

Introdução

Obrigado por escolher a SCIEX para fornecer seu sistema. Temos o prazer de apresentarmos o software SCIEX OS 2.0, compatível com os sistemas SCIEX X500R QTOF e SCIEX X500B QTOF, que fornecem as funções de espectrometria de massas tempo-de-voo-cromatográficas líquidas e o sistema SCIEX Triple Quad™ 7500 LC-MS/MS – QTRAP® Pronto. O SCIEX OS 2.0 também permite que o usuário processe os dados adquiridos do quadrupolo triplo, sistemas QTRAP® e TripleTOF® que operam o software Analyst®, versão 1.6.2 ou posterior, ou o software Analyst® TF, versão 1.7.1 ou posterior.

Este documento descreve os recursos do software. Recomendamos que os usuários guardem essas notas de versão para consulta à medida que se familiarizam com o software.

Novidade na versão 2.0

Esta seção descreve as melhorias e correções feitas no SCIEX OS2.0. Para visualizar as melhorias e correções de uma versão anterior do SCIEX OS, consulte as *Notas de versão* que acompanham a respectiva versão do software.

Novos recursos na versão 2.0

Recursos da aquisição

- Suporte para o sistema SCIEX Triple Quad™ 7500 – QTRAP® pronta:
 - Novos tipos de armadilha de íons linear (LIT) e quadrupolo no espaço de trabalho MS Method.
 - Suporte para aquisição dependente de informações (IDA= para quantificação e qualificação de compostos
 - Suporte para looping e programação de experimentos
 - Suporte para programação de ionização no espaço de trabalho MS Method
Esse recurso pode ser usado para reduzir o tempo de inatividade do espectrômetro de massas diminuindo o risco de contaminação. Quando esse recurso está habilitado, **Spray voltage** ou **Nebulizer current** é definido para o valor especificado no método somente durante um período especificado.

- Suporte aprimorado para o algoritmo *Scheduled MRM*[™]
A funcionalidade avançada foi adicionada ao algoritmo *Scheduled MRM*[™]:
 - A capacidade de configurar uma janela de aquisição para cada transição no método de aquisição. Os usuários podem ajustar janelas individuais para compostos que possuem picos LC amplos ou grande variação em seus tempos de retenção, para aprimorar a solidez do tempo de retenção dos experimentos.
 - A capacidade de rotular várias transições para um analito como primárias ou secundárias. As transições primárias são monitoradas por meio da janela de aquisição, enquanto as transições secundárias são monitoradas somente após as transições primárias atingirem os limites de acionamento.
 - Suporte para subtração de fundo dinâmica (DBS) para acionar transições secundárias.
 - A capacidade de especificar um tempo de permanência desejado para cada transição.
 - A capacidade de atualizar o tempo de retenção em um método MS através importando-o de um método de processamento.
 - A capacidade de importar transições de uma biblioteca para a Mass Table.
 - Gráficos de resumo interativo que mostram o índice MRM, a concorrência MRM, o tempo de ciclo projetado e o tempo de permanência em comparação ao tempo.
- Ferramentas automatizadas de otimização de composto:
 - Suporte para otimização do composto usando a análise de injeção de fluxo (FIA) no espaço de trabalho MS Method
 - Suporte para otimização para métodos MS³
- Ajuste automatizado de espectrometria de massas:
 - Capacidade de ajustar o quadrupolo triplo e os tipos de varreduras LIT no espaço de trabalho MS Tune
 - Capacidade de otimizar a tensão do detector
- Melhorias do espaço de trabalho Batch:
 - Layout de guia aprimorado para suportar até 4.000 concentrações de componentes no espaço de trabalho Batch
- Migração de método:
 - Capacidade de converter os parâmetros de MS de um método de aquisição do software Analyst[®] para uso no SCIEX OS
 - Capacidade de processar os dados do sistema SCIEX 7500 no software Analyst[®] no modo Quantitation
- Regras de decisão para roteamento de análise:
 - Suporte para regras de decisão no espaço de trabalho Batch para definir ações corretivas para resultados de análise especificadas. Esse recurso pode ser usado para tomar decisões para envio de amostras em tempo real, enquanto um lote de amostras está sendo adquirido.

- Suporte LC:
 - Suporte para módulos Shimadzu LC-40
 - Suporte para bombas Shimadzu Mikros
 Para obter uma lista completa de módulos suportados, consulte o *Guia de instalação do software*.
- Parada e início automáticos da bomba da seringa durante o ajuste.

Recursos de processamento

- Uma nova função GETSTAT para uso em colunas calculadas
Essa função pode ser usada para exibir as colunas de estatísticas selecionadas (Média, Desvio padrão e CV percentual) na Results Table.
- Os usuários podem criar regras de alerta combinadas que avaliam resultados com base em várias regras de alerta predefinidas ou personalizadas. A regra combinada é adicionada à Results Table como coluna, contendo valores de resultados conforme especificado na regra.
- Novas opções para calcular a proporção sinal para ruído (S/N):
 - Pico a pico: o software calcula o ruído subtraindo os valores de ruído mais alto e mais baixo na região de fundo especificada. A proporção sinal para ruído é a proporção da altura do pico detectada dividida pelo valor desse ruído.
 - Desvio padrão: o software calcula o ruído como o desvio padrão dos pontos de dados na região de fundo especificada. A proporção sinal para ruído é a proporção da altura do pico detectada dividida pelo valor desse ruído.

Problemas corrigidos na versão 2.0

Espaço de trabalho Analytics

- A janela Retention Time está incorreta no espaço de trabalho Analytics. (MQ-6225)
- A funcionalidade Recortar e colar não funcionou no painel Statistics. (MQ-6323)
- Na Results Table, a coluna **Index** agora pode ser ocultada e, portanto, suprimida durante a exportação.
- Uma nova permissão, **Create reports in all formats** controla a criação do relatório. Os usuários com essa permissão podem criar relatórios em todos os formatos suportados. Os usuários sem essa permissão podem criar somente no formato PDF.
- Para uma amostra que foi correspondida a um resultado da biblioteca, se uma correspondência diferente tiver sido selecionada, o alerta **Library Confidence** não terá sido atualizado. (BLT-2161)

- Quando o usuário clicou em **Initiate Transfer to Watson LIMS**, o software Analyst[®] foi aberto. Esse problema ocorreu se o software Analyst[®] tiver sido configurado para o modo Mixed e o Console de administrador do Analyst[®] Administrator Console estivesse sendo usado. (BLT-2162)
- Para um arquivo de dados que contém dados UV/DAD, se o primeiro experimento no arquivo de dados tiver contido um traço de pressão UV/DAD, não será possível usar o arquivo de dados em um método de processamento. (MQ-7704)

Espaço de trabalho Batch

- Quando o usuário alterou o método de LC em um lote, o volume de injeção não foi atualizado com o valor do novo método de LC. O usuário teve que excluir os valores do volume de injeção e, em seguida, selecionar novamente o novo método LC. (ONYX-2966)

Painel Data Acquisition

- Algumas informações estavam ausentes dos títulos exibidos no painel Data Acquisition. (DS-3134/ONYX-6219)

Espaço de trabalho User Management

- A permissão **Create report to PDF only** não estava funcionando corretamente. Se tivesse sido selecionada, o usuário poderia gerar relatórios em todos os formatos. Se não tivesse sido selecionada, o usuário não poderia gerar qualquer relatório. Essa permissão foi substituída por **Create reports in all formats**. (BLT-1913)

Espaço de trabalho Library

- Ocorreu um erro do ClearCore2 quando o usuário tentou abrir o espaço de trabalho Library. (ONYX-6244)

Espaço de trabalho MS Tune

- O usuário pôde restaurar as configurações do instrumento ao abrir um método de aquisição, quando as amostras estavam aguardando na fila e durante a aquisição. (ACQ-3274)

Dispositivos

- Intermitentemente, a comunicação com uma válvula não integrada falhou e ocorreu um defeito. (BLT-1703)

Instalação

- O SCIEX OS pôde ser desinstalado enquanto uma amostra estava aguardando ou sendo adquirida no espaço de trabalho Queue. (BLT-1341)
- A instalação do SCIEX OS falharia se o nome do computador fosse o mesmo do usuário. (BLT-1142)

Notas sobre o uso e problemas conhecidos

Observações sobre o uso

- Ao realizar atualizações do Windows, os usuários não devem instalar atualizações opcionais, pois elas podem afetar a funcionalidade no software. Instale somente as atualizações obrigatórias. Programe a instalação das atualizações para ocorrerem quando o sistema não estiver adquirindo dados.
- Se os usuários não tiverem permissões de leitura para o projeto Padrão, poderá ocorrer um erro ao tentar abrir o SCIEX OS. (ONYX-3131)
- O desempenho do sistema pode ficar mais lento quando houver vários espaços de trabalho abertos ou quando estiver sendo processado um grande número de transições. (ONYX-2321)
- Quando o usuário abre um lote que foi criado em uma versão mais antiga do SCIEX OS, o campo **Injection Volume** não é preenchido automaticamente. O usuário deve clicar em cada campo **LC Method** no lote. (ONYX-2967)
- Quando um lote é iniciado, o SCIEX OS interrompe a instalação do Windows Updates, inspeções de vírus do Windows Defender (Windows 10) e inspeções de vírus do Symantec Endpoint (Windows 7). Programe as atualizações e as inspeções de vírus para ocorrerem fora do horário de aquisição de dados.
- Para evitar problemas de desempenho ou corrupção de dados, o usuário não deve executar qualquer procedimento de manutenção no computador, como desfragmentação ou limpeza de disco, durante a aquisição da amostra.
- Se o serviço ClearCore2 for interrompido durante a aquisição de rede, os dados parciais da amostra em aquisição no momento da interrupção não serão gravados no arquivo de dados. Se o serviço for interrompido durante a aquisição local, os dados parciais da amostra serão gravados no arquivo de dados, mas serão marcados como corrompidos. Qualquer processamento e regra de decisão disparados automaticamente também falharão se os serviços ClearCore2 forem interrompidos.
- Os seguintes métodos permitem que o usuário visualize os dados em tempo real no espaço de trabalho Explorer enquanto adquirem um recurso de rede:
 - Abra o painel Data Acquisition na parte inferior da janela SCIEX OS.
 - No espaço de trabalho Queue, abra a amostra que está sendo adquirida fazendo clique duplo nela.(DS-1873)

Nota: Se a amostra for deixada aberta no espaço de trabalho Explorer, uma mensagem "File not found" será mostrada após a amostra ter sido movida para o recurso de rede.

- Os arquivos de dados criados no SCIEX OS 2.0 não podem ser anexados a arquivos de dados adquiridos no SCIEX OS 1.3.1 ou anterior. (DS-1931)

- Ao especificar um novo arquivo Results para uma amostra no espaço de trabalho Batch, o usuário deve também especificar um método de processamento. Se nenhum método de processamento for especificado, a coluna **Processing Method** no espaço de trabalho Queue conterá ***Embedded Method*** e o processamento automático falhará. (ONYX-4864)
- Ao especificar um arquivo Results em um caminho Analyst Data, o usuário não poderá criar uma subpasta. O usuário deve selecionar uma pasta existente. (ONYX-4962)
- Se não tiver permissões para acessar o Explorer, o usuário não poderá abrir o relatório Calibration no espaço de trabalho Queue. (ONYX-3401)
- Os arquivos do software MultiQuant™ (qmethod, qsession e cset) não podem ser abertos ou usados no espaço de trabalho Analytics do SCIEX OS. No entanto, os métodos do software MultiQuant™ que foram exportados a um arquivo de texto podem ser importados para o espaço de trabalho Analytics.
- O software não usa o parâmetro de regressão selecionado (Área ou Altura) para calcular a proporção de íons para um componente. O software usa o parâmetros de regressão definido para o primeiro componente na Tabela de resultados para calcular a proporção de íons para todos os componentes na Tabela de resultados. (MQ-5546)
- Para fluxos de trabalho não direcionados, a Results Tables deve ser limitada a 150.000 linhas. O desempenho do SCIEX OS degrada-se significativamente quando a Results Tables ultrapassa esse tamanho.
- Se o algoritmo de integração AutoPeak for utilizado, o usuário deverá considerar todos os parâmetros calculados no contexto de um componente em na Results Table específica. O software cria um modelo de AutoPeak para cada componente e esse modelo é usado para todas as amostras do componente. O parâmetro calculado AutoPeak Asymmetry exibe a proporção entre a inclinação do particular e a inclinação do modelo do AutoPeak para o componente. (BLT-2030)
- O botão **Apply to Workstation** fica ativo, embora o modelo de mapa de auditoria atual seja aplicado à estação de trabalho. Para determinar qual modelo de mapa de auditoria está atualmente aplicado à estação de trabalho, abra o espaço de trabalho Audit Trail. (ONYX-3400)

Problemas gerais

| Problema | Observações |
|--|--|
| <p>O usuário não pode abrir os arquivos de relatório (xps) durante o espaço de trabalho MS Tune, durante o ajuste, ou no espaço de trabalho MS Method, com o Guided MRM. O Windows reporta se não puder abrir arquivos desse tipo.</p> | <p>Esse problema ocorre se o Microsoft XPS Viewer não estiver instalado no computador. O visualizador está incluído no pacote de instalação do SCIEX OS. Para instalá-lo, siga estas etapas:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Execute um Prompt de comando como administrador: <ol style="list-style-type: none"> a. No campo Type here to search da barra de tarefas do Windows, digite cmd. b. Clique com o botão direito do mouse em Command Prompt e clique em Run as administrator. 2. Na janela Administrator: Command Prompt, digite o seguinte comando e, em seguida, pressione Enter: dism /online /norestart /add-package /packagepath:"C:\Program Files\SCIEX\SCIEX OS\Microsoft-Windows-Xps-Xps-Viewer-Opt-Package~31bf3856ad364e35~amd64~~.cab" <hr/> <p>Nota: Digite o comando inteiro em uma única linha.</p> <hr/> <p>Uma barra de progresso é mostrada enquanto o XPS Viewer é instalado.</p> 3. Quando a instalação for concluída, feche a janela Prompt de comando. |
| <p>Se o SCIEX OS estiver instalado em um computador configurado com um idioma diferente do inglês, um erro será exibido ao abrir o SCIEX OS pela primeira vez. (BLT-892)</p> | <p>Abra o SCIEX OS novamente.</p> |

Problemas de dispositivos

| Problema | Observações |
|--|---|
| A injeção começa antes que a coluna atinja a temperatura definida. | Se a WAIT TIME para o forno de coluna for manualmente definida para 0, certifique-se de equilibrar o sistema e aguardar de 10 a 15 minutos após o forno de coluna atingir a temperatura definida antes de enviar qualquer amostra. Como alternativa, defina a WAIT TIME para um valor igual a qualquer número inteiro de 1 a 10 e, em seguida, selecione Wait for temperature equilibration before run no método de LC. Se esta opção estiver selecionada, após o forno de coluna atingir a temperatura definida, o software irá aguardar a quantidade de tempo especificada no WAIT TIME antes de começar a injeção. |
| LC Agilent: configurações de alta produtividade não são possíveis no amostrador automático. (ACQ-529) | As configurações de alta produtividade não são compatíveis, atualmente. |
| Shimadzu LC: o status incorreto do dispositivo será mostrado quando o dispositivo estiver se recuperando. (ACQ-1410) | Se um subdispositivo for desligado antes da apresentação da amostra, o sistema LC passará para o estado Standby, mesmo que o status devesse ser Fault. Se o usuário tentar enviar o lote de amostras para a fila novamente, a primeira amostra será enviada, mas haverá falha imediata do sistema, pois o sistema LC entrará na condição de erro e a amostra será corrompida. Se esse problema ocorrer, reinicie o computador e abra o software novamente. |
| LC Shimadzu: o sinalizador do dispositivo não será atualizado depois de uma falha quando um erro for recuperado pelo controle direto. (ACQ-1420) | Se o usuário abrir o dispositivo de Direct Control e, em seguida, clicar em Clear Error quando o LC apresentar erro, o dispositivo se recuperará, mas o status no software ainda indicará uma falha. Para eliminar esse erro, clique em Standby no painel de status. |
| Agilent LC: o método de LC não é executado corretamente se os dispositivos que estiverem ligados e conectados não corresponderem aos dispositivos na lista de dispositivos ativados. (ACQ-1716/2062) | Para certificar-se de que o sistema esteja funcionando corretamente, desative ou ative os dispositivos para que sejam compatíveis com a lista de dispositivos ativados. |

| Problema | Observações |
|--|---|
| LC Shimadzu: ocorre um problema de desempenho durante a execução de um longo lote usando o Shimadzu PDA em taxas de amostragem superiores a 12,5 Hz. (ACQ-2037) | A duração do lote pode ser maior do que a esperada. Para evitar qualquer problema, use uma taxa de amostragem inferior a 12,5 Hz. |
| LC Shimadzu: dados de UV invertidos são adquiridos durante a aquisição com dois canais UV. (ACQ-2042) | Isso ocorre quando a polaridade definida é negativa na seção do detector UV do método de LC. Para evitar qualquer problema, use a configuração no modo positivo no campo de polaridade. |
| depois de processar várias amostras, o gráfico da pressão mostrará a pressão caindo a zero rapidamente, antes de retornar à pressão original. (ACQ-2043) | A queda de pressão ocorre quando o circuito de injeção é alterado no trajeto do fluxo. A pressão é obtida a cada 5 segundos, de modo que a queda de pressão pode não ser perceptível todas as vezes que o circuito de injeção for alterado. Esse problema não impacta o desempenho. |
| LC Agilent: durante o equilíbrio, se o usuário interromper a amostra, o LC Agilent poderá ir para uma condição de erro. (ACQ-2142) | Se esse problema ocorrer, clique em Standby para recuperar o dispositivo. |
| LC Agilent: o LC Agilent apresenta erro, mesmo quando os subdispositivos se recuperaram de uma falha e estão em estado de prontidão. (ACQ-2144) | Se esse problema ocorrer, clique em Standby para retornar o LC para o estado Ready. |
| Quando a duração de uma tabela de gradiente para uma bomba LC ou a tabela de temperatura do forno de coluna em um método de LC for superior à duração do método de MS, os dispositivos LC pararão de funcionar quando a duração do método de MS expirar. (ACQ-2167/2088) | Para evitar esse problema, certifique-se de que o valor no campo Stop Time para a duração do método de LC seja o maior tempo de execução do método de LC. |
| LC Shimadzu e ExionLC: os parâmetros padronizados de PDA são diferentes dependendo de como o método de LC é acessado. (ACQ-2176) | Para evitar qualquer problema, certifique-se de que os parâmetros corretos sejam usados para o dispositivo de PDA. |
| LC Agilent: a vírgula será ignorada como separador decimal quando a taxa de fluxo na tabela do gradiente de LC for copiada. (ACQ-2191) | Esse é um problema com o LC Agilent. Para evitar esse problema, digite manualmente a taxa de fluxo, usando vírgula como separador decimal. |

| Problema | Observações |
|---|--|
| LC Agilent: se durante a ativação do dispositivo o LC estiver com falha de comunicação, esse erro não será percebido. (ACQ-2195) | Para evitar esse problema, elimine a falha no sistema e, em seguida, desative e reative os dispositivos do Agilent. |
| Em alguns casos, os dispositivos não podem ser manualmente adicionados. (ACQ-3014) | Em alguns casos, quando os dispositivos são adicionados manualmente, a função Test device falha. Para evitar esse problema, use Autoconfig para adicionar dispositivos. |
| O usuário pode configurar dispositivos e opções não compatíveis. (BLT-1740) | O sistema SCIEX Triple Quad™ 7500 – QTRAP® pronta não suporta o sistema de injeção do calibrante e entra em contato com as opções de fechamento. |
| O sistema permanece no estado de Execução após a recuperação da perda de comunicação do MS durante a aquisição. (MSCS-432) | Se o cabo Ethernet estiver desconectado durante a aquisição, a aquisição será interrompida e o sistema entrará no estado de falha. Depois que o cabo de Ethernet for conectado novamente, se o usuário tentar executar outra aquisição, ela será concluída e a exibição em tempo real interromperá a atualização, mas o sistema continuará em estado de Execução. Se esse problema ocorrer, reative o perfil do dispositivo. |
| O sistema não ativa o botão Standby no painel de status direito quando um dispositivo, como o CDS, apresenta falha, evitando que o usuário elimine o erro. (MSCS-1314) | Se esse problema ocorrer, clique em Start no Direct Control para alterar o estado do CDS de Fault para Running para eliminar o estado Fault do CDS. |
| O modo de massas do espectrômetro de massas não é mostrado se o espectrômetro de massas falhar em ativar ou se ativar enquanto estiver no estado Fault. (MSCS-2065) | Ative o dispositivo novamente quando o espectrômetro de massas estiver no estado Pronto ou Ocioso. |
| O usuário não consegue configurar um Sistema X500 QTOF no espaço de trabalho Devices após fazer downgrade do SCIEX OS 2.0 para o SCIEX OS 1.7. (MSCS-2286) | Após instalar o SCIEX OS 1.7, interrompa o serviço ClearCore2 e, em seguida, instale os C++ redistribuíveis (vc_redis*.exe) na pasta Install no pacote de instalação SCIEX OS 2.0. |
| Informações ausentes na caixa de diálogo Device Details para o sistema LC. (ON-2069) | Esse problema ocorre se as configurações de região do Windows estiverem definidas para um formato diferente de English (United States) . Para evitar esse erro, configure o Windows de acordo com as instruções do <i>Guia de instalação do software</i> . |

| Problema | Observações |
|---|--|
| <p>Agilent LC: se um frasco de amostra estiver ausente, o sistema não reconhecerá o frasco ausente e injetará ar. (ONYX-4849)</p> | <p>Esse problema ocorre quando um frasco de amostra está ausente se uma ou ambas as opções a seguir forem selecionadas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • If a sample is missing, then proceed to the next sample na página Queue Settings. • Ignore missing vessel na caixa de diálogo Direct Control. <p>Se nenhuma dessas opções for selecionada, o sistema entra no estado Fault e a amostra falha.</p> <p>Para evitar esse erro, desmarque ambas as opções e, em seguida, certifique-se de que todos os frascos estão presentes.</p> |
| <p>Agilent LC: dados DAD em tempo real do módulo Agilent G7121B 1260 Infinity II FLD Spectra não são gravados quando o modo de espectro é definido para Apex ou All in Peak. (ONYX-4998).</p> | <p>O modo de espectro Apex e All in Peak não são suportados. Use um modo diferente.</p> |
| <p>Agilent LC: o sistema permanece no estado Loading ou Equilibrating quando um módulo Agilent G7121B 1260 Infinity II FLD Spectra está sendo usado se o Signal A Excitation for definido para Zero Order e o fotomultiplicador (PMT) Gain for definido para maior que 6. (ONYX-4999)</p> | <p>Se Signal A Excitation for definido para Zero Order, defina o PMT Gain para 6 ou menos.</p> |
| <p>Quando o usuário pressiona F1 no espaço de trabalho LC Method, tanto o <i>Sistema de ajuda</i> do SCIEX OS quanto a Ajuda do sistema LC são abertos. (ONYX-7149)</p> | <p>N/A</p> |
| <p>Quando o aplicativo Remote Desktop é usado para acessar o computador de aquisição, os seguintes problemas podem ocorrer:</p> <ul style="list-style-type: none"> • No espaço de trabalho LC Method, alguns parâmetros não são visíveis. • Na caixa de diálogo Detailed Status para um sistema LC, alguns parâmetros LC não são visíveis. <p>(ONYX-7153/ONYX-8048/ONYX-8185)</p> | <p>Esse problema ocorre quando o usuário desconecta e reconecta a sessão Remote Desktop sem fazer logoff do computador de aquisição. Para evitar esse problema, use um destes métodos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Faça logoff do computador de aquisição e, em seguida, faça login novamente. • Use o modo Full Screen no aplicativo Remote Desktop. • Corrija a resolução no computador de aquisição. • Visualize o status detalhado diretamente no computador de aquisição. |

SCIEX OS 2.0 Notas de versão

| Problema | Observações |
|--|--|
| Shimadzu LC-40: os botões Purge , Rinse e Cooler na caixa de diálogo Device Control estão inativos. (ONYX-7702) | Use os controles do teclado do gerador de amostras automático ou inclua essas funções no método LC. |
| A bomba LC Shimadzu Nexera Mikros LC não fica no estado Fault quando o limite máximo da pressão é atingido. (ONYX-7794) | N/A |
| Na caixa de diálogo Detailed Status para a válvula de desvio, a válvula Time está incorreta enquanto o sistema está nos estados de equilíbrio e de carregamento. (ONYX-7831) | Aguarde até que a próxima amostra comece a ser executada e, em seguida, abra a caixa de diálogo Detailed Status novamente para visualizar o Time . |
| A bomba LC Shimadzu Nexera Mikros está incorretamente identificada como uma bomba LC-20AB na configuração do dispositivo. (ONYX-8030) | O desempenho do sistema LC não é afetado, mas a bomba está incorretamente identificada nos arquivos de dados, registros e trilhas de auditoria. |
| Quando um Agilent DAD é conectado a uma pilha LC Shimadzu, há um atraso de 0,2 minuto entre o traço DAD e o traço MS. (ONYX-8120) | Ao processar dados de processamento adquiridos com esta configuração no espaço de trabalho Explorer, use o comando Process > Offset Chromatogram para definir a compensação total para 0,2 minuto. |
| Se a configuração do dispositivo incluir um detector configurado para adquirir dados no modo canal, e os dados adquiridos contiverem comprimentos de onda duplicados, os dados do comprimento de onda exibidos no painel Data Acquisition e no espaço de trabalho Explorer estão incorretos. (ONYX-8382) | Os dados são exibidos adequadamente no espaço de trabalho Analytics. |
| Shimadzu LC-40: na caixa de diálogo Plate Layout, se o usuário estiver configurando um tipo de rack com várias placas, quando o usuário acabar de configurar uma placa e selecionar a próxima placa, o nome da placa configurada muda para <Unassigned> . (ONYX-8441) | Salve o lote e abra-o novamente para mostrar os nomes das placas corretamente na caixa de diálogo Plate Layout. |
| O SCIEX OS não inicia e para automaticamente uma bomba de seringa externa. (ONYX-8459) | Inicie a bomba da seringa manualmente antes de começar a ajustar o procedimento. |

Problemas de aquisição

| Problema | Observações |
|---|---|
| <p>O processamento de amostras disparado automaticamente pode ser interrompido se o arquivo da Results Table ativo for aberto durante a aquisição ou o processamento. Isso ocorre somente quando o Método de MS contém uma grande quantidade de compostos, ou seja, mais de 500 compostos. Se isso ocorrer, qualquer Regra de decisão que tiver sido implementada também será interrompida. (ONYX-8733)</p> | <p>Para evitar esse problema, não abra um arquivo ativo da Results Table a partir da fila se os dados forem adquiridos usando os Métodos de MS que contêm uma grande quantidade de compostos (<500).</p> |
| <p>Nos espaços de trabalho Batch e Queue, as impressões feitas usando a opção PDFFactory apresentam os seguintes problemas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Os relatórios gerados com PDFFactory não incluem nenhum valor numérico, como os nomes dos métodos, nomes das amostras, IDs das amostras, códigos de barras, etc. onde os nomes forem números. (ONYX-2236) • A data e a hora quando são usadas outras configurações regionais não são mostradas. (ACQ-2700) • O índice da linha fica em branco quando apenas várias linhas isoladas são impressas usando o PDFFactory. (ACQ-2701) • (X500 QTOF Systems) Se a opção Auto-Calibrate for selecionada durante a criação do lote, os valores da Frequência de amostra de calibração, do canal do CDS e da posição do frasco (se for selecionado LC para injeção do calibrante) estarão ausentes. (ACQ-2804) • A impressão de relatórios usando XPS e PDFFactory no modo paisagem apresenta o resultado esperado; porém, quando é usado o PDFFactory em modo retrato, as últimas duas colunas da primeira página são omitidas e a hora em que o lote é impresso é truncada. (ACQ-1275) | <p>Para evitar problemas, imprima usando a opção XPS em vez de PDFFactory.</p> |

SCIEX OS 2.0 Notas de versão

| Problema | Observações |
|---|--|
| No espaço de trabalho Batch, a lista de métodos de MS e LC disponíveis estará incompleta se os métodos forem copiados de um projeto diferente. (ACQ-2127) | Se esse problema ocorrer, reinicie o software. |
| Um erro é exibido e o lote não pode ser apresentado se o Data File estiver centralizado na célula e o usuário pressionar Shift + Tab para ir para a próxima célula. (ACQ-2135) | Para evitar esse problema, não use a tecla Tab para se movimentar entre as células. Remova todo o conteúdo da célula e, em seguida, digite Data File novamente. |
| (X500 QTOF Systems) Os parâmetros da fonte de íons não serão atualizados para o espectrômetro de massas. (ACQ-2177) | Durante a aquisição manual usando um método SWATH [®] e um método de MRM HR, os parâmetros de gás e temperatura da fonte de íons estão disponíveis para serem editados na interface do usuário. Porém, as alterações feitas pelo usuário não serão atualizadas para o espectrômetro de massas nem serão registradas nas informações de amostra para essa amostra. |
| A bomba de seringa Harvard não funciona quando o modo Standby é selecionado. (ACQ-2193) | Para evitar esse problema e eliminar o erro, use o recurso de Direct Control para iniciar a seringa. |
| O usuário não consegue ativar o LC depois que ele apresenta falha. (ACQ-2207) | Se esse problema ocorrer, elimine o erro no LC e, em seguida, desative e ative os dispositivos. |
| Quando um LC Shimadzu é usado, o sistema não é capaz de realizar uma injeção se houver eventos de injeção na tabela de programação de Tempo do amostrador automático. (ACQ-2242) | Para evitar esse problema, não adicione eventos de injeção à tabela de programação de tempo do amostrador automático. |
| Ocasionalmente, o espectrômetro de massas apresenta falha e o sistema não pode ser recuperado. (ACQ-2250) | Se esse problema ocorrer, desative e reative os dispositivos e, em seguida, clique em Standby . |
| O software não salva os parâmetros necessários ao alternar de um método aberto para outro método no espaço de trabalho MS Method depois que a fonte de íons ou a sonda for alterada. (ACQ-2262) | Se esse problema ocorrer, atualize os parâmetros, conforme necessário. Alguns parâmetros ficam indisponíveis se não forem necessários para a nova fonte de íons ou sonda. |

| Problema | Observações |
|---|---|
| <p>Nem todas as colunas exibidas na UI são impressas. (ACQ-2611)</p> | <p>Nem todas as colunas exibidas na UI são exibidas nas cópias impressas do método quando o usuário:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Cria um método de MRM HR. 2. Aplica um agendamento de varredura. 3. Seleciona a exibição dos parâmetros avançados. 4. Salva e imprime o método. <p>Altere o tamanho do papel para algum tamanho maior do que Carta para evitar este problema.</p> |
| <p>Quando o software aumenta o parâmetro de CE durante a geração do MRM HR em polaridade negativa, o painel Data Acquisition em tempo real não mostra dados espectrais, e a escala do eixo x é mostrada em modo positivo. (ACQ-2727)</p> | <p>Para evitar problemas, use o gerador de MRM HR para visualizar os resultados do aumento do parâmetro. Não use o painel Data Acquisition.</p> |
| <p>(X500 QTOF Systems) Em ajuste manual, se o usuário envia um lote sem uma amostra de calibração (ou seja, sem autocalibração de CDS ou LC), os íons da aquisição manual pelo método de MS são usados como a lista de referência de DBC entre amostras para a primeira amostra e todas as amostras subsequentes do lote. Se houver discrepâncias na faixa de variação de massas, na polaridade e em outros parâmetros entre o método de MS usado para aquisição manual e o que foi enviado na amostra, a calibração entre amostras apresentará erro devido ao desvio de exatidão da massa para todas as amostras do lote. (ACQ-2834)</p> | <p>Para evitar qualquer problema, os usuários podem executar uma das seguintes etapas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Se o usuário apresentar um lote sem uma amostra de calibração após concluir a aquisição manual no espaço de trabalho MS Method, a calibração entre amostras se comportará segundo esperado. A primeira amostra do lote é usada para gerar a lista de referência para calibrar amostras subsequentes. • Se o usuário apresentar um lote com uma amostra de calibração enquanto uma aquisição manual estiver em andamento, a calibração entre amostras se comportará segundo esperado, sem desvio de exatidão da massa. |
| <p>(Sistemas X500 QTOF) Os usuários podem criar um lote com mais de 500 componentes. (ACQ-3073)</p> | <p>O SCIEX OS suporta um máximo de 500 componentes. Se um usuário adicionar mais de 500 componentes em um lote, nenhum erro é informado. No entanto, quando o usuário fecha e depois abre o lote, uma mensagem de erro é exibida.</p> |
| <p>Quando o usuário abre um método de MS, o botão Print não é disponibilizado. (ACQ-3301)</p> | <p>Feche o método e, em seguida, abra-o novamente.</p> |

| Problema | Observações |
|--|---|
| Um comportamento inconsistente ocorre durante importações de um método de aquisição e de um método de processamento, apresentando resultados de qualificação não confiáveis. (BLT-284) | As informações importadas de um método de aquisição têm uma exatidão da massa com até duas casas decimais. As fórmulas utilizadas para calcular a exatidão da massa em um método do processamento produzem resultados com até quatro casas decimais. Portanto, isso pode causar resultados inconsistentes entre os dois métodos. |
| (X500 QTOF Systems) Para métodos MRM HR, o tempo de retenção não é validado quando a duração do Método é alterada no espaço de trabalho MS Method. (BLT-961) | Salve, feche e abra o método novamente. |
| Lotes falham durante a aquisição de dados com o DAD no modo de espectro. (BLT-978) | Para melhorar a estabilidade do lote, use o DAD no modo de sinal. |
| As atualizações em tempo real para o painel DAD podem ser mais lentas do que o tempo de resposta escolhido no método (DS-853) | Para evitar esse problema, reduza a frequência da aquisição do DAD ou inspecione os dados após o término da aquisição. |
| As amostras na fila podem apresentar marcações de erro mesmo que os dados tenham sido adquiridos com sucesso. (DS-1016) | Durante o processamento de dados complexos na aquisição, a amostra na fila poderá ser marcada como se tivesse havido falha de aquisição, mesmo que tenha sido adquirida com sucesso e que a fila tenha se movido para a próxima amostra. Se isso ocorrer, a amostra e o arquivo de dados não serão afetados e poderão ser usados para exploração ou processamento. Para atualizar os ícones da fila, reinicie o software. |
| Atualizações em tempo real podem ser atrasadas quando as Tabelas de resultado estão sendo criadas. (DS-1042) | São observados atrasos quando o usuário executa aquisições ou processa dados contendo um grande número de experimentos. Para evitar qualquer problema, execute uma das seguintes etapas: <ul style="list-style-type: none"> • Reduza o número de experimentos que estão sendo adquiridos. • Reduza o número de experimentos usados para gerar a tabela de resultados. • Evite gerar tabelas de resultados e adquirir dados ao mesmo tempo. |
| A rotulagem de pico é inconsistente entre os gráficos XWC e TWC durante aquisição de dados de UV em tempo real. (DS-1262) | Para evitar problemas, examine os dados pós-aquisição usando o espaço de trabalho Explorer. |

| Problema | Observações |
|--|---|
| O painel Data Acquisition mostra a amostra previamente adquirida. (DS-1384) | Se esse problema ocorrer, reinicie o software. |
| Agilent LC: ao abrir um lote criado com o SCIEX OS 1.2 ou anterior, faltam as informações de LC, como Rack code , Rack position e Plate code . (DS-2186) | Esses campos foram redefinidos nesta versão do software. Preencha-os novamente. |
| (X500 QTOF Systems) O CDS permanecerá no modo Wash depois que o software parar de responder. (MSCS-666) | Se esse problema ocorrer, desmarque o modo Wash na caixa de diálogo Direct Control. |
| A configuração de GAS 2 da fonte de íons está incluída em uma mensagem de usuário. (MSCS-943) | Quando a sonda APCI for usada, uma mensagem será exibida informando que a configuração de GAS 2 da fonte de ionização deverá ser um valor específico. Ignore as configurações de GAS 2 da fonte de íons na mensagem de usuário. |
| Uma mensagem incorreta é mostrada quando a sonda é alterada. (MSCS-972) | O erro não afeta a aquisição. Os usuários podem cancelar a mensagem e a aquisição continuará. |
| (X500 QTOF Systems) A aquisição é abortada se o experimento TOF MS for excluído enquanto os dados estiverem sendo adquiridos com os métodos MRM HR e SWATH [®] ou os métodos MRM HR e IDA. (MSCS-1059) | Para evitar esse problema, não exclua o experimento TOF MS do método de MRM HR. |
| Em um método IDA com uma varredura de pesquisa que usa o algoritmo <i>Scheduled</i> MRM [™] com disparo sMRM, o Inclusion list não é usado. (MSCS-2270) | Não use uma lista de inclusão com varreduras de pesquisa IDA que usam o algoritmo <i>Scheduled</i> MRM [™] com disparo sMRM. |
| Quando um experimento IDA com uma varredura de pesquisa MRM entra em loop com outro experimento que usa o algoritmo <i>Scheduled</i> MRM [™] com o disparo sMRM aplicado, o limite do disparador especificado no campo Intensity threshold exceeds nos critérios IDA não é aplicado às massas do candidato na varredura de pesquisa MRM. (MSCS-2283) | <ul style="list-style-type: none"> • Desative o disparo sMRM no experimento do algoritmo <i>Scheduled</i> MRM[™] em loop. O limite de intensidade IDA será aplicado às massas do candidato na varredura de pesquisa MRM. • Altere a varredura de pesquisa MRM para usar o algoritmo <i>Scheduled</i> MRM[™] no lugar e defina o tempo de retenção dos compostos de interesse para 0. O limite de intensidade IDA será aplicado às massas do candidato na varredura de pesquisa. |

SCIEX OS 2.0 Notas de versão

| Problema | Observações |
|---|---|
| (X500 QTOF Systems) O espaço de trabalho MS Method não é atualizado para mostrar as informações corretas durante a execução do calibrante. (ONYX-1556) | Embora a interface do usuário não esteja atualizada, os parâmetros corretos são usados e refletidos nas informações do arquivo. |
| Quando os dados são aumentados, a atualização dos dados em tempo real é interrompida antes do final da aquisição. (ONYX-1682) | Os dados em tempo real e os dados pós-aquisição não coincidem quando os parâmetros são aumentados durante a aquisição. Para evitar problemas, use os dados pós-aquisição para qualquer análise. |
| Tempo extra potencial é adicionado a ciclos aleatórios durante a aquisição de IDA. (ONYX-1764) | Para evitar problemas, certifique-se de que os serviços de atualização do Google (gupdate e gupdatem) e o backup do Windows estejam desativados antes de executar o IDA, se estiverem presentes no sistema. |
| Nos espaços de trabalho MS Method e LC Method, a caixa de diálogo Print não é aberta ou há um atraso antes de abri-la. (ONYX-3412) | Aguarde aproximadamente 1 minuto até a caixa de diálogo Print abrir. |
| Ocorrem problemas de interface do usuário quando um arquivo Results está sendo especificado. A célula Results File não é mostrada corretamente. (ONYX-4790) | Redimensione a coluna ou clique em outra célula. |
| O processamento automático falha se o caminho do arquivo especificado para o Results File no lote for muito longo. (ONYX-4827) | No lote, limite o tamanho do caminho do Results File para 300 caracteres ou menos. |
| A mensagem "The path name is too long" é exibida quando um diretório raiz é definido, mas o caminho é menor do que 247 caracteres. (ONYX-4981) | Essa mensagem também é mostrada se o usuário logado não tiver acesso de gravação ao recurso de rede. |
| Quando as linhas são coladas no espaço de trabalho Batch, se o Results File na linha copiada não contiver um valor, o MS Method será inserido na coluna Results File da linha colada. (ONYX-5029) | Edite o lote para corrigir o conteúdo da coluna Results File para as linhas afetadas. |

| Problema | Observações |
|--|--|
| <p>Quando um arquivo csv for importado na tabela de massa de um método MS, nenhuma mensagem de erro é mostrada se o número de colunas no arquivo de importação for maior que o número de colunas na tabela de massa. (ONYX-5216)</p> | <p>Isso ocorre se um editor de texto for usado para adicionar uma coluna, delimitada por uma vírgula (,), a uma linha no arquivo csv, e a vírgula e o texto da coluna não forem adicionados às outras linhas.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Exporte a Mass Table para um arquivo csv. 2. Abra o arquivo exportado no Microsoft Excel. 3. Edite a Mass Table. 4. Salve o arquivo csv atualizado. 5. Importe o arquivo novamente. |
| <p>No espaço de trabalho MS Method, quando o usuário está editando a Mass Table para um método de MS, a tecla Delete não funciona. (ONYX-5467/ONYX-7384)</p> | <p>Para excluir o conteúdo na Mass Table, use um dos seguintes métodos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Use a tecla Backspace para excluir o texto. • Faça clique duplo na célula para inserir o modo Edit e use a tecla Delete. <p>Em seguida, digite o novo texto, se necessário.</p> |
| <p>Quando uma linha é copiada de um arquivo, como uma planilha do Excel, e então colada na grade no espaço de trabalho Batch, alguns componentes não são adicionados à grade. (ONYX-6068)</p> | <p>Adicione componentes ausentes ao lote manualmente.</p> |
| <p>Quando o usuário cola uma linha sobre uma linha existente no espaço de trabalho Batch, o conteúdo não é colado corretamente. (ONYX-6083)</p> | <p>Para evitar esse problema, ao invés de colar sobre uma linha existente, insira uma linha vazia e cole o novo conteúdo nele. Em seguida, exclua a linha existente.</p> |
| <p>Quando a pasta Acquisition Methods contém um método de MS corrompido, os métodos que não são de MS ficam disponíveis para seleção na coluna MS Method no espaço de trabalho Batch. (ONYX-6795)</p> | <p>Se a lista de métodos de MS estiver vazia, encontre e exclua o método corrompido.</p> |

| Problema | Observações |
|--|---|
| <p>No espaço de trabalho Queue, as amostras que são reinjetadas como resultado do processamento da regra de decisão mostram *Embedded Method* na coluna Processing Method, ao invés do nome do método de processamento associado à amostra original. (ONYX-6896)</p> | <p>Quando a primeira amostra é processada, o arquivo Results é criado e o método de processamento especificado na coluna Processing Method é incorporado ao novo arquivo Results. Portanto, o método incorporado especificado para a amostra reinjetada é o mesmo método de processamento especificado para a primeira amostra.</p> |
| <p>Ocorre um erro quando o usuário seleciona uma linha na Mass Table e, em seguida, usa o comando Fill Down. (ONYX-7225/ONYX-7461)</p> | <p>Selecione a coluna na célula a ser copiada e, em seguida, use o comando Fill Down. Não selecione a linha.</p> |
| <p>Se o computador da aquisição estiver sendo controlado pelo Windows Remote Desktop enquanto adquire os dados IDA, o desempenho da aquisição pode ficar lento, resultando em perda de pontos de dados. (ONYX-7491)</p> | <p>Não use o Remote Desktop para controlar o computador da aquisição enquanto adquire os dados IDA.</p> |
| <p>Quando o usuário altera a polaridade de um método LIT, Dynamic fill time é ativado. (ONYX-7740)</p> | <p>Desative Dynamic fill time.</p> |
| <p>O tempo de permanência não é atualizado corretamente quando o usuário altera a polaridade várias vezes em um método que contém um experimento que usa o algoritmo <i>Scheduled MRM</i>TM em loop com um ou mais tipos de experimentos. (ONYX-7841)</p> | <p>O tempo de permanência para as transições no experimento que usa o algoritmo <i>Scheduled MRM</i>TM irá variar alguns ms em relação ao tempo de permanência correto.</p> |
| <p>Não é possível definir um valor padrão para AF2 para experimentos MS³ em polaridade Negativa. (ONYX-8041)</p> | <p>Quando o usuário define um valor padrão para AF2 para experimentos MS³ em polaridade Negativa, o valor padrão não é salvo.</p> <p>Para salvar um valor padrão para AF2 em polaridade Negativa, primeiro configure a polaridade Positiva com o valor AF2 necessário para a polaridade Negativa. Em seguida, altere para a polaridade Negativa e salve os valores padrão.</p> |
| <p>O usuário não pode especificar valores decimais nos campos Start at e Stop at para rampeamento AF2. (ONYX-8318)</p> | <p>Interrompa o rampeamento manualmente quando o valor de parada desejado for atingido.</p> |

| Problema | Observações |
|---|---|
| O campo CE spread está ativo para varreduras ER. (ONYX-8328) | O parâmetro CE spread não é usado em varreduras ER. Qualquer valor inserido nesse campo será ignorado. |
| O software para de responder quando os critérios IDA de segundo nível são adicionados a um método de MS com vários experimentos IDA se a varredura de pesquisa usar o algoritmo <i>Scheduled MRM™</i> . (ONYX-8333) | As varreduras de pesquisa que usam o algoritmo <i>Scheduled MRM™</i> para acionar um experimento MS ³ não são suportadas nos métodos IDA em loop. |
| Na caixa de diálogo Decision Rule Configuration, quando um método de processamento é selecionado, a lista no campo Flagging Rules pode incluir regras de alerta Combinadas que são definidas no método de processamento, mas não aplicadas. Ou seja, a caixa de seleção Apply Rule não é marcada. (ONYX-8352) | Se o usuário selecionar uma regra de alerta Combinada que não seja aplicada no método de processamento, então nenhuma decisão será realizada na fila. |
| Um método de MS que usa o algoritmo <i>Scheduled MRM™</i> pode ser salvo com uma duração de método inválida. (ONXY-8443) | O algoritmo Duration para um método de MS que usa o algoritmo <i>Scheduled MRM™</i> pode tornar-se inválido se o tempo de varredura for muito grande. Se o usuário tentar salvar o método, será exibida uma mensagem de erro e o campo Duration conterá um ícone de erro. Se o usuário especificar uma duração de método válida, alterar a duração de volta para a duração do método incorreta e, em seguida, salvar o método, o método é salvo com êxito. Certifique-se de determinar a duração do método correta antes de salvar o método. |
| Uma caixa de diálogo de erro é mostrada quando o usuário clica em Open data exploration to view real-time data  enquanto adquire os dados IDA no espaço de trabalho MS Method. (ONYX-8446) | Se o usuário recolher o experimento IDA, enviar o método IDA e, em seguida, clicar em  , é exibida uma caixa de diálogo de erro. Clique em OK para abrir o espaço de trabalho Explorer. Para evitar esse problema, não recolha o experimento IDA. |
| Quando o usuário imprime um método com vários experimentos, somente o Nebulizer current para o primeiro experimento é impresso. (ONYX-8462) | N/A |

SCIEX OS 2.0 Notas de versão

| Problema | Observações |
|--|---|
| Os arquivos wiff gravados pelo SCIEX OS contêm menos informações detalhadas do método de MS do que os arquivos wiff criados pelo software Analyst [®] . (ONYX-8546) | N/A |
| (X500 QTOF Systems) Quando um método <i>Scheduled</i> MRM ^{HR} é impresso, o relatório não contém todas as colunas da Mass Table. (ONYX-8563) | Altere a orientação do documento para paisagem na caixa de diálogo Print antes de imprimir. |
| A polaridade do parâmetro da energia de colisão (CE) é mostrada incorretamente na polaridade dos experimentos IDA negativos. (ONYX-8566) | O valor correto para CE é usado para aquisição. |
| Um erro é exibido durante a etapa 5 (Otimizar energias de colisão) se o usuário não concluir todas as etapas precedentes, em ordem. (ONYX-8568) | Clique em OK . |
| Quando a caixa de diálogo (s)MRM Plots é aberta, ela fica à frente de todas as outras caixas de diálogo. Se a caixa de diálogo for expandida, o usuário não conseguirá visualizar as outras caixas de diálogo, como a caixa de diálogo Save. (ONYX-8601) | Use uma das seguintes soluções: <ul style="list-style-type: none">• Pressione Alt+Esc para alternar entre as caixas de diálogo abertas, até que a caixa de diálogo desejada esteja visível.• Pressione Alt+F4 para fechar a caixa de diálogo subjacente e retornar o foco para a caixa de diálogo (s)MRM Plots.• Pressione Alt+Space para abrir o menu de contexto para a caixa de diálogo subjacente. |
| Se as várias transições tiverem o mesmo tempo de retenção e permanência, somente a última será mostrada na dica de ferramenta no gráfico Dwell Time na caixa de diálogo (s)MRM Plots. (ONYX-8621) | N/A |
| Se o recurso de ionização programada for usado com um dispositivo configurado com fechamento de contato, a ionização poderá começar antes que o dispositivo controlado através do fechamento de contato comece a injetar a amostra. (ONYX-8626) | Aumente o tempo de início da ionização para permitir que os sinais de fechamento de contato sejam enviados e a injeção da amostra comece. |

Problemas do espaço de trabalho Analytics

| Problema | Observações |
|--|--|
| Nenhuma das Results Tables em um diretório raiz do projeto será aberta. | Esse erro ocorre se o diretório raiz para um projeto tiver sido usado como diretório raiz para o software Analyst [®] . O software Analyst [®] cria um ou mais dos seguintes arquivos na pasta Default/Project Information no diretório raiz: <ul style="list-style-type: none"> • ProjectSettings.atd • Default Audit Map.cam • Project.atd Se esses arquivos existirem na pasta Project Information, exclua-os. |
| Nenhum relatório pode ser criado a partir da Results Table após um modelo personalizado que contenha os elementos da imagem e uma consulta ser usado para criar um relatório csv. (BLT-1507) | Para evitar problemas, use um dos modelos suportados. Consulte Modelos padrão . |
| O SCIEX OS para de responder durante o processamento quando um fluxo de trabalho não direcionado está sendo usado. (BLT-2069) | Para fluxos de trabalho não direcionados, limite o processamento a 20 amostras por vez. |
| O SCIEX OS altera os nomes dos componentes ao somar vários íons na Results Table. (BLT-2171) | O nome do canal é adicionado a cada transição individual e o termo "Sum" é adicionado ao canal somado. Como os nomes dos componentes não correspondem aos nomes no LIMS, a importação para o LIMS é mal-sucedida. |
| Os parâmetros de soma dos íons não são preservados para os métodos de quantificação do software MultiQuant [™] importados para o SCIEX OS. (BLT-2172) | Configure os parâmetros de soma dos íons no método de processamento no SCIEX OS. |
| Para os dados do software Analyst [®] , a resolução Q3 é indicada como máxima para varreduras LIT. (DS-2220) | Abra os dados no modo Explore no software Analyst [®] . |
| O relatório csv não suporta gráficos ou logos. (MQ-1361) | O relatório csv só é compatível caso não contenha gráficos. |

| Problema | Observações |
|---|--|
| A alteração da configuração de regressão para um algoritmo na página padrão do projeto atualiza a regressão para os outros algoritmos. (MQ-1376) | Os campos das configurações de regressão não são independentes do algoritmo selecionado. Se o usuário alterar um campo de configuração de regressão em um algoritmo, o campo correspondente dos outros algoritmos também será alterado. Para evitar problemas ao mudar de um algoritmo para outro, os usuários deverão atualizar as configurações de regressão conforme necessário para o algoritmo. |
| Ocorre um erro quando uma biblioteca sem nome é importada. (MQ-1379) | Para evitar esse problema, atribua nomes às bibliotecas antes de importá-las. |
| O tempo de retenção esperado de um componente individual que faz parte de um grupo (o recurso Update Retention Time é definido como Group) pode ser alterado, resultando em tempos de retenção inconsistentes e janelas de tempo de retenção no grupo. (MQ-1511) | O usuário pode alterar manualmente o Expected RT para cada componente do grupo. |
| A pontuação combinada é diferente de zero quando as pontuações da Library e do Search Formula Finder forem iguais a zero ou não estiverem disponíveis. (MQ-1545) | Além das pontuações de Pesquisa da biblioteca e do localizador de fórmulas, o software usa as pontuações do erro da massa, do isótopo e do tempo de retenção para calcular a pontuação combinada. Para evitar a inclusão dessas pontuações, defina a ponderação de cada uma em zero. |
| Tabelas de resultados salvas não são atualizadas automaticamente quando uma biblioteca é adicionada ou removida do banco de dados. (MQ-1684) | Para evitar quaisquer problemas, reprocessse manualmente os resultados com base no banco de dados da biblioteca atualizada. |
| A pesquisa de biblioteca relata uma pontuação de pureza maior do que a esperada a partir de espectros de baixa qualidade. (MQ-1679, MQ-1773) | Se esse problema ocorrer, confirme o tempo de retenção, qualidade de pico e integração para determinar se o composto é um verdadeiro positivo. |
| Critérios de aceitação específicos do composto não estão disponíveis. (MQ-1822) | Atualmente, somente as configurações globais estão disponíveis para Library Search. |
| Licenças de pacotes licenciados criados com o LibraryView Package Builder serão salvas em C:\Arquivos de Programas\AB SCIEX\LibraryView\bin. (MQ-1847) | Licenças dos pacotes licenciados criados com o LibraryView Package Builder 1.0 devem ser copiadas manualmente para C:\Arquivos de Programas\SCIEX\LibraryView\LibraryViewFramework/Servidor. |

| Problema | Observações |
|---|--|
| Durante qualquer experimento em loop ou combinado, um espectro duplo MS/MS subtraído é exibido no painel Peak Review. (MQ-1848) | Isso não constitui um problema e o software está funcionando conforme planejado. Um único experimento IDA possuirá uma única faixa de espectro subtraído. |
| Componentes incompatíveis no método de processamento incorporado não são manuseados de forma correta se o método de processamento usar o algoritmo de integração AutoPeak. (MQ-1873) | Quando um método de processamento existente que usa o algoritmo de integração AutoPeak for usado para processar dados com a opção de criar um modelo usando a amostra atualmente selecionada, a Tabela de resultados abrirá corretamente. No entanto, componentes incompatíveis são exibidos com um ponto de exclamação vermelho no método incorporado. Os usuários podem remover os componentes incompatíveis do método ou podem modificar o tempo de retenção da massa do fragmento ou o índice de experimento para evitar esse comportamento. |
| O software para de responder quando o método de processamento que usa o algoritmo de integração Summation contiver componentes incompatíveis. (MQ-1888) | Se um método de processamento existente que usa o algoritmo de integração Summation for usado e se o método não for totalmente compatível com os dados, o software irá parar de responder. Se esse problema ocorrer, edite o método para remover os componentes incompatíveis. |
| O software aparentemente não responde quando o PDFactory é usado para criar um relatório PDF protegido a partir de uma Tabela de resultados que contenha mais de 2 500 linhas usando o modelo Positive Hit. (MQ-1896) | A criação do relatório pode levar algum tempo. A janela de progresso do PDFactory, sempre mostrada em segundo plano, mostra que a criação do PDF está em andamento. Os usuários podem minimizar todas as janelas, incluindo a do SCIEX OS, para visualizar a janela de progresso do PDFactory. |
| Alguns cromatogramas não são exibidos ao abrir o painel Peak Review. (MQ-2070) | Se esse problema ocorrer, clique em um índice da tabela de resultados. |
| Ao clicar no X azul no canto superior direito da tela para fechar o espaço de trabalho do Analytics, os painéis Samples e Components and Groups não são atualizados após abrir novamente o espaço de trabalho e a tabela de resultados. (MQ-2074) | Se esse problema ocorrer, clique em qualquer lugar na tela para atualizar os painéis. |
| O nome IS não pode ser colado na tabela de componentes no Editor de método. (MQ-2193) | Para evitar problemas, selecione manualmente o nome IS ou cole a coluna IS separadamente. |

SCIEX OS 2.0 Notas de versão

| Problema | Observações |
|--|---|
| Resultados do AutoPeak gerados em diferentes computadores que tenham diferentes arquiteturas de CPU mostrarão uma diferença no décimo primeiro dígito. (MQ-2316) | Os usuários podem personalizar a exibição da tabela de resultados. Em uma Tabela de resultados aberta, clique em More > Results Tables > Display settings e defina o campo Number Format em um valor menor do que 11. Os usuários notarão diferenças nos seus resultados se o valor for 11 ou superior. |
| Se o usuário processar dados enquanto o sistema estiver adquirindo os dados, os arquivos temporários grandes podem ser criados. Arquivos temporários grandes podem impactar o desempenho do sistema. (MQ-2382) | Se o sistema parar de responder durante a aquisição e o processamento de dados no mesmo computador, exclua o arquivo \Update\Local\Temp situado na unidade C. |
| O usuário é solicitado a salvar as alterações na tabela de resultados mesmo se nenhuma alteração tiver sido feita. (MQ-2400) | Se o usuário transferir um arquivo qsession para outra pasta e abrir e fechar a tabela de resultados sem fazer alterações, o software solicitará o usuário a salvar as alterações. Os usuários poderão selecionar Save ou Cancel . A análise de dados não é afetada. |
| Os usuários poderão processar dados e criar uma Tabela de resultados usando um método inválido. (MQ-2431) | Para evitar qualquer problema, os usuários precisam abrir métodos criados nas versões anteriores do SCIEX OS e corrigir os erros. Se os erros não forem corrigidos, o tempo de processamento poderá ser afetado. |
| O software não consegue realizar processamentos quantitativos e qualitativos de dados das varreduras Q1 para sistemas SCIEX X500 QTOF. (MQ-2790) | Dados Q1 fornecidos por sistemas SCIEX X500 QTOF não podem ser processados no espaço de trabalho do Analytics. |
| Quando o algoritmo de integração AutoPeak é usado em dados UV, DAS ou ADC, o modelo pode demorar muito para construir antes de fazer o processamento. (MQ-4421) | Não use o algoritmo de integração AutoPeak em dados UV/DAD/ADC que tenham forma de pico insatisfatória. |
| A filtragem é aplicada incorretamente. As linhas adequadas não são mostradas. (MQ-4823) | Se os Text Filters forem selecionados antes do filtro Filter By Flag, o filtro Filter By Flag não será aplicado corretamente. Selecione sempre em primeiro lugar o filtro Filter By Flag. |
| O painel Results Table torna-se somente leitura após o método de processamento incorporado ser editado. (MQ-5082) | Feche a Tabela de resultados e, em seguida, abra-A novamente. |

| Problema | Observações |
|---|---|
| <p>Ocorre um erro quando o usuário tenta copiar valores na coluna Upper Limit das tabelas do tipo Concentration Acceptance ou Values per component nas Flagging Rules. (MQ-5599)</p> | <p>Digite os valores na tabela.</p> |
| <p>No fluxo de trabalho Mass Reconstruction, os valores sinal para ruído (S/N) reportados na Results Table não são calculados corretamente para picos reconstruídos. (MQ-7073)</p> | <p>Para calcular o S/N, abra o espectro m/z médio no espaço de trabalho Explorer, realize a reconstrução manual e, em seguida, calcule o S/N no pico de destino.</p> <hr/> <p>Nota: Essa solução requer a Licença do Kit Biotool.</p> <hr/> <ol style="list-style-type: none"> 1. Selecione o Espectro médio no painel Peak Review. 2. Clique em Open data exploration (A). 3. Clique em Bio Tool Kit > Reconstruct Protein, insira um valor para a resolução, especifique os parâmetros de reconstrução e, em seguida, realize a reconstrução. 4. Calcule o S/N manualmente. Consulte "Mostrar as informações de seleção de gráfico" no <i>Guia do usuário do software</i>. |
| <p>Um erro é exibido quando o usuário define as configurações da tabela na página Components do método de processamento para mostrar Mass (Da) and Width (ppm). (MQ-7709)</p> | <p>Para sistemas de massa nominais, como SCIEX Triple Quad™ 7500 System – QTRAP® pronta, a largura XIC (ppm) não é suportada. Use a largura XIC (Da).</p> |
| <p>Quando o usuário clica em Open data exploration no painel Peak Review para um arquivo de dados que contenha dados UV no espaço de trabalho Explorer, o gráfico XIC UV não é mostrado. (MQ-7723)</p> | <p>Abra o arquivo de dados no espaço de trabalho Explorer.</p> |

Problemas no espaço de trabalho Explorer

| Problema | Observações |
|--|---|
| <p>O SCIEX OS para de responder ou gera um erro quando o usuário tenta simultaneamente gerar um gráfico de contorno de DAD e XWC em um arquivo de dados IDA+DAD. Esse problema somente ocorre quando o usuário começa a gerar um painel de contorno de DAD e, enquanto ele está sendo atualizado em segundo plano, o usuário acessa um XWC ao mesmo tempo. (BLT-498)</p> | <p>Se esse problema ocorrer, execute uma das seguintes etapas:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Gere o XWC em primeiro lugar e, depois, gere o painel de controle de DAD. • Aguarde até que o painel de controle tenha concluído a atualização, antes de gerar o XWC. |
| <p>O erro "The requested action could not be completed. Make sure your data is complete and all fields contain appropriate values" é mostrado no Formula Finder. (BLT-1423)</p> | <p>Esse erro ocorre se a estrutura para o íon selecionado, conforme previsto pelo Formula Finder, não estiver incluído na lista de íons positivos na guia Elemental Composition da caixa de diálogo Formula Finder Settings. Por exemplo, para o íon a m/z 1004, o Formula Finder corresponde a $(M+NH_4)^+$. Se esse íon não estiver incluído na lista de íons positivos a ser pesquisada, ocorrerá um erro quando nenhuma correspondência for encontrada.</p> |
| <p>Os seguintes problemas poderão ocorrer quando o usuário explorar dados durante a aquisição:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Os dados em tempo real não corresponderão aos dados pós-aquisição se os XICs e BPCs para varreduras programadas forem obtidos antes do horário agendado. (DS-903/ DS-1092) • Se o usuário alternar entre experimentos MS usando Move to next ou Move to previous no espaço de trabalho Explorer para mostrar um cromatograma de íons extraído (XIC) ou cromatograma de pico básico (BPC) gerado em tempo real, somente um ponto será mostrado no painel XIC/BPC. | <p>Para evitar esse problema, faça o seguinte:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Gere XICs para o experimento solicitado clicando em File > Show XIC • Gere o XIC/BPC pós-aquisição. • Feche o painel XIC e reabra-o. |

| Problema | Observações |
|--|--|
| <p>As atualizações dos espectros de dados em tempo real mostrados nas guias MS e DAD no painel Data Acquisition podem ser mais lentas do que no espaço de trabalho Explorer. (DS-934)</p> <p>Ocorre uma incompatibilidade no gráfico em tempo real dos painéis Data Acquisition MS e DAD e no espaço de trabalho do Explorer quando a duração do método de LC é maior do que a do método de MS. Nessa situação, os painéis Data Acquisition MS e DAD interromperão a atualização no final do método de MS, mesmo se o canal UV, DAD ou ADC continuar a ser atualizado em tempo real no espaço de trabalho Explorer até o final do tempo de aquisição do método de LC. (DS-852)</p> | <p>Caso esse problema comece a ocorrer, aguarde a conclusão da aquisição antes de explorar os dados.</p> |
| <p>Os dados de otimização do detector não são mostrados corretamente no espaço de trabalho Explorer. (DS-1044)</p> | <p>O eixo Z (Tensão do detector) está rotulado incorretamente. Para evitar qualquer problema, use o painel Detector Optimization Report ou Data Acquisition para inspecionar os dados adquiridos durante o processo de otimização do detector.</p> |
| <p>Se os dados de um método de aquisição com parâmetros elevados forem visualizados durante a aquisição, os dados não são atualizados e o espectro resultante fica incorreto. (DS-1959)</p> | <p>Não visualize dados para um método de aquisição que contenha parâmetros elevados até após a conclusão da aquisição.</p> |
| <p>Intermitentemente, a mensagem "This sample is corrupted" é exibida na primeira vez que uma amostra é adquirida no espaço de trabalho MS Method ou quando uma amostra recém-adquirida é aberta no espaço de trabalho Explorer. (DS-2281)</p> | <p>Clique em OK para confirmar a leitura da mensagem. A amostra pode ser processada como normal.</p> |

| Problema | Observações |
|---|--|
| <p>O usuário não consegue gerar um espectro a partir de uma região destacada do XIC. (ONYX-1882)</p> | <p>É exibida uma mensagem de erro quando o usuário executa as seguintes etapas:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Abra dois arquivos em painéis separados no espaço de trabalho Explorer e gere um gráfico XIC para cada arquivo. 2. Combine os gráficos XIC em um único painel. 3. No painel XIC, realce uma região e clique duas vezes para gerar um espectro. 4. Na caixa de diálogo Process All Overlays? que é aberta, clique em All Overlaid e clique em OK. <p>A mensagem de erro "Incorrect Argument - invalid cycle range" é mostrada, em vez do espectro.</p> <p>Para evitar problemas, selecione uma região mais estreita onde os gráficos estiverem sobrepostos.</p> |
| <p>Quando o usuário processar grandes volumes de dados ou múltiplos arquivos de dados no espaço de trabalho Explorer, a interface do usuário poderá parar de responder e poderão ocorrer atrasos antes que a fila de amostras vá para a amostra seguinte. (ONYX-2047/DS-1688)</p> | <p>Se esse problema ocorrer, espere o software concluir o processamento no espaço de trabalho do Explorer ou evite processar um grande volume de dados durante a aquisição.</p> |
| <p>O rótulo do número em um traço XIC não é verdadeiro no espaço de trabalho do Explorer. (PV-1009)</p> | <p>O valor mostrado é correto porque representa o valor centroeide do pico. Clique em Fill Peaks para abrir uma visualização melhor do pico. O rótulo é colocado no ponto mais alto do pico em questão, independentemente da sua posição. Portanto, o rótulo pode parecer estar na posição incorreta, mas o valor está correto.</p> <p>Caso esse problema ocorra, aguarde a conclusão da aquisição antes de explorar os dados.</p> |
| <p>As informações da amostra para experimentos IDA não são mostradas quando o usuário abrem um arquivo de dados <i>Scheduled</i> MRM™, seleciona e carrega uma amostra e, em seguida, clica em Show Sample Information. (PV-1330)</p> | <p>Esse problema não afeta o fluxo de trabalho.</p> |

Problemas do espaço de trabalho MS Tune.

| Problema | Observações |
|---|---|
| Durante o ajuste manual, o valor do parâmetro otimizado não é salvo no arquivo de definição do instrumento após o usuário clicar em Save Settings . (ACQ-2519) | O valor do parâmetro otimizado não é salvo durante o ajuste manual. Para evitar problemas, conclua todas as etapas de ajuste quando o modo Ajuste manual estiver sendo usado. |
| Quando a massa central Q1 for selecionada, a faixa de massa do espectro em tempo real não será atualizada corretamente. (DS-915) | Para evitar esse problema, defina as massas de início e fim para abranger a faixa de variação de massas central Q1. |
| Se o usuário ajustar o espectrômetro de massas, salvar as configurações do novo instrumento e, em seguida, restaurar as configurações do instrumento salvas anteriormente, então o registro de auditoria estará incompleto. (ONYX-8392) | N/A |

Problemas do relatório

| Problema | Observações |
|---|--|
| Um erro de Personalização de Documento do Microsoft Office ocorre quando o usuário tenta editar um modelo de relatório. | Esse erro ocorre porque o TemplateContentControlManager não está instalado. Siga essas etapas: <ol style="list-style-type: none"> 1. Navegue para C:/Program Files/AB Sciex/ReporterOfficeAddins/TemplateContentControlManager. 2. Faça clique duplo em TemplateContentControlManager.vsto. 3. Se o TemplateContentControlManager estiver instalado, clique em Close. Caso contrário, clique em Install e, em seguida, siga as instruções da tela. |

Problemas na instalação e ativação do software

| Problema | Observações |
|---|---|
| O SCIEX OS pode não ser instalado se for usada uma conta de usuário incorreta. (BLT-340) | Entre em contato com sciex.com/request-support . Somente administradores devem instalar ou remover o software. |
| O SCIEX OS não será instalado se mais de uma janela do Assistente de instalação estiver aberta. (BLT-341) | Se duas janelas do Assistente de instalação do SCIEX OS estiverem abertas e o usuário tentar continuar com a instalação da segunda janela, independentemente de a primeira janela estar ou não fechada, a instalação apresentará erro. Para evitar esse problema, abra somente uma janela do Assistente de instalação e, em seguida, continue com a instalação. |
| Se a licença ChemSpider tiver expirado e o usuário instalar uma nova licença, quando o usuário tentar iniciar uma sessão no ChemSpider, será exibida uma mensagem de advertência de que o ChemSpider não está licenciado. (BLT-985) | Feche e, em seguida, abra o SCIEX OS; depois, inicie o ChemSpider novamente. |
| O SCIEX OS não pode ser desinstalado. (BLT-1024) | Se o SCIEX OS não puder ser desinstalado, certifique-se de que o Microsoft .NET 2.0 esteja ativado. Consulte a Ajuda da Microsoft para obter instruções detalhadas. Depois tente novamente. |
| Quando o software passa da versão 2.0 para a versão 1.3, os espaços de trabalho Batch, Queue e User não ficam disponíveis. (OFX-489) | Se não houver disponível um backup da instalação do SCIEX OS 1.3, então: <ol style="list-style-type: none"> 1. Remova o SCIEX OS 2.0. 2. Remova a Framework LibraryView™. 3. Renomeie a pasta C:\Program Data\SCIEX\. 4. Renomeie a pasta C:\Program Files\SCIEX\. 5. Renomeie a pasta D:\SCIEX OS Data\. 6. Instale o SCIEX OS 1.3. <p>O SCIEX OS precisa ser reconfigurado, e todos os métodos, configurações, usuários, etc. precisam ser recriados.</p> |

| Problema | Observações |
|---|---|
| <p>O SCIEX OS 1.3 ou mais recente não é removido quando o usuário tenta removê-lo usando o arquivo Setup.exe. (ONYX-2124)</p> | <p>Se um usuário tentar remover o SCIEX OS 1.3 ou mais recente usando o arquivo Setup.exe, a entrada na lista Programas e Recursos do Windows para o SCIEX OS será removida. Entretanto, o programa permanecerá e ainda poderá ser aberto. Para remover o SCIEX OS, execute o arquivo Setup.exe da pasta SCIEX OS e siga as instruções na tela para instalar o software. Esse processo adicionará a entrada para o SCIEX OS de volta à lista Programas e Recursos do Windows. Use a lista Programas e Recursos para remover o SCIEX OS 1.3 ou mais recente.</p> |
| <p>Ocasionalmente, o SCIEX OS pode não ser instalado por causa de um problema no SQL Server ou devido a um problema com a Framework LibraryView™. (ONYX-2987)</p> | <p>Se esse problema ocorrer, então:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Remova o software LibraryView™, se estiver instalado. 2. Remova a Framework LibraryView™, se estiver instalada. 3. Remova todos os componentes do Microsoft SQL Server 2008. 4. Desligue e, em seguida, ligue o computador novamente. 5. Instale o SCIEX OS. <p>Se o problema de instalação persistir, ele pode ser necessário para remover os arquivos LibraryView.mdf e LibraryView_log.mdf do C:\Program Files\Microsoft SQL Servier\MSSQL10_50.SQLEXPRESS\MSSQL\DATA folder.</p> <hr/> <p>Nota: Como as bibliotecas são armazenadas nos arquivos mdf, qualquer biblioteca existente será removida se esses arquivos forem excluídos e terá que ser instalada novamente.</p> |
| <p>Um erro é exibido quando o SCIEX OS está instalado em um computador sem o .NET Framework 4.x. (ONYX-8028)</p> | <p>Se esse problema ocorrer, instale-o com Install\NDP472-KB4054530-x86-x64-AllOS-ENU.exe, localizado no pacote de instalação.</p> |

Problemas no MS FW Updater

| Problema | Descrição |
|---|---|
| O utilitário MS FW Updater não pode ser executado pelo DVD. (BLT-597) | Para atualizar o firmware do espectrômetro de massas, copie a pasta FirmwareUpdater na unidade D:\ e execute o utilitário a partir desse local. |

Modelos padrão

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|---------------------------|---|--|
| All Peaks Qual | Um relatório que exibe, para cada amostra, uma seção que inclui File Information, Sample Information, Analyte Results Table e cromatogramas sobrepostos de todos os analitos e padrão interno. A Analyte Results Table é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela. | N/A |
| Analyte 20 percent Report | Relatório que mostra, para cada analito, uma seção incluindo Informações do arquivo e uma tabela XIC para cada Blank, Standard, QC e 20% de todos os Unknowns. | Este é um exemplo de modelo de relatório que possui uma Consulta anexada - Analyte20percent.Query. |
| Analyte Summary | Tabela de resultados que mostra o Nome da amostra, as Concentrações calculadas e os Valores discrepantes para todas as amostras no lote para o analito específico e o Padrão interno associado. | N/A |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|--|--|---|
| Calibration Curve | Um relatório que mostra File Information, Statistics Table (standards) e Calibration Curve para analitos em uma página por analito. | <ul style="list-style-type: none"> • Padrões para os quais a caixa de seleção Reportable está desmarcada não serão reportados na tabela de dados. As estatísticas não serão afetadas pelo status Reportable. • O relatório exibirá a equação e o gráfico de regressão, conforme mostrado e calculado no painel Calibration Curve no espaço de trabalho Analytics, com base na coluna Used. |
| Intact Quant All Peaks and Graphs | Um relatório que mostra as entradas da Results Table para cada amostra. Todas as colunas visíveis na Results Table são exibidas no relatório. O relatório também inclui o cromatograma XIC, espectro médio e espectro de reconstrução, para cada amostra e analito. | <ul style="list-style-type: none"> • Esse relatório é específico para o fluxo de trabalho Mass Reconstruction. |
| Intact Quant Analyte Summary and Calibration Curve | Um relatório que mostra as entradas da Results Table, a curva de calibração e os dados estatísticos para cada analito. A Results Table inclui o Nome da amostra, o Tipo de amostra, o Nome do analito, a Concentração real, a Área, a Altura, MW, MW, MW Delta esperados, a Concentração calculada e a Precisão. | <ul style="list-style-type: none"> • Esse relatório é específico para o fluxo de trabalho Mass Reconstruction. |
| Intact Quant Sample Summary | Um relatório que mostra as entradas da Results Table para todas as amostras. A Results Table inclui o Nome da amostra, o Tipo de amostra, o Nome do analito, a Concentração real, a Área, a Altura, MW, MW, MW Delta esperados, a Concentração calculada, a Precisão e a Aceitação da precisão. | <ul style="list-style-type: none"> • Esse relatório é específico para o fluxo de trabalho Mass Reconstruction. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|--------------------------------------|--|---|
| Gráfico de métricas | Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as File Information e um gráfico métrico da área do pico do analito. | <ul style="list-style-type: none"> O estado da caixa de seleção Reportable não afeta o conteúdo do relatório. Todos os pontos de dados são incluídos mesmo se as caixas de seleção estiverem desmarcadas. |
| MQ Analyte Report 1 | Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo, a Results Table da amostra e a Tabela XIC para cada amostra - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR ANALITO PARA < 8 AMOSTRAS | N/A |
| MQ Analyte Report 2 | Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo e a Tabela XIC para cada amostra desconhecida - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR ANALITO PARA < 8 AMOSTRAS | <ul style="list-style-type: none"> Somente desconhecidas são reportadas. |
| MQ Analyte Report 3 | Relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo e uma Tabela de resumo de amostras desconhecidas. | <ul style="list-style-type: none"> Somente desconhecidas são reportadas. |
| MQ Analyte Report condensed table | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. A tabela é exibida como 2 colunas para que caibam mais analitos por página. | <ul style="list-style-type: none"> Somente desconhecidas são reportadas. |
| MQ Analyte Report with chromatograms | Relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui as Informações do arquivo, uma tabela de resultados de amostra e um pequeno cromatograma para cada amostra. | <ul style="list-style-type: none"> Somente desconhecidas são reportadas. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|----------------------------|---|--|
| MQ Blank Template | N/A | <ul style="list-style-type: none"> Somente informações do cabeçalho, a logo e os números das páginas são exibidos no relatório |
| MQ Pep Quant | N/A | <ul style="list-style-type: none"> Para uso com o conjunto de dados Peptide Quantitation. Consulte o segundo exemplo, o exemplo de quantificação absoluta, no <i>Guia do usuário</i> para o software MultiQuant™. |
| MQ QC Summary 1 with flags | Um relatório que mostra Informações de arquivo, tabela de resumo QC por analito (valores com um CV mais alto que 20% são destacados) e a tabela de resultados detalhados QC (valores com uma precisão fora de 80-120% são destacados). | <ul style="list-style-type: none"> Controles de qualidade com a caixa de seleção Reportable desmarcada não serão incluídos no relatório nem serão usados nos cálculos |
| MQ Sample Report 1 | Um relatório que mostra, para cada exemplo, uma seção que inclui Informações do arquivo, Informações da amostra, Informações IS, Results Table do analito, Tabela XIC incluindo IS e cada analito - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR AMOSTRA PARA < 8 AMOSTRAS | N/A |
| MQ Sample Report 2 | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, TIC, Detalhes da amostra, XIC do analito e os resultados em forma de tabela - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR AMOSTRA PARA < 8 AMOSTRAS | <ul style="list-style-type: none"> Somente desconhecidas são reportadas. |
| MQ Sample Report 3 | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. | <ul style="list-style-type: none"> Somente desconhecidas são reportadas. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|-------------------------------------|---|---|
| MQ Sample Report condensed table | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. A tabela é exibida como 2 colunas para ajustar mais analitos por página. | <ul style="list-style-type: none"> • Somente desconhecidas são reportadas. |
| MQ Sample Report with chromatograms | Um relatório que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui informações do arquivo, informações de amostra, tabela de resultados de analitos e um pequeno cromatograma para cada analito. | <ul style="list-style-type: none"> • Somente desconhecidas são reportadas. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|---|---|--|
| MQ Sample Report with Concentration Threshold | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, Informações de amostra e a Soma dos resultados. | <ul style="list-style-type: none"> • O arquivo de consulta associado é Sample Report com Concentration Threshold.query. • Os componentes devem ser nomeados como "Cmpd X #", em que X é qualquer caractere de A a F, e # é qualquer valor numérico. Exemplo: no relatório, um componente chamado "Cmpd A 1" será exibido sob o título Compound Group A; um componente chamado "Cmpd B 1" será exibido sob Compound Group B e assim por diante. • Se os componentes estiverem no mesmo grupo, somente o primeiro componente do grupo, alfabeticamente, será incluído no relatório. Exemplo 1: se "Cmpd B 25" e "Cmpd C 1" pertencerem a grupo "Grp", o "Cmpd C 1" não estará no relatório. Exemplo 2: se "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" não forem atribuídos aos grupos, "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" não estarão no relatório. Exemplo 3: se "Cmpd A 1", "Cmpd A 2" e "Cmpd A 3" forem atribuídos aos grupos 1, 2 e 3, respectivamente, os 3 componentes estarão no relatório sob o título Compound Group A. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|-------------------------------------|--|--|
| MQ Sample Report with MRM ratios 2 | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção incluindo Informações do arquivo, Informações de amostra, uma Tabela de resumo de resultados e uma sobreposição de todos XIC. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora de 20% do esperado são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9. | N/A |
| MQ Sample Report with MRM ratios EU | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora do esperado (usando diretrizes EU para tolerâncias de proporção) são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9. | <ul style="list-style-type: none"> O arquivo de consulta associado é MRM ratios EU.query. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|---|--|---|
| MQ Sample Report with MRM ratios MQ EFAB 03 | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora de 20% do esperado são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9. | N/A |
| MQ Sample Report with MRM ratios | Um relatório que mostra, para cada amostra desconhecida, uma seção que inclui Informações do arquivo, informações de amostra e uma tabela de resumo de resultados. As proporções de Íons esperadas são calculadas automaticamente usando quaisquer padrões disponíveis. Os valores de proporção são posicionados em colunas personalizadas dentro da tabela de resultados. Quaisquer valores fora de 20% do esperado são sinalizados. Os nomes do analito de quantificador devem terminar em um espaço em branco seguido pelo número 1. Os nomes de analitos de íon de proporção devem terminar em um espaço em branco seguido de um número entre 2 e 9. | <ul style="list-style-type: none"> O arquivo de consulta associado é MRM ratios.query. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|---|---|--|
| MQ Sample Report with standards, QC, and blanks | Um relatório que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui Informações do arquivo, Tabela de resumo de padrões, Tabela de resumo QC, Tabela de resultados em branco; em seguida, para cada amostra desconhecida, uma seção incluindo Informações do arquivo, Informações da amostra, Informações IS, Tabela de resultados do analito, Tabela XIC incluindo IS e cada analito - IRÁ GERALMENTE IMPRIMIR 2 PÁGINAS POR AMOSTRA PARA < 8 ANALITOS. | <ul style="list-style-type: none"> Padrões e Controles de qualidade com a caixa de seleção Reportable desmarcada não serão exibidas em suas respectivas tabelas de resumo no relatório nem serão usadas nos cálculos estatísticos. |
| MQ Tutorial Dataset Heavy Light | N/A | <ul style="list-style-type: none"> Esse relatório destina-se para uso com o conjunto de dados Tutorial Dataset Heavy Light. Consulte o segundo exemplo, o exemplo de quantificação relativa, no <i>Guia do usuário</i> para o software MultiQuant™. |
| Per Sample Quant-Qual | Um relatório que mostra, para cada amostra selecionada, uma seção que inclui informações sobre o arquivo, informações sobre a amostra e a tabela de resultados apenas para os analitos selecionados. A Analyte Results Table é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela. | N/A |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|--|---|--|
| Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte | Um relatório que mostra, para cada amostra selecionada, uma seção que inclui informações sobre o arquivo, informações sobre a amostra e a tabela de resultados apenas para os analitos selecionados. A Analyte Results Table é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela. | <ul style="list-style-type: none"> O estado oculto de uma linha tem preferência sobre o estado da caixa de seleção Reportable. Se a caixa de seleção Reportable for selecionada, mas a linha estiver oculta, a linha não será reportada. |
| Por amostra Quant-Qual com estatísticas | Um relatório que mostra componentes para cada amostra com uma tabela WYSIWYG. XIC, MS e MS/MS são exibidos. Uma tabela de resumo de estatísticas para a área é exibida ao final do relatório. | <ul style="list-style-type: none"> Se a tabela de componentes possuir componentes UV, o traço UV será reportado sob o gráfico XIC no relatório. <hr/> <p>Nota: Se o nome do componente UV estiver no formato [compound_nameuv] ou [uv], nenhum traço será reportado, pois o sufixo uv é associado com o relatório UV MS Qual.</p> <hr/> Se uma amostra for rotulada como um QC e houver 2 ou mais amostras, então a média, STDEV e %CV serão calculadas e incluídas em uma tabela de resumo QC ao final do relatório. Se a caixa de seleção Reportable estiver desmarcada para uma linha QC, essa linha não será usada para qualquer cálculo na tabela de resumo QC. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|------------------------|--|--|
| Per Analyte Quant-Qual | Um relatório que mostra, para cada analito, uma seção que inclui informações sobre o arquivo, tabela de resultados, curvas de calibração e cromatogramas, incluindo o padrão interno e cada analito. Este modelo é ideal para uma tabela de resultados com um grupo definido nela. | N/A |
| Positive Hits Qual | Um relatório que mostra, para cada amostra selecionada, uma seção que inclui File Information; Sample Information; Analyte Results Table apenas para os analitos selecionados, cromatogramas de todos os analitos, padrão interno e o XIC, os espectros de MS adquiridos/teóricos e os espectros de MS/MS adquiridos/da biblioteca para cada analito selecionado. A Analyte Results Table é impressa conforme aparece na tabela de resultados. Todos os sinalizadores de confiança qualitativa são listados no início da tabela. | N/A |
| Qual CSV report | Relatório em formato csv que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui informações de arquivos, informações de amostras e a tabelas de resultados de analitos. | <ul style="list-style-type: none"> Recomenda-se usar a opção CSV para formato de Relatório. |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|-------------------|---|------------------------|
| Sample Summary | Um relatório que mostra, para cada amostra, uma seção da tabela de resumo dos analitos. Este modelo de relatório é ideal para uma tabela de resultados com grupos. | N/A |
| UV MS Qual report | Um relatório que mostra, para cada amostra, os componentes dessa amostra e seu componentes UV correspondente com uma tabela WYSIWYG. XIC, MS e MS/MS são exibidos juntamente com os dados UV. Uma tabela de resumo de estatísticas para a área é exibida ao final do relatório. | |

| Modelo | Descrição do modelo (conforme exibido na caixa de diálogo Create Report) | Observações adicionais |
|--------|--|---|
| | | <ul style="list-style-type: none"> • Os dados UVMS devem ser processados com as convenções de nomenclatura <i>composto 1</i> (qualquer string) para o componente do espectrômetro de massas (MS) e <i>composto 1uv</i> (qualquer string mais uv) para o componente UV correspondente. • Somente as luzes de tráfego do Erro de massa, do Erro de massa do fragmento, da Confiança RT, da Confiança do isótopo e da Confiança da biblioteca são exibidas. • Uma tabela de gráficos é criada para mostrar os componentes individuais da Results Table, incluindo XIC, Traço MS1, Traço MS/MS e as informações do cabeçalho do composto 1 e o traço UV do composto 1uv. Consulte Figura 1. • Os gráficos do analito são repetidos somente para os experimentos MS, não para os experimentos UV. • Se uma amostra for rotulada como um QC e houver 2 ou mais amostras, então a média, STDEV e %CV serão calculadas e incluídas em uma tabela de resumo QC ao final do relatório. Consulte Figura 1. • Se a caixa de seleção Reportable estiver desmarcada para uma linha QC, essa linha não será usada para qualquer cálculo na tabela de resumo QC. |

Figura 1 Tabela de gráficos

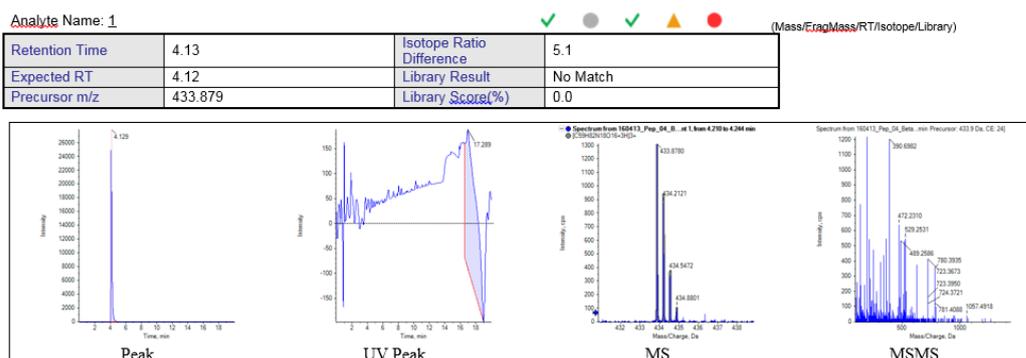


Figura 2 Tabela de estatísticas

Statistics (Grouped by Concentration for QCs - Area)

| Analyte Peak Name (MRM Transition) | Mean | Std. Deviation | % CV | Number of Values Used |
|------------------------------------|---------|----------------|------|-----------------------|
| 1 (723.3573 - 723.3773) | 1.062e4 | 7.367e2 | 6.93 | 2 of 2 |
| 2 (753.3091 - 753.3291) | 2.215e4 | 6.858e2 | 3.10 | 2 of 2 |
| 3 (760.3353 - 760.3553) | 9.332e3 | 1.955e1 | 0.21 | 2 of 2 |
| 4 (631.3450 - 631.3650) | 3.244e4 | 1.110e3 | 3.42 | 2 of 2 |
| 5 (636.3373 - 636.3573) | 1.144e5 | 3.962e2 | 0.35 | 2 of 2 |
| 6 (871.4354 - 871.4554) | 6.479e4 | 1.198e3 | 1.85 | 2 of 2 |
| 7 (932.4493 - 932.4693) | 2.183e4 | 7.301e2 | 3.34 | 2 of 2 |
| 8 (1000.5743 - 1000.5943) | 2.553e4 | 5.007e2 | 1.96 | 2 of 2 |
| 9 (755.4352 - 755.4552) | 1.127e5 | 8.422e3 | 7.48 | 2 of 2 |
| 10 (1184.5929 - 1184.6129) | 3.576e4 | 7.231e2 | 2.02 | 2 of 2 |
| 11 (884.4871 - 884.5071) | 5.183e4 | 1.512e3 | 2.92 | 2 of 2 |
| 12 (1176.5468 - 1176.5668) | 1.670e4 | 1.848e2 | 1.11 | 2 of 2 |
| 13 (871.9418 - 871.9618) | 1.597e5 | 5.501e2 | 0.34 | 2 of 2 |
| 14 (879.4236 - 879.4436) | 1.868e5 | 5.182e3 | 2.77 | 2 of 2 |

Entre em contato conosco

Treinamento do consumidor

- Na América do Norte: NA.CustomerTraining@sciex.com
- Na Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Fora da União Europeia e da América do Norte, visite sciex.com/education para obter informações de contato.

Centro de aprendizagem online

- [SCIEX University™](http://sciex.com/education)

Suporte da SCIEX

A SCIEX e seus representantes mantêm uma equipe de atendimento totalmente treinada e especialistas técnicos localizados em todo o mundo. Eles podem responder perguntas sobre o sistema ou quaisquer problemas técnicos que possam surgir. Para obter mais informações, visite o site da SCIEX em sciex.com ou entre em contato conosco através de uma das seguintes maneiras:

- sciex.com/contact-us
- sciex.com/request-support

Segurança cibernética

Para obter informações sobre as orientações mais recentes sobre cibersegurança para produtos da SCIEX, visite sciex.com/productsecurity.

Documentação

Esta versão do documento substitui todas as versões anteriores deste documento.

Para visualizar este documento eletronicamente é necessário o Adobe Acrobat Reader. Para fazer download da versão mais recente, vá até <https://get.adobe.com/reader>.

Para encontrar a documentação do software, consulte as notas de versão do software ou o guia de instalação de software que o acompanha.

Para encontrar a documentação referente aos produtos de hardware, consulte o DVD *Customer Reference* que acompanha o sistema ou componente.

As versões mais recentes da documentação estão disponíveis no site da SCIEX, em sciex.com/customer-documents.

Nota: Para solicitar uma versão gratuita e impressa deste documento, entre em contato com sciex.com/contact-us.

Este documento é fornecido aos clientes que compraram um equipamento SCIEX para uso na operação de tal equipamento. Este documento é protegido por direitos autorais e qualquer reprodução deste documento ou qualquer parte do mesmo é estritamente proibida, exceto quando houver autorização por escrito da SCIEX.

O software que pode ser descrito neste documento é fornecido sob um contrato de licença. É contra a lei copiar, modificar ou distribuir o software em qualquer meio de comunicação, exceto se permitido especificamente no contrato de licença. Além disso, o contrato de licença pode proibir o software de ser desmontado, passar por engenharia reversa ou decompilado para qualquer finalidade. As garantias são conforme definidas em tal documento.

Partes deste documento podem fazer referência a outros fabricantes e/ou os seus produtos, que podem conter peças cujos nomes estão registrados como marcas registradas e/ou funcionam como marcas registradas dos seus respectivos proprietários. Qualquer uso é destinado apenas para designar estes produtos do fabricante como fornecidos pela SCIEX para incorporação em seu equipamento e não implica em qualquer direito e/ou licença para usar ou permitir que outros usem tais nomes de produto seus e/ou do fabricante como marcas registradas.

As garantias da SCIEX estão limitadas a estas garantias expressas fornecidas no momento da venda ou licença de seus produtos e são representações, garantias e obrigações únicas e exclusivas da SCIEX. A SCIEX não oferece nenhuma outra garantia de nenhum tipo, expressa ou implícita, incluindo, entre outras, garantias de comercialização ou adequação para um propósito particular, decorrentes de um estatuto ou da lei, ou de uma negociação ou utilização comercial expressamente divulgada, e não assume nenhuma responsabilidade ou obrigação contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, para qualquer uso pelo comprador ou por quaisquer circunstâncias adversas decorrentes.

Produto destinado apenas para pesquisa científica. Não destinado ao uso em procedimentos diagnósticos.

As marcas comerciais e/ou marcas registradas mencionadas neste documento, incluindo as logos associadas, são de propriedade da AB Sciex Pte. Ltd., ou de seus respectivos proprietários, nos Estados Unidos e/ou em outros países.

AB SCIEX™ está sendo usada sob licença.

© 2020 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, n.º 04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256