SCIEX OS 2.1 Versionshinweise

The Power of Precision

Einleitung

Danke, dass Sie sich für ein System von SCIEX entschieden haben. Wir freuen uns, Ihnen die SCIEX OS 2.1 Software zur Verfügung zu stellen, die ZenoTOF™ 7600, SCIEX X500R QTOF und SCIEX X500B QTOF Systemen für Funktionen der Flüssigchromatographie-Flugzeitmassenspektrometrie und das SCIEX Triple Quad™ 7500 LC-MS/MS System – QTRAP® Ready unterstützt. SCIEX OS 2.1 ermöglicht auch die Verarbeitung von Daten, die mit Tripelquadrupol-, QTRAP®- und TripleTOF®-Systemen unter Verwendung der Analyst® Software, Version 1.6.2 oder höher oder der Analyst® TF Software, Version 1.7.1 oder höher erfasst wurden.

Dieses Dokument beschreibt die Funktionen der Software. Wir empfehlen Benutzern, diese Versionshinweise als Referenz zu verwenden, um sich mit der Software vertraut zu machen.

Neues in Version 2.1

In diesem Abschnitt werden die Verbesserungen und Korrekturen in SCIEX OS 2.1 beschrieben. Informationen zu den Verbesserungen und Korrekturen für eine frühere Version von SCIEX OS finden Sie in den *Versionshinweisen* zu dieser Softwareversion.

Neue Funktionen und Erweiterungen in Version 2.1

- SCIEX OS 2.1 unterstützt das neue ZenoTOF™ 7600 LC/MS-MS System, mit der Turbo V™ Ionenquelle und der OptiFlow® Turbo V Ionenquelle.
- SCIEX OS erzeugt gleichzeitig sowohl wiif-Dateien als auch wiff2-Dateien für SCIEX X500 QTOF und ZenoTOF™ Systeme.
- Eine neue Spalte „**Polarity**" wurde zur „Results Table“ hinzugefügt, damit der Benutzer Übergänge zwischen positiver und negativer Polarität sehen kann. (BLT-1832)
- Eine neue Funktion für Layouts von Arbeitsbereichen erlaubt Benutzern angepasste Layouts von Arbeitsbereichen im Arbeitsbereich „Analytics“ zu speichern. Das angepasste Layout wird mit der Ergebnisdatei gespeichert und automatisch angewendet, wenn die Datei geöffnet wird. So sparen Benutzer Zeit, wenn Sie Ergebnisse analysieren. Ein gespeichertes Arbeitsbereich-Layout kann auf andere Ergebnisdateien angewendet werden. Es kann auch als Arbeitsbereich-Standardlayout für ein Projekt eingerichtet und angewendet werden, wann immer eine Ergebnisdatei in diesem Projekt geöffnet wird. Arbeitsbereich-Layouts können überall gespeichert werden, auch auf lokalen Netzwerken. Benutzer können zwischen unterschiedlichen gespeicherten Layouts wecheln, um unterschiedliche Arten von Datenanalysen der Ergebnisdateien durchzuführen.

- Verbesserungen an der Funktion Berechnete Spalten erlauben Benutzern, komplexere Formeln zu erstellen. Die Seite „Formula“ hat ein neues Design erhalten, um die Erstellung von komplexen Formeln zu unterstützen. Die Logik von „**IF**"-Statements unterstützt jetzt Zahlen- und Textwerte.
- Berechtigungen des Benutzermanagement für vordefinierte Rollen wurden aktualisiert. Stellen Sie sicher, die Berechtigungseinstellungen für jede der verwendeten vordefinierten Rollen zu überprüfen. Weitere Informationen finden Sie im *Handbuch für Laborleiter*. (ONYX-8376)

Behobene Probleme in Version 2.1

Probleme bei der Erfassung

- Der Schritt zur internen Schleifenreinigung in der LC-Methode wurde übersprungen. (BLT-930)
- Wenn eine neue Zeile zum Arbeitsbereich „Batch“ hinzugefügt wurde, wechselt der Fokus auf die erste sichtbare Zeile im Chargenraster. (BLT-1240)
- Fehler wurden während der Erfassung nicht richtig behandelt. (BLT-1389)
- Das Ereignisprotokoll meldete zufällig, dass die Probenerfassung aufgrund eines Systemfehlers gestoppt wurde. (BLT-2160)
- Informationen zur LC-Druckspur bei einigen Proben fehlten oder waren falsch (BLT-2215)
- Ein Fehler ist aufgetreten, als die Proben zu einer Charge hinzugefügt wurden, die ADC- oder DAD-Daten enthielten. (BLT-2274)
- Wenn die LC-Methode länger war als die MS-Methode, dann wurden Proben ausgelassen und fehlten in der Datendatei. (BLT-2327)
- Wenn der Benutzer im Arbeitsbereich „Batch“ eine Zeile kopiert und einfügt, wurde das Injektionsvolumen nicht kopiert. Die neue Zeile enthielt das Injektionsvolumen aus der LC-Methode. (BLT-2443)
- Die Meldung „The path name is too long“ wurde angezeigt, wenn ein Stammverzeichnis festgelegt wurde, aber der Pfad aus weniger als 247 Zeichen besteht. (ONYX-4981)
- Im Arbeitsbereich „MS Method“ reagierte die Software nicht mehr, wenn die Option „Fill Down“ in der Massentabelle verwendet wurde. (ONYX-5668)
- Das Feld „**CE spread**“ wurde bei ER-Scans aktiv. (ONYX-8328)
- Die Software reagierte nicht mehr, wenn IDA-Kriterien der zweiten Ebene einer MS-Methode mit mehreren IDA-Experimenten hinzugefügt wurden, wenn der Vorläuferscan den *Scheduled* MRM™-Algorithmus verwendete. (ONYX-8333)
- Es wurde ein Fehlerdialog angezeigt, wenn der Benutzer auf „**Open data exploration to view real-time data**“ ( ) klickte, während IDA-Daten im Arbeitsbereich „MS Method“ erfasst werden. (ONYX-8446)

- Wenn der Benutzer eine Methode mit mehreren Experimenten druckte, wurde nur der „**Nebulizer current**“ für das erste Experiment gedruckt. (ONYX-8462)
- Wenn das Dialogfeld „(s)MRM Plots“ geöffnet war, befand sich dieses vor allen anderen Dialogfeldern. Wenn das Dialogfeld erweitert war, konnte der Benutzer andere Dialogfelder, z. B. das Dialogfeld „Save“ möglicherweise nicht mehr sehen. (ONYX-8601)
- (SCIEX 7500 Systems) Information Dependent Acquisition (IDA) kann abhängige Scans für das gleiche Ion häufiger auslösen als durch die Kriterien vorgegeben, wenn sowohl „**Exclude former candidate ions**“ als auch „**Exclude isotopes +/-**“ gewählt werden. (ONYX-8947)
- In einigen Fällen wurden wiff-Datendateien mit einer Prüfsumme beschädigt. (ONYX-10839)

Probleme mit dem Arbeitsbereich „Analytics“

- Probleme traten während des Exports von metrischen Kurven auf. (BLT-1156)
- Bei nicht zielgerichteten Workflows wurde bei negativ-polarisierten Daten die Vorläufer-Masse im Eingabenamen falsch berechnet. (BLT-1424)
- Probleme traten auf, wenn MultiQuant™ Software-Methoden in SCIEX OS importiert wurden. (BLT-1435)
- Wurde die Option „**Zoom intensity axis to nn percent of largest peak**“ ausgewählt, wurde der größte Peak im LC-Lauf angezeigt, nicht der größte Peak im Teilfenster „Peak Review“. (BLT-1437)
- Es gab Nutzbarkeitsprobleme mit der Funktion für die automatische Ausreißerentfernung. Die Benutzeroberfläche wurde verbessert. „**Maximum total outliers**“ wird durch „Options for Removing Calibration Points“ ersetzt. (BLT-1606)
- Leistungsprobleme traten bei berechneten Spalten mit „**IF**“-Statements auf. (BLT-1723)
- Peak-Schattierung wurde nach manueller Integration nicht aktualisiert. (BLT-1912)
- Audit-Aufzeichnungen für Watson LIMS-Ereignisse nicht korrekt erstellt. (BLT-2021)
- Die Spalte „**RT Confidence**“ wurde nicht für Daten nur für MRM angezeigt. (BLT-2027)
- Nachdem Proben zur Liste „**Selected**“ im Editor für Verarbeitungsmethoden hinzugefügt wurden, waren sie noch in der Liste „**Available**“ vorhanden. (BLT-2034)
- Probleme traten während der Erstellung von Berichten auf, die das Tag MQ_Group enthielten. (BLT-2035)
- Die Datumsspalte in der „Results Table“ wurde nicht korrekt sortiert. (BLT-2093)
- Probleme traten während der manuellen Integration einiger Daten auf. (BLT-2100)
- Benutzer von SCIEX OS-Q konnten summierte Ioneninformationen nicht zu Watson Version 7.4.1 übertragen. (BLT-2171)
- Ionensummierugsparameter wurden für MultiQuant™ Software-Quantifizierungsmethoden, die in SCIEX OS importiert werden, nicht beibehalten. (BLT-2172)

- Nachdem das Wurzelverzeichnis geändert wurde, enthielt das Projektfeld in Berichten N/A. (BLT-2176)
- Proben konnten aufgrund der Art, wie Datennamenunterschiede behandelt wurden, nicht zu einer existierenden „Results Table“ hinzugefügt werden. (BLT-2208)
- Probleme tauchten während der Verarbeitung von Daten in Dateien auf, deren Namen ein Prozentzeichen (%) enthielten. (BLT-2238)
- SCIEX OS unterstützte keine Aktualisierungen der Retentionszeit (RT) für ähnliche Komponenten in MRM-Daten, die unterschiedliche Übergänge enthielten, die durch einen automatischen Workflow erfasst wurden. (BLT-2275)
- Fehler wurden im Editor für Verarbeitungsmethoden während der Verarbeitung von Daten angezeigt, die von einem TripleTOF® 6600 System erfasst wurden, wenn die Daten Punkte und gestaffelte MS/MS-Experimente enthielten. (BLT-2318)
- Agilent DAD-Daten, die in der Analyst® Software erfasst wurden, konnten im SCIEX OS nicht verarbeitet werden. (BLT-2326)
- Im Teilfenster „Peak Review“ war der XIC für einige Peaks nicht korrekt. (BLT-2330)
- Die Option „**Overlay Other Components for Group**“ war auf der Seite „Integration“ nicht verfügbar, wenn alle Proben zur gleichen Gruppe gehörten. (BLT-2408)
- Das Datum und die Uhrzeit der Quant Method, die in Berichten angezeigt wurden, waren nicht korrekt. (BLT-2421)
- Im Teilfenster „Peak Review“ wurden Änderungen an den Integrationsparametern für eine Komponente nicht konsistent auf die Gruppe angewendet, wenn die Option zur Aktualisierung der Gruppe ausgewählt war. (BLT-2437)
- SCIEX OS reagierte nicht mehr, wenn es Ergebnisse aus einer wiff-Datei verarbeitete, für die Daten erfasst wurden. (BLT-2473)
- Ein wiff-Fehler trat auf, wenn die wiff-Datei unvollständige Daten enthielt. (DS-3533)
- Wenn der Benutzer auf „**Open data exploration**“ im Teilfenster „Peak Review“ klickte, um eine Datendatei mit UV-Daten im Arbeitsbereich „Explorer“ zu öffnen, dann wurde das XIC UV-Diagramm nicht angezeigt. (MQ-7723)
- Ergebnisse durch Verarbeitung von wiff-Daten, die über ein PDA oder FLD erfasst wurden, waren nicht korrekt. (ONYX-7843)

Probleme mit dem Arbeitsbereich „Explorer“

- SCIEX OS reagierte nicht mehr oder gab einen Fehler aus, wenn versucht wurde, gleichzeitig ein DAD-Konturdiagramm und ein XWC in einer IDA+DAD-Datendatei zu erstellen. Dieses Problem trat nur auf, wenn der Benutzer mit der Erstellung eines DAD-Konturfelds begann, und während dieses im Hintergrund aktualisiert wurde, versuchte, auf XWC zuzugreifen. (BLT-498)
- Benutzer konnten keine Daten aus der Tabelle Peaks in den Arbeitsbereich „Explorer“ kopieren. (BLT-854)

- Im Modus „Heated Nebulizer“ war die Temperatur, die „Sample Information“ angezeigt wurde, nicht korrekt. (BLT-1226)
- Für Datendateien, die mit einem ExionLC™ System mit der Analyst® Software erstellt wurden, stimmten die Absorptionswerte, die in den Probeninformationen im SCIEX OS angezeigt werden, nicht mehr den Einheiten überein, die in der Analyst® Software angezeigt werden. (BLT-1390)
- Die „Enhanced Mass“ Informationen wurden für eine Probe nicht in „Sample Information“ angezeigt. (BLT-1811)
- (SCIEX 7500 Systeme) Probeninformationen wurden für Methoden mit Polaritätswechsel nicht korrekt angezeigt. (BLT-2392)

Probleme mit dem Arbeitsbereich „MS Tune“

- Wenn der Benutzer das Massenspektrometer abstimmte, die neuen Geräteeinstellungen speicherte und dann die zuvor gespeicherten Geräteeinstellungen wiederherstellte, dann war die Audit-Aufzeichnung unvollständig. (ONYX-8392)

Andere Probleme

- Die ChemSpider-Lizenz funktionierte nicht korrekt, wenn der Server über 15 Minuten getrennt war. (BLT-962)
- SCIEX OS verwendete gelegentlich die Server-basierte Lizenz statt der Knoten-basierten Lizenz. (BLT-964)
- SCIEX OS konnte an dem Datum, zu dem die Lizenz ablief, nicht geöffnet werden. Es wurde keine Fehlermeldung angezeigt. (BLT-986)
- Audit-Trail-Funktion, einschließlich des Arbeitsbereichs „Audit Trail“ und der Seite „Audit Maps“ im Arbeitsbereich „Configuration“, war verfügbar, wenn die erforderliche Lizenz nicht installiert ist. (BLT-1013/1951)
- SCIEX OS konnte nicht deinstalliert weden, wenn .NET nicht aktiviert war. (BLT-1024)
- SCIEX OS konnte nicht installiert werden, wenn die Betriebssystemssoftware auf einem anderen Laufwerk als C: installiert war. (BLT-1466)
- Formelsuchergebnisse unterschieden sich im Arbeitsbereich „Explorer“ vom Arbeitsbereich „Analytics“. Um das Problem zu lösen, wurde der MS1-Isotopenschwellwert von 1 % (fest) auf den grünen und vom Anwender einstellbaren Schwellenwert „% Diff Isotop“-Verhältnis (Standard 5 %) geändert. (BLT-2141)
- Probleme traten während der Installation des SQL-Servers auf. Die Handhabung dieser Probleme wurde verbessert. (BLT-2167)
- Einer lokalen Gruppe konnte keine Administrator-Rolle zugewiesen werden. (BLT-2223)
- Wenn der Benutzer keinen Zugriff auf das Wurzelverzeichnis hatte, erstellte die Software ein Wurzelverzeichnis. (BLT-2225)
- Die Berechtigung „**Set Manual Integration Percentage Rule**“ war in der Registerkarte „Roles“ auf der Seite „User Management“ nicht verfügbar. (BLT-2228)

- (SCIEX 7500 Systeme) Die Servicepakete enthielten keine Rücklesedatei. (BLT-2492)

Hinweise zur Verwendung und zu bekannten Problemen

Hinweise zur Verwendung

- Bei Aktualisierung von Windows sollten Benutzer nur die erforderlichen Updates installieren. Updates sollten geplant werden, wenn das System keine Daten erfasst. Benutzer sollten keine optionalen Updates installieren, da sonst die Funktionalität der Software beeinträchtigt werden könnte.

  Hinweis: SCIEX OS unterstützt kein Windows 10 HotFix 2. (BLT-2320)

- Wenn Benutzer nicht über Leseberechtigungen für das Standardprojekt verfügen, kann ein Fehler auftreten, wenn sie versuchen, SCIEX OS zu öffnen. (ONYX-3131)
- Die Systemleistung ist möglicherweise langsamer, wenn viele Arbeitsbereiche geöffnet sind oder wenn eine große Anzahl von Übergängen verarbeitet wird. (ONYX-2321)
- Wenn der Benutzer eine Charge öffnet, die in einer früheren Version von SCIEX OS erstellt wurde, wird das Feld „**Injection Volume**“ nicht automatisch ausgefüllt. Der Benutzer muss in der Charge auf jedes „**LC Method**“-Feld klicken. (ONYX-2967)
- Wenn eine Charge startet, unterbricht SCIEX OS die Installation von Windows-Updates, Windows Defender-Virenscans (Windows 10) und Symantec Endpoint-Virenscans (Windows 7). Planen Sie die Ausführung von Aktualisierungen und Virenscans zu Zeiten, in denen keine Datenerfassung erfolgt.
- Um Leistungsprobleme oder Datenbeschädigung zu vermeiden, sollte der Benutzer während der Probenerfassung keine Computerwartungsverfahren wie Defragmentierung oder Datenträgerbereinigung durchführen.
- Wenn der ClearCore2-Dienst während der Netzwerkerfassung unterbrochen wird, werden die partiellen Probendaten der zu erfassenden Probe zum Zeitpunkt der Unterbrechung nicht in die Datendatei geschrieben. Wenn der Dienst während der lokalen Erfassung unterbrochen wird, werden die partiellen Probendaten in die Datendatei geschrieben, aber als beschädigt gekennzeichnet. Jede automatisch ausgelöste Verarbeitung und Entscheidungsregelverarbeitung schlägt zudem fehl, wenn der ClearCore2-Dienst unterbrochen wird.

- Mithilfe der folgenden Methoden kann der Benutzer Daten in Echtzeit im Arbeitsbereich „Explorer“ anzeigen, während sie in einer Netzwerkressource erfasst werden:
  - Öffnen Sie das Feld „Data Acquisition“ unten im Fenster SCIEX OS.
  - Öffnen Sie im Arbeitsbereich „Queue“ die Probe, die erfasst wird, indem Sie sie doppelt anklicken.

  (DS-1873)

  Hinweis: Wenn eine Probe im Arbeitsbereich „Explorer“ geöffnet bleibt, wird die Meldung „File not found“ angezeigt, nachdem die Probe in die Netzwerkressource verschoben wurde.

- In SCIEX OS 2.1 erstellte Datendateien können nicht an Datendateien angehängt werden, die in SCIEX OS 1.3.1 oder einer früheren Version erfasst wurden. (DS-1931)
- Der Benutzer muss beim Angeben einer neuen Ergebnisdatei für eine Probe im Arbeitsbereich „Batch“ auch eine Verarbeitungsmethode angeben. Wenn Sie keine Verarbeitungsmethode angeben, enthält die Spalte „**Processing Method**“ im Arbeitsbereich „Queue“ „***Embedded Method***“ und die automatische Verarbeitung schlägt fehl. (ONYX-4864)
- Beim Angeben einer Ergebnisdatei in einem Analyst-Datenpfad können Benutzer keine Unterordner erstellen. Sie müssen einen vorhandenen Ordner auswählen. (ONYX-4962)
- Wenn ein Benutzer keine Berechtigungen für den Zugriff auf den Arbeitsbereich „Explorer“ hat, kann er den Kalibrierungsbericht aus dem Arbeitsbereich „Queue“ nicht öffnen. (ONYX-3401)
- MultiQuant™-Softwaredateien (qmethod, qsession und cset) können nicht im Arbeitsbereich „Analytics“ von SCIEX OS geöffnet oder verwendet werden. MultiQuant™-Software-Methoden, die als Textdatei exportiert wurden, können jedoch in den Arbeitsbereich „Analytics“ importiert werden.
- Die Software verwendet nicht den ausgewählten Regressionsparameter (Bereich oder Höhe), um das Ionenverhältnis einer Komponente zu berechnen. Die Software verwendet den für die erste Komponente in der „Results Table“ definierten Regressionsparameter, um das Ionenverhältnis aller Komponenten in der „Results Table“ zu berechnen. (MQ-5546)
- Bei nicht zielgerichteten Arbeitsabläufen sollten „Results Tables“ auf 150.000 Zeilen begrenzt sein. Die Leistung von SCIEX OS lässt erheblich nach, wenn „Results Tables“ diese Größe überschreiten.
- Wenn der AutoPeak-Integrationsalgorithmus verwendet wird, dann muss der Benutzer alle berechneten Parameter im Kontext einer Komponente innerhalb der spezifischen „Results Table“ berücksichtigen. Die Software erstellt ein AutoPeak-Modell für jede Komponente und dieses Modell wird für alle Proben für die Komponente verwendet. Der durch AutoPeak Asymmetry berechnete Parameter zeigt das Verhältnis des entsprechenden Versatzes zum Versatz des AutoPeak-Modells für die Komponente an. (BLT-2030)
- Die Schaltfläche „**Apply to Workstation**“ ist aktiv, obwohl die aktuelle Audit Map-Vorlage auf die Workstation angewendet wird. Um herauszufinden, welche Audit Map aktuell auf den Arbeitsplatz angewendet wird, öffnen Sie den Arbeitsbereich „Audit Trail“. (ONYX-3400)

Allgemeine Probleme

Problem	Hinweise
Der Benutzer kann keine Berichtsdateien (xps) öffnen, die während des Tunings im Arbeitsbereich „MS Tune“ oder im Arbeitsbereich „MS Method“ mit der geführten MRM erstellt wurden. Windows meldet, dass Dateien dieses Typs nicht geöffnet werden können.	Dieses Problem tritt auf, wenn der Microsoft XPS Viewer nicht auf dem Computer installiert ist. Der Viewer ist im Installationspaket von SCIEX OS enthalten. Befolgen Sie zur Installation die folgenden Schritte: 1. Führen Sie eine Eingabeaufforderung als Administrator aus: a. Geben Sie im Feld „**Type here to search**“ in der Windows-Taskleiste „**cmd**“ ein. b. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf „**Command Prompt**“ und dann auf „**Run as administrator**“. 2. Geben Sie im Fenster „Administrator: Command Prompt“ den folgenden Befehl ein und drücken Sie dann „**Enter**“: **dism /online /norestart /add-package /packagepath:"C:\Program Files\SCIEX\SCIEX OS\Microsoft-Windows-Xps-Xps-Viewer-Opt-Package~31bf3856ad364e35~amd64~~.cab"** **Hinweis:** Geben Sie den vollständigen Befehl in einer einzigen Zeile ein. Während der Installation des XPS Viewer wird ein Fortschrittsbalken angezeigt. 3. Wenn die Installation abgeschlossen ist, schließen Sie das Fenster „Command Prompt“.
Wenn SCIEX OS auf einem Computer installiert ist, der für eine andere Sprache als Englisch konfiguriert ist, wird beim ersten Öffnen von SCIEX OS ein Fehler angezeigt. (BLT-892)	Öffnen Sie SCIEX OS erneut.

Problem	Hinweise
Der Inhaltsfensterbereich der Hilfe ist leer. (BLT-2497)	Die Hilfedatei ist gesperrt. Um das Problem zu lösen, gehen Sie wie folgt vor: 1. Navigieren Sie zur Hilfedatei, klicken Sie mit der rechten Maustaste darauf und klicken Sie danach auf „**Properties**“. 2. Wählen Sie im Dialogfeld „Properties“ die Option „**Unblock**“. 3. Klicken Sie auf „**OK**“. **Hinweis:** Wenn es im Dialogfeld „Properties“ dieses Kontrollkästchen nicht gibt, dann ist die Hilfedatei nicht gesperrt.
(SCIEX 7500-Systeme) Daten mit einem langen Dateipfad können von der Analyst® Software nicht verarbeitet werden. Einige Abschnitte in den Dateiinformationen für solche Datendateien werden ebenfalls nicht angezeigt. (ONYX-9408)	Um das Problem zu vermeiden, müssen Sie einen kürzeren Dateipfad verwenden.
Ein Fehler tritt während der Weiterverarbeitung von wiff-Daten im Arbeitsbereich „Explorer“ und im Fensterteil „Peak Review“ des Arbeitsbereichs „Analytics“ auf. (ONYX-9450)	wiff-Daten können nicht weiterverarbeitet werden.

Geräteprobleme

Problem	Hinweise
(ExionLC™ Systeme und Shimadzu LC) Injektion beginnt, bevor die Spalte die festgelegte Temperatur erreicht.	Wenn die **WAIT TIME** für den Säulenofen manuell auf 0 eingestellt ist, müssen Sie das System äquilibrieren und 10 bis 15 Minuten warten, nachdem der Säulenofen die Solltemperatur erreicht hat, bevor Sie Proben übermitteln. Alternativ können Sie die „**WAIT TIME**“ auf eine ganze Zahl zwischen 1 und 10 einstellen und das Kontrollkästchen „**Wait for temperature equilibration before run**“ in der LC-Methode aktivieren. Wenn diese Option ausgewählt ist und der Säulenofen die eingestellte Temperatur erreicht hat, wartet die Software die unter „ **WAIT TIME**“ festgelegte Zeit ab, bevor die Injektion startet.
(Agilent LC) Der Autosampler unterstützt keine hohen Durchsatzeinstellungen. (ACQ-529)	Die hohen Durchsatzeinstellungen werden derzeit nicht unterstützt.
(Shimadzu LC) Während der Gerätewiederherstellung wird ein falscher Gerätestatus angezeigt. (ACQ-1410)	Wenn ein Teilgerät vor der Übermittlung der Probe ausgeschaltet wird, geht das LC-System in den Standby-Modus über, obwohl tatsächlich ein Fehlerstatus vorliegt. Wenn der Benutzer versucht, die Charge wieder in die Warteschlange zu senden, wird die erste Probe abgesendet, scheitert aber umgehend, weil das LC-System in den Fehlerstatus übergeht, wodurch die Probe beschädigt wird. Sollte dieses Problem auftreten, starten Sie den Computer neu und öffnen Sie die Software wieder.
(Shimadzu LC) Die Ampelanzeige des Geräts hebt nach Beheben des Fehlers über „Direct Control“ den Fehlerstatus nicht auf. (ACQ-1420)	Wenn der Benutzer über „Direct Control“ die Direktsteuerung der Geräte öffnet, und dann auf „**Clear Error**“ klickt, wenn sich die LC im Fehlerstatus befindet, dann lässt sich das Gerät zwar wiederherstellen, jedoch zeigt die Software weiterhin einen Fehler an. Klicken Sie zum Beheben dieses Fehlers im Statusfeld auf „**Standby**“.
(Agilent LC) Die LC-Methode läuft nicht korrekt, wenn die eingeschalteten und angeschlossenen Geräte nicht mit den Geräten aus der Liste der aktivierten Geräte übereinstimmen. (ACQ-1716/2062)	Um sicherzustellen, dass das System korrekt arbeitet, schalten Sie die entsprechenden Geräte ein bzw. aus, sodass die eingeschalteten Geräte der Liste der aktivierten Geräte entsprechen.

Problem	Hinweise
(Shimadzu LC) Beim Durchlaufen großer Chargen mit dem Shimadzu PDA bei Abtastraten von über 12,5 Hz sind Leistungseinbrüche zu beobachten. (ACQ-2037)	Die zu erwartende Dauer der Charge könnte länger als vorgesehen sein. Verwenden Sie zur Vermeidung eventueller Probleme eine Abtastrate von unter 12,5 Hz.
(Shimadzu LC) Die bei der Datenerfassung von zwei UV-Kanälen erfassten UV-Daten sind invertiert. (ACQ-2042)	Dieses Problem tritt auf, wenn die Polarität im Abschnitt „UV Detector“ der LC-Methode auf negativ gestellt ist. Stellen Sie zum Vermeiden eventueller Probleme das Feld „Polarity“ auf positiv.
Nach der Verarbeitung mehrerer Proben wird im Druckdiagramm angezeigt, dass der Druck kurzzeitig auf null gesunken und dann wieder auf seinen ursprünglichen Druckwert angestiegen ist. (ACQ-2043)	Der Druckabfall tritt auf, wenn die Injektionsschleife in den Durchflussweg umgeleitet wird. Der Druck wird alle 5 Sekunden abgetastet, sodass der Druckabfall unter Umständen nicht bei jeder Umleitung der Injektionsschleife angezeigt wird. Dieses Problem wirkt sich nicht auf die Leistung aus.
(Agilent LC) Wenn der Benutzer während der Äquilibrierung die Probe abbricht, kann Agilent LC in einen Fehlerstatus übergehen. (ACQ-2142)	Wenn dieses Problem auftritt, klicken Sie auf „**Standby**“, um das Gerät wiederherzustellen.
(Agilent LC) Agilent LC zeigt selbst dann einen Fehlerstatus an, wenn die Teilgeräte nach einem Fehler wiederhergestellt wurden und sich im Status „Ready“ befinden. (ACQ-2144)	Wenn dieses Problem auftritt, klicken Sie auf „**Standby**“, um die LC in den Status „Ready“ zurückzuversetzen.
Wenn die Dauer einer Gradiententabelle für eine LC-Pumpe oder einer Temperaturtabelle für einen Säulenofen in einer LC-Methode länger ist als die Dauer der MS-Methode, dann laufen die LC-Geräte nicht weiter, sobald die Dauer der MS-Methode überschritten ist. (ACQ-2167/2088)	Um dieses Problem zu vermeiden, sorgen Sie dafür, dass der Wert im Feld „**Stop Time**“ für die Dauer der LC-Methode der längsten Zeit entspricht, die die LC-Methode laufen muss.
(ExionLC™ AC/ExionLC™ AD Systeme und Shimadzu LC) Die PDA-Standardparameter unterscheiden sich je nachdem, wie auf die LC-Methode zugegriffen wird. (ACQ-2176)	Um eventuelle Probleme zu vermeiden, vergewissern Sie sich, dass die richtigen Parameter für das PDA-Gerät verwendet werden.
(Agilent LC) Das Komma wird als Dezimaltrennzeichen ignoriert, wenn der Volumenstrom im LC-Gradientengitter kopiert wird. (ACQ-2191)	Hierbei handelt es sich um ein Problem mit Agilent LC. Um dieses Problem zu vermeiden, geben Sie den Volumenstrom mit Komma als Dezimaltrennzeichen manuell ein.

Problem	Hinweise
(Agilent LC) Der Fehlerstatus wird nicht korrekt wiedergegeben, wenn das Gerät bei Geräteaktivierung in den Fehlerstatus übergeht. (ACQ-2195)	Um dieses Problem zu vermeiden, setzen Sie den Fehler am Gerät zurück und deaktivieren und reaktivieren Sie dann die Agilent-Geräte.
In einigen Fällen können Geräte nicht manuell hinzugefügt werden. (ACQ-3014)	In einigen Fällen funktioniert die Funktion „**Test device**“ nicht, wenn Geräte manuell hinzugefügt wurden. Verwenden Sie daher zur Vermeidung dieses Problems „**Autoconfig**“, um Geräte hinzuzufügen.
Nicht unterstützte Geräte und Optionen können konfiguriert werden. (BLT-1740)	Im SCIEX 7500 System werden das Kalibrierungs-Abgabesystem und die Kontaktschlussoptionen nicht unterstützt.
(Shimadzu LC-40) Nachdem das System in den Standby-Modus wechselt oder deaktiviert wird, wechselt die Temperatur auf die Temperatur, die beim letzten Äquilibrationsverfahren oder bei der letzten LC-Methode festgelegt wurde. (BLT-2300)	–
Das System aktiviert die Schaltfläche „**Standby**“ im rechten Statusfeld nicht, wenn ein Gerät wie CDS in den Fehlerstatus übergeht, sodass der Benutzer den Fehler nicht beheben kann. (MSCS-1314)	Wenn dieses Problem auftritt, klicken Sie auf „**Start**“ unter „Direct Control“, um den CDS-Status von „Fault“ auf „Running“ zu ändern und den Fehlerstatus des CDS zu beenden.
Der Massenmodus des Massenspektrometers wird nicht angezeigt, wenn die Aktivierung fehlschlägt, oder wenn die Aktivierung erfolgt, während sich das Massenspektrometer im Fehlerstatus befindet. (MSCS-2065)	Aktivieren Sie das Gerät erneut, wenn sich das Massenspektrometer im Status „Ready“ oder „Idle“ befindet.
Der Benutzer kann das X500 QTOF-System im Arbeitsbereich „Devices“ nach einem Downgrade von SCIEX OS 2.0 auf SCIEX OS 1.7 nicht konfigurieren. (MSCS-2286)	Stoppen Sie nach der Installation von SCIEX OS 1.7 den ClearCore2-Dienst und installieren Sie dann C++ Redistributables „(vc_redis*.exe“) aus dem Ordner „Install“ im Installationspaket von SCIEX OS 2.0.

Problem	Hinweise
Es fehlen Informationen im Dialogfeld „Device Details“ für das LC-System. (ON-2069)	Dieses Problem tritt auf, wenn die Windows Regionseinstellungen auf ein anderes Format als „**English (United States)**“ eingestellt sind. Um diesen Fehler zu vermeiden, konfigurieren Sie Windows entsprechend den Anweisungen im *Software-Installationshandbuch*.
(Agilent LC) Wenn ein Probengefäß fehlt, kann das System das fehlende Gefäß nicht bestätigen und injiziert Luft. (ONYX-4849)	Dieses Problem tritt auf, wenn ein Probengefäß fehlt und eine oder beide der folgenden Optionen ausgewählt sind: • „ **If a sample is missing, then proceed to the next sample**“ auf der Seite „Queue Settings“. • „**Ignore missing vessel**“ im Dialogfeld „Direct Control“. Wenn keine dieser Optionen ausgewählt ist, geht das System in den Fehlerstatus über und die Probe schlägt fehl. Um diesen Fehler zu vermeiden, deaktivieren Sie beide dieser Optionen und stellen Sie sicher, dass alle Gefäße vorhanden sind.
(Agilent LC) Echtzeit-DAD-Daten aus dem Agilent G7121B 1260 Infinity II FLD Spectra-Modul werden nicht aufgezeichnet, wenn der Spektrummodus auf „Apex“ oder „All in Peak“ gesetzt ist. (ONYX-4998)	Die Spektrummodi „Apex“ und „All in Peak“ werden nicht unterstützt. Verwenden Sie einen anderen Modus.
(Agilent LC) Das System verbleibt im Status „Loading“ oder „Equilibrating“, wenn ein Agilent G7121B 1260 Infinity II FLD Spectra-Modul verwendet wird und „Signal A Excitation“ auf „ Zero Order“ und die Photomultiplier-(PMT-)Verstärkung auf einen Wert über 6 gesetzt ist. (ONYX-4999)	Wenn „Signal A Excitation“ auf „Zero Order“ gesetzt ist, legen Sie die PMT-Verstärkung auf höchstens 6 fest.
Wenn der Benutzer „**F1**“ im Arbeitsbereich „LC Method“ drückt, öffnen sich sowohl das SCIEX OS *Hilfesystem* als auch die Hilfe für das LC-System. (ONYX-7149)	–

Problem	Hinweise
Wenn die „Remote Desktop“-Anwendung für den Zugriff auf den Erfassungscomputer verwendet wird, können folgende Probleme auftreten: • Im Arbeitsbereich „LC Method“ werden einige Parameter nicht angezeigt. • Im Arbeitsbereich „Detailed Status“ für ein LC-System werden einige LC-Parameter nicht angezeigt. (ONYX-7153/ONYX-8048/ONYX-8185)	Dieses Problem tritt auf, wenn der Benutzer die „Remote Desktop“-Sitzung trennt und wiederherstellt, ohne den Erfassungscomputer abzumelden. Verwenden Sie eine dieser Methoden, um dieses Problem zu vermeiden: • Melden Sie sich vom Erfassungscomputer ab und dann wieder an. • Verwenden Sie den Vollbildmodus in der „Remote Desktop“-Anwendung. • Korrigieren Sie die Auflösung des Erfassungscomputers. • Zeigen Sie den genauen Status auf dem Erfassungscomputer direkt an.
(Shimadzu LC-40) Die Schaltflächen „**Purge**“, „**Rinse**“ und „**Cooler**“ im Dialogfeld „Device Control“ sind nicht aktiv. (ONYX-7702)	Verwenden Sie die Tastenfeldsteuerungen am Autosampler oder nehmen Sie diese Funktionen in der LC-Methode auf.
(Shimadzu LC) Die Nexera Mikros LC-Pumpe geht nicht in den Fehlerstatus über, wenn der maximale Druckgrenzwert erreicht ist. (ONYX-7794)	–
Im Dialogfeld „Detailed Status“ für das Umleitventil ist der Wert **Time** fehlerhaft, während sich das System im Äquilibrier- und Ladezustand befindet. (ONYX-7831)	Warten Sie, bis die nächste Probe analysiert wird und öffnen Sie dann das Dialogfeld „Detailed Status“ erneut, um die „**Time**“ anzuzeigen.
(Shimadzu LC) Die Nexera Mikros LC-Pumpe wird fälschlicherweise als LC-20AB-Pumpe in der Gerätekonfiguration identifiziert. (ONYX-8030)	Die Leistung des LC-Systems wird nicht beeinträchtigt, die Pumpe wird in Datendateien, Protokollen und Audit-Trails jedoch falsch identifiziert.
Wenn ein Agilent DAD mit einem Shimadzu LC-Stack verbunden ist, gibt es eine Verzögerung von 0,2 Minuten zwischen der DAD-Spur und der MS-Spur. (ONYX-8120)	Wenn Daten verarbeitet werden, die mit dieser Konfiguration im Arbeitsbereich „Explorer“ erfasst wurden, verwenden Sie den Befehl „**Process > Offset Chromatogram**“, um den Gesamtversatz auf 0,2 Minuten einzustellen.

Problem	Hinweise
Wenn die Gerätekonfiguration einen Detektor enthält, der für die Datenerfassung im Kanalmodus konfiguriert wurde, und die erfassten Daten duplizierte Wellenlängen enthalten, dann sind die im Teilfenster „Data Acquisition“ und im Arbeitsbereich „Explorer“ angezeigten Wellenlängendaten falsch. (ONYX-8382)	Daten werden im Arbeitsbereich „Analytics“ ordnungsgemäß angezeigt.
(Shimadzu LC-40) Wenn der Benutzer im Dialogfeld „Plate Layout“ einen Racktyp mit mehreren Platten konfiguriert, und dann die Konfiguration einer Platte abschließt und die nächste Platte auswählt, dann ändert sich der Name der konfigurierten Platte zu „**<Unassigned>**“. (ONYX-8441)	Speichern Sie die Charge und öffnen Sie sie erneut, um die Plattennamen im Dialogfeld „Plate Layout“ korrekt anzuzeigen.
SCIEX OS startet und stoppt eine externe Spritzenpumpe während des Tunings nicht automatisch. (ONYX-8459)	Starten Sie die Spritzenpumpe vor Beginn des Tuningverfahrens manuell.
(Waters LC) LC-Geräteeigenschaften und Methodeninformationen fehlen in „Sample Information“, die im Arbeitsbereich „Explorer“ angezeigt werden.	–
Der Name der OptiFlow® Turbo V-Ionenquelle ist nicht korrekt im Teilfenster „Detailed Status“. (ONYX-10450)	–

Probleme bei der Erfassung

Problem	Hinweise
In den Arbeitsbereichen „Batch“ und „Queue“ bestehen bei Ausdrucken unter Verwendung der Option PDFactory folgende Probleme: • In mit PDFactory erstellten Berichten werden keine numerischen Werte angezeigt, z. B. Methodennamen, Probennamen, Proben-IDs, Strichcodes usw., wenn die Namen aus Ziffern bestehen. (ONYX-2236) • Das Drucken von Berichten mithilfe von XPS und PDFactory im Querformat funktioniert wie erwartet, wenn jedoch das Hochformat in PDFactory verwendet wird, fehlen die letzten beiden Spalten auf der ersten Seite, und die Uhrzeit des Chargen-Ausdrucks ist abgeschnitten. (ACQ-1275)	Drucken Sie zur Vermeidung von möglichen Problemen mithilfe der Option XPS anstelle von PDFactory.
Im Arbeitsbereich „Batch“ ist die Liste der verfügbaren MS- und LC-Methoden nicht vollständig, wenn die Methoden aus einem anderen Projekt kopiert wurden. (ACQ-2127)	Wenn dieses Problem auftritt, starten Sie die Software erneut.
Ein Fehler wird angezeigt und die Charge kann nicht übermittelt werden, wenn die „**Data File**“ in der Zelle zentriert ist und der Benutzer auf „**Shift**“ + „**Tab**“ drückt, um zur nächsten Zelle zu wechseln. (ACQ-2135)	Um dieses Problem zu vermeiden, wechseln Sie die Zelle nicht mithilfe der „**Tab**“-Taste. Entfernen Sie den gesamten Zelleninhalt und geben Sie die „**Data File**“ dann erneut ein.
(X500 QTOF-Systeme) Die aktualisierten Ionenquellenparameter werden nicht auf das Massenspektrometer übertragen. (ACQ-2177)	Während der manuellen Erfassung mithilfe einer SWATH®- und MRM HR-Methode können die Parameter für das Ionenquellengas und die Temperatur auf der Benutzeroberfläche bearbeitet werden. Die Änderungen des Benutzers werden jedoch nicht auf das Massenspektrometer übertragen und werden auch nicht in den Probendaten für diese Probe aufgezeichnet.
Die Harvard-Spritzenpumpe geht in den Fehlerstatus über, wenn „Standby“ gewählt wird. (ACQ-2193)	Um dieses Problem zu vermeiden und den Fehler zu löschen, starten Sie die Spritzenpumpe mithilfe der Funktion „Direct Control“.

Problem	Hinweise
Bei Arbeiten mit einer Shimadzu LC kann das System keine Injektion vornehmen, wenn Injektionsereignisse im Programmzeitplan des Autosamplers stehen. (ACQ-2242)	Um dieses Problem zu vermeiden, fügen Sie dem Programmzeitplan des Autosamplers keine Injektionsereignisse hinzu.
Das Massenspektrometer geht gelegentlich in den Fehlerstatus über und das System lässt sich nicht wiederherstellen. (ACQ-2250)	Wenn dieses Problem eintritt, deaktivieren und reaktivieren Sie die Geräte und klicken Sie dann auf „**Standby**“.
Nicht alle auf der Benutzeroberfläche angezeigten Spalten werden gedruckt. (ACQ-2611)	In folgenden Fällen werden nicht alle auf der Benutzeroberfläche angezeigten Spalten in den Ausdrucken der Methode angezeigt: 1. Der Benutzer erstellt eine MRM HR-Methode. 2. Der Benutzer wendet einen Scan-Zeitplan an. 3. Der Benutzer lässt erweiterte Parameter anzeigen. 4. Der Benutzer speichert die Methode und druckt diese dann aus. Um dieses Problem zu vermeiden, ändern Sie die Papiergröße zu einer größeren Größe als „Letter“.
Wenn die Software den CE-Parameter während der MRM HR-Erstellung zu negativer Polarität anpasst, werden im Teilfenster „Data Acquisition“ in Echtzeit keine Spektraldaten angezeigt, und die x-Achsenskala wird im positiven Modus angezeigt. (ACQ-2727)	Verwenden Sie zur Vermeidung von Problemen den MRM HR-Generator, um Ergebnisse der Parameteranpassung anzuzeigen. Verwenden Sie nicht das Teilfenster „Data Acquisition“.

Problem	Hinweise
(X500 QTOF-Systeme) Wenn Benutzer während des manuellen Tunings eine Charge ohne Kalibrierungsprobe (weder CDS- noch LC-Autokalibrierung) übermitteln, werden für die erste und alle nachfolgenden Proben in der Charge die Ionen der manuellen MS-Methodenerfassung als probenübergreifende DBC-Referenzliste verwendet. Wenn es bei Massenbereich, Polarität usw. Diskrepanzen zwischen der für die manuelle Erfassung verwendeten MS-Methode und der in der Charge übermittelten gibt, schlägt die probenübergreifende Kalibrierung aufgrund der Verschiebung der Massengenauigkeit für alle Proben in der Charge fehl. (ACQ-2834)	Gehen Sie folgendermaßen vor, um mögliche Probleme zu vermeiden: • Wenn der Benutzer nach Abschluss der manuellen Erfassung im Arbeitsbereich „MS Method“ eine Charge ohne Kalibrierungsprobe übermittelt, funktioniert die probenübergreifende Kalibrierung wie erwartet. Die erste Probe in der Charge wird zur Erzeugung der Referenzliste für die Kalibrierung nachfolgender Proben verwendet. • Wenn der Benutzer während der manuellen Erfassung eine Charge mit Kalibrierungsprobe übermittelt, funktioniert die probenübergreifende Kalibrierung wie erwartet, und es ist keine Verschiebung der Massengenauigkeit zu beobachten.
(X500 QTOF-Systeme) Benutzer können eine Charge mit mehr als 500 Komponenten erstellen. (ACQ-3073)	SCIEX OS unterstützt maximal 500 Komponenten. Wenn ein Benutzer mehr als 500 Komponenten zu einer Charge hinzufügt, wird kein Fehler gemeldet. Wenn der Benutzer die Charge schließt und dann wieder öffnet, wird allerdings eine Fehlermeldung angezeigt.
Wenn der Benutzer eine MS-Methode öffnet, ist die Schaltfläche „**Print**“ nicht verfügbar. (ACQ-3301)	Schließen Sie diese Methode und öffnen Sie sie erneut.
Bei Importen aus einer Erfassungsmethode und aus einer Verarbeitungsmethode tritt ein inkonsistentes Verhalten auf, das zu unzuverlässigen Qualifizierungsergebnissen führt. (BLT-284)	Die aus einer Erfassungsmethode importierten Daten weisen eine Massengenauigkeit von zwei Dezimalstellen auf. Die zur Berechnung der Massengenauigkeit in einer Verarbeitungsmethode genutzten Formeln führen zu Ergebnissen mit vier Dezimalstellen. Aus diesem Grund können die Ergebnisse der beiden Methoden voneinander abweichen.
(X500 QTOF-Systeme) Bei MRM HR-Methoden wird die Retentionszeit nicht validiert, wenn die Methodendauer im Arbeitsbereich „MS Method“ geändert wird. (BLT-961)	Speichern und schließen Sie die Methode und öffnen Sie sie erneut.
Chargen schlagen fehl, wenn Daten mit DAD im Spektrummodus erfasst werden. (BLT-978)	Verwenden Sie DAD im Signalmodus, um eine bessere Chargen-Stabilität zu erzielen.

Problem	Hinweise
Die Echtzeitaktualisierungen für das „DAD“-Feld können langsamer ausfallen als die in der Methode ausgewählte Ansprechzeit (DS-853).	Um dieses Problem zu vermeiden, reduzieren Sie entweder die Häufigkeit der DAD-Erfassung oder betrachten Sie die Daten nach Abschluss der Erfassung.
Die Peak-Beschriftung unterscheidet sich bei XWC- und TWC-Graphen während der UV-Datenerfassung in Echtzeit. (DS-1262)	Um mögliche Probleme zu vermeiden, untersuchen Sie Daten nach der Erfassung im Arbeitsbereich „Explorer“.
(Agilent LC) Wenn eine mit SCIEX OS 1.2 oder früheren Versionen erstellte Charge geöffnet wird, fehlen LC-Informationen wie „**Rack code**“, „**Rack position**“ und „**Plate code**“. (DS-2186)	Diese Felder wurden in dieser Softwareversion neu definiert. Füllen Sie sie erneut aus.
(X500 QTOF-Systeme) Nachdem die Software nicht mehr reagiert, bleibt das CDS im Reinigungsmodus. (MSCS-666)	Wenn dieses Problem auftritt, deaktivieren Sie die Option „Wash Mode“ im Dialogfeld „Direct Control“.
Die Einstellung der Ionengasquelle 2 ist in einer Benutzernachricht aufgeführt. (MSCS-943)	Wenn eine APCI-Sonde eingesetzt wird, wird eine Benutzernachricht angezeigt, die darauf hinweist, dass die Einstellung der Ionengasquelle 2 einem bestimmten Wert entsprechen muss. Beachten Sie die Einstellungen der Ionengasquelle 2 aus der Benutzernachricht nicht.
Eine falsche Meldung wird angezeigt, wenn die Sonde geändert wird. (MSCS-972)	Der Fehler beeinträchtigt die Erfassung nicht. Benutzer können die Meldung abbrechen, und die Erfassung wird fortgesetzt.
(X500 QTOF-Systeme) Die Erfassung wird abgebrochen, wenn das TOF MS-Experiment gelöscht wird, während Daten mithilfe der MRM HR- und SWATH®-Methoden oder der MRM HR- und IDA-Methoden erfasst werden. (MSCS-1059)	Um dieses Problem zu vermeiden, löschen Sie nicht das TOF MS-Experiment aus der MRM HR-Methode.
In einer IDA-Methode mit einem Vorläuferscan, der den Algorithmus *Scheduled* MRM™ mit sMRM-Auslösung verwendet, wird die „**Inclusion list**“ nicht verwendet. (MSCS-2270)	Verwenden Sie keine Einschlussliste mit IDA-Vorläuferscans, die den *Scheduled* MRM™-Algorithmus mit sMRM-Auslösung verwenden.

Problem	Hinweise
Wenn ein IDA-Experiment mit einem MRM-Vorläuferscan mit einem anderen Experiment gestaffelt wird, das den *Scheduled* MRM™-Algorithmus mit angewandter sMRM-Auslösung verwendet, dann wird der im Feld „**Intensity threshold exceeds**“ in den IDA-Kriterien festgelegte Trigger-Schwellenwert nicht auf die Kandidatenmassen im MRM-Vorläuferscan angewandt. (MSCS-2283)	• Deaktivieren Sie die sMRM-Auslösung im gestaffelten *Scheduled* MRM™-Algorithmus-Experiment. Der IDA-Intensitätsschwellenwert wird auf die Kandidatenmassen im MRM-Vorläuferscan angewandt. • Ändern Sie den MRM-Vorläuferscan, um stattdessen den *Scheduled* MRM™-Algorithmus zu verwenden und stellen Sie die Retentionszeit der relevanten Verbindungen auf 0 ein. Der IDA-Intensitätsschwellenwert wird auf die Kandidatenmassen im Vorläuferscan angewandt.
Im EAD-Fragmentierungsmodus werden keine Daten aufgenommen. (MSCS-2527)	Wenn EAD-Fragmentierung verwendet wird, muss die Akkumulationszeit mindestens dreimal so lang wie die Reaktionszeit sein. Andernfalls werden keine Daten aufgenommen. Um dieses Problem zu lösen, muss die Akkumulationszeit erhöht werden.
Negative Werte für Massendefekt werden mit dem falschen Vorzeichen in den IDA-Kriterien für Mass Defect (Massendefekt) angezeigt. (MSCS-2537)	Der Algorithmus wählt die richtigen Vorläufer, also sind die erfassten Daten korrekt.
Auto Calibration (Autom. Kalibrierung) ist nicht verfügbar, wenn die OptiFlow® Turbo V-Ionenquelle mit NANO-Sonde installiert und Kontaktschluss aktiviert ist. (MSCS-2543)	Dieses Problem kann auftreten, wenn der Benutzer von der Turbo V™-Ionenquelle zur OptiFlow® Turbo V-Ionenquelle wechselt. Deaktivieren Sie die Geräte und aktivieren Sie diese erneut.
(X500 QTOF-Systeme) Der Arbeitsbereich „MS Method“ zeigt beim Kalibrierlösungsdurchlauf nicht die aktuell korrekten Daten an. (ONYX-1556)	Auch wenn die Benutzeroberfläche nicht aktualisiert wird, werden die korrekten Parameter verwendet, welche auch in den Dateiinformationen wiedergegeben werden.
Potenzielle zusätzliche Zeit wird zu zufälligen Zyklen während der IDA-Erfassung hinzugefügt. (ONYX-1764)	Um Probleme zu vermeiden, stellen Sie sicher, dass die Aktualisierungsdienste von Google („gupdate“ und „gupdatem“), soweit vorhanden, sowie die Windows-Sicherung deaktiviert sind, bevor Sie die IDA-Erfassung durchführen.
In den Arbeitsbereichen „MS Method“ und „LC Method“ wird das Dialogfeld „Print“ nicht oder erst nach einer Verzögerung geöffnet. (ONYX-3412)	Warten Sie ungefähr 1 Minute, bis das Dialogfeld „Print“ geöffnet wird.

Problem	Hinweise
Die automatische Verarbeitung schlägt fehl, wenn der für die „**Results File**“ angegebene Dateipfad in der Charge zu lang ist. (ONYX-4827)	Begrenzen Sie den Pfad der „**Results File**“ in der Charge auf höchstens 300 Zeichen.
Beim Importieren einer CSV-Datei in die Massentabelle einer MS-Methode wird keine Fehlermeldung angezeigt, wenn die Anzahl der Spalten in der Importdatei größer als die Anzahl der Spalten in der Massentabelle ist. (ONYX-5216)	Dieses Problem tritt auf, wenn ein Texteditor zum Hinzufügen einer Spalte mit Komma (,) als Trennzeichen zu einer Zeile in der csv-Datei verwendet wird und das Komma und der Spaltentext nicht den anderen Zeilen hinzugefügt werden. 1. Exportieren Sie die Massentabelle in eine csv-Datei. 2. Öffnen Sie die exportierte Datei in Microsoft Excel. 3. Bearbeiten Sie die Massentabelle. 4. Speichern Sie die aktualisierte csv-Datei. 5. Importieren Sie die Datei erneut.
Wenn der Benutzer die Massentabelle für eine MS-Methode im Arbeitsbereich „MS Method“ bearbeitet, dann funktioniert die Taste „**Delete**“ nicht. (ONYX-5467/ONYX-7384)	Verwenden Sie eine der folgenden Methoden, um Inhalte in der Massentabelle zu löschen: • Verwenden Sie die Taste „**Backspace**“, um den Text zu löschen. • Doppelklicken Sie auf die Zelle, um in den Bearbeitungsmodus zu wechseln und verwenden Sie dann die Taste „**Delete**“. Geben Sie anschließend bei Bedarf neuen Text ein.
Wenn eine Zeile aus einer Datei kopiert wird, z. B. aus einer Excel-Tabelle, und dann in das Raster im Arbeitsbereich „Batch“ eingefügt wird, dann werden einige Komponenten dem Raster nicht hinzugefügt. (ONYX-6068)	Fügen Sie der Charge fehlende Komponenten manuell hinzu.
Wenn der Benutzer eine Zeile in eine vorhandene Zeile im Arbeitsbereich „Batch“ einfügt, dann wird der Inhalt nicht korrekt eingefügt. (ONYX-6083)	Um dieses Problem zu vermeiden, fügen Sie eine leere Zeile ein und fügen den Inhalt dann in diese ein, anstatt den Inhalt in eine vorhandene Zeile einzufügen. Löschen Sie anschließend die vorhandene Zeile.

Problem	Hinweise
Wenn der Ordner „Acquisition Methods“ eine fehlerhafte MS-Methode enthält, dann stehen in der Spalte „**MS Method**“ im Arbeitsbereich „Batch“ keine MS-Methoden zur Auswahl. (ONYX-6795)	Wenn die Liste der MS-Methoden leer ist, suchen und löschen Sie die fehlerhafte Methode.
Im Arbeitsbereich „Queue“ zeigen Proben, die aufgrund der Entscheidungsregelverarbeitung erneut injiziert werden, „***Embedded Method***“ in der Spalte „**Processing Method**“ anstelle des Namens der mit der ursprünglichen Probe verbundenen Verarbeitungsmethode an. (ONYX-6896)	Wenn die erste Probe verarbeitet wird, wird die Ergebnisdatei erstellt und die in der Spalte „**Processing Method**“ festgelegte Verarbeitungsmethode wird in die neue Ergebnisdatei integriert. Daher entspricht die für die erneut injizierte Probe integrierte Methode der Verarbeitungsmethode, die für die erste Probe festgelegt wurde.
Es tritt ein Fehler auf, wenn der Benutzer eine Zeile in der Massentabelle auswählt und dann den Befehl „**Fill Down**“ verwendet. (ONYX-7225/ONYX-7461)	Wählen Sie die Spalte an der zu kopierenden Zelle aus und verwenden Sie dann den Befehl „**Fill Down**“. Wählen Sie nicht die Zeile aus.
Wenn der Erfassungscomputer während der Erfassung von IDA-Daten über den Windows Remote Desktop gesteuert wird, kann die Erfassungsleistung herabgesetzt sein und zu einem Verlust von Datenpunkten führen. (ONYX-7491)	Verwenden Sie den Remote Desktop nicht zur Steuerung des Erfassungscomputers während IDA-Daten erfasst werden.
Wenn der Benutzer die Polarität einer LIT-Methode ändert, dann wird „**Dynamic fill time**“ aktiviert. (ONYX-7740)	Deaktivieren Sie die „**Dynamic fill time**“.
Ein Fehler tritt auf, wenn der Benutzer versucht, eine Methode in eine PDF-Datei zu schreiben, die derzeit geöffnet ist. (ONYX-7813)	Schließen Sie die PDF-Datei, bevor Sie die Methode drucken, oder speichern Sie unter einem anderen Namen.
Die Verweilzeit wird nicht korrekt aktualisiert, wenn der Benutzer die Polarität in einer Methode mehrere Male ändert und diese Methode ein Experiment beinhaltet, das den *Scheduled* MRM™-Algorithmus gestaffelt mit einem oder mehreren weiteren Experimentarten verwendet. (ONYX-7841)	Die berechnete Verweilzeit für die Übergänge in dem Experiment, das den *Scheduled* MRM™-Algorithmus verwendet, wird um wenige ms von der korrekten Verweilzeit abweichen.

Problem	Hinweise
Ein Standardwert für AF2 kann für MS^3-Experimente in negativer Polarität nicht festgelegt werden. (ONYX-8041)	Wenn der Benutzer einen Standardwert für AF2 für MS^3-Experimente in negativer Polarität festlegt, dann wird der Standardwert nicht gespeichert. Um einen Standardwert für AF2 in negativer Polarität zu speichern, muss zunächst die positive Polarität mit dem für die negative Polarität erforderlichen AF2-Wert konfiguriert werden. Wechseln Sie dann zur negativen Polarität und speichern Sie die Standardwerte.
Der Benutzer kann in den Feldern „**Start at**“ und „**Stop at**“ für das AF2-Ramping keine Dezimalwerte festlegen. (ONYX-8318)	Stoppen Sie das Ramping manuell, wenn der erforderliche Stoppwert erreicht wurde.
Wenn eine Verarbeitungsmethode ausgewählt ist kann im Dialogfeld „Decision Rule Configuration“ die Liste im Feld „**Flagging Rules**“ kombinierte Markierungsregeln enthalten, die in der Verarbeitungsmethode definiert sind, jedoch nicht angewandt werden. Das heißt, das Kontrollkästchen „**Apply Rule**“ ist nicht aktiviert. (ONYX-8352)	Wenn der Benutzer eine kombinierte Markierungsregel auswählt, die nicht in der Verarbeitungsmethode angewandt wird, dann erfolgt keine Entscheidungsregelverarbeitung in der Warteschlange.
Eine MS-Methode, die den *Scheduled* MRM™-Algorithmus verwendet, kann mit einer ungültigen Methodendauer gespeichert werden. (ONXY-8443)	Die „**Duration**“ einer MS-Methode, die den *Scheduled* MRM™-Algorithmus verwendet, kann ungültig werden, wenn die Scandauer zu lang ist. Wenn der Benutzer versucht, die Methode zu speichern, wird eine Fehlermeldung angezeigt und das Feld „**Duration**“ enthält ein Fehlersymbol. Wenn der Benutzer eine gültige Methodendauer festlegt, die Dauer wieder auf die fehlerhafte Methodendauer ändert und dann die Methode speichert, dann wird diese erfolgreich gespeichert. Stellen Sie sicher, dass Sie die korrekte Methodendauer festlegen, bevor Sie die Methode speichern.
Die von SCIEX OS geschriebenen wiff-Dateien enthalten weniger detaillierte Informationen über die MS-Methode als die von der Analyst® Software erstellten wiff-Dateien. (ONYX-8546)	–

Problem	Hinweise
(X500 QTOF-Systeme) Wenn eine *Scheduled* MRM^{HR}-Methode gedruckt wird, enthält der Bericht nicht alle Spalten in der Massentabelle. (ONYX-8563)	Ändern Sie die Dokumentausrichtung vor dem Drucken im Dialogfeld „Print“ auf Querformat.
Die Polarität des CE-Parameters (Collision Energy - Stoßenergie) wird in der Polarität von negativen IDA-Experimenten falsch angezeigt. (ONYX-8566)	Der korrekte Wert für CE wird für die Erfassung verwendet.
Während Schritt 5 (Stoßenergien optimieren) wird ein Fehler angezeigt, wenn der Benutzer nicht alle vorhergehenden Schritte der Reihe nach abschließt. (ONYX-8568)	Klicken Sie auf „**OK**“.
Wenn mehrere Übergänge dieselbe Retentions- und Verweilzeit aufweisen, dann wird nur der letzte im Tooltip im Diagramm „Dwell Time“ im Dialogfeld „(s)MRM Plots“ angezeigt. (ONYX-8621)	–
Wenn die Funktion für die geplante Ionisation mit einem Gerät verwendet wird, das mit Kontaktschluss konfiguriert ist, dann startet die Ionisation möglicherweise bevor das über Kontaktschluss gesteuerte Gerät mit dem Injizieren der Probe beginnt. (ONYX-8626)	Erhöhen Sie die Startzeit der Ionisation, damit Kontaktschlusssignale übermittelt werden können und die Probeninjektion beginnen kann.
Die Versionsdaten der Software, die in den „Sample Information“ in einer wiff-Datei angezeigt werden, sind falsch, wenn die Datei mit anderen Versionen von SCIEX OS erfasst werden. (ONYX-9522)	Wenn Daten mit einer Version von SCIEX OS erfasst und dann Daten mit einer anderen Version von SCIEX OS an die Datendatei angehängt werden, dann ist die Software-Version, die in den „Sample Information“ in der Analyst® Software angezeigt werden, falsch. Im Abschnitt „File Info“ wird die frühere Software-Version angezeigt.
Die Anzahl der Zyklen und die Zykluszeit, die in den „Sample Information“ für eine Probe in der PeakView® Software angezeigt werden, sind für eine wiff-Datei, die mit dem Algorithmus *Scheduled* MRM^{HR} erfasst wurden, falsch. (ONYX-10623)	–

Problem	Hinweise
Wenn die Erfassung fehlschlägt, dann enthälft die wiff-Datei keine Daten. (ONYX-11006)	–
Wenn eine mit SCIEX OS 1.6 oder früheren Versionen erstellte Charge im Arbeitsbereich „Batch“ geöffnet wird, dann sind die Auswahllisten für die Spalten „**Processing Method**“ und „**Results File**“ leer. (ONYX-11275)	Schließen Sie SCIEX OS und öffnen Sie es wieder. Die Auswahllisten enthalten die Verarbeitungsmethoden und Ergebnisdateien im aktuellen Projekt.
Die für die Probe in der wiff-Datei gezeigten Parameter TOF Mass Calibration (TOF-Massenkalibration) stimmen nicht mit den Parametern überein, die in der wiff2-Datei gezeigt werden. (ONYX-11356)	Kalibrierungsparameter werden von der Analyst® TF Software und SCIEX OS unterschiedlich aufgezeichnet. Die wiff-Datei folgt dem Modell der Analyst® TF Software.
Wenn ein gestaffeltes Experiment mit komplexen Scans, IDA, SWATH, MRMHR erstellt wird, wird das gestaffelte Experiment als geplantes Experiment angezeigt, selbst wenn der Benutzer keine Planung des Experiments festgelegt hat. (ONYX-11359)	1. Speichern und schließen Sie die Methode. 2. Öffnen Sie die Methode. 3. Löschen Sie „**Experiment scheduling**“ auf der Registerkarte „Advanced“. Das gestaffelte Experiment wird als ungeplant angezeigt.
Der Benutzer kann nicht-ganzzahlige Werte in das Feld „**For**“ für „**Exclude former candidate ions**“ eingeben. (ONYX-11383)	Nicht-ganzzahlige Werte werden beim Speichern und erneuten Öffnen der Methode durch „0“ ersetzt, die Daten werden aber korrekt erfasst, bei denen der nichtganze Wert berücksichtigt wird.
SCIEX OS kann eventuell keine Daten an eine wiff-Datei auf einer Netzwerkressource anhängen. (ONYX-11437)	Das Anhängen von Daten an eine wiff-Datei auf einer Netzwerkressource kann unter den folgenden Bedingungen fehlschlagen: • Die wiff-Datei enthält Analyst Software-Daten. • Die wiff-Datei enthält beschädigte Daten. • Die wiff-Datei ist schreibgeschützt. • Der Benutzer hat keinen Schreibzugriff auf die wiff-Datei. • Die wiff-Datei ist größer als 2 GB.

Problem	Hinweise
Änderungen an den Fragmentierungsinformationen in einer neuen Ionenreferenztabelle werden eventuell nicht gespeichert. (ONYX-11511)	Dieses Problem tritt auf, wenn der Benutzer eine neue Ionenreferenztabelle erstellt, indem er eine vorhandene Tabelle kopiert und die Fragmentierungsionen bearbeitet. Wenn der Benutzer die neue Tabelle speichert, werden die Änderungen an den Fragmentierungsionen nicht gespeichert. Der Benutzer muss die neue Referenztabelle erneut bearbeiten und speichern, um die Änderungen an den Fragmentierungsionen anzuwenden.
Das Diagramm für eine IDA-summierte TOF MSMS TIC unterscheidet sich im Arbeitsbereich „Explorer“ (wiff2) von der PeakView® Software (wiff1). (ONYX-11599)	Die Daten, das Diagramm für das TOF MS TICs, die Diagramme für die einzelnen TOF MSMS TICs, die TOF MS-Spektren und die einzelnen TOF MSMS-Spektren sind alle im Arbeitsbereich „Explorer“ und der PeakView® Software identisch.

Probleme mit dem Arbeitsbereich „Analytics“

Problem	Hinweise
Es wird keine der „Results Tables“ in einem Projektstammverzeichnis geöffnet.	Dieser Fehler tritt auf, wenn das Stammverzeichnis für ein Projekt als Stammverzeichnis für die Analyst®-Software verwendet wurde. Die Analyst®-Software erstellt mindestens eine der folgenden Dateien im Stammverzeichnis unter dem Ordner „Default/Project Information“: • ProjectSettings.atd • Default Audit Map.cam • Project.atd Wenn diese Dateien im Projektinformationsordner vorhanden sind, löschen Sie diese.
Es können keine Berichte aus der „Results Table“ erstellt werden, nachdem eine benutzerdefinierte Vorlage, die sowohl Bildelemente als auch eine Abfrage enthält, für die Erstellung eines csv-Berichts verwendet wurde. (BLT-1507)	Verwenden Sie eine der unterstützten Vorlagen, um Probleme zu vermeiden. Siehe Standardvorlagen.
SCIEX OS reagiert während der Verarbeitung nicht mehr, wenn ein nicht zielgerichteter Arbeitsablauf verwendet wird. (BLT-2069)	Beschränken Sie die Verarbeitung bei nicht zielgerichteten Arbeitsabläufen auf jeweils 20 Proben.

Problem	Hinweise
Wenn eine Datei mit Einstellungen für die Tabellenanzeige (cset) importiert wird, wird die Spalte „**Component Name**“ auf die rechte Seite der Tabelle verschoben. (BLT-2564)	Verschieben Sie die Spalte „**Component Name**“ an die gewünschte Position.
(SCIEX 7500-Systeme) Daten mit einem langen Dateipfad können mit der Analyst® 1.7.2 Software nicht verarbeitet werden. Darüber hinaus können die Dateiinformationen für eine solche Datendatei in der Analyst® 1.7.2 Software nicht angezeigt werden. (BLT-2246)	Um dieses Problem zu vermeiden, verwenden Sie den Arbeitsbereich „Analytics“ im SCIEX OS zur Verarbeitung der Daten.
Für Analyst®-Softwaredaten wird die Q3-Auflösung als Maximum für LIT-Scans gemeldet. (DS-2220)	Öffnen Sie die Daten im „Explore“-Modus in der Analyst®-Software.
Der CSV-Bericht unterstützt keine Grafiken oder Logos. (MQ-1361)	Der CSV-Bericht wird unterstützt, wenn er keinerlei Grafiken enthält.
Durch Ändern der Regressionseinstellung für einen Algorithmus auf der Projektstandardseite wird auch die Regressionseinstellung für die anderen Algorithmen aktualisiert. (MQ-1376)	Die Felder für die Regressionseinstellungen sind nicht unabhängig vom ausgewählten Algorithmus. Wenn das Regressionseinstellungsfeld in einem Algorithmus geändert wird, wird auch das entsprechende Feld in anderen Algorithmen geändert. Um mögliche Probleme beim Wechseln zwischen Algorithmen zu vermeiden, müssen die Regressionseinstellungen für den jeweiligen Algorithmus aktualisiert werden.
Ein Fehler tritt auf, wenn eine Bibliothek ohne Namen importiert wird. (MQ-1379)	Um dieses Problem zu vermeiden, geben Sie den Bibliotheken vor dem Importieren einen Namen.
Die erwartete Retentionszeit einer einzelnen, zu einer Gruppe gehörigen Komponente (die Funktion „**Update Retention Time**“ ist hier auf „**Group**“ gestellt) kann geändert werden, was zu inkonsistenten erwarteten Retentionszeiten und Retentionszeitfenstern in der Gruppe führt. (MQ-1511)	Der Benutzer kann die „**Expected RT**“ für jede Komponente innerhalb der Gruppe manuell ändern.

Problem	Hinweise
Die kombinierte Bewertung ist ungleich null, wenn sowohl die Bewertung von Library Search als auch die von Formula Finder gleich null oder nicht verfügbar sind. (MQ-1545)	Außer den Bewertungen von Library Search und Formula Finder verwendet die Software zur Berechnung der kombinierten Bewertung die Bewertungen von Massefehler, Isotop und Retentionszeit. Wenn diese Bewertungen nicht berücksichtigt werden sollen, stellen Sie deren Gewichtung auf null.
Die gespeicherten „Results Tables“ werden nicht automatisch aktualisiert, wenn eine Bibliothek zu der Datenbank hinzugefügt oder aus dieser entfernt wird. (MQ-1684)	Um eventuelle Probleme zu vermeiden, bearbeiten Sie die Ergebnisse basierend auf der aktualisierten Bibliotheksdatenbank manuell nach.
Die Bibliothekssuche ergibt eine Reinheitsbewertung aus qualitativ minderwertigen Spektren, die höher als erwartet ausfällt. (MQ-1679, MQ-1773)	Wenn dieses Problem auftritt, überprüfen Sie die Retentionszeit, die Peak-Qualität und die Integration, um festzustellen, ob die Verbindung tatsächlich positiv ist.
Es sind keine verbindungsspezifischen Akzeptanzkriterien verfügbar. (MQ-1822)	Derzeit sind nur allgemeine Einstellungen für Library Search verfügbar.
Lizenzen für lizenzierte Pakete, die mit LibraryView Package Builder erstellt wurden, werden unter C:\Program Files\AB SCIEX\LibraryView\bin gespeichert. (MQ-1847)	Lizenzen für lizenzierte Pakete, die mit LibraryView Package Builder 1.0 erstellt wurden, müssen manuell in den Pfad C:\Program Files\SCIEX\LibraryView\LibraryViewFramework\Server kopiert werden.
Inkompatible Komponenten in der eingebetteten Verarbeitungsmethode werden nicht korrekt bearbeitet, wenn die Verarbeitungsmethode den AutoPeak-Integrationsalgorithmus verwendet. (MQ-1873)	Wenn zur Datenverarbeitung eine bestehende Verarbeitungsmethode, die den AutoPeak-Integrationsalgorithmus verwendet, mit der Option zur Erstellung eines Modells mithilfe der aktuell ausgewählten Probe eingesetzt wird, öffnet sich die „Results Table“ ordnungsgemäß. Inkompatible Komponenten werden jedoch mit einem roten Ausrufezeichen in der eingebetteten Methode angezeigt. Benutzer können inkompatible Komponenten aus der Methode entfernen, oder sie können die Retentionszeit der Fragmentmasse oder aber den Experimentindex ändern, um dieses Verhalten abzustellen.
Die Software scheint nicht mehr zu reagieren, wenn PDFactory unter Verwendung der Vorlage „Positive Hit“ zur Erstellung eines geschützten PDF-Berichts aus einer „Results Table“ verwendet wird, die über 2.500 Zeilen enthält. (MQ-1896)	Die Erstellung eines Berichts kann einige Zeit dauern. Das Fortschrittsfenster von PDFactory, das immer im Hintergrund angezeigt wird, zeigt, dass die PDF-Erstellung läuft. Es können alle Fenster, einschließlich SCIEX OS, minimiert werden, um das Fortschrittsfenster von PDFactory anzuzeigen.

Problem	Hinweise
Der IS-Name kann in der Tabelle „Components“ im Method Editor nicht eingefügt werden. (MQ-2193)	Um Probleme zu vermeiden, wählen Sie den IS-Namen entweder manuell aus, oder fügen Sie die Spalte „IS“ separat ein.
Benutzer haben die Möglichkeit, mithilfe einer ungültigen Methode Daten zu verarbeiten und eine „Results Table“ zu erstellen. (MQ-2431)	Um mögliche Probleme zu vermeiden, müssen in früheren Versionen von SCIEX OS erstellte Methoden geöffnet und Fehler behoben werden. Wenn Fehler nicht behoben werden, kann die Verarbeitungszeit beeinträchtigt werden.
Bei SCIEX X500 QTOF-Systemen kann die Software keine quantitative und qualitative Datenverarbeitung von Q1-Scans durchführen. (MQ-2790)	Q1-Daten von SCIEX X500 QTOF-Systemen können nicht im Arbeitsbereich „Analytics“ verarbeitet werden.
Wenn der AutoPeak-Integrationsalgorithmus für UV-, DAD- oder ADC-Daten verwendet wird, kann die Erstellung des Modells sehr lange dauern, bis die Verarbeitung erfolgt. (MQ-4421)	Verwenden Sie den AutoPeak-Integrationsalgorithmus nicht für UV/DAD/ADC-Daten mit schlechter Peakform.
Ein Fehler tritt auf, wenn der Benutzer versucht, Werte in die Spalte „**Upper Limit**“ in den Tabellen „Concentration Acceptance“ und „Values“ für Komponententypen in den Markierungsregeln zu kopieren. (MQ-5599)	Geben Sie die Werte in der Tabelle ein.

Problem	Hinweise
Im Arbeitsablauf „Mass Reconstruction“ werden in der „Results Table“ gemeldete Signal-zu-Rausch-Werte (S/N) für rekonstruierte Peaks nicht korrekt berechnet. (MQ-7073)	Öffnen Sie zum Berechnen des S/N das durchschnittliche *m/z*-Spektrum im Arbeitsbereich „Explorer“, führen Sie eine manuelle Wiederherstellung durch und berechnen Sie dann das S/N auf dem Ziel-Peak. **Hinweis:** Diese Problemumgehung erfordert eine Biotool Kit-Lizenz. 1. Wählen Sie das Durchschnittsspektrum im Teilfenster „Peak Review“ aus. 2. Klicken Sie auf „**Open data exploration**“ ( ). 3. Klicken Sie auf „**Bio Tool Kit > Reconstruct Protein**“, geben Sie einen Auflösungswert ein, legen Sie die Rekonstruktionsparameter fest und führen Sie dann eine Wiederherstellung durch. 4. Berechnen Sie das S/N manuell. Siehe „Anzeigen der Diagrammauswahlinformationen“ im *Softwarehandbuch*.
Ein Fehler wird angezeigt, wenn der Benutzer die Tabelleneinstellungen auf der Seite „Components“ der Verarbeitungsmethode konfiguriert, um „**Mass (Da) and Width (ppm)**“ anzuzeigen. (MQ-7709)	Bei nominellen Systemen, wie dem SCIEX 7500-System, wird die XIC-Breite (ppm) nicht unterstützt. Verwenden Sie die XIC-Breite (Da).
Namen von berechneten Spalten dürfen nicht mit Funktionsnamen übereinstimmen. (MQ-8087)	Weisen Sie einen Namen zu, der nicht mit einem Funktionsnamen übereinstimmt.
Der „**Percent CV**“, der im Teilfenster „Statistics“ (Statistik) angezeigt wird, unterscheidet sich vom prozentualen VK, der mit der Funktion „**GETSTAT**“ berechnet wurde. (MQ-8211)	Die Funktion „**GETSTAT**“ verwendet die Werte „**Actual Concentration**“, um Wiederholungen zu identifizieren, aber das Teilfenster „Statistics“ (Statistik) verwendet die Werte „**Actual Concentration**“ nachdem das „**Number format**“ angewendet wird. Ist das „**Number format**“ auf 0.00 gestellt, wird z. B. eine Konzentration von 5.001 als 5.00 im Teilfenster „Statistics“ behandelt.

Problem	Hinweise
Die Software unterstützt keine Markierungsregeln basierend auf der Spalte „**Outlier Reasons**“ oder in berechneten Spalten basierend auf der Spalte „**Outlier Reasons**“. (MQ-8295/MQ-8381)	Erstellen Sie keine Markierungsregeln, die die Spalte „**Outlier Reasons**“ verwenden.
Die Software sucht in den Formeln nicht nach Rechtschreibfehlern in Spaltennamen oder -werten. (MQ-8412)	Stellen Sie sicher, dass Spaltennamen und -werte in den Formeln korrekt geschrieben sind.
Die Software zeigt keinen Fortschritt, wenn sie eine komplexe Formel aufgrund einer Änderung in der „Results Table“ neu berechnet. (MQ-8439)	Wenn der Benutzer versucht, die Daten zu speichern oder zu exportieren, wenn die Berechnung läuft, zeigt die Software einen Fehler an. Die Funktionen Speichern und Exportieren sind nicht zulässig, bis die Berechnung abgeschlossen ist. Der Benutzer kann jedoch die Daten weiter anzeigen, während die Berechnung läuft.
Die Spalte „**Adduct/Charge**“ kann bei einem IF-Statement nicht verwendet werden. (MQ-8515)	Um diese Spalte bei einem IF-Statement zu verwenden, erstellen Sie eine berechnete Spalte, um die Daten für Addukt/Ladung zu speichern, und verwenden Sie die berechnete Spalte in dem IF-Statement.
Wenn eine metrische Kurve auf eine Spalte, die auf einer angepassten Formel basiert, verwendet wird, werden Änderungen an beliebigen Eingaben der Formel nicht sofort in der „Metric Plot“ widergespiegelt. (MQ-8524)	Um die metrische Kurve zu aktualisieren, wählen Sie eine andere Komponente in der „Results Table“ und danach erneut die ursprüngliche Komponente.
Ergebnisse können inkonsistent sein, wenn (nicht-numerische) Textvergleiche bei komplexen IF-Statements durchgeführt werden. (MQ-8268)	Vermeiden Sie komplexe Formeln. Erstellen Sie Spalten mit Zwischenberechnungen, um berechnete Ergebnisse zu speichern.
Die Spalte „**Acquisition Date & Time**“ wird bei Formeln nicht korrekt verarbeitet. (MQ-8662)	Verwenden Sie nicht die Spalte „**Acquisition Date & Time**“ in Formeln.

Problem	Hinweise
Wenn eine Textfolge in einer Formel ein Semikolon (;) enthält, wird die Formel nicht korrekt verarbeitet. (MQ-8670)	Fügen Sie kein Semikolon in Textfolgen ein.
Änderungen an einer „Results Table“ können nicht angewendet werden, wenn mehrere „Results Table“ geöffnet sind oder drei oder mehr Änderungen an der „Results Table“ vorgenommen wurden. (MQ-8696)	Eine Änderung an einer „Results Table“ kann unter den folgenden Bedingungen nicht angewendet werden: • Zwei „Results Tables“ sind geöffnet. • Drei Änderungen wurden an den „Results Tables“ vorgenommen, die zu einer Neuberechnung der berechneten Spalten führen. • Die ersten beiden Änderungen sind noch nicht fertig verarbeitet, bevor die dritte Änderung vorgenommen wird. Um dieses Problem zu vermeiden, müssen die ersten beiden Berechnungen abgeschlossen sein, bevor die dritte Änderung vorgenommen wird. Um sicherzustellen, dass die ersten beiden Berechnungen abgeschlossen sind, überprüfen Sie die Spalten, die durch die Berechnung betroffen sind.

Probleme mit dem Arbeitsbereich „Explorer“

Problem	Hinweise
Der Fehler „The requested action could not be completed. Make sure your data is complete and all fields contain appropriate values“ wird in der Formelsuche angezeigt. (BLT-1423)	Dieser Fehler tritt auf, wenn die Struktur für das ausgewählte Ion nicht wie von der Formelsuche vorhergesagt in der Liste der positiven Ionen auf der Registerkarte „Elemental Composition“ des Dialogfelds „Formula Finder Settings“ enthalten ist. Beispielsweise findet die Formelsuche bei *m/z* 1004 eine Übereinstimmung mit (M+NH4)+. Wenn dieses Ion in der Liste der zu suchenden positiven Ionen nicht enthalten ist, dann tritt ein Fehler auf, wenn keine Übereinstimmungen gefunden werden.
Folgende Probleme können auftreten, wenn während der Erfassung Daten durchsucht werden: • Die Echtzeitdaten stimmen nicht mit den Daten nach der Erfassung überein, wenn die XICs und BPCs für geplante Scans vor der geplanten Zeit erstellt werden. (DS-903) • Wenn der Benutzer mit „**Move to next**“ oder „**Move to previous**“ im Arbeitsbereich „Explorer“ zwischen MS-Experimenten wechselt, um ein extrahiertes Ionenchromatogramm (XIC) oder Basispeak-Chromatogramm (BPC) mit Echtzeiterstellung anzuzeigen, wird nur ein Punkt im XIC/BPC-Bereich angezeigt.	Führen Sie folgende Schritte aus, um dieses Problem zu vermeiden: • Generieren Sie XICs für das erforderliche Experiment durch Klicken auf „**File > Show XIC**“ • Erzeugen Sie das XIC/BPC nach der Erfassung. • Schließen Sie das Teilfenster „XIC“ und öffnen Sie es erneut.
Wenn die LC-Methode länger dauert als die MS-Methode, kommt es zu einer Diskrepanz der Echtzeitgraphen zwischen den „Data Acquisition“-Feldern „MS“ und „DAD“ und dem Arbeitsbereich „Explorer“. In diesem Szenario werden die „Data Acquisition“-Felder „MS“ und „DAD“ am Ende der MS-Methode nicht mehr aktualisiert, obwohl der UV-, DAD- und ADC-Kanal im Arbeitsbereich „Explorer“ bis zum Ende der Erfassung der LC-Methode weiterhin in Echtzeit aktualisiert werden. (DS-852)	Wenn dieses Problem beginnt aufzutreten, warten Sie mit dem Analysieren der Daten, bis die Erfassung abgeschlossen ist.

Problem	Hinweise
Die Optimierungsdaten des Detektors werden im Arbeitsbereich „Explorer“ nicht korrekt angezeigt. (DS-1044)	Die Z-Achse (Detector Voltage) ist falsch beschriftet. Um mögliche Probleme zu vermeiden, verwenden Sie die Felder „Detector Optimization Report“ oder „Data Acquisition“ zur Analyse der während des Optimierungsvorgangs des Detektors erfassten Daten.
Werden Daten mit einer Erfassungsmethode mit rampenförmigen Parametern erfasst und während der Erfassung angezeigt, werden die Daten nicht aktualisiert und das resultierende Spektrum ist falsch. (DS-1959)	Zeigen Sie Daten, die mit einer Erfassungsmethode mit rampenförmigen Parametern erfasst werden, erst an, wenn die Erfassung abgeschlossen ist.
Der Benutzer kann kein Spektrum aus einem markierten Bereich im XIC erstellen. (ONYX-1882)	Eine Fehlermeldung wird angezeigt, wenn der Benutzer Folgendes versucht: 1. Öffnen von zwei Dateien in separaten Teilfenstern im Arbeitsbereich „Explorer“ und anschließende Erstellung eines XIC-Graphen für jede Datei. 2. Kombinieren der XIC-Graphen in einem einzigen Teilfenster 3. Markieren eines Bereichs im Teilfenster „XIC“ und anschließendes Doppelklicken, um ein Spektrum zu erstellen 4. Wenn sich das Dialogfeld „Process All Overlays?“ öffnet, klicken Sie auf „**All Overlaid**“ und dann auf „**OK**“. Die Fehlermeldung „Incorrect Argument - invalid cycle range“ wird anstatt des Spektrums angezeigt. Wählen Sie zur Vermeidung möglicher Probleme einen engeren Bereich aus, in dem sich die Graphen überlappen.
Wenn eine große Datenmenge oder mehrere Datendateien im Arbeitsbereich „Explorer“ verarbeitet werden, reagiert die Benutzeroberfläche möglicherweise nicht mehr und es könnte zu Verzögerungen kommen, bevor die Probenwarteschlange mit der nächsten Probe fortfährt. (ONYX-2047)	Wenn dieses Problem auftritt, warten Sie, bis die Software die Verarbeitung im Arbeitsbereich „Explorer“ abgeschlossen hat, oder vermeiden Sie die Verarbeitung großer Datenmengen während der Datenerfassung.

Problem	Hinweise
Im Rekonstruktionsdiagramm für eine Datei intakter Proteindaten, die das Bio Tool Kit verwendet, wenn die Schrittgröße kleiner als 1 Da ist, ist der Ladungszustand nicht 0. (ONYX-11471)	Wählen Sie im Arbeitsbereich „Explorer“ die Option „**Edit > Options**“ und klicken Sie danach auf die Registerkarte „**Peak Labeling & Finding**“. Für „**Label field**“ wählen Sie „**Mass / Charge**“.
Die Nummernbeschriftung in einer XIC-Linie im Arbeitsbereich „Explorer“ ist irreführend. (PV-1009)	Der angezeigte Wert ist richtig, da er den Centroid-Wert des Peaks darstellt. Klicken Sie auf „**Fill Peaks**“, um eine bessere Ansicht des Peaks zu öffnen. Die Peakbeschriftung ist unabhängig von der Position des jeweiligen Peaks an seiner höchsten Stelle angeordnet. Aus diesem Grund kann es so aussehen, als würde sie sich an der falschen Stelle befinden, der Wert ist jedoch korrekt. Wenn dieses Problem auftritt, warten Sie mit dem Analysieren der Daten, bis die Erfassung abgeschlossen ist.
Probeninformation für IDA-Experimente werden nicht angezeigt, wenn der Benutzer eine *Scheduled* MRM™-Datendatei öffnet, eine Probe auswählt und lädt und dann auf „**Show Sample Information**“ klickt. (PV-1330)	Dieses Problem wirkt sich nicht auf den Arbeitsablauf aus.

Probleme mit dem Arbeitsbereich „MS Tune“

Problem	Hinweise
Der optimierte Parameterwert wird während des manuellen Tunings nicht in der Instrumentendefinitions-Datei gespeichert, wenn der Benutzer auf „**Save Settings**“ klickt. (ACQ-2519)	Der optimierte Parameterwert wird während des manuellen Tunings nicht gespeichert. Um mögliche Probleme zu vermeiden, führen Sie alle Tuning-Schritte im manuellen Tuning-Modus aus.
Wenn die Q1-Zentrumsmasse gewählt ist, wird der Massenbereich des Echtzeitspektrums nicht korrekt aktualisiert. (DS-915)	Um dieses Problem zu vermeiden, stellen Sie die Start- und die Stoppmasse so ein, dass der Q1-Zentrumsmassenbereich abgedeckt wird.

Problem	Hinweise
Während des MS-Tunings pausiert die Erfassung, nachdem die Einstellungen mit der Schaltfläche „**Copy Settings**“ kopiert wurden. (ONYX-5539)	Befolgen Sie zur Fortsetzung der Erfassung die folgenden Schritte: 1. Klicken Sie auf „**Stop**“, um die Methode zu stoppen. 2. Klicken Sie auf „**Start**“, um sie erneut zu starten. 3. Aktualisieren Sie die Einstellungen, indem Sie den Versatz für eine der Massen anpassen und dann wiederherstellen.
Wenn das Massenspektrometer innerhalb von etwa fünf Minuten nach Abschluss der Kalibration im Arbeitsbereich „MS Tune“ ausgeschaltet wird, gehen die Kalibrationseinstellungen verloren und die zuvor gespeicherten Kalibrationseinstellungen werden wiederhergestellt. (MSCS-2627)	Führen Sie das Tuning-Verfahren erneut durch.
Wenn das Tuning-Verfahren während der Kanalausrichtung gestoppt wird, wechselt das Massenspektrometer in den Fehlerzustand und die Kommunikation zwischen SCIEX OS und dem Massenspektrometer schlägt fehl. (ONYX-11760)	Schalten Sie das Massenspektrometer aus und wieder ein und stoppen und stellen Sie den „**ClearCore2**“ Service wieder her.

Probleme mit Reporter

Problem	Hinweise
Ein Fehler bei der „Microsoft Office Document Customization“ tritt auf, wenn der Benutzer versucht, eine Reporter-Vorlage zu bearbeiten.	Dieser Fehler tritt auf, wenn der TemplateContentControlManager nicht installiert ist. Befolgen Sie die folgenden Schritte: 1. Navigieren Sie zu „C:/Program Files/AB Sciex/ReporterOfficeAddins/ TemplateContentControlManager“. 2. Doppelklicken Sie auf „**TemplateContentControlManager.vsto**“. 3. Wenn der TemplateContentControlManager installiert ist, klicken Sie auf „**Close**“. Klicken Sie andernfalls auf „**Install**“, und befolgen Sie die Anweisungen auf dem Bildschirm.

Probleme bei der Softwareinstallation und -aktivierung

Problem	Hinweise
Die Installation von SCIEX OS kann fehlschlagen, wenn ein falsches Benutzerkonto verwendet wird. (BLT-340)	Wenden Sie sich an sciex.com/request-support. Nur Administratoren dürfen die Software installieren oder entfernen.
Die Installation von SCIEX OS schlägt fehl, wenn mehr als eine Instanz des Installationsassistenten geöffnet ist. (BLT-341)	Wenn zwei SCIEX OS-Installationsassistenten geöffnet sind und der Benutzer versucht, mit der Installation über den als Zweites geöffneten Assistenten fortzufahren (unabhängig davon, ob der erste geschlossen wurde oder nicht), schlägt die Installation fehl. Um dieses Problem zu vermeiden, öffnen Sie nur einen Installationsassistenten und fahren Sie mit der Installation fort.
Wenn die ChemSpider-Lizenz abgelaufen ist und der Benutzer eine neue Lizenz installiert, wird beim Starten der ChemSpider-Sitzung durch den Benutzer eine Meldung angezeigt, dass ChemSpider nicht lizenziert ist. (BLT-985)	Schließen und öffnen Sie SCIEX OS und starten Sie dann ChemSpider erneut.
Wenn die Software von Version 2.0 auf Version 1.3 heruntergestuft wird, fehlen die Arbeitsbereiche „Batch“, „Queue“, und „User“. (OFX-489)	Wenn keine Sicherung der SCIEX OS 1.3-Installation verfügbar ist, gehen Sie wie folgt vor: 1. Entfernen Sie SCIEX OS 2.0. 2. Entfernen Sie das LibraryView™ Framework. 3. Benennen Sie den Ordner „C:\Program Data\SCIEX\“ um. 4. Benennen Sie den Ordner „C:\Program Files\SCIEX\“ um. 5. Benennen Sie den Ordner „D:\SCIEX OS Data\“ um. 6. Installieren Sie SCIEX OS 1.3. SCIEX OS muss neu konfiguriert werden und alle Methoden, Einstellungen, Benutzer usw. müssen neu erstellt werden.

Problem	Hinweise
SCIEX OS 1.3 oder höher wird nicht entfernt, wenn ein Benutzer versucht, dieses mithilfe von „Setup.exe“ zu entfernen. (ONYX-2124)	Wenn versucht wird, SCIEX OS 1.3 oder höher mithilfe von „Setup.exe“ zu entfernen, wird der Eintrag für SCIEX OS unter „Programs und Features“ in Windows entfernt. Das Programm ist jedoch weiterhin vorhanden und kann geöffnet werden. Um SCIEX OS zu entfernen, führen Sie „Setup.exe“ aus dem Ordner SCIEX OS aus und folgen Sie den Anweisungen zur Installation der Software. Dadurch wird der Eintrag für SCIEX OS wieder in die Liste „Programs und Features“ in Windows eingefügt. Verwenden Sie zum Entfernen von SCIEX OS 1.3 oder höher die Liste „Programs und Features“.
Gelegentlich kann die Installation von SCIEX OS möglicherweise aufgrund eines Problems mit SQL Server oder aufgrund eines Problems mit dem LibraryView™ Framework fehlschlagen. (ONYX-2987)	In diesem Fall gehen Sie folgendermaßen vor: 1. Entfernen Sie die LibraryView™-Software, falls sie installiert ist. 2. Entfernen Sie das LibraryView™ Framework, falls es installiert ist. 3. Entfernen Sie alle Komponenten von Microsoft SQL Server 2008. 4. Fahren Sie den Computer herunter und starten Sie ihn erneut. 5. Installieren Sie SCIEX OS. Wenn das Installationsproblem weiterhin besteht, müssen Sie möglicherweise die Dateien LibraryView.mdf und LibraryView_log.mdf aus „C:\Program Files\Microsoft SQL Servier\MSSQL10_50.SQLEXPRESS \MSSQL\DATA folder“ entfernen. **Hinweis:** Da die Bibliotheken in den MDF-Dateien gespeichert sind, werden alle vorhandenen Bibliotheken entfernt, wenn diese Dateien gelöscht werden und neu installiert werden müssen.
Es wird ein Fehler angezeigt, wenn SCIEX OS auf einem Computer ohne .NET Framework 4.x installiert wird (ONYX-8028).	Wenn dieses Problem auftritt, installieren Sie es mit „Install/NDP472-KB4054530-x86-x64-AllOS-ENU.exe“, das sich im Installationspaket befindet.

Probleme mit MS FW Updater

Problem	Beschreibung
Das Dienstprogramm MS FW Updater kann nicht von der DVD ausgeführt werden. (BLT-597)	Um die Firmware des Massenspektrometers zu aktualisieren, kopieren Sie den Ordner „FirmwareUpdater“ auf das Laufwerk „D:\“ und starten Sie das Dienstprogramm von dort aus.

Standardvorlagen

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
All Peaks Qual	Ein Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformationen, Probeninformationen, Analyt-„Results Table“ und überlagerten Chromatogramme aller Analyten und den internen Standard anzeigt. Die Analyt-„Results Table“ wird wie in der „Results Table“ angezeigt gedruckt. Alle qualitativen Konfidenzampeln sind am Anfang der Tabelle aufgelistet.	–
Analyte 20 percent Report	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt mit Dateiinformationen und eine XIC-Tabelle für jede(n) Leerprobe, Standard, QC und 20 % aller Unbekannten enthält.	Dies ist eine beispielhafte Berichtsvorlage mit angehängter Abfrage - Analyte20percent.Query.
Analyte Summary	Eine Tabelle mit Ergebnissen, die den Probennamen, berechnete Konzentrationen und Ausreißer für alle Proben in der Charge für den spezifischen Analyten sowie den zugeordneten internen Standard anzeigt.	–

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
Calibration Curve	Ein Bericht, der die Dateiinformationen, Statistiktabelle (Standards) und Kalibrierkurve für Analyten anzeigt (eine Seite pro Analyt).	• Standards, für die das Kontrollkästchen „Reportable“ deaktiviert wurde, werden in der Datentabelle nicht angezeigt. Statistiken werden durch den Status „Reportable“ nicht beeinflusst. • Der Bericht zeigt die Regressionsgleichung und das Diagramm, wie im Teilfenster „Calibration Curve“ im Arbeitsbereich „Analytics“ dargestellt und berechnet, basierend auf dem Status der Spalte „**Used**“.
Intact Quant All Peaks and Graphs	Ein Bericht, der die Einträge in der „Results Table“ für jede Probe enthält. Alle in der „Results Table“ sichtbaren Spalten sind im Bericht enthalten. Der Bericht enthält auch den XIC-Chromatographen, das Durchschnittsspektrum und das Rekonstruktionsspektrum für jede Probe bzw. jeden Analyten.	Dieser Bericht ist spezifisch für den Arbeitsablauf „Mass Reconstruction“.
Intact Quant Analyte Summary and Calibration Curve	Ein Bericht, der die Einträge in der „Results Table“, die Kalibrierkurve und die Statistikdaten für jeden Analyten enthält. Die „Results Table“ enthält Folgendes: Probenname, Probenart, Analyt-Name, Istkonzentration, Bereich, Höhe, erwartetes MW, MW, MW Delta, berechnete Konzentration und Genauigkeit.	Dieser Bericht ist spezifisch für den Arbeitsablauf „Mass Reconstruction“.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
Intact Quant Sample Summary	Ein Bericht, der die Einträge in der „Results Table“ für alle Proben enthält. Die „Results Table“ enthält Folgendes: Probenname, Probenart, Analyt-Name, Istkonzentration, Bereich, Höhe, erwartetes MW, MW, MW Delta, berechnete Konzentration, Genauigkeit und Genauigkeitsakzeptanz.	Dieser Bericht ist spezifisch für den Arbeitsablauf „Mass Reconstruction“.
Metrische Kurven	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformationen und der metrischen Kurve der Analyt-Peak-Fläche anzeigt.	Der Status des Kontrollkästchens „**Reportable**“ hat keinen Einfluss auf den Inhalt des Berichts. Alle Datenpunkte sind enthalten, selbst wenn die Kontrollkästchen deaktiviert sind.
MQ Analyte Report 1	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt mit Dateiinformationen, „Sample Results Table“ und XIC-Tabelle für jede Probe enthält - DRUCKT NORMALERWEISE ZWEI SEITEN JE ANALYT FÜR < 8 PROBEN AUS.	–
MQ Analyte Report 2	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt mit Dateiinformationen und XIC-Tabelle für jede unbekannte Probe enthält - DRUCKT NORMALERWEISE ZWEI SEITEN JE ANALYT FÜR < 8 PROBEN AUS.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.
MQ Analyte Report 3	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt mit Dateiinformationen und eine Zusammenfassungstabelle für jede unbekannte Probe enthält.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
MQ Analyte Report condensed table	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebniszusammenfassungstabelle enthält. Die Tabelle wird in zwei Spalten dargestellt, damit mehr Proben auf eine Seite passen.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.
MQ Analyte Report with chromatograms	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt mit Dateiinformationen, „Sample Results Table“ und einem kleinen Chromatogramm für jede Probe enthält.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.
MQ Blank Template	–	Es werden nur Informationen zur Überschrift, das Logo und Seitenzahlen im Bericht angezeigt.
MQ Pep Quant	–	Zur Verwendung mit dem „Peptide Quantitation“-Datensatz. Siehe das zweite Beispiel, das Beispiel für die absolute Quantifizierung, im *Benutzerhandbuch* für die MultiQuant™-Software.
MQ QC Summary 1 with flags	Ein Bericht, der Dateiinformationen, eine QC-Zusammenfassungstabelle je Analyt (Werte mit einem CV von mehr als 20 % sind hervorgehoben) und eine detaillierte QC-„Results Table“ (Werte mit einer Genauigkeit außerhalb des Bereichs von 80-120 % sind hervorgehoben) enthält.	Qualitätskontrollen mit deaktiviertem Kontrollkästchen „**Reportable**“, sind im Bericht nicht enthalten und werden für die Berechnungen nicht verwendet.
MQ Sample Report 1	Ein Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen, IS-Info, Analyt-„Results Table“, XIC-Tabelle einschließlich IS und allen Analyten enthält - DRUCKT NORMALERWEISE ZWEI SEITEN JE PROBE FÜR < 8 PROBEN AUS.	–

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
MQ Sample Report 2	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, TIC, Probeninformationen, Analyt-XIC und Ergebnissen in Tabellenform enthält - DRUCKT NORMALERWEISE ZWEI SEITEN JE PROBE FÜR < 8 PROBEN AUS.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.
MQ Sample Report 3	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebniszusammenfassungstabelle enthält.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.
MQ Sample Report condensed table	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebniszusammenfassungstabelle enthält. Die Tabelle wird in zwei Spalten dargestellt, damit mehr Analyten auf eine Seite passen.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.
MQ Sample Report with chromatograms	Ein Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen, Analyt-„Results Table“ und einem kleinen Chromatogramm für jeden Analyten enthält.	Es erscheinen nur Unbekannte im Bericht.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
MQ Sample Report with Concentration Threshold	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebnissumme enthält.	• Die zugehörige Abfragedatei lautet „Sample Report with Concentration Threshold.query“. • Komponenten müssen als "Cmpd *X* #" benannt werden, wobei *X* ein beliebiges Zeichen von A bis F und # ein beliebiger numerischer Wert ist. **Beispiel:** In dem Bericht wird eine Komponente mit dem Namen "Cmpd A 1" unter der Überschrift „**Compound Group A**“ angezeigt; eine Komponente mit dem Namen "Cmpd B 1" wird unter „**Compound Group B**“ angezeigt, usw. • Wenn Komponenten sich in der gleichen Gruppe befinden, dann wird nur die erste Komponente in alphabetischer Reihenfolge in der Gruppe im Bericht aufgenommen. **Beispiel 1:** Wenn „Cmpd B 25“ und „Cmpd C 1“ beide zur Gruppe „Grp“ gehören, dann erscheint „Cmpd C 1“ nicht im Bericht. **Beispiel 2:** Wenn „Cmpd A 1“, „Cmpd A 2“ und „Cmpd A 3“ keinen Gruppen zugewiesen werden, dann erscheinen „Cmpd A 2“ und „Cmpd A 3“ nicht im Bericht. **Beispiel 3:** Wenn „Cmpd A 1“, „Cmpd A 2“ und „Cmpd A 3“ den Gruppen 1, 2 und 3 zugewiesen werden, dann erscheinen alle 3 Komponenten im Bericht unter der Überschrift „**Compound Group A**“.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
MQ Sample Report with MRM ratios 2	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen, einer Ergebniszusammenfassungstabelle und eine Überlagerung aller XIC enthält. Erwartete Ionenverhältnisse werden automatisch mit den verfügbaren Standards berechnet. Verhältniswerte werden in benutzerdefinierten Spalten in der „Results Table“ platziert. Alle Werte, die außerhalb von 20 % der erwarteten Werte liegen, werden markiert. Die Namen der Quantifizierungsanalyten müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von der Ziffer 1 enden. Die Namen der Ionenanalyten-Verhältnisse müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von einer Ziffer von 2 bis 9 enden.	–
MQ Sample Report with MRM ratios EU	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebniszusammenfassungstabelle enthält. Erwartete Ionenverhältnisse werden automatisch mit den verfügbaren Standards berechnet. Verhältniswerte werden in benutzerdefinierten Spalten in der „Results Table“ platziert. Alle Werte, die außerhalb der erwarteten Werte liegen, werden markiert (unter Anwendung der EU-Richtlinien für Verhältnistoleranzen). Die Namen der Quantifizierungsanalyten müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von der Ziffer 1 enden. Die Namen der Ionenanalyten-Verhältnisse müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von einer Ziffer von 2 bis 9 enden.	Die zugehörige Abfragedatei lautet „MRM ratios EU.query“.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
MQ Sample Report with MRM ratios MQ EFAB 03	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebniszusammenfassungstabelle enthält. Erwartete Ionenverhältnisse werden automatisch mit den verfügbaren Standards berechnet. Verhältniswerte werden in benutzerdefinierten Spalten in der „Results Table“ platziert. Alle Werte, die außerhalb von 20 % der erwarteten Werte liegen, werden markiert. Die Namen der Quantifizierungsanalyten müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von der Ziffer 1 enden. Die Namen der Ionenanalyten-Verhältnisse müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von einer Ziffer von 2 bis 9 enden.	–
MQ Sample Report with MRM ratios	Ein Bericht, der für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und einer Ergebniszusammenfassungstabelle enthält. Erwartete Ionenverhältnisse werden automatisch mit den verfügbaren Standards berechnet. Verhältniswerte werden in benutzerdefinierten Spalten in der „Results Table“ platziert. Alle Werte, die außerhalb von 20 % der erwarteten Werte liegen, werden markiert. Die Namen der Quantifizierungsanalyten müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von der Ziffer 1 enden. Die Namen der Ionenanalyten-Verhältnisse müssen mit einem Leerzeichen gefolgt von einer Ziffer von 2 bis 9 enden.	Die zugehörige Abfragedatei lautet „MRM ratios.query“.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
MQ Sample Report with standards, QC, and blanks	Ein Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Standard-Zusammenfassungstabelle, QC-Zusammenfassungstabelle und Leerproben-„Results Table“ enthält und für jede unbekannte Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen, IS-Info, Analyt-„Results Table“, XIC-Tabelle einschließlich IS und allen Analyten enthält - DRUCKT NORMALERWEISE ZWEI SEITEN JE PROBE FÜR < 8 ANALYTEN AUS.	Standards und Qualitätskontrollen mit deaktiviertem Kontrollkästchen „**Reportable**“, werden weder in den jeweiligen Zusammenfassungstabellen im Bericht angezeigt, noch werden sie für statistische Berechnungen verwendet.
MQ Tutorial Dataset Heavy Light	–	Dieser Bericht ist zur Verwendung mit dem „Tutorial Dataset Heavy Light“-Datensatz bestimmt. Siehe das zweite Beispiel, das Beispiel für die relative Quantifizierung, im *Benutzerhandbuch* für die MultiQuant™-Software.
Pro Probenmenge/Probenqualität	Ein Bericht, der für jede ausgewählte Probe einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformationen, Probeninformationen und Analyt-„Results Table“ für die ausgewählten Analyten anzeigt. Die Analyt-„Results Table“ wird wie in der „Results Table“ angezeigt gedruckt. Alle qualitativen Konfidenzampeln sind am Anfang der Tabelle aufgelistet.	–

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
Per Sample Quant-Qual Visible Rows Using Visible Analyte	Ein Bericht, der für jede ausgewählte Probe einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformationen, Probeninformationen und Analyt-„Results Table“ für die ausgewählten Analyten anzeigt. Die Analyt-„Results Table“ wird wie in der „Results Table“ angezeigt gedruckt. Alle qualitativen Konfidenzampeln sind am Anfang der Tabelle aufgelistet.	Der ausgeblendete Status einer Zeile hat Vorrang vor dem Status des Kontrollkästchens „**Reportable**“. Wenn das Kontrollkästchen „**Reportable**“ aktiviert, aber die Zeile ausgeblendet ist, dann erscheint diese Zeile nicht im Bericht.
Per sample Quant-Qual with statistics	Ein Bericht, der Komponenten für jede Probe mit einer WYSIWYG-Tabelle enthält. XIC, MS und MS/MS werden angezeigt. Eine Statistik-Zusammenfassungstabelle für den Bereich wird am Ende des Berichts angezeigt.	• Wenn die Komponententabelle UV-Komponenten enthält, dann erscheint die UV-Spur unter dem XIC-Diagramm im Bericht. **Hinweis:** Ist der Name der UV-Komponente im Format [compound_nameuv] oder [uv], dann werden keine UV-Spuren gemeldet, da das UV-Suffix mit dem Bericht UV MS Qual verbunden ist. • Wenn eine Probe als QC gekennzeichnet ist und 2 oder mehr Proben vorhanden sind, werden der Mittelwert, STDEV und %CV berechnet und einer QC-Zusammenfassungstabelle am Ende des Berichts hinzugefügt. • Wenn das Kontrollkästchen „**Reportable**“ für eine QC-Zeile deaktiviert ist, dann wird diese Zeile für Berechnungen in der QC-Zusammenfassungstabelle nicht verwendet.

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
Per Analyte Quant-Qual	Ein Bericht, der für jeden Analyten einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformationen, „Results Table“, Kalibrierkurven und Chromatogramme, einschließlich des internen Standards, und jeden Analyten anzeigt. Diese Berichtsvorlage eignet sich für eine „Results Table“, in der eine Gruppe definiert ist.	–
Positive Hits Qual	Ein Bericht, der für jede ausgewählte Probe einen Abschnitt einschließlich der Dateiinformationen, Probeninformationen, Analyt-„Results Table“ für die ausgewählten Analyten, überlagerte Chromatogramme aller Analyten, den internen Standard und das XIC, die erfassten/theoretischen MS-Spektren und die erfassten/Bibliotheks-MS/MS-Spektren für jeden ausgewählten Analyten anzeigt. Die Analyt-„Results Table“ wird wie in der „Results Table“ angezeigt gedruckt. Alle qualitativen Konfidenzampeln sind am Anfang der Tabelle aufgelistet.	–
Qual CSV report	Ein Bericht in einem .csv-Format, der für jede Probe einen Abschnitt mit Dateiinformationen, Probeninformationen und Analyt-„Results Table“ anzeigt.	Es wird empfohlen, die CSV-Option für das „Report“-Format zu verwenden.
Sample Summary	Ein Bericht, der für jede Probe einen Abschnitt der Analyten-Zusammenfassungstabelle anzeigt. Diese Berichtsvorlage eignet sich für eine „Results Table“ mit Gruppen.	–

Vorlage	Beschreibung der Vorlage (wie im Dialogfeld „Create Report“ angezeigt)	Zusätzliche Hinweise
UV MS Qual report	Ein Bericht, der für jede Probe die Komponenten dieser Probe sowie ihre entsprechenden UV-Komponenten mit einer WYSIWYG-Tabelle anzeigt. XIC, MS und MS/MS werden zusammen mit UV-Daten angezeigt. Eine Statistik-Zusammenfassungstabelle für den Bereich wird am Ende des Berichts angezeigt.	• UVMS-Daten müssen mit der Namenskonvention compound 1 (Beliebige Zeichenfolge) für die Massenspektrometer (MS)-Komponente und compound 1uv (beliebige Zeichenfolge plus uv) für die entsprechende UV-Komponente. • Es werden nur Ampelleuchten für Massefehler, Fragmentmassefehler, RT-Konfidenz, Isotop/Konfidenz und Bibliothek/Konfidenz angezeigt. • Es wird eine Diagrammtabelle erstellt, um die jeweiligen Komponenten der „Results Table“ anzuzeigen, einschließlich XIC, MS1-Spur, MS/MS-Spur und Informationen zur Überschrift von Verbindung 1 und die UV-Spur von Verbindung 1uv. Siehe Abbildung 1. • Analyt-Diagramme werden nur für die MS-Experimente wiederholt, nicht für die UV-Experimente. • Wenn eine Probe als QC gekennzeichnet ist und 2 oder mehr Proben vorhanden sind, werden der Mittelwert, STDEV und %CV berechnet und einer QC-Zusammenfassungstabelle am Ende des Berichts hinzugefügt. Siehe Abbildung 1. • Wenn das Kontrollkästchen „**Reportable**“ für eine QC-Zeile deaktiviert ist, dann wird diese Zeile für Berechnungen in der QC-Zusammenfassungstabelle nicht verwendet.

Abbildung 1 Diagrammtabelle

Analyte Name: 1 (Mass/FragMass/RT/Isotope/Library)

Retention Time	4.13	Isotope Ratio Difference	5.1
Expected RT	4.12	Library Result	No Match
Precursor m/z	433.879	Library Score(%)	0.0

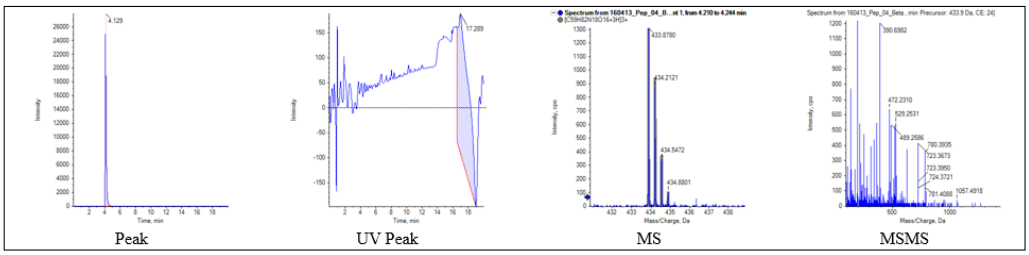

Abbildung 2 Statistiktabelle

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

Kontaktangaben

Kundenschulung

- In Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- In Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Die Kontaktinformationen für Länder außerhalb der EU und Nordamerikas finden Sie unter sciex.com/education.

Online-Lernzentrum

- SCIEX University™

SCIEX Support

SCIEX und seine Vertretungen beschäftigen weltweit einen Stab an ausgebildeten Servicekräften und technischen Spezialisten. Der Support kann Fragen zum System oder anderen auftretenden, technischen Problemen beantworten. Weitere Informationen finden Sie auf der SCIEX-Website unter sciex.com, oder kontaktieren Sie uns unter:

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

Cybersicherheit

Die aktuellsten Hinweise zur Cybersicherheit von SCIEX-Produkten finden Sie unter sciex.com/productsecurity.

Dokumentation

Diese Version des Dokuments ersetzt alle vorherigen Versionen.

Für die Anzeige des Dokuments wird der Adobe Acrobat Reader benötigt. Um sich die neueste Version herunterzuladen, besuchen Sie https://get.adobe.com/reader.

Softwareproduktdokumentationen entnehmen Sie den Versionshinweisen oder dem mit der Software mitgelieferten Software-Installationshandbuch.

Informationen zur Hardware-Produktdokumentation finden Sie auf der mit dem System oder der Komponente gelieferten *Customer Reference* DVD.

Die neuesten Versionen der Dokumentationen sind auf der Website von SCIEX unter sciex.com/customer-documents verfügbar.

Hinweis: Wenn Sie eine kostenlose gedruckte Ausgabe dieses Dokuments wünschen, wenden Sie sich bitte an sciex.com/contact-us.

Dieses Dokument wird Käufern eines SCIEX-Geräts für dessen Gebrauch zur Verfügung gestellt. Dieses Dokument ist urheberrechtlich geschützt und jegliche Vervielfältigung dieses Dokuments, im Ganzen oder in Teilen, ist strengstens untersagt, sofern keine schriftliche Genehmigung von SCIEX vorliegt.

Die in diesem Dokument beschriebene Software unterliegt einer Lizenzvereinbarung. Das Kopieren, Ändern oder Verbreiten der Software auf einem beliebigen Medium ist rechtswidrig, sofern dies nicht ausdrücklich durch die Lizenzvereinbarung genehmigt wird. Darüber hinaus kann es nach der Lizenzvereinbarung untersagt sein, die Software zu disassemblieren, zurückzuentwickeln oder zurückzuübersetzen. Es gelten die aufgeführten Garantien.

Teile dieses Dokuments können sich auf andere Hersteller und/oder deren Produkte beziehen, die wiederum Teile enthalten können, deren Namen als Marken eingetragen sind und/oder die Marken ihrer jeweiligen Inhaber darstellen. Jede Nennung solcher Marken dient ausschließlich der Bezeichnung von Produkten eines Herstellers, die von SCIEX für den Einbau in die eigenen Geräte bereitgestellt werden, und bedeutet nicht, dass eigene oder fremde Nutzungsrechte und/oder -lizenzen zur Verwendung derartiger Hersteller- und/oder Produktnamen als Marken vorliegen.

Die Garantien von SCIEX beschränken sich auf die zum Verkaufszeitpunkt oder bei Erteilung der Lizenz für die eigenen Produkte ausdrücklich zuerkannten Garantien und sind die von SCIEX alleinig und ausschließlich zuerkannten Zusicherungen, Garantien und Verpflichtungen. SCIEX gibt keinerlei andere ausdrückliche oder implizite Garantien wie beispielsweise Garantien zur Marktgängigkeit oder Eignung für einen bestimmten Zweck, unabhängig davon, ob diese auf gesetzlichen oder sonstigen Rechtsvorschriften beruhen oder aus Geschäftsbeziehungen oder Handelsbrauch entstehen, und lehnt alle derartigen Garantien ausdrücklich ab; zudem übernimmt SCIEX keine Verantwortung und Haftungsverhältnisse, einschließlich solche in Bezug auf indirekte oder nachfolgend entstehenden Schäden, die sich aus der Nutzung durch den Käufer oder daraus resultierende widrige Umstände ergeben.

Nur für Forschungszwecke. Nicht zur Verwendung bei Diagnoseverfahren.

Die hier erwähnten Marken und/oder eingetragenen Marken, einschließlich deren Logos, sind Eigentum der AB Sciex Pte. Ltd. oder ihrer jeweiligen Inhaber in den Vereinigten Staaten und/oder anderen Ländern.

AB SCIEX™ wird unter Lizenz verwendet.

© 2021 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

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