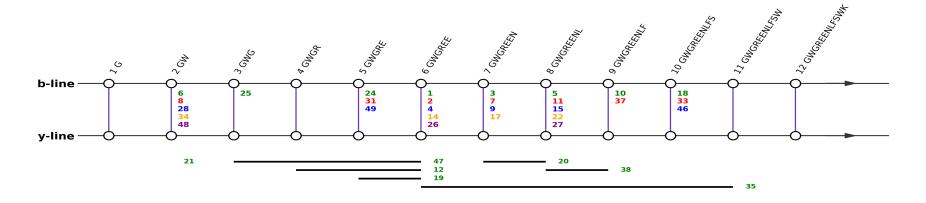
[GWGR(Me2)EENLFSWK+3H]3+

Fragmentation Diagram for: GWGREENLFSWK

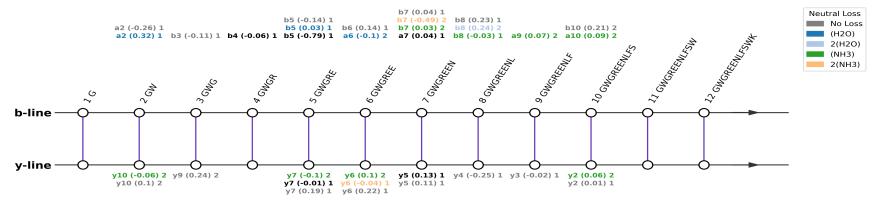


	b1y11	b2y10	b3y9	b4y8	b5y7	b6y6	b7y5	b8y4	b9y3	b10y2	b11y1	Row_Count
Parent		(b2,y10) (1+,2+)-0.02 (8.0)	(b3,y9) (1+,2+) 0.13 (25.0)		(b5,y7) (2+, 1+) 0.27 (24.0)	(b6,y6) (1+,2+) 0.08 (4.0)	(b7,y5) (1+,2+) 0.08 (7.0)	(b8,y4) (1+, 2+) 0.16 (22.0)		(b10,y2) (2+,1+) 0.01 (33.0)		7
(NH3)		(b2,(NH3)) (1+,2+)-0.19 (28.0)			(b5,(NH3)) (1+, 2+) -0.25 (49.0)	(b6,(NH3)) (1+,2+)-0.09 (26.0)	((NH3),y5) (2+, 1+) 0.15 (17.0)	((NH3),y4) (1+,2+)-0.21 (11.0)	((NH3),y3) (2+, 1+) 0.06 (10.0)	((NH3),y2) (2+, 1+) -0.12 (18.0)		7
(H2O)												0
(NH3) + (H2O)												0
a		(a2,y10) (1+, 2+) -0.24 (6.0)			(a5,y7) (2+, 1+) 0.09 (31.0)	(a6,y6) (2+, 1+) 0.06 (2.0)						3
2(H2O)								(2(H2O),y4) (2+, 1+) -0.01 (27.0)				1
2(NH3)							(2(NH3),y5) (2+, 1+) -0.43 (9.0)					1
Col_Count	0	3	1	0	3	3	3	3	1	2	0	19



Not Highlighted (H2O) (H2O) + (NH3) (NH3) (NH3) + (H2O) (NH3O) (NH3O) - 2(H2O) (NH3O) - CH3-NH2 - Parent - a

Fragmentation Diagram for: GWGREENLFSWK



Detailed Data - Table 1

b2	b3	b4	b5	b6	b7	b8	b9	b10
nan	nan	nan	nan	nan	a7-(CH3NHCH3) (0.04) (1, 1)	nan	nan	nan
nan	nan	nan	b5-(CH3NH2) (-0.79) (1, 2)	nan	nan	nan	nan	nan
nan	nan	nan	nan	nan	b7-(NH3) (0.03) (2 , 1)	b8-(NH3) (-0.03) (1 , 1)	a9-(NH3) (0.07) (2 , 1)	a10-(NH3) (0.09) (2 , 1)
nan	nan	b4-2(NH3)-(CH3NH2) (-0.06) (1 , 1)	nan	nan	nan	nan	nan	nan
a2-(H2O) (0.32) (1, 2)	nan	nan	b5-(H2O) (0.03) (1 , 1)	a6-(H2O) (-0.1) (2 , 1)	nan	nan	nan	nan
nan	nan	nan	nan	nan	b7-2(NH3) (-0.49) (2 , 1)	nan	nan	nan
nan	nan	nan	nan	nan	nan	b8-2(H2O) (0.24) (2, 1)	nan	nan

a2 (-0.26) (1 , 2)	b3 (-0.11) (1, 2)	nan	b5 (-0.14) (1 , 2)	b6 (0.14) (1 , 2)	b7 (0.04) (1, 2)	b8 (0.23) (1 , 2)	nan	b10 (0.21) (2 , 1)
--------------------	-------------------	-----	--------------------	-------------------	------------------	-------------------	-----	--------------------

Detailed Data - Table 2

у2	y3 y4		y5		у7	у9	y10
y2-(NH3) (0.06) (2 , 1)	nan	nan	nan	y6-(NH3) (0.1) (2 , 1)	y7-(NH3) (-0.1) (2 , 1)	nan	y10-(NH3) (-0.06) (2 , 1)
nan	nan nan nan		nan	y6-2(NH3) (-0.04) (1 , 1)	nan	nan	nan
nan	nan	nan	y5-2(H2O)-(HCOH) (0.13) (1, 1)	nan	y7-2(H2O)-(HCOH) (-0.01) (1, 2)	nan	nan
y2 (0.01) (1 , 2)	y3 (-0.02) (1 , 1)	y4 (-0.25) (1 , 2)	y5 (0.11) (1 , 2)	y6 (0.22) (1 , 2)	y7 (0.19) (1 , 2)	y9 (0.24) (2 , 1)	y10 (0.1) (2 , 1)

Detailed Data - Table 3

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b6	nan	372.13	372.18	-0.05	у6	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	у5	nan	680.44	680.38	0.06	1539.06
4	usable	у6	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	у5	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	у5	nan	680.44	680.38	0.06	1503.8
10	usable	уЗ	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	у6	2(NH3)	760.33	760.37	-0.04	1521.23

13												
	rare_mode	y2	(NH3)	158.49	158.59	-0.1	а7	(CH3NHCH3)	784.36	784.32	0.04	1727.21
14	usable	a6	(H2O)	349.07	349.17	-0.1	у6	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	у5	nan	680.49	680.38	0.11	1521.93
18	usable	у2	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	у6	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	у7	nan	923.86	923.46	0.4	1538.92
25	usable	b3	nan	301.02	301.13	-0.11	у9	nan	619.06	618.82	0.24	1539.14
26	usable	у6	(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	у7	2(H2O)-(HCOH)	857.42	857.43	-0.01	1322.8
31	usable	a5	nan	293.55	293.65	-0.1	у7	nan	923.65	923.46	0.19	1510.75
32	rare_mode	y4	nan	567.35	567.29	0.06	а7	(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	у3	nan	420.13	420.22	-0.09	a9	(NH3)	536.83	536.76	0.07	1493.79
38	non_complementary	уЗ	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	а7	(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	у5	2(H2O)-(HCOH)	614.47	614.34	0.13	1539.13
46	usable	у2	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	у6	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	у7	(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	у6	nan	794.64	794.42	0.22	1422.32