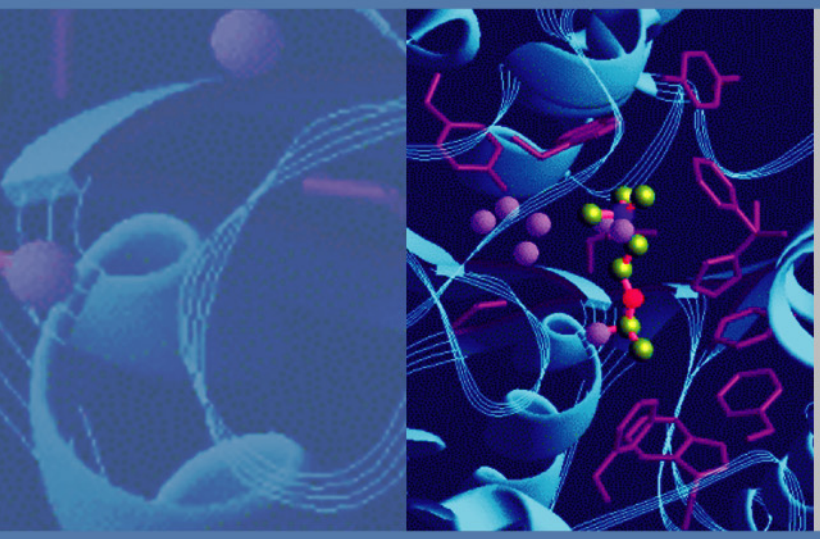


Thermo

TraceFinder

版本 2.1

用户手册

适用于法医毒物学

XCALI-97463 修订版 A　　2012 年 3 月

DOCUMENTATION SURVEY

Part of Thermo Fisher Scientific

Thermo SCIENTIFIC

© 2012 Thermo Fisher Scientific Inc。保留所有权利。

Aria、 Exactive、 FOCUS、 LCquan、 ToxID 和 TriPlus 均为商标。而 Accela、 Dionex、 Trace GC Ultra、 TSQ Quantum 和 Xcalibur 均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的注册商标。

NIST 是美国国家标准与技术研究院在美国的注册商标。

Windows、 Excel 和 Microsoft 是 Microsoft Corporation 在美国和其它国家 （地区）的注册商标。
Adobe、 Acrobat 和 Reader 是 Adobe Systems Inc. 在美国及其它国家和地区的注册商标。

Agilent 是 Agilent Technologies Inc. 的注册商标。

所有其它商标均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 及其子公司的财产。

Thermo Fisher Scientific Inc. 为购买产品的客户提供本文档，供其在操作产品时参考。本文档受版权保护，未经 Thermo Fisher Scientific Inc. 书面许可，严禁复制本文档或本文档的任何部分。

本文档的内容可能随时更改，恕不另行通知。本文档中的所有技术信息仅供参考。本文档中的系统配置和规格将取代购买者先前获得的所有信息。

Thermo Fisher Scientific Inc. 不保证本文档的完整性和准确性，而且对于可能因使用本文档 （即使是在正确遵循本文档中的说明信息的情况下）而导致的任何错误、疏忽、损害或损失，Thermo Fisher Scientific Inc. 概不负责。

本文档不是 Thermo Fisher Scientific Inc. 和购买者之间的销售合同的一部分。任何情形下，都不得使用本文档来取代或修改任何 “ 销售条款与条件 ”，若两份文档信息发生冲突，则以 “ 销售条款与条件 ” 中的信息为准。

发行历史：修订版 A， 2012 年 3 月

软件版本：Thermo Foundation 2.0 SP1; Thermo Xcalibur 2.2 SP1; Microsoft Windows XP Professional SP3 或 Windows 7 Professional; Thermo LC Devices 2.5 SP2; Thermo GC Devices 2.2

仅供研究使用。不可用于诊断。

目录

前言 ..... **vii**
相关文档 vii
特殊注意事项 viii
系统要求 ix
系统激活 x
联系我们 xii

第 1 章 简介 **1**
关于 TraceFinder 应用程序 2
TraceFinder 特性总结 4
TraceFinder 工作流程 5
报告功能 6
标准报告类型 6
自定义报告类型 7
目标筛选报告类型 7

第 2 章 使用入门 **9**
安装 TraceFinder 应用程序 10
安装功能模块 13
安装 NIST 和 QED 库 14
启动 NIST Library Browser 17
启动 Qual Browser 18
转换遗留数据 19
转换方法 20
转换批次 22
转换方法模板 25
转换批次模板 27
选择模式 29

第 3 章 使用 Configuration 模式 **35**
User Administration 37
编辑用户信息 38
选择用户职务 43
Project Administration 46
使用驱动器 47
处理项目 48
Compound Datastore 50
打开和保存数据库 50
在数据库中添加化合物，定量峰和确认离子 56
选择实验类型 60

Application Configuration 61
指定报告配置 62
指定配置默认值 67
指定检测参数 69
启用可选特性 81

第 4 章 使用 Method Development 模式 87
使用主方法 90
创建新主方法 91
编辑主方法 106
创建方法模板 191
导入已发布的主方法 199
导出 SRM 数据 200
使用仪器方法 201
使用开发批次 208
创建开发批次 208
编辑开发批次中的样品 210
采集开发批次中的样品 212
在 Qual Browser 中查看原始数据文件 213
使用快速采集 215

第 5 章 使用 Acquisition 模式 217
使用批次 218
打开和浏览采集模式 218
创建批次 220
使用快速采集 246
实时显示 248
Acquisition 页面 249
Instrument 页面 250
Devices 页面 250
Queues 页面 255
实时谱图显示 259
样品类型 261

第 6 章 使用 Analysis 模式 263
使用快速采集 265
使用 Batch View 267
Batch View 窗格 268
创建新批次 279
编辑批次 286
编辑报告输出格式 288
设置 Compound Active Status 289
提交批次 292
将批次保存到新位置 296
利用 Batch Wizard 创建批次 298
使用 Data Review 视图 312
Data Review 样品列表 313
Quan Mode 323
Qual Mode 340

使用 Report View 350
查看报告 351
生成报告 355
使用报告 359
使用 Active View. 361
使用 Local Method View. 374
使用 Batch Template Editor 376

附录 A 报告 383
指定报告 384
标准报告 385
自定义报告 386
目标筛选报告 386
报告标记 389
样品标准报告 390
Batch Report 391
Batch Report Rev 1 392
Calibration Report. 393
Calibration Density Report 396
Chromatogram Report. 397
Compound Calibration Report 398
Compound Calibration Report - Alternate. 400
Confirmation Report 402
Confirmation Report 2 403
High Density Calibration Report. 404
High Density Internal Standard Report 405
High Density Internal Standard Report Long 406
High Density Sample Report 1 407
High Density Sample Report 1 Long. 408
High Density Sample Report 2 409
High Density Sample Report 2 Long. 410
High Density Sample Report 3 411
High Density Sample Report 3 Long. 412
Internal Standard Summary Report 413
Ion Ratio Failure Report 414
Manual Integration Report 415
Method Report 416
Method Validation Report. 419
MSMSD Report 422
Quality Control Report 423
Quantitation Report 424
Quantitation Report - 2. 425
Solvent Blank Report. 427
Surrogate Recovery Report. 428
TIC Report 429
TIC Summary Report 430

附录 B 使用 Copy Down 和 Fill Down 431

附录 C 使用过滤标准.....435

术语表 437

索引.....457

前言

TraceFinder 2.1 软件是 Thermo Scientific GC/MS 和 LC/MS 分析软件系列的最新产品。

目录

- 相关文档
- 特殊注意事项
- 系统要求
- 系统激活
- 联系我们

❖ **若要对文档或 Help 提出更改建议**

点击下面的链接完成有关本文档的简短调查。
在此先对您的帮助表示感谢。

相关文档

本应用程序包括 Help （帮助）和下列 PDF 文档：

- *TraceFinder User Guide （TraceFinder 用户手册）*
- *TraceFinder Administrator Quick Reference Guide （TraceFinder 管理员快速参考指南）*
- *TraceFinder Acquisition Quick Reference Guide （TraceFinder 采集快速参考指南）*
- *TraceFinder Analysis Quick Reference Guide （TraceFinder 分析快速参考指南）*
- *TraceFinder Shortcut Menus Quick Reference Guide （TraceFinder 快捷菜单快速参考指南）*
- *TraceFinder Custom Reports Tutorial （TraceFinder 自定义报告教程）*

❖ **若要利用 Start 菜单查看 TraceFinder 说明书**

转至 **Start （开始） > All Programs （所有程序） > Thermo TraceFinder > Manuals （手册）**。

❖ **若要从应用程序中打开 TraceFinder Help 和进入相关文档**

1. 打开 TraceFinder 应用程序，然后选择 **Help （帮助） > TraceFinder Help （TraceFinder 帮助）**。
   - 要查找特定主题，可使用帮助目录、索引或搜索框。
   - 若要创建自己的书签，使用 Favorites （收藏夹）窗格。
2. 若要查看用户手册或快速参考指南，选择 **Help （帮助） > Manuals （手册） > User Guide （用户手册）**或 **Quick Reference Guide （快速参考指南）**。

   PDF 文件在新窗口中打开。

特殊注意事项

本指南包括下列特殊注意事项类型：

重要信息 强调防止软件损害、数据丢失或无效测试结果必需的信息；或可能包含获得系统最佳性能的重要信息。

注释 强调普遍关注的信息。

提示 强调能够帮助简化工作的信息。

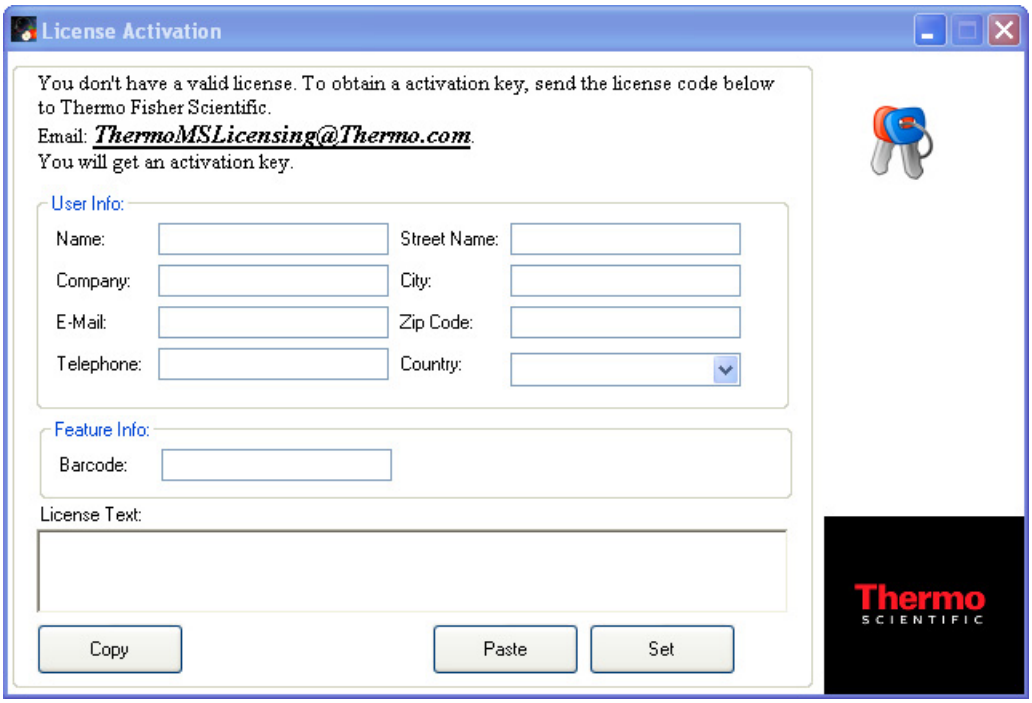
系统要求

系统必须满足以下最低要求。

系统	要求
计算机	• 2.33 GHz 双核处理器， 4 GB RAM • CD/R-ROM 驱动器 • 视频卡和显示器分辨率 (XGA) 达到 1280 × 1024 • C：驱动器可用空间 75 GB • NTFS 格式
仪器 （支持或要求）	自动进样器 : • Triplus™ • AS3000 • Accela™ AS GC 仪器： • FOCUS™ GC • Trace GC Ultra™ • Trace 1300 系列 LC 设备： • Accela 1250 泵 • Accela 泵 • Dionex™ • TLX-1 • LX2 • Agilent™ 1100 • Agilent 1200 GC/MS 和 LC/MS 质谱仪
软件	• Microsoft™ Windows XP Professional SP3 或 Windows 7 Professional • Microsoft Office 2007 SP2 或者 Excel™ 2007 SP2 • Microsoft .NET Framework 4.0 Extended • Thermo Foundation™ 2.0 SP1 • Thermo Xcalibur™ 2.2 SP1 • Adobe™ Reader™ 10.0 • NIST™ 2008 • Thermo LC Devices 2.5 SP2 或 Thermo GC Devices 2.2

系统激活

首次打开 TraceFinder 应用程序时，出现一个显示 60 天试用期剩余天数的对话框。如果试用已过期，则 License Activation （许可证激活）窗口打开。



注释 在试用期间可以通过从 TraceFinder 菜单中选择 **Help （帮助） > License Activation （许可证激活）**打开 License Activation 窗口。若已有永久许可证，则出现一个信息表示产品已完全被授权。

以下两种类型的许可证可用：

- 60-Day Evaluation Version （60 天评估版）（免费）
- Full Version Single License （单许可证完整版）

评估版功能完整，在激活后 60 天后会自动过期。任何企图回拨系统日期的行为都将自动终止该版本。可以购买 TraceFinder 应用程序完整版，在评估期或之后随时激活完整版，无需重新安装软件。

每一激活码仅对单个许可证有效。任何一次以外的安装都将生成另一个许可证，并且需要不同的激活码。

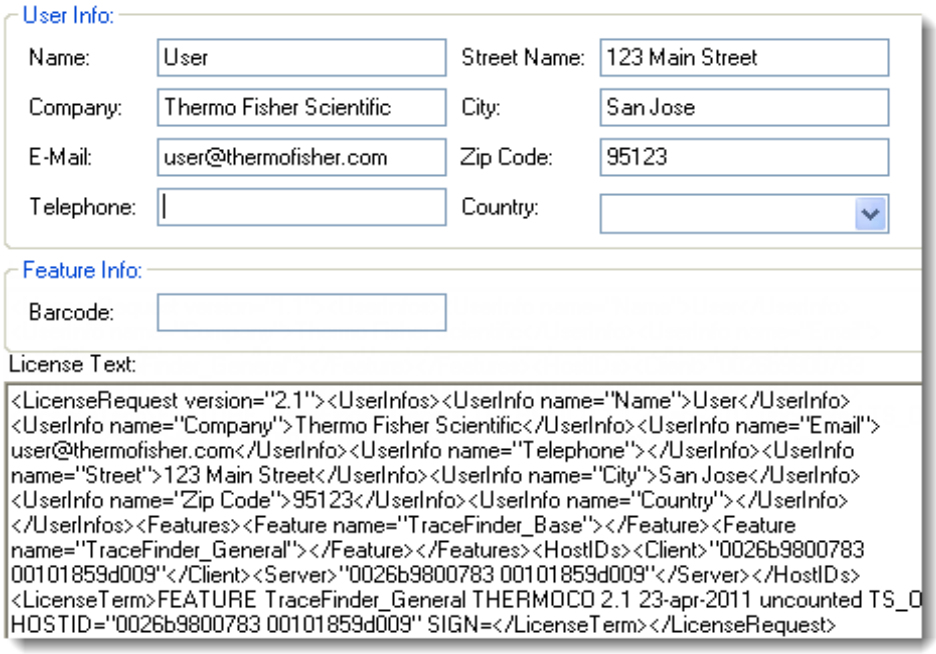
有关激活的任何问题，可联系加利福尼亚州 San Jose 的 Thermo Fisher Scientific 技术支持：

- 电子邮件： ThermoMSLicensing@thermofisher.com
- 传真： 408-965-6120

❖ 若要获取激活码

1. 在 License Activation 窗口的 User Info （用户信息）区域输入信息。

   在输入的同时， License Text （许可证文本）框创建该信息的 XML 文本串。



2. 在 Barcode （条形码）框中输入 TraceFinder CD 上打印的条形码。

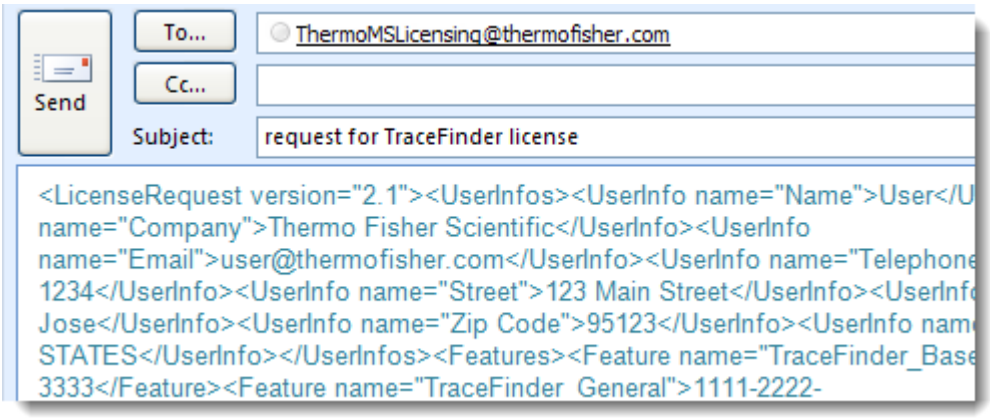
   条形码格式为 *xxxx-xxxx-xxxx* 或 *xxxx-xxxx-xxxx-xxxx*。

3. 当所有信息输入完成之后，点击 **Copy （复制）**。

   应用程序将该 XML 文本复制至剪贴板。

   如果未输入所有信息，将出现一个指出确实信息的弹出窗口。

4. 将 XML 文本粘贴至电子邮件的正文，然后发送邮件至 ThermoMSLicensing@thermofisher.com。



❖ **若要使用激活码**

注释 在输入激活码时，必须在 ITAdmin （IT 管理员）或 LabDirector （实验室主任）权限下运行 TraceFinder 应用程序。

1. 收到激活码后，从电子邮件中进行复制。
2. 从 TraceFinder 菜单中选择 **Help （帮助）> License Activation （许可证激活）**。

   License Activation 窗口打开。
3. 点击 **Paste （粘贴）**。

   应用程序将剪贴板中的内容粘贴至 Licence Text 框。
4. 点击 **Set （设置）**。

   应用程序按照许可证给予的授权类型被激活。

联系我们

您可以通过多种方式联系 Thermo Fisher Scientific，获取所需信息。

❖ **联系技术支持中心**

电话	800-532-4752
传真	561-688-8736
电子邮件	us.techsupport.analyze@thermofisher.com
知识库	www.thermokb.com

若要下载更新和配套软件，请访问：mssupport.thermo.com。

❖ **联系客户服务中心，获取订购信息**

电话	800-532-4752
传真	561-688-8731
电子邮件	us.customer-support.analyze@thermofisher.com
网站	www.thermo.com/ms

❖ **若要获得本地销售或服务联系信息**

转至 www.thermoscientific.com/wps/portal/ts/contactus。

❖ **若要从互联网复制手册**

转至 mssupport.thermo.com，同意相关条款和条件，然后单击窗口左侧空白处的 **Customer Manuals （用户手册）**。

❖ **对文档或 Help 提出更改建议**

- 在 www.surveymonkey.com/s/PQM6P62 中在线填写问卷调查。
- 向技术出版编辑发送电子邮件，邮箱地址为 techpubs-lcms@thermofisher.com。

简介

本章描述了 TraceFinder 软件的常规特性。

目录

- 关于 TraceFinder 应用程序
- TraceFinder 特性总结
- TraceFinder 工作流程
- 报告功能

关于 TraceFinder 应用程序

TraceFinder 应用程序针对法医毒物学市场，创建实验室使用的工作流程。它在单个软件包中提供集成化的工作流程，用于特定的非生物分析实验室、仪器控制和方法开发等。TraceFinder 是 TSQ Quantum™ XLS 三重四极杆质谱仪的主要应用软件。

TraceFinder 应用程序能够导出 .xml 格式的 SRM 数据，这些数据文件随后可导入到其它应用程序的数据库中。

TraceFinder 应用程序可导入以下类型的文件：

- .csv 或 .xml 格式的样品列表

  参阅第 227 页的 “ 定义样品列表 ”。

- Xcalibur 数据系统提供的处理 (.pmd) 和仪器 (.meth) 方法文件

  参阅第 90 页的 “ 使用主方法 ” 或 第 201 页的 “ 使用仪器方法 ”。

- 采用数据库 （.xml) 格式的文件中的化合物

  参阅第 56 页的 “ 在数据库中添加化合物，定量峰和确认离子 ”。

- 来自以下应用程序的批次、方法或模板：
  - TraceFinder 1.0
  - TraceFinder 1.1
  - TraceFinder 2.0
  - QuanLab Forms 或 ToxLab Forms 2.5
  - QuanLab Forms 或 ToxLab Forms 3.0

  参阅第 19 页的 “ 转换遗留数据 ”。

TraceFinder 应用程序使用之前已根据标准处理程序如统计分析系统 （SAS）认证的系统，对数据准确性和精确度进行检查。

支持的文件类型

TraceFinder 应用程序支持以下文件类型：

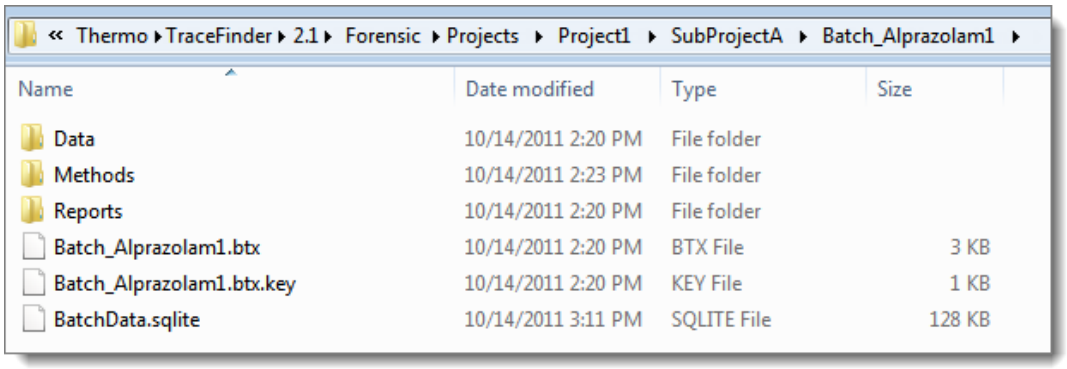
- 逗号分隔值 (.csv)：用于将表格式数据中的数字和文本保存为纯文本格式的一系列文件格式能够被文本编辑器所读取。文本文件中的行代替了表格中的行，行中的逗号分隔了表格中行的字段。
- 可扩展标记语言 (.xml)：一种储存任意数量文本或数据的通用框架，其结构可用树形表示。唯一不可或缺的语法要求是文档须有一个根元素，也称文档元素。这意味着文本必须位于根开始标记与相应的结束标记之间。
- 仪器方法 (.meth)：Xcalibur 软件包专有的文件格式，包含让连接的科学仪器执行数据采集的特定指令。
- 处理方法 （.pmd）：Xcalibur 软件专有的文件格式，包含有关处理数据的具体指令，已通过系统所连接仪器完成数据采集。
- 原始数据 （.raw）：用于在系统上采集样品的文件类型。

TraceFinder 目录结构

TraceFinder 应用程序在 C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic 目录中创建项目 / 子项目 / 批次和模板文件夹。应用程序在每个批次文件夹内为数据、方法和报告创建文件夹。

重要信息 无法重命名或移动由 TraceFinder 应用程序创建的文件夹。

图 1. 批次目录结构示例



TraceFinder 特性总结

TraceFinder 系统为高通量定量分析提供面向工作流程的方法。该系统采用以批次为中心的方法，结合多种工具，可自动快速创建方法、加载样品、自动生成数据、手动查看和编辑结果，并完成数据查看和报告处理。

TraceFinder 软件包具有数据采集、处理、检查和报告等功能，旨在为法医毒物学分析人员提供帮助。本应用程序具有全自动采集模式和手动数据检查模式。可以使用数据采集系统来创建和提交批次，并监控实时检查结果。

TraceFinder 应用程序采用综合的处理方法，提供改善的离子比率计算结果、查看和报告。此外，还能比较质谱图，并整合数据查看和报告过程。

其主要功能包括：

- 基于 LabDirector （实验室主任）、 ITAdmin （IT 管理员）、 Supervisor （主管）、 Technician （技术人员）和 QAQC (质保质控）职务的授权
- 具有用户管理、项目管理、数据库管理和应用程序管理的 Configuration （配置）模式
- 编辑仪器方法、设置处理和错误标记参数以及设置报告选项的 Method Development （方法开发）模式
- 采集向导的选项：
  - 采集批次模式指导用户创建批次和运行样品
  - 批次模版向导类似 ToxLab Forms 应用程序中用到的界面
- 包含批次视图、数据查看、本地方法视图和报告视图的 Analysis （分析）模式
- 数据库能力方法开发
- 定量分析流程，支持 LCquan™ 和 ToxLab Forms 应用程序中的功能
- 标准和自定义报告格式

常规工作流程的功能包括：

- 采集和处理
- 峰检测
- 包括校正的定量
- 错误分析和标记设置
- 报告
- 数据持久性
- 原始数据文件处理

TraceFinder 工作流程

TraceFinder 应用程序由典型的实验室工作流程组成。用户创建一个批次，随后系统将样品注射到仪器中、运行样品、分析数据然后生成报告。可以为准备在该实验室运行的特定化合物分组或实验设置主方法。当用户准备运行特殊类型的样品时，先选择适当方法，然后开始运行。

使用 TraceFinder 应用程序时，遵照下列基本步骤：

1. 在 Method Development 模式中创建并保存一个主方法。

   主方法结合仪器方法和处理方法，定义了如何处理原始数据、错误检查信息如何评估结果以及结果将如何在报告显示。

2. 利用其中一种批次向导创建并提交批次。

   批次是指使用指定方法处理和报告的样品列表。批次的每一行代表一个特定样品。

3. 监控 Real Time Status （实时状态）视图中的批次状态。

   可从主菜单和所有 TraceFinder 模式中查看实时显示。可以在观看当前采集批次的实时显示的同时开始另一批次。

   注释 在任何时候都可以通过 TraceFinder 窗口右下角快速查看系统状态。该区域显示一个绿色、黄色或红色状态灯及队列中样品的数量 （如有）。

4. 评估 Analysis 模式中的数据。

   Analysis 模式包含用户可以查看批次、批次数据、报告和本地方法的视图。

5. 在 Analysis 模式的 Report View （报告视图）中查看和打印报告。

   使用 Report View 查看或打印当前选定批次的报告。

报告功能

报告引擎可生成多种不同类型的报告，旨在满足实验室、实验室客户以及可能查看结果的主要监管机构的需求。以下报告类型符合不同方法和全球监管机构的要求，旨在帮助跟踪 LC 和 GC 系统性能和方法。报告分为三组：Standard （标准）、 Custom （自定义）和 Target Screening （目标筛选）。

有关标准、自定义或目标筛选报告的更多信息以及每个标准报告类型的示例，参阅第 383 页的 “ 报告 ”。标准报告示例 （PDF 文件）位于 C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\ExampleReports 文件夹下。

标准报告类型

- Batch Report （批次报告）
- Batch Summary Report （批次总结报告）
- Calibration Report （校正报告）
- Calibration Curve Report （校正曲线报告）
- Chromatogram Report （色谱图报告）
- Compound Calibration Report （化合物校正报告）
- Compound Calibration Report - Alternate （化合物校正报告 - 备用）
- Confirmation Report （确认报告）
- High Density Calibration Report （高密度校正报告）
- High Density Internal Standard Report （高密度内标报告）
- High Density Internal Standard Report Long （高密度内标长报告）
- High Density Sample Report 1 （高密度样品报告 1）
- High Density Sample Report 1 Long （高密度样品长报告 1）
- High Density Sample Report 2 （高密度样品报告 2）
- High Density Sample Report 2 Long （高密度样品长报告 2）
- High Density Sample Report 3 （高密度样品报告 3）
- High Density Sample Report 3 Long （高密度样品长报告 3）
- Internal Standard Summary Report （内标总结报告）
- Ion Ratio Failure Report （离子比率未通过报告）
- Manual Integration Report （手动积分报告）
- Method Report （方法报告）
- Negative Report （阴性样品报告）
- Qualitative Peak Report （定性峰报告）
- Qualitative Summary Report （定性总结报告）
- Quality Control Report （质量控制报告）
- Quantitation Report （定量报告）
- Quantitation Report - 2 （定量报告 -2）
- Sample Report （样品报告）
- Sample Report Long （样品长报告）
- Solvent Blank Report （溶剂空白报告）

自定义报告类型

- AltCalibrationReport （备用校正报告）
- Alternate BatchReport （备用批次报告）
- Alternate CalibrationReport （备用校正报告）
- Alternate ConfirmationReport （备用确认报告）
- Alternate MatrixSpikeReport （备用基质加标报告）
- Alternate SampleReport （备用样品报告）
- Alternate SummaryReport （备用总结报告）
- BatchReport （批次报告）
- BlankReport （空白报告）
- CalibrationDensityReport （校正密度报告）
- CalibrationReport （校正报告）
- CheckStandardReport （质控样报告）
- CompoundCalibrationReport （化合物校正报告）
- ConfirmationReport （确认报告）
- ConfirmationReport2 （确认报告 2）
- HighDensitySampleReport1Long （高密度样品长报告 1）
- HighDensitySampleReport2Long （高密度样品长报告 2）
- HighDensitySampleReport3Long （高密度样品长报告 3）
- HighDensitySampleReport4 （高密度样品报告 4）
- HighDensitySampleReport5 （高密度样品报告 5）
- QuantitationReport （定量报告）
- SteroidAnalysisReport （类固醇分析报告）

目标筛选报告类型

仅当已安装 ToxID™ 软件并启用 Target Screening 特性时， Target Screening 报告才可用。有关启用目标筛选特性的详细步骤，参阅第 82 页的 “Target Screening （目标筛选） ”。

- Target Screening Long Report （目标筛选长报告）
- Target Screening Summary Report （目标筛选总结报告）

使用入门

本章包括 TraceFinder 应用程序入门使用的步骤。

目录

- 安装 TraceFinder 应用程序
- 安装功能模块
- 安装 NIST 和 QED 库
- 启动 NIST Library Browser
- 启动 Qual Browser
- 转换遗留数据
- 选择模式

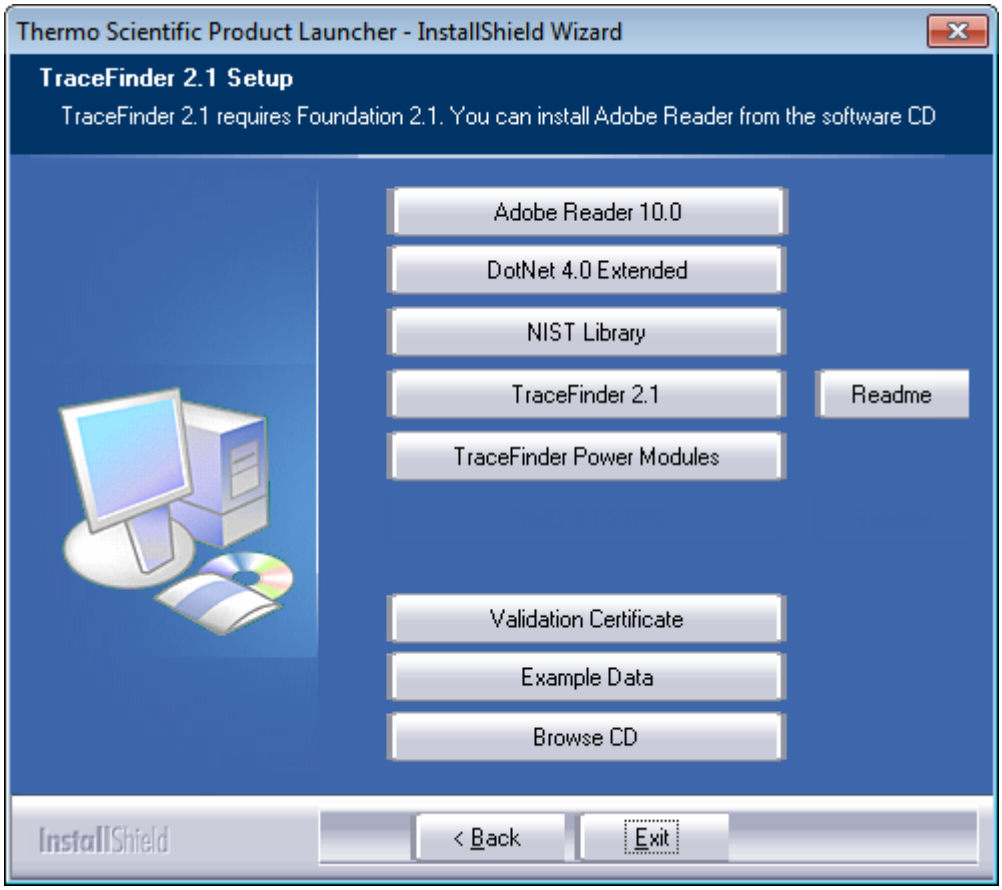
安装 TraceFinder 应用程序

遵照下列说明安装、启动和登录 TraceFinder 应用程序。

❖ 若要安装 TraceFinder 应用程序

1. 插入 TraceFinder CD，打开 TraceFinder 安装文件，然后点击 **Next （下一步）**。

   InstallShield Wizard （安装保护向导）打开。



2. 点击 **TraceFinder 2.1** 按钮，按照 InstallShield Wizard 中的说明继续。

   安装程序验证是否有合适的 Thermo Foundation 和 Thermo Xcalibur 应用程序，并在需要时进行更新。

   重要信息 如果要立即安装 Thermo Foundation，点击 **Yes （是）**，当提示重启计算机时，点击 **OK （确定）**。

   向导继续之后的安装。

3. 出现提示，选择安装该软件的 **GC** 或 **LC** 版本。
4. 安装完成后，不要启动 TraceFinder 应用程序。
5. 再次打开 TraceFinder 安装文件，然后点击 **Next**。
6. 点击 **NIST Library （NIST 库）**按钮，按照说明安装 NIST 库 （ToxID 必需）。

   当向导提示选择目标文件夹时，选择 **C:\Program Files\NISTMS**。

7. 安装合适的仪器驱动器，在 Thermo Foundation Instrument Configuration （Thermo Foundation 仪器配置）对话框中配置仪器。

现在可以启动 TraceFinder 应用程序。

❖ **若要安装示例数据**

（可选）点击 **Example Data （示例数据）**按钮，按照说明安装包含示例批次数据的示例项目。

❖ **若要启动 TraceFinder 应用程序**

1. 配置仪器。

   TraceFinder 应用程序正在运行时，用户无法进行仪器配置。

2. 双击桌面上的 **TraceFinder** 图标，或者转至 **Start（开始）> All Programs（所有程序）> Thermo TraceFinder > TraceFinder Forensic Toxicology （TraceFinder 法医毒物学）**。

   默认情况下未启用用户安全功能，应用程序无需密码。若要启用用户安全，参阅第 82 页的 “User Security （用户安全)”。

❖ **若要登录 TraceFinder 应用程序 （当用户安全启用时）**

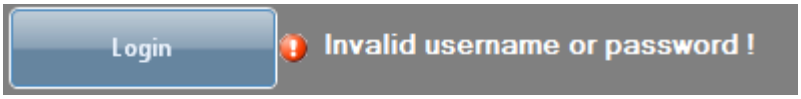
1. 输入 TraceFinder 登录界面分配的用户名。

   系统管理员为用户设置一个用户帐户后，用户才可以登录 TraceFinder 应用程序。管理员将分配用户名和密码，并授予用户特定模式的访问权限。

   重要信息 若在启用用户安全情况下，以管理员权限首次登录时以 **Administrator/Password （管理员 / 密码）**作为 *username/password （用户名 / 密码）*。

2. 输入密码。

   如果输入的用户名或密码不匹配，系统会出现错误提示：

   输入正确的用户名或密码，或者联系系统管理员。

3. 单击 **Login （登录）**。

   TraceFinder 主菜单将显示。参阅第 32 页的 “TraceFinder 主菜单 ”。

4. 若要取消登录并关闭 TraceFinder 应用程序，点击 **Exit TraceFinder （退出 TraceFinder）**。

图 2. TraceFinder 登录界面

表 1. 登录界面参数

参数	描述
Username （用户名）	分配给用户的用户名。
Password （密码）	为用户名分配的密码。
Login （登录）	验证用户名和密码，并显示主菜单。
Exit TraceFinder （退出 TraceFinder）	未登录时退出 TraceFinder 应用程序。

安装功能模块

根据以下说明安装和启用 TraceFinder 功能模块以实现多通道。

❖ 若要安装功能模块

1. 根据说明安装 TraceFinder 应用程序。

   参阅第 10 页的 “ 安装 TraceFinder 应用程序 ”。

2. 再次打开 TraceFinder 安装文件，然后点击 **Next**。
3. 点击 **TraceFinder Power Modules （TraceFinder 功能模块）**按钮，按照说明安装多通道模块。
4. 对功能模块进行授权。

   对功能模块的授权参照 TraceFinder 应用程序授权的步骤。参阅第 x 页的 “ 系统激活 ”。

❖ 若要启用功能模块

1. 启动 TraceFinder 应用程序。
2. 转至 Configuration （配置）模式。
3. 点击导航窗格中的 **Application Configuration （应用程序配置）**。
4. 点击 **Optional Features （可选特性）**。
5. 在 Optional Features 页面上选中 **Multiplexing （多通道）**复选框。

   有关详细说明，参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。

6. 点击 **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。

7. 点击 **Yes**。

安装 NIST 和 QED 库

当使用三重四极杆仪器时，按照以下说明安装 NIST 和 QED 库。

❖ 若要安装 NIST 库

1. 打开 TraceFinder 安装文件，然后点击 **Next**。
2. 单击 **NIST Library**。

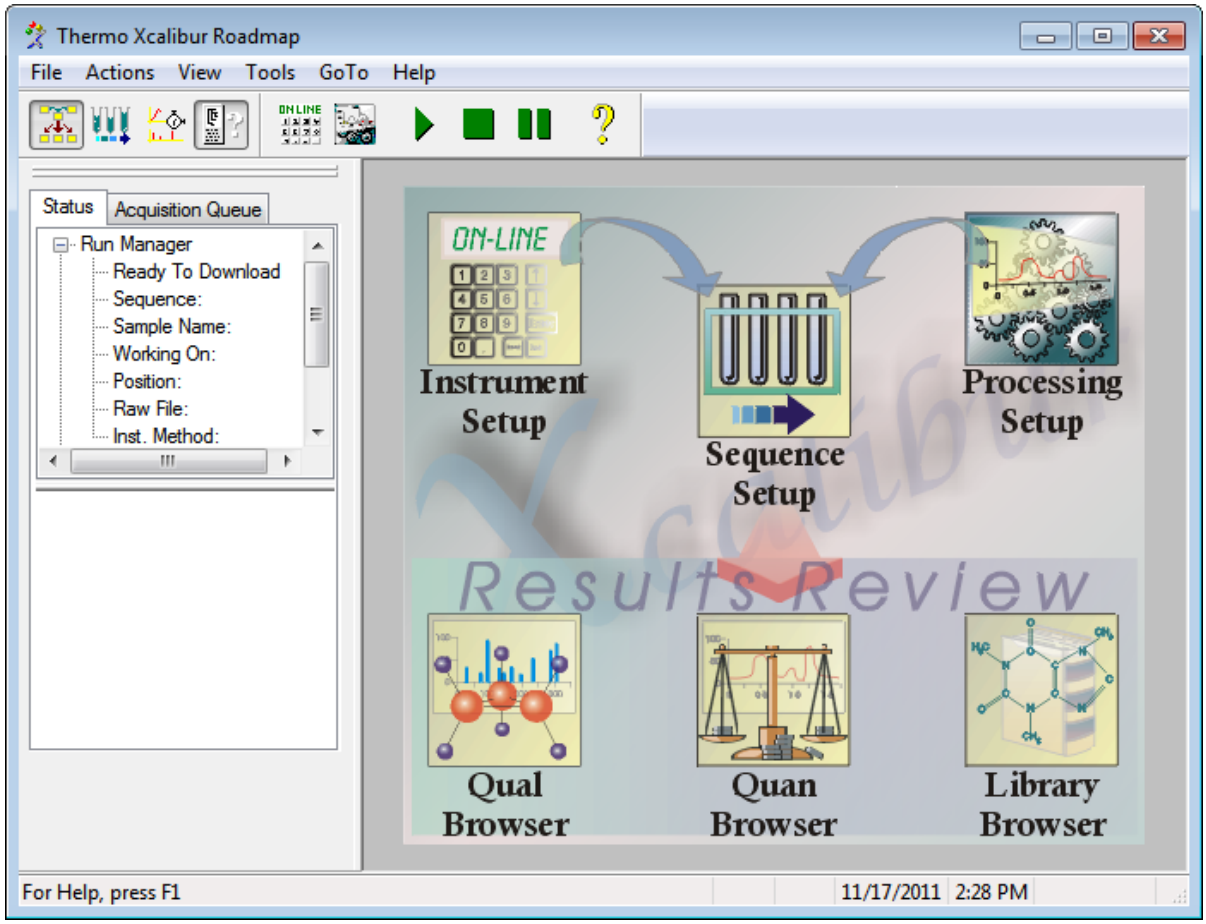
   NIST 08 MS Search and AMDIS Setup （NIST 08 质谱图检索和 AMDIS 设置）向导打开。
3. 按照设置向导中的说明操作。
4. 当向导提示选择目标文件夹时，选择 **C:\Program Files\NISTMS**。

❖ 若要安装 QED 库

1. 双击桌面上的 **Xcalibur** 图标，

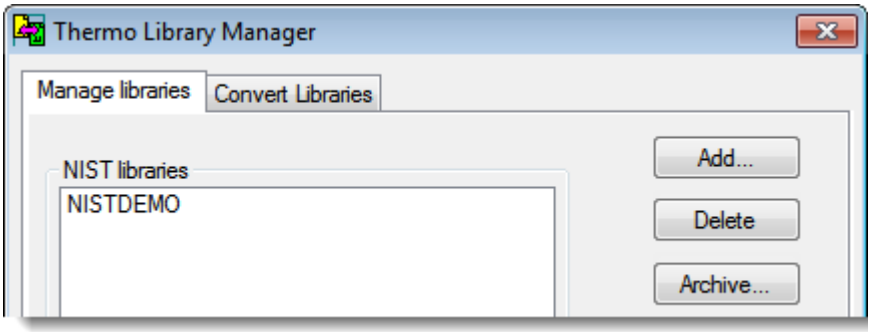
。

   Thermo Xcalibur 导航图打开。



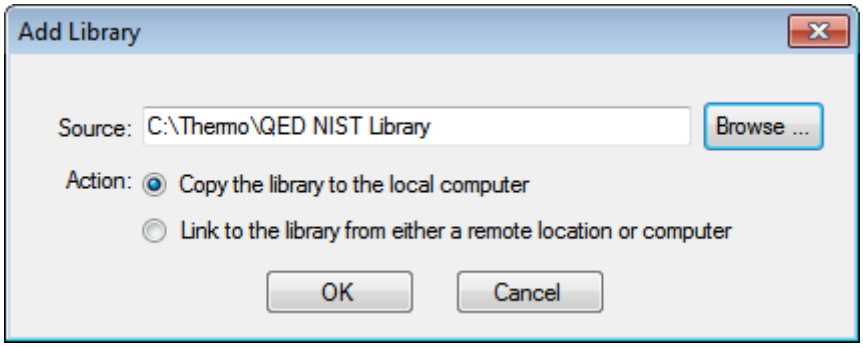
2. 从主菜单中选择 **Tools （工具） > Library Manager （库管理器）**。

   Thermo Library Manager （Thermo 库管理器）对话框打开，显示 NIST Libraries 列表中的 NIST 库。



3. 点击 **Add （添加）**。

   Add Library （添加库）对话框打开。

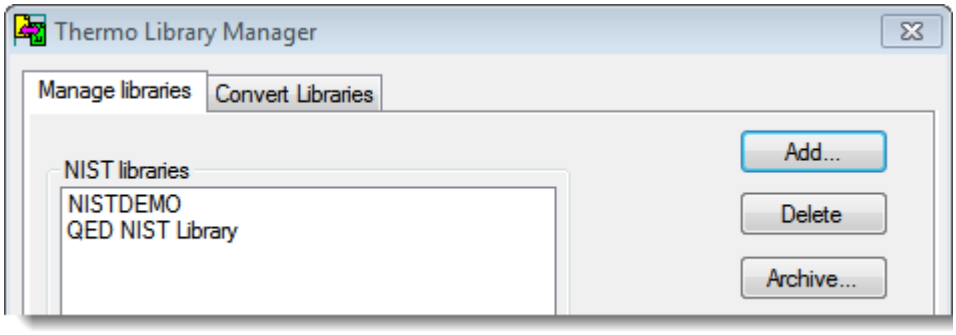


4. 点击 **Browse （浏览）**，然后在 C:\Thermo 文件夹中找到 QED 库。
5. 点击 **OK**。

   Xcalibur 应用程序报告已将该库添加至 NIST 应用程序。

6. 点击 **Dismiss （退出）**以关闭消息框。

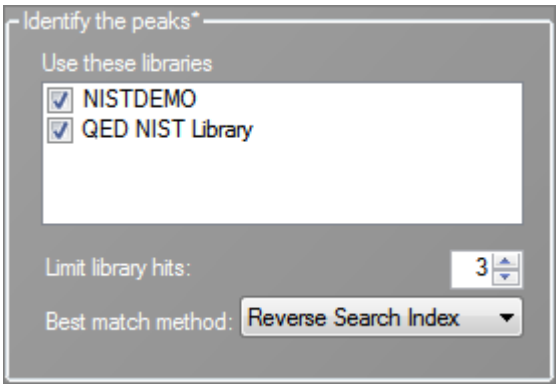
   Xcalibur 应用程序将 QED 库添加至 Library Manager 中的 NIST 库列表中。



7. 点击 Thermo Library Manager 对话框中的 **Exit （退出）**。
8. 启动 TraceFinder 应用程序。
9. 转至 Method Development （方法开发）模式。
10. 点击位于导航窗格的 **Method View （方法视图）**。

11. 从主菜单依次选择 **File （文件） > New （新建） > Method Template （方法模板）**。

    Method Template Editor （方法模板编辑器）在 Use These Libraries （使用这些库）列表中显示 QED NIST Library （QED NIST 库）。



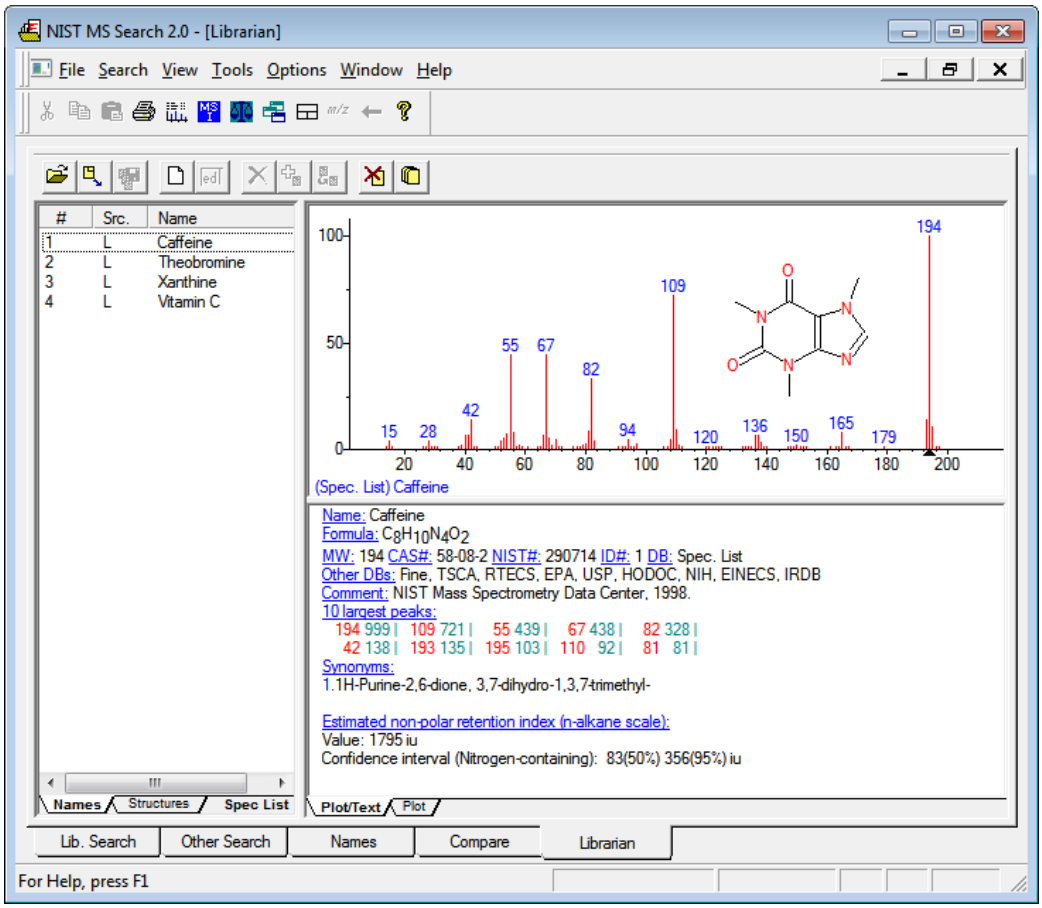
启动 NIST Library Browser

利用 NIST MS Search （NIST 质谱图检索）工具检索 NIST 库。

❖ **若要打开 NIST 库浏览器**

从主菜单中选择 **Go （运行） > Launch Library Browser （启动库浏览器）**。

NIST MS Search 窗口打开。



有关使用库浏览器的详细说明，参阅 NIST MS Search 窗口中的 Help （帮助）。

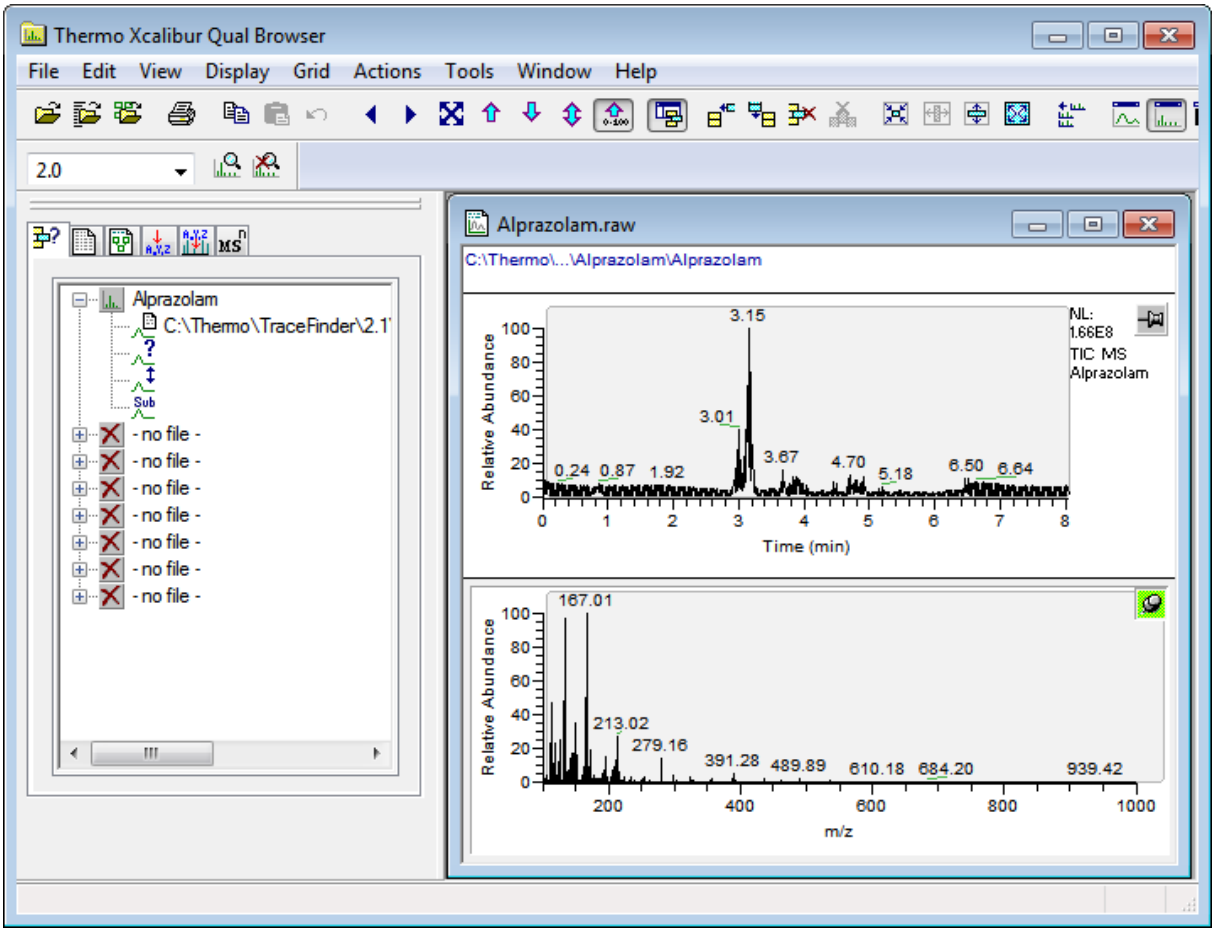
启动 Qual Browser

利用 Qual Browser （定性浏览器）从原始数据文件或定性处理结果查看色谱图和质谱图。

❖ **若要打开 Qual Browser**

从 TraceFinder 主菜单中选择 **Go （运行） > Launch Qual Browser （启动定性浏览器）**。

Thermo Xcalibur Qual Browser 显示。



有关使用 Qual Browser 的详细说明，参阅 Qual Browser 的帮助。

转换遗留数据

利用 TraceFinder Legacy Data Converter （TraceFinder 遗留数据转换器）将方法、批次、方法模板或批次模板从 TraceFinder 1.0.1/1.1/2.0、 EnviroLab Forms、 QuanLab Forms 或 ToxLab Forms 原始版本转换为可兼容 TraceFinder 2.1 目标版本。

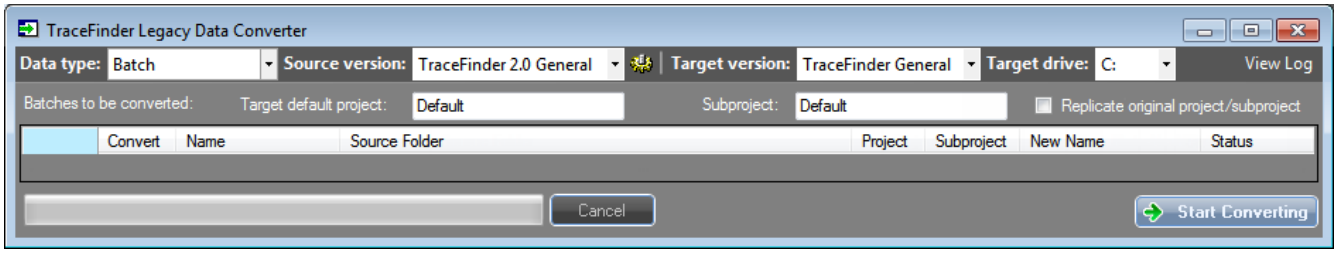
表 2. 版本兼容性

原始	TraceFinder 2.1 目标			
	General（常规）	EFS（环境和食品安全）	Clinical Research（临床研究）	Forensic Toxicology（法医毒物学）
TraceFinder 2.0 General	✓	✓	✓	✓
TraceFinder 2.0 EFS		✓		
TraceFinder 2.0 Clinical Research			✓	✓
TraceFinder 1.1 General	✓	✓	✓	✓
TraceFinder 1.1 EFS		✓		
TraceFinder 1.0.1		✓		
EnviroLab Forms 3.1		✓		
QuanLab Forms 3.1	✓	✓	✓	✓
ToxLab Forms 3.1			✓	✓
EnviroLab Forms 2.5.2		✓		
QuanLab Forms 2.5.2	✓	✓	✓	✓
ToxLab Forms 2.5.2			✓	✓

❖ **若要打开 TraceFinder Legacy Data Converter**

从主菜单选择 **Go （运行） > Launch Legacy Data Converter （启动遗留数据转换器）**。

TraceFinder Legacy Data Converter 窗口打开。



本部分主题包含以下主题：

- 转换方法
- 转换批次
- 转换方法模板
- 转换批次模板

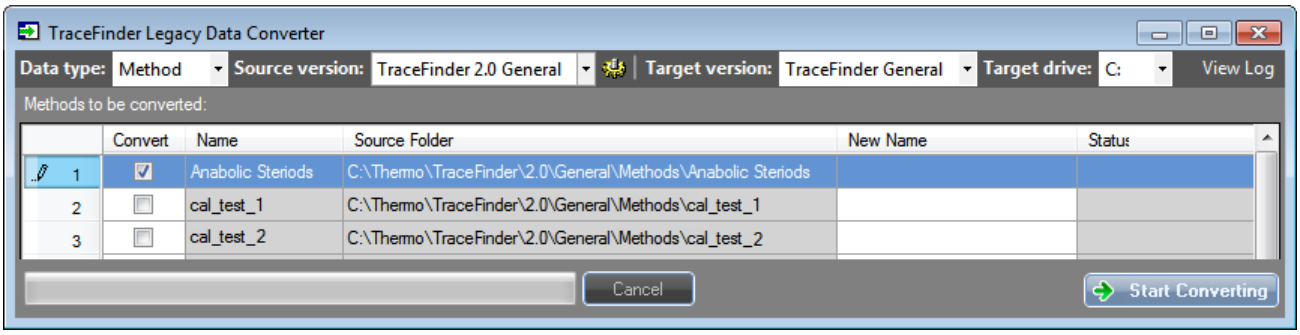
转换方法

使用数据转换器将遗留数据转换为 TraceFinder 2.1 方法。

❖ **若要转换方法**

1. 在 Data Type （数据类型）列表中，选择 **Method （方法）**。

   TraceFinder Legacy Data Converter 显示转换方法的界面。



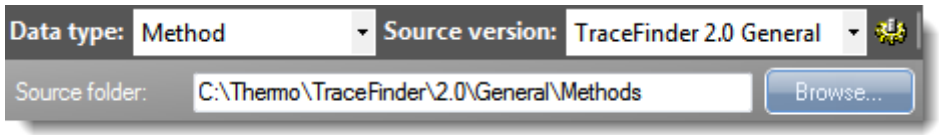
2. 在 Source Version （原始版本）列表中，选择希望转换的方法版本。

   Methods to be Converted （待转换方法）显示选中原始版本的 Methods 文件夹中的方法。应用程序验证方法文件是 .mmx 文件格式。

3. 若要转换一个不在默认列表中的方法，执行以下操作：

   a. 点击 **Source Folder （原始文件夹）**图标， 。

      应用程序将 Source Folder 框添加至窗口。



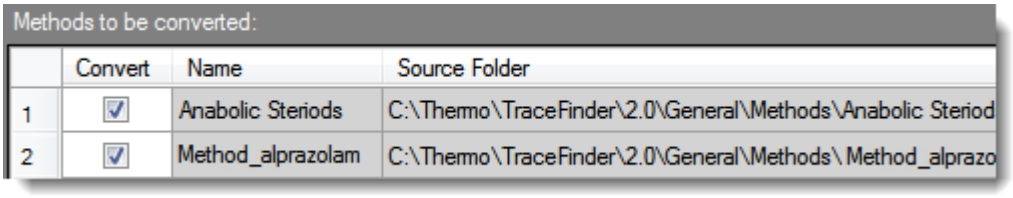
   b. 点击 **Browse** 找到方法文件夹。

      可以选择一个特定方法文件夹或包含多个方法的文件夹。

   c. 点击 Browser for Folder （浏览文件夹）对话框中的 **OK**。

   应用程序在 Methods to be Converted 列表中显示选中的文件夹。

   当选择一个包含多个方法文件夹的文件夹时，应用程序将显示所有的方法。



4. 在 Target Version 列表中，选择将要转化为的版本。

   列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页的 “ 版本兼容性 ”。

5. 在 Target Drive （目标驱动器）列表中，选择一个固定驱动器。

   无法将已转换文件写入映射驱动器。

6. （可选）在 New Name （新名称）栏中，更改希望转换的每个方法的默认新名称。

   当填充 Methods to be Converted 列表时，应用程序检查每个方法以确认目标文件夹中是否存在该名称的方法。

   - 如果方法名称已经存在于目标文件夹中，默认新名称是在原始名称之后添加 “_1”。
   - 如果方法名称不存在于目标文件夹中，应用程序保持原始的方法名称。

   重要信息 转换无法覆盖一个已存在的文件名。若新名称与已有方法文件相同，则转换失败。当手动输入一个新名称时，必需验证该名称是否已存在。

7. 选中将要转换的每个方法模板的复选框，然后点击 Start Converting 。

   应用程序确认所有待转换方法使用 .mmx 文件格式。

   当转换过程开始时，应用程序显示一个状态栏和 Cancel （取消）按钮。可以取消将要处理的转换，但是无法取消当前正在转换的方法。

   当 Status （状态）栏报告方法已成功转换时，应用程序将已转换文件写入 C:\Thermo*TargetVersion*\Methods 文件夹。

   注释 若方法转换失败，则 Status 栏显示错误图标。在图标上方按住鼠标以显示错误消息。

8. 若要查看转换日志，点击 **View Log （查看日志）**。

   应用程序在 Microsoft Notepad 文本编辑器窗口打开某一时期内累积的日志文件。

图 3. 转换方法的示例日志文件

```
======= Start Converting Method from TraceFinder 2.0 to TraceFinder 2.1          ==========
-- Converting master method from
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Methods\Sulphonamide Method\Sulphonamide Method.mmx'
-- Creating master method
-- Importing properties of object 'MethodData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Methods\Sulphonamide Method\Sulphonamide Method.mmx'
-- Saving master method
-- Copying instrument method
-- Successfully converted master method from
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Methods\Sulphonamide Method\Sulphonamide Method.mmx'
   to 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\...\Methods\Sulphonamide Method_1\Sulphonamide Method_1.mmx'
```

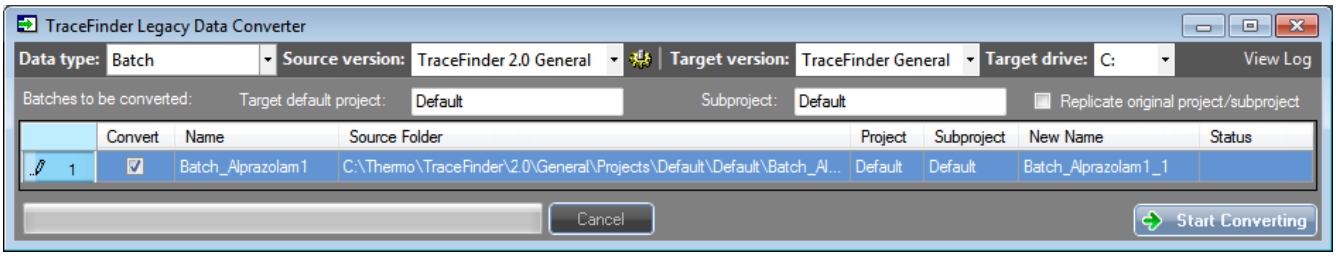
转换批次

使用数据转换器将遗留批次转换为 TraceFinder 2.1 批次。

❖ 若要转换批次

1. 在 Data Type 列表中，选择 **Batch （批次）**。

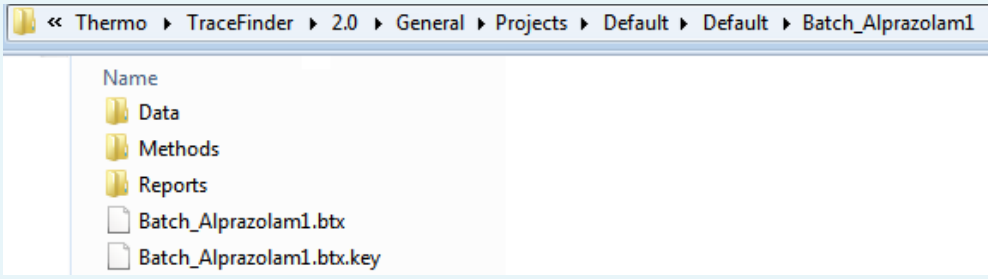
   TraceFinder Legacy Data Converter 显示转换批次的界面。



2. 在 Source Version 列表中，选择希望转换的批次模板的版本。

   Batches to be Converted （待转换批次）显示选中原始版本的 Projects （项目）文件夹中的所有批次。

   重要信息 一个有效的批次文件 （.btx）必须在名称相同的文件夹中。例如：



3. 若要转换一个不在默认列表中的批次，执行以下操作：

   a. 点击 **Source Folder** 图标， 。

      应用程序将 Source Folder 框添加至窗口。

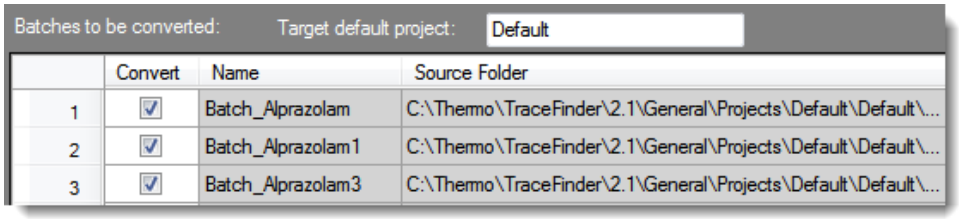
   b. 点击 **Browse** 找到批次文件夹。

      可以选择一个特定批次文件夹或包含多个批次的项目或子项目文件夹。

   c. 点击 Browser for Folder 对话框中的 **OK**。

   应用程序在 Batches to be converted 列表中显示选择的文件夹和该文件夹中的所有批次。

当选择一个包含多个批次文件夹的项目或子项目文件夹时，应用程序将显示所有批次。



4. 在 Target Version （目标版本）列表中，选择将要转化为的版本。

   列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页的 “ 版本兼容性 ”。

5. 在 Target Drive 列表中，选择一个固定驱动器。

   无法将已转换文件写入映射驱动器。

6. 执行下列操作之一以为已转换批次创建一个项目或子项目：

   在 Target Default Project （目标默认项目）和 Subproject （子项目）框内输入项目和子项目的名称。

   – 或 –

   选中 **Replicate Original Project/Subproject （复制原始项目 / 子项目）**复选框。

7. （可选）在 New Name 栏中，更改希望转换的每个批次的默认新名称。

   当填充 Batches to be Converted 列表时，应用程序检查每个批次以确认目标文件夹中是否存在该名称的批次。

   - 如果批次名称已经存在于目标文件夹中，默认新名称是在原始名称之后添加 “_1”。
   - 如果批次名称不存在于目标文件夹中，应用程序保持原始的批次名称。

   重要信息 转换无法覆盖一个已存在的文件名。若新名称与已有批次文件夹相同，则转换失败。当手动输入一个新名称时，必需验证该名称是否已存在。

8. 选中将要转换的每个批次的复选框，然后点击

。

   应用程序确认所有待转换批次使用 .btx 文件格式。

   当转换过程开始时，应用程序显示一个状态栏和 Cancel 按钮。可以取消将要处理的转换，但是无法取消当前正在转换的批次。

   当 Status 栏报告批次已成功转化时，应用程序将已转换批次写入 C:\Thermo*TargetVersion*\Projects 文件夹，该文件夹可以使用原始项目和子项目名称，也可以使用输入的新名称。

   注释 若批次转换失败，则 Status 栏显示错误图标。在图标上方按住鼠标以显示错误消息。

9. 若要查看转换日志，点击 **View Log**。

   应用程序在 Notepad 文本编辑器窗口打开某一时期内累积的日志文件。

图 4. 转换批次的示例日志文件

```
======== Start Converting Batch from TraceFinder2.0 General to TraceFinder General ==========
-- Converting batch from 'C:\Thermo\TraceFinder\1.1\Projects\Default\Default\batch_steroids5\batch_steroi
-- Importing properties of object 'BatchData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Projects\Default\Default\batch_steroids5\batch_steroids5.btx'
-- ---------- Importing sample 'steroids01_110504155226' [1/3] ----------
-- Importing properties of object 'SampleData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Projects\Default\Default\batch_steroids5\Data\steroids01_110504155226.rsx
-- Saving sample data
-- Copying raw file from 'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Projects\Default\Default\batch_steroids5\Data\steroids
   to 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\Default\Default\batch_steroids5\Data\steroids01_11050
-- ---------- Completed sample import ----------
-- Importing local method for 'batch_steroids5'
-- Importing properties of object 'MethodData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Projects\Default\Default\batch_steroids5\Methods\method_steroids\batch_st
-- Saving local method data for 'batch_steroids5_method_steroids'
-- Copying instrument method
-- Saving batch data for 'batch_steroids5'
-- Successfully converted batch from 'C:\Thermo\TraceFinder\2.0\Projects\Default\Default\batch_steroids5\
   to 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\Default\Default\batch_steroids5\batch_steroids5.btx'
```

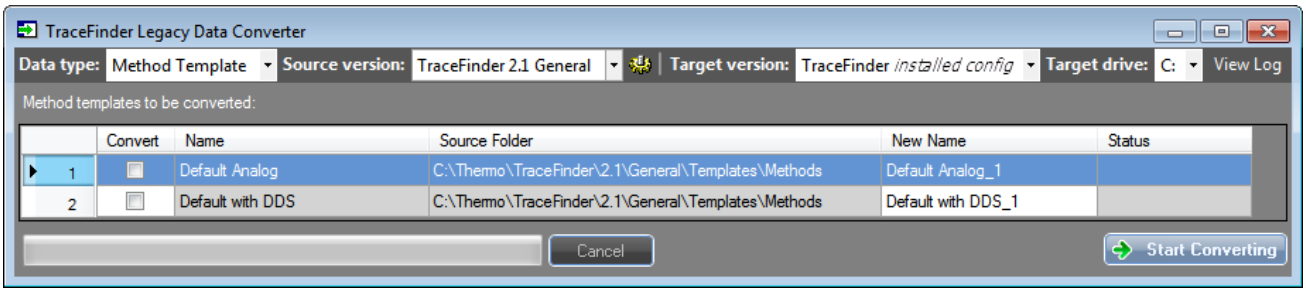
转换方法模板

使用数据转换器将遗留方法模板转换为 TraceFinder 2.1 方法模板。

❖ 若要转换方法模板

1. 在 Data Type 列表中，选择 **Method Template （方法模板）**。

   TraceFinder Legacy Data Converter 显示转换方法模板的界面。



2. 在 Source Version 列表中，选择希望转换的方法模板的版本。

   Method Templates to be Converted （待转换方法模板）显示选中原始版本的 Templates（模板）文件夹中的方法模板。应用程序验证方法模板文件是 .pmtx 文件格式。

3. 若要转换一个不在默认列表中的方法模板，执行以下操作：

   a. 点击 **Source Folder** 图标， 。

      应用程序将 Source Folder 框添加至窗口。

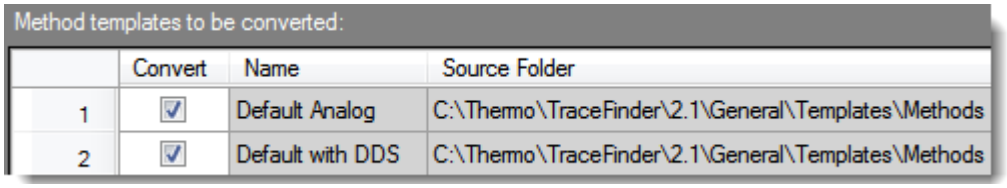
   b. 点击 **Browse** 找到模板文件夹。

      可以选择一个特定模板文件夹或包含多个模板的文件夹。

   c. 点击 Browser for Folder 对话框中的 **OK**。

   应用程序显示 Method Templates to be Converted 列表中选中的文件夹。

   当选择一个包含多个方法模板文件夹的文件夹时，应用程序将显示所有的方法模板。



4. 在 Target Version 列表中，选择将要转化为的版本。

   列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页的 “ 版本兼容性 ”。

5. 在 Target Drive 列表中，选择一个固定驱动器。

   无法将已转换文件写入映射驱动器。

6. （可选）在 New Name 栏中，更改希望转换的每个方法模板的默认新名称。

   当填充 Method Template to be Converted 列表时，应用程序检查每个方法模板以确认目标文件夹中是否存在该名称的模板。

   - 如果方法模板名称已经存在于目标文件夹中，默认新名称是在原始名称之后添加“_1”。
   - 如果方法模板名称不存在于目标文件夹中，应用程序保持原始的方法模板名称。

   重要信息 转换无法覆盖一个已存在的文件名。若新名称与已有方法模板文件相同，则转换失败。当手动输入一个新名称时，必需验证该名称是否已存在。

7. 选中将要转换的每个方法模板的复选框，然后点击

。

   应用程序确认所有待转换方法模板使用 .pmtx 文件格式。

   当转换过程开始时，应用程序显示一个状态栏和 Cancel 按钮。可以取消将要处理的转换，但是无法取消当前转换的模板。

   当 Status 栏报告模板已成功转换时，应用程序将已转换模板写入 C:\Thermo*TargetVersion*\Templates\Methods 文件夹。

   注释 若模板转换失败，则 Status 栏显示错误图标。在图标上方按住鼠标以显示错误消息。

8. 若要查看转换日志，点击 **View Log**。

   应用程序在 Notepad 文本编辑器窗口打开某一时期内累积的日志文件。

图 5. 转换方法模板的示例日志文件

```
======== Start Converting Method Template from TraceFinder 2.1 General to TraceFinder EFS ==========
-- Converting method template from 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Templates\Methods\MethodTemplate
-- Importing properties of object 'ProcMethodTemplateData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Templates\Methods\MethodTemplate4962.pmtx'
-- Saving the method template
-- Successfully converted method template from 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Templates\Methods\Met
   to 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\EFS\Templates\Methods\MethodTemplate4962.pmtx'
```

转换批次模板

使用数据转换器将遗留批次模板转换为 TraceFinder 2.1 批次模板。

❖ 若要转换批次模板

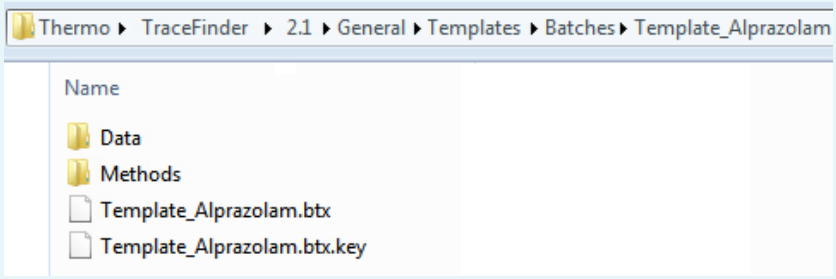
1. 在 Data Type 列表中，选择 **Batch Template （批次模板）**。

   TraceFinder Legacy Data Converter 显示转换批次模板的界面。

2. 在 Source Version 列表中，选择希望转换的批次模板的版本。

   Batch Templates to be Converted （待转换批次模板）显示选中原始版本的 Templates 文件夹中的方法模板。

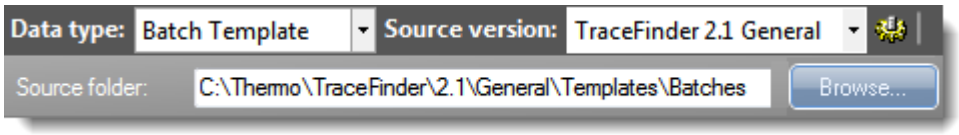
   重要信息 一个有效的批次模板文件 （.btx）必须在名称相同的文件夹中。例如：

3. 若要转换一个不在默认列表中的批次模板，执行以下操作：

   a. 点击 **Source Folder** 图标， 。

      应用程序将 Source Folder 框添加至窗口。

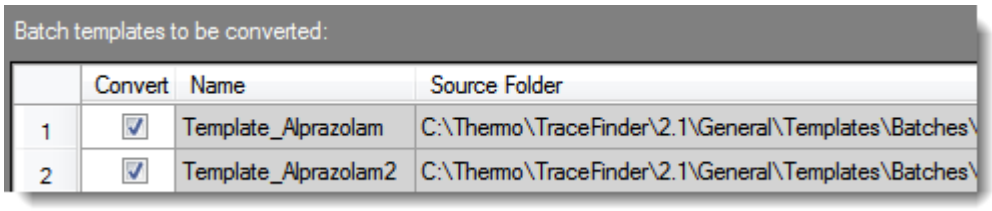
   b. 点击 **Browse** 找到模板文件夹。

      可以选择一个特定批次模板文件夹或包含多个批次模板的文件夹。

   c. 点击 Browser for Folder 对话框中的 **OK**。

   应用程序显示 Batch Templates to be Converted 列表中选中的文件夹。

   当选择一个包含多个批次模板文件夹的文件夹时，应用程序将显示所有的批次模板。

4. 在 Target Version 列表中，选择将要转化为的版本。

   列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页的 “ 版本兼容性 ”。

5. 在 Target Drive 列表中，选择一个固定驱动器。

   无法将已转换文件写入映射驱动器。

6. （可选）在 New Name 栏中，更改希望转换的每个批次模板的默认新名称。

   当填充 Batch Templates to be Converted 列表时，应用程序检查每个批次模板以确认目标文件夹中是否存在该名称的批次模板。

   - 如果批次模板名称已经存在于目标文件夹中，默认新名称是在原始名称之后添加“_1”。
   - 如果批次模板名称不存在于目标文件夹中，应用程序保持原始的批次模板名称。

   重要信息 转换无法覆盖一个已存在的文件名。若新名称与已有批次模板文件相同，则转换失败。当手动输入一个新名称时，必需验证该名称是否已存在。

7. 选中将要转换的每个批次模板的复选框，然后点击

。

   应用程序确认所有待转换批次模板使用 .btx 文件格式。

   当转换过程开始时，应用程序显示一个状态栏和 Cancel 按钮。可以取消将要处理的转换，但是无法取消当前转换的模板。

   当 Status 栏报告模板已成功转化时，应用程序将已转换模板文件夹写入 C:\Thermo*TargetVersion*\Templates\Batches 文件夹。

   注释 若模板转换失败，则 Status 栏显示错误图标。在图标上方按住鼠标以显示错误消息。

8. 若要查看转换日志，点击 **View Log**。

   应用程序在 Notepad 文本编辑器窗口打开某一时期内累积的日志文件。

图 6. 转换批次模板的示例日志文件

```
======== Start Converting Batch Template from TraceFinder 2.1 General to TraceFinder EFS ==========
-- Converting batch template from 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\ProjectA\SubProjectA1\Batc
-- Importing properties of object 'BatchData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\ProjectA\SubProjectA1\Batch5247\Batch5247.btx'
-- ---------- Importing sample 'Unknown1' [1/1] ----------
-- Importing properties of object 'SampleData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\ProjectA\SubProjectA1\Batch5247\Data\Unknown1.rsx'
-- ---------- Completed sample import ----------
-- Importing local method for 'Batch5247'
-- Importing properties of object 'MethodData' from XML file
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\ProjectA\SubProjectA1\Batch5247\Methods\Method2\Batch
-- Saving local method data for 'Batch5247_Method2'
   Successfully converted batch template from
   'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\General\Projects\ProjectA\SubProjectA1\Batch5247\Batch5247.btx'
    to 'C:\Thermo\TraceFinder\2.1\EFS\Templates\Batches\Batch5247\Batch5247.btx'
```

选择模式

当用户安全启用时，主菜单显示当前用户分配角色可用的选项。下表显示各用户职务的可用模式：

表 3. 用户职务和可用模式

用户职务	Method Development（方法开发）	Acquisition（采集）	Analysis（分析）	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）			✓	

注释 当用户安全未启用时，所有模式对所有用户开放。

按照如下步骤进行操作：

- 若要选择模式
- 若要显示仪器错误日志
- 若要监测仪器状态
- 从主菜单观看实时显示

❖ 若要选择模式

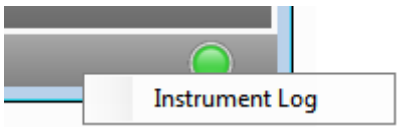
1. 从主菜单点击要使用的模式。

   主菜单仅显示有权使用的模式。参阅第 32 页的 “TraceFinder 主菜单 ”。

2. 若要更改 TraceFinder 应用程序模式，点击导航窗格中的模式按钮。

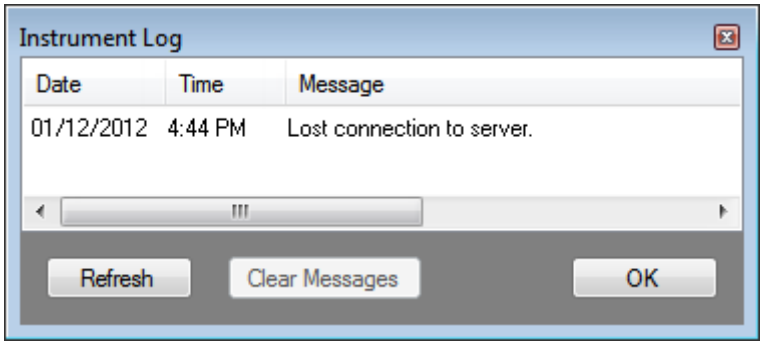
❖ **若要显示仪器错误日志**

1. 右击任意模式右下角的状态灯。



2. 选中 **Instrument Log （仪器日志）**。

   Instrument Log 对话框打开。



   Instrument Log 对话框显示从 TraceFinder 应用程序启动或从上次清除消息日志开始发生的所有仪器错误。

3. 执行下列操作之一：

   - 点击 **Refresh （刷新）**以显示打开 Instrument Log 对话框后发生的错误。
   - 点击 **Clear Messages （清除消息）**以从 Instrument Log 显示中清除消息。

     应用程序仅清除 Instrument Log 显示的消息。这些消息保留在以下日志文件中：

     C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Logs\TraceFinder.log

   - 单击 **OK** 退出 Instrument Log 对话框。

❖ **若要监测仪器状态**

查看 TraceFinder 窗口右下角的状态灯：

绿色表示该仪器已准备就绪。

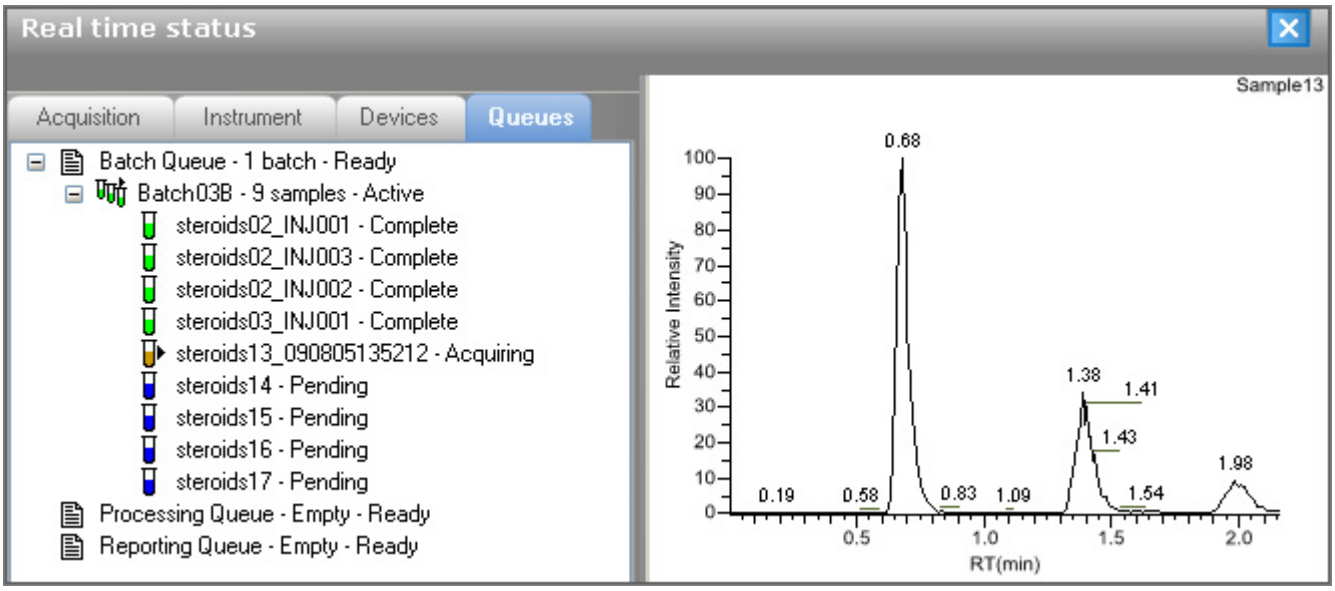
黄色代表该仪器处于待机模式。

红色代表仪器被关闭或没有配置任何设备。

❖ **从主菜单观看实时显示**

点击 **Real Time Status （实时状态）**。

实时状态在主菜单下方显示。



有关实时显示所有特性的说明，参阅第 248 页的 “ 实时显示 ”。

TraceFinder 主菜单

未启用用户安全时或 LabDirector 用户的主菜单如下：

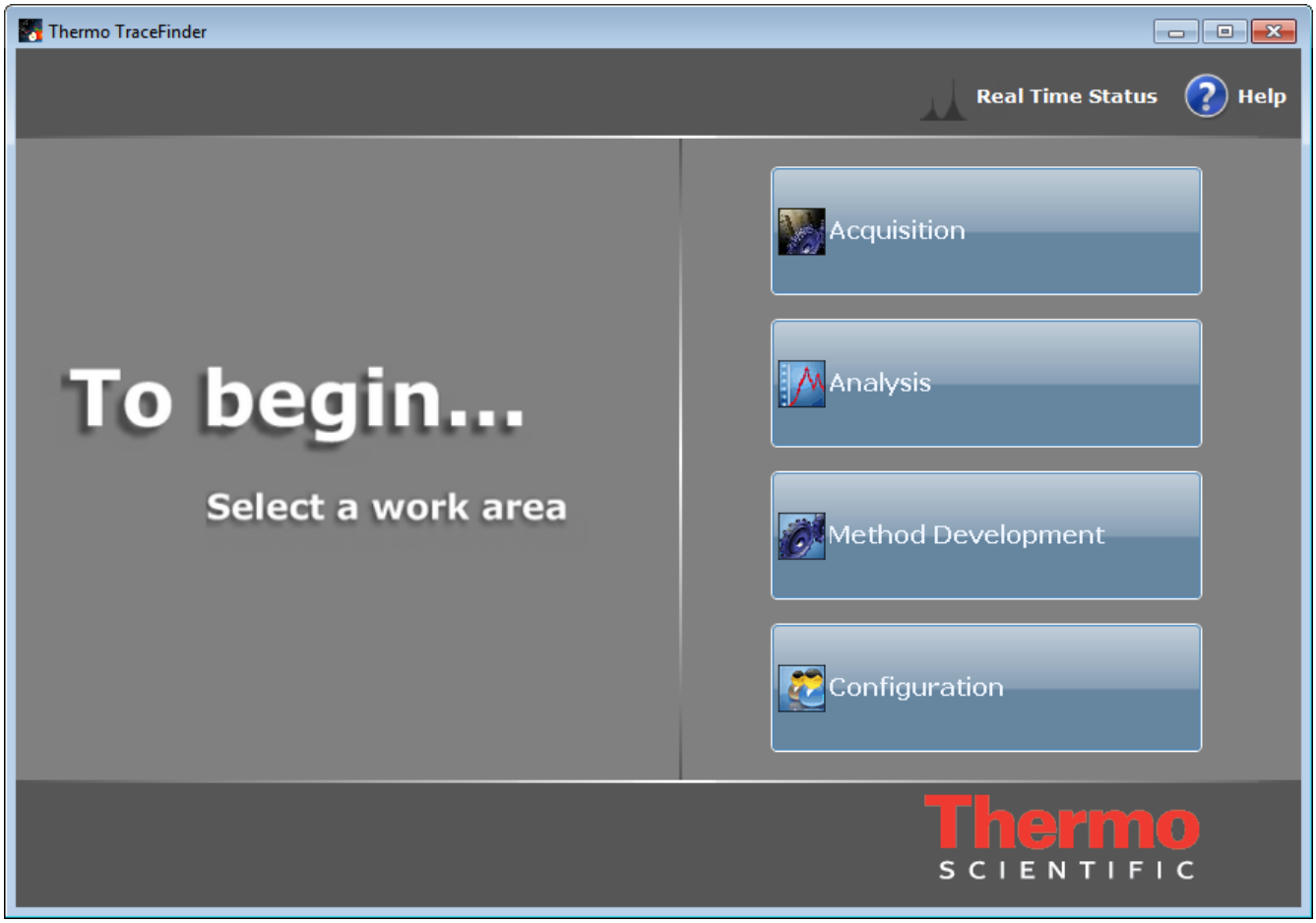


表 4. TraceFinder 主菜单屏幕参数

参数	描述
Real Time Status （实时状态）	打开当前采集的实时显示。采集进度在当前模式窗口中显示。
Help （帮助）	打开 TraceFinder 帮助。
Log Off （注销）	注销当前用户并显示登录画面。该功能仅在用户安全启用时可用。参阅第 82 页的 “User Security （用户安全）”。
Acquisition （采集）	打开 Acquisition 模式，在该模式下可以创建和查看批次、批次数据、报告和当前方法。参阅第 5 章 , “ 使用 Acquisition 模式。 ” 仅当在 Configuration 模式中显示选中 Acquisition Batch Wizard （采集批次向导）时该模式才可用。参阅第 85 页的 “Batch Wizard Style （批次向导风格） ”。
Analysis （分析）	打开 Analysis 模式，在该模式下可以复查批次、批次数据、报告和本地方法。参阅第 6 章 , “ 使用 Analysis 模式。 ”
Method Development （方法开发）	打开 Method Development 模式，在该模式下可以创建主方法、仪器方法或开发批次。参阅第 4 章 , “ 使用 Method Development 模式。 ”
Configuration （配置）	打开 Configuration 模式，在该模式下可以设置权限、分配用户职务、配置可用报告、输入新报告以及维护包括化合物数据库在内的多个数据库。参阅第 3 章 , “ 使用 Configuration 模式。 ”

使用 Configuration 模式

本章讨论了当用户安全启用时分配给 ITAdmin （IT 管理员）和 LabDirector （实验室主任）的配置任务。当用户安全未启用时，所有用户都可以使用 Configuration （配置）模式下除 User Administration （用户管理）任务之外的所有任务。

目录

- User Administration
- Project Administration
- Compound Datastore
- Application Configuration

ITAdmin 或 LabDirector 职务的用户负责以下任务：

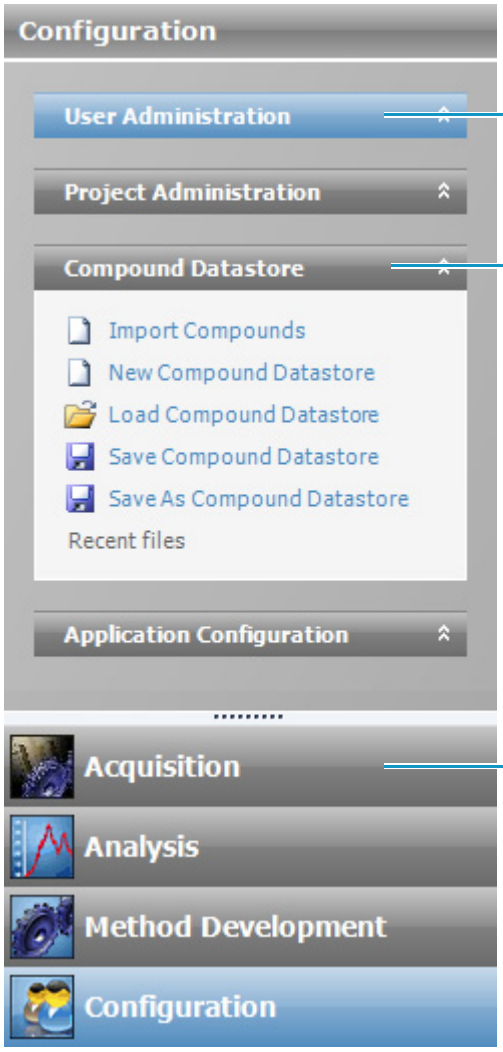
- 处理数据库
- 为使用者分配职务
- 了解安全规则、使用者和组
- 创建本地用户和网络组
- 创建项目和子项目
- 维护化合物数据库中的化合物

❖ **若要访问 Configuration 模式**

从主菜单或导航窗格单击 **Configuration**。

Configuration 模式导航窗格打开。

图 7. Configuration 模式导航窗格



仅 LabDirector 或 ITAdmin 职务的用户可用。

仅当在应用程序 Configuration 视图中选择 Compound Datastore（化合物数据库）选项时，该命令才可用。

仅当在应用程序 Configuration 视图中选择 Acquisition Batch Wizard（采集批次向导）选项时，该命令才可用。

表 5. Configuration 模式导航窗格功能

功能	描述
User Administration（用户管理）	打开 User Administration 视图，可以在其中添加、删除或编辑使用者帐户和权限。参阅第 37 页的 “User Administration”。 当用户安全未启用时，该任务窗格不可用。当用户安全启用时，该任务窗格仅对 LabDirector 或 ITAdmin 职务的用户可用。参阅第 61 页的 “Application Configuration”。
Project Administration（项目管理）	打开 Project Administration 视图，可以在其中创建和管理项目及子项目。参阅第 46 页的 “Project Administration”。
Compound Datastore（化合物数据库）	打开 Compound Datastore 视图，可以在其中管理当前数据库中化合物的定义。参阅第 50 页的 “Compound Datastore”。 仅当在 Application Configuration （应用程序配置）视图的 Optional Features（可选特性）页面选中 Compound Datastore 选项后，该任务栏才可用。参阅第 61 页的 “Application Configuration”。
Application Configuration（应用程序配置）	打开 Application Configuration 视图，在该视图上可以指定可用报告、应用程序默认设置和检测算法。也可以启用用户安全、目标筛选、化合物数据库、多通道和批次向导特性。参阅第 61 页的 “Application Configuration”。

User Administration

在 Configuration 模式的 User Administration 视图中，职务为 LabDirector 或 ITAdmin 的用户可以添加、删除或编辑用户帐户和权限。

有关每个用户职务以及每个职务权限和职责的详细说明，参阅第 43 页的 “ 选择用户职务 ”。

❖ 若要打开 User Administration 视图

1. 从主菜单或导航窗格单击 **Configuration**。

Configuration 导航窗格打开。

注释 仅当启用用户安全时 User Administration 视图才可用。按照第 82 页的 “ 若要打开用户安全 ” 的说明进行操作。

2. 点击 **User Administration** 任务窗格。

User Administration 视图打开。参阅第 41 页的 “User Administration 视图 ”。

编辑用户信息

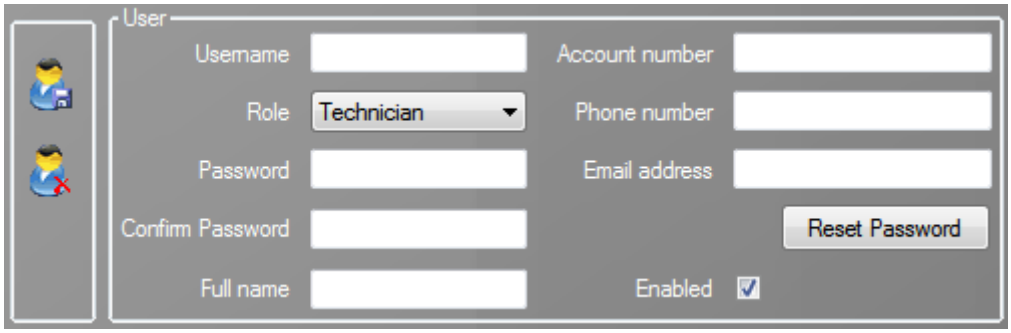
按照如下步骤进行操作：

- 若要添加用户
- 若要编辑用户信息
- 若要更改用户密码
- 若要移除用户

❖ 若要添加用户

1. 点击 **Add User （添加用户）**图标， 。

   应用程序启用视图底部 User （用户）区域的参数。



2. 在 Username （用户名）字段输入唯一名称。
3. 从 Role （职务）列表选择职务。

   LabDirector 或 ITAdmin 职务的用户必须将每个用户分配为这些定义的职务之一。有关每个职务使用权限的详细信息，参阅第 43 页的 “ 选择用户职务 ”。

4. 输入用户密码，并再次输入以确认。

   确保将密码告知用户。

5. （可选）输入用户的全名、帐号、电话号码和电子邮件地址。
6. 若要使该用户登录，选中 **Enabled （已启用）**复选框。

   可以在不删除用户信息的情况下禁止用户登录。按照第 39 页的 “ 若要编辑用户信息 ”的说明进行操作。

7. 执行下列操作之一：

   当所有用户信息均正确时，点击 **Save Changes （保存更改）**图标， 。

   TraceFinder 应用程序将新用户添加至 User Listing （用户列表）表格， User 区域的参数将不可用。

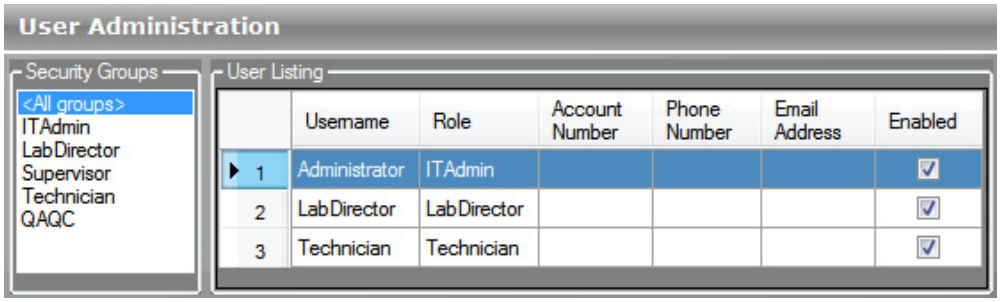
   – 或 –

   若要删除所有信息，
   且不使用所输入的参数值创建新用户，点击 **Cancel Changes （取消更改）**图标， 。

   应用程序删除所有信息且 User 区域的参数将不可用。

❖ 若要编辑用户信息

1. 在 User Listing 中选择一个用户。

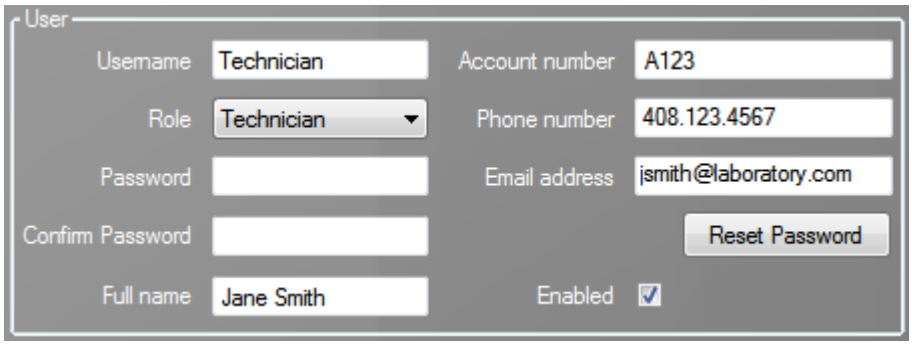


注释 单击行中的任意位置可选择用户。

将用户信息填入用户区域的参数区。

2. 点击 **Edit User （编辑用户）**图标， 。

   应用程序启用 User 区域的参数。



3. 编辑任意参数值。

   如果正在编辑自己的当前用户名， Enabled 复选框将不可用，因为无法停用自己的帐户。

4. 执行下列操作之一：

   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， User 区域的参数将不可用。

   – 或 –

   若要舍弃所有更改并且不保存编辑信息，点击 **Cancel Changes** 图标， 。

   所有更改将被放弃，用户区域中的参数将不可用。

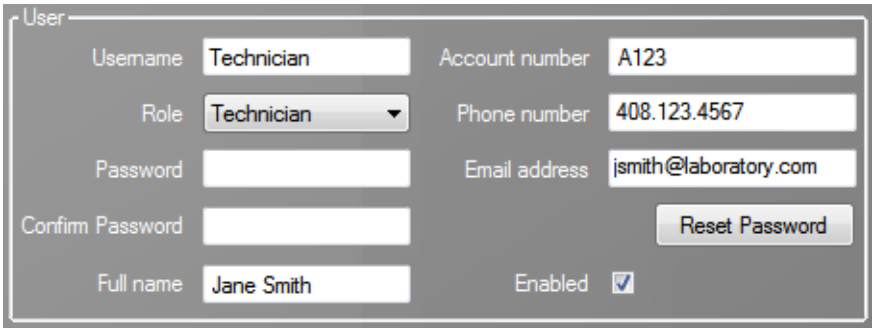
❖ **若要更改用户密码**

1. 在 User Listing 中选择一个用户。

   将用户信息填入用户区域的参数区。

2. 点击 **Edit User** 图标， 。

   用户区域中的参数将启用。



3. 点击 **Reset Password （重置密码）**。

   应用程序设定密码，然后以星号串 ****** 形式确认密码。

4. 在 Password （密码）框内，选中 ****** 然后输入一个新密码。
5. 在 Confirm Password （确认密码）框内，选中 ****** 然后再次输入新密码。
6. 点击 **Save Changes** 图标， 。

   确保将新密码告知用户。

❖ **若要移除用户**

1. 在 User Listing 中选择一个用户。

   注释 单击行中的任意位置可选择用户。

   将用户信息填入用户区域的参数区。

2. 点击 **Remove User （移除用户）**图标， 。

   如果选择当前用户名， Remove User 图标将不可用。无法删除自己的帐户。

3. 收到提示信息时，确认要删除此用户。

   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。

4. 点击 **OK （确定）**。

   注释 在不删除系统中所有用户信息 （即非完全删除用户）的情况下，也可以禁止用户登录。按照第 39 页的 " 若要编辑用户信息 "的说明进行操作。

图 8. User Administration 视图

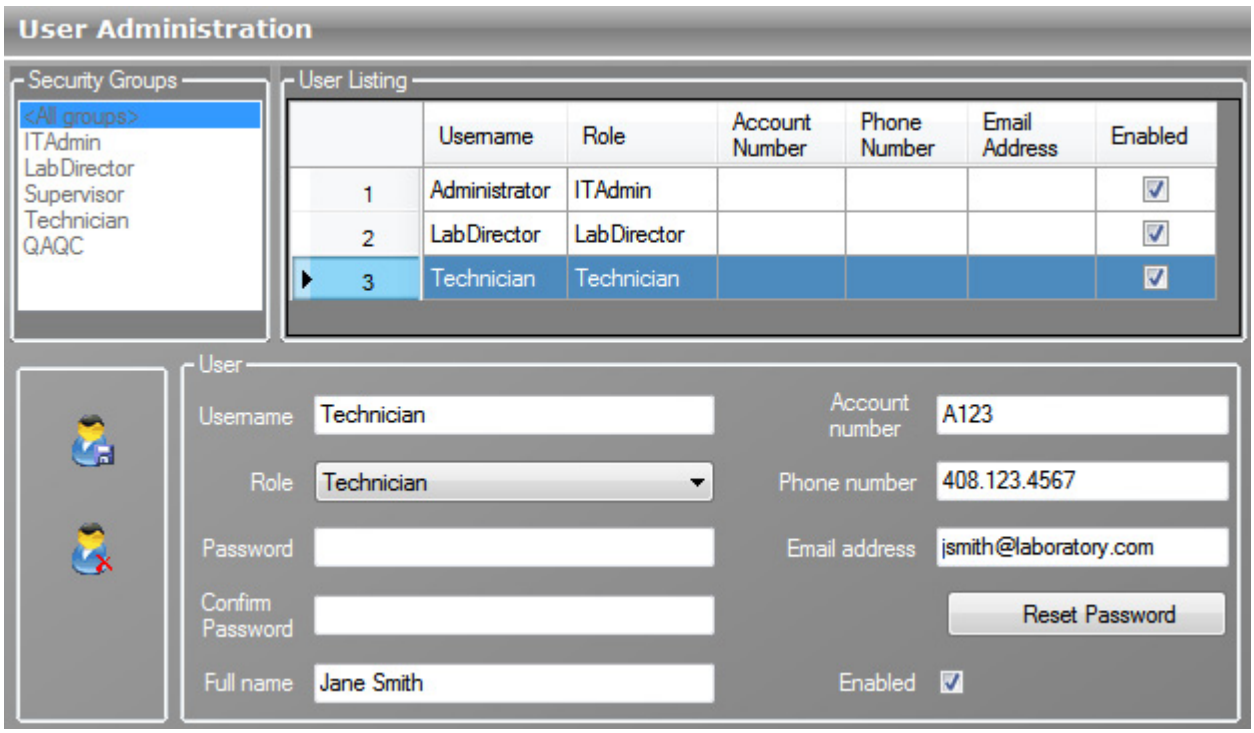


表 6. User Administration 视图参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Security Groups （安全组）	在 TraceFinder 应用程序中定义的所有权限等级。有关用户权限的详细说明，参阅第 43 页的 “ 选择用户职务 ”。
User Listing （用户列表）	
Username （用户名）	用户登录名。
Role （职务）	定义用户权限的安全组。
Account Number （账号）	用户账号。
Phone Number （电话号码）	用户电话号码。
Email Address （电子邮件地址）	用户电子邮件地址。
Reset Password （重置密码）	启用 Password 和 Confirm Password 参数，以便进行修改。
Enabled （已启用）	用户帐户的可用或不可用状态。
User （用户）	
Username （用户名）	当前用户的登录名。
Role （职务）	定义当前用户权限的安全组。
Password （密码）	当前用户的登录密码。
Full Name （全名）	当前用户的真实名字。
Account Number （账号）	当前用户的可选账号。
Phone Number （电话号码）	当前用户的可选电话号码。
Email Address （电子邮件地址）	当前用户的电子邮件地址。用于通知用户随机生成的密码。
Enabled （已启用）	启用或终止用户的访问权限。如果用户正在登录，其权限终止将在用户退出后生效。
Reset Password （重置密码）	确保密码显示为可进行选择及更改的星号串。
图标 功能	
Add User （添加用户）	激活可输入新用户信息的 User 输入区。
Remove User （移除用户）	删除选定用户的所有信息。
Edit User （编辑用户）	启用可编辑选定用户任意参数的 User 区域。

表 6. User Administration 视图参数 （第 2 页，共 2 页）

参数		描述
	Save Changes （保存更改）	将新参数值添加至 User Listing 表， User 区域的参数将不可用。
	Cancel Changes （取消更改）	放弃所有新的或编辑后的信息。

选择用户职务

本部分描述了用户安全启用时五种不同用户职务的职责：LabDirector、ITAdmin、 Supervisor （主管）、 Technician （技术人员）和 QAQC （质保质控）。

重要信息 仅当用户安全启用时，用户职务才有效。当用户安全未启用时，所有模式对所有用户开放。

访问 TraceFinder 模式

实验室主任或 IT 管理员负责分配职务，授予用户 TraceFinder 应用程序特定模式的访问权限。当登录时，主菜单仅显示可以访问的模式链接。

表 7. 用户职务和可用模式

用户职务	Method Development （方法开发）	Acquisition （采集）	Analysis （分析）	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）			✓	

LabDirector

在 LabDirector 职务下，用户可以查看图形适用数据和操作数据、批次、方法和仪器。

实验室主任负责下列任务：

- 为新的检测水平创建或编辑方法或将新化合物添加至现有数据库
- 审查来自质谱仪的数据
- 运行样品和审查其他人采集的数据
- 报告数据
- 了解结果并在存档前对数据发布做最后审批

ITAdmin

在 ITAdmin 职务下，可以设置安全性、管理用户的职责以及操作不同的数据库。同时负责将化合物添加到不同的化合物数据库中。

IT 管理员负责下列任务：

- 处理数据库
- 为使用者分配职务
- 了解安全规则、使用者和组
- 创建本地用户和网络组

Supervisor

在 Supervisor 职务下，用户负责将样品放到仪器上，然后使用先前建立的序列及方法处理和采集数据。也负责开发和编辑用于处理和采集数据的方法，审查数据，判断是否需要重新运行样品，或是将报告上交实验室经理进行最后审查。主管每天建立要运行样品的优先级列表并创建事件批次。

主管负责下列任务：

- 提交样品
- 创建和提交批次
- 向管理层报告数据
- 为新的检测水平创建或编辑方法或将新化合物添加至现有数据库
- 审查来自质谱仪的数据
- 在给予中级审批和发送数据至管理层之前，了解结果以及谁负责运行批次和递交结果
- 为特殊结果修改新化合物或调整方法

Technician

在 Technician 职务下，用户负责将样品放到仪器上，然后使用先前建立的序列及方法处理和采集数据。技术人员还负责编辑现有方法来处理和采集数据、审查所采集的数据、并判断是否需要重新运行样品或将报告上交主管。技术人员负责每天建立要运行样品的优先级列表并创建事件批次。

技术员负责下列任务：

- 提交样品
- 创建和提交批次
- 创建由管理层审查的数据
- 接收新样品系列的有关指令， TraceFinder 应用程序将会在完成当前分析之后分析新样品
- 审查来自质谱仪的数据
- 了解结果数据、将更改汇总并上报以获得进一步的审批

QAQC

在 QAQC 职务下，用户负责审查图形适用数据及解析数据，但不对数据作任何处理。

QAQC 技术员负责下列任务：

- 审查来自质谱仪的数据
- 在给予中级审批和发送数据至管理层之前，先了解结果以及运行批次和递交结果的负责人是谁
- 接收新样品系列的有关指令， TraceFinder 应用程序将会在完成当前分析之后分析新样品

注释 QAQC 职务的用户仅可访问 Analysis 模式。

Project Administration

当用户安全启用时， LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户能够在固定驱动器或网络驱动器上，在 Configuration 模式下的 Project Administration 页面上创建和管理项目和子项目。

本部分主题包含以下主题：

- 使用驱动器
- 处理项目

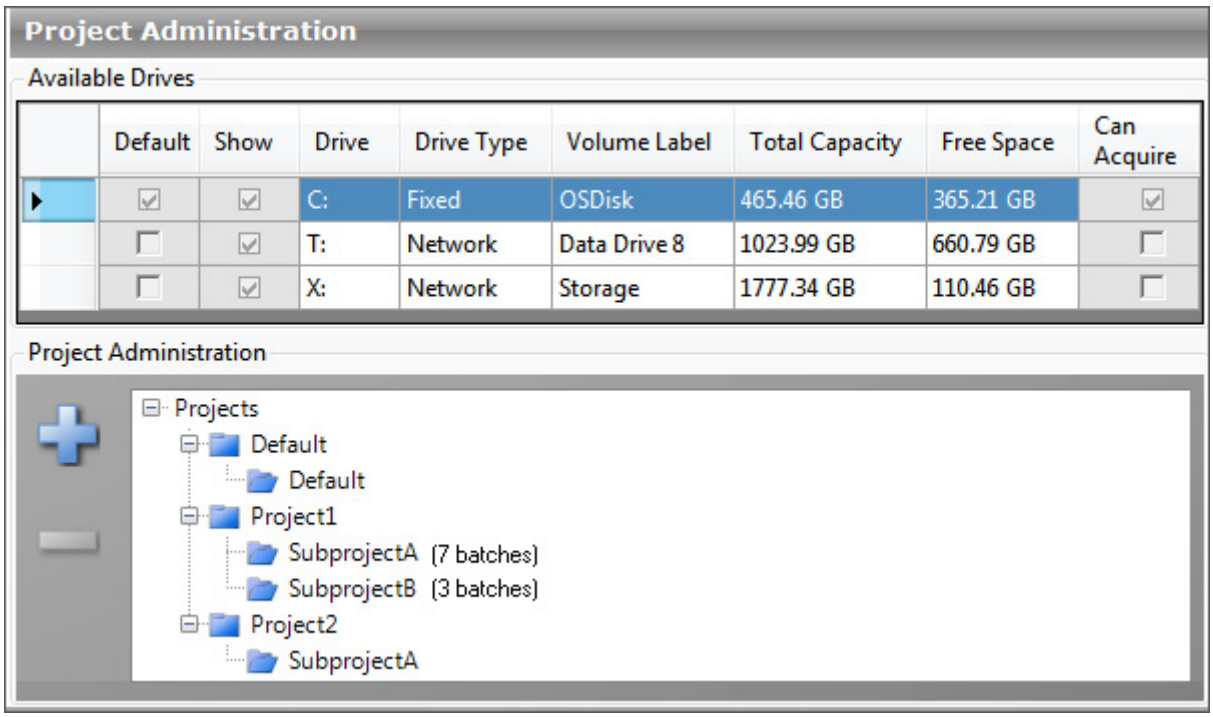
❖ 若要打开 Project Administration 视图

1. 从主菜单或导航窗格单击 **Configuration**。

Configuration 导航窗格打开。参阅第 36 页的 “Configuration 模式导航窗格 ”。

2. 在 Configuration 导航窗口中，点击 **Project Administration**。

Project Administration 视图显示。



默认情况下，所有项目将创建于 C: 驱动器上的主 Projects （项目）文件夹下：

C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Projects

使用驱动器

驱动器可以是以下任一：

- 固定：直接连接在计算机上。
- 网络：远程箱，也可以是映射驱动器。映射到驱动器字母的共享文件夹可能在电脑上实际存在，但由于它是映射的，因此被认为是网络驱动器。
- 可移除：如 3.5 英寸盘或 USB 驱动器之类的临时驱动器。

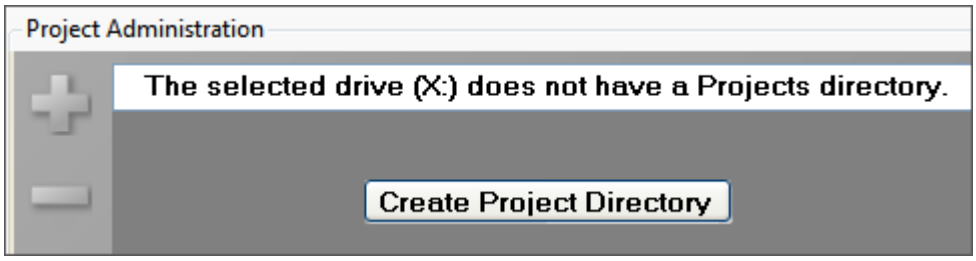
按照如下步骤进行操作：

- 若要选择驱动器
- 若要更改默认驱动器
- 若要隐藏驱动器的显示
- 若要刷新显示

❖ 若要选择驱动器

1. 在 Available Drives （可用驱动器）区域，点击除默认 C：驱动器外的任意驱动器。

   若还未在该驱动器上创建 Projects 目录，则会看到这一消息：



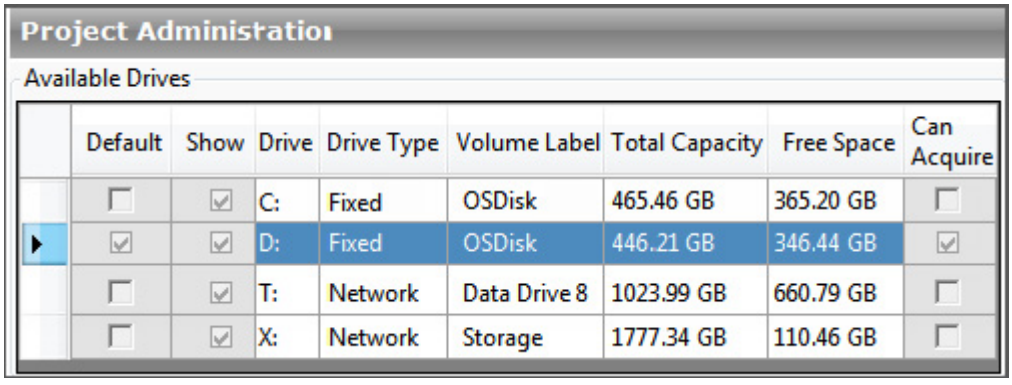
2. 点击 **Create Projects Directory （创建项目目录）**。

   TraceFinder 应用程序将在驱动器下新建 Projects 目录。若要在该驱动器中创建项目和子项目，参阅第 48 页的 “ 若要创建项目或子项目 ”。

❖ 若要更改默认驱动器

选择 Default （默认）栏中的复选框。

仅可以将固定驱动器设置为默认驱动器。默认驱动器是唯一可以用来采集数据的驱动器。



❖ 若要隐藏驱动器的显示

选择 Show （显示）栏中的复选框。

应用程序不在驱动器列表中列出隐藏的驱动器。无法隐藏默认驱动器。

❖ 若要刷新显示

右击并从快捷菜单中选择 **Refresh （刷新）**。

刷新 Available Drives 表格以显示任何已经更改的驱动器，例如如果插入了一个 USB 驱动器。现在可以配置任何新的驱动器了。

处理项目

当创建一个批次时，应用程序将在项目和子项目中保存数据文件、本地方法和报告，项目和子项目创建在 C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Projects 文件夹中。

若安装了 TraceFinder 示例数据，则主 Projects 文件夹包含一个 Example （示例）项目文件夹，该文件夹包含一个含可用于实验的示例批次的子文件夹。若要从 InstallShield Wizard （安装保护向导）中安装示例数据，参阅第 11 页的 " 若要安装示例数据 " 中的说明。

按照如下步骤进行操作：

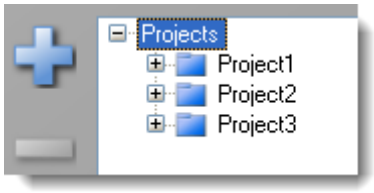
- 若要创建项目或子项目
- 若要删除项目或子项目
- 若要移除空文件夹
- 若要将文件夹复制到另一个驱动器且保留层次结构

❖ 若要创建项目或子项目

1. 选择最高级别的项目。

   可以选择主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。

   当选择一个项目文件夹时，应用程序启用加号图标， ，代表可以在该指定文件夹内创建文件夹。

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文件夹。

3. 在新项目仍呈突出显示时，输入新名称。

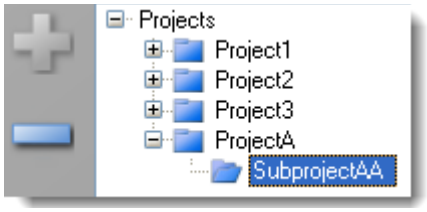
   项目名称最多为 30 个字符，可包含空格和特殊字符，但下列特殊字符除外：\ / : * ? " < > |

   注释 在项目中添加子项目之后，无法重命名该项目。

4. 按 ENTER （输入）或点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。



可以删除不包含子项目的项目。可以删除不包含批次的子项目。当所选项目或子项目可被删除时，应用程序启用减号图标， 。

2. 点击减号图标，或右击然后从快捷菜单中选择 **Remove Project （移除项目）**。
3. 收到提示信息时，单击 **Yes （是）**删除所选项目或子项目。

❖ 若要移除空文件夹

1. 选中包含空文件夹的项目或子项目。
2. 右击然后从快捷菜单中选择 **Remove All Empty Child Folders** （移除所有空子文件夹）。

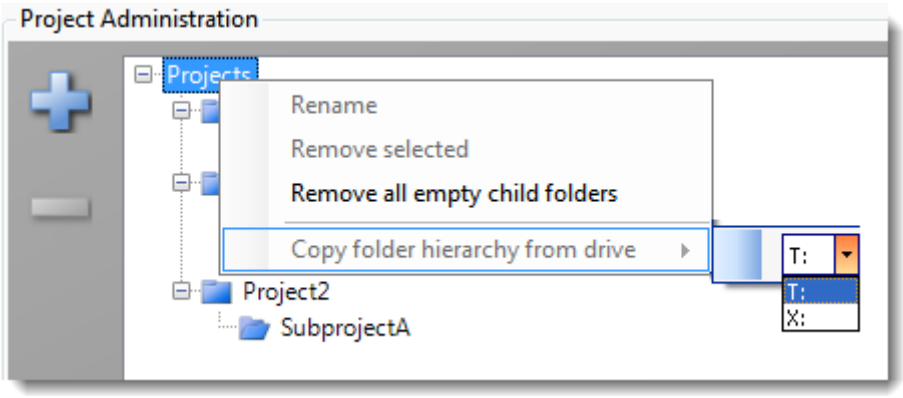
   出现对话框，询问是否希望移除所有空文件夹。
3. 点击 **OK**。

   应用程序移除所有不含文件夹或文件的文件夹。该操作无法撤销。

❖ 若要将文件夹复制到另一个驱动器且保留层次结构

1. 在 Project Administration 区域选中最上级 Projects 目录 .

   当将层次结构*从*驱动器复制*到*Projects 文件夹时，应用程序将在当前层次中添加新文件夹，但不会移除文件夹。
2. 右击然后从快捷菜单中选择 **Copy Folder Hierarchy from Drive （从驱动器复制文件夹层次结构）**。
3. 从可用驱动器列表中选择一个驱动器。



收到提示信息后，必需确认是否希望创建一个与指定文件夹匹配的文件夹层次结构。

4. 点击 **OK**。

   若要从指定驱动器复制层次结构，应用程序将在当前层次中添加新文件夹，但不会移除文件夹。

   重要信息 **Copy Folder Hierarchy from Drive** 命令仅复制项目和子项目文件夹；它不复制文件夹内的批次。

Compound Datastore

当用户安全启用时， LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户能够在 Compound Datastore 视图中管理当前数据库的化合物定义。

本部分主题包含以下主题：

- 打开和保存数据库
- 在数据库中添加化合物，定量峰和确认离子
- 选择实验类型

有关 Compound Datastore 视图中所有参数的描述，参阅第 53 页的 “Compound Datastore 视图 ”。

打开和保存数据库

可以使用默认数据库，也可以创建自己的数据库。仅当 Compound Datastore 特性启用时，Compound Datastore 任务窗格才可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

按照如下步骤进行操作：

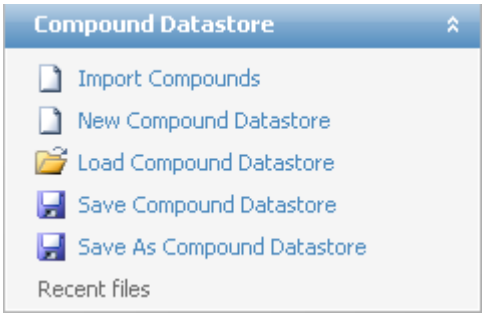
- 若要打开 Compound Datastore 编辑器
- 若要打开化合物数据库
- 若要新建化合物数据库
- 若要保存数据库
- 若要以新名称另存数据库

❖ 若要打开 Compound Datastore 编辑器

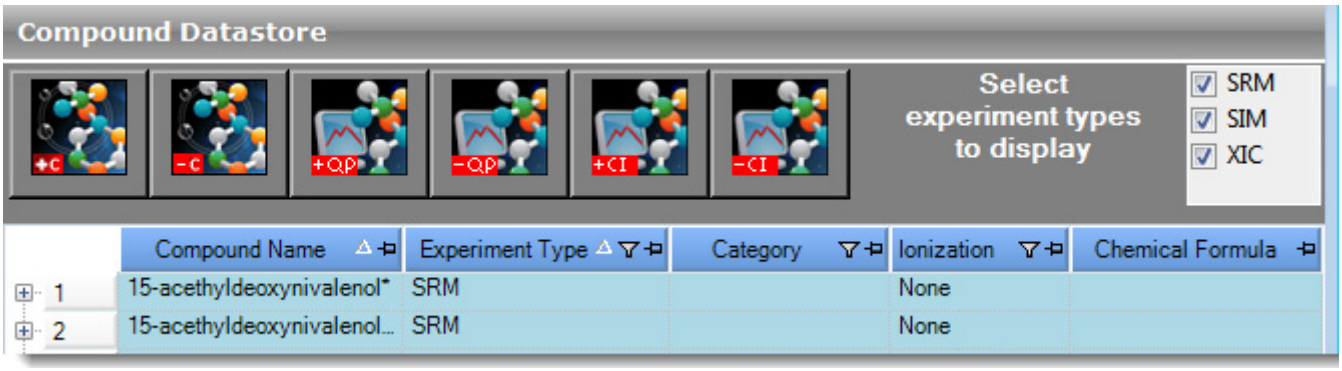
1. 从主菜单或导航窗格单击 **Configuration**。

   Configuration 导航窗格打开。参阅第 36 页的 “Configuration 模式导航窗格 ”。

2. 单击 **Compound Datastore** 任务窗格。



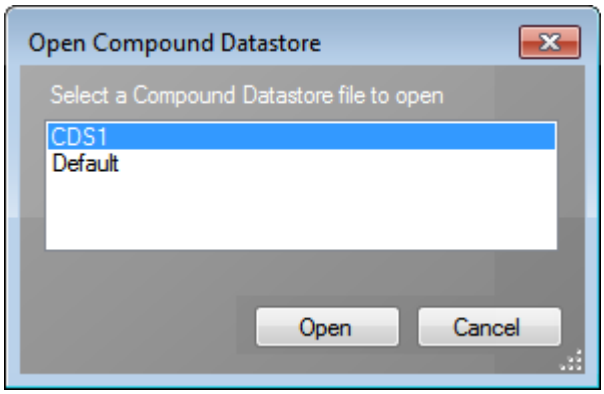
当前数据库将在 Compound Datastore 视图中打开。有关 Compound Datastore 视图中所有参数及其功能的详细列表，参阅第 53 页的 “Compound Datastore 视图 ”。



❖ **若要打开化合物数据库**

1. 点击 Compound Datastore 任务窗格中的 **Load Compound Datastore （加载化合物数据库）**。

   Open Compound Datastore （打开化合物数据库）对话框打开。



2. 双击要打开的数据库名称。

   所选数据库将在 Compound Datastore 视图中打开。参阅第 53 页的 “Compound Datastore 视图 ”。

❖ **若要新建化合物数据库**

点击 Compound Datastore 任务窗格中的 **New Compound Datastore （新建化合物数据库）**。

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 （参阅若要导入化合物中的说明），也可以手动逐个添加化合物 （参阅若要将化合物添加到数据库中的说明）。

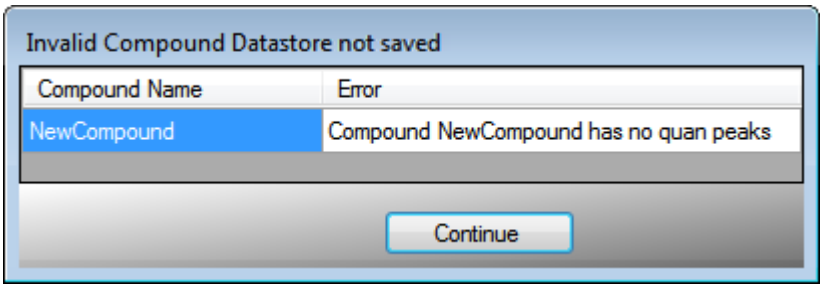
❖ **若要保存数据库**

1. 点击 Compound Datastore 任务窗格中的 **Save Compound Datastore （保存化合物数据库）**。

   应用程序将数据保存为

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Databases*filename*.xml

   如果数据库包含任何没有关联定量峰的化合物， Invalid Compound Datastore Not Saved （无效化合物数据库不保存）对话框将打开，其中会列出这些化合物。



2. 若要将定量峰行添加到已列出的化合物中，点击 **Continue （继续）**。

   应用程序返回至 Compound Datastore 视图中。

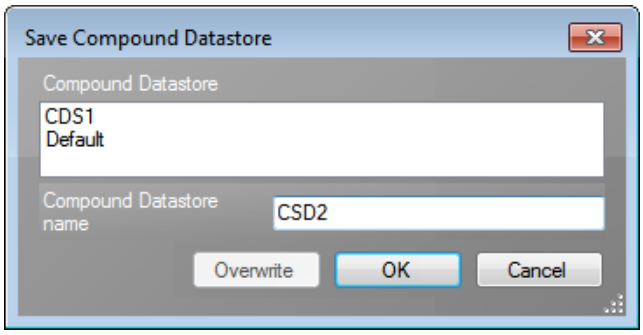
3. 在保存数据库之前，将定量峰添加至不完整的化合物中。

   参阅第 58 页的 “ 若要将定量峰添加至化合物 ”。

❖ **若要以新名称另存数据库**

1. 点击 Compound Datastore 任务窗格中的 **Save As Compound Datastore （另存为化合物数据库）**。

   Save Compound Datastore 对话框打开。



2. 输入新数据库的文件名。
3. 点击 **OK**。

   应用程序将数据保存为

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Databases*filename*.xml

表 8. Save Compound Datastore 对话框参数

参数	描述
Compound Datastore Name （化合物数据库名称）	列出新数据库的文件名。
Overwrite （覆盖）	覆盖所选数据库。
OK （确定）	将新数据库写入至 Databases （数据库）文件夹。
Cancel （取消）	关闭对话框并且不更改数据库。

图 9. Compound Datastore 视图

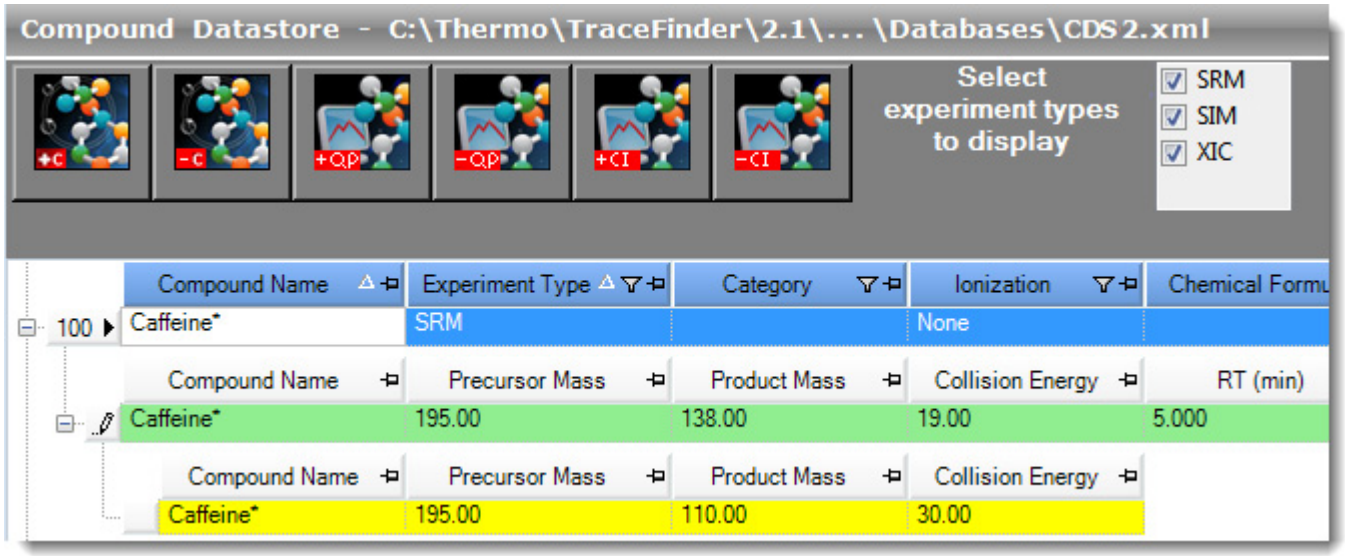


表 9. Compound Datastore 视图参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
功能图标	
	添加新化合物行。
	移除所选行和其中的所有定量峰和确认离子行。
	将新定量峰行添加到化合物。每个化合物至少需要一个定量峰。
	移除所选行和其中的所有确认离子行。
	将新确认离子行添加到定量峰。
	移除所选确认离子行。
Select Experiment Types to Display （选择显示的实验类型）	指定其中一个实验类型，每一类型都使用一个不同的质量数过滤器结构。 参阅第 60 页的 “ 选择实验类型 ”。 • SRM: Selected Reaction Monitoring （选择反应监测） • XIC: Extracted Ion Chromatogram （提取离子色谱图） • SIM: Selected Ion Monitoring （选择离子监测）
化合物参数	
Compound Name （化合物名称）	分配给化合物的含字母数字的名称。
Experiment Type （实验类型）	实验类型为：SRM、 XIC 或 SIM。
Category （类别）	（可选）字母数字标识符。
Ionization （离子化）	（可选）字母数字标识符。 有效值：None （无）、 ESI、 APCI、 EI、 CI、 APPI 默认值：None
Chemical Formula （化学分子式）	（可选）字母数字化学品标识符。
定量峰参数	
Precursor Mass （母离子质量数）	母离子的质荷比 （*m/z*）。在质荷比单位中的目标母离子峰的中心位置。 在确认离子行中，母离子质量数即为定量峰母离子质量数，无法进行编辑。 仅对 SRM 实验可用。 默认：0.0 范围：10.000 至 2999.999
Product Mass （子离子质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 SRM 实验可用。 默认：0.0 范围：10.000 至 2999.999

表 9. Compound Datastore 视图参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Mass （质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 XIC 和 SIM 实验可用。 默认：0.0 范围：10.000 至 2999.999
Collision Energy （碰撞能量）	离子与碰撞气体碰撞时耗用的能量。 仅对 SRM 实验可用。 范围：–250.00 至 250.00
RT （min） （保留时间，分钟）	保留时间。应用程序使用 RT 和窗口值确定采集的开始和停止时间。 范围：0.00 至 999.00 开始时间 = RT– （Window/2） 停止时间 = RT+ （Window/2） 开始和停止范围：0.00 至 999.00
Window (sec) （窗口，秒）	应用程序使用 RT 和窗口值确定采集的开始和停止时间。 范围：0.00 至 499.50 开始时间 = RT– （Window/2） 停止时间 = RT+ （Window/2） 开始和停止范围：0.00 至 999.00
Polarity （极性）	+ （正极）或 – （负极）
Lens （透镜）	（可选）范围：–400 至 400
Energy Ramp （能量递变）	（可选） 仅对 SRM 实验可用。 范围：0.00 至 200.00
确认离子参数	
Precursor Mass （母离子质量数）	母离子的质荷比。在质荷比 （*m/z*）单位中的目标母离子峰的中心位置。 非可编辑字段，仅对 SRM 实验可用。 默认：0.0 范围：10.000 至 2999.999
Product Mass （子离子质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 SRM 实验可用。 默认：0.0 范围：10.000 至 2999.999
Mass （质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 （*m/z*）。 仅对 XIC 和 SIM 实验可用。 默认：0.0 范围：10.000 至 2999.999
Collision Energy （碰撞能量）	离子与碰撞气体碰撞时耗用的能量。 仅对 SRM 实验可用。 范围：–250.00 至 250.00

在数据库中添加化合物，定量峰和确认离子

在 Compound Datastore 视图中，可以将化合物导入数据库中、从数据库中添加或移除化合物、将定量峰和确认离子添加至化合物、或从化合物移除定量峰或确认离子。

按照如下步骤进行操作：

- 若要导入化合物
- 若要将化合物添加到数据库
- 若要移除化合物
- 若要将定量峰添加至化合物
- 若要移除定量峰
- 若要将确认离子添加至定量峰
- 若要移除确认离子

❖ 若要导入化合物

1. 单击 Compound Datastore 任务窗格中的 **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，将其添加至数据库内已存在的化合物，并按字母顺序排序。

   当应用程序导入一个包含多个定量峰和确认离子的化合物时，它在单化合物名称下方列出所有峰，如灭草隆示例：

Compound Name	ExperimentType	Category	Ionization	Ch
3 Monuron	SRM	Class 1	ESI	

Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy	
Monuron	199.09	46.182	16.00	6.00

Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy
Monuron	199.09	72.105	16.00
Monuron	199.09	74.104	16.00

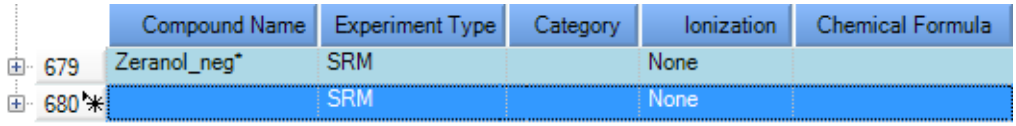
Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy	
Monuron	200.09	46.182	16.00	6.00

Compound Name	Precursor Mass	Product Mass	Collision Energy
Monuron	200.09	72.105	16.00
Monuron	200.09	74.112	16.00

❖ 若要将化合物添加到数据库

1. 单击 **Add Compound （添加化合物）**图标， ，或右击化合物列表并从快捷菜单中选择 **Add Compound**。

   应用程序将一个新且空白的化合物行添加至化合物表格的末尾。



	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 参数。
3. （可选）更改 Experiment Type 的值。

   默认值为 SRM。有关可用实验类型的描述，参阅第 60 页的 “ 选择实验类型 ”。

   在将定量峰添加至化合物后，即时取消该定量峰也无法更改实验类型。
4. （可选）输入或从 Category 列表中选择一个值。

   可以使用任意字母串。在输入一个新 Category 值之后，该值可用于该列表。
5. （可选）更改 Ionization 的值。

   默认值为 None。
6. （可选）更改 Chemical Formula 的值。

   可以使用任意字母串。

每个化合物至少需要一个定量峰。

❖ 若要移除化合物

1. 选择希望删除的化合物行。
2. 单击 **Remove Compound （移除化合物）**图标， ，或右击并从快捷菜单中选择 **Remove Compound** 。
3. 如果确定要删除所选行，在出现提示信息后点击 **OK**。

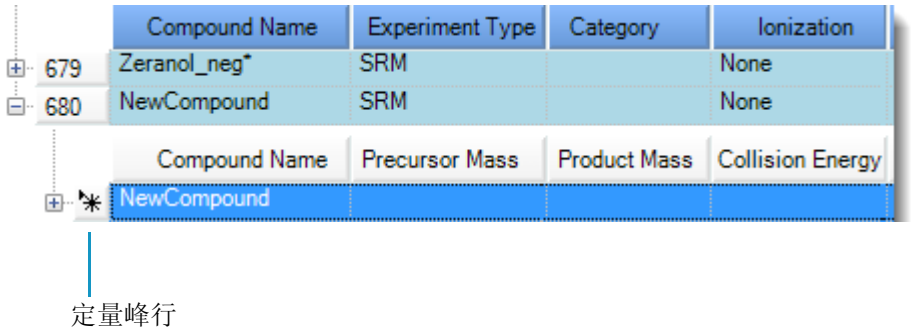
   应用程序移除所选行和其中的所有定量峰和确认离子行。

> **提示** 如果添加的是一行化合物信息且未填写所有必填值，可以点击右键然后选择 **Cancel** 以删除整行。可以仅删除不完整化合物行。

❖ 若要将定量峰添加至化合物

1. 选中化合物。
2. 单击 **Add Quan Peak （添加定量峰）**图标， ，或右击并从快捷菜单中选择 **Add Quan Peak**。

   应用程序将新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。



3. 输入所有必填参数。

   有关必填和可选的参数列表，参阅第 54 页的 “Compound Datastore 视图参数 ”列表。

> **提示** 只有输入所有必填定量峰参数或从化合物中移除所有不完整定量峰后，才可以添加其他新的化合物或保存化合物数据库。

4. 重复步骤 2 至 3 以将六个定量峰添加到化合物。

❖ 若要移除定量峰

1. 选择希望删除的定量峰的行。
2. 单击 **Remove Quan Peak （移除定量峰）**图标， ，或右击并从快捷菜单中选择 **Remove Quan Peak**。
3. 如果确定要删除所选行，在出现提示信息后点击 **OK**。

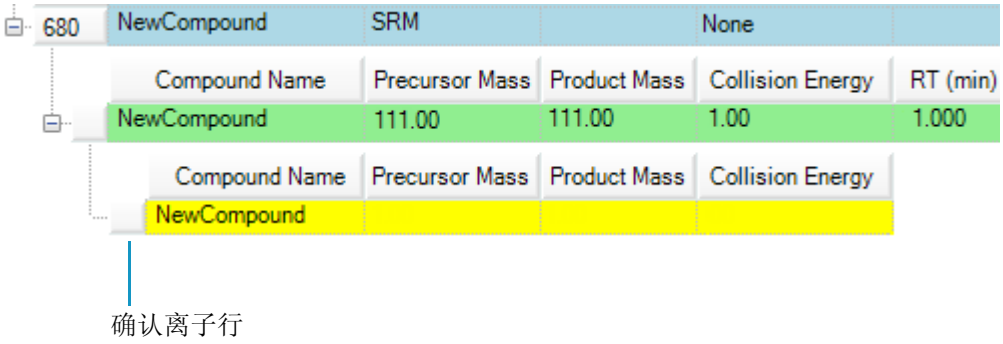
   应用程序移除所选行和其中的所有确认离子行。

> **提示** 如果添加的是一行定量峰信息且未填写所有必填，可以点击右键然后选择 **Cancel** 以删除整行。可以仅取消填写不完整的定量峰行。

❖ 若要将确认离子添加至定量峰

1. 单击 **Add Confirming Ion （添加确认离子）**图标， ，或右击定量峰行并从快捷菜单中选择 **Add Confirming Ion**。

   应用程序将新确认离子行添加到定量峰。确认离子包含质量数值。



2. 为确认离子输入必填值。

   不同实验类型的确认离子必填值会有所不同。参阅第 60 页的 “ 选择实验类型 ”。

3. 重复步骤 1 至 2 以将 10 个确认离子添加到定量峰。

❖ 若要移除确认离子

1. 选择希望删除的确认离子行。
2. 单击 **Remove Confirming Ion （移除确认离子）**图标， ，或右击并从快捷菜单选择 **Remove Confirming Ion** 。
3. 如果确定要删除所选行，在出现提示信息后点击 **OK**。

   应用程序移除所选确认离子行。

> **提示** 如果添加的是一行确认离子信息且未填写所有必填，可以点击右键然后选择 **Cancel** 以删除整行。可以仅取消填写不完整的确认离子行。

❖ 若要过滤列表

点击栏标题中的漏斗图标 。

应用程序在列表中为每一栏显示可过滤参数 （化合物名称、实验类型、类别或离子化方法）。在所有列表中，可以选择查看所有参数或该栏指定类型的参数。

选择实验类型

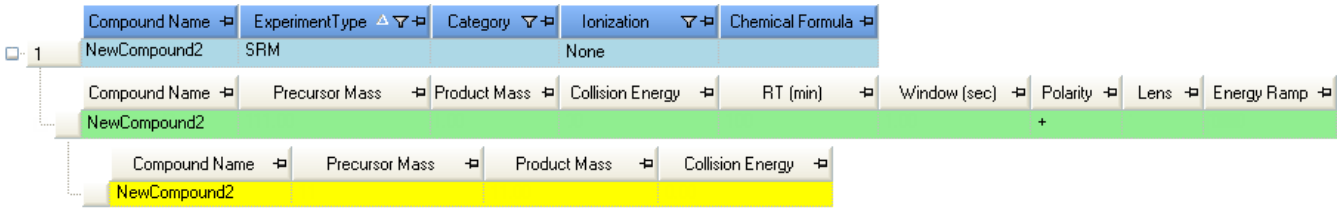
TraceFinder 应用程序使用三种实验类型：SRM、 XIC 和 SIM。

化合物数据库可以包含单个化合物的多种实验类型，但是每个化合物名称和实验类型的组合必须为唯一。

SRM: Selected Reaction Monitoring （选择反应监测）

SRM 实验类型支持三重四极杆 LC/MS。质量数过滤器包含母离子质量数和窄质量数范围以识别子离子质量数。无实验类型的导入化合物被认为是 SRM 数据。

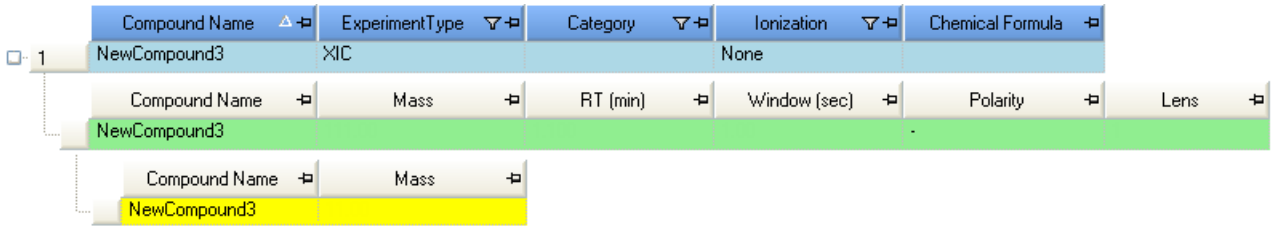
确认离子包含子离子 质量数、碰撞能量和无法进行编辑的子离子质量数值。



XIC: Extracted Ion Chromatogram （提取离子色谱图）

质量数过滤器是一个后处理的单次全扫描，用于提取感兴趣离子的峰。

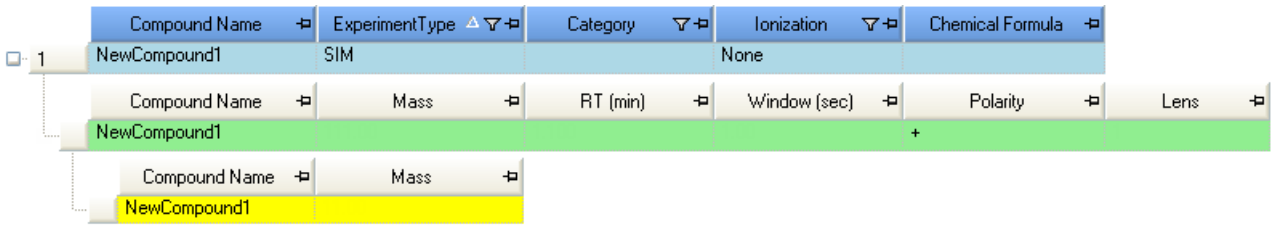
确认离子包含单质量数值。



SIM: Selected Ion Monitoring （选择离子监测）

SIM 实验类型支持单四极杆 LC/MS 和 Exative™ 系统。质量数过滤器包含窄质量数范围以识别子离子质量数。

确认离子包含单质量数值。



Application Configuration

当用户安全启用时， LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户可以启用如可用报告、用户安全、化合物数据库、报告默认值、多通道、检测算法和目标筛选等特性。也可以选择用户可用的报告、应用程序默认值和用于峰检测的默认值。

本部分主题包含以下主题：

- 指定报告配置
- 指定配置默认值
- 指定检测参数
- 启用可选特性

❖ 若要打开 Application Configuration 视图

1. 从主菜单或导航窗格单击 **Configuration**。

Configuration 导航窗格打开。参阅第 36 页的 “Configuration 模式导航窗格 ”。

2. 点击 **Application Configuration**。

Application Configuration 视图打开。

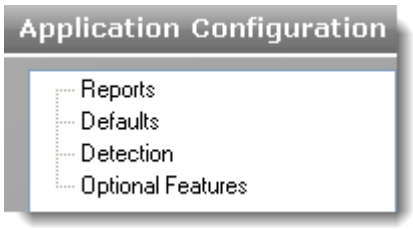


表 10. Application Configuration 页面

页面	
Reports （报告）	参阅 “ 指定报告配置。 ”
Defaults （默认）	参阅第 67 页的 “ 指定配置默认值 ”。
Detection （检测）	参阅第 69 页的 “ 指定检测参数 ”。
Optional Features （可选特性）	参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

3. 在 Application Configuration 列表中，点击希望配置的信息的类型。

指定报告配置

当用户安全启用时， LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户能够配置一个报告列表，该列表对所有用户在从 Method Development、 Analysis 和 Acquisition 模式下生成报告时可用。从 Reports 页面，可以配置标准、自定义报告或目标筛选报告。

报告格式的 PDF 示例文件位于以下文件夹：

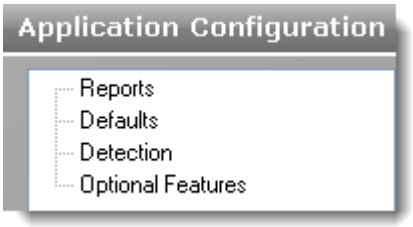
C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\ExampleReports

按照如下步骤进行操作：

- 若要打开报告页面
- 指定可用的报告
- 若要导入新报告

❖ 若要打开报告页面

在 Application Configuration 视图中单击 **Reports**。



Application Configuration 视图的 Reports 页面打开。有关报告列表的信息，参阅第 64 页的 “ 报告 ”。

❖ 指定可用的报告

1. 使用方向箭头将报告从 Installed Reports （已安装报告）窗格移至 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、 Analysis 和 Acquisition 模式中，用户可以在 Displayed Reports 窗格中获取所有报告。

2. 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）。

   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。批次水平报告附带 **B** 以示区别。

   注释 只有能够在批次水平整合数据的报告才启用 **Batch Level** 复选框。默认情况下，应用程序为所有这些报告选中 Batch Level 特性。

3. 执行下列操作之一：

   按如下应用当前选择：

   a. 单击 **Apply （应用）**。

      出现信息，提示重新启动 TraceFinder 应用程序以使用户可用为 Method Development、 Analysis 和 Acquisition 模式选择的报告。

   b. 若要即刻重启 TraceFinder 应用程序，点击 **Yes**，或停留在 Reports 页面上点击 **No （不）**。

   – 或 –

   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），点击 **Undo Changes （撤销更改）**。

❖ 若要导入新报告

1. 单击 **Import （导入）**。
2. 在浏览器中找到 Crystal Reports .dll 或 Custom Reports .xltm 文件并将其打开。

   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。

报告

应用程序使用下列标准、自定义和目标筛选报告 （分别参阅图 10，图 11，和图 12）。有关 Reports 页面上参数的描述，参阅第 66 页的 “Reports 页面参数 ”。

图 10. Reports 页面显示标准报告

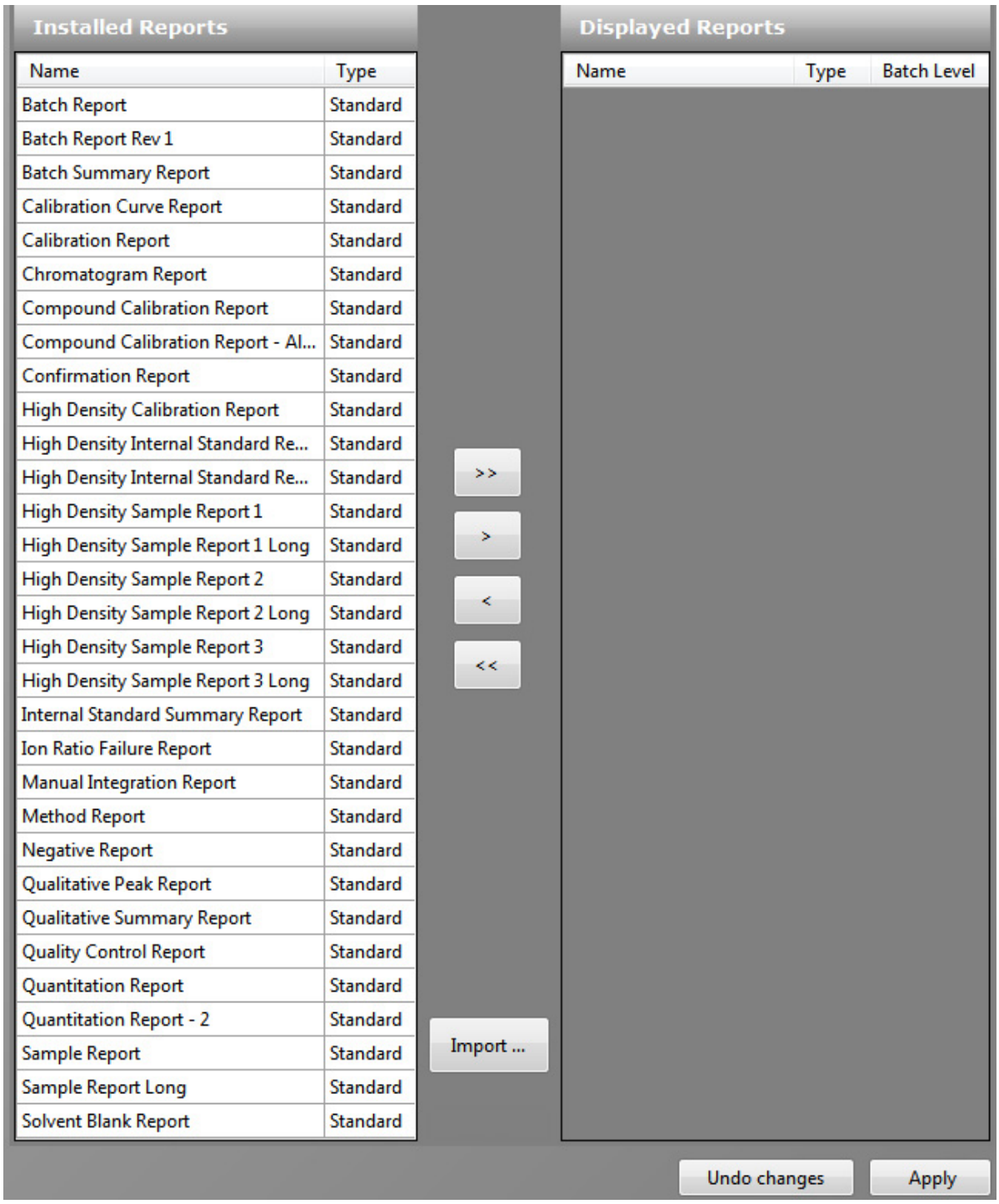


图 11. Reports 页面显示自定义报告

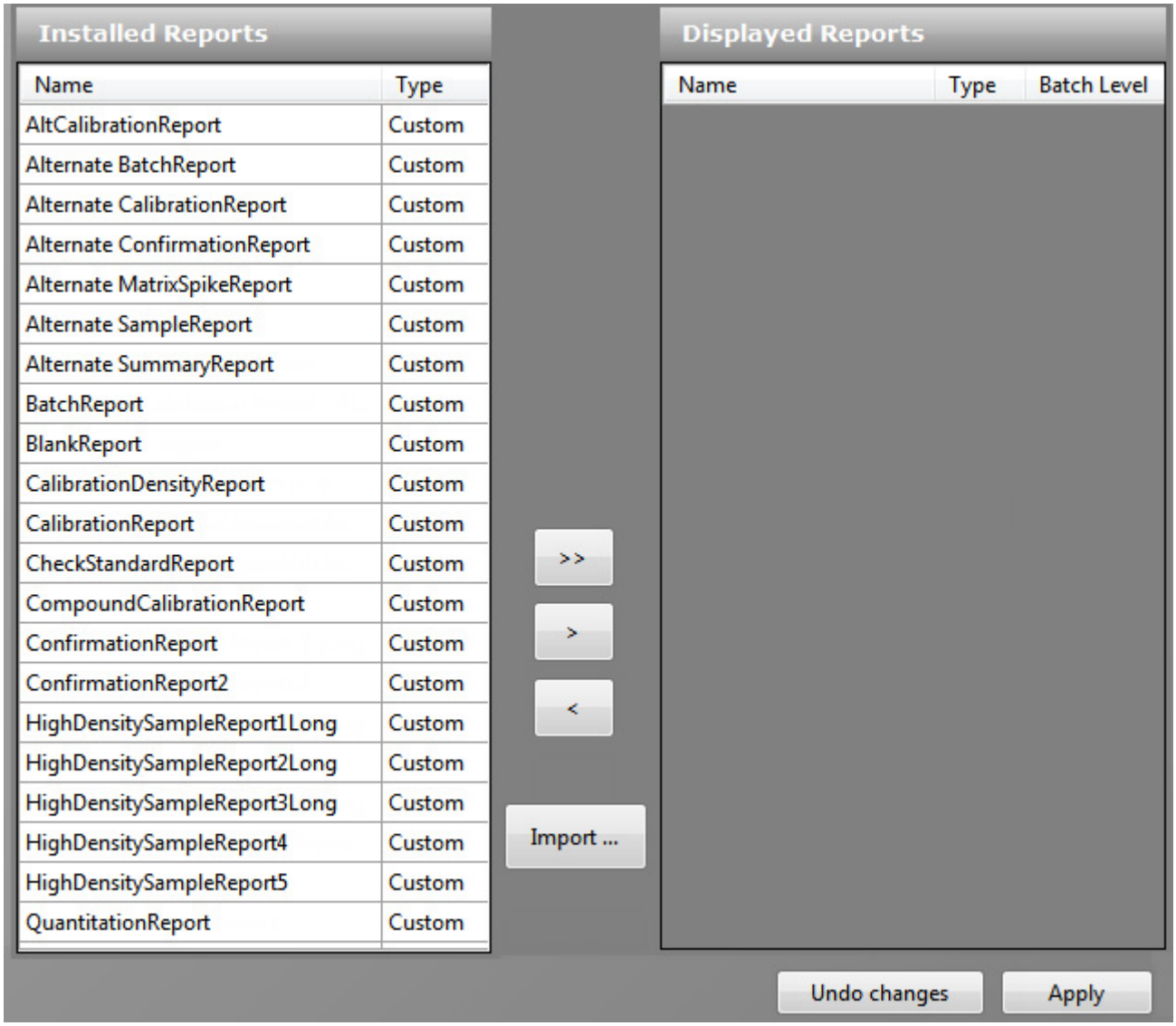
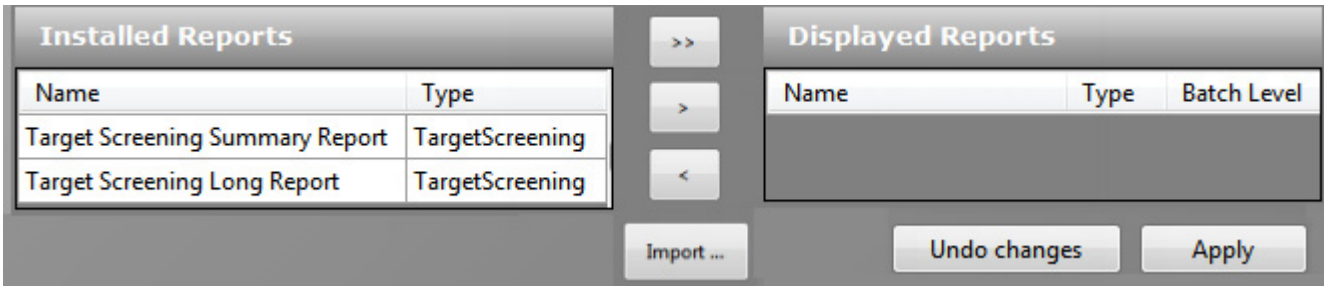


图 12. Reports 页面显示目标筛选报告



注释 仅当已安装 ToxID 软件并启用目标筛选特性时，目标筛选报告才可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

表 11. Reports 页面参数

参数	描述
Installed Reports （已安装报告）	本窗格所列出的所有报告潜在可用，但在应用程序中没有选择使用。
Displayed Reports （已显示报告）	本窗格所列出的所有报告在应用程序中已选择使用。
>>	将所有报告从 Installed Reports 列表移至 Displayed Reports 列表。
>	将选中报告从 Installed Reports 列表移至 Displayed Reports 列表。
<	将选中报告从 Displayed Reports 列表移至 Installed Reports 列表。
<<	将所有报告从 Displayed Reports 列表移至 Installed Reports 列表。
Import （导入）	打开浏览器，可在其中选择一个报告文件添加至 Installed Reports 列表。
Undo Changes （撤销更改）	将报告选择恢复至初始状态 （初次打开此页面时的状态）。
Apply （应用）	应用当前选择 , 提示重新启动 TraceFinder 应用程序以使用户可用为 Method Development、 Analysis 和 Acquisition 模式选择的报告。

指定配置默认值

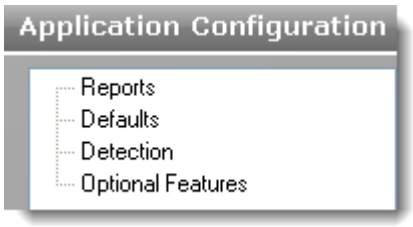
利用 Configuration 模式的 Application Configuration 视图指定用于报告的默认实验室和仪器名称、质量数精度和强度范围。当用户安全启用时，仅 LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户才可用这些特性。

按照如下步骤进行操作：

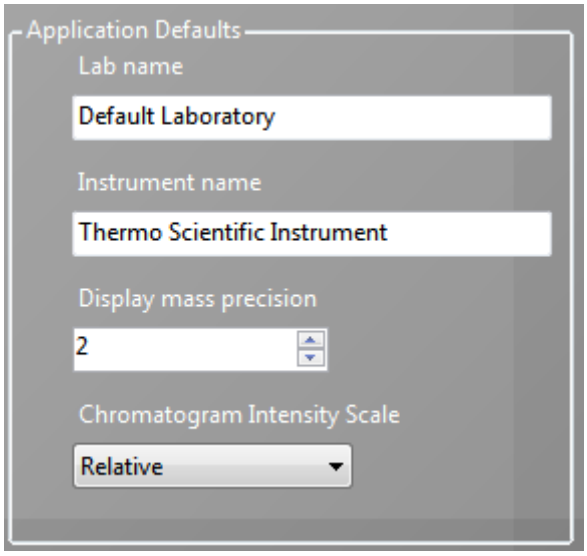
- 若要打开 Application Defaults 页面
- 若要指定默认实验室名称和仪器名称
- 若要指定默认质量数精度和强度范围

❖ 若要打开 Application Defaults 页面

在 Application Configuration 视图中单击 **Defaults**。



Application Configuration 视图的 Application Defaults （应用程序默认值）页面打开。



❖ 若要指定默认实验室名称和仪器名称

1. 在 Lab Name （实验室名称）框中输入实验室的名称。

   当创建新方法时，应用程序使用该默认实验室名称作为 Master Method （主方法）视图 General （常规）页面的 Laboratory Name （实验室名称）值。应用程序在报告标题中使用该实验室名。

   应用程序不会将该默认实验室名应用到先前创建的方法中。默认情况下，实验室名为 Default Laboratory （默认实验室）。

2. 在 Instrument Name （仪器名称）框中输入实验室的名称。

   当创建批次时，应用程序使用该默认仪器名作为 Instrument Name 值。应用程序在报告标题中使用该仪器名。

3. 在 Application Configuration 视图中单击 **Apply**。

   应用程序不会将该默认仪器名应用到先前创建的批次中。默认情况下，仪器名称为 Thermo Scientific Instrument （Thermo Scientific 仪器）。

4. 点击 **Yes**。

❖ 若要指定默认质量数精度和强度范围

1. 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。

   默认显示的数字是 2。 TraceFinder 应用程序利用这个质量数精度值显示下列位置中的质量数：

   - Reports：
     - Blank Report （空白报告）
     - Confirmation Report （确认报告，数据谱、库谱、定量离子显示和定性离子显示）
     - All High Density Reports （所有高密度报告， *m/z* 值）
     - Ion Ratio Failure Report （离子比率未通过报告，定量离子和定性离子）
     - Manual Integration Report （手动积分报告， *m/z* 值）
     - Qualitative Summary Report （定性总结报告，所有 *m/z* 值）
     - Quantitation Report （定量报告， QIon）
   - Method Development 模式中 Detection 页面上的所有峰
   - Analysis 模式中的质谱图显示
   - Method Forge （方法向导）对话框中的质谱图显示

   重要信息 当使用原始数据文件创建方法时，应用程序从原始数据文件中读取过滤器精度值，以创建扫描过滤器；而当显示没有包含在过滤器表达式内的质量数，以及在质谱图上显示的质量数时， TraceFinder 应用程序使用 Display Mass Precision 值。

2. 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。

3. 在 Application Configuration 视图中单击 **Apply**。

4. 点击 **Yes**。

指定检测参数

当用户安全启用时， LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户可以为 Genesis、 ICIS 或 Avalon 检测算法指定检测参数。利用 Peak Detection Defaults （峰检测默认值）页面指定峰检测算法和其选项以及确定曲线下的面积。

本部分包含指定以下检测算法的步骤：

- Genesis 检测方法
- ICIS 检测方法
- Avalon 检测方法

❖ 若要指定常用检测参数

1. 在 Application Configuration 视图中单击 **Detection**。

   Peak Detection Defaults 页面打开。参阅 “ 常见峰检测区域。 ”

2. 在 Detector Type （检测器类型）列表中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：
   a. 选择希望使用的测量单位。
   b. 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：
   a. 在 Window 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。
   b. 在 View Width （视图宽度）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：
   a. 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。
   b. 在 Window (+/–%) （窗口， +/–%）框中，选择可接受离子比率范围。
   c. 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**。

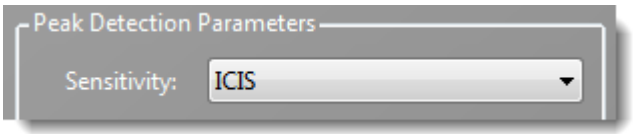


图 13. 常见峰检测区域

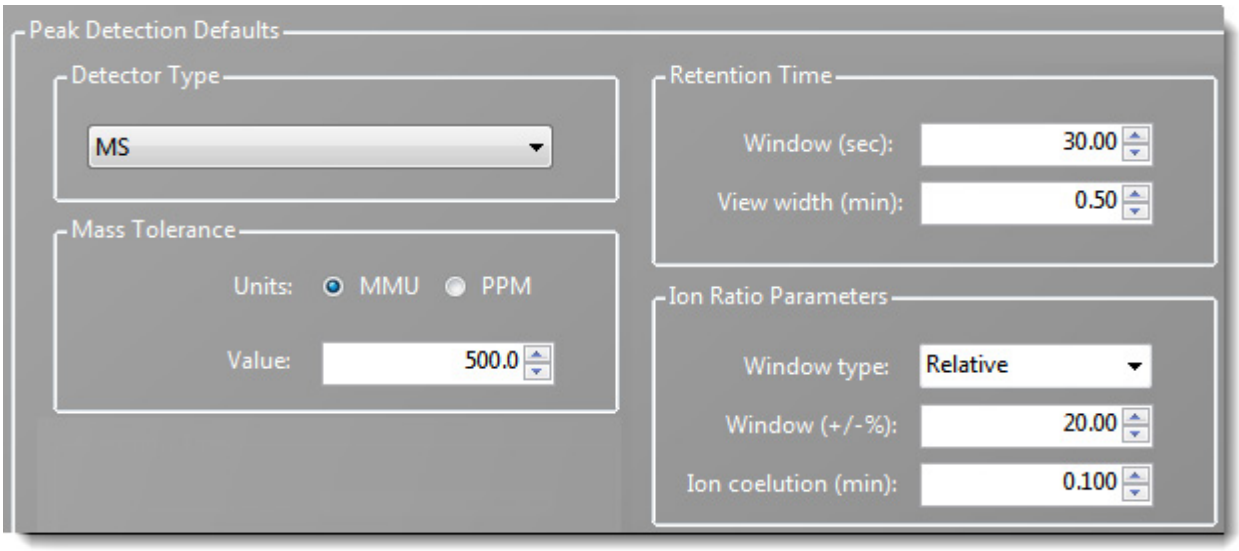


表 12. 常见峰检测参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Detector Type （检测器类型）	保留以备将来使用。
Mass Tolerance （质量数容许偏差）	
Units （单位）	• （默认） MMU （毫质量数单位） MMU 是提取质量数的静态计算。 • PPM （百万分之一） PPM 是一个取决于实际质量数的可变计算。质量数越小，容许偏差范围越窄。质量数越大，容许偏差范围越宽。
Value （值）	MMU 或 PPM 上限值 默认值：500 范围：0.1 至 50 000
Retention Time （保留时间）	
Window (sec) （窗口，秒）	窗口宽度 （以秒为单位）是系统将查看峰顶点的预期保留时间的距离长度。
View Width (min) （视图宽度，分钟）	显示离子色谱图的可查看尺寸 （以分钟为单位）。更改查看宽度并不影响峰检测的处理， TraceFinder 应用程序只将其用于图形显示。
Ion Ratio Parameters （离子比率参数）	
Window Type （窗口类型）	用于确定可接受的离子比率范围的绝对或相对计算方法。

表 12. 常见峰检测参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Window (+/–%)（窗口， +/– %）	可接受的离子比率范围。
Ion Coelution (min)（离子共洗脱，分钟）	确认离子峰与定量离子峰的保留时间最大差值。

Genesis 检测方法

TraceFinder 应用程序提供了 Genesis 峰检测算法，以反向兼容 Xcalibur 1.0 研究。

图 14. Genesis 峰检测页面

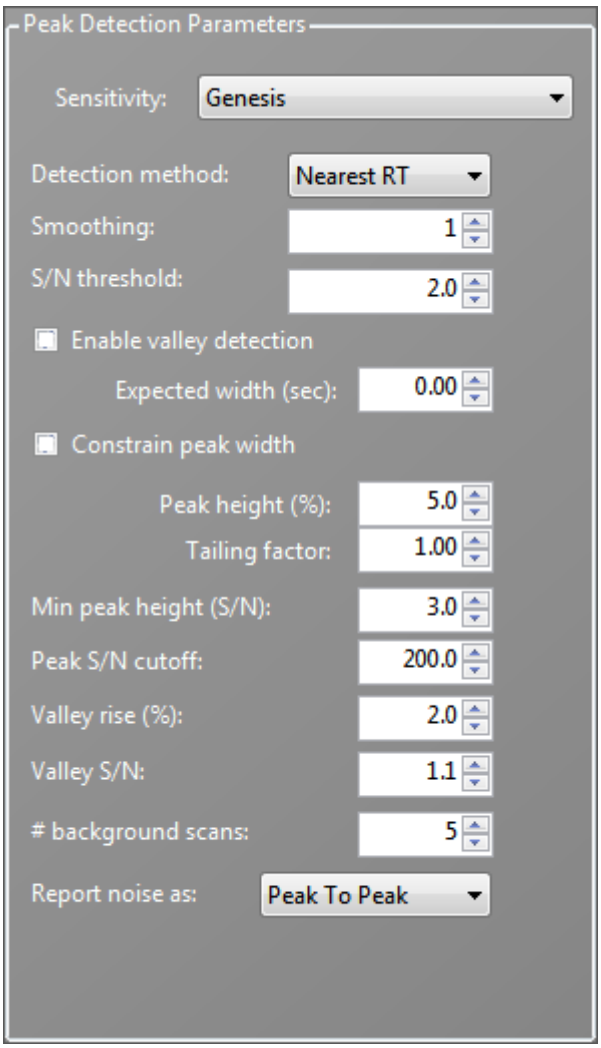


表 13. Genesis 峰检测页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Sensitivity （灵敏度）	指定 Genesis 峰检测算法。
Detection Method （检测方法）	Highest peak：利用色谱图中的最高峰进行化合物鉴定。 Nearest RT：使用色谱图中具有最近保留时间的峰进行化合物鉴定。
Smoothing （平滑）	在峰检测和积分前确定要在启用化合物峰执行的数据平滑水平。 ICIS 峰检测算法使用此值。 默认值：1 范围：从 1 到 15 点之间的任意奇数整数
S/N threshold （信噪比阈值）	用于峰积分的当前信噪比阈值。信噪比值小于该值的峰将不会进行积分。信噪比值大于该值的峰将进行积分。 范围：0.0 至 999.0
Enable Valley Detection （启用峰谷检测）	使用谷值检测近似方法来检测未解析的峰。此方法从未解析峰之间的谷顶点到基线画一条垂直线。将垂直线和基线的交点定义为首个峰的结束点以及第二个峰的开始点。
Expected Width (sec) （预期宽度，秒）	预期的峰宽参数 （以秒计算）如果已启用峰谷检测，它可控制峰预期的最小宽度。 启用谷值检测时，任何距离峰顶小于*预期峰宽*一半的谷点将被忽略。如果谷点处于预期峰宽之外， TraceFinder 应用程序将会在此点终止该峰。应用程序始终会在信号达到基线时终止峰，与预期的峰宽设置值无关。 范围：0.0 至 999.0
Constrain Peak Width （限定峰宽）	在色谱图峰积分时抑制化合物的峰宽。然后可以通过设置阈值和拖尾因子值来控制峰积分何时开关。选择 Constrain Peak Width 复选框会启用 Peak Height(%) （峰高， %）和 Tailing Factor （拖尾因子）选项。
Peak Height(%) （峰高， %）	在打开或关闭积分前，信号必须高于总峰高 (100%) 的基线百分比。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.0 至 100.0%
Tailing Factor （拖尾因子）	控制 TraceFinder 应用程序如何进行峰拖尾积分的因子。此因子是一个限制峰的拖尾缘对前延缘的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.5 至 9.0
Min Peak Height (S/N) （最小峰高，信噪比）	若要谷值检测近似方法使用最近 RT 峰识别标准，必须大于或等于此峰信噪比值。对于化合物识别目的， TraceFinder 应用程序会忽略信噪比值小于 S/N 阈值的所有色谱图峰。 范围：0.0 （所有峰）到 999.0
Peak S/N Cutoff （峰信噪比截止值）	峰缘的设置值低于此信噪比。 当基线调整的边缘高度小于基线调整顶点高度的信噪比与峰信噪比临界值时，该测试假定应用程序会找到一个峰边缘。 当顶点的信噪比为 500，峰的信噪比截止值为 200，且某个峰的信噪比值小于 200 时，应用程序会定义此峰的左右边缘。 范围：50.0 到 10000.0

表 13. Genesis 峰检测页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Valley Rise (%) （峰谷上升， %）	峰离子流图可在通过最小值 （在峰之前或之后）后上升至高于基线的百分比。上升百分比标准对于具有长尾的积分峰特别有用。 此方法从未解析峰之间的峰谷顶点到基线画一条垂直线。将垂直线和基线的交点定义为首个峰的结束点以及第二个峰的开始点。 当离子流图超过上升百分比时， TraceFinder 应用程序应用谷检测峰积分标准。此测试应用至峰的左右缘。 范围：0.1 至 500.0
Valley S/N （峰谷信噪比）	指定评估谷底的值。使用此参数确保周围的测量更高。 默认值：2.0 范围：1.0 至 100.0
# Background Scans （背景扫描数）	TraceFinder 应用程序执行的背景扫描的数量。
Report Noise As （将噪声报告为）	确定是否使用 RMS 计算或峰对峰分辨率阈值计算 S/N 值中使用的噪音。选项有 RMS （均方根）和 Peak to Peak （峰对峰）。

ICIS 检测方法

ICIS 峰检测算法设计用于处理 MS 数据，在 MS 信号水平低时具有优异的峰检测效率。

图 15. ICIS 峰检测页面

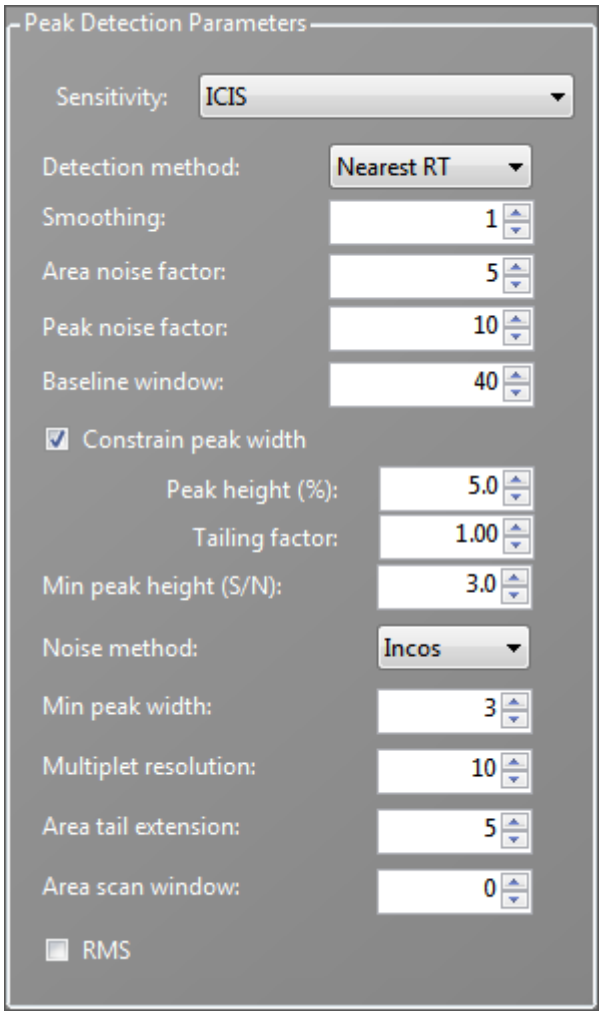


表 14. ICIS 峰检测页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Sensitivity （灵敏度）	指定 ICIS 峰检测算法。
Detection Method （检测方法）	Highest peak：利用色谱图中的最高峰进行化合物鉴定。 Nearest RT：使用色谱图中具有最近保留时间的峰进行化合物鉴定。
Smoothing （平滑）	在峰检测和积分前确定要在启用化合物峰执行的数据平滑水平。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：从 1 到 15 点之间的任意奇数整数 默认值：1
Area Noise Factor （峰面积噪声因子）	用于确定峰缘在可能峰位置后的噪音水平乘数。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：1 至 500 默认值：5
Peak Noise Factor （峰噪声因子）	噪音水平乘数用于确定潜在峰的信号阈值。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：1 至 1000 默认值：10
Baseline Window （基线窗口）	TraceFinder 应用程序在此数里的扫描中查找局部最小值。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：1 至 500 默认值：40
Constrain Peak Width （限定峰宽）	在色谱图峰积分时抑制化合物的峰宽。然后可以通过设置峰高阈值和拖尾因子值来控制峰积分何时开关。选择 Constrain Peak Width 复选框会启用 Peak Height(%) 和 Tailing Factor 选项。
Peak Height(%) （峰高， %）	在打开或关闭积分前，信号必须高于总峰高 (100%) 的基线百分比。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.0 至 100.0%
Tailing Factor （拖尾因子）	控制 TraceFinder 应用程序如何进行峰拖尾积分的因子。此因子是一个限制峰的拖尾缘对前延缘的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.5 至 9.0
Min Peak Height (S/N) （最小峰高，信噪比）	若要谷值检测近似方法使用最近 RT 峰识别标准，必须大于或等于此峰信噪比值。对于化合物识别目的， TraceFinder 应用程序会忽略信噪比值小于 S/N 阈值的所有色谱图峰。 范围：0.0 （所有峰）到 999.0
Noise Method （噪声方法）	选项有 INCOS 或 Repetitive （重复性）。 INCOS: 利用单遍算法来确定噪声水平。 ICIS 峰检测算法使用此值。 Repetitive: 利用多遍算法来确定噪声水平。 ICIS 峰检测算法使用此值。一般而言，这种算法在分析噪声方面比 INCOS 噪声算法更准确，但分析所需时间更长。

表 14. ICIS 峰检测页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Min Peak Width （最小峰宽）	在峰中要求的最小扫描数。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：0 到 100 次扫描 默认：3
Multiplet Resolution （多重分辨率）	在两个潜在峰的顶点之间最小的扫描分离。这是确定是否已解析两个峰的标准。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：1 到 500 次扫描 默认：10
Area Tail Extension （峰面积尾扩展）	扫描数目超过峰端点以便在均分强度中使用。 ICIS 峰检测算法使用此值。 范围：0 到 100 次扫描 默认：5
Area Scan Window （峰面积扫描窗口）	峰顶点每一边的可扫描数。定义被包括在区域积分中所有扫描 （峰起点到峰终点）的零值。 范围：0 到 100 次扫描 默认：0
RMS （均方根）	指定 TraceFinder 应用程序计算 RMS 噪音。默认情况下，应用程序使用 Peak to Peak 进行噪声计算。如果手动确定噪声区域，将会自动选择 RMS。

Avalon 检测方法

Avalon 峰检测算法专为 UV 数据而设计。 Avalon 峰检测算法也支持负峰。可以从 "Avalon Event List" 编辑 Event （事件）值。

图 16. Avalon 峰检测算法页面

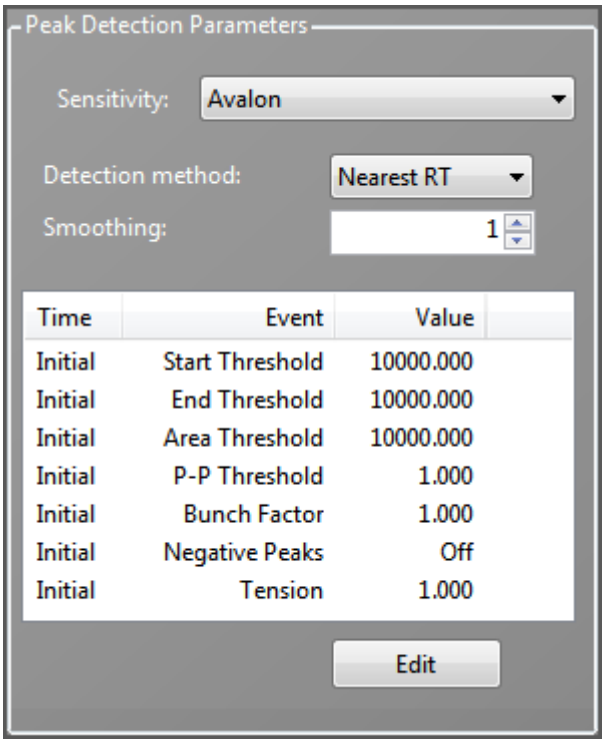


表 15. Avalon 峰检测算法页面参数

参数	描述
Sensitivity （灵敏度）	指定 Avalon 峰检测算法。
Detection Method （检测方法）	Highest peak （最高峰）：利用色谱图中的最高峰进行化合物鉴定。 Nearest RT （最近保留时间）：使用色谱图中具有最近保留时间的峰进行化合物鉴定。
Smoothing （平滑）	在峰检测和积分前确定要在启用化合物峰执行的数据平滑水平。 ICIS 峰检测算法使用此值。 默认值：1 范围：从 1 到 15 点之间的任意奇数整数
Time/Event/Value （时间 / 事件 / 值）	显示在 Avalon Event List （Avalon 事件列表）中指定的事件。起初只显示无法被编辑或删除的默认事件。
Edit （编辑）	打开 Avalon Event List 对话框，在此可以编辑 Time/Event/Value 参数。参阅 "Avalon Event List。 "

Avalon Event List

该事件列表同时包含用户自定义事件和无法进行编辑的默认事件。当用户选择 Avalon 灵敏度时，应用程序显示默认事件。无法删除这些事件或更改它们的时间和值。有关事件和值范围的详细列表，参阅 Event 类型。

图 17. Avalon Event List 对话框

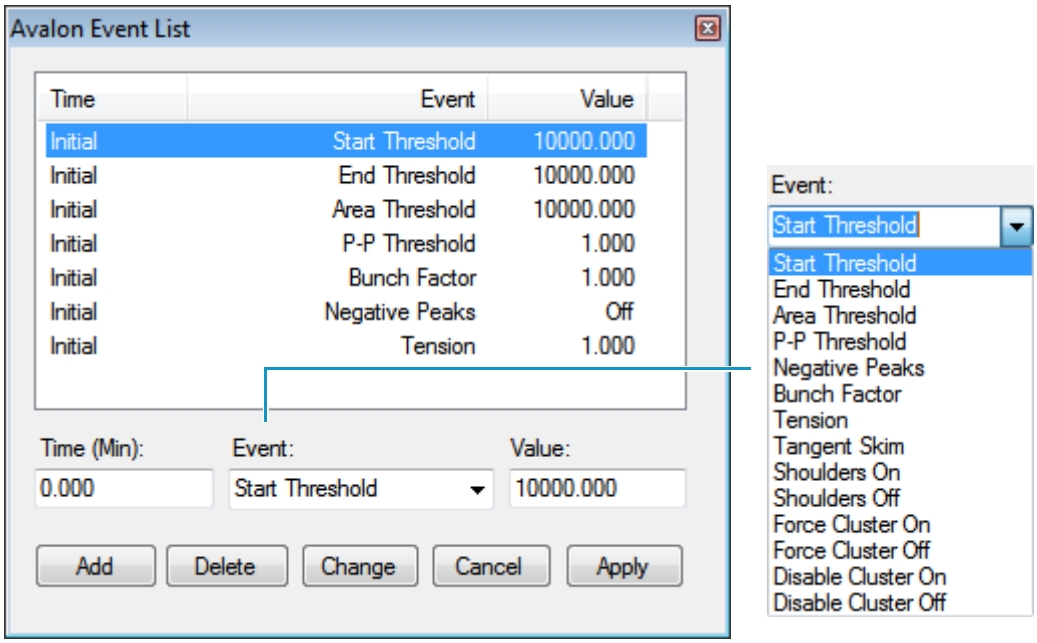


表 16. Avalon Event List 对话框参数

参数	描述
Time (Min) （时间，分钟）	指定事件的起始时间。
Event （事件）	指定事件类型。有关事件和值范围的详细列表，参阅 “Event 类型。 ”
Value （值）	指定事件的值。
Add （添加）	以当前 Time/Event/Value 参数添加一个新事件到列表中。
Delete （删除）	从事件列表中移除所选 Time/Event/Value 参数。
Change （更改）	应用当前参数值。
Cancel （取消）	不作任何更改，关闭对话框。将任意添加、删除或更改恢复为原始状态。
Apply （应用）	关闭对话框。

图 18. Event 类型

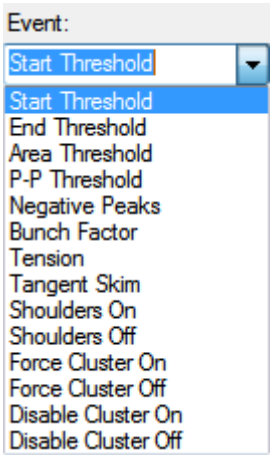


表 17. Event 类型定义 （第 1 页，共 2 页）

Event 类型	描述
Start Threshold （起始阈值）	指定峰起始处的阈值。 Start Threshold 与色谱图中的 RMS 噪声直接相关。 范围：0 至 999 999 999
End Threshold （结束阈值）	指定峰结束处的阈值。 End Threshold 与色谱图中的 RMS 噪声直接相关。 范围：0 至 999 999 999
Area Threshold （峰面积阈值）	控制峰面积阈值。系统不会检测峰面积小于面积阈值的任何峰。该控制参数的数据以面积为单位。 范围：0 至 999 999 999
P-P Threshold （峰对峰阈值）	在两个或更多邻近峰创建一个峰组之前，峰对峰分辨率阈值控制必须出现的峰重叠程度。峰组具有基线下降，代替了峰谷到峰谷的基线。这被指定为峰高重叠的百分比。 范围：0.1 至 99.99
Negative Peaks （负峰）	允许负峰的检测。在找到负峰后自动重设。 有效值：On （打开）或 Off （关闭）
Bunch Factor （分组因子）	指定峰检测时归为一组的点数。该事件控制积分时色谱图点的分组，不会影响最终峰面积的计算。分组因子高，则将峰分为大组。 范围：0 至 999
Tension （接近张力）	控制基线与色谱图整体形状的接近程度。接近张力越低，则基线更接近色谱图的变化。一个高基线接近张力，在更长的时间间隔内使基线的接近程度更低。 范围：0 至 999.99 分钟
Tangent Skim （切线撇去）	可以利用这个事件对任何峰组进行切线撇去。默认情况下，应用程序选择组中的最高峰作为基准。也可以指定峰组中的一个峰作为基准。应用程序会在基准峰的一侧 （或两侧）检测切线撇去峰。切线撇去在峰组的最后自动重设。 范围：0 至 1
Shoulders On （肩峰打开）	允许检测肩峰 （那些由弯折而不是谷点分离的峰）。设置阈值。

表 17. Event 类型定义 （第 2 页，共 2 页）

Event 类型	描述
Shoulders Off （肩峰关闭）	不启用肩峰检测。 范围：0 至 50
Force Cluster On （强制打开峰组）	强制将以下峰看作为一个组 （单个峰）。
Force Cluster Off （强制关闭峰组）	关闭已强制的峰分组。
Disable Cluster On （禁用峰组打开）	使所有峰都不被分组。
Disable Cluster Off （禁用峰组关闭）	允许再次分组。

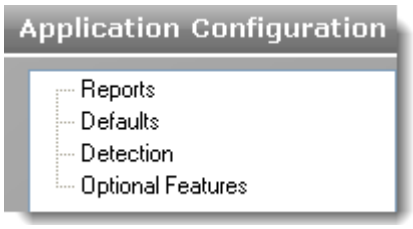
启用可选特性

在 Configuration 模式的 Application Configuration 视图中，可以启用以下特性：

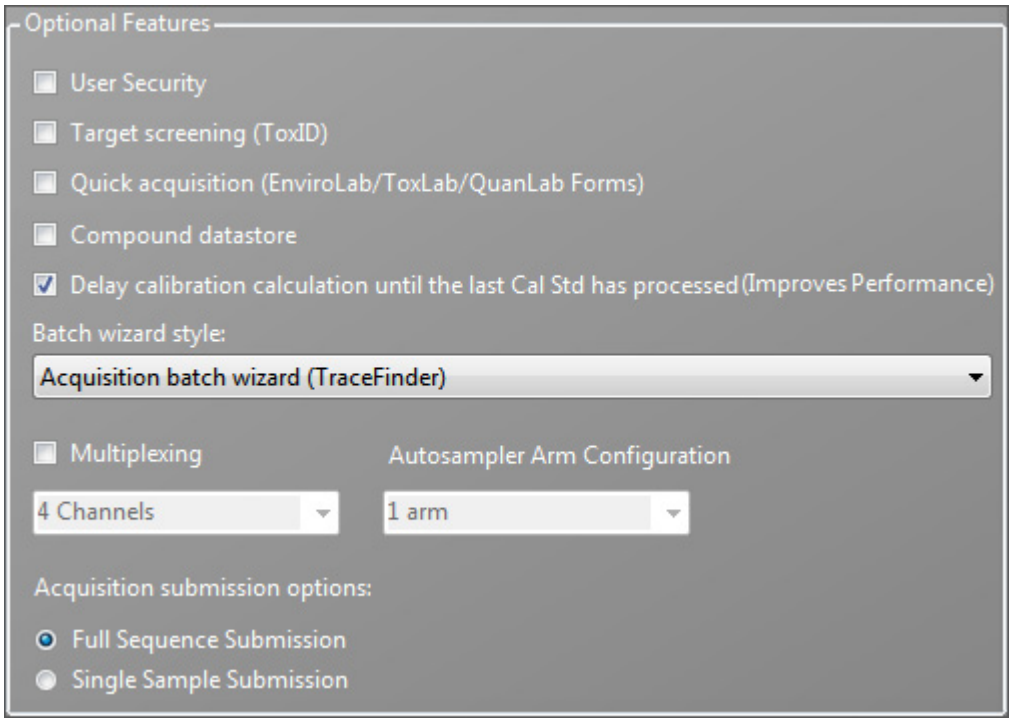
- User Security （用户安全）
- Target Screening （目标筛选）
- Quick Acquisition （快速采集）
- Compound Datastore （化合物数据库）
- Multiplexing （多通道）
- Delay Calibration Calculation （延迟校正校正计算）
- Batch Wizard Style （批次向导风格）
- 采集提交选项

❖ **若要打开 Optional Features 页面**

在 Application Configuration 视图中点击 **Optional Features**。



Application Configuration 页面的 Optional Features 页面打开。



User Security （用户安全）

当用户安全启用时，所有用户必须登录 TraceFinder 应用程序，而且只能使用他们用户职务下指定的模式。参阅第 43 页的 “ 选择用户职务 ”。

❖ 若要打开用户安全

1. 选中 **User Security** 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 43 页的 “ 选择用户职务 ”。当用户安全启用时，仅 LabDirector 或 ITAdmin 职务下的用户才可用 Configuration 特性。

   当复选框清除时，用户无需登录 TraceFinder 应用程序。当启动应用程序时，主菜单为用户看到的第一个屏幕，所有模式都对用户可用。 Configuration 模式的 User Administration 视图对除指定 LabDirector 或 ITAdmin 职务的用户外的其他所有用户都隐藏。

   重要信息 若在启用用户安全情况下，以管理员权限登录时，可以使用 **Administrator/Password （管理员 / 密码）**作为用户名 / 密码。

2. 点击 **Apply**。

   出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。

3. 点击 **Yes**。

Target Screening （目标筛选）

在生成 Target Screening 报告之前，必须已在计算机上安装 ToxID 应用程序。

❖ 若要启用目标筛选

1. 选中 **Target Screening (ToxID) （目标筛选， ToxID）**复选框。
2. 单击 **Apply**。

   出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。

3. 点击 **Yes**。

有关可用目标筛选报告的列表，参阅第 64 页的 “ 报告 ”。

Quick Acquisition （快速采集）

快速采集选项启用了 Acquisition、 Analysis 或 Method Development 模式下的 Quick Acquisition 特性。

注释 当启用多通道时， Quick Acquisition 特性不可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。

❖ 若要启用快速采集

1. 选中 **Quick Acquisition (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms) （快速采集，EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms）**复选框。
2. 点击 **Apply**。

   出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。
3. 点击 **Yes**。

有关 Quick Acquisition 特性的描述，参阅第 90 页的 “ 使用主方法 ”。

Compound Datastore （化合物数据库）

❖ 若要启用化合物数据库

1. 选中 **Compound Datastore** 复选框。

   默认情况下， Compound Datastore 不选中。
2. 在 Application Configuration 视图中单击 **Apply**。
3. 点击 **Yes**。

   应用程序使以下更改生效：
   - 显示 Master Method 视图 Compounds （化合物）页面上的 Acquisition List （采集列表）页面。参阅第 114 页的 “ 编辑 Compounds 页面 ”。
   - 显示 Configuration 模式导航窗格中的 Compound Datastore 任务窗格。参阅第 50 页的 “Compound Datastore”。
   - 在 Method Development 模式中启用 Export SRM Data （导出 SRM 数据）命令。参阅第 200 页的 “ 导出 SRM 数据 ”。

Multiplexing （多通道）

仅当安装 Power Modules （功能模块）时， Multiplexing 选项才可用。参阅第 13 页的 “ 安装功能模块 ”。

❖ 若要指定多通道特性

1. 选择 **Multiplexing** 复选框。
2. 选择 **2 Channels （2 通道）**或 **4 Channels （4 通道）**。
3. 当使用 2 通道时，选择 1- 或 2- 臂自动进样器配置。

   1 arm （单臂）配置启动通道 1 和 3； **2 arm** 配置启动通道 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。
4. 单击 **Apply**。

   出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。
5. 点击 **Yes**。

当启用多通道时，以下可选特性不可用：

- Quick Acquisition （快速采集）
- Batch Template Wizard （批次模板向导）
- Single Sample Submission (Intelligent Sequencing) （单样品提交，智能序列）

当为批次中的一个样品指定通道 （参阅第 227 页的 “ 定义样品列表 ”）或检测一次采集（参阅第 250 页的 “Devices 页面 ”）时，应用程序在 Acquisition 模式下使用多通道特性。

Delay Calibration Calculation （延迟校正校正计算）

利用 Delay Calibration Calculation... 选项使应用程序在计算校正曲线之前等待直到处理批次中的最后一个样品 （更快速），而不是在每个校正样品之后重新计算校正校正校正曲线（响应度更高）。

❖ 若要延迟校正曲线的计算

1. 选中 **Delay Calibration Calculation...** 复选框。

   默认情况下该选项选中。
2. 在 Application Configuration 视图中单击 **Apply**。
3. 点击 **Yes**。

Batch Wizard Style （批次向导风格）

利用 Batch Wizard Style 选项为批次向导选择其中一个风格。

❖ 若要选择向导风格

1. 在 Batch Wizard Style 列表中，选择一个向导风格：

   - **Acquisition Batch Wizard**：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。参阅第 5 章 , “ 使用 Acquisition 模式。 ”

     当启用多通道时，应用程序自动启用该向导风格。

   - **Batch Template Wizard**：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。
     参阅第 298 页的 “ 利用 Batch Wizard 创建批次 ”。

     注释 当启用多通道时， Batch Template Wizard 特性不可用。参阅 Multiplexing （多通道）。

2. 点击 **Apply**。

   出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。

3. 点击 **Yes**。

采集提交选项

若要控制采集，可以启用全序列或单样品提交选项。当从 Acquisition 模式提交批次、从 Method Development 模式提交开发批次或从任意模式提交 Quick Acquisition 批次时，按先进后出顺序进行。首先运行最后提交的那个批次，除非在 Acquisition 模式中提交了一个优先运行的批次。

- 当使用 Full Sequence Submission （完整序列提交）时，在完成当前采集批次后总是即刻运行优先批次。
- 当使用 Single Sample Submission （单样品提交）时，在完成当前采集样品后总是即刻运行优先批次。

❖ 若要指定采集提交特性

1. 选中 **Full Sequence Submission** 或 **Single Sample Submission** 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 , 在下一进样位置放入样品。

     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。
   - 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。

     注释 当启用多通道时， Single Sample Submission 特性不可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。
2. 点击 **Apply**。

   出现消息，提示是否即可重启 TraceFinder 应用程序以使更改生效。
3. 点击 **Yes**。

使用 Method Development 模式

本章讨论了当用户安全启用时分配给 Supervisor （主管）或 LabDirector （实验室主任）的方法开发任务。

目录

- 使用主方法
- 使用仪器方法
- 使用开发批次
- 使用快速采集

从 Method Development （方法开发）模式可以创建主方法、仪器方法或一个简单的用于测试仪器方法的开发批次。

也可以使用 Quick Acquisition （快速采集）特性快速从 Method Development 模式下的任意视图提交单样品。

❖ **若要访问 Method Development 模式**

在主菜单或导航窗格中点击 **Method Development**。

Method Development 导航窗格打开。有关 Method Development 导航窗格中所有特性的详细描述，参阅 “Method Development 导航窗格。 ”

图 19. Method Development 导航窗格

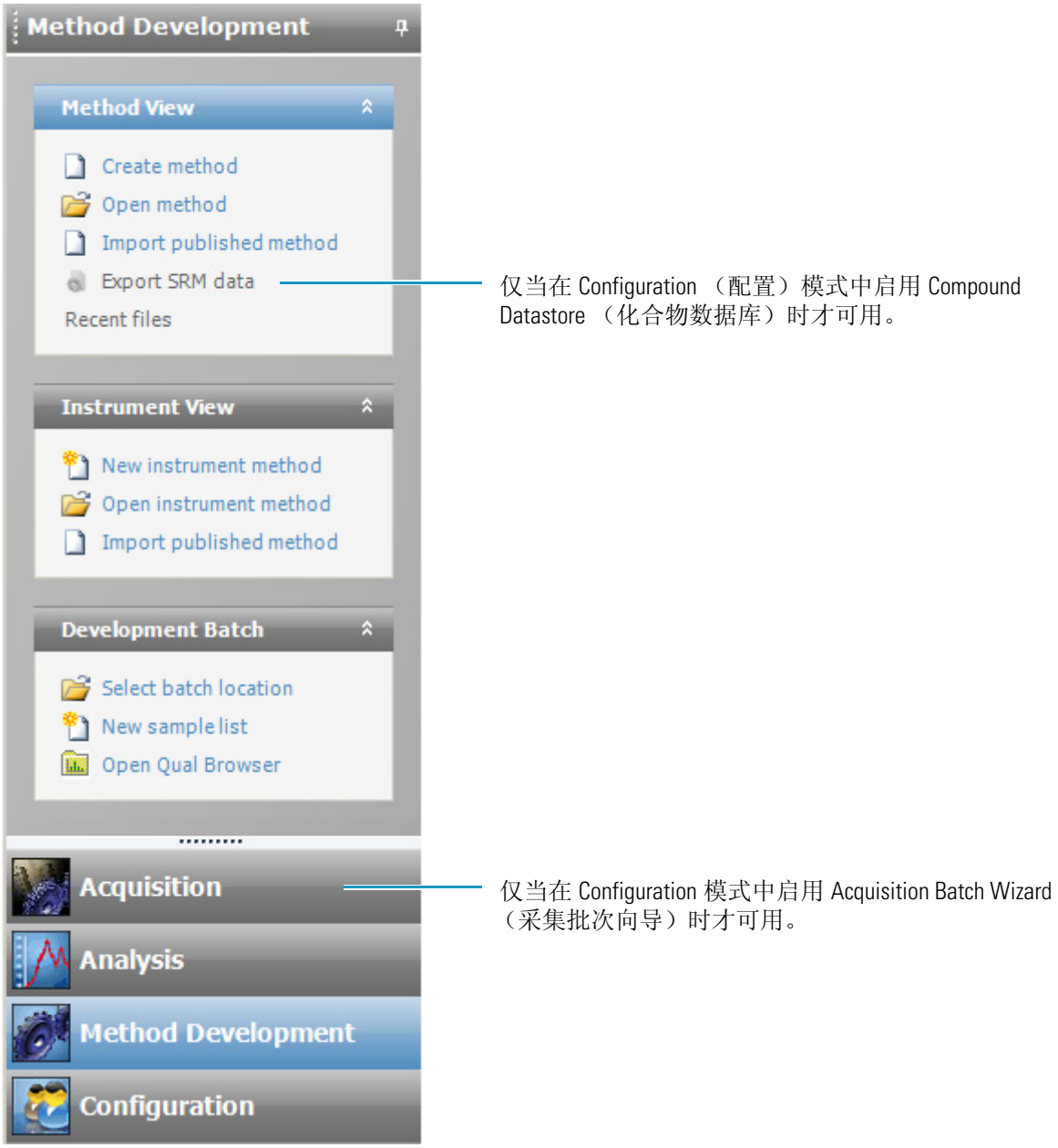


表 18. Method Development 导航窗格命令

命令	描述
Method View（方法视图）	参阅第 90 页的 “ 使用主方法 ”。
Create Method（创建方法）	打开 Create Master Method （创建主方法）对话框，在此可以选择希望用于开始主方法的进程。
Open Method（打开方法）	打开 Open Master Method （打开主方法）对话框，在此选择要打开的主方法。
Import Published Method （导入已发布的方法）	打开 Import Published Method 对话框，在此选择要导入的已发布方法。
Export SRM Data（导出 SRM 数据）	将选择反应监测 （SRM）表中的数据写至下列文件： …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods*methodname*.xml 当打开 TSQ 2.1 应用程序时，可以在仪器方法编辑器中使用此文件中的数据。仅当在 Configuration 模式中启用 Compound Datastore 选项时，该命令才显示。参阅第 83 页的 “Compound Datastore （化合物数据库） ”。 Acquisition List （采集列表）中的化合物必须包含至少一个 SRM 实验类型。
Recent Files（最近文件）	显示最近保存的主方法。
Instrument View（仪器视图）	参阅第 201 页的 “ 使用仪器方法 ”。
New Instrument Method（新建仪器方法）	打开 Instrument View，在此为已配置的仪器指定仪器设置。 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。
Open Instrument Method（打开仪器方法）	打开一个浏览器，可在其中选择要打开的仪器方法。
Development Batch（开发批次）	参阅第 208 页的 “ 使用开发批次 ”。
Select Batch Location（选择批次位置）	指定一个位置以供存储临时开发批次原始数据文件。
New Sample List（新建样品列表）	从开发批次中移除已采集的样品，以便建立新样品列表。
Open Qual Browser（打开定性浏览器）	打开 Thermo Xcalibur Qual Browser （Thermo Xcalibur 定性浏览器），在此可以查看已采集的原始数据文件。

使用主方法

TraceFinder 应用程序使用主方法指定批次样品的采集、处理和报告的特性和类型。当在分析中测试化合物时，可以创建专为该应用类型设计的方法。

主方法包含化合物列表和用于检测、处理和报告这些化合物的设置。

当创建主方法时， TraceFinder 应用程序使用该方法来确定软件如何处理样品集以提供有意义的结果。应用程序利用仪器方法来定义如何采集原始数据。主方法也可以定义如何处理原始数据、如何使用标记信息来评估结果以及报告功能如何定义数据和结果的输出。

TraceFinder 应用程序将主方法应用至批次，即要处理和报告的包含一个或多个样品的列表。同时，主方法和批次提供数据处理的面向工作流程方法以及用于批次样品的报告信息。

若要加速创建主方法，可以创建方法模板。使用方法模板有助于更迅速地开发方法，因为 TraceFinder 应用程序将所有的常用方法设置 （如确认离子的数量或数据依赖数据的使用）保存在模板中。

本部分包括对下列任务的说明：

- 创建新主方法
- 编辑主方法
- 创建方法模板
- 导入已发布的主方法
- 导出 SRM 数据

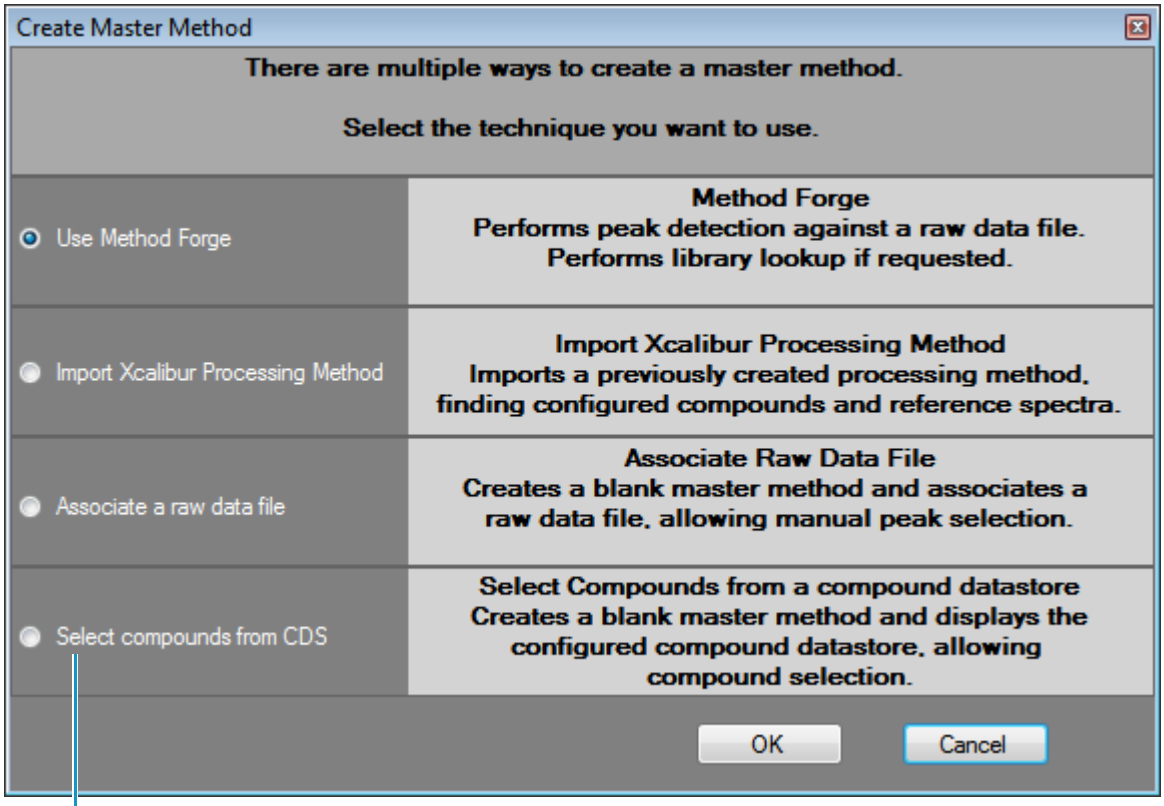
创建新主方法

若要开始一个主方法，按照 Create Master Method 对话框中四种不同步骤中的其中一种进行操作：

- 使用 Method Forge 来建立新方法
- 导入 Xcalibur 主方法
- 关联原始数据文件
- 从 Compound Datastore 中选择化合物

对于每种步骤，用户都以一种特定的方式开始方法，然后利用 Master Method View （主方法视图）中的常见特性完成并保存主方法。

图 20. Create Master Method 对话框



仅当在 Configuration 模式中启用 Compound Datastore 选项时，该命令才可用。

使用 Method Forge 来建立新方法

利用 Method Forge （方法向导）可以通过手动选择峰、选择多个化合物、对峰进行重命名或比较质谱图与库谱来建立一个新的主方法。也可以选择使 TraceFinder 应用程序自动创建主方法。有关所有 Method Forge 参数的详细描述，参阅第 97 页的 “Method Forge 对话框参数 ”。

当 TraceFinder 应用程序自动创建主方法时，它会执行下列功能：

- 检查原始文件和识别存在于样品中的化合物。
- 使用参考谱库指定化合物名称和 CAS 号。
- 使用质谱信息来选择潜在定量和确认离子以及用于化合物的参考质谱。

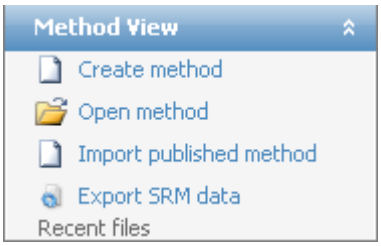
> **注释** 当识别峰来自一个模拟图，应用程序不会执行库检索，也不会识别任何确认离子。

按照如下步骤进行操作：

- 若要自动选择用于创建新方法的化合物
- 若要手动选择用于创建新方法的化合物

❖ 若要自动选择用于创建新方法的化合物

1. 从 Method View 任务窗格点击 **Create Method**。



   Create Master Method 对话框打开。参阅第 91 页的 “Create Master Method 对话框 ”。

2. 选择 **Use Method Forge （使用方法向导）**选项并点击 **OK （确定）**。

   Method Forge 对话框显示。有关 Method Forge 对话框中所有特性的详细描述，参阅第 97 页的 “Method Forge 对话框 ”。

   使用 Method Forge 根据现有的原始数据文件来创建主方法，或创建一个用于主方法的新原始数据文件。

3. 在 Method Forge 话框中，执行下列操作之一：

   选择 **Use the Default Template （使用默认模板）**选项。

   – 或 –

   选择 **Select a Custom Template （选择自定义模板）**并在 Method Template （方法模板）表中突出显示自定义模板。

   有关创建自定义方法模板的详细说明，参阅第 191 页的 “ 创建方法模板 ”。

4. 选择 **Name the Master Method （命名主方法）**复选框并键入主方法名称。

   当创建方法时，可以输入现有的方法名称并覆盖它。若不指定名称，则应用程序将方法命名为创建此方法时所用的原始文件的名称。

5. 选中 **Automatically Create the Master Method （自动创建主方法）**复选框。

6. 按照以下操作之一指定原始数据文件：

   a. 在 Raw File Selection （原始文件选择）区域，选择 **Use an Existing Raw Data File （使用现有的原始数据文件）**。

   b. 单击 Browse （浏览）按钮并找到要用于该方法的原始数据文件。

   c. 转至 步骤 8。

   – 或 –

   a. 在 Raw File Selection 区域，选择 **Acquire a New Raw Data File （采集新的原始数据文件）**。

   b. 在 Instrument Method （仪器方法）列表中，选择要用于采集数据的方法 (.meth) 文件。

   c. 在 Raw Filename （原始文件名）框中，输入 TraceFinder 应用程序将写入原始数据的文件名称。

   d. 在 Path （路径）框中输入路径，或点击浏览按钮然后找到应用程序将用于保存原始数据文件的文件夹。

   e. （可选）键入关于所采集的样品或该数据文件的注释。

7. 若选择采集新的原始数据文件，执行以下操作之一：

   选择 **Manual Injection （手动进样）**。

   – 或 –

   指定自动进样器设置：

   a. 选择 **Use Autosampler （采用自动进样器）**。

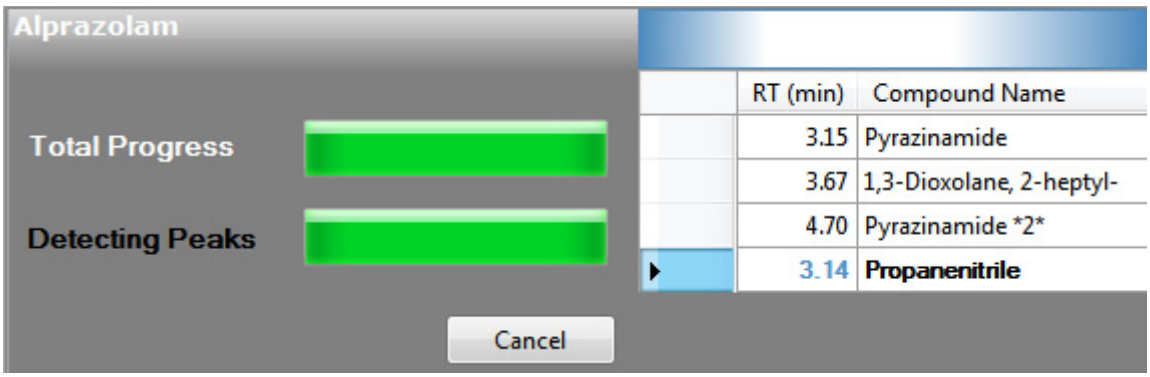
   b. 在 Vial Position （样品瓶位置）框中输入样品瓶位置。

   c. 在 Injection Volume （进样体积）框中输入进样体积。

      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。

8. 若要自动创建主方法，点击 **OK** （或 **Overwrite （覆盖）**）。

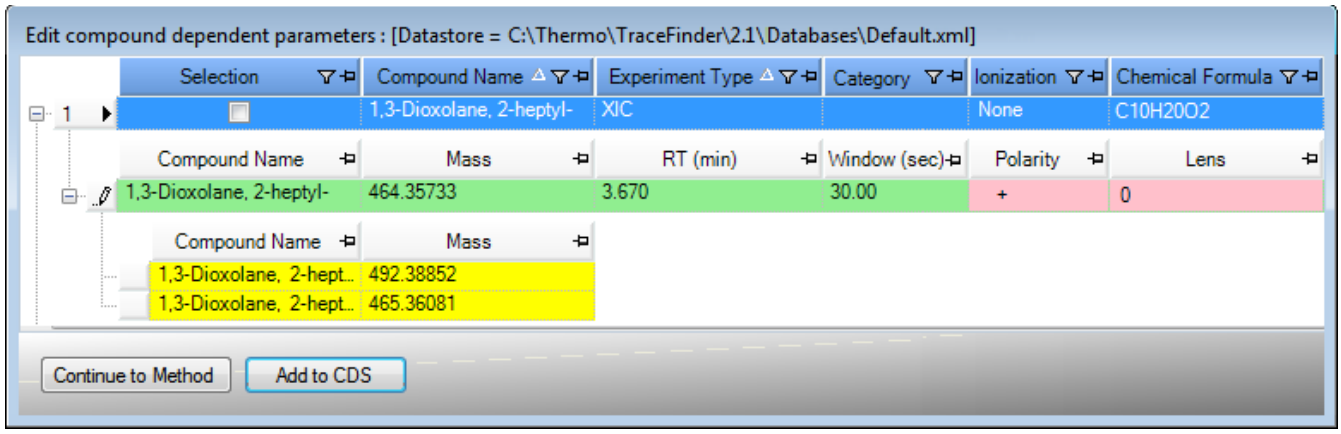
   Method Forge 建立方法时，会显示下列状态：



- 对于模拟峰， Method Forge 将检测峰显示为 *Peak@(RT)Analog*。 Method Forge 不会对模拟图中找到的峰执行库检索。
- 对于质谱峰， Method Forge 进程检索 NIST 库，并显示识别的化合物名称而不是峰时间。

当采集完成时， Method Forge 进行峰检测、搜索数据库（除了模拟峰）、特征离子和参考质谱图识别。随后， Method Forge 将这一信息载入新的主方法中。如果选择之前采集的原始文件，则会立即出现这个流程。

如果用于创建方法的原始数据文件中的化合物不在当前化合物数据库中， TraceFinder 应用程序在 Edit Compound Dependent Parameters （编辑化合物相关性参数）对话框中显示化合物。



9. （可选）选择要添加到化合物数据库中的化合物，然后点击 **Add to CDS （添加到化合物数据库）**中。

   所选的化合物即添加到当前的化合物数据库中。

   注释 在继续使用方法之前必须点击 **Add to CDS** 按钮。

10. 若要使用方法中的这些化合物并关闭对话框，点击 **Continue to Method （继续使用方法）**。

    TraceFinder 应用程序使用方法的原始数据文件中找到的所有化合物，并在 Master Method View 中显示 General （常规）页面。有关 General 页面上所有参数的详细说明，参阅第 112 页的 “General 页面 ”。

11. 从 General 页面的 Instrument Method 列表中选择仪器方法。

12. 在 Qualitative Peak Processing Template （定性峰处理模板）列表中选择在目标化合物分析之后对定量样品进行峰检测时所用的模板。

13. 从 Background Subtraction Range Option （背景扣除范围选项）列表中的其中一个选项来选择如何确定背景扣除范围。

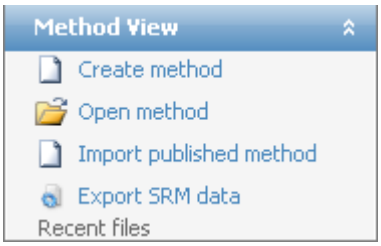
    - **Before Peak （峰顶前）**：在峰顶之前平均和扣除指定数量的扫描。
    - **After Peak （峰顶后）**：在峰顶之后扣除指定数量的扫描。
    - **Both Sides of Peak （峰顶两边）**：在峰顶两边扣除指定数量的扫描。

14. 若要保存新方法，从主菜单中选择 **File （文件） > Save （保存）**。

    有关如何修改主方法的详细说明，参阅第 106 页的 “ 编辑主方法 ”。

❖ 若要手动选择用于创建新方法的化合物

1. 从 Method View 任务窗格点击 **Create Method**。



   Create Master Method 对话框打开。参阅第 91 页的 “Create Master Method 对话框 ”。

2. 选择 **Use Method Forge** 选项并点击 **OK**。

   Method Forge 对话框显示。有关 Method Forge 对话框中所有特性的详细描述，参阅第 99 页的 “ 导入 Xcalibur 主方法 ”。

3. 执行下列操作之一：

   选择 **Use the Default Template** 选项。

   – 或 –

   选择 **Select a Custom Template** 并在 Method Template 表中突出显示自定义模板。

   有关创建自定义方法模板的详细说明，参阅第 191 页的 “ 创建方法模板 ”。

4. 选择 **Name the Master Method** 复选框并键入主方法名称。

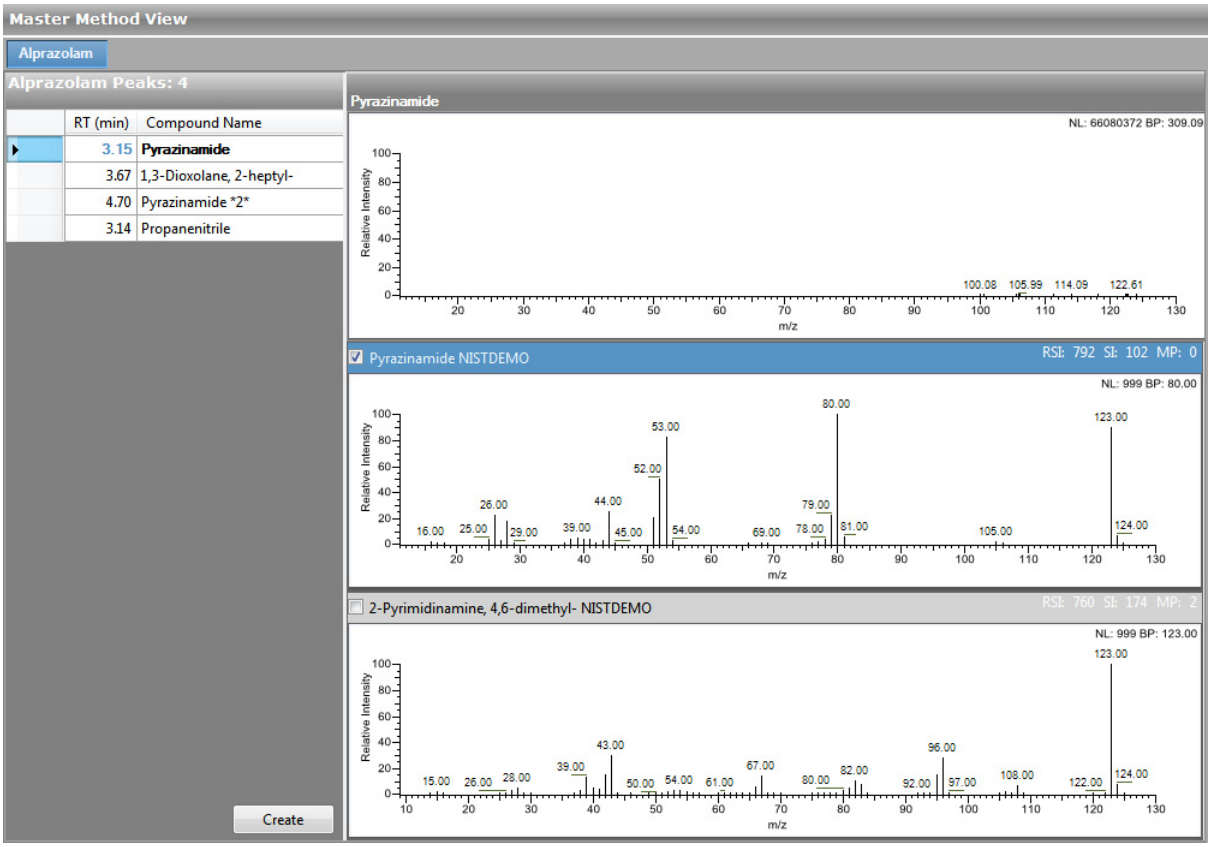
   当创建方法时，可以输入现有的方法名称并覆盖它。若不指定名称，则方法名称会采用创建此方法时所用的原始数据文件的名称。

5. 确保未选中 **Automatically Create the Master Method** 复选框。

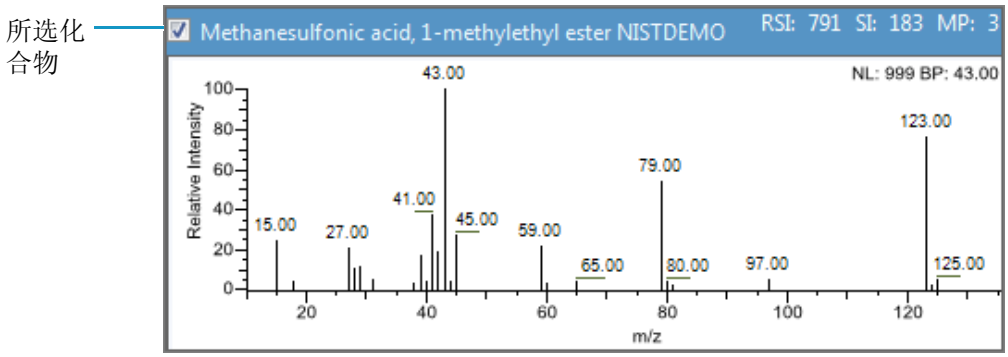
6. 若要选择原始数据文件，单击浏览按钮并找到该文件。

7. 若要手动创建主方法，点击 **OK**（或 **Overwrite**）。

   Master Method View 在 Library Results（谱库结果）窗格中显示可能的匹配列表。TraceFinder 应用程序在 Compound Name（化合物名称）列表中显示最佳匹配结果，并显示该化合物的峰质谱图。



8. 若要使用除由 TraceFinder 应用程序选择以外的化合物，滚动至该化合物的质谱图并在质谱图窗格的标题中选择该化合物名称。



9. 手动选择化合物之后，点击 **Create**（**创建**）以创建主方法。

   TraceFinder 应用程序使用方法的原始数据文件中找到的所有化合物，并在 Master Method View 中显示 General 页面。有关 General 页面上所有参数的详细说明，参阅第 112 页的 “General 页面 ”。

10. 从 General 页面的 Instrument Method 列表中选择仪器方法。

11. 若要保存新方法，从主菜单中选择 **File > Save**。

    有关如何修改主方法的详细说明，参阅第 106 页的 “ 编辑主方法 ”。

图 21. Method Forge 对话框

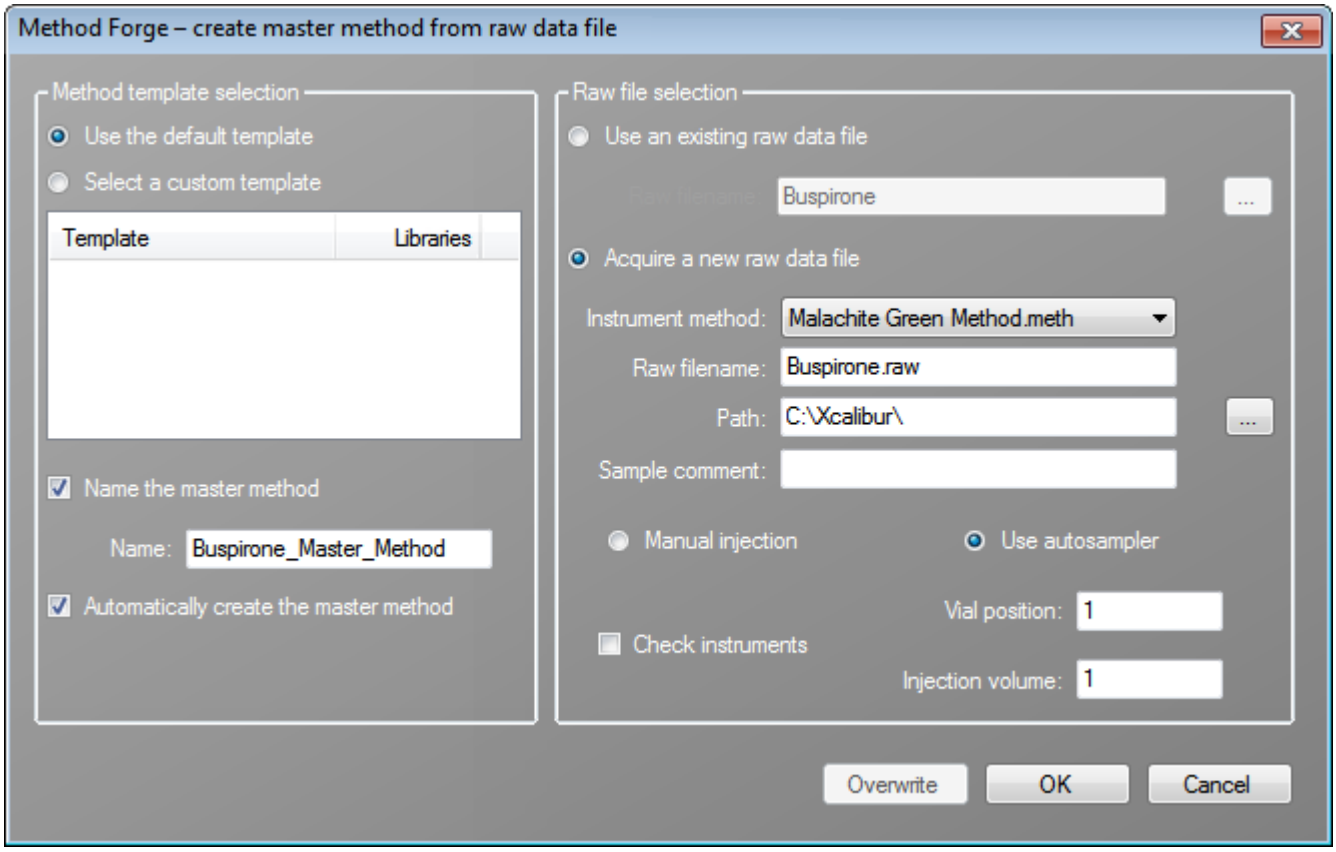


表 19. Method Forge 对话框参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Method Template Selection （方法模板选择）	
Use the Default Template （使用默认模板）	使用默认模板创建新的方法。
Select a Custom Template （选择自定义模板）	列出所有可用的方法模板。 有关创建自定义方法模板的详细说明，参阅第 191 页的 “ 创建方法模板 ”。
Name the Master Method （命名主方法）	新的主方法的名称。
Automatically Create the Master Method （自动创建主方法）	当采集完成时， Method Forge 向导进行峰检测、检索库、特征离子和参考质谱图识别。这个信息会载入至新的主方法中。如果选择已经存在的原始文件，则会立即出现这个流程。
Raw File Selection （原始文件选择）	
Use an Existing Raw Data File （使用现有的原始数据文件）	启用 Raw Filename 框，可在其中选择用于创建主方法的原始数据文件。

表 19. Method Forge 对话框参数 （第 2 页，共 2 页）

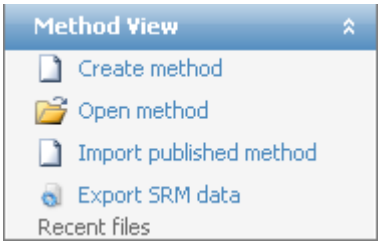
参数	描述
Acquire a New Raw Data File （采集新的原始数据文件）	启用数据采集功能以创建用于创建主方法的原始数据文件。
Instrument Method （仪器方法）	用于采集数据的已保存的方法 (.meth) 文件。
Raw Filename （原始文件名）	TraceFinder 应用程序写入原始数据的文件名称。
Path （路径）	TraceFinder 应用程序保存原始数据文件的位置。
Sample Comment （样品注释）	（可选）关于所采集的样品或该数据文件的注释。
Manual Injection （手动进样）	进行手动采集。
Use Autosampler （采用自动进样器）	进行自动进样器采集。
Vial Position （样品瓶位置）	用于自动进样器采集的托盘样品瓶编号。
Injection Amount （进样量）	自动进样器采集的进样体积 （单位为微升）。
Function button （功能按钮）	
Overwrite （覆盖）	覆盖指定的主方法名称。这个功能只在已存在指定的主方法名称时启用。
OK （确定）	使用指定的数据和参数创建主方法。
Cancel （取消）	关闭 Method Forge 而不创建主方法。

导入 Xcalibur 主方法

可以从现有的 Xcalibur 处理方法创建新的主方法。

❖ 若要导入 Xcalibur 主方法

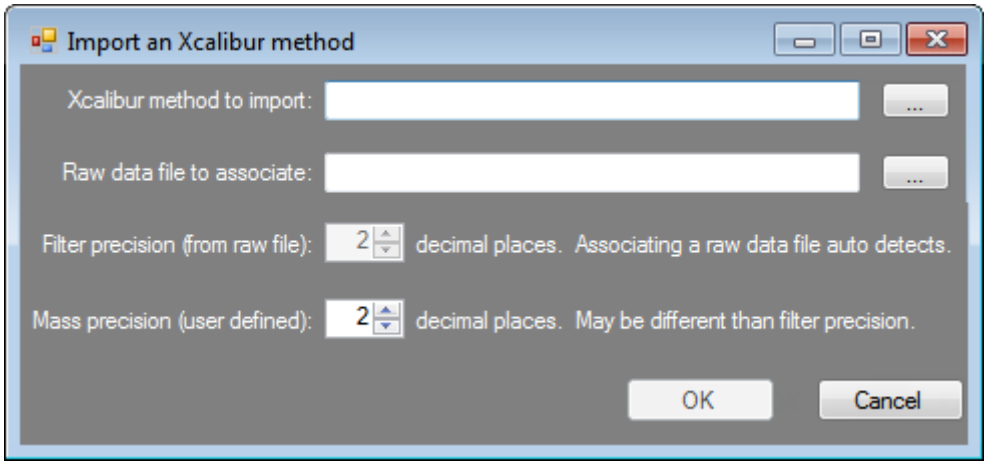
1. 从 Method View 任务窗格点击 **Create Method**。



Create Master Method 对话框打开。参阅第 91 页的 “Create Master Method 对话框 ”。

2. 选择 **Import Xcalibur Processing Method （导入 Xcalibur 处理方法）**选项并点击 **OK**。

Import an Xcalibur Method 对话框打开。



3. 点击 Xcalibur Method to Import （导入的 Xcalibur 方法）框中的浏览按钮，浏览至 Xcalibur 处理方法文件，然后打开该文件。

   TraceFinder 应用程序从 Xcalibur 方法文件导入化合物信息。

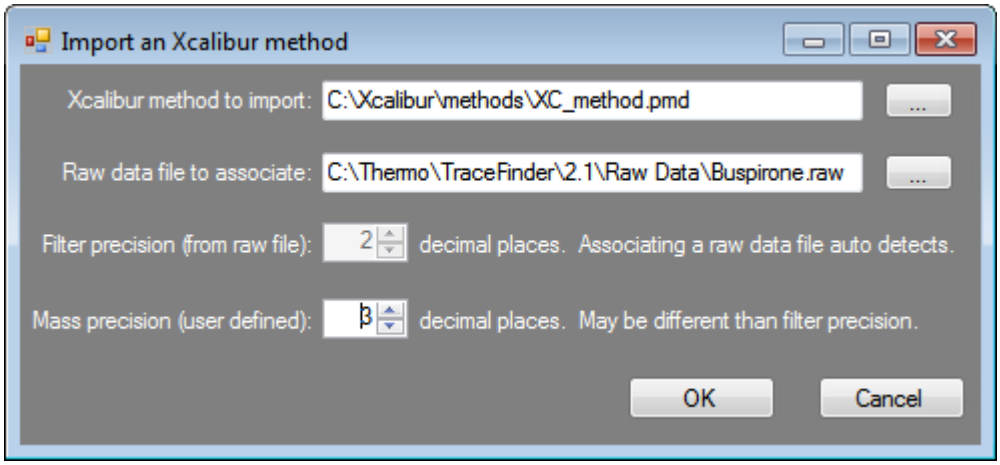
4. （可选）单击 Raw Data File to Associate （关联的原始数据文件）的浏览按钮，浏览到与方法相关的原始数据文件 （或从之前相关的原始数据文件列表选择），打开文件。

   若要确保这个原始数据文件总是适用于方法 （例如，如果将方法移动到另一个系统），应用程序在方法文件夹中保存原始数据文件：

   C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods*MethodName*

5. （可选）在 Mass Precision （质量数精度）框中更改小数位数。

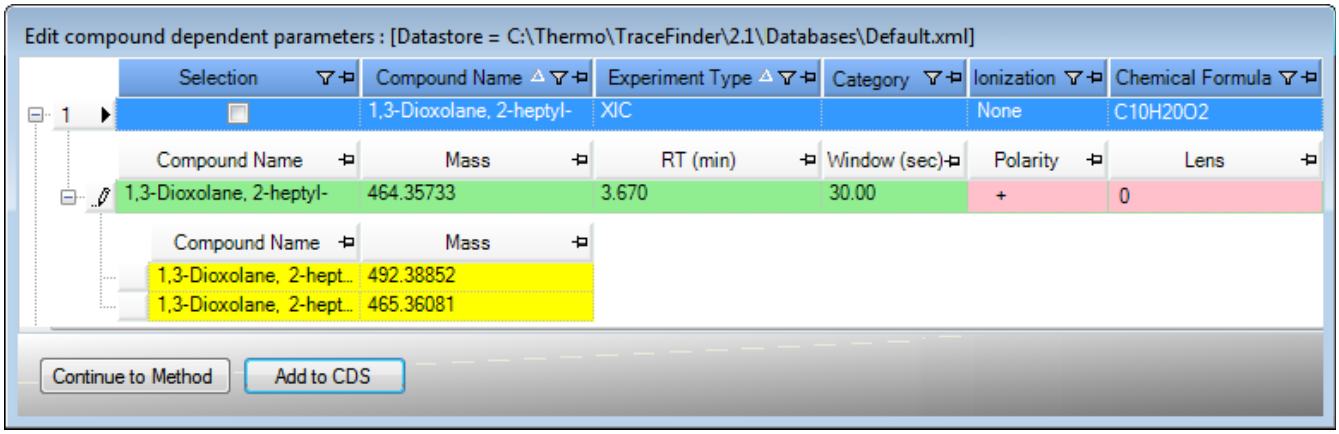
   可将质量数精度的小数位数设置为 2 到 6 之间的整数。



注释 当关联一个原始数据文件时，应用程序从相关文件读取过滤器精度，这样无法改变 Filter Precision （过滤精度）值。

6. 单击 **OK**。

   如果导入的 Xcalibur 方法文件中的化合物不在化合物数据库中，则 TraceFinder 应用程序会在 Edit Compound Dependent Parameters 对话框中显示那些化合物。



7. （可选）选择要添加到化合物数据库中的化合物，然后点击 **Add to CDS** 中。

   所选的化合物即添加到当前的化合物数据库中。

   若要将这些化合物添加到数据库，必须在继续运行方法前点击 Add to CDS 按钮。当点击 Continue to Method 时， Edit Compound Dependent Parameters 对话框关闭，用户无法添加化合物。

8. 若要将这些化合物添加到方法中并关闭对话框，点击 **Continue to Method**。

   TraceFinder 应用程序将添加在导入的 Xcalibur 方法中找到的所有化合物，并在 Master Method View 中显示 General 页面。有关 General 页面上所有参数的详细说明，参阅第 112 页的 “General 页面 ”。

9. 从 General 页面的 Instrument Method 列表中选择仪器方法。

10. 若要保存新方法，从主菜单中选择 **File > Save**。

    有关如何修改主方法的详细说明，参阅第 106 页的 “ 编辑主方法 ”。

关联原始数据文件

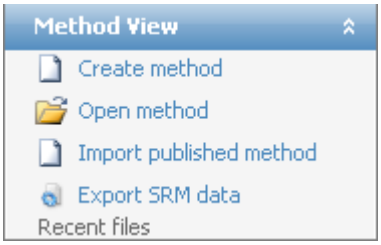
可以使用先前采集的原始数据文件中的化合物来创建新的主方法。

按照如下步骤进行操作：

- 若要将原始数据文件和方法相关
- 若要将化合物添加到方法

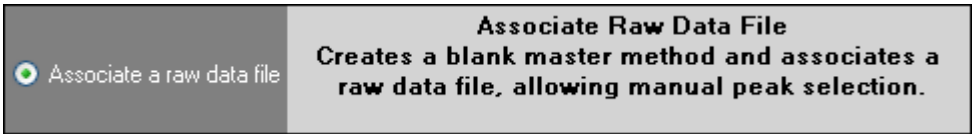
❖ 若要将原始数据文件和方法相关

1. 从 Method View 任务窗格点击 **Create Method**。

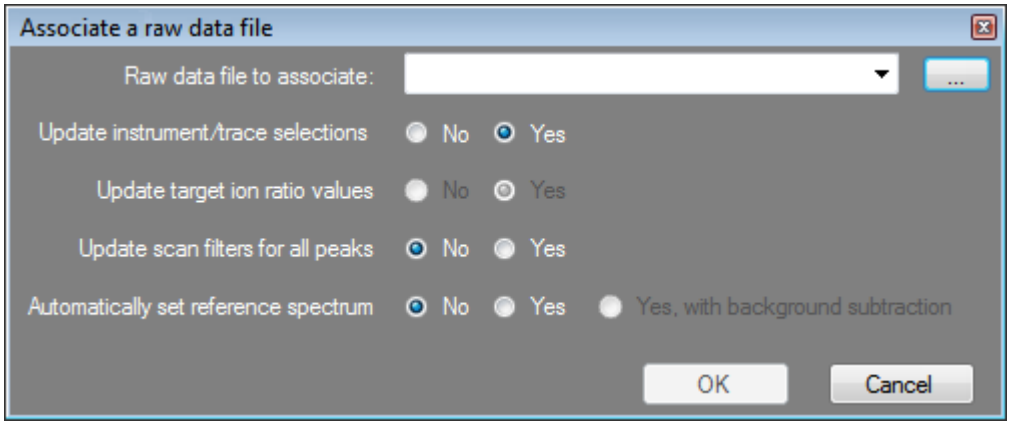


Create Master Method 对话框打开。参阅第 91 页的 “Create Master Method 对话框 ”。

2. 选择 **Associate a Raw Data File （关联原始数据文件）**选项并单击 **OK**。



Associate a Raw Data File 对话框打开。



3. 浏览到与方法相关的原始数据文件 （或从之前相关的原始数据文件列表选择），打开文件。

   若要确保这个原始数据文件总是适用于方法 （例如，如果将方法移动到另一个系统），应用程序在方法文件夹中保存原始数据文件：

   C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods

4. 为创建方法选择更新选项：

   - **Update Instrument/Trace Selections （更新仪器 / 谱图选择）**：从关联的原始数据文件读取 Detector （检测器）和 Trace （谱图）选项。在 Detection （检测）页面上，只能使用在原始数据文件中定义的检测器类型和谱图。对于可用的 Detector 和 Trace 值的详细说明，参阅第 136 页的 “Signal”。
   - **Update Target Ion Ratio Values （更新目标离子比率值）**：从关联的原始数据文件读取离子比率值。
   - **Update Scan Filters for All Peaks （更新所有峰的扫描过滤器）**：从关联的原始数据文件更新所有峰的扫描过滤器。
   - **Automatically Set Reference Spectrum （自动设置参考质谱）**：从关联的原始数据文件读取参考质谱。

   设置为 **No （否）**的选项适用方法中的标准值。

5. 单击 **OK**。

   TraceFinder 应用程序会显示 Master Method View 的 General 页面。有关 General 页面上所有参数的详细说明，参阅第 112 页的 “General 页面 ”。

6. 从 General 页面的 Instrument Method 列表中选择仪器方法。
7. 若要将化合物添加到方法，遵守第 103 页的 “ 若要将化合物添加到方法 ” 说明。

   若要保存方法，它必须包括至少一个化合物。

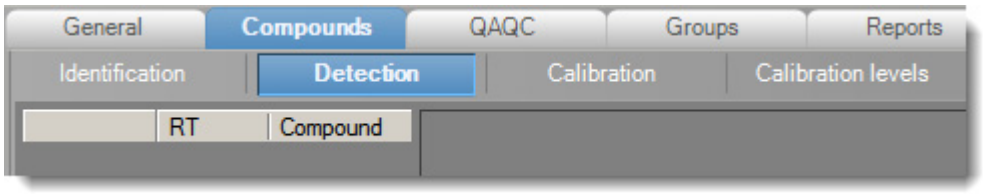
8. 若要保存新方法，从主菜单中选择 **File > Save**。

   有关如何修改主方法的详细说明，参阅第 106 页的 “ 编辑主方法 ”。

❖ 若要将化合物添加到方法

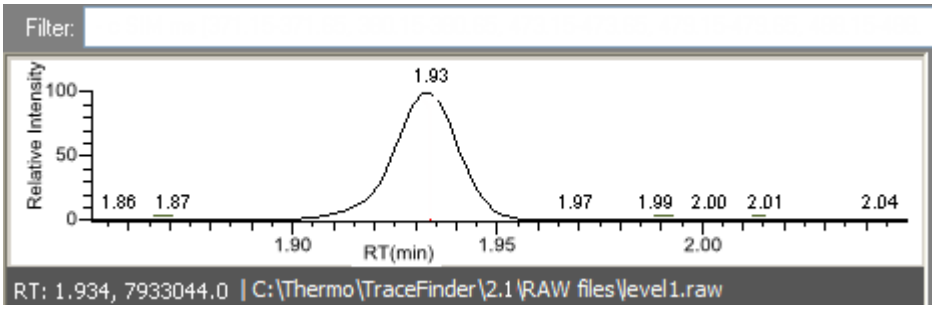
1. 点击 **Compounds （化合物）**选项卡。

   默认情况下选中 Detection 选项卡。

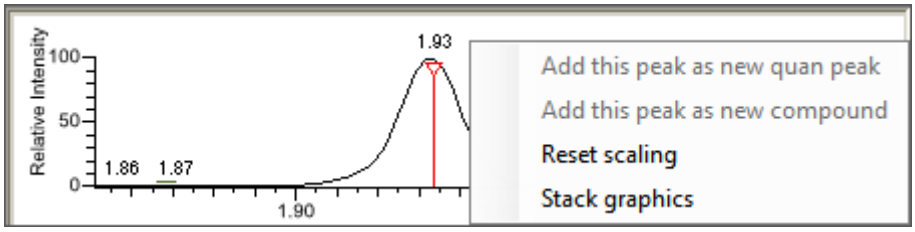


注释 当启用 Compound Datastore 时， Compounds 页面中包含 Acquisition List 选项卡。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

   Detection 页面显示空白的 Compound List （化合物列表），在原始数据文件中显示化合物的色谱图数据。



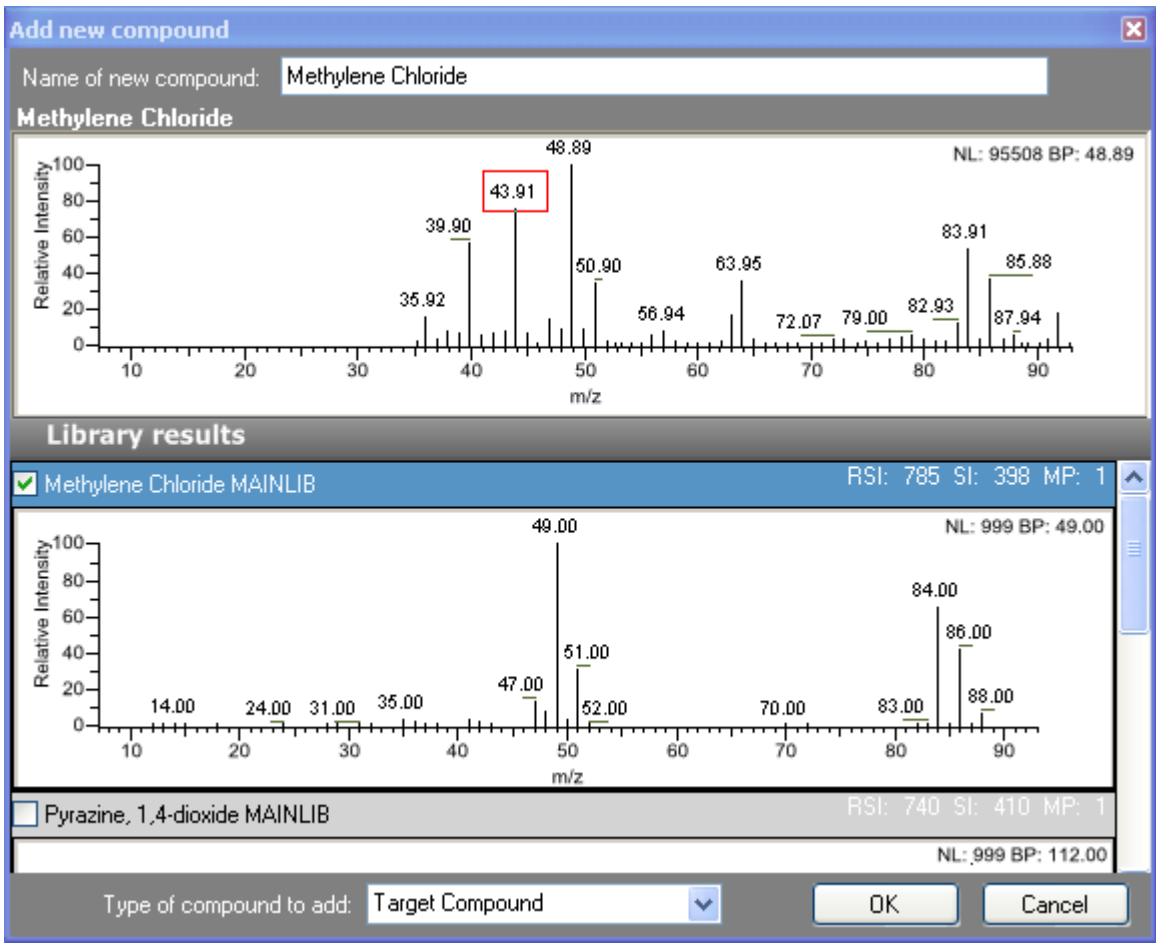
2. 从 Filter （过滤）列表中选择一个过滤器。
3. 在代表要添加至方法的化合物的色谱图内选择峰。
4. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Peak as New Compound （添加该峰作为新化合物）**。



   TraceFinder 应用程序为所选化合物进行库检索。应用程序将首个匹配的化合物作为化合物名称，将质谱图的基峰作为定量峰，将第二和第三大的离子作为确认离子峰。

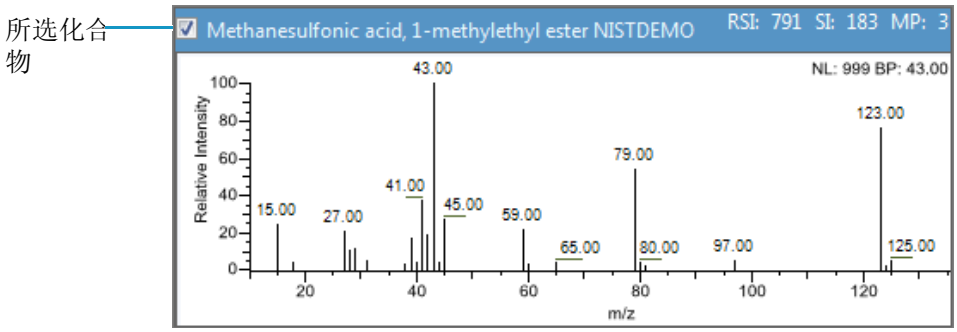
注释 当峰来自一个模拟图，应用程序不会执行库检索，也不会识别任何确认离子。

如果库中已有首个匹配的化合物名称，则 Add New Compound （添加新化合物）对话框打开。



5. （可选）执行下列操作：

   a. 若要使用除库中已有化合物以外的化合物，滚动至该化合物的质谱图并在质谱图窗格的标题栏中选择该化合物名称。



   b. 在 Type of Compound to Add （添加化合物的类型）列表中选择一个化合物类型。

   c. 点击 **OK**。

6. 为要添加到方法中的每个化合物重复这些步骤。

   有关 Detection 页面上所有特性的详细说明，参阅第 114 页的 “ 编辑 Compounds 页面 ”。

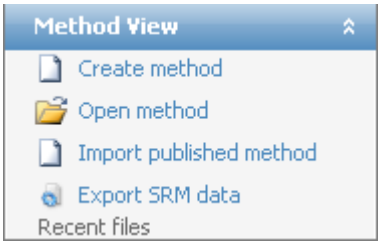
   有关如何修改主方法的详细说明，参阅第 106 页的 “ 编辑主方法 ”。

从 Compound Datastore 中选择化合物

可以从化合物数据库中选择化合物来创建新的主方法。仅当化合物数据库启用时，创建主方法的方法才可用。参阅第 83 页的 “Compound Datastore （化合物数据库） ”。

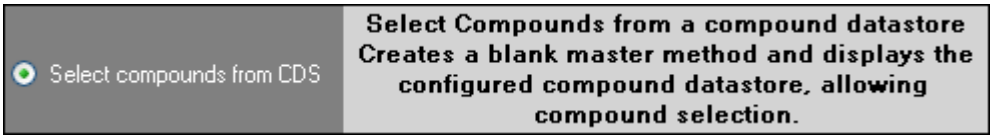
❖ 若要从数据库中选择化合物

1. 从 Method View 任务窗格点击 **Create Method**。

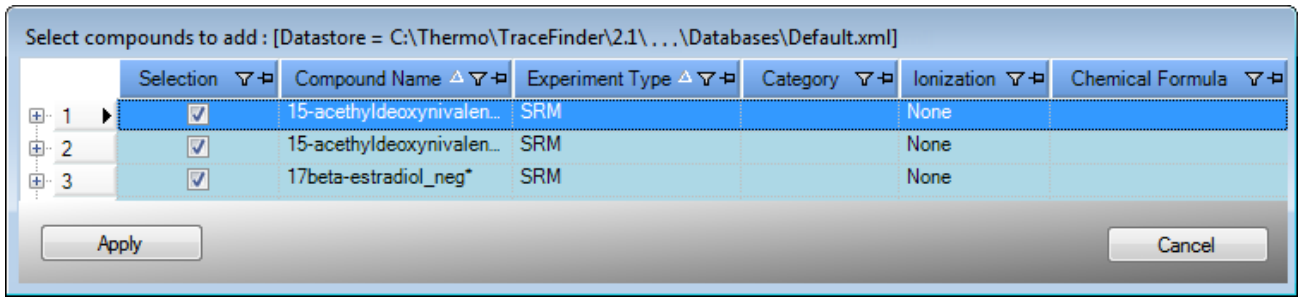


Create Master Method 对话框打开。

2. 选择 **Select Compounds from CDS （从化合物数据库中选择化合物）**选项 并单击 **OK**。



Select Compounds to Add （选择待添加的化合物）对话框打开，列出在化合物数据库中定义的所有化合物。



3. 选中希望添加到方法的每一个化合物的复选框。
4. 若要快速选择多个化合物，右击并使用快捷菜单中的任意命令。

表 20. 选择 Select Compounds to Add 快捷菜单

命令	描述
Select All （全选）	选中化合物数据库中的所有化合物。
Deselect All （取消全选）	清除化合物数据库中的所有化合物。
Copy Down （向下复制）	将化合物列表中当前选中的化合物状态 （选中或清除）复制到其以下的所有化合物。

5. 点击 **Apply （应用）**。

   TraceFinder 应用程序将选中的化合物添加到方法。

   注释 在将化合物添加到方法之后，在 Select Compounds to Add 对话框中不再启用该化合物。无法通过返回至该对话框来将已应用的化合物从方法中移除。若要从方法中移除化合物，参阅第 115 页的 “Acquisition List”。

6. 从 General 页面的 Instrument Method 列表中选择仪器方法。
7. 若要保存新方法，从主菜单中选择 **File > Save**。

   有关如何修改主方法的详细说明，参阅 “ 编辑主方法。 ”。

编辑主方法

可打开主方法以查看或编辑其中的化合物、方法说明和报告选项。

本部分包括对下列任务的说明：

- 打开主方法
- 编辑 General 页面
- 编辑 Compounds 页面
- 编辑 QAQC 页面
- 编辑 Groups 页面
- 编辑 Reports 页面

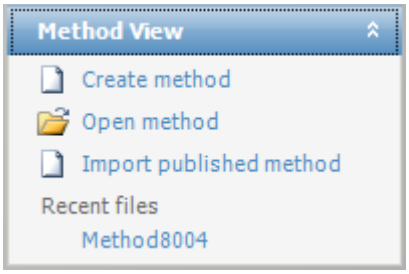
打开主方法

利用 TraceFinder 应用程序打开在当前 TraceFinder 应用程序中创建和保存的主方法或从这些从遗留应用程序转换的主方法。 TraceFinder、 EnviroLab Forms、 QuanLab Forms 或 ToxLab Forms。若要转换遗留方法，参阅第 19 页的 “ 转换遗留数据 ”。

❖ 若要打开已保存的主方法

1. 在主菜单或导航窗格中点击 **Method Development**。

   Method Development 导航窗格打开。



2. 在 Method View 对话框中，执行下列操作之一：

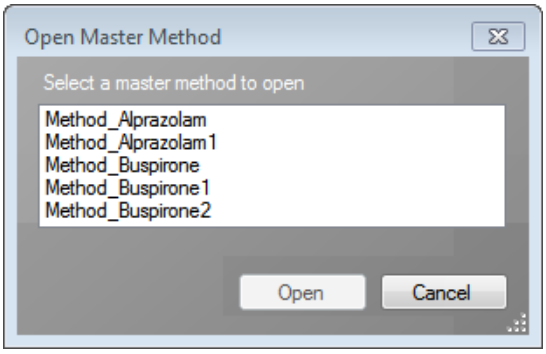
   点击 **Open Method**。

   – 或 –

   点击 Recent Files 列表中该方法的名称。

   当保存方法时，应用程序会将其添加至 Recent Files 列表中。 Recent Files 列表显示最近保存的主方法文件列表。

   Open Master Method 显示所有可用的方法。



3. 选择主方法然后点击 **Open （打开）**。

   TraceFinder 应用程序复制所选方法的所有部分包括其关联的仪器方法。

   所选方法的 General 页面显示在 Method View 中。有关 General 页面上所有参数的详细说明，参阅第 112 页的 “General 页面 ”。

编辑 General 页面

General 页面定义有关主方法的基本信息。有关 General 页面上所有参数的详细说明，参阅第 112 页的 “General 页面 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要指定主方法的常规信息
- 若要编辑仪器方法参数
- 若要选择定性峰处理模板
- 若要设置自动背景扣除选项
- 若要指定色谱图参考样品
- 若要指定质量数容许偏差

❖ 若要指定主方法的常规信息

1. 在 Lab Name （实验室名称）框中，输入要在每次打印、保存或导出报告顶端显示的名称。

   默认名称为 Default Laboratory （默认实验室）。

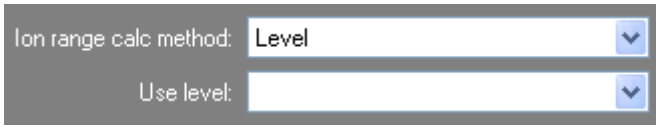
2. 在 Assay Type （实验类型）框中，输入方法的目标分析类型。
3. 在 Injection Volume 框中，选择进样时所用的进样体积 （单位为 µL）。

   使用向上 / 向下箭头以 1 µL 的增量 / 减量更改容量，或使用键盘输入非整数的注射容量。

   重要信息 TraceFinder 应用程序使用主方法中的进样体积，而不是仪器方法中的进样体积。

4. 在 Ion Range Calc Method （离子范围计算方法）列表中，选择用于计算离子比率范围窗口的方法。

   当选择 Level （水平）时， TraceFinder 应用程序显示 Use Level （使用水平）列表，在此可以选择校正水平。若要在 Compounds 页面上定义校正水平，参阅第 114 页的 “ 编辑 Compounds 页面 ”。

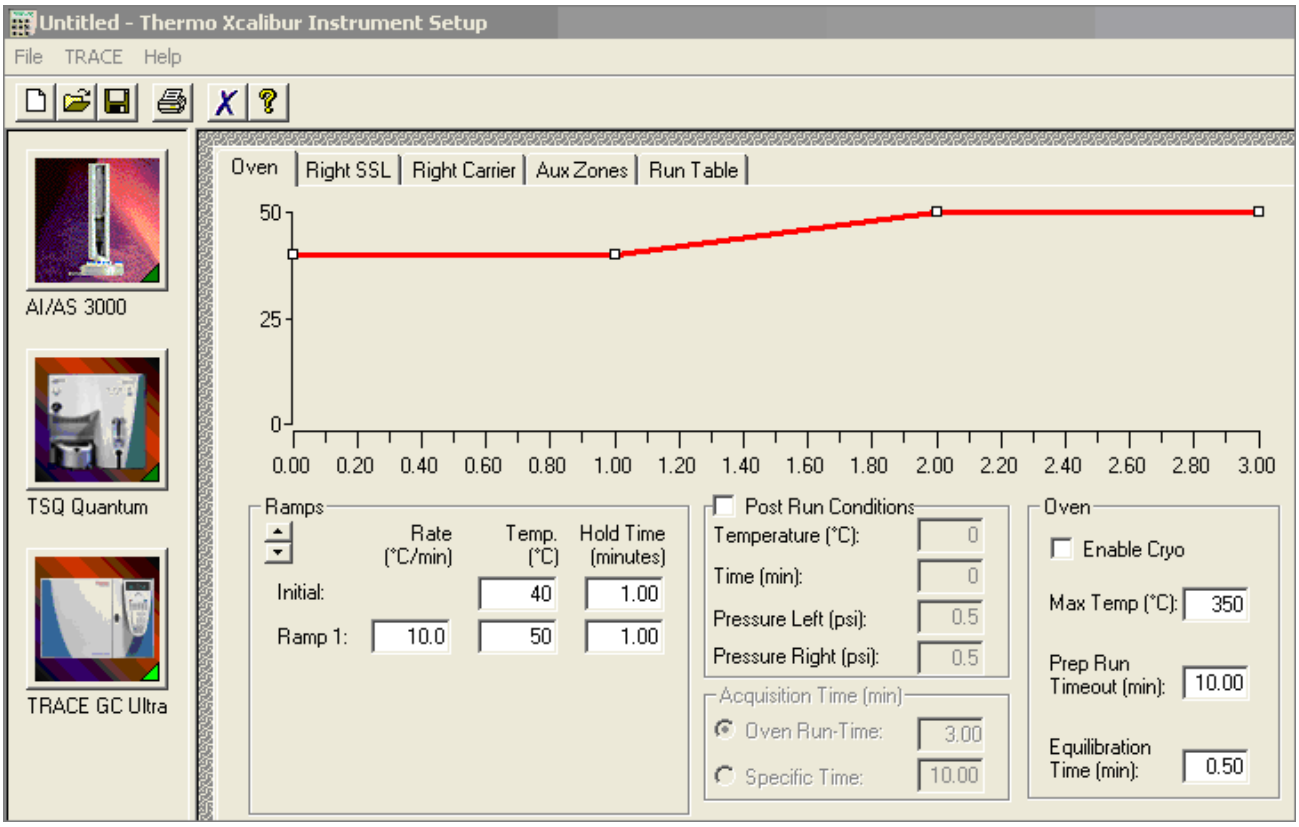
   

5. 在 Qualitative Peak Processing Template 框中选择在目标化合物分析之后对定量样品进行峰检测时所用的模板。

❖ 若要编辑仪器方法参数

1. 从 General 页面的 Instrument Method 列表中选择仪器方法。
2. 若要编辑此主方法的仪器方法，点击 **Edit （编辑）**。

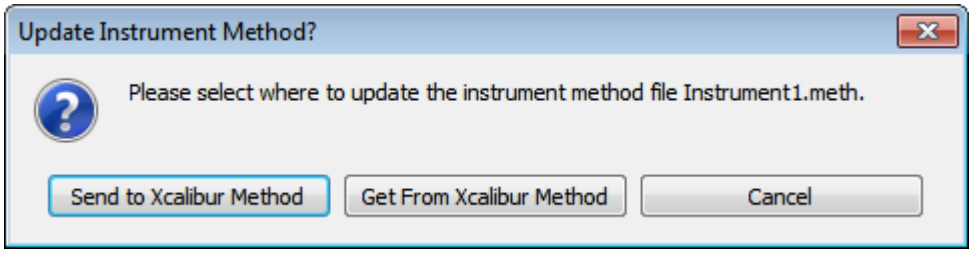
   Thermo Xcalibur Instrument Setup （Thermo Xcalibur 仪器设置）对话框打开。仪器设置示例显示多个已配置仪器。



3. 为仪器编辑仪器页面上的值。
4. 在 Thermo Xcalibur Instrument Setup 对话框的主菜单中，选择 **File > Save**，然后选择 **File （文件） > Exit （退出）**。

   TraceFinder 应用程序返回至 General 页面。参阅第 112 页的 “General 页面 ”。
5. 若要在创建此主方法后更新仪器方法中的任何更改，点击 **Update （更新）**。

   Update Instrument Method? （更新仪器方法？）对话框打开。



6. 选择以下其中一种选项：
   - **Send to Xcalibur Method （发送至 Xcalibur 方法）**：以当前仪器方法覆盖 C:\Xcalibur\methods 文件夹下的仪器方法。
   - **Get from Xcalibur Method （使用 Xcalibur 方法）**：以 C:\Xcalibur\methods 文件夹下的仪器方法覆盖当前仪器方法。
   - **Cancel （取消）**：对当前主方法中的仪器方法不作任何改变。

❖ 若要选择定性峰处理模板

在 Qualitative Peak Processing Template 列表中选择在化合物分析之后对样品进行峰检测时所用的模板。

应用程序在以下文件夹中列出所有方法模板 （.pmtx 文件格式）：

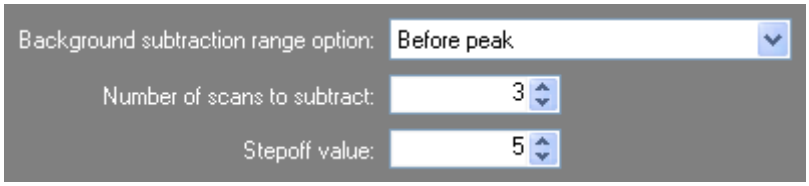
C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Templates\Methods

❖ 若要设置自动背景扣除选项

1. 从 Background Subtraction Range Option 列表中的其中一个选项来选择如何确定背景扣除范围。
   - **Before Peak**：在峰顶之前平均和扣除指定数量的扫描。
   - **After Peak**：在峰顶之后扣除指定数量的扫描。
   - **Both Sides of Peak**：在峰顶两边扣除指定数量的扫描。
2. 在 **Number of Scans to Subtract （扣除的扫描数）**框中输入一个数值。

   这是 TraceFinder 应用程序在平均之后从背景中扣除的扫描数。如果指定从峰的两边扣除扫描，则应用程序从峰的 **each （每一边）**扣除该数量的扫描。
3. 在 Stepoff Value （放弃值）框内输入一个值。

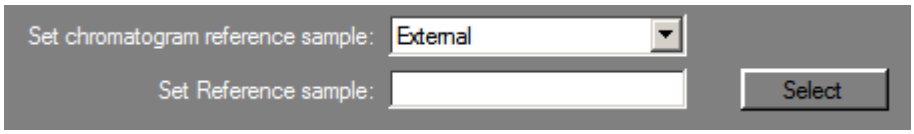
   TraceFinder 应用程序利用该值平均和扣除那些与峰顶不相连的扫描。例如：



   如果在 Number of Scans to Subtract 框输入 3，且放弃值为 5，则 TraceFinder 应用程序忽略峰左侧的前 5 次扫描，而对峰左侧的第 6、 7 和 8 次扫描执行平均和背景扣除。

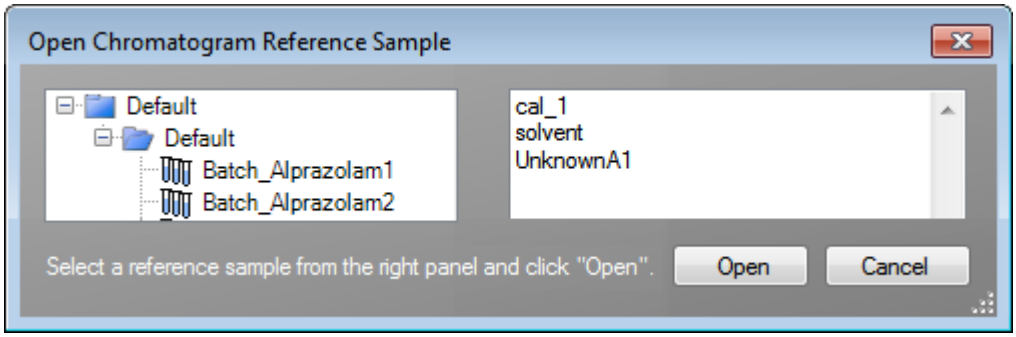
❖ 若要指定色谱图参考样品

1. 在 Set Chromatogram Reference Sample （设置色谱图参考样品）列表中，选中 **External （外标）**。



2. 点击 **Select （选择）**。

   Open Chromatograph Reference Sample （打开色谱图参考样品）对话框打开。



   如果正 f14,654 cm 在创建一个新方法，则在此处不会看到任何参考样品。必须采用当前方法创建和保存批次，以在列表中看到参考样品。

3. 从项目列表中选择一个项目。
4. 从子项目列表中选择一个子项目。
5. 从批次列表中选择一个批次。

   TraceFinder 应用程序仅显示采用当前主方法创建的批次。

6. 从已处理样品中选择一个样品。

   TraceFinder 应用程序显示所选批次中所有已处理的样品。若要使某个样品成为参考样品，该样品必须以当前主方法进行处理。

7. 点击 **Open**。

   在 Master Method View 中所选样品显示为色谱图参考样品。

   提示 若要将参考样品从主方法中清除，在 Set Chromatogram Reference Sample 类别中选中 **None （无）**。

❖ **若要指定质量数容许偏差**

1. 选择希望使用的测量单位。
2. 指定作为 *m/z* ± 质量数容许偏差的毫质量数单位或 ppm 的值。

   应用程序将质量数容许偏差应用至提取色谱图。

图 22. General 页面

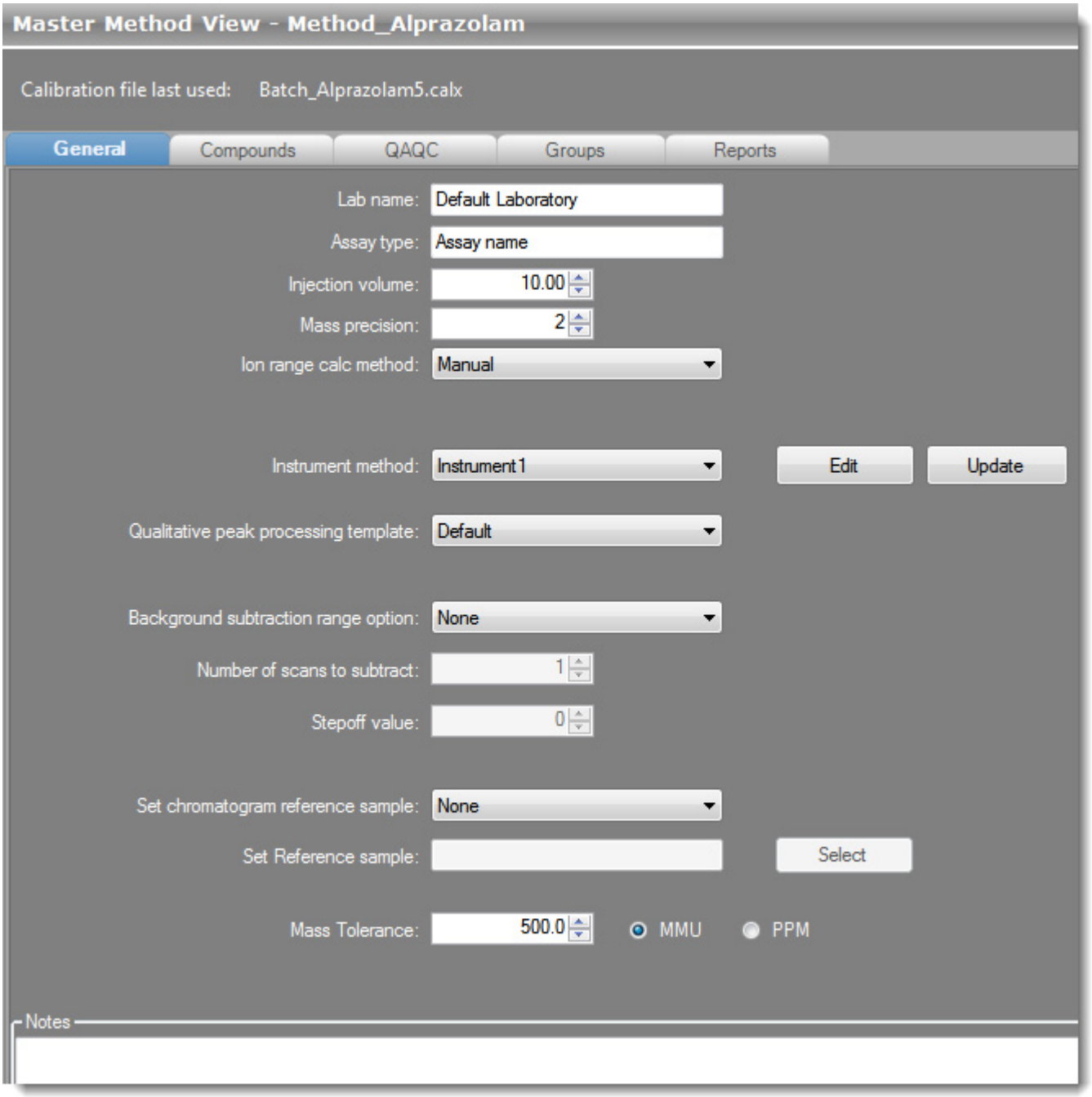


表 21. General 页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Lab Name （实验室名称）	要在每份打印、保存或导出报告顶端显示的实验室名称。 默认：Default Laboratory 若要指定默认实验室名称，参阅第 67 页的 “ 指定配置默认值 ”。
Assay Type （实验类型）	方法的目标分析类型的名称。分析类型将方法与化合物分析或特定化合物类别相联系 （例如， PAH 的分析类型可能用于多环芬芳碳氢化合物的分析）。
Injection Volume （进样体积）	系统在进样时所用的进样体积 （单位为 µL）。有关更详细的说明，参阅自动进样器的文档。 优先使用主方法中的进样体积，而不是仪器方法中的进样体积。 优先使用批次中的进样体积，而不是主方法中的进样体积。 范围：0.1 至 5000 µL
Mass Precision （质量数精度）	报告，峰以及质谱图中所用的小数点位数。 有效值：2 到 6 之间的整数。
Ion Range Calc Method （离子范围计算方法）	TraceFinder 应用程序使用所选离子范围计算方法来计算离子比率范围窗口：手动 （默认）、平均、水平或权重平均。当选择 Level 时，会显示一个额外的列表框，供选择校正水平量。若要在 Compounds 页面上定义这些校正水平，参阅第 114 页的 “ 编辑 Compounds 页面 ”。
Instrument Method （仪器方法）	用于采集样品的仪器方法。
Edit （编辑）	打开 Thermo Xcalibur Instrument Setup 对话框，在此可以编辑仪器方法。
Update （更新）	执行以下操作之一： **Send to Xcalibur Method**：以当前仪器方法覆盖 Xcalibur 方法。 **Get from Xcalibur Method**：以 Xcalibur 方法覆盖当前仪器方法。
Qualitative Peak Processing Template （定性峰处理模板）	TraceFinder 应用程序使用定性峰处理模板以在化合物分析后对定量样品执行峰检测。
Background Subtraction Range Option （背景扣除范围选项）	有效值：None、 Before Peak、 After Peak、 Both Sides of Peak 默认：None
Number of Scans to Subtract （扣除的扫描数）	有效值：整数偶数 默认：0
Stepoff Value （放弃值）	所选峰至首个扣除背景峰的放弃值。
Set Chromatogram Reference Sample （设置色谱图参考样品）	有效值：None、 External 默认：None

表 21. General 页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Set Reference Sample （设置参考样品）	仅当 Set Chromatogram Reference Sample 设置为 External 时，该参数才启用。点击 Select 按钮从项目文件夹中选择一个参考样品。
Mass Tolerance （质量数容许偏差）	MMU 或 PPM 上限值。 默认：500 范围：0.1 至 50 000 • （默认） MMU （毫质量数单位）：MMU 是提取质量数的静态计算。 • PPM （百万分之一）：PPM 是一个取决于实际质量数的可变计算。质量数越小，容许偏差范围越窄。质量数越大，容许偏差范围越宽。
Notes （注释）	用户添加的对方法的注释。

编辑 Compounds 页面

利用 Compounds 页面为目标化合物列表设置所有用于识别、检测和定量的参数。

从 Master Method View 的 Compounds 页面，可以访问下列页面：

Acquisition List	也参阅第 117 页的 “Acquisition List 页面参数 ”。
Identification	也参阅第 120 页的 “Identification 页面参数 ”。
Detection	也参阅第 133 页的 “Detection 页面参数 ”。
Calibration	也参阅第 160 页的 “Calibration 页面参数 ”。
Calibration Levels	也参阅第 162 页的 “Calibration Levels 页面参数 ”。
QC Levels	也参阅第 164 页的 “QC Levels 页面参数 ”。
Real Time Viewer	也参阅第 166 页的 “Real Time Viewer 页面参数 ”。

Compounds 页面上的每一页 （除 Acquisition List 和 Real Time Viewer （实时查看器）页面）都使用右击快捷菜单。参阅第 167 页的 “ 使用快捷菜单命令 ”。

Acquisition List

Acquisition List 页面显示所有定义用于当前方法的化合物。从这个页面，可以从方法添加或删除化合物。有关 Acquisition List 页面上所有特性的详细说明，参阅第 117 页的 “Acquisition List 页面参数 ”。

仅当在 Configuration 模式中启用 Compound Datastore 选项时， Acquisition List 页面才显示。参阅第 83 页的 “Compound Datastore （化合物数据库） ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要过滤化合物列表
- 若要从列表删除化合物
- 若要将化合物添加至列表

❖ 若要过滤化合物列表

1. 若要显示经过滤的化合物列表，单击列标题中的漏斗图标， 。

   应用程序显示可过滤标准列表。在所有列表中，可以按照 All （所有）、 Blanks （空白）、 NonBlanks （非空白）或自定义过滤标准进行过滤。其他过滤标准可适用于单列。

2. 若要基于特定列中的化合物值创建自定义过滤器，可从列的列表框选择 **Custom （自定义）**。

   有关创建自定义过滤器的详细说明，参阅附录 C, “ 使用过滤标准。 ”

❖ 若要从列表删除化合物

1. 从列表选择要移除的化合物。
2. 点击 **Remove Compound （移除化合物）**图标， ，或点击右键然后从快捷菜单中选择 **Remove Compound**。

   确认对话框显示，其中列出要移除的化合物。

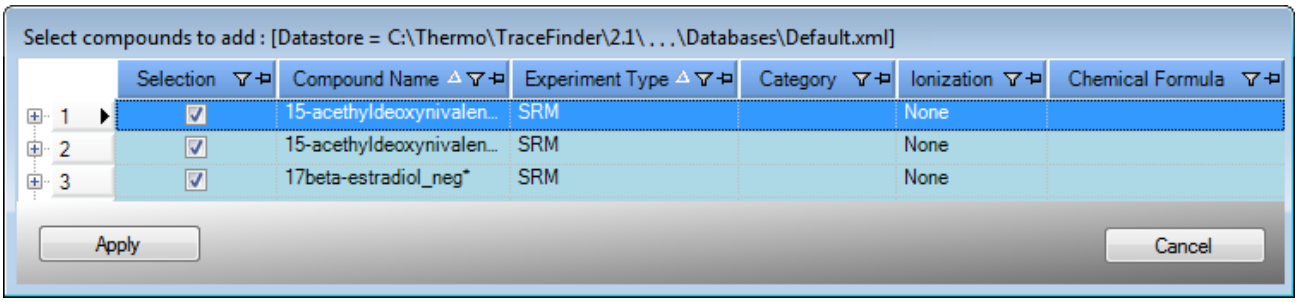
3. 若要确认该删除，点击 **Yes （是）**。

   所选化合物从采集列表中移除，对化合物数据库无任何影响。

❖ **若要将化合物添加至列表**

1. 点击 **Add Compound （添加化合物）**图标， ，或右击然后从快捷菜单中选择 **Add Compound**。

   Select Compounds to Add 对话框打开，列出在化合物数据库中定义的所有化合物。



2. 选中希望添加到方法的每一个化合物的复选框。
3. 若要快速选择多个化合物，右击并使用快捷菜单中的任意命令。

表 22. Select Compounds to Add 快捷菜单命令

命令	描述
Select All （全选）	选中化合物数据库中的所有化合物。
Deselect All （取消全选）	清除化合物数据库中的所有化合物。
Copy Down （向下复制）	将化合物列表中当前选中的化合物状态 （选中或清除）复制到其以下的所有化合物。

4. 点击 **Apply**。

   TraceFinder 应用程序将化合物添加至 Master Method View 的 Acquisition List 页面中。参阅 “Acquisition List 页面。 ”

图 23. Acquisition List 页面

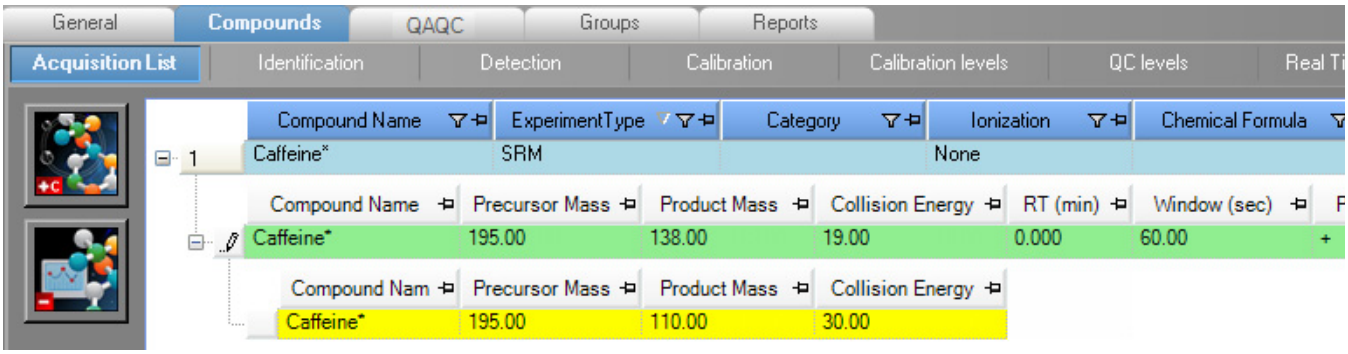


表 23. Acquisition List 页面参数 （第 1 页，共 2 页）

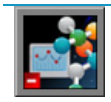
参数	描述
功能图标	
	打开 Select Compounds to Add 对话框，列出在化合物数据库中定义的所有化合物。
	删除选定化合物。当没有选择行时该图标不可用。若使用过滤器显示化合物子集，则选定化合物可能在 Acquisition List 页面中不可见。
化合物参数	
Compound Name （化合物名称）	分配给化合物的含字母数字的名称。
Experiment Type （实验类型）	实验类型为：SRM、 XIC 或 SIM。
Category （类别）	（可选）字母数字标识符。
Ionization （离子化）	（可选）字母数字标识符。 有效值：ESI、 APCI、 EI、 CI 或 APPI
Chemical Formula （化学分子式）	（可选）字母数字化学品标识符。
定量峰参数	
Precursor Mass （母离子质量数）	母离子的质荷比。在质荷比 （*m/z*）单位中的目标母离子峰的中心位置。 仅对 SRM 实验可用。 范围：10.000 至 2999.999
Product Mass （子离子质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 SRM 实验可用。 范围：10.000 至 2999.999
Mass （质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 XIC 和 SIM 实验可用。 范围：10.000 至 2999.999
Collision Energy （碰撞能量）	离子与碰撞气体碰撞时耗用的能量。 范围：–250 至 250
Lens （透镜）	（可选）范围：-400 至 400
Polarity （极性）	+ （正极）或 – （负极）
RT （min） （保留时间，分钟）	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。 TraceFinder 应用程序使用 RT 和 Window （窗口）值确定采集的开始和停止时间。 范围：0.00 至 999.00 开始时间 = RT–(Window/2) 停止时间 = RT+(Window/2) 开始和停止范围：0.00 至 999.00

表 23. Acquisition List 页面参数 （第 2 页，共 2 页）

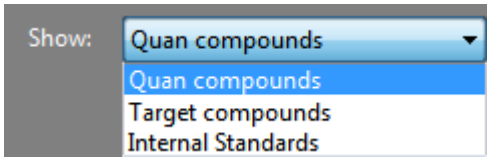
参数	描述
Window (sec) （窗口，秒）	Acquisition （采集）窗口。 TraceFinder 应用程序使用 RT 和 Window 值确定采集的开始和停止时间。 范围：0.00 至 499.50 开始时间 = RT–(Window/2) 停止时间 = RT+(Window/2) 开始和停止范围：0.00 至 999.00
Energy Ramp （能量递变）	仅对 SRM 实验可用。 范围 :0.00 至 200.00
确认离子参数	
Precursor Mass （母离子质量数）	母离子的质荷比。在质荷比 （*m/z*）单位中的目标母离子峰的中心位置。 只读字段，仅对 SRM 实验可用。 范围：10.000 至 2999.999
Product Mass （子离子质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 SRM 实验可用。 范围：10.000 至 2999.999
Mass （质量数）	定量离子的质荷比。目标定量离子峰的中心位置，单位为质荷比 (*m/z*)。 仅对 XIC 和 SIM 实验可用。 范围：10.000 至 2999.999
Collision Energy （碰撞能量）	离子与碰撞气体碰撞时耗用的能量。 仅对 SRM 实验可用。 范围：–250.00 至 250.00

Identification

Identification （识别）页面会列出将用于分析、报告和其他指定化合物值的目标化合物。有关 Identification 页面上所有值的详细说明，参阅 “Identification 页面。 ”

❖ 若要过滤显示的化合物

从 Show 列表中，选择要在化合物列表中显示的化合物的类型。



化合物类型	描述
Quan Compounds （定量化合物）	仅显示定量化合物，例如目标化合物和内标化合物。
Target Compounds （目标化合物）	仅显示目标化合物。
Internal Standards （内标）	仅显示内标化合物。

图 24. Identification 页面

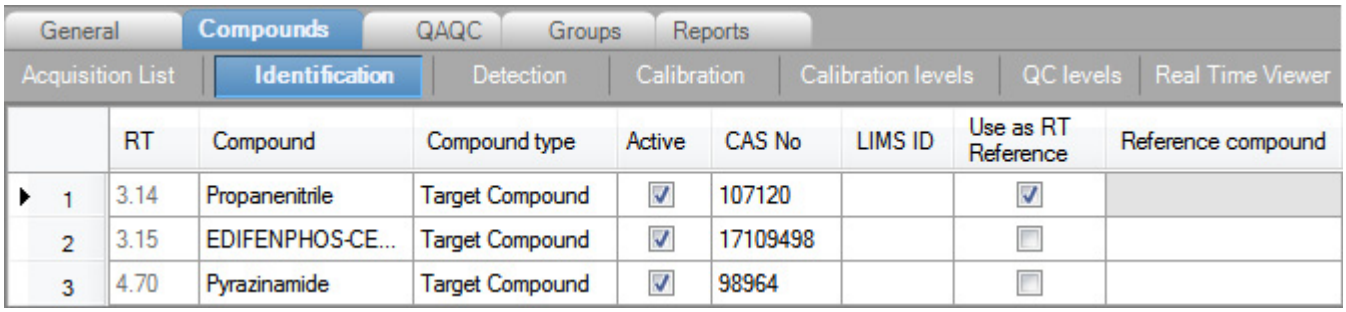


表 24. Identification 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。 TraceFinder 应用程序使用 RT 和 Window 值确定采集的开始和停止时间。 范围：0.00 至 999.00 开始时间 =RT-(Window/2) 停止时间 =RT-(Window/2) 开始和停止范围：0.00 至 999.00
Compound （化合物）	识别的化合物列表。要自定义化合物名称，在单元中单击然后键入新名称。若要显示化合物的过滤列表，使用 Show 列表。
Compound Type （化合物类型）	化合物类型为 Target Compound 和 Internal Standard。 TraceFinder 应用程序在定量分析中采用目标化合物和内标物。
Active （活动）	识别要包括在数据查看和报告中的每一个化合物。根据默认，所有添加的化合物会设置为启用。激活或非激活设置位于 Analysis （分析）模式的 Batch View （批次视图）和 Data Review （数据查看）视图。
CAS No （CAS 号）	TraceFinder 应用程序使用化学文摘社 （CAS）登记号匹配每一个化合物。若要更改或添加登记号，点击 CAS 号单元格后输入新登记号。
Use as RT Reference （用作保留时间参考）	当根据保留时间标准执行峰检测时， TraceFinder 应用程序首先识别被标记为保留时间标准的那些化合物，并且使用其被观察的保留时间来调整任何相关的目标化合物。
Reference Compound （参考化合物）	参比化合物用于调整化合物保留时间。该列表包括在 Use as RT Reference 列中选取的所有化合物。
快捷菜单	Identification 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 167 页的 “ 使用快捷菜单命令 ”。

Detection

Detection 页面用于自定义定义峰和化合物的任何离子的峰检测及积分。

从 Detection 页面，可以访问下列页面：

Times	也参阅第 135 页的 “Times 页面参数 ”。
Signal	也参阅第 141 页的 “Signal 页面参数 ”。
Detect	也参阅第 144 页的 “Genesis 的 Detect 页面参数 ”。 也参阅第 147 页的 “ICIS 的 Detect 页面参数 ”。 也参阅第 150 页的 “Avalon 的 Detect 页面参数 ”。
Spectrum	也参阅第 156 页的 “Spectrum 快捷菜单命令 ”。
Ratios	也参阅第 158 页的 “Ratios 页面参数 ”。

在 Detection 页面中 （参阅第 132 页的 “Detection 页面 ”），可以配置如何检测和积分目标化合物的特征离子。也可以编辑指定化合物的特性离子。细调主方法中每一个化合物的这些参数，可减少其离子要求手动积分的程度。

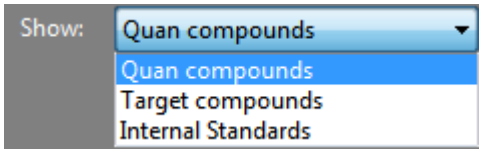
可以更改用于识别定量峰、质量数范围或确认离子峰的参数。 TraceFinder 应用程序自动将首个匹配的化合物作为化合物名称，将质谱图的基峰作为定量峰，将第二和第三大离子作为确认离子峰。

按照如下步骤进行操作：

- 若要过滤显示的化合物
- 若要更改已检测峰的显示信息
- 若要添加化合物到方法
- 若要更改化合物参考质谱图
- 若要替换定量质量数
- 若要将质量数添加到已有定量质量数范围中
- 若要添加定量峰
- 若要添加质量数为新建化合物
- 若要利用确认离子峰替换定量峰
- 若要将确认离子峰设置为额外的定量峰
- 若要对确认离子峰使用剪切粘贴功能
- 若要将谱图添加至实时查看器
- 若要替换确认离子峰
- 若要添加质量数为新确认离子峰
- 若要保存新方法

❖ 若要过滤显示的化合物

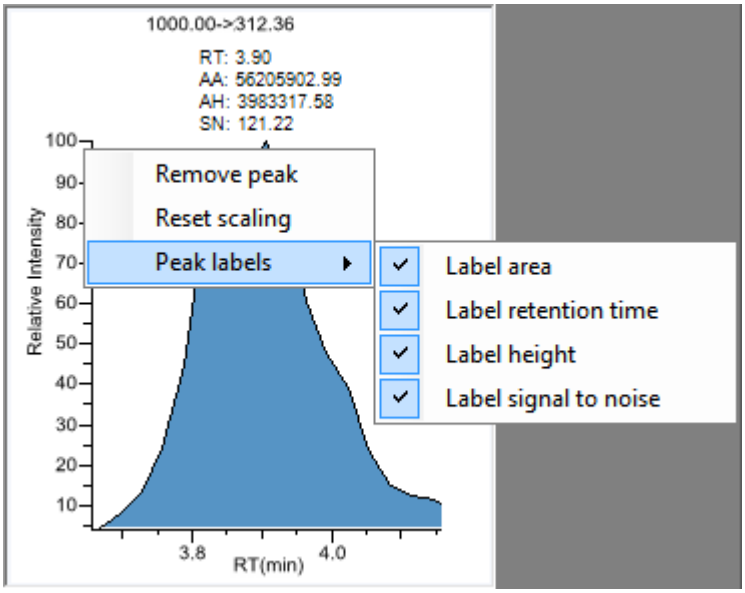
从 Show （显示）列表中，选择要在化合物列表中显示的化合物的类型。



化合物类型	描述
Quan Compounds （定量化合物）	仅显示定量化合物，例如目标化合物、内标化合物和替代物。
Target Compounds （目标化合物）	仅显示目标化合物。
Internal Standards （内标）	仅显示内标化合物。

❖ 若要更改已检测峰的显示信息

1. 右击色谱图，然后将光标停留在 **Peak Labels （峰标签）**上方。
2. 选择显示峰保留时间、峰高、峰面积或信噪比的标签。



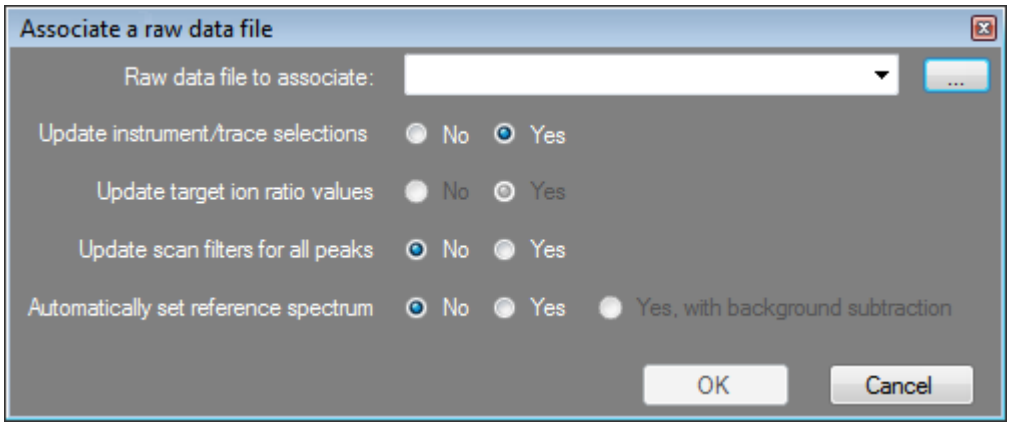
3. 若要删除标签，再次选择标签类型并将其清除。

应用程序一般对方法中的所有定量峰、确认峰和内标峰应用这些标签设置。

❖ **若要添加化合物到方法**

1. 从主菜单选择 **Master Method （主方法） > Associate a Raw Data File （关联原始数据文件）**。

   Associate a Raw Data File 对话框打开。



2. 浏览到与方法相关的原始数据文件 （或从之前相关的原始数据文件列表选择），打开文件。

   若要确保这个原始数据文件总是适用于方法 （例如，如果将方法移动到另一个系统），应用程序在方法文件夹中保存原始数据文件：

   C:\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods

3. 若要在关联该原始数据文件时更新目标离子比率值，选中 **Yes** 选项。
4. 若要在关联该原始数据文件时更新扫描过滤器，选中 **Yes** 选项。
5. 若要设置参考谱图，执行下列操作之一：

   选中 **Yes** 选项。

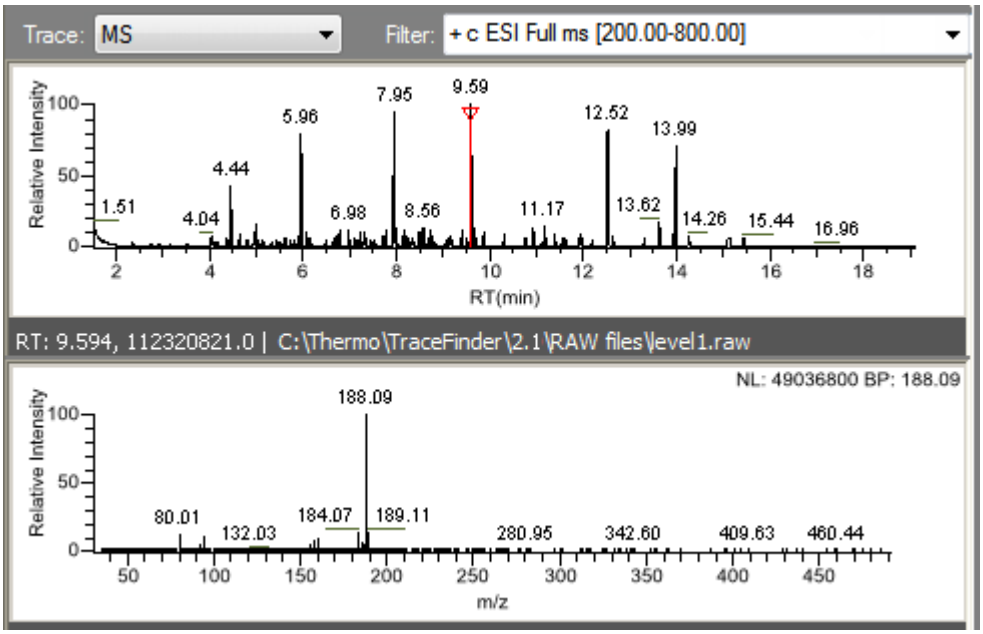
   – 或 –

   选中 **Yes, with Background Subtraction （是，使用背景扣除）**选项。

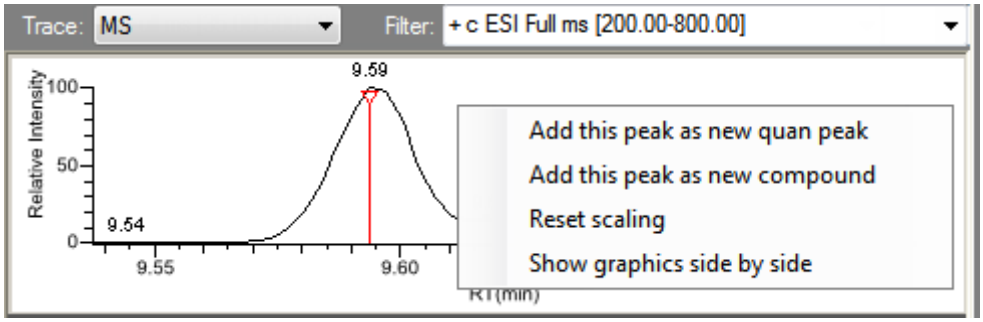
   仅当在 Master Method View 的 General 页面上设置背景扣除值时，该特性才可用。参阅第 108 页的 “ 编辑 General 页面 ”。

6. 点击 **OK**。

   TraceFinder 应用程序会显示所选的原始数据文件中化合物的色谱和质谱数据。



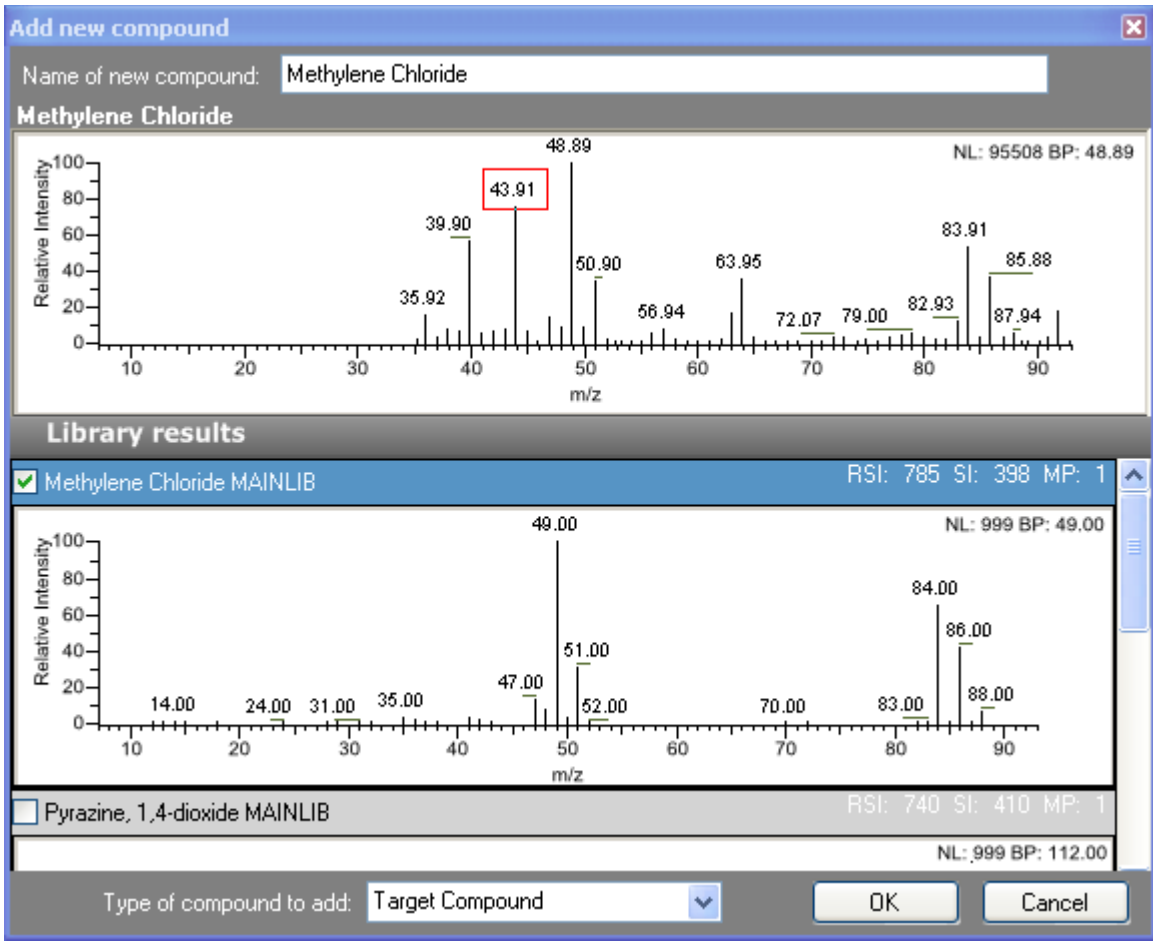
7. 从 Filter 列表中选择一个过滤器。
8. 点击以选中在代表要添加至方法的化合物的色谱图内的峰。
9. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Peak as New Compound**。



   TraceFinder 应用程序为所选化合物进行库检索。应用程序将首个匹配的化合物作为化合物名称，将质谱图的基峰作为定量峰，将第二和第三大的离子作为确认离子峰。

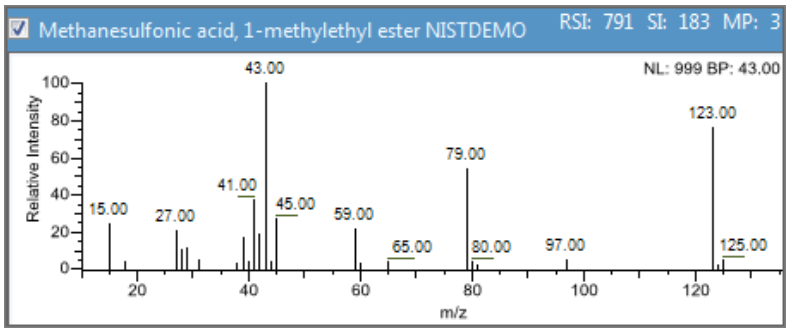
   如果库中已有首个匹配的化合物名称，则 Add New Compound 对话框打开。

图 25. Add New Compound 对话框



10. （可选）若要使用除库中已有化合物以外的化合物，滚动至该化合物的质谱图并在质谱图窗格的标题栏中选择该化合物名称。

选择化合物



11. 在 Type of Compound to Add 列表中选择一个化合物类型。
12. 点击 **OK**。
13. 为要添加到方法中的每个化合物重复这些步骤。

❖ 若要更改化合物参考质谱图

1. 在原始数据文件色谱图窗格中点击一个峰。

   TraceFinder 应用程序在质谱图窗格中显示所选峰的质谱图。

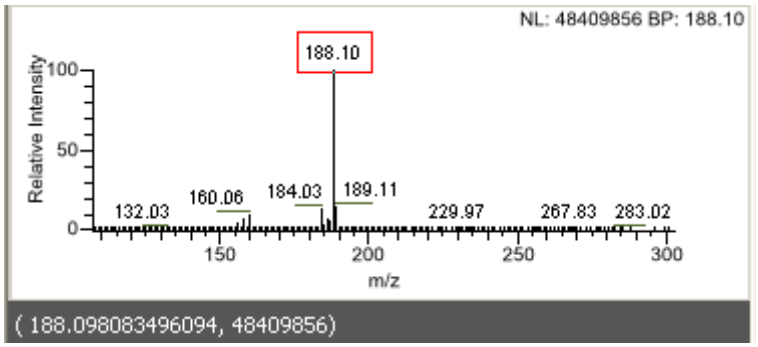
2. 在原始数据文件质谱图窗格中，右击然后从快捷菜单中选择 **Use This Spectrum for Compound Reference Spectrum （将该质谱图用作为化合物参考质谱图）**。

   TraceFinder 应用程序将定量峰窗格中 Spectrum （质谱图）页面上的质谱图替换为该质谱图。

❖ 若要替换定量质量数

1. 点击希望替换的定量质量数的窗格。
2. 在原始数据文件质谱图窗格中，在峰上方处按住光标。

   红色框代表选中的峰。



3. 右击并从快捷菜单选择 **Set This Mass as Quan Mass （设置该质量数为定量质量数）**。
4. 选择 **Don't Update Ion Ratios （不更新离子比率）**或 **Update Ion Ratios Using This Spectrum （利用该质谱图更新离子比率）**。

   可以在确认离子峰的 Ratios （比率）页面看到更新的离子比率。参阅第 157 页的 "Ratios"。

❖ 若要将质量数添加到已有定量质量数范围中

1. 在原始数据文件质谱图窗格中，在峰上方处按住光标。

   红色框代表选中的峰。

2. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Mass to Existing Quan Mass Ranges （将质量数添加到已有定量质量数范围）**。
3. 选择 **Don't Update Ion Ratios** 或 **Update Ion Ratios Using This Spectrum**。

   TraceFinder 应用程序将所选质量数添加到已有定量质量数范围中以增强信号。

   若已选择更新离子比率，则可以在确认离子的 Ratios 页面上看到已更新的离子比率。参阅第 157 页的 "Ratios"。

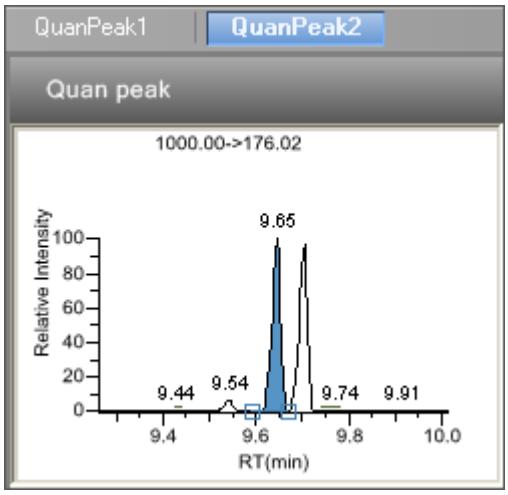
❖ 若要添加定量峰

1. 在原始数据文件质谱图窗格中，在峰上方处按住光标。

   红色框代表选中的峰。

2. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Mass as New Quan Peak （添加该质量数为新建定量峰）**。

   应用程序将新定量峰添加到化合物。



   可以使用该新建定量峰质谱图窗格中的快捷菜单来执行可以对原始定量峰操作的任务。

❖ 若要添加质量数为新建化合物

1. 在原始数据文件质谱图窗格中，在峰上方处按住光标。

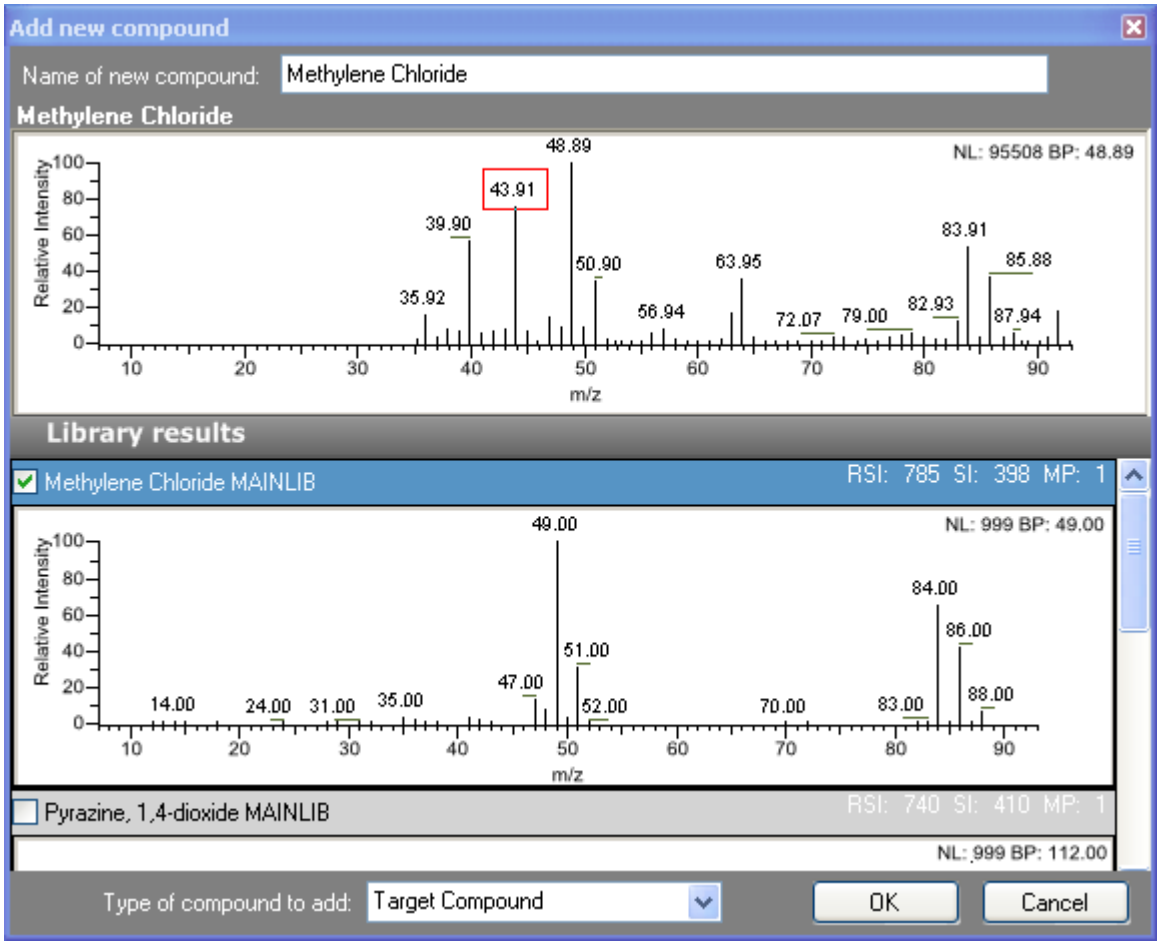
   红色框代表选中的峰。

2. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Peak as New Compound**。

   TraceFinder 应用程序为所选化合物进行库检索。应用程序将首个匹配的化合物作为化合物名称，将质谱图的基峰作为定量峰，将第二和第三大的离子作为确认离子峰。

   如果有多个匹配， Add New Compound 对话框打开。参阅第 128 页的 “Add New Compound 对话框 ”。如果库中已有首个匹配的化合物名称，则此对话框随所选的匹配化合物打开。

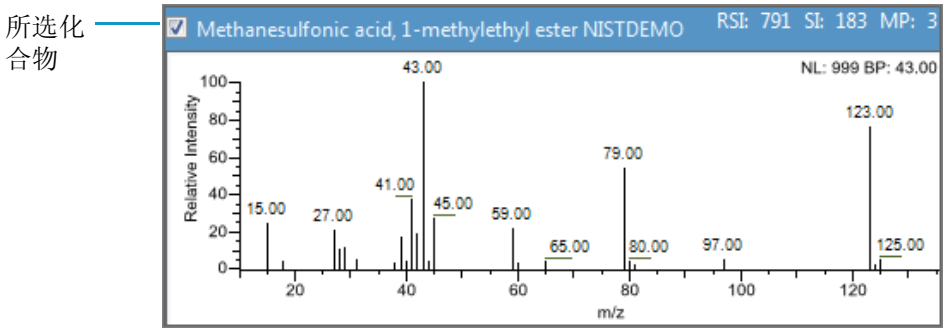
图 26. Add New Compound 对话框



3. （可选）作出下列修改之一：

   a. 更改 Name of New Compound （新建化合物名称）框中的化合物名称。

   b. 使用除由 TraceFinder 应用程序选择以外的化合物，滚动至该化合物的质谱图并在质谱图窗格的标题中选择该化合物名称。



   c. 在 Type of Compound to Add 列表中选择一个化合物类型。

4. 点击 **OK**。

❖ **若要利用确认离子峰替换定量峰**

1. 当具有多个定量峰时，选择想要替换的定量峰。
2. 右击准备用作定量峰的确认离子峰的标题栏，从快捷菜单选择 **Swap with Quan Peak（和定量峰交换）**。

   应用程序使定量峰和确认离子峰交换。应用程序利用确认离子的信息替换定量峰的所有信息。这包括确认离子从原始定量峰那里继承的预期保留时间。原始定量峰替换了确认离子峰。应用程序重新计算所有确认离子峰的比率。

❖ **若要将确认离子峰设置为额外的定量峰**

右击确认离子峰的标题栏并从快捷菜单选择 **Promote to Separate Quan Peak （成为单个定量峰）**。

应用程序利用确认离子峰的信息创建一个新定量峰。这包括确认离子峰从原始定量峰那里继承的预期保留时间。应用程序从方法中移除确认离子峰的所有参考值。

❖ **若要对确认离子峰使用剪切粘贴功能**

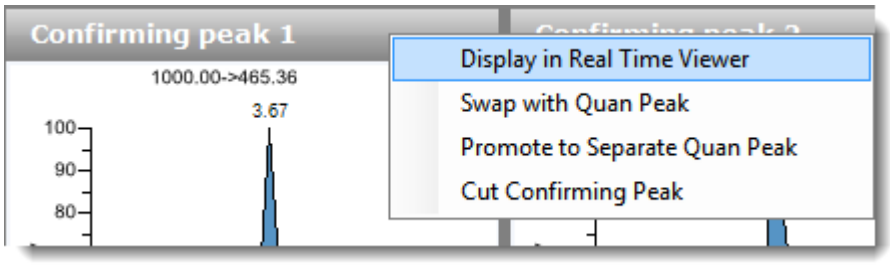
右击准备移除的确认离子峰的标题栏，从快捷菜单选择 **Cut Confirming Peak （剪切确认峰）**。

右击准备替换的确认离子峰的标题栏，从快捷菜单选择 **Paste Confirming Peak （粘贴确认峰）**。

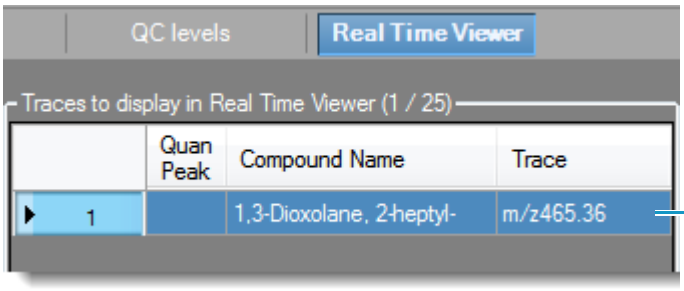
应用程序粘贴移除的确认离子峰。可以将一个已删除峰从它被移除的地方粘贴回定量峰，或者将已删除的确认离子峰粘贴到这个化合物的另一个定量峰。

❖ 若要将谱图添加至实时查看器

右击准备添加到实时查看器显示中的定量峰或者确认离子峰的标题栏，从快捷菜单选择 **Display in Real Time Viewer （在实时查看器中显示）**。

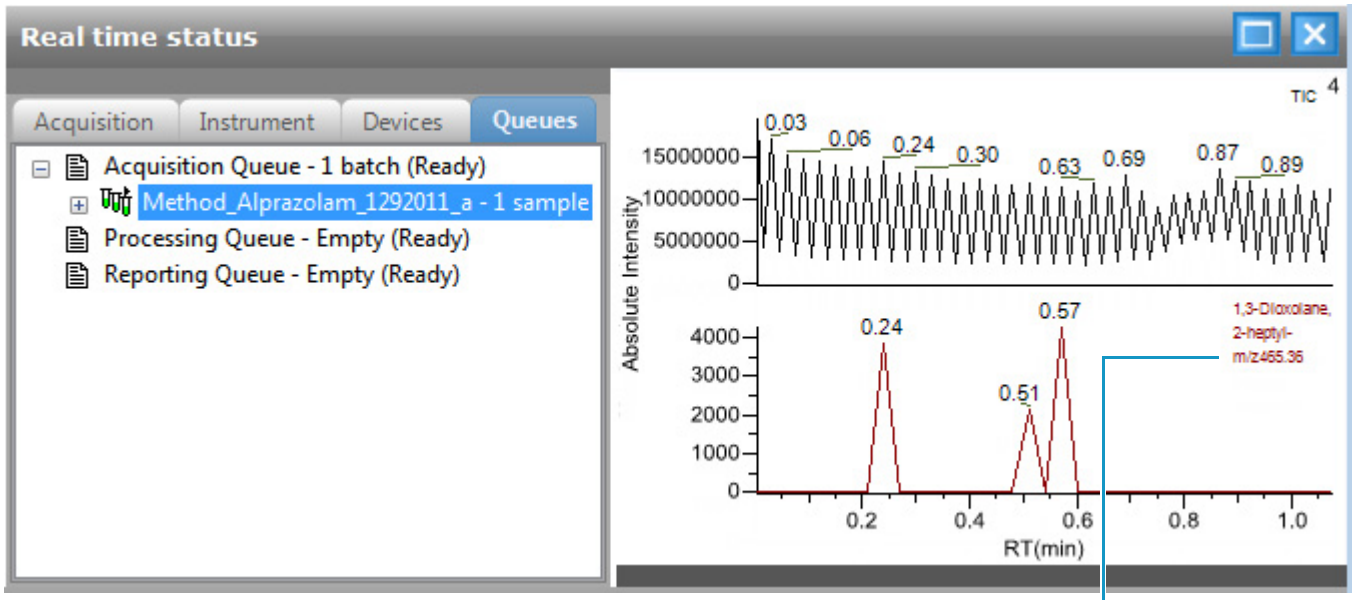


应用程序将峰移动到 Real Time Viewer 页面的 Traces to Display in Real Time Viewer （显示在实时查看器中的谱图）窗格内。参阅第 165 页的 “Real Time Viewer”。



谱图 *m/z* 465.36 添加到 Real Time Viewer

当利用这个方法采集样品时，应用程序在 Real Time Status （实时状态）窗格中显示 *m/z* 465.36 谱图以及总离子流图。



谱图 *m/z* 465.36 添加到 Real Time Status 显示中

❖ **若要替换确认离子峰**

1. 点击希望替换的确认离子峰的窗格。
2. 在原始数据文件质谱图窗格中，在峰上方处按住光标。

   红色框代表选中的峰。
3. 右击并从快捷菜单选择 **Set This Spectral Peak as Confirming （设置该质谱峰为确认峰）**。

   TraceFinder 应用程序以所选质量数替换确认离子峰。

❖ **若要添加质量数为新确认离子峰**

1. 在原始数据文件质谱图窗格中，在峰上方处按住光标。

   红色框代表选中的峰。
2. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Spectral Peak as New Confirming （添加该质谱峰作为新确认峰）**。

   TraceFinder 应用程序将确认离子添加至定量峰。

可以使用该新建确认离子峰的质谱图窗格中的快捷菜单来执行可以对原始确认离子峰操作的任务。

❖ **若要保存新方法**

1. 选择 **File > Save**。

   Save Master Method （保存主方法）对话框打开。
2. 执行下列操作之一：

   输入主方法的新名称，然后点击 **OK**。

   – 或 –

   选择要覆盖的方法名称，然后点击 **Overwrite**。

   TraceFinder 应用程序将新方法数据保存在下列文件夹中：

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods

图 27. Detection 页面

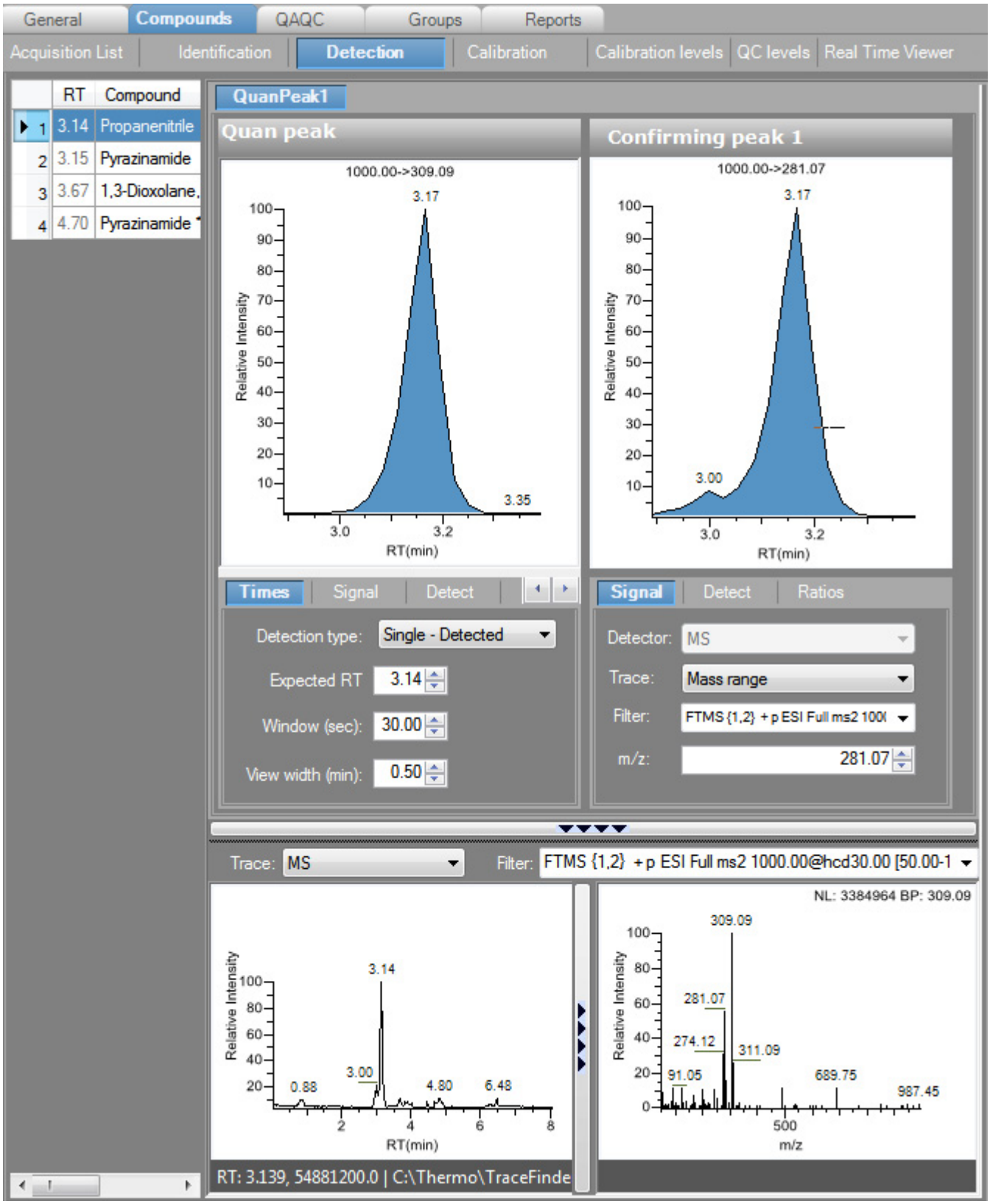


表 25. Detection 页面参数

窗格	描述
Compound （化合物）	列出主方法中的所有化合物。 Compound 列表使用右击出现的快捷菜单。 参阅第 167 页的 “ 使用快捷菜单命令 ”。
Quan Peak （定量峰）	显示定量峰的色谱图及其确认离子峰。定量峰及确认离子窗格包括保留时间、信号、检测、质谱图和比率参数的附加页面。
Trace （谱图）	显示用于原始数据文件的 Detector 和 Trace 值的组合。
Filter （过滤器）	显示用于原始数据文件的过滤器。
Reference Chromatogram and Spectra （参考色谱图和质谱图）	显示原始数据文件的参考色谱图和质谱图。 当查看模拟谱图时，没有质谱显示。若要关闭质谱窗格，并使用全宽模式显示色谱图，单击折叠图标， 。
附加页面	
Times （时间）	用于定量峰的保留时间和窗口。 参阅第 134 页的 “Times”。
Signal （信号）	定义用于显示每个色谱图的检测器和检测参数。参阅第 136 页的 “Signal”。
Detect （检测）	定义峰检测算法及其选项。 参阅第 142 页的 “Detect”。
Spectrum （质谱图）	定义用于定量峰或化合物的参考质谱。参阅第 151 页的 “Spectrum”。
Ratios （比率）	定义评估、确认或定性离子的标准。参阅第 157 页的 “Ratios”。

Times

使用 Times 页面定义定量峰的保留时间或保留时间范围。

图 28. Times 页面

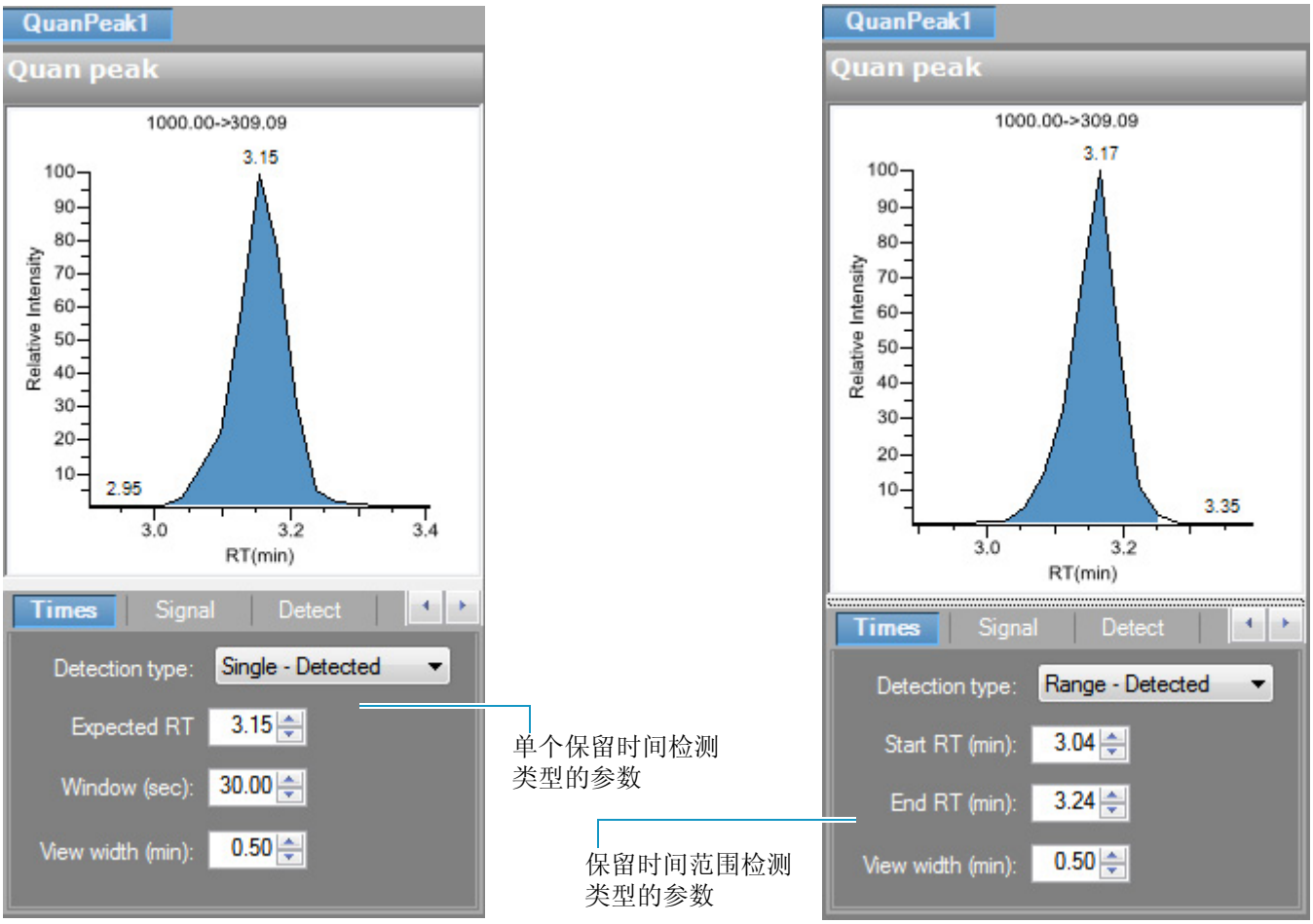


表 26. Times 页面参数

参数	描述
Detector Type（检测器类型）	**Single - Detected （单个 - 检测）：**（默认）指定为中心的保留时间窗口。应用程序积分一个清楚的峰。在报告中，应用程序将预期保留时间和实际保留时间值显示为 Method RT （方法保留时间）和 Detected RT （检测保留时间）。 **Range - Detected （范围 - 检测）：**指定为保留时间开始 / 结束范围。 **Range - Integrated （范围 - 积分）：**指定为保留时间开始 / 结束范围。应用程序积分指定时间范围内的所有峰。
Expected RT (min)（预期保留时间，分钟）	单个峰的预期保留时间。只适用于 Single - Detected 类型。
Window (sec)（窗口，秒）	窗口宽度 （以秒为单位）是系统将查看峰顶点的预期保留时间的距离长度。只适用于 Single - Detected 类型。
Start/End RT (min)（开始 / 结束保留时间，分钟）	包含多个峰的开始和结束保留时间窗口。适用于 Range - Detected 和 Range - Integrated 类型。当从 Single - Detected 类型修改时，这些值默认是从 Expected RT （预期保留时间）和 Window 值计算的之前的开始和结束时间。
View Width (min)（视图宽度，分钟）	显示离子色谱图的可视大小。更改查看宽度并不影响峰检测的处理； TraceFinder 应用程序只将其用于图形显示。当选择 Range - Detected 或者 Range - Integrated 检测类型时，无法选择小于保留时间范围的 View Width 值 （*结束时间*减去*起始时间*）。
快捷菜单	
Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound （对化合物所有峰应用峰窗口设置）	将 View Width 和 Window 值复制到化合物的所有定量峰，并更新这个化合物。 仅当化合物具有多个定量峰时可用。
Set Peak Windows Settings to All Peaks in Method （对方法中所有峰应用峰窗口设置）	将 View Width 和 Window 值复制到方法的所有定量峰，并更新这个方法。

Signal

使用 Signal 页面 （参阅第 140 页的 “Signal 页面 ”）来定义显示每个色谱图时的检测器和过滤器参数。有关 Signal 页面上所有功能的详细说明，参阅第 141 页的 “Signal 页面参数 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要指定用于检测和积分的离子范围
- 若要指定 XIC 过滤器
- 若要指定 MS 过滤器

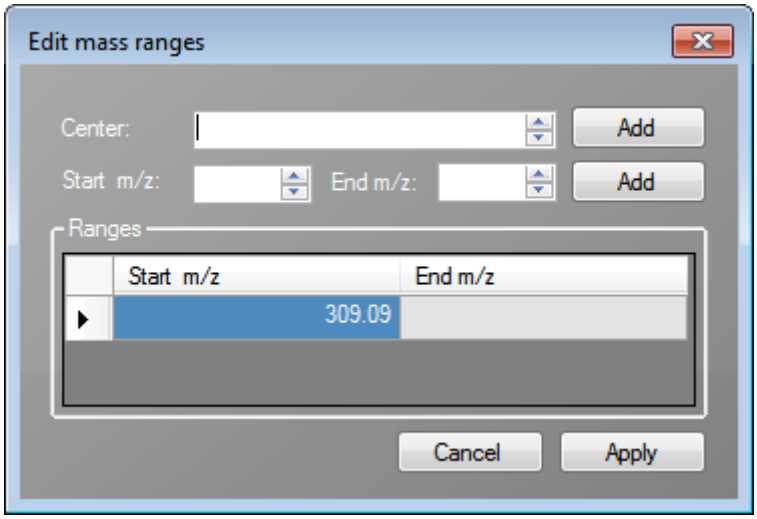
❖ 若要指定用于检测和积分的离子范围

1. 在 Detector 列表中选择 **MS （质谱仪）**。
2. 从 Trace 列表选择 **Mass Range （质量数范围）**。
3. 在 Ranges （范围）页面，点击 **Edit**。

   注释 仅当将 Detector 参数设置为 MS， Trace 参数设置为 Mass Range 时， Ranges 区域可用。

   Edit Mass Ranges （编辑质量数范围）对话框打开，在此可以在行中输入中心质量数或范围。

   图 29. Edit Mass Ranges 对话框



4. 在 Center Mass （中心质量数）框中输入一个值，然后点击 **Add （添加）**。

   带有新值的一个新行出现在 Ranges 下面。在 Start *m/z* （起始质荷比）列中列出中心质量数值。应用程序采用中心质量数为该值的范围。

5. 在 Start *m/z* 和 End *m/z* （结束质荷比）列中输入值，然后点击 **Add**。

   应用程序添加包含这些起始和结束数值的行。

6. 可以添加所希望数量的范围。

   当以该方法处理批次时，应用程序合计由这些范围指定的多个离子。

7. 点击 **Apply**。

   应用程序对该范围列表应用参数。

❖ 若要指定 XIC 过滤器

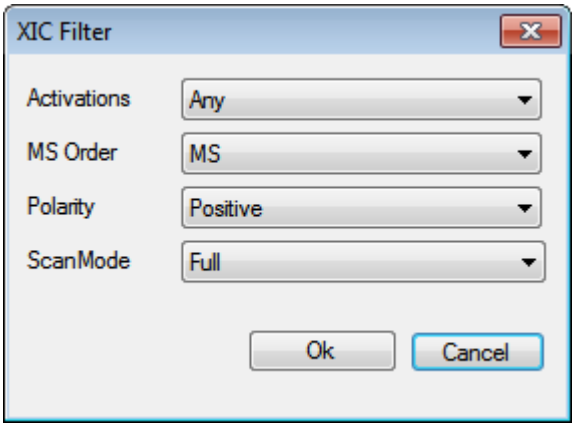
1. 在 Detector 列表中选择 **MS**。
2. 从 Trace 列表选择 **Mass Range**。
3. 选择 **XIC** 选项。

   注释 仅当将 Detector 参数设置为 MS，Trace 参数设置为 Mass Range 时，XIC 选项可用。

4. 单击 Filter 的浏览按钮。

   XIC Filter （XIC 过滤器）对话框显示。

   图 30. XIC Filter 对话框



5. 选择一个 Activation （激活）类型：

CID	碰撞诱导解离
MPD	多光子解离
ECD	电子捕获解离
PQD	脉冲解离
ETD	电子转移解离
HCD	更高能量碰撞诱导解离
Any	允许任何激活方法。
SAactivation	
PTRactivation	
NETDactivation	负电子转移解离激活
NPTRactivation	

6. 选择一个 MS Order （质谱级数）：

Any	允许任何质谱级数。
MS	一级质谱
MS2-MS10	多级质谱
Ng	毫微克
N1	纳升
Par	

7. 选择一个极性值。

   有效值：**Positive （正极）**、 **Negative （负极）**或 **Any （任意）**。

8. 选择 Scan Mode （扫描模式）：

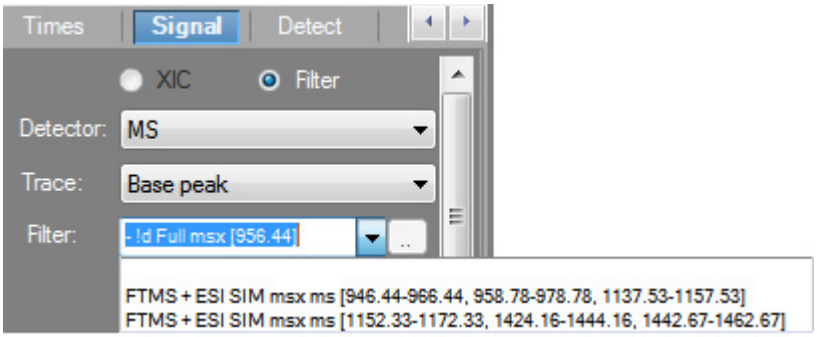
Full （全扫描）	
Zoom （缩放）	
SIM	选择离子监测
SRM	选择反应监测
CRM	连续反应监测
Any	允许任何扫描模式。
Q1MS	使用四极杆 1 的质谱
Q3MS	使用四极杆 3 的质谱

9. 点击 **OK**。

   应用程序利用指定的 XIC 过滤器选项更新色谱数据。

❖ 若要指定 MS 过滤器

1. 选中 **Filter** 选项。
2. 在 Detector 列表中选择 **MS**。
3. 从 Trace 列表中选择 Trace 类型。
4. 从 Filter 列表中选择一个过滤器。



应用程序对定量或确认离子峰应用所选过滤器。

5. 若要将相同的过滤器应用到其他峰，右击并从快捷菜单选择下列之一：
   - **Set This Filter on All Peaks in This Compound （对化合物所有峰设置该过滤器）**：对化合物内所有其他峰应用这个过滤器。
   - **Set This Filter on All Compounds （对所有化合物设置该过滤器）**：对方法内所有峰应用这个过滤器。

图 31. Signal 页面

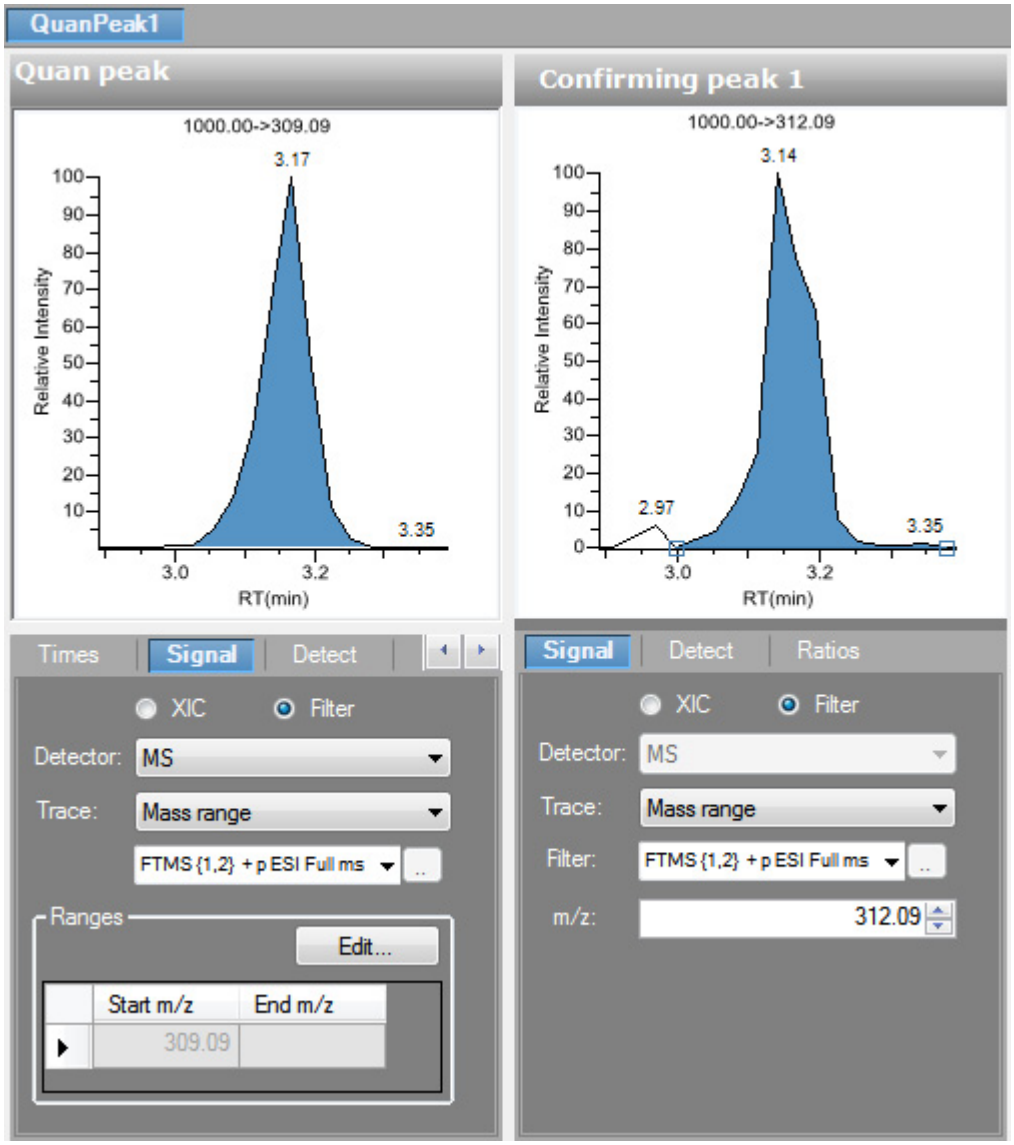


表 27. Signal 页面参数

参数	描述
XIC	指定提取离子色谱实验类型，它利用单个全扫描质量过滤器进行后处理，提取某个目标离子峰。
Filter（过滤器）	从质量过滤器列表选择用于处理化合物的过滤器。
Detector（检测器）	由用于创建方法的检测选项确定的选项。该方法可以使用标准选项 （所有列出选项）或者只有检测选项，用于采集相关的原始数据文件。 **MS （质谱仪）**：质谱仪电离样品分子，使离子根据质荷比 （*m/z*）分离。 **PDA （光电二极管阵列）**：光电二极管阵列检测器是一种集成电路芯片上的离散光电二极管的线性阵列。它位于光谱仪的像平面，允许同时检测一系列波长。 **Analog （模拟）**：辅助检测器 （例如 FID、 ECD）。当选择这个检测器时，任何显示 Qlon 值的报告显示该值为 **Analog**，而显示质谱图的任何报告将质谱图显示为 **Not Available （不可用）**。 **A/D card （A/D 卡）**：如果检测器不在数据系统控制之下，可以捕获模拟信号并使用接口盒 （例如， SS420X）将它转换为数字信号以保存在原始文件中。 **UV （紫外）**：配备了低体积流通池的紫外分光光度计 （用于不同波长检测）或者光度计（用于单波长检测）。这种检测器检测在选定波长下吸收光的分析物。
Trace（谱图）	代表特定的数据范围。 TraceFinder 应用程序利用谱图鉴定化合物的特征离子。 质谱检测器选项：Mass Range、 TIC （总离子流图）或 Base Peak （基峰）。 PDA 检测器选项：Spectrum Maximum （质谱最高峰）、 Wavelength Range （波长范围）或 Total Scan （全扫描）。 Analog 检测器选项：Analog 1、 Analog 2、 Analog 3 或者 Analog 4。可以在仪器配置中配置这些通道名称。 A/D Card 检测器选项：AD Card ch1、 AD Card ch2、 AD Card ch3 或者 AD Card ch4。可以在仪器配置中配置这些通道名称。 UV 检测器选项：通道 A、通道 B、通道 C 或者通道 D。可以在仪器配置中配置这些通道名称。
Filter（过滤器）	仅当选择 MS 检测器时可用。代表特定的数据采集通道。 例如，过滤器选项 *+ c Full ms [35.00-500.00]* 代表正离子棒状图信号是在 *m/z* 35 至 500 的单级全扫描模式中采集的。
Ranges（范围）	仅当选择 Mass Range 谱图时可用。
Edit（编辑）	打开 Edit Mass Ranges 对话框，在此可以指定用于检测和积分的离子范围。参阅第 136 页的 “Edit Mass Ranges 对话框 ”。
Start *m/z*（*起始质荷比*） End *m/z*（*结束质荷比*）	指定用于检测和积分的离子范围。应用程序合计由这些范围指定的多个离子。 由中心质量数值指定的范围以单数值的形式列在 Start *m/z* 列中。应用程序采用中心质量数作为该值的范围。

Detect

Detect 页用于定义峰检测算法 （灵敏度）和其选项以及确定曲线下的面积。灵敏度模式有三种：Genesis、ICIS 和 Avalon。在此页，可以选择每一个模式的运行方式。

有关 Detect 页面上所有特性的详细说明，参阅下列说明：

- 对于 Genesis 灵敏度，参阅第 144 页的 “Genesis 的 Detect 页面参数 ”。
- 对于 ICIS 灵敏度，参阅第 147 页的 “ICIS 的 Detect 页面参数 ”。
- 对于 Avalon 灵敏度，参阅第 150 页的 “Avalon 的 Detect 页面参数 ”。

图 32. Genesis 的 Detect 页面

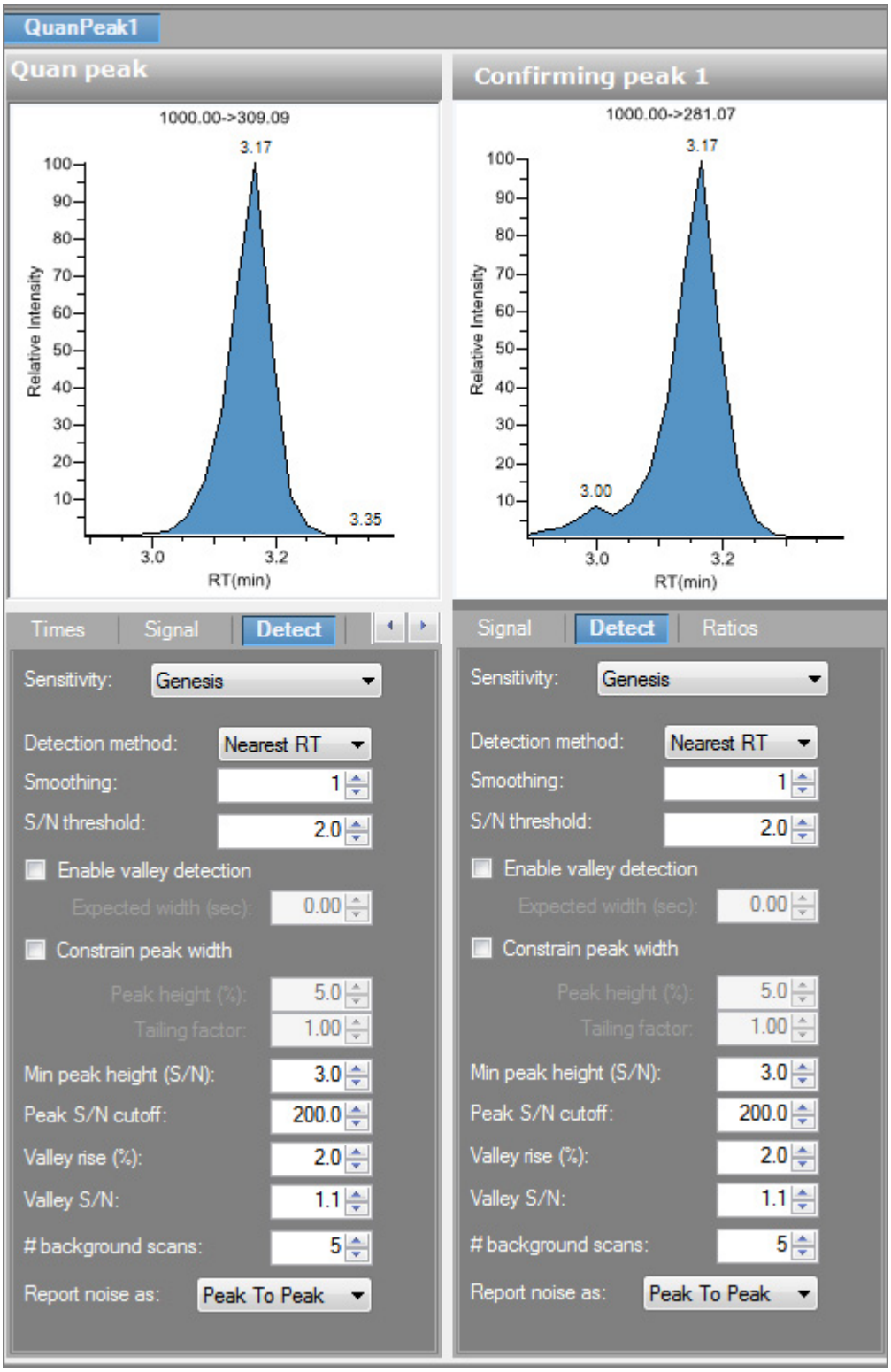


表 28. Genesis 的 Detect 页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Sensitivity （灵敏度）	指定 Genesis 峰检测算法。
Detection Method （检测方法）	Highest peak （最高峰）：利用色谱图中的最高峰进行化合物鉴定。 Nearest RT （最近保留时间）：使用色谱图中具有最近保留时间的峰进行化合物鉴定。
Smoothing （平滑）	在峰检测和积分前确定要在启用化合物峰执行的数据平滑水平。 默认：1 范围：从 1 到 15 点之间的任意奇数整数
S/N Threshold （信噪比阈值）	用于峰积分的当前信噪比阈值。信噪比值小于该值的峰将不会进行积分。信噪比值大于该值的峰将进行积分。 范围：0.0 至 999.0
Enable Valley Detection （启用峰谷检测）	使用谷值检测近似方法来检测未解析的峰。此方法从未解析峰之间的谷顶点到基线画一条垂直线。将垂直线和基线的交点定义为首个峰的结束点以及第二个峰的开始点。
Expected Width (sec) （预期宽度，秒）	预期的峰宽参数 （以秒计算）。如果已启用峰谷检测，它可控制峰预期的最小宽度。 启用谷值检测时，任何距离峰顶小于*预期峰宽*一半的谷点将被忽略。如果谷点处于预期峰宽之外， TraceFinder 应用程序将会在此点终止该峰。应用程序始终会在信号达到基线时终止峰，与预期的峰宽设置值无关。 范围：0.0 至 999.0
Constrain Peak Width （限定峰宽）	在色谱图峰积分时抑制化合物的峰宽。然后可以通过设置峰高阈值和拖尾因子值来控制峰积分何时开关。选择 Constrain Peak Width 复选框会启用 Peak Height(%) （峰高， %）和 Tailing Factor （拖尾因子）选项。
Peak Height(%) （峰高， %）	在打开或关闭积分前，信号必须高于总峰高 (100%) 的基线百分比。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.0 至 100.0%
Tailing Factor （拖尾因子）	控制 TraceFinder 应用程序如何进行峰拖尾积分的因子。此因子是一个限制峰的拖尾缘对前延缘的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时， 该文本框才激活。 范围：0.5 至 9.0
Min Peak Height (S/N) （最小峰高，信噪比）	若要谷值检测近似方法使用最近 RT 峰识别标准，必须大于或等于此峰信噪比值。对于化合物识别目的， TraceFinder 应用程序会忽略信噪比值小于 S/N 阈值的所有色谱图峰。 范围：0.0 （所有峰）到 999.0
Peak S/N Cutoff （峰信噪比截止值）	峰缘的设置值低于此信噪比。 此测试识别在基线调整缘高度少于基线调整顶点高度和峰 S/N 切断比率的比率时的峰缘。 当顶点的信噪比为 500，峰的信噪比截止值为 200，且某个峰的信噪比值小于 200 时，应用程序会定义此峰的左右边缘。 范围：50.0 到 10000.0

表 28. Genesis 的 Detect 页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Valley Rise (%) （峰谷上升， %）	峰离子流图可在通过最小值 （在峰之前或之后）后上升至高于基线的百分比。 此方法从未解析峰之间的谷顶点到基线画一条垂直线。将垂直线和基线的交点定义为首个峰的结束点以及第二个峰的开始点。 当离子流图超过上升百分比时， TraceFinder 应用程序应用谷检测峰积分标准。 TraceFinder 应用程序将此测试应用至峰的左右缘。 上升百分比标准对于具有长尾的积分峰特别有用。 范围：0.1 至 500.0
Valley S/N （峰谷信噪比）	指定评估谷底的值。使用此参数确保周围的测量更高。 默认：2.0 范围：1.0 至 100.0
# Background Scans （背景扫描数）	TraceFinder 应用程序执行的背景扫描的数量。
Report Noise As （将噪声报告为）	确定是否使用 RMS 计算或峰对峰分辨率阈值计算 S/N 值中使用的噪声。选项有 RMS （均方根）和 Peak to Peak （峰对峰）。
快捷菜单	
Apply To All Peaks In Method （应用至方法中的所有峰）	以 Detect 页面上的当前设置更新方法中的所有化合物。对定量和确认离子应用这些更新。
Apply To All Peaks With Like Sensitivity Setting （应用至方法中具有相似灵敏度设置的所有峰）	应用程序以 Detect 页面上的当前设置更新在方法中采用 Genesis 灵敏度模式的所有化合物。对采用 Genesis 灵敏度模式的定量和确认离子都应用这些更新。
Apply To All Peaks In Compound	以 Detect 页面上的当前设置更新当前化合物中的所有峰。对定量和确认离子应用这些更新。

图 33. ICIS 的 Detect 页面

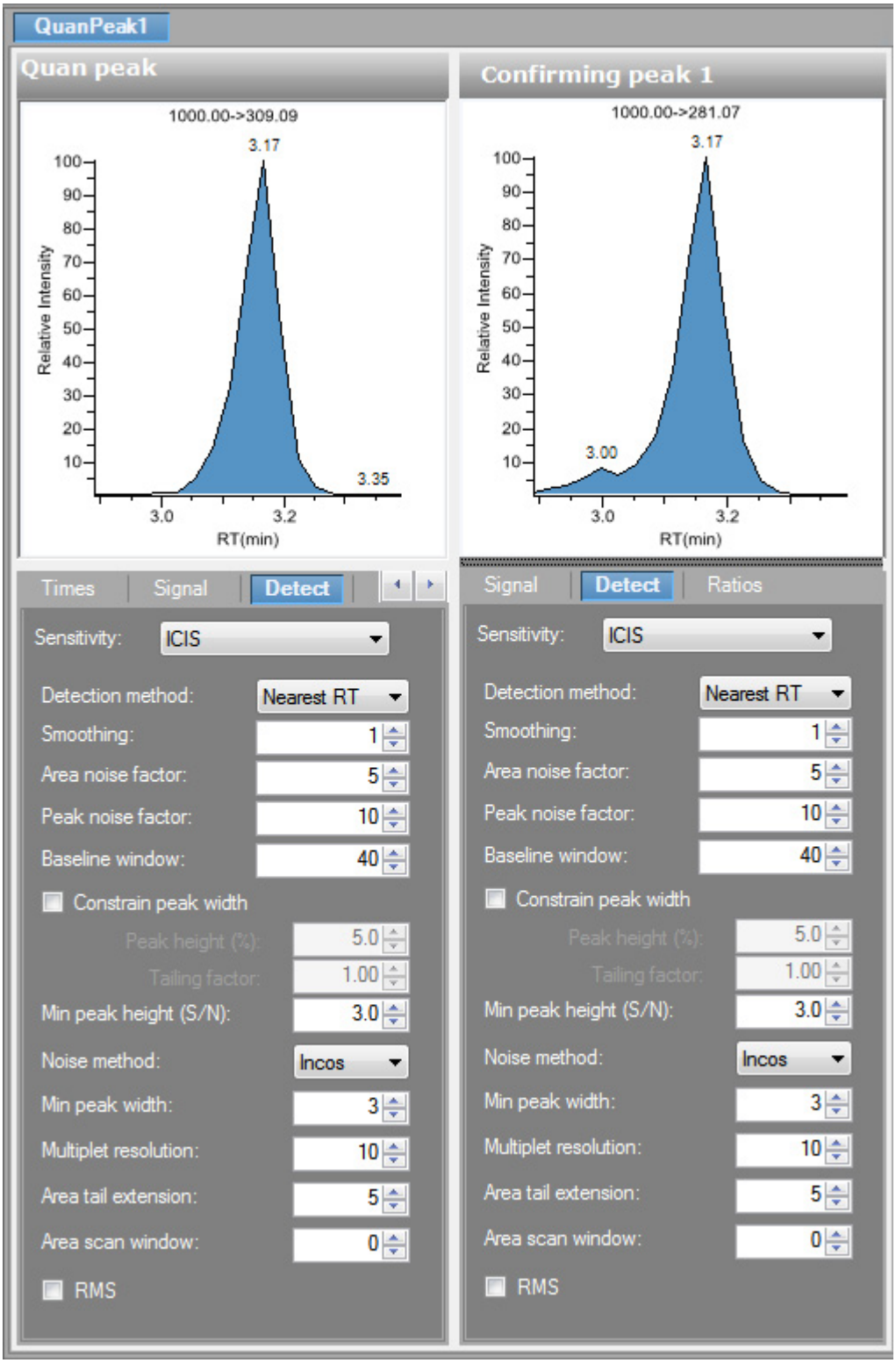


表 29. ICIS 的 Detect 页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Sensitivity （灵敏度）	指定 ICIS 峰检测算法。
Detection Method （检测方法）	Highest peak：利用色谱图中的最高峰进行化合物鉴定。 Nearest RT：使用色谱图中具有最近保留时间的峰进行化合物鉴定。
Smoothing （平滑）	在峰检测和积分前确定要在启用化合物峰执行的数据平滑水平。 默认：1 范围：从 1 到 15 点之间的任意奇数整数
Area Noise Factor （峰面积噪声因子）	用于确定峰缘在可能峰位置后的噪音水平乘数。 默认：5 范围：1 至 500
Peak Noise Factor （峰噪声因子）	噪音水平乘数用于确定潜在峰的信号阈值。 默认：10 范围：1 至 1000
Baseline Window （基线窗口）	TraceFinder 应用程序在此数里的扫描中查找局部最小值。 默认：40 范围：1 至 500
Constrain Peak Width （限定峰宽）	在色谱图峰积分时抑制化合物的峰宽。然后可以通过设置峰高阈值和拖尾因子值来控制峰积分何时开关。选择 Constrain Peak Width 复选框会启用 Peak Height(%) 和 Tailing Factor 选项。
Peak Height(%) （峰高， %）	在打开或关闭积分前，信号必须高于总峰高 （100%）的基线百分比。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.0 至 100.0%
Tailing Factor （拖尾因子）	控制 TraceFinder 应用程序如何进行峰拖尾积分的因子。此因子是一个限制峰的拖尾缘对前延缘的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width 复选框时，该文本框才激活。 范围：0.5 至 9.0
Min Peak Height (S/N) （最小峰高，信噪比）	若要谷值检测近似方法使用 Nearest RT 峰识别标准，必须大于或等于此峰信噪比值。对于化合物识别目的， TraceFinder 应用程序会忽略信噪比值小于 S/N 阈值的所有色谱图峰。 范围：0.0 （所有峰）到 999.0
Noise Method （噪声方法）	选项有 INCOS 或 Repetitive （重复性）。 INCOS: 利用单遍算法来确定噪声水平。 Repetitive: 利用多遍算法来确定噪声水平。一般而言，这种算法在分析噪声方面比 INCOS 噪声算法更准确，但分析所需时间更长。
Min Peak Width （最小峰宽）	在峰中要求的最小扫描数。 默认：3 范围：0 到 100 次扫描
Multiplet Resolution （多重分辨率）	在两个潜在峰的顶点之间最小的扫描分离。这是确定是否已分辨两个峰的标准。 默认：10 范围：1 到 500 次扫描

表 29. ICIS 的 Detect 页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Area Tail Extension （峰面积尾扩展）	扫描数目超过峰端点以便在均分强度中使用。 默认：5 范围：0 到 100 次扫描
Area Scan Window （峰面积扫描窗口）	峰顶点每一边的可扫描数。定义被包括在区域积分中所有扫描 （峰起点到峰终点）的零值。 默认：0 范围：0 到 100 次扫描
RMS （均方根）	指定 TraceFinder 应用程序计算 RMS 噪音。默认情况下，应用程序使用 Peak to Peak 进行噪声计算。如果手动确定噪声区域，将会自动选择 RMS。
快捷菜单	
Apply To All Peaks In Compound （应用至化合物中的所有峰）	以 Detect 页面上的当前设置更新当前化合物中的所有峰。对定量和确认离子应用这些更新。
Apply To All Peaks In Method （应用至方法中的所有峰）	以 Detect 页面上的当前设置更新方法中的所有化合物。对定量和确认离子应用这些更新。
Apply To All Peaks With Like Sensitivity Setting （应用至方法中具有相似灵敏度设置的所有峰）	应用程序以 Detect 页面上的当前设置更新在方法中采用 ICIS 灵敏度模式的所有化合物。对采用 ICIS 灵敏度模式的定量和确认离子都应用这些更新。

图 34. Avalon 的 Detect 页面

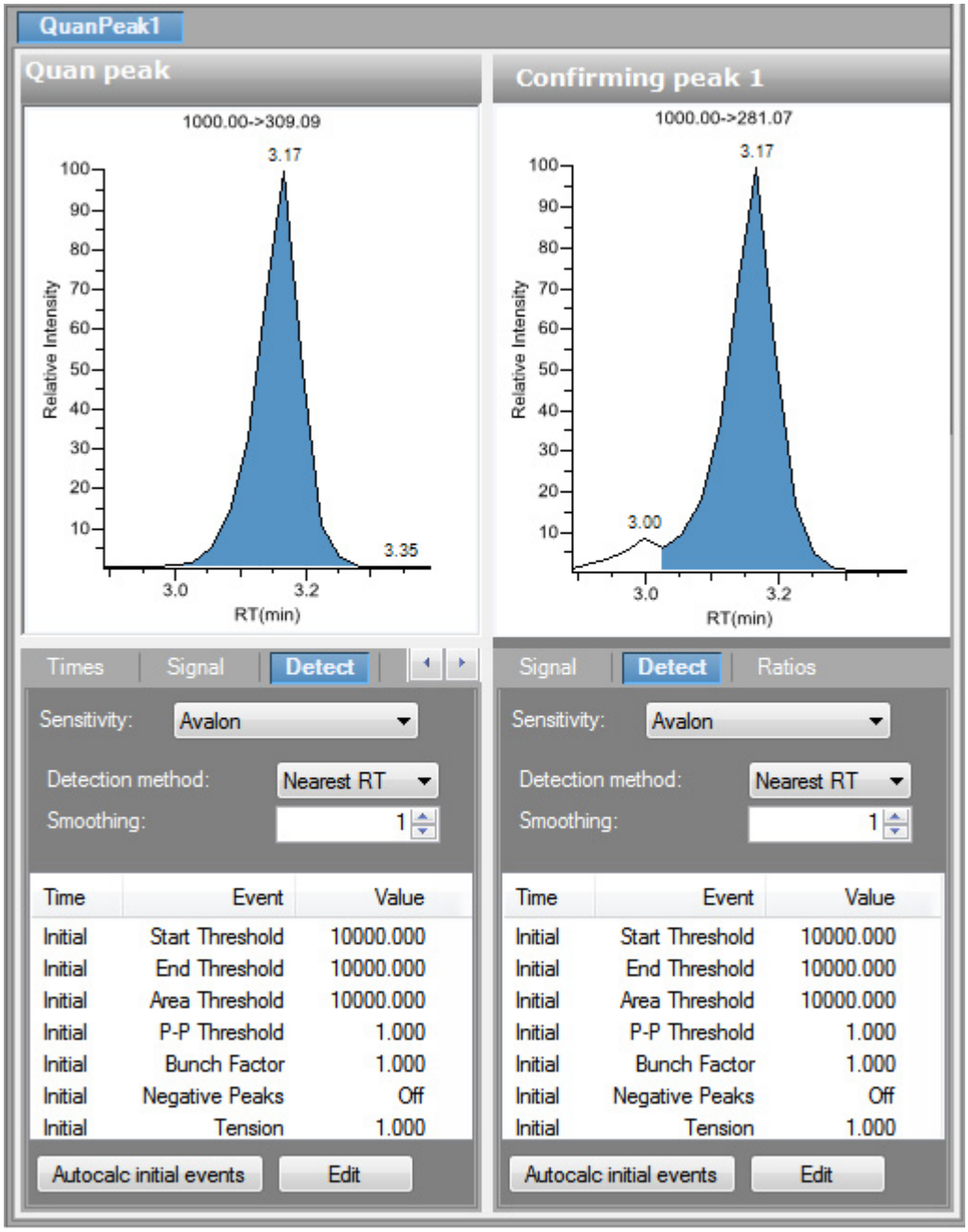


表 30. Avalon 的 Detect 页面参数

参数	描述
Sensitivity （灵敏度）	指定 Avalon 峰检测算法。
Detection Method （检测方法）	Highest Peak: 利用色谱图中的最高峰进行化合物鉴定。 Nearest RT：使用色谱图中具有最近保留时间的峰进行化合物鉴定。
Smoothing （平滑）	在峰检测和积分前确定要在启用化合物峰执行的数据平滑水平。 默认：1 范围：从 1 到 15 点之间的任意奇数整数
Autocalc Initial Events （自动计算初始事件）	自动计算 Event List （事件列表）中的事件。
Edit （编辑）	打开 Avalon Event List （Avalon 事件列表）对话框。参阅第 78 页的 “Avalon Event List”。
快捷菜单	
Apply To All Peaks In Compound （应用至化合物中的所有峰）	以 Detect 页面上的当前设置更新当前化合物中的所有峰。对定量和确认离子应用这些更新。
Apply To All Peaks In Method （应用至方法中的所有峰）	以 Detect 页面上的当前设置更新方法中的所有化合物。对定量和确认离子峰应用这些更新。
Apply To All Peaks With Like Sensitivity Setting （应用至方法中具有相似灵敏度设置的所有峰）	应用程序以 Detect 页面上的当前设置更新在方法中采用 Avalon 灵敏度模式的所有化合物。对采用 Avalon 灵敏度模式的定量和确认离子都应用这些更新。

Spectrum

利用 Spectrum 页面保存用于定量峰或化合物的参考质谱。

有关 Spectrum 页面上所有快捷菜单命令的详细说明，参阅第 156 页的 “Spectrum 快捷菜单命令 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要更新确认离子比率
- 若要更改定量峰所用的定量质量数
- 若要将离子信号叠加得到累积信号
- 若要将定量峰添加到现有的化合物
- 若要将一个或多个确认离子添加到已有化合物
- 若要放大色谱图或质谱图显示

❖ 若要更新确认离子比率

1. 点击定量峰色谱图窗格中的峰。

   该峰的质谱图显示在 Spectrum 窗格中。

2. 右击 Spectrum 窗格并从快捷菜单中选择 **Update Confirming Ion Ratios with This Spectrum （利用该质谱图更新确认离子比率）**。

❖ 若要更改定量峰所用的定量质量数

1. 单击色谱图窗口中的一个峰。

   该峰的质谱图显示在质谱图窗口中。

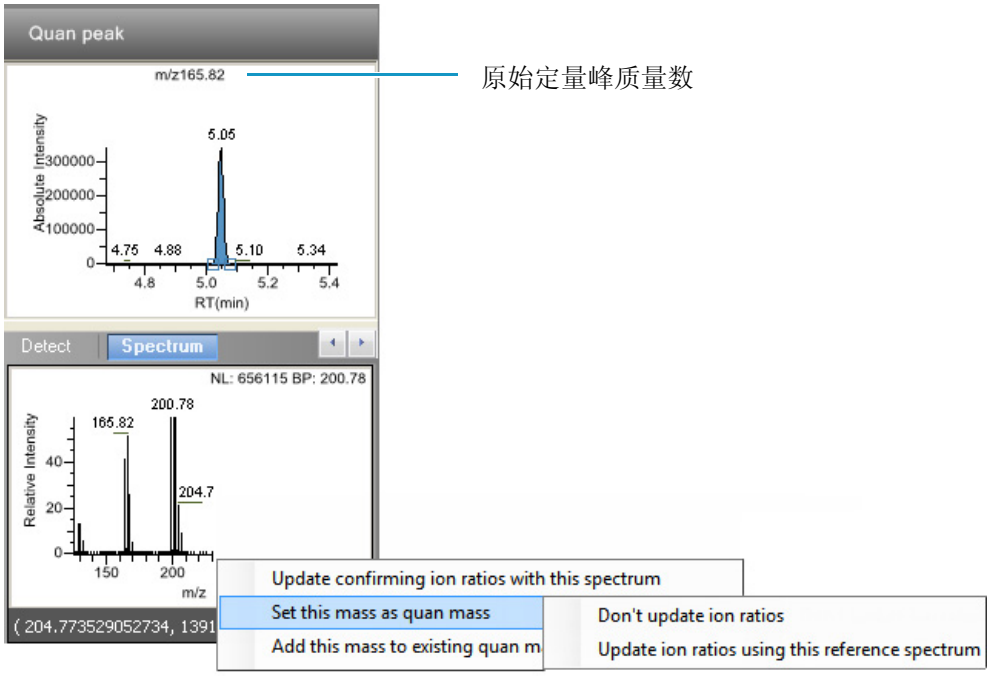
2. 在质谱图窗格中，在某个离子的 *m/z* 值上方按住光标。

   该离子的 *m/z* 值周围出现一个红色框，表示已选中该离子。

3. 右击并从快捷菜单中选择以下命令：
   - Set This Mass as Quan Mass > Don't Update Ion Ratios
   - Set This Mass as Quan Mass > Update Ion Ratios Using This Reference Spectrum

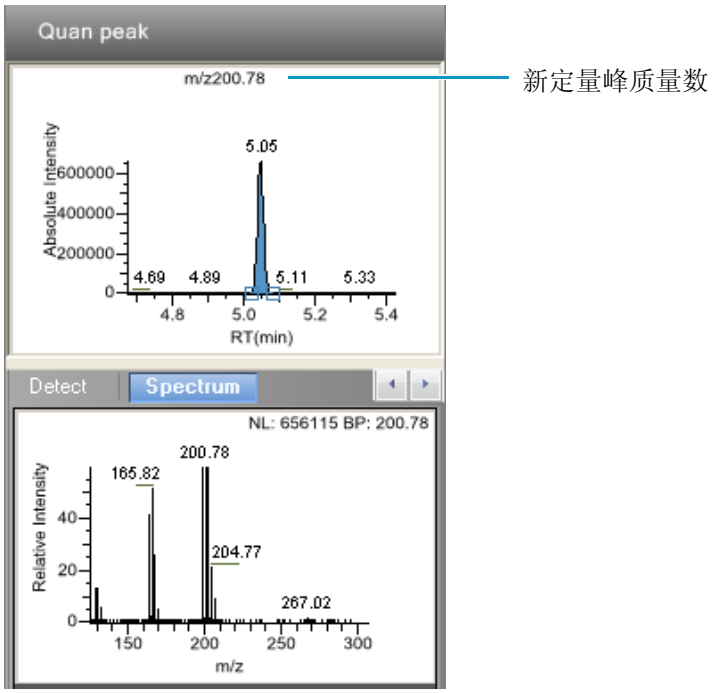
以下示例显示原始定量峰和包含更新的定量质量数的定量峰。

图 35. 原始定量峰质量数示例



TraceFinder 应用程序以所选质量数替换原始定量质量数。

图 36. 更新的定量峰示例



❖ 若要将离子信号叠加得到累积信号

1. 在 Spectrum 窗格中，在某个离子的 *m/z* 值上方按住光标。

   该离子的 *m/z* 值周围出现一个红色框，表示已选中该离子。

2. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Mass to Existing Quan Mass Range**。

   现在可以更新离子比率，以调整确认离子与新定量峰总信号的比较。

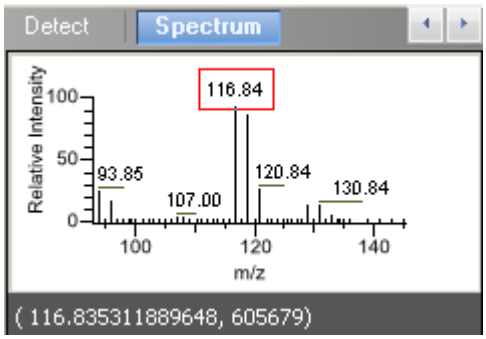
❖ 若要将定量峰添加到现有的化合物

1. 点击 Quan Peak Chromatogram （定量峰色谱图）窗格中的峰。

   该峰的质谱图显示在 Spectrum 窗格中。

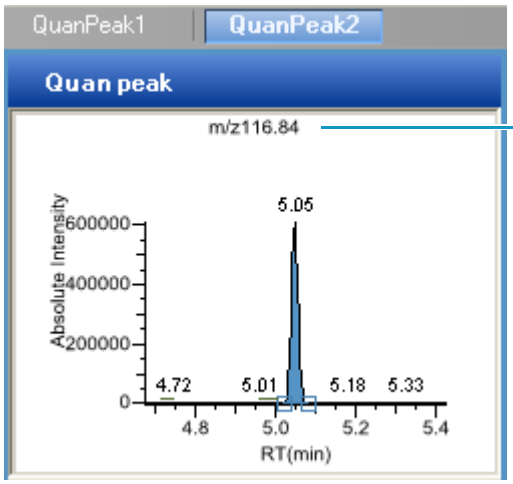
2. 在 Spectrum 窗格中，在某个离子的 *m/z* 值上方按住光标。

   该离子的 *m/z* 值周围出现一个红色框，表示已选中该离子。



3. 右击并从快捷菜单选择 **Set This Mass as New Quan Peak （设置该质量数为新定量峰）**。

   TraceFinder 应用程序添加该离子为新定量峰。



❖ 若要将一个或多个确认离子添加到已有化合物

1. 单击色谱图窗口中的峰。

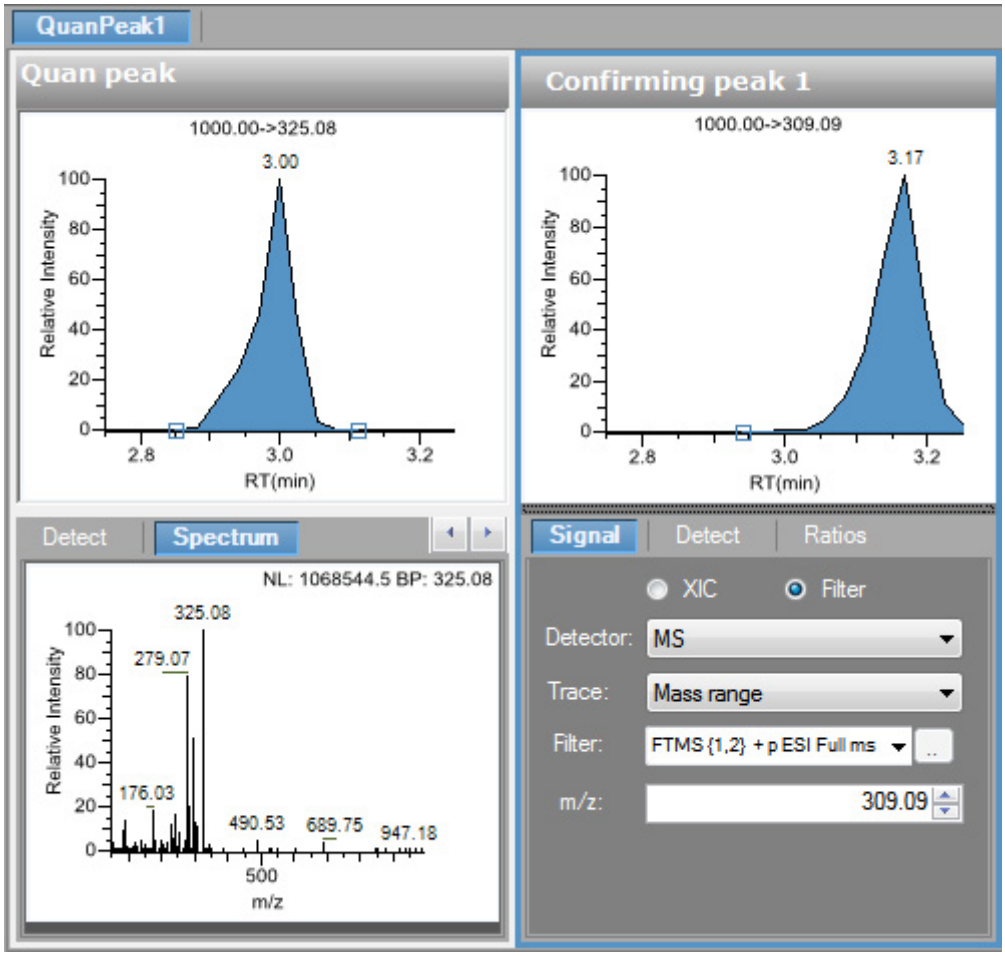
   该峰的质谱图显示在 Spectrum 窗格中。

2. 在 Spectrum 窗格中，在某个离子的 *m/z* 值上方按住光标。

   该离子的 *m/z* 值周围出现一个红色框，表示已选中该离子。

3. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Mass as New Confirming Ion （添加该质量数为新确认离子）**。

   TraceFinder 将所选质量数添加为该定量峰的确认峰。



❖ **若要放大色谱图或质谱图显示**

1. 拖曳光标形成一个矩形。

   显示画面放大到该指定的矩形大小。

2. 若要返回到原始显示，右击并从快捷菜单中选择 **Reset Scaling （重置缩放比例）**。

图 37. Spectrum 页面

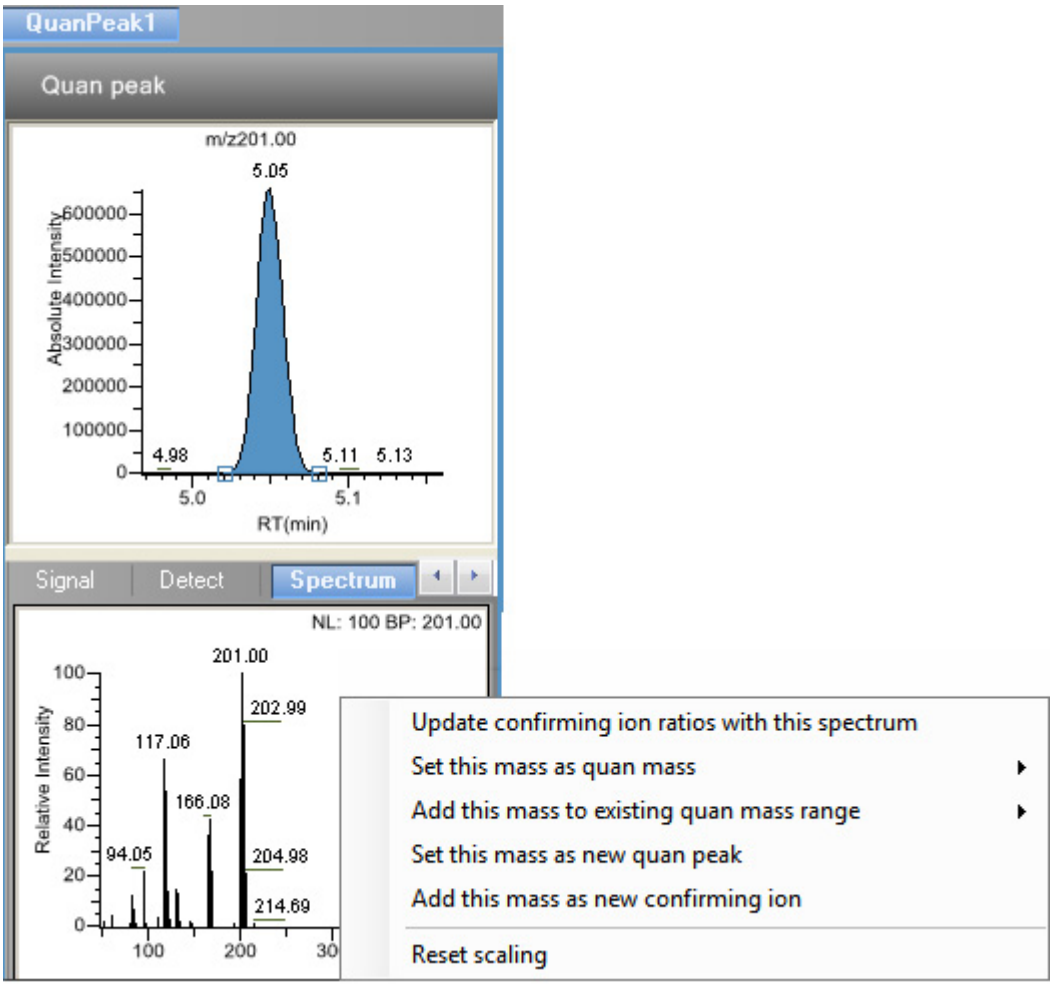


表 31. Spectrum 快捷菜单命令

命令	描述
Update Confirming Ion Ratios With This Spectrum （利用该质谱图更新确认离子比率）	使用所选峰更新确认离子比率。
Set This Mass as Quan Mass （设置该质量数为定量质量数）	将所选离子的定量质量添加到定量峰所用的定量质量。可以使用该参考质谱图选择更新或不更新离子比率。
Add This Mass to Existing Quan Mass Range （将质量数添加到已有定量质量数范围）	将所选质量数添加到现有定量质量数范围。现在可以选择更新离子比率，以调整确认离子与新定量峰总信号的比较。
Set This Mass as New Quan Peak （设置该质量数为新定量峰）	将新定量峰添加到现有的化合物。
Add This Mass as New Confirming Ion （添加该质量数为新确认离子）	将一个或多个确认离子添加到现有的化合物。
Reset Scaling （重置缩放比例）	将色谱图或质谱图画面恢复为原始大小。

Ratios

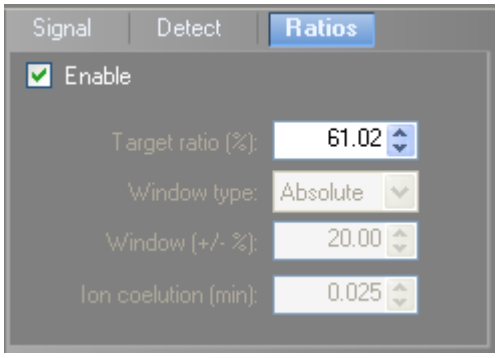
使用 Ratios 页面 （参阅第 158 页的 “Ratios 页面 ”）来定义用于评估确认离子或定性离子的标准。 TraceFinder 应用程序检测确认离子值超出其可接受窗口的化合物，并将其在 Acquisition （采集）模式和报告中标记出来。

有关 Ratios 页面上所有特性的详细说明，参阅第 158 页的 “Ratios 页面参数 ”。

❖ 若要指定离子比率标准

1. 选择 **Enable （启用）**复选框以启用确认离子。
2. 在 Target Ratio （目标比率）框中，选择确认离子的响应值与定量离子的响应值之间的理论比率。
3. 在 Window Type （窗口类型）框中，选择 **Absolute （绝对）**或 **Relative （相对）**作为用于确定可接受离子比率范围的计算方法。
4. 在 Window (+/–%) （窗口， +/–%）框中，选择可接受离子比率范围。
5. 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。

   在以下示例中



- 目标比率的预期值为 61.02%，窗口为 Absolute 20%，因此该确认离子的可接受窗口为 41.02% 到 81.02%。
- 如果窗口类型为 Relative，则加减值将为 61.02% 的 20% （即 12.20%），因此该确认离子的可接受窗口为 48.82% 到 73.22%。

图 38. Ratios 页面

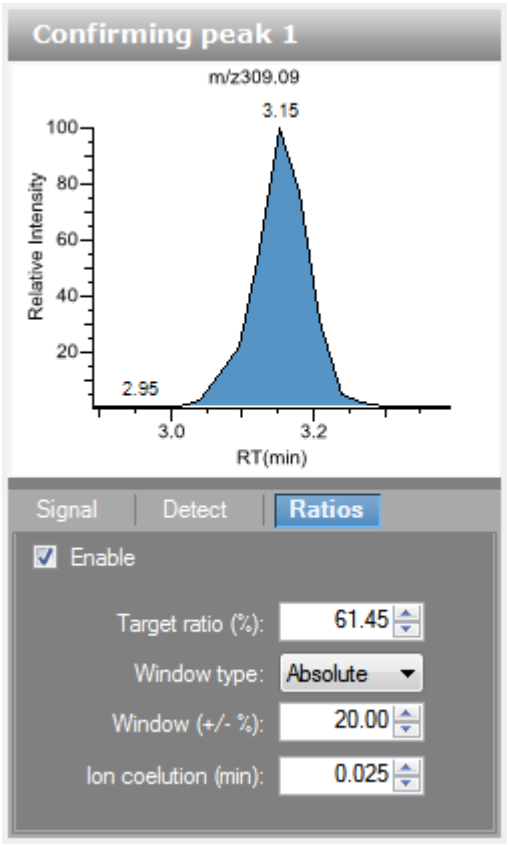


表 32. Ratios 页面参数

参数	描述
Enable （启用）	使离子比率标准可用。
Target Ratio (%) （目标比率， %）	确认离子的响应值与定量离子的响应之间的理论比率。
Window Type （窗口类型）	用于确定可接受的离子比率范围的绝对或相对计算方法。
Window (+/–%) （窗口， +/– %）	可接受的离子比率范围。
Ion Coelution (min) （离子共洗脱，分钟）	确认离子峰与定量离子峰的保留时间最大差值。
快捷菜单	
Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Compound （对化合物中所有确认峰应用离子比率）	将 Window Type、 Window 和 Ion Coelution 值复制到化合物的所有确认离子峰，并更新这个化合物。 仅当化合物具有多个确认离子峰时可用。
Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Method （对方法中所有确认峰应用离子比率）	将 Window Type、 Window 和 Ion Coelution 值复制到方法的所有定量峰，并更新这个方法。

Calibration

利用 Calibration （校正）页面设置或编辑数学模型，该模型用于准备一个或多个校正标准的初始校正评估。

每个目标化合物可具有其专有的初始校正设置，独立于其他化合物。当查看实际校正批次的结果时，可在此页或 Acquisition 模式中修改校正方法。

有关 Calibration 页面上所有功能的详细说明，参阅 Calibration 页面参数。

❖ 若要指定化合物的内标物

1. 在 Identification 页面上，至少指定方法中的一个化合物作为内标化合物类型。

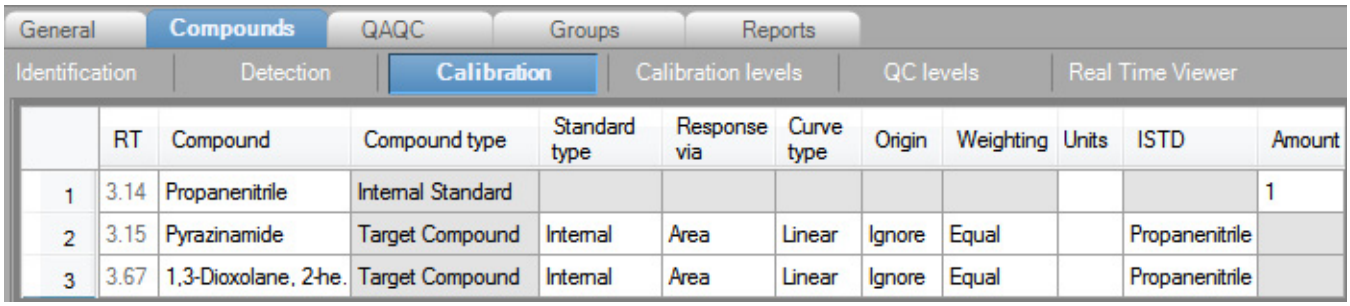
   参阅第 119 页的 “Identification”。

2. 在 Calibration 页面上执行以下操作：
   a. 在 Standard Type （标样类型）列表中，选择 **Internal （内标）**。
   b. 在 ISTD （内标）列中选择用作这个化合物内标的化合物。

      应用程序只列出在 Identification 页面上指定为内标的化合物。

若要查看 Analysis 模式下的内标峰，参阅第 325 页的 “Peak Display 窗格 ”。

图 39. Calibration 页面



	RT	Compound	Compound type	Standard type	Response via	Curve type	Origin	Weighting	Units	ISTD	Amount
1	3.14	Propanenitrile	Internal Standard								1
2	3.15	Pyrazinamide	Target Compound	Internal	Area	Linear	Ignore	Equal		Propanenitrile	
3	3.67	1,3-Dioxolane, 2-he.	Target Compound	Internal	Area	Linear	Ignore	Equal		Propanenitrile	

表 33. Calibration 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Compound Type （化合物类型）	化合物类型显示为 Target Compound 或 Internal Standard。
Standard Type （标样类型）	指定 Internal 或 External 标样。
Response Via （响应方式）	峰面积或峰高的使用。
Curve Type （曲线类型）	指定 Linear （线性）、 Quadratic （二次方）或 Average RF （平均响应因子）曲线类型。
Origin （原点）	对原点的处理包括 Ignore （忽略）、 Include （包括）和 Force （强制）。 Origin 和 Weighting （加权）列只在使用 Linear 或 Quadratic 曲线类型时启用。
Weighting （加权）	指定加权为 Equal （相等）、 1/X、 1/X^2、 1/Y 或 1/Y^2。
Units （单位）	和计算的值共同显示的单位。
ISTD （内标）	当标样类型设置为 Internal 时，用于目标化合物或替代物的内标物 (ISTD)。如果将标样类型设置为 External，此区域不被激活。列表显示所有化合物类型为 Internal Standard 的化合物。
Amount （量）	内标物的内标量。
快捷菜单	Calibration 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 167 页的 “ 使用快捷菜单命令 ”。

Calibration Levels

在主方法的 Calibration levels （校正水平）页面 （参阅第 162 页的 “Calibration Levels 页面 ”）上，可以定义校正标准。可以编辑仅用于主方法的校正水平和浓度。当编辑当前方法时，本页内容为只读。

有关 Calibration Levels 页面上所有功能的详细说明，参阅第 162 页的 “Calibration Levels 页面参数 ”。

❖ 若要指定校正水平和浓度

1. 选择要为其定义校正水平和浓度的化合物。

	RT	Compound
1	3.15	Pyrazinamide
2	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-
3	4.70	Pyrazinamide *2*

2. 在 Manage Calibration Levels （管理校正水平）区域，输入第一个校正水平的值。

   应用程序会在已编辑行下方添加一个新的空白校正水平行。

Manage Calibration levels

	Level
1	cal1
2	cal2
3	cal3
* 4	

3. 继续添加校正水平。

   添加完校正水平之后，可以指定每种化合物的每个水平的浓度。

4. 若要向表中输入浓度，执行下列操作：
   a. 选择第一个校正水平表单元格。
   b. 再次单击该单元格使其变为可编辑状态。
   c. 键入浓度值。

5. 对与第一个化合物相关的所有校正水平重复步骤 4。

General | Compounds | QAQC | Groups | Reports

Identification | Detection | Calibration | Calibration levels

	RT	Compound	cal1	cal2	cal3
1	3.15	Pyrazinamide	5.000	10.000	15.000
2	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-			
3	4.70	Pyrazinamide *2*			

6. 若要为所有化合物指定相同的浓度值，选择希望复制的值，右击并从快捷菜单中选择 **Copy Down**。

图 40. Calibration Levels 页面

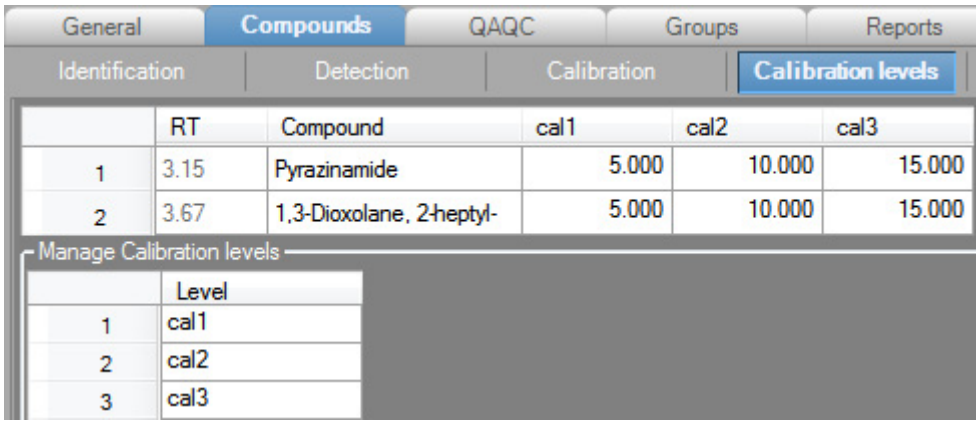


表 34. Calibration Levels 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Cal1-Cal*n* （校正 1- 校正 n）	用户定义的化合物的校正水平。
Manage Calibration Levels （管理校正水平）	为所选化合物定义每个校正水平值。
快捷菜单	Calibration Levels 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 167 页的 “ 使用快捷菜单命令 ”。

QC Levels

使用主方法的 QC levels （QC 水平）页面 （参阅 “QC Levels 页面 ”）来定义 QC 水平标准。可编辑仅用于主方法的 QC 水平。当编辑当前方法时，本页内容为只读。有关 QC Levels 页面上所有功能的详细说明，参阅 “QC Levels 页面参数。 ”

❖ 若要指定 QC 水平和浓度

1. 选择要为其定义 QC 水平、百分比测试值以及浓度的化合物。

	RT	Compound
▶ 1	3.15	Pyrazinamide
2	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-
3	4.70	Pyrazinamide *2*

2. 在 QC Levels 区域，输入第一个 QC 水平的名称。

   TraceFinder 应用程序在正在编辑的行下方添加一个新的空白 QC 水平行。

QC levels

	Level	% Test
1	QCLevel1	.00
✳ 2		NA

3. 输入 % Test （测试百分比）值。

   % Test 是每个 QC 水平的已知量与计算量 （已测量）之间的可接受的差异值 （以百分比表示）。

QC levels

	Level	% Test
1	QCLevel1	5.00
✳ 2		NA

4. 继续添加 QC 水平和测试百分比值。

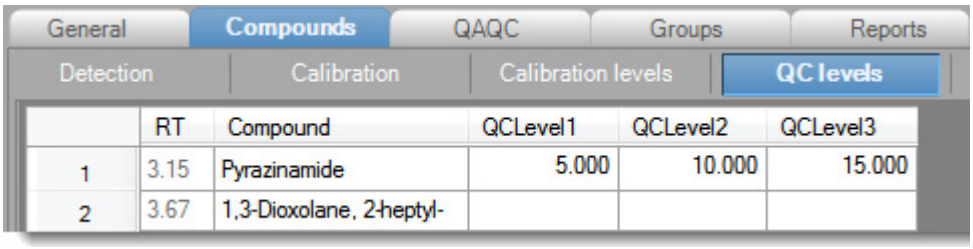
QC levels

	Level	% Test
1	QCLevel1	5.00
2	QCLevel2	5.00
3	QCLevel3	5.00
▶✳ 4		.00

   添加完 QC 水平之后，可以指定每种化合物的每个水平的浓度。

5. 若要向表中输入浓度值，执行下列操作：
   a. 选择第一个 QC 水平表单元格。
   b. 再次单击该单元格使其变为可编辑状态。
   c. 键入浓度值。

6. 对与第一个化合物相关的所有 QC 水平重复步骤 5。



7. 若要为所有化合物指定相同的浓度值，选择希望复制的值，右击并从快捷菜单中选择 **Copy Down**。

图 41. QC Levels 页面

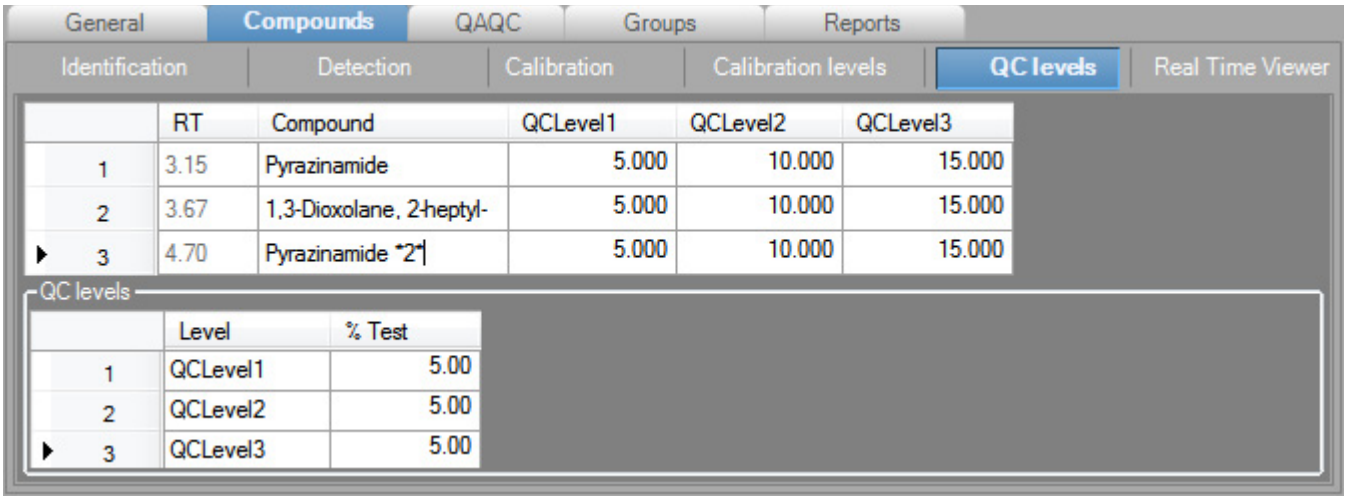


表 35. QC Levels 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
QC1-QC*n* （QC1-QCn）	用户定义的化合物的质量控制水平。
QC Levels QC 水平	
Level （水平）	用户定义的质量控制水平名称。
% Test （测试百分比）	每个 QC 水平的已知量与计算量 （经测量）之间的可接受的差异值 （以百分比表示）。
快捷菜单	QC Levels 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 167 页的 “ 使用快捷菜单命令 ”。

Real Time Viewer

利用 Real Time Viewer 页面指定当在 Acquisition 模式下执行采集或在 Method Development 模式下采集开发批次时，在实时状态窗格中显示的谱图。参阅第 248 页的 “ 实时显示 ”。

图 42. Real Time Viewer 页面

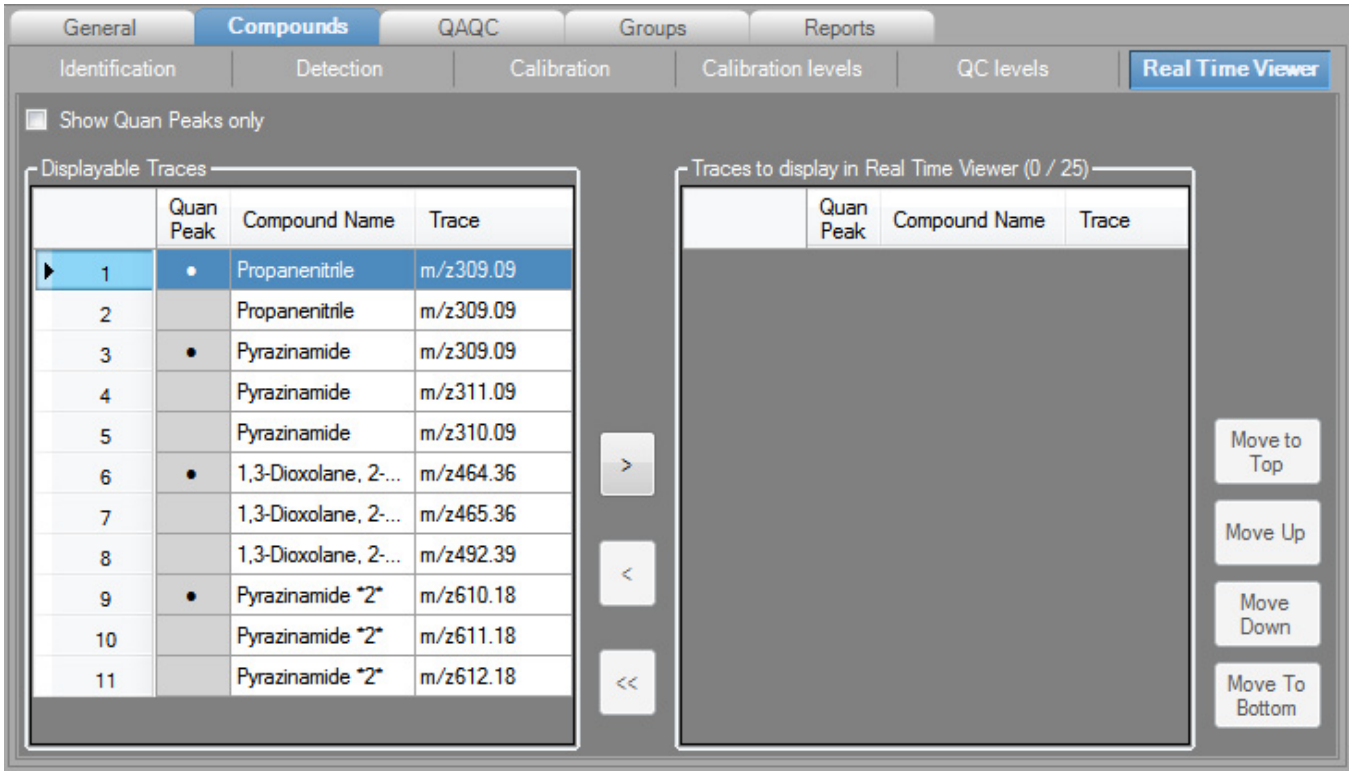
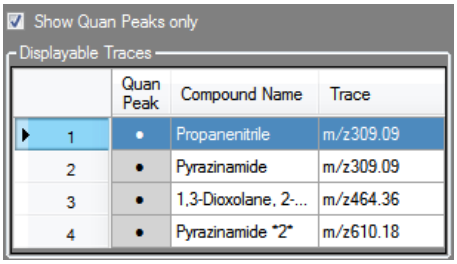


表 36. Real Time Viewer 页面参数

参数	描述
Show Quan Peaks Only （仅显示定量峰）	在化合物列表中仅显示定量峰。定量峰在 Quan Peak 列中以黑点标示出来。 
Displayable Traces （可显示谱图）	
Quan Peak （定量峰）	标记代表定量峰谱图。未标记谱图代表确认离子峰。
Compound Name （化合物名称）	方法中所有化合物的名称。
Trace （谱图）	为每个化合物列出所有谱图的简单质量数和母离子质量数 - 包括定量峰和确认离子峰。
>	将所选谱图移动到 Traces to Display in Real Time Viewer 窗格。
<	将所选谱图移动到 Displayable Traces 窗格。
<<	将所有谱图移动到 Displayable Traces 窗格。 若要将多个谱图移动到 Traces to Display... （待显示谱图）窗格，按住 SHIFT 键，选择多个谱图，然后点击 > 。
Traces to Display in Real Time Viewer (0/25) （显示在实时查看器中的谱图， 0/25）	在 Acquisition 模式下 , 在实时查看器中列出需要显示的谱图和显示次序 . 最大谱图数为 25。
Move to Top （移至顶部）	将所选谱图移动至 Traces to Display... 列表的顶部及实时显示中的第二位置。在实时显示中， TIC 总处于第一位置。
Move Up （上移）	在列表中将所选谱图上移一个位置。
Move Down （下移）	在列表中将所选谱图下移一个位置。
Move to Bottom （移至底部）	在列表中将所选谱图下移至底部。

使用快捷菜单命令

Compounds 页面上的每个页面 （除 Acquisition List 和 Real Time Viewer 页面外）都使用右击快捷菜单来显示或隐藏保留时间列、从方法中移除化合物，复制和粘贴数据或将化合物列表保存为 .csv 文件。

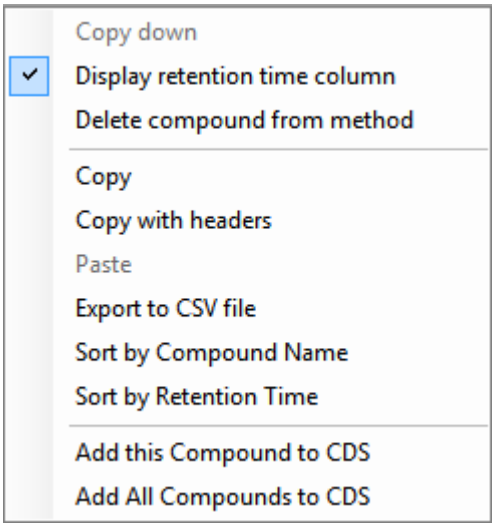


表 37. Compounds 页面快捷菜单命令 （第 1 页，共 2 页）

命令	描述
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。参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”
Display Retention Time Column （显示保留时间列）	显示或隐藏化合物列表中的 RT 列。
Delete Compound from Method （从方法中删除化合物）	从当前主方法中删除所选化合物。
Copy （复制）	将所选行或列中的数据复制至剪贴板。利用该命令将化合物信息复制至另一个应用程序，例如 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中。
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。粘贴数据必须是所选列的有效数据。
Undo Last Paste （撤销上次粘贴）	将上次粘贴条目从方法开发化合物列表中移除。
Export to CSV File （导出至 CSV 文件）	打开 Save As （另存为）对话框，在此可以将当前化合物列表保存为 .csv 文件。
Sort by Compound Name （按化合物名称排序）	按照化合物名称的字母顺序从 A 到 Z 排序。

表 37. Compounds 页面快捷菜单命令 （第 2 页，共 2 页）

命令	描述
Sort By Retention Time （按保留时间排序）	按短保留时间至长保留时间对化合物进行排序。
Add This Compound to CDS （将该化合物添加到化合物数据库）	将所选化合物添加到化合物数据库。当化合物已经在数据库中时， TraceFinder 应用程序利用当前化合物信息更新化合物数据库。 当 Compound Datastore 启用时，这个命令只在 Detection 页面快捷菜单上可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。
Add All Compounds to CDS （将所有化合物添加到化合物数据库）	将当前方法中的所有化合物添加到化合物数据库中。当任何一个化合物已经在数据库中时， TraceFinder 应用程序利用当前化合物信息更新化合物数据库。 当 Compound Datastore 启用时，这个命令只在 Detection 页面快捷菜单上可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

编辑 QAQC 页面

QAQC （质保质控）页面用于设置限制和范围，以便 TraceFinder 检查数据和结果，可作为最终审批的辅助手段。

从 Master Method View 的 QAQC 页面可以访问下列页面：

- Limits
- Calibration
- QC Check
- Negative
- ISTD
- Solvent Blank
- Hydrolysis

Limits

使用 Limits （限制）页面定义用于定量结果的检查水平。定量结果显示在打印版和电子报告上。还可以定义何时报告定量值而非报告小于特定值的值。

图 43. Limits 页面

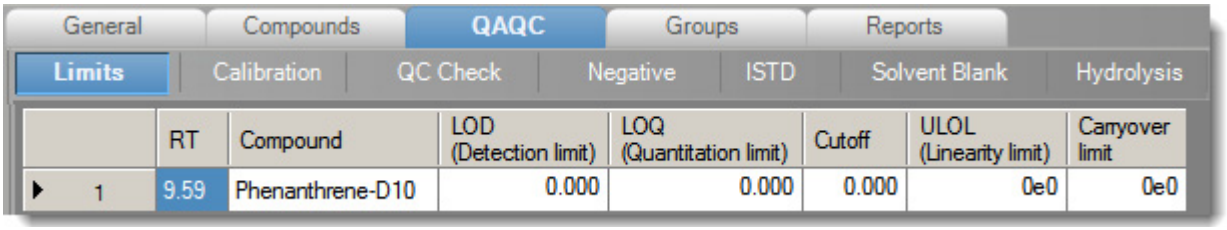


表 38. Limits 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
LOD Detection Limit （LOD，检测限）	检测限。可检测出的最低量。通常来自方法检测限 (mdl) 分析。
LOQ Quantitation Limit （LOQ，定量限）	定量限制。能够可靠且精确地定量的最低量。这通常是最低校正剂量。
Cutoff （截止值）	在某些行业也称为报告限 （LOR）。这是可报告的最低量，由每个实验室的标准操作规范来确定。
ULOL Linearity Limit （线性上限）	线性上限。这通常是最高校准剂重量。
Carryover Limit （残留限）	不会在仪器中留下残留量的最高物质量。如果某物质的残留限为 5，则高于 5 的量通常会污染仪器和后续的样品。假如某物质的残留限为 5，则小于 5 的量不会留下任何残留物质量。

Calibration

使用 Calibration 页面来定义可接受的初始校正标准。 TraceFinder 应用程序通过将样品中每个化合物的初始校正结果与本页中的定义值相比较而进行评估。

在 Calibration 报告中，应用程序会标记出超出这些限制的内标化合物的计算值。

图 44. Calibration 页面

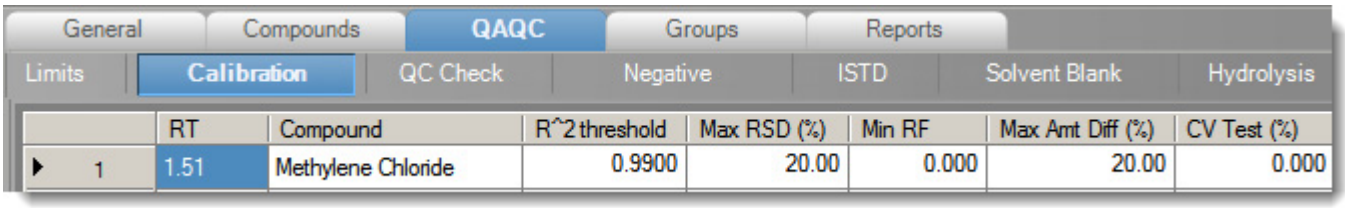


表 39. Calibration 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
R^2 Threshold （R^2 阈值）	用于可接受校正 （当处于线性或二次方模式中）的最小相关性系数 (r^2)。
Max RSD (%) （最大相对标准偏差， %）	用于可接受校正 （当处于平均 RF 模式中）的最大相对标准偏差 (RSD)。
Min RF （最小响应因子）	用于可接受校正 （当处于平均 RF 模式中）的最小平均响应因子 (RF)。
Max Amt Diff (%) （最大量偏差， %）	校正曲线数据点 （当处于线性或二次方模式中）的计算和理论浓度之间的最大差异。

QC Check

利用 QC Check （质控样）页面查看校正。 TraceFinder 应用程序通过将样品中每个化合物的 QC 样品结果与使用本页中定义值的初始校正相比较而进行评估。

在 Quality Control （质控样）报告中， TraceFinder 应用程序会标记出超出这些限制的内标化合物的计算值。

对于线性和二次方模式， QC （质控样）样品中的计算浓度与理论值相比的最大偏差将设置在 Compounds 页面中的 QC Levels 页中。

图 45. QC Check 页面

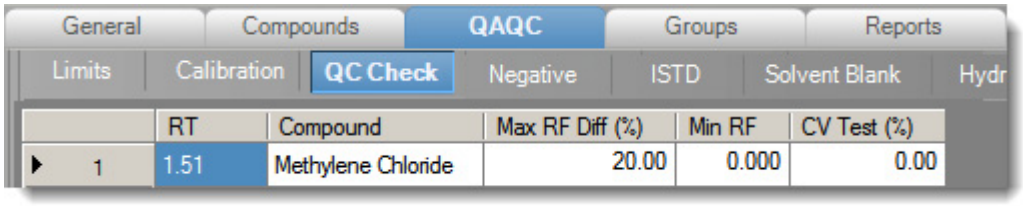


表 40. QC Check 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Max RF Diff (%) （最大响应因子偏差，%）	QC 样品的响应因子 (RF) 和校正 （当处于平均 RF 模式中）的平均响应因子之间的最大差异。
Min RF （最小响应因子）	QC 样品的最小响应因子 （当处于平均 RF 模式下时）。

Negative

Negative （阴性）页面用于定义空白样品中目标化合物的可接受样品浓度水平。 TraceFinder 应用程序通过将样品中每个化合物的计算浓度与本页中定义的最大浓度相比较而进行评估。可采用标记值的百分比的形式或指定值的形式来输入最大浓度。

有关 Negative 页面上所有功能的详细说明，参阅 Negative 页面参数。

在 Negative 报告中，应用程序会标记出超出这些限值的目标化合物的计算值。

❖ 若要指定百分比形式的最大浓度

1. 从 Method （方法）列表框中选择下列方法之一：
   - LOD%
   - LOQ%
   - LOR%
2. 在 Percentage （百分比）列中，输入百分比值。

❖ 若要指定最大浓度

1. 从 Method 列表框中选择 **Concentration （浓度）**。
2. 在 Max Conc （最大浓度）列中输入绝对值。

图 46. Negative 页面

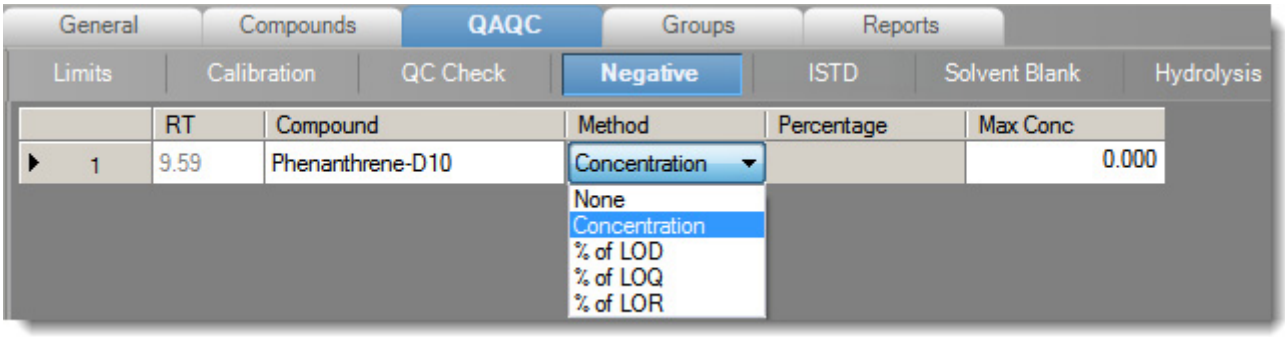


表 41. Negative 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Method （方法）	用于比较计算出的浓度的评估过程。可以指定无最大值、具体浓度值，或者指定报告限、检测限或定量限的百分比值。
Percentage （百分比）	如果使用百分比方法，则代表报告限、检测限或定量限的百分比。
Max Conc （最大浓度）	如果使用绝对值方法，则代表最大浓度。

ISTD

ISTD 页面用于检查内标化合物 （若适用）的响应和保留时间。 TraceFinder 应用程序通过将样品中每个内标化合物的面积和保留时间结果与特定范围比较而进行评估。

如果所有的目标化合物都设置为外标校正模式或尚未将任何化合物识别为内标化合物，则该页不显示任何值。

图 47. ISTD 页面

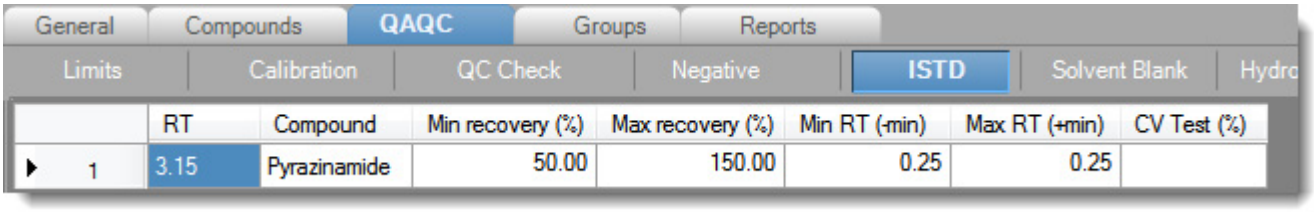


表 42. ISTD 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Min Recovery (%) （最小回收率，%）	内标化合物的最小和最大回收率百分比，用于定义可接受的范围。对于质控样，TraceFinder 应用程序将每个样品中的每个内标化合物响应值与以所有校正标准中该化合物的平均响应值为中心的范围相比较。对于所有其他样品，如果该批次中有可用的 QC 样品，则应用程序会计算以 QC 样品响应值为中心的比较范围。如果没有可用的标准样品，则应用程序会根据初始校正进行测试。
Max Recovery (%) （最大回收率，%）	
Min RT (–min) （最小保留时间， – 分钟）	内标化合物的最小和最大偏移 （分钟），用于定义可接受的范围。对于质控样，TraceFinder 应用程序将每个样品中的每个内标保留时间与以所有校正标准中该化合物的平均保留时间为中心的范围相比较。对于所有其他样品，如果该批次中有可用的 QC 样品，则应用程序会计算以 QC 样品保留时间为中心的比较范围。如果没有可用的标准样品，则应用程序会根据初始校正进行测试。
Max RT (+min) （最大保留时间，+ 分钟）	
CV Test (%) （变异系数测试， %）	变异系数测试。变异系数百分比是同一水平的多个样品的标准偏差乘以 100，再除以该水平多个样品的平均值所得到的结果。此计算是基于峰面积而进行的。

Solvent Blank

Solvent Blank （溶剂空白）页面用于查看或编辑溶剂报告的 QC 值。应用程序通过将样品中每个化合物的计算响应值与本页中定义的最大响应值相比较而进行评估。

在 Solvent Blank 报告中，应用程序会标记出超出这些限值的内标化合物的计算值。

图 48. Solvent Blank 页面

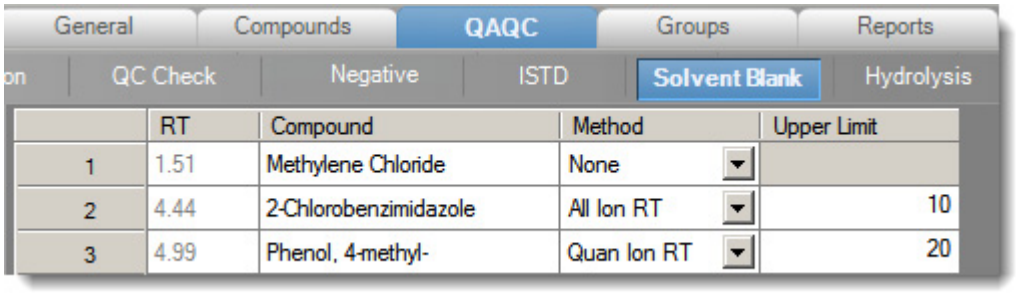


表 43. Solvent Blank 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Method （方法）	仅使用定量离子 （Quan Ion RT，定量离子保留时间）响应值或使用定量离子与任何确认离子 （All Ion RT，所有离子保留时间）响应值总和的评估过程。若要取消某个特定化合物的溶剂空白测试，选择 **None**。
Upper Limit （上限）	如果已选择了评估过程，在样品中为每个化合物指定上限。这些值不是浓度，而是原始响应值。

Hydrolysis

利用 Hydrolysis （水解）页面指定化合物的水解参数。

图 49. Hydrolysis 页面

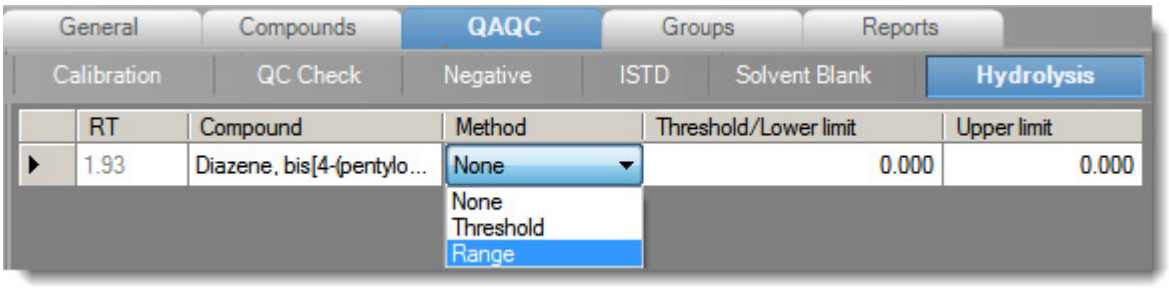


表 44. Hydrolysis 页面参数

参数	描述
RT （保留时间）	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。
Compound （化合物）	化合物名称。
Method （方法）	使用的评价过程，指定为一个更低的阈值或范围。若要取消激活某一特定化合物的水解测试，选中 **None**。
Threshold/Lower Limit （阈值 / 下限）	为使用 Threshold 方法的化合物指定水解测试的阈值。在该阈值以下的值将标记在 Hydrolysis 报告中。 对使用 Range （范围）方法的化合物，这将指定范围下限。
Upper Limit （上限）	对使用 Range 方法的化合物，该参数将指定范围的上限。
快捷菜单	
Copy Down （向下复制）	将所选的列值复制到该列中的所有行。有关使用 Copy Down 命令的详细说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”
Display Retention Time Column （显示保留时间列）	显示或隐藏化合物列表中的 RT 列。
Delete Compound from Method （从方法中删除化合物）	从当前主方法中删除所选化合物。
Copy （复制）	将所选行或列中的数据复制至剪贴板。利用该命令将化合物信息复制至另一个应用程序，例如 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中。
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。利用该命令将化合物信息复制至另一个应用程序，例如 Excel 工作表。
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。粘贴数据必须是所选列的有效数据。
Undo Last Paste （撤销上次粘贴）	将上次粘贴条目从方法开发化合物列表中移除。
Export to CSV File （导出至 CSV 文件）	打开 Save As 对话框，在此可以将当前化合物列表保存为 .csv 文件。

编辑 Groups 页面

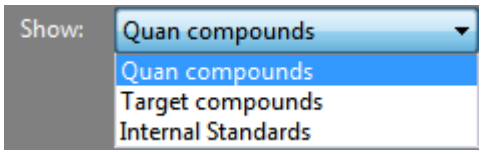
利用 Master Method View 的 Groups （组）页面 （参阅 “Groups 页面 ”）将化合物分配到功能组或逻辑组中。可以使用这些组来创建目标化合物的子集。有关 Groups 页面上所有功能的详细说明，参阅 “Groups 页面参数。 ”

对于定量处理， TraceFinder 应用程序会处理方法中的所有化合物并保存完整的结果集，但在 Acquisition 模式下只能看见所选组中的化合物。将化合物显示方式限制为仅显示所选组中的化合物，在所处理的主方法虽然包含较大的化合物列表但特定样品分析只需要其中的部分化合物时特别有用。在该情况下，应用程序只需要一种方法，因此可减少产生的结果。若要仅显示用于定量处理的化合物，从 Show 列表框中选择 **Quan Compounds**。

可以创建多个组并且在其中包含相同的化合物。

❖ 若要创建组

1. 从 Show 列表框中选择要查看的化合物的类型。



2. 在 Groups 区域的底部，点击 **Add Group （添加组）**。

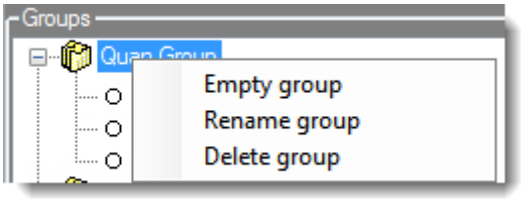
   Add a New Group （添加新组）对话框打开。

3. 输入新组的名称，然后点击 **OK**。

   新组显示在 Groups 区域中。

4. 从 Compounds 区域拖曳化合物到组名上 （就象移动文件到文件夹中一样）。

5. 要从组中移除所有化合物，重命名该组或删除它，右键单击该组名并从快捷菜单中选择。



6. 若要移除单个化合物，右击组中的化合物名称并从快捷菜单中选择 **Remove from Group （从组中移除）**。

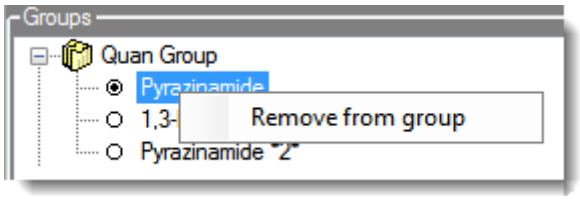


图 50. Groups 页面

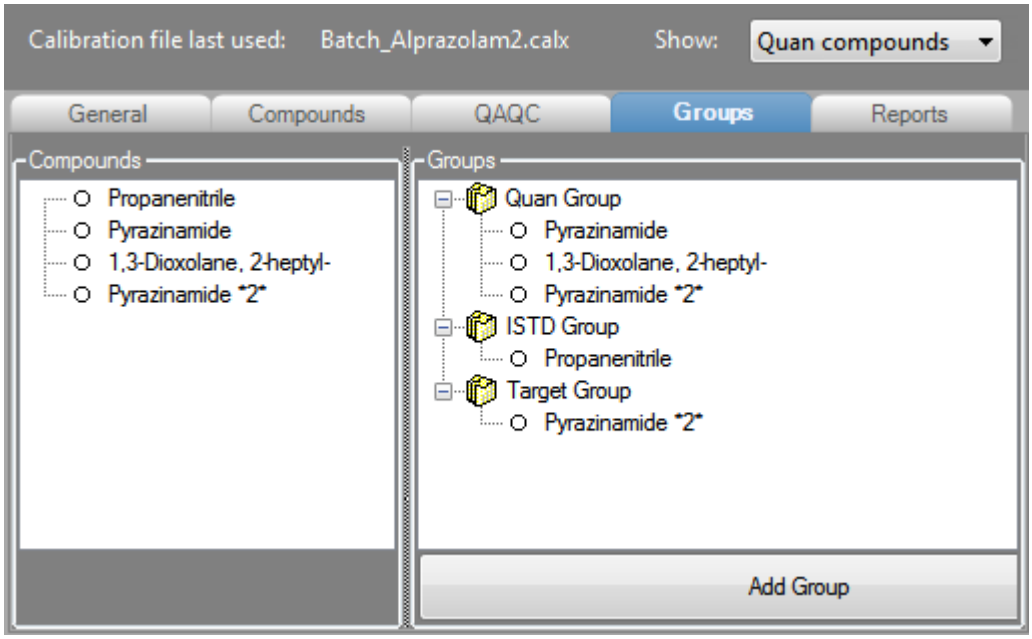


表 45. Groups 页面参数

参数	描述
Compounds（化合物）	列出所有可用的化合物。
Groups （组）	列出所有可用的组。
Add Group（添加组）	打开 Add a New Group 对话框，可在此创建新组。
快捷菜单	
Empty Group（清空组）	从所选组中删除所有化合物。
Rename Group（重命名组）	更改所选组的名称。
Delete Group（删除组）	删除所选组及其中的所有化合物。
Remove from Group（从组中移除）	将所选化合物从其组中移除。

编辑 Reports 页面

利用 Reports （报告）指定保存或打印报告的方式。有关 Reports 页面上所有参数的详细说明，参阅 “Reports 页面参数。 ”

对于定量报告类型，可以修改 Quan Report Settings （定量报告设置）页面中的定量限标记、用户界面选项以及定量标记选项。

对于目标筛选报告类型，可以修改 Target Screening Settings （目标筛选设置）页面上的默认报告选项、半定量结果选项、离子比率计算法方法、精确质量窗口以及 Exactive 选项。

本部分包括对下列任务的说明：

- 指定报告格式
- 指定定量报告设置
- 指定目标筛选设置

指定报告格式

- 可以为每份标准报告创建硬拷贝打印件、 PDF 文件或 XML 文件。
- 可以为每份自定义报告创建硬拷贝打印件或 Excel 宏启用工作簿 （.xlsm）文件。
- 可以为每份目标筛选报告创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。

除了报告类型，也可以为每份报告指定标题。默认报告标题是报告名称。

❖ 若要指定报告类型和导出格式

1. 点击 **Reports** 选项卡。

   Reports 页面显示所有已配置报告的列 :

   - 示例 : 点击放大镜图标以查看 PDF 文件格式的报告类型示例。
   - Report Name （报告名称）、 Report Description （报告描述）和 Report Type （报告类型）。
   - 对于标准报告类型：选项有创建硬拷贝、 PDF 文件或 XML 文件
   - 对于自定义报告类型：选项有创建硬拷贝、 PDF 文件或 Excel 宏启用工作簿文件
   - 对于目标筛选报告类型：选项有创建硬拷贝或 PDF 文件
   - Batch Level （批次水平） : 指明哪些报告为批次水平报告的选项。

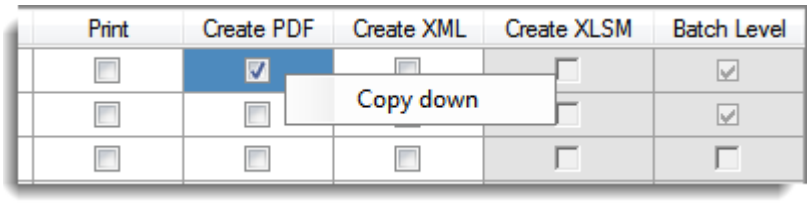
   有关在创建主方法时配置哪些为可用报告或哪些为创建批次水平报告的详细信息，参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

2. 若要编辑 Report Description，双击该名称然后输入新名称。

   TraceFinder 应用程序将对使用该主方法的所有报告使用该名称。无法从其他报告视图编辑 Report Description。

3. 要为每个报告类型指定要创建的报告输出类型，在适当的列中选择复选框。

4. 若要为所有报告复制输出类型，点击单元格将其选中，然后右击并从快捷菜单选择 **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格的选取或未选取状态。该操作仅应用于哪些输出格式可用的报告。

默认情况下会清除所有报告类型。

图 51. Reports 页面

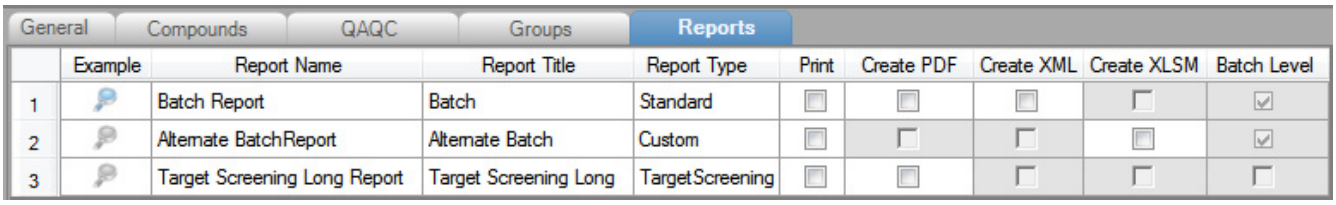


表 46. Reports 页面参数

参数	描述
Example （示例）	打开一个显示示例报告类型的 PDF 文件。
Report Name （报告名称）	报告的名称。
Report Description （报告描述）	报告使用用户定义的描述。
Report Types （报告类型）	报告类型：Standard （标准）、 Custom （自定义）或 Target Screening （目标筛选）。
Print （打印）	发送报告至打印机。
Create PDF （创建 PDF）	将报告保存为 PDF 文件。 仅对标准和目标筛选报告可用。
Create XML （创建 XML）	将报告导出为 XML 格式。 仅对标准报告可用。
Create XLSM （创建 XLSM）	将报告导出为宏启用工作簿 (.xlsm) 格式。 仅对自定义报告可用。
Batch Level （批次水平）	该方法不会为每个样品创建独立的报告，应用程序综合所有合适样品的数据，为整个批次创建一份报告。批次水平报告附带 **B** 以示区别。 用户无法从 Reports 页面选择该选项。必须在报告配置中选中报告的 Batch Level 选项。参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

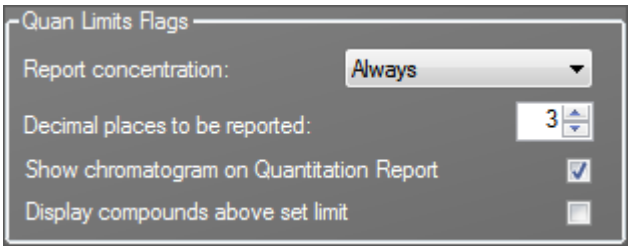
指定定量报告设置

利用 Quan Report Settings 页面的选项选择在标准报告类型中标记值和显示信息参数。

按照如下步骤进行操作：

- 若要指定定量限
- 若要指定用户界面选项
- 若要指定定量标记选项
- 若要指定浓度计算方法
- 若要跟踪调谐文件的使用

❖ 若要指定定量限



1. 若要报告在所有情况或只在定量值超过 LOD、 LOQ 或 LOR 时的计算浓度，从 Report Concentration （报告浓度）列表框中选择适当的值。

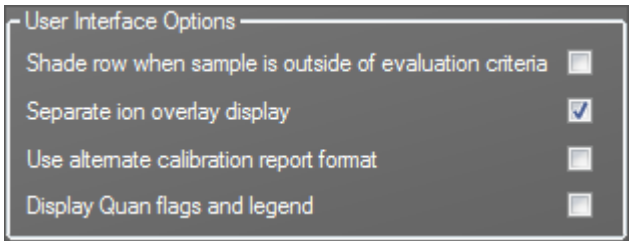
   有关浓度限的说明，参阅第 168 页的 “ 编辑 QAQC 页面 ”。

2. 若要选择需报告的计算浓度的小数位数，在 Decimal Places to be Reported （需报告的小数位数）框中设置该值。

3. 若要在 Quantitation Report （定量报告）中包括样品的色谱图，选中 **Show Chromatogram on Quantitation Report （定量报告显示色谱图）**复选框。

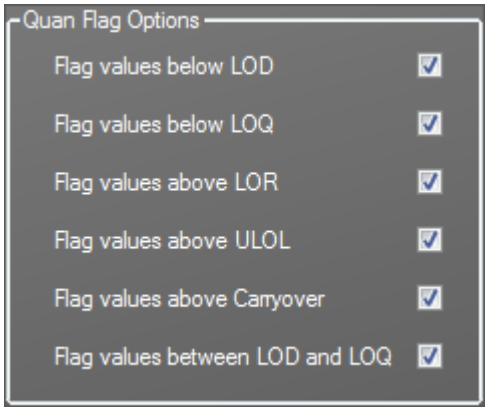
4. 若要仅显示有效化合物，选中 **Display Compounds Above Set Limit** （显示设置限以上的化合物）复选框。

❖ **若要指定用户界面选项**



1. 若要在用于评估的值不符合其中一个标准时在任何报告上对化合物行加阴影，选取 **Shade Row when Sample is Outside of Evaluation Criteria（样品超评估标准时对该行加阴影）**复选框。
2. 若要从确认离子绘图将离子重叠窗格分隔开来，选取 **Separate Ion Overlay Display （分隔离子重叠显示）**复选框。
3. 若要使用专为简洁打印目的而设计的用于 Calibration Report （校正报告）的替代格式，并将报告限制为最多 7 个校正标准，选中 **Use Alternate Calibration Report Format （使用备用校正报告格式）**复选框。
4. 若要在高密度报告上显示标记和说明，选中 **Display Quan Flags and Legend （显示定量标记和说明）**复选框。

❖ **若要指定定量标记选项**

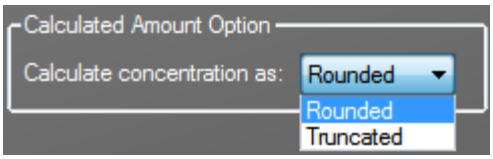


选取希望在报告中显示的值。

该值高于或低于 Quan （定量）页面上定义的限制。

这些标记出现在各种报告上并在第 183 页的 “Quan Report Settings 页面参数 ” 中定义。

❖ **若要指定浓度计算方法**

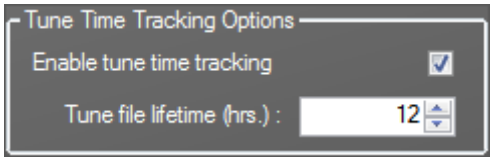


在 Calculate Concentration As （浓度计算为）框中，选中 **Rounded （四舍五入）**或 **Truncated （截取）**。

- **Rounded**：利用在 Quan Limits Flags （定量限标记）区域指定的小数位数将计算量四舍五入为最近值。
- **Truncated**：将计算量按 Quan Limits Flags 区域指定的小数位数进行截取。

参阅第 180 页的 “ 若要指定定量限 ”。

❖ **若要跟踪调谐文件的使用**



1. **Enable Tune Time Tracking （启用调谐时间跟踪）**复选框。

   该选项跟踪了上次仪器调谐和每次样品采集之间的小时数。

2. 在 Tune File Lifetime （调谐文件使用寿命）框中，输入上次仪器调谐和样品采集之间的允许的小时数。

   任何超出这一最大允许时间的样品采集都会被标记在 Batch （批次）报告中。

图 52. Quan Report Settings 页面

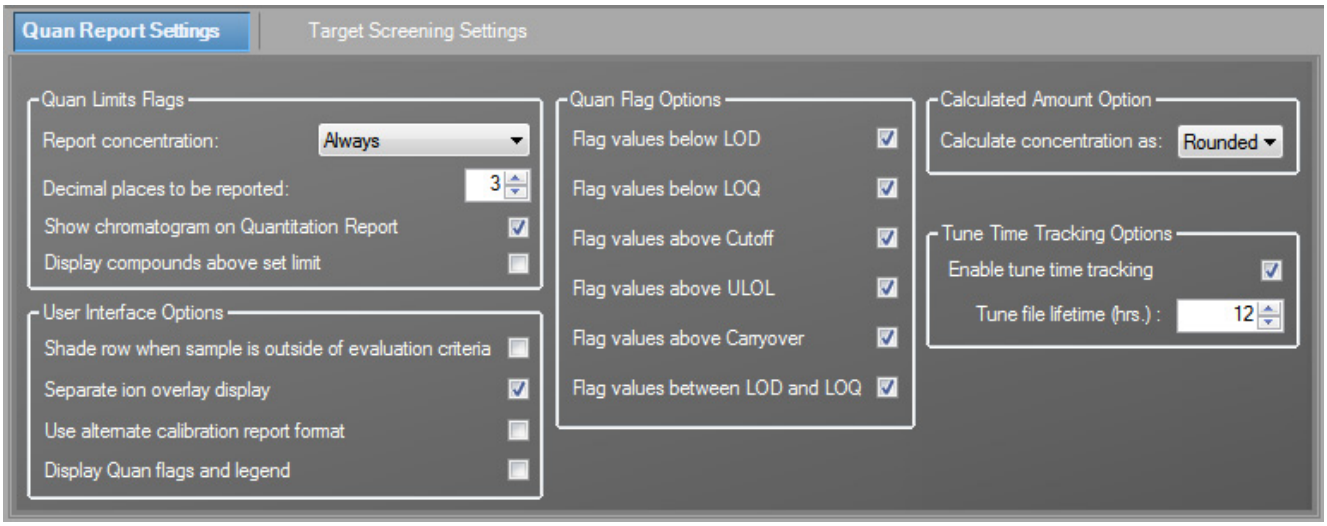


表 47. Quan Report Settings 页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Quan Limits Flags （定量限标记）	
Report Concentration （报告浓度）	报告在所有时候或只在定量值超过检测限 (LOD)、定量限 (LOQ) 或报告限 (LOR) 时的计算浓度。 Report concentration：Always （总是）、 >LOD、 >LOQ 或 >LOR。
Decimal Places to Be Reported （需报告的小数位）	要包括在报告中的小数位数。最大值为 6。
Show Chromatogram on Quantitation Report （定量报告显示色谱图）	在定量报告上显示色谱图 （TIC 总离子流图）。
Display Compounds Above Set Limit （显示设置限以上的化合物）	仅打印样品中的阳性化合物。如果某个化合物超出了指定的定量标记选项限制，则 TraceFinder 应用程序会报告该化合物。
User Interface Options 用户界面选项	
Shade Row When Sample is Outside of Evaluation Criteria （样品超评估标准时对该行加阴影）	在用于评估的值不符合其中一个标准时在任何报告上掩蔽化合物行。
Separate Ion Overlay Display （分隔离子重叠显示）	从分析的确认离子绘图将离子重叠窗格分隔开来。
Use Alternate Calibration Report Format （使用备用校正报告格式）	使用专为简洁打印目的而设计的用于 Calibration Report 的替代格式 （此报告限制为最多 7 个校正标准）。

表 47. Quan Report Settings 页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Display Quan Flags and Legend （显示定量标记和说明）	在高密度报告上显示手动标记、确认手动标记、定量标记和说明。
Quan Flag Options 定量标记选项	该值高于或低于 Limits 页面上定义的限制。这些标记出现在各种报告上。
Flag Values Below LOD （标记低于检测限的值）	标记小于检测限 (LOD) 的值。
Flag Values Below LOQ （标记低于定量限的值）	标记小于定量限 (LOQ) 的值。
Flag Values Above LOR （标记高于报告限的值）	标记大于报告限 (LOR) 的值。
Flag Values Above ULOL （标记高于线性上限的值）	标记大于线性上限 (ULOL) 的值。
Flag Values Above Carryover （标记高于残留限的值）	标记大于残留限制的值。
Flag Values Between LOD and LOQ （标记介于检测限和定量限之间的值）	标记介于检测限和定量限之间的值。
Calculated Amount Option 计算量选项	
Calculate Concentration As （浓度计算为）	为报告浓度量指定 Rounded 或 Truncated 方法。
Tune Time Tracking Options 调谐时间跟踪	
Enable Tune Time Tracking （启用调谐时间跟踪）	跟踪上次仪器调谐和每次样品采集之间的小时数。
Tune File Lifetime （调谐文件使用寿命）	指定上次仪器调谐和每次样品采集之间的最大小时数。任何超出这一最大允许时间的样品采集都会被标记在 Batch 报告中。

指定目标筛选设置

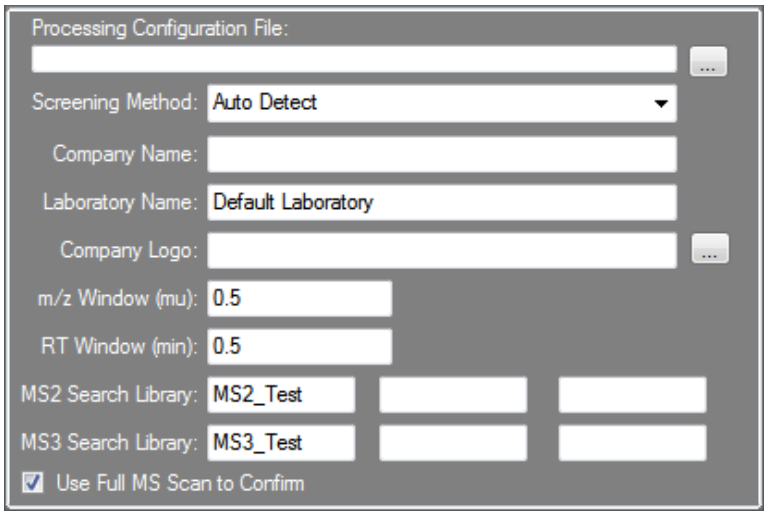
利用 Target Screening Settings 页面上的选项设置生成 Target Screening 报告所需的参数。有关 Target Screening Settings 页面上特性的详细说明，参阅第 188 页的 “Target Screening Settings 页面参数 ”。

TraceFinder 应用程序使用这些参数处理原始数据文件和创建与 ToxID 报告类似的本报告。参阅第 190 页的 “Target Screening Summary Report （目标筛选总结报告）示例 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要指定默认参数
- 若要计算和报告半定量结果
- 若要指定离子比率计算方法
- 若要指定准确质量数窗口
- 若要指定 Exactive 参数

❖ 若要指定默认参数



1. 点击 Processing Configuration File （处理配置文件）浏览按钮，然后选择一个配置文件（.csv）。
2. 从 Screening Method （筛选方法）列表框中选择下列化合物筛选方法之一：
   - （默认） Auto Detect （自动检测）
   - Based on Full MS2 scans （基于全 MS2 扫描）
   - Based on SRM and MS2 scans （基于 SRM 和 MS2 扫描）
   - Based on MS2 and MS3 scans （基于 MS2 和 MS3 扫描）
   - Based on MS3 scans （基于 MS3 扫描）
   - Based on accurate mass scans （基于准确质量数扫描）
   - Based on SRM scans （基于 SRM 扫描）
   - Based on Exactive screening method （基于 Exactive 筛选方法）
3. 输入打印在报告上的公司名。
4. 输入打印在报告上的实验室名。
5. 点击 Company Logo （公司徽标）浏览按钮，然后选择打印在报告上的图片文件（.jpg， .gif 或 .bmp）。

6. 在 *m/z* Window （质荷比窗口）框中，输入高于和低于化合物 *m/z* 值的窗口值。
7. 在 RT Window （保留时间窗口）框中，输入高于和低于化合物保留时间值的窗口值。
8. 在 MS2 Search Library （MS2 检索库）框中，输入用于检索 MS/MS 质谱图的三个检索库的名称。
9. 在 MS3 Search Library （MS3 检索库）框中，输入用于检索 MS^3 谱图的三个检索库的名称。
10. 若希望将离子库检索结果与全扫描中的母离子峰检测进行确认，选中 **Use Full MS Scan to Confirm （使用全 MS 扫描以确认）**复选框。

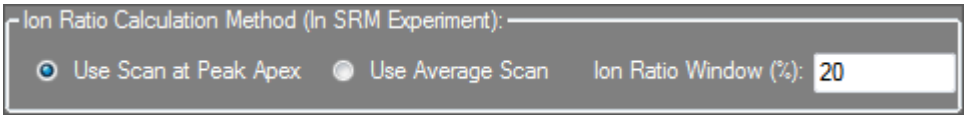
    当应用程序没有在全扫描中检测峰时，化合物不被报告为目标化合物。

❖ **若要计算和报告半定量结果**

1. 在 Semi Quantitative （半定量）区域，执行以下操作：
   a. 选中 **Report Semi-Quantitative Result （报告半定量结果）**复选框。
   b. 输入测量单位。

      测量单位仅用于标记目的。
2. 选中 **Scan Intensity （扫描强度）**或 **Peak Area （峰面积）**选项。
   - Scan Intensity：应用程序测量 MS/MS 峰的强度，没有执行背景扣除。
   - Peak Area：应用程序测量母离子的重建全扫描色谱峰的峰面积。当选中 Peak Area 时， Use Full MS Scan to Confirm 复选框自动选中。

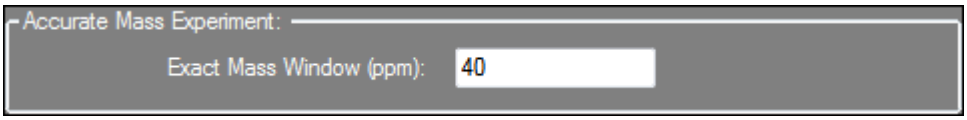
❖ **若要指定离子比率计算方法**



1. 选中 **Use Scan at Peak Apex （使用峰顶处扫描）**或 **Use Average Scan （使用平均扫描）**选项。
   - Use Scan at Peak Apex：应用程序基于峰顶扫描质谱图计算离子比率。
   - Use Average Scan：应用程序基于半峰高范围以上的平均扫描质谱图计算离子比率。配置文件中的相对强度必须使用已选择的扫描方法。
2. 在 Ion Ratio Window (%) （离子比率窗口， %）框中，对定量离子输入可接受的定性离子强度百分比。

   例如，当 Ion Ratio Window 为 20% 时且定量离子强度 / 峰高为 100 时，指定确认离子 / 质量数峰高必须至少为 80。

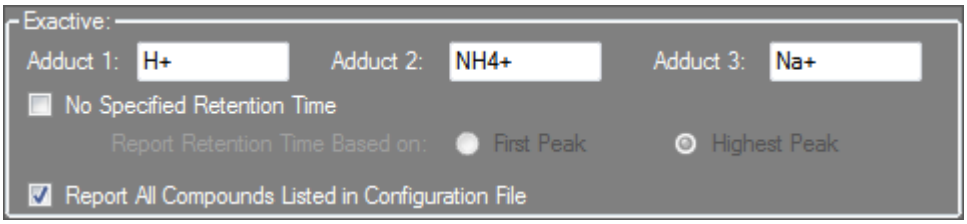
❖ **若要指定准确质量数窗口**



为 Exact Mass Window （准确质量数窗口）输入以 ppm 为单位的总窗口宽度。

例如，当用户希望得到质量数为 50 且窗口为 2 的结果时，算法会创建一个基于所有质量数在 49 至 51 范围内的响应结果。

❖ **若要指定 Exactive 参数**



1. 输入 Adduct 1 （加合物 1）、 Adduct 2 （加合物 2）和 Adduct 3 （加合物 3）的值。

   这些值识别了在配置文件中列出和应用的加合物。加合物对极性敏感。对于负离子化，输入负加合物值。这些值分别默认为 H+、 NH4+ 和 Na+。

2. 若要检索指定峰的整个原始数据文件，执行以下操作：

   a. 选中 **No Specified Retention Time （无指定保留时间）**复选框。

   b. 选中 **First Peak （首个峰）**或 **Highest Peak （最高峰）**选项。

      当检索过程在原始数据文件中找到一个以上 *m/z* 匹配结果时，应用程序使用指定峰进行处理。

3. 选中 **Report All Compounds Listed in Configuration File （报告配置文件中列出的所有化合物）**复选框，以报告配置文件中的所有化合物，无论这些化合物匹配与否。

   默认报告仅为那些在原始数据文件中找到匹配的化合物。该选项仅应用于 Exactive™ 实验。

图 53. Target Screening Settings 页面

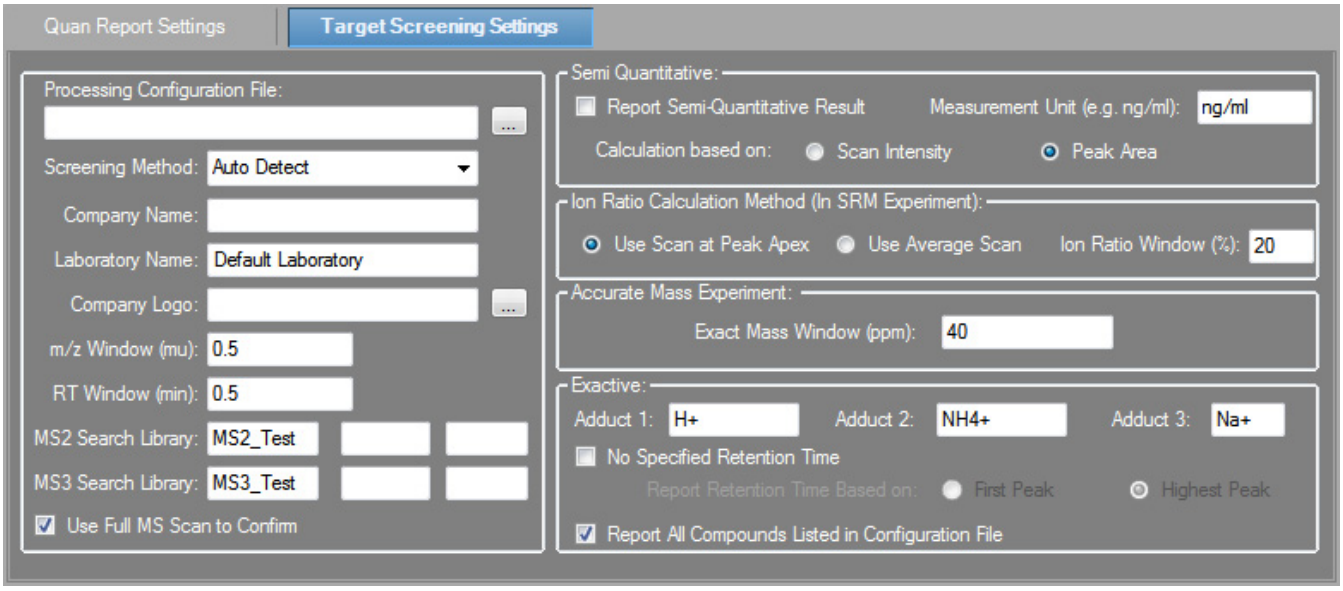


表 48. Target Screening Settings 页面参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Processing Configuration File （处理配置文件）	指定配置文件 （.csv）。
Screening Method （筛选方法）	指定以下其中一种筛选方法： • （默认） Auto Detect • Based on Full MS2 scans • Based on SRM and MS2 scans • Based on MS2 and MS3 scans • Based on MS3 scans • Based on accurate mass scans • Based on SRM scans • Based on Exactive screening method **注释** 采用 Auto Detect 方法时， ToxID 应用程序能够识别采集数据文件中使用的筛选实验。
Company Name （公司名称）	指定打印在报告上的公司名。
Laboratory Name （实验室名称）	指定打印在报告上的实验室名。
Company Logo （公司徽标）	指定打印在报告上的图片文件 （.jpg、 .gif 或 .bmp)。
m/z Window (mu) （质荷比窗口， mu）	指定高于和低于化合物 *m/z* 值的窗口值。
RT Window (min） （保留时间窗口，分钟）	指定高于和低于化合物保留时间值的窗口值。
MS2 Search Library （MS2 检索库）	指定用于检索 MS/MS 质谱图的三个检索库的名称。
MS3 Search Library （MS3 检索库）	指定用于检索 MS^3 质谱图的三个检索库的名称。
Use Full MS Scan to Confirm （使用全 MS 扫描以确认）	指定应用程序将库检索结果与全扫描中母离子峰检测进行确认。当应用程序没有在全扫描中检测峰时，化合物不被报告为目标化合物。
Semi Quantitative （半定量）	
Report Semi-Quantitative Result （报告半定量结果）	包括目标筛选报告中的半定量结果。
Measurement Unit （测量单位）	用于标记目的的单位。

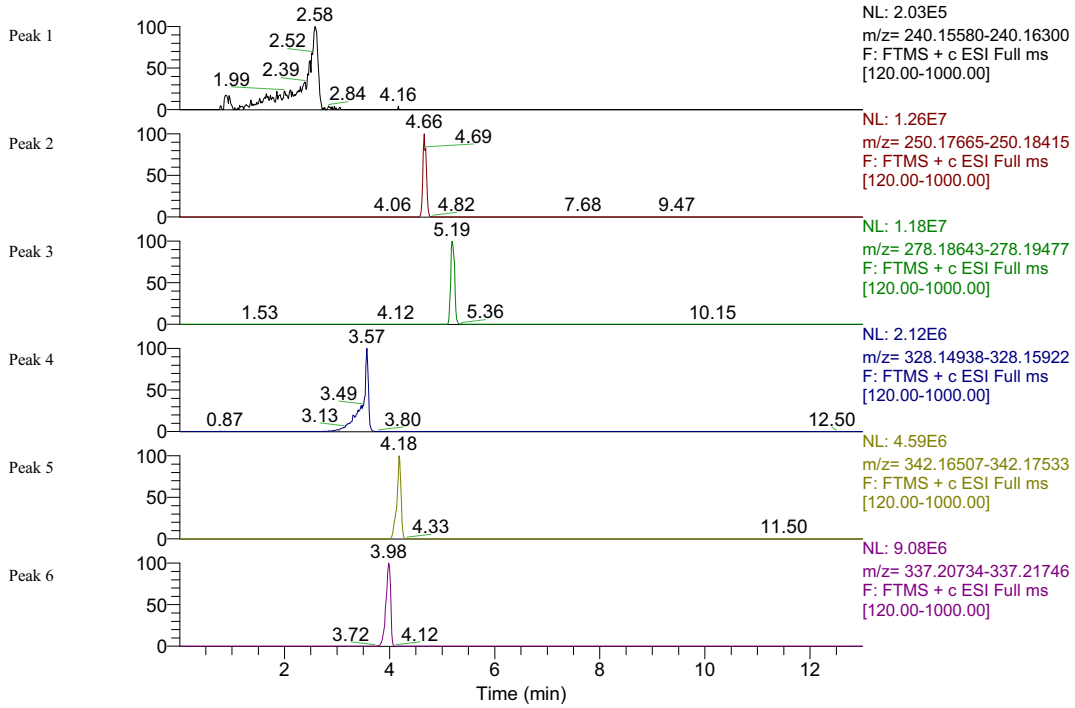
表 48. Target Screening Settings 页面参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Calculation Based On（计算基于）	指定以下其中一种计算方法： • Scan Intensity：指定应用程序测量 MS/MS 峰的强度，不执行背景扣除。 • Peak Area：指定应用程序测量母离子的重建全扫描色谱峰的峰面积。当选中 Peak Area 时， Use Full MS Scan to Confirm 复选框自动选中。
Ion Ratio Calculation Method (In SRM Experiment) （离子比率计算方法，在 SRM 实验中）	
Use Scan at Peak Apex（使用峰顶处扫描）	指定应用程序基于峰顶扫描质谱图计算离子比率。
Use Average Scan（使用平均扫描）	指定应用程序基于半峰高范围以上的平均扫描质谱图计算离子比率。配置文件中的相对强度必须使用已选择的扫描方法。
Ion Ratio Window(%)（离子比率窗口，%）	
Accurate Mass Experiment （准确质量数实验）	
Exact Mass Window（准确质量数窗口）	为准确质量数实验指定以 ppm 为单位的窗口值。
Exactive	
Adduct 1–*n*（加合物 1-*n*）	指定在配置文件中列出和应用的加合物。加合物对极性敏感。对于负离子化，输入负加合物值。 默认：Adduct 1：H+， Adduct 2: NH4+，和 Adduct 3: Na+
No Specified Retention Time（无指定保留时间）	当检索过程在原始数据文件中找到多个 *m/z* 匹配结果时，指定处理采用的 First Peak 或 Highest Peak。
Report All Compounds Listed in Configuration File （报告配置文件中列出的所有化合物）	指定在 Exactive 实验中，应用程序报告配置文件中的所有化合物，无论这些化合物匹配与否。 默认：报告仅为那些在原始数据文件中找到匹配的化合物。

图 54. Target Screening Summary Report （目标筛选总结报告）示例

Your Company Name
Summary Report

Raw File Name: C:\Xcalibur\examples\ToxID\Exact_Mass\Exact_Mass_Test.RAW
Config File Name: C:\Xcalibur\examples\ToxID\Exact_Mass\ConfigFile_Exact_mass.csv
Sample Name: Laboratory: Your Lab Name
Acquistion Start Time: 3/24/2008 4:46:43 PM
Screening Conditions: Based on accurate mass scans. Exact mass window (ppm): 30, RT window(min): 0.50.



Peak Number	Compound Name	Expected m/z	Detected m/z	Delta (mDa)	Delta (ppm)	Expected RT	Actual RT	Intensity
1	Albuterol	240.15940	240.15939	-0.0	-0.0	2.58	2.58	199505
2	Alprenolol	250.18040	250.18039	-0.0	-0.0	4.50	4.66	12604499
3	Amitriptyline	278.19060	278.19061	0.0	0.0	5.00	5.19	11769755
4	6-Acetylmorphine	328.15430	328.15433	0.0	0.1	3.30	3.57	2112090
5	6-Acetylcodeine	342.17020	342.17035	0.1	0.4	4.10	4.18	4593306
6	Acebutolol	337.21240	337.21246	0.1	0.2	3.80	3.98	9077282

创建方法模板

在 TraceFinder 应用程序中，可以采用包含常用设置的方法模板创建处理方法。

按照如下步骤进行操作：

- 若要打开 Method Template Editor
- 若要指定峰标准
- 若要识别峰
- 若要指定确认离子
- 若要校正化合物
- 若要为方法输入注释
- 若要保存方法模板

❖ 若要打开 Method Template Editor

1. 在主菜单或导航窗格中点击 **Method Development**。

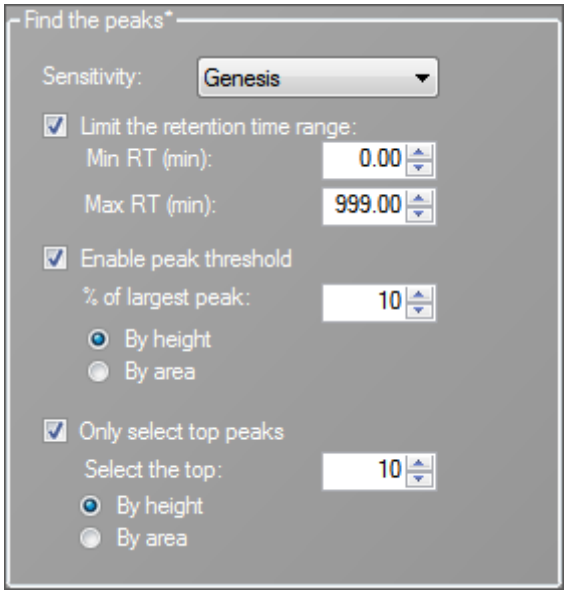
   Method Development 导航窗口显示。

2. 点击位于导航窗格的 **Method View**。

3. 从主菜单中选择 **File （文件） > New （新建） > Method Template （方法模板）**。

   方法模板编辑器显示。有关 Method Template Editor （方法模板编辑器）的完整说明，参阅第 196 页的 “Method Template Editor 对话框 ”。

❖ **若要指定峰标准**



1. 在 Find the Peaks （查找峰）区域，选择一个灵敏度水平。

   在选择灵敏度水平时，定义峰检测器算法检索低水平峰时的范围。

   - Genesis 峰检测算法用于与 Xcalibur 1.0 分析反向兼容。
   - ICIS 峰检测算法设计用于处理 MS 数据，在 MS 信号水平低时具有优异的峰检测效率。
   - Avalon 峰检测算法专为 UV 数据积分和模拟色谱图而设计。

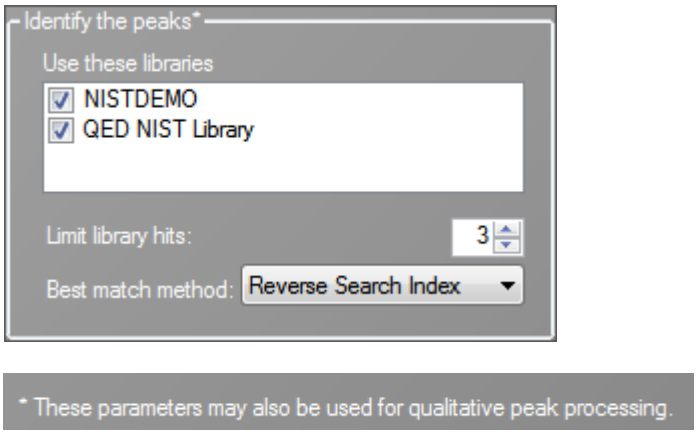
2. 若要查找仅处于整个色谱图中特定范围内的峰，选择 **Limit the Retention Time Range （限制保留时间范围）**复选项并指定保留时间 (RT) 范围。

3. 若要指示是否要通过相对峰高或峰面积以及将确定化合物选择的最高峰百分比来选择峰，选择 **Enable Peak Threshold （启用峰阈值）**复选框。

   若要考虑用于处理方法的峰， TraceFinder 应用程序使用 Enable Peak Threshold 过滤器来确定哪些峰符合指定的最大峰百分比。

4. 若要按峰高或峰面积显示特定数量的最大峰，选中 **Only Select Top Peaks （仅选择最高峰）**复选框并输入显示的峰数目。

❖ **若要识别峰**



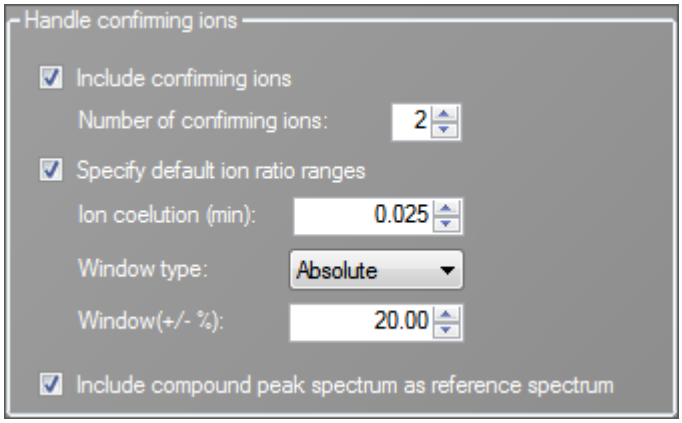
1. 在 Use These Libraries （使用这些库）框中，选择希望检索的库。

   仪器上加载的所有库显示在 Use These Libraries 框中。

2. 若要限制系统在所选库中检索质谱图时返回的匹配项数，在 Limit Library Hits （限值谱库匹配数）框中设置一个值。

3. 若要指定如何对库检索结果进行排序，在 Best Match Method （最佳匹配方法）列表框中选择一个值。

❖ **若要指定确认离子**



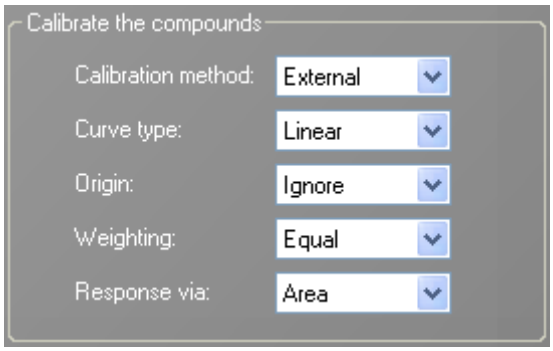
1. 若要设置确认离子的数量，选中 **Include Confirming Ions （包括确认离子）**复选框，并在 Number of Confirming Ions （确认离子数）框中设置一个值。

   此值是质谱图中其它离子的数量，与定量离子相比较得到其离子比率。使用此比率，即可确定它是目标化合物还是其它物质。该值默认为 **2**，因为用户通常使用一个定量质量离子和两个确认离子进行 3- 离子实验。

   系统将选择浓度最大的离子作为定量质量离子，并将此质量用于数学运算。

2. 若要定义评估确认离子或定性离子的标准，选择 **Specify Default Ion Ratio Ranges （指定默认离子比率范围）**复选框并设置下列值：
   a. 若要指定确认离子峰与定量离子峰的保留时间最大差值，在 Ion Coelution (min) 框中设置一个值。
   b. 若要指定用于确定可接受离子比率范围的绝对或相对计算方法，在 Window Type 列表中选择 **Absolute** 或 **Relative**。
   c. 若要指定可接受离子比率范围，在 Window (+/- %) 框中设置一个值。
3. 若要在处理方法中包括峰质谱图，选择 **Include Compound Peak Spectrum as Reference Spectrum （包括化合物峰质谱图作为参考质谱图）**复选框。

❖ **若要校正化合物**

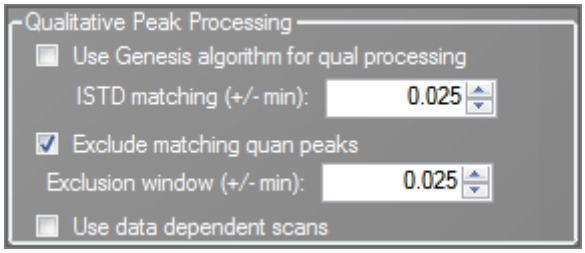


1. 在 Calibration Method （校正方法）列表中选择 **Internal** 或 **External**。
2. 在 Curve Type 列表中选择下列项之一：
   - Linear：所有其它设置均可用，仅下列设置例外：当在 Origin 列表中选择了 Include 时，除 Equal 之外的所有加权值均不可用。
   - Quadratic：所有其它设置均可用，仅下列设置例外：当在 Origin 列表中选择了 Include 时，除 Equal 之外的所有加权值均不可用。
   - Average RF: Weighting 或 Origin 列表中无可用选项。 Weighting 列表设置为 Equal，Origin 列表设置为 Ignore。
3. 在 Origin 列表中选择下列项之一：
   - Ignore: 指定当生成曲线时不将原点包括为校准曲线的有效点。当选择 Ignore 时，校正曲线不一定经过原点。
   - Force：指定当校正曲线生成时校正曲线经过数据点图的原点。
   - Include：指定在计算校正曲线时将原点包括为单个数据点。当选择 Include 时，校正曲线不一定经过原点。
4. 在 Weighting 列表中选择下列项之一：
   - Equal：指定在计算校正曲线时将原点包括为单个数据点。当选择 Equal 时，校正曲线不一定经过原点。
   - 1/X：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/X。校正物的权重为其数量的倒数。
   - 1/X^2：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/X^2。校正物的权重为其数量的平方的倒数。

- 1/Y：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/Y。校正物的权重为其响应值 （或响应比率）的倒数。
- 1/Y^2：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/Y^2。校正物的权重为其响应值 （或响应比率）的平方的倒数。

5. 在 Response Via 列表中，选择 **Area （峰面积）**或 **Height （峰高）**。
   - Area：指定 TraceFinder 应用程序在响应计算中使用该面积值。
   - Height：指定应用程序在响应计算中使用此高度值。

❖ 若要指定定量峰处理



1. 选中 **Use Genesis Algorithm for Qual Processing （采用 Genesis 算法进行定性处理）**复选框，并指定内标配置的值。

   应用程序采用 Genesis 算法在指定值的加 / 减范围内匹配内标。有 Genesis 算法的更多信息，参阅第 71 页的 “Genesis 检测方法 ”。

   仅当 Find the Peaks 中的 Sensitivity 参数被设为 ICIS 时，这个参数可用。

2. 选中或清除 **Exclude Matching Quan Peaks （排除匹配定量峰）**复选框，并指定排除窗口值。

   应用程序在指定值的加 / 减范围内排除定量峰。

3. 若要处理包括数据依赖扫描的样品，选中 **Use Data Dependent Scans （使用数据依赖扫描）**复选框。

   当采用该特性处理样品时，应用程序使用 TIC 图找到所有的数据依赖全扫描，并将其列出，然后根据数据依赖 MS/MS 或 MS^n 扫描执行库检索。

   除显示峰信息以外， TIC Report （总离子流图报告）和 TIC Summary Report （总离子流图总结报告）还显示数据依赖过滤数据的信息。参阅附录 A, “ 报告。 ”

❖ 若要为方法输入注释

在 Notes 框中键入文本或使用 CTRL+V 键从其它应用程序中粘贴文本。

可以在方法模板中添加注释，使其区别于其他模板。

❖ 若要保存方法模板

1. 从 Method Template Editor 菜单中选择 **File > Save**。

   Save Method Template （保存方法模板）对话框打开。

2. 执行下列操作之一：

   输入主方法的新名称，然后点击 **OK**。

– 或 –

选择要覆盖的方法名称，然后点击 **Overwrite**。

TraceFinder 应用程序将新方法模板保存在下列文件夹中：

…\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Templates\Methods

图 55. Method Template Editor 对话框

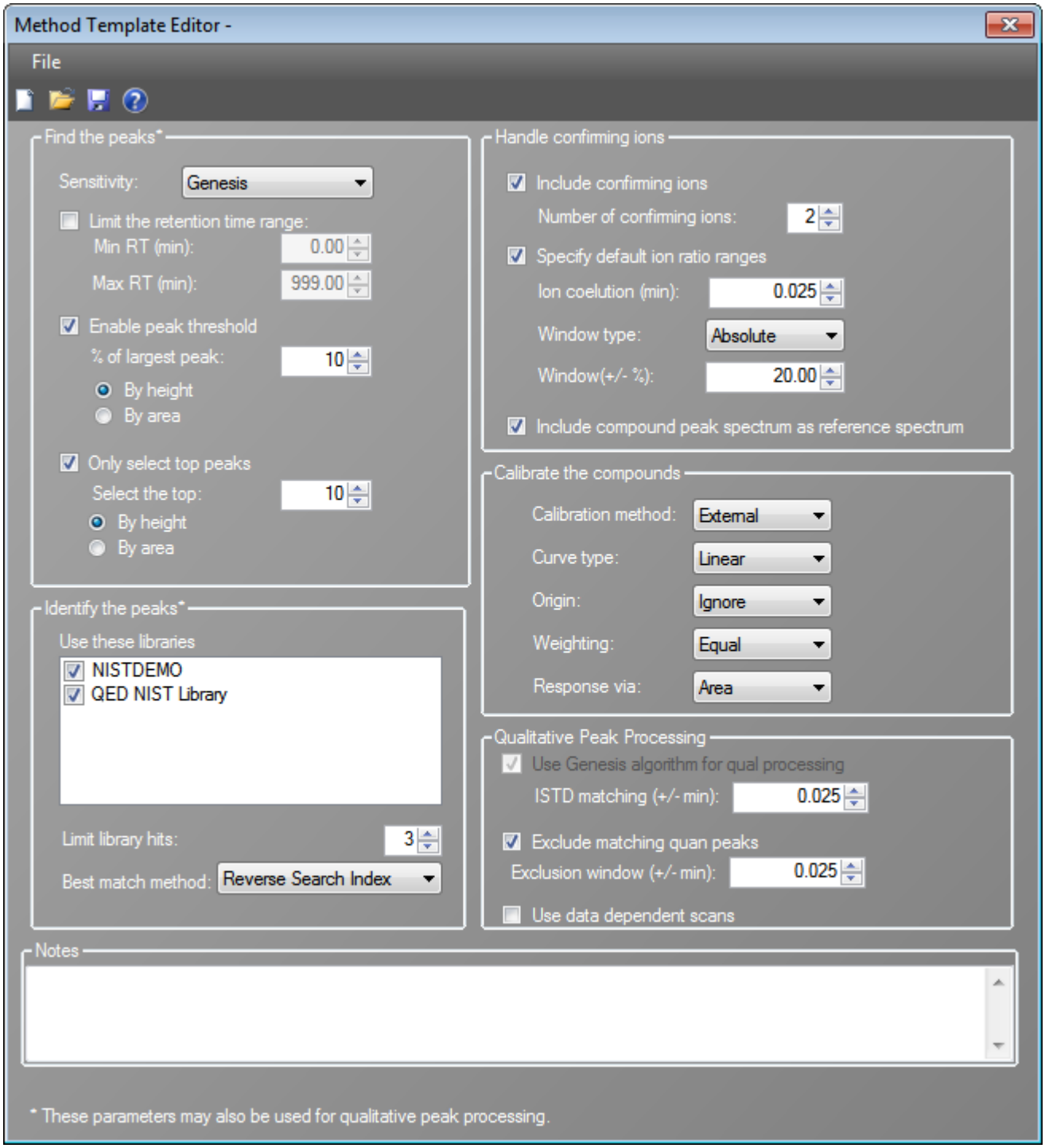


表 49. Method Template Editor 对话框参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Find the Peaks （查找峰）	
Sensitivity （灵敏度）	定义峰检测器算法搜索低水平峰的范围。
Limit the Retention Time Range （限制保留时间范围）	Min RT 指定了范围的开始。 Min RT 指定了范围的结束。
Enable Peak Threshold （启用峰阈值）	指定是否通过相对峰高或峰面积以及将确定化合物选择的最高峰百分比来选择峰。
Only Select Top Peaks （仅选择最高峰）	显示通过峰高或峰面积确定的最高峰的具体数量。
Identify the Peaks （识别峰）	
Use These Libraries （使用这些库）	列出可检索的库。
Limit Library Hits （限制谱库匹配数）	指定系统在所选库中搜索质谱图时返回的匹配项数。
Best Match Method （最佳匹配方法）	指定库搜索的排序方式。 有效值：Search Index （检索索引）、 Reverse Search Index （逆向检索索引）、 Match Probability （匹配概率）
Handle Confirming Ions （处理确认离子）	
Include Confirming Ions/Number Of Confirming Ions （包括确认离子 / 确认离子数）	指定确认离子的数量，通过确认离子与定量离子的比率来识别化合物。 该值默认为 2，因为用户通常使用一个定量质量离子和两个确认离子进行 3- 离子实验。
Specify Default Ion Ratio Ranges （指定默认离子比率范围）	启用离子比率范围功能。 Ion Coelution 指定了确认离子峰与定量离子峰的保留时间最大差值。 Window Type 指定了可接受离子比率范围的 Absolute 或 Relative 计算方法。 Window (+/-%) 指定了离子比率的可接受范围。
Include Compound Peak Spectrum as Reference Spectrum （包括化合物峰质谱图作为参考质谱图）	在处理方法中包括峰质谱图。使用该设置在 Data Review 模式下进行质谱图比较。
Calibrate the Compounds （校正化合物）	
Calibration Method （校正方法）	指定一个内标或外标校准方法。
Curve Type （曲线类型）	指定一个线性、二次方或平均 RF 曲线类型。

表 49. Method Template Editor 对话框参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Origin （原点）	指定在生成校正曲线时忽略、强制经过还是包括原点。 • Ignore：指定当生成曲线时不将原点包括为校正曲线的有效点。当选择 Ignore 时，校正曲线不一定经过原点。 • Force：指定当校正曲线生成时校正曲线经过数据点图的原点。 • Include：指定在计算校正曲线时将原点包括为单个数据点。当选择 Include 时，校正曲线不一定经过原点。
Weighting （加权）	指定校正数据点的权重。 • Equal：指定在计算校正曲线时将原点包括为单个数据点。当选择 Equal 时，校正曲线不一定经过原点。 • 1/X：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/X。校正物的权重为其数量的倒数。 • 1/X^2：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/X^2。校正物的权重为其数量的平方的倒数。 • 1/Y：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/Y。校正物的权重为其响应值 （或响应比率）的倒数。 • 1/Y^2：指定在校正曲线的最小二乘回归计算中所有校正数据点的权重为 1/Y^2。校正物的权重为其响应值 （或响应比率）的平方的倒数。
Response Via （响应方式）	指定 TraceFinder 应用程序在响应计算中是否使用峰面积或峰高。 • Area：指定应用程序在响应计算中使用此峰面积值。 • Height：指定应用程序在响应计算中使用此峰高度值。
Qualitative Peak Processing （定性峰处理）	
Use Genesis Algorithm For Qual Processing （采用 Genesis 算法进行定性处理）	应用程序采用 Genesis 算法来匹配内标。
ISTD Matching （内标匹配）	排除在方法中找到的目标化合物，并且不在 TIC Report 或 Data Review 模式的 Qual Mode （定性模式）视图中列出这些化合物。
Exclude Matching Quan Peaks （排除匹配定量峰）	将方法中内标的保留时间与库检索中找到的内标保留时间进行比较，排除 Exclusion Window 范围外的峰。
Exclusion Window （排除窗口）	定义一个范围加 / 减指定 Exclusion Window 值。
Use Data Dependent Scans （使用数据依赖扫描）	将 Data Review 中的 Qual Mode 视图仅限定为数据依赖扫描质谱图。参阅第 340 页的 “Qual Mode”。除显示峰信息以外， TIC Report 和 TIC Summary Report 还显示数据依赖过滤数据的信息。

导入已发布的主方法

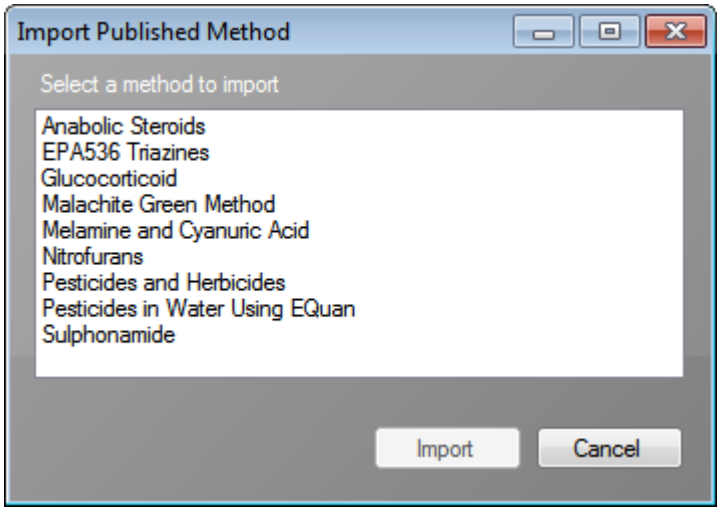
在 TraceFinder 应用程序中可以导入已发布的方法用于检测、处理和报告。 TraceFinder 安装提供已发布方法的以下文件夹：

…\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Published Master Methods

❖ 若要导入已发布主方法

1. 在 Method View 任务窗口中，单击 **Import Published Method**。

   Import Published Method 对话框显示。



2. 选择要导入的方法。
3. 单击 **Import （导入）**。

   应用程序报告方法已成功导入，并将方法保存在以下文件夹中：

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods

   可以使用任意 Open Method 命令打开这个方法，正如打开创建的方法。

导出 SRM 数据

在 TraceFinder 应用程序中，可将选择反应监测 （SRM）数据导出为 XML 文件。仅当在 Configuration 模式中启用 Compound Datastore 选项时，Export SRM Data 页面才显示。参阅 第 83 页的 “Compound Datastore （化合物数据库） ”。

❖ 若要将 SRM 数据导出为 XML 文件

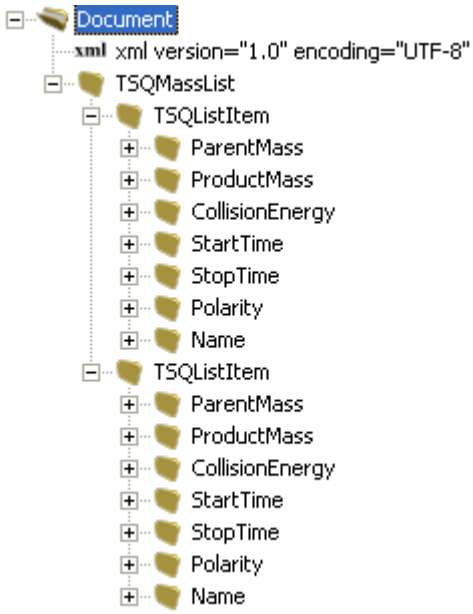
1. 打开希望导出 SRM 数据的主方法。
2. 从 Method View 任务窗口，点击 **Export SRM Data**。

   TraceFinder 应用程序将 SRM 表中的数据写至下列文件：

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Methods*methodname*.xml

   该文件中的数据符合 TSQ .xml 数据格式，可用于 TSQ 应用程序中的仪器方法编辑器。

图 56. SRM TSQ Quantum 示例



使用仪器方法

仪器方法是一组实验参数，用于定义自动进样器和质谱仪等装置的运行设置。仪器方法保存为 .meth 文件类型。

重要信息 当 TraceFinder 应用程序运行时，不要打开 Thermo Foundation Instrument Configuration （仪器配置）窗口。

按照如下步骤进行操作：

- 若要打开 Instrument View
- 若要创建新仪器方法
- 若要创建新多通道仪器方法
- 若要打开仪器方法
- 若要导入仪器方法

❖ 若要打开 Instrument View

1. 在主菜单或导航窗格中点击 **Method Development**。

Method Development 导航窗口显示。

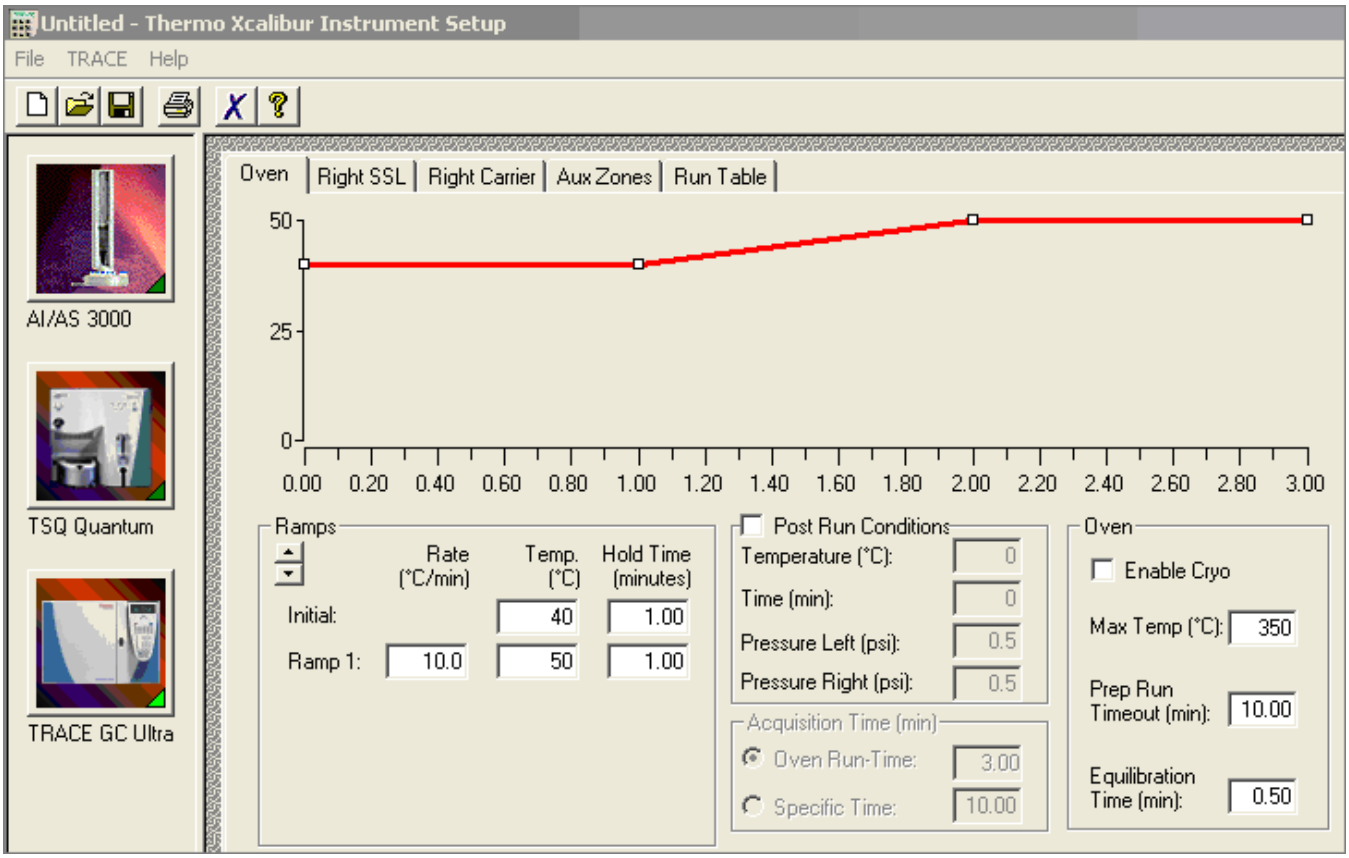
2. 单击 **Instrument View** 任务窗格。

❖ 若要创建新仪器方法

1. 在 Instrument View 任务窗格中，点击 **New Instrument Method**。

   Thermo Xcalibur Instrument Setup 窗口打开。

   图 57. 仪器设置示例显示多个已配置仪器。

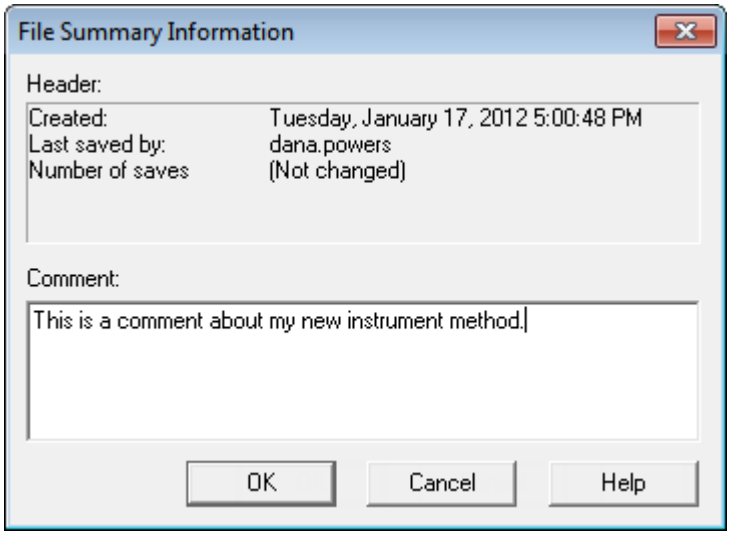


2. 点击用于方法的仪器的图标。
3. 编辑仪器页面上的值。
4. 从 Thermo Xcalibur Instrument Setup 窗口的主菜单中选择 **File > Save As**。

   Save As 对话框打开。

5. 选中需覆盖的仪器方法名称或未该仪器方法输入一个新名称，然后点击 **Save**。

   File Summary Information （文件总结信息）对话框打开。



6. （可选）输入有关新仪器方法的注释。
7. 点击 **OK**。

   TraceFinder 应用程序将新仪器方法保存在下列文件夹中：

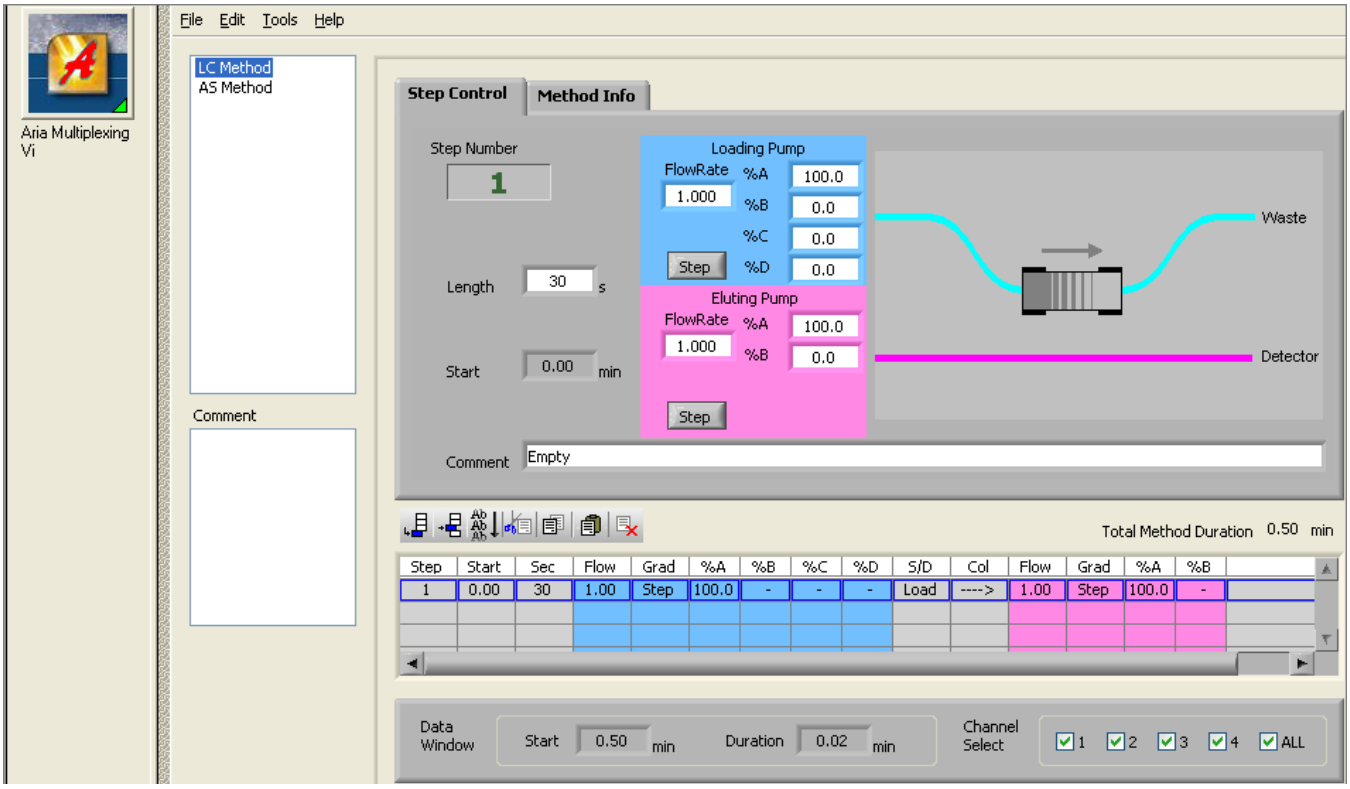
   …\Xcalibur\methods

❖ 若要创建新多通道仪器方法

1. 在 Instrument View 任务窗格中，点击 **New Instrument Method**。

   Thermo Xcalibur Instrument Setup 窗口打开。

   图 58. 仪器设置示例显示已配置的多通道仪器



2. 点击用于方法的仪器的图标。
3. 编辑仪器方法页面上的值。

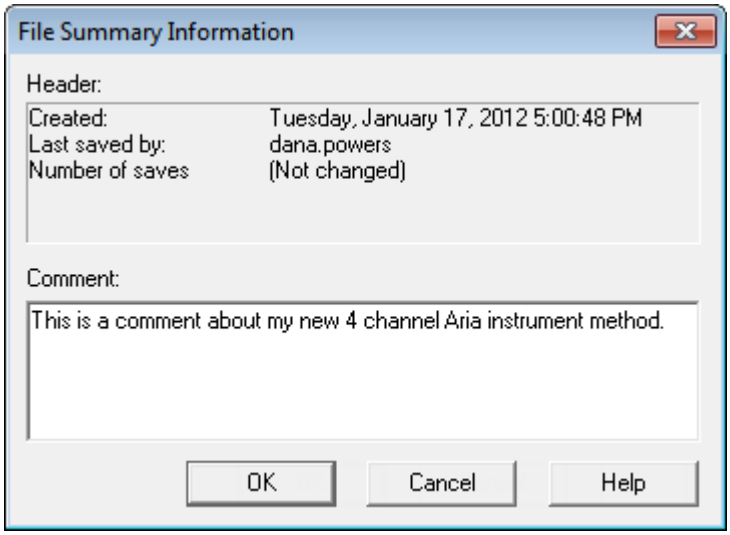
   有关指定多通道值的信息，参阅多通道仪器的文档。
4. 指定用于采集的通道。例如：

5. 从 Thermo Xcalibur Instrument Setup 窗口的主菜单中选择 **File > Save As**。

   Save As 对话框打开。

6. 选中需覆盖的仪器方法名称或未该仪器方法输入一个新名称，然后点击 **Save**。

   File Summary Information 对话框打开。



7. （可选）输入有关新仪器方法的注释。
8. 点击 **OK**。

   TraceFinder 应用程序将新仪器方法保存在下列文件夹中：

   …\Xcalibur\methods

❖ 若要打开仪器方法

1. 在 Instrument View 任务窗口中，点击 **Open Instrument Method**。

   仪器方法浏览器打开。

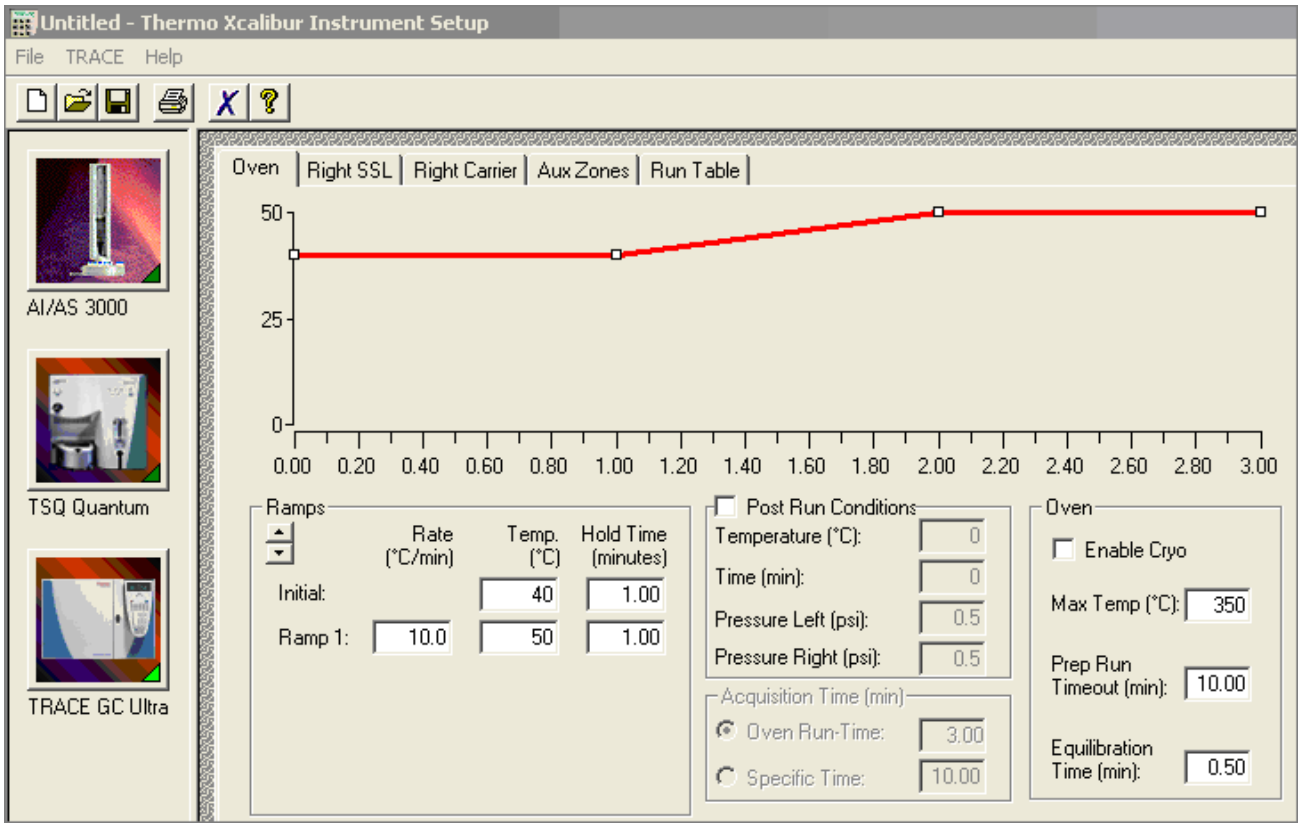
2. 在浏览器中，进行下列操作之一：

   - 从列表选择仪器方法，然后点击 **Open**。
   - 单击 **Xcalibur Instrument Method**，从最近方法列表选择一个方法，并单击 **Open**。

   所选方法在 Thermo Xcalibur Instrument Setup 窗口中打开。可以编辑该方法并保存更改，也可将其保存为其它名称。

注释 若要打开已配置的任何仪器的 Help （帮助），点击该仪器页面上的 **Help**。

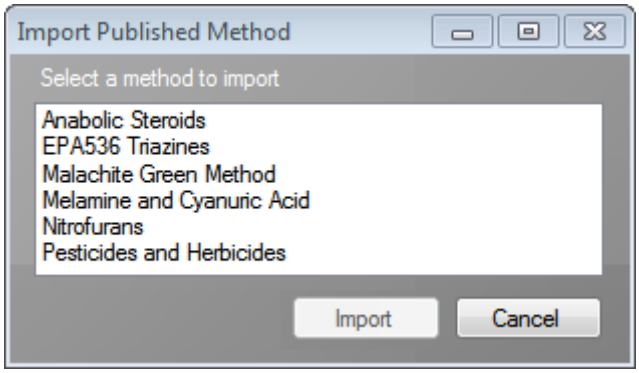
图 59. 仪器设置示例显示多个已配置仪器



❖ 若要导入仪器方法

1. 在 Instrument View 任务窗格中，点击 **Import Published Method**。

   Import Published Method 对话框显示。该对话框列出了 Published Master Methods （已发布主方法）文件夹下的主方法。可以导入与已发布主方法相关的仪器方法。

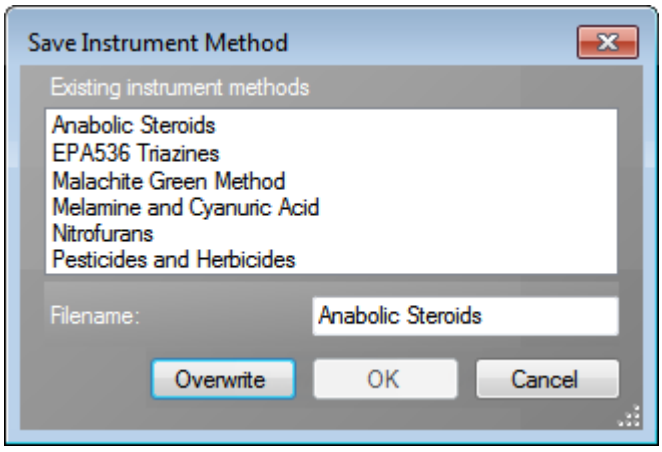


2. 选中包括希望导入的仪器方法的方法。

   有关导入主方法的说明，参阅第 199 页的 “ 导入已发布的主方法 ”。

3. 单击 **Import**。

   Save Instrument Method （保存仪器方法）对话框显示。



4. 执行下列操作之一：

   输入仪器方法的新名称，然后点击 **OK**。

   – 或 –

   选择要覆盖的仪器方法名称，然后点击 **Overwrite**。

   应用程序会报告方法导入成功。

可以使用任意 Open Instrument Method 命令来打开这个方法，正如打开创建的仪器方法。

使用开发批次

在 Development Batch 视图中，可以通过创建并采集测试样品来实时测试仪器方法。开发批次可用于测试各种仪器方法并优化参数（例如 MS 源参数和自动进样器变量）以查找适合主方法的最佳条件。开发批次的设计目的不在于完成高通量的日常分析。

本部分包括对下列任务的说明：

- 创建开发批次
- 编辑开发批次中的样品
- 采集开发批次中的样品
- 在 Qual Browser 中查看原始数据文件

创建开发批次

创建开发批次以测试仪器方法，并利用该方法仅采集样品一次。无法保存开发批次；可以保存采集批次中样品时创建的原始数据文件。

按照如下步骤进行操作：

- 若要打开 Development Batch 视图
- 若要为开发批次数据指定位置
- 若要将样品添加到开发批次中
- 若要将样品插入到开发批次中
- 若要复制样品

❖ 若要打开 Development Batch 视图

1. 在主菜单或导航窗格中点击 **Method Development**。

Method Development 导航窗口显示。

2. 在 Method Development 导航窗格中，点击 **Development Batch**。

Development Batch 视图会打开一个新的空白批次。

Development Batch - [C:\Thermo\TraceFinder\2.1\...\Temp]

	Filename	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume	Instrument Method	Sample Volume	Dilution Factor	Sample Weight	Calculation Type	Final Units	Channel
▶ 1	Unknown1				1.0		1	1	1	Liquid		Channel 1

注释 仅当在 Configuration 模式中启用多通道时， Channel （通道）列才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道）”。

❖ 若要为开发批次数据指定位置

1. 若要为文件指定位置，点击 Development Batch 任务窗格中的 **Select Batch Location**。

   默认情况下，TraceFinder 应用程序会将临时文件、原始数据文件和 .sld 方法文件写入下列文件夹中：

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Temp

2. 在浏览器中，进行下列操作之一：

   找到要用于保存开发批次文件的文件夹并点击 **OK**。

   – 或 –

   创建一个新文件夹：

   a.找到并选择要为批次文件新建的文件夹所在的文件夹。

   b.点击 **Make New Folder （创建新文件夹）**。

   TraceFinder 应用程序即会在所选的文件夹内新建一个文件夹。

   c.右击该新文件夹的文件名，然后从快捷菜单中选择 **Rename （重命名）**。

   d.为该文件夹键入名称。

   e.点击 **OK**。

   TraceFinder 应用程序会在该指定的文件夹内创建所有的开发批次文件。

❖ 若要将样品添加到开发批次中

执行下列操作之一：

右击并从快捷菜单中选择 **Add Sample （添加样品）**。

– 或 –

若要添加多个样品行，输入行数目然后点击 **Add Sample** 图标。

应用程序将指定数量的新的空白样品添加至样品列表的末尾。

❖ 若要将样品插入到开发批次中

1. 选择要在哪一样品前插入空白样品。
2. 执行下列操作之一：

   右击并从快捷菜单中选择 **Insert Sample （插入样品）**。

   – 或 –

   若要插入多个样品行，输入行数目然后点击 **Insert Sample** 图标。

TraceFinder 应用程序会将新的空白行插入到所选样品上方。

注释 无法在空白批次中插入样品。在使用该图标前，必须已选中至少一个样品。

❖ **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 应用程序在所选样品上方添加样品的副本。

编辑开发批次中的样品

开发批次所需的参数比真实批次所需的参数少，但管理信息的机制是相同的。

关于使用 Copy Down 或 Fill Down （向下填充）命令来输入列的值的详细说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”

开发批次使用与 Batch View 中批次相同的快捷菜单功能。有关右击快捷菜单功能的详细说明，参阅第 277 页的 “Batch View 快捷菜单 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要输入列值
- 若要调整列尺寸或重新组织列
- 若要从列表中移除所选样品
- 若要从列表中移除所有样品

❖ **若要输入列值**

1. 双击 Filename （文件名）列并为原始数据文件输入文件名。
2. （可选）在 Sample Name （样品名称）或 Sample ID （样品标识号）列中输入值。
3. 为每个样品输入样品瓶位置。
4. 为每个样品输入进样体积。

   允许的最小进样体积值为 0.1 µL ； 允许的最大进样体积值为 5000 µL。
5. 若要为每个样品输入仪器方法，点击 Instrument Method 列中的向下箭头，然后从列表中选择一个方法。

   此列表包含所有可用的仪器方法。
6. 若要为每个样品输入通道，点击 Channel 列中的向下箭头，然后从列表中选择一个通道。

   无法早开发批次中指定自动通道选择。

   注释 仅当在 Configuration 模式中启用多通道时， Channel 列才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。

图 60. 已完成的开发批次

Development Batch - [C:\Thermo\TraceFinder\2.1\...\Temp]

	Filename	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume	Instrument Method	Sample Volume	Dilution Factor	Sample Weight	Calculation Type	Final Units	Channel
1	File1	1		1	10.0	Anabolic...	1	1	1	Liquid		Channel 1
2	File2	2		2	10.0	Anabolic...	1	1	1	Liquid		Channel 1
3	File3	3		3	10.0	Anabolic...	1	1	1	Liquid		Channel 1
4	File4	4		4	10.0	Anabolic...	1	1	1	Liquid		Channel 1

❖ 若要调整列尺寸或重新组织列

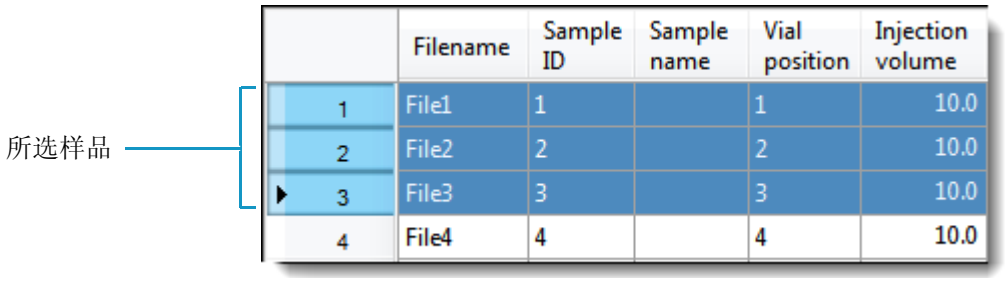
1. 若要调整列的大小，拖动列右侧的标题分隔线。
2. 若要移动列，拖动列标题。

   Filename 列无法移动。

❖ 若要从列表中移除所选样品

1. 选择要移除的样品。

   使用首列以确保样品被选中。



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

❖ 若要从列表中移除所有样品

1. 在 Development Batch 任务窗格中，点击 **New Sample List**。

   会出现下列情况之一：

   - 若当前批次中的样品均已采集，则会清除该列表。
   - 若当前批次中的样品尚未采集，则会出现一则消息，询问您是否要清除它们并创建新列表。

2. 若要创建新的空白列表，点击 **Yes**。

注释 在创建一个新开发批次时无法保存该批次；只可以创建，采集，然后在使用后将其删除。 TraceFinder 应用程序仅将生成的原始文件保存在指定的批次位置。

采集开发批次中的样品

在开发批次中，您既可以提交整个批次供采集，也可以仅提交选定的样品。

按照如下步骤进行操作：

- 若要采集所选样品
- 若要采集批次

❖ 若要采集所选样品

1. 选择要采集的批次。
2. 右击并在快捷菜单中选择 **Submit Selected Samples （提交所选样品）**。

   或点击 **Submit Selected Samples** 图标， 。

   TraceFinder 应用程序会为所选的每个样品创建一个原始数据文件。它将原始数据文件和所有的临时工作文件写入到下列文件夹中：

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Temp

   当采集完成时，应用程序会删除所有的临时工作文件。仅原始数据文件和 MethodDevelopment.sld 文件保留在文件夹中。

   若多次采集某个样品，应用程序以采集时间对后续的原始数据文件打上时间戳。

❖ 若要采集批次

右键单击并从快捷菜单中选择 **Submit Batch （提交批次）**。

或者点击 **Submit Batch** 图标， 。

TraceFinder 应用程序为批次中的每个样品创建一个原始数据文件和一个 .sld 方法文件。TraceFinder 将原始数据文件、 .sld 方法文件和所有的临时工作文件写入指定的文件夹中。

当采集完成时，应用程序会删除所有的临时工作文件。仅原始数据文件和 MethodDevelopment.sld 文件保留在文件夹中。

若多次采集某个样品，则采用采集时间对后续的原始数据文件打上时间戳。

在 Qual Browser 中查看原始数据文件

可以查看开发批次中已完成样品的色谱图和质谱图。

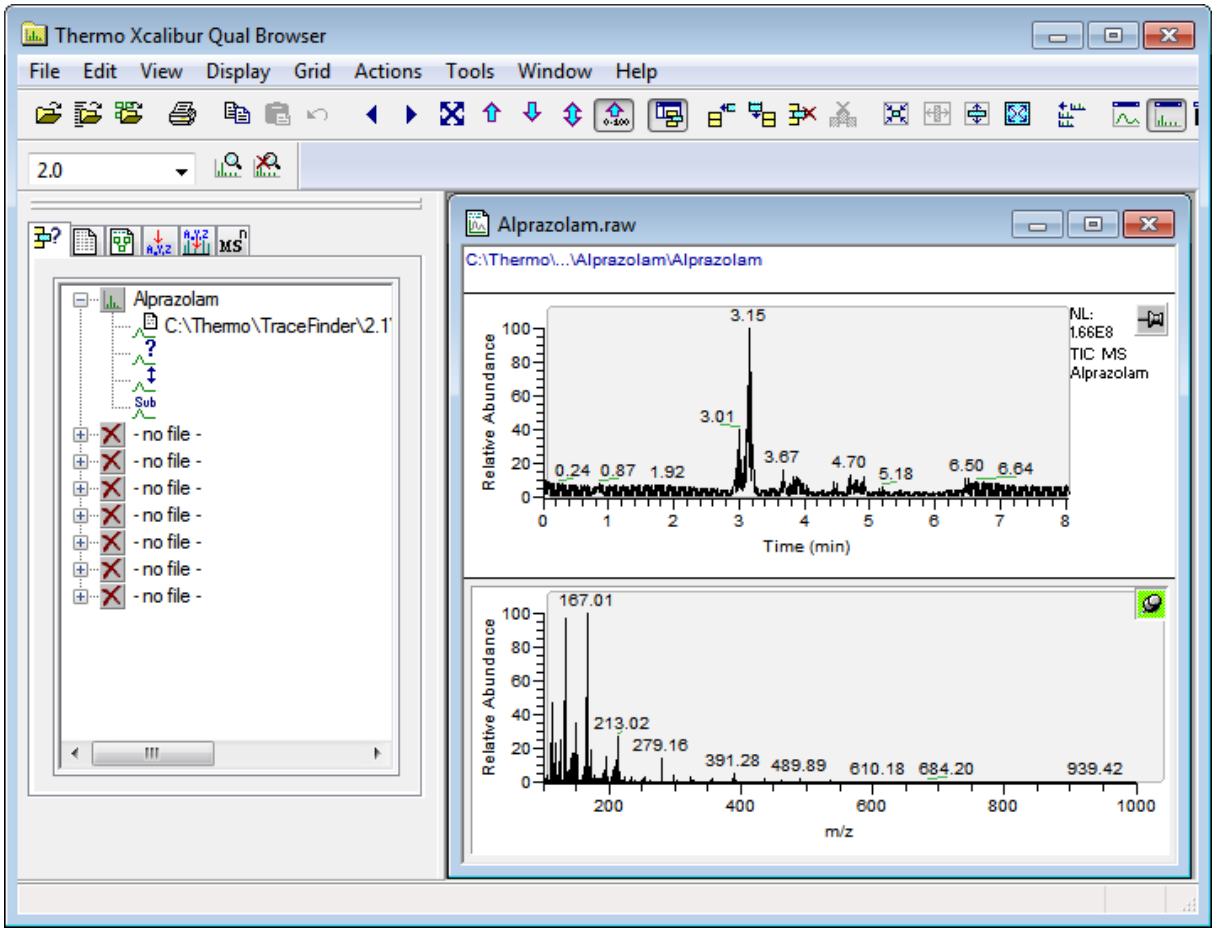
按照如下步骤进行操作：

- 若要打开 Qual Browser
- 若要在 Qual Browser 中显示最后完成的原始数据文件

❖ 若要打开 Qual Browser

在 Development Batch 任务窗格中，点击 **Open Qual Browser**。

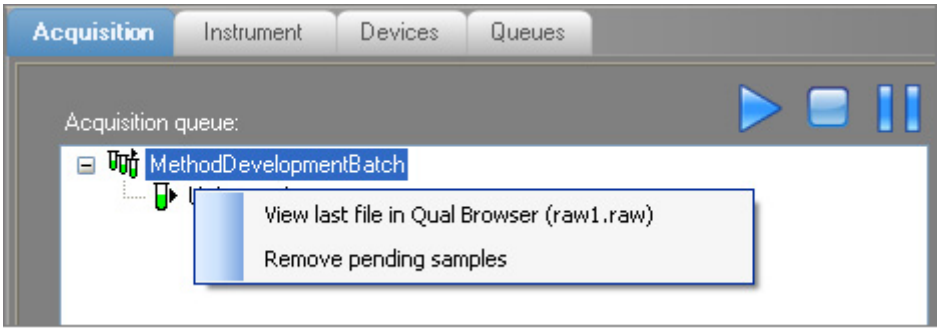
Thermo Xcalibur Qual Browser 窗口打开。



有关使用 Qual Browser 的详细说明，参阅 Qual Browser 的帮助。

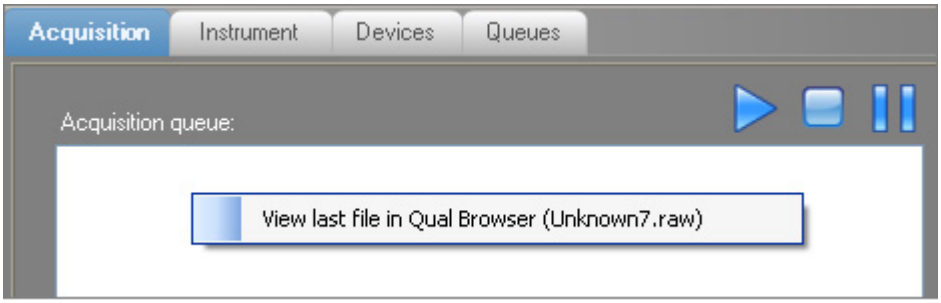
❖ **若要在 Qual Browser 中显示最后完成的原始数据文件**

在实时查看器的 Acquisition 页面中，右击并从快捷菜单中选择 **View Last File in Qual Browser （在定量浏览器中查看上一次的文件）**。



最后完成的文件显示在 Qual Browser 中。

当所有样品完成后，可以查看该批次最后的原始数据文件。



使用快速采集

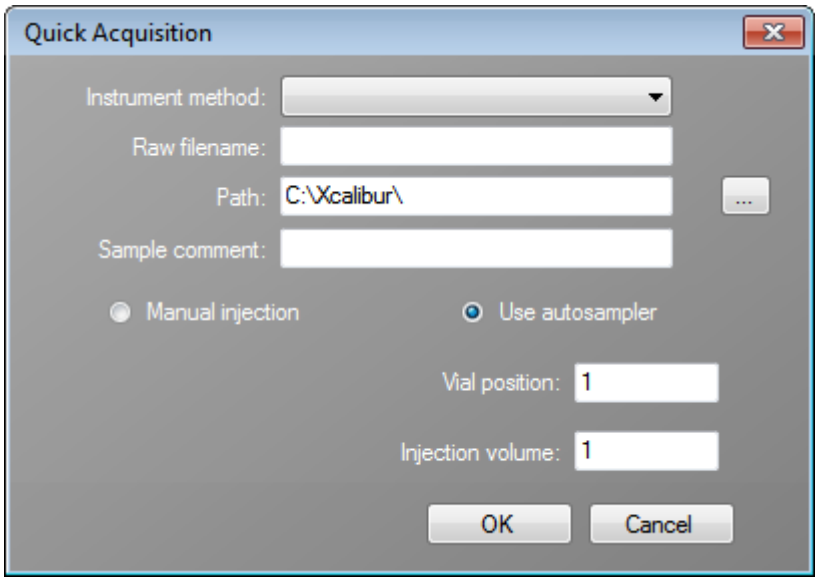
可以使用快速采集特性快速从 Method Development 模式下的任意视图提交单个样品。

注释 仅当在 Configuration 模式中启用时， Quick Acquisition 特性才可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

❖ 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。



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。

   若要指定手动进样，执行以下操作：

   a. 选中 **Manual Injection** 选项。

   b. 点击 **OK**。

      应用程序将样品提交至 Acquisition 序列。参阅第 249 页的 “Acquisition 页面 ”。

   若要执行自动进样器进样，执行以下操作：

   a. 选中 **Use Autosampler** 选项。

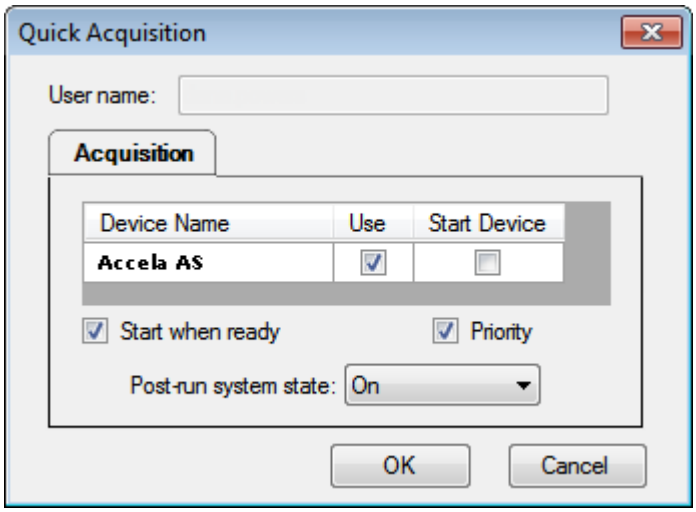
   b. 在 Vial Position 框中键入样品瓶位置。

   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. 点击 **OK**。

      Quick Acquisition 对话框打开。



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。

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。

h. （可选）选中 **Priority （优先）**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 （后运行系统状态）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. 点击 **OK**。

应用程序将样品提交至 Acquisition 序列。参阅第 249 页的 “Acquisition 页面 ”。

使用 Acquisition 模式

本章介绍与 Acquisition （采集）模式相关的任务。

仅当在 Configuration （配置）模式中显示选中 Acquisition Batch Wizard （采集批次向导）时该模式才可用。参阅第 85 页的 “Batch Wizard Style （批次向导风格） ”。

目录

- 使用批次
- 使用快速采集
- 实时显示
- 样品类型

当计划运行多个样品或使用设计相似的批次时，通过 Acquisition 模式可以减少必须的数据输入量。

因为批次的性质和类型通常很相似 （在某些情况下由实验室标准操作程序指定），批次模板可定义为提供批次的基本结构。

注释 当用户安全启用时，仅 LabDirector （实验室主任）或 Supervisor （主管）职务下的用户才可以创建批次模板。

如果有主方法，就可以创建批次并运行样品。批次代表一个或多个待采集、处理、检查和出报告的样品。创建样品批次后，就可以提交批次并在 Analysis （分析）模式下检查结果，也可以直接查看并打印报告。

也可以设置目标化合物已知浓度的校正批次，以便与未来批次中样品的校正值进行比较。

也可以使用 Quick Acquisition （快速采集）特性快速从 Acquisition 模式下的任意视图提交单个样品。参阅第 246 页的 “ 使用快速采集 ”。

使用批次

本部分包括对下列任务的说明：

- 打开和浏览采集模式
- 创建批次

打开和浏览采集模式

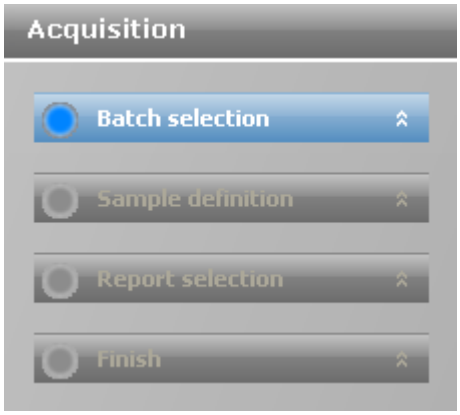
❖ **若要访问 Acquisition 模式**

从主菜单或导航窗格点击 **Acquisition**。

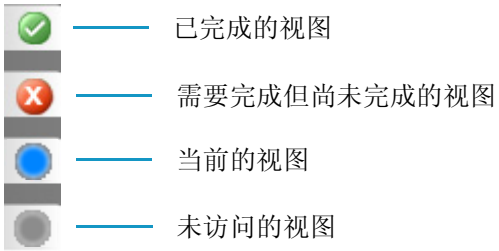
Acquisition 模式导航窗格打开。

TraceFinder 应用程序在数据采集模式下使用导航窗口的方式不同于在其它模式下使用导航窗口的方式。在 Acquisition 模式中，该窗格可在用户查看视图以创建和提交批次或批次模板时追踪进度。

图 61. 进入 Acquisition 模式时的任务窗格

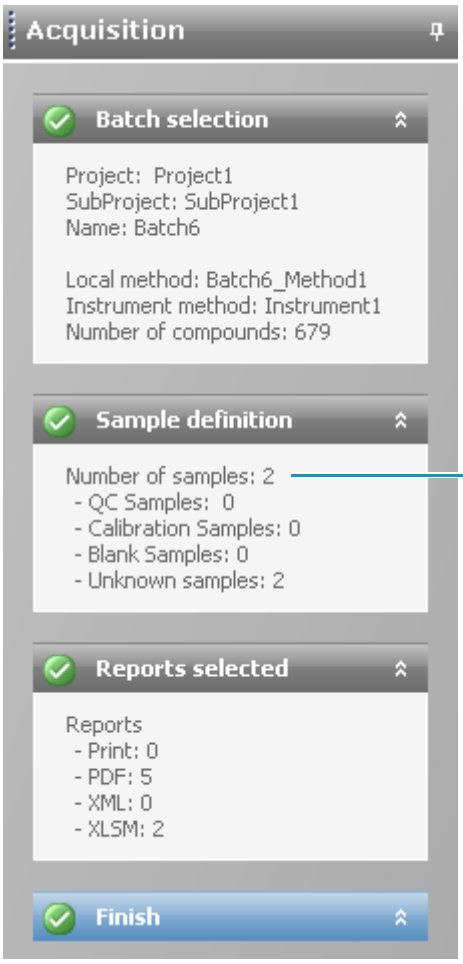


Acquisition 模式中每个视图的状态栏显示哪些任务已完成、哪些任务未完成。



当完成每一个视图时，任务窗口会显示为批次指定的参数。

图 62. 完成 Acquisition 模式后的任务窗格示例



Sample Definition （样品定义）列表目录：

QC Samples （QC 样品）：
QC （质控）

Calibration Samples （校正样品）：
Calibrator （校正品）

Blank Samples （空白样品）：
Negative （阴性）

Unknown Samples （未知样）：所有其他样品

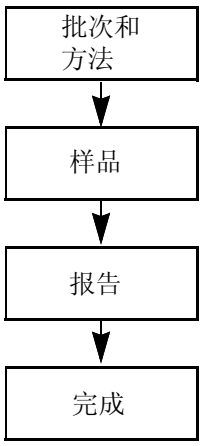
创建批次

若要创建批次，在 Acquisition 模式中执行如下主要步骤：

1. 选择批次
2. 定义样品列表
3. 选择和检查报告
4. 提交批次

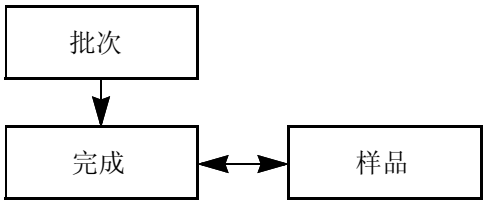
以下工作流程展示了批次创建方法所需的不同的 Acquisition 视图。根据创建批次的方式的不同，可以使用下面的一种特定工作流程。

❖ **若要创建原始批次**



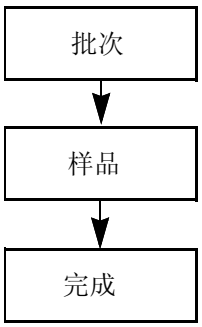
若要创建原始批次，从说明第 222 页的 “ 若要创建新批次 ”开始。

❖ **若要采集先前保存的 (.tbr) 批次**



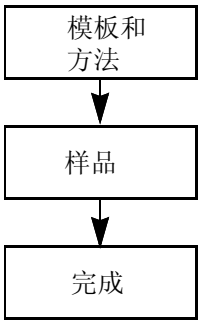
若要采集先前保存的批次，从说明第 224 页的 “ 若要选择准备采集批次 ”开始。

❖ **若要编辑和处理先前采集的批次**



若要处理先前采集的批次，从说明第 225 页的 “ 若要选择先前采集的批次 ”开始。

❖ **若要创建批次模板**



注释 当用户安全启用时，该工作流程仅对 LabDirector 或 Supervisor 职务的用户可用。

若要创建批次模板，从第 226 页的 “ 若要创建批次模板 ”说明开始，然后点击 Finish（完成）页面上的 **Save （保存）**。

选择批次

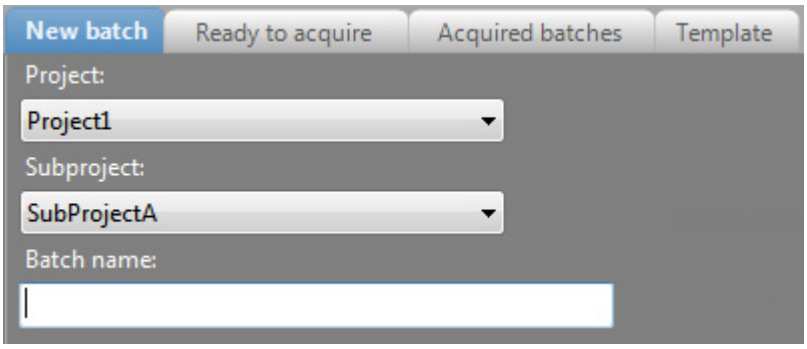
在 Acquisition 模式的 Template Selection （模板选择）视图中，可以选择在任意当前项目 / 子项目中创建新批次。

按照如下步骤进行操作：

- 若要创建新批次
- 若要使用模板创建新批次
- 若要选择准备采集批次
- 若要选择先前采集的批次
- 若要创建批次模板

❖ 若要创建新批次

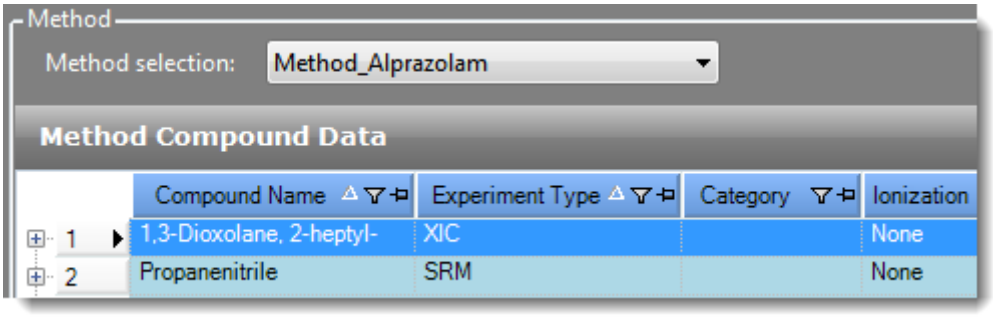
1. 单击 **New Batch （新批次）**选项卡。
2. 选择要创建的新批次所在的项目和子项目。
3. 在 Batch Name （批次名称）框中为新批次输入名称。



如果输入的名称不是唯一，红色警告框闪现。

4. 从 Method Selection （方法选择）列表中选择一个方法。

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。



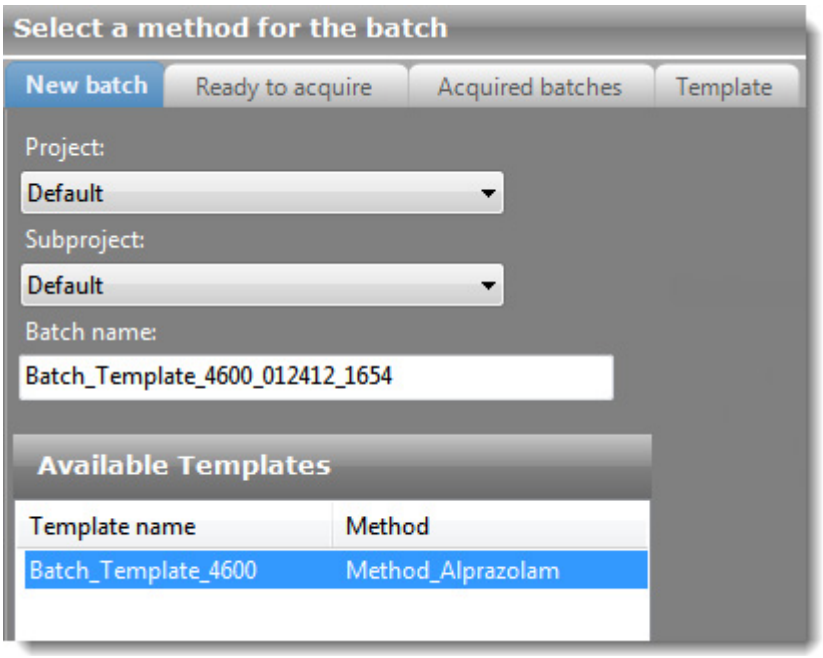
5. 若要继续到下一个视图，点击 **Next （下一步）**。

Sample Definition 视图打开。参阅第 227 页的 “ 定义样品列表 ”。

❖ 若要使用模板创建新批次

1. 单击 **New Batch** 选项卡。
2. 在 Available Templates （可用模板）窗格中选择要采用的模板和方法组合。

   系统会使用所选的模板名称和日期 / 时间戳创建批次名称。可以更改与该模板相关的默认项目、子项目和方法。
3. （可选）选择在不同项目和子项目内创建新批次。



4. （可选）为新批次选择不同方法。
5. 若要继续到下一个视图，点击 **Next**。

   Acquisition 模式的 Sample Definition 视图打开。参阅第 227 页的 “ 定义样品列表 ”。

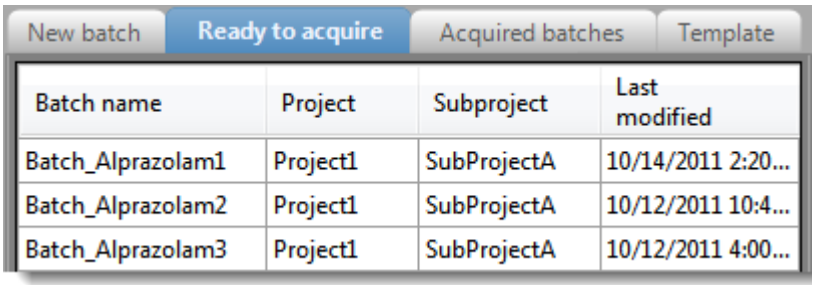
❖ 若要选择准备采集批次

1. 点击 **Ready to Acquire （准备采集）**选项卡。

   所有已保存但尚未采集的批次均会显示出来，其文件扩展名为 .tbr （待运行）。TraceFinder 应用程序会在下列文件夹内保存所有 .tbr 批次：

   …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Projects*projectname**subprojectname*

2. 选择要采集的批次。



3. 若要继续到下一个视图，点击 **Next**。

   Acquisition 模式的 Finish 视图打开。在 Finish 视图中，可以保存批次、提交待采集批次、或转至 Sample Definition 视图中编辑该批次的样品列表。

   - 如果批次不可读，应用程序报告该批次无效且无法打开。
   - 若批次中的某一样品不可读，应用程序无法打开该样品。应用程序以相同名称创建新样品，并标记该样品。必须填写如 Sample Type （样品类型）、 Level （水平）等缺失信息，然后在提交进行采集前保存批次。也可以浏览至一个新的原始数据文件以替换损坏文件。

4. 执行下列操作之一：

   - 若要准备待采集的批次，单击 **Submit （提交）**。

     有关详细说明，参阅第 238 页的 “ 提交批次 ”。

   – 或 –

   - 若要编辑样品列表，单击 **Previous （上一步）**。

     有关详细说明，参阅第 227 页的 “ 定义样品列表 ”。

   – 或 –

   - 若要保存批次至 Ready to Acquire 列表，单击 **Save**。

     TraceFinder 应用程序将批次保存为待运行 (.tbr) 文件，关闭 Acquisition 模式，并返回至应用程序主菜单。

     应用程序在下列文件夹内保存 .tbr 批次：

     …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Projects*projectname**subprojectname*

❖ 若要选择先前采集的批次

1. 单击 **Acquired Batches （已采集批次）**选项卡。

   在此页中，可以重新提交先前采集的批次、编辑该批次，或保存该批次以供以后采集。

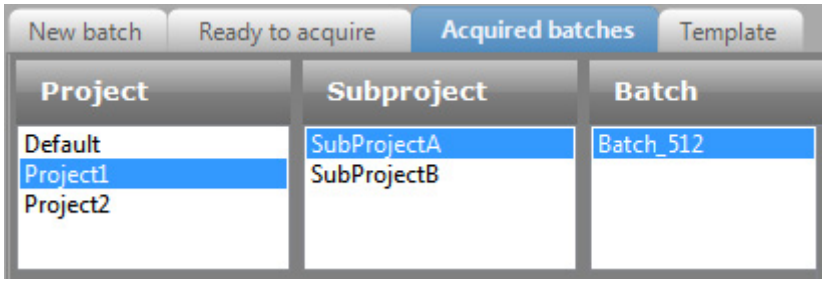
2. 在 Project （项目）窗格中，选择一个项目名称。

   所选项目中包括的所有子项目会显示在子项目窗口中。

3. 在 Subproject （子项目）窗口中，选择一个子项目名称。

   Batch （批次）窗格显示所选子项目中所有先前采集的批次。

4. 在批次窗口中，选择要重新采集的批次。



5. 若要继续到下一个视图，点击 **Next**。

   Acquisition 模式的 Sample Definition 视图打开。参阅第 227 页的 “ 定义样品列表 ”。

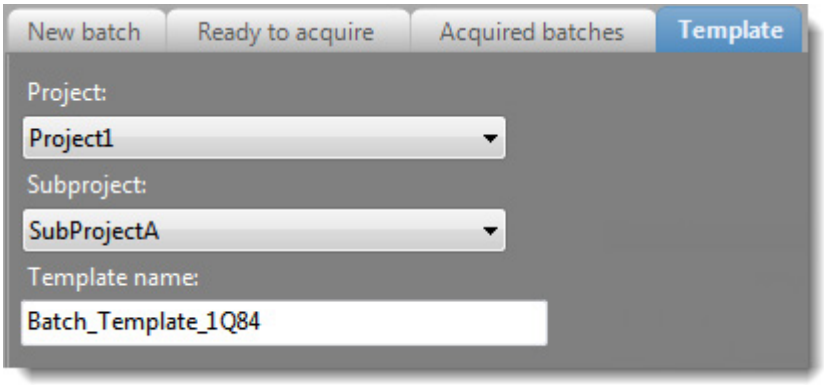
   - 如果批次不可读，应用程序报告该批次文件无效且无法打开。
   - 若批次中的某一样品不可读，应用程序以相同名称创建新样品，并标记该样品。必须填写如 Sample Type、 Level 等缺失信息，然后在提交进行采集前保存批次。也可以浏览至一个新的原始数据文件以替换损坏文件。

❖ 若要创建批次模板

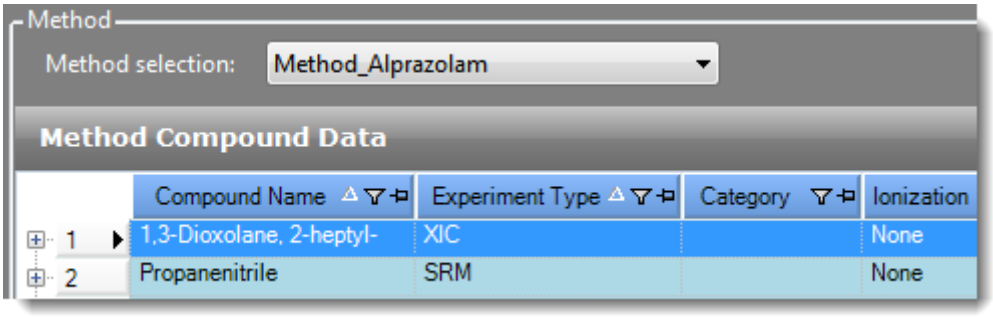
1. 点击 **Template （模板）**选项卡。

   注释 当用户安全启用时，该页面仅对 LabDirector 或 Supervisor 职务的用户可用。

2. 选择要创建的新批次所在的项目和子项目。
3. 在 Template Name （模板名称）框中为输入新批次模板的名称。



4. 从 Method Selection 列表中选择一个方法。
5. Method Compound Data 窗格显示该方法中的化合物。在数据采集模式下无法编辑化合物列表。



6. 若要继续到下一个视图，点击 **Next**。
7. Acquisition 模式的 Sample Definition 视图打开。参阅 “ 定义样品列表。 ”

定义样品列表

在 Acquisition 模式的 Sample Definition 视图上，可以创建批次的样品列表。可以添加样品、插入样品、导入样品列表或从列表中移除样品。若要创建样品列表，可以使用两组功能按钮之一 （在下图中说明）或者使用快捷菜单命令 （参阅第 233 页的 “Sample Definition 视图参数 ” 的 Shortcut Menu （快捷菜单）部分）。

当输入样品值时，可以使用 Copy Down （向下复制）和 Fill Down （向下填充）命令来输入列的值。有关使用 Copy Down 和 Fill Down 命令来输入列值的详细说明，参阅附录 B, “使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”

按照如下步骤进行操作：

- 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
- 若要重新进样先前采集批次中的样品
- 若要为批次选择通道
- 若要为样品分配特定通道

当完成样品列表的定义时，点击 **Next**。

- 如果是从草稿或模板创建批次，或者编辑批次模板，则会显示 Report Selection （报告选择）视图。参阅第 235 页的 “ 选择和检查报告 ”。
- 如果是编辑先前采集的批次或 .tbr 批次，则会显示 Finish Selection （完成选择）视图。参阅第 238 页的 “ 提交批次 ”。

❖ 若要将样品添加到列表中

1. 选择要添加的样品行数，然后点击 **Add （添加）**，

。
2. 在 Filename （文件名）列中为每个样品键入文件名。

   每个文件名必须唯一。
3. 从 Sample Type 框中为每个样品选择样品类型。

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）	

有关样品类型的详细说明，参阅第 261 页的 “ 样品类型 ”。

4. 为每个 Calibrator 或 QC 样品，从 Level 列表中选择一个水平。

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

   a. 返回方法开发模式。
   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 Analysis 模式，点击 **Update （更新）**。

   有关详细说明，参阅第 4 章 , “ 使用 Method Development 模式。 ”

5. 在 Vial Position （样品瓶位置）列中为每个样品输入样品瓶位置。

   提示 使用 Fill Down 命令简化样品瓶位置输入。

6. 在 Injection Volume （进样体积）列中为每个样品键入体积。

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

7. （可选）键入或编辑其它列的值。

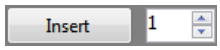
   注释 当使用样品列表底部的水平滚动条时， Status （状态）和 Filename、 Sample Type 和 Level 列将保持固定，其他列可左右滚动。

   有关在这些列中自动复制或填充值的说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”

❖ 若要在列表中插入样品

1. 选择要在其上方插入新的 specimen 的样品。

   无法使用 Insert （插入）命令来创建第一个样品行。

2. 选择要插入的样品数，然后点击 **Insert**， 

。

   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

3. 在 Filename 列中为每个样品输入文件名。

   每个文件名必须唯一。

4. 从 Sample Type 框中为每个样品选择样品类型。

   有关样品类型的详细说明，参阅第 261 页的 “ 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）	

5. 对于每个 Calibrator 或 QC 样品，从列表单击 Level 单元格并选择一个水平。

   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，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，参阅第 4 章 , “ 使用 Method Development 模式。 ”

6. 在 Vial Position 列中为每个样品输入样品瓶位置。

   提示 使用 Fill Down 命令简化样品瓶位置输入。

7. 在 Injection Volume 列中为每个样品输入体积。

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

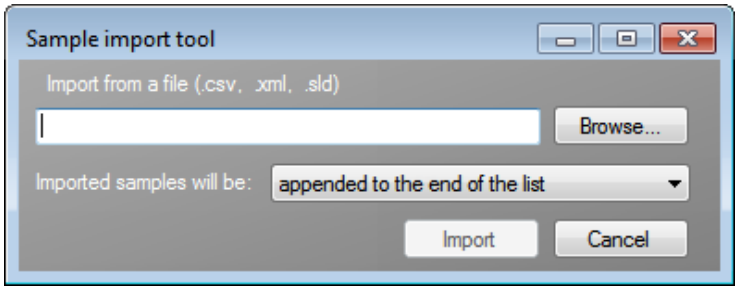
8. （可选）键入或编辑其它列的值。

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

❖ 若要在列表中导入样品

1. 点击 **Import （导入）**，Import 。

   Sample Import Tool （样品导入工具）对话框打开。



   利用该对话框可以从 .csv 文件、 .xml 文件或 .sld 文件中导入样品列表。

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）列表中，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**。

   Sample Import Tool 对话框关闭，指定的样品则添加至样品列表。

   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：

Xcalibur 列	TraceFinder 列
Position （位置）	Vial position （样品瓶位置）
Inj Vol （进样体积）	Injection volume （进样体积）
Dil Factor （稀释因子）	Conversion Factor （换算系数）

   当从 Xcalibur 序列文件 （.sld）中导入样品时， TraceFinder 应用程序替换以下样品类型：

Xcalibur 样品类型	TraceFinder 样品类型
Blank （空白样）	Negative （阴性）
Std Bracket （标曲更新）	Calibrator （校正品）

5. 对于每个 Calibrator 或 QC 样品，从列表单击 Level 单元格并选择一个水平。

   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，让职务为 Supervisor 或 LabDirector 的用户编辑该方法并指定水平。

   有关详细说明，参阅第 4 章 , “ 使用 Method Development 模式。 ”

6. 在 Vial Position 列中为每个样品输入样品瓶位置。

   提示 使用 Fill Down 命令简化样品瓶位置输入。

7. 在 Injection Volume 列中为每个样品输入体积。

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

8. （可选）键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、 Filename、 Sample Type 和 Level 列将保持固定，其他列可左右滚动。

9. （可选）当使用多通道时，为每个导入样品选择通道。

导入样品默认为 Auto （自动）。

❖ 若要移除列表中的样品

1. 选择要删除的样品。

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 **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。

绿色状态图标代表先前已采集的样品 （已采集和处理），样品名变灰。蓝色状态图标代表为重新进样 （未采集）而创建的样品。

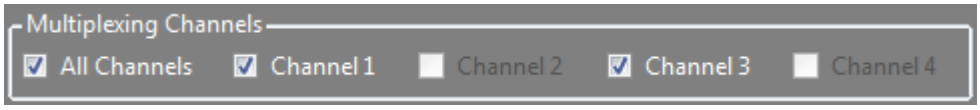
●	cal_50_INJ001	Calibrator	10
●	cal_50_INJ002	Calibrator	10
●	cal_50	Calibrator	10
●	cal_10_INJ001	Calibrator	10
●	cal_10	Calibrator	10

当用户提交批次时，应用程序仅采集重新进样的样品。

❖ 若要为批次选择通道

注释 仅当在 Configuration 模式中启用多通道用时，这些特性才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。

若要使已配置通道无效，清除页面底部 Multiplexing Channels （多通道）区域通道的复选框。



默认情况下会选中所有已配置报告。已配置报告由 Configuration 模式中的多通道决定。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

使 Multiplexing Channels 区域的通道无效不会从每个样品的 Channel 列表中移除该通道选择。当为某一样品分配通道时，注意不要分配无效通道。

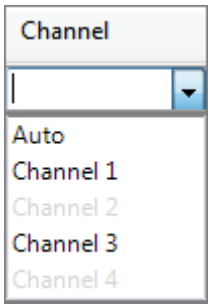
❖ 若要为样品分配特定通道

1. 滚动到 Channel （通道）列。

   注释 仅当在 Configuration 模式中启用多通道时， Channel 列才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。

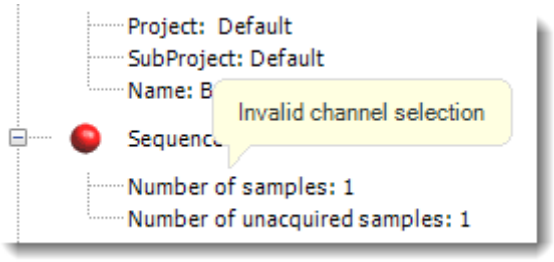
   所有样品默认为 Auto。

2. 从 Channel 列表中选择一个通道。



   当提交样品批次时，设置为 Auto 的样品可以在任意可用通道上运行，而设置为特定通道的样品仅在该通道上运行。

   若选择了该批次不可用的通道，应用程序在 Acquisition 模式的 Finish 页面上标记样品顺序。参阅前面的步骤，若要为批次选择通道。



3. 若看到这一错误，按如下操作：

   a. 点击 **Previous** 返回至 Sample Definition 页面。

      不正确样品标记有错误标记。

   b. 更正通道选择。

图 63. Sample Definition 视图

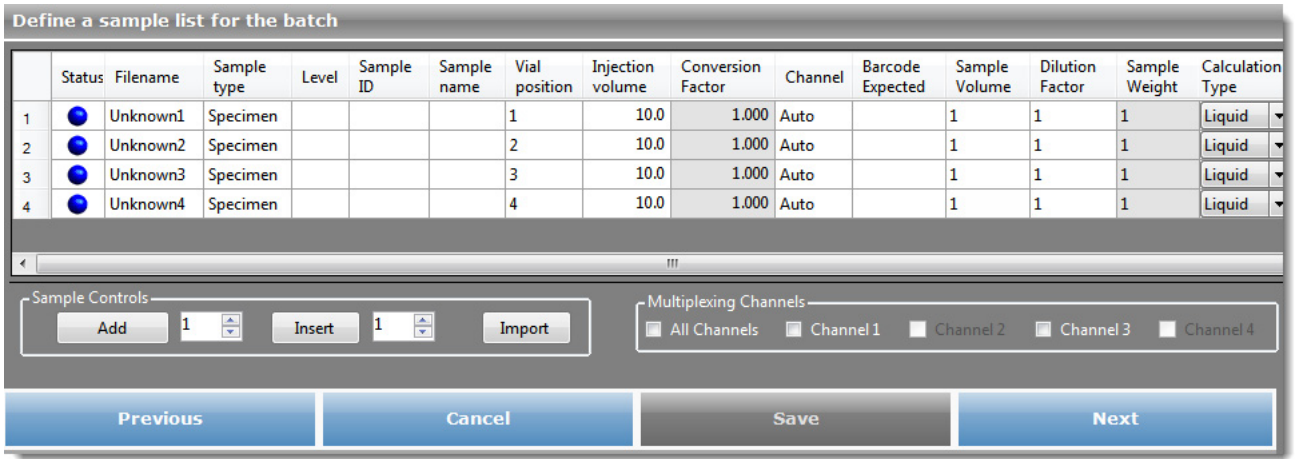
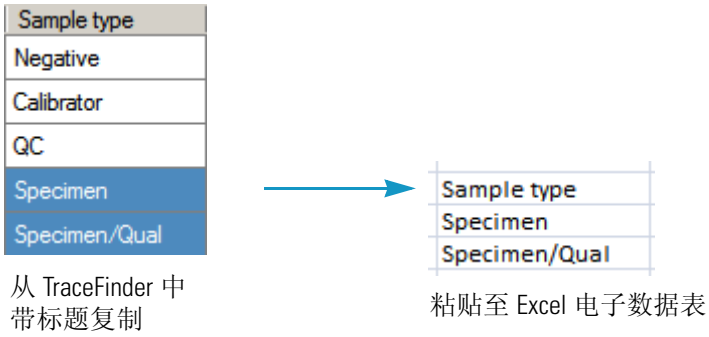


表 50. Sample Definition 视图参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	定义
Sample Controls （样品控制）	
Add （添加）	在样品栅格中添加指定的空白行数。
Insert （插入）	在所选行之前插入指定的空白行数。
Import （导入）	打开 Sample Import Tool，可在此导入 .csv 或 .xml 文件中定义的样品。
Multiplexing Channels （多通道）	仅当在 Configuration 模式中启用多通道时，这些特性才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。
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）	可返回到上一个 Acquisition 模式视图。
Cancel （取消）	确认要退出 Acquisition 模式。当选择取消并退出数据采集模式时，将不保存所作的编辑。
Save （保存）	将该批次保存为待运行 (.tbr) 批次。
Next （下一步）	可转到下一个 Acquisition 模式视图。
快捷菜单	
Add Sample （添加样品）	在样品栅格中添加单个空行。
Insert Sample （插入样品）	在样品栅格中所选行之前插入单个空行。
Insert Copy Sample （插入复制样品）	复制当前选择行并在该行之前插入复制行。
Reinject Selected Samples （所选样品重新进样）	创建所选样品的副本并在文件名称中附加 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。

表 50. Sample Definition 视图参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	定义
Remove Selected Samples （移除所选样品）	从样品栅格中移除所选样品。
Copy Down （向下复制）	将所选行的值复制到其下方的所有行中。有关使用 Copy Down 命令的详细说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”
Fill Down （向下填充）	在该列中输入从所选行中的值开始到最后一行的连续值。有关使用 Fill Down 命令的详细说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”
Modify Columns （修改列）	打开 Modify Columns 对话框。参阅第 317 页的 “ 列显示 ”。
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 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 Microsoft™ Excel™ 工作表。无法将该数据粘贴回 Acquisition 模式样品列表中。 例如  从 TraceFinder 中带标题复制 粘贴至 Excel 电子数据表
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）	将上次粘贴条目从 Acquisition 模式样品列表中移除。
Export to CSV File （导出至 CSV 文件）	打开 Save As （另存为）对话框，在此可以将当前样品列表保存为 .csv 文件。
Status Color Codes （状态颜色代码）	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。

选择和检查报告

在 Report Selection 视图上，可以指定要创建的报告类型。参阅第 237 页的 “Report Selection 视图 ”。有关报告类型的完整列表和输出文件示例，参阅附录 A, “ 报告。 ” 除了报告类型外，还可以为每个报告指定报告描述。

可以为生成的每份标准报告创建硬拷贝打印件、 PDF 文件或 XML 文件。

可以为生成的每份自定义报告创建硬拷贝打印件或 XLSM 文件。

可以为生成的每份目标筛选报告创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。

当完成指定报告选项后，点击 **Next** 转至 Finish 视图以提交批次。参阅第 238 页的 “ 提交批次 ”。

应用程序报告的输出文件写入以下文件夹：

…\TraceFinder\2.1\Forensic\Projects*projectname**subprojectname**batchname*\Reports

按照如下步骤进行操作：

- 若要编辑报告描述
- 若要预览标准报告
- 若要将标准报告指定为打印格式或 PDF、 XML 或 XLSM 文件
- 若要将报告导出至指定文件夹

❖ 若要编辑报告描述

在 Report Description （报告描述）列内点击并编辑该默认描述。

默认的报告描述与报告名称相同。

❖ 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 查看器按钮的 PDF 报告示例。

2. 若要最小化 PDF 查看器，单击最小化图标， 。

注释 仅 Standard （标准）报告有预览文档。

❖ 若要将标准报告指定为打印格式或 PDF、 XML 或 XLSM 文件

1. 为要创建的每种报告，选中 Print （打印）、 Create PDF （创建 PDF）、 Create XML （创建 XML）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。

❖ 若要将自定义报告指定为硬拷贝或 XLSM 格式

1. 为要创建的每一份自定义报告，选中 Print 或 Create 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。

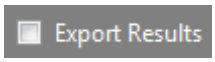
❖ 若要将目标筛选报告指定为硬拷贝格式或 PDF 文件

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**。

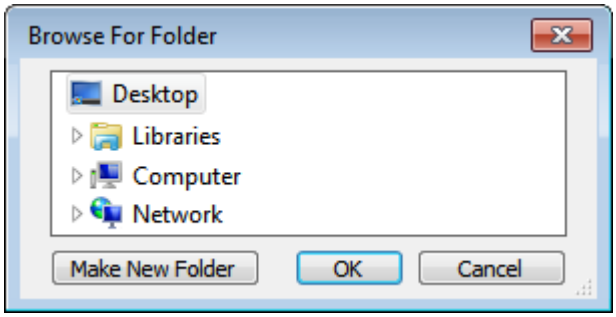
   位于列中所选单元以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。

❖ 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。

   Browse For Folder （浏览文件夹）对话框打开。

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 （报告）文件夹外，应用程序也会将将所有报告写入指定文件夹。

图 64. Report Selection 视图

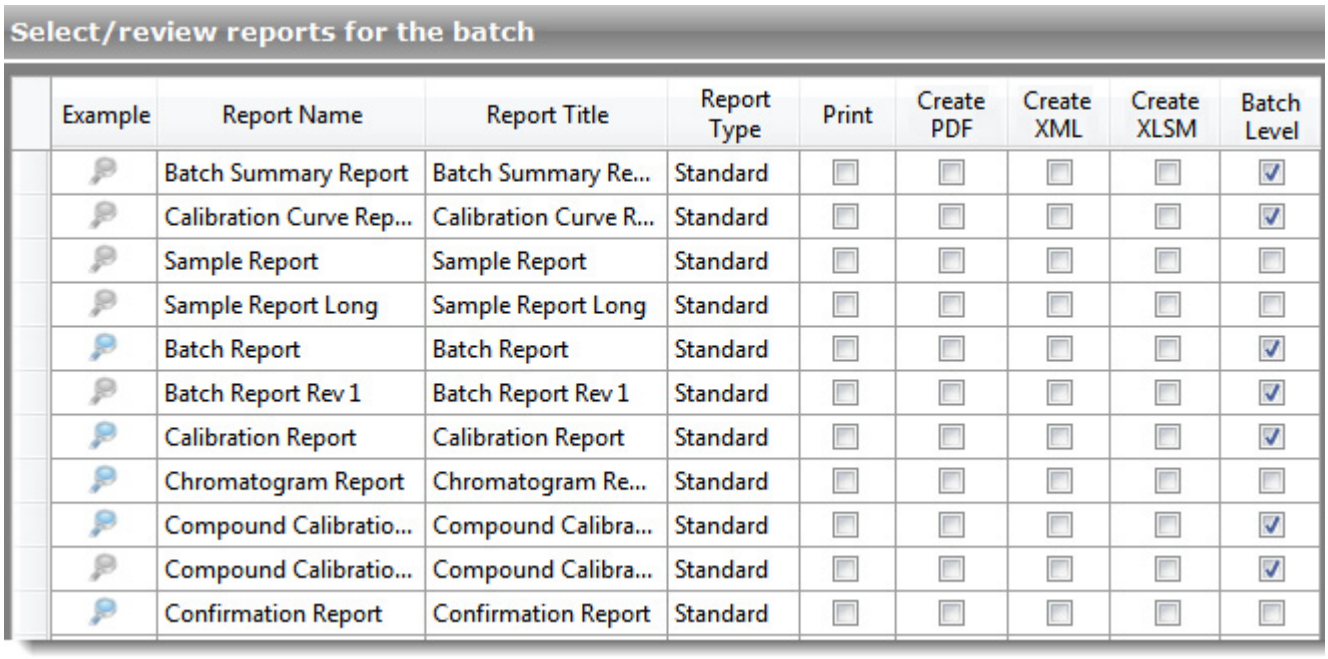


表 51. Report Selection 参数

参数	描述
	显示该报告类型的示例 PDF。示例仅提供报告类型的模式，并不反映具体的数据。仅对标准报告可用。
Report Name （报告名称）	报告的名称。
Report Title （报告标题）	将用于报告的可供用户编辑的描述。
Report Type （报告类型）	报告类型：Standard （标准）、 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。 仅对标准和目标筛选报告可用。
Create XML （创建 XML）	要导出为 XML 格式的报告。 仅对标准报告可用。
Create XLSM （创建 XLSM）	将导出为 Excel 宏启用工作簿文件 (.xlsm) 格式的报告。 仅对自定义报告可用。
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。批次水平报告附带 **B** 以示区别。 用户无法从 Report Selection 页面选择该选项。必须在报告配置中选中报告的 Batch Level 选项。参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。
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。

提交批次

在 Acquisition 模式的 Finish 视图中，可以指定启动方法、关闭方法或校正批次。可保存该批次以供以后采集，也可选择采集数据、处理数据或创建报告。参阅第 244 页的 “Finish 视图 ”。

注释 如果正在处理的是批次模板，则唯一可用的功能是保存。

按照如下步骤进行操作：

- 若要指定启动或关闭方法
- 若要自动更新定时 SRM 信息
- 若要指定校正批次
- 若要指定设备状态
- 若要保存批次供以后采集
- 若要开始采集
- 若要查看输出文件

❖ 若要指定启动或关闭方法

1. （可选）从 System Startup Method （系统启动方法）列表中选择一个方法。

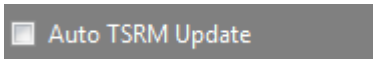
   TraceFinder 应用程序会在运行该批次之前运行此方法。自动进样器不会进样。并非所有仪器均提供此功能。

2. （可选）从 System Shutdown Method （系统关闭方法）列表中选择一个方法。

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

❖ 若要自动更新定时 SRM 信息

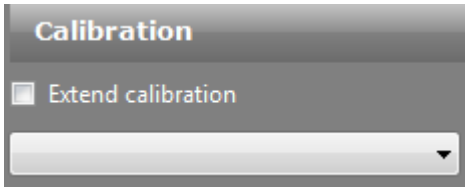
选中 **Auto TSRM Update （自动更新定时 SRM 信息）**复选框。



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 SRM。

❖ 若要指定校正批次

1. 在 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 .calx 校正文件。

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。

❖ 若要指定设备状态

在 System Status （系统状态）区域内，选择设备名称，右击并从快捷菜单中选择设备状态。

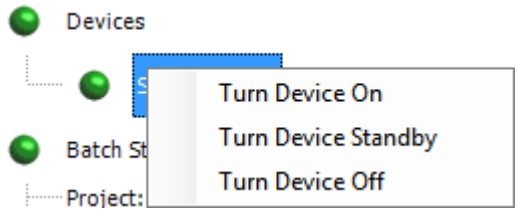


表 52. 仪器状态

仪器状态	描述
Turn Device On（开启设备）	当前运行完成时，使系统保持开启，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。 默认值：On （开机）
Turn Device Standby（使设备待机）	当前运行完成时，使系统保持待机，这样在开始下一次运行前只需短暂延迟。 某些设备没有待机功能。对于具有此功能的设备，设备会进入节能或节省耗材的模式，且可在约 15 分钟内将设备恢复到正常工作状态。该状态会关闭气流和液体流速，但使加热器和其它子系统保持运行，因此从待机转换为正常运行状态时无需预热时间，具体情况取决于设备型号。
Turn Device Off （关闭设备）	在当前运行完成后使设备关闭。关闭状态表示可由 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子组件的电源，但有些情况下某些子组件例外。 某些设备没有关闭功能。对于具有此功能的设备，设备会进入节能或节省耗材的模式，且可将设备恢复到正常工作状态。当队列中有若干样品等待运行时，应用程序会采用最后提交样品的系统电源方案。
仪器状态指示器	
	绿色代表设备开启或正在运行。
	黄色代表设备处于待机模式或正在等待触点闭合。
	红色代表设备关闭或设备有故障。

❖ **若要保存批次供以后采集**

在 Finish 视图单击 **Save**。

TraceFinder 应用程序会将的批次保存为待运行 (.tbr) 文件，关闭数据采集模式，并使返回到应用程序主菜单。

❖ **若要开始采集**

1. 点击 **Submit**。

   Submit Options （提交选项）对话框显示。有关方法参数的详细说明，参阅第 242 页的 “Submit Options 对话框 ”。

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. 选择要在本次采集中所用设备的 **Use （使用）**复选框。

4. （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。

5. （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。

6. （多通道启用时可选）选中 **Priority Sequence （优先序列）**复选框。

   应用程序在下一个可通道或指定通道中采集优先批次。

7. （多通道启用时可选）选中 **Priority Sequence** 复选框，然后选择以下其中一个优先选项以将批次安排到队列中：

   - Next Available Batch （下一可用批次）将批次放入当前采集的批次后。
   - Next Available Sample （下一可用样品）将批次放入当前采集的样品后。

   注释 当选择 Configuration 模式的 Full Sequence Submission （完整序列提交）时，这些选项不可用，因为当前批次和当前样品是一样的。

8. 执行下列操作之一：

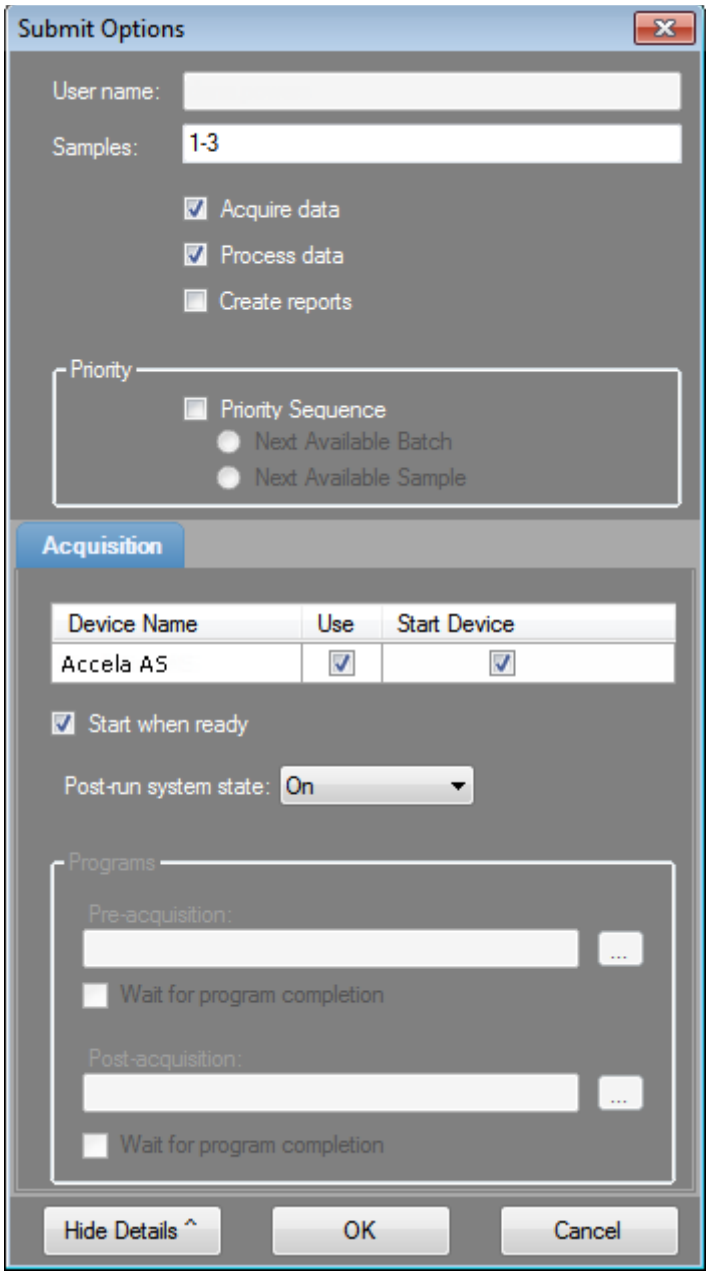
   若要开始所选的流程，点击 **OK**。

   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，并查看当前采集批次的实时显示。

   – 或 –

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

图 65. Submit Options 对话框



参数	描述
User Name（用户名）	当前用户的名称。
Samples （样品）	准备提交用于采集、处理或报告的样品范围。
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）	多通道启用时，将批次放入当前采集的批次后。 多通道未启用时，指定以下其中一种优先级选项以将批次放入队列中： **Next Available Batch**：将批次放入当前采集的批次后。 **Next Available Sample**: 将批次放入当前采集的样品后。 **注释** 当选择 Configuration 模式的 Full Sequence Submission 时，这些选项不可用，因为当前批次和当前样品是一样的。
Acquisition 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 TraceFinder 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。这通常是自动进样器。
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。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。
Post-run System State（运行后系统状态）	指定系统在采集完最后批次后的状态。 On （默认，开机）、 Standby （待机），或 Off （关机）。
Hide/Show Details （隐藏 / 显示详细信息）	收起或展开 Submit Options 对话框的采集详细信息。
OK （确定）	开始所选的流程。
Cancel （取消）	在不提交任何任务的情况下关闭 “ 提交选项 “ 对话框。

❖ **若要查看输出文件**

- TraceFinder 将保存的批次以文件扩展名 .tbr （待运行）写入子项目文件夹：

  …\TraceFinder\2.1\Forensic\Projects*projectname**subprojectname*

- 对于采集的每个样品，应用程序写入一个 RSX 文件到批次 Data （数据）文件夹：

  …*projectname**subprojectname**batchname*\Data

- 应用程序将方法信息保存到批次 Methods （方法）文件夹：

  …*projectname**subprojectname**batchname*\Methods*methodname*

- 应用程序将报告写入到批次 Reports （报告）文件夹：

  …*projectname**subprojectname**batchname*\Reports

图 66. Finish 视图

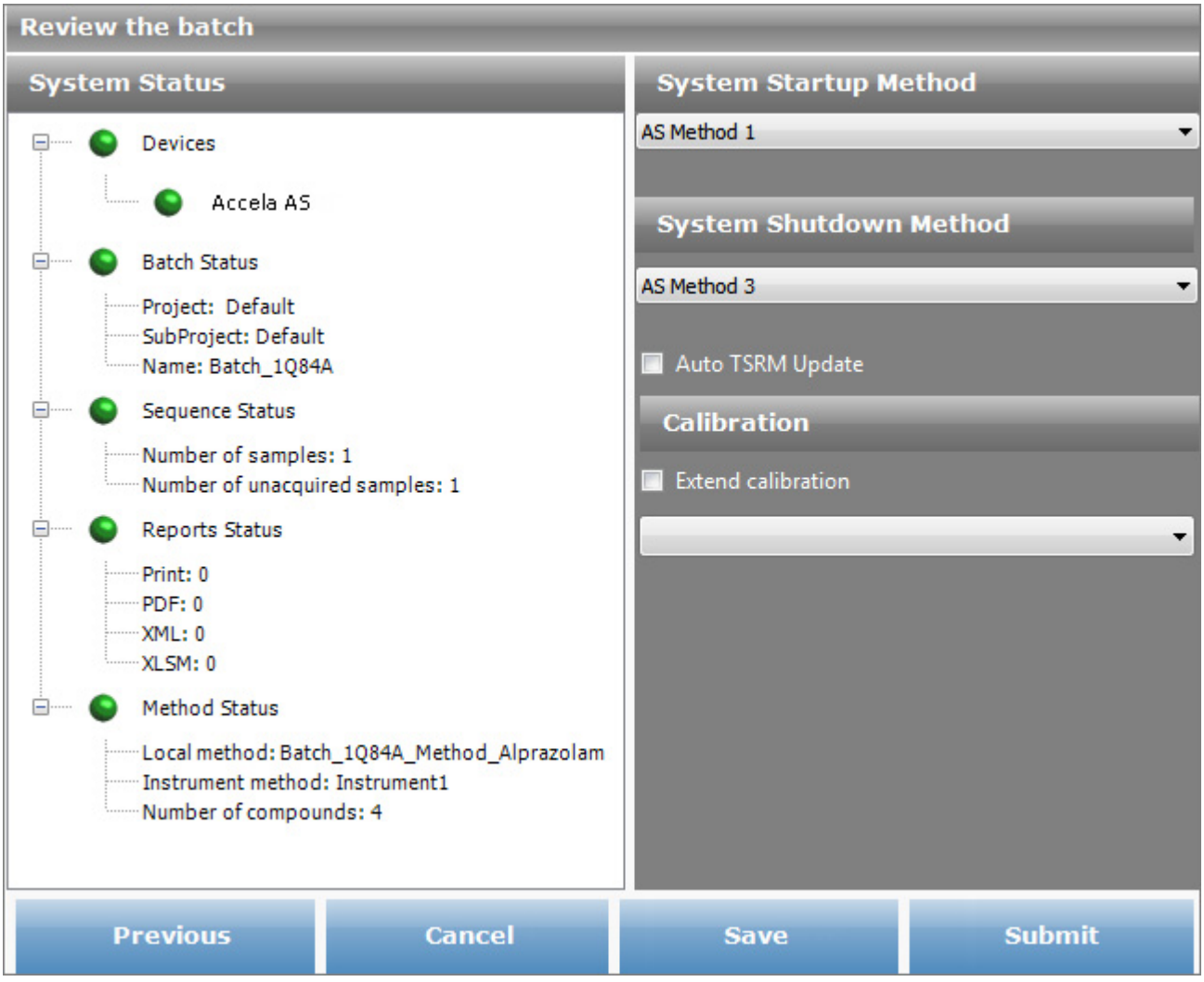


表 53. Finish 视图参数

参数	描述
System Status（系统状态）	System Status 窗口会显示下列： • 用于该次采集的设备 • 批次的项目、子项目和名称 • 批次中的样品数 • 要打印并保存为 PDF、 XML 或 XLSM 文件的标准报告和自定义报告的数量 • 用于该批次的本地方法和仪器方法 • 方法中的化合物数
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 SRM 信息）	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 SRM。
Calibration （校正）	• 使用校正：使用所选的校正文件来处理当前数据。 • 扩展校正：从当前批次添加校正数据到所选的校正文件中。
Save （保存）	将当前批次保存为待运行 (.tbr) 文件。
Submit （提交）	打开 Submit Options 对话框，在此可以随意地选择生成报告。

使用快速采集

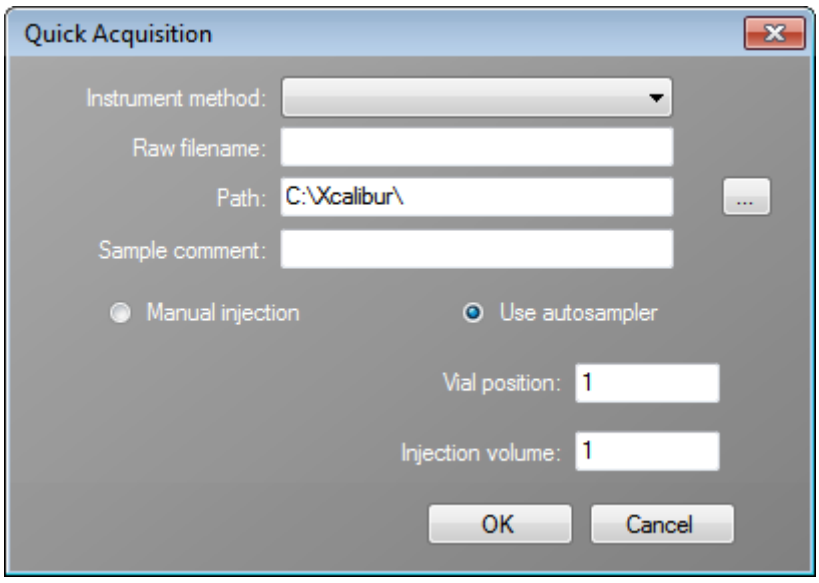
快速采集特性让用户从 Acquisition 模式的任意视图快速提交单个样品。

注释 仅当在 Configuration 模式中启用时，快速采集特性才可用。
参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

❖ 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。



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 序列。参阅第 249 页的 “Acquisition 页面 ”。

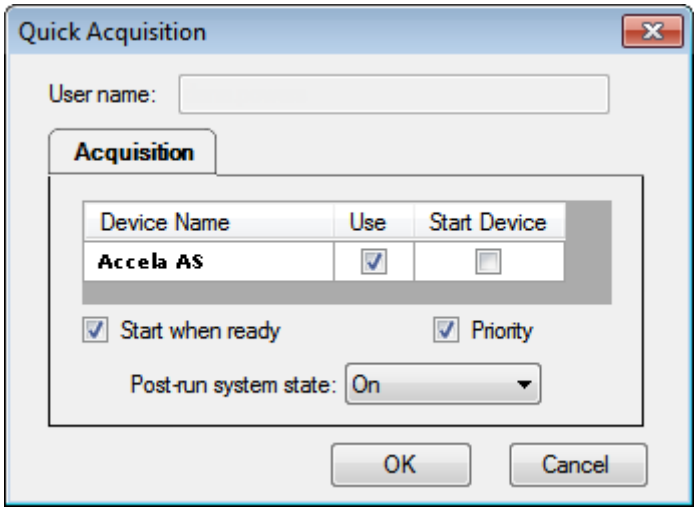
   若要执行自动进样器进样，执行以下操作：

   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。



e. 选择要在本次采集中所用设备的 **Use** 复选框。

f. （可选）选择 **Start Device** 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。

g. （可选）选中 **Start When Ready** 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。

h. （可选）选中 **Priority （优先）**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 的值：**Unknown （未知）**、 **On** （默认）、 **Off** 或者 **Standby**。

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 序列。参阅第 249 页的 “Acquisition 页面 ”。

实时显示

可从 TraceFinder 应用程序的主菜单和任何模式访问实时显示。

❖ **若要从主菜单访问实时显示**

点击 **Real Time Status （实时状态）**。

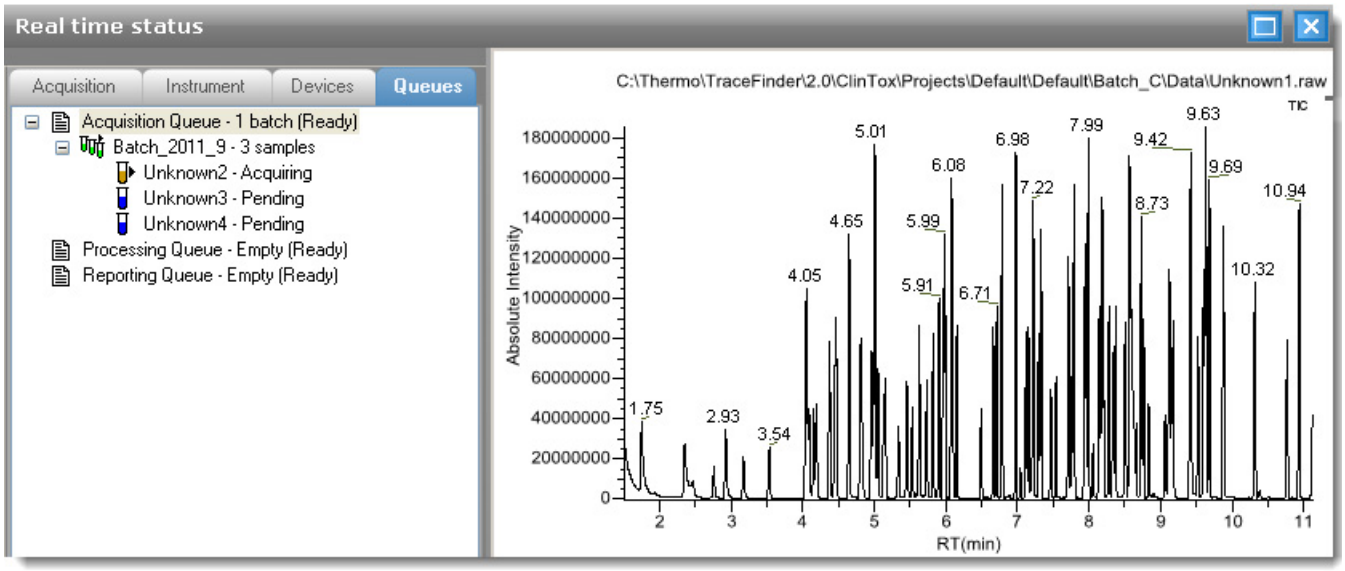
实时状态显示在主菜单底部。

❖ **若要从所有模式访问实时显示**

点击 **Real Time Status**。

实时状态显示在当前视图底部。

图 67. Real Time Status 显示

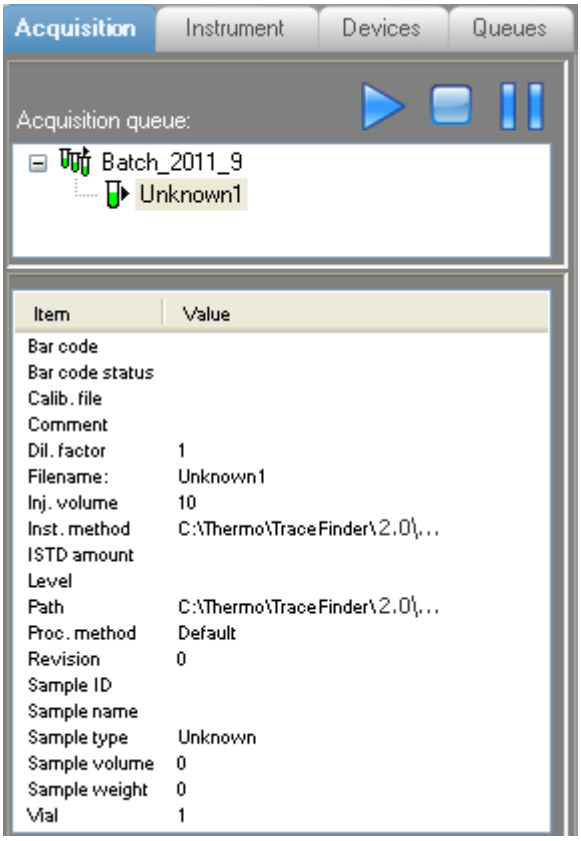


实时状态显示包含四个信息页面和一个实时谱图窗格：

- Acquisition 页面
- Instrument 页面
- Devices 页面
- Queues 页面
- 实时谱图显示

Acquisition 页面

利用 Acquisition 页面检测应用程序采集样品的进程。



❖ **若要暂停或停止队列中的批次**

使用 **Start （启动）**， ，**Stop （停止）**， ，或 **Pause （暂停）**， ，图标控制 Acquisition 队列中的批次。

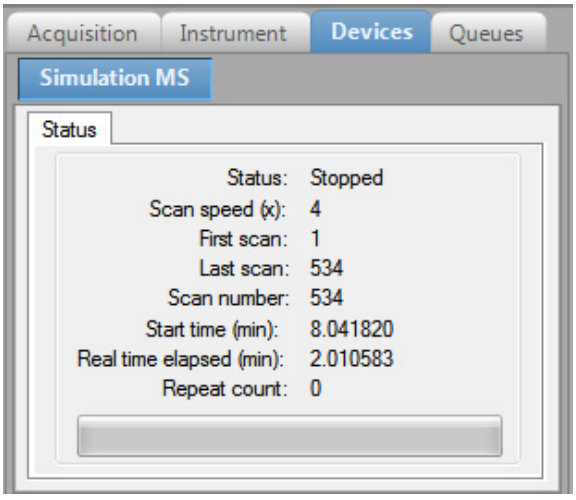
Instrument 页面

利用 Instrument （仪器）页面检测当前采集的样品。

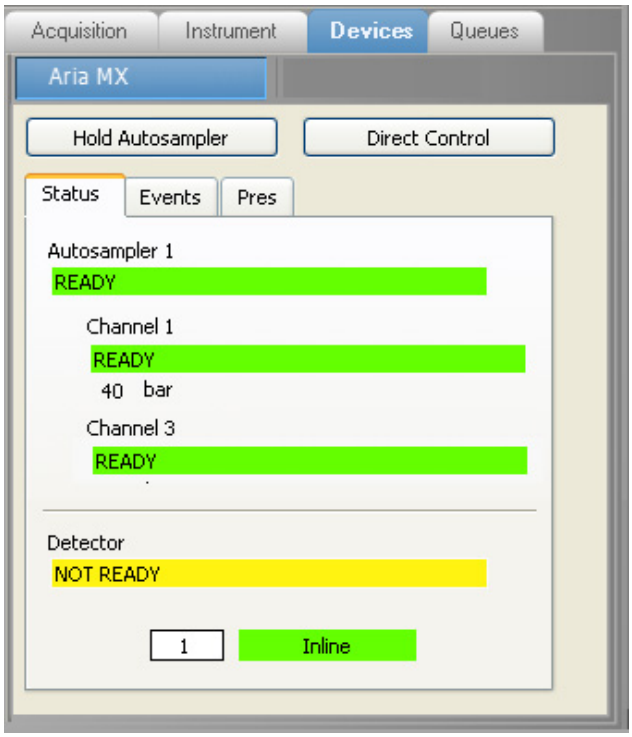
Devices 页面

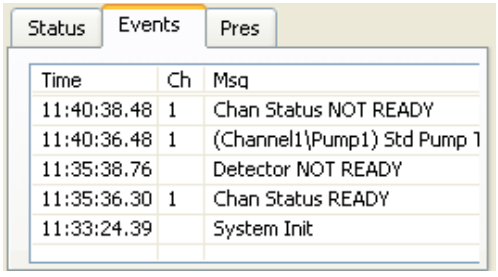
利用 Devices （设备）页面检测仪器状态。在 Devices 页面上看到的反馈取决于正在使用的仪器。以下示例显示了一个 Accela 自动进样器和一个 Aria™ 多通道设备。

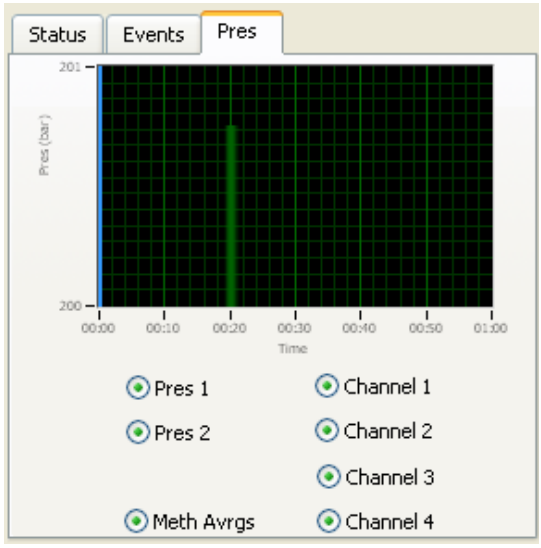
Accela 自动进样器反馈



Aria 多通道反馈







按照如下步骤进行操作：

- 若要暂停自动进样器
- 若要控制通道
- 若要显示压力图
- 若要控制通道

❖ 若要暂停自动进样器

1. 点击 **Hold Autosampler （暂停自动进样器）**。

   自动进样器完成当前自动进样器步骤，然后暂停。 LC 泵和自动进样器继续。

2. 若要重启自动进样器，再次点击 **Hold Autosampler**。

❖ **若要控制通道**

右击通道名称并从快捷菜单选择一个命令。

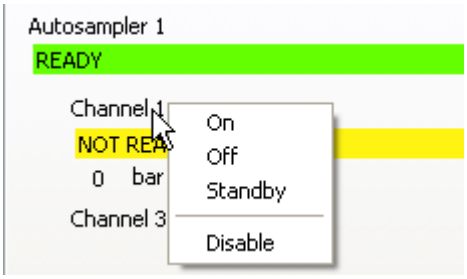


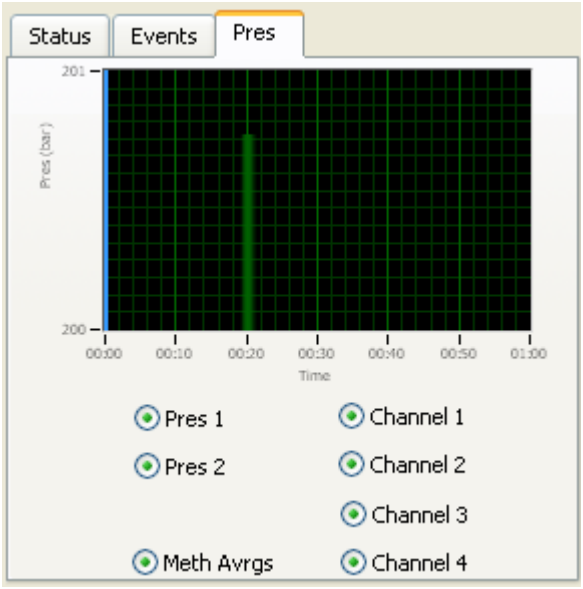
表 54. Autosampler 快捷菜单命令

命令	描述
On （开机）	打开已停止的泵，继续采集为该通道分配的样品列表。
Off （关机）	当前样品采集完成后，应用程序停止采集且泵关闭。
Standby （待机）	当前样品采集完成后，应用程序停止采集。泵继续运行。
Disable / Enable （禁用 / 启用）	**Disable：** 阻止通道接收样品。当在运行过程那种选择 **Disable** 时，应用程序完成该通道上当前样品的采集然后停止。 **Enable：** 允许通道接收样品。 当不启用设置为 **On** 的通道时，通道高亮显示为绿色且状态为 READY （就绪）。可以将该通道设为 **Off** 或 **Standby**。

❖ 若要显示压力图

1. 点击 **Pres （压力）**选项卡。

   Pressure （压力）页面显示批次中每个样品的泵压力图。泵压力的波动和改变代表了色谱图条件的改变。



2. 若要查看特定泵的压力，选择 **Pres 1 （压力 1）**或 **Pres 2 （压力 2）**选项。

   默认情况下，显示所有泵的压力。

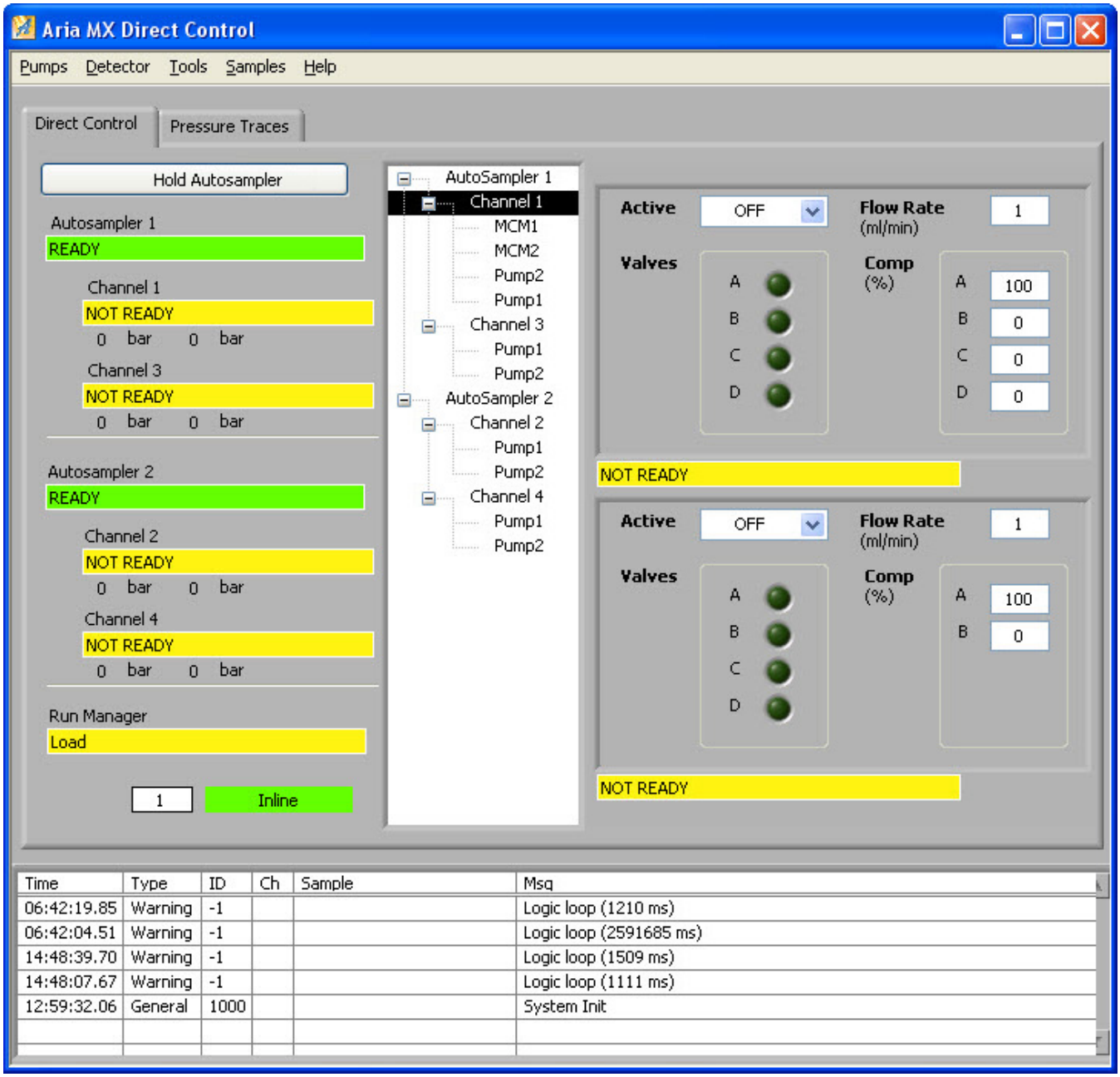
3. 若要查看特定通道的压力，选择相应的通道编号。

   默认情况下，显示所有通道的压力。

❖ **若要访问 Aria 多通道控件**

点击 **Direct Control （直接控制）**。

Aria MX Direct Control （Aria MX 直接控制）对话框打开。

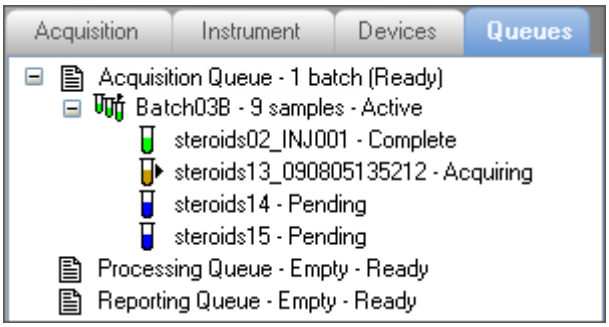


有关该对话框中特性的详细描述，参阅 *Transcend Systems with Xcalibur Software User Guide（带 Xcalibur 软件的 Transcend 系统用户手册）*。

Queues 页面

利用 Queues （队列）页面检测和控制 Acquisition、 Processing （处理）和 Reporting （报告）页面。

- 利用 Queue-Level 命令暂停或移除任意队列中的批次。
- 利用 Batch-Level 命令暂停或移除任意队列的批次中的整个批次或样品。



Queue-Level 命令

利用 Queue-Level （队列 - 水平）命令暂停或移除 Queues 页面上任意队列中的批次。参阅第 256 页的 “Queue-level 快捷菜单 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要暂停队列中的所有批次
- 若要从队列移除单个批次
- 若要移除队列中的所有批次
- 若要移除所有待定批次

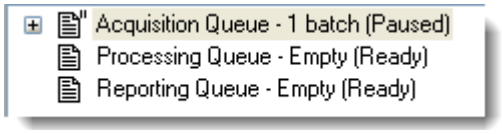
❖ 若要暂停队列中的所有批次

1. 选择一个队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）。

   注释 当启用多通道时，用户可以一次采集四个样品。暂停 Acquisition 队列不会对采集样品产生影响。

2. 右击并从快捷菜单中选择 **Pause Queue （暂停队列）**。

   当前样品完成后，应用程序暂停指定队列中的所有批次和样品。仅对所选队列有效。

3. 若要重启一个已暂停的队列，选中队列，右击并从快捷菜单选择 **Resume Queue （继续队列）**。

❖ 若要从队列移除单个批次

1. 选择一个队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）。
2. 右击并从快捷菜单中 **Stop Active Batch （停止活动批次）**。

> **注释** 仅当在队列中有活动批次时该命令才可用。已暂停批次和仅包含待定样品的批次不是 “ 活动 ” 批次。

应用程序确认用户希望从所选队列中移除活动批次。当前样品完成后，应用程序从队列中移除批次和所有待定样品。仅对所选队列有效。

❖ 若要移除队列中的所有批次

1. 选择一个队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）。
2. 右击并从快捷菜单中 **Stop All Batches （停止所有批次）**。

应用程序从所选队列中移除所有包含待定样品的批次。当前样品继续采集。仅对所选队列有效。

❖ 若要移除所有待定批次

1. 选择一个队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）。
2. 右击并在快捷菜单中选择 **Remove Pending Batches （移除待定批次）**。

> **注释** 待定批次是指所有样品均待定的批次。如果批次中有活动样品，则该命令对该批次无效。

应用程序移除仅包含待定样品的所有批次。仅对所选队列有效。

图 68. Queue-level 快捷菜单

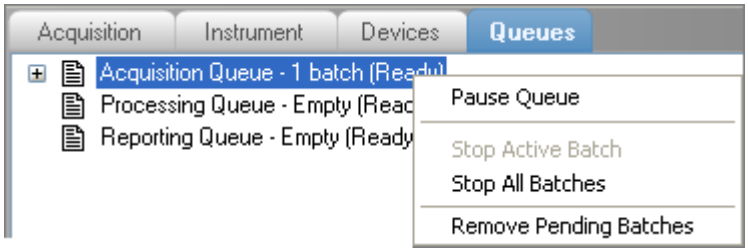


表 55. Queue-level 快捷菜单命令

命令	描述
Pause Queue （暂停队列）	当前样品完成后，应用程序暂停指定队列。仅对所选队列有效。
Stop Active Batch （停止活动批次）	移除指定队列中的所有待定样品。活动样品不受影响。
Stop All Batches （停止所有批次）	移除指定队列中的所有待定样品和批次。活动样品不受影响。
Remove Pending Batches （移除待定批次）	移除指定队列中的所有待定批次。活动批次不受影响。

Batch-Level 命令

利用 Batch-Level （批次 - 水平）命令暂停或移除 Queues 页面上任意队列批次中的整个批次或样品。参阅 “Batch-level 快捷菜单。 ”

按照如下步骤进行操作：

- 若要停止批次
- 若要移除一个待定批次
- 若要从批次中移除待定样品
- 若要从批次中移除单个待定样品

❖ 若要停止批次

1. 选择任意队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）中的活动批次。

   注释 该批次必须包含至少一个活动样品和一个待定样品。

2. 右击并从快捷菜单中选择 **Stop Batch （停止批次）**。

   应用程序确认用户希望从队列中移除所选批次。当前样品完成后，应用程序从队列中移除批次和所有待定样品。

❖ 若要移除一个待定批次

1. 选择任意队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）中的待定批次。

   注释 待定批次时指所有样品均待定的批次。如果批次中有活动样品，则该命令不可用。

2. 右击并在快捷菜单中选择 **Remove Pending Batch （移除待定批次）**。

   应用程序确认用户移除队列中的所选批次，然后将该批次从队列中移除。

❖ 若要从批次中移除待定样品

1. 选择任意队列 （Acquisition、 Processing 或 Reporting）中的批次。

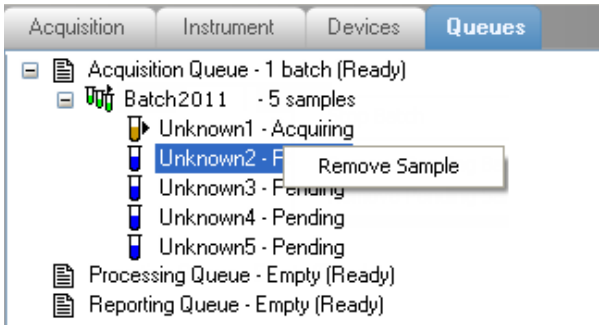
   该批次必须包含至少一个待定样品。

2. 右击并在快捷菜单中选择 **Remove Pending Samples （移除待定样品）**。

   应用程序确认用户移除队列中的所有待定样品，然后移除这些样品。如果某批次仅包含待定样品，则应用程序将其从队列中移除。

❖ 若要从批次中移除单个待定样品

1. 选择一个待定样品。
2. 右击并在快捷菜单中选择 **Remove Sample （移除样品）**。



应用程序确认用户移除队列中的所选样品，然后移除该样品。

图 69. Batch-level 快捷菜单

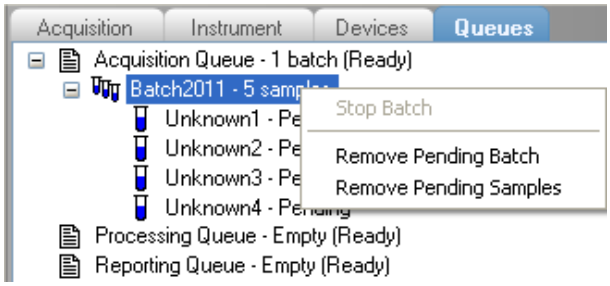
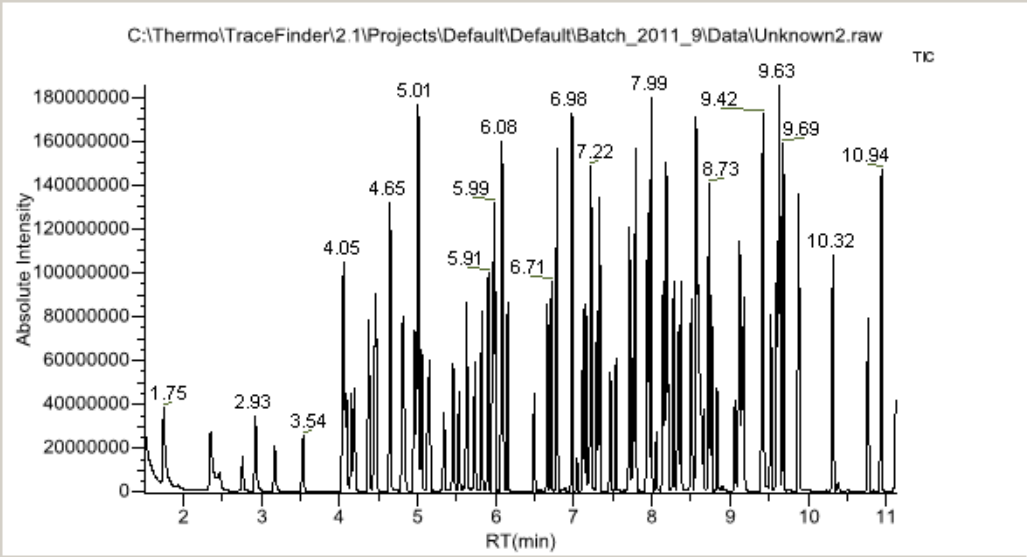


表 56. Batch-level 快捷菜单命令

命令	描述
Stop Batch （停止批次）	当前样品完成后，应用程序暂停所选批次中的所有样品。
Remove Pending Batch （移除待定批次）	移除所选待定批次中的所有样品。
Remove Pending Samples （移除待定样品）	移除指所选批次中的所有待定样品。

实时谱图显示

随着每个样品的采集，实时色谱图窗格显示 TIC 图的保留时间和强度。



默认情况下，实时显示仅显示随每个样品采集的 TIC 图。若要查看特定谱图如内标等，使用 RTV Display Traces （RTV 显示谱图）功能显示多个谱图。

当用户创建方法时，可以指定在实时查看器中显示其他谱图及这些谱图显示的次序。应用程序总在最上方窗格中显示 TIC 图。参阅第 165 页的 “Real Time Viewer”。

❖ **若要显示多个谱图**

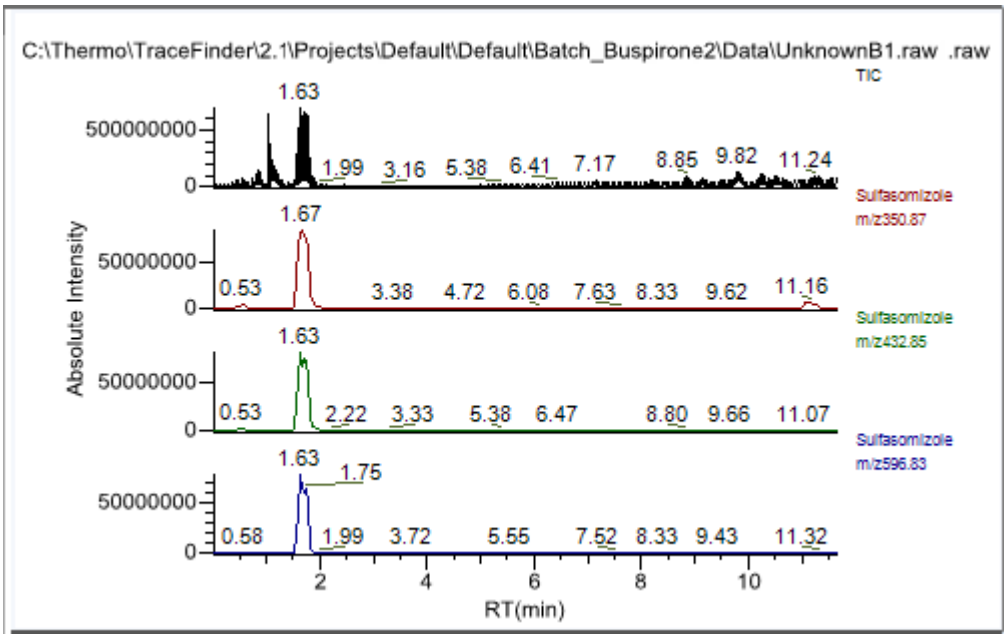
右击色谱图窗格然后选择希望显示的谱图数。

色谱图窗格显示所选谱图数的实时色谱图。

TIC 图总显示在最上方。当窗格中有多个谱图时，可以滚动查看这些谱图。

应用程序为每个谱图显示质量数和母离子质量数。

图 70. 多个谱图的实时显示



样品类型

TraceFinder 应用程序在所有样品定义和报告中使用下列样品类型。若要查看某个样品类型特定的标准报告示例，参阅附录 A, “ 报告。 ”

表 57. 样品类型定义

样品类型	定义
Negative（阴性）	不包含目标化合物，但在使用内标定量分析技术时可能包含内标物。通过分析空白样品，可以确认溶剂系统中不存在可能导致错误结果的残留化合物。
Unextracted（未提取）	与 Negative 样品类型，但包含目标化合物。通过分析样品，可以确认溶剂系统中不存在可能导致错误结果的残留化合物。
Calibrator（校正品）	（校正标样）包含已知量的所有目标化合物。标样的用途在于测量仪器对目标化合物的响应，这样处理软件可以生成每种化合物的校准曲线。
QC （质控）	（质控样）包含已知量的一种或多种特定目标化合物。应用程序将 QC 样品放入批次以测试定量分析结果，从而确保定量分析结果。应用程序分析完 QC 样品之后，会将测量值与预期值及其可接受范围相比较。如果测量值与预期值之间的差异处于用户定义的允许范围之内，则将 QC 样品定量分析判定为 *已通过*。如果测量值与预期值之间的差异超出了用户定义的允许范围，则将 QC 样品定量分析判定为 *未通过*。
Solvent （溶剂）	仅包含溶剂。
Specimen（定量样品）	用于样品定量分析。
Specimen/Qual（样品 / 定性）	用于样品的定量和定性分析。
Hydrolysis（水解）	检查溶于水的化合物的分解。

使用 Analysis 模式

本章主题包括使用 Analysis （分析）模式中特性的说明。

目录

- 使用快速采集
- 使用 Batch View
- 利用 Batch Wizard 创建批次
- 使用 Data Review 视图
- 使用 Report View
- 使用 Local Method View
- 使用 Batch Template Editor

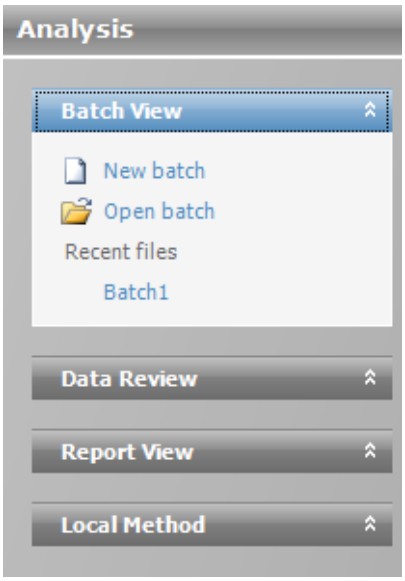
利用 Analysis 模式执行下列操作：

- 提交单个样品进行快速采集。
- 提交批次进行采集、处理或报告。
- 查看批次、批次数据、报告和本地方法。

❖ **若要访问 Analysis 模式**

从主菜单或导航窗格点击 **Analysis**。

Analysis 导航窗格打开。



使用快速采集

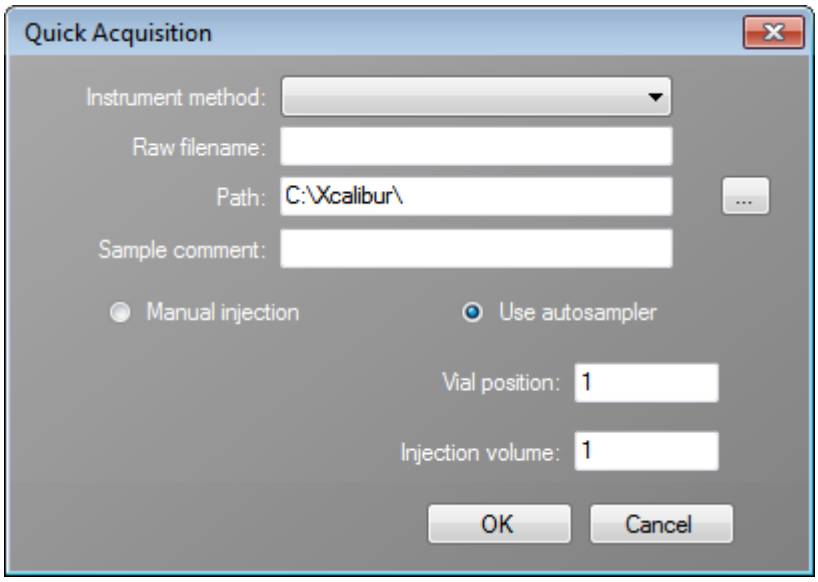
利用快速采集特性，用户可以从 Analysis 模式的任意视图快速提交单个样品。

注释 仅当在 Configuration （配置）模式中启用时，快速采集特性才可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

❖ 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 （快速采集）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. 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 （确定）**。

      应用程序将样品提交至 Acquisition （采集）序列。参阅第 249 页的 “Acquisition 页面 ”。

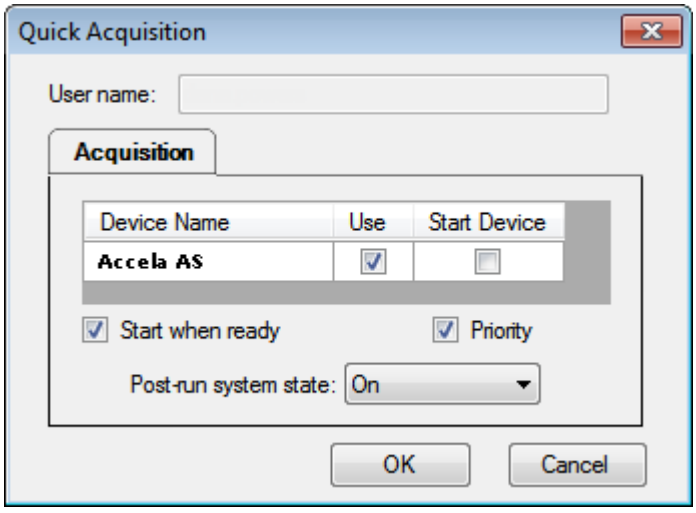
   若要执行自动进样器进样，执行以下操作：

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

      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。



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。

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。

h. （可选）选中 **Priority （优先）**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 （运行后系统状态）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 序列。参阅第 249 页的 “Acquisition 页面 ”。

使用 Batch View

在 Batch View （批次视图）中，可以手动创建和编辑新批次，或者打开并编辑先前保存的批次。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

1. 执行下列操作之一：

   从主菜单点击 **Analysis**。

   – 或 –

   在当前模式下，点击导航窗格中的 **Analysis**。

2. 在 Analysis 导航窗格中点击 **Batch View**。

当前选定批次的 Batch View 显示。

本节包含下列信息：

- Batch View 窗格
- 创建新批次
- 编辑批次
- 编辑报告输出格式
- 提交批次

Batch View 窗格

Batch View 被分为三个窗格：

- 样品列表

  利用样品列表创建一个批次。参阅第 279 页的 “ 创建新批次 ”。

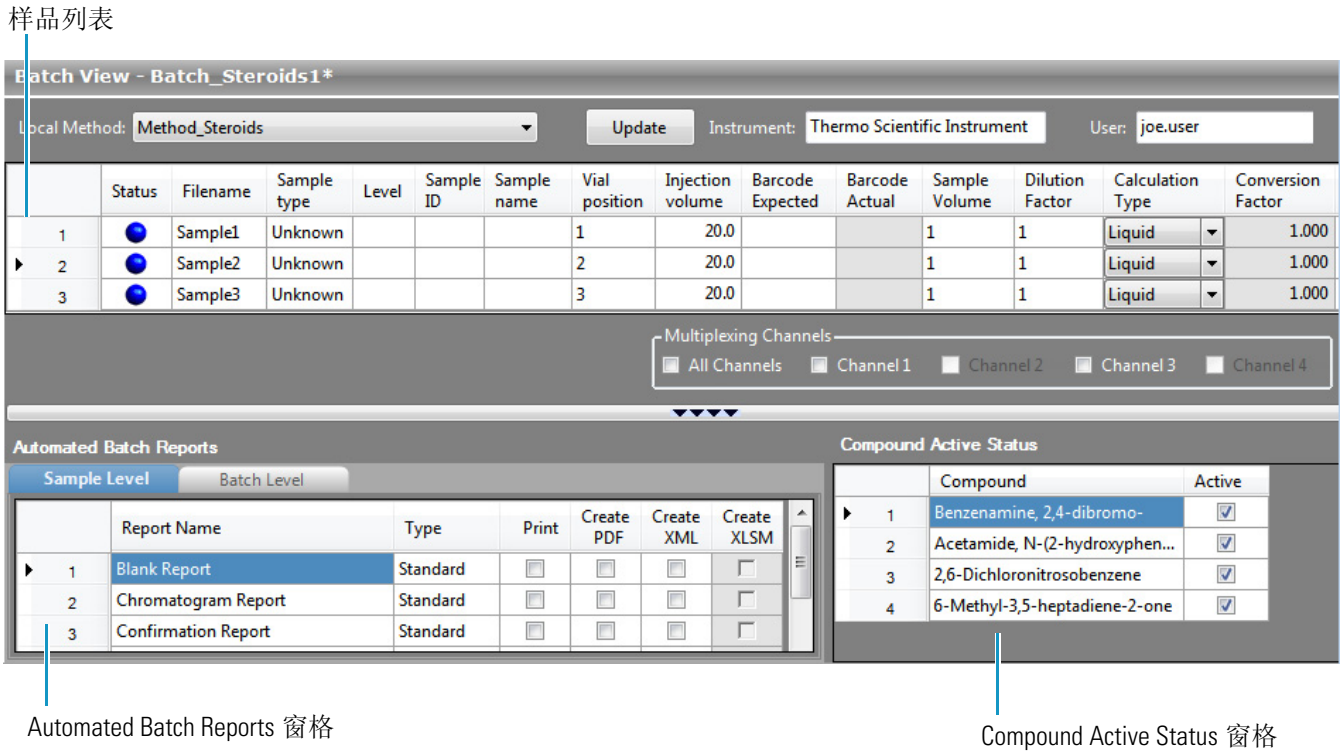
- Automated Batch Reports

  利用 Automated Batch Reports （自动批次报告）窗格选择生成报告的输出格式类型。参阅第 288 页的 “ 编辑报告输出格式 ”。

- Compound Active Status

  利用 Compound Active Status （化合物活动状态）窗格激活或停用特定化合物。参阅第 289 页的 “ 设置 Compound Active Status”。

利用 Batch View 工具栏或快捷菜单创建样品列表和提交样品进行采集。参阅第 273 页的 “Batch View 工具栏 ” 或 第 277 页的 “Batch View 快捷菜单 ”。



提示 若要调整窗格尺寸，可拖动分隔窗格的分隔线。

样品列表

样品列表包含以下特性：

- 列显示
- 状态指示器
- 样品质量计算

列显示

样品列表可以包含许多信息列。可以滚动以查看所有信息列，并且可以自定义想要显示的列及列的显示次序。

按照如下步骤进行操作：

- 若要滚动样品列表
- 若要自定义列显示

❖ 若要滚动样品列表

利用样品列表底部的水平滚动条以查看所有信息。

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

❖ 若要自定义列显示

1. 右击样品列表，然后从快捷菜单中选择 **Modify Columns （修改列）**。

   Modify Columns 对话框打开。参阅 “Modify Columns 对话框。 ”

2. 利用箭头按钮移动所有希望显示在 Displayed Columns （已显示列）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。

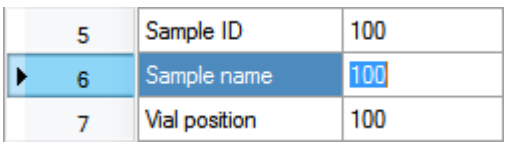
   b. 选择 **Up （向上）**或 **Down （向下）**在列表中上下移动所选列。

   列表中的首列代表 Batch View 样品列表中的最左列；列表中的末列代表 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。

   b. 输入一个新的宽度值。

5. 为所有要改变宽度的列重复步骤 4，并单击 **OK**。

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

图 71. Modify Columns 对话框

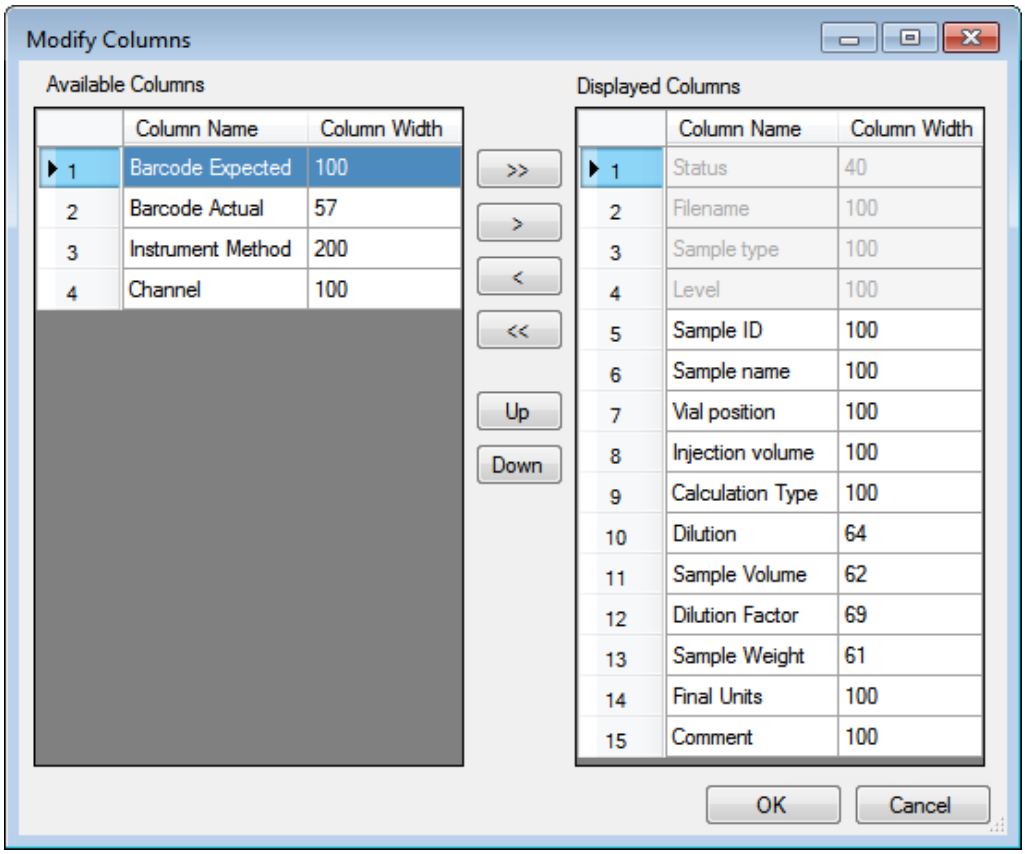


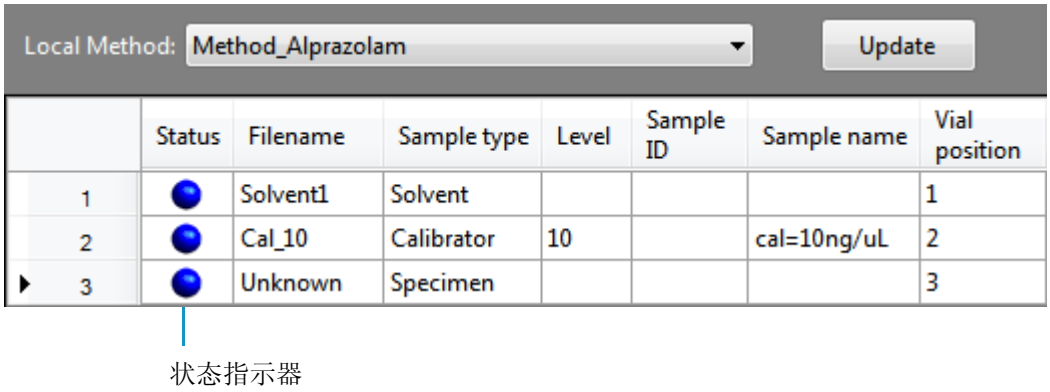
表 58. Modify Columns 功能按钮

功能	描述
>>	将所有列移动到 Displayed Columns 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。
Up	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。
Down	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。

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。



样品质量计算

使用这个功能计算样品质量，以计算样品的换算系数。应用程序采用不同方法计算液体或固体计算类型的换算系数。

液体：*样品体积* ÷ *稀释因子*

固体：（*样品体积* × *稀释因子*） ÷ *样品质量*

手动：应用程序不计算换算系数。但是可以输入 Conversion Factor （换算系数）值。

按照如下步骤进行操作：

- 若要显示计算样品质量的功能
- 若要计算液体样品的换算系数
- 若要计算固体样品的换算系数
- 若要手动指定样品的换算系数

❖ 若要显示计算样品质量的功能

如果 Conversion Factor、 Sample Weight （样品质量）、 Sample Volume （样品体积）、 Calculation Type （计算类型）、 Dilution Factor （稀释因子）和 Final Units （最终单位）列都不可见，右击并从快捷菜单选择 **Enable Sample Weight Calculation （启用样品质量计算）**。

Sample Weight	Sample Volume	Calculation Type	Dilution Factor	Final Units
1	1	Liquid	1	
1	1	Solid	1	
1	1	Manual	1	

❖ 若要计算液体样品的换算系数

1. 从 **Calculation Type** 列表选择 **Liquid （液体）**。

   对于液体样品， Sample Weight 值是不可编辑的。

2. 在 Sample Volume 列中，输入样品体积，单位 ng/mL。
3. 在 Dilution Factor 列中输入稀释因子值。

   例如，如果某个物质为 1000 ng/mL，这对于质谱仪浓度太高，可以稀释 1000 倍。当进样体积为 1 时，换算系数为 1000，则样品量为 1000。

4. 在 Final Units 列中输入用于 Report （报告）视图内 Active View （活动视图）页面上的 Data Review （数据查看）视图，或者报告上的计算量的单位。

应用程序利用下列公式计算换算系数：

样品体积 ÷ 稀释因子

❖ 若要计算固体样品的换算系数

1. 从 **Calculation Type** 列表选择 **Solid （固体）**。
2. 在 Sample Weight 列中，输入样品质量，单位 ng。
3. 在 Sample Volume 列中，输入样品体积，单位 ng/mL。
4. 在 Dilution Factor 列中输入稀释因子值。

   例如，如果某个物质为 1000 ng/mL，这对于质谱仪浓度太高，可以稀释 1000 倍。当进样体积为 1 时，换算系数为 1000，则样品量为 1000。

5. 在 Final Units 列中输入用于 Report 视图内 Active View 页面上的 Data Review 视图，或者报告上的计算量的单位。

应用程序利用下列公式计算换算系数：

（*样品体积* × *稀释因子*） ÷ *样品质量*

❖ **若要手动指定样品的换算系数**

1. 从 **Calculation Type** 列表选择 **Manual （手动）**。

   对于手动计算样品，可用列仅包括 Conversion Factor 和 Final Units。

2. 在 Conversion Factor 列中，输入换算系数。
3. 在 Final Units 列中输入用于 Report 视图内 Active View 页面上的 Data Review 视图，或者报告上的计算量的单位。

当应用程序计算样品量时，它利用指定的换算系数。

Batch View 工具栏

Batch View 包括用于创建和提交批次的工具栏。

图标	描述
	将指定数量新的空白样品添加至样品列表的末尾。参阅第 280 页的 “ 若要在列表中添加样品 ” 的说明。
	将一个新的空白样品或多个样品插入到所选样品上方。参阅第 280 页的 “ 若要在列表中插入样品 ” 的说明。
	从样品列表中移除所选样品。参阅第 282 页的 “ 若要移除列表中的样品 ” 的说明。
	将 .csv、 .xml或 .sld文件中的已导入样品添加到样品列表中。参阅第 281 页的 “ 要在列表中导入样品 ” 的说明。
	仅提交所选样品用于采集、处理或生成报告。参阅第 292 页的 “ 若要提交所选样品 ” 的说明。
	提交批次用于采集、处理或生成报告。参阅第 292 页的 “ 若要提交批次中的所有样品 ” 的说明。
	关闭 / 打开 Analysis 导航窗格。
	打开 Quick Acquisition 对话框，这样可以快速提交单个样品。参阅第 265 页的 “ 使用快速采集 ”。

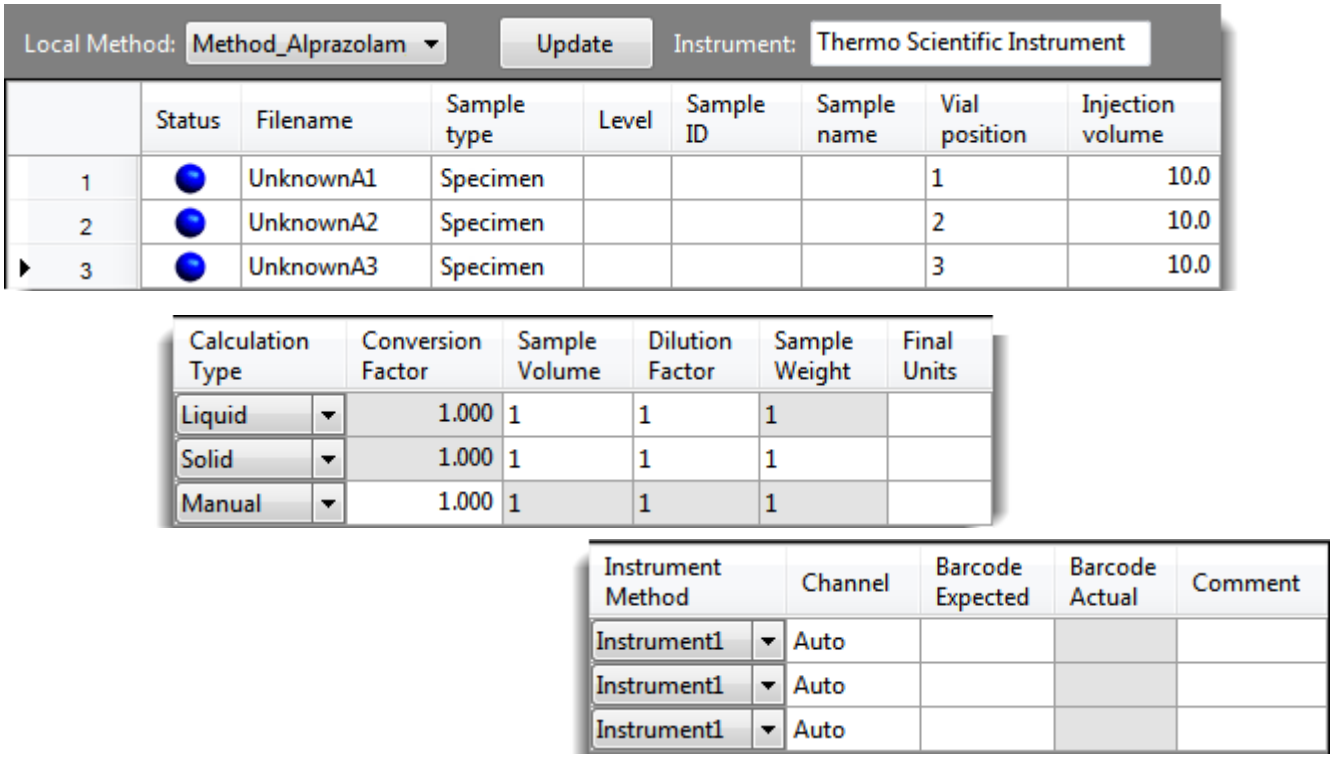
Batch View 样品列表

样品列表显示某个批次样品所有的定量数据。

每个样品的状态指示器会标示该样品的状态是未采集、采集中或已采集完毕或已处理。

样品列表包含下列信息列：

图 72. Batch View 样品列表



样品列表中的单元格不可编辑，例如 Barcode Actual （实际条形码）呈空白阴影。

表 59. Batch View 样品列表列 （第 1 页，共 2 页）

列	描述
Status （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。
Filename （文件名）	包含样品数据的原始数据文件的名称。
Sample Type （样品类型）	定义 TraceFinder 应用程序如何处理样品数据。按照下列样品类型进行样品分类： Specimen （定量样品）、 Specimen/Qual （样品 / 定性）、 QC （质控）、 Solvent （溶剂）、Calibrator （校正品）、 Hydrolysis （水解）、 Unextracted （未提取）或 Negative （阴性） 默认值：Specimen
Level （水平）	为校正样品或质控样品定义的水平。
Sample ID （样品标识号）	用户定义的用以识别样品的字母数字字符串。
Sample Name （样品名称）	用户定义的用以识别样品的名称。
Vial Position （样品瓶位置）	用于自动进样器采集的托盘样品瓶编号。
Injection Volume （进样体积）	要进样的样品体积，单位为微升。 使用自动进样器时，可以在 Instrument View （仪器视图）的 Autosampler （自动进样器）对话框中设置默认进样体积。可以使用的最小和最大进样体积取决于自动进样器的配置。可用范围取决于进样模式，并且可能比显示的范围小。 主方法中设置的 Injection Volume 值覆盖了仪器方法中的值。 范围：0.1 至 5000 µL
Calculation Type （计算类型）	**Liquid：** 应用程序计算换算系数如下 *样品体积* ¸ *稀释因子* **Solid：** 应用程序计算换算系数如下 （*样品体积* × *稀释因子*） ¸ *样品质量* **Manual：** Sample Volume、 Dilution Factor、 Sample Weight 和 Final Units 列均不可用，而可以编辑 Conversion Factor 值。
Conversion Factor （换算系数）	仅当 Calculation Type 为手动时可以编辑。默认值：1
Sample Volume （样品体积）	默认值：1

表 59. Batch View 样品列表列 （第 1 页，共 2 页）

列	描述
Status （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。
Filename （文件名）	包含样品数据的原始数据文件的名称。
Sample Type （样品类型）	定义 TraceFinder 应用程序如何处理样品数据。按照下列样品类型进行样品分类： Specimen （定量样品）、 Specimen/Qual （样品 / 定性）、 QC （质控）、 Solvent （溶剂）、Calibrator （校正品）、 Hydrolysis （水解）、 Unextracted （未提取）或 Negative （阴性） 默认值：Specimen
Level （水平）	为校正样品或质控样品定义的水平。
Sample ID （样品标识号）	用户定义的用以识别样品的字母数字字符串。
Sample Name （样品名称）	用户定义的用以识别样品的名称。
Vial Position （样品瓶位置）	用于自动进样器采集的托盘样品瓶编号。
Injection Volume （进样体积）	要进样的样品体积，单位为微升。 使用自动进样器时，可以在 Instrument View （仪器视图）的 Autosampler （自动进样器）对话框中设置默认进样体积。可以使用的最小和最大进样体积取决于自动进样器的配置。可用范围取决于进样模式，并且可能比显示的范围小。 主方法中设置的 Injection Volume 值覆盖了仪器方法中的值。 范围：0.1 至 5000 µL
Calculation Type （计算类型）	**Liquid：** 应用程序计算换算系数如下 *样品体积* ¸ *稀释因子* **Solid：** 应用程序计算换算系数如下 （*样品体积* × *稀释因子*） ¸ *样品质量* **Manual：** Sample Volume、 Dilution Factor、 Sample Weight 和 Final Units 列均不可用，而可以编辑 Conversion Factor 值。
Conversion Factor （换算系数）	仅当 Calculation Type 为手动时可以编辑。默认值：1
Sample Volume （样品体积）	默认值：1

表 59. Batch View 样品列表列 （第 2 页，共 2 页）

列	描述
Dilution Factor （稀释因子）	默认值：1
Sample Weight （样品质量）	仅当 Calculation Type 为固体时可以用。默认值：1
Final Units （最终单位）	指定在 Report 视图内 Active View 页面上的 Data Review 视图，或者报告上的计算量的单位。 默认值：1
Instrument Method （仪器方法）	指定用于采集的仪器。
Channel （通道）	指定样品运行的通道。若样品未采集，则该值为 Pending （待定）。仅当在 Configuration 模式中启用多通道时， Channel 列才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。
Barcode Expected （预期条形码）	
Barcode Actual （实际条形码）	
Comment （注释）	用户为样品定义的备注。

Batch View 快捷菜单

Batch View 包含一个用于创建批次的快捷菜单。

表 60. Batch View 快捷菜单命令 （第 1 页，共 2 页）

命令	描述
Add Sample （添加样品）	在样品栅格中添加单个空行。
Insert Sample （插入样品）	在样品栅格中所选行之前插入单个空行。
Insert Copy Sample （插入复制样品）	复制当前选择行并在该行之前插入复制行。
Reinject Selected Samples （所选样品重新进样）	创建所选样品的副本并在文件名称中附加 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。
Remove Selected Samples （移除所选样品）	从样品栅格中移除所选样品。
Import Samples （导入样品）	打开 Sample Import Tool （样品导入工具）。参阅第 281 页的 “ 要在列表中导入样品 ”。
Browse in Raw File （浏览原始文件）	打开一个对话框，可以在其中选择要用于所选样品行的原始数据文件。

表 60. Batch View 快捷菜单命令 （第 2 页，共 2 页）

命令	描述
Map Raw Files To Samples （选择样品的原始文件）	打开一个对话框，可以在其中选择要用于所选样品行的多个原始数据文件。
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）	在该列中输入从所选行中的值开始到最后一行的连续值。仅当已选中一个可以向下填充的值时，该命令才可用。
Modify Columns （修改列）	打开 Modify Columns 对话框。参阅第 317 页的 “ 列显示 ”。
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 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回 Batch View 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样品列表中。 例如： 从 TraceFinder 中带标题复制 粘贴至 Excel 电子数据表
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 Batch View 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，在此可以将当前样品列表保存为 .csv 文件。

创建新批次

在 Batch View 中，可以创建新批次。

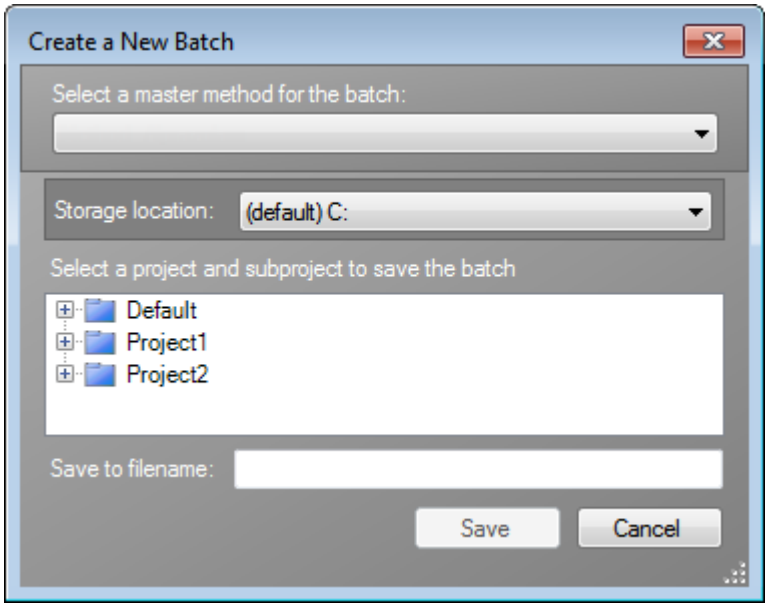
按照如下步骤进行操作：

- 若要创建新批次
- 若要在列表中添加样品
- 若要在列表中插入样品
- 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
- 若要浏览原始数据文件
- 若要自定义列显示

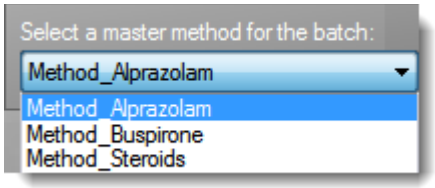
❖ 若要创建新批次

1. 点击 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）**。

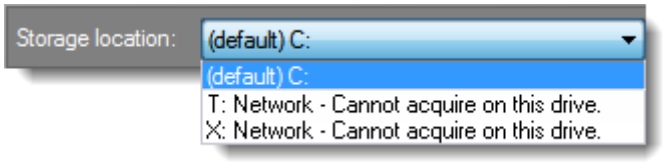
   Create a New Batch （创建新批次）对话框打开。



2. 从 Method （方法）列表选择主方法。



3. 从 Storage Location （保存位置）列表中选择一个驱动器。



项目列表显示所选驱动器中的所有项目、子项目和批次。

提示 应用程序不显示不包含项目和子项目的驱动器。

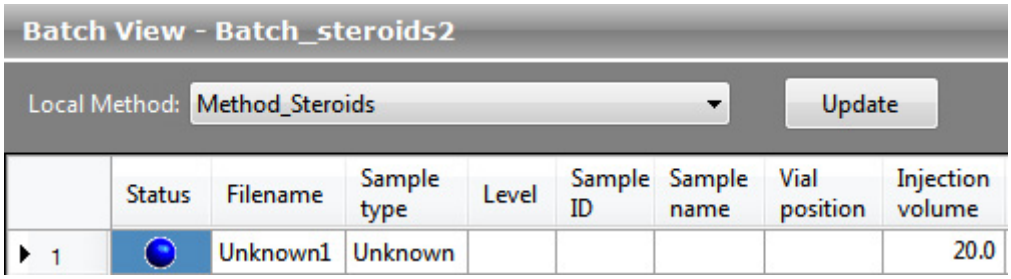
无法用网络驱动器采集数据。有关网络驱动器的详细信息，参阅第 47 页的 “ 使用驱动器 ”。

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**。

带有一个未知样品的新的、未命名的批次显示。



❖ 若要在列表中添加样品

1. 若要添加单样品行，右击样品列表然后从快捷菜单中选择 **Add Sample**。
2. 若要添加多个样品行，选择行数目然后点击 **Add Sample** 图标， 。

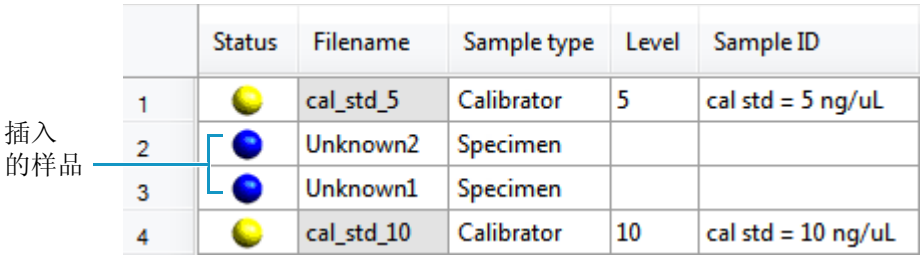
应用程序将指定数量的新的空白样品添加至样品列表的末尾。

❖ 若要在列表中插入样品

选择将会在其上方插入新 Specimen 样品，然后执行以下操作：

- 若要插入单样品行，右击并从快捷菜单中选择 **Insert Sample**。
- 若要插入多个样品行，选择行数目然后点击 **Insert Sample** 图标 。

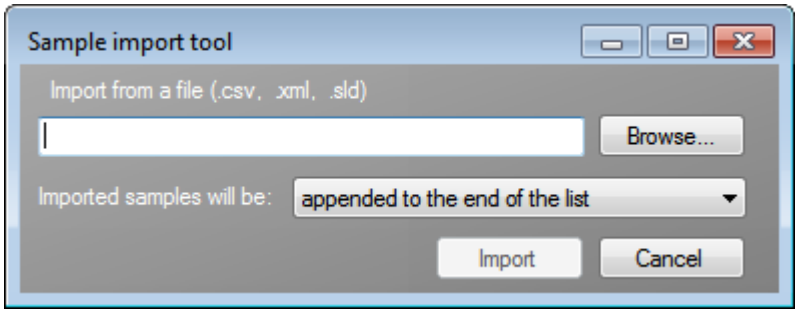
应用程序会将 Specimen 样品插入到所选样品上方。



❖ 要在列表中导入样品

1. 从主菜单选择 **Batch （批次） > Import Samples （导入样品）**，或点击 **Import Samples** 图标， 。

   Sample Import Tool 对话框显示。



   可以在此对话框导入 .csv， .xml 或 .sld 文件中的样品。

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。
3. 从 Imported Samples Will Be （导入样品将被）列表中，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样品列表。

   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：

Xcalibur 列	TraceFinder 列
Position （位置）	Vial Position （样品瓶位置）
Inj Vol （进样体积）	Injection Volume （进样体积）
Dil Factor （稀释因子）	Conversion Factor （换算系数）

   当从 Xcalibur 序列文件 （.sld）中导入样品时， TraceFinder 应用程序替换以下样品类型：

Xcalibur 样品类型	TraceFinder 样品类型
Blank （空白样）	Negative （阴性）
Std Bracket （标曲更新）	Calibrator （校正品）

5. （可选）当使用多通道时，为每个导入样品选择通道。

   导入样品默认为 Auto （自动）。

   注释 仅当在 Configuration 模式中启用多通道时， Channel 列才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道）”。

❖ 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**。

❖ 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**。

   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 **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：

   在当前文件名上输入新文件名。

   – 或 –

   双击 Filename 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**，然后找到用于样品的原始数据文件。

   默认情况下，应用程序将 Sample Type 设置为 Unknown。

2. 对于每一个添加的样品，点击 Sample Type 列，然后从列表中选择样品类型。

可用的样品类型		
Specimen （样品）	Specimen/Qual （样品 / 定性）	QC （质控）
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 列表中选择一个水平。

   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）**。

应用程序以新样品水平更新本地方法。

有关详细说明，参阅第 4 章 , “ 使用 Method Development 模式。 ”

4. 在 Vial Position 列中为每个样品输入样品瓶位置。

5. 在 Injection Volume 列中为每个样品输入体积。

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

6. （可选）键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 和 Filename、 Sample Type、 Level 列将保持固定，其他列可左右滚动。

有关在这些列中自动复制或填充值的说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”

❖ 若要浏览原始数据文件

1. 执行下列操作之一：

   双击 Filename 列。

   – 或 –

   右击并从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File**。

   What Raw File Would You Like to Use （您希望使用什么原始文件）对话框将打开。

2. 选择用于样品的原始数据文件，或是要 CTRL 键选择多个文件，然后点击 **Open （打开）**。

   应用程序将批次中已选择且尚未采集的样品覆盖为首个 “ 浏览到 ” 的文件，然后将其他浏览到的文件插入到所选样品的上方。

   对于所有浏览到的原始数据文件，应用程序将 Status 设置为 Acquired （已采集）， ，将 Sample Type 设置为 Unknown。

> **注释** 无法覆盖一个已采集的样品。当选择已采集样品时，应用程序将浏览到的文件插入所选样品上方。

❖ 若要自定义列显示

1. 右击 Batch View 样品列表，然后从快捷菜单中选择 **Modify Columns**。

   Modify Columns 对话框打开。

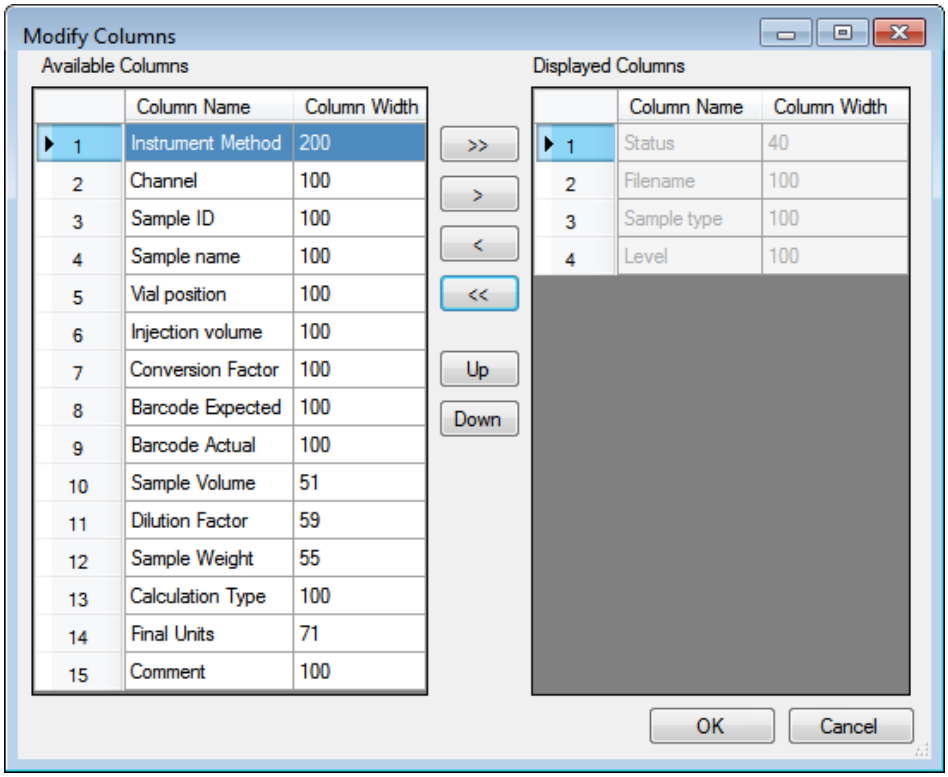


表 61. Modify Columns 对话框功能按钮

功能	描述
>>	将所有列移动到 Displayed Columns 窗格。
>	将所选列移动到 Displayed Columns 窗格。
<	将所选列移动到 Available Columns 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。
Up	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。
Down	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。

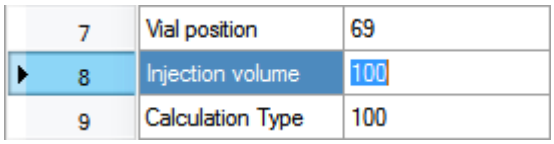
   所有选中列显示在 Status、 Filename、 Sample 或 Level 列之后。

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** 或 **Down** 在列表中上下移动所选列。

      列表中的首列代表 Batch View 样品列表中的最左列；列表中的末列代表 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。



   b. 输入一个新的宽度值。

5. 完成更改后，点击 **OK**。

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

编辑批次

在 Batch View 中，可以打开已保存的批次并编辑样品列表。可以添加、编辑或移除样品。如果批次已采集，可以选择要重新进样的特定样品。如果完成编辑时该批次有尚未采集的样品，则可以将其保存为待运行 （.tbr）批次。

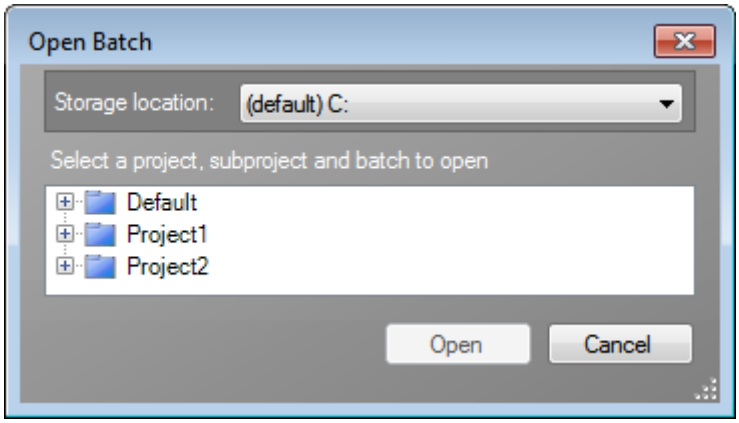
按照如下步骤进行操作：

- 若要打开已保存的批次
- 若要打开最近的批次
- 若要编辑批次中的样品
- 若要重新进样先前采集批次中的样品
- 若要提交批次中的所有样品
- 若要提交所选样品

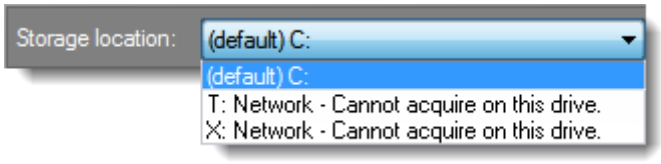
❖ 若要打开已保存的批次

1. 从 Batch View 任务窗口，点击 **Open Batch （打开批次）**。

   Open Batch 对话框打开。



2. 从 Storage Location 列表中选择一个驱动器。



   项目列表显示所选驱动器中的所有项目、子项目和批次。

3. 选择一个项目、子项目或批次。
4. 点击 **Open**。

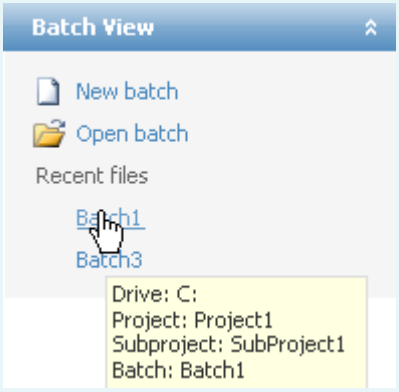
   所选批次将在 Batch View 中打开。

❖ 若要打开最近的批次

点击 Recent Files （最近文件）列表中的批次名称。

所选批次将在 Batch View 中打开。

提示 若要查看最近批次的驱动器、项目和子项目，在批次名称上方按住光标。



❖ 若要编辑批次中的样品

使用第 267 页的 “ 使用 Batch View” 中的命令。

可以编辑样品、添加新样品、重新进样采集的样品或删除样品。

❖ 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 **Reinject This sample**。

   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。

   绿色状态图标代表先前已采集的样品 （已采集和处理），样品名变灰。蓝色状态图标代表为重新进样 （未采集）而创建的样品。

●	cal_50_INJ001	Calibrator	10
●	cal_50_INJ002	Calibrator	10
●	cal_50	Calibrator	10
●	cal_10_INJ001	Calibrator	10
●	cal_10	Calibrator	10

   当提交该批次中的所有样品时，应用程序采集所有样品 （包括先前采集的样品）。

3. 若要保存此添加新样品的批次以重新进样，可从主菜单选择 **File （文件） > Save （保存） > Batch （批次）**。

   该批次保存为 .tbr 批次。可以从 Acquisition 模式的 Ready to Acquire （准备采集）页面打开该批次。应用程序采集所有已提交的样品 — 重新进样的样品和先前采集的样品。应用程序在已采集的原始数据文件中附加一个时间戳，以示区别。

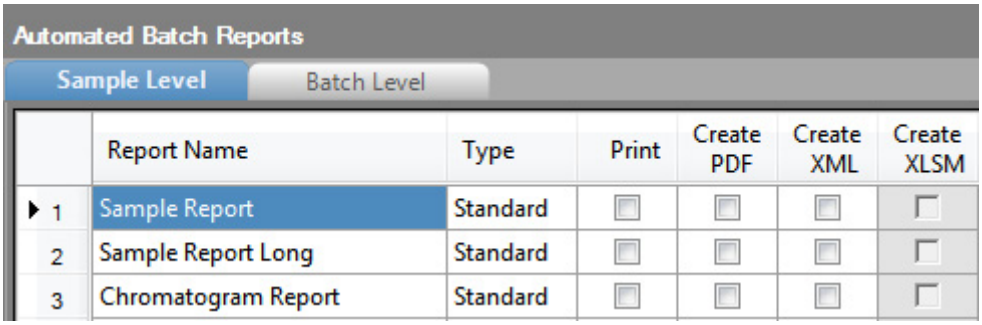
编辑报告输出格式

在 Automated Batch Reports 窗格中，可以查看为该批次选择的报告和为每份报告修改生成的输出格式。

❖ 若要编辑样品 - 水平输出格式

1. 点击 **Sample Level （样品水平）**选项卡。

   应用程序显示报告和在方法中指定的其他输出格式。



   有关指定生成哪些报告和哪种输出格式的说明，参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

2. 选中或清除报告的任意复选框。
3. 若要为所有报告复制输出格式，在单元格中右击然后从快捷菜单选择 **Copy Down**。

   位于列中所选单元以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。可以仅对该输出类型可用的报告复制输出类型。

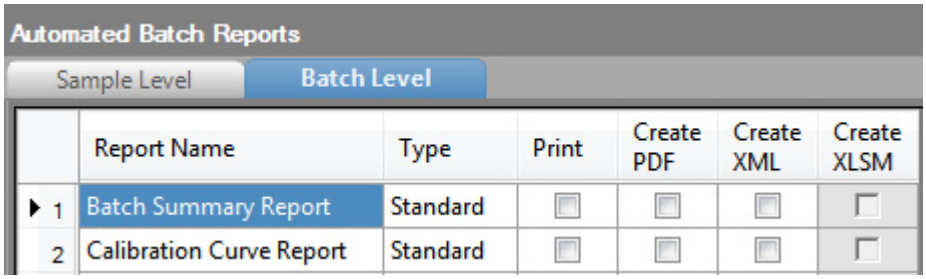
4. 若要为批次中的所有样品复制输出格式，右击单元格然后从快捷菜单选择 **Apply Selection to All Samples （对所有样品应用选择）**。

> **提示** 在 Batch View 中，可以更改输出格式，但是无法更改哪些报告可用。

❖ 若要编辑批次 - 水平输出格式

1. 点击 **Batch Level （批次水平）**选项卡。

   应用程序显示报告和在方法中指定的其他输出格式。



   有关指定生成哪些报告和哪种输出格式及哪些报告为批次 - 水平的说明，参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

2. 选中或清除报告的任意复选框。

3. 若要为所有报告复制输出格式，右击单元格然后从快捷菜单选择 **Copy Down**。

   位于列中所选单元以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。可以仅对该输出类型可用的报告复制输出类型。

> **提示** 在 Batch View 中，可以更改输出格式，但是无法更改哪些报告可用。

设置 Compound Active Status

利用 Compound Active Status 窗格激活或停用特定化合物。

❖ 若要设置化合物为活动或非活动状态

1. 在样品列表中，选中一个样品。

   所选样品中的所有化合物均显示在 Compound Active Status 窗格中。默认活动 / 停用状态取决于本地方法的设置。有关设置识别参数的更多信息，参阅第 119 页的 “Identification”。

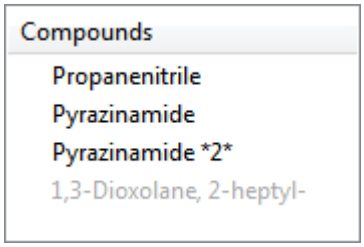
   - 若要按照字母顺序显示化合物，右击并从快捷菜单选择 **Sort by Compound Name（按化合物名称排序）**。
   - 若要按照保留时间从短到长的次序显示化合物，右击并从快捷菜单选择 **Sort by Retention Time （按保留时间排序）**。

Compound Active Status

	RT	Compound	Active
1	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-	☐
2	3.14	Propanenitrile	☑
3	3.15	Pyrazinamide	☑
▶ 4	4.70	Pyrazinamide *2*	☑

2. 选中或清除化合物的 Active （活动）复选框。

   当在该窗格中将某个化合物指定为非活动时，该化合物在 Data Review 视图的 Compounds 窗格中变为非活动状态。非活动化合物将呈灰色显示。

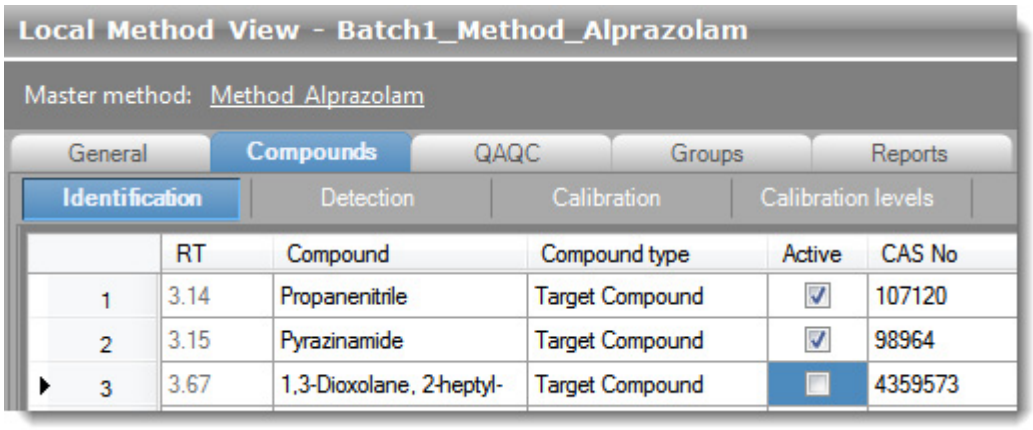


   有关在 Data Review 视图中更改活动 / 非活动状态的说明，参阅第 321 页的 “ 停用或排除化合物 ”。

化合物活动 / 非活动状态

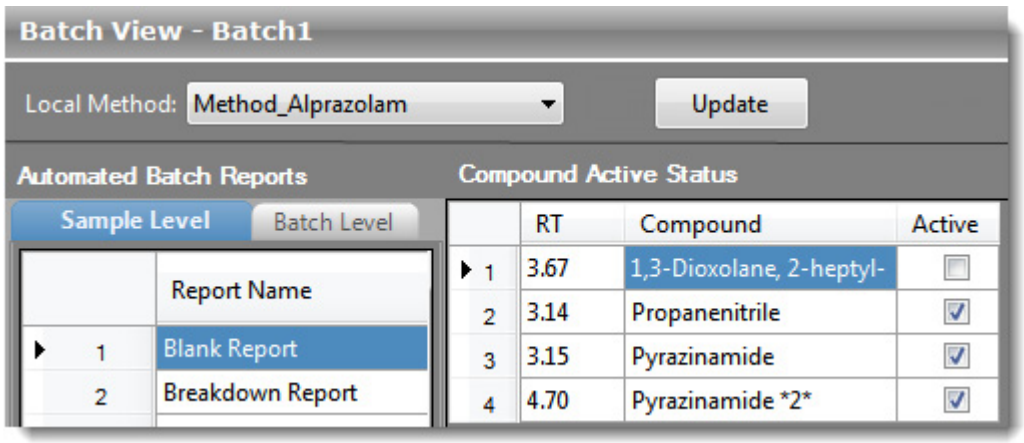
可以在 Local Method View （本地方法视图）、 Batch View 或 Data Review 视图中指定化合物为活动或非活动状态。

图 73. Local Method View 中的活动和非活动化合物



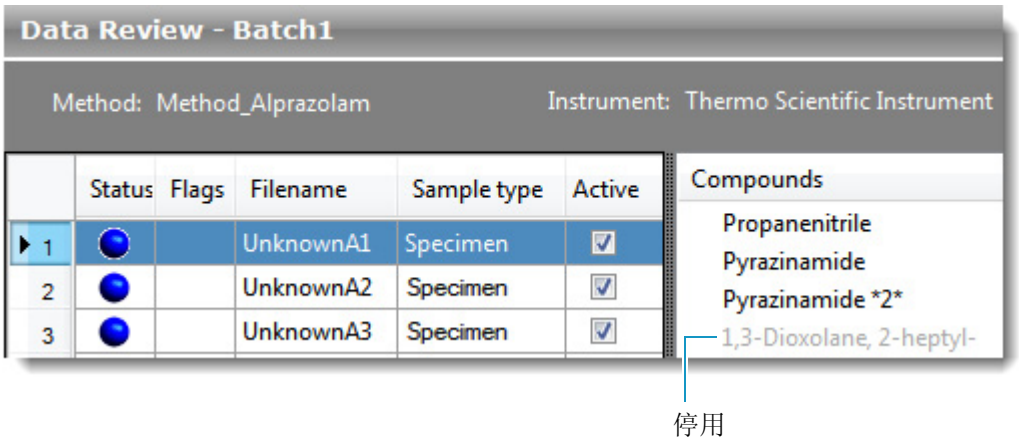
有关 Identification （识别）页面上所有状态设置的详细说明，参阅第 119 页的 “Identification”。

图 74. Batch View 中的活动和非活动化合物



有关 Batch View 页面上所有状态设置的详细说明，参阅第 289 页的 “ 设置 Compound Active Status”。

图 75. Data Review 视图中的活动和非活动化合物



有关 Data Review 视图中所有状态设置的详细说明，参阅第 321 页的 “ 停用或排除化合物 ”。

提交批次

在 Batch View 中，可以提交整个批次或仅提交批次中的选定样品。提交批次用于采集和处理时，可以选择创建已提交样品的报告。参阅第 294 页的 “Submit Options 对话框 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要提交批次中的所有样品
- 若要提交所选样品

有关快捷菜单上命令的描述，参阅第 277 页的 “Batch View 快捷菜单命令 ”。

❖ 若要提交批次中的所有样品

1. 点击 **Submit Batch （提交批次）**按钮， 。

   Submit Options （提交选项）对话框显示。参阅第 294 页的 “Submit Options 对话框 ”。
2. 选择想要执行的任务：采集数据、处理数据或创建报告。
3. （可选）点击 **Show Details （显示详细信息）**以显示其他 Acquisition 参数。
4. 选择要在本次采集中所用设备的 **Use** 复选框。
5. （可选）选中 **Start Device** 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。
6. （可选）选中 **Start When Ready** 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。
7. （多通道启用时可选）选中 **Priority Sequence （优先序列）**复选框。

   应用程序在下一个可通道或指定通道中采集优先批次。
8. （多通道启用时可选）选中 **Priority Sequence** 复选框，然后选择以下其中一个优先选项以将批次安排到队列中：
   - **Next Available Batch （下一可用批次）**将批次放入当前采集的批次后。
   - **Next Available Sample （下一可用样品）**将批次放入当前采集的样品后。
9. 若要开始所选的流程，点击 **OK**。

❖ 若要提交所选样品

1. 选择要提交的样品。
2. 点击 **Submit Selected Samples （提交所选样品）**图标， 。

   Submit Options 对话框显示。参阅 “Submit Options 对话框。 ”
3. 选择想要执行的任务：采集数据、处理数据或创建报告。
4. 选择要在本次采集中所用设备的 **Use** 复选框。
5. （可选）点击 **Show Details** 以显示其他 Acquisition 参数。

6. （可选）选择 **Start Device** 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。

7. （可选）选中 **Start When Ready** 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。

8. （多通道启用时可选）选中 **Priority Sequence** 复选框。

   应用程序在下一个可通道或指定通道中采集优先批次。

9. （多通道启用时可选）选中 **Priority Sequence** 复选框，然后选择以下其中一个优先选项以将批次安排到队列中：

   - **Next Available Batch** 将批次放入当前采集的批次后。
   - **Next Available Sample** 将批次放入当前采集的样品后。

10. 若要开始所选的流程，点击 **OK**。

图 76. Submit Options 对话框

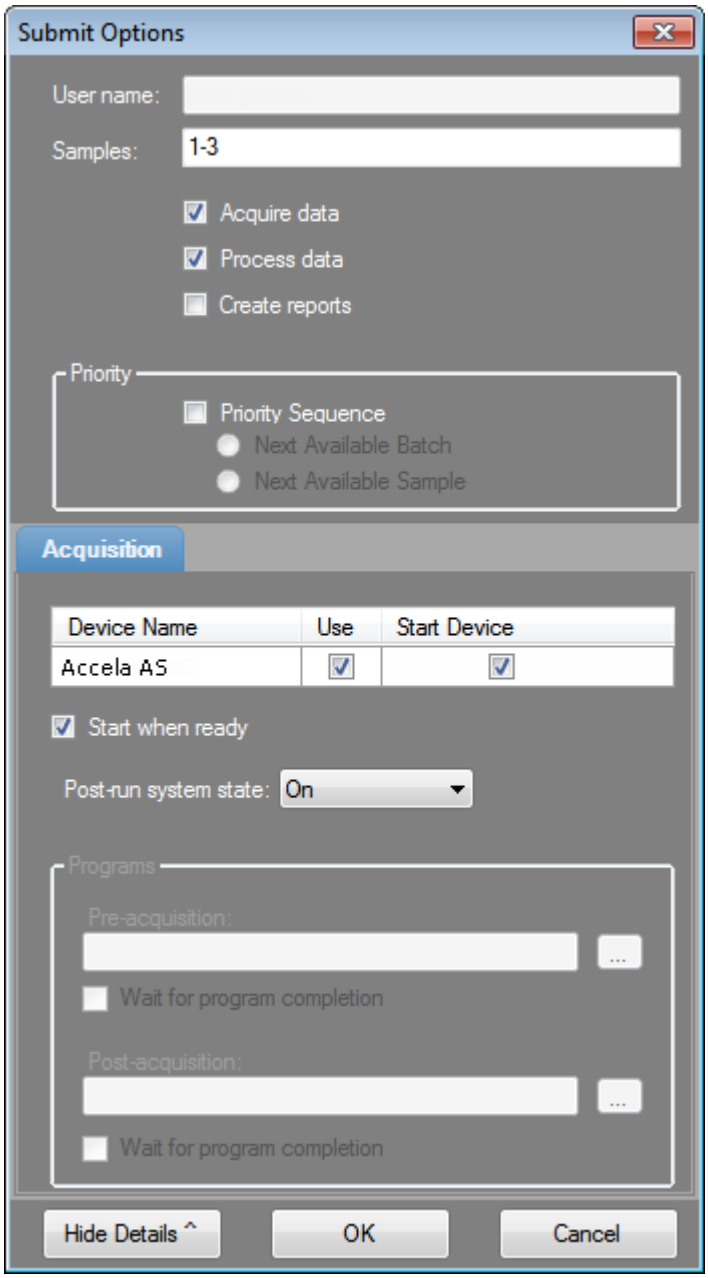


表 62. Submit Options 对话框参数

参数	描述
User Name（用户名）	当前用户的名称。
Samples （样品）	准备提交用于采集、处理或报告的样品范围。
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）	多通道启用时，将批次放入当前采集的批次后。 多通道未启用时，指定以下其中一种优先级选项以将批次放入队列中： • **Next Available Batch** 将批次放入当前采集的批次后。 • **Next Available Sample** 将批次放入当前采集的样品后。
Acquisition 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。这通常是自动进样器。
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。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。
Post-run System State（运行后系统状态）	指定系统在采集完最后批次后的状态。 On （默认）、 Standby，或 Off。
功能按钮	
Hide/Show Details （隐藏 / 显示详细信息）	收起或展开 Submit Options 对话框的采集详细信息。
OK （确定）	开始所选的流程。
Cancel （取消）	在不提交任何任务的情况下关闭 Submit Options 对话框。

将批次保存到新位置

可以将当前批次移动到不同项目或子项目，或者复制它并将批次副本保存到不同的项目和子项目中。

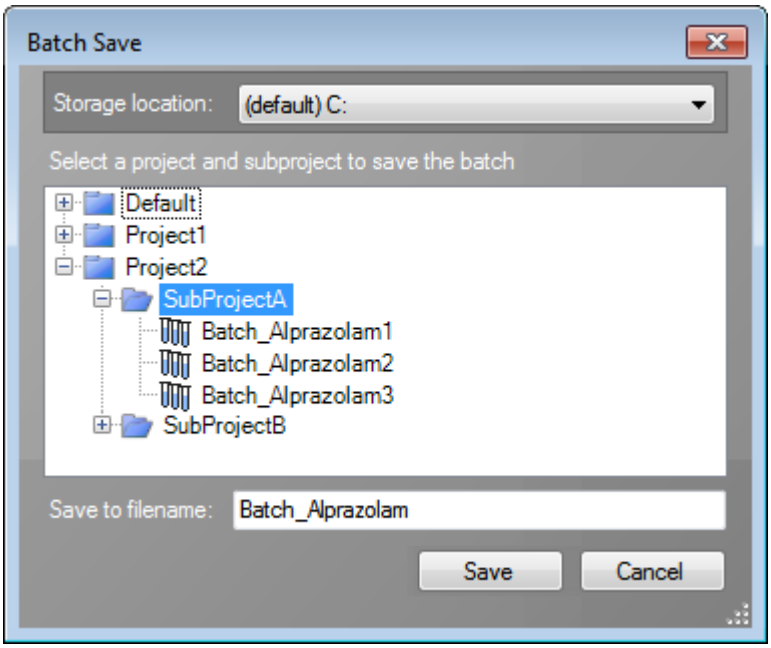
按照如下步骤进行操作：

- 若要将批次保存到另一个项目或子项目
- 若要将批次移动到另一个项目或子项目

❖ 若要将批次保存到另一个项目或子项目

1. 从 Analysis 模式的主菜单中选择 **File （文件） > Save （保存） > Save Batch As （将批次另存为）**。

   Batch Save （批次保存）对话框显示。



2. 选择一个存储位置。
3. 选择一个项目。
4. 选择一个子项目。
5. 为新批次输入名称。

   如果将批次保存到另一个子项目，其名称必须是唯一的。无法覆盖新的子项目中已有的批次。

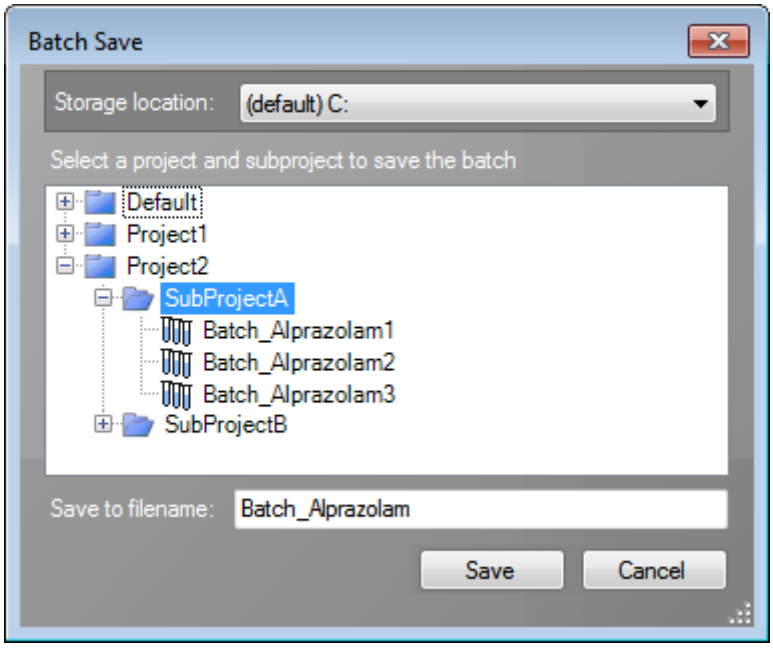
6. 单击 **Save**。

   当将批次保存到另一个子项目时，报告反映出原始的项目 / 子项目，应用程序不会保存校正历史。

❖ **若要将批次移动到另一个项目或子项目**

1. 从 Analysis 模式的主菜单中选择 **File （文件） > Save （保存） > Move Batch （移动批次）**。

   Batch Save 对话框显示。



2. 选择一个存储位置。
3. 选择一个项目。
4. 选择一个子项目。
5. 为新批次输入名称。

   必须为新的子项目中的批次提供一个唯一的名称。无法覆盖一个已存在的批次。

6. 单击 **Save**。

   当移动批次时，报告反映出原始的项目 / 子项目，应用程序不会保存校正历史。

利用 Batch Wizard 创建批次

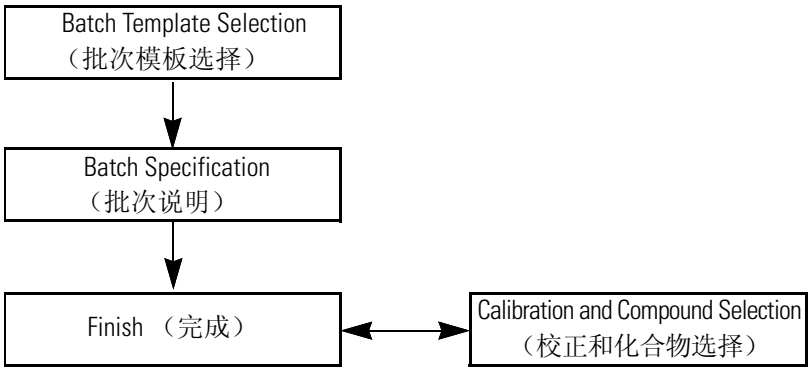
利用 Batch Wizard （批次向导），可以定义由待分配到样品批次中的各种样品类型组成的序列。在利用 Batch Wizard 创建批次前，必须已有一个主方法和批次模板。参阅第 91 页的 “ 创建新主方法 ” 和第 376 页的 “ 使用 Batch Template Editor”。

注释 仅当在 Configuration 模式中选择 Batch Template Wizard （批次模板向导，EnviroLab/ToxLab/QuanLab 格式）批次向导风格时 , 批次向导才可用。参阅第 61 页的 “Application Configuration”。

按照 Batch Wizard 中的步骤创建和提交批次 :

- 选择批次模板
- 指定批次
- 提交批次
- （可选）选择校正文件和化合物

Batch Wizard 工作流程使用以下页面 :



❖ **若要打开 Batch Wizard**

从 Analysis 模式的主菜单中选择 **File （文件） > New （新建） > Batch Using Wizard （批次使用向导）**，或者点击 **Batch Wizard** 图标， 。

注释 使用 Batch Wizard 创建批次要求以前至少创建过一个批次模板。参阅第 376 页的 “ 使用 Batch Template Editor”。

Batch Wizard 的 Batch Template Selection （批次模板选择）页面打开。有关 Batch Template Selection 页面上参数的描述，参阅第 300 页的 “Batch Template Selection 页面 ”。

选择批次模板

从 Batch Template Selection 页面可以创建用于采集或处理的批次列表。有关 Batch Template Selection 页面上参数的描述，参阅 “Batch Template Selection 页面。 ”

❖ 若要创建批次列表

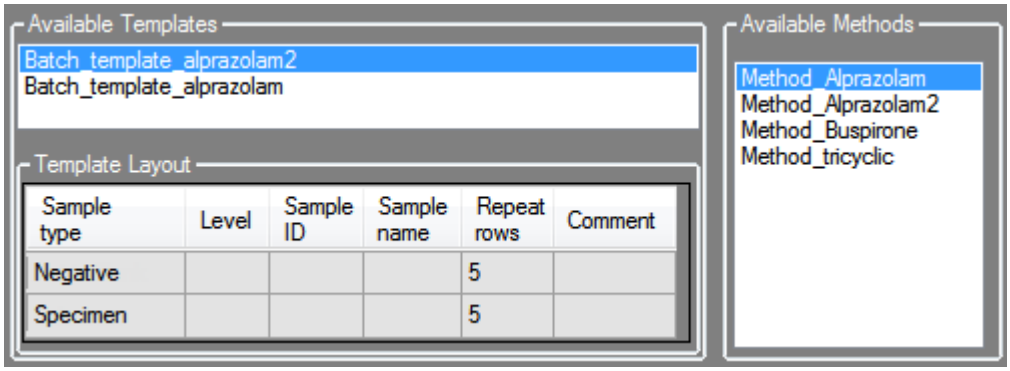
1. 从 Project （项目）列表中选择一个项目。
2. 从 Subproject （子项目）列表中选择一个子项目。

   Available Templates （可用模板）区域列出了指定子项目中的所有模板。
3. 选择一个起始样品瓶位置。

   默认样品瓶位置为 1，但用户可以选择从任意样品瓶位置开始采集。
4. （可选）若要简化样品列表，选中 **Quick Mode （快速模式）**复选框。

   Quick Mode 将 Batch Specification （批次说明）页面上的列信息限制为以下：
   - Sample Type
   - Sample ID
   - Injection Volume
   - Conversion Factor
5. 从 Available Templates 中选择定义为希望采用的布局的模板。

   Template Layout （模板布局）区域显在所选批次模板中显示样品信息和采用与模板相同实验类型的方法列表。



6. 选择可用方法。

   默认情况下，应用程序选择用于创建批次模板的方法，但用户可以在 Available Methods （可用方法）列表中选择任意方法。
7. 若要转至下一向导视图，点击 **Next （下一步）**。

   从向导的 Batch Specification 页面可以自定义批次。

图 77. Batch Template Selection 页面

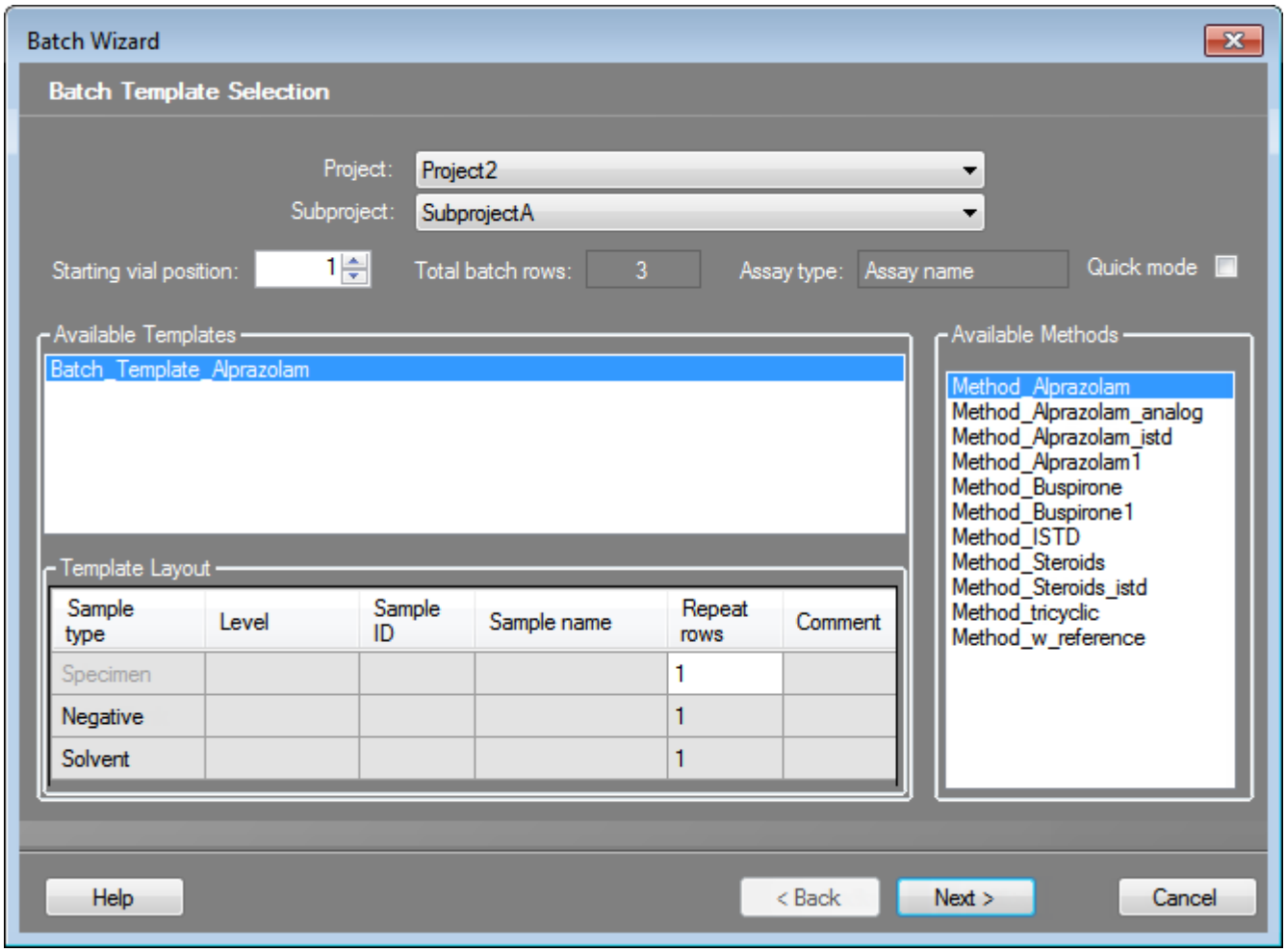


表 63. Batch Template Selection 参数

参数	描述
Starting Vial Position（起始样品瓶位置）	用户希望开始采集样品的样品瓶位置。 默认值：1
Total Batch Rows（总批次行）	批次模板中的样品行数。
Assay Type（实验类型）	主方法中指定的实验类型用于创建批次模板。
Quick Mode（快速模式）	将 Batch Specification 页面上的列信息限制为以下： • Sample Type • Sample ID • Injection Volume • Conversion Factor
Available Templates（可用模板）	所有批次模板保存在下列文件夹中： …\Thermo\TraceFinder\2.1\Forensic\Templates\Batches
Template Layout（模板布局）	在所选批次模板中显示样品信息。
Available Methods（可用方法）	列出所有以与所选批次模板一致的实验类型创建的主方法。
Help （帮助）	在应用程序的 Help 工具中打开 “Creating a Batch Using the Batch Wizard （利用 Batch Wizard 创建批次）” 主题 （该主题）。
Next （下一步）	返回至 Batch Specification 页面，在此可以输入样品 ID、样品名称或注释。可以从样品列表中添加或移除样品或编辑样品的列值。参阅第 302 页的 “ 指定批次 ”。
Cancel （取消）	立刻退出 Batch Wizard 且不保存批次。没有确认信息。

指定批次

从 Batch Specification 页面，必须输入样品 ID、样品名称或注释中的一个。可以从样品列表中添加或移除样品或编辑样品的列值。批次模板可能包含不想用于批次的多个样品。若没有为这些样品输入样品 ID、样品名称或注释，应用程序在用户保存批次时会删除这些样品。有关 Batch Specification 页面上参数的描述，参阅第 305 页的 “Batch Specification 页面 ”。

❖ 若要输入样品 ID、样品名称或注释

1. 在 Sample ID 列中输入识别号。

   识别号可以为任意文本串。

2. 在 Sample Name 列中输入名称。

   名称可以为任意文本串。

3. 在 Comment 列中输入注释。

   注释可以为任意文本串。

> **注释** 应用程序至少需要一个字段值以采集样品。当批次开始采集时，应用程序丢弃那些不含该字段值的样品。

❖ 若要简化样品列表

选中 **Quick Mode** 复选框。

在 Quick Mode 中， Batch Specification 页面仅显示以下列：

- Sample Type （样品类型）
- Sample ID （样品识别号）
- Injection Volume （进样体积）
- Conversion Factor （换算系数）

在 Quick Mode 中，无法从样品列表中添加或移除样品。仅可以为在模板中指定的样品编辑这四列值。

当未使用 Quick Mode 时，执行以下步骤：

- 若要将样品添加到批次
- 若要移除批次中的样品
- 若要在批次中插入样品
- 若要复制样品
- 若要在样品列表中上下移动样品
- 若要浏览原始数据文件

❖ 若要将样品添加到批次

1. 右击然后从快捷菜单中选择 **Add Sample**，或者点击 add sample 图标， 。

   应用程序将新的 Specimen 样品添加到样品列表的末尾。

2. 在每个样品的 Filename 列中输入一个文件名。

   注释 或者，右击并从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File**。按照 " 若要浏览原始数据文件 " 的说明进行操作。

3. 从 Sample Type 列表中为每个样品选择样品类型。

可用的样品类型		
Specimen （样品）	Specimen/Qual （样品 / 定性）	QC （质控）
Solvent （溶剂）	Calibrator （校正品）	Hydrolysis （水解）
Unextracted （未提取）	Negative （阴性）	

4. 有关样品类型的详细说明，参阅第 261 页的 " 样品类型 "。
5. 为每个 Calibrator 或 QC 样品，从 Level 列表中选择一个水平。

   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. 取消 Batch Wizard。
   b. 返回 Method Development 模式。
   c. 打开该方法。
   d. 点击 **Compounds** 选项卡。
   e. 点击 **Calibration Levels** 选项卡。
   f. 添加水平。
   g. 保存方法。
   h. 返回至 Analysis 模式，打开 Batch Wizard，然后再次开始批次。

   有关定义样品水平的详细说明，参阅第 4 章 , " 使用 Method Development 模式。 "

6. 在新样品的 Vial Position 列，输入样品瓶位置。
7. 在新样品的 Injection Volume 列，输入进样量。

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

8. （可选）键入或编辑其它列的值。

   注释 在 Quick Mode 中 Add Sample 功能不可用。

❖ 若要移除批次中的样品

1. 选择要移除的样品。
2. 右击然后从快捷菜单中选择 **Remove Selected Samples**，或右击移除样品图标， 。

   应用程序从样品列表中移除所选样品。

   注释 在 Quick Mode 中 Remove Selected Samples 功能不可用。

❖ 若要在批次中插入样品

1. 选择要在其上方插入新样品的样品。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Insert Sample**。

   应用程序会将新 Specimen 样品插入到所选样品上方。

注释 在 Quick Mode 中 Insert Sample 功能不可用。

❖ 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**。

   应用程序将复制的样品插入到选定样品上方。

注释 在 Quick Mode 中 Insert Copy Sample 功能不可用。

❖ 若要在样品列表中上下移动样品

1. 选择要移动的样品。
2. 右击然后从快捷菜单中选择 **Move Sample Up （上移样品）**或 **Move Sample Down （下移样品）**。

   应用程序在样品列表中将所选样品上移或下移一行。

注释 在 Quick Mode 中 Move Sample 功能不可用。

❖ 若要浏览原始数据文件

1. 双击 Filename 列或从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File**。

   打开一个对话框，可以在其中选择要用于样品的原始数据文件。可以浏览多个原始数据文件以创建多个样品。
2. 找到要使用的原始数据文件，然后点击 **Open**。

注释 在 Quick Mode 中 Browse in Raw File 功能不可用。

图 78. Batch Specification 页面

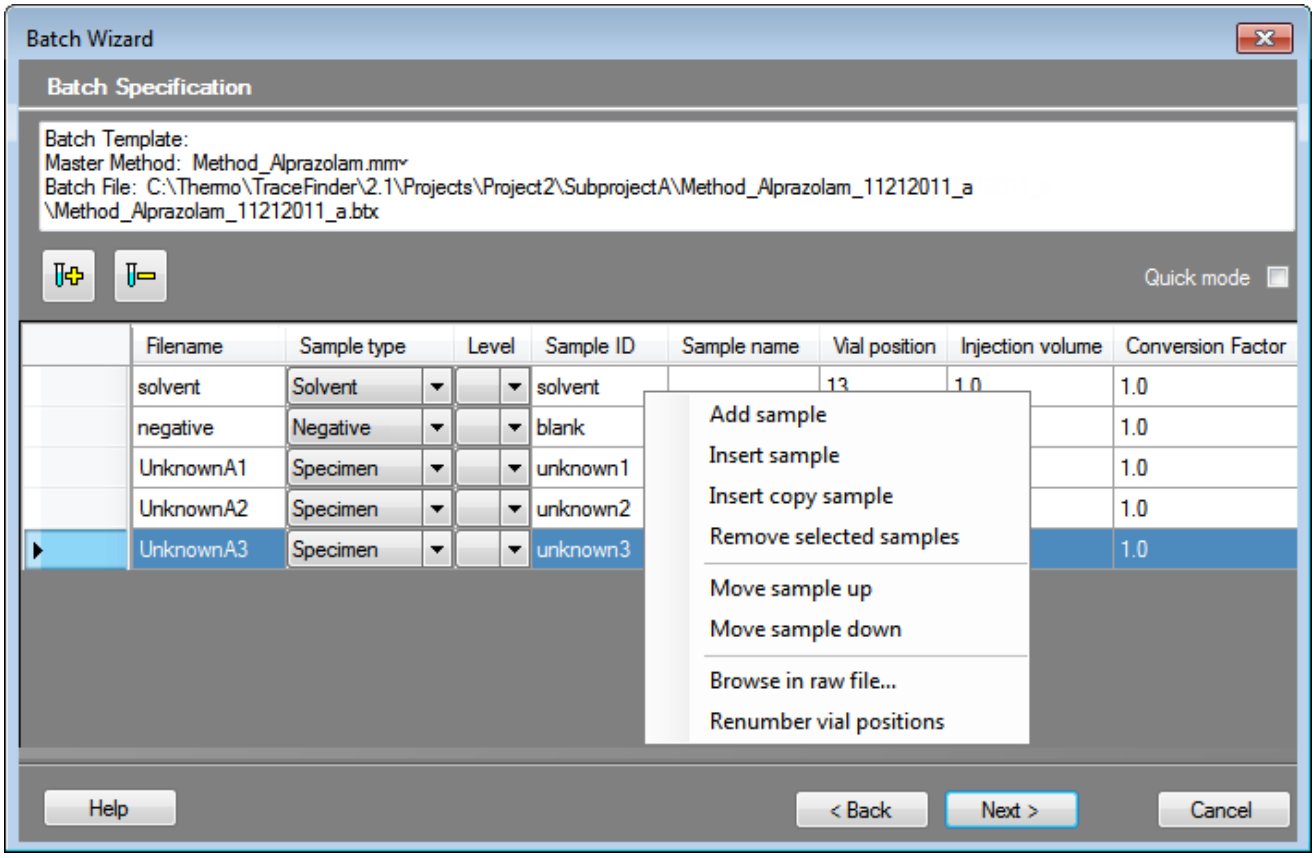


表 64. Batch Specification 参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Batch Template （批次模板） Master Method （主方法） Batch File （批次文件） Calibration File （校正文件）	显示用于创建批次的批次模板、主方法、批次文件和校正文件的路径名称。
	新的 Specimen 样品添加到样品列表的末尾。 在 Quick Mode 中该功能不可用。
	移除所选样品。 在 Quick Mode 中该功能不可用。
Quick Mode （快速模式）	将 Batch Specification 页面上的列信息限制为以下： • Sample Type • Sample ID • Injection Volume • Conversion Factor 在 Quick Mode，快捷菜单和添加 / 移除图标不可用。

表 64. Batch Specification 参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Help （帮助）	在应用程序的 Help 工具中打开 “Creating a Batch Using the Batch Wizard” 主题（该主题）。
Back （返回）	返回至 Batch Template Selection 页面，在此可以选择一个不同的批次模板、主方法或起始样品瓶位置。
Next （下一步）	转至 Finish （完成）页面，在此可以提交用于采集或处理的批次。参阅 “ 提交批次。 ”
取消	立刻退出 Batch Wizard 且不保存批次。没有确认信息。
快捷菜单	
Add Sample （添加样品）	在样品列表中添加单个空行。
Insert Sample （插入样品）	将新 Specimen 样品插入到所选行上方。
Insert Copy Sample （插入复制样品）	复制当前选择行并在该行之前插入复制行。
Remove Selected Samples （移除所选样品）	从样品列表中移除所选样品。
Move Sample Up （上移样品）	在列表中将所选样品上移一行。
Move Sample Down （下移样品）	在列表中将所选样品下移一行。
Browse in Raw File （浏览原始文件）	打开一个对话框，可以在其中选择要用于样品行的原始数据文件。可以浏览多个原始数据文件以创建多个样品。
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。有关使用 Fill Down 命令的详细说明，参阅附录 B, “ 使用 Copy Down 和 Fill Down。 ”

提交批次

从 Finish 窗格中，可以更改批次名称，访问 Calibration and Compound Selection （校正和化合物选择）页面以编辑校正文件或编辑待识别的化合物列表，或保存批次然后将其在 Batch View 中打开。有关 Finish 页面上参数的详细说明，参阅 “Finish 页面。 ”

按照如下步骤进行操作：

- 若要更改批次名称
- 若要保存批次
- 若要编辑校正文件
- 若要识别特定化合物或化合物组

❖ 若要更改批次名称

在 Batch Name （批次名称）框内输入名称。

无法覆盖一个已存在的批次名称。若要为已存在的批次输入名称，当点击 Finish 时，出现 Batch Save 对话框要求用户输入另一个名称。

❖ 若要保存批次

点击 **Finish**。

应用程序保存批次并将其显示在 Batch View 中。从 Batch View 中可以提交批次用于采集、处理或生成报告。参阅第 292 页的 “ 提交批次 ”。

❖ 若要编辑校正文件

1. 选中 **Modify Calibrations or Active Compounds by Group （通过组修改校正或活动化合物）**复选框。

   应用程序以 Next 按钮替换 Finish 按钮。

2. 点击 **Next**。

   Calibration and Compound Selection 页面打开。参阅第 310 页的 “ 选择校正文件和化合物 ”。

❖ 若要识别特定化合物或化合物组

1. 选中 **Modify Calibrations or Active Compounds by Group** 复选框。

   应用程序以 Next 按钮替换 Finish 按钮。

2. 点击 **Next**。

   Calibration and Compound Selection 页面打开。参阅第 310 页的 “ 选择校正文件和化合物 ”。

图 79. Finish 页面

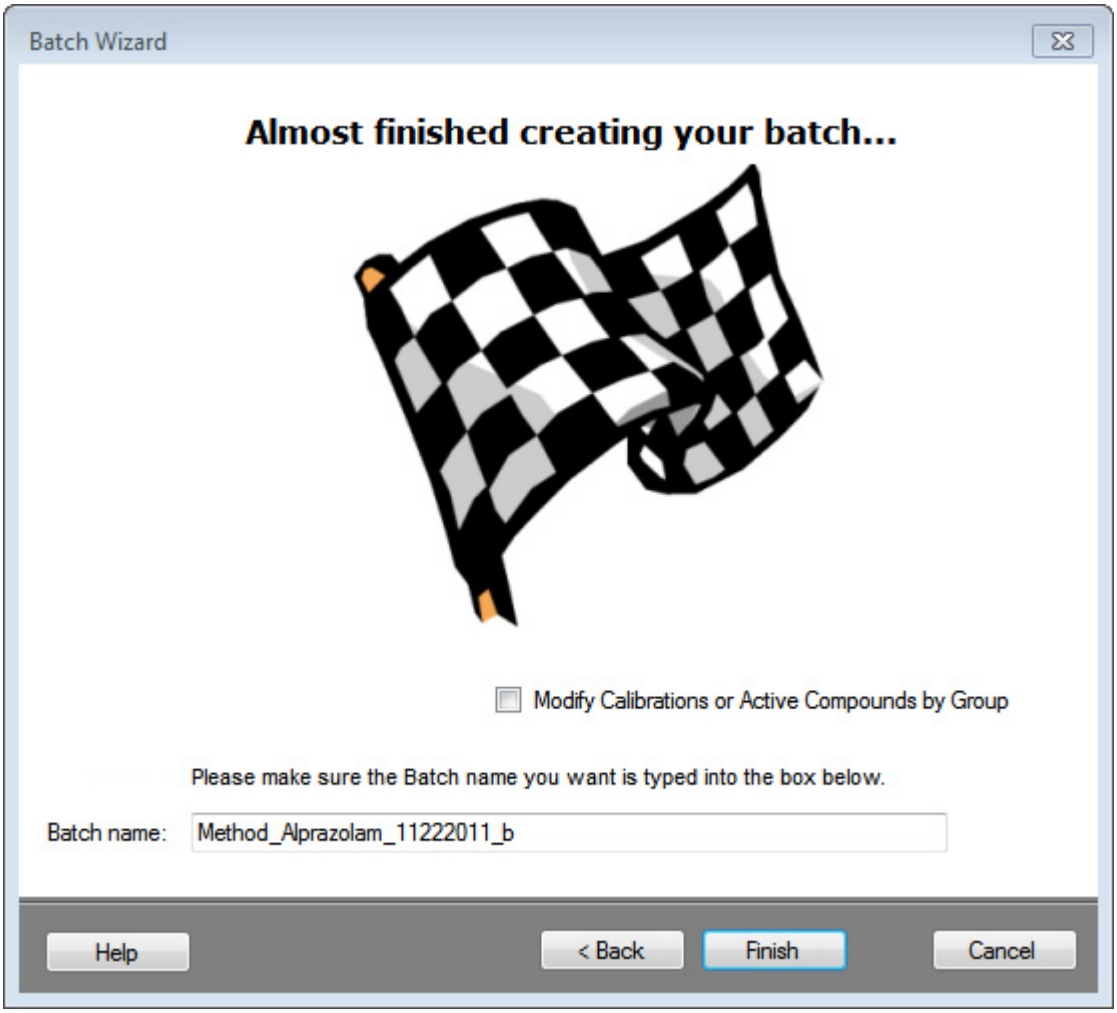


表 65. Finish 参数

参数	描述
Modify Calibrations or Active Compounds by Group （通过组修改校正或活动化合物）	启用 Next 按钮，可以访问 Calibration and Compound Selection 页面。 若已使用 Calibration and Compound Selection 页面，该选项不可用。
Batch Name （批次名称）	以下列形式命名的默认批次： *MasterMethodName_MMDDYYYY_*
Help （帮助）	在应用程序 Help 工具中打开利用 Batch Wizard 创建批次主题。
Back （返回）	返回至 Batch Specification 页面，在此可以输入样品 ID、样品名称或注释。可以从样品列表中添加或移除样品或编辑样品的列值。参阅第 302 页的 “ 指定批次 ”。
Finish （完成）	应保存批次并将其显示在 Batch View 中。从 Batch View 中可以提交批次用于采集、处理或生成报告。参阅第 292 页的 “ 提交批次 ”。
Next （下一步）	打开 Calibration and Compound Selection 页面，在此可以编辑校正文件或编辑希望识别的化合物列表。 仅当 Modify Calibrations or Active Compounds by Group 选中时才可用。
Cancel （取消）	立刻退出 Batch Wizard 且不保存批次。没有确认信息。

选择校正文件和化合物

从 Calibration and Compound Selection 页面，可以编辑校正文件或编辑希望识别的化合物列表。有关 Calibration and Compound Selection 页面上参数的描述，参阅 “Calibration and Compound Selection 页面。 ”

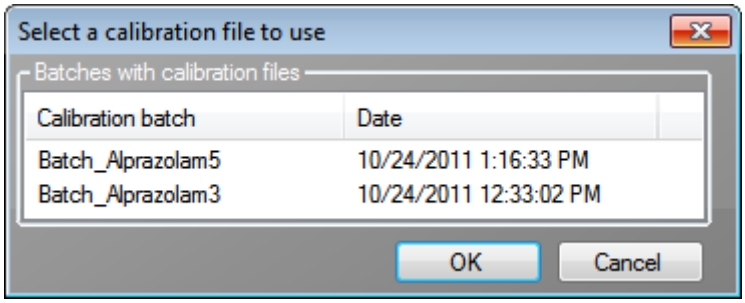
按照如下步骤进行操作：

- 若要将校正数据添加到校正文件
- 若要识别特定化合物或化合物组

❖ 若要将校正数据添加到校正文件

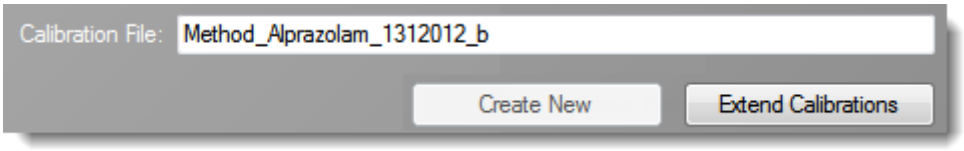
1. 若要从另一个批次将校正数据添加到当前校正文件，选中 **Extend Calibration （扩展校正）**选项。

   Selecta Calibration File to Use （选择要使用的校正文件）对话框打开。该对话框仅列出采用与当前批次相同主方法的校正批次。



2. 选择要附加到当前校正文件的校正文件，然后点击 **OK**。

   应用程序将所选校正文件附加到当前文件。



3. 若要将来自这两个文件的校正数据将保存为该批次中的单个文件，点击 **Create New（创建新文件）**。
4. 当完成 Calibration and Compound Selection 页面上的设置时，点击 **Next**。

   Finish 页面打开。参阅第 307 页的 “ 提交批次 ”。

❖ **若要识别特定化合物或化合物组**

1. 在 Compound Groups （化合物组）区域，选中包括在样品中希望识别的化合物的组。
2. 在 Included Compounds （已包括化合物）区域，选中希望在样品中识别的每个化合物的 **Active** 复选框。
3. 当完成 Calibration and Compound Selection 页面上的设置时，点击 **Next**。

   Finish 页面打开。参阅第 307 页的 “ 提交批次 ”。

图 80. Calibration and Compound Selection 页面

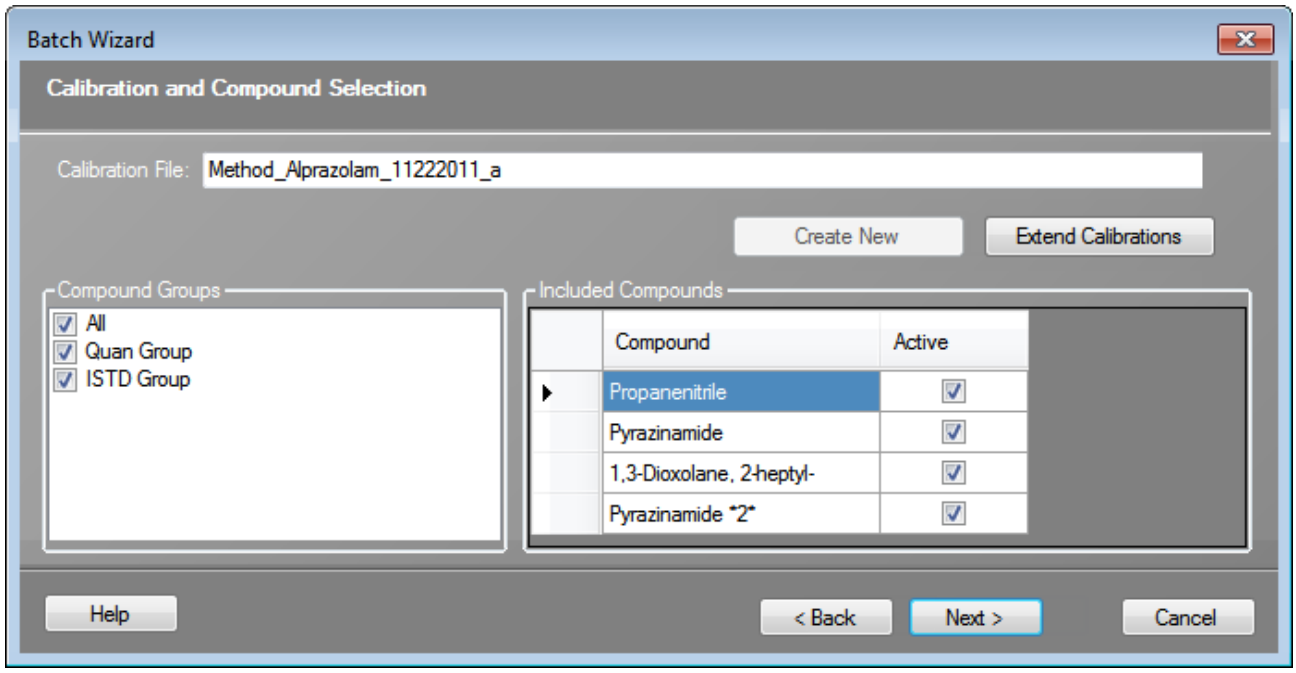


表 66. Calibration and Compound Selection 参数 （第 1 页，共 2 页）

参数	描述
Calibration File （校正文件）	以下列形式命名的当前批次： *MasterMethodName_MMDDYYYY_*
Create New （创建新文件）	将所有校正文件中的校正数据保存到当前校正文件。 仅当使用 Extend Calibrations 以附加来自另一个校正文件的校正数据时才可用。
Extend Calibrations （扩展校正）	从当前批次添加校正数据到所选的校正文件中。
Compound Groups （化合物组）	显示在 Master Method View （主方法视图）的 Groups （组）页面上显示的所有可用组。参阅第 176 页的 “ 编辑 Groups 页面 ”。
Included Compounds （已包括化合物）	显示可以在样品中识别的所有可用化合物。标记为 Active 的化合物在批次样品中被识别。
Help （帮助）	在应用程序的 Help 工具中打开 “Creating a Batch Using the Batch Wizard” 主题（该主题）。
Back （返回）	返回至 Batch Specification 页面，在此可以输入样品 ID、样品名称或注释。可以从样品列表中添加或移除样品或编辑样品的列值。参阅第 302 页的 “ 指定批次 ”。

表 66. Calibration and Compound Selection 参数 （第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Next （下一步）	打开 Finish 页面，在此可以更改批次名称或将批次保存到 Batch View。参阅第 307 页的 “ 提交批次 ”。
Cancel （取消）	立刻退出 Batch Wizard 且不保存批次。没有确认信息。

使用 Data Review 视图

在 Data Review 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。可以使用 Data Review 视图中的功能来调查和编辑批次中的定量或定性值。

❖ 若要打开 Data Review 视图

1. 执行下列操作之一：

   从主菜单点击 **Analysis**。

   – 或 –

   在当前模式下，点击导航窗格中的 **Analysis**。

2. 在 Analysis 导航窗格中，点击 **Data Review**。

   当前所选批次的 Data Review 视图打开。

Data Review 视图使用一个样品列表和两个模式之一：Quan Mode （定量模式）或 Qual Mode （定性模式）。 Qual Mode 仅对 Specimen/Qual 样品类型可用。当用户查看 Specimen/Qual 样品类型的数据时，可以在 Qual Mode 和 Quan Mode 之间切换。

注释 在 Qual Mode 下，应用程序只显示具有质谱数据的化合物峰信息。 Qual Mode 只对于具有类似物数据 （没有质谱化合物）的批次不可用。

本部分主题包含以下主题：

- Data Review 样品列表
- Quan Mode
- Qual Mode

Data Review 样品列表

利用样品列表选择一个特定样品。若要查看样品列表中的列和查看其描述，参阅 “Data Review 样品列表。 ”

每个样品的状态指示器会标示该样品的状态是未采集、采集中或已采集完毕或已处理。

样品列表包含以下特性：

- 列显示
- 状态指示器
- 警告标记
- 化合物标记
- 停用或排除化合物

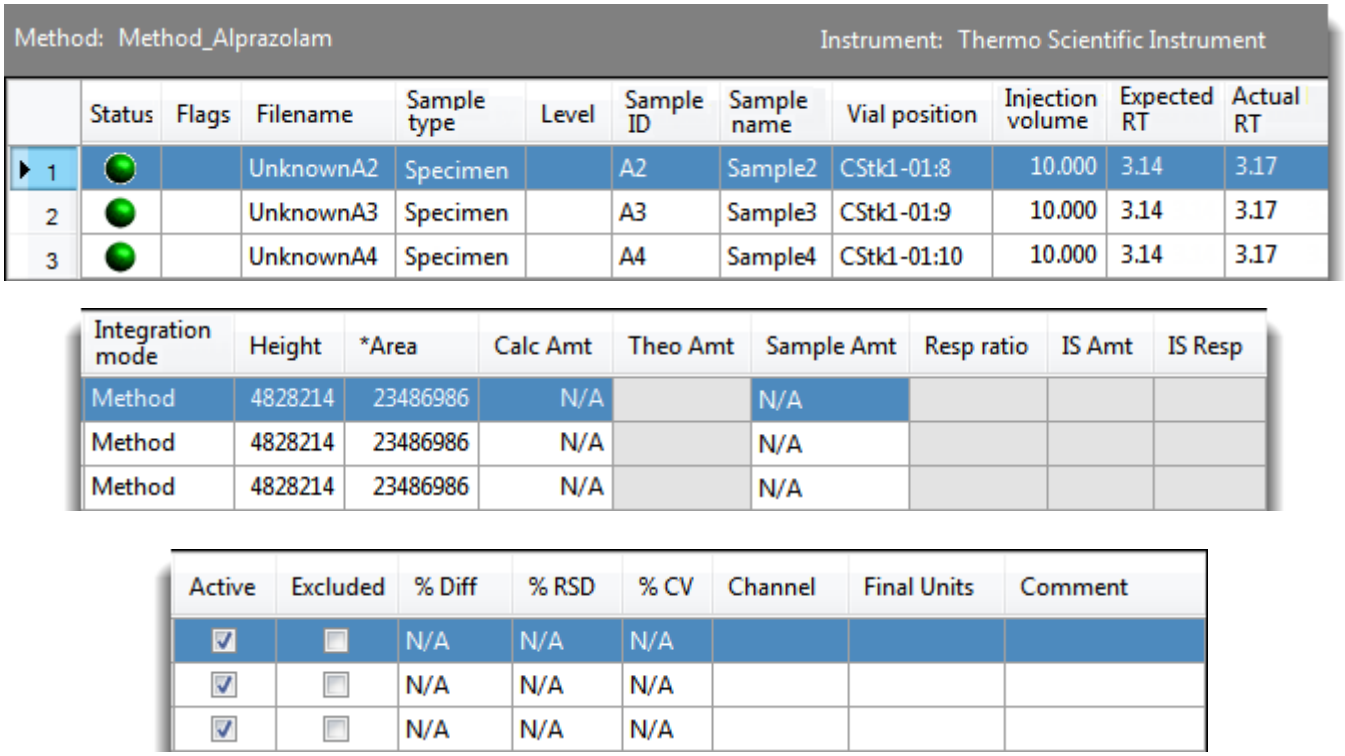
Quan Mode 和 Qual Mode 中的样品列表一致，显示某个批次样品的所有定量数据。

- 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。特定方法可用的化合物列表在 Compounds 窗口中显示。

  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，并在化合物列表中以灰色显示该化合物。
  - 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。

图 81. Data Review 样品列表



Method: Method_Alprazolam　　Instrument: Thermo Scientific Instrument

	Status	Flags	Filename	Sample type	Level	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume	Expected RT	Actual RT
1			UnknownA2	Specimen		A2	Sample2	CStk1-01:8	10.000	3.14	3.17
2			UnknownA3	Specimen		A3	Sample3	CStk1-01:9	10.000	3.14	3.17
3			UnknownA4	Specimen		A4	Sample4	CStk1-01:10	10.000	3.14	3.17

Integration mode	Height	*Area	Calc Amt	Theo Amt	Sample Amt	Resp ratio	IS Amt	IS Resp
Method	4828214	23486986	N/A		N/A			
Method	4828214	23486986	N/A		N/A			
Method	4828214	23486986	N/A		N/A			

Active	Excluded	% Diff	% RSD	% CV	Channel	Final Units	Comment
☑	☐	N/A	N/A	N/A			
☑	☐	N/A	N/A	N/A			
☑	☐	N/A	N/A	N/A			

样品列表中不含值的单元格将会带阴影和空白，例如未知样的理论浓度值。应包含值，但值不存在的单元中将显示 N/A （不适用）。未检测到化合物结果的单元中将显示 N/F （未发现）。

表 67. （第 1 页，共 2 页） Data Review 样品列表

列	描述
Status （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。
Flags （标记）	仅当样品内的化合物出错时显示。
Filename （文件名）	包含样品数据的原始数据文件的名称。
Sample Type （样品类型）	定义 TraceFinder 应用程序如何处理样品数据。按照下列样品类型进行样品分类： Specimen、 Specimen/Qual、 QC、 Solvent、Calibrator、 Hydrolysis、 Unextracted 或 Negative
Level （水平）	为校正样品或质控样品定义的水平。
Sample ID （样品标识号）	用户定义的用以识别样品的字母数字字符串。
Sample Name （样品名称）	用户定义的用以识别样品的名称。
Vial Position （样品瓶位置）	用于自动进样器采集的托盘样品瓶编号。
Injection Volume （进样体积）	要进样的样品体积，单位为微升。 使用自动进样器时，可以在 Instrument View 的 Autosampler 对话框中设置默认进样体积。可以使用的最小和最大进样体积取决于自动进样器的配置。可用范围取决于进样模式，并且可能比显示的范围小。 主方法中设置的 Injection Volume 值覆盖了仪器方法中的值。 范围 :0.1 至 5000 µL
Integration Mode （积分模式）	标示峰是否已手动积分或从原始方法积分。
Height （峰高）	峰顶点与峰基线之间的距离 （测量方向垂直于纵坐标）。当 Resp Ratio （响应比率）被指定为 Height 时，该列用星号表示 （*Height）。
Area （峰面积）	指从峰的起始位置到结束位置积分峰强度获得的面积。当 Resp Ratio 被指定为 Area 时，该列用星号表示 （*Area）。
Actual RT （实际保留时间）	指化合物的实际保留时间。保留时间是进样后化合物洗脱所用的时间，即化合物在色谱柱上保留的总时间。
Expected RT （预期保留时间）	指化合物的预期保留时间。
Calc Amt （计算量）	样品中的化合物量，该值将由校正曲线和响应比率确定。
Theo Amt （理论量）	指样品中化合物预期的理论量。

表 67. （第 2 页，共 2 页） Data Review 样品列表

列	描述
Sample Amt （样品量）	乘以换算系数的进样体积。例如，如果某个物质为 1000 ng/mL，这对于质谱仪浓度太高，可以稀释 1000 倍。当进样体积为 1 时，换算系数为 1000，则样品量为 1000。
Resp Ratio （响应比率）	指响应值与内标响应值的比率。如果在处理方法中 Response （响应）指定为 Area， Response 和 IS Response （内标响应）的单位为计数 - 秒。如果在处理方法中 Response 指定为 Height，则 Response 和 IS Response 的单位为计数。
IS Amt （内标量）	内标物的重量。
IS Resp （内标响应）	内标物的响应值。
Active （活动）	显示或隐藏特定样品的化合物。校正标样标示为停用时，应用程序不再采用数据文件的校正点进行校正，并且会将校正点从在 Qualification 窗格中显示的校正曲线的图形中删除。该校正点已不再是结果的一部分。
Excluded （已排除）	打开或关闭 Qualification 窗格的校正曲线中的化合物。
%Diff （百分比偏差）	计算量减去预期量的差值除以预期量，得到的商值再乘以 100 所得到的结果。
%RSD （相对标准偏差百分比）	同一水平的多个样品的标准偏差乘以 100，再除以该水平多个样品的平均值所得到的结果。此计算是基于计算量而进行的。
%CV （变异系数百分比）	变异系数。同一水平的多个样品的标准偏差乘以 100，再除以该水平多个样品的平均值所得到的结果。此计算是基于峰面积而进行的。
Channel （通道）	指定样品运行的通道。若样品未采集，则该值为 Pending。仅当在 Configuration 模式中启用多通道时， Channel 列才可用。参阅第 84 页的 “Multiplexing （多通道） ”。
Comment （注释）	用户为样品定义的备注。

列显示

样品列表可以包含许多信息列。可以滚动以查看所有信息列，并且可以自定义想要显示的列及列的显示次序。

按照如下步骤进行操作：

- 若要滚动样品列表
- 若要自定义列显示

❖ 若要滚动样品列表

利用样品列表底部的水平滚动条以查看所有信息。

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

❖ 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**。

   Modify Columns 对话框打开。参阅 “Modify Columns 对话框。 ”

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、 Flags、 Filename、 Sample Type 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。

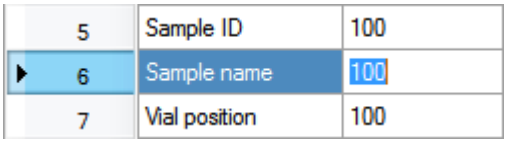
   b. 选择 **Up** 或 **Down** 在列表中上下移动所选列。

   列表中的首列代表 Data Review 样品列表中的最左列；列表中的末列代表 Data Review 样品列表中的最右列。

   注释 无法移动 Status、 Flags、 Filename 和 Sample Type 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。

   b. 输入一个新的宽度值。

5. 完成更改后，点击 **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。

图 82. Modify Columns 对话框

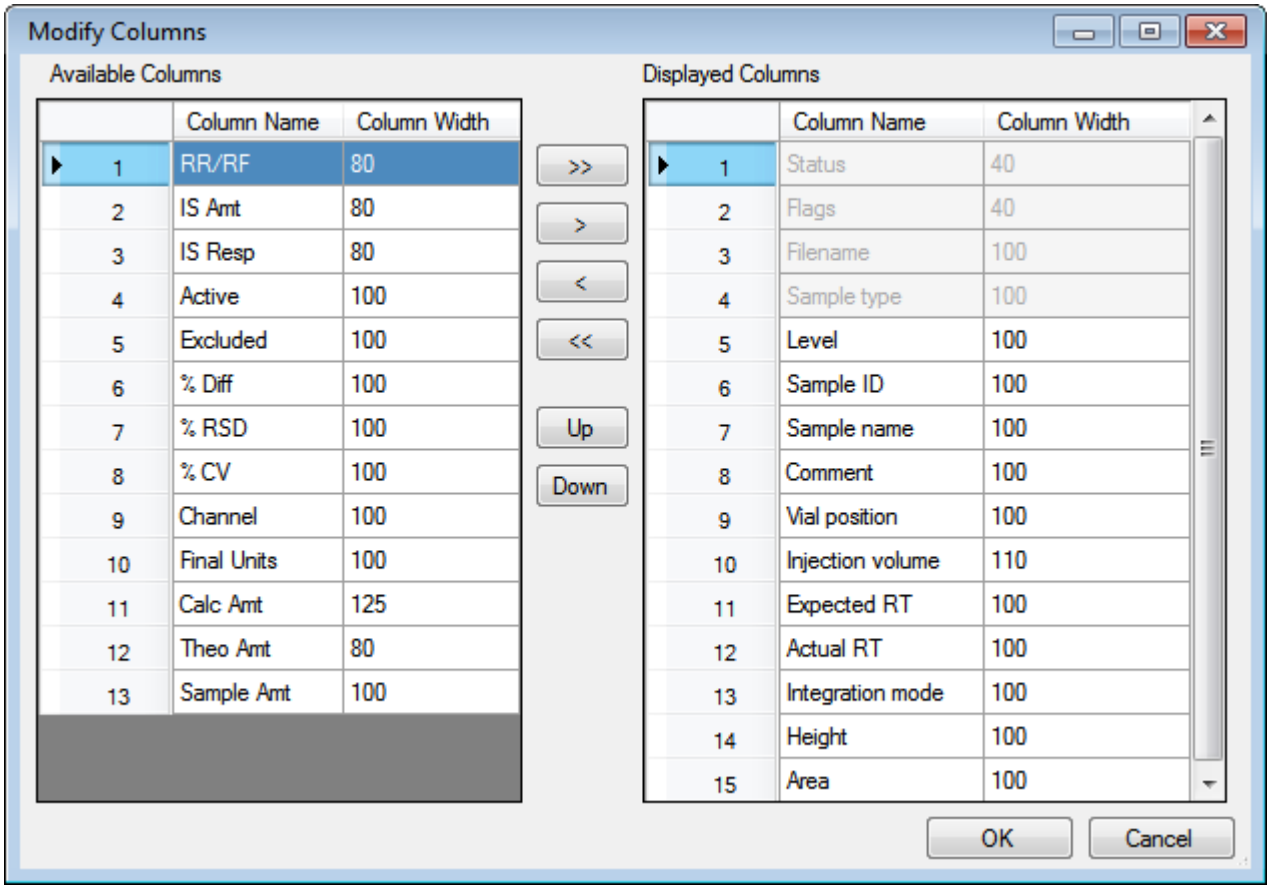


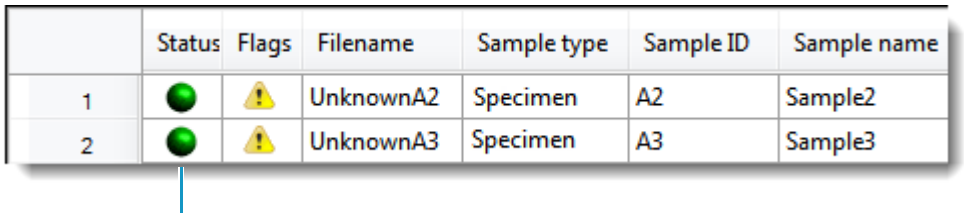
表 68. Modify Columns 对话框功能按钮

功能	描述
>>	将所有列移动到 Displayed Columns 窗格。
>	将所选列移动到 Displayed Columns 窗格。
<	将所选列移动到 Available Columns 窗格。无法移动 Status、 Flags、 Filename 和 Sample Type 列。
<<	将除 Status、 Flags、 Filename 和 Sample Type 列之外的所有列移动到 Available Columns 窗格。
Up	将 Displayed Columns 窗格中所选列名称的次序上移一行。无法移动 Status、 Flags、 Filename 和 Sample Type 列。
Down	将 Displayed Columns 窗格中所选列名称的次序下移一行。无法移动 Status、 Flags、 Filename 和 Sample Type 列。

状态指示器

状态指示器显示采集和处理过程中每个样品的当前状态：

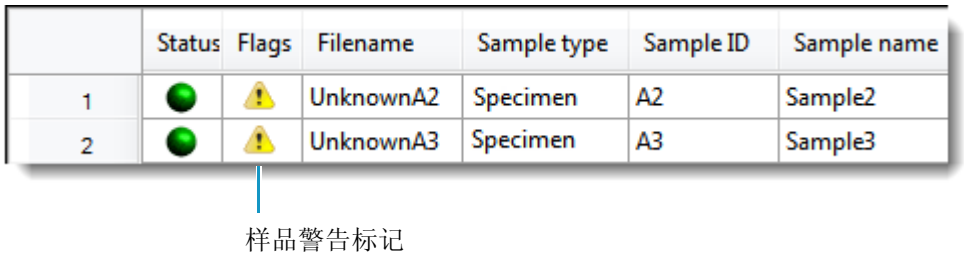
- 样品未采集。
- 样品已采集但未处理。
- 样品已采集并处理。
- 正在采集样品。



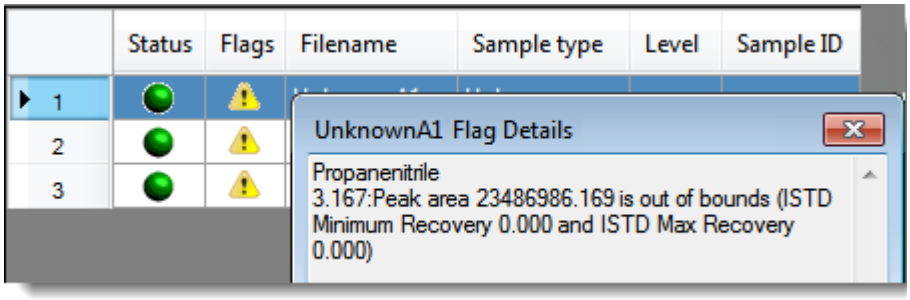
警告标记

若样品不符合方法标准，则样品列表中的 Flags 列会显示一个警告标记。

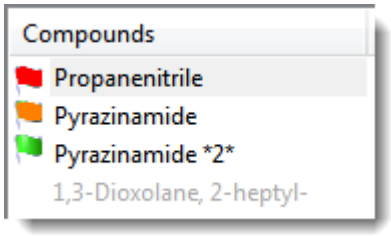
当在化合物之间切换以查看色谱图时，样品警告标记会保持不变，直到用户作出更改（例如通过手动积分使化合物不再处于可接受的标准范围之外）。



若要显示在样品中找到的问题的总结，点击警告标记。总结不列出 Specimen 样品类型中没有找到的化合物。



化合物标记



标记将在下列情况下显示：

- 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）（参阅第 168 页的 “ 编辑 QAQC 页面 ”。）
- 化合物无法找到。
- 对无法在 Calibrator 或 QC 样品类型中找到的样品类型
- 化合物超出指定离子比率范围。

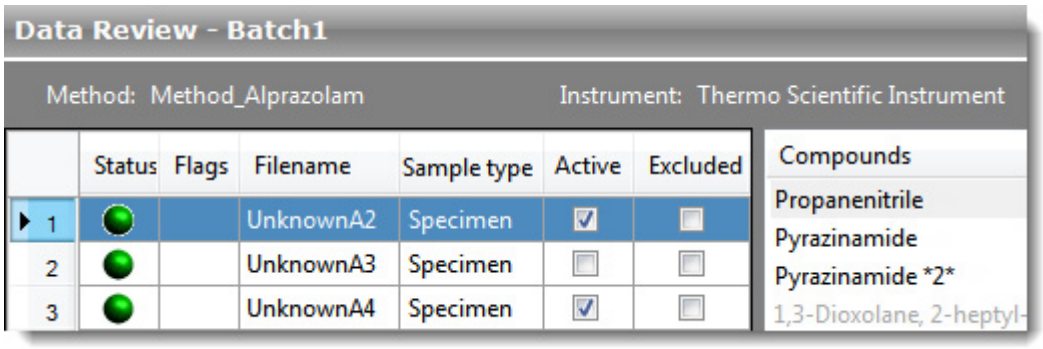
化合物为内标物时，这些标准不适用于 Negative 样品类型。

化合物列表首先按标记指示排序，再按化合物名称排序。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
- 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 和 Excluded 列控制哪些化合物用于计算校正曲线和报告。



按照如下步骤进行操作：

- 若要启用或停用样品
- 若要排除校正点

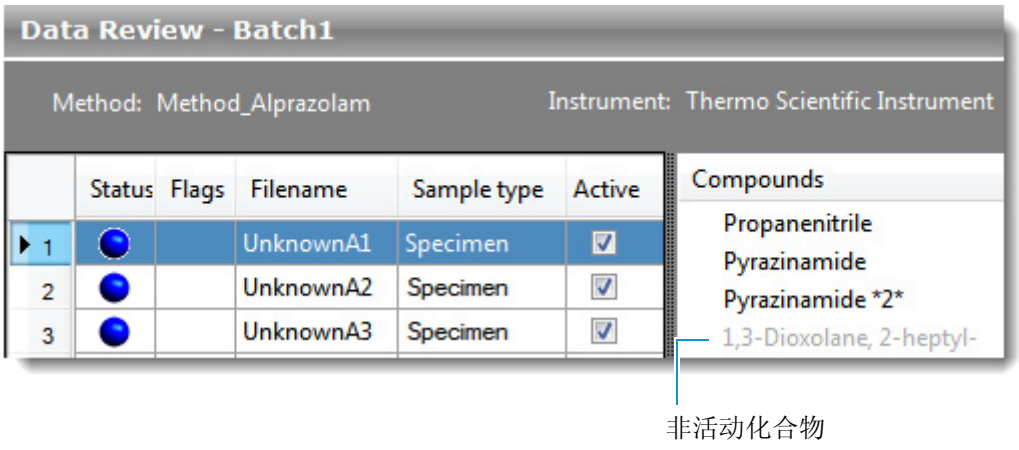
❖ 若要启用或停用样品

1. 在样品列表中选择一个样品。

   所选样品中的所有化合物均显示在 Compounds 窗格中。停用的化合物将呈灰色显示。

2. 在 Compounds 窗格中，选择希望更改活动 / 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。

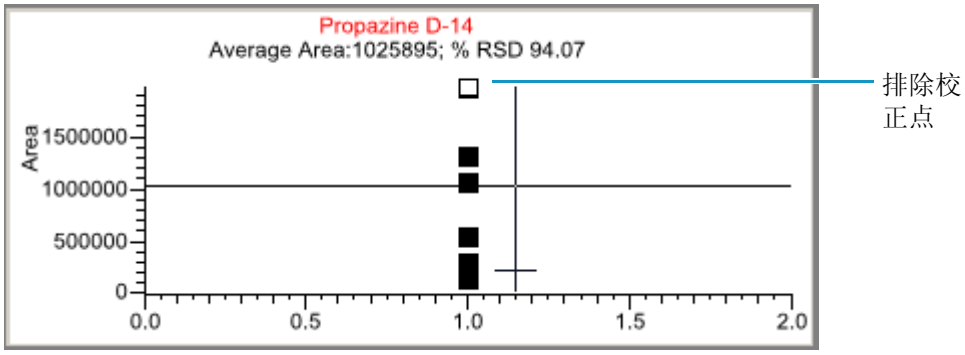


❖ **若要排除校正点**

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峰信息。

除了 Data Review 样品列表， Quan Mode 视图还使用以下窗格：

- Compounds 窗格
- Peak Display 窗格

Compounds 窗格

同时使用 Compounds 窗格和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。

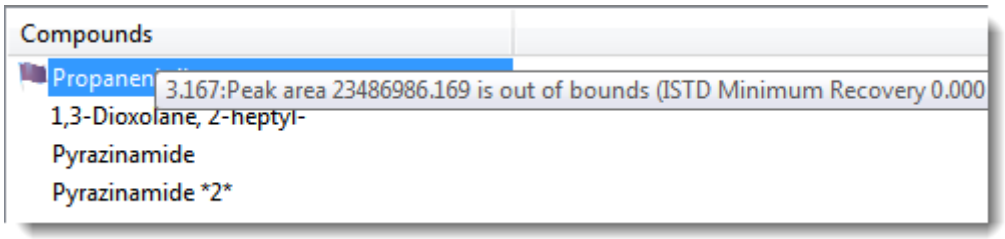
❖ 若要对化合物列表排序

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。

命令	描述
Sort by Flag and Alphabetical （按标记和字母顺序排序）	首先按标记对化合物进行排序，然后在同一标记组内按化合物的字母顺序进行排序。
Sort by Flag and Retention Time （按标记和保留时间排序）	首先按标记对化合物进行排序，然后在同一标记组内按化合物的保留时间进行排序。
Sort by Alphabetical （按字母顺序排序）	按字母顺序对化合物进行排序 （1-*n* 之后为 *a-z*）。
Sort by Retention Time （按保留时间排序）	按短保留时间至长保留时间对化合物进行排序。

❖ 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。



Peak Display 窗格

在峰显示窗格中，可以显示每个化合物的多个窗格。

可以显示下列数据类型之一：

- 定量峰
- 确认离子
- 校正曲线
- 离子重叠
- ISTD
- 参考峰
- 质谱

❖ 若要显示特定化合物的峰

1. 在样品列表中，选中一个样品。

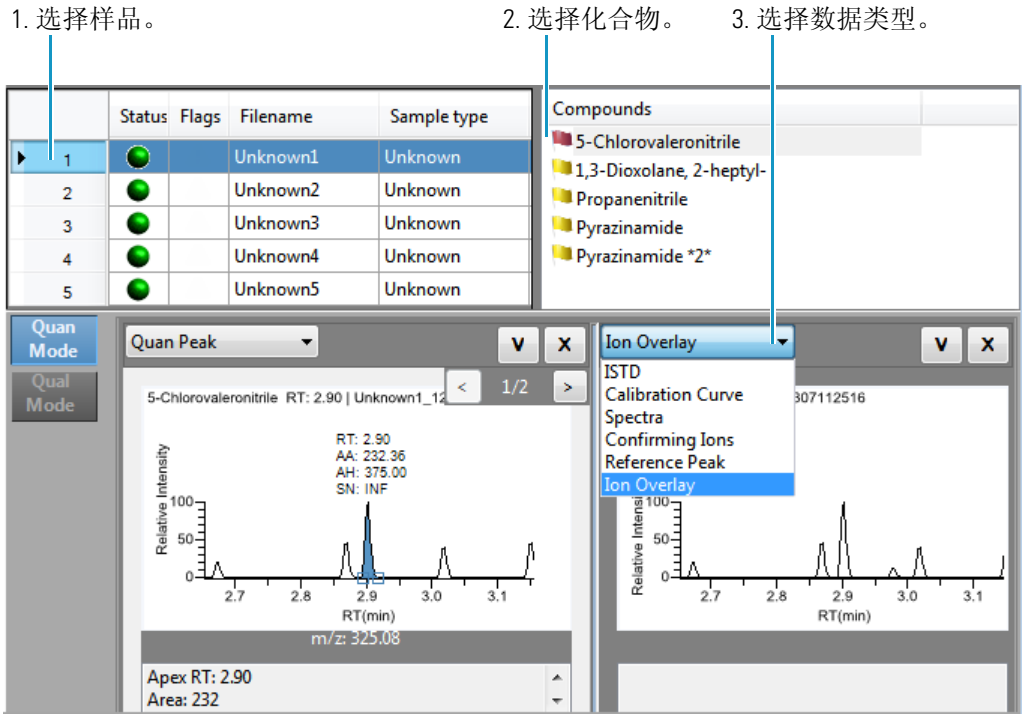
   Compounds 窗格将列出方法中指定的以及样品中找到的所有化合物。

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，选择要显示的其他数据类型。

图 83. 显示化合物峰

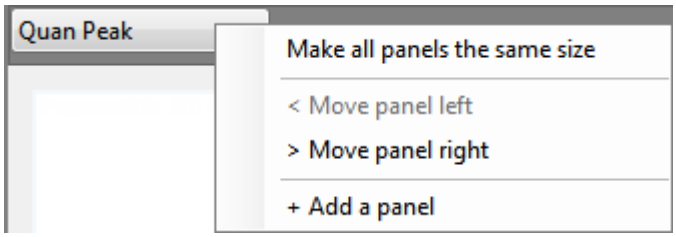


根据这些程序修改峰数据显示：

- 若要修改峰窗格
- 若要放大峰

❖ 若要修改峰窗格

在任何峰窗格中，右击标题栏或单击 v 图标。



命令	描述
Make All Panels the Same Size （使所有窗格同尺寸）	平均分配使所有窗格同宽。这个命令不会更改窗格高度。
Move Panel Left （左移窗格）	使目前的窗格向左移。当目前窗格位于最左侧时，该命令不可用。
Move Panel Right （右移窗格）	使目前的窗格向右移。当目前窗格位于最右侧时，该命令不可用。
Add a Panel （添加窗格）	将一个空白峰窗格添加到显示区域。最多显示四个峰窗格。

❖ 若要放大峰

1. 在任何视图中，拖动光标在峰或质谱图周围画一个长方形。

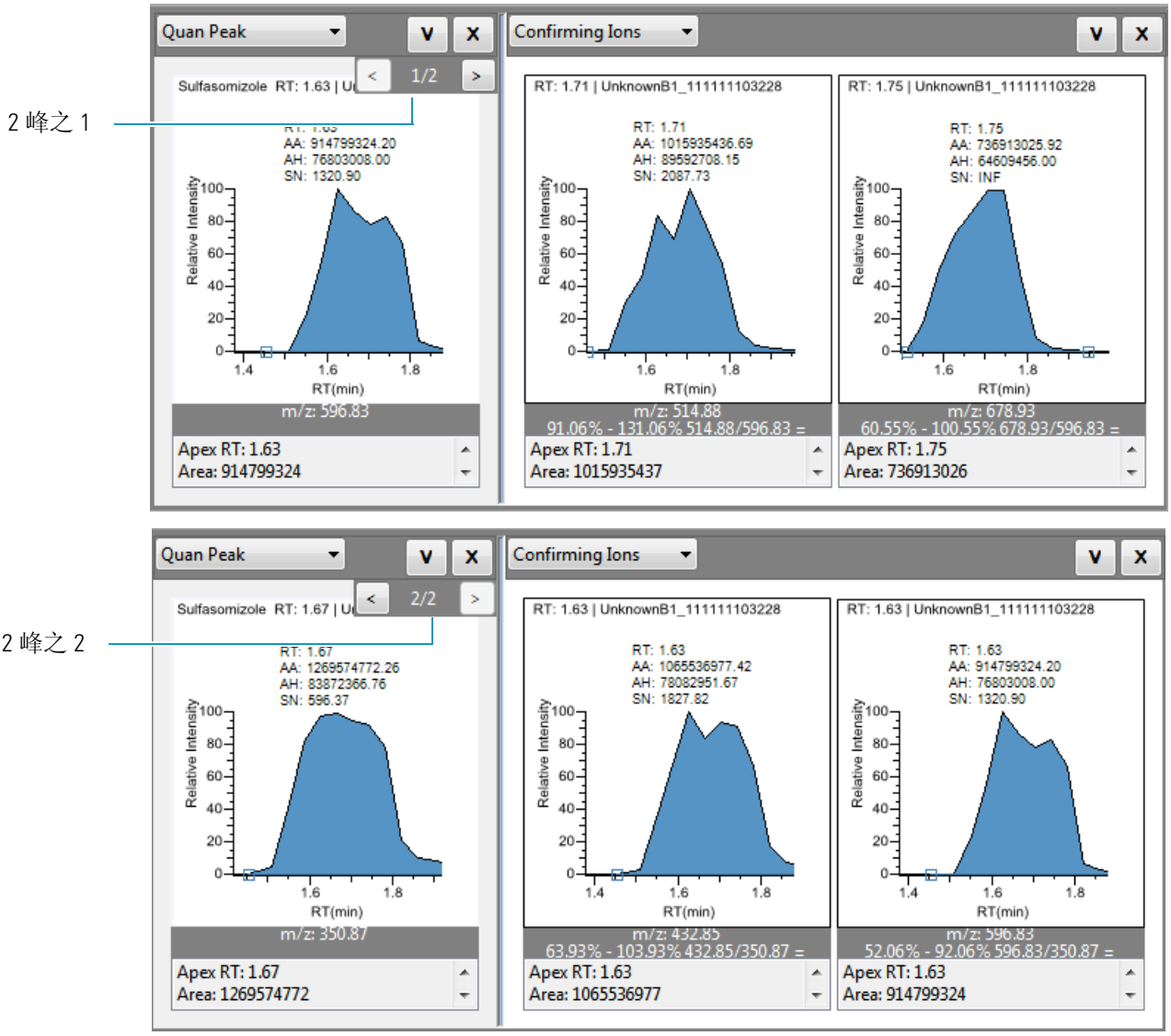
   画出的区域会扩大以填满视图。

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）**。

定量峰

一个化合物可以具有多个定量峰。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 （定量峰）窗格右上角的指示器显示正在查看的多个定量峰。 Quan Peak 窗格使用唯一的快捷菜单。参阅第 331 页的 “Quan Peak 窗格快捷菜单命令 ”。

图 84. 具有多个定量峰的 Quan Peak 窗格



根据这些程序修改定量峰数据：

- 若要手动添加峰
- 若要移除手动创建的峰
- 若要在方法积分和手动积分模式之间切换
- 若要更改已检测峰的显示信息
- 若要修改峰检测设置

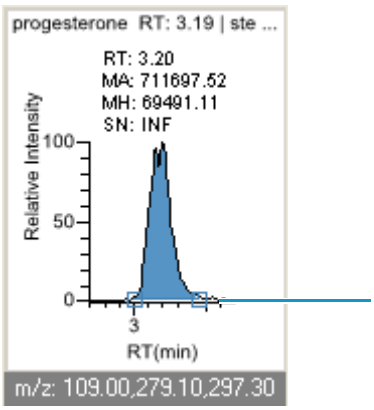
❖ 若要手动添加峰

1. 在定量峰窗格中右击任意位置，然后从快捷菜单中选择 **Add Quan Peak （添加定量峰）**。

   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）。



注释 在 Confirming Ions （确认离子）窗格中 Add Quan Peak 命令可用。

❖ 若要移除手动创建的峰

右击窗格，然后从快捷菜单中选择 **Remove Quan Peak （移除定量峰）**。

应用程序将移除手动添加的峰。

注释 在 Confirming Ions 窗格中 Remove Quan Peak 命令也可用。

❖ 若要手动积分定量峰

1. 将光标放在峰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. 将峰分隔符标签拖曳至另一个位置，且自动将峰值 （峰面积、峰高等）更新到结果设置中。

   此数据所生成的报告可识别手动修改。

   可以存储两个峰值 （方法积分和手动积分设置），每个化合物在一个文件中。这些设置可能导致已保存值会有所不同。根据处理方法参数，应用程序自动计算这些方法值。手动值则是已经编辑的结果。

❖ 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和手动积分设置一致。当切换模式时，已保存结果设置不改变。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却换，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。

注释 在 Confirming Ions 窗格中 Method Integration Settings 和 Manual Integration Settings 命令都可用。

❖ 若要更改已检测峰的显示信息

1. 右击峰窗格，然后将光标停留在 **Peak Labels （峰标签）**上方。
2. 选择显示峰保留时间、峰高、峰面积或信噪比的标签。

   列表中看到显示标签的标签类型，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。

   标签设置对定量峰、确认离子峰和内标峰均适用。

注释 在 Confirming Ions 窗格中 Peak Labels 命令也可用。

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，然后再次选择更改过标签的化合物。

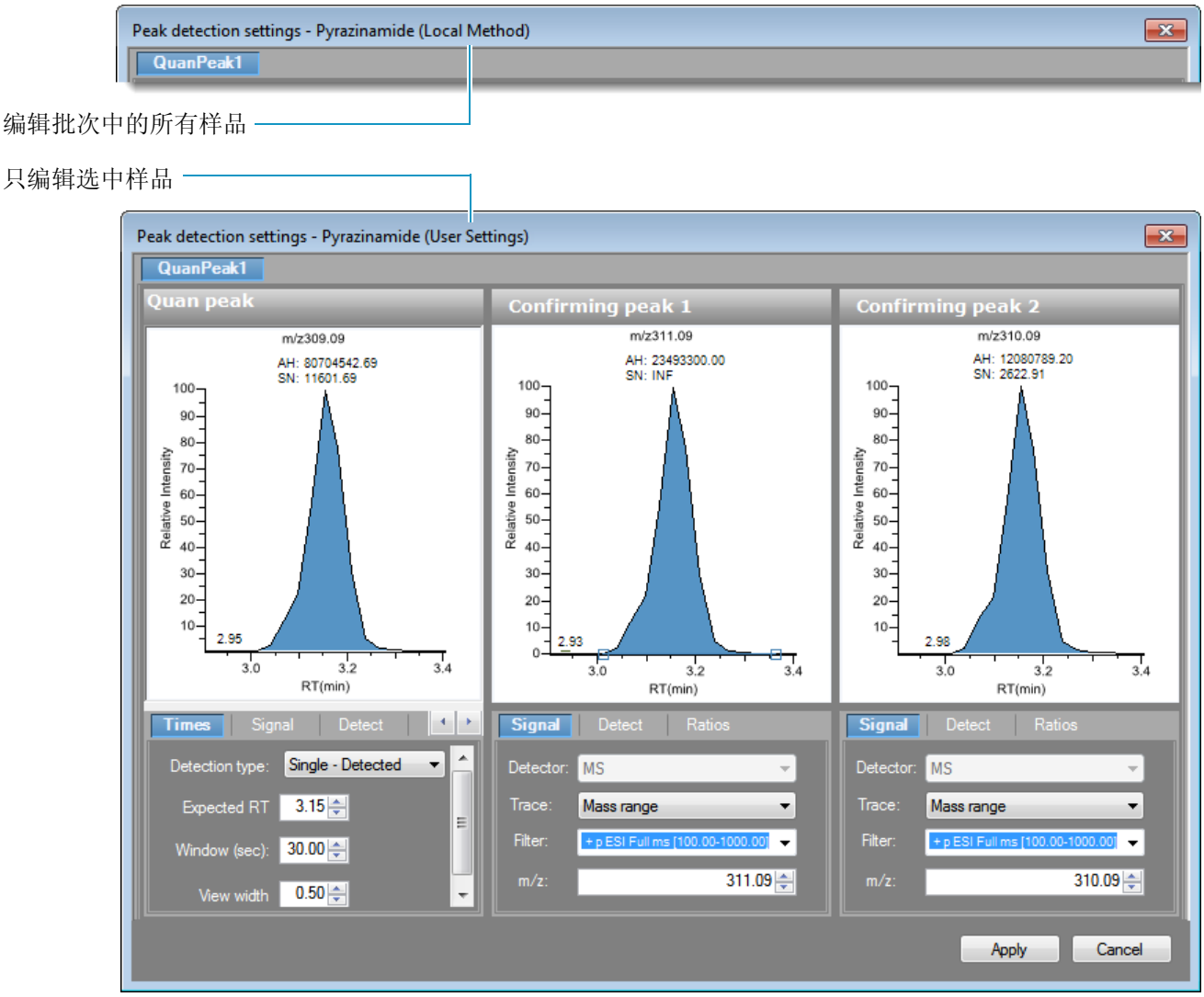
❖ 若要修改峰检测设置

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 对话框打开，用于调整方法中指定的检测设置。该对话框的标题栏列出选中化合物，并指出是否只修改选中样品或本地方法。

图 85. Peak Detection Settings 对话框



2. 编辑任意检测设置。

   有关所有检测设置的详细说明，参阅第 121 页的 “Detection”。

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。

   注释 在 Confirming Ions 窗格中 Peak Detection Settings 命令也可用。

表 69. Quan Peak 窗格快捷菜单命令 （第 1 页，共 2 页）

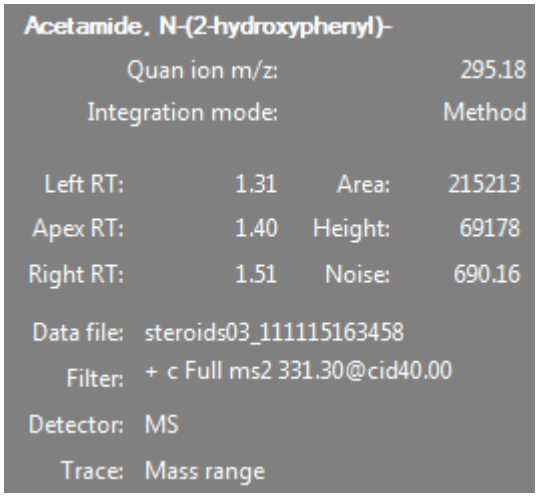
命令	描述
Method Integration Settings （方法积分设置）	**Use Local Method Peak Detection Settings （使用本地方法峰检测设置）**：将本地方法积分设置应用到选中化合物。 为了编辑这些峰检测设置，使用 Peak Detection Settings > Edit Local Method Peak Detection Settings 命令。 **Use User Peak Detection Settings （使用用户定义的峰检测设置）**：将用户定义的方法积分设置应用到选中化合物。 为了编辑这些用户自定义的设置，使用 Peak Detection Settings > Edit User Defined Peak Detection Settings 命令。
Manual Integration Settings （手动积分设置）	显示手动积分设置。
Add Quan Peak （添加定量峰） – 或 – Remove Quan Peak （移除定量峰） – 或 – Cancel Add Peak （取消添加峰）	添加峰，移除峰或取消正在进行的添加峰操作。
Confirming Ion List （确认离子列表）	选择要查看的确认离子。不适用于类似物。
Send RT to Method （将保留时间发送到方法）	将当前保留时间设置为本地方法中化合物的预期保留时间。
Peak Labels （峰标签）	显示或隐藏峰标签 （Label Area （标记峰面积）、 Label Retention Time （标记保留时间）、 Label Height （标记峰高）或 Label Signal to Noise （标记信噪比））。
Show Peak Info （显示峰信息）	显示所选化合物的峰信息。例如 

表 69. Quan Peak 窗格快捷菜单命令 （第 2 页，共 2 页）

命令	描述
Reset Scaling （重置缩放比例）	缩放操作完成后，重置为原比例。
Peak Detection Settings （峰检测设置）	**Edit User Defined Peak Detection Settings：** 打开 Peak Detection Settings 对话框，可以修改这个样品的选中化合物。 **Edit Local Method Peak Detection Settings：** 打开 Peak Detection Settings 对话框，可以修改这个批次所有样品的选中化合物。 在应用任一更新之后，应用程序不会保留手动积分设置。

确认离子

Confirming Ions 窗格显示选定化合物的所有定性 / 确认离子的图谱，以及计算的离子比率和离子比率接受窗口。红色边框表示该离子比率位于其窗口之外。 Confirming Ions 窗格使用唯一的快捷菜单。参阅 Confirming Ions 窗格快捷菜单命令。

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） ”。

图 86. 具有多个确认离子的定量峰

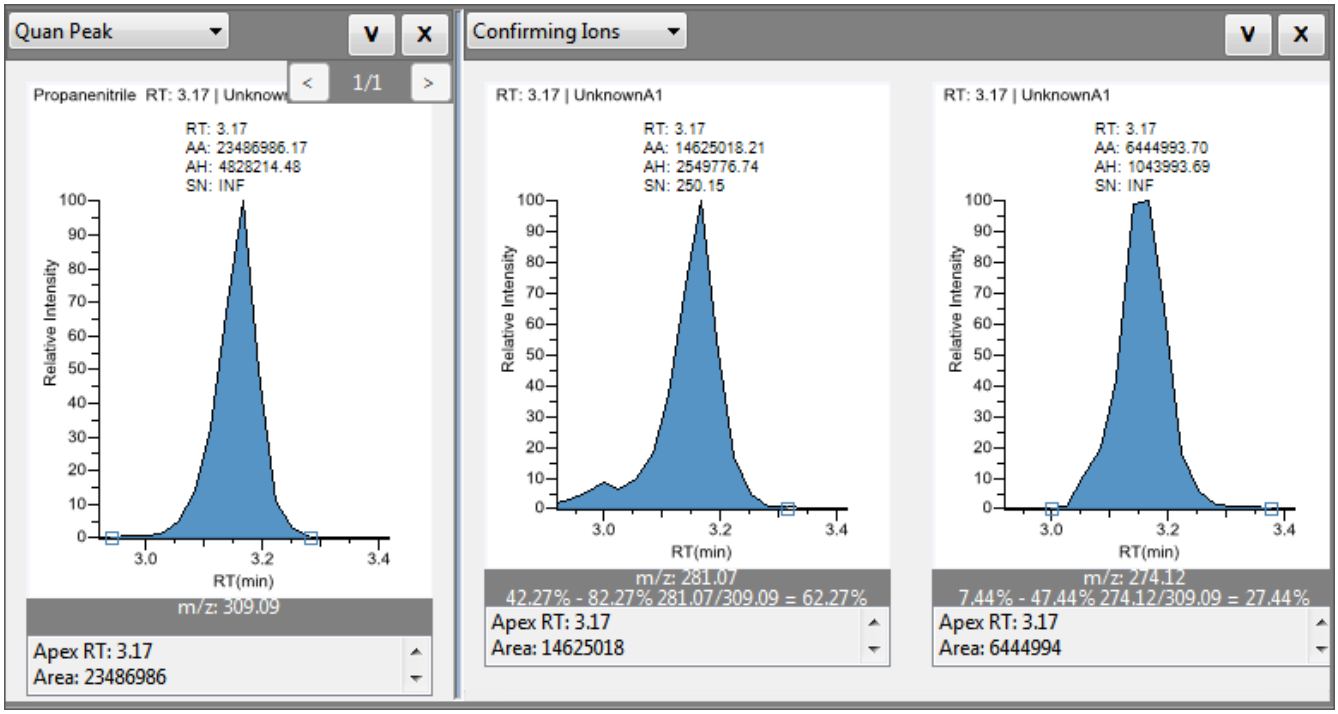
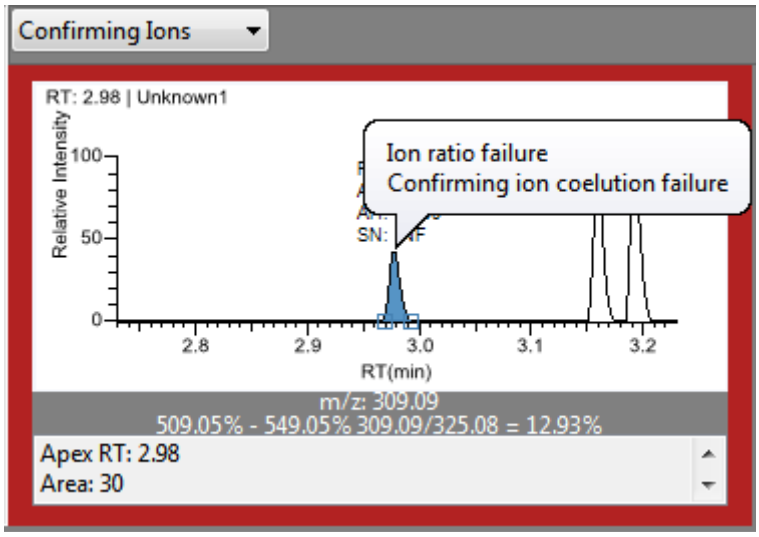


图 87. 确认离子共流出未通过



❖ 若要手动积分确认离子峰

1. 将光标放在峰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。您可放大基线使选择标签变得更容易。

2. 将峰分隔符标签拖曳至另一个位置，且自动将峰值 （峰面积、峰高等）更新到结果设置中。

   此数据所生成的报告可识别手动修改。

   可以存储两个峰值 （方法积分和手动积分设置），每个化合物在一个文件中。这些设置可能导致已保存值会有所不同。根据处理方法参数，应用程序自动计算这些方法值。手动值则是已经编辑的结果。

   注释 由于 Blank Report （空白报告）仅显示定量质量数，当对一个确认离子手动积分时，报告中的手动积分标记会显示在定量质量数上。

表 70. Confirming Ions 窗格快捷菜单命令 （第 1 页，共 2 页）

命令	描述
Method Integration Settings （方法积分设置）	显示方法积分设置。
Manual Integration Settings （手动积分设置）	显示手动积分设置。
Add Quan Peak （添加定量峰） – 或 – Remove Quan Peak （移除定量峰） – 或 – Cancel Add Quan Peak （取消添加定量峰）	添加定量峰，移除峰或取消正在进行的添加峰操作。

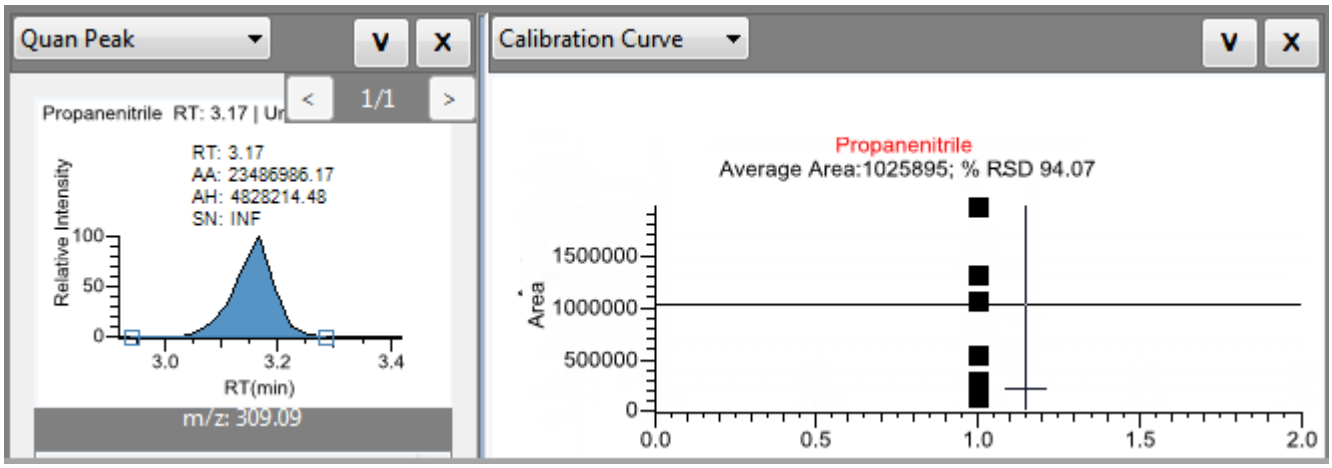
表 70. Confirming Ions 窗格快捷菜单命令 （第 2 页，共 2 页）

命令	描述
Range Calc Method （范围计算方法）：Manual （手动）	选择用于计算离子比率范围窗口的方法：Manual （手动）、Average （平均）、 Weighted Average （加权平均）或 Level （水平）。
Range Calc Level （范围计算水平）	基于校正水平的范围。
Target Ratio （目标比率）	指定确认离子响应值与定量离子响应值的理论比率。
Window Type （窗口类型）	指定可接受离子比率范围的绝对或相对计算方法。
Window （窗口）	以百分比形式指定离子比率的可接受范围。
Peak Labels （峰标签）	显示或隐藏峰标签 （Label Area, Label Retention Time, Label Height, 或 Label Signal to Noise）。
Show Peak Info （显示峰信息）	显示所选化合物的峰信息。
Reset Scaling （重置缩放比例）	缩放操作完成后，重置为原比例。
Peak Detection Settings （峰检测设置）	打开所选化合物的 Peak Detection Settings 对话框。

校正曲线

Calibration Curve （校正曲线）窗格显示选定化合物校正曲线的图形视图及用于评估校正质量的主要统计值。 Calibration Curve 窗格使用唯一的快捷菜单。参阅 Calibration Curve 窗格快捷菜单命令。

图 88. 具有校正曲线的定量峰



❖ **若要手动排除校正点**

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，在校正曲线的图形视图内显示为空框。

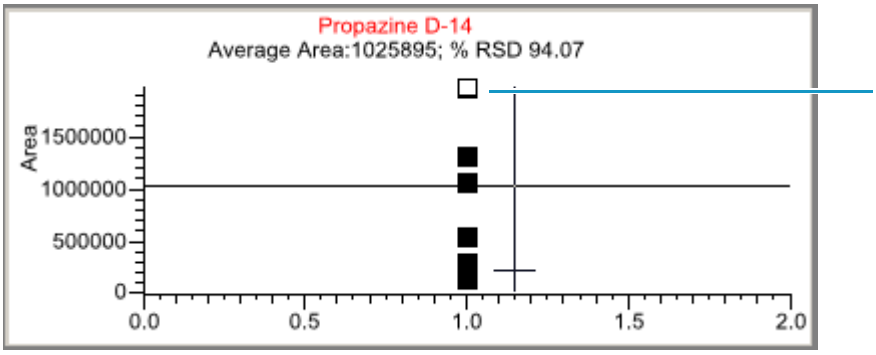


表 71. Calibration Curve 窗格快捷菜单命令

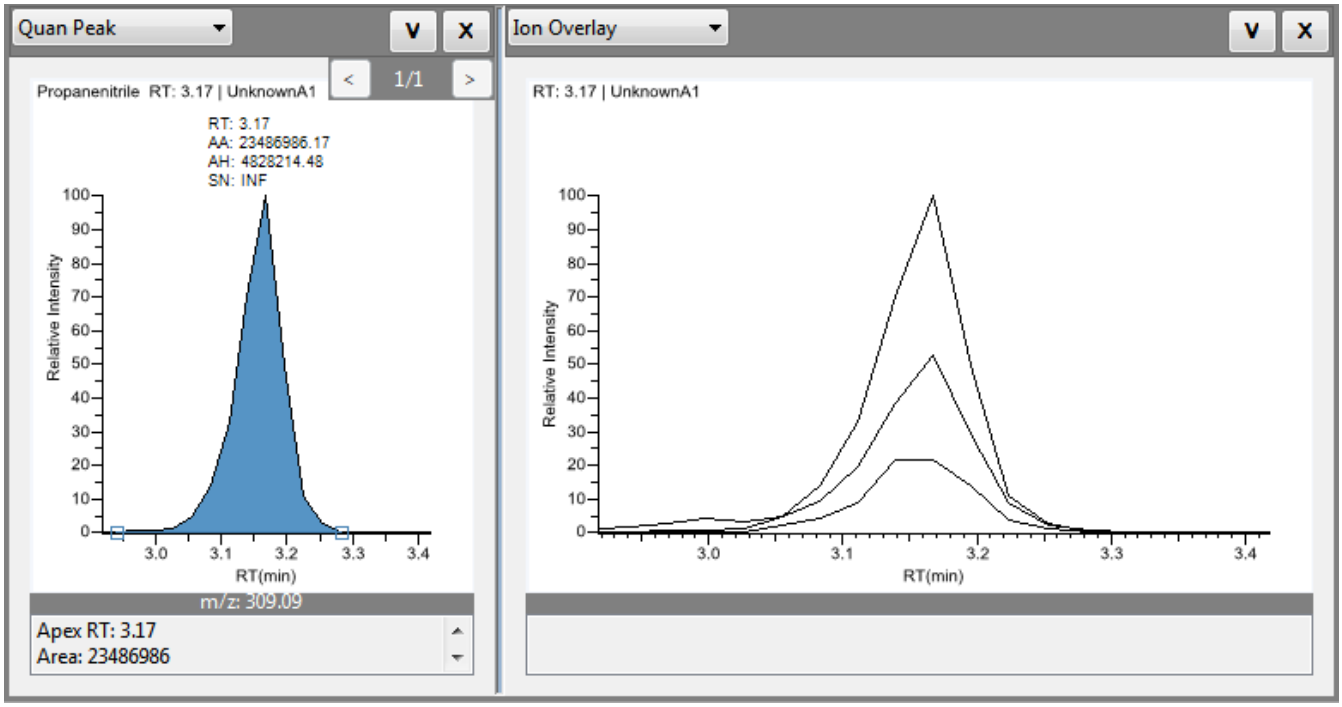
命令	描述
Standard Type（标准类型）	将标准类型设置为 External （外标）或 Internal （内标）。
Calibration Curve Type（校正曲线类型）	设置以下其中一种校正曲线类型： • Linear （线性）：除下列特殊情况外，允许所有设置：当将 Origin （原点）设置为 Include （包括）时，所有的 Weighting （加权）值将变灰， Weighting 设置为 Equal （相等）。 • Quadratic （二次方）：除下列特殊情况外，允许所有设置：当将 Origin 设置为 Include 时，所有的 Weighting 值将变灰， Weighting 设置为 Equal。 • Average RF （平均响应因子）：允许不选择 Weighting 或 Origin。所有 Weighting 和 Origin 值都变灰。 Weighting 设置为 Equal， Origin 设置为 Ignore （忽略）。
Response Via（响应方式）	将响应设置为 Area 或 Height。
Weighting （加权）	将权重设置为相等、 1/X、 1/X^2、 1/Y 或 1/Y^2。
Origin （原点）	将原点设置为 Ignore、 Force （强制）或 Include。
Units （单位）	设置单位。
Done with Settings（完成设置）	保存校正曲线设置。
Reset Scaling（重置缩放比例）	重置校正曲线窗口的原始比例。

离子重叠

Ion Overlay （离子重叠）页面代表选定样品和化合物的整个离子组 （定量和定性 / 确认离子）的重叠。使用该窗格以图形形式查看峰顶点匹配和共洗脱峰情况。

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）”。

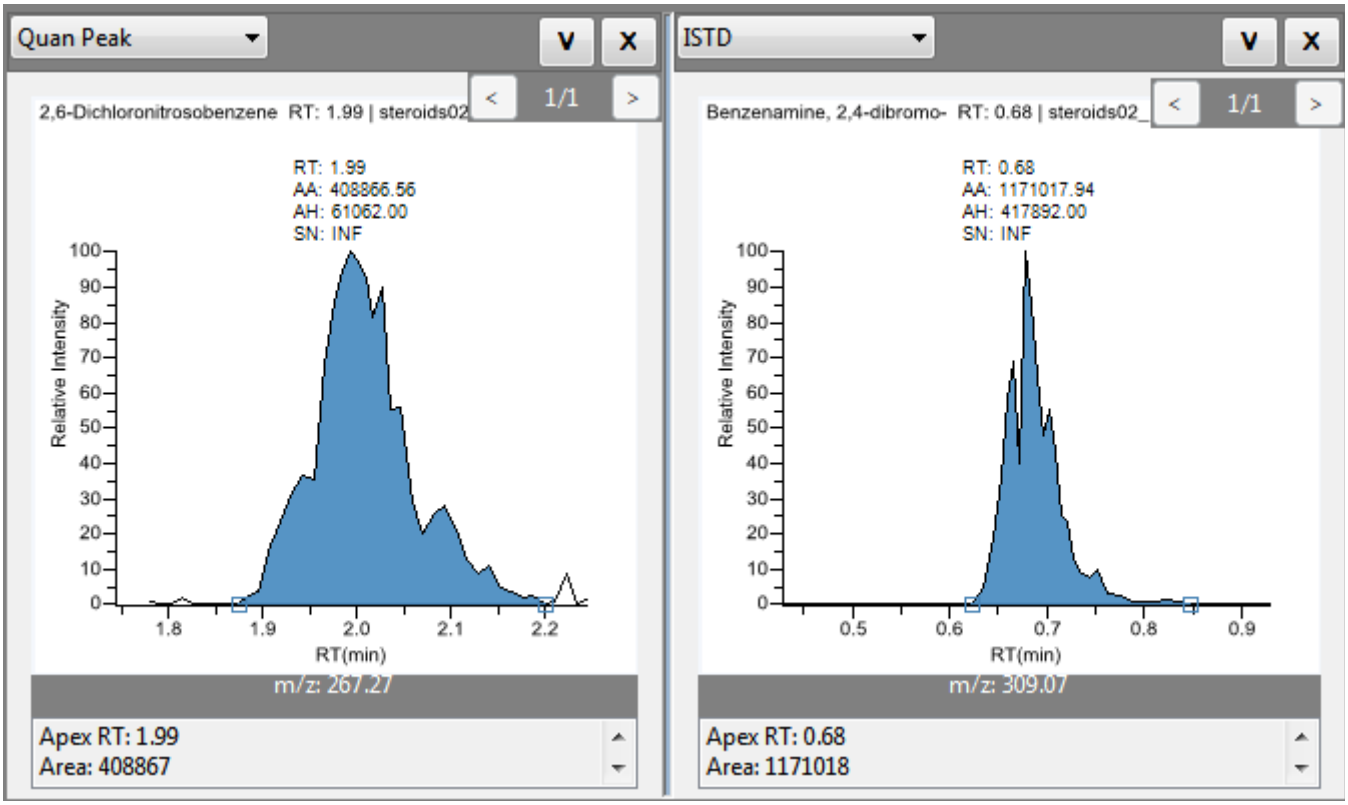
图 89. 具有确认离子重叠的定量峰



ISTD

ISTD （内标）窗格显示方法中为化合物指定的内标。参阅第 159 页的 “ 若要指定化合物的内标物 ”。

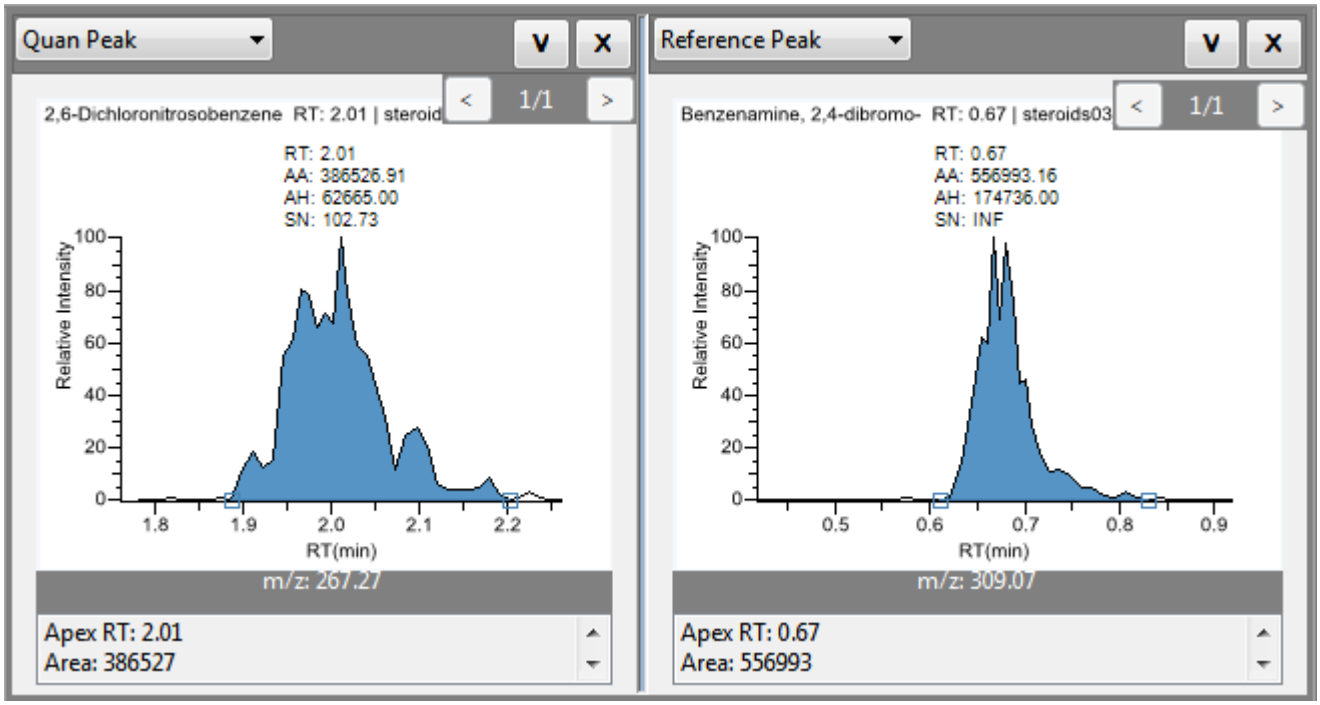
图 90. 具有内标的定量峰



参考峰

Reference Peak （参考峰）窗格显示方法中指定的参考峰。参阅第 110 页的 “ 若要指定色谱图参考样品 ”。

图 91. 具有参考峰的定量峰

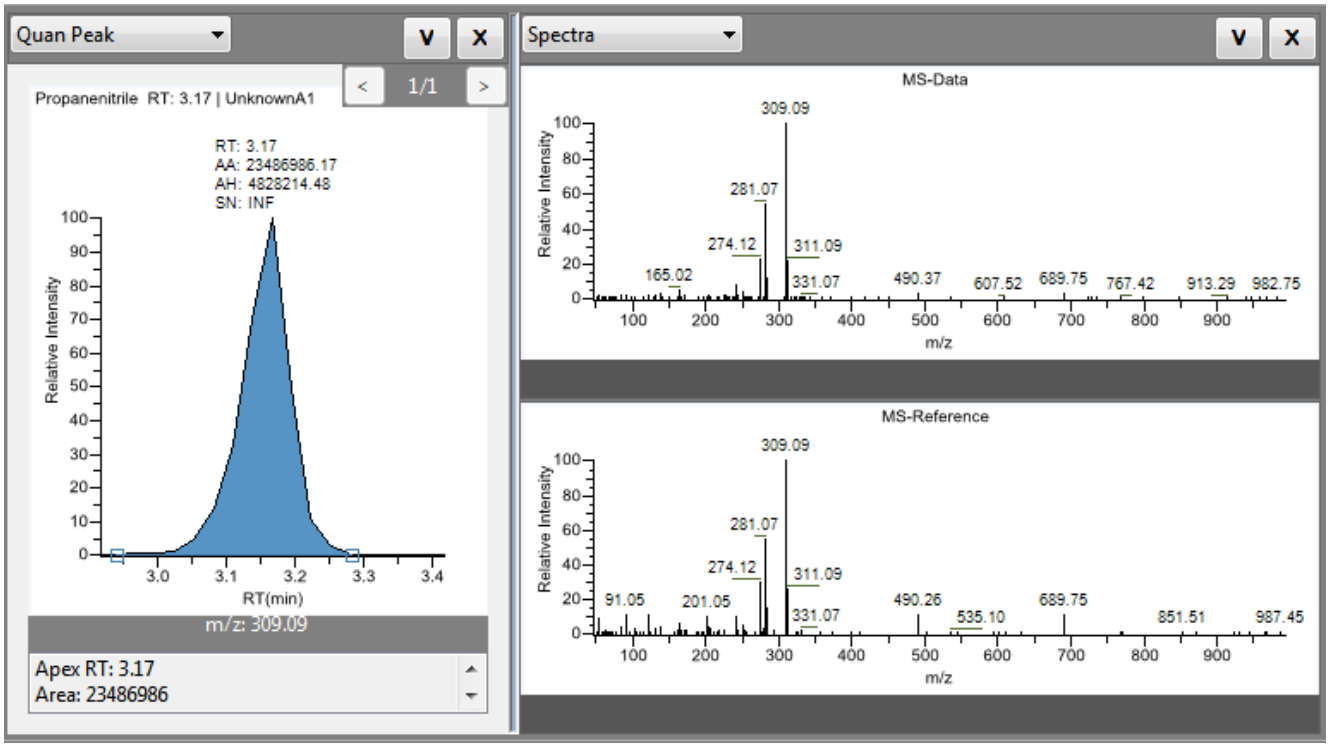


质谱

Spectra （质谱图）页面显示在数据和方法参考中找到的质谱图比较。

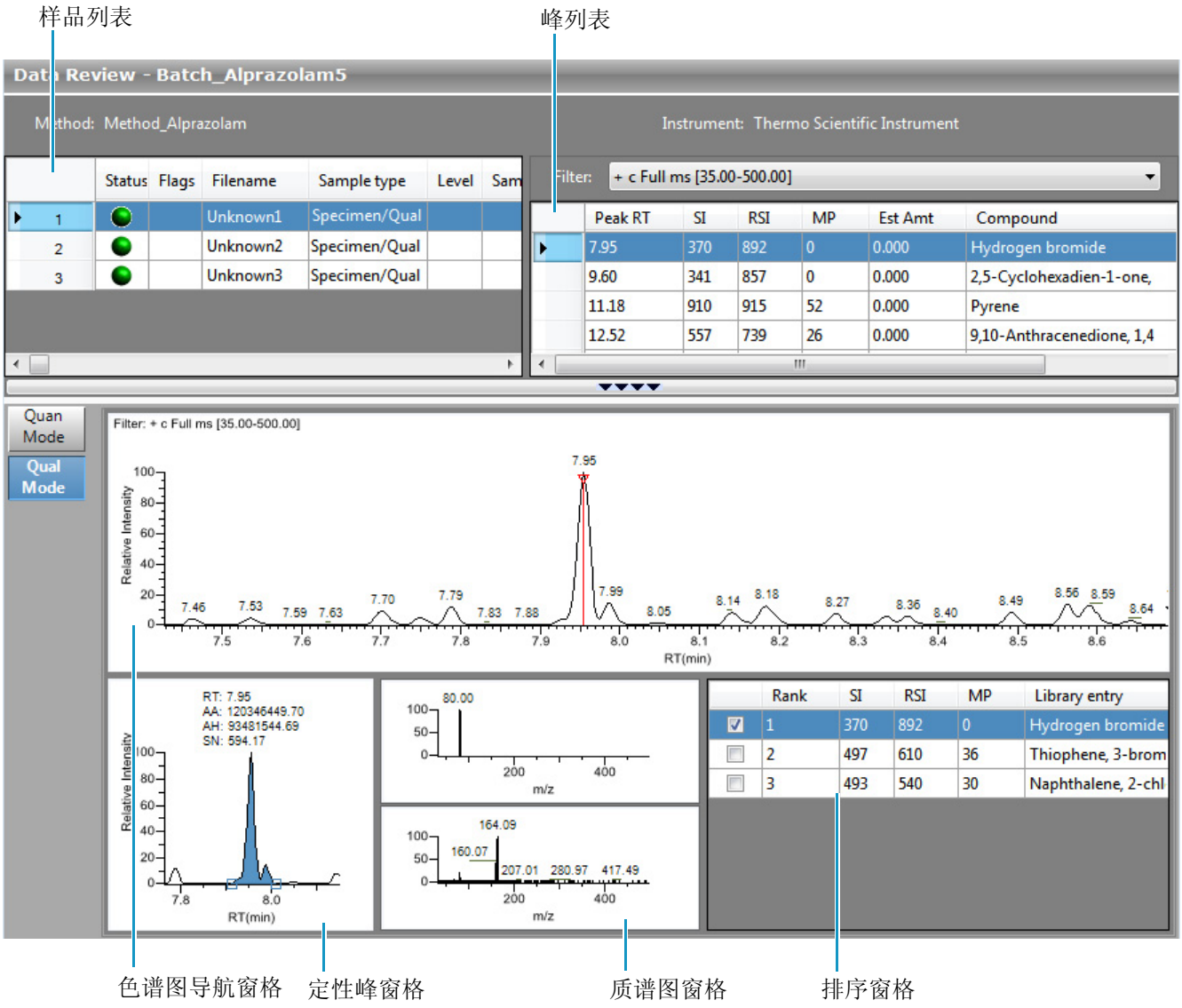
注释 对于具有类似物检测类型的化合物，应用程序在 Spectra 窗格中显示 “Not Available（不可用）”。

图 92. 具有数据和参考质谱的定量峰



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已检测峰。从 Qual Mode 视图中可以手动添加峰。 Qual Mode 视图仅对 Specimen/Qual 样品类型可用。



提示 要调整窗口的大小，可拖动分隔窗格的分隔线。

除了样品列表， Qual Mode 视图还在以下窗格中显示数据：

- 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）
- 排序窗格

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。有关峰列表参数的详细说明，参阅第 342 页的 “ 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。

   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。

   列出的峰的数目由方法指定。可以在 Method Template Editor （方法模板编辑器）中更改已识别峰的数目。参阅第 191 页的 “ 创建方法模板 ”。

2. 从峰列表选择样品的某个峰。

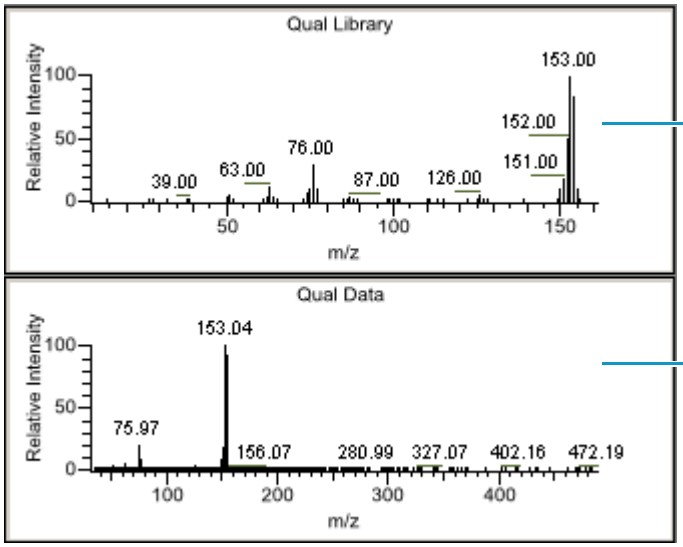
	Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Compound
▶	7.95	370	892	0	0.000	Hydrogen bromide
	9.60	341	857	0	0.000	2,5-Cyclohexadien-1-one,
	11.18	910	915	52	0.000	Pyrene

   TraceFinder 应用程序在定性峰窗格中显示所选峰。

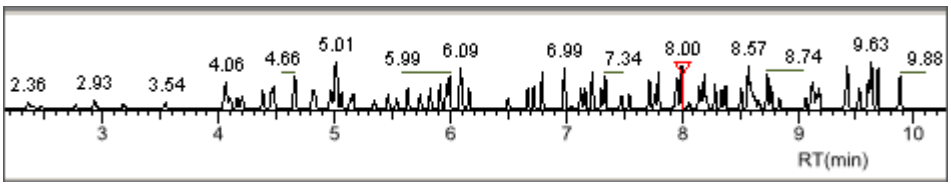
   当选择数据依赖样品时，峰可以来自全扫描或 SRM- 过滤色谱图的 QED 质谱图。

   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。



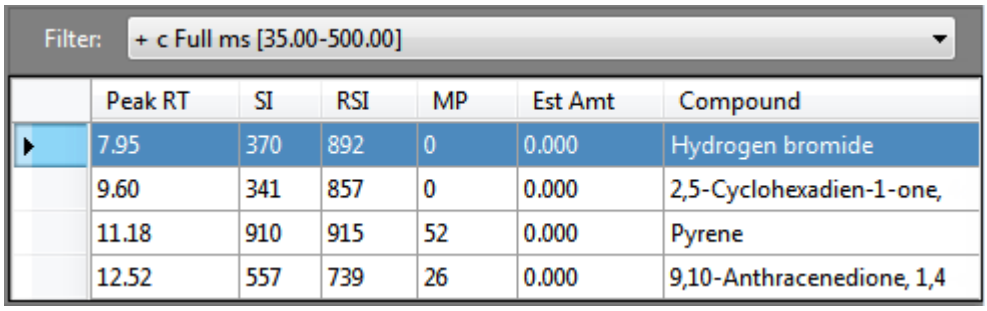
❖ **若要移除峰**

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。

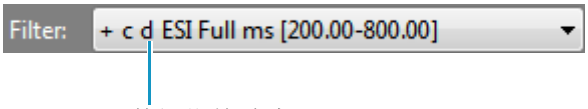
注释 无法撤销该操作，但可以通过手动添加峰来重新定义一个已移除的峰。参阅第 343 页的 “ 色谱图导航窗格 ”。

图 93. 峰列表



	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

表 72. 峰列表参数

参数	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。在峰列表中选择的峰显示为红色标记。参阅第 344 页的 “ 色谱图导航窗格 ”。

有关快捷菜单上命令的描述，参阅第 344 页的 “ 色谱图导航窗格快捷菜单命令 ”。

❖ 若要放大峰

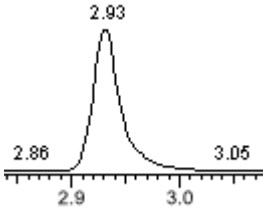
1. 在色谱图导航窗格中，拖动光标在峰周围画一个长方形。

   画出的区域会扩大以填满视图。

2. 若要恢复默认视图，右击色谱图导航窗格，然后从快捷菜单中选择 **Reset Scaling**。

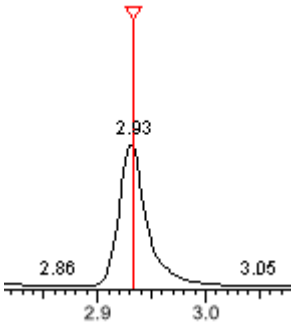
❖ 若要手动添加峰

1. 放大以利于识别希望添加到结果组中的峰。



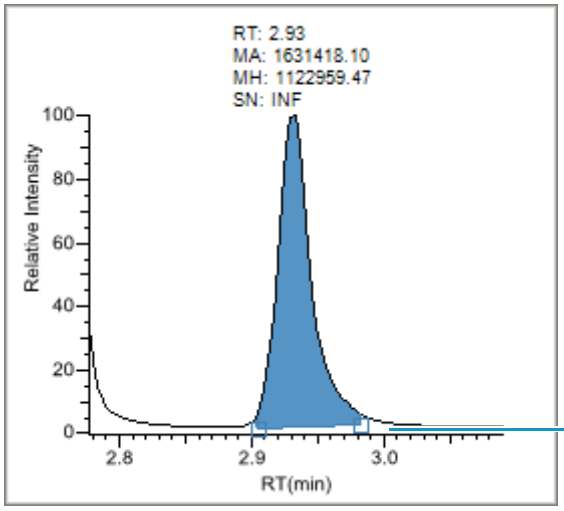
2. 右键单击色谱图导航窗格，然后从快捷菜单中选择 **Add Qual Peak （添加定性峰）**。
3. 单击以标示峰的左右基线点。

   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，且自动更新峰列表和定性峰窗格中的峰值。

图 94. 包含手动添加峰的定性峰窗格



	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

图 95. 色谱图导航窗格

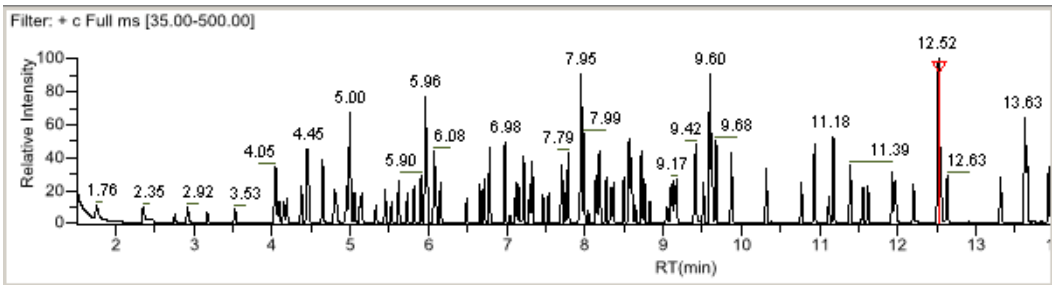


表 73. 色谱图导航窗格快捷菜单命令

命令	描述
Add Qual Peak （添加定性峰）	选择某个新定性峰的开始和结束基线点。
Reset Scaling （重置缩放比例）	缩放操作完成后，重置为原比例。

定性峰窗格

定性峰窗格显示所选峰。参阅第 346 页的 “ 定性峰窗格 ”。

按照如下步骤进行操作：

- 若要放大峰
- 若要手动添加峰
- 若要移除峰
- 若要在方法积分和手动积分模式之间切换
- 若要更改已检测峰的显示信息

有关快捷菜单上命令的描述，参阅第 347 页的 “ 定性峰窗格快捷菜单命令 ”。

❖ 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**。

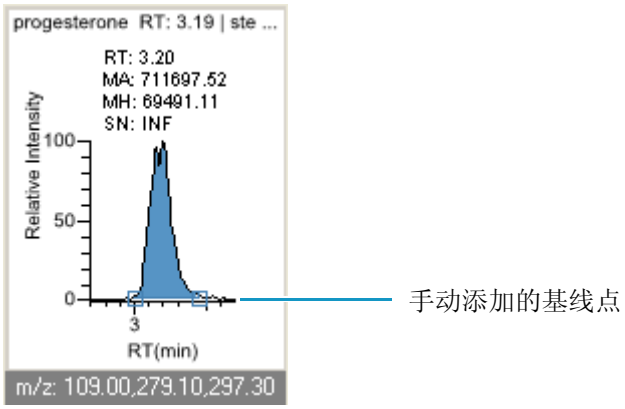
❖ 若要手动添加峰

1. 在定性峰窗格中右击任意位置，然后从快捷菜单中选择 **Add Peak**。

   如果峰已被检测到，则 Add Peak 命令将禁用。

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

右击色谱图，然后从快捷菜单中选择 **Remove Peak （移除峰）**。

TraceFinder 应用程序移除定性峰窗格中显示的峰。该峰的所有数据都被移除出 Qual Mode 窗格。

❖ 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，为化合物和文件保存的方法和手动积分设置一致。当切换模式时，已保存结果设置不改变。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却换，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

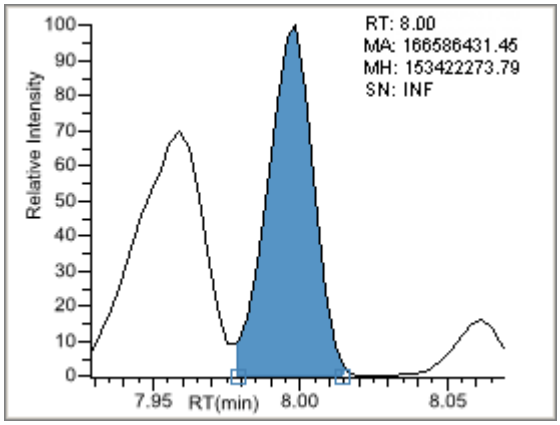
1. 右击色谱图，然后将光标停留在 **Peak Labels** 上方。
2. 选择显示峰保留时间、峰高、峰面积或信噪比的标签。

   列表中看到显示标签的标签类型，并清除未显示标签的标签类型。
3. 要删除标签，再次选择标签类型并将其删除

   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，然后再次选择更改过标签的化合物。

图 96. 定性峰窗格



定性峰窗格快捷菜单包含以下命令：

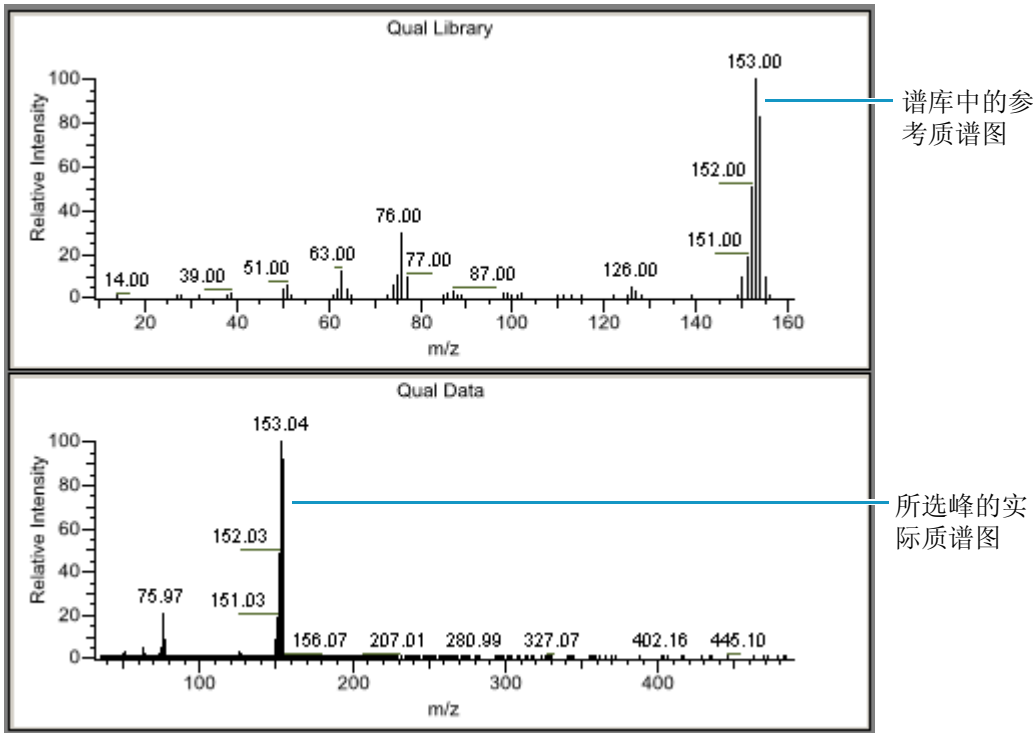
表 74. 定性峰窗格快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling（重置缩放比例）	缩放操作完成后，重置为原比例。
Method Integration（方法积分）	显示方法积分设置。
Manual Integration（手动积分）	显示手动积分设置。
Peak Labels （峰标签）	显示或隐藏峰标签 （Label Area， Label Retention Time，Label Height 或 Label Signal to Noise）。
Remove Qual Peak（移除定性峰）	移除定性峰窗格中显示的定性峰。

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。上方窗格显示谱库中已识别化合物的参考质谱图，下方窗格显示所选峰的质谱图。

图 97. 质谱图窗格



❖ 若要放大峰

1. 在色谱图中，拖曳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**。

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。参阅 “ 排序窗格。 ”

当选中除原始条目外的另一个库条目时， TIC Report （总离子流图报告）和 TIC Summary Report （总离子流总结报告）以 “P” 标签表示：

Peak:	Retention Time	Area	Height	Inj Estimate	In-sample Est	Flag
Naphthalene	7.95	13829174	10605061	0.000	0.000	P

P 标签

有关排序窗格参数的详细说明，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 Compound 值更新为所选库条目的相关值。

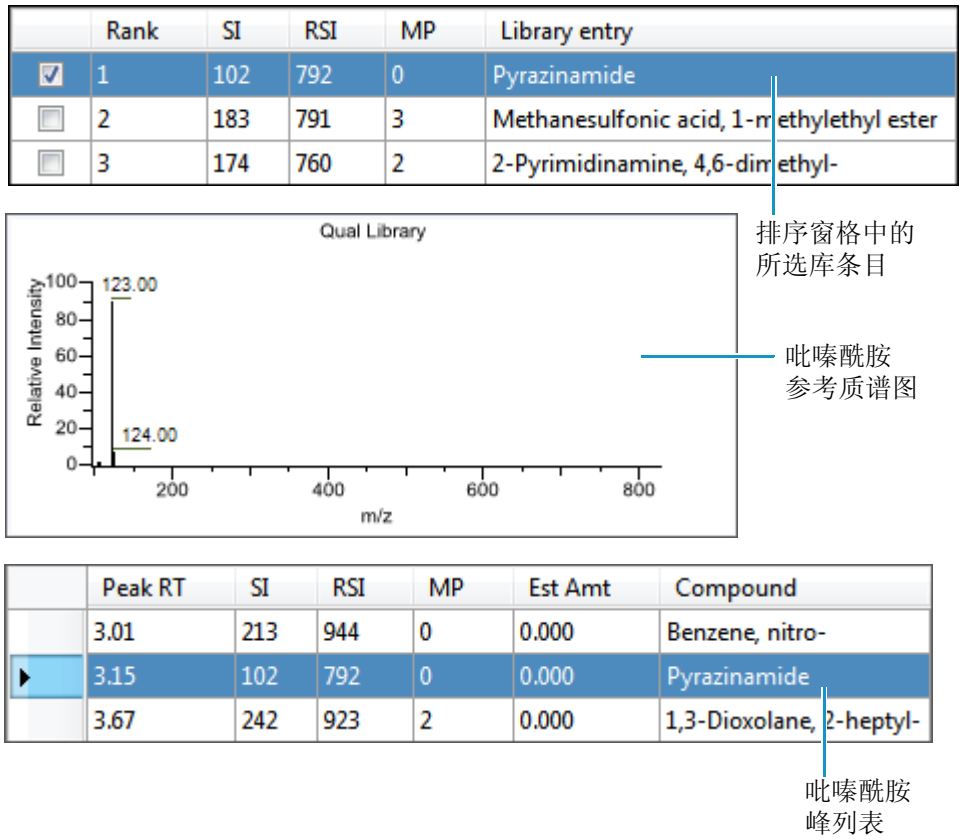
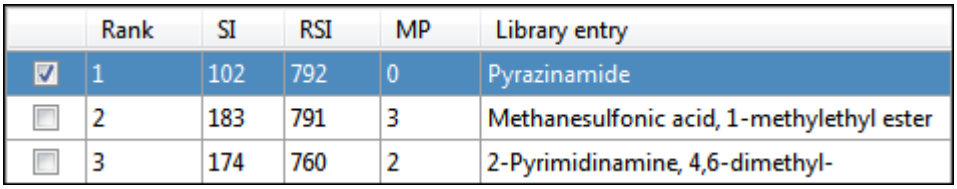


图 98. 排序窗格



	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-

表 75. 排序窗格参数

参数	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。

使用 Report View

利用 Report View （报告视图）为在 Analysis 模式中当前所选批次显示或生成报告。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

1. 从任意模式的导航窗格中，点击 **Analysis**。
2. 在 Analysis 导航窗格中点击 **Report View**。

当前选定批次的 Report View 显示。

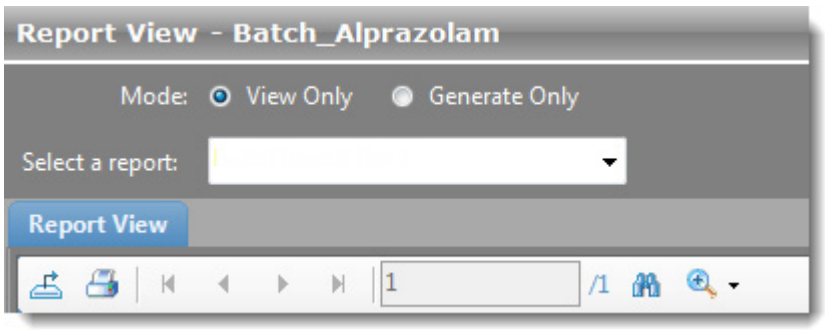
❖ 若要刷新 Report View

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

本部分主题包含以下主题：

- 查看报告
- 生成报告
- 使用报告
- 使用 Active View

图 99. Analysis 模式中的 Report View



- **View Only （仅查看）：** 显示批次、样品或化合物的所选报告类型的 PDF 或 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 Custom （自定义）和 Target Screening （目标筛选）报告类型在列表中可用时，才能生成这些报告。

  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）：** 为所选样品或批次水平报告创建所有指定的报告输出格式。参阅第 355 页的 “ 生成报告 ”。

查看报告

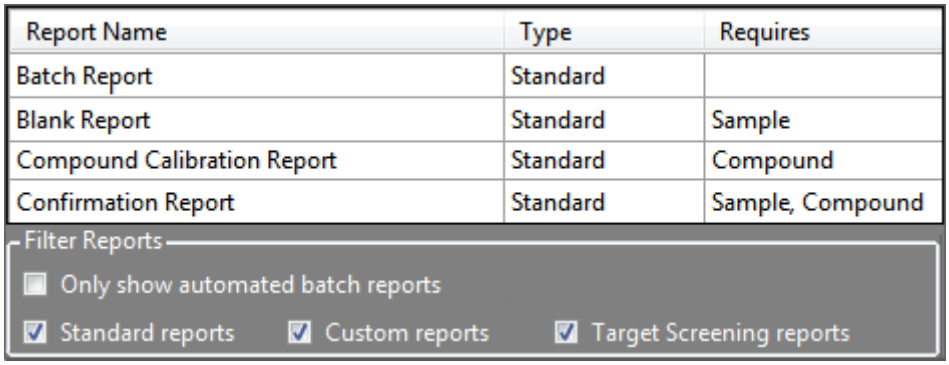
利用 View Only 特性查看所有已配置的标准报告和任意已生成的自定义或目标筛选报告。在用户生成一个报告之后，应用程序在 View Only 报告列表中显示该报告。

按照如下步骤进行操作：

- 若要选择报告
- 若要选择样品
- 若要选择化合物
- 若要选择样品和化合物

❖ 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。



这些报告反映了 Configuration 模式中的 Displayed Reports （已显示报告）选择。若要更改视图中可用的已配置报告，参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

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。

若要帮助组织报告，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 （过滤报告）区域中选中任意报告过滤器选项的组合。

表 76. Filter Reports 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 区域指定输出格式的报告。参阅第 288 页的 “ 编辑报告输出格式 ”。
Standard Reports （标准报告）	显示 Standard 报告类型。
Custom Reports （自定义报告）	显示所有生成的 Custom 报告类型。在报告生成之前，无法查看 Custom 报告。
Target Screening Reports （目标筛选报告）	显示所有生成的 Target Screening 报告。在报告生成之前，无法查看 Target Screening 报告。

注释 当对 Local Method （本地方法）视图中的方法、 Data Review 视图中的峰或 Batch View 中的样品作出更改时，必须重新生成自定义或目标筛选报告以使这些更改生效。

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。

遵照步骤第 353 页的 “ 若要选择样品 ”进行操作。

- 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 353 页的 “ 若要选择化合物 ”进行操作。

- 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。

遵照步骤第 354 页的 “ 若要选择样品和化合物 ”进行操作。

❖ 若要选择样品

1. 打开 Sample File （样品文件）列表显示批次中的所有样品。
2. 若要仅显示将包括在所选报告中的样品，选中 **Only Show Samples Relevant... （仅显示样品相关 ...）**复选框。

   例如，若选择 Check Standard Report （质控样报告）时，样品列表仅显示 QC 样品。

   注释 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。

3. 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 列表显示样品中所有化合物的名称和保留时间。

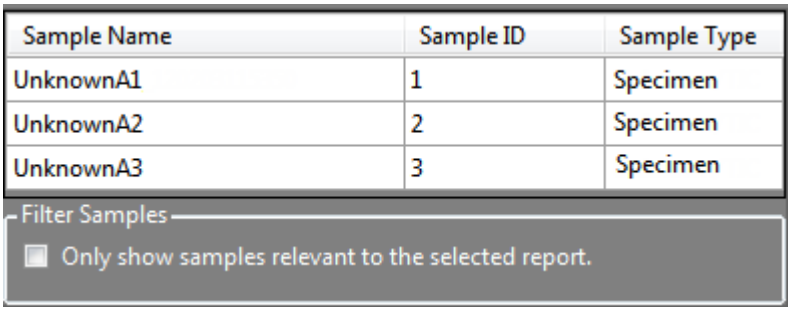
RT	Compound Name
	All Compounds
3.14	Propanenitrile
3.15	Pyrazinamide
3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-

2. 双击单个化合物或 **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。



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 Check Standard Report 时，样品列表仅显示 QC 样品。

   提示 点击列标题对样品进行排序。应用程序在批次的 Report View 中保存该排序顺序。

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. 双击单个化合物或 **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

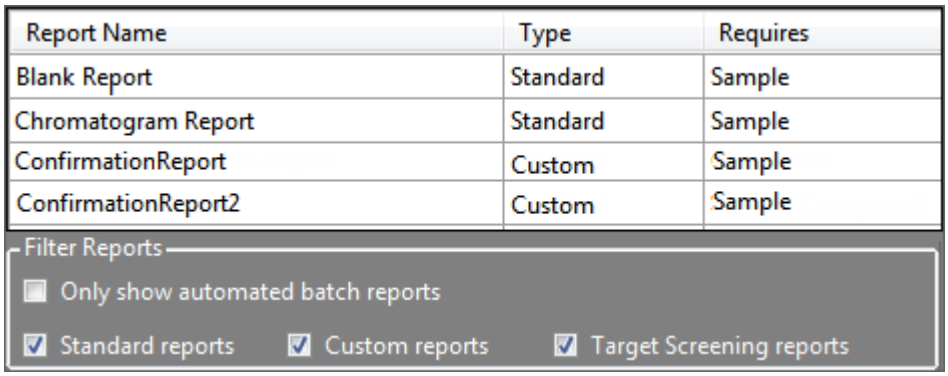
利用 Generate Only 特性创建样品水平报告。无法使用 View Only 特性在报告生成之前查看自定义或目标筛选报告。当对 Local Method 视图中的方法或 Data Review 视图中的峰作出更改时，必须重新生成自定义或目标筛选报告以查看这些更改的效果。

按照如下步骤进行操作：

- 若要选择报告
- 若要选择样品

❖ 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。



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。若要更改视图中可用的已配置报告，参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

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复选框的组合。

选项	操作
Only Show Automated Batch Reports （仅显示自动批次报告）	仅显示报告输出格式为 Batch View 的 Automated Batch Reports 区域指定的格式的样品水平报告。参阅第 288 页的 “ 编辑报告输出格式 ”。 如果在 Batch View 中仅指定了批次水平报告，选择该选项排除 Report Name （报告名称）列表中的所有报告。
Standard Reports （标准报告）	显示样品水平 Standard 报告类型。
Custom Reports （自定义报告）	显示样品水平 Custom 报告类型。
Target Screening Reports （目标筛选报告）	显示样品水平 Target Screening 报告类型。

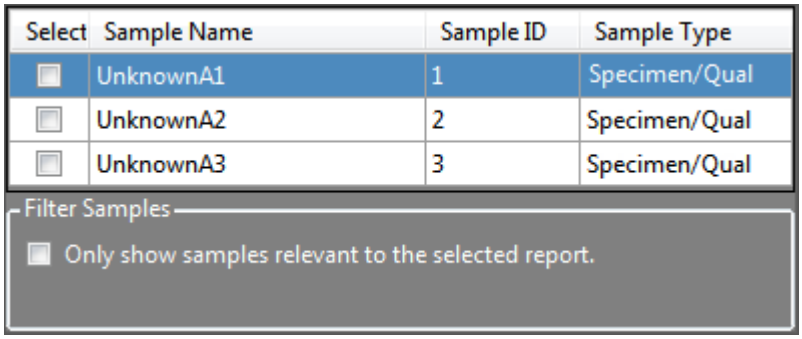
注释 点击列标题对样品进行排序。应用程序在批次的 Report View 中保存该排序顺序。

4. 双击报告名称。

报告列表关闭。必须为所选报告选择一个样品文件。

❖ 若要选择样品

1. 打开 Sample File 列表显示批次中的所有样品。



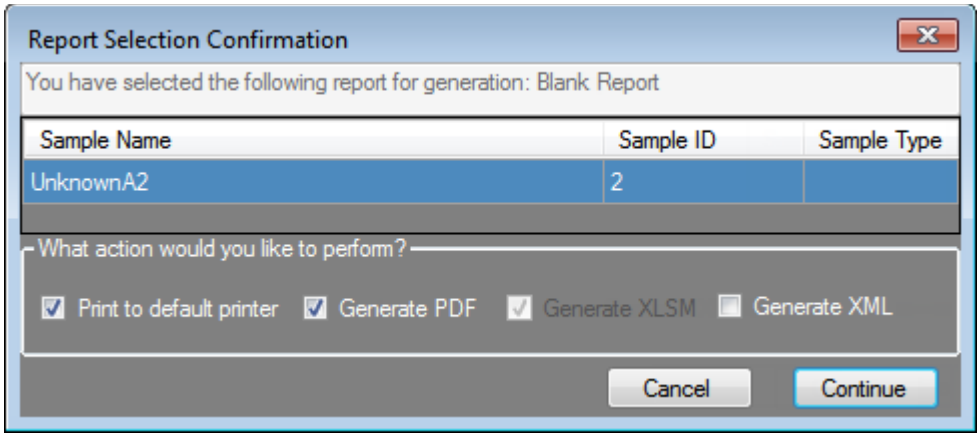
2. 若要仅显示将包括在所选报告中的样品，选中 **Only Show Samples Relevant...** 复选框。

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

> **注释** 点击列标题对样品进行排序。应用程序在批次的 Report View 中保存该排序顺序。

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。

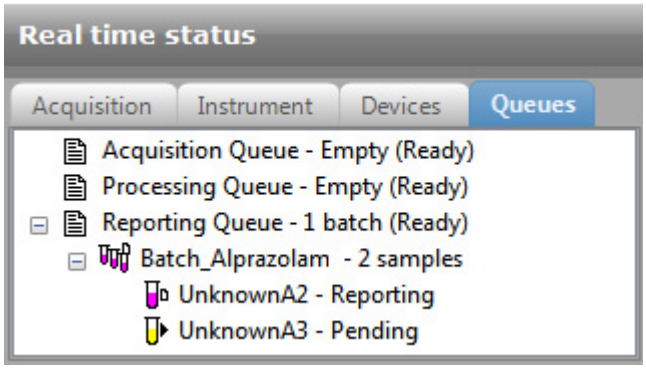


5. 在 What Action Would You Like to Perform （希望执行的操作）区域，选择想要创建的报告类型。

> **注释** 应用程序自动选择所需输出格式。这些选项不可编辑。

6. 点击 **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 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。

7. 若套查看生成的报告，按照第 351 页的 “ 查看报告 ”的说明进行操作。

注释 当对 Local Method 视图中的方法、 Data Review 视图中的峰或 Batch View 中的样品作出更改时，必须重新生成自定义或目标筛选报告以使那些更改生效。

使用报告

利用 Report View 页面上的图标来查看、打印或导出报告。

- PDF 报告视图对所有 Standard 和 Target Screening 报告类型可用。
- 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。

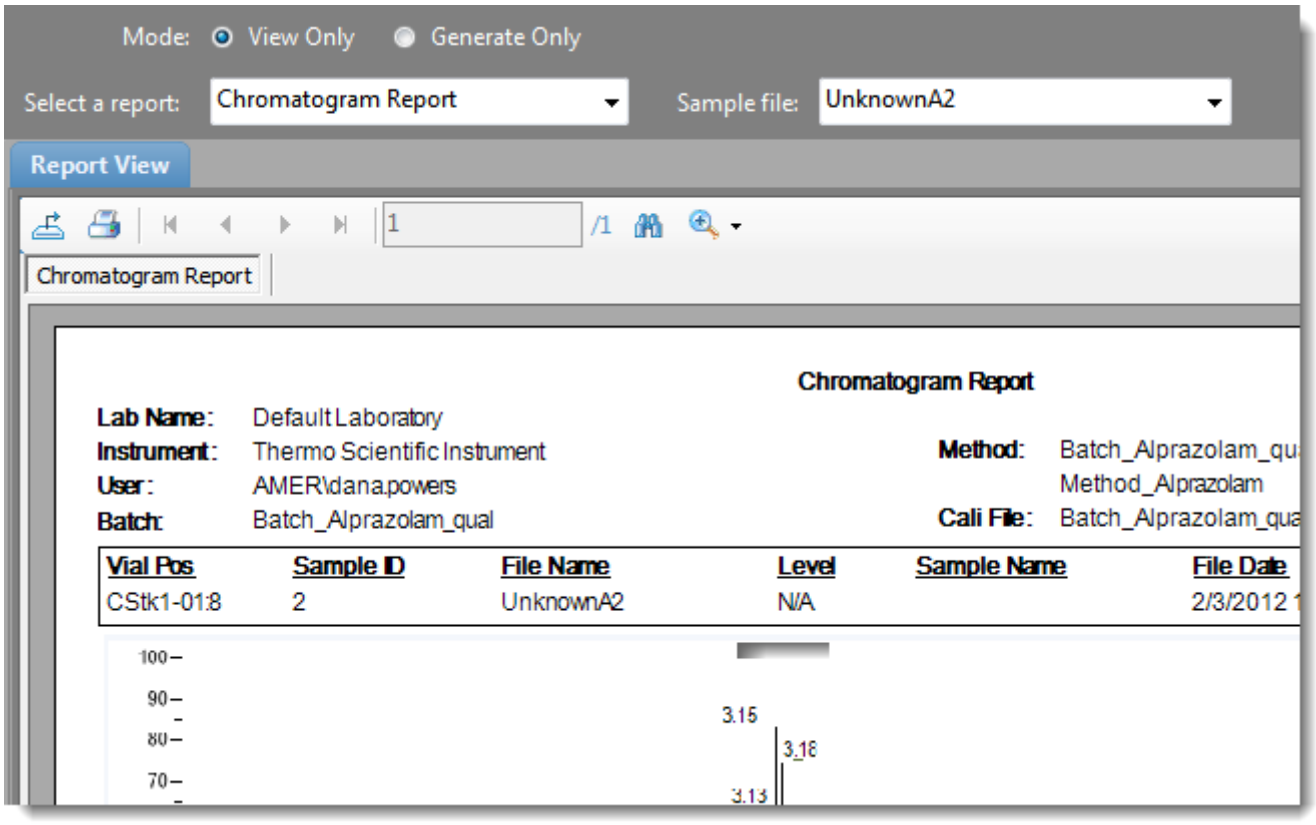
按照如下步骤进行操作：

- 若要打印标准或目标筛选报告
- 若要导出标准报告
- 若要搜索文本
- 若要放大报告文本

❖ 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 列表中选择一个样品。

   应用程序在 Report View 页面上显示报告。



3. 单击 **Print Report （打印报告）**图标， 。

   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。

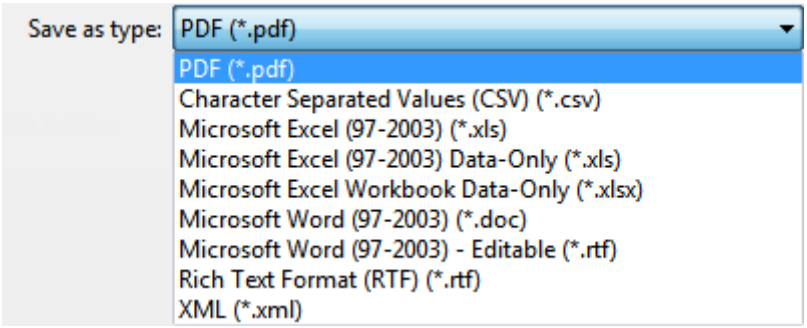
   横向报告将自动旋转以调整至适合纸张的尺寸。

❖ 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 列表中选择一个样品。

   应用程序在 Report View 页面上显示报告。
3. 单击 **Export Report （导出报告）**图标， 。

   Export Report 对话框打开。
4. 找到要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 （保存为类型）列表中选择报告类型：



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。

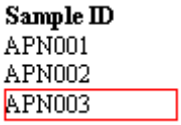
❖ 若要搜索文本

1. 从 Select a Report 列表中选择一个报告。
2. （可选）从 Sample File 列表中选择一个样品。

   应用程序在 Report View 页面上显示报告。
3. 点击 **Find Text （查找文本）**图标， 。

   Find Text 对话框打开。
4. 输入文本并点击 **Find Next （查找下一个）**。

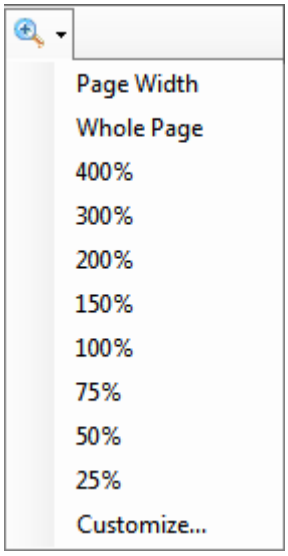
   当 TraceFinder 应用程序找到文本时会将该文本用红色框标示出来。



❖ 若要放大报告文本

1. 从 Select a Report 列表中选择一个报告。
2. （可选）从 Sample File 列表中选择一个样品。

   应用程序在 Report View 页面上显示报告。
3. 单击 **Zoom （缩放）**图标， ，然后选择缩放比例。



使用 Active View

利用 Active View 页面查看报告中每个样品的定量数据。 Active View 中的数据标记有标记信息。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。

❖ 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。参阅 “Active View 页面。 ”

❖ 若要显示报告

1. 从 Select a Report 列表中选择报告类型。

   只有为当前批次创建的报告类型显示在列表中。
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。

❖ 若要过滤需显示的化合物

点击 Showing （显示）按钮显示所有化合物或仅显示标记为未通过 QAQC 测试的化合物。

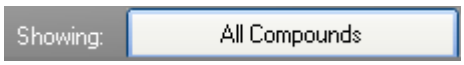


图 100. Active View 页面

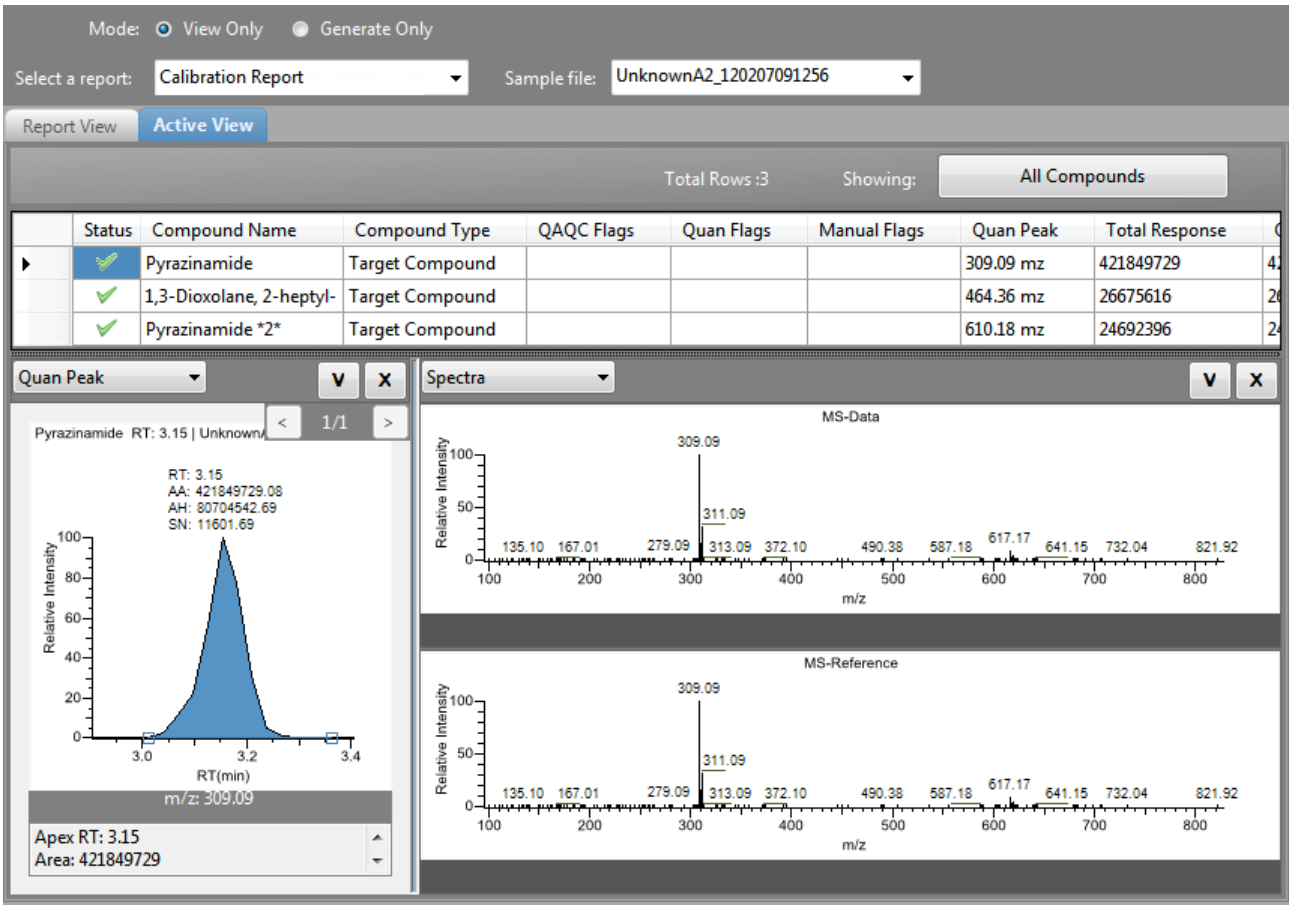


表 77. Active View 参数 （第 1 页，共 4 页）

参数	描述
View Only （仅查看）	激活 Active View 窗格。
Generate Only （仅生成）	将窗格切换到 Report View，使 Active View 不可用。
Select a Report （选择报告）	显示为当前批次创建的报告类型。
Sample File （样品文件）	当报告类型包含与每个样品对应的独立报告时使用。
Total Rows （总行数）	当前显示在窗格中的化合物行数。
Showing （显示）	显示所有化合物或仅显示带标记的化合物。
列标题	许多列标题都专门对应于单独的报告。参阅第 367 页的 “Active View 报告内容 ”。
Status （状态）	代表已报告化合物的状态。 • 黄色复选标记代表以下一种情况： – 化合物为手动积分。 – 任意确认峰为手动积分。 – 化合物具有定量标记。 • 红色复选标记代表代表未通过 QAQC 检查。 • 绿色复选标记代表不存在以下这些情况。 当化合物为内标物时，仅在内标物报告上显示警告。对 Manual Integration 报告，Status 列为空。
Compound Name （化合物名称）	分配给化合物的含字母数字的名称。
Compound Type （化合物类型）	Target Compound （目标化合物）或 Internal Standard （内标）。
QAQC Flags （QAQC 标记）	代表样品的 QAQC 检查未通过。 Manual Integration 报告不使用 QAQC 列。
Quan Flags （定量标记）	• Limit Of Detection (LOD) （检测限， LOD） • Limit Of Quantitation (LOQ)（定量限， LOQ） • Limit of Reporting (LOR) （报告限， LOR） • 将介于检测限和定量限之间的值标记为 J。 • Upper Limit of Linearity (ULOL) （线性上限， ULOL） 定量标记不适用于这些样品类型：Calibrator、 QC 或 Solvent。 Manual Integration 报告不使用 Quan Flag 列。
Manual Flags （手动标记）	代表手动积分的峰。 **M**：代表手动积分的定量峰。 **m**：代表手动积分的确认峰。

表 77. Active View 参数 （第 2 页，共 4 页）

参数	描述
根据所选报告的不同， Active View 页面包含以下任意或所有参数：	
Quan Peak *m/z*（定量峰质荷比）	所选定量峰的质荷比。
Total Response（总响应）	化合物的所有 Quan Peak Response （定量峰响应）值的总和。
Quan Peak Response（定量峰响应）	定量峰的响应值。
Quan Peak RT（定量峰保留时间）	定量峰的保留时间。
Theoretical Amount（理论量）	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Concentration（浓度）	
Confirming *n* Mass（确认 *n* 质量数）	确认峰的质量数。
Confirming *n* Response（确认 *n* 响应）	确认峰的响应值。
Confirming *n* Manual Flag（确认 *n* 手动标记）	代表手动积分的确认峰。
Confirming *n* Ion Ratio Flag （确认 n 离子比率标记）	代表离子比率处于范围外。不适用于类似物。
Confirming *n* Ion Ratio（确认 *n* 离子比率）	确认离子响应对定量离子响应的实际比率。
Confirming *n* Range（确认 *n* 范围）	确认离子的可接受范围。
Retention Time（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。
Quan Mass（定量质量数）	用于确定化合物峰面积和峰高的离子比率。
Response （响应）	化合物的所有 Quan Peak Response 值的总和。
Injection Concentration（进样浓度）	进样浓度为样品的计算量，不采用转换。
Injection Units（进样单位）	在 Method Development 模式的 Calibration 页面指定的进样单位。参阅第 159 页的 “Calibration”。

表 77. Active View 参数 （第 3 页，共 4 页）

参数	描述
Sample Concentration （样品浓度）	乘以换算系数的进样浓度。
Sample Units （样品单位）	在 Method Development 模式的 Calibration 页面指定的进样单位。参阅第 159 页的 “Calibration”。
QIon （定量离子）	定量峰的质量数范围。当选择主方法的信号参数的模拟检测器时，应用程序显示这个值为 Analog （模拟）以及具有质谱 Not Available 显示的报告。参阅第 136 页的 “Signal”。
RT （保留时间）	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。
Manual Integration 报告	
m/z （质荷比）	定量峰的质荷比。
Method RT （方法保留时间）	方法积分的峰的最高保留时间。
Method Peak Height （方法峰高）	方法积分的峰的峰高。
Method Peak Area （方法峰面积）	方法积分的峰的峰面积。
Manual RT （手动保留时间）	手动积分的峰的最高保留时间。
Manual Peak Height （手动峰高）	手动积分的峰的峰高。
Manual Peak Area （手动峰面积）	手动积分的峰的峰面积。
Internal Standard 报告	
Std Response （标准响应）	校正文件中找到的内标的响应平均值。
Minimum Response （最小响应）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最小响应。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Maximum Response （最大响应）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最大响应。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Sample Response （样品响应）	样品中找到的峰面积。
Std RT （标准保留时间）	校正文件中找到的平均保留时间。
Min RT （最小保留时间）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最小保留时间。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Max RT （最大保留时间）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最大保留时间。参阅第 173 页的 “ISTD”。

表 77. Active View 参数 （第 4 页，共 4 页）

参数	描述
Sample RT （样品保留时间）	样品中找到的保留时间。
图表数据	
Quan Peak 1 （定量峰 1）	
Calibration curve （校正曲线）	显示选定化合物校正曲线的图示及用于评估校正质量的关键统计值。
Spectra （质谱图）	显示在数据和方法参考中找到的质谱图比较。
QED Spectra （QED 质谱图）	显示原始数据文件和数据库匹配项的平均 QED 质谱图。若样品不含 QED 数据，该页面将为空。
Confirming Ions （确认离子）	显示选定样品和化合物的所有定性 / 确认离子的图谱，以及计算的离子比率和离子比率接受窗口。

Active View 报告内容

每个使用 Active View 的标准报告显示所有报告中常见的值。参阅第 367 页的 “ 常见 Active View 报告列 ”。

除了常见值以外，以下报告显示其他活动视图特性：

- Blank Report 的 Active View 列
- Calibration Report 的 Active View 列
- High Density Sample Report 1 （高密度样品报告 1）和 High Density Sample Report 1 Long （高密度样品长报告 1）的 Active View 列
- High Density Sample Report 2 （高密度样品报告 2）和 High Density Sample Report 2 Long （高密度样品长报告 2）的 Active View 列
- High Density Sample Report 3 （高密度样品报告 3）和 High Density Sample Report 3 Long （高密度样品长报告 3）的 Active View 列
- Internal Standard Summary Report （内标总结报告）的 Active View 列
- Ion Ratio Failure Report （例子比率未通过报告）的 Active View 列
- Manual Integration Report 的 Active View 列
- Modify Columns 对话框功能按钮
- Quantitation Report （定量报告）的 Active View 列
- Solvent Blank Report （溶剂空白报告）的 Active View 列

表 78. 常见 Active View 报告列

列	描述
Status （状态）	代表已报告化合物的状态。 • 黄色警告标志代表以下一种情况： – 化合物为手动积分。 – 任意确认峰为手动积分。 – 化合物具有定量标记。 – 化合物未通过 QAQC。 • 绿色复选标记代表不存在以下这些情况。 当化合物为内标物时，仅在内标物报告上显示警告标记。
Compound Name （化合物名称）	分配给化合物的含字母数字的名称。
Compound Type （化合物类型）	Target Compound 或 Internal Standard。
QAQC Flags （QAQC 标记）	代表样品的 QAQC 检查未通过。 Method Validation （方法验证）和 MDL 报告不使用 QAQC 列。

表 78. 常见 Active View 报告列

列	描述
Quan Flags （定量标记）	• Limit Of Detection (LOD) （检测限， LOD） • Limit Of Quantitation (LOQ) （定量限， LOQ） • Limit of Reporting (LOR) （报告限， LOR） • 将介于检测限和定量限之间的值标记为 J。 • Upper Limit of Linearity (ULOL) （线性上限， ULOL） 定量标记不适用于这些样品类型：Calibrator、 QC 或 Solvent。 Calibration 报告不使用 Quan Flags 列。 Calibration Curve 报告不使用 Quan Flags 列。
Manual Flags （手动标记）	代表手动积分的峰。 • **M** 代表手动积分的定量峰。 • **m** 代表手动积分的确认峰。

表 79. Blank Report 的 Active View 列

列	描述
Retention Time （保留时间）	定量质量数的保留时间。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。
Quan Mass （定量质量数）	定量峰的质量数范围。
Response （响应）	化合物的所有 Quan Peak Response 值的总和。
Inj Conc （进样浓度）	进样浓度为样品的计算量，不采用转换。
Inj Units （进样单位）	在 Method Development 模式的 Calibration 页面指定的进样单位。参阅第 159 页的 “Calibration”。
Sample Conc （样品浓度）	乘以换算系数的计算量。
Sample Units （样品单位）	在 Method Development 模式的 Calibration 页面指定的进样单位。参阅第 159 页的 “Calibration”。

表 80. Calibration Report 的 Active View 列 （第 1 页，共 2 页）

列	描述
Curve Type （曲线类型）	当校正化合物时使用的曲线类型 （线性、二次方或平均响应因子）。
Average RF （平均响应因子）	平均响应因子。若曲线类型为 Average RF 时适用。
Average Response （平均响应）	穿过所有校正点的内标物的平均响应。仅应用于 Internal Standard 样品类型。
A0	不含 X 的值，仅应用于线性或二次方曲线。
A1	X 值。仅应用于线性或二次方曲线。
A2	X^2 值。仅应用于二次方曲线。

表 80. Calibration Report 的 Active View 列 （第 2 页，共 2 页）

列	描述
R^2	用于可接受校正 （当处于线性或二次方模式中）的最小相关性系数 （r^2）。
RSD （相对标准偏差）	相对标准偏差。仅应用于内标或经平均响应因子曲线校正的目标物。
Level （水平）	列指定了水平名称；字段值指定了用于校正的数据点。字段可以是外标校正的 Response Factor （响应因子），内标线性或二次方的 Response Factor 或 Internal Average RF （内标平均响应因子）的 Relative Response Factor （相对响应因子）。曲线中的每个水平都有一列。若某个批次采用扩展校正，则可能比当前批次中的校正标样的列更多。

表 81. High Density Sample Report 1 （高密度样品报告 1）和 High Density Sample Report 1 Long （高密度样品长报告 1）的 Active View 列

列	描述
m/z （质荷比）	定量峰的质荷比。
Total Response （总响应）	化合物的所有 Quan Peak Response 值的总和。
Quan Peak Response （定量峰响应）	定量峰的响应值。
Quan Peak RT （定量峰保留时间）	定量峰的保留时间。
T Amount （理论量）	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Conc （浓度）	已计算 （进样）量。

表 82. High Density Sample Report 2 （高密度样品报告 2）和 High Density Sample Report 2 Long （高密度样品长报告 2）的 Active View 列 （第 1 页，共 2 页）

列	描述
m/z （质荷比）	定量峰的质荷比。
Total Response （总响应）	化合物的所有 Quan Peak Response 值的总和。
Quan Peak Response （定量峰响应）	定量峰的响应值。
Quan Peak RT （定量峰保留时间）	定量峰的保留时间。
T Amount （理论量）	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Conc （浓度）	已计算 （进样）量。
Confirming 1 Mass （确认 1 质量数）	确认峰的质量数。
Confirming 1 Response （确认 1 响应）	确认峰的响应值。
Confirming 1 Manual Flag （确认 1 手动标记）	代表手动积分的确认峰。

表 82. High Density Sample Report 2 （高密度样品报告 2）和 High Density Sample Report 2 Long （高密度样品长报告 2）的 Active View 列 （第 2 页，共 2 页）

列	描述
Confirming 1 Ion Ratio Flag （确认 1 离子比率标记）	代表离子比率处于范围外。不适用于类似物。
Confirming 1 Ion Ratio （确认 1 离子比率）	确认离子响应对定量离子响应的实际比率。
Confirming 1 Range （确认 1 范围）	确认离子的可接受范围。

表 83. High Density Sample Report 3 （高密度样品报告 3）和 High Density Sample Report 3 Long （高密度样品长报告 3）的 Active View 列 （第 1 页，共 2 页）

列	描述
m/z （质荷比）	定量峰的质荷比。
Total Response （总响应）	化合物的所有 Quan Peak Response 值的总和。
Quan Peak Response （定量峰响应）	定量峰的响应值。
Quan Peak RT （定量峰保留时间）	定量峰的保留时间。
T Amount （理论量）	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Conc （浓度）	已计算 （进样）量。
Confirming 1 Mass （确认 1 质量数）	确认峰的质量数。
Confirming 1 Response （确认 1 响应）	确认峰的响应值。
Confirming 1 Manual Flag （确认 1 手动标记）	代表手动积分的确认峰。
Confirming 1 Ion Ratio Flag （确认 1 离子比率标记）	代表离子比率处于范围外。不适用于类似物。
Confirming 1 Ion Ratio （确认 1 离子比率）	确认离子响应对定量离子响应的实际比率。
Confirming 1 Range （确认 1 范围）	确认离子的可接受范围。
Confirming 2 Mass （确认 2 质量数）	确认峰的质量数。
Confirming 2 Response （确认 2 响应）	确认峰的响应值。
Confirming 2 Manual Flag （确认 2 手动标记）	代表手动积分的确认峰。
Confirming 2 Ion Ratio Flag （确认 2 离子比率标记）	代表离子比率处于范围外。不适用于类似物。

表 83. High Density Sample Report 3 （高密度样品报告 3）和 High Density Sample Report 3 Long （高密度样品长报告 3）的 Active View 列 （第 2 页，共 2 页）

列	描述
Confirming 2 Ion Ratio （确认 2 离子比率）	确认离子响应对定量离子响应的实际比率。
Confirming 2 Range （确认 2 范围）	确认离子的可接受范围。

表 84. Internal Standard Summary Report （内标总结报告）的 Active View 列

列	描述
Std Response （标准响应）	校正文件中找到的内标的响应平均值。
Minimum Response （最小响应）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最小响应。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Maximum Response （最大响应）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最大响应。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Sample Response （样品响应）	样品中找到的峰面积。
Std RT （标准保留时间）	校正文件中找到的平均保留时间。
Min RT （最小保留时间）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最小保留时间。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Max RT （最大保留时间）	在 Method Development 模式的 ISTD 页面指定的最大保留时间。参阅第 173 页的 “ISTD”。
Sample RT （样品保留时间）	样品中找到的保留时间。

表 85. Ion Ratio Failure Report （例子比率未通过报告）的 Active View 列

列	描述
Quan Ion （定量离子）	定量峰的离子。
Qual Ion （定性离子）	确认峰的离子。
Quan Ion Response （定量离子响应）	定量离子的响应。
Qual Ion Response （定性离子响应）	定性离子的响应。
Ratio （比率）	确认离子响应对定量离子响应的比率。
Range （范围）	可接受范围。

表 86. Manual Integration Report （手动积分报告）的 Active View 列

列	描述
m/z （质荷比）	定量峰的质荷比。
Method RT （方法保留时间）	方法积分的峰的最高保留时间。
Method Peak Height （方法峰高）	方法积分的峰的峰高。
Method Peak Area （方法峰面积）	方法积分的峰的峰面积。
Manual RT （手动保留时间）	手动积分的峰的最高保留时间。
Manual Peak Height （手动峰高）	手动积分的峰的峰高。
Manual Peak Area （手动峰面积）	手动积分的峰的峰面积。

表 87. Quality Control Report （质量控制报告）的 Active View 列

列	描述
Curve Type （曲线类型）	L - Linear A - Average RF Q - Quadratic
Daily RF （日响应因子）	Average RF 曲线类型的响应因子。对所有其他的曲线类型，该列为空。
Mean RF （平均响应因子）	校正文件中找到的平均保留时间。当曲线类型为 Average RF 时显示。对所有其他的曲线类型，该列为空。
Min RF （最小响应因子）	在方法的 QC Check （质控样）页面找到的最小 QC 响应因子。
RF %D （响应因子百分比偏差）	日响应因子和平均响应因子之间的百分比偏差。
Max RF Diff (%) （最大响应因子偏差， %）	在方法的 QC Check 页面找到的最大 QC 响应因子。
QC Amount （QC 量）	由化合物水平定义的值。
Calculated Amount （计算量）	浓度的报告值。
Amount % Difference （百分比偏差量）	计算值和 QC 值之间的百分比偏差。利用进样浓度计算该值。
Max Amount % Difference （最大百分比偏差量）	查看计算值和 QC 值之间的最大允许百分比偏差。

表 88. Quantitation Report （定量报告）的 Active View 列

列	描述
RT （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。
QIon （定量离子）	定量峰的质量数范围。 当选择主方法的信号参数的模拟检测器时，应用程序显示这个值为 Analog 以及具有质谱 Not Available 显示的报告。参阅第 136 页的 “Signal”。
Response （响应）	化合物的所有定量峰响应值的总和。
Injected Concentration （进样浓度）	进样浓度为样品的计算量，不采用转换。 随着其他样品被处理，校正数据发生变化，因此除了批次中的最后样品，活动视图或报告视图中的报告与在处理结束时创建的物理 （PDF、 XML 或打印报告）报告的值有所不同。若要避免这一差异，执行下列操作之一： • 对于标准 Quantitation Report 或 Quantitation Report - 2 （定量报告 -2），仅观察批次中最后一个样品的活动和报告视图。 • 对于自定义 Quantitation Report，使报告成为批次 - 水平报告。
Injected Units （进样单位）	在 Method Development 模式的 Calibration 页面指定的进样单位。参阅第 159 页的 “Calibration”。
Sample Conc （样品浓度）	乘以换算系数后计算所得的进样量。参阅 Injected Concentration 描述
Sample Units （样品单位）	在 Method Development 模式的 Calibration 页面指定的进样单位。参阅第 159 页的 “Calibration”。

表 89. Solvent Blank Report （溶剂空白报告）的 Active View 列

列	描述
RT （保留时间）	定量峰的保留时间。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。
QIon （定量离子）	定量峰的质量数范围。 当选择主方法的信号参数的模拟检测器时，应用程序显示这个值为 Analog 以及具有质谱 Not Available 显示的报告。参阅第 136 页的 “Signal”。
Response （响应）	化合物的所有 Quan Peak Response 值的总和。
Method （方法）	方法中定义的评估方法。
Upper Limit （上限）	在方法中进行定义。

使用 Local Method View

当前方法为与批次关联的主方法的副本。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。

在 Local Method View 中，可编辑本地方法参数。参阅 Local Method View。当前方法为与批次关联的主方法的副本。将当前方法命名为 *BatchName_MasterMethodName*。

❖ 若要打开 Local Method View 视图

1. 执行下列操作之一：

   从主菜单点击 **Analysis**。

   – 或 –

   点击导航窗格中的 **Analysis**。

2. 在 Analysis 导航窗格中，点击 **Local Method**。

   当前所选批次的 Local Method 视图打开。

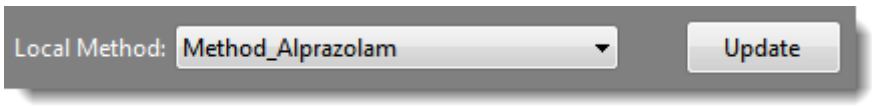
   可以编辑当前方法中的多个方法参数。编辑本地方法不会影响主方法中的参数。

   有关方法参数的详细说明，参阅第 90 页的 “ 使用主方法 ”。

3. 输入对方法的任何当前更改。
4. 本地方法编辑完成以后，选择 **File > Save**。
5. 若要使用经过编辑的当前方法处理批次或创建新报告，需返回至 Batch View 并提交批次。

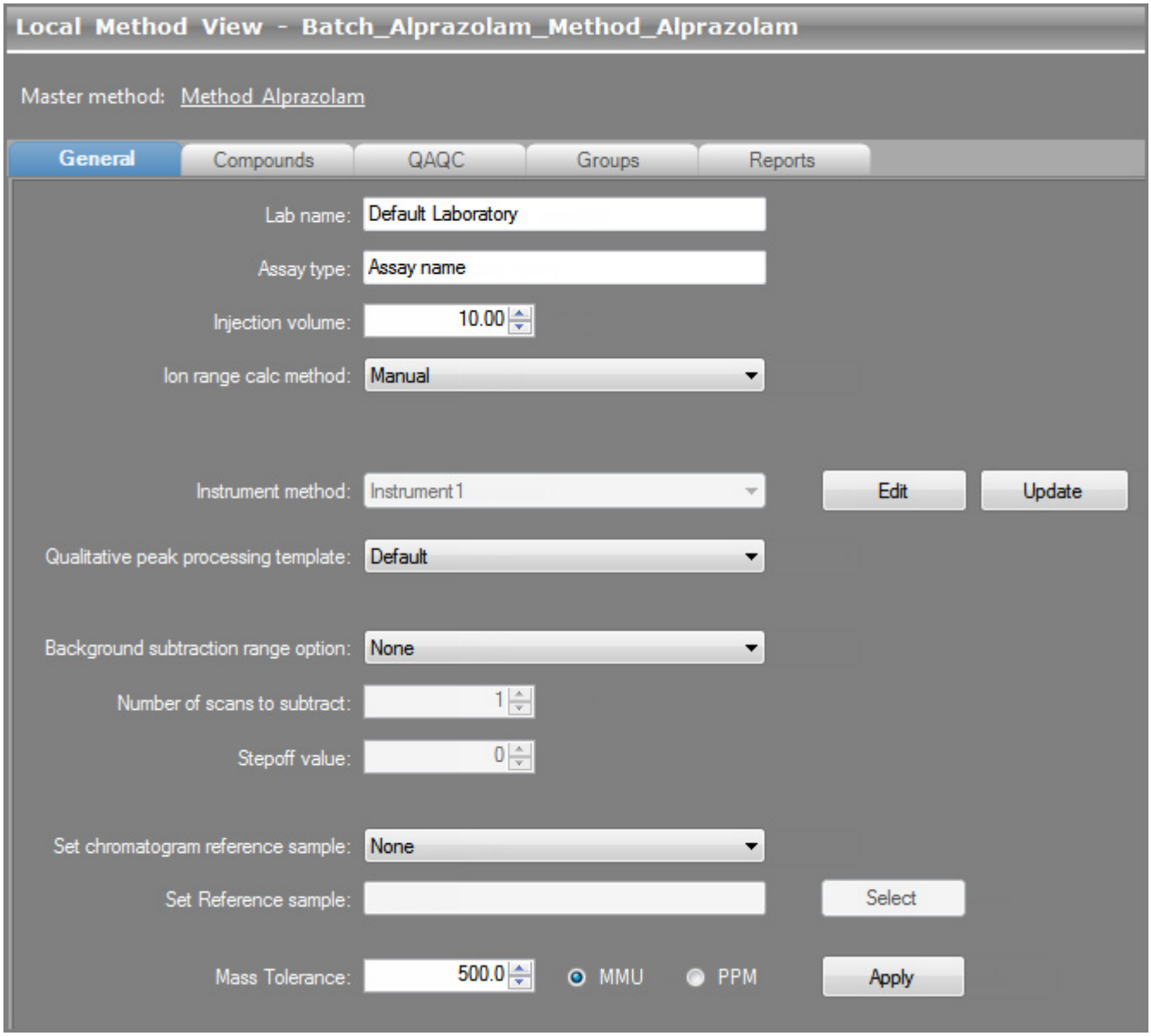
❖ **若要以 Batch View 中的主方法覆盖本地方法**

在 Batch View 中，点击 **Update**。



应用程序以相同名称的主方法覆盖本地方法。可以使用这一特性以原始主方法覆盖已编辑的主方法或以已更新的主方法覆盖本地方法。

图 101. Local Method View



使用 Batch Template Editor

在 Batch Template Editor （批次模板编辑器）中，可以创建包含批次基本设置的批次模板。参阅第 381 页的 “Batch Template Editor”。批次创建被视为常规操作，因为批次的性质和类型通常很相似 （在某些情况下由实验室操作程序指定），批次模板可定义为提供批次的基本结构。

若要采用批次模板创建批次，从应用程序菜单中选择 **File > New > Batch Using Wizard**。参阅第 298 页的 “ 利用 Batch Wizard 创建批次 ”。

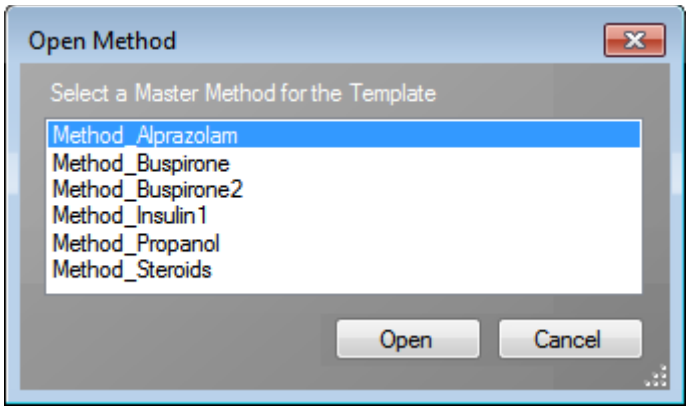
按照如下步骤进行操作：

- 若要创建新批次模板
- 若要指定活动化合物
- 若要指定模板方法信息
- 若要指定活动化合物
- 若要将样品插入到列表中
- 若要复制样品
- 若要移除列表中的样品
- 若要编辑样品值
- 若要添加类型相同的多个样品
- 若要指定报告选项
- 若要指定活动化合物

❖ 若要创建新批次模板

1. 从应用程序菜单中选择 **File （文件） > New （新建） > Batch Template （批次模板）**。

   Open Method （打开方法）对话框打开，可在此选择要打开的主方法。



2. 选择主方法然后点击 **Open**。

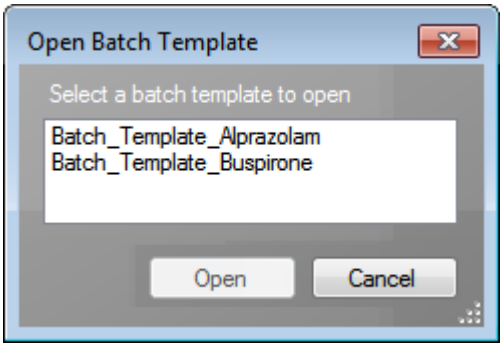
   Batch Template Editor 打开。有关所有参数的详细说明，参阅第 381 页的 “Batch Template Editor”。

   编辑器使用为模板所选的主方法。

❖ 若要打开批次模板

1. 从应用程序菜单中选择 **File > Open > Batch Template**。

   Open Batch Template （打开批次模板）对话框打开。



2. 选择一个批次模板并点击 **Open**。

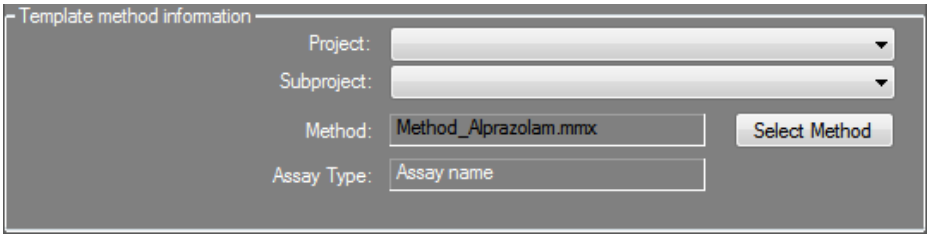
   Batch Template Editor 以所选模板的设置打开。若要查看编辑器和参数的详细说明，参阅第 381 页的 “Batch Template Editor”。

❖ 若要指定模板方法信息

1. 从 Project 列表中选择一个项目名称。
2. 从 Subproject 列表中选择一个子项目名称。

   提示 若没有项目或子项目可选，转至 Configuration 模式的 Project Administration（项目管理）视图并创建一个新子项目。参阅第 46 页的 “Project Administration”。

3. 若要更改当前方法，点击 **Select Method （选择方法）**然后选择一个新方法。



❖ 若要将样品添加到批次

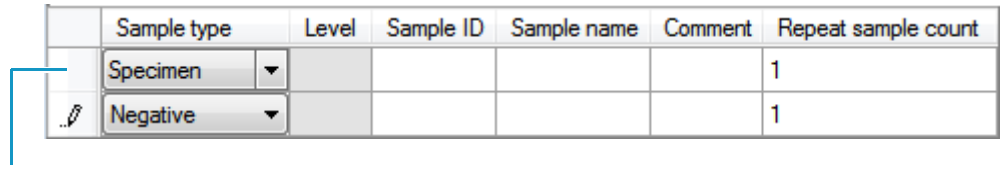
右击然后从快捷菜单中选择 **Add Sample**，或者点击 add sample 图标， 。

应用程序将新的 Specimen 样品添加到样品列表的末尾。

❖ 若要将样品插入到列表中

1. 选择要在其上方插入新的 Specimen 样品。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Insert Sample**。

   应用程序会将新 Specimen 样品插入到所选样品上方。



❖ 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**。

   应用程序将复制的样品插入到选定样品上方。

❖ 若要移除列表中的样品

1. 选择要移除的样品。

   利用 SHIFT 或 CTRL 键选择多个样品。
2. 右击然后从快捷菜单中选择 **Remove Selected Samples**，或右击 **Remove Sample** （移除样品）图标，。

   应用程序从列表中移除所选样品。

❖ 若要编辑样品值

1. 对于每一个添加的样品，点击 Sample Type 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）	

2. 对于每个 QC 或 Calibrator 样品，单击 Level 单元格并从列表选择一个水平。

   校正和 QC 水平已在主方法中定义。如果 Level 列表中无任何选项，执行下列步骤：

   a. 关闭 Batch Template Editor。
   b. 返回方法开发模式。
   c. 打开主方法。
   d. 点击 **Compounds** 选项卡。
   e. 点击 **Calibration Levels** 选项卡。
   f. 添加水平。
   g. 保存方法。

h. 返回 Analysis 模式，然后再次开始这个批次模板。

必须先关闭原始批次模板，然后才能保存和开始新的批次模板。有关详细说明，参阅第 106 页的 “ 编辑主方法 ”。

3. （可选）输入样品 ID、样品名称或注释。

这些值可以为任意文本串。

❖ 若要添加类型相同的多个样品

在 Repeat Sample Count （重复样品计数）列中，输入希望为每个样品类型创建的样品数。

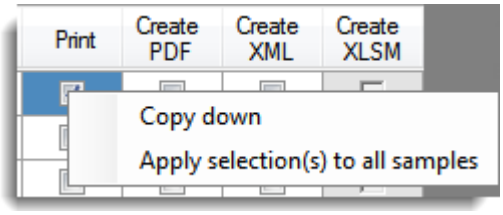
当使用该模板创建批次时，批次包含这一数量的指定类型的单独样品。在批次中可以改变单独样品的任意列值。

❖ 若要指定报告选项

1. 要为每个报告类型指定要创建的报告输出类型，在适当的列中选择复选框。

默认情况下会清除所有报告输出类型。

2. 若要在所选报告下方为所有报告复制输出类型，点击该单元格将其选中，然后右键单击并从快捷菜单选择 **Copy Down**。



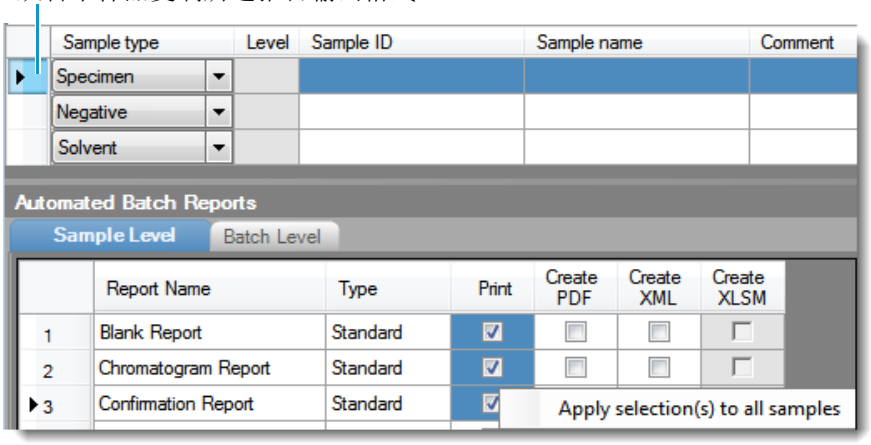
位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元的选取或未选取状态。

可以仅对该输出类型可用的报告复制输出类型。

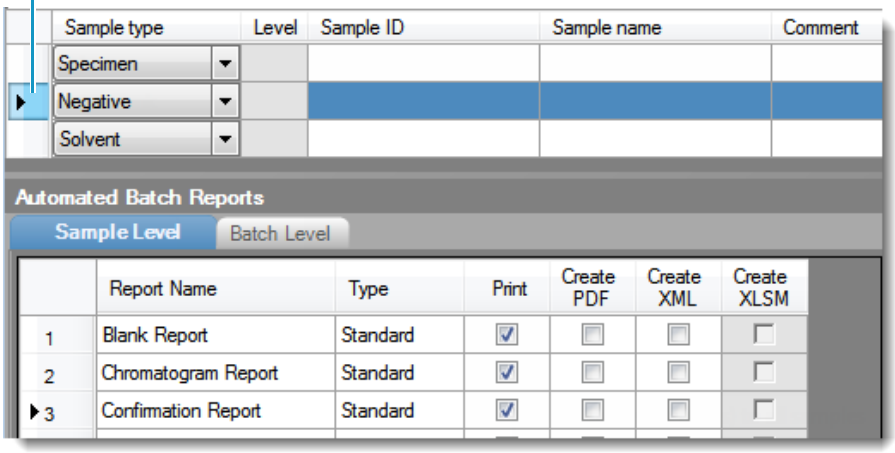
3. 若要为批次中的所有样品复制所选报告输出格式，右击单元格然后从快捷菜单选择 **Apply Selection to All Samples**。

示例

从首个样品复制所选报告输出格式



将所选报告输出格式复制到批次中的所有样品



❖ 若要指定活动化合物

1. 在样品表格中，点击样品行中的任意位置以选择希望指定活动化合物的样品。

   化合物选项针对样品。即使样品的样品类型一致，也可以为每个样品选择不同的化合物。

2. 在 Compound Active Status 区域，选中希望在所选样品中识别的每个化合物的 Active 复选框。

   若已创建化合物组，可以激活或停用整个组。右击然后从列表中选择组。

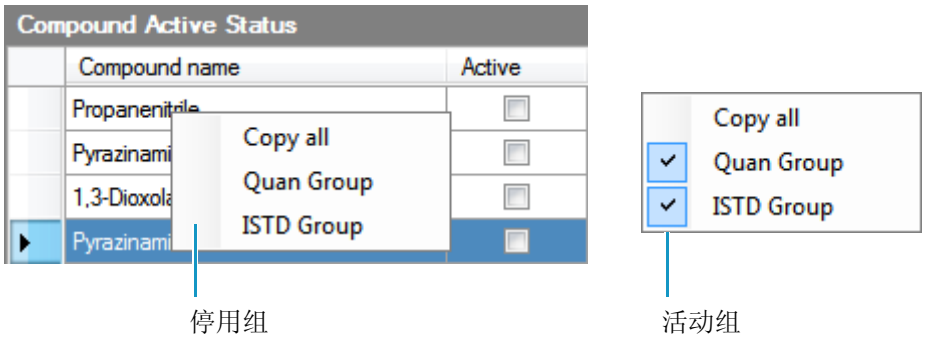


图 102. Batch Template Editor

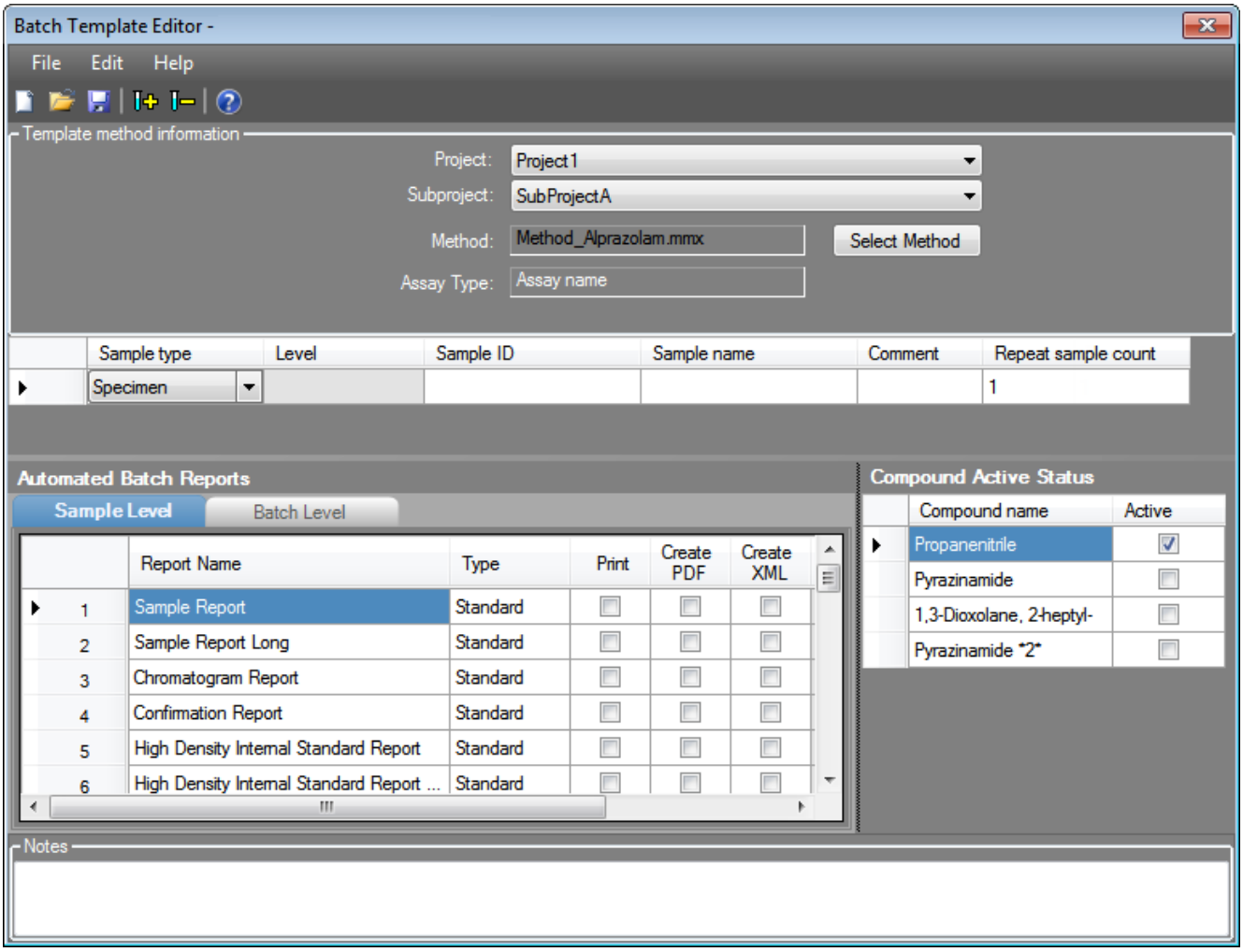


表 90. Batch Template Editor 参数

参数	描述
Template Method Information （模板方法信息）	
Project （项目）	批次的上级项目。
Subproject （子项目）	批次的下级项目。
Method （方法）	批次使用的主方法。 Select Method 按钮打开 Open Method 对话框，在此可以为批次模板选择不同的主方法。
Assay Type （实验类型）	方法的目标分析类型的名称。分析类型将方法与化合物分析或特定化合物类别相联系 （例如， PAH 的分析类型可能用于多环芬芳碳氢化合物的分析）。应用程序在批次模板中使用此分析类型。也可选择方法与批次模板的适当组合。
列值	
Sample Type （样品类型）	定义应用程序如何处理样品数据。按照下列样品类型进行样品分类：Specimen、Specimen/Qual、 QC、 Solvent、Calibrator、 Hydrolysis、 Unextracted 或 Negative
Level （水平）	为校准样品或质控样品定义的水平。
Sample ID （样品标识号）	用户定义的用以识别样品的字母数字字符串。
Sample Name （样品名称）	用户定义的用以识别样品的名称。
Comment （注释）	用户为样品定义的备注。
Repeat Sample Count （重复样品计数）	用于创建该类型的样品数。
Sample Level / Batch Level （样品水平 / 批次水平）	
Report Name （报告名称）	报告的名称。
Type （类型）	Standard、 Custom 或 Target Screening。
Print （打印）	发送报告至打印机。
Create PDF （创建 PDF）	将报告保存为 PDF 文件。 仅对标准和目标筛选报告可用。
Create XML （创建 XML）	将报告保存为 XML 文件。 仅对标准报告可用。
Create XLSM （创建 XLSM）	将报告导出为宏启用工作簿 (.xlsm） 格式。 仅对自定义报告可用。
化合物活动状态	
Compound Name （化合物名称）	方法中所有化合物的列表。
Active （活动）	在所选样品中识别的化合物。

报告

本附录包含标准及自定义报告的相关信息。

目录

- 指定报告
- 报告标记
- 样品标准报告

报告引擎可生成多种不同类型的报告，旨在满足实验室、实验室客户以及可能查看结果的主要监管机构的需求。本附录中列出的报告符合不同方法和全球监管机构的要求，专为帮助跟踪系统和方法的运行情况而设计。 TraceFinder 应用程序可生成标准和自定义报告。

指定报告

ITAdmin （IT 管理员）或 LabDirector （实验室主任）职务下的用户可以配置一系列能够在 Method Development （方法开发）或 Acquisition （采集）模式下使用的报告。

有关在 Configuration （配置）模式下配置报告的详细信息，参阅第 62 页的 “ 指定报告配置 ”。

有关在 Method Development 模式下创建方法时指定报告的详细信息，参阅第 178 页的 “ 编辑 Reports 页面 ”。

有关在 Acquisition 模式下查看批次报告的详细信息，参阅第 235 页的 “ 选择和检查报告 ”。

标准报告

对于生成的每份标准报告，可以创建硬拷贝打印件、 PDF (.pdf) 文件、或 XML(.xml) 输出格式。除了报告类型，可以为每份报告指定描述。默认的报告描述是报告名称。

TraceFinder 应用程序能够生成下列类型的标准报告：

- Batch Report （批次报告）
- Batch Summary Report （批次总结报告）
- Calibration Report （校正报告）
- Calibration Curve Report （校正曲线报告）
- Chromatogram Report （色谱图报告）
- Compound Calibration Report （化合物校正报告）
- Compound Calibration Report - Alternate （化合物校正报告 - 备用）
- Confirmation Report （确认报告）
- High Density Calibration Report （高密度校正报告）
- High Density Internal Standard Report （高密度内标报告）
- High Density Internal Standard Report Long （高密度内标长报告）
- High Density Sample Report 1 （高密度样品报告 1）
- High Density Sample Report 1 Long （高密度样品报告长 1）
- High Density Sample Report 2 （高密度样品报告 2）
- High Density Sample Report 2 Long （高密度样品长报告 2）
- High Density Sample Report 3 （高密度样品报告 2）
- High Density Sample Report 3 Long （高密度样品长报告 3）
- Internal Standard Summary Report （内标总结报告）
- Ion Ratio Failure Report （离子比率未通过报告）
- Manual Integration Report （手动积分报告）
- Method Report （方法报告）
- Negative Report （阴性样品报告）
- Qualitative Peak Report （定性峰报告）
- Qualitative Summary Report （定性总结报告）
- Quality Control Report （质量控制报告）
- Quantitation Report （定量报告）
- Quantitation Report - 2 （定量报告 -2）
- Sample Report （样品报告）
- Sample Report Long （样品长报告）
- Solvent Blank Report （溶剂空白报告）

若要查看每种类型标准报告的样品，参阅第 390 页的 “ 样品标准报告 ”。

自定义报告

对于生成的每份自定义报告，可以创建硬拷贝打印件或 Excel 宏启用工作簿，(.xlsm) 输出文件。默认报告描述是报告名称。

职务是 ITAdmin 或 LabDirector 的用户可以配置自定义报告，为整个批次生成一份报告或者为每个样品创建独立的报告。

TraceFinder 应用程序能够生成下列类型的自定义报告：

- AltCalibrationReport （备用校正报告）
- Alternate BatchReport （备用批次报告）
- Alternate CalibrationReport （备用校正报告）
- Alternate ConfirmationReport （备用确认报告）
- Alternate MatrixSpikeReport （备用基质加标报告）
- Alternate SampleReport （备用样品报告）
- Alternate SummaryReport （备用总结报告）
- BatchReport （批次报告）
- BlankReport （空白报告）
- CalibrationDensityReport （校正密度报告）
- CalibrationReport （校正报告）
- CheckStandardReport （质控样报告）
- CompoundCalibrationReport （化合物校正报告）
- ConfirmationReport （确认报告）
- ConfirmationReport2 （确认报告 2）
- HighDensitySampleReport1Long （高密度样品长报告 1）
- HighDensitySampleReport2Long （高密度样品长报告 2）
- HighDensitySampleReport3Long （高密度样品长报告 3）
- HighDensitySampleReport4 （高密度样品报告 4）
- HighDensitySampleReport5 （高密度样品报告 5）
- QuantitationReport （定量报告）
- SteroidAnalysisReport （类固醇分析报告）

目标筛选报告

TraceFinder 应用程序能够生成下列类型的目标筛选报告：

- Target Screening Long Report （目标筛选长报告）
- Target Screening Summary Report （目标筛选总结报告）

图 103. Reports 页面显示标准报告

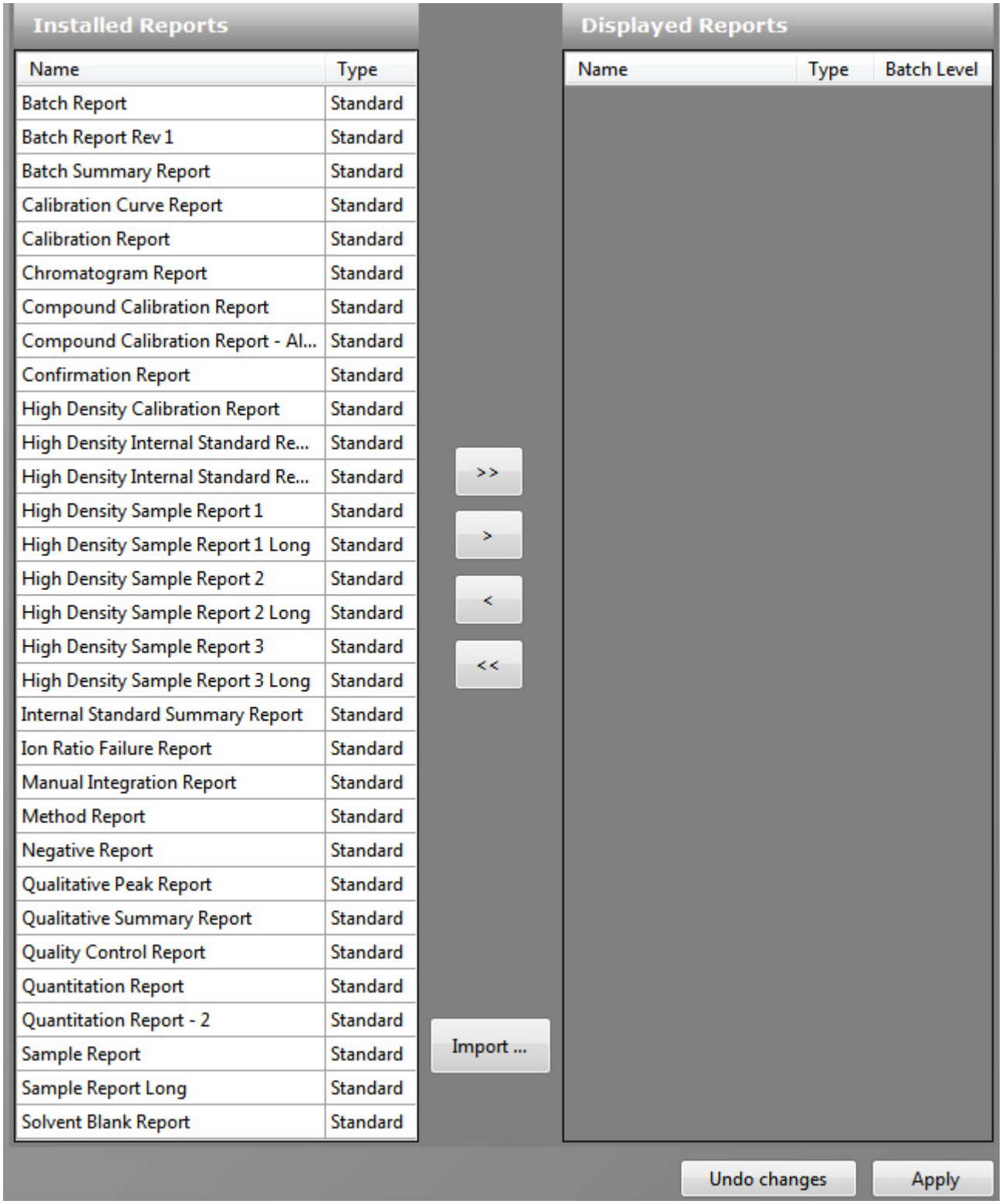


图 104. Reports 页面显示自定义报告

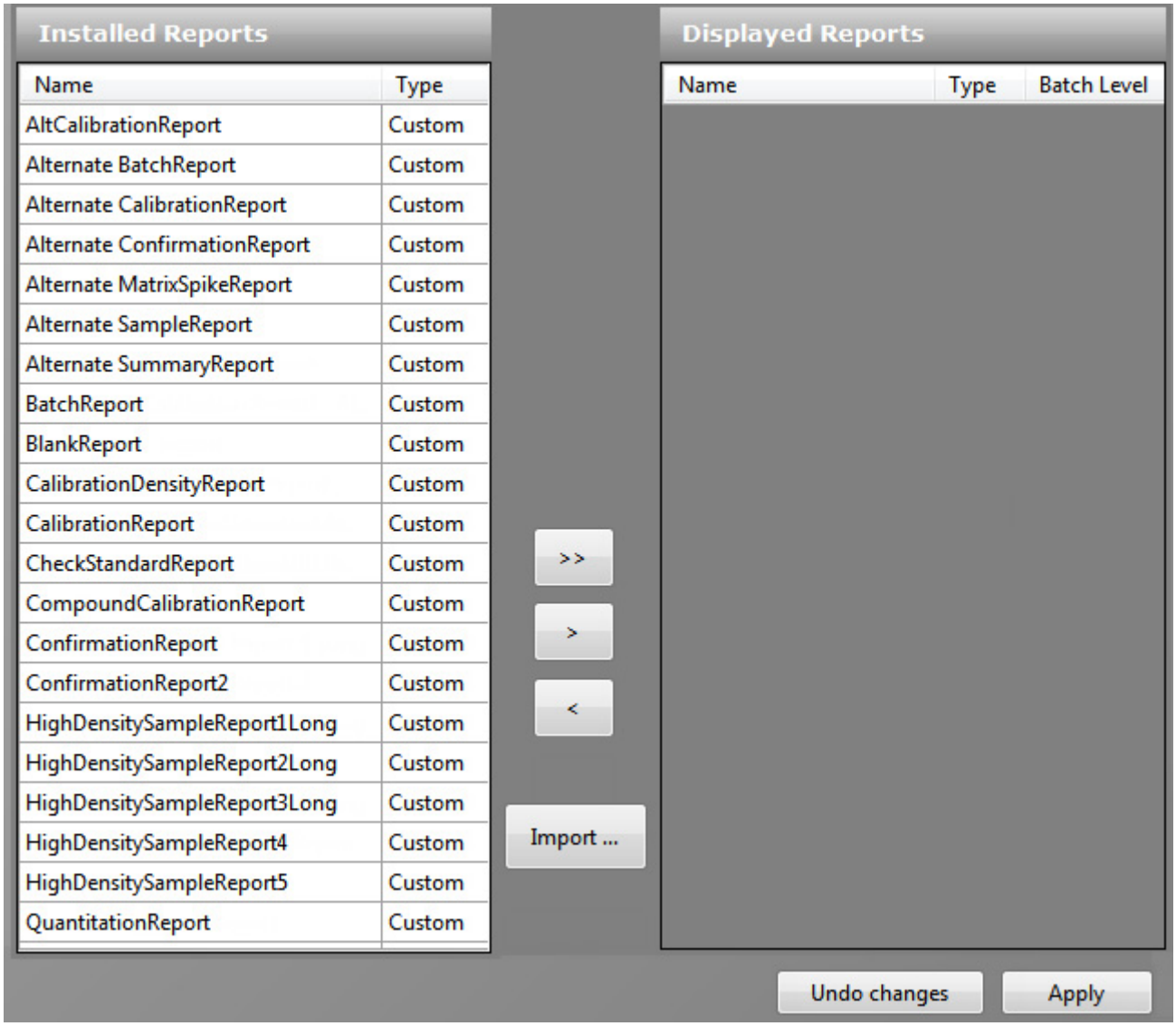
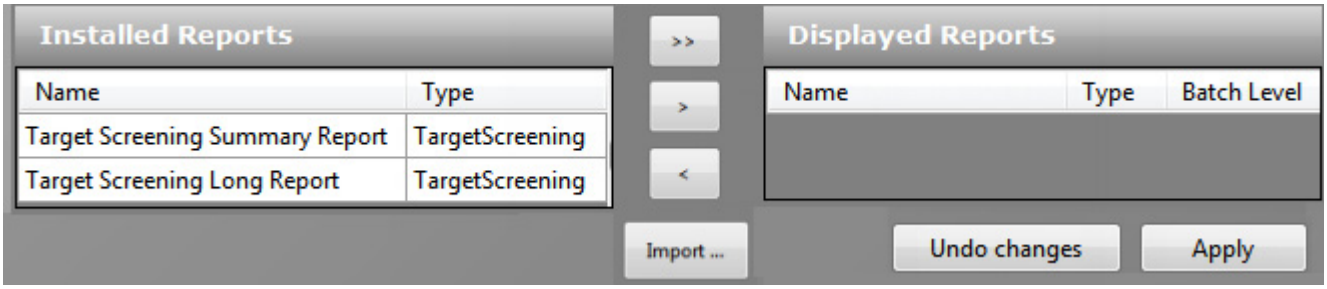


图 105. Reports 页面显示目标筛选报告



注释 仅当已安装 ToxID 软件并启用目标筛选特性时，目标筛选报告才可用。参阅第 81 页的 “ 启用可选特性 ”。

报告标记

当生成或查看报告时，用户可能看到页面上列出以下其中一个定量或校正标记。

表 91. 定量标记

标记	定义
b	观察到的化合物在 Matrix Blank （基质空白）样品中的浓度高于指定限值。
s	观察到化合物在溶剂空白样品中的响应值高于指定限。
J	观察到化合物的浓度高于检测限但低于定量限。
I 或 *	观察到化合物确认 / 定性离子比率在目标比率之外或定量离子与确认 / 定性离子之间的共流时间差大于可接受限。
C	观察到化合物的浓度高于指定残留限量。
?	观察到化合物的浓度指定的线性范围。
D	观察到化合物的浓度低于指定的检测限。
Q	观察到化合物的浓度低于指定的定量限。
POS	观察到化合物的浓度高于指定的临界值。

表 92. 校正标记

标记	定义
D	此化合物的校准超出指定的最大相对标准差百分比 (%RSD)。
F	此化合物的响应因子低于指定的最小响应因子 (Min RF)。
R	该化合物的校正低于指定的最小相关系数 (r^2)。
A	该化合物校正点的反演计算超出指定的最大差异百分比 (Max %D)。
X	此化合物的校准点通过手动选择被排除在整体校准之外。
X(ISNF)	由于未找到关联的内标物，此化合物的校准点被排除在整体校准之外。

QA/QC 失败由星号 (*)、带阴影行或 *Fail （未通过）*字样识别。

对于手动积分结果的报告，报告上的值使用大写的 M 表示手动积分定量离子，小写的 m 表示手动积分定性 / 确认离子。在备用报告上，手动积分通过值周围的黑框表示。

样品标准报告

本部分介绍了以下标准报告类型的示例：

- Batch Report
- Batch Report Rev 1
- Calibration Report
- Chromatogram Report
- Compound Calibration Report
- Compound Calibration Report - Alternate
- Confirmation Report
- High Density Calibration Report
- High Density Internal Standard Report
- High Density Internal Standard Report Long
- High Density Sample Report 1
- High Density Sample Report 1 Long
- High Density Sample Report 2
- High Density Sample Report 2 Long
- High Density Sample Report 3
- High Density Sample Report 3 Long
- Internal Standard Summary Report
- Ion Ratio Failure Report
- Manual Integration Report
- Method Report
- Quality Control Report
- Quantitation Report
- Quantitation Report - 2
- Solvent Blank Report
- Surrogate Recovery Report
- TIC Report
- TIC Summary Report

提示 若要查看横向格式的报告，可从 Adobe Acrobat™ 查看器菜单中选择 **View（查看）> Rotate View （横向视图） > Clockwise （顺时针）**。

Batch Report

Batch Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File: 011HPLR1.calx

File Name	Date/Time	Sample ID	Sample Name	Level	Sample Type	Vial Pos	Inj Vol	Conv Factor	Comment
LLOD_HP031711	3/17/2011 5:46:30 PM	1	LLOD_HP031711	N/A	Matrix Blank	5	5.000	1.0	
L1XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:06:33 PM	2	L1XLOQ_HP031711	1XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:26:29 PM	3	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L4XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:46:23 PM	4	L4XLOQ_HP031711	4XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L6XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:06:17 PM	5	L6XLOQ_HP031711	6XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L10XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:26:11 PM	6	L10XLOQ_HP031711	10XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L16XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:46:05 PM	7	L16XLOQ_HP031711	16XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
MeOH_01	3/17/2011 8:26:01 PM	9	MeOH	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0041RB	3/17/2011 8:45:57 PM	10	11_0041RB	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0040MB	3/17/2011 9:05:59 PM	11	11_0040MB	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0037LCMS	3/17/2011 9:26:01 PM	12	11_0037LCMS	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_01	3/17/2011 9:45:57 PM	13	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0001	3/17/2011 10:05:53 PM	14	11_0001	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0002	3/17/2011 10:25:49 PM	15	11_0002	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0003	3/17/2011 10:45:41 PM	16	11_0003	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0004	3/17/2011 11:05:35 PM	17	11_0004	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0005	3/17/2011 11:25:39 PM	18	11_0005	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0006	3/17/2011 11:45:43 PM	19	11_0006	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0007	3/18/2011 12:05:43 AM	20	11_0007	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0008	3/18/2011 12:25:37 AM	21	11_0008	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0009	3/18/2011 12:45:37 AM	22	11_0009	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0010	3/18/2011 1:05:37 AM	23	11_0010	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0011	3/18/2011 1:25:35 AM	24	11_0011	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_02	3/18/2011 1:45:29 AM	25	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0012	3/18/2011 2:05:23 AM	26	11_0012	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0013	3/18/2011 2:25:19 AM	27	11_0013	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0014	3/18/2011 2:45:17 AM	28	11_0014	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0015	3/18/2011 3:05:13 AM	29	11_0015	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0016	3/18/2011 3:25:07 AM	30	11_0016	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0017	3/18/2011 3:45:05 AM	31	11_0017	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0018	3/18/2011 4:05:09 AM	32	11_0018	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0019	3/18/2011 4:25:11 AM	33	11_0019	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0020	3/18/2011 4:45:19 AM	34	11_0020	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0021	3/18/2011 5:05:15 AM	35	11_0021	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_03	3/18/2011 5:25:15 AM	36	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0022	3/18/2011 5:45:11 AM	37	11_0022	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0023	3/18/2011 6:05:03 AM	38	11_0023	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	

Batch Report Rev 1

Batch Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cal File: 011HPLR1.calx

File Name	Date/Time	Sample ID	Sample Name	Level	Sample Type	Vial Pos	Inj Vol	Conv Factor	Comment
LLOD_HP031711	3/17/2011 5:46:30 PM	1	LLOD_HP031711	N/A	Matrix Blank	5	5.000	1.0	
L1XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:06:33 PM	2	L1XLOQ_HP031711	1XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:26:29 PM	3	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L4XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:46:23 PM	4	L4XLOQ_HP031711	4XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L6XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:06:17 PM	5	L6XLOQ_HP031711	6XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L10XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:26:11 PM	6	L10XLOQ_HP031711	10XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L16XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:46:05 PM	7	L16XLOQ_HP031711	16XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
MeOH_01	3/17/2011 8:26:01 PM	9	MeOH	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0041RB	3/17/2011 8:45:57 PM	10	11_0041RB	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0040MB	3/17/2011 9:05:59 PM	11	11_0040MB	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0037LCMS	3/17/2011 9:26:01 PM	12	11_0037LCMS	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_01	3/17/2011 9:45:57 PM	13	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0001	3/17/2011 10:05:53 PM	14	11_0001	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0002	3/17/2011 10:25:49 PM	15	11_0002	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0003	3/17/2011 10:45:41 PM	16	11_0003	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0004	3/17/2011 11:05:35 PM	17	11_0004	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0005	3/17/2011 11:25:39 PM	18	11_0005	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0006	3/17/2011 11:45:43 PM	19	11_0006	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0007	3/18/2011 12:05:43 AM	20	11_0007	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0008	3/18/2011 12:25:37 AM	21	11_0008	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0009	3/18/2011 12:45:37 AM	22	11_0009	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0010	3/18/2011 1:05:37 AM	23	11_0010	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0011	3/18/2011 1:25:35 AM	24	11_0011	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_02	3/18/2011 1:45:29 AM	25	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0012	3/18/2011 2:05:23 AM	26	11_0012	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0013	3/18/2011 2:25:19 AM	27	11_0013	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0014	3/18/2011 2:45:17 AM	28	11_0014	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0015	3/18/2011 3:05:13 AM	29	11_0015	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0016	3/18/2011 3:25:07 AM	30	11_0016	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0017	3/18/2011 3:45:05 AM	31	11_0017	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0018	3/18/2011 4:05:09 AM	32	11_0018	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0019	3/18/2011 4:25:11 AM	33	11_0019	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0020	3/18/2011 4:45:19 AM	34	11_0020	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0021	3/18/2011 5:05:15 AM	35	11_0021	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_03	3/18/2011 5:25:15 AM	36	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0022	3/18/2011 5:45:11 AM	37	11_0022	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0023	3/18/2011 6:05:03 AM	38	11_0023	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	

Calibration Report

Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511 PDP_040511
Cali File: 011HPLR1.calx

Calibration Summary

Compound	Manually Integrated	Curve Type	A0 y-Intercept Mean RF	A1 Slope	A2	R^2 R^2 % RSD	Flag
Oxamyl_Oxime		Q	0e0	1.021e5	-9.21e0	0.9999	
Omethoate		Q	0e0	3.449e5	-2.743e2	0.9999	
Formetanate		Q	0e0	7.037e5	-8.207e1	0.9999	
Dinotefuran		Q	0e0	8.978e4	-3.798e1	0.9995	
Aldicarb_SO		Q	0e0	8.444e4	-1.968e1	0.9997	
Propamocarb		Q	0e0	2.953e5	1.094e2	0.9990	
Pymetrozine		Q	0e0	1.458e5	-1.625e2	0.9999	
Aldicarb_SO2		Q	0e0	1.304e5	-2.433e1	0.9999	
Oxamyl		Q	0e0	6.343e4	-9.365e0	0.9999	
Methomyl		Q	0e0	5.609e4	2.406e-2	0.9998	A
Flonicamid		Q	0e0	6.78e3	-6.227e-1	0.9999	
ODMS		Q	0e0	1.559e5	-3.779e1	1.0000	
5-OH_TBZ		Q	0e0	1.554e5	-8.3e1	1.0000	
Thiamethoxam		Q	0e0	9.218e4	-8.168e1	0.9999	
Monocrotophos		Q	0e0	2.546e5	3.747e0	0.9999	
Imidacloprid		Q	0e0	9.412e4	-1.542e1	0.9999	
Clothianidin		Q	0e0	6.899e4	-2.01e1	0.9999	
Thiabendazole		Q	0e0	2.318e5	-3.829e1	0.9998	
3-OH_Carbofuran		Q	0e0	2.673e5	-5.488e1	0.9999	
Acetamiprid		Q	0e0	1.465e5	-1.234e2	0.9999	
Cymoxanil		Q	0e0	1.907e4	-2.093e0	0.9999	
Thiacloprid		Q	0e0	1.804e5	-3.743e1	0.9998	
Methidathion_OA		Q	0e0	2.452e5	-4.327e1	0.9999	
Aldicarb		Q	0e0	9.107e4	-8.106e0	0.9999	
Azinphos_Me_OA		Q	0e0	7.722e4	-1.808e1	0.9993	
Metribuzin		Q	0e0	1.285e5	-6.658e1	0.9998	
Simazine		Q	0e0	5.641e4	-4.048e1	0.9997	
Propoxur_(S)		Q	0e0	2.644e5	-7.519e1	0.9999	
Pirimicarb		Q	0e0	4.722e5	-4.082e1	0.9998	
Bendiocarb		Q	0e0	1.491e5	-6.818e1	0.9997	
Carbofuran		Q	0e0	7.01e5	-2.286e2	0.9998	
Fenamiphos_SO		Q	0e0	1.522e4	-9.643e-1	0.9998	A
Tebuthiuron		Q	0e0	8.461e5	-2.67e2	0.9998	
Carboxin		Q	0e0	6.506e5	-1.708e2	1.0000	
Sulfentrazone		Q	0e0	1.374e4	-1.836e0	0.9998	
Fenamiphos_SO2		Q	0e0	9.059e4	-2.877e1	0.9999	
Carbaryl		Q	0e0	4.251e5	-4.87e1	0.9999	
Thiodicarb		Q	0e0	3.968e4	-3.693e0	0.9995	A
Phorate_Sulfoxide		Q	0e0	3.861e5	-1.033e2	0.9998	
Norflurazon_DM		Q	0e0	4.987e4	-1.219e1	0.9998	
Phorate_Sulfone		Q	0e0	2.959e5	-3.89e1	1.0000	
Atrazine		Q	0e0	3.679e5	-1.13e2	1.0000	
Isoprocarb		Q	0e0	9.685e4	3.858e0	0.9996	
Imazalil		Q	0e0	7.833e4	-4.144e0	1.0000	
Metalaxyl		Q	0e0	8.234e5	6.852e1	0.9999	
Diuron		Q	0e0	8.495e4	-1.208e1	0.9999	
Norflurazon		Q	0e0	5.513e4	-9.775e0	0.9999	
Chlorantraniliprole		Q	0e0	2.947e4	-1.6e0	0.9996	
Azinphos_Me		Q	0e0	7.972e4	-1.585e1	1.0000	
Benoxacor		Q	0e0	1.333e4	-8.821e-1	0.9999	
Fluridone		Q	0e0	5.003e5	-1.602e2	0.9999	
Pyrimethanil		Q	0e0	4.783e4	-1.313e0	0.9999	
Azoxystrobin		Q	0e0	7.944e5	-3.268e2	1.0000	

Curve Type: A=Average RF; L=Linear; Q=Quadratic;I=Internal standard; Note: Amounts displayed for internal standards represent the ISTD Response.

Calibration flags: D=RSD; F=Response factor; R=R^2; A=Amount;X=Excluded; X(ISNF)=Excluded because ISTD wasn't found.

Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File: 011HPLR1.calx

Calibration Data Points Compound	Curve Type	1XLOQ	2XLOQ	4XLOQ	6XLOQ	10XLOQ	16XLOQ	32XLOQ
Oxamyl_Oxime	Q	4301979	8239118	16242623	23873974	39827173	61070387	115624994
Omethoate	Q	1767322	3484419	6936118	10019480	16562654	25318124	47692071
Formetanate	Q	14839193	28774173	55703047	83034780	140328387	215487571	418192129
Dinotefuran	Q	1957462	3754131	7124741	10430815	16753892	24286005	41994838
Aldicarb_SO	Q	1800889	3431833	6655525	10063684	16448105	24529724	46055255
Propamocarb	Q	4981586	9714037	23426813	33421290	62325833	109908202	233040768
Pymetrozine	Q	827514	1491832	2850157	4285647	6910457	10568034	19185279
Aldicarb_SO2	Q	2773066	5247744	10263769	15236469	25734192	39154955	73839209
Oxamyl	Q	1360327	2563147	4952614	7533418	12426641	19210270	36777897
Methomyl	Q	2737537	4939807	9115295	13452238	22783824	35397006	71931672
Flonicamid	Q	390564	802238	1626266	2324940	3876593	5915996	10725410
ODMS	Q	1662957	3110348	6149507	9205405	15380974	23845736	46047319
5-OH_TBZ	Q	1563076	3024611	6173603	9057919	14758723	22647279	41244357
Thiamethoxam	Q	473839	910788	1823911	2662361	4489338	6790735	12666340
Monocrotophos	Q	2676623	5322359	10272373	15475446	25680186	40444172	81911360
Imidacloprid	Q	1961674	3825066	7339375	11168910	18451926	28278482	53957135
Clothianidin	Q	714437	1377702	2705701	4075866	6843503	10397614	20034742
Thiabendazole	Q	2395330	4756375	9238564	13690129	23391302	35599065	70334577
3-OH_Carbofuran	Q	5631688	10797837	21032050	31558082	51838968	79183682	148721201
Acetamiprid	Q	770010	1489167	2851066	4289654	7143229	10810031	20289765
Cymoxanil	Q	377047	756131	1497988	2306694	3788308	5818639	11376041
Thiacloprid	Q	941310	1842377	3581247	5550042	9091552	13943056	27954176
Methidathion_OA	Q	5135521	9703625	18972892	29071643	47865654	73550478	139292777
Aldicarb	Q	1907088	3842466	7306696	11001829	17988401	28021382	55021609
Azinphos_Me_OA	Q	1653176	3209908	6311122	9387092	15079442	22160680	42137270
Metribuzin	Q	1382329	2590504	5034977	7543546	12429050	18563473	34333097
Simazine	Q	600586	1153840	2195023	3290653	5346202	7846242	13927839
Propoxur_(S)	Q	5511712	10559750	20690769	30998535	50521949	76084707	138563122
Pirimicarb	Q	20377224	38877301	76042738	114813774	183271544	281193286	538368936
Bendiocarb	Q	1600951	3142333	5931661	8910739	14446667	21691320	40789937
Carbofuran	Q	7314397	14139593	27712966	41779139	69378009	104524513	201180038
Fenamiphos_SO	Q	121310	301661	586312	869804	1528556	2435404	4766884
Tebuthiuron	Q	4394378	8642882	16607479	25289637	42667565	65032815	128681978
Carboxin	Q	6534810	12905965	25606866	38078875	63816950	99587153	190687947
Sulfentrazone	Q	279987	562967	1047875	1656952	2720819	4160971	8048554
Fenamiphos_SO2	Q	837268	1748158	3488544	5345562	8905884	13692958	26046963
Carbaryl	Q	4473316	8624723	17143920	25672675	42556304	65943386	131179439
Thiodicarb	Q	490260	1248479	3213413	4825393	7837944	12292695	23881048
Phorate_Sulfoxide	Q	4159733	7765608	15382246	23084301	38335816	58206610	113125292
Norflurazon_DM	Q	1052465	1986723	3983707	5792912	9714334	14483066	26957917

Curve Type: A=Average RF; L=Linear; Q=Quadratic;I=Internal standard; Note: Amounts displayed for internal standards represent the ISTD Response.

Calibration flags: D=RSD; F=Response factor; R=R^2; A=Amount;X=Excluded; X(ISNF)=Excluded because ISTD wasn't found.

Manually Integrated

Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File: 011HPLR1.calx

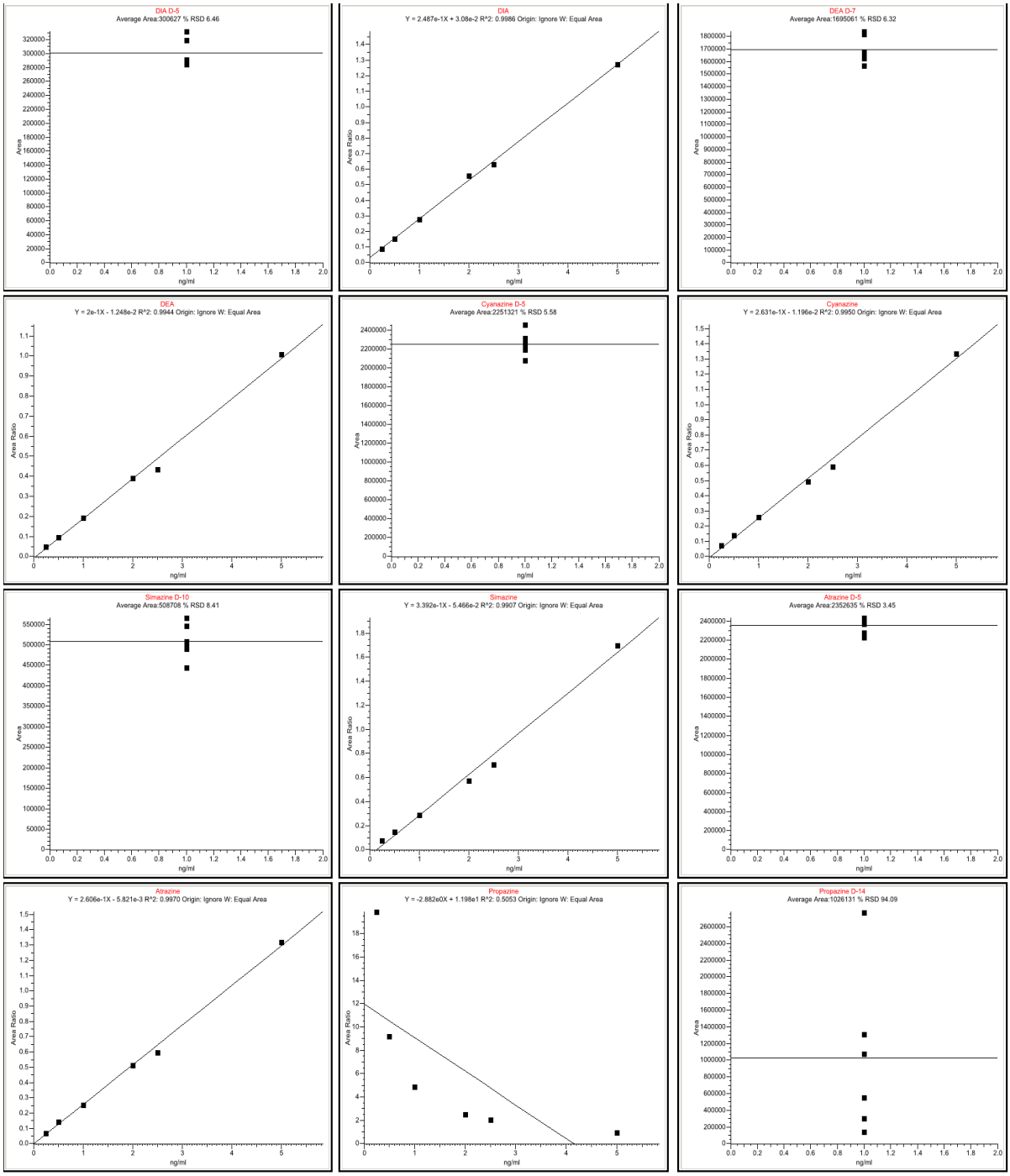
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	2	L1XLOQ_HP031711	1XLOQ	L1XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:06:33 PM	
5	3	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	L2XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:26:29 PM	
5	4	L4XLOQ_HP031711	4XLOQ	L4XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:46:23 PM	
5	5	L6XLOQ_HP031711	6XLOQ	L6XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:06:17 PM	
5	6	L10XLOQ_HP031711	10XLOQ	L10XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:26:11 PM	
5	7	L16XLOQ_HP031711	16XLOQ	L16XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:46:05 PM	
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Curve Type: A=Average RF; L=Linear; Q=Quadratic;I=Internal standard; Note: Amounts displayed for internal standards represent the ISTD Response.
Calibration flags: D=RSD; F=Response factor; R=R^2; A=Amount;X=Excluded; X(ISNF)=Excluded because ISTD wasn't found.
Manually integrated

Calibration Density Report

Calibration Density Report

Lab name:	Thermo Fisher Laboratory		
Instrument:	Thermo Scientific Instrument	**Method:**	Preview2_EPA536-Triazines
User:	AMER\jamie.humphries		EPA536-Triazines
Batch:	Preview2	**Cali File:**	Preview2.calx

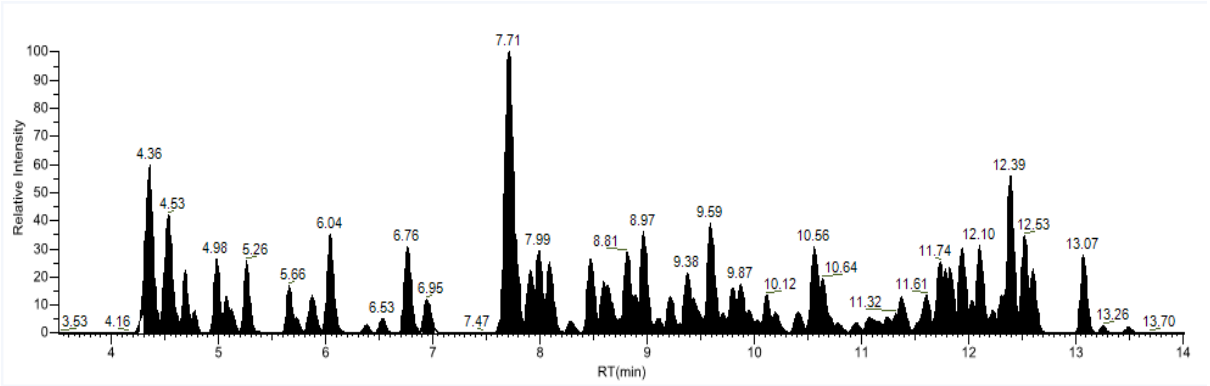


Chromatogram Report

Chromatogram Report

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Cali File:**	011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	



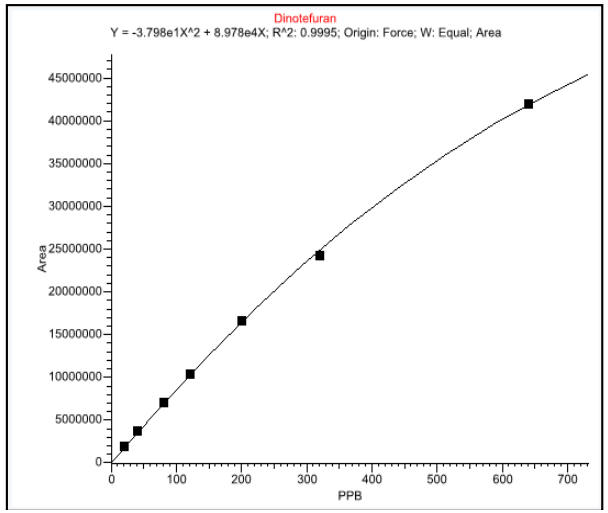
Compound Calibration Report

Compound Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File 011HPLR1.calx

Compound Name: Dinotefuran



Quadratic

Pass

Level	Std Amount	Std Area	IS Amount	IS Area	Response factor	Calc Amt	Units	% CV	% RSD
1XLOQ	20.00	1957462			97873.106	22.01	PPB	N/A	N/A
2XLOQ	40.00	3754131			93853.284	42.58	PPB	N/A	N/A
4XLOQ	80.00	7124741			89059.260	82.22	PPB	N/A	N/A
6XLOQ	120.00	10430815			86923.457	122.54	PPB	N/A	N/A
10XLOQ	200.00	16753892			83769.461	204.27	PPB	N/A	N/A
16XLOQ	320.00	24286005			75893.767	311.59	PPB	N/A	N/A
32XLOQ	640.00	41994838			65616.934	642.34	PPB	N/A	N/A

Manually Integrated:

Calibration Flags: D =RSD, F = Response factor, R = R Squared, A = Amount

Compound Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	2	L1XLOQ_HP031711	1XLOQ	L1XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:06:33 PM	
5	3	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	L2XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:26:29 PM	
5	4	L4XLOQ_HP031711	4XLOQ	L4XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:46:23 PM	
5	5	L6XLOQ_HP031711	6XLOQ	L6XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:06:17 PM	
5	6	L10XLOQ_HP031711	10XLOQ	L10XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:26:11 PM	
5	7	L16XLOQ_HP031711	16XLOQ	L16XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:46:05 PM	
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Manually Integrated:

Calibration Flags: D =RSD, F = Response factor, R = R Squared, A = Amount

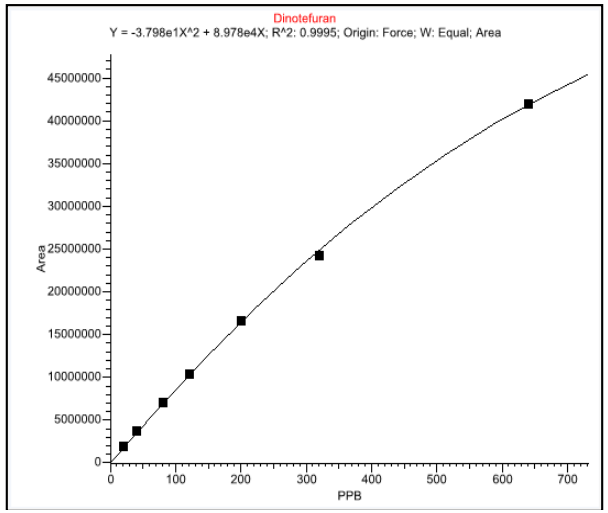
Compound Calibration Report - Alternate

Compound Calibration Report - Alternate

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File 011HPLR1.calx

Compound Name: Dinotefuran



Quadratic

Pass

Level	File Name	Std Amount	Std Area	IS Amount	IS Area	Response factor	Calc Amt	Units	Min Range	Max Range	% RSD	Flags
1XLOQ	L1XLOQ_HP031711	20.00	1957462			97873.106	22.01	PPB	16.00	24.00	N/A	
2XLOQ	L2XLOQ_HP031711	40.00	3754131			93853.284	42.58	PPB	32.00	48.00	N/A	
4XLOQ	L4XLOQ_HP031711	80.00	7124741			89059.260	82.22	PPB	64.00	96.00	N/A	
6XLOQ	L6XLOQ_HP031711	120.00	10430815			86923.457	122.54	PPB	96.00	144.00	N/A	
10XLOQ	L10XLOQ_HP031711	200.00	16753892			83769.461	204.27	PPB	160.00	240.00	N/A	
16XLOQ	L16XLOQ_HP031711	320.00	24286005			75893.767	311.59	PPB	256.00	384.00	N/A	
32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	640.00	41994838			65616.934	642.34	PPB	512.00	768.00	N/A	

Manually Integrated:

Calibration Flags: D =RSD, F = Response factor, R = R Squared, A = Amount

Compound Calibration Report - Alternate

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cali File 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	2	L1XLOQ_HP031711	1XLOQ	L1XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:06:33 PM	
5	3	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	L2XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:26:29 PM	
5	4	L4XLOQ_HP031711	4XLOQ	L4XLOQ_HP031711	3/17/2011 6:46:23 PM	
5	5	L6XLOQ_HP031711	6XLOQ	L6XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:06:17 PM	
5	6	L10XLOQ_HP031711	10XLOQ	L10XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:26:11 PM	
5	7	L16XLOQ_HP031711	16XLOQ	L16XLOQ_HP031711	3/17/2011 7:46:05 PM	
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Manually Integrated:

Calibration Flags: D =RSD, F = Response factor, R = R Squared, A = Amount

Confirmation Report

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Call File:**	011HPLR1.calx

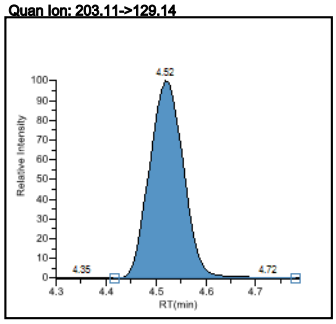
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Dinotefuran

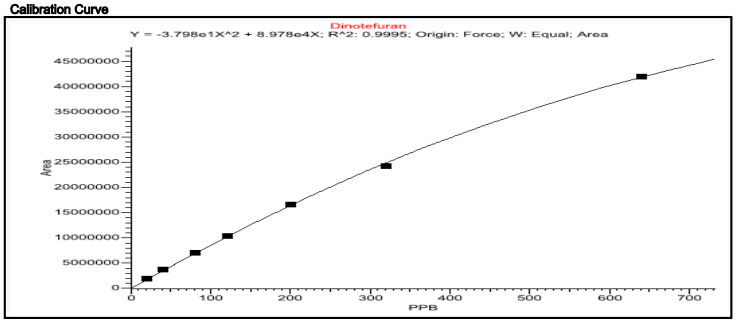
	Injected	Sample
Conc:	642.34 PPB	642.34 PPB

Retention Time:	4.52
Area:	41994838
Height:	8893885

Quan Ion: 203.11->129.14

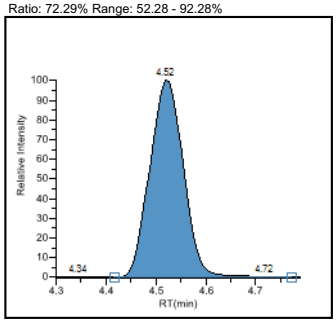


Calibration Curve

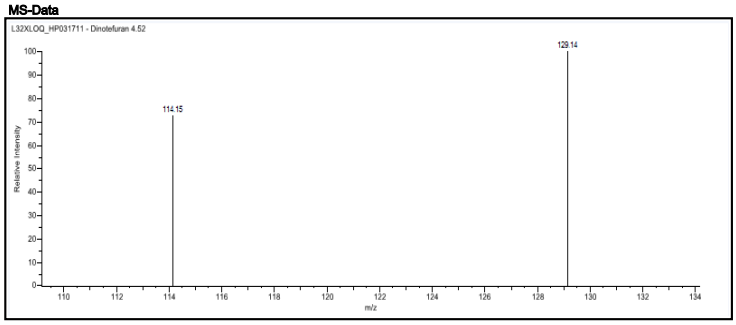


Qual Ion 1: 203.11->114.15

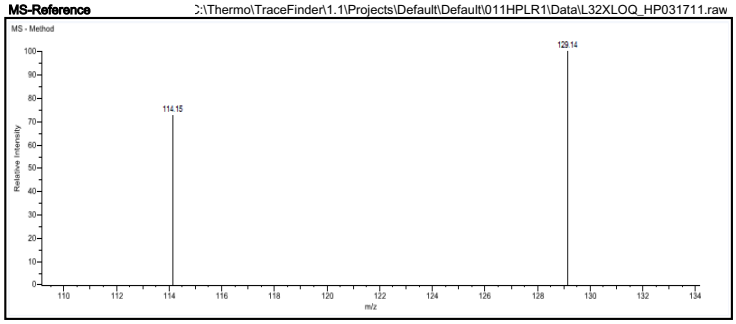
Ratio: 72.29% Range: 52.28 - 92.28%



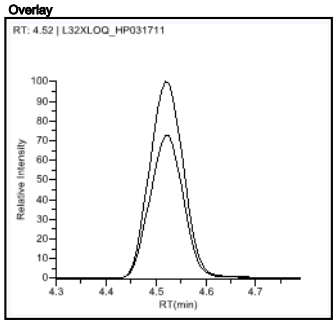
MS-Data



MS-Reference :\Thermo\TraceFinder\1.1\Projects\Default\Default\011HPLR1\Data\L32XLOQ_HP031711.raw



Overlay



Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

Confirmation Report 2

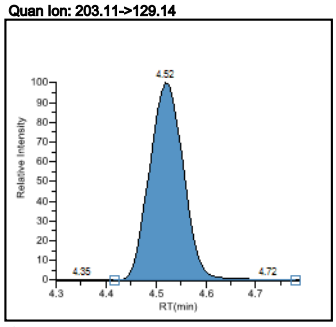
Confirmation Report 2

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Cali File:**	011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

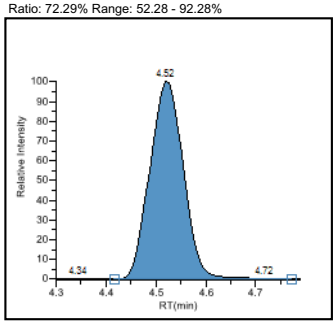
Compound Name:	**Dinotefuran**
Injected Conc:	642.34 PPB
Sample Conc:	642.34 PPB
Retention Time:	4.52
Area (Quan):	41994838
Height (Quan):	8893885
Qual Ratio 1:	Pass
Qual Ratio 2:	Pass

Quan Ion: 203.11->129.14

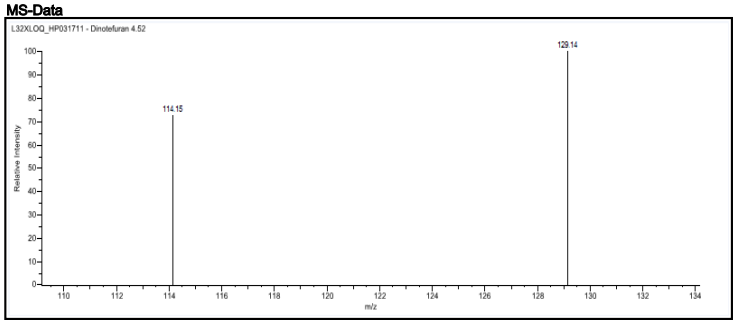


Qual Ion 1: 203.11->114.15

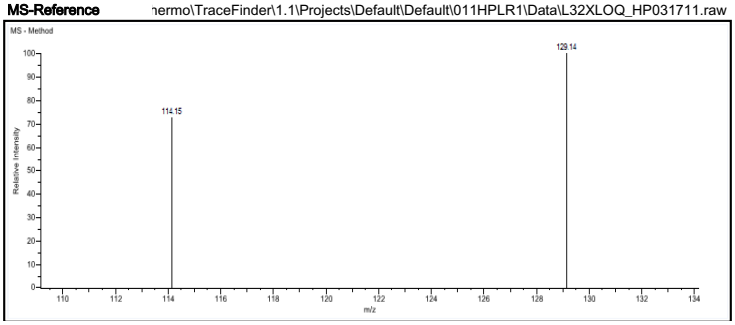
Ratio: 72.29% Range: 52.28 - 92.28%



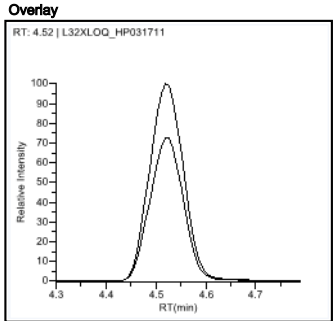
MS-Data



MS-Reference ıermo\TraceFinder\1.1\Projects\Default\Default\011HPLR1\Data\L32XLOQ_HP031711.raw



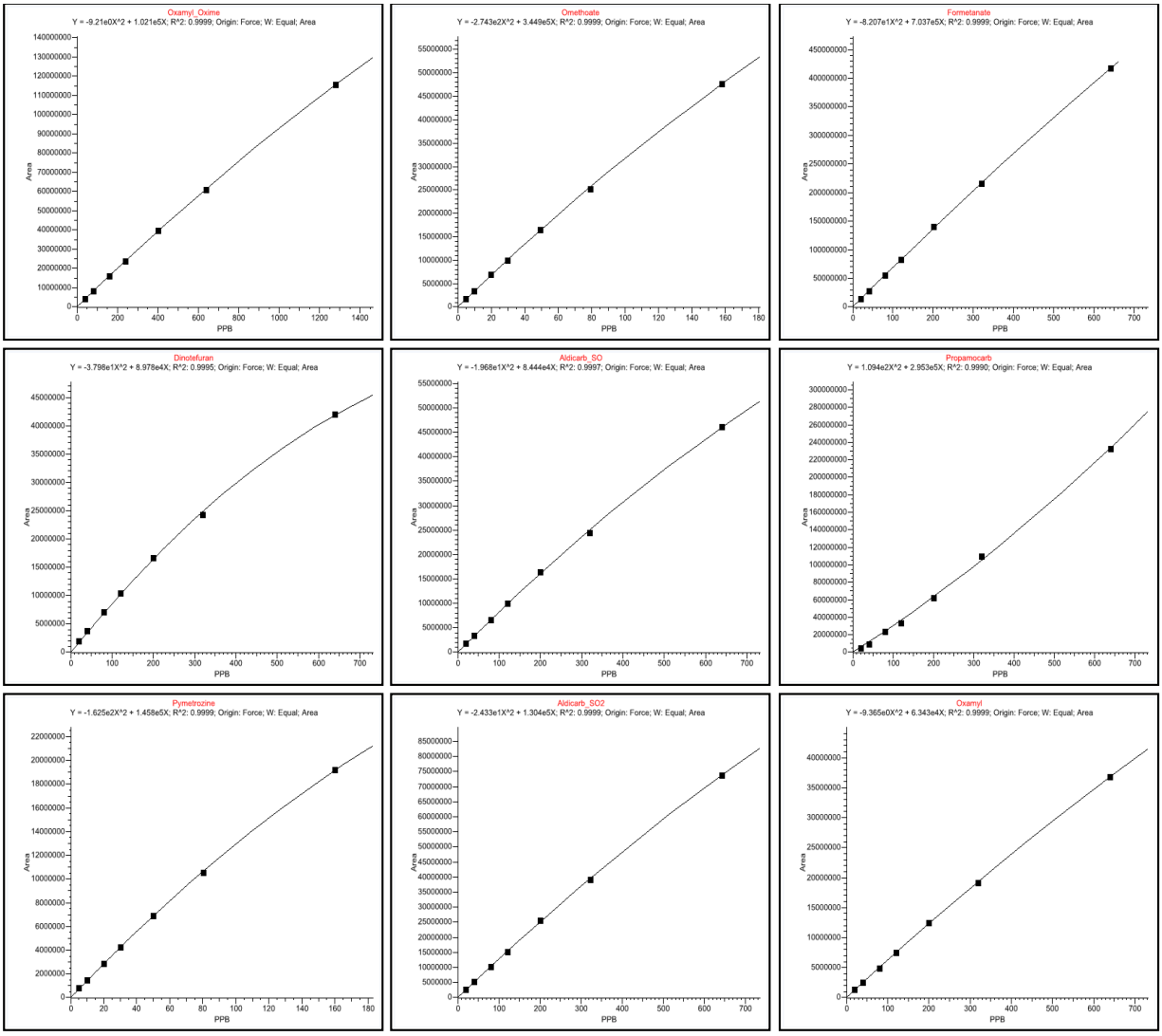
Overlay



High Density Calibration Report

High Density Calibration Report

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Cali File:**	011HPLR1.calx



High Density Internal Standard Report

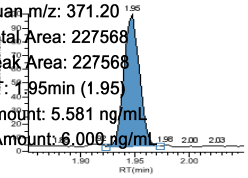
High Density Internal Standard Report

Page 1 of 1

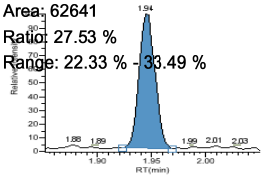
Lab name:	Thermo Fisher Laboratory		
Instrument:	Thermo Scientific Instrument	Method:	Drug_A_Drug_A
User:	AMER\jamie.humphries		Drug_A
Batch:	Drug_A	Cali File:	Drug_A.calx

Vial Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
2	cal 1 = 6 ng/mL	cal_1	level 1		4/17/2008 5:05:47 PM	

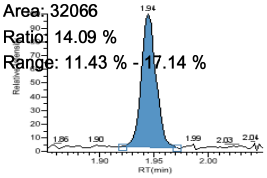
Drug_A
Quan m/z: 371.20
Total Area: 227568
Peak Area: 227568
RT: 1.95min (1.95)
Amount: 5.581 ng/mL
TAmount: 6.000 ng/mL



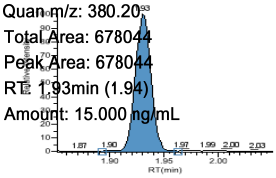
Qual m/z: 473.20
Area: 62641
Ratio: 27.53 %
Range: 22.33 % - 33.49 %



Qual m/z: 488.20
Area: 32066
Ratio: 14.09 %
Range: 11.43 % - 17.14 %



Int_Std
Quan m/z: 380.20
Total Area: 678044
Peak Area: 678044
RT: 1.93min (1.94)
Amount: 15.000 ng/mL



Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit; D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Cutoff; n=Negative; b=Solvent blank; H=Hydrolysis

High Density Internal Standard Report Long

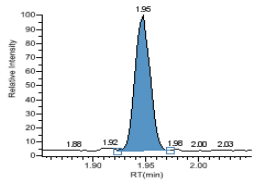
High Density Internal Standard Report Long

Page 1 of 1

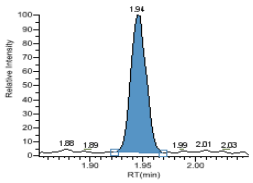
Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Drug_A

Method: Drug_A_Drug_A
Drug_A
Cali File: Drug_A.calx

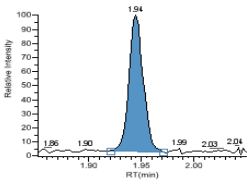
Vial Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
2	cal 1 = 6 ng/mL	cal_1	level 1		4/17/2008 5:05:47 PM	



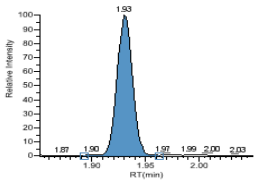
Drug_A
Quan m/z: 371.20
Total Area: 227568
Peak Area: 227568
RT: 1.95min (1.95)
Amount: 5.581 ng/mL
TAmount: 6.000 ng/mL



Qual m/z: 473.20
Area: 62641
Ratio: 27.53 %
Range: 22.33 % - 33.49 %



Qual m/z: 488.20
Area: 32066
Ratio: 14.09 %
Range: 11.43 % - 17.14 %



Int_Std
Quan m/z: 380.20
Total Area: 678044
Peak Area: 678044
RT: 1.93min (1.94)
Amount: 15.000 ng/mL

Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit; D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Cutoff; n=Negative; b=Solvent blank; H=Hydrolysis

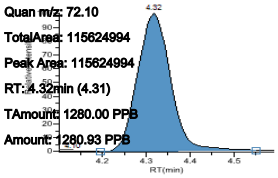
High Density Sample Report 1

High Density Sample Report 1

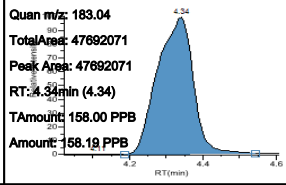
Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Cal File:**	011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

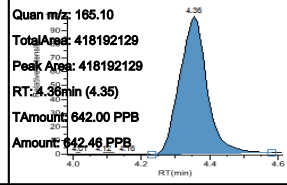
Oxamyl_Oxime
Quan m/z: 72.10
TotalArea: 115624994
Peak Area: 115624994
RT: 4.32min (4.31)
TAmount: 1280.00 PPB
Amount: 1280.93 PPB



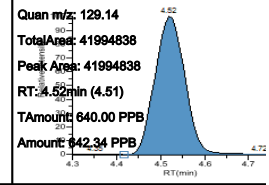
Omethoate
Quan m/z: 183.04
TotalArea: 47692071
Peak Area: 47692071
RT: 4.34min (4.34)
TAmount: 158.00 PPB
Amount: 158.19 PPB



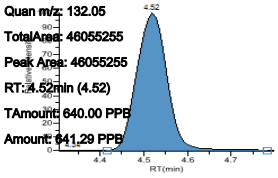
Formetanate
Quan m/z: 165.10
TotalArea: 418192129
Peak Area: 418192129
RT: 4.36min (4.35)
TAmount: 642.00 PPB
Amount: 642.46 PPB



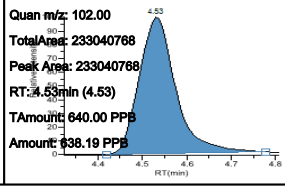
Dinotefuran
Quan m/z: 129.14
TotalArea: 41994838
Peak Area: 41994838
RT: 4.52min (4.51)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 642.34 PPB



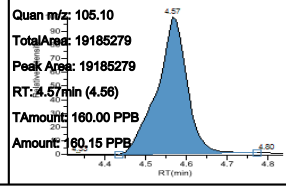
Aldicarb_SO
Quan m/z: 132.05
TotalArea: 46055255
Peak Area: 46055255
RT: 4.52min (4.52)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 641.29 PPB



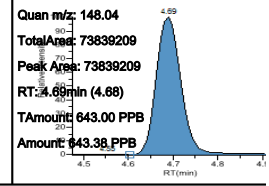
Propamocarb
Quan m/z: 102.00
TotalArea: 233040768
Peak Area: 233040768
RT: 4.53min (4.53)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 638.19 PPB



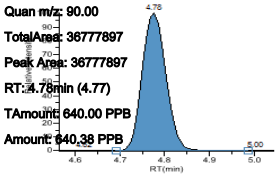
Pymetrozine
Quan m/z: 105.10
TotalArea: 19185279
Peak Area: 19185279
RT: 4.57min (4.56)
TAmount: 160.00 PPB
Amount: 160.15 PPB



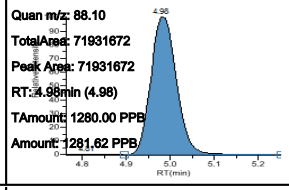
Aldicarb_SO2
Quan m/z: 148.04
TotalArea: 73839209
Peak Area: 73839209
RT: 4.69min (4.68)
TAmount: 643.00 PPB
Amount: 643.38 PPB



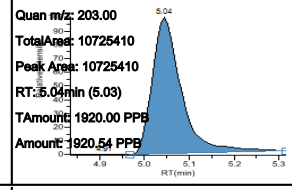
Oxamyl
Quan m/z: 90.00
TotalArea: 36777897
Peak Area: 36777897
RT: 4.78min (4.77)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 640.38 PPB



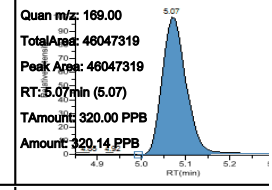
Methomyl
Quan m/z: 88.10
TotalArea: 71931672
Peak Area: 71931672
RT: 4.98min (4.98)
TAmount: 1280.00 PPB
Amount: 1281.62 PPB



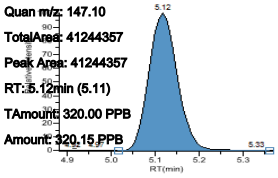
Flonicamid
Quan m/z: 203.00
TotalArea: 10725410
Peak Area: 10725410
RT: 5.04min (5.03)
TAmount: 1920.00 PPB
Amount: 1920.54 PPB



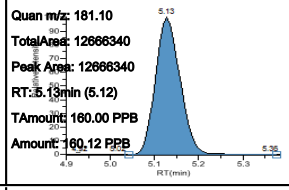
ODMS
Quan m/z: 169.00
TotalArea: 46047319
Peak Area: 46047319
RT: 5.07min (5.07)
TAmount: 320.00 PPB
Amount: 320.14 PPB



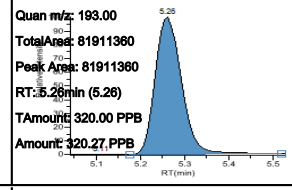
5-OH_TBZ
Quan m/z: 147.10
TotalArea: 41244357
Peak Area: 41244357
RT: 5.12min (5.11)
TAmount: 320.00 PPB
Amount: 320.15 PPB



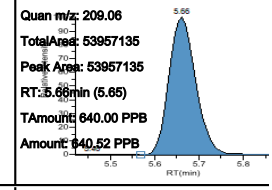
Thiamethoxam
Quan m/z: 181.10
TotalArea: 12666340
Peak Area: 12666340
RT: 5.13min (5.12)
TAmount: 160.00 PPB
Amount: 160.12 PPB



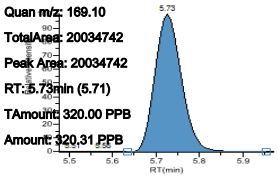
Monocrotophos
Quan m/z: 193.00
TotalArea: 81911360
Peak Area: 81911360
RT: 5.26min (5.26)
TAmount: 320.00 PPB
Amount: 320.27 PPB



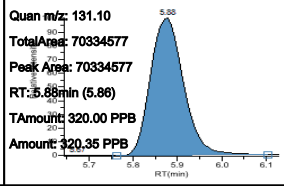
Imidacloprid
Quan m/z: 209.06
TotalArea: 53957135
Peak Area: 53957135
RT: 5.66min (5.65)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 640.52 PPB



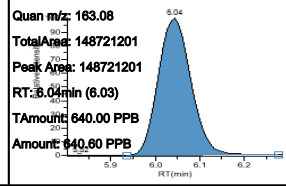
Clothianidin
Quan m/z: 169.10
TotalArea: 20034742
Peak Area: 20034742
RT: 5.73min (5.71)
TAmount: 320.00 PPB
Amount: 320.31 PPB



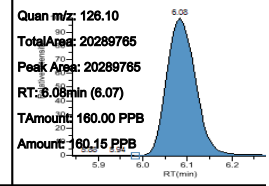
Thiabendazole
Quan m/z: 131.10
TotalArea: 70334577
Peak Area: 70334577
RT: 5.88min (5.86)
TAmount: 320.00 PPB
Amount: 320.35 PPB



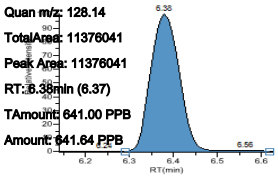
3-OH_Carbofuran
Quan m/z: 163.08
TotalArea: 148721201
Peak Area: 148721201
RT: 6.04min (6.03)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 640.60 PPB



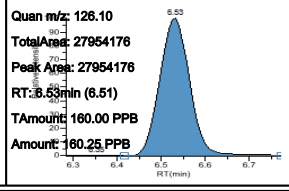
Acetamiprid
Quan m/z: 126.10
TotalArea: 20289765
Peak Area: 20289765
RT: 6.08min (6.07)
TAmount: 160.00 PPB
Amount: 160.15 PPB



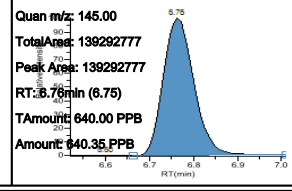
Cymoxanil
Quan m/z: 128.14
TotalArea: 11376041
Peak Area: 11376041
RT: 6.38min (6.37)
TAmount: 641.00 PPB
Amount: 641.64 PPB



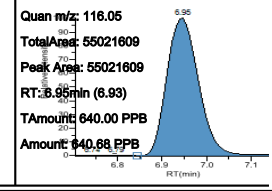
Thiacloprid
Quan m/z: 126.10
TotalArea: 27954176
Peak Area: 27954176
RT: 6.53min (6.51)
TAmount: 160.00 PPB
Amount: 160.25 PPB



Methidathion_OA
Quan m/z: 145.00
TotalArea: 139292777
Peak Area: 139292777
RT: 6.76min (6.75)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 640.35 PPB



Aldicarb
Quan m/z: 116.05
TotalArea: 55021609
Peak Area: 55021609
RT: 6.95min (6.93)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 640.68 PPB



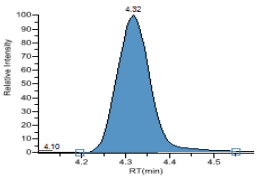
Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

High Density Sample Report 1 Long

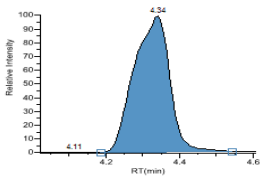
High Density Sample Report 1 Long

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Call File: 011HPLR1.calx

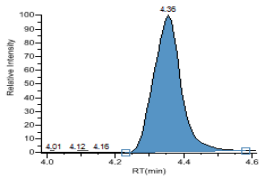
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	



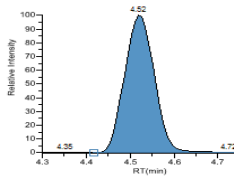
Oxamyl_Oxime
Quan m/z: 72.10
TotalArea: 115624994
Peak Area: 115624994
RT: 4.32min (4.31)
TAmount: 1280.00 PPB
Amount: 1280.93 PPB



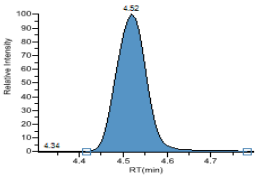
Omethoate
Quan m/z: 183.04
TotalArea: 47692071
Peak Area: 47692071
RT: 4.34min (4.34)
TAmount: 158.00 PPB
Amount: 158.19 PPB



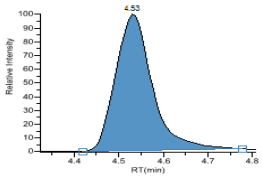
Formetanate
Quan m/z: 165.10
TotalArea: 418192129
Peak Area: 418192129
RT: 4.36min (4.35)
TAmount: 642.00 PPB
Amount: 642.46 PPB



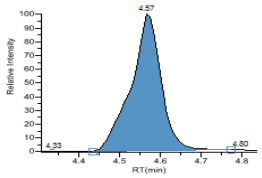
Dinotefuran
Quan m/z: 129.14
TotalArea: 41994838
Peak Area: 41994838
RT: 4.52min (4.51)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 642.34 PPB



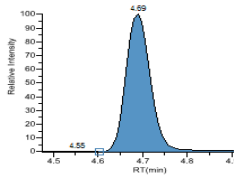
Aldicarb_SO
Quan m/z: 132.05
TotalArea: 46055255
Peak Area: 46055255
RT: 4.52min (4.52)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 641.29 PPB



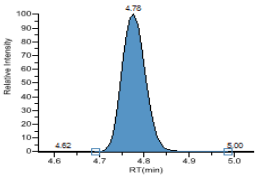
Propamocarb
Quan m/z: 102.00
TotalArea: 233040768
Peak Area: 233040768
RT: 4.53min (4.53)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 638.19 PPB



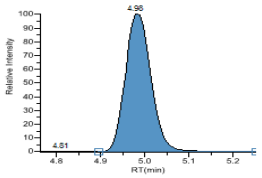
Pymetrozine
Quan m/z: 105.10
TotalArea: 19185279
Peak Area: 19185279
RT: 4.57min (4.56)
TAmount: 160.00 PPB
Amount: 160.15 PPB



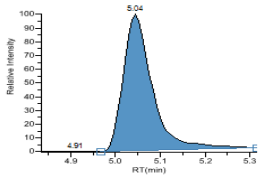
Aldicarb_SO2
Quan m/z: 148.04
TotalArea: 73839209
Peak Area: 73839209
RT: 4.69min (4.68)
TAmount: 643.00 PPB
Amount: 643.38 PPB



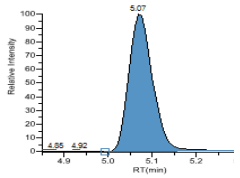
Oxamyl
Quan m/z: 90.00
TotalArea: 36777897
Peak Area: 36777897
RT: 4.78min (4.77)
TAmount: 640.00 PPB
Amount: 640.38 PPB



Methomyl
Quan m/z: 88.10
TotalArea: 71931672
Peak Area: 71931672
RT: 4.98min (4.98)
TAmount: 1280.00 PPB
Amount: 1281.62 PPB



Flonicamid
Quan m/z: 203.00
TotalArea: 10725410
Peak Area: 10725410
RT: 5.04min (5.03)
TAmount: 1920.00 PPB
Amount: 1920.54 PPB



ODMS
Quan m/z: 169.00
TotalArea: 46047319
Peak Area: 46047319
RT: 5.07min (5.07)
TAmount: 320.00 PPB
Amount: 320.14 PPB

Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

High Density Sample Report 2

High Density Sample Report 2

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Call File:**	011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Oxamyl_Oxime
Quan m/z: 72.10
TotalArea: 115624994
Peak Area: 115624994
RT: 4.32min (4.31)
Amount: 1280.93 PPB
TAmount: 1280.00 PPB
Qual m/z: 90.06
Area: 8374691
Range: 0.00 % - 27.25 %

Omethoate
Quan m/z: 183.04
TotalArea: 47692071
Peak Area: 47692071
RT: 4.34min (4.34)
Amount: 158.19 PPB
TAmount: 158.00 PPB
Qual m/z: 125.03
Area: 35413809
Ratio: 74.26 %
Range: 53.49 % - 93.49 %

Formetanate
Quan m/z: 165.10
TotalArea: 418192129
Peak Area: 418192129
RT: 4.36min (4.35)
Amount: 642.46 PPB
TAmount: 642.00 PPB
Qual m/z: 120.00
Area: 33553959
Ratio: 8.02 %
Range: 0.00 % - 28.09 %

Dinotefuran
Quan m/z: 129.14
TotalArea: 41994838
Peak Area: 41994838
RT: 4.52min (4.51)
Amount: 642.34 PPB
TAmount: 640.00 PPB
Qual m/z: 114.15
Area: 30358995
Ratio: 72.29 %
Range: 52.28 % - 92.28 %

Aldicarb_SO
Quan m/z: 132.05
TotalArea: 46055255
Peak Area: 46055255
RT: 4.52min (4.52)
Amount: 641.29 PPB
TAmount: 640.00 PPB
Qual m/z: 89.10
Area: 30100441
Range: 48.87 % - 88.87 %

Propamocarb
Quan m/z: 102.00
TotalArea: 233040768
Peak Area: 233040768
RT: 4.53min (4.53)
Amount: 638.19 PPB
TAmount: 640.00 PPB
Qual m/z: 144.00
Area: 97076996
Ratio: 41.66 %
Range: 19.38 % - 59.38 %

Pymetrozine
Quan m/z: 105.10
TotalArea: 19185279
Peak Area: 19185279
RT: 4.57min (4.56)
Amount: 160.15 PPB
TAmount: 160.00 PPB
Qual m/z: 78.11
Area: 2406306
Ratio: 12.54 %
Range: 0.00 % - 32.18 %

Aldicarb_SO2
Quan m/z: 148.04
TotalArea: 73839209
Peak Area: 73839209
RT: 4.69min (4.68)
Amount: 643.38 PPB
TAmount: 643.00 PPB
Qual m/z: 86.00
Area: 43918555
Ratio: 59.48 %
Range: 40.81 % - 80.81 %

Oxamyl
Quan m/z: 90.00
TotalArea: 36777897
Peak Area: 36777897
RT: 4.78min (4.77)
Amount: 640.38 PPB
TAmount: 640.00 PPB
Qual m/z: 219.70
Area: 3371404
Range: 0.00 % - 31.32 %

Methomyl
Quan m/z: 88.10
TotalArea: 71931672
Peak Area: 71931672
RT: 4.98min (4.98)
Amount: 1281.62 PPB
TAmount: 1280.00 PPB
Qual m/z: 106.03
Area: 73876485
Ratio: 102.70 %
Range: 85.41 % - 125.41 %

Flonicamid
Quan m/z: 203.00
TotalArea: 10725410
Peak Area: 10725410
RT: 5.04min (5.03)
Amount: 1920.54 PPB
TAmount: 1920.00 PPB
Qual m/z: 98.00
Area: 5546720
Ratio: 51.72 %
Range: 32.77 % - 72.77 %

ODMS
Quan m/z: 169.00
TotalArea: 46047319
Peak Area: 46047319
RT: 5.07min (5.07)
Amount: 320.14 PPB
TAmount: 320.00 PPB
Qual m/z: 108.95
Area: 21960912
Ratio: 47.69 %
Range: 29.22 % - 69.22 %

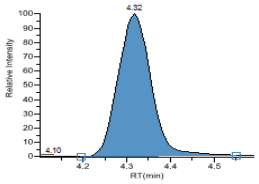
Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

High Density Sample Report 2 Long

High Density Sample Report 2 Long

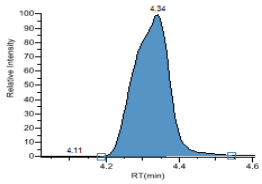
Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Call File: 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	



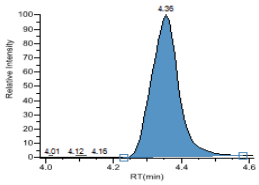
Oxamyl_Oxime
Quan m/z: 72.10
TotalArea: 115624994
Peak Area: 115624994
RT: 4.32min (4.31)
Amount: 1280.93 PPB
TAmount: 1280.00 PPB

Area: 8374691
Ratio: 7.24 %
Range: 0.00 % - 27.25 %



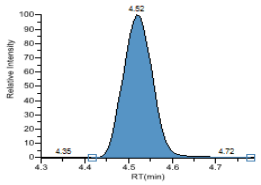
Omethoate
Quan m/z: 183.04
TotalArea: 47692071
Peak Area: 47692071
RT: 4.34min (4.34)
Amount: 158.19 PPB
TAmount: 158.00 PPB

Qual m/z: 125.03
Area: 35413809
Ratio: 74.26 %
Range: 53.49 % - 93.49 %



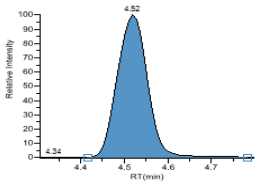
Formetanate
Quan m/z: 165.10
TotalArea: 418192129
Peak Area: 418192129
RT: 4.36min (4.35)
Amount: 642.46 PPB
TAmount: 642.00 PPB

Area: 33553959
Ratio: 8.02 %
Range: 0.00 % - 28.09 %



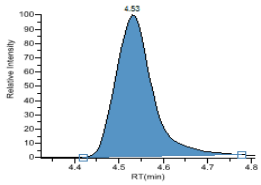
Dinotefuran
Quan m/z: 129.14
TotalArea: 41994838
Peak Area: 41994838
RT: 4.52min (4.51)
Amount: 642.34 PPB
TAmount: 640.00 PPB

Qual m/z: 114.15
Area: 30358995
Ratio: 72.29 %
Range: 52.28 % - 92.28 %



Aldicarb_SO
Quan m/z: 132.05
TotalArea: 46055255
Peak Area: 46055255
RT: 4.52min (4.52)
Amount: 641.29 PPB
TAmount: 640.00 PPB

Area: 30100441
Ratio: 65.36 %
Range: 48.87 % - 88.87 %



Propamocarb
Quan m/z: 102.00
TotalArea: 233040768
Peak Area: 233040768
RT: 4.53min (4.53)
Amount: 638.19 PPB
TAmount: 640.00 PPB

Qual m/z: 144.00
Area: 97076996
Ratio: 41.66 %
Range: 19.38 % - 59.38 %

Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

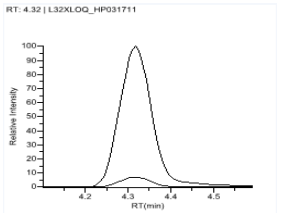
High Density Sample Report 3

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Cal File: 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

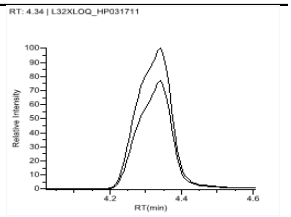
Oxamyl_Oxime
Quan m/z: 72.10
TotalArea: 115624994
Peak Area: 115624994
RT: 4.32min (4.31)
Amount: 1280.93 PPB
TAmount: 1280.00 PPB

Qual m/z: 90.06
Area: 8374691
Ratio: 7.24 %
Range: 0.00 % - 27.25 %



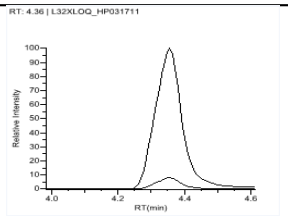
Omethoate
Quan m/z: 183.04
TotalArea: 47692071
Peak Area: 47692071
RT: 4.34min (4.34)
Amount: 158.19 PPB
TAmount: 158.00 PPB

Qual m/z: 125.03
Area: 35413809
Ratio: 74.26 %
Range: 53.49 % - 93.49 %



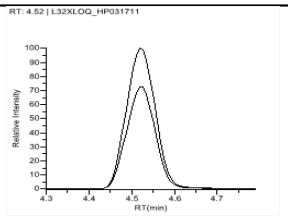
Formetanate
Quan m/z: 165.10
TotalArea: 418192129
Peak Area: 418192129
RT: 4.36min (4.35)
Amount: 642.46 PPB
TAmount: 642.00 PPB

Qual m/z: 120.00
Area: 33553959
Ratio: 8.02 %
Range: 0.00 % - 28.09 %



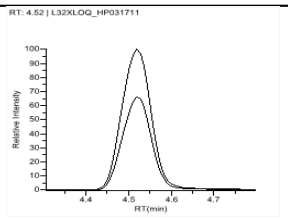
Dinotefuran
Quan m/z: 129.14
TotalArea: 41994838
Peak Area: 41994838
RT: 4.52min (4.51)
Amount: 642.34 PPB
TAmount: 640.00 PPB

Qual m/z: 114.15
Area: 30358995
Ratio: 72.29 %
Range: 52.28 % - 92.28 %



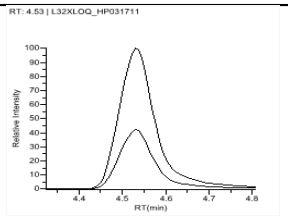
Aldicarb_SO
Quan m/z: 132.05
TotalArea: 46055255
Peak Area: 46055255
RT: 4.52min (4.52)
Amount: 641.29 PPB
TAmount: 640.00 PPB

Qual m/z: 89.10
Area: 30100441
Ratio: 65.36 %
Range: 48.87 % - 88.87 %



Propamocarb
Quan m/z: 102.00
TotalArea: 233040768
Peak Area: 233040768
RT: 4.53min (4.53)
Amount: 638.19 PPB
TAmount: 640.00 PPB

Qual m/z: 144.00
Area: 97076996
Ratio: 41.66 %
Range: 19.38 % - 59.38 %



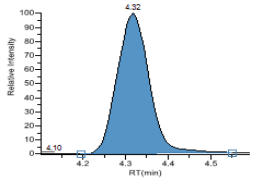
Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

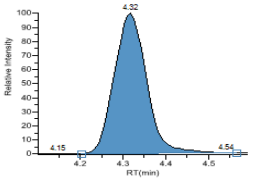
High Density Sample Report 3 Long

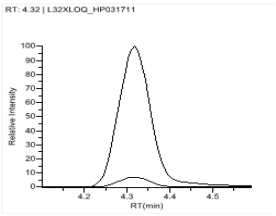
High Density Sample Report 3 Long

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Call File:**	011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

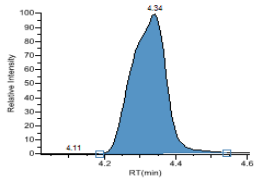


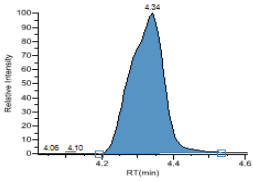


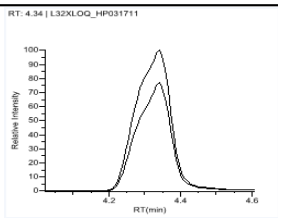


Oxamyl_Oxime
Quan m/z: 72.10
TotalArea: 115624994
Peak Area: 115624994
RT: 4.32min (4.31)
Amount: 1280.93 PPB
TAmount: 1280.00 PPB

Qual m/z: 90.06
Area: 8374691
Ratio: 7.24 %
Range: 0.00 % - 27.25 %

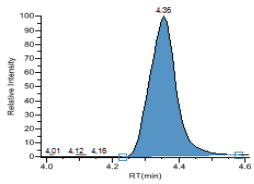


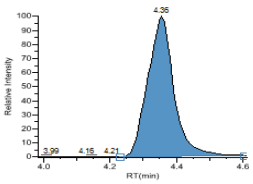


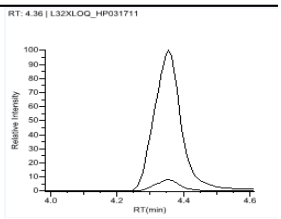


Omethoate
Quan m/z: 183.04
TotalArea: 47692071
Peak Area: 47692071
RT: 4.34min (4.34)
Amount: 158.19 PPB
TAmount: 158.00 PPB

Qual m/z: 125.03
Area: 35413809
Ratio: 74.26 %
Range: 53.49 % - 93.49 %







Formetanate
Quan m/z: 165.10
TotalArea: 418192129
Peak Area: 418192129
RT: 4.36min (4.35)
Amount: 642.46 PPB
TAmount: 642.00 PPB

Qual m/z: 120.00
Area: 33553959
Ratio: 8.02 %
Range: 0.00 % - 28.09 %

Internal Standard Summary Report

Internal Standard Summary Report

Page 1 of 1

Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Drug_A

Method: Drug_A_Drug_A
Drug_A
Cali File: Drug_A.calx

Vial Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
2	cal 1 = 6 ng/mL	cal_1	level 1		4/17/2008 5:05:47 PM	

Compound	Std Response	Min	Max	Sample Response
Int_Std	655596	327798(50.00%)	983394(150.00%)	678044
	Std RT	**Min**	**Max**	**Sample RT**
Int_Std	1.93	1.68(-0.25)	2.18(+0.25)	1.93

* = Fail

Manually integrated ☐

Ion Ratio Failure Report

Page 1 of 1

Ion Ratio Failure Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Call File: 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Compound	Response	Quan Ion	Quan Response	Qual Ion	Qual Response	Ratio	Range
Sethoxydim_I	Area	178.02	4002074	220.05	2971396	74.25	34.09-74.09
Buprofezin	Area	106.10	39861606	201.10	168167286	421.88	369.96-409.96

Manually Integrated

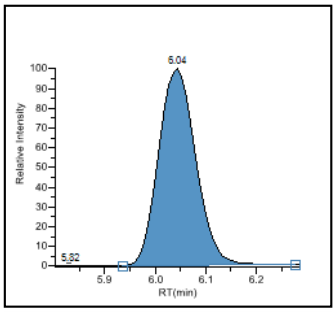
Manual Integration Report

Manual Integration Report

Lab Name:	Thermo Lab		
Instrument:	TQU00637	**Method:**	011HPLR1_PDP_040511
User:	TQU00637\RPC		PDP_040511
Batch:	011HPLR1	**Cali File:**	011HPLR1.calx

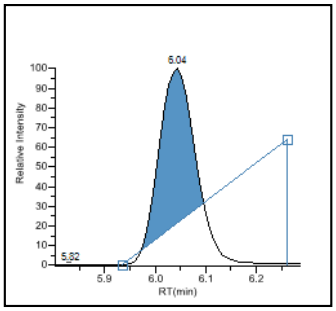
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

3-OH_Carbofuran
m/z: 163.08



Method Integration

Apex RT:	6.04
Height:	30046630
Area:	148721201



Manual Integration

Apex RT:	6.04
Height:	23956657
Area:	94907912

Method Report

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x
Ion range calc method: Average
Page number: Page 1 of 11

Compound Identification:

Compound	Quan mass	RT	Window	View width	Use as reference	Reference compound
Int_Std	380.20	1.94	10.00	0.40	Yes	
Drug_A	371.20	1.95	10.00	0.40	No	Int_Std

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x
Ion range calc method: Average
Page number: Page 2 of 11

Compound Calibration:

Compound	Response	Calibration	Curve type	Weighting	Origin	Units	ISTD Name	ISTD Units
Drug_A	Area	Internal	Linear	Equal	Ignore	ng/mL	Int_Std	ng/mL

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x
Ion range calc method: Average
Page number: Page 3 of 11

QAQC Limits:

Compound	LOD	LOQ	Cutoff	ULOL	Carryover
Drug_A	1.500	1.500	15.000	1000.000	1000.000

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x
Ion range calc method: Average
Page number: Page 4 of 11

Groups

Method Report

Method name:	Drug_A_Drug_A			Page number:	Page 5 of 11
Master method name:	Drug_A				
Current calibration file:	Drug_A.calx				
Assay type:	Drug_A	Ion range calc method:	Average		
Inj vol:	1.000				
Instrument method:	20x				

Report options:

Quan report options

Report concentration:	Always
Decimal places to be reported:	3
Show chromatogram on Quantitation report:	True
Display valid compounds only	False

Qual options

Sort Qual results by:	Search Index
Enable limiting peaks:	False
Limit Peaks to :	

User interface options

Shade row when sample is outside of evaluation criteria:	False
Separate ion overlay display :	True
Use alternative calibration report format:	False
Display quan flags and legend	True

ToxLab Forms settings

Quan flags

Flag values below LOD:	True
Flag values below LOQ:	True
Flag values above Cutoff:	True
Flag values above ULOL:	True
Flag values above Carryover:	True
Flag values between LOD and LOQ:	True

Calculated amount option

Calculate concentration as:	Truncated

Tune time tracking options

Enable tune time tracking:	False
Tune file lifetime (hrs):	N/A

Method Report

Method name:	Drug_A_Drug_A			Page number:	Page 6 of 11
Master method name:	Drug_A				
Current calibration file:	Drug_A.calx				
Assay type:	Drug_A	Ion range calc method:	Average		
Inj vol:	1.000				
Instrument method:	20x				

QAQC Calibration

Compound	Max RSD (%)	Min RF	R^2 threshold	Max amt diff (%)
Drug_A	20.00	0.00	0.990	20.000

Method Report

Method name:	Drug_A_Drug_A			Page number:	Page 7 of 11
Master method name:	Drug_A				
Current calibration file:	Drug_A.calx				
Assay type:	Drug_A	Ion range calc method:	Average		
Inj vol:	1.000				
Instrument method:	20x				

QAQC QC Check:

Compound	Max RF diff (%)	Min RF
Drug_A	20.00	0.000

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A — Page number: Page 8 of 11
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A — Ion range calc method: Average
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x

QAQC Negative:

Compound	Criterion	Max value
Drug_A	% of LOD	1.500

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A — Page number: Page 9 of 11
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A — Ion range calc method: Average
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x

QAQC ISTD:

Compound	Min recovery (%)	Max recovery (%)	Min RT (-min)	Max RT (+min)
Int_Std	50.00	150.00	0.25	0.25

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A — Page number: Page 10 of 11
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A — Ion range calc method: Average
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x

QAQC Solvent Blank:

Compound	Method	Upper Limit %
Int_Std	None	
Drug_A	Quan Ion RT	0

Method Report

Method name: Drug_A_Drug_A — Page number: Page 11 of 11
Master method name: Drug_A
Current calibration file: Drug_A.calx
Assay type: Drug_A — Ion range calc method: Average
Inj vol: 1.000
Instrument method: 20x

QAQC Hydrolysis:

CompoundName	EvaluationMethod	LowerLimit	UpperLimit
Drug_A	Range	15.000	23.000

Method Validation Report

Method Validation Report

Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Preview2

Method: Preview2_EPA536-Triazines
EPA536-Triazines
Cali File: Preview2.calx

Method Validation Summary

Compound	Avg Conc	Theo Conc	% Diff	Min Conc	Max Conc	% RSD	Max % RSD	
DIA D-5	295652					0.00		IS
DIA	0.358	0.500	-28.34	0.250	0.750	0.00	20.00	
DEA D-7	1778658					0.00		IS
DEA	0.602	0.500	20.45	0.250	0.750	0.00	20.00	
Cyanazine D-5	2224244					0.00		IS
Cyanazine	0.565	0.500	12.90	0.250	0.750	0.00	20.00	
Simazine D-10	505462					0.00		IS
Simazine	0.607	0.500	21.49	0.250	0.750	0.00	20.00	
Atrazine D-5	2334865					0.00		IS
Atrazine	0.512	0.500	2.46	0.250	0.750	0.00	20.00	
Propazine	0.757	0.500	51.41	0.250	0.750	0.00	20.00	<<<
Propazine D-14	272050					0.00		IS

Manually integrated ☐

<<< = Failure

Method Validation Report

Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Preview2

Method: Preview2_EPA536-Triazines
EPA536-Triazines
Cali File: Preview2.calx

Method Validation Report Data

Compound	1
DIA D-5	295652
DIA	0.358
DEA D-7	1778658
DEA	0.602
Cyanazine D-5	2224244
Cyanazine	0.565
Simazine D-10	505462
Simazine	0.607
Atrazine D-5	2334865
Atrazine	0.512
Propazine	0.757
Propazine D-14	272050

Manually integrated ☐

<<< = Failure

Method Validation Report

Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Preview2
Method: Preview2_EPA536-Triazines
EPA536-Triazines
Cali File: Preview2.calx

Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
Tray1:10	SampleID003	500ppt-003	N/A	D003	6/26/2007 10:18:49 PM	New Dilutions 6/26/2007 F

Manually integrated ☐ **<<< = Failure**

MSMSD Report

MSMSD Report

Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Preview2
Method: Preview2_EPA536-Triazines
EPA536-Triazines
Cali File: Preview2.calx

Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
Tray1:1	SampleID021	DACTTest001	N/A	D021	6/27/2007 11:42:07 AM	New dilution of DACT

SampleID021

Compound	Unknown Conc	Spike Amt	MS Conc	% Rec	Lower Limit %	Upper Limit %	Rec Fails
DIA	0.000	0.500	0.000	0.00	50.00	150.00	0
DEA	0.000	0.500	0.000	0.00	50.00	150.00	0
Cyanazine	0.000	0.500	0.000	0.00	50.00	150.00	0
Simazine	0.000	0.500	0.000	0.00	50.00	150.00	0
Atrazine	0.000	0.500	0.000	0.00	50.00	150.00	0
Propazine	0.000	0.500	0.000	0.00	50.00	150.00	0

Quality Control Report

Quality Control Report

Page 1 of 1

Lab name: Thermo Fisher Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: AMER\jamie.humphries
Batch: Drug_A

Method: Drug_A_Drug_A
Drug_A
Cali File: Drug_A.calx

Vial Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
7	qc 40% = 6 ng/mL	qc_40	level 40		4/17/2008 5:07:57 PM	

Compound	Curve Type	Daily RF	Mean RF	Min RF	RF %D	Max RF % D	QC amt	Calc amt	Amt %D	Max Amt %D	Flag
Drug_A	L			0.000			6.000	5.603	-6.62	20.00	Pass

Internal standard summary:

Compound	Std Response	Min	Max	Sample Response
Int_Std	655596	327798(50.00%)	983394(150.00%)	639922

	Std RT	Min	Max	Sample RT
Int_Std	1.93	1.68(-0.25)	2.18(+0.25)	1.93

Manually integrated [ ] * = Fail;Curve Type: A=Average RF; L=Linear; Q=Quadratic;R=Recovery limits exceeded

Quantitation Report

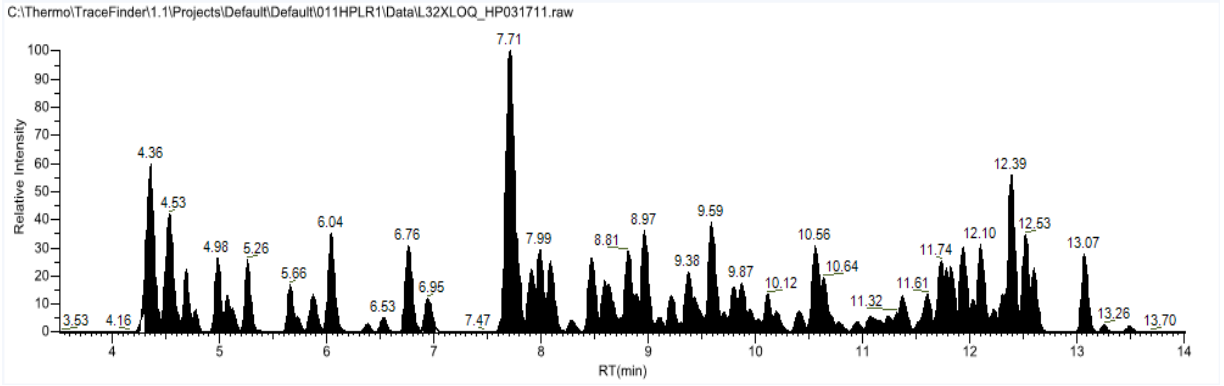
Quantitation Report

Page 1 of 6

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Call File: 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	



Surrogates	RT	Qion	Response	Curve Type	Average RF/ Response Ratio	Injected Conc	Units	Calculated Conc	Units	Flags
Propoxur_(S)	7.70	111.10	138563122	Quadratic	0.00	640.78	PPB	640.78	PPB	

Target Compounds	RT	Qion	Response	Curve Type	Average RF/ Response Ratio	Injected Conc	Units	Calculated Conc	Units	Flags
Oxamyl_Oxime	4.32	72.10	115624994	Quadratic	0.00	1280.93	PPB	1280.93	PPB	
Omethoate	4.34	183.04	47692071	Quadratic	0.00	158.19	PPB	158.19	PPB	
Formetanate	4.36	165.10	418192129	Quadratic	0.00	642.46	PPB	642.46	PPB	
Dinotefuran	4.52	129.14	41994838	Quadratic	0.00	642.34	PPB	642.34	PPB	
Aldicarb_SO	4.52	132.05	46055255	Quadratic	0.00	641.29	PPB	641.29	PPB	
Propamocarb	4.53	102.00	233040768	Quadratic	0.00	638.19	PPB	638.19	PPB	
Pymetrozine	4.57	105.10	19185279	Quadratic	0.00	160.15	PPB	160.15	PPB	
Aldicarb_SO2	4.69	148.04	73839209	Quadratic	0.00	643.38	PPB	643.38	PPB	
Oxamyl	4.78	90.00	36777897	Quadratic	0.00	640.38	PPB	640.38	PPB	

Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

Manually Integrated

Quantitation Report - 2

MS Integ Params:	PDP_040511	**Quant Time:**	4/19/2011 3:39:05 PM
Quant Method:	011HPLR1_PDP_040511	**Data File:**	L32XLOQ_HP031711
Title:	Assay	**Acq On:**	3/17/2011 8:06:03 PM
Last Update:	6/2/2011 9:47:56 AM	**Sample:**	L32XLOQ_HP031711
Data Acq Method:	PDP_010411	**Comment:**	
Operator:	TQU00637\RPC	**Vial:**	5
Instr:	TQU00637	**MultiplIr:**	1.000
Response Via:	011HPLR1.calx	**Quant Results File:**	C:\Thermo\TraceFinder\1.1\Projects\Default\Default\011HPLR1\Data\L32XLOQ_HP031711.rsx

Surrogates

Compound Name	RT	Qion	Response	Conc	Units	Dev (min)	Spike Amt	Recovery	Flags
28 Propoxur_(S)	7.70	111.10	138563122	640.78	PPB	0.01	40.00	1601.95	

Target Compounds

Compound Name	RT	Qion	Response	Conc	Units	Dev (min)	Flags
1 Oxamyl_Oxime	4.32	72.10	115624994	1280.93	PPB	0.01	
2 Omethoate	4.34	183.04	47692071	158.19	PPB	0.01	
3 Formetanate	4.36	165.10	418192129	642.46	PPB	0.01	
4 Dinotefuran	4.52	129.14	41994838	642.34	PPB	0.01	
5 Aldicarb_SO	4.52	132.05	46055255	641.29	PPB	0.00	
6 Propamocarb	4.53	102.00	233040768	638.19	PPB	0.00	
7 Pymetrozine	4.57	105.10	19185279	160.15	PPB	0.01	
8 Aldicarb_SO2	4.69	148.04	73839209	643.38	PPB	0.01	
9 Oxamyl	4.78	90.00	36777897	640.38	PPB	0.01	
10 Methomyl	4.98	88.10	71931672	1281.62	PPB	0.01	
11 Flonicamid	5.04	203.00	10725410	1920.54	PPB	0.01	
12 ODMS	5.07	169.00	46047319	320.14	PPB	0.00	
13 5-OH_TBZ	5.12	147.10	41244357	320.15	PPB	0.01	
14 Thiamethoxam	5.13	181.10	12666340	160.12	PPB	0.01	
15 Monocrotophos	5.26	193.00	81911360	320.27	PPB	0.01	
16 Imidacloprid	5.66	209.06	53957135	640.52	PPB	0.01	
17 Clothianidin	5.73	169.10	20034742	320.31	PPB	0.01	
18 Thiabendazole	5.88	131.10	70334577	320.35	PPB	0.01	
19 3-OH_Carbofuran	6.04	163.08	94907912	537.87	PPB	0.01	I

Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

Manually integrated

Quantitation Report - 2

Target Compounds

Compound Name	RT	Qion	Response	Conc	Units	Dev (min)	Flags
52 Pyrimethanil	9.31	107.00	15176188	320.09	PPB	0.02	
53 Azoxystrobin	9.38	372.10	118737360	160.00	PPB	0.01	
54 Fenobucarb	9.43	95.00	68157960	320.10	PPB	0.01	
55 Linuron	9.48	160.10	31079975	639.90	PPB	0.02	
56 Dimethomorph_I	9.55	301.10	8049921	92.89	PPB	0.00	
57 Fenamidone	9.58	92.10	11883329	320.00	PPB	0.01	
58 Methiocarb	9.59	169.00	188527803	644.38	PPB	0.01	
59 Boscalid	9.70	307.10	16765638	320.43	PPB	0.01	
60 Fludioxonil	9.72	158.00	11536347	640.67	PPB	0.02	
61 Mandipropamid	9.70	328.21	36436634	320.31	PPB	0.00	
62 Sethoxydim_I	9.74	178.02	4002074	22.38	PPB	0.02	I
63 Promecarb	9.80	109.02	72069251	320.27	PPB	0.01	
64 Flutolanil	9.81	262.00	59962817	160.05	PPB	0.01	
65 Fluopicolide	9.83	173.00	29652715	160.16	PPB	0.01	
66 Methoxyfenozide	9.87	149.00	68163623	319.95	PPB	0.01	
67 Dimethomorph_II	9.88	301.10	24249261	227.43	PPB	0.00	
68 Clethodim_I	9.94	164.09	30569148	512.02	PPB	0.02	
69 Triadimefon	9.95	197.00	34892978	640.89	PPB	0.01	
70 Imiprothrin_I	10.02	151.10	9384265	68.41	PPB	0.01	
71 Myclobutanil	10.03	70.10	20569388	639.97	PPB	0.02	
72 Bifenazate	10.12	170.10	47077629	319.44	PPB	0.01	
73 Triadimenol	10.16	70.00	17384509	1924.45	PPB	0.02	
74 Spirotetramat	10.20	216.15	28050091	159.99	PPB	0.01	
75 Imiprothrin_II	10.22	123.09	10608234	248.90	PPB	0.01	I
76 Cyazofamid	10.41	108.00	50568848	642.61	PPB	0.03	
77 Fenbuconazole	10.54	125.00	26717669	640.05	PPB	0.02	
78 Chlorpyrifos_OA	10.56	278.00	125363774	641.05	PPB	0.02	
79 Uniconazole	10.61	125.08	9243171	2559.62	PPB	0.02	
80 Diflubenzuron	10.62	158.02	27577198	1280.31	PPB	0.03	
81 Tebufenozide	10.64	133.00	114645763	320.30	PPB	0.03	
82 Flubendiamide	10.71	408.07	20125339	320.06	PPB	0.02	

Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

Manually integrated

Solvent Blank Report

Solvent Blank Report

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Call File: 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	1	LLOD_HP031711	N/A	LLOD_HP031711	3/17/2011 5:46:30 PM	

Surrogates	RT	Qion	Response	Method	Upper Limit
Propoxur_(S)	7.69	111.10	1553885	None	

Target Compounds	RT	Qion	Response	Method	Upper Limit
Oxamyl_Oxime	4.32	72.10	1291350	None	
Omethoate	4.34	183.04	540508	None	
Formetanate	4.35	165.10	4408552	None	
Dinotefuran	4.52	129.14	608336	None	
Aldicarb_SO	4.51	132.05	538697	None	
Propamocarb	4.53	102.00	750180	None	
Pymetrozine	4.56	105.10	231305	None	
Aldicarb_SO2	4.68	148.04	842061	None	
Oxamyl	4.77	90.00	408081	None	
Methomyl	4.98	88.10	973424	None	
Flonicamid	5.05	203.00	121206	None	
ODMS	5.07	169.00	495002	None	
5-OH_TBZ	5.12	147.10	427244	None	
Thiamethoxam	5.12	181.10	149534	None	
Monocrotophos	5.26	193.00	820046	None	
Imidacloprid	5.66	209.06	611636	None	
Clothianidin	5.71	169.10	216332	None	
Thiabendazole	5.87	131.10	692435	None	
3-OH_Carbofuran	6.03	163.08	1717688	None	
Acetamiprid	6.07	126.10	239740	None	
Cymoxanil	6.38	128.14	108494	None	
Thiacloprid	6.51	126.10	299625	None	
Methidathion_OA	6.75	145.00	1537066	None	
Aldicarb	6.94	116.05	563453	None	
Azinphos_Me_OA	6.95	132.00	485885	None	
Metribuzin	7.65	187.16	437173	None	
Simazine	7.69	104.10	182755	None	
Pirimicarb	7.71	182.08	6037105	None	

Manually Integrated

Surrogate Recovery Report

Surrogate Recovery Report

Page 1 of 1

Lab Name: Thermo Lab
Instrument: TQU00637
User: TQU00637\RPC
Batch: 011HPLR1
Method: 011HPLR1_PDP_040511
PDP_040511
Call File: 011HPLR1.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

Compound	Conc Added	Conc Recovered	% Recovered	Limits	
Propoxur_(S)	40.00	640.78	1601.95	83.00 - 121.00	R

Manually Integrated ☐ **R=Recovery limits exceeded**

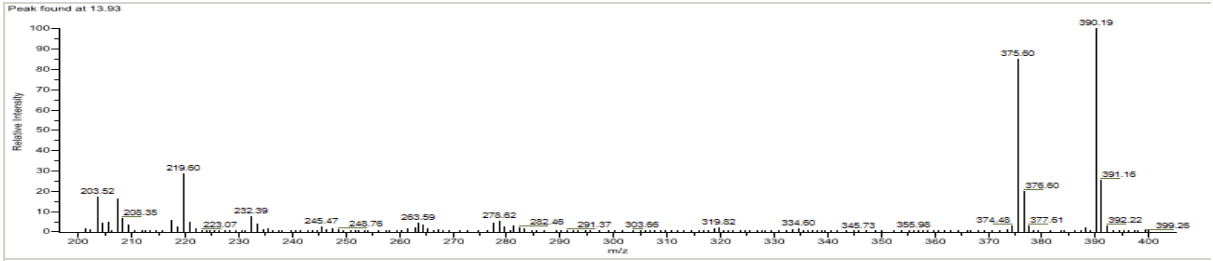
TIC Report

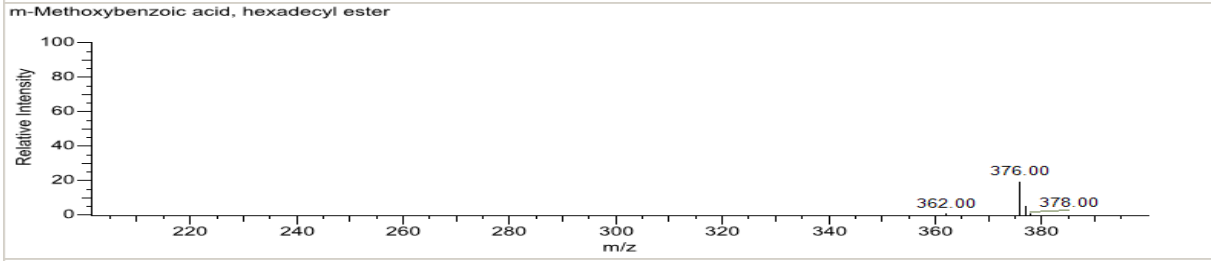
Lab Name:	Default Laboratory		
Instrument:	Thermo Scientific Instrument	**Method:**	jbe_test_5_jbe_test_q2_c1
User:	MS110434\ITQ		jbe_test_q2_c1
Batch:	jbe_test_5	**Cali File:**	jbe_test_5.calx

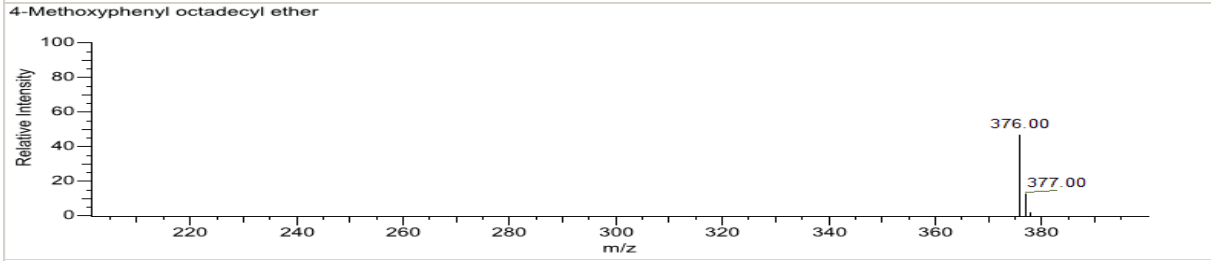
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
4	6	spl07	N/A		3/15/2011 3:24:54 PM	L135 20 ppm

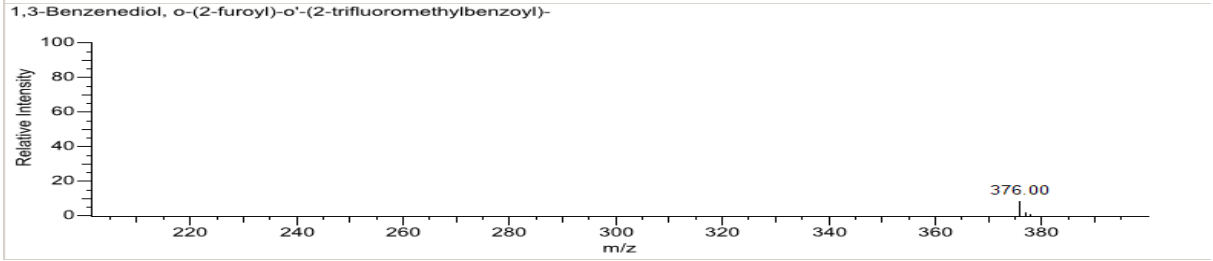
Peak:	Retention Time	Area	Height	Inj Estimate	In-sample Est	Flag
m-Methoxybenzoic acid, hexadecy	13.93	224271083	65488496	0.000	0.000	

Compound	CAS Number	Library	Entry	Match Prob	Search Index	Rev Search Index	Formula	Weight
m-Methoxybenzoic acid, hexadecyl	111722113	mainlib	113559	9	565	984	C24H40O3	376
4-Methoxyphenyl octadecyl ether	0	mainlib	88087	7	562	981	C25H44O2	376
1,3-Benzenediol, o-(2-furoyl)-o'-(2-t	0	mainlib	128603	6	556	975	C19H11F3O5	376









Manually integrated

Flag legend: P = Library entry selected manually

TIC Summary Report

TIC Summary Report

Lab Name: Default Laboratory
Instrument: Thermo Scientific Instrument
User: MS110434\ITQ
Batch: jbe_test_5
Method: jbe_test_5_jbe_test_q2_c1
jbe_test_q2_c1
Cali File: jbe_test_5.calx

Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
4	6	spl07	N/A		3/15/2011 3:24:54 PM	L135 20 ppm

Internal Standards

Internal Standard	ISTD#	RT	Response	Injected Conc	Injected Units	Sample Conc	Sample Units

Qualitatively-identified Compounds

Compound	Uses ISTD#	RT	Response	Injected Conc	Injected Units	Sample Conc	Sample Units	Flag
8-Chloro-5-quinolinecarboxylic acid		2.78	566067	0.000		0.000		
8-Chloro-5-quinolinecarboxylic acid		2.90	164769	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		3.07	2136999	0.000		0.000		
Cyclotetrasiloxane, octamethyl-		4.46	1139812	0.000		0.000		
Benzaldehyde, 2,5-bis[(trimethylsilyl)oxy]-		5.44	10912	0.000		0.000		
Benzoic acid, 2-[(trimethylsilyl)oxy]-, trimethylsilyl ester		5.80	87135	0.000		0.000		
Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester		7.18	14550	0.000		0.000		
Quinoline, 2-chloro-6-methoxy-4-methyl-		7.74	10864	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		8.43	10854	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		9.40	10900	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		11.02	200098	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		11.02	27413	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		11.08	69527	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		11.13	313964	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		11.33	35676	0.000		0.000		
Padimate O		11.44	843015	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		11.52	13886	0.000		0.000		
Cyclohexa-2,5-diene-1,4-dione, 2-methyl-5-(4-morpholinyl)-		11.91	413305	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		11.96	523374	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.07	206827	0.000		0.000		
5-Acetamido-4,7-dioxo-4,7-dihydrobenzofurazan		12.11	91980	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.13	43177	0.000		0.000		
5-Acetamido-4,7-dioxo-4,7-dihydrobenzofurazan		12.33	15408	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.48	15166	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.51	16599	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		12.58	12284	0.000		0.000		
5-Acetamido-4,7-dioxo-4,7-dihydrobenzofurazan		12.81	16241	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.84	11652	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.86	12466	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		12.90	57442	0.000		0.000		
1,1,1,3,5,5,5-Heptamethyltrisiloxane		12.97	44518	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		12.98	15734	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		13.02	35927	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		13.04	45368	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		13.10	33807	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		13.12	67005	0.000		0.000		
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-		13.16	30617	0.000		0.000		

使用 Copy Down 和 Fill Down

本附录描述了 Copy Down （向下复制）和 Fill Down （向下填充）命令，这两个命令能够使用户更方便地输入列值。

- 利用 Fill Down 命令输入 Filename （文件名）、 Sample Name （文件名）、 Sample ID （样品标识号）和 Vial Position （样品瓶位置）列。
- 利用 Copy Down 命令输入 Sample Type （样品类型）、 Vial Position、 Injection Volume （进样体积）、 Conv Factor （换算系数）、 Level （水平）、 Comment （注释）以及其他列。

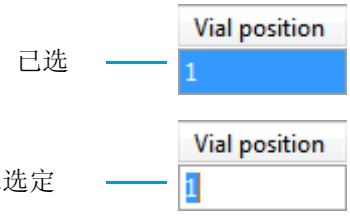
按照如下步骤进行操作：

- 若要自动复制列值
- 若要自动输入连续的列值
- 若要使用 Copy Down 或 Fill Down 为特定范围的样品填充值

❖ 若要自动复制列值

1. 选择一个单元，将其列值复制至其下方所有单元。

   观察已选中和未选中单元格之间的区别。



2. 右击并从快捷菜单中选择 **Copy Down**。

   该值将被复制至选定行下面的所有行。

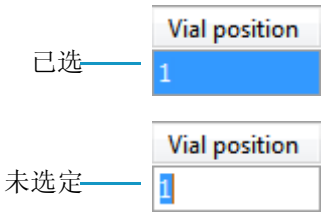
❖ 若要自动输入连续的列值

1. 输入填充批次第一行的值。

   该输入不是必须从第一个样品行开始。可以从批次中的任意行开始向下填充。

2. 选择含有向下填充批次起始值的单元。

   观察已选中和未选中单元格之间的区别。



3. 右击并从快捷菜单中选择 **Fill Down**。

   应用程序将以选定行中的值为起始值，输入连续的列值，直到列中的最后一行结束。

   可以重复使用 Fill Down 命令以创建多个序列。

Vial position
A:A1
A:A2
A:A1
A:A2
A:A1
A:A2
A:A3
A:A4

   如果对 Vial Position 列使用 Fill Down 命令并且已配置自动进样器，则 TraceFinder 应用程序会知道自动进样器中配置的样品瓶位置数量，并对所有瓶位进行相应编号。

Vial position
A:A1
A:A2
A:A3
A:A4
A:A5
A:A6
A:B1
A:B2
A:B3
A:B4
A:B5
A:B6

❖ 若要使用 Copy Down 或 Fill Down 为特定范围的样品填充值

1. 执行下列操作之一选择特定范围的样品值：

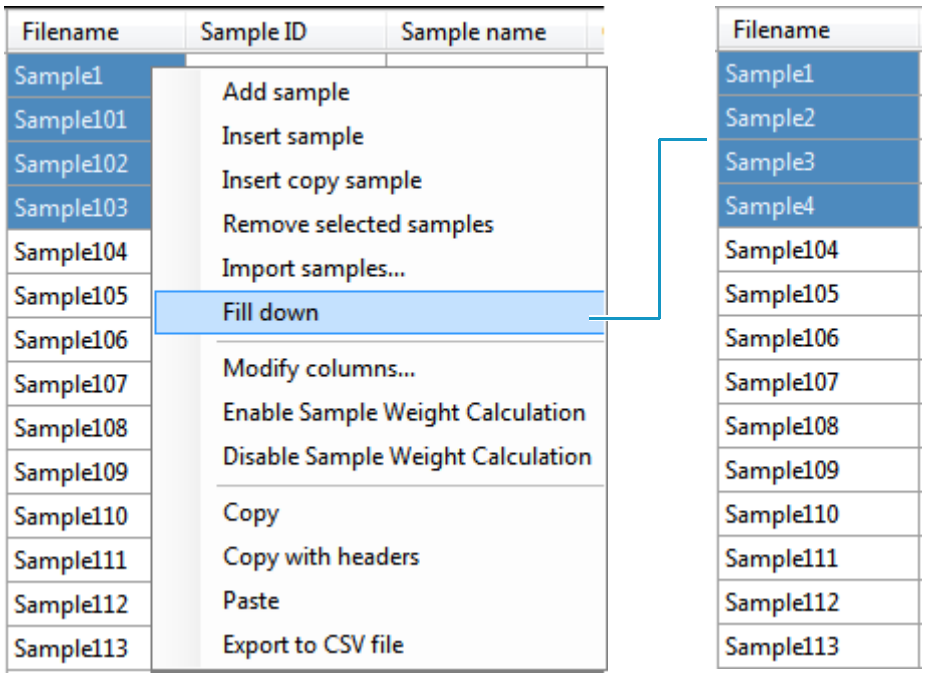
   拖动光标选择一组连续的样品值。

   – 或 –

   按住 SHIFT 键选择一组连续的样品值。

2. 右键单击并从快捷菜单中选择相应命令。

   列值将会以第一个选定行的值为起始值向下复制或连续输入，直到最后一个选定行为止。



使用过滤标准

系统配置模式中的化合物数据库和方法开发模式中的采集列表提供过滤参数工具。

❖ **过滤化合物列表**

1. 仅显示经过滤的化合物列表，单击列标题中的漏斗图标， 。

   每列的可过滤标准列表将显示。在所有列中，过滤选项均为 All （全部）、 Blanks （空白）和 NonBlanks （非空白）。其他过滤标准可适用于单列。

2. 若要基于特定列中的化合物值创建自定义过滤器，可从列的列表框选择 **Custom （自定义）**。

   此时 Enter Filter Criteria （输入过滤标准）对话框显示。参阅第 436 页的 “ Enter Filter Criteria 对话框 ”。

3. 从 Operator （运算符）列表框中选择运算符。

4. 从 Operand （操作数）列表框中选择操作数。

5. 当完成所有条件定义时，点击 **OK （确定）**。

   完整的过滤字符串会在对话框底部显示，例如：chemical formula=Blanks （化学分子式 = 空白）。

   注释 Enter Filter Criteria 对话框的名称专门与需要过滤的列对应。在此例中，选定列是 Compound Name （化合物名称）列。

图 106. Enter Filter Criteria 对话框

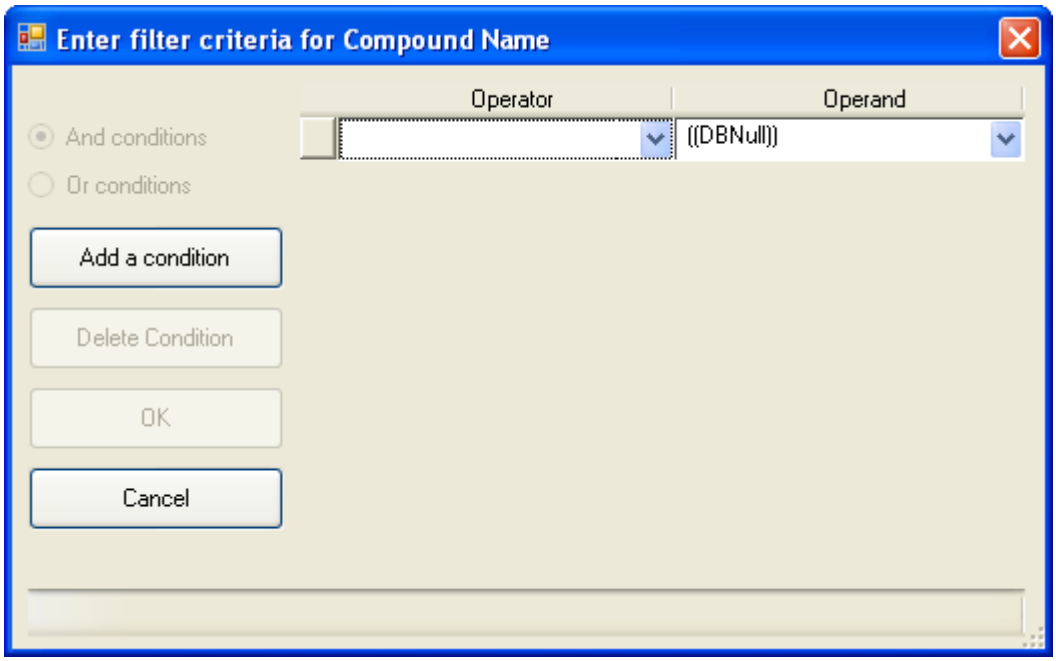


表 93. Enter Filter Criteria 对话框参数

参数	描述
And Conditions（And 条件）	需要符合所有过滤标准。
Or Conditions（Or 条件）	需要符合任何指定的过滤标准。
Add a Condition（添加条件）	添加新的空白条件至提取参数。
Delete Condition（删除条件）	删除所选的条件。单击行左边的框以选中条件。
Operator （运算符）	应用至操作数的数学功能。
Operand （操作数）	运算符所作用的参数。

术语表

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

Numerics

 # Background Scans 背景扫描数

%CV 变异系数百分比

%Diff 百分比偏差

%RSD 相对标准偏差百分比

%Test 测试百分比

1 arm 单臂

2 arm 双臂

2 Channels 2 通道

4 Channels 4 通道

60-Day Evaluation Version 60 天评估版

A

Absolute 绝对

Account Number 账号

Accurate Mass Experiment 准确质量数实验

Acquire a New Raw Data File 采集新的原始数据文件

Acquire Data 采集数据

Acquired 已采集

Acquired Batches 已采集批次

Acquisition 采集

Acquisition Batch Wizard 采集批次向导

Acquisition List 采集列表

Activation 激活

Active 活动

Active View 活动视图

Actual RT 实际保留时间

A/D card A/D 卡

Add 添加

Add a Condition 添加条件

Add a New Group 添加新组

Add a Panel 添加窗格

Add All Compounds to CDS 将所有化合物添加到化合物数据库

Add Compound 添加化合物

Add Confirming Ion 添加确认离子

Add Group 添加组

Add Library 添加库

Add New Compound 添加新化合物

Add Peak 添加峰

Add Qual Peak 添加定性峰

Add Quan Peak 添加定量峰

Add Sample 添加样品

Add This Compounds to CDS 将该化合物添加到化合物数据库

Add This Mass as New Confirming Ion 添加该质量数为新确认离子

Add This Mass to Existing Quan Mass Ranges 将质量数添加到已有定量质量数范围

Add This Peak as New Compound 添加该峰作为新化合物

Add This Spectral Peak as New Confirming 添加该质谱峰作为新确认峰

Add to CDS 添加到化合物数据库

Add User 添加用户

Adduct 1 加合物 1

Adduct 1–n 加合物 1-n

Adduct 2 加合物 2

Adduct 3 加合物 3

Administrator/Password 管理员 / 密码

After Peak 峰顶后

All 全部

All Channels 所有通道

All Compounds 所有化合物

All High Density Reports 所有高密度报告

All Ion RT 所有离子保留时间

All Programs 所有程序

AltCalibrationReport 备用校正报告

Alternate BatchReport 备用批次报告

Alternate CalibrationReport 备用校正报告

Alternate ConfirmationReport 备用确认报告

Alternate MatrixSpikeReport 备用基质加标报告

Alternate SampleReport 备用样品报告

Alternate SummaryReport 备用总结报告

Always 总是

Amount 量

Amount% Difference 百分比偏差量

Analog 模拟

Analysis 分析

And Conditions And 条件

Any 任意

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

Application Configuration 应用程序配置

Application Defaults 应用程序默认值

Apply 应用

Apply Selection to All Samples 对所有样品应用选择

Apply To All Peaks In Compound 应用至化合物中的所有峰

Apply to All Peaks in Method 应用至方法中的所有峰

Apply to All Peaks with Like Sensitivity Setting 应用至方法中具有相似灵敏度设置的所有峰

Area 峰面积

Area Noise Factor 峰面积噪声因子

Area Scan Window 峰面积扫描窗口

Area Tail Extension 峰面积尾扩展

Area Threshold 峰面积阈值

Aria MX Direct Ctl Aria MX 直接控制

Assay Type 实验类型

Associate a Raw Data File 关联原始数据文件

Auto 自动

Auto Detect 自动检测

Auto TSRM Update 自动更新定时 SRM 信息

Autocalc Initial Events 自动计算初始事件

Automated Batch Reports 自动批次报告

Automatically Create the Master Method 自动创建主方法

Automatically Set Reference Spectrum 自动设置参考质谱

Autosampler 自动进样器

Available Columns 可用列

Available Drives 可用驱动器

Available Methods 可用方法

Available Templates 可用模板

Avalon Event List Avalon 事件列表

Average 平均

Average Response 平均响应

Average RF 平均响应因子

B

Back 返回

Background Subtraction Range Option 背景扣除范围选项

Barcode 条形码

Barcode Actual 实际条形码

Barcode Expected 预期条形码

Base Peak 基峰

Based on Accurate Mass Scans 基于准确质量数扫描

Based on Exactive Screening Method 基于 Exactive 筛选方法

Based on Full MS2 Scans 基于全 MS2 扫描

Based on MS2 and MS3 Scans 基于 MS2 和 MS3 扫描

Based on MS3 Scans 基于 MS3 扫描

Based on SRM and MS2 Scans 基于 SRM 和 MS2 扫描

Based on SRM Scans 基于 SRM 扫描

Baseline Window 基线窗口

Batch 批次

Batch File 批次文件

Batch Level 批次水平

Batch Name 批次名称

Batch Report 批次报告

Batch Report Rev 1 批次报告版本 1

Batch Save 批次保存

Batch Specification 批次说明

Batch Template 批次模板

Batch Template Editor 批次模板编辑器

Batch Template Selection 批次模板选择

Batch Template Wizard 批次模板向导

Batch Templates to be Converted 待转换批次模板

Batch Using Wizard 批次使用向导

Batch View 批次视图

Batch Wizard 批次向导

Batch Wizard Style 批次向导风格

Batches to be Converted 待转换批次

BatchReport 批次报告

Batch-level 批次 - 水平

Before Peak 峰顶前

Best Match Method 最佳匹配方法

Blank 空白样

Blank Report 空白报告

Blank Samples 空白样品

BlankReport 空白报告

Blanks 空白

Both Sides of Peak 峰顶两边

Browse 浏览

Browse in Raw File 浏览原始文件

Browser for Folder 浏览文件夹

Bunch Factor 分组因子

C

Calibration Standard 校正标样

Cal1-Caln 校正 1- 校正 n

Calc Amt 计算量

Calculate Concentration As 浓度计算为

Calculated Amount 计算量

Calculated Amount Option 计算量选项

Calculation Based On 计算基于

Calculation Type 计算类型

Calibration 校正

Calibration and Compound Selection 校正和化合物选择

Calibration Curve 校正曲线

Calibration Curve Type 校正曲线类型

Calibration File 校正文件

Calibration Levels 校正水平

Calibration Method 校正方法

Calibration Report 校正报告

Calibration Samples 校正样品

CalibrationDensityReport 校正密度报告

CalibrationReport 校正报告

Calibrator 校正品

Cancel 取消

Cancel Add Peak 取消添加峰

Cancel Add Quan Peak 取消添加定量峰

Cancel Changes 取消更改

Carryover Limit 残留限

CAS No CAS 号

Category 类别

Center Mass 中心质量数

Change 更改

Channels 通道

Check Box Column 复选框列

Check Standard Report 质控样报告

CheckStandardReport 质控样报告

Chemical Abstract Service 化学文摘社

Chemical Formula 化学分子式

chemical formula=Blanks 化学分子式 = 空白

Check Standard 质控样

Chromatogram Intensity Scale 色谱图强度范围

Chromatogram Report 色谱图报告

Clear Messages 清除消息

Clinical Research 临床研究

Clockwise 顺时针

Collision Energy 碰撞能量

Comment 注释

Company Logo 公司徽标

Compound 化合物

Compound Active Status 化合物活动状态

Compound Calibration Report 化合物校正报告

Compound Calibration Report - Alternate 化合物校正报告 - 备用

Compound Datastore 化合物数据库

Compound Datastore Name 化合物数据库名称

Compound Groups 化合物组

Compound List 化合物列表

Compound Name 化合物名称

Compound Type 化合物类型

CompoundCalibrationReport 化合物校正报告

Compounds 化合物

Conc 浓度

Concentration 浓度

Configuration 配置

Confirm Password 确认密码

Confirmation Report 确认报告

Confirmation Report 2 确认报告 2

ConfirmationReport 确认报告

ConfirmationReport2 确认报告 2

Confirming 1 Ion Ratio 确认 1 离子比率

Confirming 1 Ion Ratio Flag 确认 1 离子比率标记

Confirming 1 Manual Flag 确认 1 手动标记

Confirming 1 Mass 确认 1 质量数

Confirming 1 Range 确认 1 范围

Confirming 1 Response 确认 1 响应

Confirming 2 Ion Ratio 确认 2 离子比率

Confirming 2 Ion Ratio Flag 确认 2 离子比率标记

Confirming 2 Manual Flag 确认 2 手动标记

Confirming 2 Mass 确认 2 质量数

Confirming 2 Range 确认 2 范围

Confirming 2 Response 确认 2 响应

Confirming Ion List 确认离子列表

Confirming Ions 确认离子

Confirming n Ion Ratio 确认 n 离子比率

Confirming n Ion Ratio Flag 确认 n 离子比率标记

Confirming n Manual Flag 确认 n 手动标记

Confirming n Mass 确认 n 质量数

Confirming n Range 确认 n 范围

Confirming n Response 确认 n 响应

Constrain Peak Width 限定峰宽

Contents 目录

Continue 继续

Continue to Method 继续使用方法

Conversion Factor 换算系数

Copy 复制

Copy Down 向下复制

Copy Folder Hierarchy from Drive 从驱动器复制文件夹层次结构

Copy With Headers 带标题复制

Create 创建

Create a New Batch 创建新批次

Create Master Method 创建主方法

Create Method 创建方法

Create New 创建新文件

Create PDF 创建 PDF

Create Projects Directory 创建项目目录

Create Reports 创建报告

Create XLSM 创建 XLSM

Create XML 创建 XML

Creating a Batch Using the Batch Wizard 利用 Batch Wizard 创建批次

Curve Type 曲线类型

Custom 自定义

Custom Reports 自定义报告

Customer Manuals 用户手册

Cutoff 截止值

Cut Confirming Peak 剪切确认峰

CV Test(%) 变异系数测试 （%）

D

Daily RF 日响应因子

Data 数据

Data Review 数据查看

Data Type 数据类型

Databases 数据库

Decimal Places to be Reported 需报告的小数位数

Default(s) 默认

Default Laboratory 默认实验室

Delay Calibration Calculation… 延迟校正计算 …

Delete 删除

Delete Compound from Method 从方法中删除化合物

Delete Condition 删除条件

Delete Group 删除组

Deselect All 取消全选

Detect 检测

Detected RT 检测保留时间

Detection 检测

Detection Method 检测方法

Detector 检测器

Detector Type 检测器类型

Development Batch 开发批次

Device Name 设备名称

Devices 设备

Dilution Factor/Dil Factor 稀释因子

Direct Control 直接控制

Disable 禁用

Disable Cluster Off 禁用峰组关闭

Disable Cluster On 禁用峰组打开

Dismiss 退出

Display Compounds Above Set Limit 显示设置限以上的化合物

Display in Real Time Viewer 在实时查看器中显示

Display Mass Precision 显示质量数精度

Display Quan Flags and Legend 显示定量标记和说明

Display Retention Time Column 显示保留时间列

Displayable Traces 可显示谱图

Displayed Columns 已显示列

Displayed Reports 已显示报告

Don't Update Ion Ratios 不更新离子比率

Done with Settings 完成设置

Down 向下

E

Each 每一边

Edit 编辑

Edit Compound Dependent Parameters 编辑化合物相关性参数

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

Edit Mass Ranges 编辑质量数范围

Edit User 编辑用户

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

EFS 环境与食品安全

Email Address 电子邮件地址

Empty Group 清空组

Enable 启用

Enable Peak Threshold 启用峰阈值

Enable Sample Weight Calculation 启用样品质量计算

Enable Tune Time Tracking 启用调谐时间跟踪

Enable Valley Detection 启用峰谷检测

Enabled 已启用

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

End Threshold 结束阈值

Energy Ramp 能量递变

ENTER 输入

Enter Filter Criteria 输入过滤标准

Equal 相等

Event 事件

Event List 事件列表

Event Types 事件类型

Exact Mass Window 准确质量数窗口

Example/Examples 示例

Example Data 示例数据

Exclude Matching Quan Peaks 排除匹配定量峰

Excluded 已排除

Exclusion Window 排除窗口

Exit 退出

Exit TraceFinder 退出 TraceFinder

Expected RT 预期保留时间

Expected RT(min) 预期保留时间 （分钟）

Expected Width(sec) 预期宽度 （秒）

Experiment Type 实验类型

Export Report 导出报告

Export Results 导出结果

Export SRM Data 导出 SRM 数据

Export to CSV File 导出至 CSV 文件

Extend Calibration(s) 扩展校正

External 外标

Extracted Ion Chromatogram 提取离子色谱图

F

Favorites 收藏夹

File 文件

File Summary Information 文件总结信息

Filename 文件名

Fill Down 向下填充

Filter 过滤 / 过滤器

Filter Reports 过滤报告

Filter Precision 过滤精度

Final Units 最终单位

Find Next 查找下一个

Find Text 查找文本

Find the Peaks 查找峰

Finish 完成

Finish Selection 完成选择

First Peak 首个峰

Flag Values Above Carryover 标记高于残留限的值

Flag Values Above LOR 标记高于报告限的值

Flag Values Above ULOL 标记高于线性上限的值

Flag Values Below LOD 标记低于检测限的值

Flag Values Below LOQ 标记低于定量限的值

Flag Values Between LOD and LOQ 标记介于检测限和定量限之间的值

Flags 标记

Force 强制

Force Cluster Off 强制关闭峰组

Force Cluster On 强制打开峰组

Forensic Toxicology 法医毒物学

Full 全扫描

Full Name 全名

Full Sequence Submission 完整序列提交

Full Version Single License 单许可证完整版

Function Button 功能按钮

G

General 常规

Generate 生成

Generate Only 仅生成

Generate XLSM 生成 XLSM

Get from Xcalibur Method 使用 Xcalibur 方法

Glossary 术语

Go 运行

Groups 组

H

Handle Confirming Ions 处理确认离子

Height 峰高

Help 帮助

Help Options 帮助选项

Hide/Show Details 隐藏 / 显示详细信息

High Density Calibration Report 高密度校正报告

High Density Internal Standard Report 高密度内标报告

High Density Internal Standard Report Long 高密度内标长报告

High Density Sample Report 1 高密度样品报告 1

High Density Sample Report 1 Long 高密度样品长报告 1

High Density Sample Report 2 高密度样品报告 2

High Density Sample Report 2 Long 高密度样品长报告 2

High Density Sample Report 3 高密度样品报告 3

High Density Sample Report 3 Long 高密度样品长报告 3

HighDensitySampleReport1Long 高密度样品长报告 1

HighDensitySampleReport2Long 高密度样品长报告 2

HighDensitySampleReport3Long 高密度样品长报告 3

HighDensitySampleReport4 高密度样品报告 4

HighDensitySampleReport5 高密度样品报告 5

Highest Peak 最高峰

Hold Autosampler 暂停自动进样器

Home 主页

Hydrolysis 水解

I

Identification 识别

Identify the Peaks 识别峰

Ignore 忽略

Import 导入

Import Compounds 导入化合物

Import Published Method 导入已发布的方法

Import Samples 导入样品

Import Xcalibur Processing Method 导入 Xcalibur 处理方法

Imported Samples Will Be 导入样品将被

Include 包括

Include Compound Peak Spectrum as Reference Spectrum 包括化合物峰质谱图作为参考质谱图

Include Confirming Ions 包括确认离子

Include Confirming Ions/Number Of Confirming Ions 包括确认离子 / 确认离子数

Included Compounds 已包括化合物

Index 索引

Inj Conc/Injection Concentration 进样浓度

Inj Units/Injection Units 进样单位

Inj Vol/Injection Volume 进样体积

Injection Amount 进样量

Insert 插入

Insert Copy Sample 插入复制样品

Insert Sample 插入样品

Inserted at the Selected Row 插入到所选行

Installed Reports 已安装报告

InstallShield Wizard 安装保护向导

Instrument 仪器

Instrument Log 仪器日志

Instrument Method 仪器方法

Instrument Name 仪器名称

Instrument View 仪器视图

Integration Mode 积分模式

Internal 内标

Internal Average RF 内标平均响应因子

Internal Standard(s) 内标

Internal Standard Summary Report 内标总结报告

Internet Options 互联网选项

Invalid Compound Datastore Not Saved 无效化合物数据库不保存

Ion Coelution(min) 离子共洗脱 （分钟）

Ion Overlay 离子重叠

Ion Range Calc Method 离子范围计算方法

Ion Ratio Calculation Method (In SRM Experiment) 离子比率计算方法 （在 SRM 实验中）

Ion Ratio Failure Report 离子比率未通过报告

Ion Ratio Window(%) 离子比率窗口 （%）

Ion Ration Parameter 离子比率参数

Ionization 离子化

IS Amt 内标量

IS Resp 内标响应

IS Response 内标响应

ISTD 内标

ISTD Matching 内标匹配

ITAdmin IT 管理员

L

Lab Name/Laboratory Name 实验室名称

LabDirector 实验室主任

Label Area 标记峰面积

Label Height 标记峰高

Label Retention Time 标记保留时间

Label Signal to Noise 标记信噪比

Laboratory Name 实验室名称

Launch Legacy Data Converter 启动遗留数据转换器

Launch Library Browser 启动库浏览器

Launch Qual Browser 启动定性浏览器

Lens 透镜

Level 水平

Library Entry 库条目

Library Manager 库管理器

Library Results 谱库结果

License Activation 许可证激活

License Text 许可证文本

Limit Library Hits 限值谱库匹配数

Limit of Detection (LOD) 检测限 （LOD）

Limit of Quantitation (LOQ） 定量限 （LOQ）

Limit of Reporting (LOR) 报告限 （LOR）

Limit the Retention Time Range 限制保留时间范围

Limits 限制

Linear 线性

Liquid 液体

List topics 列出主题

Load Compound Datastore 加载化合物数据库

Local Method 本地方法

Local Method View 本地方法视图

LOD Detection Limit LOD，检测限

Log Off 注销

Login 登录

LOQ Quantitation Limit LOQ，定量限

LOR 报告限

M

m/z 质荷比

m/z Window 质荷比窗口

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

Make New Folder 创建新文件夹

Manage Calibration Levels 管理校正水平

Manual 手动

Manual Flags 手动标记

Manual Injection 手动进样

Manual Integration 手动积分

Manual Integration Report 手动积分报告

Manual Integration Settings 手动积分设置

Manual Peak Area 手动峰面积

Manual Peak Height 手动峰高

Manual RT 手动保留时间

Manuals 手册

Map Raw Files to Samples 选择样品的原始文件

Mass 质量数

Mass Precision 质量数精度

Mass Range 质量数范围

Mass Tolerance 质量数容许偏差

Master Method 主方法

Master Method View 主方法视图

Match Probability 匹配概率

Matrix Blank 基质空白

Max Amount% Difference 最大百分比偏差量

Max Amt Diff(%) 最大量偏差 （%）

Max Conc 最大浓度

Max Recovery(%) 最大回收率 （%）

Max RF Diff(%) 最大响应因子偏差 （%）

Max RSD(%) 最大相对标准偏差 （%）

Max RT(+min) 最大保留时间 （+ 分钟）

Maximum Response 最大响应

MDL 方法检出限

Mean RF 平均响应因子

Measurement Unit 测量单位

Method Val/Meth Val 方法验证

Method 方法

Method Compound Data 方法化合物数据

Method Detection Limit 方法检测限

Method Development 方法开发

Method Forge 方法向导

Method Integration 方法积分

Method Integration Settings 方法积分设置

Method Peak Area 方法峰面积

Method Peak Height 方法峰高

Method Report 方法报告

Method RT 方法保留时间

Method Selection 方法选择

Method Template 方法模板

Method Template Editor 方法模板编辑器

Method Template Selection 方法模板选择

Method Templates to be Converted 待转换方法模板

Method Validation 方法验证

Method Validation Report 方法验证报告

Method View 方法视图

Method(s)

Methods to be Converted 待转换方法

Min Peak Height(S/N) 最小峰高 （信噪比）

Min Peak Width 最小峰宽

Min Recovery(%) 最小回收率 （%）

Min RF 最小响应因子

Min RT(–min) 最小保留时间 （– 分钟）

Minimum Response 最小响应

Modify Calibrations or Active Compounds by Group 通过组修改校正或活动化合物

Modify Columns 修改列

Move Batch 移动批次

Move Down 下移

Move Panel Left 左移窗格

Move Panel Right 右移窗格

Move Sample Down 下移样品

Move Sample Up 上移样品

Move to Bottom 移至底部

Move to Top 移至顶部

Move Up 上移

MP 匹配概率

MS 质谱仪

MS Order 质谱级数

MS2 Search Library MS2 检索库

MS3 Search Library MS3 检索库

MSD 基质加标重复

MSMSD Report 基质加标 / 基质加标重复报告

Multiplet Resolution 多重分辨率

Multiplexing 多通道

Multiplexing Channels 多通道

N

Name of New Compound 新建化合物名称

Name the Master Method 命名主方法

Nearest RT 最近保留时间

Negative 负极 / 阴性

Negative Peaks 负峰

Negative Report 阴性样品报告

New 新建

New Batch 新建批次

New Compound Datastore 新建化合物数据库

New Data Available - Refresh 新数据可用 - 刷新

New Instrument Method 新建仪器方法

New Name 新名称

New Sample List 新建样品列表

Next 下一步

Next Available Batch 下一可用批次

Next Available Sample 下一可用样品

NIST 08 MS Search and AMDIS Setup NIST 08 质谱检索和 AMDIS 设置

NIST Library NIST 库

NIST MS Search NIST 质谱图检索

No 否

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

No Data 没有数据

No Specified Retention Time 无指定保留时间

Noise Method 噪声方法

NonBlanks 非空白

None 无

Notes 注释

Not Available 不可用

Number of Confirming Ions 确认离子数

Number of Scans to Subtract 扣除的扫描数

O

Off 关闭 / 关机

OK 确定

On 打开 / 开机

Only Select Top Peaks 仅选择最高峰

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

Only Show Samples Relevant... 仅显示样品相关 ...

Open 打开

Open Batch 打开批次

Open Batch Template 打开批次模板

Open Chromatograph Reference Sample 打开色谱图参考样品

Open Compound Datastore 打开化合物数据库

Open Instrument Method 打开仪器方法

Open Master Method 打开主方法

Open Method 打开方法

Open Qual Browser 打开定性浏览器

Operand 操作数

Operator 运算符

Optional Features 可选特性

Or Conditions Or 条件

Origin 原点

Overwrite 覆盖

P

Password 密码

Paste 粘贴

Paste Confirming Peak 粘贴确认峰

Path 路径

Pause 暂停

Pause Queue 暂停队列

Peak Area 峰面积

Peak Detection Defaults 峰检测默认值

Peak Detection Parameters 峰检测参数

Peak Detection Settings 峰检测设置

Peak Height(%) 峰高 （%）

Peak Labels 峰标签

Peak Noise Factor 峰噪声因子

Peak RT (min) 峰保留时间 （分钟）

Peak S/N Cutoff 峰信噪比截止值

Peak to Peak 峰对峰

Pending 待定

Percentage 百分比

Phone Number 电话号码

Polarity 极性

Position 位置

Positive 正极

Post-run System State 运行后系统状态

P-P Threshold 峰对峰阈值

Precursor Mass 母离子质量数

Pres 压力

Pres 1 压力 1

Pres 2 压力 2

Pressure 压力

Previous 上一步

Print 打印

Print Report 打印报告

Priority 优先

Priority Sequence 优先序列

Process Data 处理数据

Processing 处理

Processing Configuration File 处理配置文件

Product Mass 子离子质量数

Project Administration 项目管理

Project(s) 项目

Promote to Separate Quan Peak 成为单个定量峰

Published Master Methods 已发布主方法

Q

QAQC 质保质控

QAQC Flags QAQC 标记

QC 质控

QC Amount QC 量

QC Check 质控样

QC Levels QC 水平

QC Samples QC 样品

QED NIST Library QED NIST 库

QED Spectra QED 质谱图

QIon 定量离子

Quadratic 二次方

Qual Browser 定性浏览器

Qual Browser Help 定性浏览器帮助

Qual Data 定性数据

Qual Ion 定性离子

Qual Ion Response 定性离子响应

Qual Library 定性库

Qual Mode 定性模式

Qualification 定性

Qualitative Peak Processing 定性峰处理

Qualitative Peak Processing Template 定性峰处理模板

Qualitative Summary Report 定性总结报告

Quality Control 质控样

Quan 定量

Quan Compounds 定量化合物

Quan Flags 定量标记

Quan Ion 定量离子

Quan Ion Response 定量离子响应

Quan Ion RT 定量离子保留时间

Quan Limits Flags 定量限标记

Quan Mass 定量质量数

Quan Mode 定量模式

Quan Peak 定量峰

Quan Peak 1 定量峰 1

Quan Peak Chromatogram 定量峰色谱图

Quan Peak m/z 定量峰质荷比

Quan Peak Response 定量峰响应

Quan Peak RT 定量峰保留时间

Quan Report Settings 定量报告设置

Quantification Data 定量数据

Quantitation Report - 2 定量报告 -2

QuantitationReport 定量报告

Queue-level 队列 - 水平

Queues 队列

Quick Acquire Sample 快速采集样品

Quick Acquisition 快速采集

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

Quick Mode 快速模式

Quick Reference Guide 快速参考指南

R

R^2 Threshold R^2 阈值

Range(s) 范围

Range Calc Level 范围计算水平

Range Calc Method 范围计算方法

Range-Detected 范围 - 检测

Range-Integrated 范围 - 积分

Rank 排序

Ratio 比率

Raw Data File to Associate 关联的原始数据文件

Raw File Selection 原始文件选择

Raw Filename 原始文件名

READY 就绪

Ready to Acquire 准备采集

Real Time Status 实时状态

Real Time Viewer 实时查看器

Recent Files 最近文件

Reference Chromatogram and Spectra 参考色谱图和质谱图

Reference Compound 参考化合物

Reference Peak 参考峰

Refresh 刷新

Reinject Selected Samples 所选样品重新进样

Reinject This sample 重新进样

Relative 相对

Relative Response Factor 相对响应因子

Remove All Empty Child Folders 移除所有空子文件夹

Remove Compound 移除化合物

Remove Confirming Ion 移除确认离子

Remove from Group 从组中移除

Remove Peak 移除峰

Remove Pending Batch 移除待定批次

Remove Pending Batches 移除待定批次

Remove Pending Samples 移除待定样品

Remove Project 移除项目

Remove Qual Peak 移除定性峰

Remove Quan Peak 移除定量峰

Remove Sample 移除样品

Remove Selected Peak 移除所选峰

Remove Selected Samples 移除所选样品

Remove User 移除用户

Rename 重命名

Rename Group 重命名组

Repeat Sample Count 重复样品计数

Repetitive 重复性

Replicate Original Project/Subproject 复制原始项目 / 子项目

Report All Compounds Listed in Configuration File

报告配置文件中列出的所有化合物

Report Concentration 报告浓度

Report Description 报告描述

Report Name 报告名称

Report Noise As 将噪声报告为

Report Options 报告选项

Report Selection 报告选择

Report Selection Confirmation 报告选择确认

Report Semi-Quantitative Result 报告半定量结果

Report Title 报告标题

Report Type 报告类型

Report View 报告视图

Reporting 报告

Report(s) 报告

Reset Password 重置密码

Reset Scaling 重置缩放比例

Resp Ratio 响应比率

Response 响应

Response Factor 响应因子

Response Via 响应方式

Resume Queue 继续队列

Retention Time 保留时间

Reverse Search Index 逆向检索索引

RF%D 响应因子百分比偏差

RMS 均方根

Role 职务

Rotate View 横向视图

RSD 相对标准偏差

RSI 反向检索索引

RT 保留时间

RT Window 保留时间窗口

RT （min） 保留时间 （分钟）

RTV Display Traces RTV 显示谱图

S

S/N Threshold 信噪比阈值

Sample Amt 样品量

Sample Comment 样品注释

Sample Conc 样品浓度

Sample Concentration 样品浓度

Sample Controls 样品控制

Sample Definition 样品定义

Sample File 样品文件

Sample ID 样品标识号

Sample Import Tool 样品导入工具

Sample Level 样品水平

Sample Name 样品名称

Sample Response 样品响应

Sample RT 样品保留时间

Sample Type 样品类型

Sample Units 样品单位

Sample Volume 样品体积

Sample Weight 样品质量

Samples 样品

Samples List 样品列表

Save 保存

Save As 另存为

Save As Compound Datastore 另存为化合物数据库

Save as Type 保存为类型

Save Batch As 将批次另存为

Save Changes 保存更改

Save Compound Datastore 保存化合物数据库

Save Instrument Method 保存仪器方法

Save Master Method 保存主方法

Save Method Template 保存方法模板

Scan Intensity 扫描强度

Scan Mode 扫描模式

Screening Method 筛选方法

Search 搜索

Search Index 检索索引

Security Groups 安全组

Select 选择

Select a Custom Template 选择自定义模板

Select a Report 选择报告

Select All 全选

Select Batch Location 选择批次位置

Select Calibration File to Use 选择要使用的校正文件

Select Compounds from CDS 从化合物数据库中选择化合物

Select Compounds to Add 选择待添加的化合物

Select Experiment Types to Display 选择显示的实验类型

Select Method 选择方法

Selected Ion Monitoring 选择离子监测

Selected Reaction Monitoring 选择反应监测

Semi Quantitative 半定量

Send RT to Method 将保留时间发送到方法

Send to Xcalibur Method 发送至 Xcalibur 方法

Sensitivity 灵敏度

Separate Ion Overlay Display 分隔离子重叠显示

Set 设置

Set Chromatogram Reference Sample 设置色谱图参考样品

Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Compound 对化合物中所有确认峰应用离子比率

Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Method 对方法中所有确认峰应用离子比率

Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound 对化合物所有峰应用峰窗口设置

Set Peak Windows Settings to All Peaks in Method 对方法中所有峰应用峰窗口设置

Set Reference Sample 设置参考样品

Set This Filter on All Peaks in This Compound 对化合物所有峰设置该过滤器

Set This Filter on All Compounds 对所有化合物设置该过滤器

Set This Mass as New Quan Peak 设置该质量数为新定量峰

Set This Mass as Quan Mass 设置该质量数为定量质量数

Set This Spectral Peak as Confirming 设置该质谱峰为确认峰

Shade Row when Sample is Outside of Evaluation Criteria 样品超评估标准时对该行加阴影

Shortcut Menu 快捷菜单

Shoulders Off 肩峰关闭

Shoulders On 肩峰打开

Show 显示

Show Chromatogram on Quantitation Report 定量报告显示色谱图

Show Details 显示详细信息

Show Peak Info 显示峰信息

Show Quan Peaks Only 仅显示定量峰

Showing 显示

SI 检索索引

Signal 信号

Single-Detected 单个 - 检测

Single Sample Submission(Intelligent Sequencing) 单样品提交 （智能序列）

Single Sample Submission 单样品提交

Smoothing 平滑

Solid 固体

Solvent 溶剂

Solvent Blank 溶剂空白

Solvent Blank Report 溶剂空白报告

Sort by Alphabetical 按字母顺序排序

Sort by Compound Name 按化合物名称排序

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

Source Folder 原始文件夹

Source Version 原始版本

Specify Default Ion Ratio Ranges 指定默认离子比率范围

Specimen 定量样品

Specimen/Qual 样品 / 定性

Spectra 质谱图

Spectrum 质谱图

Spectrum Maximum 质谱最高峰

Standard 标准

Standard Reports 标准报告

Standard Type 标样类型

Standby 待机

Start 开始 / 启动

Start Device 启动设备

Start m/z 起始质荷比

Start/End RT (min) 开始 / 结束保留时间，分钟

Start Threshold 起始阈值

Start When Ready 准备就绪时启动

Starting Vial Position 起始样品瓶位置

Status 状态

Status Color Codes 状态颜色代码

Std Bracket 标曲更新

Std Response 标准响应

Std RT 标准保留时间

Stepoff Value 放弃值

SteroidAnalysisReport 类固醇分析报告

Stop 停止

Stop Active Batch 停止活动批次

Stop All Batches 停止所有批次

Stop Batch 停止批次

Storage Location 保存位置

Submit 提交

Submit Batch 提交批次

Submit Options 提交选项

Submit Selected Samples 提交所选样品

Subproject 子项目

Supervisor 主管

Surrogate 替代物

Surrogate Recovery Report 替代物回收率报告

Swap with Quan Peak 和定量峰交换

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

T Amount 理论量

Tailing Factor 拖尾因子

Tangent Skim 切线撇去

Target Compound(s) 目标化合物

Target Default Project 目标默认项目

Target Drive 目标驱动器

Target Ratio 目标比率

Target Screening (ToxID) 目标筛选 （ToxID）

Target Screening Long Report 目标筛选长报告

Target Screening Report(s) 目标筛选报告

Target Screening Settings 目标筛选设置

Target Screening Summary Report 目标筛选总结报告

Target Version 目标版本

Technician 技术人员

Template 模板

Template Layout 模板布局

Template Method Information 模板方法信息

Template Name 模板名称

Template Selection 模板选择

Templates 模板

Tension 接近张力

Theo Amt/Theoretical Amount 理论量

Theo Conc 理论浓度

Thermo Foundation Instrument Configuration

Thermo Foundation 仪器配置

Thermo Library Manager Thermo 库管理器

Thermo Scientific Instrument Thermo Scientific 仪器

Thermo Xcalibur Instrument Setup Thermo Xcalibur 仪器设置

Thermo Xcalibur Qual Browser Thermo Xcalibur 定性浏览器

Threshold/Lower Limit 阈值 / 下限

TIC 总离子流图

TIC Report 总离子流图报告

TIC Summary Report 总离子流总结报告

Time (Min) 时间 （分钟）

Time/Event/Value 时间 / 事件 / 值

Times 时间

Tools 工具

Total Batch Rows 总批次行

Total Response 总响应

Total Rows 总行数

Total Scan 全扫描

Trace 谱图

TraceFinder Acquisition Quick Reference Guide

TraceFinder 采集快速参考指南

TraceFinder Administrator Quick Reference Guide

TraceFinder 管理员快速参考指南

TraceFinder Analysis Quick Reference Guide

TraceFinder 分析快速参考指南

TraceFinder Custom Reports Tutorial TraceFinder 自定义报告教程

TraceFinder Help TraceFinder 帮助

TraceFinder Legacy Data Converter TraceFinder 遗留数据转换器

TraceFinder Power Modules TraceFinder 功能模块

TraceFinder Shortcut Menus Quick Reference Guide TraceFinder 快捷菜单快速参考指南

TraceFinder User Guide TraceFinder 用户手册

Traces to Display in Real Time Viewer 显示在实时查看器中的谱图

Transcend Systems with Xcalibur Software User Guide 带 Xcalibur 软件的 Transcend 系统用户手册

Truncated 截取

Tune 调谐

Tune Compound 调谐化合物

Tune Time Tracking Options 调谐时间跟踪选项

Turn Device Off 关闭设备

Turn Device On 开启设备

Turn Device Standby 使设备待机

Type of Compound to Add 添加化合物的类型

U

ULOL Linearity Limit 线性上限

Undo Changes 撤销更改

Undo Last Paste 撤销上次粘贴

Unextracted 未提取

Units 单位

Unknown 未知样 / 未知

Unknown Samples 未知样

Up 向上

Update 更新

Update Confirming Ion Ratios with This Spectrum 利用该质谱图更新确认离子比率

Update Instrument Method? 更新仪器方法?

Update Instrument/Trace Selections 更新仪器 / 谱图选择

Update Ion Ratios Using This Reference Spectrum 利用该参考谱图更新离子比率

Update Ion Ratios Using This Spectrum 利用该质谱图更新离子比率

Update Scan Filters for All Peaks 更新所有峰的扫描过滤器

Update Spectrum Only 仅更新质谱图

Update Target Ion Ratio Values 更新目标离子比率值

Upper Limit 上限

Upper Limit of Linearity(ULOL) 线性上限（ULOL）

Use 使用

Use Alternate Calibration Report Format 使用备用校正报告格式

Use an Existing Raw Data File 使用现有的原始数据文件

Use as RT Reference 用作保留时间参考

Use Autosampler 采用自动进样器

Use Average Scan 使用平均扫描

Use Data Dependent Scans 使用数据依赖扫描

Use Full MS Scan to Confirm 使用全 MS 扫描以确认

Use Genesis Algorithm for Qual Processing 采用 Genesis 算法进行定性处理

User Guide 用户手册

Use Level 使用水平

Use Local Method Peak Detection Settings 使用本地方法峰检测设置

Use Method Forge 使用方法向导

Use Scan at Peak Apex 使用峰顶处扫描

Use the Default Template 使用默认模板

Use These Libraries 使用这些库

Use This Spectrum for Compound Reference Spectrum 将该质谱图用作为化合物参考质谱图

Use User Peak Detection Settings 使用用户定义的峰检测设置

User 用户

User Administration 用户管理员

User Info 用户信息

User Interface Options 用户界面选项

User Listing 用户列表

User Name 用户名

User Security 用户安全

Username 用户名

UV 紫外

V

Valid Values 有效值

Valley Rise(%) 峰谷上升 （%）

Valley S/N 峰谷信噪比

Value 值

Vial Position 样品瓶位置

View Last File in Qual Browser 在定量浏览器中查看上一次的文件

View Log 查看日志

View Only 仅查看

View Width(min) 视图宽度 （分钟）

W

Wavelength Range 波长范围

Weighted Average 加权平均

Weighting 加权

Welcome to TraceFinder Help 欢迎使用 TraceFinder 帮助

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

What Raw File Would You Like to Use 您希望使用什么原始文件

Window 窗口

Window(+/-%) 窗口 （+/-%）

Window(sec) 窗口 （秒）

Window Type 窗口类型

Window:% 窗口：%

X

Xcalibur Method to Import 导入的 Xcalibur 方法

XIC Filter XIC 过滤器

Y

Yes 是

Yes, with Background Subtraction 是，使用背景扣除

Z

Zoom 缩放

索引

符号与字母

.csv，已定义 3
.meth，已定义 3
.pmd，已定义 3
.raw，已定义 3
.xml, 已定义 3
background scans 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 73
  方法开发 145
% Test 参数 164
%CV 参数 316
%Diff 参数 316
%RSD 参数 316

A

Account Number 参数 42
Acquire a new raw data file 参数 98
Acquisition List 页面， Master Method View 115
Acquisition 命令 33
Active View 页面 361
Active 参数
  Data Review 样品列表 316
  Identification 页面 120
Actual RT 参数 315
Add a condition 参数 436
Add compound 命令 57
Add Confirming Ion 命令 59
Add Group 命令 177
Add Quan Peak 命令 58
Add Sample 命令
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Add This Mass as New Confirming Ion 命令 156
Add this mass to existing quan mass ranges 命令 156
Add to CDS 命令 100
Add User 参数 42
Adduct 1–*n* 参数 189
Amount 参数 160
Analysis 命令 33
And conditions 参数 436
Area noise factor 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 75
  Detect 页面 147
Area scan window 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 148
Area tail extension 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 148
Area Threshold，事件类型 79
Area 参数 315
Assay Type 参数
  Batch Wizard 301
  Master Method View 113
Associate a Raw Data File 参数 101
Associate a Raw Data File 对话框 101
Available Methods 参数 301
Available Templates 参数 301
Avalon Event List 对话框 78
Avalon 检测算法 69
Auto TSRM Update 参数 245
Autocalc Initial Events 参数， Avalon 150
Automatically create the master method 参数 97
安装 NIST 和 QED 库 14
安装 TraceFinder 10

B

Background subtraction range option 参数 113
Barcode Actual 参数 277
Barcode Expected 参数 277
Baseline window 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 75
  Detect 页面 147
Batch Level 参数
  报告配置 63
  方法开发 179
Batch view 267
Batch/Template Selection 选择 222
Best match method 参数 197
Browse in Raw File 命令 277
Bunch Factor，事件类型 79
报告
  Analysis 模式 350
  查看横向 PDF 格式的报告 390
  列出 6
  配置 62

数据采集模式 235
样品 PDF 390
已定义的标记 389
报告格式，指定 178
背景扣除选项 110
标准报告，已列出 6

C

cal1-cal*n* 参数 162
Calc Amt 参数 315
Calculate Concentration As 参数 184
Calculation Based On 参数 189
Calculation Type 参数 275–276
Calibration Curve Type 命令 335
Calibration Levels 页面， Master Method View 161
Calibration method 参数 197
Calibration 参数 245
Calibration 页面
Compounds 页面 159
QAQC 页面 170
Calibrator 样品类型，已定义 261
Cancel Changes 参数 43
Carryover limit 参数 169
CAS No 参数， Identification 页面 120
Category 参数
Acquisition List 117
Compound Datastore 54
Channel 参数
Batch View 277
Data Review 316
Chemical Formula 参数
Acquisition List 117
Compound Datastore 54
Collision Energy 参数
Acquisition List
定量峰 117
确认离子 118
Compound Datastore
定量峰 55
确认离子 55
color codes, Sample Definition 视图 234
Comment 参数
Batch View 277
Data Review 316
Company Logos 参数 188
Company Name 参数 188
Compound Datastore, 管理 50
Compound Datastore 视图 53
Compound Name 参数
Acquisition List 117
Compound Datastore 54
Compound Type 参数
Calibration （校正） 160
Identification 页面 120
Compound 参数
Calibration 页面 170
QC Levels 页面 164
Compounds 页面， Master Method View 114
Configuration 导航窗格 36
Configuration 命令 33
Confirming Ion List 命令 331
Confirming *n* Ion Ratio Flag 参数 364
Confirming *n* Ion Ratio 参数 364
Confirming *n* Manual Flag 参数 364
Confirming *n* Mass 参数 364
Confirming *n* Range 参数 364
Confirming *n* Response 参数 364
Constrain Peak Width 参数
Genesis
Application Configuration （应用程序配置） 72
Detect 页面 144
ICIS
Application Configuration （应用程序配置） 75
Detect 页面 147
Continue to Method 命令 100
Conversion Factor 参数 275–276
Copy down 命令 431
Copy With Headers 命令
Acquisition 模式 234
Batch View 样品列表 278
Create Master Method 对话框 91
Create Method 参数 89
Create New 命令 311
Create XLSM 参数
Batch Template Editor 382
Master Method View 179
Create XML 参数
Master Method View 179
CV Test (%) 参数 173
Curve Type 参数
Calibration 页面 160
Method Template Editor 197
Cutoff 参数 169
参考质谱图 347
参数
Background Scans （背景扫描数） 145
Application Configuration （应用程序配置） 73
% Test （% 测试） 164
%CV （变异系数百分比） 316
%Diff （百分比偏差） 316
%RSD （相对标准偏差百分比） 316
Account Number （账号） 42
Acquire a New Raw Data File （采集新的原始数据文件） 98
Active （活动）
Data Review 样品列表 316
Identification 页面 120
Actual RT （实际保留时间） 315
Add A Condition （添加条件） 436

Add User （添加用户） 42
Adduct 1–*n* 189
Amount （量） 160
And Conditions （And 条件） 436
Area Noise Factor （峰面积噪声因子）
  Application Configuration （应用程序配置） 75
  Detect 页面 147
Area Scan Window （峰面积扫描窗口）
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 148
Area Tail Extension （峰面积尾扩展）
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 148
Area （峰面积） 315
Assay Type （实验类型）
  Batch Wizard 301
  Master Method View 113
Associate a Raw Data File 101
Available Methods （可用方法） 301
Available Templates （可用模板） 301
Auto TSRM Update （自动更新定时 SRM 信息） 245
Autocalc Initial Events， Avalon 150
Automatically Create the Master Method （自动创建主方法） 97
Background Subtraction Range Option （背景扣除范围选项） 113
Barcode Actual （实际条形码） 277
Barcode Expected （预期条形码） 277
Baseline Window （基线窗口）
  Application Configuration （应用程序配置） 75
  Detect 页面 147
Batch Level （批次水平）
  报告配置 63
  方法开发 179
Best Match Method （最佳匹配方法） 197
cal1-cal*n* 162
Calc Amt （计算量） 315
Calculate Concentration As （浓度计算为） 184
Calculation Based On （计算基于） 189
Calculation Type （计算类型） 275–276
Calibration Method （校正方法） 197
Calibration （校正） 245
Cancel Changes （取消更改） 43
Carryover Limit （残留限） 169
CAS No， Identification 页面 120
Category
  Acquisition List 117
Category （类别）
  Compound Datastore 54
Channel （通道）
  Batch View 277
  Data Review 316
Chemical Formula （化学分子式）
  Acquisition List 117
  Compound Datastore 54
Collision Energy （碰撞能量）
  Acquisition List
    定量峰 117
    确认离子 118
  Compound Datastore
    定量峰 55
    确认离子 55
Comment （注释）
  Batch View 277
  Data Review 316
Company Logo （公司徽标） 188
Company Name （公司名称） 188
Compound Name （化合物名称）
  Acquisition List 117
  Compound Datastore 54
Compound Type （化合物类型）
  Calibration （校正） 160
  Identification 页面 120
Compound （化合物）
  Calibration 页面 170
  QC Levels 页面 164
Confirming *n* Ion Ratio （确认 n 离子比率） 364
Confirming *n* Manual Flag （确认 n 手动标记） 364
Confirming *n* Range （确认 n 范围） 364
Confirming*n* Ion Ratio Flag （确认 n 离子比率标记） 364
Confirming*n* Mass （确认 n 质量数） 364
Confirming*n* Response （确认 n 响应） 364
Constrain Peak Width （限定峰宽）
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    Detect 页面 147
Conversion Factor （换算系数） 275–276
Create Method （创建方法） 89
Create PDF （创建 PDF）
  Batch Template Editor 382
  Master Method View 179
Create XLSM （创建 XLSM）
  Batch Template Editor 382
  Master Method View 179
Create XML （创建 XML）
  Master Method View 179
CV Test (%) （变异系数测试， %） 173
Curve Type （曲线类型）
  Calibration 页面 160
  Method Template Editor 197
Cutoff （截止值） 169
创建 XML
  Batch Template Editor 382
Decimal Places to Be Reported （需报告的小数位） 183
Delete Condition （删除条件） 436

Detection Method （检测方法）
Avalon
Application Configuration （应用程序配置） 77
Detect 页面 150
Genesis
Application Configuration （应用程序配置） 72
Detect 页面 144
ICIS
Application Configuration （应用程序配置） 75
Detect 页面 147
Detection Type， Times 页面 135
Detector （检测器） 141
Device Name （设备名称）
Acquisition 模式 243
Batch View 295
Dilution Factor （稀释因子） 277
Display Compounds Above Set Limit （显示设置限以上的化合物） 183
Display Quan Flags and Legend （显示定量标记和说明） 184
Displayed Reports （已显示报告） 66
打开定性浏览器 89
Edit User （编辑用户） 42
Email Address （电子邮件地址） 42
Enable Peak Threshold （启用峰阈值） 197
Enable Tune Time Tracking （启用调谐时间跟踪） 184
Enable Valley Detection （启用峰谷检测）
Application Configuration （应用程序配置） 72
方法开发 144
Enable， Ratios 页面 158
Enabled （启用） 42
End RT， Time 页面 135
Energy Ramp （能量递变）
Application Configuration （应用程序配置） 55
方法开发 118
Event （事件） 78
Exact Mass Window （准确质量数窗口） 189
Example， Reports 页面 179
Exclude Matching Quan Peaks （排除匹配定量峰） 198
Excluded （已排除） 316
Exclusion Window （排除窗口） 198
Expected RT， Times 页面 135
Expected RT （预期保留时间） 315
Expected Width （预期峰宽）
Application Configuration （应用程序配置） 72
方法开发 144
Experiment Type （实验类型）
Acquisition List 117
Compound Datastore 54
Export SRM Data （导出 SRM 数据） 89
Filename （文件名）
Batch View 275–276
Data Review 315
Filter，检测 141
Filter （过滤器） 141
Final Units （最终单位） 277
Flag Values Above Carryover （标记高于残留限的值） 184
Flag Values Above LOR （标记高于报告限的值） 184
Flag Values Above ULOL （标记高于线性上限的值） 184
Flag Values Below LOD （标记低于检测限的值） 184
Flag Values Below LOQ （标记低于定量限的值） 184
Flag Values Between LOD and LOQ （标记介于 LOD 和 LOQ 之间的值） 184
Flags （标记） 315
Full Name （全名） 42
Generate Only （仅生成） 363
Height （峰高） 315
Import Published Method （导入已发布的方法） 89
Import Xcalibur Processing Method 参数 99
Import （导入） 66
Include Compound Peak Spectrum as Reference Spectrum （包括化合物峰质谱图作为参考质谱图） 197
Include Confirming Ions 197
Injection Amount （进样量） 98
Injection Concentration （进样浓度） 364
Injection Units （进样单位） 364
Injection Volume （进样体积）
Batch View 275–276
方法开发 113
样品列表 315
Installed Reports （已安装报告） 66
Instrument Method （仪器方法）
Batch View 277
General 页面 113
Method Forge 98
Integration Mode （积分模式） 315
Ion Coelution （离子共流出）
Ratios 页面 158
Ion Coelution （离子共洗脱）
Application Configuration （应用程序配置） 71
Ion Range Calc Method （离子范围计算方法） 113
Ion Ratio Window(%) （离子比率窗口， %） 189
Ionization
Acquisition List 117
Ionization （离子化）
Compound Datastore 54
IS Amt （内标量） 316
IS Resp （内标响应） 316
ISTD Matching （内标匹配） 198
ISTD （内标） 160
极性
Compound Datastore 55
Lab Name （实验室名称） 113
Laboratory Name （实验室名称） 188
Lens （透镜）
Application Configuration （应用程序配置） 55
方法开发 117
Level （水平）
Batch View 275–276

Data Review 315
QC Levels 页面 164
Limit Library Hits （限制谱库匹配数） 197
Limit the Retention Time Range （限制保留时间范围） 197
LOD (Detection Limit) （LOD，检测限） 169
Login （登录） 12
LOQ (Quantitation Limit) （LOQ，定量限） 169
m/z Window 188
Manual Flags （手动标记） 363
Manual Injection （手动进样） 98
Mass Precision （质量数精度） 113
Mass Tolerance （质量数容许偏差） 114
Mass （质量数）
定量峰
Acquisition List 117
Compound Datastore （化合物数据库） 55
确认离子
Acquisition List 118
Compound Datastore 55
Max Amt Diff (%) （最大量偏差， %） 170
Max Conc （最大浓度） 172
Max Recovery (%)， ISTD 页面 173
Max RF Diff (%) （最大响应因子偏差， %） 171
Max RSD (%)， Calibration 页面 170
Max RT (+min)， ISTD 页面 173
Measurement Unit （测量单位） 188
Method （方法）
Matrix Blank 页面 172
Solvent Blank 页面 174
Min Peak Height (S/N) （最小峰高，信噪比）
Genesis
Application Configuration （应用程序配置） 72
Detect 页面 144
ICIS
Application Configuration （应用程序配置） 75
Detect 页面 147
Min Peak Width （最小峰宽）
Application Configuration （应用程序配置） 76
Detect 页面 147
Min Recovery (%) （最小回收率， %）
ISTD 页面 173
Min RF （最小响应因子） 171
Min RT (–min) （最小保留时间， – 分钟） 173
Modify Calibrations or Active Compounds by Group （通过组修改校正或活动化合物） 309
MS2 Search Library （MS2 检索库） 188
MS3 Search Library （MS3 检索库） 188
Multiplet Resolution （多重分辨率）
Application Configuration （应用程序配置） 76
Detect 页面 147
Multiplexing Channels （多通道） 233
Name the Master Method （命名主方法） 97
New Instrument Method 89
New Sample List （新建样品列表） 89
No Specified Retention Time （无指定保留时间） 189
Noise Method （噪声方法）
Application Configuration （应用程序配置） 75
Detect 页面 147
Number Of Confirming Ions （包括确认离子 / 确认离子数） 197
Number of Scans to Subtract （扣除的扫描数） 113
Only Select Top Peaks （仅选择最高峰） 197
Open Instrument Method （打开仪器方法） 89
Open Method （打开方法） 89
Operand （操作数） 436
Operator （运算符） 436
Or Conditions （Or 条件） 436
Origin （原点）
Calibration （校正） 160
Method Template Editor 198
Password （密码）
登录界面 12
User Administration （用户管理） 42
Path （路径） 98
Peak Height （峰高， %）
Genesis
Application Configuration （应用程序配置） 72
Detect 页面 144
ICIS
Application Configuration （应用程序配置） 75
方法开发 147
Peak Noise Factor （峰噪声因子）
Application Configuration （应用程序配置） 75
方法开发 147
Peak S/N Cutoff （峰信噪比截止值）
Application Configuration （应用程序配置） 72
Detect 页面 144
Percentage （百分比） 172
Phone Number （电话号码） 42
Polarity （极性）
Acquisition List 117
Post-run System State （运行后系统状态） 243, 295
Precursor Mass （母离子质量数）
Acquisition List
定量峰 117
确认离子 118
Compound Datastore
定量峰 54
确认离子 55
Priority Sequence （优先级序列） 295
Priority Sequence （优先序列） 243
Processing Configuration File （处理配置文件） 188
Product Mass （子离子质量数）
Acquisition List
定量峰 117
确认离子 118
Compound Datastore
定量峰 54
确认离子 55
QAQC Flags （QAQC 标记） 363
QC1-QC*n* 164
QIon （定量离子） 365

Qualitative Peak Processing Template （定性峰处理模板） 113
Quan Flags （定量标记） 363
Quan Mass （定量质量数） 364
Quan Peak *m/z* （定量峰质荷比） 364
Quan Peak Response （定量峰响应） 364
Quan peak RT （定量峰保留时间） 364
Quick Mode （快速模式） 301
R^2 Threshold （R^2 阈值） 170
Ranges，化合物检测 141
Raw Filename （原始文件名） 98
Recent Files， Method View 89
Reference Compound， Identification 页面 120
Remove User （移除用户） 42
Report All Compounds Listed in Configuration File （报告配置文件中列出的所有化合物） 189
Report Concentration （报告浓度） 183
Report Description （报告描述） 179
Report Name （报告名称） 179
Report Noise As （将噪声报告为）
  Application Configuration （应用程序配置） 73
  Detect 页面 145
Report Semi-Quantitative Result （报告半定量结果） 188
Report Type （报告类型） 179
Reset Password （重置密码） 42
  User Administration （用户管理） 42
Resp Ratio （响应比率） 316
Response Via （响应方式）
  Calibration （校正） 160
  Method Template Editor 198
Response （响应） 364
Retention Time （保留时间） 364
RMS （均方根）
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 148
Role （职务） 42
RT Window 188
RT （保留时间）
  Acquisition List 117
  Calibration （校正） 160
  Calibration 页面 170
  Chk Std 页面 171
  Compound Datastore 55
  Hydrolysis 页面 175
  Identification 页面 120
  Limits 页面 169
  Matrix Blank 页面 172
  内标物页面 173
  QC Levels 页面 164
  Solvent Blank 页面 174
  校正水平 162
S/N Threshold （信噪比阈值）
  Application Configuration （应用程序配置） 72
  方法开发 144
Sample Amt （样品量） 316
Sample Comment （样品注释） 98
Sample Concentration （样品浓度） 365
Sample File （样品文件） 363
Sample ID （样品标识号）
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Sample Name （样品名称）
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Sample Type （样品类型）
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Sample Weight （样品质量） 277
Sample Units （样品单位） 365
Sample Volume （样品体积） 275–276
Save Changes （保存更改） 43
Screening Method （筛选方法） 188
Select a Custom Template （选择自定义模板） 97
Select a Report （选择报告） 363
Select Batch Location （选择批次位置） 89
Select Compounds from CDS 参数 105
Sensitivity （灵敏度）
  Avalon
    Application Configuration （应用程序配置） 77
    Detect 页面 150
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    Detect 页面 147
  Method Template Editor 197
Separate Ion Overlay Display （分隔离子重叠显示） 183
Set Chromatogram Reference Sample （设置色谱图参考样品） 113
Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Compound （对化合物中所有确认峰应用离子比率） 158
Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Method （对方法中所有确认峰应用离子比率） 158
Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound （对化合物所有峰应用峰窗口设置） 135
Set Peak Windows Settings to All Peaks in Method （对方法中所有峰应用峰窗口设置） 135
Set Reference Sample （设置参考样品） 114
Shade Row When Sample is Outside of Evaluation Criteria （样品超评估标准时对该行加阴影） 183
Show Chromatogram on Quantitation Report （定量报告显示色谱图） 183
Show Quan Peaks Only （仅显示定量峰） 166
Showing， Active View 363
Smoothing （平滑）
  Avalon
    Application Configuration （应用程序配置） 77
    Detect 页面 150
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144

ICIS
Application Configuration （应用程序配置） 75
Detect 页面 147
Specify Default Ion Ratio Ranges （指定默认离子比率范围） 197
Standard Type （标样类型） 160
Start Device （启动设备） 243, 295
Start RT
Times 页面 135
Start When Ready （准备就绪时启动） 243, 295
Starting Vial Position （起始样品瓶位置） 301
Status （状态）
Active View 363
Batch View 275–276
数据查看 315
Stepoff Value （放弃值） 113
System Shutdown Method （系统关闭方法） 245
System Startup Method （系统启动方法） 245
System Status （系统状态） 245
Tailing Factor （拖尾因子）
Genesis
Application Configuration （应用程序配置） 72
方法开发 144
ICIS
Application Configuration （应用程序配置） 75
方法开发 147
Target Ratio （目标比率） 158
Template Layout （模板布局） 301
Theo Amt （理论量） 315
Theoretical Amount （理论量） 364
Threshold/Lower Limit （阈值 / 下限） 175
Time （时间） 78
Time/Event/Value （时间 / 事件 / 值） 77
Total Batch Rows （总批次行） 301
Total Response （总响应） 364
Total Rows （总行数） 363
Trace，检测 141
Tune File Lifetime （调谐文件使用寿命） 184
Valley Rise (%) （峰谷上升， %）
Application Configuration （应用程序配置） 73
Detect 页面 145
Valley S/N （峰谷信噪比）
Application Configuration （应用程序配置） 73
方法开发 145
Value （值） 78
Weighting （加权）
Calibration （校正） 160
Method Template Editor 198
Vial Position （样品瓶位置）
Batch View 275–276
Data Review 315
Method Forge 98
View Only （仅查看） 363
View Width （视图宽度）
Application Configuration （应用程序配置） 70
Times 页面 135
Window Type （窗口类型）
Application Configuration （应用程序配置） 70
Ratios 页面 158
Window （窗口）
Acquisition List 118
Application Configuration （应用程序配置）
离子比率 71
Retention time （保留时间） 70
Compound Datastore 55
Ratios 页面 158
Times 页面 135
ULOL (Linearity Limit) （ULOL，线性上限） 169
Units （单位） 160
Upper Limit （上限）
Hydrolysis 页面 175
Solvent Blank 页面 174
Use Alternate Calibration Report Format （使用备用校正报告格式） 183
Use an Existing Raw Data File （使用现有的原始数据文件） 97
Use as RT Reference， Identification 页面 120
Use Average Scan （使用平均扫描） 189
Use Autosampler （采用自动进样器） 98
Use Data Dependent Scans （使用数据依赖扫描） 198
Use Full MS Scan to Confirm （使用全 MS 扫描以确认） 188
Use Genesis Algorithm For Qual Processing （采用 Genesis 算法进行定性处理） 198
Use Method Forge 参数 92, 95
Use Scan at Peak Apex （使用峰顶处扫描） 189
Use the Default Template （使用默认模板） 97
Use These Libraries （使用这些库） 197
User Security 82
Username （用户名） 12, 42
XIC 141
常规页
Injection volume 参数
方法开发 113
程序
acquisition mode
进入实时显示 248
暂停队列中的所有批次 255
Acquisition 模式
保存待运行批次 240
查看输出文件 244
更新 TSRM 数据 238
开始采集 240
指定启动或关闭方法 238
指定设备状态 239
指定校正批次 239
acquisition 模式
从队列移除单个批次 256–257
从批次中移除待定样品 257
移除队列中的所有待定批次 256
移除队列中的所有批次 256
Analysis 模式
编辑批次中的样品 287

编辑样品 - 水平输出格式 288
创建新的批次 279
从定性峰窗格中移除一个峰 345
从峰窗格中移除一个峰 342
从样品列表中移除样品 282
打开 Batch View 267
打开 Report View 350
打开已保存的批次 286
打开最近的批次 287
打印报告 359
导出报告 360
对化合物列表排序 324
放大报告文本 361
放大峰
  定量峰 326
  定性峰 345
  色谱图导航 343
  质谱图窗格 347
更改所选峰的库条目 348
更改已检测峰的显示信息
  定量峰
    Data Review 329
    方法开发 122
  定性峰 346
滚动样品列表 269, 317
将样品添加到列表中 280
进入 Analysis 模式 264
排除校正点 322
启用或停用化合物 321
若要打开 Data Review 视图 312
若要打开 Local Method 视图 374
手动积分定量峰 328
手动积分确认离子峰 333
手动排除校正点 335
手动添加峰
  定量峰 328
  定性峰窗格 345
  色谱图窗格 343
搜索文本 360
提交批次中的所有样品 292
提交所选样品 292
显示化合物出现的具体问题 324
显示特定化合物的峰 341
  定量峰 325
修改峰窗格显示 326
修改峰检测设置 329
选择报告
  查看报告 351
  生成报告 355
选择化合物 353
选择样品
  查看报告 353
  生成报告 357
移除手动创建的峰 328
在方法积分和手动积分模式之间切换
  Qual Mode 346
  Quan Mode 329
在样品列表中插入一个样品 280
在样品列表中复制一个样品 282
重新进样 282
重新进样先前采集批次中的样品 287
自定义列显示
  Batch View 284
  Data Review 视图 317
Configuration 模式
  保存数据库 52
  编辑用户信息 39
  创建项目或子项目 48
  打开 Application Configuration 视图 61
  打开 Application Defaults 页面 67
  打开 Compound Datastore 编辑器 50
  打开化合物数据库 51
  打开 Project Administration 视图 46
  导入化合物 56
  导入新的报告类型 63
  访问 Configuration 模式 36
  更改默认驱动器 47
  将定量峰添加至化合物 58
  将化合物添加至数据库 57
  将确认离子添加至定量峰 59
  将文件夹复制到另一个驱动器且保留层次结构 49
  启用用户安全 82
  Remove All Empty 文件夹 49
  若要打开 User Administration 视图 37
  删除项目或子项目 49
  刷新驱动器的显示 48
  添加用户 38
  新建化合物数据库 52
  选择驱动器 47
  移除化合物 57
  移除确认离子 59
  移除用户 41
  以新名称另存数据库 53
  隐藏驱动器的显示 48
  指定常用检测参数 69
  指定默认实验室名称和仪器名称 68
  指定默认质量数精度和强度范围 68
Method Development 模式 161
  保存方法模板 195
  保存新方法 131
  编辑仪器方法参数 108
  采集批次 212
  采集选定的样品 212
  创建新多通道仪器方法 204
  创建一个新的仪器方法 202
  创建组 176
  从列表删除化合物 115
  从数据库中选择化合物 105
  从样品列表中移除所选样品 211
  打开 Development Batch 视图 208
  打开 Instrument View 201
  打开 Qual Browser 213
  打开已保存的主方法 106
  打开仪器方法 206

导入 Xcalibur 方法 99
导入仪器方法 207
导入主方法 199
调整列的大小或重新组织列 211
Exactive 参数 187
放大色谱图或质谱图画面 155
访问 Method Development 模式 88
复制样品 210
更改定量峰所用的定量质量 151
更改化合物参考质谱图 126
更新确认离子比率 151
过滤显示的化合物 119, 122
计算和报告半定量结果 186
将定量峰添加到现有的化合物 153
将化合物添加至列表 116
将离子信号叠加得到累积信号 152
将确认离子峰设置为额外的定量峰 129
将确认离子添加到现有的化合物 154
将 SRM 数据导出为 XML 文件 200
将样品插入到开发批次中 209
将样品添加到开发批次中 209
将原始数据文件和方法相关 101
将质量数添加到已有定量质量数范围中 126
利用确认离子峰替换定量峰 129
若要输入列的值 210
设置自动背景扣除选项 110
手动选择用于创建新方法的化合物 95
替换定量质量数 126
替换确认离子峰 131
添加定量峰 127
添加化合物到方法 103, 123
添加质量数为新建化合物 127
添加质量数为新确认离子峰 131
为方法输入注释 195
为开发批次数据指定位置 209
校正化合物 194
要跟踪调谐文件的使用 182
识别峰 193
指定百分比形式的最大浓度 172
指定标准报告类型和输出格式 178
指定定量标记选项 181
指定定量峰处理 195
指定定量限 180
指定峰标准 192
指定化合物的内标物 159
指定离子比率标准 157
指定离子比率计算方法 186
指定默认参数 185
指定 QC 水平和浓度 163
指定色谱图参考样品 110
指定用户界面选项 181
指定用于检测和积分的离子范围 136
指定用于主方法的常规信息 108
指定质量数容许偏差 112
指定准确质量数窗口 187
自动选择用于创建新方法的化合物 92
使用入门
  安装 NIST 库 14
  安装 QED 库 14
  从主菜单观看实时显示 31
  登录 TraceFinder 应用程序 11
  监测仪器状态 30
  启动 TraceFinder 应用程序 11
  显示仪器错误日志 30
  选择模式 29
数据采集模式
  创建批次模板 226
  从批次中移除待定样品 258
  从样品列表中移除样品 231
  将报告导出至指定文件夹 236
  将样品添加到列表中 227
  开始新批次 222
  为样品分配特定通道 232
  选择先前采集的批次 225
  选择准备采集批次 224
  预览标准报告 235
  在样品列表中插入样品 228, 230
  重新进样来自 231
创建 PDF 参数
  Batch Template Editor 382
  Master Method View 179
创建 XML 参数
  Batch Template Editor 382

D

Data Review 视图 312
Decimal places to be reported 参数 183
Delay Calibration Calculation 选项 84
Delete Compound From Method 命令 175
Delete condition 参数 436
Detection Method 参数
  Avalon
    Application Configuration （应用程序配置） 77
    Detect 页面 150
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    Detect 页面 147
Detection Type 参数， Times 页面 135
Detection 页面， Master Method View 121
Detector 参数， Signal 页面 141
Development Batch 视图 208
Device Name 参数
  Acquisition 模式 243
  Batch View 295
Dilution Factor 参数 277
Disable Cluster Off，事件类型 80
Disable Cluster On，事件类型 80
Display compounds above set limit 参数 183

Display Quan flags and legend 参数 184
Display Retention Time Column 命令 175
Displayed Reports 参数 66
打开定性浏览器参数 89
登录界面 12
定量报告设置，指定 180
逗号分隔值文件，已定义 3
对话框
  Add Library 15
  Associate a Raw Data File 101
  Avalon Event List 78
  Create Master Method 91
  Edit Compound Dependent Parameters 100
  Import an Xcalibur Method 99
  Invalid Compound Datastore not saved 52
  Open Chromatograph Reference Sample 111
  Open Compound Datastore 51
  Save Compound Datastore 53
  Select Compounds to Add 105
  Thermo Library Manager 15
  Thermo Xcalibur Instrument Setup 108
  Thermo Xcalibur 导航图 14

E

Edit Compound Dependent Parameters 对话框 100
Edit User 参数 42
Email Address 参数 42
Enable peak threshold 参数 197
Enable tune time tracking 参数 184
Enable Valley Detection 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 72
  方法开发 144
Enable 参数， Ratios 页面 158
Enabled 参数 42
End RT 参数， Times 页面 135
End Threshold，事件类型 79
Energy Ramp 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 55
  方法开发 118
Event types 79
Event 参数 78
Exact Mass Window 参数 189
Example 参数， Reports 页面 179
Exclude matching quan peaks 参数 198
Excluded 参数 316
Exclusion Window 参数 198
Exit TraceFinder 命令 12
Expected RT 参数 315
Expected RT 参数， Times 页面 135
Expected Width 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 72
  方法开发 144
Experiment Type 参数
  Acquisition List 117
  Compound Datastore 54
Export SRM data 参数 89
Export to CSV File 命令
  Acquisition 模式 234
  Batch View 样品列表 278
Extend Calibrations 命令 311
Extracted Ion Chromatogram 60

F

Filename 参数
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Fill down 命令 431
Filter 参数，检测 141
Filter 参数， Signal 页面 141
Final Units 参数 277
Finish 视图 238
Flag values above Carryover 参数 184
Flag values above LOR 参数 184
Flag values above ULOL 参数 184
Flag values below LOD 参数 184
Flag values below LOQ 参数 184
Flag values between LOD and LOQ 参数 184
Flags 参数 315
Force Cluster Off，事件类型 80
Force Cluster On，事件类型 80
Full Name 参数 42
方法
  当前 374
  导入 Xcalibur 99
  更新 TSQ 方法 238
  Method Template Editor 196
  仪器 201
  主 90

G

General （常规）页面
  Injection volume 参数
    Batch View 275–276
General 页面
  Background Subtraction Range Option （背景扣除范围选项） 113
  编辑 108
  Instrument Method 参数 113
  Ion range calc method 参数 113
  Mass Precision 参数 113
  Mass Tolerance 参数 114
  Number of scans to subtract 参数 113
  Qualitative peak processing template 参数 113
  Set chromatogram reference sample 参数 113
  Set Reference sample 参数 114
  Stepoff value 参数 113
General 页面，Master Method View 108

Generate Only 参数 363
Genesis 检测算法 69
Groups 页面， Master Method View 176
工作流程
  概述 5
  数据采集模式 220

H

Height 参数 315
Hydrolysis 样品类型，已定义 261
Hydrolysis 页面， Master Method View 175
化合物，导入到化合物数据库 56
化合物类型
  定量
    Detection 页面 122
    Identification 页面 119
  目标
    Detection 页面 122
    Identification 页面 119
  内标物
    Detection 页面 122
    Identification 页面 119

J

ICIS 检测算法 69
Identification 页面，Master Method View 119
Import an Xcalibur Method 对话框 99
Import Compounds 命令 56
Import Published Method 参数 89
Import Published Method 命令 199
Import Samples 命令 277
Import Xcalibur Processing Method 参数 99
Import 参数 66
Include compound peak spectrum as reference spectrum 参数 197
Include confirming ions 参数 197
Injection amount 参数 98
Injection concentration 参数 364
Injection Units 参数 364
Injection volume 参数
  Batch View 275–276
  方法开发 113
  样品列表 315
Insert Copy Sample 命令
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Insert Sample 命令
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Installed Reports 参数 66
Instrument Method 参数
  Batch View 277
  General 页面 113
  Method Forge 98
Instrument 视图 201
Integration Mode 参数 315
Invalid Compound Datastore not saved 对话框 52
Ion Coelution 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 71
  Ratios 页面 158
Ion range calc method 参数 113
Ion Ratio Window 参数 189
Ionization 参数
  Acquisition List 117
  Compound Datastore 54
IS Amt 参数 316
IS Resp 参数 316
ISTD Matching 参数 198
ISTD 参数 160
ISTD 页面， Master Method View 173
IT Administrator 职务 44
警告标记 319

L

Lab name 参数 113
Laboratory Name 参数 188
Lens 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 55
  方法开发 117
Level 参数
  Batch View 275–276
  Data Review 315
  QC Levels 页面 164
Limit library hits 参数 197
Limit the retention time range 参数 197
Limits 页面， Master Method View 169
Load Compound Datastore 命令 51
Local Method 视图 374
LOD (Detection limit) 参数 169
Log Off 命令 33
Login 参数 12
LOQ (Quantitation limit) 参数 169
灵敏度参数
  Avalon
    Application Configuration （应用程序配置） 77

M

m/z Window 参数 188
Manual Flags 参数 363
Manual injection 参数 98
Manual Integration Settings 命令 331
Map Raw Files To Samples 命令 278
Mass Precision 参数 113

Mass Tolerance 参数 114
Mass 参数
  定量峰
    Acquisition List 117
    Compound Datastore 55
  确认离子
    Acquisition List 118
    Compound Datastore 55
Master Method View
  Acquisition List 页面 115
  Calibration Levels 页面 161
  Calibration 页面
    Compounds 页面 159
    QAQC 页面 170
  Compounds 页面 114
  Detection 页面 121
  General 页面 108
  Groups 页面 176
  Hydrolysis 页面 175
  Identification 页面 119
  ISTD 页面 173
  Negative 页面 172
  QC Levels 页面 163
  Ratios 页面 157
  Real Time Viewer 页面 165
  Reports 页面 178
  Solvent Blank 页面 174
  Spectrum 页面 151
Master Method View， QAQC 页面 168
Max Amt Diff (%) 参数 170
Max Conc 参数 172
Max Recovery (%) 参数， ISTD 页面 173
Max RF Diff (%) 参数 171
Max RSD (%) 参数， Calibration 页面 170
Max RT (+min) 参数， ISTD 页面 173
Measurement Unit 参数 188
Method Integration Settings 命令 331
Method Template Editor 196
Method view 91
Method 参数
  Matrix Blank 页面 172
  Solvent Blank 页面 174
Methods 命令 33
Min Peak Height (S/N) 参数
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    Detect 页面 147
Min peak width 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 147
Min recovery (%) 参数
  ISTD 页面 173
Min RF 参数 171
Min RT (–min) 参数 173
Modify Calibrations or Active Compounds by Group 参数 309
Modify Columns 命令
  Batch View 样品列表 269
  Data Review 样品列表 317
Move Sample Down 命令 306
Move Sample Up 命令 306
MS2 Search Library 参数 188
MS3 Search Library 参数 188
Multiplet resolution 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 147
Multiplexing Channels 参数 233
命令
  Acquisition （采集） 33
  Add Compound （添加化合物） 57
  Add Confirming Ion （添加确认离子） 59
  Add Group （添加组） 177
  Add Quan Peak （添加定量峰） 58
  Add Sample （添加样品）
    Acquisition 模式 233
    Batch View 样品列表 277
    Batch Wizard 306
  Add This Mass as New Confirming Ion （添加该质量数为新确认离子） 156
  Add This Mass to Existing Quan Mass Ranges （将质量数添加到已有定量质量数范围） 156
  Add to CDS 100
  Analysis （分析） 33
  Apply To All Peaks In Compound （应用至化合物中的所有峰）
    Avalon 150
    Genesis 145
    ICIS 148
  Apply To All Peaks In Method （应用至方法中的所有峰）
    Avalon 150
    Genesis 145
    ICIS 148
  Apply To All Peaks With Like Sensitivity Setting （应用至方法中具有相似灵敏度设置的所有峰）
    Avalon 150
    Genesis 145
    ICIS 148
  Browse in Raw File （浏览原始文件） 277
  Calibration Curve Type （校正曲线类型） 335
  Configuration （配置） 33
  Confirming Ion List （确认离子列表） 331
  Continue to Method 100
  Copy Down 431
  Copy With Headers
    Acquisition 模式 234
  Copy With Headers （带标题复制）
    Batch View 样品列表 278

Create New （创建新文件） 311
Delete Compound From Method （从方法中删除化合物） 175
Display Retention Time Column （显示保留时间列） 175
Exit TraceFinder （退出 TraceFinder） 12
Export to CSV File （导出至 CSV 文件）
  Acquisition 模式 234
  Batch View 样品列表 278
Extend Calibrations （扩展校正） 311
Fill Down （向下填充） 431
Import Compounds 56
Import Published Method 199
Import Samples （导入样品） 277
Insert Copy Sample （插入复制样品）
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Insert Sample （插入样品）
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Load Compound Datastore 51
Log Off （注销） 33
Manual Integration Settings （手动积分设置） 331
Map Raw Files To Samples （选择样品的原始文件） 278
Method Integration Settings （方法积分设置） 331
Methods （方法） 33
Modify Columns （修改列）
  Batch View 样品列表 269
  Data Review 样品列表 317
Move Sample Down （下移样品） 306
Move Sample Up （上移样品） 306
New Compound Datastore 52
Pause Queue （暂停队列） 256
Peak Detection Settings （峰检测设置） 332
Peak Labels （峰标签） 331
启用 Target Screening 命令 82
Real Time Status （实时状态） 33
Reinject Selected Samples （所选样品重新进样）
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
Remove Pending Batch （移除待定批次） 258
Remove Pending Batches （移除待定批次） 256
Remove Pending Samples （移除待定样品） 258
Remove Selected Samples （移除所选样品）
  Acquisition 模式 234
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Save As Compound Datastore 53
Save Compound Datastore 52
Send RT to Method （将保留时间发送到方法） 331
Set This Mass as New Quan Peak （设置该质量数为新定量峰） 156
Set This Mass as Quan Mass （设置该质量数为定量质量数） 156
Show Peak Info （显示峰信息） 331
Sort By Alphabetical （按字母顺序排序） 324
Sort By Flag And Alphabetical （按标记和字母顺序排序） 324
Sort By Flag And Retention Time （按标记和保留时间排序） 324
Sort By Retention Time （按保留时间排序） 324
Stop Active Batch （停止活动批次） 256
Stop All Batches （停止所有批次） 256
Stop Batch （停止批次） 258
Turn Device Off （关闭设备） 240
Turn Device On （开启设备） 240
Turn Device Standby （使设备待机） 240
Update Confirming Ion Ratios With This Spectrum （利用该质谱图更新确认离子比率） 156
模板
  方法 191
  批次 226
模式
  选择 29
  已定义 33
目标筛选报告，已列出 7
目标筛选设置，指定 185

N

Name the master method 参数 97
Negative Peaks, event type 79
Negative 样品类型，已定义 261
Negative 页面， Master Method View 172
New Compound Datastore 命令 52
New Instrument Method 参数 89
New sample list 参数 89
NIST 库，安装 14
No Specified Retention Time 参数 189
Noise method 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 75
  Detect 页面 147
Number Of Confirming Ions （包括确认离子 / 确认离子数） 197
Number of scans to subtract 参数 113

O

Only select top peaks 参数 197
Open Chromatograph Reference Sample 对话框 111
Open Compound Datastore 对话框 51
Open Instrument Method 参数 89
Open Method 参数 89
Operand 参数 436
Operator 参数 436
Or conditions 参数 436
Origin 参数
  Calibration （校正） 160
  Method Template Editor 198

P

password, administrator 11
Password 参数
  登录界面 12
  User Administration （用户管理） 42
Path 参数 98
Pause Queue 命令 256
Peak Detection Settings 命令 332
Peak Height (%) 参数
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    方法开发 147
Peak Labels 命令 331
Peak noise factor 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 75
  方法开发 147
Peak S/N cutoff 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 72
  Detect 页面 144
Percentage 参数 172
Phone Number 参数 42
Polarity 参数
  Acquisition List 117
  Compound Datastore 55
Post-run System State 参数 243, 295
P-P Threshold，事件类型 79
Precursor Mass 参数
  Acquisition List
    定量峰 117
    确认离子 118
  Compound Datastore
    定量峰 54
  Compound Datastore （化合物数据库）
    确认离子 55
Priority Sequence 参数 243, 295
Processing Configuration File 参数 188
Product Mass 参数
  Acquisition List
    定量峰 117
Product Mass 参数
  Acquisition List
    确认离子 118
  Compound Datastore
    确认离子 55
      定量峰 54
Project Administration 视图 46
批次
  Analysis 模式 267
  开发批次 208
  数据采集模式 218
  校正 239
平滑参数
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75

Q

QAQC Flags 参数 363
QAQC 页面， Master Method View 168
QAQC 职务 45
QC Levels 页面， Master Method View 163
QC1-QC*n* 参数 164
QED 库，安装 14
QIon 参数 365
Qual Mode 312
Qualitative peak processing template 参数 113
Quan Flags 参数 363
Quan mass 参数 364
Quan Mode 312
Quan Peak *m/z* 参数 364
Quan peak response 参数 364
Quan Peak RT 参数 364
Quick mode 参数 301
启用 Target Screening 命令 82

R

R^2 Threshold 参数 170
Ranges 参数，化合物检测 141
Ratios 页面， Master Method View 157
Raw filename 参数 98
Real Time Status 命令 33
Real Time Viewer 页面，Master Method View 165
Recent Files 参数， Method View 89
Reference Compound 参数， Identification 页面 120
Reinject Selected Samples 命令
  Acquisition 模式 233
  Batch View 样品列表 277
Remove Pending Batches 命令 256
Remove Pending Batch 命令 258
Remove Pending Samples 命令 258
Remove Selected Samples 命令
  Acquisition 模式 234
  Batch View 样品列表 277
  Batch Wizard 306
Remove User 参数 42
Report All Compounds Listed in Configuration File 参数 189
Report concentration 参数 183
Report Description 参数 179
Report Name 参数 179
Report noise as 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 73
  Detect 页面 145
Report selection 视图 235

Report Semi-Quantitative Result 参数 188
Report Type 参数 179
Report View 350
Reports 页面， Master Method View 178
Reset Password 参数 42
  User Administration （用户管理） 42
Resp Ratio 参数 316
Response Via 参数
  Calibration （校正） 160
  Method Template Editor 198
Response 参数 364
Retention Time 参数 364
RMS 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 76
  Detect 页面 148
Role 参数 42
RT Window 参数 188
RT 参数
  Acquisition List 117
  Calibration （校正） 160
  Calibration 页面 170
  Chk Std 页面 171
  Compound Datastore 55
  Hydrolysis 页面 175
  Identification 页面 120
  Limits 页面 169
  Matrix Blank 页面 172
  内标物页面 173
  QC Levels 页面 164
  Solvent Blank 页面 174
  校正水平 162

S

S/N threshold 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 72
  方法开发 144
Sample Amt 参数 316
Sample comment 参数 98
Sample Concentration 参数 365
Sample definition 视图 227
Sample File 参数 363
Sample ID 参数
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Sample Name 参数
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Sample Type 参数
  Batch View 275–276
  Data Review 315
Sample Weight 参数 277
Sample Units 参数 365
Sample Volume 参数 275–276
Save As Compound Datastore 命令 53
Save Changes 参数 43
Save Compound Datastore 对话框 53
Save Compound Datastore 命令 52
Screening Method 参数 188
Select a custom template 参数 97
Select a report 参数 363
Select batch location 参数 89
Select Compounds from CDS 参数 105
Select Compounds to Add 对话框 105
Selected Ion Monitoring 60
Selected Reaction Monitoring 60
Send RT to Method 命令 331
Sensitivity 参数
  Avalon
    Detect 页面 150
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    Detect 页面 147
  Method Template Editor 197
Separate ion overlay display 参数 183
Set chromatogram reference sample 参数 113
Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Compound 参数 158
Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Method 参数 158
Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound 参数 135
Set Peak Windows Settings to All Peaks in Method 参数 135
Set Reference sample 参数 114
Set this mass as a new quan peak 命令 156
Set this mass as quan mass 命令 156
Shade row when sample is outside of evaluation criteria 参数 183
Show chromatogram on Quantitation Report 参数 183
Show Peak Info 命令 331
Show Quan Peaks Only 参数 166
Showing 参数， Active View 363
Shoulders On，事件类型 79
SIM 实验类型 60
Smoothing 参数
  Avalon
    Application Configuration （应用程序配置） 77
    Detect 页面 150
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    Detect 页面 144
  ICIS
    Detect 页面 147
Solvent Blank 页面， Master Method View 174
Solvent 样品类型，已定义 261
Sort by Alphabetical 命令 324
Sort by Flag and Alphabetical 命令 324

Sort by Flag and Retention Time 命令 324
Sort by Retention Time 命令 324
Specify default ion ratio ranges 参数 197
Specimen/Qual 样品类型，已定义 261
Specimen 样品类型，已定义 261
Spectrum 页面， Master Method View 151
SRM 实验类型 60
SRM 数据，导出 200
Standard type 参数 160
Start Device 参数 243, 295
Start RT 参数
  Times 页面 135
Start Threshold，事件类型 79–80
Start When Ready 参数 243, 295
Starting vial number 参数 301
status color codes, Sample Definition 视图 234
Status 参数
  Active View 363
  Batch View 275–276
  数据查看 315
Stepoff value 参数 113
Stop Active Batch 命令 256
Stop All Batches 命令 256
Stop Batch 命令 258
Supervisor 职务 44
System Shutdown Method 参数 245
System Startup Method 参数 245
System Status 参数 245
实时显示 248
视图
  Batch/Template Selection 222
  Compound Datastore 53
  Data Review 312
  Development Batch （开发批次） 208
  当前方法 374
  Finish 238
  方法 91
  Project Administration （项目管理） 46
  批次 267
  Report selection 235
  Report View 350
  Sample definition 227
  User Administration 37
  仪器 201
实验类型 60

T

Tailing Factor 参数
  Genesis
    Application Configuration （应用程序配置） 72
    方法开发 144
  ICIS
    Application Configuration （应用程序配置） 75
    方法开发 147
Tangent Skim，事件类型 79
Target Ratio 参数 158
Technician 职务 44
Template Layout 参数 301
Tension，事件类型 79
Theo Amt 参数 315
Theoretical Amount 参数 364
Thermo Xcalibur Instrument Setup 对话框 108
Threshold/Lower Limit 参数 175
Time/Event/Value 参数 77
Time 参数 78
Total batch rows 参数 301
Total Response 参数 364
Total Rows 参数 363
Trace 参数，检测 141
Tune file lifetime 参数 184
Turn Device Off 命令 240
Turn Device On 命令 240
Turn Device Standby 命令 240
特性总结 4

W

Valley rise(%) 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 73
  Detect 页面 145
Valley S/N 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 73
  方法开发 145
Value 参数 78
Weighting 参数
  Calibration （校正） 160
  Method Template Editor 198
Vial position 参数
  Batch View 275–276
  Data Review 315
  Method Forge 98
View Only 参数 363
View Width 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 70
  Times 页面 135
Window Type 参数
  Application Configuration （应用程序配置） 70
  Ratios 页面 158
Window 参数
  Acquisition List 118
  Application Configuration （应用程序配置）
    离子比率 71
    Retention time （保留时间） 70
  Compound Datastore 55
  Ratios 页面 158
  Times 页面 135
ULOL(Linearity limit) 参数 169
Unextracted 样品类型，已定义 261
Units 参数 160

Update confirming ion ratios with this spectrum 命令 156
Upper Limit 参数
  Hydrolysis 页面 175
  Solvent Blank 页面 174
Use alternate calibration report format 参数 183
Use an existing raw data file 参数 97
Use as RT Reference 参数 120
Use Average Scan 参数 189
Use autosampler 参数 98
Use data dependent scans 参数 198
Use Full MS Scan to Confirm 参数 188
Use Genesis algorithm for qual processing 参数 198
Use Method Forge 参数 92, 95
Use Scan at Peak Apex 参数 189
Use the default template 参数 97
Use These libraries 参数 197
User Administration 视图 37
User Security 参数 82
Username 参数 12, 42
文件类型，支持的 3

X

XIC 参数， Signal 页面 141
XIC 实验类型 60
系统要求 ix
项目和子项目，创建 46
许可证，类型 x

Y

样品类型，已定义 261
仪器，支持的 ix
仪器状态指示器 240
用户安全，启用 82
用户帐户，创建 37
用户职务，已定义 43
用户职务和权限 43

Z

支持的软件和硬件 ix
支持的文件类型，已定义 3
质控 （QC）样品类型，已定义 261
主方法视图
  Limits 页面 169
自定义报告，已列出 7
自动背景扣除选项 110