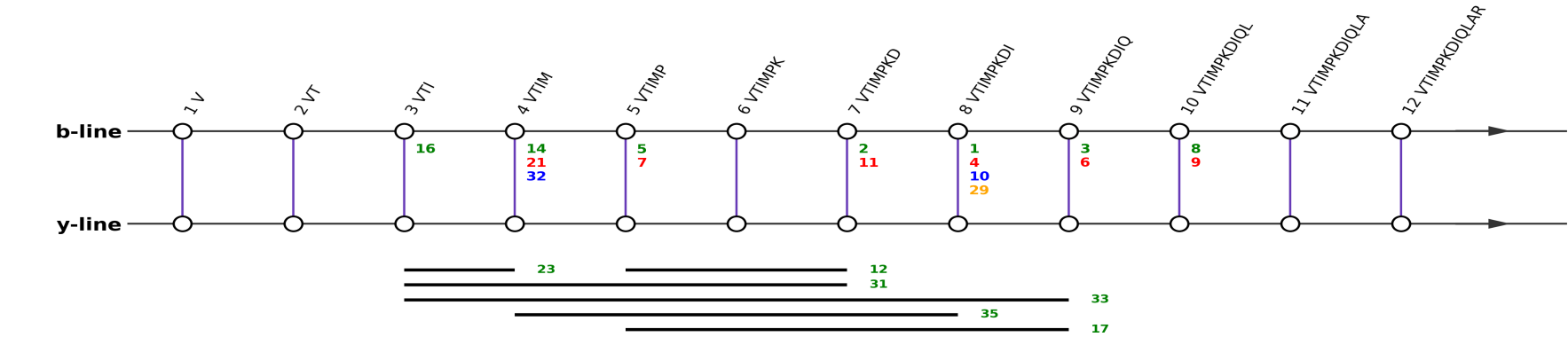


ME14\_2+: [VTIMPK(Ac)DIQLAR+2H]2+

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 (H2O) (H2O)-(NH3) (NH3) (NH3)-(H2O) 2(H2O) 2(NH3) CH3-NH2 Parent a

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	(H2O)	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	(H2O)	1050.69	1050.57	0.12	1409.77
7	usable	b5	(H2O)	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	(H2O)	1163.9	1163.65	0.25	1409.81
10	usable	y4	(NH3)	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	(H2O)	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	(H2O)	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	(CH3CH2SCH3)	466.06	466.27	-0.21	y7	nan	885.51	885.52	-0.01	1351.57
16	usable	b3	(H2O)	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(H2O)-(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