SCIEX OS 2.2 版本发布说明

介绍

感谢您选择 SCIEX 作为您的系统供应商。我们很高兴为您提供 SCIEX OS 2.2 软件，它可支持下列系统：

- ZenoTOF 7600 系统
- X500R QTOF 和 X500B QTOF 系统
- SCIEX 7500 系统
- SCIEX Triple Quad 4500、5500、5500+、6500 和 6500+ 系统

  注释: QTRAP 系统不受支持。

- Echo MS 系统，它包括 SCIEX Triple Quad 6500+ 系统和 Echo MS 模块

SCIEX OS 2.2 还能让用户处理从三重四极杆、QTRAP 和 TripleTOF 系统（运行 Analyst 软件 1.6.2 版或更高版本，或 Analyst TF 软件 1.7.1 版或更高版本采集的数据。

本文档介绍了软件的功能。我们建议用户保留这些版本发布说明，以在熟悉软件的过程中用作参考。

版本 2.2 的新增功能

本节介绍 SCIEX OS 2.2 的改进和修正。要查看 SCIEX OS 之前版本的改进和修正，请参阅该版本软件随附的版本发布说明。

2.2 版的新功能和改进

- 对 **SCIEX Triple Quad** 系统的支持：软件支持 SCIEX Triple Quad 4500、5500、5500+、6500 和 6500+ 系统。
- 用户管理设置的导出和导入：SCIEX OS 用户数据库可以在一台 SCIEX 计算机上导出，然后在另一台计算机上导入。此功能允许在一台计算机上进行配置更改，然后移植到实验室中的其他计算机。

  注释: （管控客户）如果在软件验证之后导入用户管理设置，我们建议客户记录在其内部变更控制流程之后进行的配置更改。

- 多个 **MS** 方法：用户可以在 MS Method 工作区中打开多个 MS 方法。
- **Batch** 工作区中的自定义列：用户可以在 Batch 工作区中创建自定义列，以便在处理中使用，例如在处理化学式和计算列时。

  注释: 数据无法从实验室信息管理系统 (LIMS) 导入到包含自定义列的批次。

- **Data Acquisition** 窗口中的碎裂模式：当 SCIEX OS 从 ZenoTOF 7600 系统采集数据时，Data Acquisition 窗格中的图形标题显示在方法中配置的碎裂模式。
- 可变 **SWATH** 窗口的导入：用户现在可以从文本文件导入可变 SWATH 窗口。
- 保存自动批次的结果：这种新权限允许保存在 Batch 工作区中自动创建的 Results Tables。
- **QJetX500 QTOF** 系统的 **RF** 振幅：用户可以手动覆盖 X500 QTOF 系统的 **QJet RF amplitude** 参数。

  注释**:** 当用户打开在先前版本的 SCIEX OS 中创建的 MS 方法时，可以看到 **Override QJet RF** 值和 **QJet RF amplitude** 参数。这些参数设置为默认值。(ONYX-15939)

- 新 **Reporter** 软件字段：这些新字段在 Reporter 软件模板中可用：
  - StdAdd_ActualConcentration
  - StdAddn_CalculatedConcentration
  - StdAddn_Accuracy
  - StdAddn_CalibrationCurve
  - Report_Created_By
  - ISMSMSPeak

已在 **2.2** 版中解决的问题

MS Method 工作区

- 当用户为 MS 方法编辑 Mass Table 时，**Delete** 键不起作用。(ONYX-7384)

Batch 工作区

- 用户无法从网络位置导入批次文件。(BLT-3147)
- 在 Decision Rule Configuration 对话框中，选择处理方法后，**Flagging Rules** 字段中的列表可能会包括该处理方法所定义的组合标记规则，但不会应用。即，不选中 **Apply Rule** 复选框。(ONYX-8352)

Queue 工作区

- SCIEX OS 可能无法将数据附加到网络资源上的 wiff 文件。(ONYX-11437)

MS Tune 工作区

- 用户无法恢复在先前版本的 SCIEX OS 中保存的仪器设置。(BLT-2722)

Analytics 工作区

- 当用户在处理方法的 Components 页面配置表格设置以显示 **Mass (Da) and Width (ppm)** 时出现错误。(MQ-7709)
- 导入表显示设置 (cset) 文件时，**Component Name** 列移到表的右侧附近。(BLT-2564)

- 公式编辑器未识别布尔运算符后面的语法错误。
- 当 Results Table 导出到文本文件时，数据格式不是所选的区域格式。(BLT-2314)
- **Comment** 列已添加到 Processing Method Editor 中的 Components 页面上的成分表。(BLT-2726)
- 多电荷物质无法从文本方法导入到 Processing Method Editor 中的 Components 页面。(BLT-2745)
- 如果使用的列是计算列，度量图表在手动积分后不会自动刷新。(BLT-2822)
- Results Table 中的 **Sample Name** 列无法移动以适应导出到 LIS 的操作。(BLT-2852)
- 仅导出当前可见的 **XIC Width** 列。(BLT-2874)
- 对于 Formula Finder 和 ChemSpider 工作流，在负电荷化合物的处理中使用了错误的极性。(BLT-2963)
- SCIEX OS 在审核未找到峰的成分期间意外关闭。(BLT-2976)
- 如果化学式包含未出现在当前数据中的列名称或单元格值，则无法保存化学式。(BLT-2991)
- 在用户通过化学式打开高电荷离子的 Peak Review 窗格时 SCIEX OS 意外关闭。(BLT-2998)
- 对于公差的离子率，标记规则未能正确地标记值。(BLT-3052)

Reporter

- 新标签 Report_Created_By 显示创建报告的用户的名称。(BLT-1818)
- 未显示分析物的内标的 MS/MS 峰。(BLT-2123)
- 为单个样本创建的报告仅包含关于 QC 样本的信息。(BLT-2661)
- 如果度量图表在控件内，例如在 IF 语句内，则不会生成它们。(BLT-2901)
- 在报告中未处理 IF 语句内的成分组名称和样本 ID 列。(BLT-2904)
- 样本序列号未包含在报告中。(BLT-2931)
- 从 Microsoft Office 365 升级到 Microsoft 365 Apps 或从 Microsoft Word 2016 升级到 Microsoft Word 2019 后，所生成报告上的一些色谱图为空。(BLT-3080)

Explorer 工作区

- 通过 **Copy Graph** 命令复制的 XIC 分辨率低。(BLT-2869)
- 用于导出到 Analyst 软件的命令已从 Explorer 工作区删除。(BLT-2974)

审核图

- SCIEX OS 不会对使用 Analyst 软件创建的项目应用审核图。(BLT-2833)
- 用户登录失败在审核记录配置为记录它们的情况下未记录在审核记录中。(BLT-2995)

设备

- 在分流阀的 Detailed Status 对话框中，当系统处于平衡和加载状态时 **Time** 值不正确。(ONYX-7831)
- （Shimadzu LC-40 系统）50 µL 样本环的进样体积无法设置为 50 µL。(BLT-3024)
- （Agilent LC 系统）在 Detailed Status 对话框的泵部分中，未显示 A 和 B 溶剂瓶。用户无法看到正在使用的是哪些溶剂。(BLT-2319)
- （Agilent G7167A 多样本进样器）SCIEX OS 不支持为 G7167A 多样本进样器定义的定制孔板。已添加了两种新孔板布局，以支持 54 瓶孔板的行和列布局。（BLT-2389、BLT-2401）
- 对于一些质谱仪，Event Log 中显示的固件版本不正确。(BLT-2625)
- 在设备激活和打开 MS Tune 工作区的过程中发生性能变慢的问题。该问题主要发生在 Waters Acquity LC 中，但是在其他 LC 设备中也可见到。此修正也包含在针对变慢问题的 SCIEX OS 2.1.6 补丁程序中。(BLT-2957)
- 当采集计算机连接到客户 LAN 时，用户无法激活质谱仪设备。此修正也包含在针对通信问题的 SCIEX OS 2.1.6 补丁程序中。（BLT-3007、BLT-3028、BLT-3066）
- 对于配有多层进样器的 ExionLC 系统，**Plate Layout** 功能在 Batch 工作区中被禁用。此修正也包含在针对 Shimadzu 孔板布局的 SCIEX OS 2.0.1 补丁程序中。(BLT-3061)

SCIEX 7500 系统

- 在负极性的 IDA 实验中碰撞能量 (CE) 参数显示错误。(ONYX-8566)
- 如果用户没有按顺序完成所有前序步骤，在步骤 5（优化碰撞能量）将显示错误。(ONYX-8568)

Echo MS 系统

- 使用列蛇形采样序列时，可能会出现问题：
  - 液滴捕获的丢失率可能较高，导致重现性较差。
  - 沿着 Y 轴长时间前后移动产生的附加载荷可能会导致运动机构一直承受压力。

使用注意事项和已知问题

使用注意事项

- （管控客户）我们建议，如果在软件验证之后导入用户管理设置，则客户应按照其内部变更控制流程记录配置更改。
- 对于 ExionLC 2.0 系统：
  - 如果使用溶剂液位监控，则确保当前容积正确，并且执行每个批次采集之前在 Device Control 或 Device Details 对话框中设置了正确的警告液位和关闭液位。如果由于需要添加流动相而造成在样本采集过程中必须更新当前容积，则在 Device Details 对话框中使用泵的溶剂液位面板。

  - 在样本托盘中加载样品时，确保采用软件中的孔板布局。请参阅文档：《*ExionLC 2.0 系统硬件用户指南*》。
  - 二极管阵列检测器（DAD 或 DAD-HS）不能与多波长检测器 (MWD) 同时用于数据采集。切勿将 LC 系统配置为同时使用 DAD 和 MWD。
  - ExionLC 2.0 DAD（DAD 或 DAD-HS）和 MWD 仅支持 10 Hz 或更低的采样率。不会保存采样率高于 10 Hz 的 LC 方法。
  - 创建 DAD 方法时，即使未选择 3D 数据模式，也应确保 2D 数据通道的波长和波长程序的波长处在为 3D 数据模式定义的波长范围内。
- 当一个批次开始时，SCIEX OS 会停止安装 Windows 更新、Windows Defender 病毒扫描 (Windows 10) 和 Symantec Endpoint 病毒扫描 (Windows 7)。计划更新和病毒扫描在未发生数据采集时进行。
- 如欲避免性能问题或数据损坏，用户不应在样本采集期间执行任何计算机维护步骤，如整理碎片或清理磁盘。
- 对于 Echo MS 系统：
  - 创建 MS 方法时，**Spray Voltage** 默认为 4500 V。

    注释**:** 我们建议使用不超过 5000 V 的值，以最大限度延长开放端口接口 (OPI) 电极装置的使用寿命。
  - 由于峰较窄，我们建议尽可能减少离子对的数量。建议使用四到六个离子对。
  - 用户不得在多个批次中使用相同的数据或结果文件名称。在每个新批次中始终使用新数据和结果文件。
  - **Injection Volume** Batch 工作区的 列中输入的值不能替代 AE 方法中指定的喷射量。
- 如果 ClearCore2 服务在网络采集期间中断，那么中断时正在采集的样本的部分样本数据不会写入数据文件。如果该服务在本地采集期间中断，那么部分样本数据写入数据文件，但是会被标记为损坏。如果 ClearCore2 服务中断，那么任何自动触发的处理和决策规则处理也会失败。
- 在获取网络资源时，用户可通过下列方法实时查看 Explorer 工作区中的数据：
  - 打开 SCIEX OS 窗口底部的 Data Acquisition 面板。
  - 在 Queue 工作区内，双击打开正在获取的样本。

  (DS-1873)

  注释**:** 如果样本在 Explorer 工作区内被打开，那么样本被移动至网络资源后会显示一条 "File not found message" 消息。
- 在 SCIEX OS 2.2 中创建的数据文件不能附加到 SCIEX OS 1.3.1 或更早版本中采集的数据文件。(DS-1931)
- 包含自定义列的数据不能附加到在 SCIEX OS 2.1.6 或更早版本中采集的数据文件。

- MultiQuant 软件文件（qmethod、qsession 和 cset）不能打开或用于 SCIEX OS 的 Analytics 工作区。然而，已导出到文本文件的 MultiQuant 软件方法可以导入 Analytics 工作区中。
- 对于非目标工作流， Results Table 应限制在 150,000 行以内。当 Results Table 超出此规模时，SCIEX OS 性能显著下降。
- 如果使用 AutoPeak 积分算法，则用户必须在特定 Results Table 内的成分背景下考虑所有计算参数。软件会为每个成分创建 AutoPeak 模型，且此模型将用于该成分的所有样本。AutoPeak Asymmetry 计算参数显示了特定偏离与该成分 AutoPeak 模型的偏离之比。(BLT-2030)
- 在将数据传输到 Watson LIMS 时，用户必须等到传输成功完成，然后才能单击 SCIEX OS 中的 **Confirm**。如果用户在传输完成之前单击 **Confirm**，则传输状态显示为 `Failed`。
- 处理方法 Integration 页面上的 **XIC width** 默认值为 0.02。为了处理标称质量数据，建议的值为 0.1 或更大，以便尽量提高谱库搜索的质量。(MQ-7810)
- 在从 Analyst 软件向 SCIEX OS 2.2 传输仪器设置时，请确保使用 SCIEX OS 2.2 安装包中包含的 Instrument Settings Converter。
- 转换方法时，请确保使用 SCIEX OS 2.2 安装包中包含的 SCIEX OS 至 Analyst 版软件方法转换器。

一般问题

问题	注释
用户无法打开在 MS Tune 工作区中或在 MS Method 工作区中进行调谐期间使用 Guided MRM 创建的报告 (xps) 文件。Windows 报告无法打开这种类型的文件。	如果计算机上未安装 Microsoft XPS Viewer，则会出现此问题。该查看器包含在 SCIEX OS 安装包中。要安装该查看器，请遵循以下步骤： 1. 以管理员身份运行 Command Prompt： a. 在 Windows 工具栏的 **Type here to search** 字段中，键入 **cmd**。 b. 右键单击 **Command Prompt**，然后单击 **Run as administrator**。 2. 在 Administrator: Command Prompt 窗口中，键入以下命令，然后按 **Enter**： **dism /online /norestart /add-package /packagepath:"C:\Program Files\SCIEX\SCIEX OS\Microsoft-Windows-Xps-Xps-Viewer-Opt-Package~31bf3856ad364e35~amd64~~.cab"** 注释**:** 在一行中键入完整命令。 安装 XPS Viewer 时会显示一个进度条。 3. 安装完成后，关闭 Command Prompt 窗口。
（SCIEX 7500 系统）文件路径过长（129 个或更多字符）的数据无法使用 Analyst 1.7.2 或安装了 HotFix 5 的 Analyst 1.6.3 软件处理。此外，此类数据文件的文件信息无法完整地显示在 Analyst 1.7.2 或安装了 HotFix 5 的 Analyst 1.6.3 软件中。(BLT-2246/AN-2250)	为了避免此问题，使用 SCIEX OS 中的 Analytics 工作区处理数据，或确保使用较短的文件路径。

问题	注释
帮助的内容窗格为空白。(BLT-2497)	帮助文件被阻挡。为了解决此问题，请执行以下步骤： 1. 浏览到该帮助文件，在文件夹 `C:\Program Files\SCIEX\SCIEX OS\Documentation` 中用右键单击，然后单击 **Properties**。 2. 在 Properties 对话框中，选择 **Unblock**。 3. 单击 **OK**。 注释**:** 如果 Properties 对话框不包含此复选框，则不会阻挡帮助文件。

设备问题

问题	注释
当选择一种、两种或三种冲洗溶剂时，冲洗不会发生。(BLT-1212)	添加第四种冲洗溶剂，并减少每种冲洗液的体积，以缩短冲洗时间。
当质谱仪处于待机状态时用户无法启动注射泵，因为注射泵的 **Direct device control** 按钮未激活。(BLT-2698)	启动数据采集或调谐程序以使 **Direct device control** 按钮激活。
随即显示以下错误消息：“未能在 `wiff` 文件中写入 `LC` 数据。” (BLT-2960)	在这些条件下可能会显示该错误消息： • 如果 LC 方法配置为无检测器。可以忽略消息。 • 如果 LC 方法配置了检测器。该消息指示样本的 LC 数据采集出现了问题。
在设备（如 CDS）发生故障时，系统未激活右侧状态窗格上的 **Standby** 按钮，导致用户无法清除错误。(MSCS-1314)	如果发生此问题，则单击 Direct Control 中的 **Start** 将 CDS 状态从 Fault 更改为 Running，以清除 CDS 的 Fault 状态。
LC 系统的 Device Details 对话框缺失信息。(ON-2069)	如果 Windows 区域设置被设置为 **English (United States)** 以外的格式，则会出现此问题。为避免此错误，请按照文档《软件安装指南》中的说明配置 Windows。

问题	注释
当使用远程桌面应用访问采集计算机时，可能会发生以下问题： • 在 LC Method 工作区中，某些参数不可见。 • 在 LC 系统的 Detailed Status 对话框中，某些 LC 参数不可见。 (ONYX-7153/ONYX-8185)	当用户在未登出采集计算机的情况下断开并重新连接远程桌面会话时，会发生此问题。如欲避免这个问题，请使用以下方法之一： • 登出采集计算机，然后再次登录。 • 使用远程桌面应用的全屏模式。 • 纠正采集计算机的分辨率。 • 直接在采集计算机上查看详细的状态。
在调谐期间，SCIEX OS 未自动启动和停止外部注射泵。(ONYX-8459)	先手动启动注射泵，然后再开始调谐程序。
在溶剂液位面板中更改了任何参数之后，等待 5 秒钟让状态更新，然后再进行其他更改。(ONYX-9093)	不适用
(Waters LC) Explorer 工作区中显示的 Sample Information 中缺失 LC 设备属性和方法信息。(ONYX-11604)	不适用

Agilent LC 系统问题

问题	注释
自动进样器不支持高通量设置。(ACQ-529)	目前不支持高通量设置。
当 LC 梯度网格中的流率被复制时，逗号被视为小数分隔符而被忽略。(ACQ-2191)	这是 Agilent LC 的问题。如欲避免出现该问题，请手动输入流率，并使用逗号作为小数分隔符。
如果设备在设备激活期间为 Fault 状态，则 Fault 状态未被正确反映。(ACQ-2195)	如果出现这种问题，请清除设备故障，然后停用和重新激活 Agilent 设备。
当质谱模式被设置为 Apex 或 All in Peak 时，Agilent G7121B 1260 Infinity II FLD Spectra 模块的实时 DAD 数据未记录。(ONYX-4998)	不支持 Apex 和 All in Peak 质谱模式。使用另一种模式。
当信号 A 激励被设置为零阶且光电倍增管 (PMT) 增益被设置为大于 6 时，如果正在使用 Agilent G7121B 1260 Infinity II FLD Spectra 模块，则系统仍处于 Loading 或 Equilibrating 状态。(ONYX-4999)	如果信号 A 激励被设置为零阶，则将 PMT 增益设置为 6 或以下。

ExionLC 2.0 系统问题

问题	注释
如果 Plate Layout 窗口打开时用户在 Batch 工作区中更改了 **Rack Type**，则 Plate Layout 窗口中的 **Rack Type** 不会更新。(ONYX-8760)	如果 Plate Layout 对话框在 Batch 工作区中打开且用户更改了批次网格中的 **Rack Type**，则 Plate Layout 中的进样瓶布局的可视化表示会更新，但是 **Rack Type** 字段不更新。但是，批次中的所有信息，包括 **Rack Type** 和 **Vial Position**，都正确无误。为了避免出现此问题，在 Plate Layout 对话框中更改 **Rack Type**，或者先关闭 Plate Layout 对话框，再在批次网格中更改 **Rack Type**。
可以同时打开 Device Details 对话框的多个实例。(ONYX-9049)	如果用户更改设备配置时 Device Details 对话框打开，即使为新配置打开了 Device Details 的另一个实例，较旧配置的 Device Details 对话框仍保持打开。此问题不影响可用性。但是，为了避免混淆，确保在更改设备配置之前关闭任何打开的 Device Details 对话框。

ExionLC AC、ExionLC AD 和 Shimadzu LC 系统问题

问题	注释
在柱温达到设定温度前开始注射。	如果柱温箱的 **WAIT TIME** 被手动设置为 0，则确保提交任何样本前平衡系统并在柱温箱达到设定温度后等待 10-15 分钟。或者，将 **WAIT TIME** 设置为 1 - 10 的任何整数，然后在 LC 方法中选择 **Wait for temperature equilibration before run**。如果选中此选项，则在柱温箱达到设定温度后，软件将会在等待 **WAIT TIME** 所设定的时间量后开始注射。
当包含 PDA 检测器的硬件配置文件激活时，LC 方法中的检测器默认设置在新创建的 LC 方法与已打开的先前在未激活 PDA 检测器的情况下使用相同 LC 创建的 LC 方法之间存在不同。(ACQ-2176)	如欲避免出现任何问题，请确保 PDA 设备使用正确的参数。
在系统进入待机状态后，或者停用后，温度恢复到在上一个平衡程序或 LC 方法中设置的温度。(BLT-2300)	不适用
（Shimadzu LC-40 系统）LC 方法中自动填充的字段内容未打印在报告中。(BLT-2850)	通过键入值替换自动填充的内容。
Nexera Mikros LC 泵在达到最大压力限值时不会进入故障状态。(ONYX-7794)	不适用

问题	注释
Nexera Mikros LC 泵在设备配置中被错误识别为 LC-20AB 泵。(ONYX-8030)	LC 系统的性能不会受到影响，但是会在数据文件、日志和审核记录中错误地识别泵。
(Shimadzu LC-40) 在 Plate Layout 对话框中，如果用户要配置含多个孔板的支架类型，则当用户完成孔板配置并选择下一个孔板时，已配置孔板的名称会更改为 **<Unassigned>**。(ONYX-8441)	保存批次并重新打开，可在 Plate Layout 对话框中正确显示孔板名称。
（Shimadzu LC-20 系统）在柱温达到设定温度之前停止平衡。(ONYX-14932)	不适用

采集问题

问题	注释
当选择 Standby 时，Harvard 注射泵转向 Fault 状态。(ACQ-2193)	如欲避免该问题和清除错误，须使用 Direct Control 功能启动注射泵。
（X500 QTOF 和 ZenoTOF 7600 系统）对于 *Scheduled* MRM^{HR} 方法，质量表列不打印。(ACQ-2611)	当用户执行以下操作时，UI 中显示的列并不会全部显示在方法的打印输出中： 1. 创建一个 MRM HR 方法。 2. 应用扫描时间表。 3. 选择显示高级参数。 4. 保存，然后打印方法。 如欲避免出现此问题，须将纸张尺寸更改为比信纸尺寸大的尺寸。
（X500 QTOF 系统）在手动调谐中，如果用户在无校准样本（即无 CDS 或 LC 自动校准）的情况下提交批次，则手动 MS 方法采集中的离子将用做首个样本和批次中所有后续样本的样本间 DBC 参考列表。如果用于手动采集的 MS 方法与批次中提交的方法之间存在质量范围、极性等任何不匹配之处，则由于批次中所有样本的质量准确度偏移，样本间校准将失败。(ACQ-2834)	为避免出现这个问题，用户可以执行下列操作之一： • 如果用户在 MS Method 工作区内完成手动采集后提交了不含校准样本的批次，则样本间校准将表现出预期行为。批次中的第一个样本用于生成参考列表，用以校准后续样本。 • 如果在手动采集的过程中，用户提交了包含校准样本的批次，样本间校准将表现出预期行为，不会观察到任何质量精度偏移。
导入采集方法和处理方法出现不一致从而导致定性结果不可信。(BLT-284)	从采集方法中导入的信息的质量准确性保留两位小数。在处理方法中用于计算质量准确性的方程式生成的结果保留四位小数。因此，这可能导致两种方法生成的结果不一致。
DAD 面板的实时更新可能比本方法中所选择的响应时间慢。(DS-853)	如欲避免出现此问题，须降低 DAD 采集的频率，或者在完成采集后检查数据。

问题	注释
实时 UV 数据采集期间，XWC 与 TWC 图形的峰标记不一致。(DS-1262)	为避免任何问题，应使用 Explorer 工作区检查采集后的数据。
（SCIEX 7500 系统）当采用 MRM 全谱扫描的 IDA 实验与另一个采用实施 sMRM 触发的 *Scheduled* MRM 算法的实验发生循环时，在 IDA 标准的 **Intensity threshold exceeds** 字段中指定的触发阈值将不会应用到 MRM 全谱扫描的候选质量。(MSCS-2283)	• 在循环的 *Scheduled* MRM 算法实验中关闭 sMRM 触发。IDA 强度阈值将会应用到 MRM 全谱扫描的候选质量。 • 将 MRM 全谱扫描更改为使用 *Scheduled* MRM 算法，并将所关注的化合物保留时间设置为 0。IDA 强度阈值将会应用到全谱扫描的候选质量。
（ZenoTOF 7600 系统）在 EAD 碎裂模式中未采集数据。(MSCS-2527)	如果使用 EAD 碎裂，则累积时间必须为反应时间的至少三倍。否则，不会采集任何数据。为了解决此问题，可以增加累积时间。
（X500 QTOF 和 ZenoTOF 7600 系统）在质量亏损 IDA 标准中，显示的负质量亏损值的符号有误。(MSCS-2537)	算法选择了正确的前体离子，因此采集的数据正确。
（ZenoTOF 7600 系统）使用 SCIEX OS 2.1.6 或更低版本采集的 wiff 数据文件在使用更高版本的软件打开时，可能会在图形标题中显示错误的碎裂模式。(MSCS-2945)	这个问题出现在使用 MRM^{HR} 或 *Scheduled* MRM^{HR} 算法方法与混合碎裂模式 (EAD/CID) 的 wiff 数据文件中。
IDA 采集过程中可能会有额外时间被增加到随机循环。(ONYX-1764)	如欲避免出现任何问题，在运行 IDA 之前，请确保 Google 更新服务（gupdate 和 gupdatem）（如果系统上存在此服务）以及 Windows 备份已被禁用。
在用户将批次打印到 PDF 时，列标题或正文单元格中的任何数值从文档中缺失。(ONYX-2236)	不适用
从 Excel 电子表格等文件复制行并将其粘贴到 Batch 工作区的网格时，某些成分未添加到网格中。(ONYX-6068)	将缺失的成分手动添加到批次中。
当用户在 Batch 工作区中粘贴行到现有行时，内容不会被正确粘贴。(ONYX-6083)	为避免此问题，不要粘贴到现有行，而是插入空行并在其中粘贴新内容。然后删除现有行。
当 `Acquisition Methods` 文件夹包含损坏的 MS 方法时，Batch 工作区的 **MS Method** 列中没有可用的 MS 方法可供选择。(ONYX-6795)	如果 MS 方法列表为空，则找到损坏的方法并将其删除。

问题	注释
当用户使用选项 **Stop after the current tasks are completed** 停止队列时，采集完成，且处理不会开始。(ONYX-6802)	不适用
在 Queue 工作区中，因决策规则处理而重新进样的样本显示在 **Processing Method** 列的 ***Embedded Method*** 中，而不是与原始样本相关联的处理方法名称中。(ONYX-6896)	在处理第一个样本时，将会创建 Results 文件并会将 **Processing Method** 列中指定的处理方法嵌入到新的 Results 文件中。因此，为重新进样的样本指定的嵌入方法与为第一个样本指定的处理方法相同。
如果采集计算机在采集 IDA 数据期间由 Windows 远程桌面控制，则采集性能可能降低，导致数据点丢失。(ONYX-7491)	在采集 IDA 数据时，请勿使用远程桌面控制采集计算机。
在 SCIEX OS 中采集的数据在 Analyst 软件中打开时，Analyst 软件中的 **MRM detection window** 与 SCIEX OS 中的 **Retention time tolerance** 不匹配。(ONYX-7602)	**Retention time tolerance** 值用于计算 **MRM window**。此值与 **MRM detection window** 不同，它显示检测窗口的默认值。
当用户尝试将方法打印到当前打开的 PDF 文件时发生错误。(ONYX-7813)	打印该方法之前关闭 PDF 文件，或者使用不同的文件名保存。
（QTRAP 系统）在负极性中，不能为 MS^3 实验设置 AF2 的默认值。(ONYX-8041)	当用户在负极性中为 MS^3 实验设置 AF2 的默认值时，不会保存默认值。 要在负极性中保存 AF2 的默认值，首先使用负极性所需的 AF2 值配置正极性。然后再更改为负极性并保存默认值。
使用 *Scheduled* MRM 算法的 MS 方法可能以无效的方法持续时间进行保存。(ONXY-8443)	如果扫描时间太长，使用 *Scheduled* MRM 算法的 MS 方法的 **Duration** 可能无效。如果用户尝试保存该方法，则会显示错误消息且 **Duration** 字段会包含错误图标。如果用户指定了有效的方法持续时间并将该持续时间改回不正确的方法持续时间，然后保存该方法，则该方法会成功保存。 请确保在保存该方法前确定正确的方法持续时间。
（ZenoTOF 7600 系统）对于使用 *Scheduled* MRM^{HR} 算法采集的 wiff 文件，在 PeakView 软件中样本的 Sample Information 内显示的周期数量和周期时间不正确。(ONYX-10623)	不适用

问题	注释
（ZenoTOF 7600 系统）wiff 文件中显示的样本 TOF 质量校准参数与 wiff2 文件中显示的参数不符。(ONYX-11356)	Analyst TF 软件和 SCIEX OS 以不同的方式记录校准参数。wiff 文件采用 Analyst TF 软件模型。
（X500 QTOF 和 ZenoTOF 7600 系统）使用复杂扫描、IDA、SWATH、MRMHR 创建循环实验时，即使用户未指定实验日程，循环实验仍显示为计划实验。(ONYX-11359)	1. 保存并关闭方法。 2. 打开方法。 3. 在 Advanced 选项卡上清除 **Experiment scheduling**。 循环实验显示为“未计划”。
（X500 QTOF 和 ZenoTOF 7600 系统）用户可以在 **Exclude former candidate ions** 的 **For** 字段中输入非整数值。(ONYX-11383)	保存并重新打开方法时非整数值被替换为“0”，但是仍将正确地采集数据，并考虑该非整数值。
（SCIEX Triple Quad 7500 系统）用户可以在 Analyst 软件中转换为 QTRAP 系统创建的方法，以便用于没有 QTRAP 许可的系统。(ONYX-14104)	不适用
在 **Guided MRM** > **MRM Infusion** 中，当用户单击 **Start** 时，Set Initial Conditions 页面上的源和气体参数恢复为默认值。(ONYX-15218)	再次设置参数。
在 Q1-IDA 循环实验中，稳定时间不能设置为 15 ms。(ONYX-15511)	不适用
（ZenoTOF 7600 系统）在 MS Method 工作区中，用户可以为 MRM^{HR} 实验定义多达 2500 个离子对，这可能会导致采集速度变慢。(ONYX-16282)	对于 *Scheduled* MRM^{HR} 实验，可以定义最多 548 个并发离子对。
当用户打开或导入包含手动添加成分的批次时，对于不是标准物或 QC 的样本，该手动添加成分可能会丢失。（ONYX-16474、ONYX-16466、ONYX-16467）	打开或导入包含手动添加成分的批次后，仔细检查以确保所有成分都存在。

问题	注释
（ZenoTOF 7600 系统）**Zeno threshold** 参数对其不适用的实验和碎裂类型处于激活状态。(ONYX-16556)	**Zeno threshold** 参数用于同时包含 EAD 和 CID 碎裂的 IDA 实验，以及仅包含 CID 碎裂的 MRM HR 和 MSMS 实验。但是，**Zeno threshold** 字段对同时包含 EAD 和 CID 碎裂的所有实验类型激活。该参数还显示在包含 EAD 碎裂的 MRM HR 和 MSMS 实验的 Sample Information 中。 对于 MRM^{HR} 实验，Zeno threshold 字段名称错误。它应为 **Zeno threshold (CID)**。
当用户关闭激活的方法时，相邻的方法未激活。(ONYX-16704)	由于没有方法激活，因此 **Start** 按钮之类的控件未激活。选择所需的方法以使其激活。
当用户创建多个引导式 MS3 输注方法时，这些方法使用相同的名称。(ONYX-16740)	由于这些方法同名，因此 **Views** 菜单中只显示一个方法。 为了解决此问题，使用新名称保存这些方法：**Save** > **Save as**。

Echo MS 系统问题

问题	注释
当 Plate Layout 对话框中的条目被删除时，行不会从 Batch 工作区中删除，且某些字段会保留。	要删除行，请选中它们，然后点击鼠标右键并单击 **Delete Rows**。
当连续批次将数据保存到相同数据文件时，峰分离失败，且自动处理失败。(ONYX-6904)	峰分离在采集数据后执行。如果系统正在分离上一次采集期间写入文件的峰，同时后续批次将数据采集到该文件中，则会发生资源冲突。为避免发生此问题，将每个批次的数据写入单独的数据文件中。
存在以下限制： • 决策规则无法正确地用于 Echo MS 系统。 • LC 系统不能用在包含 Echo MS 系统的配置中。 • 如果配置了 Echo MS 系统，则不能使用 MS Tune 工作区。 (ONYX-10636)	• 在 SCIEX OS 中配置了 Echo MS 系统时，切勿使用决策规则。 • 当 Echo MS 系统处于活动状态时，切勿激活 LC 系统。 • 当 Echo MS 系统处于活动状态时，切勿调谐 MS Tune 工作区。 SCIEX 6500+ 系统的调谐使用 IonDrive Turbo V 离子源和相关探针执行。

问题	注释
当用户使用 Plate Layout 对话框填充 Batch 工作区中的 **Well Positions** 时，有时不会填充 **Well Positions**。此问题可能会在以下条件下发生： • 当用户在打开 SCIEX OS 后第一次打开 Batch 工作区时。 • 当用户尝试在空批次中填充 **Well Positions** 时。 (ONYX-12525)	如果发生此问题，采取如下措施之一： • 关闭软件，然后再次打开。 • 打开保存的批次，然后使用 Plate Layout 对话框更新该批次中的 **Well Positions**。
当用户单击 Plate Layout 对话框上的 **Remove All** 时，软件响应得很慢。(ONYX-12726)	为了提高性能，删除 Batch 工作区表格中的孔。选择表格中的孔，然后单击右键，并选择 **Cut**。
（Echo MS 系统）在采集期间触发流动相低警告时，采集失败。(OPP-288)	开始采集之前，确保流动相瓶中含有足够的流动相，以完成计划的采集。
（Echo MS 系统）当用户使用 Plate Layout 对话框向 Batch 工作区中的表格添加样本孔时，所选的孔无法添加。(OPP-365)	选择目标行中不同的列，并重试。
（Echo MS 系统）未为 AE 样本更新 Queue 工作区中的 **Est. Start Time**。(OPP-421)	这只是用户界面问题。系统功能不受影响

Analytics 工作区问题

问题	注释
项目根目录中的任何 Results Tables 都不会打开。	当项目根目录被用作 Analyst 软件的根目录时，会发生此错误。Analyst 软件会在根目录中的 Default/Project Information 文件夹中创建一个或多个以下文件： • ProjectSettings.atd • Default Audit Map.cam • Project.atd 如果 Project Information 文件夹中已存在这些文件，则删除它们。
使用包含图片元素和查询的自定义模板创建 csv 报告之后，无法从 Results Table 中创建报告。(BLT-1507)	为避免出现问题，请使用支持的模板之一。请参阅文档：《软件用户指南》。

问题	注释
当另一台计算机上运行的 Analyst 软件正在跨网络获取网络位置上的 wiff 文件的数据时，SCIEX OS 在处理该文件时无响应。(BLT-2873)	SCIEX OS 不支持此工作流。
对于 Analyst 软件数据，Q3 分辨率被报告为 LIT 扫描的最大值。(DS-2220)	在 Analyst 软件中以 Explore 模式打开数据。
csv 报告不支持图形或徽标。(MQ-1361)	只有当报告不包含任何图形时才支持 csv 报告。
当 PDFactory 从采用阳性匹配模板的包含超过 2,500 行的 Results Table 中创建受保护的 PDF 报告时，软件似乎失去响应。(MQ-1896)	创建报告可能需要一段时间。始终在后台显示的 PDFactory 进度窗口显示，正在创建 PDF。用户可以最小化全部窗口（包括 SCIEX OS），以便查看 PDFactory 进度窗口。
在方法编辑器中，IS 名称不能粘贴到 Components Table 中。(MQ-2193)	为避免发生问题，手动选择 IS 名称或者单独粘贴 IS 列。
当对 UV、DAD 或 ADC 数据使用 AutoPeak 积分算法时，耗费了很长的时间来建立模型，然后才进行了处理。(MQ-4421)	请勿对峰形欠佳的 UV/DAD/ADC 数据使用 AutoPeak 积分算法。
在质量重建工作流中，Results Table 中报告的信噪比 (S/N) 值未被正确计算用于重建峰。(MQ-7073)	要计算 S/N，在 Explorer 工作区中打开平均 *m/z* 光谱，进行手动重建，然后计算目标峰的 S/N。 注释**:** 这种解决方法需要 Biotool Kit 许可。 1. 在 Peak Review 窗格中选择 Average 谱图。 2. 单击 **Open data exploration**( )。 3. 单击 **Bio Tool Kit** > **Reconstruct Protein**，输入分辨率值，指定重建参数，然后执行重建。 4. 手动计算 S/N。请参阅文档《软件用户指南》中的“显示图形选择信息”。
计算列的名称不能与函数名称相同。(MQ-8087)	指定与函数名称不同的名称。
Statistics 窗格中显示的 **Percent CV** 与使用 **GETSTAT** 函数计算出的 CV 百分比值不同。(MQ-8211)	**GETSTAT** 函数使用 **Actual Concentration** 值识别重复，但 Statistics 窗格使用的是应用了用户指定的 **Number format** 之后的 **Actual Concentration** 值。例如，如果 **Number format** 设置为 0.00，则浓度 5.001 在 Statistics 窗格中将被处理为 5.00。

问题	注释
软件不支持基于 **Outlier Reasons** 列或从 **Outlier Reasons** 列计算出的列的标记规则。(MQ-8295/MQ-8381)	切勿创建使用 **Outlier Reasons** 列的标记规则。
当根据自定义公式将度量图表应用于列时，对公式的任何输入的更改都不会立即反应在 Metric Plot 中。(MQ-8524)	要刷新度量图表，在 Results Table 中选择不同的成分，然后再次选择原始成分。
Acquisition Date & Time 列在公式中未得到正确处理。(MQ-8662)	切勿在公式中使用 **Acquisition Date & Time** 列。
公式编辑器不会识别在公式中错误使用 & 和 | 字符的情况。(MQ-8837)	要代表布尔 AND（与），使用“&&”。要代表布尔 OR（或），使用“||”。
在 Calibration Curve 窗格中未选择 **Log-log plot** 时，校准曲线报告中的校准曲线为对数-对数图格式。(MQ-9424)	关闭 Results Table，重新打开，然后再次创建报告。
数据无法从 LIMS 导入到包含自定义列的 Results Table，数据无法从包含自定义列的 Results Table 导出至 LIMS。(ONYX-15730)	不适用
ChemSpider 数据库无法通过代理服务器访问。(PV-632)	不适用

Explorer 工作区问题

问题	注释
当用户采集大量的 *Scheduled* MRM^{HR} 算法离子对（多达 2500 个离子对）时，在实时数据采集期间可能会观察到短时延迟。(Onyx-17742)	为了避免其他数据文件问题，请执行以下操作： • 切勿打开数据探索来查看当前样本的实时数据。 • 每个数据文件仅采集一个样本。
用户在 Explorer 工作区中处理大量数据或多个数据文件时，用户界面可能会停止响应，在样本队列移至下一样本时可能发生延迟。(BLT-719)	如果发生此问题，等待软件完成 Explorer 工作区中的处理，或者避免在数据采集期间处理大量数据。
在 Formula Finder 中显示 "The requested action could not be completed.Make sure your data is complete and all fields contain appropriate values" 错误。(BLT-1423)	如果所选离子的结构未如 Formula Finder 所预测的包括在 Formula Finder Settings 对话框的 Elemental Composition 选项卡的正离子列表中，则会发生此错误。例如，对于 *m/z* 1004 处的离子，Formula Finder 匹配到 (M+NH4)+。如果此离子未包括在要搜索的正离子列表中，则会在未找到匹配时发生错误。

问题	注释
用户在采集过程中浏览数据时，可能会发生以下问题： • 如果未在预定时间前生成预定扫描的 XIC 和 BPC，则实时数据将与采集后数据不匹配。(DS-903) • 如果用户使用 Explorer 工作区中的 **Move to next** 或 **Move to previous** 在 MS 实验之间进行切换以显示实时生成的提取离子色谱图 (XIC) 或基峰色谱图 (BPC)，则 XIC/BPC 窗格中只显示一个点。	如欲避免该问题，请按以下步骤操作： • 通过单击 **File > Show XIC** 为所需的实验生成 XIC。 • 生成 XIC/BPC 采集后数据。 • 关闭并重新打开 XIC 窗格。
Explorer 工作区中未正确显示检测器优化数据。(DS-1044)	Z 轴（检测器电压）标记不正确。为避免出现问题，请使用 Detector Optimization Report 或 面板检查检测器优化期间采集的数据。
XIC 描线中的数字标记误导了 Explorer 工作区。(PV-1009)	显示的值正确，因为它代表的是峰的质心值。单击 **Fill Peaks** 打开更好的峰视图。峰标签均被置于相关峰的最高点（无论其位置如何）。因此，标签看上去似乎位于错误位置，但值是正确的。 如果出现此问题，则等待完成采集再浏览数据。

MS Tune 工作区问题

问题	注释
（X500 QTOF 系统）当用户单击 **Save Settings** 后在手动调谐过程中，最佳参数值未保存至仪器定义文件。(ACQ-2519)	在手动调谐过程中，最佳参数值不会保存。如欲避免出现任何问题，在处于手动调谐模式时完成所有调谐步骤。
（ZenoTOF 7600 系统）如果在 MS Tune 工作区中完成校准后大约五分钟内质谱仪关闭，则校准设置丢失，将恢复以前保存的校准设置。(MSCS-2627)	再次执行调谐程序。
（SCIEX 4500、5500、5500+、6500、6500+ 和 7500 系统）在 MS Tune 工作区中，对 10 Da/s 扫描速率进行自动校准期间，可能选择了错误的同位素。(TUN-7245)	自动校准完成后，审核仪器调谐报告以确保对所有质量使用了正确的同位素。在正极性中，确保对质量 1952 使用了正确的（第二种）同位素。在负极性中，确保对质量 1863 和 1979 使用了正确的（第二种）同位素。对于所有其他质量，确保使用第一种同位素。

问题	注释
（SCIEX Triple Quad 4500、5500、5500+、6500 和 6500+ 系统）在高分辨率模式中，仅调谐 10 Da/s 扫描速率。(TUN-7292)	将 10 Da/s 的分辨率偏移量复制到其他扫描速率。
用户不能打开 Explorer 工作区来显示在 MS Tune 工作区中使用 **Advanced Troubleshooting** 命令采集的数据。(ONYX-16557)	不适用

Reporter 问题

问题	注释
在名称为数字的情况下，用 PDFactory 生成的报告不包括任何数值，如方法名称、样本名称、样本标识号、条形码等。(ONYX-2236)	为避免任何问题，请使用 XPS 选项而非 PDFactory 选项进行打印。
如果从报告模板中删除了 **For Each Sample** 标签，则无法再将其添加回来。(RPT-21)	再次创建报告。

MS FW Updater 问题

问题	描述
MS FW Updater 实用工具无法在 DVD 光盘上运行。(BLT-597)	若要升级质谱仪固件，请将 FirmwareUpdater 文件夹复制到 D:\ 盘，然后从该位置运行实用工具。

SCIEX OS 至 Analyst 软件方法转换器问题

问题	描述
如果方法包含 EMS 扫描，则无法从 SCIEX OS 转换方法。(ONYX-12112)	如果使用的是较早版本的方法转换器，则会出现此问题。确保使用 SCIEX OS 2.2 安装包中包含的方法转换器版本。
如果 Analyst 软件在 SCIEX OS to Analyst Software Method Converter 之后安装，则在 Analyst 软件中无法打开 SCIEX OS to Analyst Software Method Converter。(ONYX-14031)	在安装 SCIEX OS to Analyst Software Method Converter 之前安装 Analyst 软件。

联系我们

客户培训

- 北美地区：NA.CustomerTraining@sciex.com
- 欧洲：Europe.CustomerTraining@sciex.com
- 在欧盟与北美之外请访问 sciex.com/education

在线学习中心

- SCIEX Now Learning Hub

SCIEX 支持

SCIEX 及其代表在全球范围内设有经过系统培训的服务和技术专家。他们可以解答系统问题或可能出现的任何技术问题。详情请访问 SCIEX 网站 sciex.com 或通过下述方式之一联系我们：

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

网络安全

有关 SCIEX 产品的最新网络安全指南，请访问 sciex.com/productsecurity。

文档

本版本的文档取代本文档的所有先前版本。

要查看本文档的电子版本，需要 Adobe Acrobat Reader。要下载最新版本，请转到 https://get.adobe.com/reader。

要查找软件产品文档，请参阅软件随附的版本发布说明或软件安装指南。

要查找硬件产品文档，请参阅系统或组件随附的客户参考 DVD。

最新版本的文档可从 SCIEX 网站上获得，网址：sciex.com/customer-documents。

注释**:** 如需免费获取本文档的印刷版本，请联系 sciex.com/contact-us。

本文件供已购买 SCIEX 设备的客户在操作此 SCIEX 设备时使用。本文件受版权保护，除非 SCIEX 书面授权，否则严禁对本文件或本文件任何部分进行任何形式的复制。

本文中所介绍的软件依据许可协议提供。除许可证协议中特别准许的情况外，在任何媒介上复制、修改或传播本软件均为违法行为。此外，许可协议禁止出于任何目的对本软件进行分解、逆向工程或反编译。质保条款见文中所述。

本文件的部分内容可能涉及到其他制造商和/或其产品，其中可能有一些部件的名称属于各自所有者的注册商标和/或起到商标的作用。这些内容的使用仅仅是为了表明这些制造商的产品由 SCIEX 提供以用于整合到 SCIEX 的设备中，并不意味 SCIEX 有权和/或许可来使用或允许他人使用这些制造商的产品和/或允许他人将制造商产品名称作为商标来进行使用。

SCIEX 的质量保证仅限于在销售或为其产品发放许可证时所提供的明确保证，而且是 SCIEX 的唯一且独有的表述、保证和义务。SCIEX 不作任何其他形式的明确或隐含的质量保证，包括但不限于特定目的的适销性或适用性的保证，不论是法规或法律所规定、还是源于由贸易洽谈或商业惯例，对所有这些要求均明确免责，概不承担任何责任或相关后果，包括由于购买者的使用或由此引起的任何不良情况所造成的间接或从属损害。

仅供研究使用。请勿用于诊断过程。

本文提及的商标和/或注册商标，包括相关标志，是 AB Sciex Pte. Ltd. 或各自所有者在美国和/或某些其他国家的财产(参见 sciex.com/trademarks)。

AB Sciex™ 的使用经过许可。

© 2021 年 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

爱博才思有限公司 AB Sciex Pte. Ltd.
Blk33, #04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256