



Waters™

LC-MS Toolkit 1.14.0

发行说明

常规信息

版权声明

© 2024 WATERS CORPORATION。未经出版商的书面允许，不得以任何形式转载本文档或其中的任何部分。

本文档中的信息如有更改，恕不另行通知，并且不应理解为 Waters Corporation 的承诺。对于本文档中可能出现的任何错误，Waters Corporation 概不负责。本文档在出版时被认为是完整并且准确的。任何情况下，对与使用本文档有关或因使用本文档而导致的直接或间接损失，Waters Corporation 不承担任何责任。有关此文档更新修订版本的信息，请访问 Waters 网站 (www.waters.com)。

商标

ACQUITY™ 是 Waters Corporation 的商标。

BioAccord™ 是 Waters Corporation 的商标。

UNIFI™ 是 Waters Corporation 的商标。

UPLC™ 是 Waters Corporation 的商标。

Vion™ 是 Waters Corporation 的商标。

Waters™ 是 Waters Corporation 的商标。

waters_connect™ 是 Waters Corporation 的商标。

Xevo™ 是 Waters Corporation 的商标。

所有其他商标均为其各自所有者的资产。

关于本发行说明

本文档包含有关此版本产品中增加、更改或删除的特性及功能的信息。本文档中包含主要功能更改列表，还包含对 Waters 认为对客户而言很重要的已知缺陷、已修复缺陷和观察到的产品行为（已知问题）的描述。本文档中不包括：

- 此版本产品的所有更改的详尽列表
- 对产品发布时 Waters 尚不知晓的缺陷描述
- 对 Waters 无法重现的缺陷的描述

- 有关客户对产品改进的要求的信息
- 产品组件、功能、计算算法和软件代码专有内容的具体更改细节

本档中列出的更改是相较于本产品之前版本的更改。如果您要更新本产品的更早版本，请查阅在此期间的全部版本的发行说明，确保您了解产品更改的累积影响。

在安装本产品之前，请仔细阅读本文档中的信息。如果您对安装此产品会如何影响您的环境有疑问，或者如果您需要有关此产品的更多信息，请联系您的 Waters 代表。

获取 Waters 软件和软件更新

要以数字方式获取您购买的软件应用程序和许可证，请使用 Waters Digital Software Delivery and License Entitlement 平台。Waters 软件维护计划生效情况下，该平台会在有新版本软件发布时向您发送电子邮件通知并提供即时访问途径。此交付平台允许用户安全地搜索和共享软件授权和仪器驱动程序，它还提供一个指向 www.waters.com 的安全搜索文档链接，其中详细列出了特定软件产品和版本的所有相关文档。

如需访问 Digital Software Delivery and License Entitlement 平台，请联系贵机构的指定软件经理。软件经理通常是系统管理员或负责部署软件和激活许可证的人员，他们也是负责贵机构内部 Waters 数字授权（软件和许可证）的人员。在这个平台中，软件经理可以安全地管理和为机构内其他人员分配软件授权，从而控制整个机构的软件资产。

如果您还没有获得此平台的访问权限，请联系您的 Waters 销售代表开启安全访问程序。

请通过您的 www.waters.com 用户个人资料界面访问 Software Delivery and License Entitlement 平台，具体路径为 **waters.com > 我的帐户 [您好! 用户名] > 个人资料 > Download Software Entitlements**（下载软件授权）。

客户意见或建议

我们会认真对待收到的每条客户意见。请协助我们更好地了解您最希望从文档中获得什么内容，让我们可以不断改进其准确性及可用性。要报告您在使用该文档时所遇到的任何错误或向我们提出改进建议，请发送邮件到 tech_comm@waters.com 与我们联系。

联系 Waters

如果您就使用、运输、移除或处理 Waters 的任何产品有技术问题，请联系 Waters。您可以通过 Internet、电话、传真或传统邮件联系我们。

| 联系方式 | 信息 |
|--|---|
| www.waters.com | Waters 的网站包括全球范围内 Waters 所在地的联系信息。 |
| iRequest | <p>iRequest 是一款安全的 Web 服务表单，可让您请求 Waters 仪器和软件的支持和服务，或安排计划的服务活动。这些类型的支持和服务可能包含在您的维护计划或支持计划中。如果您的产品没有合适的服务计划，您可能需要为请求的服务付费。</p> <p>注： 在授权分销商管理的区域，iRequest 可能不可用。有关详细信息，请联系当地分销商。</p> |
| 本地办公室联系信息 | 如需全球范围内的地点、电话、传真和传统邮件信息，请访问 本地办公室网站 。 |
| 公司联系信息 | <p>Waters Corporation 34 Maple Street Milford, MA 01757 USA 在美国或加拿大，请致电 800-252-4752 或发传真至 508-872-1990。</p> |

目录

| | |
|--|-----------|
| 常规信息 | ii |
| 版权声明..... | ii |
| 商标..... | ii |
| 关于本发行说明..... | ii |
| 获取 Waters 软件和软件更新..... | iii |
| 客户意见或建议..... | iii |
| 联系 Waters..... | iii |
| | |
| LC-MS Toolkit 1.14.0 发行说明 | 6 |
| LC-MS Toolkit 应用程序概述..... | 6 |
| LC-MS toolkit 部署说明..... | 6 |
| LC-MS Toolkit 应用程序功能改进..... | 6 |
| 本版本中已解决的问题..... | 7 |
| INFMSTK-4627..... | 7 |
| INFMSTK-4664..... | 7 |
| 本版本中的已知问题..... | 8 |
| INFMSTK-1557..... | 8 |
| INFMSTK-2464..... | 8 |
| INFMSTK-2468..... | 8 |
| INFMSTK-3327..... | 8 |
| INFMSTK-3352..... | 8 |
| INFMSTK-4468、PMFCR-2139..... | 9 |
| INFMSTK-4887..... | 9 |
| INFMSTK-4888..... | 9 |
| INFMSTK-4889..... | 9 |
| INFMSTK-4900..... | 9 |

LC-MS Toolkit 1.14.0 发行说明

本节包含 LC-MS Toolkit 1.14.0 的相关信息，包括新功能介绍及已知问题和已解决问题列表。

LC-MS Toolkit 应用程序概述

LC-MS Toolkit 应用程序是从 waters_connect 应用程序中心启动的应用程序。

通过 LC-MS Toolkit 应用程序，可以快速研究其他 waters_connect 应用程序的结构化工作流之外的 LC-MS 和 LC-MS/MS 数据。

您可以使用这款数据处理工具研究色谱图和质谱图。

LC-MS toolkit 部署说明

LC-MS Toolkit 1.14.0 可兼容 waters_connect 3.5.0，作为 waters_connect 数据实用程序的一部分。

LC-MS Toolkit 应用程序功能改进

本节列出了本产品自上一个商业版本（1.13.0 版）以来的新功能和改进。

Mass Fragment（质量数碎片离子）工具的改进

- 您现在可以通过更改列配置在结果表中查看碎片结构。
- 您可以生成详细的 PDF 报告，其中包括样品信息、提取的谱图和通道的详细信息、.mol 文件结构、处理设置和匹配碎片离子表格。
- 多个候选 .mol 文件现在可以通过同一个会话加载到该工具中进行比较。
- 现在，当给定质量数有多个可用的子结构时，用户可以在结果表中重新指配备选碎片离子。
- 支持使用增强的 V3000 .mol 文件格式运行处理。
- 您现在可以调整要重点查看的窗格的大小。
- 指向谱图图示中碎片离子的注释可以重新聚焦并突出显示结果表中的匹配行，并更新碎片离子视图。
- 程序现在会对强度低或与其他离子相近的碎片离子进行注释。
- 程序现在会显示每个碎片离子结构的得分、断键数量和氢原子差异数量（S、B 和 H）。

- 结果表的标题行现在会显示匹配分配的数量。
- 用户现在可以使用调色板工具自定义如何突出显示质量数碎片分子。
- Ion intensity（离子强度）现在是结果表中的缺省列。

元素组成计算的改进

- 结果表现在会同时显示中性和带电离子分子的组成。
- 现在，标题中会指示加载的设置。
- 可以通过展开和收起图标将元素组成工具中的窗格最大化和最小化。

质谱峰表

用户现在可以为棒状图或去卷积数据生成质谱峰表并导出，以便用于其他应用程序。

其他改进

- 只有视图中强度超过最强离子 5% 的离子会被标记出来。
- 除了拖动鼠标指针，在 **Combine Spectra**（合并谱图）工具中定义范围的方式现在还包括手动指定范围。
- 系统现在会自动选中通过右键单击并拖动操作生成的低能量和高能量合并谱图。
- 积分峰现在会标注峰高、峰面积和保留时间。
- 从实时查看的 ToF 数据色谱图中提取的谱图现在已经过锁定质量数校正。
- 如果运行样品但不采集锁定质量数通道，系统现在会显示警告符号和工具提示警告消息。

注： 提取自样品通道且无法进行锁定质量数校正的任何谱图也将在谱图图示上显示此警告。

本版本中已解决的问题

本节将列出本版本中已解决的问题。编号用于识别 Waters 人员在系统更改请求跟踪工具中监视的问题。

INFMSTK-4627

以前，如果对通过双击质谱图选择的母离子运行元素组成处理，可能会出问题。如果随后加载一组保存的设置，则 m/z （母离子）和碎片离子质量数设置将分别恢复为 50 和 0。这种情况不会再出现。

INFMSTK-4664

有时，在 **Elemental Composition**（元素组成）或 **Mass Fragment**（质量数碎片离子）工具中查看（使用 **Center**（中心化）工具处理过的）棒状图质谱图时，强度最高的离子的注释会被截断，不完全可见。这种情况不会再出现。

本版本中的已知问题

本节将列出此版本的已知问题和解决方案。编号用于识别 Waters 人员在系统更改请求跟踪工具中监视的问题。

INFMSTK-1557

如果为 waters_connect Identity Server Sign in (登录) 页面添加书签 (例如, 工作站上以 https://localhost:48333/ 开头的 URL 或服务器安装上以 https://server_name:48333/ 开头的 URL), 则两名用户可以在同一设备上同时登录, 且可能会出现意外行为。

解决方案: 为 waters_connect Hub 页面添加书签 (缺省 URL 是工作站上的 https://localhost:1234 或服务器上的 https://server_name:1234), 而非 Sign in (登录) 页面。

INFMSTK-2464

当您在会话中浏览要选择的数据时, 您会看到进样采集开始时间以协调世界时 (UTC) 显示, 偏移为零, 而不是采集地点的原始偏移。

解决方案: 无。

INFMSTK-2468

在 LC-MS Toolkit 中查看导入的 MRM MassLynx 数据时, 通道名称包括母离子和子离子 m/z 值, 但它们只四舍五入到一位小数, 例如 234.5>123.4。

变通方案: 您可以在 Filter Acquired Chromatograms (筛选采集到的色谱图) 对话框中查看保留保留三位小数的母离子和子离子 m/z 值。

INFMSTK-3327

如果样品已经包含在 LC-MS Toolkit 会话中, 从 waters_connect Explorer 样品组中删除该样品会导致会话无法使用。应避免按这样的工作流程操作。

变通方案: 如果要从样品组中永久删除不需要的样品, 必须先从所有包含该样品的 LC-MS Toolkit 会话中删除该样品。否则, 系统将无法打开受影响的会话。但是, 可以使用修改后的样品组创建新的 LC-MS Toolkit 会话。

INFMSTK-3352

当创建会话并提取或合并多个谱图, 然后选择所有谱图并单击一次 **BayesSpray** 和 **MaxEnt1** 时, 有时在图的列表顶部会出现一个额外的图表, 并显示错误 No spectra found for this injection (没有找到此进样的谱图)。此外, 用户还无法返回主页。

解决方案: 按 **F5** 键, 或关闭然后再重新打开 LC-MS Toolkit。

INFMSTK-4468、PMFCR-2139

当大量网络用户同时使用不同的 waters_connect 客户端在 LC-MS Toolkit 中分析 MRM 数据时，网络性能可能会下降（所有用户可能都无法使用 LC-MS Toolkit 和其他 waters_connect 应用程序）。在所有用户停止 LC-MS Toolkit 中的活动后，网络将恢复。

当有十个用户同时在线时会出现这种现象。

解决方案： 将可同时在 LC-MS Toolkit 中分析 MRM 数据的网络用户数量限制为 5 个。

INFMSTK-4887

通过单击和拖动操作在色谱图上执行框缩放时，缩放区域的下边界始终设置为 x 轴或强度零。

变通方案： 无。

INFMSTK-4888

日语版本的 **Acquisition Method Editor** 不允许将剪贴板中的 **Spectral Peak Table**（质谱峰表）结果（来自 LC-MS Toolkit）作为包含或排除表导入 DDA 方法。

提示： 可以将剪贴板中的表格粘贴到文本编辑器中，然后将日语字符编辑为英语。修改后的文件可以复制回剪贴板，然后粘贴到 AME 中。

INFMSTK-4889

当结果表显示 **Mass Fragment**（质量数碎片离子）工具中的结构列时，选择个别行生成 PDF 报告会失败，且按钮不可用。您可以生成包含所有行且显示结构的报告，或者生成包含选择的行但不显示结构的报告。

提示： 如果 **Generate report**（生成报告）按钮不可用，请退出到 **Main View Data**（主视图数据）页面，然后重新输入 **Mass Fragment**（质量数碎片离子）进行恢复。

INFMSTK-4900

日语版本的 **Acquisition Method Editor** 不允许将剪贴板中的 **DDA Switching Table**（DDA 转换表）结果（来自 LC-MS Toolkit）作为包含或排除表导入 DDA 方法。

提示： 可以将剪贴板中的表格粘贴到文本编辑器中，然后将日语字符编辑为英语。修改后的文件可以复制回剪贴板，然后粘贴到 AME 中。