

TraceFinder 分析快速参考指南

本快速指南说明为 Thermo TraceFinder™ 分析软件中 Technician（技术人员）职务分配的 Analysis（分析）模式任务。

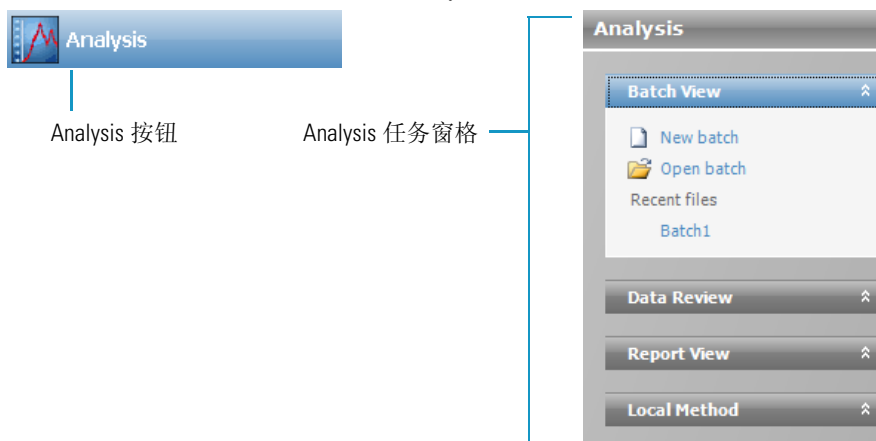
有关本快速参考指南中所有程序的详细说明，参阅 *TraceFinder User Guide*（*TraceFinder* 用户手册）的“Using the Analysis Mode（使用分析模式）”章节。

目录

- [Batch View](#)
- [Data Review 视图](#)
- [Report View](#)
- [Local Method 视图](#)
- [Quick Acquisition](#)
- [术语表](#)
- [商标](#)

❖ 若要打开 **Analysis** 模式

从任何模式或单击主菜单上的 **Analysis** 按钮。



Batch View

在 Analysis 模式的 Batch View（批次视图）中，可以手动创建和编辑新批次，或者打开并编辑之前保存的批次。提交批次时，可以采集，处理或创建所提交样品的报告。

- 若要打开 [Batch View](#)
- 若要创建批次
- 若要将样品添加到列表中
- 若要在列表中插入样品
- 若要在列表中导入样品
- 若要移除列表中的样品
- 若要复制样品
- 若要重新进样
- 若要编辑样品值
- 若要提交样品

❖ 若要打开 **Batch View**

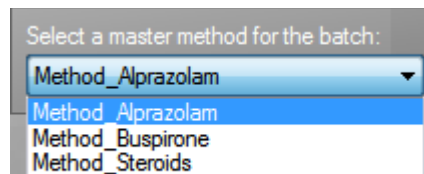
单击导航窗格中的 **Batch View**（批次视图），或从 Batch View 任务窗格内的 Recent Files（最近文件）列表选择一个批次。

❖ 若要创建批次

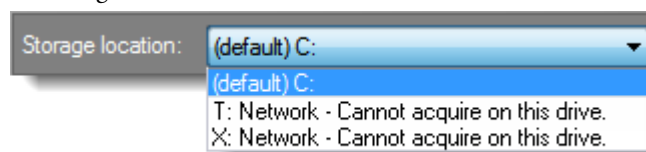
1. 选择 Batch View 任务窗格中的 **New Batch**（新批次），或者选择 **File**（文件）> **New**（新建）> **Batch**（批次）。

Create a New Batch（创建新批次）对话框打开。

2. 从 Method（方法）列表选择主方法。



3. 从 Storage Location（保存位置）列表选择一个驱动器。



所选驱动器上的 Project（项目）列表打开，显示所有项目，子项目和批次。应用程序不显示不包含项目和子项目的驱动器。

无法用网络驱动器采集数据。更多有关网络驱动器的信息，参阅 *TraceFinder User Guide* 中的“Using the Configuration Mode（使用配置模式）”章节。

4. 为新批次选择一个项目，子项目并输入名称。

提示 若要启用 Save（保存）按钮，必须选择一个子项目并输入唯一的批次名称。若 Save 按钮未启用，则可能是因为输入的名称已经存在或者尚未选择子项目。

5. 单击 **Save**。

具有一个 Specimen（定量样品）的新的未命名的批次打开。

❖ 若要将样品添加到列表中

选择要添加的样品行数，然后单击 **Add Sample**（添加样品），。

提示 若要快速添加单样品行，右击样品列表然后从快捷菜单中选择 **Add Sample**。

应用程序将指定数量的新的 Specimen 样品添加至 Sample（样品）列表的末尾。

❖ 若要在列表中插入样品

1. 选择您要在其上方插入新的未知样品的样品。
2. 选择要插入的样品数，然后单击 **Insert Sample**（插入样品）图标，。

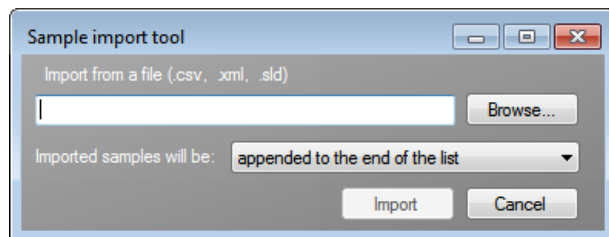
应用程序会将 Specimen 样品插入到所选样品上方。

插入的样品

	Status	Filename	Sample type	Level	Sample ID
1		cal_std_5	Calibrator	5	cal std = 5 ng/uL
2		Unknown2	Specimen		
3		Unknown1	Specimen		
4		cal_std_10	Calibrator	10	cal std = 10 ng/uL

❖ 若要在列表中导入样品

1. 点击 **Import Samples** （导入样品）图标，。
- Sample Import Tool （样品导入工具）对话框显示。



2. 单击 **Browse** （浏览）然后选择含有要导入的样品定义的 .csv，.xml 或 .sld 文件。

注释 该 .csv，.xml 或 .sld 文件格式必须匹配 TraceFinder 文件格式。

3. 从 Imported Samples Will Be （导入样品将被）列表选择 **Appended to the End of the List** （附加到列表末尾）或 **Inserted at the Selected Row** （插入到所选行）。
4. 单击 **Import** （导入）。

Sample Import Tool 对话框关闭，应用程序将指定的样品添加至 Sample 列表。

当从 Xcalibur™ 序列文件（.sld）中导入样品时，TraceFinder 应用程序替换以下列名称和样品类型。

Xcalibur 列	TraceFinder 列	Xcalibur 样品类型	TraceFinder 样品类型
Position （位置）	Vial Position （样品瓶位置）	Blank （空白样）	Negative （阴性）
Inj Vol （进样体积）	Injection Volume （进样体积）	Std Bracket （标曲更新）	Calibrator （校正品）
Dil Factor （稀释因子）	Conversion Factor （转换系数）		

❖ 若要移除列表中的样品

1. 选择要移除的样品。

提示 使用 CTRL 或 SHIFT 键来选择多个样品。

2. 右击并在快捷菜单中选择 **Remove Selected Samples** （移除所选样品）。

❖ 若要复制样品

1. 选择要复制的样品。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Insert Copy Sample** （插入复制样品）。

TraceFinder 应用程序将复制的样品插入到选定样品之前。

❖ 若要重新进样

1. 从 Sample 列表中选择要重新进样的样品。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Reinject This Sample** （重新进样）。

TraceFinder 应用程序将创建选定样品的副本，并会在文件名称中附加 INJ001。多次重新进样的同一样品将依进样顺序编号为 INJ002，INJ003，以此类推。

TraceFinder 应用程序将从原始样品复制所有的参数值。

❖ 若要编辑样品值

1. 对每个样品执行下列操作之一：

删除旧文件名，然后输入新文件名。

– 或 –

双击 Filename（文件名）列并找到要用于该样品的原始数据文件。

– 或 –

右击并从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File**（浏览原始文件），然后找到用于样品的原始数据文件。

2. 对于每个样品，单击 Sample Type（样品类型）列，然后从列表中选择样品类型。

可用的样品类型

Specimen（定量样品）	Specimen/Qual（样品 / 定性）	QC（质控样）
Solvent（溶剂）	Calibrator（校正品）	Hydrolysis（水解）
Unextracted（未提取）	Negative（阴性）	

3. 为每个 Calibrator 或 QC 样品，从 Level（水平）列表选择一个水平。

样品水平已在主方法中定义。如果 Level 列表中无任何水平选项，执行下列步骤：

- a. 返回 Method Development（方法开发）模式。
- b. 打开该方法。
- c. 点击 **Compounds**（化合物）选项卡。
- d. 点击 **Calibration Levels**（校正水平）选项卡。
- e. 添加水平。
- f. 保存方法。
- g. 返回至 Analysis 模式，点击 **Update**（更新）。

Local Method: Method_Steroids

Update

应用程序以新样品水平更新本地方法。

- 4.（可选）输入或编辑其他列的值。

注释 当使用样品列表底部的水平滚动条时，Status（状态），Filename，Sample Type 和 Level 列将保持固定，其他列可左右滚动。

❖ 若要提交样品

1. 若要提交批次中的所有样品，执行下列操作：

- a. 点击 **Submit Batch**（提交批次）按钮，。

Submit Options（提交选项）对话框显示。

- b.（可选）在 Submit Options 对话框中选择 **Create Reports**（创建报告）复选框。

2. 若只提交所选样品，执行下列操作：

- a. 选择要提交的样品。

- b. 点击 **Submit Selected Samples**（提交所选样品）图标，。

Submit Options 对话框显示。

- c.（可选）在 Submit Options 对话框中选择 **Create Reports** 复选框。

注释 默认情况下，应用程序在用户提交批次时采集和处理数据。

3. 单击 **OK**（确定）。

样品列表

在 Analysis 模式的 Data Review（数据查看）视图中，可以查看由主方法生成的数据。在生成报告之前，使用 Data Review 视图来验证特定样品化合物的数据。使用 Data Review 视图中的功能来调查和编辑批次中的定量值。

Data Review 视图使用 **样品列表** 和两个模式之一：**Quan Mode** 或 **Qual Mode**。Qual Mode（定性模式）只适用于 Specimen/Qual 样品类型。当查看 Specimen/Qual 样品类型数据时，可以在 Qual Mode 和 Quan Mode（定量模式）之间切换。

❖ 若要打开 Data Review 视图

单击导航窗格中的 **Data Review**，或从 Data Review 任务窗格的 Recent Files 列表选择一个批次。

样品列表显示某个批次样品所有的定量数据。应用程序显示适用于某个特定方法的化合物列表。如果样品的结果有问题，样品列表中的 Flags（标记）列会显示注意的标志。

Method: Method_Alprazolam						Instrument: Thermo Scientific Instrument	
	Status	Flags	Filename	Sample type	Level	Sample ID	Compounds
▶ 1			cal_1_120...	Calibrator	5	cal 1 = 6 ng/mL	L,3-Dioxolane, 2-heptyl-
2			cal_2_120...	Calibrator	10	cal 2 = 15 ng/mL	5-Chlorovaleronitrile
3			level_1_12...	Specimen		level 1 = 5 ng/uL	Propanenitrile
							Pyrazinamide

样品警告标记
状态指示器

化合物标记

Quan Mode 和 Qual Mode 中的样品列表一致，显示某个批次样品的所有定量数据。

- 在 **Quan Mode** 中，利用样品列表和 Compounds 窗格选择唯一的样品和化合物组合，随后这一组合的文本和图像值会显示在 Quan Mode 窗格中。Compounds 窗格列出适用于某个特定方法的化合物。

在样品列表中，可以启用或停用化合物。将化合物切换到停用状态不会将其数据和计算值从结果中删除。相反，TraceFinder 应用程序将从特定样品中隐藏该化合物，并在 Compounds 列表中使用该化合物不可用。对于校正标样，应用程序不再采用数据文件的校正点校正，且会将校正点从 Qualification（定性）窗格中显示的校正曲线的图形视图中删除。该校正点已不再是结果的一部分。

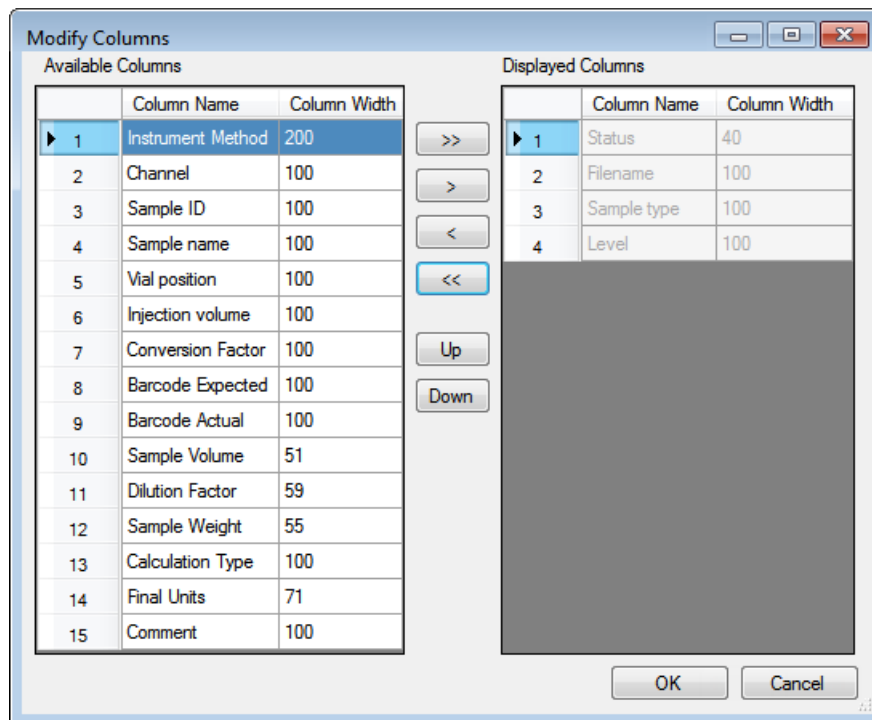
- 在 **Qual Mode** 中，利用样品列表和 Peaks（峰）窗格选择唯一的样品和峰组合，随后这一组合的文本和图像值会显示在 Qual Mode 窗格中。

列显示

样品列表可以包含许多信息列。可以自定义需要显示的列以及显示顺序。

❖ 若要自定义列显示

1. 右击 Data Review 样品列表，然后从快捷菜单中选择 **Modify Columns**（修改列）。
Modify Columns 对话框打开。



参数	描述
	将所有列移动到 Displayed Columns（显示列）窗格。
	将所选列移动到 Displayed Columns 窗格。
	将所选列移动到 Available Columns（可用列）窗格。无法移动 Status, Filename, Sample Type 或 Level 列。
	将除 Status, Filename, Sample Type 或 Level 列之外的所有列移动到 Available Columns 窗格。
	将 Displayed Columns 窗格中所选列名称的次序上移一行。无法移动 Status, Filename, Sample Type 或 Level 列。
	将 Displayed Columns 窗格中所选列名称的次序下移一行。无法移动 Status, Filename, Sample Type 或 Level 列。

2. 利用箭头按钮移动所有希望显示在 Displayed Columns 窗格中的列。
所有选中列显示在 Status, Filename, Sample Type 和 Level 列之后。
3. 若要安排列次序，执行下列操作：
 - a. 在 Displayed Columns 窗格中选择一个列名称。
 - b. 选择 **Up**（向上）或 **Down**（向下）在列表中上下移动所选列。
列表中的第一列代表 Batch View 样品列表中的最左列。列表中的最后一列代表 Batch View 样品列表中的最右列。

注释 无法移动 Status, Filename, Sample Type 或 Level 列。

4. 若要更改列宽，执行下列操作：
 - a. 在 Displayed Columns 窗格中选择一个列宽。

7	Vial position	69
8	Injection volume	100
9	Calculation Type	100

- b. 输入一个新的宽度值。
5. 若要保存修改，单击 **OK**。

样品列表中的列立刻反映出所作的更改。应用程序对 Data Review 视图中的所有样品列表采用这些设置。

可以采用拖放的方法对样品列表中的列临时重新排序，但是无法保存这一次序。当重启 TraceFinder 应用程序时，Data Review 视图按 Modify Columns 对话框中指定的次序显示列。

状态指示器

状态指示器显示每个样品在采集和处理时的当前状态。

-  样品未采集。
-  样品已采集但未处理。
-  样品已采集并处理。
-  正在采集样品。

样品警告标记

当样品内的化合物包含错误时，样品警告标记将显示。

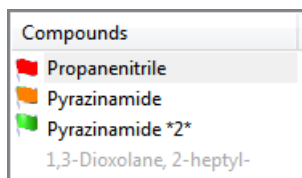
- 当在化合物之间切换以查看色谱图时，样品标记会保持不变，直到作出更改，例如，通过手动积分使化合物不再处于可接受的标准范围之外。
- 单击警告标记列出样品内所有化合物指示器信息。

	Status	Flags	Filename	Sample type	Level	Sample ID
1						
2						
3						

UnknownA1 Flag Details

Propanenitrile
3.167:Peak area 23486986.169 is out of bounds (ISTD
Minimum Recovery 0.000 and ISTD Max Recovery
0.000)

化合物标记



使光标在标记上停留以显示化合物出现的问题。

TraceFinder 应用程序在这些情况下显示化合物标记：

- 当化合物违反方法中设定的任何值（或被方法中设定的值激活）
- 找不到化合物
- 当无法找到 Calibrator 或 QC 样品类型的化合物
- 当化合物超出指定的离子比率范围

化合物为内标物时，这些标准不适用于 Negative 样品类型。

TraceFinder 应用程序首先依据标记指示器对化合物列表排序，然后依据化合物名称排序。化合物标记具有下列含义：

- 红色标记表示化合物离子比率未通过或方法验证失败
- 橙色标记表示化合物低于方法中指定的 LOQ 或 LOD，或者介于 LOD 和 LOQ 值之间
- 绿色标记表示化合物高于方法中指定的 LOR 值
- 黄色标记表示化合物低于方法中指定的 LOR 值
- 无标记表示化合物无错误或未选择报告选项。

停用或排除化合物

利用 Active（活动）和 Excluded（已排除）列控制哪些化合物用于计算校正曲线和报告。

Data Review - Batch1						
Method: Method_Alprazolam				Instrument: Thermo Scientific Instrument		
	Status	Flags	Filename	Sample type	Active	Excluded
▶ 1			UnknownA2	Specimen	☒	☐
2			UnknownA3	Specimen	☐	☐
3			UnknownA4	Specimen	☒	☐

Compounds

Propanenitrile

Pyrazinamide

Pyrazinamide *2*

1,3-Dioxolane, 2-heptyl

非活动化合物

非活动化合物

❖ 若要启用或停用化合物

1. 在样品列表中选择一個样品。

Compounds 窗格显示所选样品的所有化合物。某个批次内特定化合物的默认状态由批次 Batch View 内的 Compounds Active Status（化合物活动状态）窗格确定。停用的化合物将呈灰色显示。

2. 在 Compounds 窗格中选择想要修改启用或停用状态的化合物。
3. 在样品列表中，选择或清除 **Active** 复选框。

使用表格底部的水平滚动条滚动至 Active 列。

❖ 若要排除校正点

在样品列表中，选中样品的 **Excluded** 复选框。

使用表格底部的水平滚动条滚动至 Excluded 列。

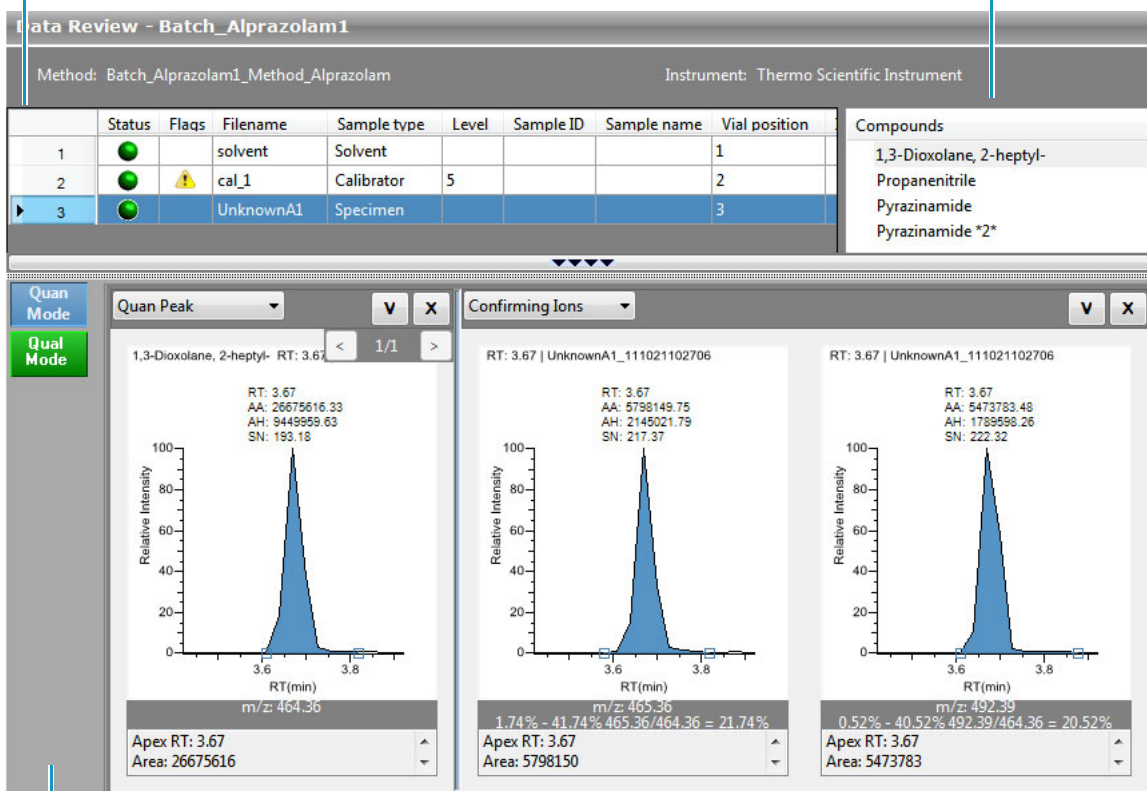
当某个值不再用于校正时，在校正曲线的图形视图内这个值显示为空框。

Quan Mode

利用 Quan Mode 和相关的 Compounds 窗格查看定量信息以补充所选样品的文本信息。Quan Mode 显示在已处理样品中找到的所选化合物的定量峰和确认离子信息。

样品列表

Compounds 窗格



峰显示窗格

除了样品列表，Quan Mode 视图使用 Compounds 窗格以及峰显示窗格。

Compounds

同时使用 Compounds 窗格和 Sample List （样品列表）窗格显示唯一文件和化合物组合的文本和图形值。

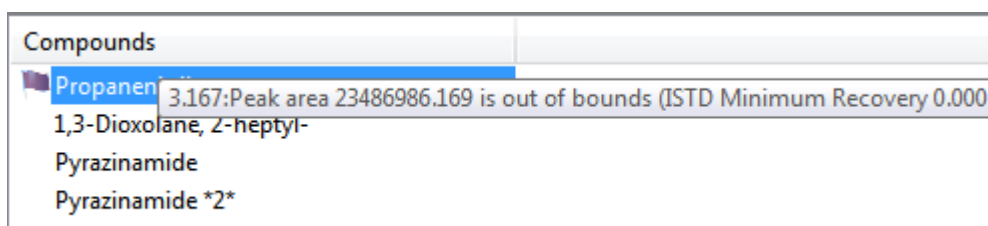
❖ 若要对化合物列表排序

在 Compounds 窗格中，右击并从快捷菜单中选择以下其中一种排序方式：

- Sort By Flag And Alphabetical （按标记和字母顺序排序）
- Sort By Flag And Retention Time （按标记和保留时间排序）
- Sort By Alphabetical （按字母顺序排序）
- Sort By Retention Time （按保留时间排序）

❖ 若要显示化合物出现的具体问题

使光标在标记上停留以显示化合物出现的问题。



峰显示

对于每个化合物，可以显示多达四个窗格。

❖ 若要修改峰窗格显示

在任何峰窗格中，右击标题栏或单击  图标并选择下列命令之一：

- **Make All Panels the Same Size** （使所有窗格同尺寸）
- **Move Panel Left or Right** （使窗格左移或右移）
- **Add a Panel** （添加窗格）

❖ 若要显示特定化合物的峰

1. 在样品列表中，选中一个样品。

Compounds 窗格将列出方法中指定的以及样品中找到的所有化合物。

2. 在 Compounds 窗格中，选择样品中找到的化合物。

默认，第一个窗格显示所选化合物的定量峰。

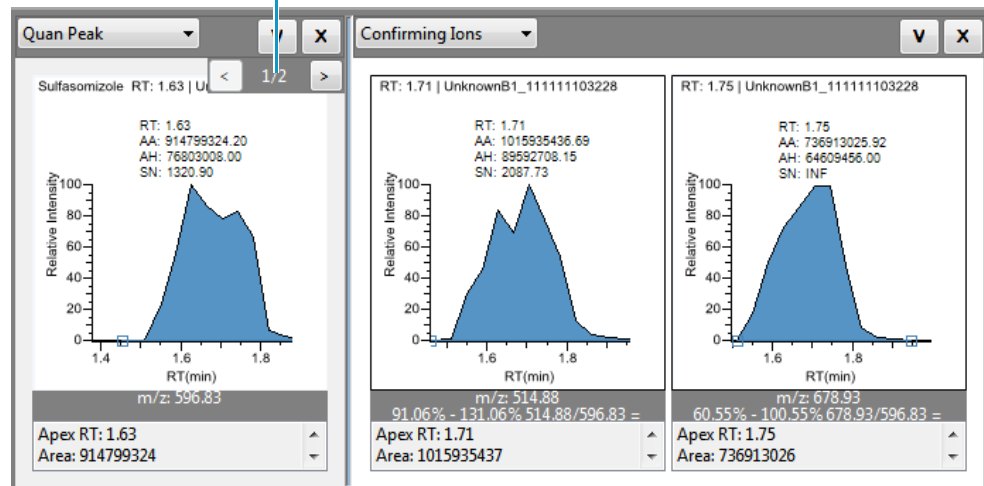
3. 在第二个窗格中，选择要显示的数据类型。

可以显示下列数据类型之一：[Quan Peak](#)（定量峰），[Confirming Ions](#)（确认离子），[Reference Peak](#)（参考峰），[ISTD](#)（内标），[Ion Overlay](#)（离子重叠），[Calibration Curve](#)（校正曲线），或 [Spectra](#)（质谱）。

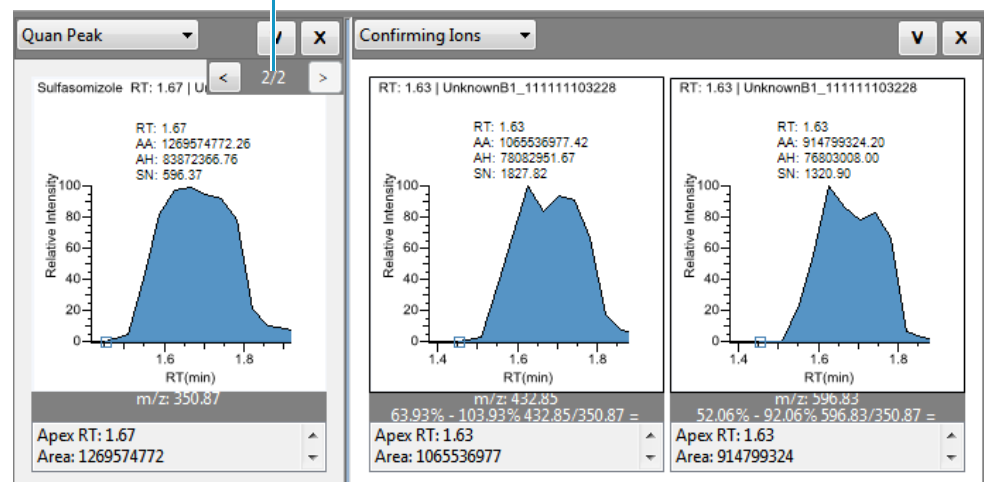
- **Quan Peak** （定量峰）

可以在定量峰之间切换，但是无法同时查看多个定量峰。Quan Peak 窗格右上角的指示器显示正在查看的多个定量峰。

2 峰之 1



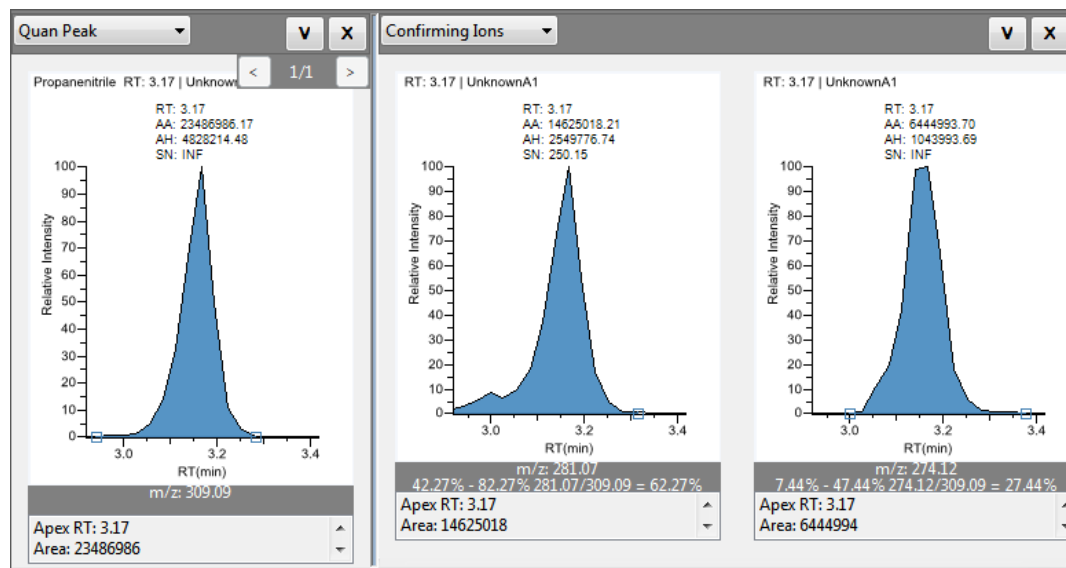
2 峰之 2



- **Confirming Ions** （确认离子）

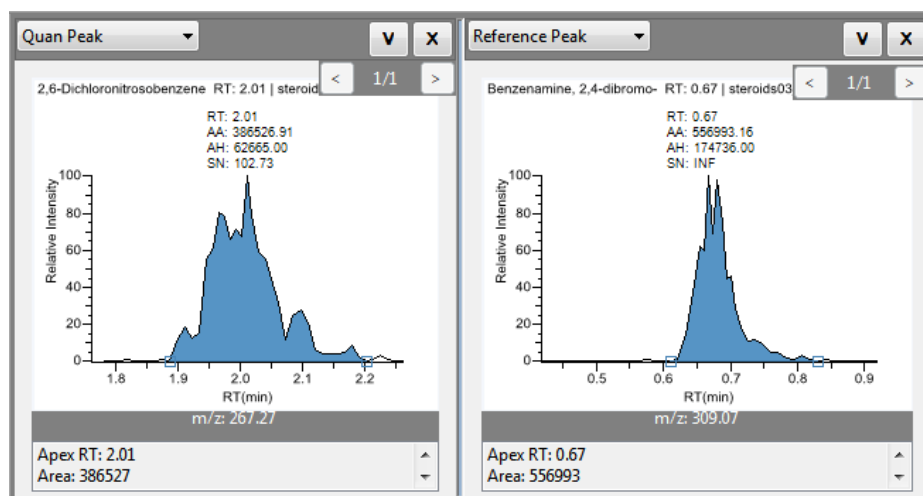
具有多个确认离子的定量峰。

注释 对于具有类似物检测类型的化合物，应用程序在 Confirming Ions 窗格中显示 “No Confirming Ions are Enabled （没有启用确认离子）”。

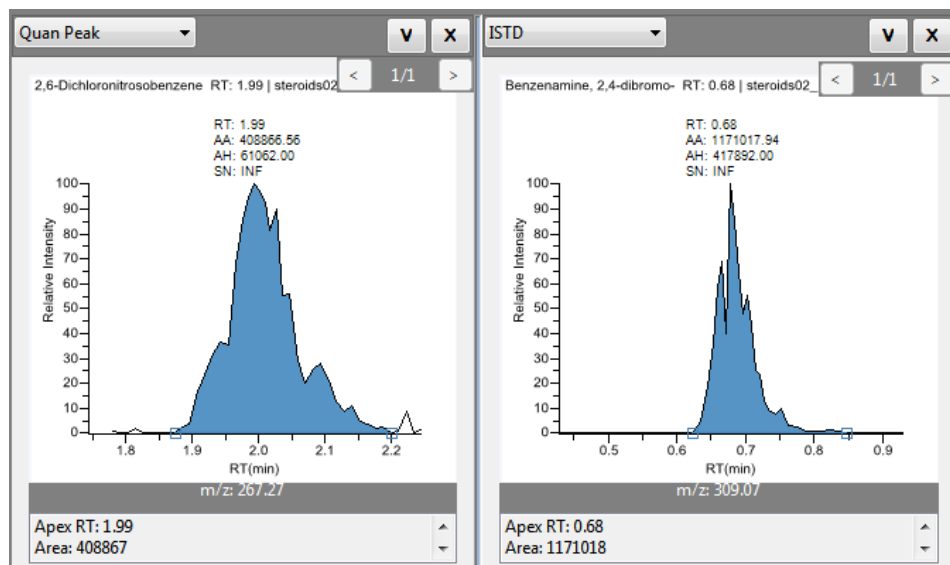


- **Reference Peak** （参考峰）

具有参考峰的定量峰。

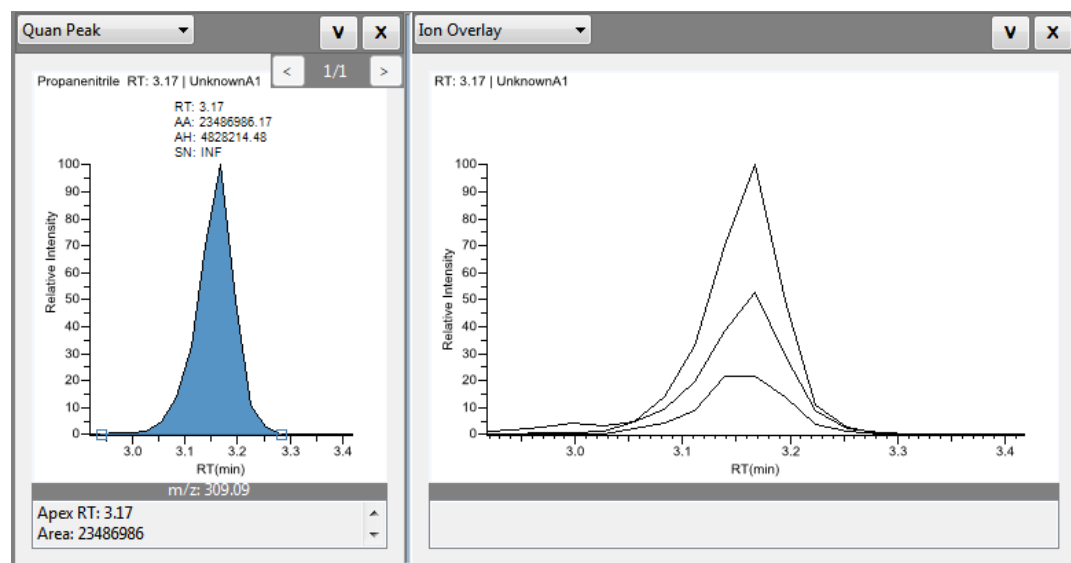


- **ISTD (内标)**
具有内标的定量峰。

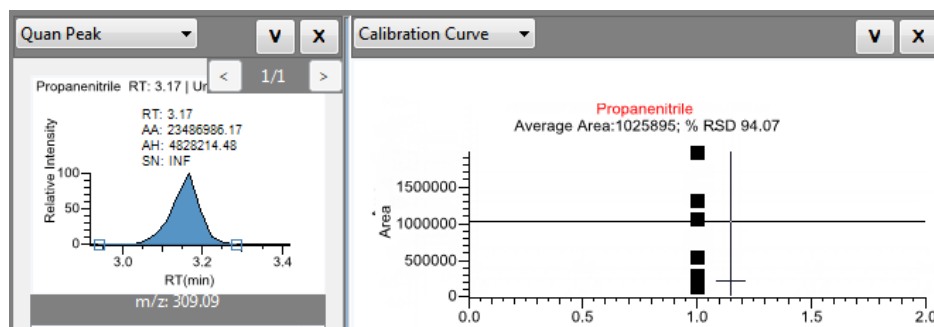


- **Ion Overlay (离子重叠)**
具有确认离子重叠的定量峰。

注释 对于具有类似物检测类型的化合物，应用程序在 Ion Overlay 窗格中显示 “No Data (没有数据)”。



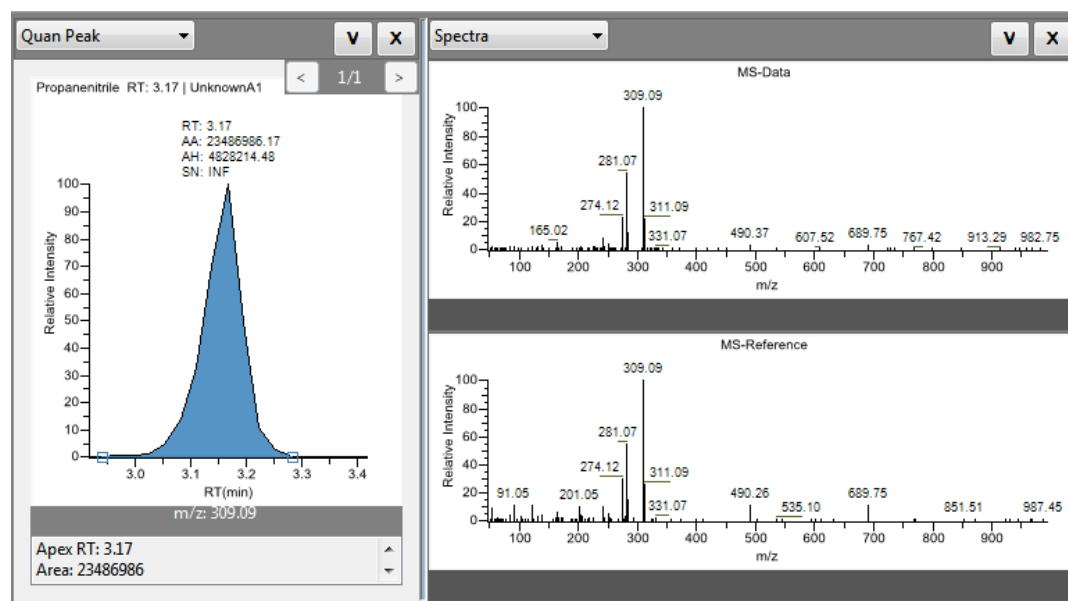
- **Calibration Curve (校正曲线)**
具有校正曲线的定量峰。



- Spectra （质谱）

具有数据和参考质谱的定量峰。

注释 对于具有类似物检测类型的化合物，应用程序在 Spectra 窗格中显示 “Not Available （不可用）”。



❖ 若要手动积分定量或确认离子

1. 将光标放在窗格内两个峰分隔符标签的其中之一上面。

当标签可选时，光标将变成十字光标。可放大基线使选择标签变得更容易。

2. 将标签拖至其它位置，然后放开光标将峰分隔符标签放在其新位置，并自动将峰值（峰面积，峰高等）更新至结果中。

此数据所生成的报告可识别手动修改。

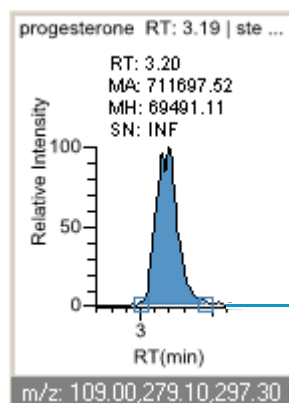
❖ 若要手动添加峰

1. 在 Quantification Peak （定量峰）窗格中右键单击任意位置，然后从快捷菜单中选择 **Add Peak** （添加峰）。

仅当应用程序没有检测到峰时，Add Peak 命令可用。

2. 单击以标示峰的左右基线点。

应用程序将峰分隔符标签放在这些位置，并自动更新结果中的峰值（峰面积，峰高等）。



❖ 若要移除手动创建的峰

右键单击色谱图，然后从快捷菜单中选择 **Remove Peak**（移除峰）。
应用程序将移除手动添加的峰。

❖ 若要在方法积分和手动积分模式之间切换

右键单击色谱图，然后从快捷菜单中选择 **Method Integration Settings**（方法积分设置）或 **Manual Integration Settings**（手动积分设置）。

最初，为化合物和文件保存的方法积分和手动积分的设置相同，当选择一种模式时并不会影响已保存的结果。然而，若可以使用手动数据，当在方法和手动模式之间转换时，色谱图和结果将随之更新。

随着在两种模式之间的切换，每个窗格都反映出更改。此数据所生成的报告可识别手动修改。

❖ 若要更改已检测峰的显示信息

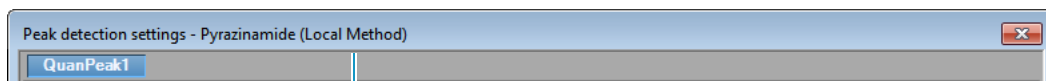
1. 右键单击定量色谱图，然后将光标停留在 **Peak Labels**（峰标签）显示标签选项。
2. 选择显示峰保留时间，峰高，峰面积或信噪比的标签。
为显示标签选择列表中的标签类型，并清除未显示标签的标签类型。
3. 若要删除标签，再次选择标签类型并将其删除
标签设置对定量峰，确认峰和内标峰均适用。

提示 并非所有峰显示的标签总能及时更新。若要更新所有标签，先选择一个不同的化合物，然后选择更改过标签的化合物。

❖ 若要修改峰检测设置

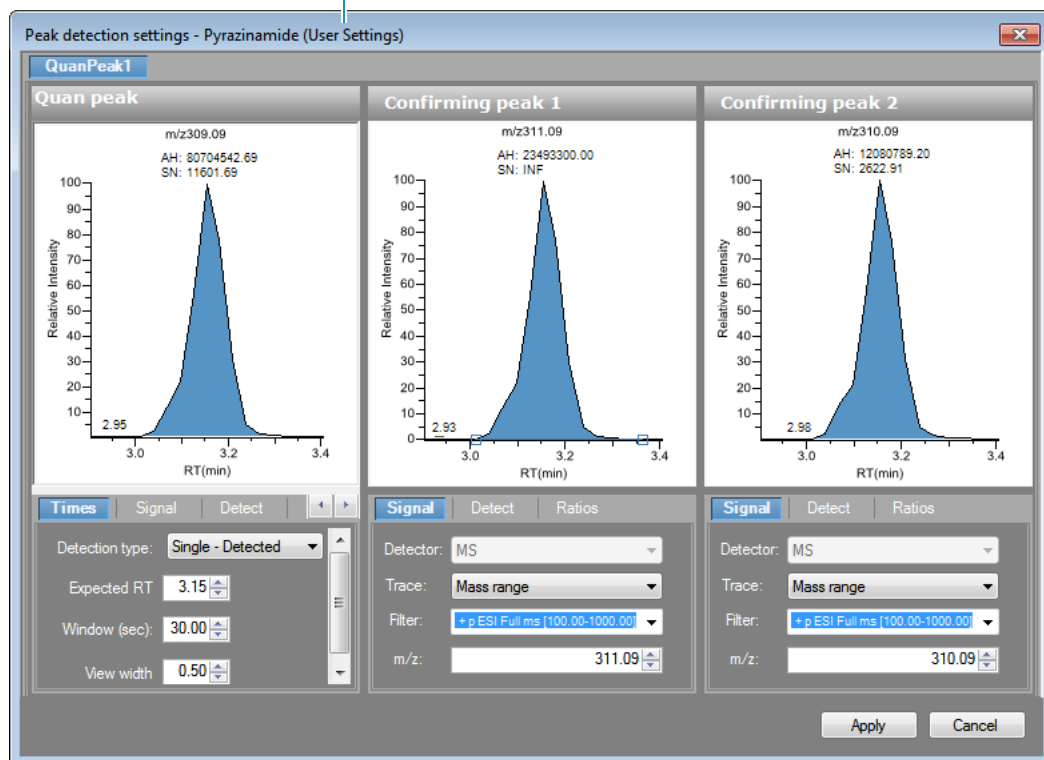
1. 右键单击色谱图，然后从快捷菜单中选择下列选项之一：

- **Peak Detection Settings**（峰检测设置）> **Edit Local Method Peak Detection Settings**（编辑本地方法峰检测设置）：修改批次中所有样品的选中化合物。
- **Peak Detection Settings**（峰检测设置）> **Edit User Defined Peak Detection Settings**（编辑用户定义峰检测设置）：只修改选中样品的选中化合物。TraceFinder 应用程序保存批次的修改，停止只将本地方法检测设置应用到这个样品的化合物。Peak Detection Settings 对话框显示。该对话框包含方法中定义的检测设置。



编辑批次中的所有样品

只编辑选中样品



2. 编辑任意检测设置。

有关所有检测设置的详细说明，参阅 *TraceFinder User Guide* 中的“Using the Analysis Mode”模式。

3. 若要保存对这个化合物的修改，单击 **Apply**（应用）。

- 当编辑单个样品时，应用程序修改这个样品的选中化合物。如果样品是校正样品类型，这个更新修改校正曲线，而校正曲线影响所有计算量。
- 当编辑本地方法时，应用程序修改这个批次所有样品的选中化合物。

Qual Mode

利用 Qual Mode 和相关的峰窗格查看定量信息以补充所选 Specimen/Qual 样品的文本信息。Qual Mode 视图显示所选样品的检测峰，并允许用户手动添加峰。Qual Mode 视图仅对 Specimen/Qual 样品类型可用。

除了样品列表，Qual Mode 视图显示以下窗格数据，包括峰列表，色谱图导航窗格，定性峰窗格，质谱图窗格（参考和选中）和排序窗格。



提示 要调整窗口的大小，可拖动分隔窗格的分隔线。

峰列表

同时使用峰列表和样品列表以显示唯一的样品和峰组合的图形值。

Filter: + c Full ms [35.00-500.00]						
	Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Compound
▶	7.95	370	892	0	0.000	Hydrogen bromide
	9.60	341	857	0	0.000	2,5-Cyclohexadien-1-one,
	11.18	910	915	52	0.000	Pyrene
	12.52	557	739	26	0.000	9,10-Anthracenedione, 1,4

有关峰列表参数的说明，参阅“[峰列表参数](#)”。

❖ 若要显示特定化合物的峰

1. 在样品列表中，选中一个样品。

注释 若选择了除 Specimen/Qual 以外的样品类型，TraceFinder 应用程序将返回至 Quan Mode。Quan Mode 不会显示峰窗格。

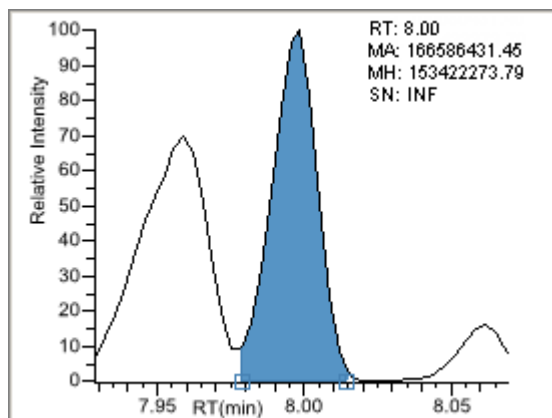
峰列表中列出了所选样品中识别出的峰的保留时间，每个峰的最佳匹配方法的值以及化合物匹配结果。

该方法指定列出峰的数量。可以在 Method Template Editor（方法模板编辑器）中更改已识别峰的数目。

2. 从峰列表选择样品的某个峰。

	Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Compound
▶	7.95	370	892	0	0.000	Hydrogen bromide
	9.60	341	857	0	0.000	2,5-Cyclohexadien-1-one,
	11.18	910	915	52	0.000	Pyrene

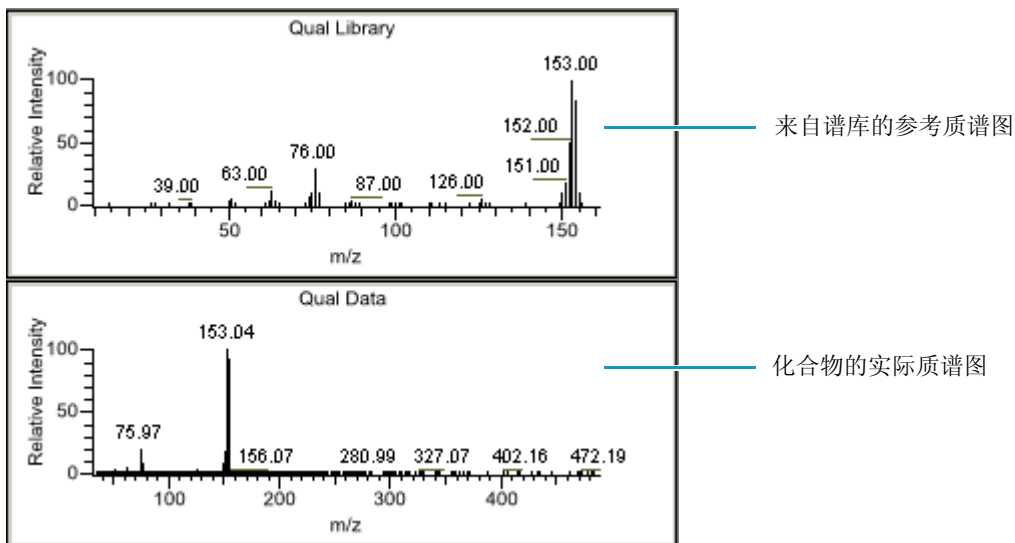
TraceFinder 应用程序在定性峰窗格中显示所选峰。



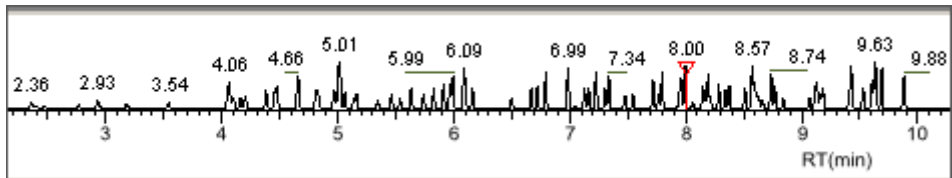
当选择数据依赖样品时，峰可以来自全扫描或 SRM- 过滤色谱图的 QED 质谱图。

TraceFinder 应用程序显示包含两部分的 Spectra 窗格：

- **Qual Data**（定性数据）窗格显示原始数据文件中峰的质谱图数据。
- **Qual Library**（定性库）窗格显示已识别库化合物的实际质谱图。



TraceFinder 应用程序在导航色谱图中找到所选峰。



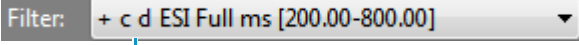
❖ 若要移除峰

1. 选择峰列表中的一个峰。
2. 右击并在快捷菜单中选择 **Remove Selected Peak**（移除所选峰）。

TraceFinder 应用程序从峰列表中移除所选峰。

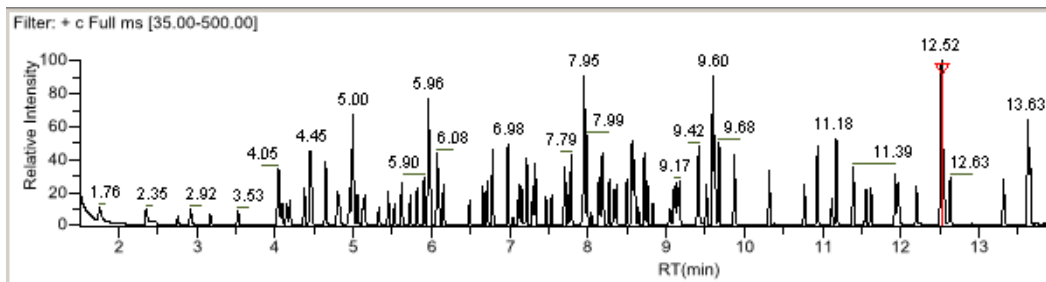
注释 无法撤销该操作，但可以通过手动添加峰来重新定义一个已移除的峰。
参阅第 14 页的“若要手动添加峰”。

表 1. 峰列表参数

命令	描述
Filter（过滤器）	用于识别峰的过滤器。在原始数据文件或主方法中指定。 当原始数据文件为数据依赖时，过滤器以“d”指示：  数据依赖过滤器
Peak RT（峰保留时间）	峰保留时间。进样后某个化合物洗脱的时间。该时间为该化合物保留在色谱柱中的总时间。
SI（检索索引）	用于检索 NIST 库的检索索引方法。
RSI（反向检索索引）	用于检索 NIST 库的反向检索索引方法。
MP（匹配概率）	匹配概率。
Compound（化合物）	匹配已识别峰的库化合物。
Remove Selected Peak （移除所选峰）	从峰列表中移除所选峰的快捷菜单命令。

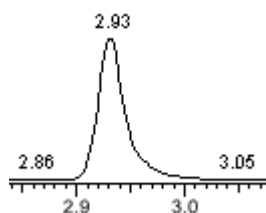
色谱图导航窗格

色谱图导航窗格显示所选样品中的所有峰。应用程序将峰窗格中选择的峰显示为红色标记。



❖ 若要手动添加峰

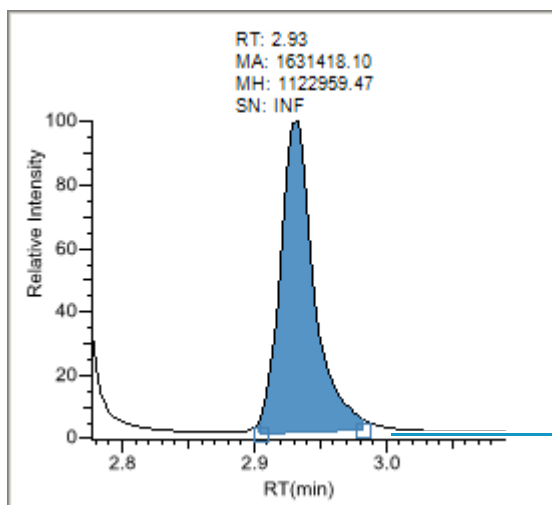
1. 放大以利于识别希望添加到结果组中的峰。



2. 右键单击色谱图导航窗格，然后从快捷菜单中选择 **Add Peak**。
3. 单击以标示峰的左右基线点。

TraceFinder 应用程序在色谱图导航窗格中标记峰。

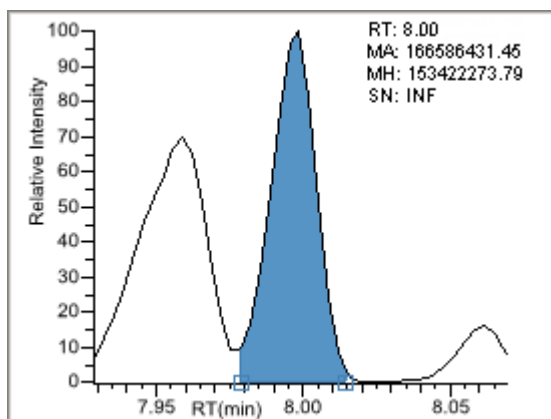
TraceFinder 应用程序将峰分隔符标记置于基线点位置，且自动更新峰窗格和定性峰窗格中的峰值。



	Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Compound
▶	2.93	235	870	0	0.000	Benzene, nitro-
	3.01	213	944	0	0.000	Benzene, nitro-
	3.15	102	792	0	0.000	Pyrazinamide

定性峰窗格

定性峰窗格显示所选峰。

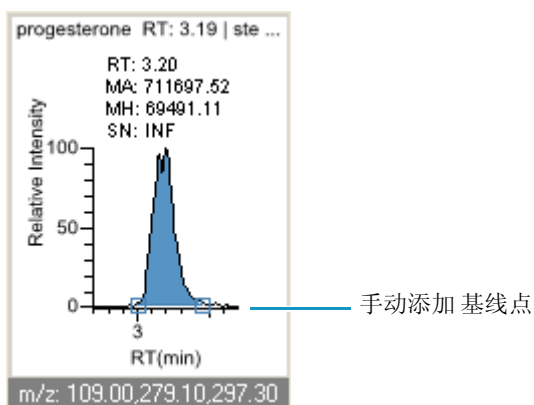


❖ 若要放大峰

1. 在色谱图中，拖动光标在峰周围画一个长方形。
画出的区域会扩大以填满视图。
2. 若要恢复默认视图，可右击色谱图，然后从快捷菜单中选择 **Reset Scaling**（重置缩放比例）。

❖ 若要手动添加峰

1. 在定性峰窗格中右键单击任意位置，然后从快捷菜单中选择 **Add Peak**。
仅当应用程序没有检测到峰时，Add Peak 命令可用。
2. 单击以标示峰的左右基线点。
应用程序将峰分隔符标签放在这些位置，并自动更新结果中的峰值（峰面积，峰高等）。



❖ 若要移除峰

右键单击色谱图，然后从快捷菜单中选择 **Remove Peak**。

TraceFinder 应用程序移除定性峰窗格中显示的峰。它从 Qual Mode 窗格中移除该峰的所有数据。

❖ 若要在方法积分和手动积分模式之间切换

右击色谱图视图，然后从快捷菜单中选择 **Method Integration** 或 **Manual Integration**。

最初，保存以用于化合物和文件的方法和手动积分设置是相同的，并选择一种不影响保存的结果集的模式。然而，若可以使用手动数据，当在方法和手动模式之间转换时，色谱图和结果将随之更新。

随着在两种模式之间的切换，每个窗格都反映出更改。此数据所生成的报告可识别手动修改。

❖ 若要更改已检测峰的显示信息

1. 右键单击定量色谱图，然后将光标停留在 **Peak Labels** 显示标签选项。
2. 选择显示峰保留时间，峰高，峰面积或信噪比的标签。

为显示标签选择列表中的标签类型，并清除未显示标签的标签类型。

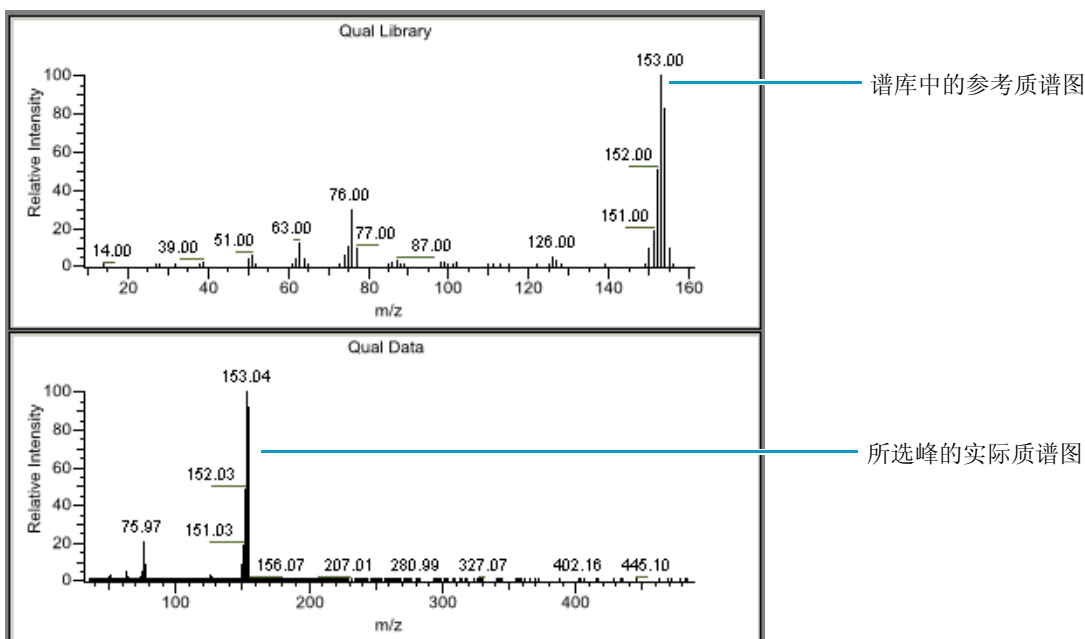
3. 若要删除标签，再次选择标签类型并将其清除。

标签设置对定性峰，确认峰和内标峰均适用。

提示 并非所有峰显示的标签总能及时更新。若要更新所有标签，先选择一个不同的化合物，然后选择更改过标签的化合物。

质谱图窗格（参考和选中）

质谱图窗格显示所选样品的参考质谱图和质谱图。顶部窗格显示库中已识别化合物的参考质谱图。底部窗格显示所选峰的质谱图。



排序窗格

排序窗格显示所选峰的三个最佳库匹配。利用该窗格选中该峰的另一个库条目。

	Rank	SI	RSI	MP	Library entry
☒	1	102	792	0	Pyrazinamide
☐	2	183	791	3	Methanesulfonic acid, 1-methylethyl ester
☐	3	174	760	2	2-Pyrimidinamine, 4,6-dimethyl-

有关排序窗格参数的说明，参阅[排序窗格参数](#)。

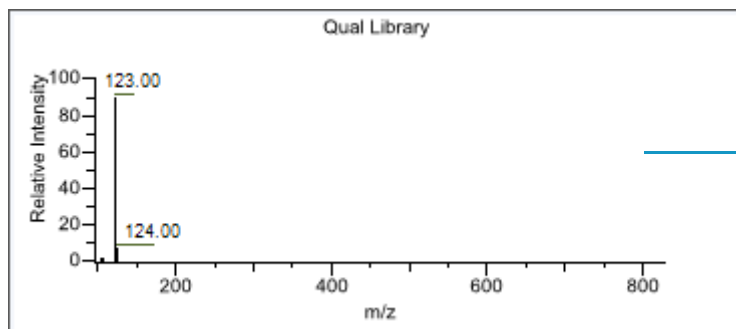
❖ 若要更改所选峰的库条目

在排序窗格中，选中希望用于识别所选峰的库条目的复选框。

- 在质谱图窗格中，参考质谱图改为显示所选库条目的质谱图。
- 在峰窗格中，SI，RSI，MP 和 Library Entry 值更新为所选库条目的相关值。

	Rank	SI	RSI	MP	Library entry
☒	1	102	792	0	Pyrazinamide
☐	2	183	791	3	Methanesulfonic acid, 1-methylethyl ester
☐	3	174	760	2	2-Pyrimidinamine, 4,6-dimethyl-

排序窗格中的所选库条目



二氢苊的参考质谱图

	Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Compound
	3.01	213	944	0	0.000	Benzene, nitro-
☒	3.15	102	792	0	0.000	Pyrazinamide
	3.67	242	923	2	0.000	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-

吡嗪酰胺峰列表

表 2. 排序窗格参数

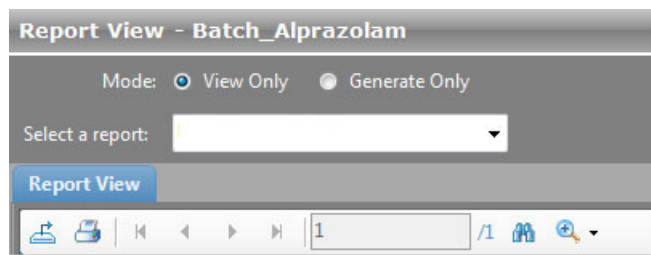
命令	描述
<Check box column> (< 复选框列 >)	代表所选峰的选中库条目。
Rank (排序)	代表所选峰和库条目之间最佳匹配项的次序。
SI (检索索引)	用于检索 NIST 库的检索索引方法。
RSI (反向检索索引)	用于检索 NIST 库的反向检索索引方法。
MP (匹配概率)	匹配概率。
Library Entry (库条目)	匹配已识别峰的库化合物。

在 Analysis 模式的 Report View（报告视图）中，可以显示或生成当前所选批次的报告。必须在能够查看或生成样品的样品水平报告之前处理批次中的每个样品。

❖ 若要打开 Report View

单击导航窗格的 **Report View**。

从 Report View 中可以查看报告或生成批次的报告。



- **View Only**（仅查看）：显示批次，样品或化合物的所选报告类型的 PDF 文件或 Microsoft™ Excel™ 电子数据表预览。参阅“[查看报告](#)”。

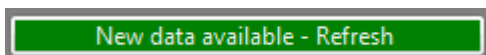
所有 Standard（标准）样品报告的预览报告总是可用。必须在生成 Custom（自定义）和 Target Screening（目标筛选）报告类型之后，才能查看这些报告。

Report View 页面显示以下其中一种报告输出格式：

- 保存为 PDF 文件的 Standard 报告
- XLSM 格式的 Custom 报告
- 保存为 PDF 文件的 Target Screening 报告
- **Generate Only**（仅生成）：为所选报告创建所有指定的报告输出格式。参阅第 27 页的“[生成报告](#)”。

❖ 若要刷新 Report View

如果修改了报告，单击 **New Data Available - Refresh**（新数据可用 - 刷新）。



查看报告

利用 View Only 特性查看所有已配置的标准报告和任意已生成的自定义或目标筛选报告。在用户生成一个报告之后，应用程序在 View Only 报告列表中显示该报告。

❖ 若要选择报告

1. 选中 **View Only** 选项。
2. 打开 Select a Report（选择报告）列表显示所有已配置的报告类型。

Report Name	Type	Requires
Batch Report	Standard	
Blank Report	Standard	Sample
Compound Calibration Report	Standard	Compound
Confirmation Report	Standard	Sample, Compound
Filter Reports		
☐ Only show automated batch reports		
☒ Standard reports ☒ Custom reports ☒ Target Screening reports		

这些报告反映了 Configuration（配置）模式中的 Displayed Reports（已显示报告）选择。

（可选）若要对报告排序，点击列标题。应用程序在用户每次打开该批次的 Report View 时都保持该排序顺序。

（可选）若要帮助组织报告，可以过滤该列表。

（可选）可以选择过滤选项的任何组合。

表 3. Filter Reports（过滤报告）选项

选项	操作
Only Show Automated Batch Reports （仅显示自动批次报告）	仅显示在 Batch View 的 Automated Batch Reports （自动批次报告）区域指定输出格式的报告。
Standard Reports（标准报告）	显示 Standard 报告类型。
Custom Reports（自定义报告）	显示 Custom 报告类型。
Target Screening Reports （目标筛选报告）	显示 Target Screening 报告类型。

3. 双击报告名称。

报告列表关闭。

- 当所选报告为批次水平报告时，应用程序在 **Report View** 页面显示报告。

当所选报告包括每个样品对应的独立报告时，必须选择一个样品文件。

遵照步骤“若要选择一个样品”。进行操作。

Select a report:

TIC Summary Report

▼

Sample file:

▼

- 当所选报告包括每个化合物对应的独立报告时，必须选择一个化合物。

遵照步骤第 26 页的“若要选择化合物”进行操作。

Select a report:

Compound Calibration Report

▼

Compound:

▼

- 当所选报告包括样品中每个样品和每个化合物对应的独立报告时，必须同时选中样品和化合物。遵照步骤“若要选择样品和化合物”。进行操作。

Select a report:

Confirmation

▼

Sample file:

▼

Compound:

▼

❖ 若要选择一个样品

1. 打开 Sample File（样品文件）列表显示批次中的所有样品。

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA1	1	Specimen
UnknownA2	2	Specimen
UnknownA3	3	Specimen

Filter Samples

☒ Only show samples relevant to the selected report.

若仅显示包括在所选报告中的样品，选中 **Only Show Samples Relevant...**（仅显示相关样品 ...）复选框。

例如，若选择 Quality Control Report（质量控制报告），则样品列表仅显示 QC 样品。

点击列标题对样品进行排序。应用程序在用户每次打开该批次的 Report View 时都保持该排序顺序。

2. 双击样品名称。

样品列表关闭。Report View 页面显示样品水平报告。

❖ 若要选择化合物

1. 打开 Compound （化合物）列表显示样品中所有化合物的名称和保留时间。

RT	Compound Name
	All Compounds
3.14	Propanenitrile
3.15	Pyrazinamide
3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-

2. 双击某个化合物或 **All Compounds** （所有化合物）。
化合物列表关闭。 Report View 页面显示化合物水平报告。

❖ 若要选择样品和化合物

1. 打开 Sample File 列表显示批次中的所有样品。

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA1	1	Specimen
UnknownA2	2	Specimen
UnknownA3	3	Specimen

Filter Samples —

☐ Only show samples relevant to the selected report.

2. 若仅显示包括在所选报告中的样品，选中 **Only Show Samples Relevant...** 复选框。
例如，若选择 Quality Control Report，则样品列表仅显示 QC 样品。
若要对报告排序，点击列标题。应用程序在用户每次打开该批次的 Report View 时都保持该排序顺序。
3. 双击样品名称。
样品列表关闭。
4. 打开 Compound 列表显示样品中所有化合物的名称和保留时间。

RT	Compound Name
	All Compounds
3.14	Propanenitrile
3.15	Pyrazinamide
3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-

5. 双击某个化合物或 **All Compounds**。
化合物列表关闭。 Report View 页面显示所选样品和化合物的化合物水平报告。

生成报告

利用 Generate Only 特性创建样品水平报告。无法使用 View Only 特性在报告生成之前查看自定义或目标筛选报告。当对 Local Method （本地方法）视图中的方法或 Data Review 视图中的峰作出更改时，必须重新生成自定义或目标筛选报告以查看这些更改的效果。

❖ 若要选择报告

- 1. 选中 **Generate Only** 选项。
- 2. 打开 Select a Report 列表显示可用的报告。

Report Name	Type	Requires
Blank Report	Standard	Sample
Chromatogram Report	Standard	Sample
ConfirmationReport	Custom	Sample
ConfirmationReport2	Custom	Sample

Filter Reports

☐ Only show automated batch reports

☒ Standard reports ☒ Custom reports ☒ Target Screening reports

- 应用程序在列表中仅显示已配置的样品水平报告。无法从该视图生成批次水平或化合物水平报告。
- 若报告数量多，可以过滤该列表。
- 3. 若要限制希望显示在报告列表中的报告类型，在 Filter Reports 区域中选中任意报告过滤器选项的组合。
- 有关 Filter Reports 选项的描述，参阅第 25 页的“Filter Reports （过滤报告）选项”。
- 4. 双击报告名称。
- 报告列表关闭。

- 当所选报告为批次水平报告时，应用程序生成报告并在 **Report View** 页面显示报告。
- 当所选报告包括每个样品对应的独立报告时，必须选择一个样品文件。

Select a report:

TIC Summary Report

▼

Sample file:

▼

❖ 若要选择一个样品

1. 打开 Sample File 列表显示批次中的所有样品。

Select	Sample Name	Sample ID	Sample Type
☐	UnknownA1	1	Specimen/Qual
☐	UnknownA2	2	Specimen/Qual
☐	UnknownA3	3	Specimen/Qual

Filter Samples
☐ Only show samples relevant to the selected report.

2. 若要仅显示将包括在所选报告中的样品，选中 **Only Show Samples Relevant...** 复选框。
例如，若选择 Quality Control Report，则样品列表仅显示 QC 样品。
若要对报告排序，点击列标题。应用程序在用户每次打开该批次的 Report View 时都保持该排序顺序。
3. 选中每个希望包括在报告中的样品的复选框。
4. 点击 **Generate**（生成）。

Report Selection Confirmation（报告选择确认）对话框打开。

Report Selection Confirmation

×

You have selected the following report for generation: Blank Report

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA2	2	

What action would you like to perform?

☒ Print to default printer
☒ Generate PDF
☒ Generate XLSM
☐ Generate XML

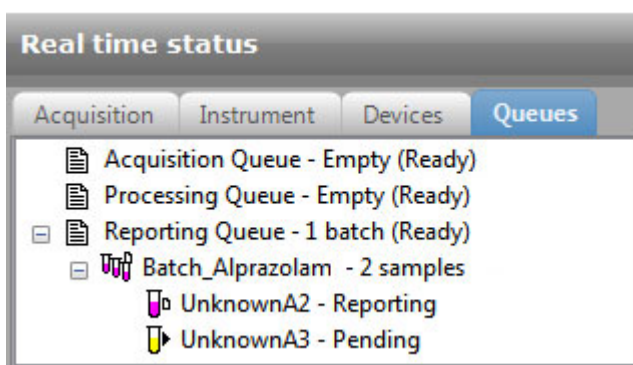
Cancel Continue

5. 在 What Action Would You Like to Perform（希望执行的操作）区域，选择想要创建的报告类型。

注释 应用程序自动选择所需输出格式。这些选项不可编辑。

样品列表关闭。Report View 页面生成并显示样品水平报告。

6. 单击 **Continue**（继续）。
应用程序将所选样品提交至报告队列。



当已经在 Batch View 或 Acquisition Mode（采集模式）中生成该报告时，应用程序对新报告加时间戳，以与原始报告进行区分。

使用报告

利用 Report View 页面上的按钮来查看、打印或导出报告。

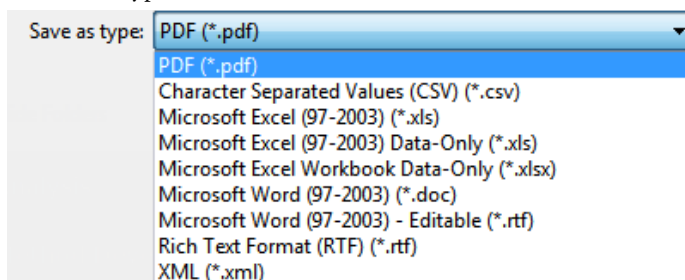
- PDF 文件报告视图对所有 Standard 和 Target Screening 报告类型可用。
- Excel Macro-Enabled Workbook (Excel 宏启用工作簿) 报告视图对选中 Generate XLSM (生成 XLSM) 选项时生成的任意 Custom 报告类型可用。

❖ 若要打印标准或目标筛选报告

1. 从 Select a Report 列表中选择要打印的报告。
2. (可选) 从 Sample File 列表选择一个样品。
应用程序在 Report View 页面上显示报告。
3. 单击 **Print Report** (打印报告) 按钮, 。
默认打印机的 Print (打印) 对话框打开。
4. 遵循打印机的一般程序打印报告。
横向报告将自动旋转以调整至适合纸张的尺寸。

❖ 若要导出标准报告

1. 从 Select a Report 列表中选择要打印的报告。
2. (可选) 从 Sample File 列表选择一个样品。
应用程序在 Report View 页面上显示报告。
3. 单击 **Export Report** (导出报告) 按钮, 。
4. 在 Export Report 对话框中找到准备写入报告文件的文件夹。
5. 输入导出报告文件的文件名。
6. 从 Save as Type (另存为类型) 列表选择一个文件类型。



7. 单击 **Save**。
TraceFinder 应用程序将文件保存为指定文件类型并将报告文件写入指定文件夹。

❖ 若要搜索文本

1. 从 Select a Report 列表选择一个报告。
2. 单击 **Find Text** (查找文本) 图标, 。
3. 在 Find Text 对话框中输入文本, 然后单击 **Find Next** (查找下一个)。
TraceFinder 应用程序用红色框圈出检索结果。

Sample ID

APN001

APN002

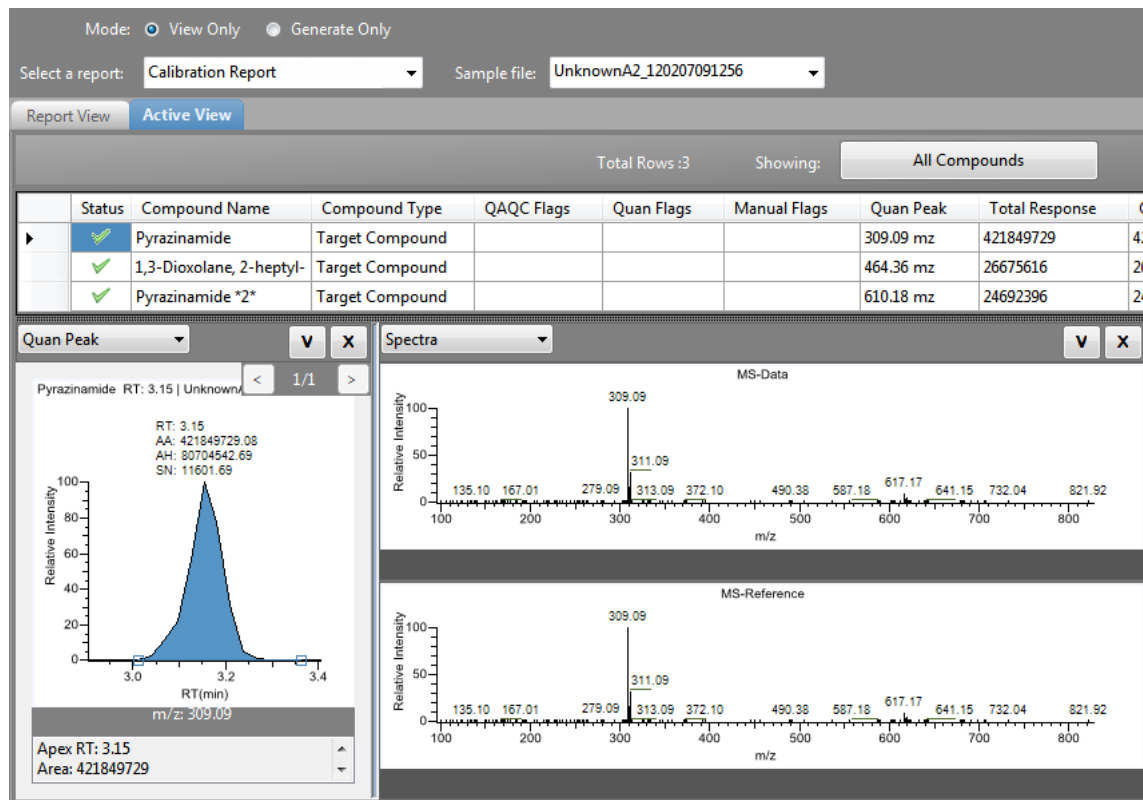
APN003

❖ 若要放大报告文本

1. 从 Select a Report 列表选择一个报告。
2. 单击 **Zoom** (缩放) 图标, , 然后选择缩放比例。

Active View

利用 Active View（活动视图）页面查看报告中每个样品的定量数据。Active View 显示带有标记信息的数据。这些标记基于批次数据与主方法中定义的标准之间的比较。



并非所有报告支持 Active View 功能。有关 Active View 页面上的所有功能和参数说明，了解支持 Active View 的每个报告，参阅 *TraceFinder User Guide* 的“Using the Analysis Mode”章节。

❖ 若要显示 Active View 页面

点击 **Active View** 选项卡。

Active View 页面显示每个样品的定量数据和 QAQC（质保质控）错误标记。

❖ 若要显示报告

1. 从 Select a Report 列表中选择报告类型。
该列表仅显示为当前批次创建的报告类型。
- 2.（可选）若报告类型包含与每个样品对应的独立报告，则选择一个样品文件。

Select a report: **Chromatogram Report** Sample file: **UnknownA2**

❖ 若要利用 Showing 按钮过滤显示的化合物

单击 Showing（显示）：**All Compounds/Flagged Compounds Only**（所有化合物 / 仅标记化合物）在过滤所有化合物，或者只过滤某个未通过 QAQC 测试中标记的化合物之间切换。

Showing: **All Compounds** Showing: **Flagged Compounds Only**

Local Method 视图

在 Analysis 模式的 Local Method 视图中，可以仅编辑方法的本地副本，或编辑主方法，然后以已编辑主方法覆盖本地副本。当前方法为与批次关联的主方法的副本。编辑本地方法不会影响主方法中的参数。

❖ 若要打开 Local Method 视图

单击位于导航窗格的 **Local Method**。

Local Method 视图的 General（常规）页面显示。从 Local Method 视图中，可按照与访问主方法参数一样的方式访问本地方法的参数。

将本地方法命名为 *BatchName_MasterMethodName*。

❖ 若要编辑本地方法

1. 输入对本地方法的任何更改。

更多有关编辑方法的说明，参阅 *TraceFinder User Guide* 中的“Using the Method Development Mode（使用方法开发模式）”章节。

2. 选择 **File（文件）> Save（保存）**。

3. 使用经过编辑的本地方法处理批次或创建新报告，需返回至 Batch View 视图并提交批次。

Local Method View - Batch_Alprazolam_Method_Alprazolam

Master method: [Method_Alprazolam](#)

General | Compounds | QAQC | Groups | Reports

Lab name: Default Laboratory

Assay type: Assay name

Injection volume: 10.00

Ion range calc method: Manual

Instrument method: Instrument1

Qualitative peak processing template: Default

Background subtraction range option: None

Number of scans to subtract: 1

Steppoff value: 0

Set chromatogram reference sample: None

Set Reference sample:

Mass Tolerance: 500.0

MMU PPM

Edit Update

Select

Apply

利用 Quick Acquisition（快速采集）特性可以从 Analysis 模式的任意视图快速提交单个样品。

注释 仅当在 Configuration 模式中启用时，Quick Acquisition 特性才可用。

❖ 若要运行快速采集

1. 从主菜单中选择 **Go（运行） > Quick Acquire Sample（快速采集样品）**。

Quick Acquisition 对话框打开。

The image shows the 'Quick Acquisition' dialog box. It has a title bar with a close button. Inside, there are several input fields: 'Instrument method' (a dropdown menu), 'Raw filename' (a text box), 'Path' (a text box with 'C:\Xcalibur\' entered and a browse button), and 'Sample comment' (a text box). Below these are two radio buttons: 'Manual injection' and 'Use autosampler'. The 'Use autosampler' option is selected. Below the radio buttons are two more text boxes: 'Vial position' (with '1' entered) and 'Injection volume' (with '1' entered). At the bottom are 'OK' and 'Cancel' buttons.

2. 选择仪器方法。
3. 输入采集的原始数据文件名。
4. 点击浏览按钮，然后找到希望保存已采集原始数据文件的文件夹。
5. 选择手动进样或自动进样器选项：

若要指定手动进样，执行以下操作：

- a. 选中 **Manual Injection（手动进样）** 选项。
- b. 单击 **OK**。

应用程序将样品提交至 Acquisition（采集）队列。

若要执行自动进样器进样，执行以下操作：

- a. 选中 **Use Autosampler（采用自动进样器）** 选项。
- b. 在 Vial Position 框中键入样品瓶位置。
- c. 在 Injection Volume 框中键入进样体积。

允许的最小进样体积为 0.1 μL ；允许的最大进样体积为 5000 μL 。

- d. 单击 **OK**。

Quick Acquisition 对话框打开。

The image shows the 'Quick Acquisition' dialog box with the 'Acquisition' tab selected. At the top is a 'User name' text box. Below it is a table with three columns: 'Device Name', 'Use', and 'Start Device'. The first row contains 'Accela AS', a checked checkbox under 'Use', and an unchecked checkbox under 'Start Device'. Below the table are two checked checkboxes: 'Start when ready' and 'Priority'. At the bottom is a 'Post-run system state' dropdown menu set to 'On'. 'OK' and 'Cancel' buttons are at the very bottom.

- e. 选择要在本次采集中所用设备的 **Use（使用）** 复选框。
- f. （可选）选择 **Start Device（启动设备）** 复选框表示该设备用于触发其它仪器。这通常是自动进样器。

术语表

- g. (可选) 选中 **Start When Ready** (准备就绪时启动) 复选框, 指示应用程序在所有仪器准备就绪时将其全部启动。
若清除此选项, 则各台仪器会分别启动并等待最后一台仪器准备就绪。
- h. (可选) 选中 **Priority** (优先级) 复选框在当前采集样品后立即放置样品。
- i. (可选) 选择 **Post-run System State** (运行后仪器状态) 的值: **Unknown** (未知), **On** (开机) (默认), **Off** (关机) 或者 **Standby** (待机)。
应用程序在采集完最后的样品后将系统设置为该状态。
- j. 单击 **OK**。
应用程序将样品提交至 Acquisition 队列。

A

Acquisition 采集

Acquisition Mode 采集模式

Active 活动

Active View 活动视图

Add a Panel 添加窗格

Add Peak 添加峰

Add Sample 添加样品

All Compounds 所有化合物

All Compounds/Flagged Compounds Only 所有化合物 / 仅标记 化合物

Analysis 分析

Appended to the End of the List 附加到列表末尾

Apply 应用

Automated Batch Reports 自动批次报告

Available Columns 可用列

B

Batch 批次

Batch View 批次视图

Blank 空白样

Browse 浏览

Browse in Raw File 浏览原始文件

C

Calibration Curve 校正曲线

Calibration Levels 校正水平

Calibrator 校正品

Check box column 复选框列

Compounds Active Status 化合物活动状态

Compounds/Compound 化合物

Configuration 配置

Confirming Ions 确认离子

Continue 继续

Conversion Factor 转换系数

Create a New Batch 创建新批次

Create Reports 创建报告

Custom 自定义

Custom Reports 自定义报告

D

Data Review 数据查看

Dil Factor 稀释因子

Displayed Columns 显示列

Displayed Reports 已显示报告

Down 向下

E

Edit Local Method Peak Detection Settings 编辑本地方法峰检测设置

Edit User Defined Peak Detection Settings 编辑用户定义峰检测设置

Excel Macro-Enabled Workbook Excel 宏启用工作簿

Excluded 已排除

Export Report 导出报告

F

File 文件

Filename 文件名

Filter 过滤器

Filter Reports 过滤报告

Find Next 查找下一个

Find Text 查找文本

Flags 标记

G

General 常规

Generate 生成

Generate Only 仅生成

Generate XLSM 生成 XLSM

Go 运行

H

Hydrolysis 水解

I

Import 导入

Import Samples 导入样品

Imported Samples Will Be 导入样品将被

Inj Vol/Injection Volume 进样体积

Insert Copy Sample 插入复制样品

Insert Sample 插入样品

Inserted at the Selected Row 插入到所选行

Ion Overlay 离子重叠

ISTD 内标

L

Level 水平

Library Entry 库条目

Local Method 本地方法

M

Make All Panels the Same Size 使所有窗格同尺寸

Manual Injection 手动进样

Manual Integration Settings 手动积分设置

Method 方法

Method Development 方法开发

Method Integration Settings 方法积分设置

Method Template Editor 方法模板编辑器

Modify Columns 修改列

Move Panel Left or Right 使窗格左移或右移

MP 匹配概率

N

Negative 阴性

New 新建

New Batch 新批次

New Data Available - Refresh 新数据可用 - 刷新

No Confirming Ions are Enabled 没有启用确认离子

No Data 没有数据

Not Available 不可用

O

Off 关机

OK 确定

On 开机

Only Show Automated Batch Reports 仅显示自动批次报告

Only Show Samples Relevant... 仅显示相关样品 ...

P

Peak Detection Settings 峰检测设置

Peak Labels 峰标签

Peak RT (min) 峰保留时间 (分钟)

Peaks 峰

Position 位置

Post-run System State 运行后仪器状态

Print 打印

Print Report 打印报告

Priority 优先级

Project 项目

Q

QAQC 质保质控

QC 质控样

Qual Data 定性数据

Qual Library 定性库

Qual Mode 定性模式

Qualification 定性

Quality Control Report 质量控制报告

Quan Mode 定量模式

Quantification Peak/Quan Peak 定量峰

Quick Acquire Sample 快速采集样品

Quick Acquisition 快速采集

R

Rank 排序

Recent Files 最近文件

Reference Peak 参考峰

Reinject This Sample 重新进样

Remove Peak 移除峰

Remove Selected Peak 移除所选峰

Remove Selected Samples 移除所选样品

Report Selection Confirmation 报告选择确认

Report View 报告视图

Reset Scaling 重置缩放比例

RSI 反向检索索引

S

Sample File 样品文件

Sample Import Tool 样品导入工具

Sample Type 样品类型

Sample/Samples 样品

Sample List 样品列表

Save 保存

Save as Type 另存为类型

Select a Report 选择报告

Showing 显示

SI 检索索引

Solvent 溶剂

Sort By Alphabetical 按字母顺序排序

Sort By Flag And Alphabetical 按标记和字母顺序排序

Sort By Flag And Retention Time 按标记和保留时间排序

Sort By Retention Time 按保留时间排序

Specimen 定量样品

Specimen/Qual 样品 / 定性

Spectra 质谱图

Standard 标准

Standard Reports 标准报告

Standby 待机

Start Device 启动设备

Start When Ready 准备就绪时启动

Status 状态

Std Bracket 标曲更新

Storage Location 存储位置

Submit Batch 提交批次

Submit Options 提交选项

Submit Selected Samples 提交所选样品

T

Target Screening 目标筛选

Target Screening Reports 目标筛选报告

Technician 技术人员

TraceFinder User Guide TraceFinder 用户手册

U

Unextracted 未提取

Unknown 未知样

Up 向上

Update 更新

Use 使用

Use Autosampler 采用自动进样器

Using the Analysis Mode 使用分析模式

Using the Configuration Mode 使用配置模式

Using the Method Development Mode 使用方法开发模式

商标

V

Vial Position 样品瓶位置

View Only 仅查看

W

What Action Would You Like to Perform 希望执行的操作

Z

Zoom 缩放

TraceFinder 是一个商标。而 Xcalibur 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的注册商标。
Excel 和 Microsoft 是 Microsoft Corporation 在美国和其它国家（地区）的注册商标。