

a2 b2 ions, integer values, Cys = acetamide

GG	87	115	LN,QV,AR,KV	200	228	CD,FQ,FK	248	276
AG	101	129	NN,MP,DL,EV	201	229	EF,LY	249	277
AA	115	143	DN,QT,KT	202	230	NY	250	278
GS	117	145	DD,ET,MV	203	231	DY,FM	251	279
GP	127	155	AC	204	232	PW	256	284
GV	129	157	MT	205	233	FH,QR	257	285
AS, GT	131	159	AY,FS,HP	207	235	KR	257	285
AP	141	169	HV	209	237	ER,VW	258	286
AV, GL	143	171	HT	211	239	TW,MR	260	288
GN	144	172	LQ,KL	214	242	CQ,CK	261	289
DG, AT	145	173	NQ,EL,KN	215	243	CE	262	290
SS	147	175	DQ,EN,GW,DK,RS216	244		CM,QY,KY	264	292
PS, AL	157	185	DE,FP,LM	217	245	EY	265	293
AN,GQ,GK	158	186	MN	218	246	HR	266	294
AD,EG,SV	159	187	DM,FV	219	247	MY,FF	267	295
GM,ST	161	189	CS	220	248	CH	270	298
GH,PP	167	195	FT	221	249	LW	272	300
PV	169	197	SY,HL	223	251	HY,NW	273	301
PT,VV	171	199	HN	224	252	DW	274	302
AQ,AK	172	200	DH	225	253	FR	276	304
AE,LS,TV	173	201	PR	226	254	CF	280	308
NS	174	202	RV	228	256	FY	283	311
DS,AM,TT	175	203	QQ,KQ,KK	229	257	RR	285	313
FG	177	205	CP,EQ,AW,EK,RT	230	258	QW,KW	287	315
AH	181	209	EE	231	259	EW	288	316
LP	183	211	CV,MQ,KM	232	260	CR	289	317
NP	184	212	EM,PY,FL	233	261	MW	290	318
DP,LV	185	213	CT,FN	234	262	RY	292	320
NV,GR	186	214	MM,DF,VY	235	263	CC	293	321
DV,LT	187	215	TY	237	265	CY,HW	296	324
NT,QS,KS	188	216	HQ,HK	238	266	YY	299	327
DT,ES	189	217	EH	239	267	FW	306	334
CG	190	218	HM	241	269	RW	315	343
MS,AF	191	219	LR	242	270	CW	319	347
GY	193	221	NR	243	271	WY	322	350
HS	197	225	DR	244	272	WW	345	373
PQ,KP	198	226	CL,SW	246	274			
EP,LL	199	227	CN,HH	247	275			