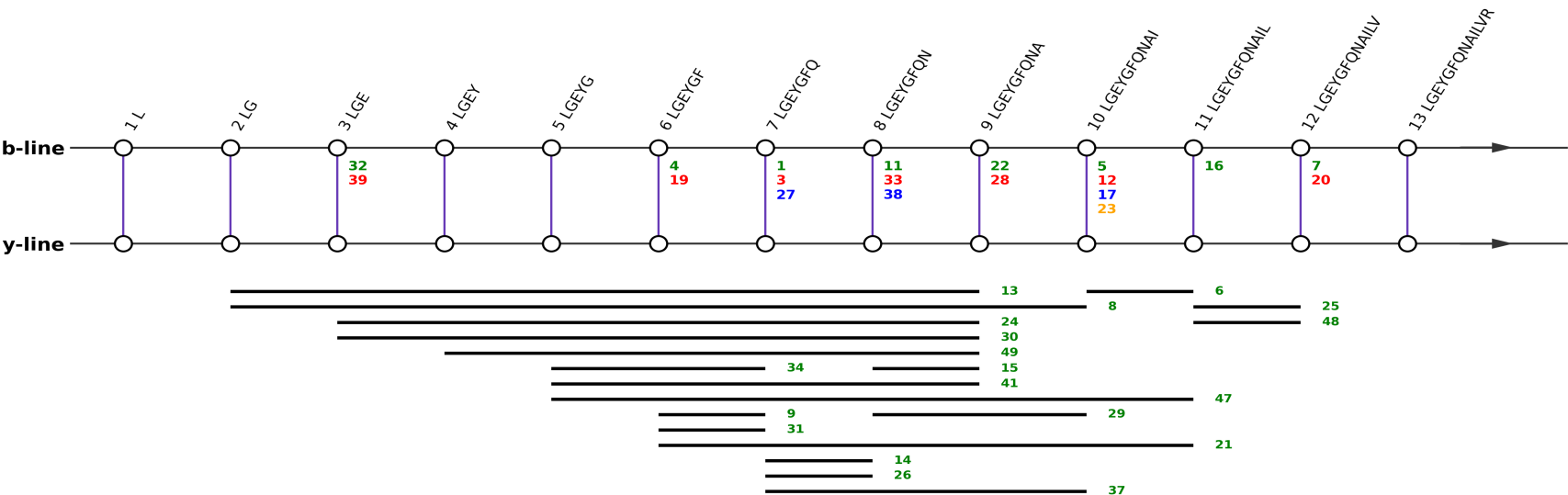


ME4_3+: [LGE(nitro)YGFQNAILVR+3H]3+

Fragmentation Diagram for: LGEYGFQNAILVR



	b1y12	b2y11	b3y10	b4y9	b5y8	b6y7	b7y6	b8y5	b9y4	b10y3	b11y2	b12y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	--	--	--	--	(b6,y7) (1+, 2+) (0.06, 0.08) 4	(b7,y6) (1+, 2+) (-0.04, 0.05) 3	(b8,y5) (1+, 2+) (-0.14, -0.06) 33	(b9,y4) (1+, 2+) (-0.34, -0.03) 22	(b10,y3) (2+, 1+) (-0.12, -0.05) 5	--	(b12,y1) (2+, 1+) (-0.47, -0.04) 7	6	1	0.24	0.56(32)
(NH3)	--	--	--	--	--	(b6,(NH3)) (1+, 2+) (-0.07, 0.11) 19	--	((NH3),y5) (1+, 2+) (-0.14, 0.02) 38	((NH3),y4) (1+, 2+) (-0.18, -0.3) 28	((NH3),y3) (2+, 1+) (-0.17, -0.02) 17	((NH3),y2) (2+, 1+) (-0.12, -0.02) 16	((NH3),y1) (2+, 1+) (-0.52, 0.08) 20	6	1	0.34	-0.16(39)
(H2O)	--	--	--	--	--	--	((H2O),y6) (1+, 2+) (-0.05, 0.29) 27	--	--	--	--	--	1	1	0.34	0.31(35)
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
a	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
Col_Count	0	0	0	0	0	2	2	2	2	2	1	2	13	3	0.13	nan
Ion Mass	(114.09, 1411.7)	(171.11, 1354.67)	(345.14, 1180.65)	(508.2, 1017.58)	(565.23, 960.56)	(712.29, 813.49)	(840.35, 685.44)	(954.4, 571.39)	(1025.43, 500.36)	(1138.52, 387.27)	(1251.6, 274.19)	(1350.67, 175.12)	0	0	0.0	0



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

Table ME4_3+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b7	nan	420.68	420.68	0.0	y6	nan	685.47	685.44	0.03	1526.83
2	rare_mode	b5	(H2O)	274.0	274.11	-0.11	y6	(NH3)-(HN=C=NH)	626.38	626.39	-0.01	1526.76
3	usable	y6	nan	343.18	343.22	-0.04	b7	nan	840.4	840.35	0.05	1526.76
4	usable	y7	nan	407.31	407.25	0.06	b6	nan	712.37	712.29	0.08	1526.99
5	usable	y3	nan	387.15	387.27	-0.12	b10	nan	569.71	569.76	-0.05	1526.57
6	non_complementary	y2	nan	273.94	274.19	-0.25	b10	nan	1138.46	1138.52	-0.06	1412.4
7	usable	y1	nan	174.65	175.12	-0.47	b12	nan	675.8	675.84	-0.04	1526.25
8	internal_acid	y3	nan	387.19	387.27	-0.08	bi(2-10)	nan	1025.41	1024.43	0.98	1412.6
9	non_complementary	y6	nan	685.52	685.44	0.08	b6	nan	712.65	712.29	0.36	1398.17
10	unclear	???	nan	685.6	nan	nan	???	nan	729.52	nan	nan	1415.12
11	usable	b8	nan	477.67	477.7	-0.03	y5	nan	571.75	571.39	0.36	1527.09
12	usable	y3	nan	193.8	194.14	-0.34	b10	(NH3)	1121.15	1121.49	-0.34	1508.75
13	internal_acid	y4	nan	500.2	500.36	-0.16	bi(2-9)	nan	912.43	911.34	1.09	1412.63
14	internal_acid	bi(7-8)	nan	242.83	242.1	0.73	b6	nan	712.35	712.29	0.06	1667.53
15	non_complementary	y4	nan	500.36	500.36	0.0	b8	nan	954.34	954.4	-0.06	1454.7
16	usable	y2	nan	274.07	274.19	-0.12	b11	(NH3)	617.77	617.79	-0.02	1509.61
17	usable	y3	nan	387.1	387.27	-0.17	b10	(NH3)	561.23	561.25	-0.02	1509.56
18	internal_acid	ai(7-10)	(NH3)	382.53	381.19	1.34	b6	nan	712.44	712.29	0.15	1477.5
19	usable	y7	(NH3)	398.67	398.74	-0.07	b6	nan	712.4	712.29	0.11	1509.74
20	usable	y1	nan	174.6	175.12	-0.52	b12	(NH3)	667.4	667.32	0.08	1509.4
21	internal_acid	bi(6-11)	(H2O)-(HCOH)	319.86	319.68	0.18	b5	(NH3)-(HCOH)	518.11	518.19	-0.08	1356.08
22	usable	y4	nan	250.34	250.68	-0.34	b9	nan	1025.4	1025.43	-0.03	1526.08
23	usable	y3	nan	387.14	387.27	-0.13	a10	(NH3)	547.28	547.24	0.04	1481.7
24	internal_acid	y4	nan	500.38	500.36	0.02	bi(3-9)	nan	855.2	854.32	0.88	1355.58
25	non_complementary	y1	nan	174.67	175.12	-0.45	b11	nan	1251.44	1251.6	-0.16	1600.78

26	internal_acid	bi(7-8)	(NH3)	225.78	225.07	0.71	b6	nan	712.2	712.29	-0.09	1650.18
27	usable	y6	nan	343.17	343.22	-0.05	b7	(H2O)	822.63	822.34	0.29	1508.97
28	usable	y4	nan	250.5	250.68	-0.18	b9	(NH3)	1008.11	1008.41	-0.3	1509.11
29	internal_acid	bi(8-10)	nan	298.93	298.16	0.77	b7	nan	840.47	840.35	0.12	1438.33
30	internal_acid	y4	nan	500.18	500.36	-0.18	bi(3-9)	(H2O)	837.58	836.31	1.27	1337.76
31	internal_acid	bi(6-7)	nan	275.79	275.13	0.66	b5	nan	565.2	565.23	-0.03	1406.19
32	usable	b3	nan	299.81	345.14	-45.33	y10	nan	613.77	590.83	22.94	1527.35
33	usable	y5	nan	286.06	286.2	-0.14	b8	nan	954.34	954.4	-0.06	1526.46
34	non_complementary	b5	nan	565.38	565.23	0.15	y6	nan	685.7	685.44	0.26	1251.08
35	unclear	???	nan	325.64	nan	nan	???	nan	857.81	nan	nan	1509.09
36	unclear	???	nan	480.44	nan	nan	???	nan	561.71	nan	nan	1522.59
37	non_complementary	y3	(NH3)	185.67	185.63	0.04	b7	nan	840.79	840.35	0.44	1212.13
38	usable	y5	nan	286.06	286.2	-0.14	b8	(NH3)	937.39	937.37	0.02	1509.51
39	usable	b3	nan	299.81	345.14	-45.33	y10	(NH3)	604.9	582.31	22.59	1509.61
40	unclear	???	nan	291.85	nan	nan	???	nan	518.15	nan	nan	1328.15
41	internal_acid	y4	nan	500.42	500.36	0.06	bi(5-9)	nan	518.33	517.23	1.1	1519.17
42	internal_acid	ai(8-10)	(NH3)	253.8	253.13	0.67	b7	nan	840.43	840.35	0.08	1348.03
43	rare_mode	b6	(H2O)-(HCOH)	332.86	332.64	0.22	y6	nan	685.32	685.44	-0.12	1351.04
44	internal_acid	ai(10-11)	nan	198.67	198.16	0.51	y2	nan	273.99	274.19	-0.2	746.65
45	unclear	???	nan	337.82	nan	nan	???	nan	447.1	nan	nan	1232.02
46	unclear	???	nan	239.79	nan	nan	???	nan	633.99	nan	nan	1507.77
47	internal_acid	y2	nan	274.17	274.19	-0.02	bi(5-11)	nan	744.47	743.4	1.07	1292.81
48	non_complementary	y1	nan	174.58	175.12	-0.54	b11	nan	626.04	626.3	-0.26	1426.66
49	internal_acid	y4	nan	500.6	500.36	0.24	bi(4-9)	nan	726.26	680.29	45.97	1727.46
50	rare_mode	y4	nan	500.5	500.36	0.14	b8	(HCOH)-(HCOH)	894.41	894.37	0.04	1394.91