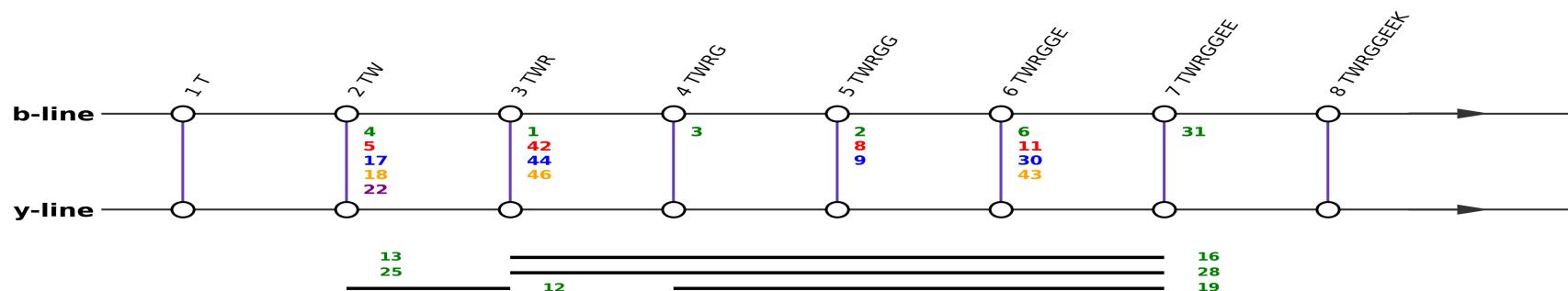


ME17_2+:[TWR(Me2)GGEEK+2H]2+

Fragmentation Diagram for: TWRGGEEK



	b1y7	b2y6	b3y5	b4y4	b5y3	b6y2	b7y1	Row_Count	Unexplained Count	Abs Average Mass Difference	Unexplained Pairs
Parent	--	(b2,y6) (1+, 1+) (-0.25, 0.05) 4	(b3,y5) (1+, 1+) (-0.15, 0.09) 1	(b4,y4) (1+, 1+) (0.1, 0.12) 3	(b5,y3) (1+, 1+) (-0.13, -0.07) 8	(b6,y2) (1+, 1+) (-0.57, 0.17) 11	--	5	0	0.34	
(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
(H2O)	--	((H2O),y6) (1+, 1+) (-0.12, 0.29) 18	(b3,(H2O)) (1+, 1+) (-0.12, 0.22) 44	--	(b5,(H2O)) (1+, 1+) (-0.03, 0.06) 2	--	((H2O),y1) (1+, 1+) (-0.5, 0.15) 31	4	1	0.34	0.06(38)
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
a	--	(a2,y6) (1+, 1+) (-0.02, -0.05) 17	--	--	--	(a6,y2) (1+, 1+) (-0.51, 0.44) 43	--	2	0	0.51	
2(H2O)	--	(b2,2(H2O)) (1+, 1+) (-0.25, 0.02) 22	--	--	(b5,2(H2O)) (1+, 1+) (-0.05, -0.18) 9	--	--	2	0	0.25	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	0	0	0.0	
Col_Count	0	4	2	1	3	2	1	13	1	0.21	nan
Ion Mass	(102.05, 889.45)	(288.13, 703.37)	(472.27, 519.24)	(529.29, 462.22)	(586.31, 405.2)	(715.35, 276.16)	(844.39, 147.11)	0	0	0.0	0



Legend: Not Highlighted (Grey), (H2O) (Blue), (H2O)-(NH3) (Green), (NH3) (Dark Green), (NH3)-(H2O) (Light Green), 2(H2O) (Light Blue), 2(NH3) (Orange), CH3-NH2 (Red), Parent (Dark Grey), a (Red).

Table ME17_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b3	nan	472.12	472.27	-0.15	y5	nan	519.33	519.24	0.09	991.45
2	usable	y3	(H ₂ O)	387.16	387.19	-0.03	b5	nan	586.37	586.31	0.06	973.53
3	usable	y4	nan	462.32	462.22	0.1	b4	nan	529.41	529.29	0.12	991.73
4	usable	b2	nan	287.88	288.13	-0.25	y6	nan	703.42	703.37	0.05	991.3
5	usable	b2	nan	288.02	288.13	-0.11	y6	(H ₂ O)	685.47	685.36	0.11	973.49
6	usable	y2	(H ₂ O)	257.58	258.14	-0.56	b6	nan	714.87	715.35	-0.48	972.45
7	unclear	???	nan	324.56	nan	nan	???	nan	603.2	nan	nan	927.76
8	usable	y3	nan	405.07	405.2	-0.13	b5	nan	586.24	586.31	-0.07	991.31
9	usable	y3	2(H ₂ O)	369.13	369.18	-0.05	b5	nan	586.13	586.31	-0.18	955.26
10	rare_mode	b2	nan	287.89	288.13	-0.24	y6	(CH ₃ NHCH ₃)	658.28	658.32	-0.04	946.17
11	usable	y2	nan	275.59	276.16	-0.57	b6	nan	715.52	715.35	0.17	991.11
12	non_complementary	b2	nan	288.12	288.13	-0.01	y5	nan	519.22	519.24	-0.02	1095.46
13	internal_acid	bi(2-2)	nan	187.0	186.08	0.92	y6	nan	703.71	703.37	0.34	1077.71
14	unclear	???	nan	487.29	nan	nan	???	nan	604.19	nan	nan	1091.48
15	unclear	???	nan	402.33	nan	nan	???	nan	519.27	nan	nan	921.6
16	internal_acid	b2	nan	287.84	288.13	-0.29	bi(3-7)	nan	557.08	556.26	0.82	1132.76
17	usable	a2	nan	260.1	260.12	-0.02	y6	nan	703.32	703.37	-0.05	963.42
18	usable	b2	(H ₂ O)	270.0	270.12	-0.12	y6	nan	703.66	703.37	0.29	973.66
19	internal_acid	bi(4-7)	nan	373.06	372.13	0.93	b3	nan	472.29	472.27	0.02	845.35
20	unclear	???	nan	453.15	nan	nan	???	nan	518.97	nan	nan	972.12
21	unclear	???	nan	287.68	nan	nan	???	nan	615.96	nan	nan	903.64
22	usable	b2	nan	287.88	288.13	-0.25	y6	2(H ₂ O)	667.37	667.35	0.02	955.25
23	unclear	???	nan	800.31	nan	nan	???	nan	818.33	nan	nan	1618.64
24	unclear	???	nan	221.73	nan	nan	???	nan	715.89	nan	nan	937.62
25	internal_acid	bi(2-2)	nan	186.43	186.08	0.35	y6	(H ₂ O)	685.46	685.36	0.1	1058.32

26	unclear	???	nan	380.42	nan	nan	???	nan	729.32	nan	nan	1109.74
27	unclear	???	nan	239.3	nan	nan	???	nan	715.34	nan	nan	954.64
28	internal_acid	a2	nan	260.16	260.12	0.04	bi(3-7)	nan	557.32	556.26	1.06	1077.64
29	rare_mode	b2	nan	287.78	288.13	-0.35	y6	(H2O)-(CH3NHCH3)	640.67	640.3	0.37	928.45
30	usable	y2	nan	275.74	276.16	-0.42	a6	(NH3)	670.9	670.32	0.58	946.64
31	usable	y1	nan	146.61	147.11	-0.5	b7	(H2O)	826.53	826.38	0.15	973.14
32	unclear	???	nan	699.79	nan	nan	???	nan	733.51	nan	nan	1433.3
33	unclear	???	nan	477.61	nan	nan	???	nan	801.07	nan	nan	1278.68
34	unclear	???	nan	456.83	nan	nan	???	nan	816.67	nan	nan	1273.5
35	internal_acid	ai(2-2)	nan	158.77	158.07	0.7	y6	nan	703.53	703.37	0.16	1021.07
36	unclear	???	nan	240.41	nan	nan	???	nan	316.55	nan	nan	873.51
37	unclear	???	nan	633.94	nan	nan	???	nan	844.98	nan	nan	1478.92
38	unclear	???	nan	427.15	nan	nan	???	nan	546.41	nan	nan	973.56
39	unclear	???	nan	456.67	nan	nan	???	nan	640.65	nan	nan	1097.32
40	unclear	???	nan	628.49	nan	nan	???	nan	863.01	nan	nan	1491.5
41	unclear	???	nan	809.02	nan	nan	???	nan	862.16	nan	nan	1671.18
42	usable	a3	(NH3)	427.76	427.23	0.53	y5	nan	519.17	519.24	-0.07	946.93
43	usable	y2	nan	275.65	276.16	-0.51	a6	nan	687.78	687.34	0.44	963.43
44	usable	b3	nan	472.15	472.27	-0.12	y5	(H2O)	501.45	501.23	0.22	973.6
45	unclear	???	nan	251.34	nan	nan	???	nan	486.63	nan	nan	989.31
46	usable	b3	nan	472.91	472.27	0.64	y5	2(NH3)	485.54	485.19	0.35	958.45
47	unclear	???	nan	362.26	nan	nan	???	nan	843.57	nan	nan	1205.83
48	unclear	???	nan	221.66	nan	nan	???	nan	808.87	nan	nan	1030.53
49	unclear	???	nan	716.16	nan	nan	???	nan	891.51	nan	nan	1607.67
50	unclear	???	nan	352.44	nan	nan	???	nan	817.82	nan	nan	1170.26