

# TraceFinder 采集快速参考手册

这本快速参考手册说明了 Thermo TraceFinder™ 分析软件的 Acquisition Batch Wizard（采集批次向导）任务。

## 目录

- 采集模式
- 选择批次
- 定义 样品列表
- 选择和检查报告
- 提交批次
- 快速采集
- 商标

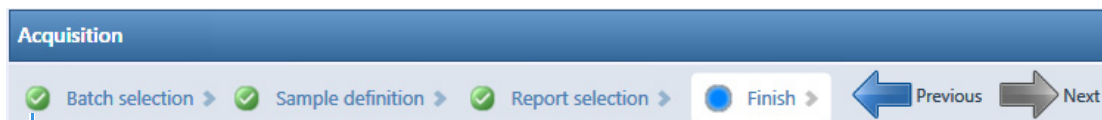
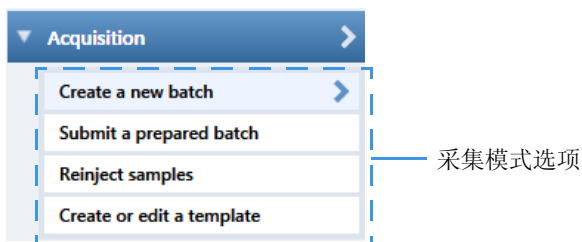
## 采集模式

### ❖ 若要打开 Acquisition（采集）模式

点击导航窗格上的 **Acquisition**。

**Acquisition**

**注释** 仅当在 Configuration（配置）控制台中选择 Acquisition Batch Wizard 时，该模式才可用。



当完成每个任务时任务窗格的示例

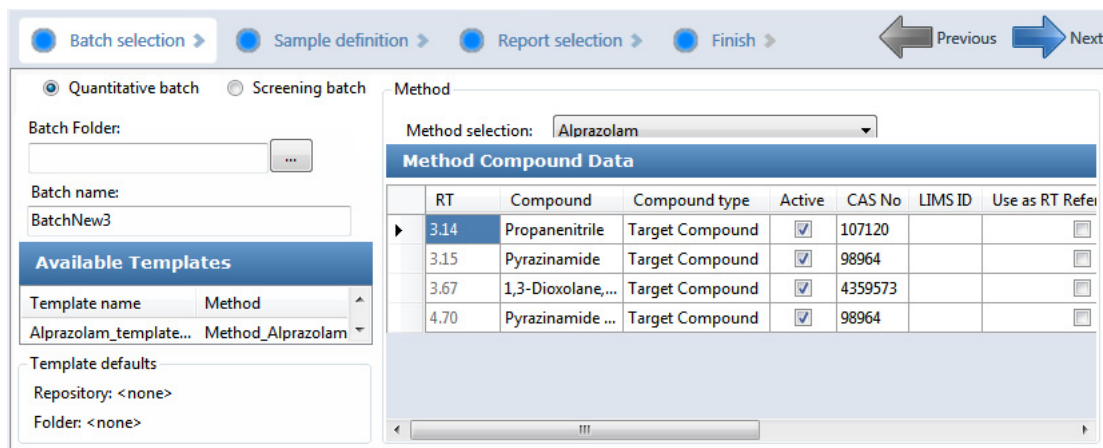
## 选择批次

在 Acquisition 模式的 Batch Selection（批次选择）视图中，可以在任意当前项目中创建一个新批次，或使用批次模板启动一个新批次。

### ❖ 若要开始新批次

1. 在导航窗格中，点击 **Create a New Batch（创建一个新批次）**。
2. 选择 **Quantitative Batch（定量批次）** 或 **Screening Batch（筛选批次）** 选项。
3. 选择要创建新批次所在的批次文件夹。
4. 在 Batch Name（批次名称）框中为新批次输入唯一的名称。
5. 从 Method Selection（方法选择）列表选择一个方法。

Method Compound Data（方法化合物数据）窗格显示该方法中的化合物。在 Acquisition 模式下无法编辑化合物列表。



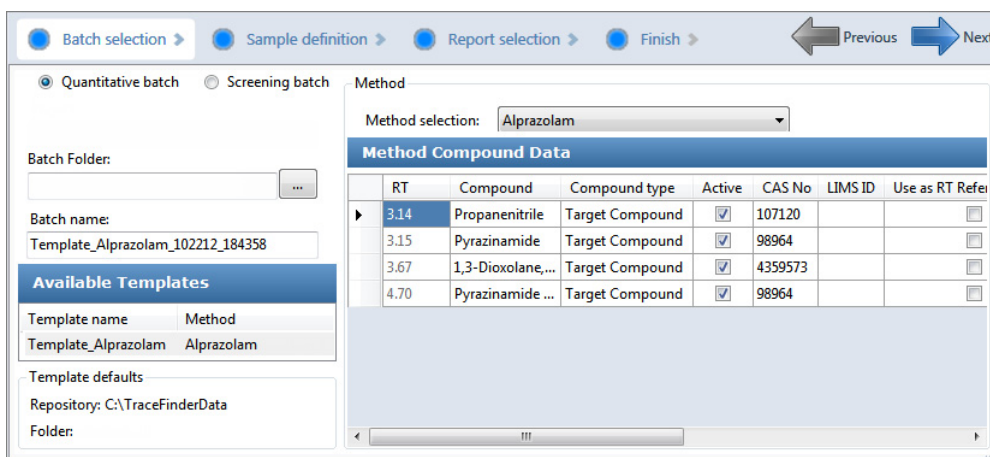
6. 若要继续到下一个页面，点击 **Next（下一步）**。  
Sample Definition（样品定义）视图显示。参阅第 5 页上的“定义样品列表”。

### ❖ 若要使用模板创建新批次

1. 在导航窗格中，点击 **Create a New Batch**。
2. 选择 **Quantitative Batch** 或 **Screening Batch** 选项。
3. 在 Available Templates（可用模板）窗格中选择要采用的模板和方法组合。

系统使用所选的模板名称和日期 / 时间戳创建批次名称。应用程序选择默认项目、子项目和与模板相关的方法。

- 4.（可选）选择要创建新批次所在的不同的批次文件夹。
- 5.（可选）为新批次选择不同方法。



6. 若要继续到下一个页面，点击 **Next**。  
Sample Definition 视图显示。参阅第 5 页上的“定义样品列表”。

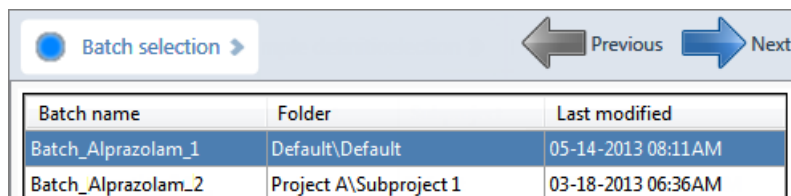
#### ❖ 若要选择已经准备好的批次

1. 在导航窗格中，点击 **Submit a Prepared Batch**（提交已准备的批次）。

应用程序显示所有未采集、已保存的批次。TraceFinder 应用程序会在下列文件夹内保存所有未采集的批次：

...\TraceFinderData\Projects\...

2. 选择要采集的批次。



Batch name	Folder	Last modified
Batch_Alprazolam_1	Default\Default	05-14-2013 08:11 AM
Batch_Alprazolam_2	Project A\Subproject 1	03-18-2013 06:36 AM

3. 若要继续到下一个页面，点击 **Next**。

Acquisition 模式的 Finish（完成）视图显示。在 Finish 视图中，可以保存批次、提交批次进行采集，或转到 Sample Definition 视图中编辑此批次的样品列表。


4. 执行下列操作之一：

- 若要准备待采集的批次，单击 **Submit（提交）**， Submit。  
有关详细说明，参阅第 11 页上的“提交批次”。

– 或 –

- 若要编辑样品列表，单击 **Previous（上一步）**。  
有关编辑样品列表的详细说明，参阅第 5 页上的“定义样品列表”。

– 或 –

- 若要保存批次便于以后采集，单击 **Save（保存）**， Save。

TraceFinder 应用程序保存批次，关闭 Acquisition 模式，并返回至用户最后一次使用的模式。

TraceFinder 应用程序在下列文件夹内保存批次：

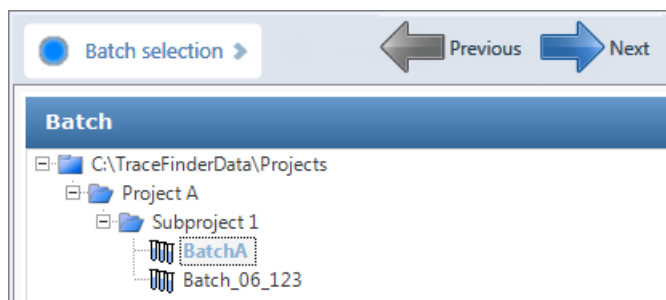
...\TraceFinderData\Projects\...

#### ❖ 若要重新进样以前已采集批次中的样品

1. 在导航窗格内，点击 **Reinject Samples**（重新进样）。

2. 在 Batch（批次）页面上，选择要重新采集的批次。


Batch 页面上显示所有以前已采集的定量和筛选批次。

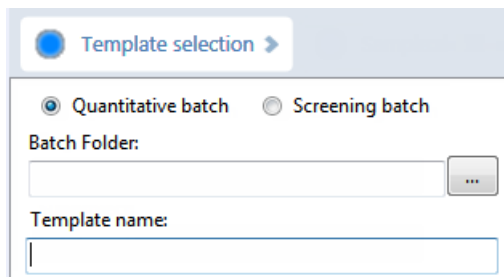


3. 若要继续到下一个页面，点击 **Next**。

Sample Definition 视图显示。参阅第 5 页上的“定义样品列表”。

#### ❖ 若要创建定量批次模板

1. 在导航窗格中，点击 **Create or Edit a Template**（创建或编辑模板）。  
从本页面，可以创建新的批次模板。
2. 选择 **Quantitative Batch** 选项。
3. 点击 ，选择要创建新批次模板所在的文件夹。
4. 在 Template Name（模板名称）框中为新批次模板键入名称。




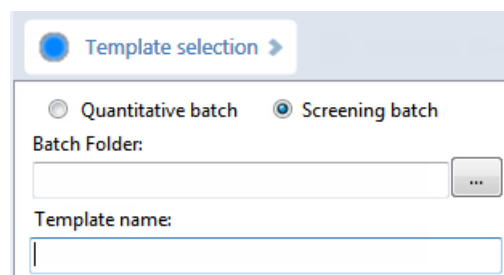
5. 从 Method Selection 列表选择一个方法。  
Method Compound Data 窗格显示该方法中的化合物。在 Acquisition 模式下无法编辑化合物列表。

Method					
Method selection:		Method_Alprazolam_1			
Method Compound Data					
	RT	Compound	Compound type	Active	CAS No
▶	3.14	Propanenitrile	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	107120
	3.15	EDIFENPHOS-CES-R20-T...	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	17109498

6. 若要继续到下一个页面，点击 **Next**。  
Sample Definition 视图显示。参阅[定义样品列表](#)。

#### ❖ 若要创建筛选批次模板

1. 在导航窗格中，点击 **Create or Edit a Template**。  
从 Template Selection（模板选择）页面，可以创建新的批次模板。
2. 选择 **Screening Batch** 选项。
3. 点击 ，选择要创建新批次模板所在的文件夹。
4. 在 Template Name 框中为新批次模板键入名称。



5. 从 Method Selection 列表选择一个方法。  
Method Compound Databases（方法化合物数据库）窗格显示已选方法可用的筛选数据库。
6. 选中想要用于筛选的每个数据库的复选框。
7. 若要继续到下一个页面，点击 **Next**。  
Sample Definition 视图显示。参阅[定义样品列表](#)。

## 定义 样品列表


在 Acquisition 模式的 Sample Definition 视图（参阅第 8 页上的“Sample Definition 页面”）上，可以创建批次的样品列表。可以在列表中添加或插入样品，导入样品列表或从列表中移除样品。

当输入样品值时，可以使用 Copy Down（向下复制）和 Fill Down（向下填充）命令快速输入列值。关于使用 Copy Down 和 Fill Down 命令输入列值的详细说明，参阅 *TraceFinder 用户手册*（*TraceFinder User Guide*）中的“使用向下复制和向下填充（Using Copy Down and Fill Down）”章节。

当完成样品列表的定义时，点击 **Next**。

- 如果是从草稿创建批次，或者从模板编辑批次，或编辑批次模板，则 Report Selection（报告选择）视图打开。参阅第 9 页上的“选择和检查报告”。
- 如果正在编辑已采集的批次或 .tbr 批次，则 Finish 视图打开。参阅第 11 页上的“提交批次”。

### ❖ 若要在列表中添加样品

1. 选择要添加的样品行数，然后点击 **Add（添加）**，。

**提示** 若要快速添加单样品行，右击样品列表然后从菜单中选择 **Add Sample（添加样品）**。

2. 为每个样品在 Filename（文件名）列中输入唯一文件名。
3. 在 Sample Type（样品类型）列表中选择每个样品的样品类型。

#### 可用样品类型

Matrix Blank (基质空白)	Solvent (溶剂)	Tune (调谐)	MS (基质加标)
Cal Std (校正标样)	Chk Std (质控样)	Tune/Breakdown (调谐 / 裂解产物)	MSD (基质加标重复)
LCS (实验室控制样品)	MDL (方法检出限)	Breakdown (裂解产物)	Unknown (未知样)
LCSD (实验室控制重复样品)	Method Val (方法验证)		

有关样品类型的详细说明，参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“使用采集模式（Using the Acquisition Mode）”。

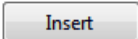
4. 为每个 Cal Std 或 Chk Std 样品，从 Level（水平）列表选择一个水平。  
样品水平已在主方法中定义。如果 Level 列表中没有可供选择的水平，可以让职务为 Supervisor（主管）和 LabDirector（实验室主任）的用户编辑该方法并指定水平。  
有关定义样品水平的详细说明，参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“使用方法开发模式（Using the Method Development Mode）”。
5. 输入每个样品在 Vial Position（样品瓶位置）列中的样品瓶位置。

**提示** 使用 Fill Down 命令简化输入样品瓶位置。

6. 输入每个样品在 Injection Volume（进样体积）列中的进样体积。
- 7.（可选）输入或编辑其它列的值。

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

### ❖ 若要在列表中插入样品

1. 选择要在其上方插入新 Unknown 的样品。
2. 选择要插入的样品数，然后单击 **Insert（插入）**，。  
应用程序会将 Unknown 样品插入到所选样品上方。

插入的样品

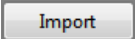
	Status	Filename	Sample type	Groups	Qual Processing	Level
1		cal_std_5	Cal Std		<input type="checkbox"/>	5
2		Unknown2	Unknown		<input type="checkbox"/>	
3		Unknown1	Unknown		<input type="checkbox"/>	
4		cal_std_10	Cal Std		<input type="checkbox"/>	10

- 为每个样品在 Filename 列中输入唯一文件名。
- 在 Sample Type 列表中选择每个样品的样品类型。
- 为每个 Cal Std 或 Chk Std 样品，从 Level 列表选择一个水平。  
样品水平已在主方法中定义。如果 Level 列表中没有可供选择的水平，可以让职务为 Supervisor 或 LabDirector 的用户编辑该方法并指定水平。  
有关定义样品水平的详细说明，参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“使用方法开发模式”。
- 在 Vial Position 列中为每个样品键入样品瓶位置。

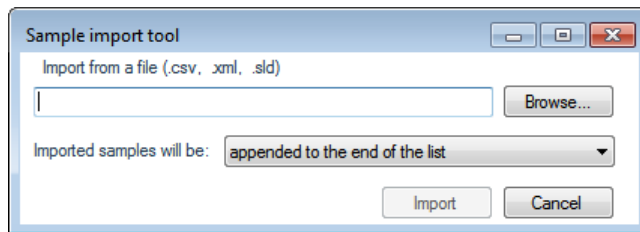
**提示** 使用 Fill Down 命令简化输入样品瓶位置。

- 输入每个样品在 Injection Volume 列中的进样体积。
- (可选) 输入或编辑其它列的值。

#### ❖ 若要在列表中导入样品

- 单击 **Import (导入)**，。

Sample Import Tool (样品导入工具) 对话框打开，然后可以从 .CSV、.XML 或者 .SLD 文件中导入样品列表。



- 单击 **Browse (浏览)**，选择包含要导入样品定义的 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。

- 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 (插入到所进行)**。
- 单击 **Import**。

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

当从 Xcalibur™ 序列文件中导入样品时，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)	Matrix Blank (基质空白)
Inj Vol (进样体积)	Injection Volume (进样体积)	Std Bracket (标曲更新)	Cal Std (校正标样)
Dil Factor (稀释因子)	Conversion Factor (转换系数)	QC (质控样)	Chk Std (质控样)

- 为每个 Cal Std 或 Chk Std 样品，从 Level 列表选择一个水平。  
样品水平已在主方法中定义。如果 Level 列表中没有可供选择的水平，可以让职务为 Supervisor 和 LabDirector 的用户编辑该方法并指定水平。  
有关定义样品水平的详细说明，参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“使用方法开发模式”。
- 输入每个样品在 Vial Position 列中的样品瓶位置。

**提示** 使用 Fill Down 命令简化输入样品瓶位置。

- 输入每个样品在 Injection Volume 列中的进样体积。
- (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、Filename 和 Sample Type 列将保持固定，其他列可左右滚动。

9. (可选) 当使用多通道时, 为每个导入的样品选择一个通道。  
 导入样品默认为 Auto (自动)。

❖ **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)**。

❖ **若要重新进样先前采集批次中的样品**





1. 从样品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 **Remove Selected Samples**。

TraceFinder 应用程序将创建选定样品的副本, 并会在文件名称上附加 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。

	cal_std_50_INJ001	Cal Std	10
	cal_std_50	Cal Std	10
	cal_std_100_INJ001	Cal Std	10
	cal_std_100	Cal Std	10

样品状态颜色代码

-  Sample is not acquired.
-  Sample is acquired but not processed.
-  Sample is acquired and processed.
-  Sample is currently acquiring.

当用户提交批次时, 应用程序仅采集重新进样的样品。

## Sample Definition 页面

Batch selection > 
  Sample definition > 
  Report selection > 
  Finish >

Status	Filename	Sample type	Qual Processing	Level	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume	Conversion Factor	Channel	Barcode Expected	Sample Volume	Dilution Factor	Sample Weight	Calculation Type
1	Unknown1	Solvent	<input type="checkbox"/>				CStk1-01:1	10.0	1.000	Channel 1		1	1	1	Liquid
2	Unknown2	Unknown	<input type="checkbox"/>				CStk1-01:3	10.0	1.000	Auto		1	1	1	Liquid
3	Unknown3	Matrix Blank	<input type="checkbox"/>				CStk1-01:4	10.0	1.000	Auto		1	1	1	Liquid

Sample Controls: Add 1 Insert 1 Import

Multiplexing Channels:  All Channels  Channel 1  Channel 2  Channel 3  Channel 4

### 参数 定义

#### Sample Controls (样品控制)

Add (添加)	在样品格中添加指定的空白行数。
Insert (插入)	在所选行上方插入指定的空白行数。
Import (导入)	打开 Sample Import Tool 从 .CSV、.XML 或 .SLD 文件中导入样品。

**Multiplexing Channels (多通道)** 仅当激活多通道时可用。参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“使用数据查看模式 (Using the Data Review Mode)”。

All Channels (所有通道) 使用所有已配置通道采集该批次。

Channel 1-n (通道 1-n) 仅使用所选通道采集该批次。

Previous (上一步) 可返回到上一步的 Acquisition 视图。

Next (下一步) 可转到下一步的 Acquisition 视图。

#### 快捷菜单

Add Sample (添加样品)	在样品格中添加单个空行。
Insert Sample (插入样品)	在样品格中所选行上方插入单个空行。
Insert Copy Sample (插入复制样品)	复制当前选择行并在该行上方插入复制行。
Reinject Selected Samples (重新进样所选样品)	创建所选样品的副本并在文件名称末尾附加 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。
Remove Selected Samples (移除所选样品)	从样品表格中移除所选样品。
Copy Down (向下复制)	将所选行的值复制到其下方的所有行中。仅当已选中一个可以向下复制的值时，该命令才可用。
Fill Down (向下填充)	以选定行中的值为起始值在列中向下连续输入值，直到列中的最后一行为止。
Modify Columns (修改列)	打开 Modify Columns 对话框自定义列显示。参阅 <i>TraceFinder 用户手册</i> 中的“使用分析模式 (Using the Analysis Mode)”。
Enable/Disable Sample Weight Calculation (启动/禁止样品质量计算)	显示或隐藏 Sample Volume (样品体积)、Dilution Factor (稀释因子)、Sample Weight (样品质量)、Calculation Type (计算类型) 和 Final Units (最终单位) 列。
Copy (复制)	将所选行或列中的数据复制至剪贴板。利用该命令将样品信息复制至另一个应用程序，如 Microsoft™ Excel™ 工作表。无法将该数据粘贴回 Acquisition 模式样品列表中。
Copy With Headers (带标题复制)	将所选行或列中的数据及其相关的列标题复制至剪贴板。利用该命令将样品信息复制至另一个应用程序，如 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中。
Paste (粘贴)	将来自其他应用程序如 Excel 工作表的单列数据粘贴至所选列。
Undo Last Paste (撤销上次粘贴)	移除样品列表中上次粘贴的条目。
Export to CSV File (导出至 CSV 文件)	打开 Save As (另存为) 对话框将该批次保存为 .CSV 文件。



## 选择和检查报告

在 Acquisition 模式的 Report Selection 视图（参阅第 10 页上的“Report Selection 页面”）上，可以指定要创建的报告类型。有关报告类型和输出文件例子的完整列表，参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“报告（Reports）”。

Report Selection 页面会列出所有可用的报告。Report Selection 页面会显示报告名称、报告说明、报告类型以及用于创建打印件、PDF、XML 或 XLSM 输出的选项：

- 当生成标准报告后，可以创建硬拷贝打印件、PDF（.pdf）文件或 XML（.xml）文件。除了报告类型，可为每份报告指定标题。
- 当生成自定义报告后，可以创建硬拷贝打印件或 XLSM 文件。
- 当生成目标筛选报告后，可以创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。

当指定报告选项后，点击 **Next** 转至 Finish 视图以提交批次。参阅第 11 页上的“提交批次”。


TraceFinder 应用程序将报告的结果输出文件保存到以下文件夹：

...\TraceFinderData\Projects\...\batch\Reports

### ❖ 若要编辑报告标题

选中 Report Title（报告标题）列中的文本并编辑默认文本。  
此列中的默认文本与报告名称相同。

### ❖ 若要预览标准报告

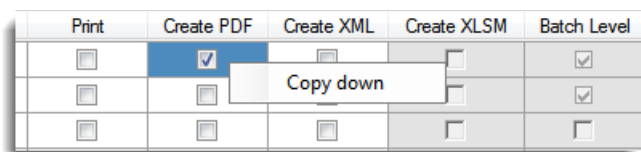
1. 单击 （放大图标），以查看 PDF 文件格式的报告类型示例。  
视图右窗格会显示带有标准 PDF 查看器控件的 PDF 报告示例。

**注释** 仅 Standard（标准）报告类型有预览文档。

2. 若要最小化 PDF 查看器，点击 。

### ❖ 若要指定用于打印件、PDF 或 XML 格式的标准报告

1. 对于要创建的每个报告，选取 Print（打印）、Create PDF（创建 PDF）或 Create XML（创建 XML）列中的复选框。
2. 若要为所有报告复制输出类型，右击单元格然后从快捷菜单选择 **Copy Down**。



位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。

### ❖ 若要指定打印版或 XLSM 格式的自定义报告

1. 为要创建的每一份自定义报告，选中 Print 或 Create XLSM（创建 XLSM）列的复选框。
2. 若要为所有报告复制输出类型，右击单元格然后从快捷菜单选择 **Copy Down**。

位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。

### ❖ 若要将 ToxID 或目标筛选报告指定为硬拷贝格式或 PDF 文件

1. 对于要创建的每一个 ToxID™ 或目标筛选报告，选取 Print 或 Create PDF 列中的复选框。
2. 若要为所有报告复制输出类型，右击单元格然后从快捷菜单选择 **Copy Down**。

位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。

#### ❖ 若要将报告导出至指定文件夹

1. 选择视图底部的 **Export Results**（导出结果）复选框。

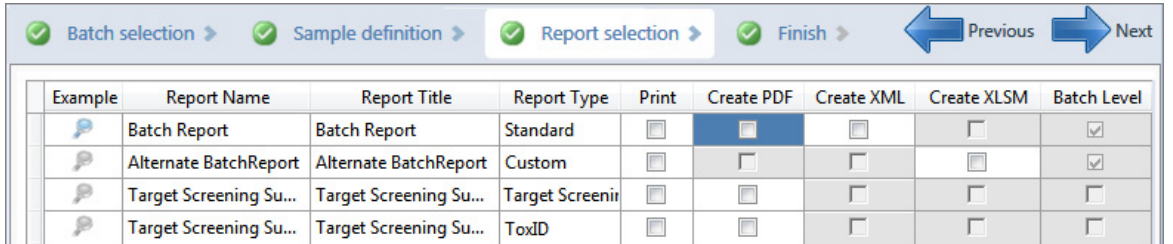
**Export Results**

可以将报告导出至任何目录。

2. 找到并选择要保存报告的文件夹。
3. 若要在所选文件夹内创建新的报告文件夹，单击 **Make New Folder**（创建新文件夹）并键入新文件夹名称。
4. 单击 **OK**（确定）。

除了批次 Reports 文件夹外，应用程序也会将将所有报告保存到指定文件夹。

#### Report Selection 页面



The screenshot shows the 'Report Selection' page with a progress bar at the top containing 'Batch selection', 'Sample definition', 'Report selection', and 'Finish'. Navigation buttons for 'Previous' and 'Next' are also present. Below the progress bar is a table with the following columns: Example, Report Name, Report Title, Report Type, Print, Create PDF, Create XML, Create XLSM, and Batch Level. The table contains four rows of report configurations.

Example	Report Name	Report Title	Report Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM	Batch Level
	Batch Report	Batch Report	Standard	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
	Alternate BatchReport	Alternate BatchReport	Custom	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
	Target Screening Su...	Target Screening Su...	Target Screenin	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
	Target Screening Su...	Target Screening Su...	ToxID	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

#### 参数

#### 描述

Example (示例)	(仅对标准报告) 显示该报告类型的示例 PDF 文件。示例仅提供报告类型的例子；它并不反映具体的数据。
Report Name (报告名称)	报告的名称。
Report Title (报告标题)	用户可以编辑的报告描述。
Report Type (报告类型)	报告类型: Standard、Custom (自定义) 或 Target Screening (目标筛选)。
Print (打印)	要发送到打印机的报告。
Create PDF (创建 PDF)	要另存为 PDF 文件的报告。
Create XML (创建 XML)	要导出为 XML 格式的报告。
Create XLSM (创建 XLSM)	要导出为 XLSM 格式的报告。
Batch Level (批次水平)	该方法不会为每个样品创建独立的报告，应用程序综合所有样品的数据，为整个批次创建一份报告。Batch-level 报告具有一个前缀 <b>B</b> 以示区别。 用户无法从 Report Selection 页面选择该选项。必须在配置控制台中选择报告的 Batch Level 选项。参阅 <i>TraceFinder 用户手册</i> 中的“使用配置控制台 (Using the Configuration Console)”。
快捷菜单: Copy Down (向下复制)	将选取或未选取的状态复制到列中的所有后续报告中。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。

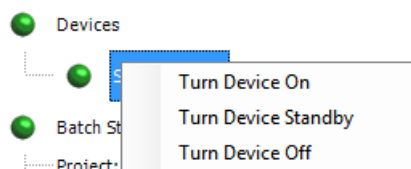
## 提交批次

在 Acquisition 模式的 Finish 视图（参阅第 14 页上的“Finish 页面”）中，可以指定启动方法、关闭方法或校正文件。可保存该批次以供以后采集，也可选择提交批次和采集数据、处理数据或创建报告。

**注释** 如果正在处理的是批次模板，则唯一可用的功能是 Save。

### ❖ 若要指定设备状态




在 Finish 页面的 System Status（系统状态）区域内右击设备名称，然后从快捷菜单中选择一个设备状态。



#### 仪器状态

Turn Device On (开启设备)	(默认) 当前运行完成时，使系统保持 On (开机) 状态，这样无需等待即可开始下一次运行。所有功率和流量均保持在工作水平。
Turn Device Standby (使设备待机)	当前运行完成时，使系统保持 Standby (待机)，这样在开始下一次运行前只需短暂延迟。
Turn Device Off (关闭设备)	在当前运行完成后使设备处于 Off (关机) 状态。Off 状态表示可由 TraceFinder 应用程序控制的所有仪器电源均关闭。这包括所有加热器和大多数子组件的电源，但某些情况下某些子组件例外。

#### 仪器状态指示灯

	绿色代表设备开启。
	黄色代表该仪器处于待机模式。
	红色代表设备错误。

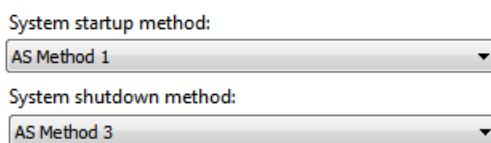
### ❖ 若要指定启动或关闭方法

1. (可选) 从 Finish 页面的 System Startup Method (系统启动方法) 列表中选择一种方法。

TraceFinder 应用程序会在运行该批次之前运行此方法。自动进样器不会进样。并非所有仪器均提供此功能。

2. (可选) 从 System Shutdown Method (系统关闭方法) 列表中选择一种方法。

TraceFinder 应用程序会在运行该批次之后运行此方法。自动进样器不会进样。并非所有仪器均提供此功能。



### ❖ 若要自动更新定时选择反应监测信息

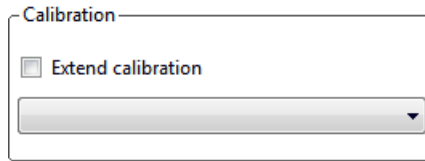
在 Finish 页面上选中 Auto TSRM Update (自动更新定时选择反应监测) 复选框。

Auto TSRM Update

当提交批次时，应用程序利用离子对、碰撞能量和其他适合的数据更新 TSQ 方法，以实现定时 TSRM 功能。

#### ❖ 若要指定校正文件


1. 在 Finish 页面的 Calibration（校正）区域内，从列表中选择 一个校正（.calx）文件。



**注释** 必须以当前方法采集至少一个批次以创建校正文件（.calx）。


2. 若要从当前批次将校正数据添加到所选的校正文件，选择 **Extend Calibration（扩展校正）** 选项。

#### ❖ 若要保存批次以便将来采集

在 Finish 页面上单击 **Save**， **Save**。

TraceFinder 应用程序会将这个批次另存为待运行文件，关闭 Acquisition 模式，并返回到应用程序主菜单。

#### ❖ 若要开始采集

1. 在 Finish 页面上单击 **Submit**， **Submit**。

**Submit Options** 对话框打开。

- 2.（可选）选中 **Create Reports（创建报告）** 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. 在 Acquisition 窗格中，执行以下操作：

- a. 选择要在本次采集中所用设备的 **Use（使用）** 复选框。

- b.（可选）选中 **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。

- c.（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。

- 4.（可选）在 Submit Options（提交选项）对话框中选择 **Priority Sequence（优先序列）** 复选框，然后选择下列优先级选项之一，以将该批次安排到队列中。

- 选择 **Next Available Batch（下一可用批次）** 将该批次立即放入当前采集的批次后。

- 选择 **Next Available Sample（下一可用样品）** 将该批次立即放入当前采集的样品后。

**注释** 当正在使用多通道功能时，应用程序在下一个可用通道或指定通道中采集优先批次。

5. 执行下列操作之一：

- 若要开始所选的流程，点击 **OK**。

所选的流程开始运行，TraceFinder 应用程序返回主菜单，并在主菜单底部显示实时画面。在主菜单以及所有模式下均可查看实时显示。可在 Acquisition 模式中开始另一个批次，并同时查看当前采集批次的实时显示。

- （可选）点击 **Cancel（取消）** 以退出 Acquisition 模式而不执行任何任务。

## Submit Options 对话框

参数	描述
User Name (用户名)	显示当前用户的名称。
Samples (样品)	报告批次编号和样品数。
Acquire Data (采集数据)	(默认) 提交当前批次供采集。
Process Data (处理数据)	(默认) 处理当前批次的数据。
Create Reports (创建报告)	创建当前批次的报告。
Priority Sequence (优先序列)	多通道激活时, 将批次放在当前采集批次之后。 多通道未激活时, 指定下列优先级选项之一, 将该批次放入队列中: <b>Next Available Batch</b> 将该批次放入当前采集的批次后。 <b>Next Available Sample</b> 将该批次放入当前采集的样品后。 <b>注释</b> 当选择 Configuration 控制台上的 Full Sequence Submission (完整序列提交) 时, 这些选项不可用, 因为实际上当前批次和当前样品是一样的。

### Acquisition (采集) 窗格

Device Name (设备名称)	列出已配置的所有仪器。如果要使用的仪器尚未配置, 则关闭 TraceFinder 应用程序, 配置该仪器, 然后重新打开该应用程序。当 TraceFinder 应用程序正在运行时无法配置仪器。
Use (使用)	指定本次采集所用的仪器。
Start Device (启动设备)	指定可以启动与其它仪器之间通信的仪器。通常是自动进样器。
Start When Ready (准备就绪时启动)	在所有仪器准备好采集数据时启动指定的设备。
Hide/Show Details (隐藏 / 显示详细信息)	折叠或展开 Submit Options 对话框的采集详细信息。
OK (确定)	开始所选的流程。

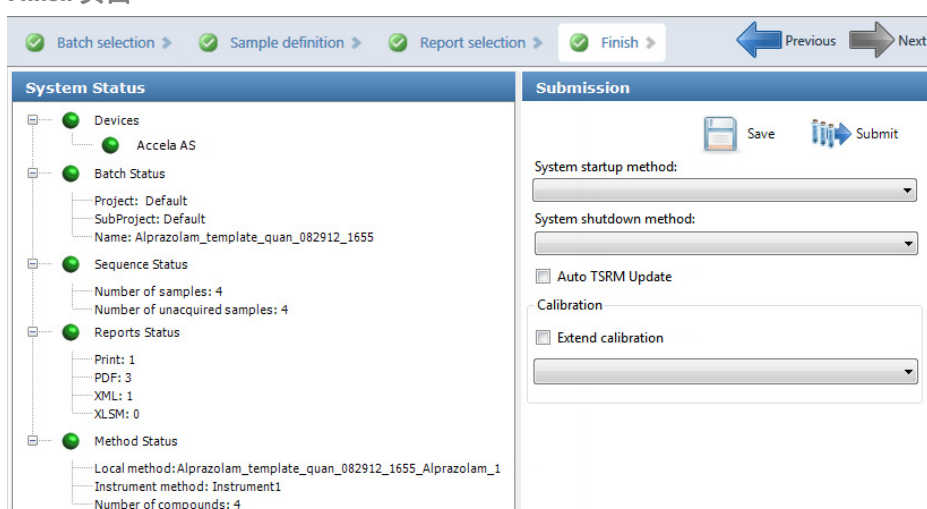
参数	描述
Cancel (取消)	在不提交任何任务的情况下关闭 Submit Options 对话框。

### ❖ 若要找到输出文件

TraceFinder 应用程序在下列目录内保存要查看的文件：

- 找到子项目文件夹中已保存的批次：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...
- 对于每个已采集的样品，在批次 Data (数据) 文件夹中找到 RSX 文件：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\Data
- 找到批次 Methods (方法) 文件夹中的方法信息：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\Methods\\method
- 找到批次 Reports (报告) 文件夹中的报告：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\batch\\Reports

### Finish 页面



参数	描述
System Status (系统状态)	System Status 窗格显示下列信息： <ul style="list-style-type: none"> <li>• 用于该次采集的设备</li> <li>• 批次的项目、子项目和名称</li> <li>• 批次中的样品数</li> <li>• 要打印或保存为 PDF、XML 或 XLSM 文件的报告数量</li> <li>• 用于该批次的本地方法和仪器方法</li> <li>• 方法中的化合物数</li> </ul>
System Startup Method (系统启动方法)	在该批次之前运行的仪器方法。自动进样器不会进样。并非所有仪器均提供此功能。
System Shutdown Method (系统关闭方法)	在该批次之后运行的仪器方法。自动进样器不会进样。并非所有仪器均提供此功能。
Auto TSRM Update (自动更新定时选择反应监测)	利用离子对、碰撞能量和其他适合的数据更新 TSQ 方法，以实现定时 TSRM 功能。
Calibration (校正)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Use calibration (使用校正)：使用所选的校正文件来处理当前数据。</li> <li>• Extend calibration (扩展校正)：将当前批次的校正数据添加到所选的校正文件中。</li> </ul>
Previous (上一步)	可返回到上一步的 Acquisition 视图。
Cancel (取消)	确认要退出 Acquisition 模式。用户的编辑不会被保存。
Save (保存)	将当前批次保存为已准备文件。


## 快速采集

参数	描述
Submit (提交)	打开 Submit Options 对话框, 在此可以选择性生成报告。

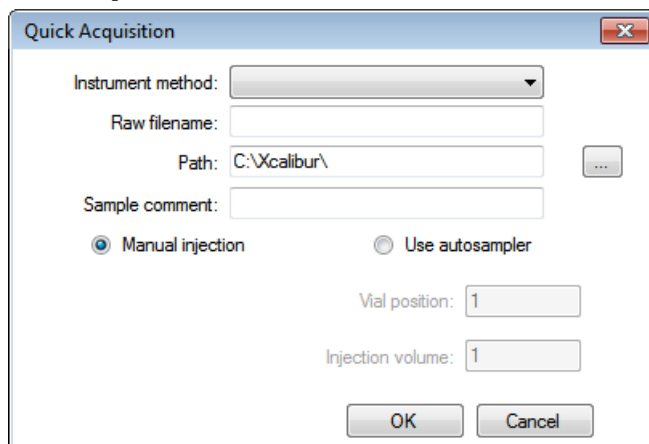
利用 Quick Acquisition (快速采集) 特性, 用户可以从 Acquisition 模式下的任意视图快速提交单个样品。


**注释** 仅在 Configuration 控制台中将其激活时, Quick Acquisition 特性才可用。

### ❖ 若要运行快速采集

1. 从主菜单上选择 **Tools (工具) > Quick Acquire Sample (快速采集样品)** 或点击 **Quick Acquire Sample** 图标, 。

Quick Acquisition 对话框打开。



2. 选择仪器方法。
3. 输入采集的原始数据文件名。
4. 对于路径, 点击  找到要写入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:

- 若要执行手动进样, 执行以下操作:
  - i. 选中 **Manual Injection (手动进样)** 选项。
  - ii. 点击 **OK**。

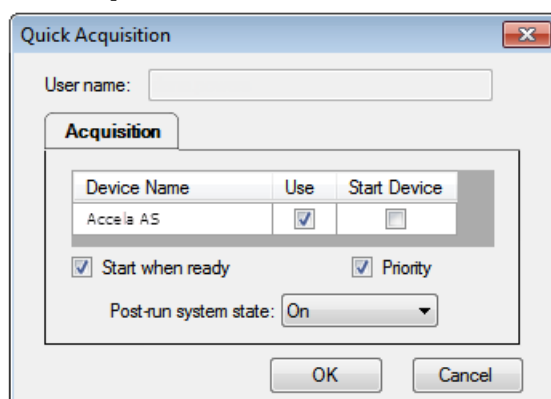
应用程序将样品提交至 Acquisition 队列。

- 若要执行自动进样器进样, 执行以下操作:
  - i. 选中 **Use Autosampler (采用自动进样器)** 选项。
  - ii. 在 Vial Position 框中输入样品瓶的位置。
  - iii. 在 Injection Volume 框中键入进样体积。

允许的最小进样体积为 0.1  $\mu\text{L}$ ; 允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。

- iv. 点击 **OK**。

Quick Acquisition 对话框打开。



## 术语表

- v. (可选) 选中 **Start Device** 复选框表示该设备将会触发与其它仪器的通信。  
通常是自动进样器。
- vi. (可选) 选中 **Start When Ready** 复选框, 在所有仪器准备就绪时将其全部启动。  
若清除该选项, 则各台仪器会分别启动并等待最后一台仪器准备就绪。
- vii. (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。
- viii. (可选) 选择 Post-run System State (运行后仪器状态) 的值: **Unknown (未知)**、**On (默认)**、**Off** 或 **Standby**。  
应用程序在采集完最后的样品后将系统设置为该状态。
- ix. 点击 **OK**。  
应用程序将样品提交至 Acquisition 队列。

### A

- Acquire Data** 采集数据
- Acquisition** 采集
- Acquisition Batch Wizard** 采集批次向导
- Add** 添加
- Add Sample** 添加样品
- All Channels** 所有通道
- Appended to the End of the List** 附加到列表末尾
- Auto** 自动
- Auto TSRM Update** 自动更新定时选择反应监测
- Available Templates** 可用模板

### B

- Batch** 批次
- Batch Level** 批次水平
- Batch Name** 批次名称
- Batch Selection** 批次选择
- Blank** 空白样
- Breakdown** 裂解产物
- Browse** 浏览

### C

- Calculation Type** 计算类型
- Calibration** 校正
- Calibrator/Cal Std** 校正标样
- Cancel** 取消
- Channel** 通道
- Chk Std** 质控样

**Conversion Factor** 转换系数

**Copy** 复制

**Copy Down** 向下复制

**Copy With Headers** 带标题复制

**Create a New Batch** 创建一个新批次

**Create or Edit a Template** 创建或编辑模板

**Create PDF** 创建 PDF

**Create Reports** 创建报告

**Create XLSM** 创建 XLSM

**Create XML** 创建 XML

**Custom** 自定义

### D

**Data** 数据

**Device Name** 设备名称

**Dil Factor/Dilution Factor** 稀释因子

### E

**Enable/Disable Sample Weight Calculation** 启动 / 禁止样品质量计算

**Example** 示例

**Export Results** 导出结果

**Export to CSV** 导出至 CSV 文件

**Extend Calibration** 扩展校正

### F

**Filename** 文件名

**Fill Down** 向下填充

**Final Units** 最终单位



**Finish** 完成

**Full Sequence Submission** 完整序列提交

## H

**Hide/Show Details** 隐藏 / 显示详细信息

**Hydrolysis** 水解

## I

**Import** 导入

**Imported Samples Will Be** 导入样品将被

**Injection Volume/Inj Vol** 进样体积

**Insert** 插入

**Insert Copy Sample** 插入复制样品

**Insert Sample** 插入样品

**Inserted at the Selected Row** 插入到所选定行

## L

**LabDirector** 实验室主任

**LCS** 实验室控制样品

**LCSD** 实验室控制重复样品

**Level** 水平

## M

**Make New Folder** 创建新文件夹

**Manual Injection** 手动进样

**Matrix Blank** 基质空白

**MDL** 方法检出限

**Method Compound Data** 方法化合物数据

**Method Compound Databases** 方法化合物数据库

**Method Selection** 方法选择

**Method Val** 方法验证

**Methods** 方法

**Modify Columns** 修改列

**MS** 基质加标

**MSD** 基质加标重复

**Multiplexing Channels** 多通道

## N

**Negative** 阴性对照

**Next** 下一步

**Next Available Batch** 下一可用批次

**Next Available Sample** 下一可用样品

## O

**Off** 关机

**OK** 确定

**On** 开机

## P

**Paste** 粘贴

**Position** 位置

**Post-run System State** 运行后系统状态

**Previous** 上一步

**Print** 打印

**Priority** 优先级

**Priority Sequence** 优先序列

**Process Data** 处理数据

## Q

**QC/QC Std/Chk Std** 质控样

**Quantitative Batch** 定量批次

**Quick Acquire Sample** 快速采集样品

**Quick Acquisition** 快速采集

## R

**Reinject Samples** 重新进样

**Reinject Selected Samples** 重新进样所选样品

**Remove Selected Samples** 移除所选样品

**Report Name** 报告名称

**Report Selection** 报告选择

**Report Title** 报告标题

**Report Type** 报告类型

**Reports** 报告

## S

**Sample Controls** 样品控制

**Sample Definition** 样品定义

**Sample Import Tool** 样品导入工具

**Sample Type** 样品类型

**Sample Volume** 样品体积

**Sample Weight** 样品质量

**Samples** 样品

**Save** 保存

**Save As** 另存为

**Screening Batch** 筛选批次

**Solvent** 溶剂

**Specimen** 定量样品

**Standard** 标准

**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

**Submit** 提交

**Submit a Prepared Batch** 提交已准备的批次

**Submit Options** 提交选项

**Supervisor** 主管

**System Shutdown Method** 系统关闭方法

**System Startup Method** 系统启动方法

**System Status** 系统状态

## T

**Target Screening** 目标筛选

**Template Name** 模板名称

**Template Selection** 模板选择

**Tools** 工具

**TraceFinder User Guide** TraceFinder 用户手册

**Tune** 调谐

**Tune/Breakdown** 调谐 / 裂解产物

**Turn Device Off** 关闭设备

**Turn Device On** 开启设备

**Turn Device Standby** 使设备待机

## U

**Undo Last Paste** 撤销上次粘贴

**Unextracted** 未提取

**Unknown** 未知样 / 未知

**Use** 使用

**Use Autosampler** 采用自动进样器

**Use Calibration** 使用校正

**User Name** 用户名

**Using Copy Down and Fill Down** 使用向下复制和  
向下填充

**Using the Acquisition Mode** 使用采集模式

**Using the Analysis Mode** 使用分析模式

**Using the Configuration Console** 使用配置控制台

**Using the Data Review Mode** 使用数据查看模式

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

## V

**Vial Position** 样品瓶位置

## 商标

TraceFinder 和 ToxID 是商标，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。