

# TraceFinder 管理员快速参考指南

本快速指南说明了当在 Thermo TraceFinder™ 分析软件内启用了用户安全时，为计算机管理员和实验室主任分配的 Configuration（配置）模式任务。

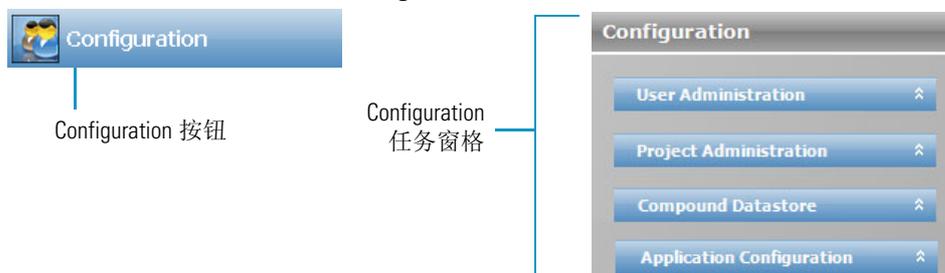
有关本快速参考指南中说明的所有程序，参阅 *TraceFinder User Guide*（TraceFinder 用户手册）的“Using the Configuration Mode（使用配置模式）”章节。

## 目录

- 用户管理
- 项目管理
- 化合物数据库
- 应用程序配置
- 术语表
- 商标

### ❖ 若要打开 Configuration 模式

从任何模式或主菜单上单击 **Configuration** 按钮。



## 用户管理

打开 Configuration 模式的 User Administration（用户管理）视图，可以在其中添加，删除或编辑用户帐户和权限。

若要打开 User Administration 视图，单击 **User Administration** 任务窗格。

The screenshot shows the 'User Administration' window. It is divided into three main sections: 'Security Groups', 'User Listing', and 'User'.

**Security Groups:** A list of groups including '<All groups>', 'ITAdmin', 'LabDirector', 'Supervisor', 'Technician', and 'QAQC'. 'Technician' is selected.

**User Listing:** A table with columns: Username, Role, Account Number, Phone Number, Email Address, and Enabled.

	Username	Role	Account Number	Phone Number	Email Address	Enabled
1	Administrator	ITAdmin				<input checked="" type="checkbox"/>
2	LabDirector	LabDirector				<input checked="" type="checkbox"/>
3	Technician	Technician				<input checked="" type="checkbox"/>

**User:** A form for adding or editing a user. Fields include: Username (Technician), Role (Technician), Account number (A123), Phone number (408.123.4567), Email address (jsmith@laboratory.com), Confirm Password, Full name (Jane Smith), and Enabled (checked). A 'Reset Password' button is also present.

❖ 若要添加用户

1. 点击 **Add User**（添加用户）图标，。
2. 在 Username（用户名）框中输入唯一名称。
3. 从 Role（职务）列表选择职务。

必须为每个用户分配一个角色，以确定用户可以进入的 TraceFinder 模式。

用户职务	Method Development (方法开发)	Analysis (分析)	Acquisition (采集)	Configuration (配置)
LabDirector（实验室主任）	✓	✓	✓	✓
ITAdmin（IT 管理员）				✓
Supervisor（主管）	✓	✓	✓	
Technician（技术人员）		✓	✓	
QAQC（质保质控）		✓		

4. 输入用户密码。  
不会收到确认，所以仔细输入密码并通知用户。
- 5.（可选）输入用户的全名，帐号，电话号码和电子邮件地址。
6. 当所有用户信息均正确时，点击 **Save Changes**（保存更改）图标，。

❖ 若要编辑用户信息

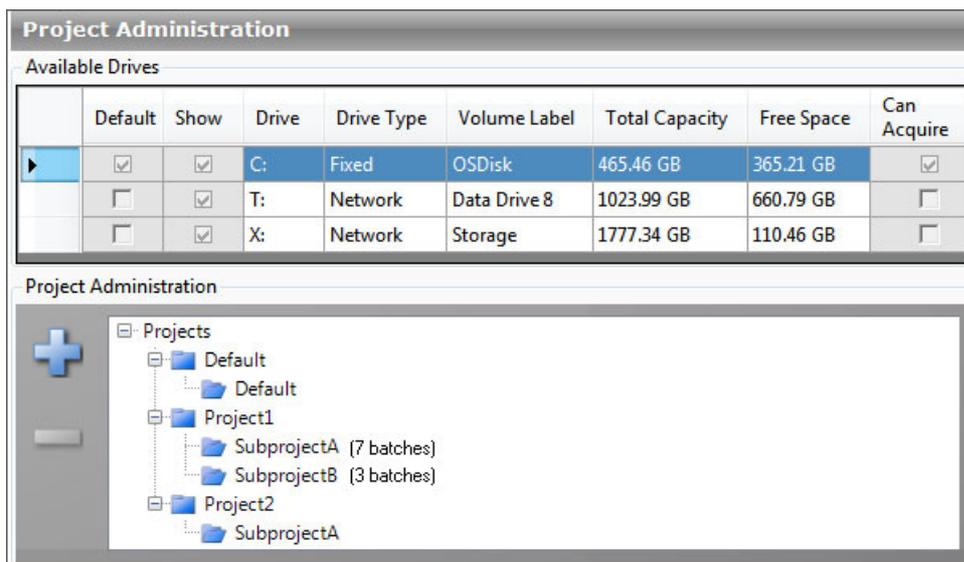
1. 在 User Listing（用户列表）中选择一个用户。  
应用程序在参数框内输入用户信息，但是无法编辑该参数。
2. 点击 **Edit User**（编辑用户）图标，。  
应用程序启用 User（用户）区域的参数。
3. 编辑任意参数值。  
如果正在编辑当前的用户名，该 Enabled（启用）复选框将停用。无法停用自己的登陆。
4. 当所有用户信息均正确时，点击 **Save Changes** 图标，。  
TraceFinder 应用程序将新参数值添加至 User Listing 表，User 区域的参数将不可用。
5. 若要弃置所有更改并且不保存编辑，单击 **Discard Changes**（放弃更改）按钮，。  
应用程序放弃所有修改，这个用户区域的参数将不可用。

❖ 若要移除用户

1. 在 User Listing 中选择一个用户。  
应用程序在这个用户的参数框内输入用户信息。
2. 点击 **Remove User**（移除用户）图标，。  
收到提示信息时，确认要移除此用户。  
如果选择当前的用户名，Remove User 按钮将不可用。无法删除自己的帐户。  
如果该用户目前正在登录至 TraceFinder 应用程序，其当前会话不会受到影响。
3. 单击 **OK**（确定）。

**注释** 在不移除系统中所有用户信息（即非完全移除用户）的情况下，也可以禁止用户登录。参阅第 2 页的“若要编辑用户信息”。

在 Configuration 模式的 Project Administration（项目管理）视图中，可以创建和管理项目及子项目。若要打开 Project Administration 视图，单击 **Project Administration** 任务窗格。

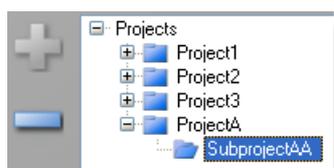


### ❖ 若要添加项目或子项目

1. 在 Project Administration 区域选中最高级目录。  
可以选择主 Projects（项目）文件夹并在其下新建项目，或选择一个现有项目并在其下创建子项目。
2. 单击该加号。  
TraceFinder 应用程序将在选定项目下新建未命名的项目。
3. 在新项目仍呈突出显示时，输入新名称。  
项目名称可包含空格或特殊字符。  
无法使用下列特殊字符：\ / : \* ? " < > |
4. 按 ENTER（回车）键或单击视图中的任意位置以保存新的名称。

### ❖ 若要删除项目或子项目

1. 选择要删除的项目或子项目。  
可以删除不含子项目的任何项目。可以删除不含批次的任何子项目。如果可以删除所选的项目或子项目，应用程序启用减号。



2. 单击该减号。
3. 提示用户单击 **Yes**（是）确认删除项目或子项目。  
应用程序移除所选确认项目或子项目。

在 Configuration 模式的 Compound Datastore（化合物数据库）视图中，可以在其中管理当前数据库中化合物的定义。

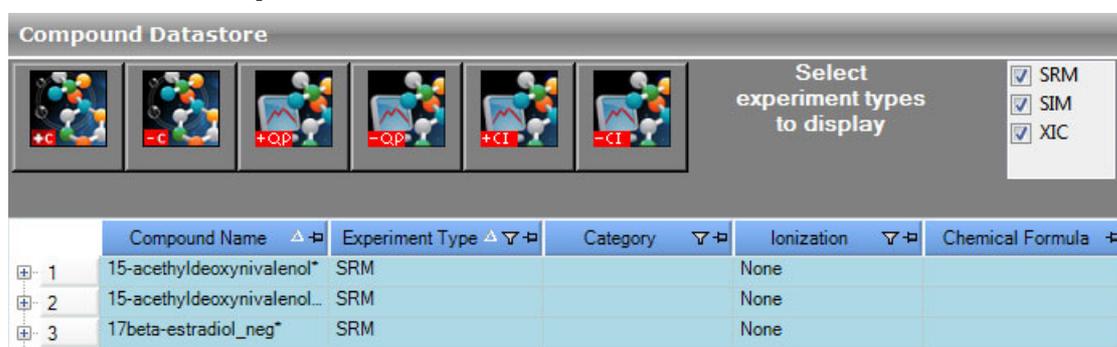
**注释** 仅当 Compound Datastore 特性启用时，Compound Datastore 任务窗格才可用。  
参阅第 6 页的“应用程序配置”。

## ❖ 若要打开 Compound Datastore 视图

单击 **Compound Datastore** 任务窗格。



当前数据库将在 Compound Datastore 视图中打开。



## ❖ 若要新建化合物数据库

单击任务窗格中的 **New Compound Datastore**（新化合物数据库）。

新的空白数据库将在 Compound Datastore 视图中打开。可以将化合物文件导入至新数据库，或者手动逐个添加化合物。

## ❖ 若要导入化合物

1. 在任务窗格中单击 **Import Compounds**（导入化合物）。
2. 浏览至 .csv 或 .xml 化合物文件然后单击 **Open**（打开）。

TraceFinder 应用程序将导入所导入文件中的化合物，将其添加至已有数据库内的化合物，并按字母顺序排序。

## ❖ 若要手动添加单个化合物到数据库

1. 若要将单个化合物添加到数据库中现有的化合物中，单击 **Add Compound**（添加化合物）图标，。

应用程序将一个空白化合物行添加到化合物列表的底部。

	Compound Name	Experiment Type	Category	Ionization	Chemical Formula
679	Zeranol_neg*	SRM		None	
680*		SRM		None	

2. 单击第一个表格单元并输入所需的 Compound Name（化合物名称）参数。
- 3.（可选）在 Category（类别）或 Chemical Formula（化学式）列中输入值。
- 4.（可选）更改 Experiment Type（实验类型）的值。  
在为化合物添加定量峰后，无法修改实验类型。
- 5.（可选）更改 Ionization（离子化）的值。

6. 若要添加一个定量峰，选择化合物并单击 **Add Quan Peak**（添加定量峰）按钮，。
- 应用程序将空白定量峰行添加到化合物。定量峰包括用于化合物的定量值。每个化合物至少需要一个定量峰。

	Compound Name	Experiment Type	Category	Ionization
679	Zeranol_neg*	SRM		None
680	NewCompound	SRM		None

	Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy
*	NewCompound			

7. 输入所有必填参数。

**提示** 只有输入所有需要定量峰参数，或从化合物中移除定量峰后，才可以添加其它新的化合物或保存化合物数据库。

8. 若要为定量峰添加确认离子，单击 **Add Confirming Ion**（添加确认离子）按钮，。
- 应用程序将新确认离子行添加到定量峰。

	Compound Name	Experiment Type	Category	Ionization
680	NewCompound	SRM		None

	Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy	RT (min)
	NewCompound	111.00	111.00	1.00	1.000

	Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy
	NewCompound			

9. 输入所有必填参数。
10. 单击 Compound Datastore 任务窗格中的 **Save Compound Datastore**（保存化合物数据库）以保存新数据库。
- 每个实验类型所需的定量峰和确认离子参数均不同。有关每个实验类型所需和可选参数的列表，参阅 *TraceFinder User Guide* 的“Using the Configuration Mode”章节。

❖ 若要移除化合物或化合物的定量峰信息

- 在 Compound Datastore 视图中选择要删除的行。  
可用下列方式之一移除：
  - 整个化合物，包括所有相关的定量峰和确认离子信息。
  - 定量峰行和任何相关的确认离子信息。
- 单击 **Remove Quan Peak**（移除定量峰）按钮，。
- 收到提示信息时，单击 **Yes** 删除所选行。  
该选定行及其中的所有条目将被删除。

**提示** 如果添加的是一行化合物或定量峰信息，且未填写所有需要值，可以单击右键并从快捷菜单选择 **Cancel**（取消）以删除整行。可以仅取消填写不完整的化合物或定量峰行。

在 Configuration 模式的 Application Configuration（应用程序配置）视图中，可以启用以下特性：

- 配置用户生成的报告。
- 为 Genesis，ICIS 或 Avalon 检测算法指定检测参数。
- 启用用户安全，化合物数据库，目标筛选，快速采集或多通道功能。
- 选择批次向导方式。
- 在完全序列和单样品提交选项之间选择。

若要打开 Application Configuration 视图，单击 **Application Configuration** 任务窗格。



**重要信息** 在编辑任何配置特性后，必须应用修改。

### ❖ 若要打开应用程序配置设置

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Apply**（应用）。  
出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。
2. 收到提示信息时，单击 **Yes** 重启 TraceFinder 应用程序。

### ❖ 若要指定可用报告

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Reports**（报告）。
2. 使用方向箭头将报告从 Installed Reports（已安装报告）窗格移到 Displayed Reports（已显示报告）窗格。

**提示** 使用 CTRL 或 SHIFT 键选择多份报告。

在 Method Development（方法开发），Analysis（分析）和 Acquisition（采集）模式中，用户可以在 Displayed Reports 窗格中获取所有报告。

3. 选中报告类型为 **Batch Level**（批次水平）复选框，为整个批次创建单份报告（而不是为每个样品单独创立报告）。
4. 若要导入新报告，执行下列操作：
  - a. 单击 **Import**（导入）。
  - b. 浏览到 Crystal Reports .dll 文件或 Custom Reports .xltm 文件，单击 **Open**。  
应用程序将已导入报告写入 TraceFinder 安装目录并在 Installed Reports 窗格显示新报告。
5. 若要将报告选择恢复至初始状态（初次打开此页面时的状态），单击 **Undo Changes**（撤销更改）。

### ❖ 若要指定配置默认值

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Defaults**（默认值）。
2. 在 Application Defaults（应用程序默认值）区域输入实验室和仪器名称。  
应用程序在报告标题中使用该实验室和仪器名称。
3. 在 Display Mass Precision（显示质量数精度）框内，设置质量数精度小数位值，范围为 **2** 到 **6** 之间的整数（默认值为 2）。  
TraceFinder 应用程序利用这个质量数精度值显示报告和质谱图中的质量数。
4. 从 Chromatogram Intensity Scale（色谱图强度范围）列表中选择 **Relative**（相对）或 **Absolute**（绝对）。  
这将为在数据查看和报告中显示的定量和定性色谱图设置默认显示类型。

❖ 若要指定检测参数

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Detection** (检测)。
2. 从 Detector Type (检测器类型) 列表选择一个检测器类型。
3. 在 Mass Tolerance (质量数容许偏差) 区域执行以下操作：
  - 选择希望使用的测量单位。
  - 在 Value (值) 框中, 指定作为上限使用的毫质量数单位或 ppm 的数值。应用程序将质量数容许偏差应用至提取色谱图。默认值为 500 mmu。
4. 在 Retention Time (保留时间) 区域执行以下操作：
  - 在 Window (窗口) 框中指定窗口宽度 (以秒为单位), 以指示系统将查看峰顶点的预期保留时间的距离长度。
  - 在 View Width (查看宽度) 框中, 指定离子色谱图显示的可查看尺寸 (以分钟为单位)。
5. 在 Ion Ratio Parameters (离子比率参数) 区域执行以下操作：
  - 在 Window Type (窗口类型) 框中, 选择 **Absolute** 或 **Relative** 作为用于确定可接受离子比率范围的计算方法。
  - 在 Window (+/-%) (窗口, +/-%) 框中, 选择可接受离子比率范围。
  - 在 Ion Coelution (离子共洗脱) 框中, 选择确认离子峰与定量离子峰的保留时间最大差值。
6. 在 Peak Detection Parameters (峰检测参数) 区域选择其中一个检测算法: **Genesis**, **ICIS** 或 **Avalon**。  
每个检测方法使用特定的检测设置。  
有关 Genesis, ICIS 和 Avalon 检测参数的详细说明, 参阅 *TraceFinder User Guide* 的 “Using the Configuration Mode” 章节。

❖ 若要启用用户安全

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Optional Features** (可选特性)。
2. 在 Optional Features 区域中选择 **User Security** (用户安全) 复选框。  
当复选框选中时, 所有用户必须登录 TraceFinder 应用程序, 且仅可使用其用户职务下指定的模式。参阅第 1 页的 “用户管理”。

❖ 若要启用目标筛选

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Optional Features**。
2. 在 Optional Features 区域中选择 **Target Screening (ToxID)** (目标筛选, **ToxID**) 复选框。  
在生成 Target Screening 报告之前, 必须已在计算机上安装 Thermo ToxID™ 应用程序。

❖ 若要启用快速采集

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Optional Features**。
2. 在 Optional Features 区域选中 **Quick Acquisition (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms)** (快速采集, **EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms**) 复选框。

注释 当启用多通道时, Quick Acquisition 特性不可用。

❖ 若要启用化合物数据库

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Optional Features**。
2. 在 Optional Features 区域中选择 **Compound Datastore** 复选框。

❖ 若要选择向导风格

1. 在 Application Configuration 视图中点击 **Optional Features**。
2. 在 Optional Features 区域中从 Batch Wizard Style（批次向导风格）列表中选择向导风格。
  - **Acquisition Batch Wizard**（采集批次向导）：将 Acquisition 模式添加至导航窗格。该模式与 TraceFinder 1.1 应用程序中的 Acquisition 模式类似。  
当启用多通路时，应用程序自动启用该向导风格。
  - **Batch Template Wizard**（批次模板向导）：默认向导风格与 EnviroLab Forms，ToxLab Forms 和 QuanLab Forms 应用程序中的采集向导类似。

**注释** 当启用多通路时，Batch Template Wizard 特性不可用。

❖ 若要启用多通道

1. 在 Application Configuration 视图中点击 **Optional Features**。
2. 在 Optional Features 区域中选择 **Multiplexing**（多通道）复选框。
3. 在通道列表中选择 **2 Channels**（两通道）或 **4 Channels**（四通道）。
4. 当选择 2 通道时，选择 **1 arm**（单臂）或 **2 arm**（双臂）自动进样器配置。
  - 1 arm 配置启用通道 1 和 3；2 arm 配置启用通道 2 和 4。
  - 当使用 4- 通道配置时，自动进样器 1 使用通道 1 和 3，自动进样器 2 使用通道 2 和 4。

**注释** 仅当安装 Power Modules（功能模块）时，Multiplexing 选项才可用。参阅 *TraceFinder User Guide* 中的“Using the Configuration Mode”章节。

❖ 若要指定采集提交特性

1. 在 Application Configuration 视图中点击 **Optional Features**。
2. 在 Optional Features 区域中选择 **Full Sequence Submission**（完整序列提交）或 **Single Sample Submission**（单样品提交）选项。
  - **Full Sequence Submission**：支持自动进样器将来可能使用的特性。当仪器方法指定将来可能使用的特性时，TraceFinder 应用程序如一个多路驱动器一样运行，在自动进样器的下一进样位置提交样品。  
在提交一个批次后，当预运行开始时自动进样器开始准备所有的样品进样。在开始其他批次（即使是优先级更高的批次）之前，必须先完成批次中的所有样品。  
当使用 Full Sequence Submission 时，在完成当前采集批次后总是即刻运行优先批次。
  - **Single Sample Submission**：支持智能序列特性。在提交一个批次后，自动进样器开始一次准备一个样品进样。优先级更高的批次可以中断当前采集批次中的样品序列。  
当使用 Single Sample Submission 时，在完成当前采集样品后总是即刻运行优先批次。

**注释** 当启用多通道时，Single Sample Submission 特性不可用。

## 术语表

### Numerics

**2 Channels** 两通道

**4 Channels** 四通道

**1 arm** 单臂

**2 arm** 双臂

### A

**Absolute** 绝对

**Acquisition** 采集

**Acquisition Batch Wizard** 采集批次向导

**Add Compound** 添加化合物

**Add Confirming Ion** 添加确认离子

**Add Quan Peak** 添加定量峰

**Add User** 添加用户

**Analysis** 分析

**Application Configuration** 应用程序配置

**Application Defaults** 应用程序默认值

**Apply** 应用

### B

**Batch Level** 批次水平

**Batch Template Wizard** 批次模板向导

**Batch Wizard Style** 批次向导风格

### C

**Cancel** 取消

**Category** 类别

**Chemical Formula** 化学式

**Chromatogram Intensity Scale** 色谱图强度范围

**Compound Datastore** 化合物数据库

**Compound Name** 化合物名称

**Configuration** 配置

### D

**Defaults** 默认值

**Detection** 检测

**Detector Type** 检测器类型

**Discard Changes** 放弃更改

**Display Mass Precision** 显示质量数精度

**Displayed Reports** 已显示报告

### E

**Edit User** 编辑用户

**Enabled** 启用

**ENTER** 回车

**Experiment Type** 实验类型

### F

**Full Sequence Submission** 完整序列提交

### I

**Import** 导入

**Import Compounds** 导入化合物

**Installed Reports** 已安装报告

**Ion Coelution** 离子共流出

**Ion Ratio Parameters** 离子比率参数

**Ionization** 离子化

**ITAdmin** IT 管理员

### L

**LabDirector** 实验室主任

### M

**Mass Tolerance** 质量数容许偏差

**Method Development** 方法开发

**Multiplexing** 多通路

### N

**New Compound Datastore** 新化合物数据库

### O

**OK** 确定

**Open** 打开

**Optional Features** 可选特性

## P

**Peak Detection Parameters** 峰检测参数

**Power Modules** 功能模块

**Project Administration** 项目管理

**Projects** 项目

## Q

**QAQC** 质保质控

**Quick Acquisition (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms)** 快速采集 (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms)

## R

**Relative** 相对

**Remove Quan Peak** 移除定量峰

**Remove User** 移除用户

**Reports** 报告

**Retention Time** 保留时间

**Role** 职务

## S

**Save Changes** 保存更改

**Save Compound Datastore** 保存化合物数据库

**Single Sample Submission** 单样品提交

**Supervisor** 主管

## T

**Target Screening (ToxID)** 目标筛选 (ToxID)

**Technician** 技术人员

**TraceFinder User Guide** TraceFinder 用户手册

## U

**Undo Changes** 撤销更改

**User** 用户

**User Administration** 用户管理

**User Listing** 用户列表

**User Security** 用户安全

**Username** 用户名

**Using the Configuration Mode** 使用配置模式

## V

**Value** 值

**View Width** 查看宽度

## W

**Window** 窗口

**Window (+/-%)** 窗口 (+/-%)

**Window Type** 窗口类型

## Y

**Yes** 是

## 商标

TraceFinder 和 ToxID 均为商标。而 Xcalibur 是 Thermo Fisher Scientific Inc 在美国的注册商标。