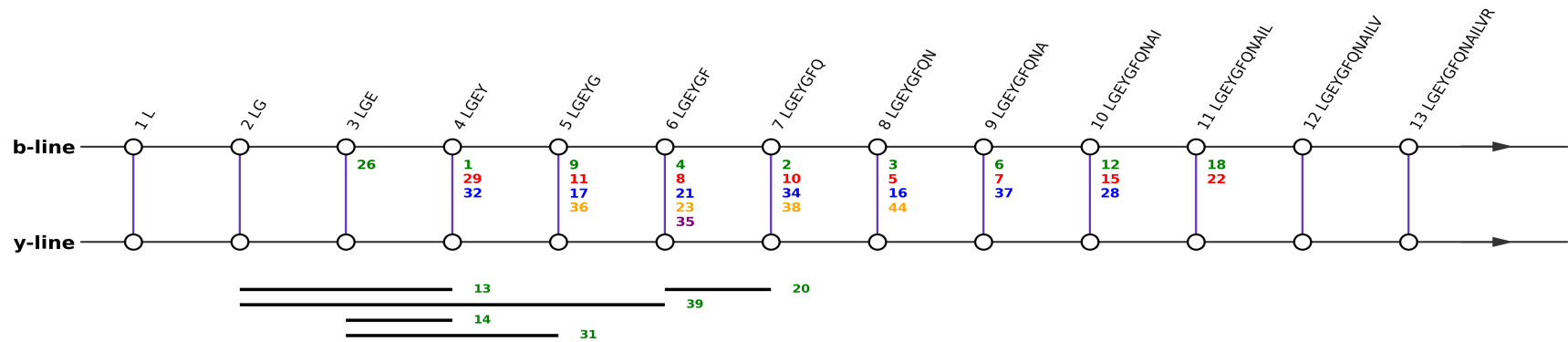


ME4_2+: [LGE(nitro)YGFQNAILVR+2H]2+

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	--	--	--	(b4,y9) (1+ , 1+) (-0.05, 0.16) 1	(b5,y8) (1+ , 1+) (0.05, 0.15) 11	(b6,y7) (1+ , 1+) (0.11, 0.03) 4	(b7,y6) (1+ , 1+) (0.04, 0.07) 2	(b8,y5) (1+ , 1+) (0.03, 0.0) 5	(b9,y4) (1+ , 1+) (0.03, -0.01) 7	(b10,y3) (1+ , 1+) (-0.19, -0.19) 12	(b11,y2) (1+ , 1+) (-0.31, -0.19) 18	--	8	1	0.2	-0.3(26)
(NH3)	--	--	--	(b4,(NH3)) (1+ , 1+) (-0.09, -0.16) 32	(b5,(NH3)) (1+ , 1+) (-0.03, 0.24) 36	(b6,(NH3)) (1+ , 1+) (0.06, -0.05) 23	--	((NH3),y5) (1+ , 1+) (0.03, 0.0) 3	((NH3),y4) (1+ , 1+) (0.01, -0.05) 6	((NH3),y3) (1+ , 1+) (-0.13, -0.38) 15	((NH3),y2) (1+ , 1+) (-0.09, -0.2) 22	--	7	0	0.22	
(H2O)	--	--	--	--	((H2O),y8) (1+ , 1+) (0.09, -0.07) 17	((H2O),y7) (1+ , 1+) (0.08, 0.14) 8	((H2O),y6) (1+ , 1+) (0.38, 0.36) 10	--	--	--	--	--	3	0	0.37	
(NH3)-(H2O)	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0	1	0.0	0.31(24)
a	--	--	--	(a4,y9) (1+ , 1+) (-0.12, 0.42) 29	(a5,y8) (1+ , 1+) (0.07, 0.18) 9	(a6,y7) (1+ , 1+) (-0.4, -0.16) 21	--	--	--	--	--	--	3	0	0.45	
2(H2O)	--	--	--	--	--	--	(2(H2O),y6) (1+ , 1+) (0.17, 0.68) 38	--	--	--	--	--	1	0	0.85	
2(NH3)	--	--	--	--	--	--	--	(2(NH3),y5) (1+ , 1+) (0.17, -0.35) 16	--	(2(NH3),y3) (1+ , 1+) (-0.09, -0.72) 28	--	--	2	0	0.67	
Col_Count	0	0	0	3	4	4	3	3	2	3	2	0	24	2	0.39	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_2+

n	classification	ion1	loss1	mass1	correct_mass1	mass_difference1	ion2	loss2	mass2	correct_mass2	mass_difference2	chosen_sum
1	usable	b4	nan	508.15	508.2	-0.05	y9	nan	1017.74	1017.58	0.16	1525.89
2	usable	y6	nan	685.48	685.44	0.04	b7	nan	840.42	840.35	0.07	1525.9
3	usable	y5	nan	571.42	571.39	0.03	b8	(NH3)	937.37	937.37	0.0	1508.79
4	usable	b6	nan	712.4	712.29	0.11	y7	nan	813.52	813.49	0.03	1525.92
5	usable	y5	nan	571.42	571.39	0.03	b8	nan	954.4	954.4	0.0	1525.82
6	usable	y4	nan	500.37	500.36	0.01	b9	(NH3)	1008.36	1008.41	-0.05	1508.73
7	usable	y4	nan	500.39	500.36	0.03	b9	nan	1025.42	1025.43	-0.01	1525.81
8	usable	b6	(H2O)	694.36	694.28	0.08	y7	nan	813.63	813.49	0.14	1507.99
9	usable	a5	nan	537.28	537.21	0.07	y8	nan	960.74	960.56	0.18	1498.02
10	usable	y6	nan	685.82	685.44	0.38	b7	(H2O)	822.7	822.34	0.36	1508.52
11	usable	b5	nan	565.28	565.23	0.05	y8	nan	960.71	960.56	0.15	1525.99
12	usable	y3	nan	387.08	387.27	-0.19	b10	nan	1138.33	1138.52	-0.19	1525.41
13	internal_acid	bi(2-4)	nan	395.03	394.11	0.92	y9	nan	1018.21	1017.58	0.63	1413.24
14	internal_acid	bi(3-4)	nan	337.89	337.09	0.8	y9	nan	1017.5	1017.58	-0.08	1693.28
15	usable	y3	nan	387.14	387.27	-0.13	b10	(NH3)	1121.11	1121.49	-0.38	1508.25
16	usable	y5	nan	571.56	571.39	0.17	b8	2(NH3)	919.99	920.34	-0.35	1491.55
17	usable	b5	(H2O)	547.3	547.21	0.09	y8	nan	960.49	960.56	-0.07	1507.79
18	usable	y2	nan	273.88	274.19	-0.31	b11	nan	1251.41	1251.6	-0.19	1525.29
19	rare_mode	b5	(HCOOH)	519.66	519.22	0.44	y8	nan	960.68	960.56	0.12	1480.34
20	non_complementary	b6	2(H2O)	676.15	676.27	-0.12	y6	nan	685.45	685.44	0.01	1361.6
21	usable	a6	nan	683.88	684.28	-0.4	y7	nan	813.33	813.49	-0.16	1497.21
22	usable	y2	nan	274.1	274.19	-0.09	b11	(NH3)	1234.37	1234.57	-0.2	1508.47
23	usable	b6	nan	712.35	712.29	0.06	y7	(NH3)	796.42	796.47	-0.05	1508.77
24	unclear	???	nan	500.62	nan	nan	???	nan	990.44	nan	nan	1491.06
25	unclear	???	nan	486.13	nan	nan	???	nan	813.76	nan	nan	1299.89

26	usable	b3	nan	299.82	345.14	-45.32	y10	nan	1225.67	1180.65	45.02	1525.49
27	rare_mode	a6	2(H ₂ O)-(HCOH)	619.0	618.25	0.75	y6	nan	685.46	685.44	0.02	1304.46
28	usable	y3	nan	387.18	387.27	-0.09	b10	2(NH ₃)	1103.74	1104.46	-0.72	1490.92
29	usable	a4	nan	480.07	480.19	-0.12	y9	nan	1018.0	1017.58	0.42	1498.07
30	unclear	???	nan	526.05	nan	nan	???	nan	813.33	nan	nan	1339.38
31	internal_acid	bi(3-5)	(NH ₃)	378.02	377.09	0.93	y8	nan	960.46	960.56	-0.1	1338.48
32	usable	b4	nan	508.11	508.2	-0.09	y9	(NH ₃)	1000.4	1000.56	-0.16	1508.51
33	non_complementary	a4	(NH ₃)	462.96	463.17	-0.21	y8	nan	960.49	960.56	-0.07	1423.45
34	usable	y6	nan	685.37	685.44	-0.07	a7	(NH ₃)	795.36	795.32	0.04	1480.73
35	usable	a6	(NH ₃)	666.95	667.26	-0.31	y7	nan	813.56	813.49	0.07	1480.51
36	usable	b5	nan	565.2	565.23	-0.03	y8	(NH ₃)	943.78	943.54	0.24	1508.98
37	usable	y4	nan	500.53	500.36	0.17	a9	(NH ₃)	980.73	980.4	0.33	1481.26
38	usable	y6	nan	685.61	685.44	0.17	b7	2(H ₂ O)	805.01	804.33	0.68	1490.62
39	internal_acid	bi(2-6)	nan	599.13	598.2	0.93	y7	nan	813.58	813.49	0.09	1412.71
40	unclear	???	nan	583.17	nan	nan	???	nan	813.29	nan	nan	1396.46
41	unclear	???	nan	609.65	nan	nan	???	nan	813.45	nan	nan	1423.1
42	rare_mode	a6	(NH ₃)-(HCOH)	636.87	637.25	-0.38	y7	nan	813.97	813.49	0.48	1450.84
43	unclear	???	nan	435.94	nan	nan	???	nan	960.7	nan	nan	1396.64
44	usable	y5	nan	571.39	571.39	-0.0	a8	(NH ₃)	909.63	909.36	0.27	1481.02
45	rare_mode	y4	nan	500.31	500.36	-0.05	a8	(NH ₃)-(HCOH)	879.37	879.35	0.02	1379.68
46	unclear	???	nan	293.79	nan	nan	???	nan	960.22	nan	nan	1547.8
47	unclear	???	nan	658.15	nan	nan	???	nan	685.42	nan	nan	1343.57
48	unclear	???	nan	386.96	nan	nan	???	nan	952.17	nan	nan	1339.13
49	unclear	???	nan	600.89	nan	nan	???	nan	685.34	nan	nan	1286.23
50	internal_acid	ai(3-5)	(NH ₃)	349.78	349.08	0.7	y8	nan	960.77	960.56	0.21	1660.33