

TraceFinder 分析快速参考手册

这本快速参考手册描述如何使用 Thermo TraceFinder™ 3.1 分析软件中的 Analysis（分析）模式完成任务。


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

目录

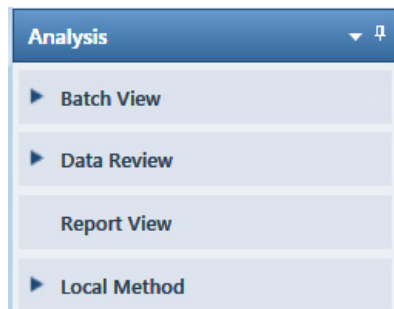
- 批次视图
- 数据查看
- 报告视图
- 本地方法
- 快速采集
- 商标

❖ 若要打开 Analysis 模式

点击导航窗格中的 **Analysis**。

A blue rectangular button with the word "Analysis" in white text.

Analysis 导航窗格打开。



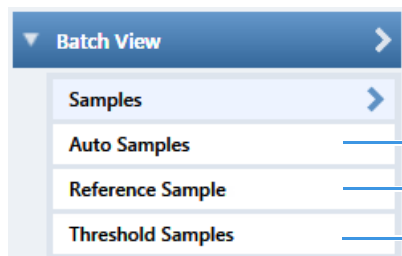
批次视图

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，可以采集数据、处理数据或创建所提交样品的报告。

❖ 若要打开 Batch View

单击导航窗格的 **Batch View**。

Batch View 导航窗口打开。



当激活配置控制台中的智能排序时，只对定量批次可用。

只对定量批次可用。

样品页面

Batch View 包括以下页面：

- 样品页面
- 自动样品页面
- 参考样品页面
- 阈值样品页面

利用 Samples（样品）页面创建一个新批次。按照如下步骤进行操作：

- 若要打开样品页面
- 若要创建批次
- 若要添加样品到列表
- 若要在列表中插入样品
- 若要在列表中导入样品
- 若要移除列表中的样品
- 若要复制样品
- 若要重新进样
- 若要编辑样品值
- 若要创建组
- 若要提交样品

❖ 若要打开样品页面

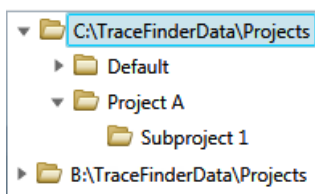
点击 Batch View 导航窗格中的 **Samples**。

❖ 若要创建批次

1. 选择 **File（文件） > New（新建） > Batch（批次）**。

Create New Batch（创建新批次）对话框打开。

2. 从列表选择一个驱动器。



提示 应用程序显示所有已经配置和启用的储存处。

该项目列表显示所选储存处的所有项目、子项目和批次。

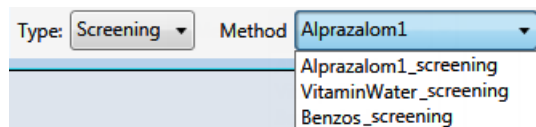
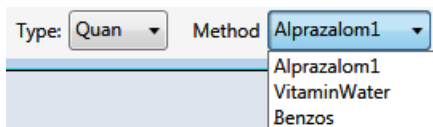
3. 选择要存储批次的文件夹。

提示 若要激活 Create（创建）按钮，必须输入唯一的批次名称。若 Create 按钮未激活，可能是因为输入的名称已经被使用或者尚未选择一个文件夹。

4. 从 Type（类型）列表选择 **Quan（定量）** 或 **Screening（筛选）**。

5. 从 Method（方法）列表选择一个主方法。

应用程序显示所有可用的定量或筛选方法。



6. 点击 **Create**。

含一个 Unknown（未知样）的新批次打开。标题栏内的批次名称表示用户正在创建一个定量或目标筛选批次。


❖ **若要添加样品到列表**

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

提示 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**。


应用程序将指定数量的新空白样品添加至样品列表的末尾。

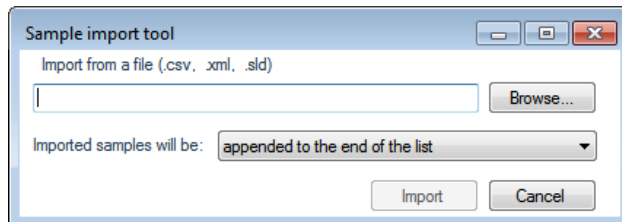
❖ **若要在列表中插入样品**

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

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

❖ **若要在列表中导入样品**

1. 单击 **Import Samples（导入样品）** 图标，。
Sample Import Tool（样品导入工具）对话框打开。



2. 单击 **Browse（浏览）** 然后选择含有指定要导入样品的 .CSV、.XML 或 .SLD 文件。
3. 从 Imported Samples Will Be（导入样品将被）列表选择 **Appended to the End of the List（附加到列表末尾）** 或 **Inserted at the Selected Row（插入到所选行）**。
4. 单击 **Import（导入）**。

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

当从 Xcalibur™ 序列文件中导入样品时，TraceFinder 应用程序替换下列名称和样品类型。

Xcalibur 列	TraceFinder 列	Xcalibur 样品类型	TraceFinder 样品类型
Position（位置）	Vial Position （样品瓶位置）	Blank （空白样）	Matrix Blank （基质空白）
Inj Vol （进样体积）	Injection Volume （进样体积）	Std Bracket （标曲更新）	Cal Std（校正标样）
Dil Factor （稀释因子）	Conversion Factor （转换系数）	QC（质控样）	Chk Std（质控样）

❖ **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. 右击并从快捷菜单中选择 **Remove Selected Samples（移除所选样品）**。

❖ **若要复制样品**

1. 选择要复制的样品。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Insert Copy Sample（插入复制样品）**。
TraceFinder 应用程序将复制的样品插入到选定样品上方。

❖ 若要重新进样

1. 从 Sample（样品）列表中选择要重新进样的样品。
2. 右键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 应用程序复制原始样品的所有参数值。

❖ 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（文件名）列并找到要用于该样品的原始数据文件。

– 或 –

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

2. 对于每个样品，单击 Sample Type（样品类型）列，然后从列表中选择一個样品类型。

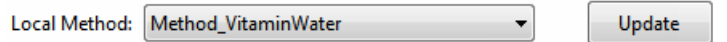
可用样品类型

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

3. 为每个 Cal Std 或 Chk Std 样品，从 Level（水平）列表中选择一個水平。

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

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



应用程序以新样品水平更新本地方法。

4. (可选) 输入或编辑其他列的值。

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

❖ 若要创建组

1. 为每个样品点击 Groups（组）列并输入组名。

注释 组名不区分大小写，而且总是被视作小写。例如，如果某个样品被分配到“GroupA”，另一个样品被分配到“groupa”，在 Threshold Samples（阈值样品）页面上这两个样品都被分配到“groupa”。

2. 为每个要分配组的样品重复步骤 1。
3. 创建所需要的组。

注释 如果要将某个样品分配到多个组，以逗号隔开这些组。

Status	Filename	Groups
	Benzo26473	groupB, groupA
	Benzo25557	groupB

❖ 若要提交样品

1. 执行下列操作之一：

- 若要提交批次中的所有样品，点击 **Submit Batch（提交批次）** 图标，
- 若要提交特定样品，选择这些样品并点击 **Submit Selected Samples（提交所选样品）** 图标，

Submit Options（提交选项）对话框打开。

2. 选择想要执行的任务：采集数据、处理数据或创建报告。

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. 若要开始所选的流程，点击 **OK（确定）**。

Auto Samples（自动样品）页面识别 Solvent 或 Matrix Blank 样品，将其用于任何 Auto Sample 或 Auto Sample and Reinject（自动样品以及重新进样）失败的操作，这些操作在该方法的 Intelligent Sequencing（智能排序）页面上指定。

❖ 若要打开 Auto Samples 页面

点击 Batch View 导航窗格中的 **Auto Samples**。

Auto Samples 页面打开。

	Sample Type	Injection Volume	Injections Used	Number of Injections	Vial Position
	Solvent	1.0	0	1	10
	Matrix Blank	1.0	0	10	11
	Matrix Blank	1.0	0	10	12

❖ 若要添加一种自动样品类型

1. 右击然后从快捷菜单中选择 **Add Auto Sample（添加自动样品）**，或者点击 **Add New Auto Sample（添加新自动样品）** 图标，

应用程序将一个 Solvent 样品添加到样品列表。

用户可以从该列表或任何样品列表中添加、插入或移除样品。参阅第 2 页上的“样品页面”。

2. 若要将样品类型修改为 Matrix Blank，单击 Sample Type 列并从列表选择 **Matrix Blank**。
3. 在新样品的 Injection Volume 列，输入进样量。

允许的最小进样量为 0.1 μL；允许的最大进样量为 5000 μL。

4. 在 Number of Injections（进样次数）列中，输入指定的 Solvent 或 Matrix Blank 样品瓶允许的进样次数。

自动进样完成后，可以返回这个页面查看每个进样瓶所用的进样次数。

5. 在 Vial Position 列中，输入 Solvent 或 Matrix Blank 样品的样品瓶位置。

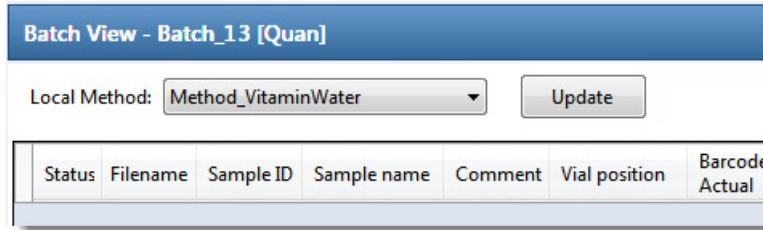
参考样品页面

Reference Sample（参考样品）页面显示为该批次所选的参考样品。

❖ 若要指定色谱图参考样品

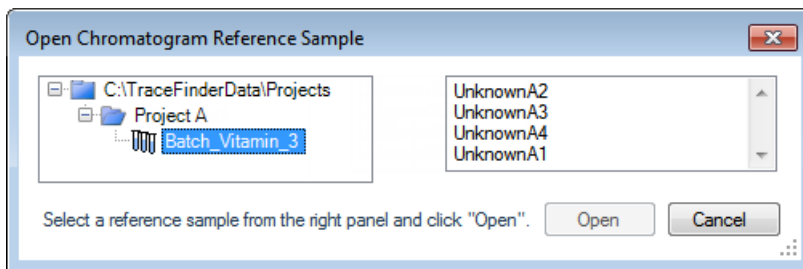
1. 点击 Batch View 导航窗格中的 **Reference Sample**。

一个空白的参考样品表打开。



2. 右击然后从快捷菜单中选择 **Add Reference Sample（添加参考样品）**，或者点击 **Add Reference Sample** 图标，。

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



注释 如果正在使用一种新方法，不会出现任何参考样品。必须采用当前方法处理一个批次，才可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。
该应用程序仅显示采用当前主方法创建的批次。

6. 从右面板的已处理样品列表中选择一个样品。

应用程序显示所选批次中所有已处理的样品。若要将某个样品作为参考样品，必须先采用当前主方法处理该样品。

7. 点击 **Open（打开）**。

阈值样品页面

对于批次中的每个组，可以指定组中一个样品作为 Comparative View（比较视图）中所用的阈值样品。

❖ 若要指定一个阈值样品

1. 点击 Batch View 导航窗格中的 **Threshold Samples**。
2. 点击每个组的 Sample 列表并选择一个组样品作为阈值样品。

Group	Sample
groupb	Benzo26473
	Benzo26473
	Benzo25557
	Benzo26154

Comparative View 使用方法中指定的阈值方法和量、在 Samples 页面上创建的组、在该页面上选择的阈值样品以指定它显示在样品峰图上的阈值导线。

也可参阅第 5 页上的“若要创建组”和第 13 页上的“比较视图”。

数据查看

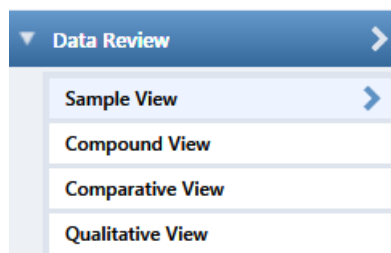
在生成报告之前，使用 Data Review（数据查看）验证由定量或目标筛选主方法生成的数据。

❖ 若要打开 Data Review 视图

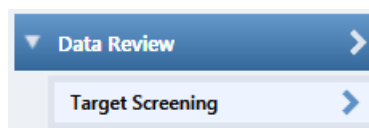
单击导航窗格的 **Data Review**。

Data Review 导航窗口打开。

定量方法的数据查看



目标筛选方法的数据查看



- 定量方法的数据查看
- 目标筛选方法的数据查看

定量方法的数据查看

定量方法的 Data Review 包括下列视图：

- 样品视图
- 化合物视图
- 比较视图
- 定性视图

样品视图

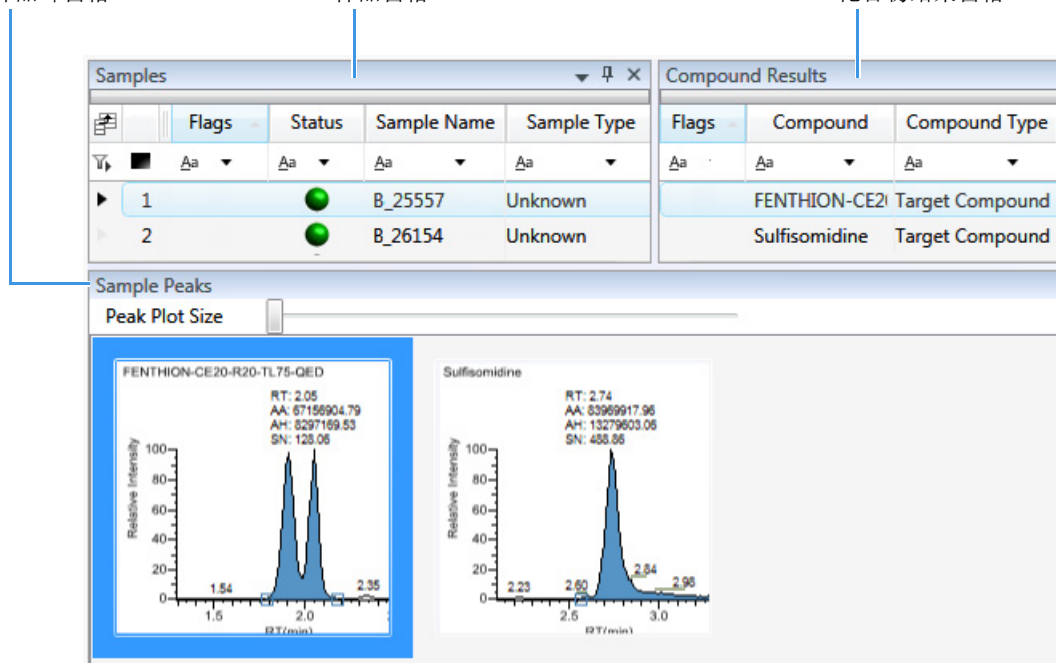
Sample View（样品视图）显示当前批次中的所有样品列表，方法中所有化合物的结果，以及当前所选样品中找到的所有化合物的峰图表。

以下是默认的窗格及其位置：

样品峰窗格

样品窗格

化合物结果窗格



- **Samples (样品) 窗格**

利用 Samples 窗格选择一个特定样品。相关的 **Compound Results (化合物结果) 窗格** 显示方法中所有化合物，并标记所选样品中有错误的任何化合物。

Samples					Compound Results		
	Flags	Status	Sample Name	Sample Type	Flags	Compound	Compound Type
1		●	B_25557	Unknown		FENTHION-Cl	Target Compound
2	⚠	●	B_26154	Unknown	⚠	Sulfisomidine	Target Compound
3		●	B_26473	Unknown			
4		●	B_26984	Unknown			
5		●	B_27126	Unknown			

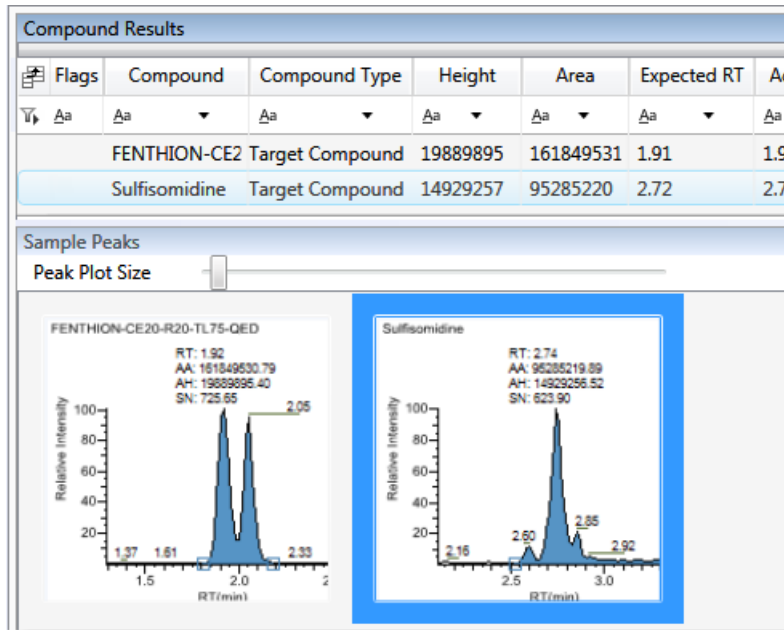
所选样品

所选样品中的化合物错误

所选样品没有化合物错误

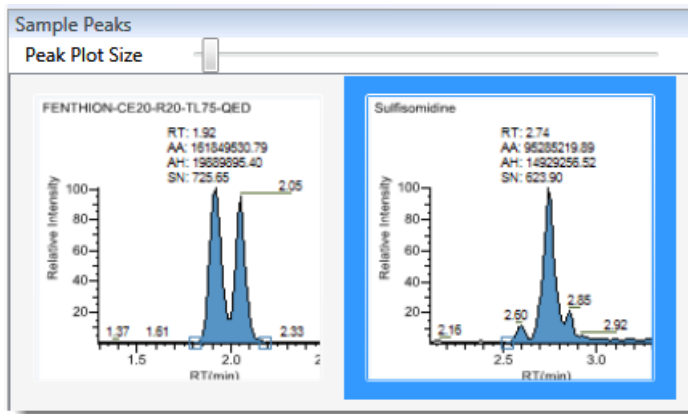
- **Compound Results (化合物结果) 窗格**

在 Compound Results 窗格中，选择所选样品的一个特定化合物。相关的 **Sample Peaks (样品峰) 窗格** 高亮显示选中的化合物。



• **Sample Peaks (样品峰) 窗格**

Sample Peaks 窗格显示 Compound Results 窗格中所有化合物的色谱图、保留时间、峰面积、峰高和信噪比。该应用程序高亮显示在 **Compound Results (化合物结果) 窗格** 中目前所选的化合物的色谱图。



❖ **若要显示某个化合物的细节**

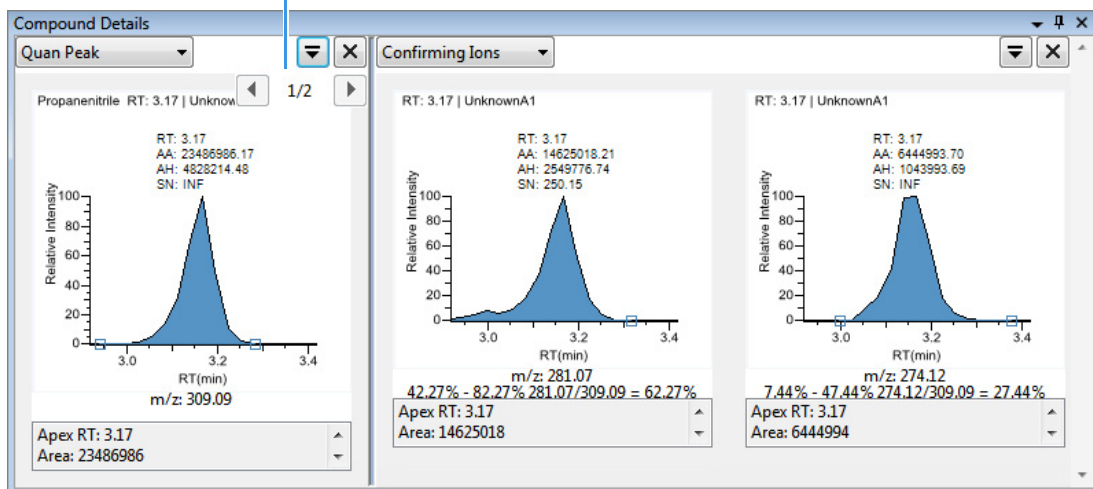
双击 Sample Peaks 窗格内的色谱图。

Compound Details (化合物细节) 窗格显示这个化合物的 **定量峰**、**校正曲线**、**确认离子**、**ISTD**、**参考峰**、**离子重叠**和**质谱**的信息。

定量峰

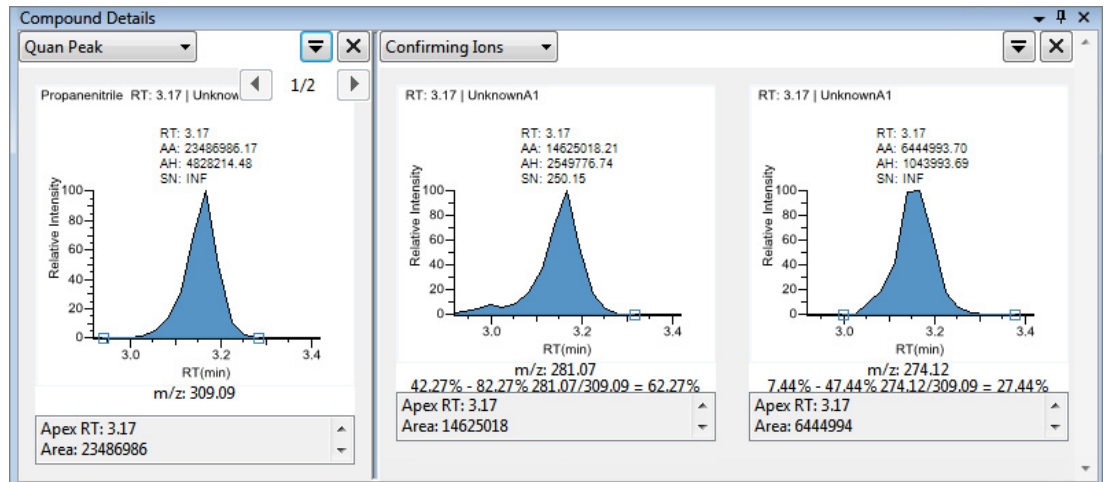
可以在定量峰之间切换，但是无法同时查看多个定量峰。Quan Peak (定量峰) 窗格右上角的指示器显示正在查看的多个定量峰。

2 个峰之 1



确认离子

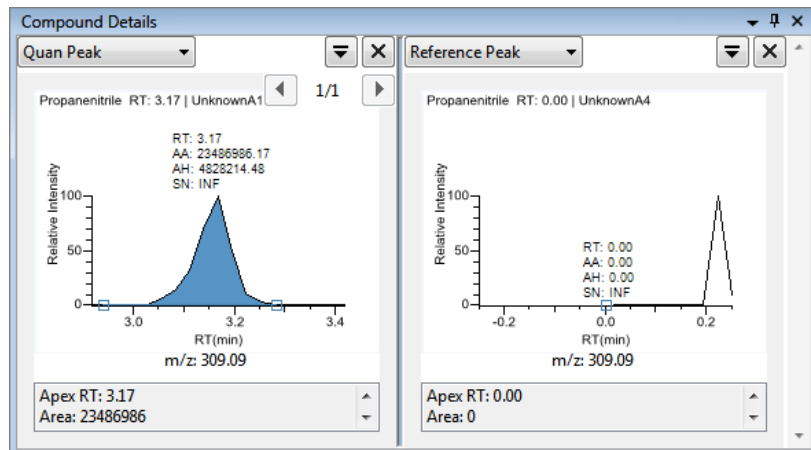
具有多个确认离子的定量峰。



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

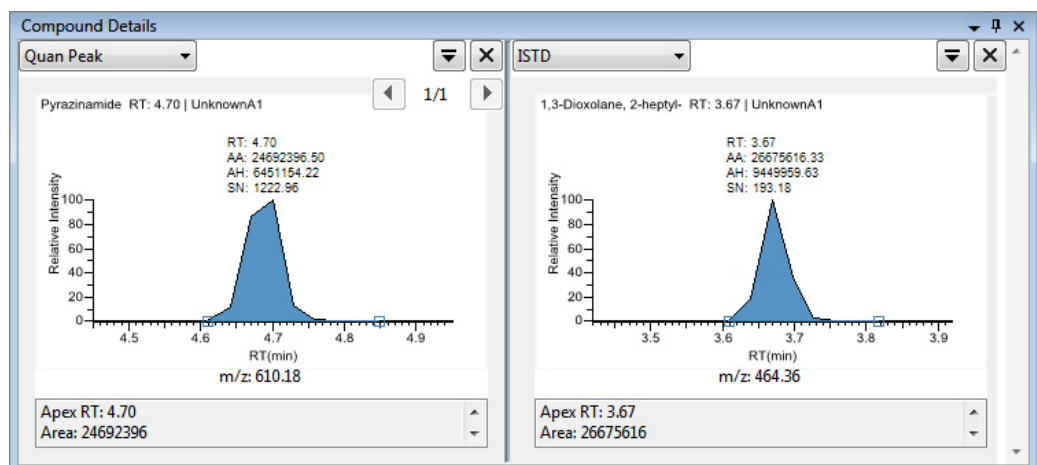
参考峰

具有参考峰的定量峰。



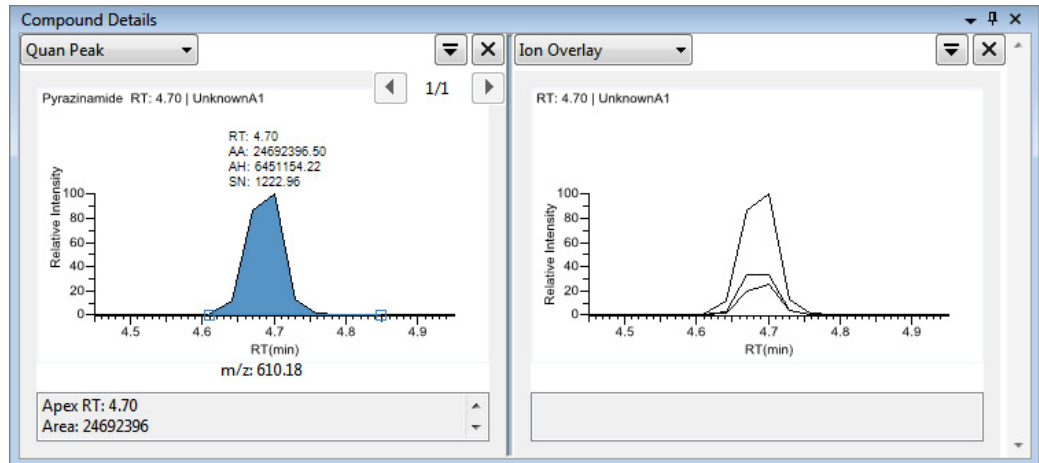
ISTD

具有内标的定量峰。



离子重叠

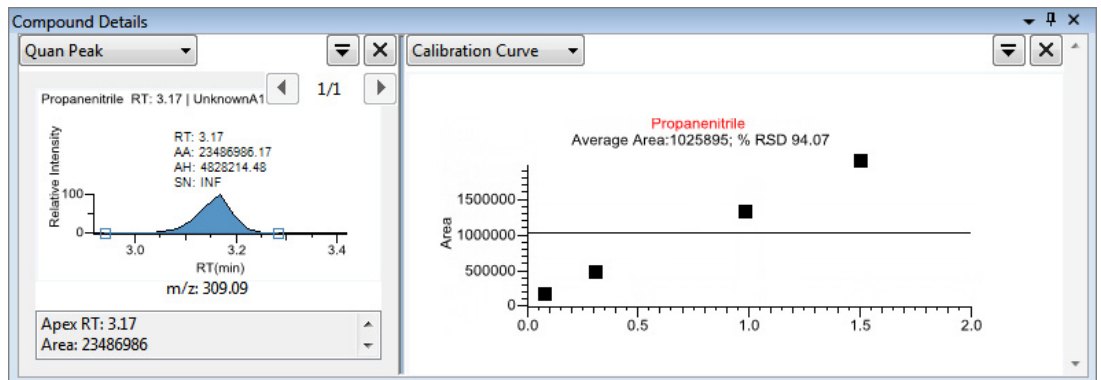
具有确认离子重叠的定量峰。



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

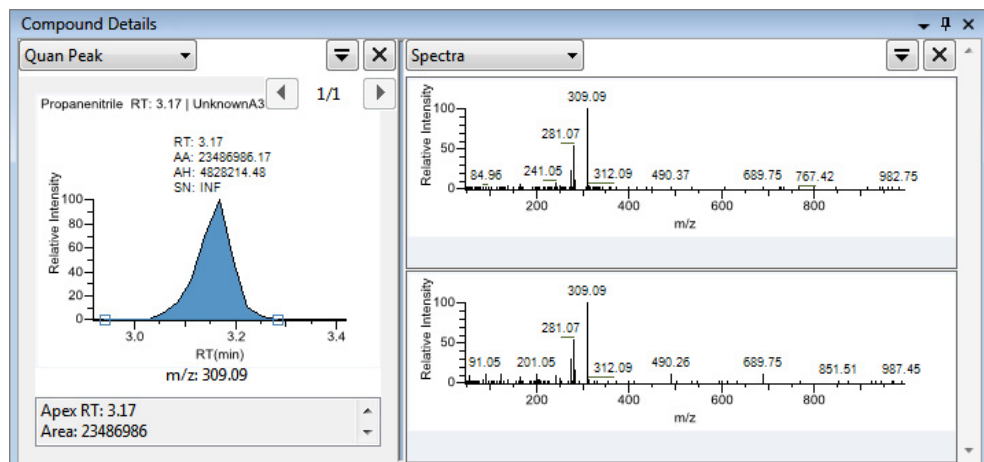
校正曲线

具有校正曲线的定量峰。



质谱

具有数据和参考质谱的定量峰。

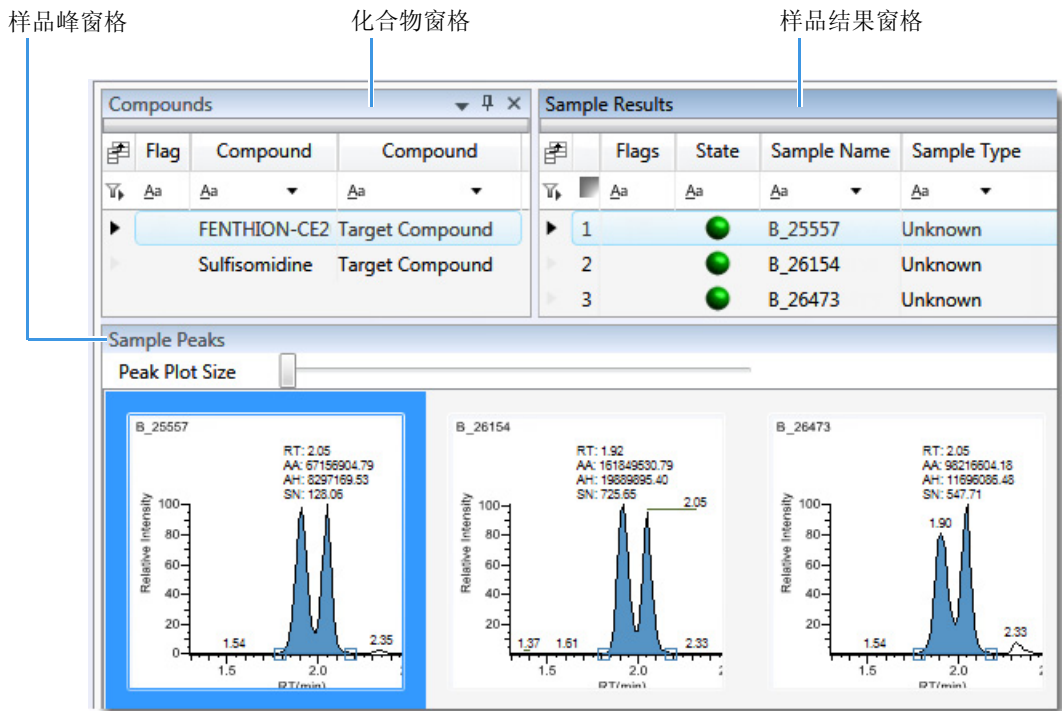


注释 对于具有类似物检测类型的化合物，应用程序在 Spectra 窗格中显示 “Not Available（不可用）”。

化合物视图

Compound View（化合物视图）显示方法中可用的所有化合物列表，当前批次中的所有样品，以及每个样品中找到的所有化合物的出峰图。

以下是默认的窗格及其位置：



• Compounds 窗格

利用 Compounds 窗格选择一个特定化合物。Sample Results（样品结果）窗格显示批次中的所有样品，并标记出所选化合物有错误的样品。

The screenshot shows the Compounds and Sample Results panels with annotations:

Flags	Compound	Compound Type	Expected RT	Status	Filename	Flags	Flag Details
	Benzoic acid	Target Compound	1.91	●	Benzo26473		
	Dibutyl phth	Target Compound	2.72	●	Benzo26154		
				●	Benzo25557	■ I	

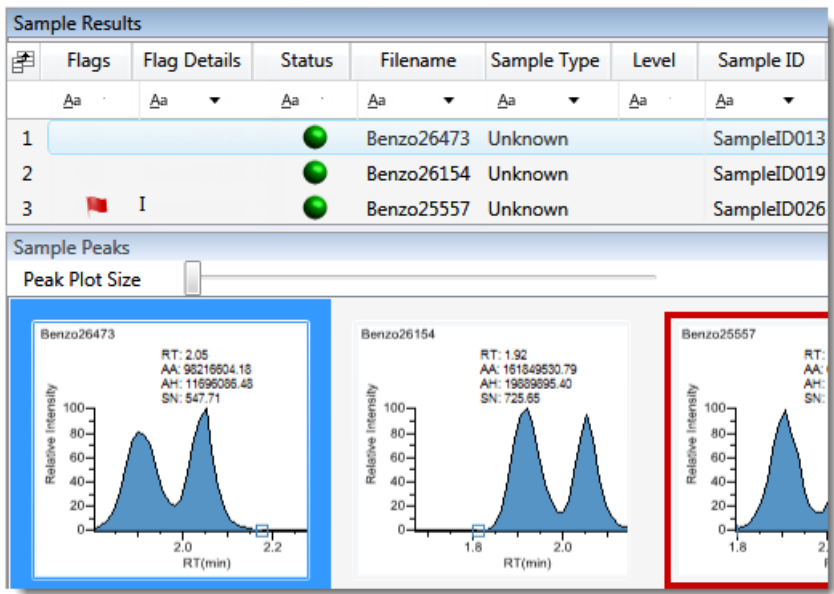
所选化合物

在这些样品的所选化合物中没有发现错误

在这个样品的所选化合物中发现错误

• **Sample Results (样品结果) 窗格**

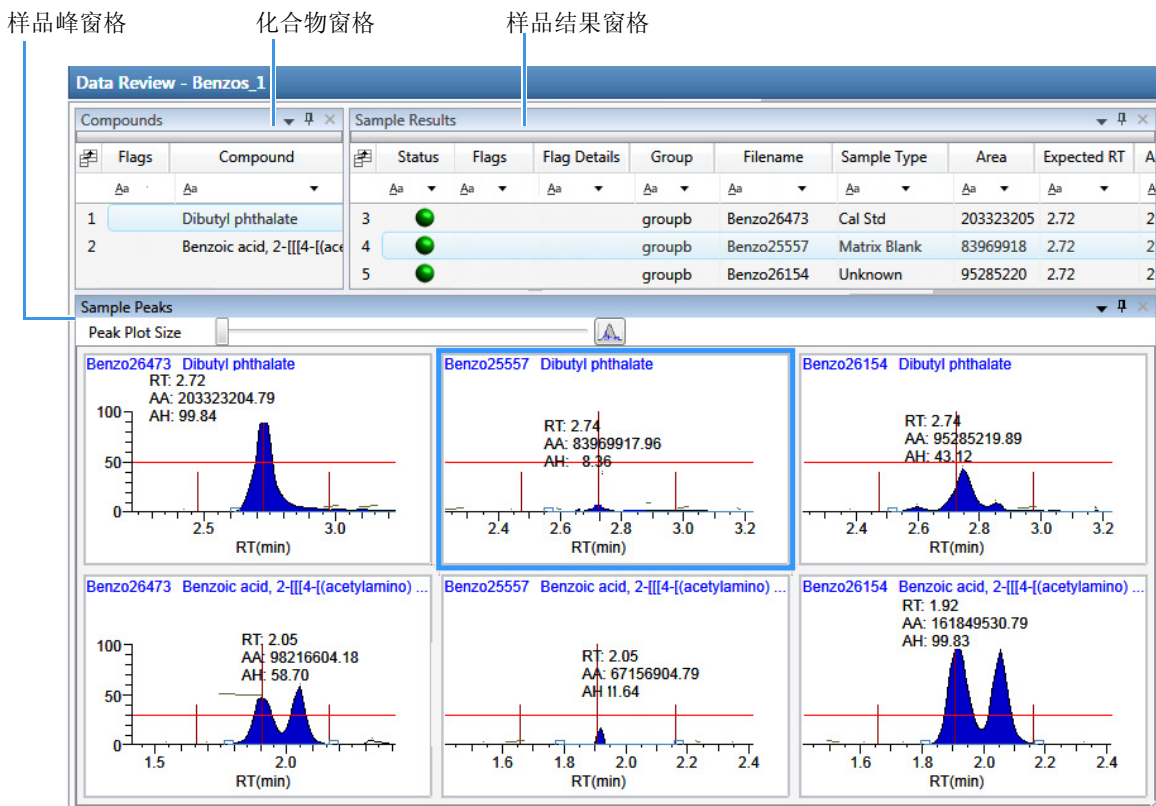
在 Sample Results 窗格中，选择特定样品的一个特定化合物。**Sample Peaks (样品峰)** 窗格高亮显示所选化合物，显示包含这个化合物的样品名称以及有关化合物的下列信息：色谱图、保留时间、峰面积、峰高和信噪比。



比较视图

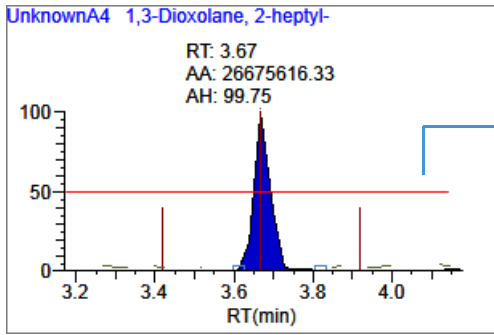
Comparative View (比较视图) 显示方法中可用的所有化合物列表，当前批次中的所有样品，每个样品中找到的所有化合物的出峰图，以及水平阈值线。

这些是默认的窗格及其位置：



比较视图中的窗格和具有 Group (组) 列的化合物视图一样。这列识别出某个样品所属的任何组，正如批次视图中指定的一样。

比较视图使用阈值方法和方法中指定量、在 Samples 页面上创建的组以及在 Threshold Samples 页面上所选的阈值样品，以定义它显示在样品峰图表上的阈值指导线。



水平线表示方法中指定的阈值。

定性视图

Qualitative View（定性视图）显示所选样品的定性信息。若要在定性视图中观察某个样品的已处理数据，必须在处理批次之前在批次视图中选择这个样品的 Qual Processing（定性处理）参数。

以下是默认的窗格及其位置：

样品窗格

峰窗格

Data Review Batch_Buspiron_1

Samples

Acc	Status	Sample Name	Sample Type
1	●	BuspironB1	Unknown
2	●	BuspironB2	Unknown

Peaks

Filter: + c ESI Full ms [200.00-800.00]

Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Library Hit
1.63	161	570	4	0.000	Sulfasomizole

Sample chromatogram

Filter: + c ESI Full ms [200.00-800.00]

Relative Intensity

RT(min)

Peak details

RT: 1.63
 AA: 15938608054.13
 AH: 664538778.45
 SN: 146.16

Relative Intensity

RT(min)

Spectrum

Relative Intensity

m/z

Library hits

Rank	SI	RSI	MP	Library Hit
1	332	978	0	2-Hexan
2	320	966	0	Sulfisom
3	314	959	0	Propane

峰细节窗格

样品色谱图窗格

质谱图窗格

库结果窗格

当在 Samples 窗格中选择一个样品时，相关的 Peaks（峰）窗格显示样品中找到的所有峰。

- **Samples 窗格**

利用 Samples 窗格选择一个特定样品。

Acc	Status	Sample Name	Sample Type
1	●	BuspironeB1	Unknown
2	●	BuspironeB2	Unknown
3	●	BuspironeB3	Unknown

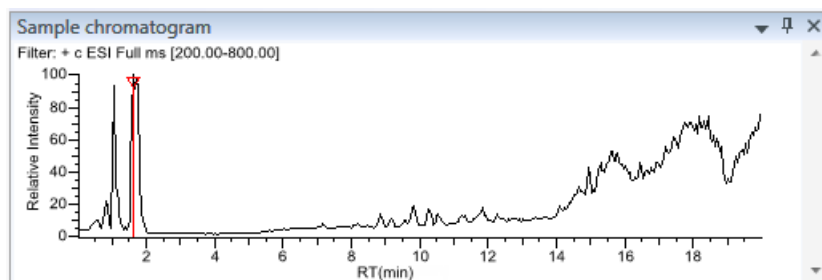
- **Peaks (峰) 窗格**

同时使用 Peaks 窗格和 Samples 窗格显示唯一的样品和峰组合的图形值。

Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Library Hit
9.82	124	732	0	0.000	Phenomorphane
1.05	274	793	59	0.000	Phosphoramidic acid, phenyl-, dipher
1.63	161	570	4	0.000	Sulfasomizole

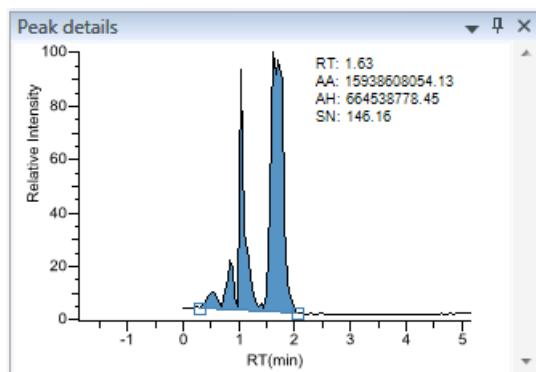
- **Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格**

Sample Chromatogram 导航窗格显示所选样品中的所有峰。在 Peaks 窗格中选择的峰显示为红色标记。



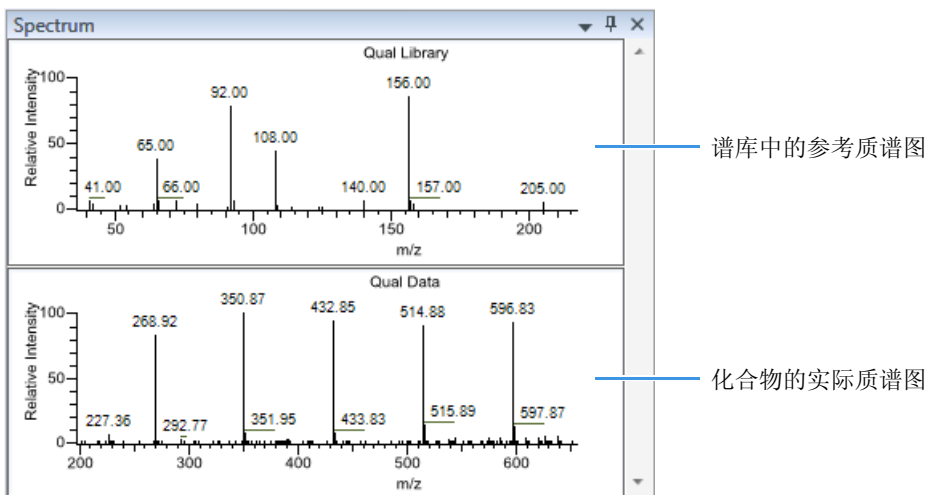
- **Peak Details (峰细节) 窗格**

Peak Details 窗格显示所选峰。



- **Spectrum (质谱图) 窗格**

Spectrum 窗格显示库中的参考质谱，以及所选样品的质谱数据。上方窗格显示参考谱库中已识别化合物的质谱图；下方窗格显示所选峰的实际质谱图。



谱库中的参考质谱图

化合物的实际质谱图

- **Library Hits (库结果) 窗格**

Library Hits 窗格显示所选峰的最佳库匹配。利用该窗格选中该峰的另一个库条目。

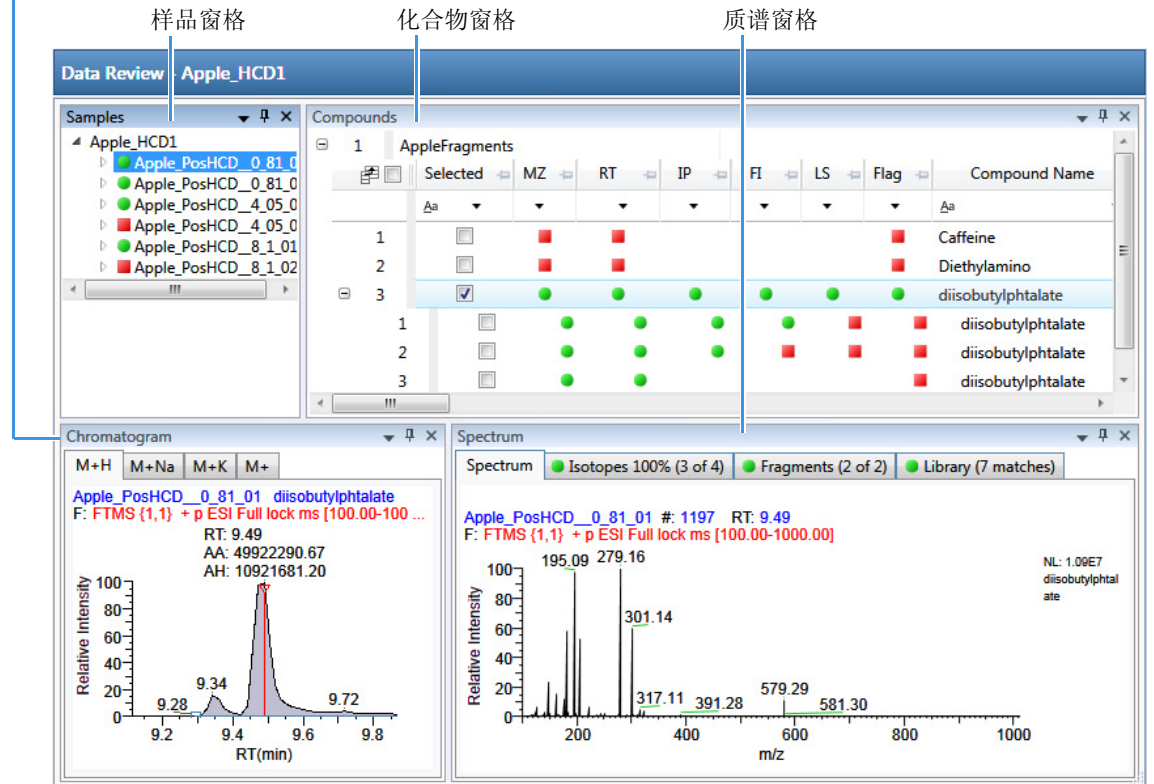
Library hits				
Rank	SI	RSI	MP	Library entry
<input type="radio"/>	=	=	=	Aa
<input checked="" type="radio"/>	1	332	978	0 2-Hexanone
<input type="radio"/>	2	320	966	0 Succinic anhydride
<input type="radio"/>	3	314	959	0 Propane, 1-(ethenylloxy)-:

目标筛选方法的数据查看

在目标筛选显示中，应用程序显示当前批次中的所有样品列表，方法中所有化合物的结果，以及当前所选样品中找到的所有化合物的质谱图和色谱图。

以下是默认的窗格及其位置：

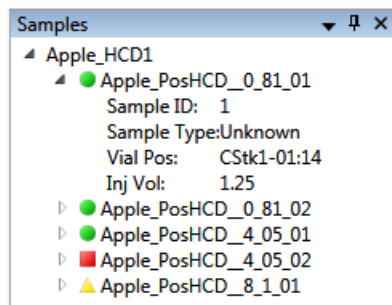
色谱图窗格



可以显示、隐藏或删除任意这些窗格。

Samples 窗格

利用 Samples 窗格选择批次中的一个特定样品。相关的 Compounds 窗格显示方法中所有化合物，并标记所选样品中有错误的任何化合物。



Samples 窗格中的标记表示如下：

- 当样品 / 化合物 / 峰组合已被识别且完全确认时，出现一个绿色圆圈。
- ▲ 当样品 / 化合物 / 峰组合已被识别但未完全确认时，出现一个黄色三角。
- 当样品 / 化合物 / 峰组合未识别时，出现一个红色方块。

Compounds 窗格

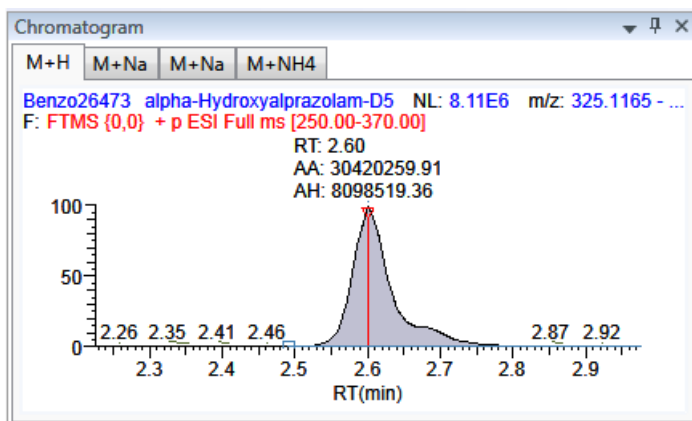
Compounds 窗格显示所选样品中的所有找到的峰，并标记有错误的任何化合物。Target Screening Results（目标筛选结果）表格显示了化合物数据库中找到的已识别化合物，以及方法处理标准的结果。

Compounds										
Benzodiazepines Example Database										
	Selected	MZ	RT	IP	FI	LS	Flag	Compound Name	Match Result Name	Formula
+	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 0.19	C17H14ClFN2O2
+	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 1.42	C17H14ClFN2O2
+	<input type="checkbox"/>	●	■	●	●	■	▲	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 1.71	C17H14ClFN2O2
+	<input type="checkbox"/>	●	■	●	●	■	▲	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 1.96	C17H14ClFN2O2
+	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 2.35	C17H14ClFN2O2

Chromatogram（色谱图）窗格

利用 Chromatogram 窗格显示所选化合物所有加合物的已提取色谱图。

第一个选项卡显示峰结果中强度最大的目标加合物。其他（可选）选项卡显示同一保留时间下，目标化合物的其他加合物的提取离子色谱图，按照强度顺序排列。如果没有加合物信号，第一个选项卡显示在指定的保留和色谱图窗口内，预期 m/z 的 XIC。当没有指定保留时间或窗口时，应用程序显示完整的时间范围。



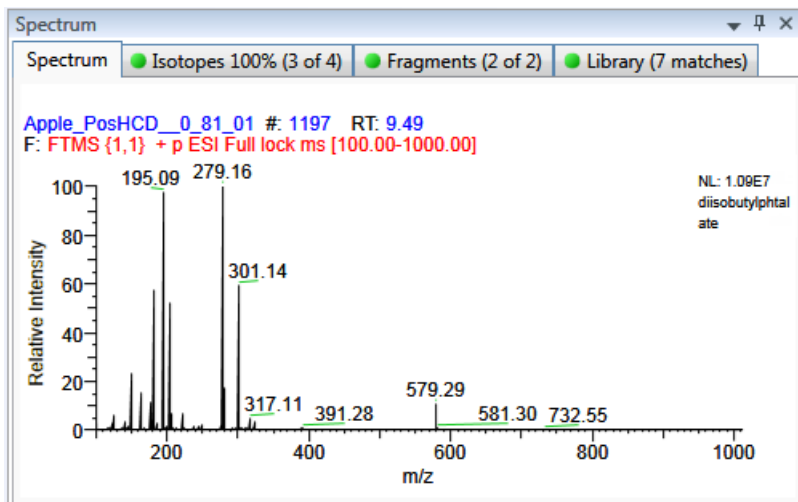
Spectrum 窗格

利用 Spectrum 窗格显示 Chromatogram 窗格内所选加合物的质谱图、同位素、碎片和库检索信息。Spectrum 窗格只显示方法中指定的识别和确认标准。确认只基于强度最大的加合物。

Spectrum 窗格包括每个所选样品 / 化合物 / 峰组合的下列信息页面（可用时）：

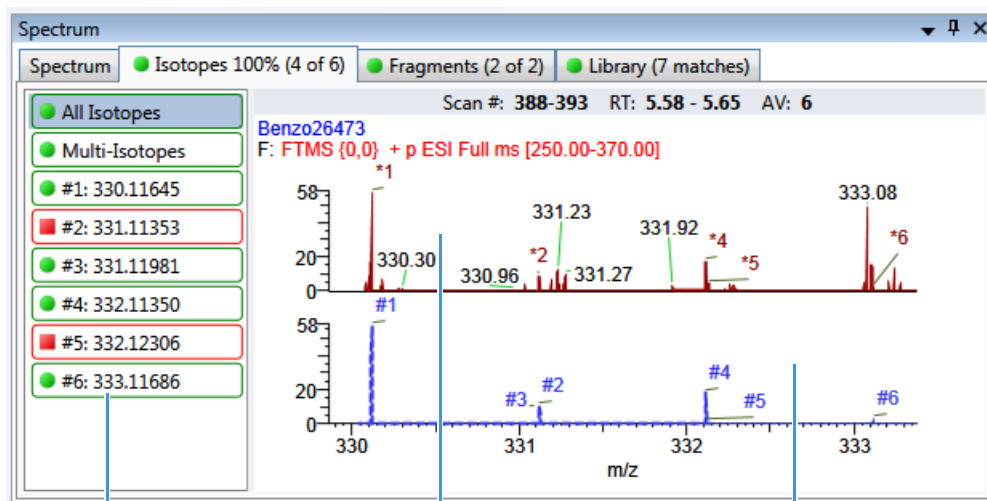
- **质谱图**

质谱图在 Spectrum 页面右侧显示中性丢失（NL）和化合物 / 峰名称信息。若数据可用，谱图宽度为原始文件中的完整质量数范围。否则，应用程序使查看宽度变为扫描范围。



- **同位素**

根据筛选方法中定义的阈值和偏差参数，Isotopes（同位素）页面显示同位素分布结果。为了识别或确认一个化合物的存在，同位素分布匹配的分百分比必须高于指定的拟合阈值百分比。若同位素峰强度（相对于单同位素离子强度值而言）高于该同位素离子理论相对强度的指定强度偏差百分比，则该同位素峰未找到。若同位素峰的 m/z 测量值与其 m/z 预期值之间的偏差小于指定质量数偏差，则该同位素峰可以找到。



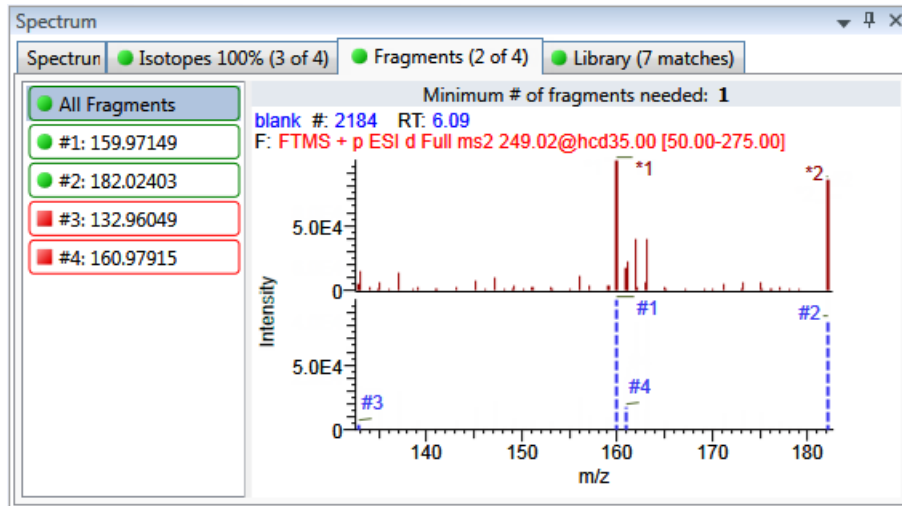
同位素的预期 m/z

测量质谱图

预期质谱图

- 碎片

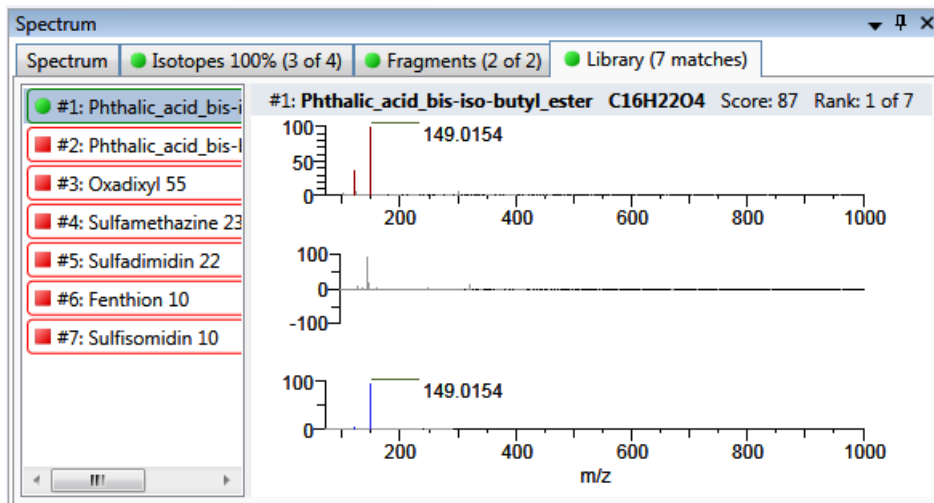
Fragments（碎片）页面显示在筛选方法中指定的碎片最大数量。必须在筛选库中定义碎片。



- 库

Library（库）库页面显示匹配的库质谱图（蓝色）和实验质谱图（黑色）。由库检索匹配得到的分数百分比必须高于指定阈值，以识别或确认某个化合物的存在。

应用程序为匹配的库质谱图和测量质谱图中的最高峰显示 100% 强度，并将匹配的库条目名称的结果中性丢失（NL）值显示在图表右侧。

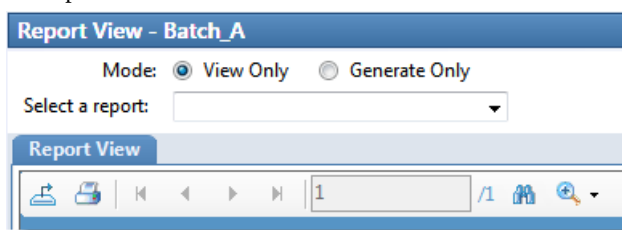


在 Analysis 模式的 Report View（报告视图）中，可以显示或生成当前所选批次的报告。必须在能够查看或生成该样品的水平报告之前处理批次中的每个样品。

❖ 若要打开 Report View

单击导航窗格的 **Report View**。

从 Report View 中可以查看报告或生成批次的报告。



- **View Only（仅查看）**：显示批次、样品或化合物的所选报告类型的 PDF 文件或 Microsoft™ Excel™ 电子数据表预览。参阅“[查看报告](#)”。
 - 对于定量批次，可以预览所有 Standard（标准）报告类型的报告。
 - 对于目标筛选批次，可以预览所有 Standard 和 Target Screening（目标筛选）报告类型的报告。
 - 必须在生成 Custom（自定义）和 ToxID 报告类型之后，才能查看这些报告。

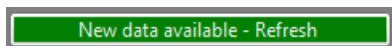
Report View 页面显示以下其中一种报告输出格式：

- 保存为 PDF 文件的标准报告
- XLSM 格式的自定义报告
- 保存为 PDF 文件的目标筛选报告

- **Generate Only（仅生成）**：为所选报告创建所有指定的报告输出格式。参阅第 23 页上的“[生成报告](#)”。

❖ 若要刷新 Report View

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

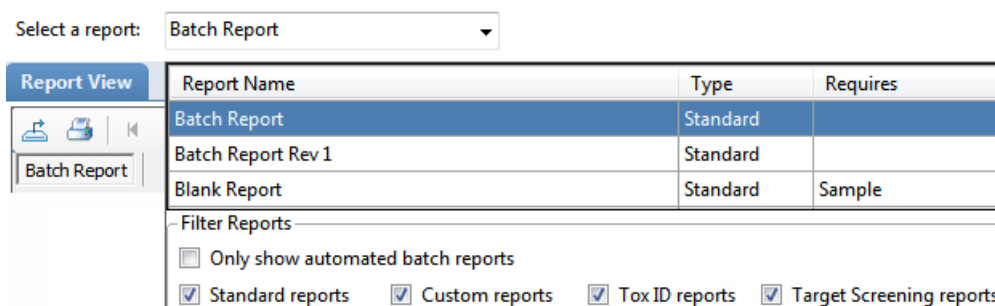


查看报告

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

❖ 若要选择报告

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



这些报告反映了应用程序 Configuration（配置）模式中的 Displayed Reports（已显示报告）选项。

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

（可选）若要帮助组织报告，可以过滤该列表。参阅 [Filter Reports（过滤报告）](#) 选项。

（可选）可以选择过滤选项的任何组合。

表 1. Filter Reports (过滤报告) 选项

选项	结果
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 (自动批次报告) 区域指定格式的报告。
Standard Reports (标准报告)	显示 Standard 报告类型。
Custom Reports (自定义报告)	显示 Custom 报告类型。在报告生成之前, 无法查看 Custom 报告。
ToxID Reports (ToxID 报告)	显示 ToxID 报告类型。在报告生成之前, 无法查看 ToxID 报告。
Target Screening Reports (目标筛选报告)	显示 Target Screening 报告类型。

3. 双击报告名称。

报告列表关闭。

- 当所选报告为批次水平报告时, 应用程序在 Report View 页面显示报告。
当所选报告包括每个样品对应的独立报告时, 必须选择一个样品文件。遵照程序“若要选择一个样品”。进行操作

Select a report: Sample file:

- 当所选报告包括每个化合物对应的独立报告时, 必须选择一个化合物。遵照程序“若要选择化合物”。进行操作

Select a report: Compound:

- 当所选报告包括每个样品和样品中每个化合物对应的独立报告时, 必须同时选择一个样品文件和化合物。遵照程序“若要选择样品和化合物”。进行操作

Select a report: Sample file: Compound:

❖ 若要选择一个样品

1. 打开 Sample File (样品文件) 列表显示批次中的所有样品。

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA1	1	Unknown
UnknownA2	1	Unknown

Filter Samples

Only show samples relevant to the selected report.

若仅显示所选报告中的样品, 选中 **Only Show Samples Relevant...** (仅显示相关样品 ...) 复选框。例如, 若选择 Check Standard Report (质控样报告), 则样品列表仅显示 Chk Std 样品。点击列标题对样品进行排序。应用程序在用户每次打开该批次的 Report View 时都保持该排列顺序。

2. 双击样品名称。

样品列表关闭。Report View 页面显示样品水平报告。

❖ 若要选择化合物

1. 打开 Compound 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

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

❖ 若要选择样品和化合物

1. 打开 Sample File 列表显示批次中的所有样品。

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA1	1	Unknown
UnknownA2	1	Unknown

Filter Samples

Only show samples relevant to the selected report.

2. 若仅显示包含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，则样品列表仅显示 Chk Std 样品。
若要对报告排序，点击列标题。应用程序在用户每次打开该批次的 Report View 时都保持该排列顺序。
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

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

生成报告

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

❖ 若要选择报告

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

Select a report: Target Screening Long Report

Report Name	Type	Requires
Target Screening Long Report	ToxID	
Alternate BatchReport	Custom	
Target Screening Summary Report	Target Screeni	Sample

Filter Reports

Only show automated batch reports

Standard reports Custom reports ToxID reports Target Screening reports

应用程序在列表中仅显示已配置的样品水平报告。无法从该视图生成批次水平或化合物水平报告。

若报告数量多，可以过滤该列表。

3. 若要限制希望显示在报告列表中的报告类型，在 Filter Reports 区域中选中报告过滤器选项的任意组合。

有关 Filter Reports 选项的描述，参阅第 22 页上的“Filter Reports（过滤报告）选项”。

4. 双击报告名称。

报告列表关闭。

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



❖ 若要选择样品

1. 打开 Sample File 列表显示批次中的所有样品。

Select	Sample Name	Sample ID	Sample Type
<input type="checkbox"/>	UnknownA1	1	Unknown
<input type="checkbox"/>	UnknownA2	1	Unknown
<input type="checkbox"/>	UnknownA3	1	Unknown
<input type="checkbox"/>	UnknownA5	1	Unknown

Filter Samples

Only show samples relevant to the selected report.

2. 若要仅显示所选报告中的样品，选中 **Only Show Samples Relevant...** 复选框。

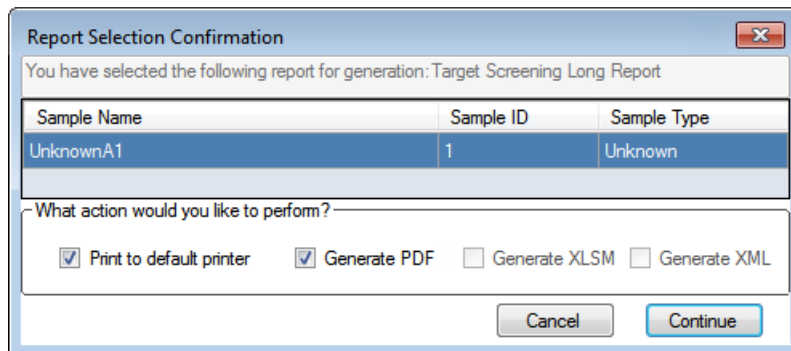
例如，若选择 Check Standard Report，则样品列表仅显示 Chk Std 样品。

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

3. 选中每个希望包含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。



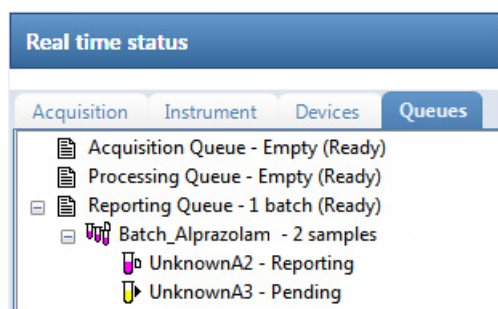
5. 在 What Action Would You Like to Perform? (希望执行的操作) 区域，选择想要创建的报告类型。

注释 应用程序自动选择所需输出格式。这些选项不可编辑。

样品列表关闭。Report View 页面生成并显示样品水平报告。

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

处理报告


利用 Report View 页面上的图标来查看、打印或导出报告。

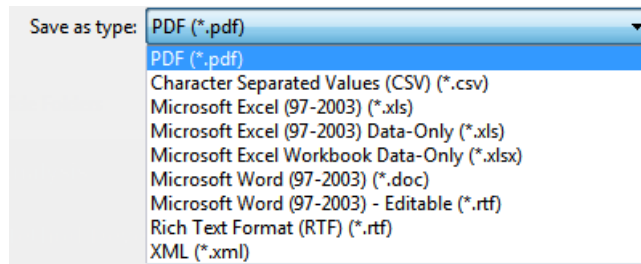
- 可以查看所有 Standard 和 Target Screening 报告类型的 PDF 文件报告。
- 当选中 Generate XLSM（生成 XLSM）选项时，可以查看任意 Custom 报告类型的 Excel 宏启用工作簿报告。

❖ 若要打印标准或目标筛选报告

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


❖ 若要导出标准报告

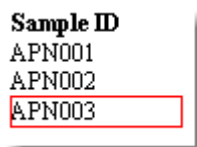
1. 从 Select a Report 列表中选择要打印的报告。
2. （可选）从 Sample File 列表选择一个样品。
应用程序在 Report View 页面上显示报告。
3. 单击 **Export Report（导出报告）** 按钮，。
4. 在 Export Report 对话框中找到准备写入报告文件的文件夹。
5. 输入导出报告文件的文件名。
6. 从 Save as Type（另存为类型）列表选择一个文件类型。




7. 单击 **Save（保存）**。
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。

❖ 若要检索文本

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



❖ 若要放大报告文本

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

活动视图

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

Report View - Batch_2

Mode: View Only Generate Only

Select a report: Calibration Curve Report

Report View Active View

Total Rows: 4 Showing: All Compounds

Status	Compound	Compound Type	QAQC Flags	Manual Flags	Curve Type	Average RF	Average	A0	A1	A2	RSquared	RSD
✔	METOLACHLO...	Target Compound										
✔	DIFENOXURON...	Target Compound										
⚠	CHLOROXYURO...	Target Compound										
⚠	Benzenamine, ...	Target Compound										

Quan Peak 1/0 Spectra

并非所有报告支持 Active View 功能。若要查看哪些报告支持 Active View，可参阅 *TraceFinder 用户手册* 第 6 章“使用分析模式”。

❖ 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 错误标记。

❖ 若要显示报告

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

Mode: View Only Generate Only

Select a report: Blank Report Sample file: UnknownA1

❖ 若要利用 Showing 切换按钮过滤显示的化合物

点击 Showing（显示）切换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。

Showing: All Compounds Showing: Flagged Compounds Only

本地方法

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

❖ 若要打开 Local Method 视图

单击位于 Analysis 导航窗格的 **Local Method**。

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

将本地方法命名为 *BatchName_MasterMethodName*。

图 1. 一个定量方法的 Local Method View

Analysis ▾

Local Method View - Batch_2_Method_Vitamin1

Master method: [Method_Vitamin1](#)

Lab name: Default Laboratory 1

Assay type: Assay name

Injection volume: 1000.00

Mass Precision: 2

Ion range calc method: Manual

Instrument method: Instrument1 [Edit] [Update]

Tune/Breakdown method: Instrument1 [Edit] [Update]

Qualitative peak processing template: Default

Background subtraction range option: None

Number of scans to subtract: 1

Steppoff value: 0

Mass Tolerance: 500.0 MMU PPM [Apply]

图 2. 一个筛选方法的 Local Method View

Analysis ▾

Local Method View - Batch_4_Method_Screening

Master method: [Method_Screening](#)

Lab name: Default Laboratory

Assay type: Assay name

Injection volume: 1.00

Mass Precision: 2

Instrument method: Instrument1 [Edit] [Update]

Mass Tolerance: 500.0 MMU PPM [Apply]

Library Search Type: NIST

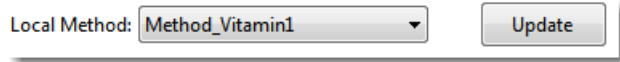
Show not found compounds

❖ 若要编辑本地方法

1. 输入对本地方法所作的任何更改。
更多有关编辑方法的说明，参阅 *TraceFinder 用户手册* 中的“Using the Method Development Mode（使用方法开发模式）”章节。
2. 选择 **File（文件） > Save（保存）**。
3. 使用经过编辑的本地方法处理批次或创建新报告，需返回至 Batch View 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**。



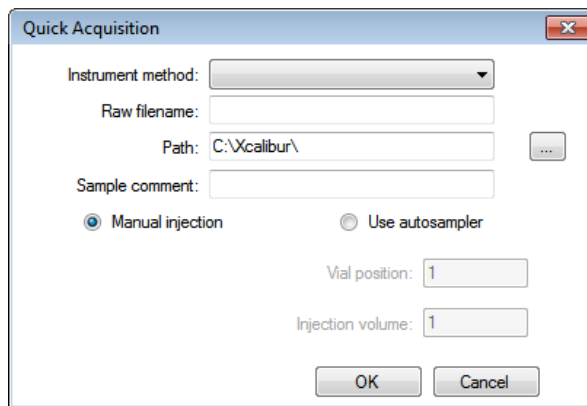
应用程序以相同名称的主方法覆盖本地方法。可以使用这一特性以原始主方法覆盖已编辑的主方法或以已更新的主方法覆盖本地方法。

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

注释 仅当在应用程序 Configuration 模式中激活 Quick Acquisition（快速采集）特性时，这个特性才可用。

❖ 若要运行快速采集

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



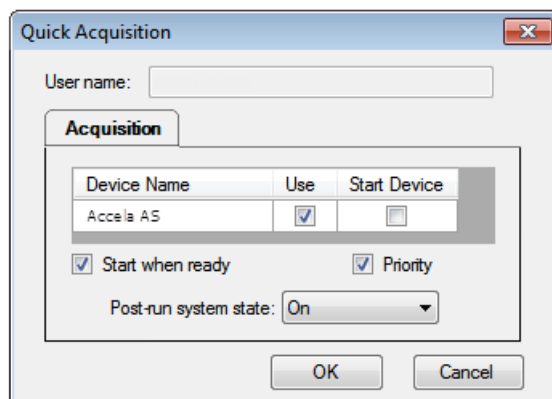
2. 选择仪器方法。
输入采集的原始数据文件名。不要输入 .raw 文件后缀。
3. 对于路径，浏览至希望写入已采集原始数据文件的文件夹。
4. 选择手动进样或自动进样器选项：
 - 若要指定手动进样，执行以下操作：
 - i. 选中 **Manual Injection（手动进样）** 选项。
 - ii. 点击 **OK**。

应用程序将样品提交至 Acquisition 序列。

- 若要执行自动进样器进样，执行以下操作：
 - i. 选中 **Use Autosampler（采用自动进样器）** 选项。
 - ii. 在 Vial Position（样品瓶位置）框中输入样品瓶位置。
 - iii. 在 Injection Volume 框中键入进样体积。
允许的最小进样体积为 0.1 μL ；允许的最大进样体积为 5000 μL 。

iv. 点击 **OK**。

Quick Acquisition 对话框打开。



v. (可选) 选中 **Start Device (启动设备)** 复选框表示该设备将会触发与其它仪器的通信。通常是自动进样器。

vi. (可选) 选中 **Start When Ready (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。

vii. (可选) 选中 **Priority (优先级)** 复选框，在当前采集样品后立即放置样品。

viii. (可选) 选择 Post-run System State (运行后仪器状态) 的值: **Unknown (未知)**、**On (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。

ix. 点击 **OK**。

应用程序将样品提交至 Acquisition 序列。

术语表

A

Acquisition 采集

Acquisition Mode 采集模式

Active View 活动视图

Add Auto Sample 添加自动样品

Add New Auto Sample 添加新自动样品

Add Reference Sample 打开参考样品

Add Sample 添加样品

All Compounds 所有化合物

Analysis 分析

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

Auto Samples 自动样品

Automated Batch Reports 自动批次报告

B

Batch 批次

Batch View 批次视图

Blank 空白样

Breakdown 裂解产物

Browse 浏览

Browse in Raw File 浏览原始文件

C

Calibration Levels 校正水平

Calibrator/Cal Std 校正标样

Check Standard Report 质控样报告

Chk Std 质控样

Chromatogram 色谱图

Comparative View 比较视图

Compound Details 化合物细节

Compound Results 化合物结果

Compounds/Compound 化合物

Configuration 配置

Confirming Ions 确认离子

Continue 继续

Conversion Factor 转换系数

Create 创建

Create New Batch 创建新批次

Custom 自定义

Custom Reports 自定义报告

D

Data Review 数据查看

Dil Factor 稀释因子

Displayed Reports 已显示报告

E

Export Report 导出报告

F

File 文件

Filename 文件名

Filter Reports 过滤报告

Find Next 查找下一个

Find Text 查找文本

Fragments 碎片

G

General 常规

Generate 生成

Generate Only 仅生成

Generate XLSM 生成 XLSM

Go 运行

Group(s) 组

H

Hydrolysis 水解

I

Import 导入

Import Samples 导入样品

Imported Samples Will Be 导入样品将被

Inj Vol/Injection Volume 进样体积

Insert Copy Sample 插入复制样品

Insert Sample 插入样品

Inserted at the Selected Row 插入到所选定行

Intelligent Sequencing 智能排序

Ion Overlay 离子重叠

L

LCS 实验室控制样品

LCSD 实验室控制重复样品

Level 水平

Library 库

Library Hits 库结果

Local Method 本地方法

M

Manual Injection 手动进样

Matrix Blank 基质空白

MDL 方法检出限

Method 方法

Method Development 方法开发

Method Val 方法验证

MS 基质加标

MSD 基质加标重复

N

Negative 阴性

New 新建

New Data Available - Refresh 新数据可用 - 刷新

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

No Data 没有数据

Not Available 不可用

Number of Injections 进样次数

O

Off 关机

OK 确定

On 开机

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

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

Open 打开

Open Chromatograph Reference Sample 打开色谱图参考样品

P

Peak Details 峰细节

Peaks 峰

Position 位置

Post-run System State 运行后仪器状态

Print 打印

Print Report 打印报告

Priority 优先级

Q

QC 质控样

QC Standard Report 质控样报告

QC Std 质控样

Qual Processing 定性处理

Quality Control Report 质控样报告

Quan 定量

Quick Acquire Sample 快速采集样品

Quick Acquisition 快速采集

R

Reference Sample 参考样品

Reinject This Sample 重新进样

Remove Selected Samples 移除所选样品

Report Selection Confirmation 报告选择确认

Report View 报告视图

S

Sample Chromatogram 样品色谱图

Sample File 样品文件

Sample Import Tool 样品导入工具

Sample Peaks 样品峰

Sample Results 样品结果

Sample Type 样品类型

Sample(s) 样品

Save 保存

Save as Type 另存为类型

Screening 筛选

Select a Report 选择报告

Showing 显示

Solvent 溶剂

Specimen 定量样品

Spectra/Spectrum 质谱图

Standard 标准

Standard Reports 标准报告

Standby 待机

Start Device 启动设备

Start When Ready 准备就绪时启动

Status 状态

Std Bracket 标曲更新

Submit Batch 提交批次

Submit Options 提交选项

Submit Selected Samples 提交所选样品

T

Target Screening 目标筛选

Target Screening Reports 目标筛选报告

Target Screening Results 目标筛选结果

Threshold Samples 阈值样品

ToxID Reports ToxID 报告

TraceFinder User Guide TraceFinder 用户手册

Tune 调谐

Tune/Breakdown 调谐 / 裂解产物

Type 类型

U

Unextracted 未提取

Unknown 未知样 / 未知

Update 更新

Use Autosampler 采用自动进样器

Using the Analysis Mode 使用分析模式

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

V

Vial Position 样品瓶位置

View Only 仅查看

W

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

Z

Zoom 缩放

商标

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