

TraceFinder 快捷菜单快速参考手册

本快速参考手册描述了 Thermo TraceFinder™ 分析软件 3.1 中可用的右击快捷菜单。

目录

- 采集模式
- 分析模式
- 方法开发模式
- 商标

采集模式

Acquisition（采集）模式中的下列页面包括快捷菜单：

- 样品定义页面
- 完成页面
- 实时状态窗格

样品定义页面

在 Sample Definition（样品定义）页面上任意处右击，可以使用快捷菜单命令创建样品列表。

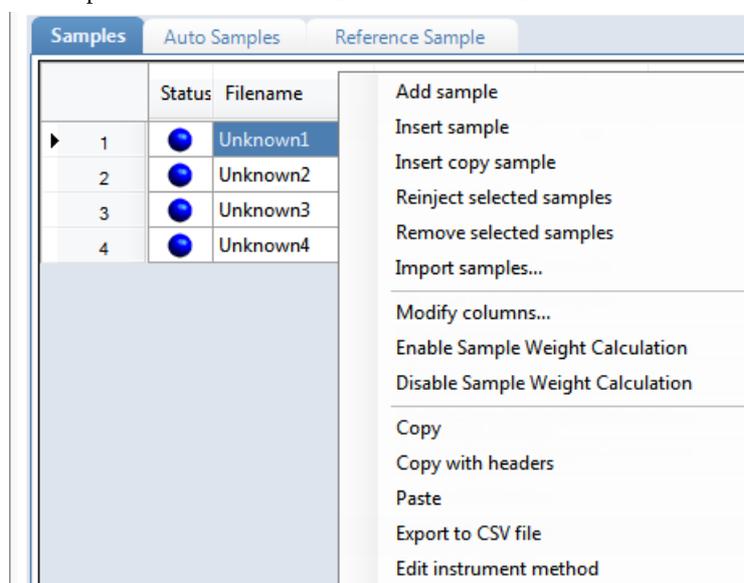


表 1. Sample Definition 页面快捷菜单命令（第 1 页，共 2 页）

命令	描述
Add Sample (添加样品)	在样品表格中添加一个空行。
Insert Sample (插入样品)	在样品表格中所选行上方插入单个空行。
Insert Copy Sample (插入复制的样品)	复制当前选择行并在该行上方插入复制行。
Reinject Selected Samples (重新进样所选样品)	创建所选样品的副本并在文件名称末尾附加 INJ001。多次重新进样的同一样品将依进样顺序编号为 INJ002、INJ003，以此类推。
Remove Selected Samples (移除所选样品)	从样品表格中移除所选样品。
Import Samples (导入样品)	Sample Import Tool（样品导入工具）对话框打开，然后可以从 .csv、.xml 或者 .sld 文件中导入样品列表。

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

命令	描述
Copy Down (向下复制)	将所选行的值复制到你下方的所有行中。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 对话框以选择显示的列及更改这些列的显示次序。
Enable/Disable Sample Weight Calculation (启动 / 禁止样品质量计算)	显示或隐藏 Sample Volume (样品体积)、Dilution Factor (稀释因子)、Sample Weight (样品质量)、Calculation Type (计算类型) 和 Final Units (最终单位) 列。
Copy (复制)	将所选行或列中的数据复制至剪贴板。利用该命令将样品信息复制至另一个应用程序, 如 Microsoft™ Excel™ 工作表。无法将该数据粘贴回 Acquisition 模式样品列表中。
Copy With Headers (带标题复制)	将所选行或列中的数据及其相关的列标题复制至剪贴板。利用该命令将样品信息复制至另一个应用程序, 如 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中。
Paste (粘贴)	将来自其他应用程序如 Excel 工作表的单列数据粘贴至所选列。
Undo Last Paste (撤销上次粘贴)	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) 对话框将该批次保存为 .csv 文件。
Edit Instrument Method (编辑仪器方法)	打开 Instrument Setup (仪器设置) 窗口, 在此可以编辑仪器方法中的参数。 <ul style="list-style-type: none"> 在编辑外部方法时, 应用程序更新了 ...\Xcalibur\methods 文件夹中的方法。 在编辑内部方法时, 应用程序更新 ...\TraceFinderData\Projects\project\subproject\batch\Methods\method 文件夹中的方法。

完成页面

在 Finish (完成) 页面中右击某个设备名称, 可以利用快捷菜单命令为已配置仪器指定设备状态。

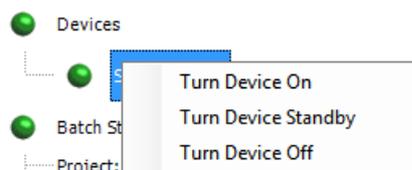


表 2. Finish 页面快捷菜单命令

命令	描述
Turn Device On (开启设备)	当前运行完成时, 使系统保持 On (开机), 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: 开机
Turn Device Standby (使设备待机)	当前运行完成时, 使系统保持 Standby (待机), 这样在开始下一次运行前只需短暂延迟。
Turn Device Off (关闭设备)	在当前运行完成后使设备处于 Off (关机) 状态。Off 状态表示可由 TraceFinder 应用程序控制的所有仪器电源均关闭。该操作包括所有加热器和大多数子组件的电源, 但某些情况下某些子组件例外。

实时状态窗格

在 Real Time Status（实时状态）窗格的 Queues（队列）页面上，右击某个队列、批次或者样品名称，可以利用快捷菜单命令控制 Acquisition 和 Processing（处理）队列。

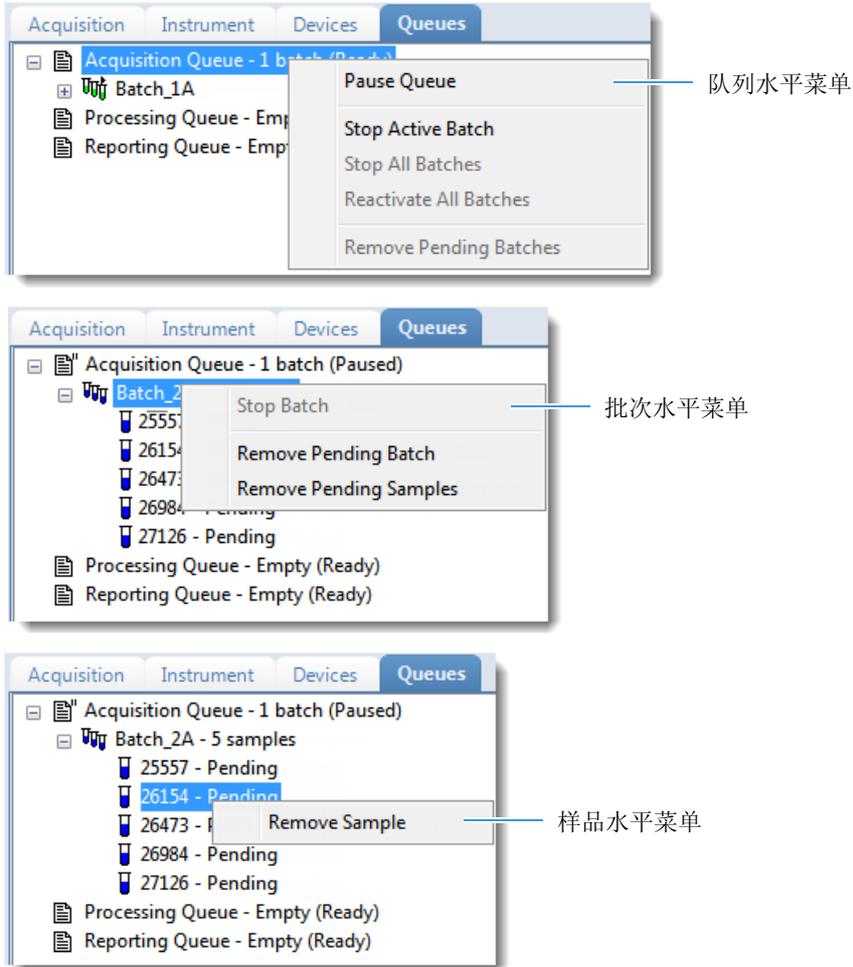


表 3. Queues 页面快捷菜单命令

命令	描述
队列水平命令	
Pause Queue (暂停队列)	当前样品完成后，应用程序暂停指定队列。该操作仅对选中队列有效。
Stop Active Batch (停止活动批次)	移除指定队列中的所有待定样品。该操作不影响活动样品。
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。该操作不影响活动样品。
Reactivate All Batches (重新激活所有批次)	使所有暂停批次返回活动状态。
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。
批次水平命令	
Stop Batch (停止批次)	当前样品完成后，应用程序移除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)	移除所选批次中的所有待定样品。
样品水平命令	
Remove Sample (移除样品)	当前样品完成后，应用程序从批次中移除所选样品。

分析模式

Analysis（分析）模式中的下列视图包括快捷菜单：

- 批次视图
- 样品视图

批次视图

Batch View（批次视图）提供下列快捷菜单：

- [Sample List（样品列表）](#) 菜单
- [Automated Batch Reports（自动批次报告）](#) 菜单

Sample List（样品列表）菜单

在样品列表窗格任意处右击，可以使用快捷菜单命令添加、插入或移除样品。

	Status	Filename	Sample type	Groups	Qual Processing
▶ 1	●	Unknown2			
2	●	Unknown3			
3	●	Unknown4			

- Add sample
- Insert sample
- Insert copy sample
- Reinject selected samples
- Remove selected samples
- Import samples...
- Browse in raw file (Move) ...
- Browse in raw file (Copy) ...
- Map raw files to samples...
- Copy down
- Modify columns...
- Enable Sample Weight Calculation
- Disable Sample Weight Calculation
- Copy
- Copy with headers
- Paste
- Export to CSV file
- Edit instrument method

表 4. 样品列表窗格快捷菜单命令（第 1 页，共 2 页）

命令	描述
Add Sample（添加样品）	在样品表格中添加一个空行。
Insert Sample（插入样品）	在样品表格中所选行上方插入单个空行。
Insert Copy Sample（插入复制的样品）	复制当前选择行并在该行上方插入复制行。
Reinject Selected Samples（重新进样所选样品）	创建所选样品的副本并在文件名称末尾附加 INJ001。多次重新进样的同一样品将依进样顺序编号为 INJ002、INJ003，以此类推。
Remove Selected Samples（移除所选样品）	从样品表格中移除所选样品。
Browse In Raw File (Move)（浏览原始文件，移动）	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。应用程序从源位置移动原始数据文件。也可以选择和浏览多个原始数据文件以创建多个样品。
Browse In Raw File (Copy)（浏览原始文件，复制）	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。应用程序从源位置复制原始数据文件。也可以选择和浏览多个原始数据文件以创建多个样品。
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样品行的原始数据文件。
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。

表 4. 样品列表窗格快捷菜单命令 (第 2 页, 共 2 页)

命令	描述
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 对话框以选择显示的列及更改这些列的显示次序。
Enable/Disable Sample Weight Calculation (启动 / 禁止样品质量计算)	显示或隐藏 Sample Volume、 Dilution Factor、 Sample Weight、 Calculation Type 和 Final Units 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到另一个应用程序, 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到另一个应用程序, 如 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中。
Paste (粘贴)	将来自其他应用程序如 Excel 工作表的单列数据粘贴至所选列。
Undo Last Paste (撤销上次粘贴)	移除 Batch View 中上次粘贴的条目。
Export to CSV File (导出至 CSV 文件)	打开 Save As 对话框, 在此可以将当前样品列表保存为 .csv 文件。
Edit Instrument Method (编辑仪器方法)	打开 Instrument Setup 窗口, 在此可以编辑仪器方法中的参数。 <ul style="list-style-type: none"> 在编辑外部方法时, 应用程序更新了 ...\Xcalibur\methods 文件夹中的方法。 在编辑内部方法时, 应用程序更新 ...\TraceFinderData\Projects\project\subproject\batch\Methods\method 文件夹中的方法。

Automated Batch Reports (自动批次报告) 菜单

在 Automated Batch Reports 窗格内的报告格式列中右击一个已选或已清除的复选框, 可以使用快捷菜单命令快速指定自动报告的格式。

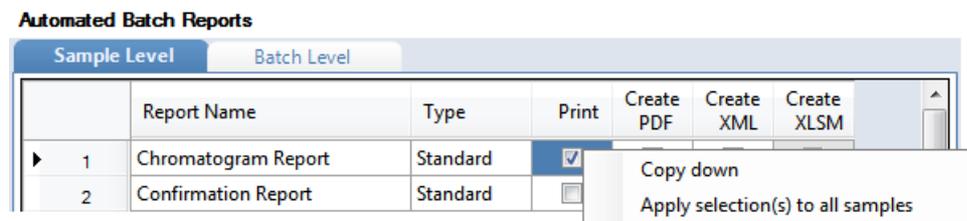


表 5. Automated Batch Reports 窗格快捷菜单命令

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适用的行中。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。该命令在 Sample Level (样品水平) 和 Batch Level (批次水平) 页面上均可用。
Apply Selection(s) to All Samples (将选择应用到所有样品)	将所选输出格式复制到批次中的所有样品。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。该命令在 Batch Level 页面上不可用。

样品视图

Data Review（数据查看）中的 Sample View（样品视图）页面提供下列快捷菜单：

- [Quan Peak（定量峰）](#) 页面菜单
- [Confirming Ions（确认离子）](#) 页面菜单

Quan Peak（定量峰）页面菜单

在 Quan Peak 页面上任意处右击，可以使用快捷菜单命令控制定量峰的显示。

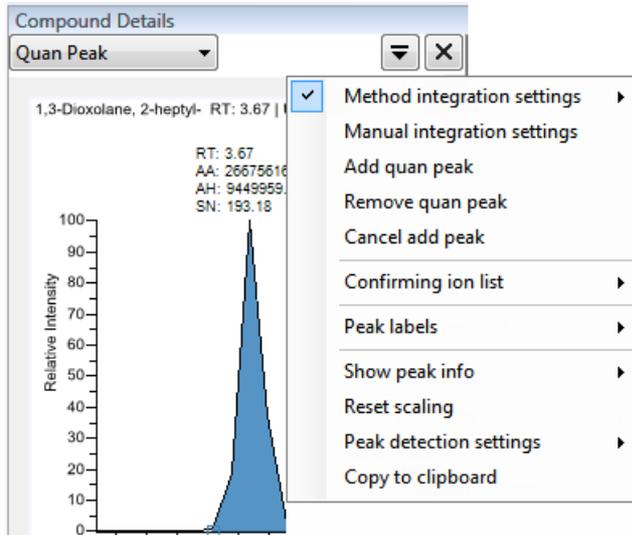


表 6. Quan Peak 页面快捷菜单命令（第 1 页，共 2 页）

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。 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。
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)	添加定量峰，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)	列出所有定量峰的确认离子，包括共洗脱未通过的任何离子。不适用于类似物。
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。
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后，重置为原始比例。
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。 Edit User Defined Peak Detection Settings（编辑用户定义的峰检测设置）： 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。

表 6. Quan Peak 页面快捷菜单命令 (第 2 页, 共 2 页)

命令	描述
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。

Confirming Ions (确认离子) 页面菜单

在 Confirming Ions 页面上任意处右击, 可以使用快捷菜单命令确认离子峰的显示。

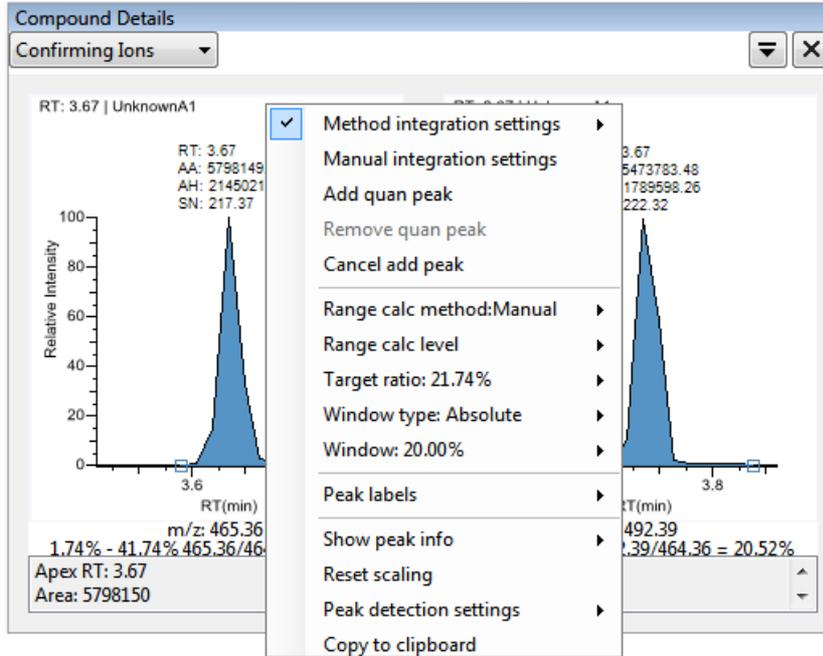


表 7. Confirming Ions 页面快捷菜单命令 (第 1 页, 共 2 页)

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 Peak (取消添加峰)	添加定量峰, 移除峰或取消正在进行的添加峰操作。
Range Calc Method (范围计算方法)	选择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)	显示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)	用于确定可接受的离子比率范围的 Absolute (绝对) 或 Relative (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。

方法开发模式

化合物页面

表 7. Confirming Ions 页面快捷菜单命令 (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, 重置为原始比例。
Peak Detection Settings (峰检测设置)	打开所选化合物的 Peak Detection Settings 对话框。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。

仅对于定量方法, Method Development (方法开发) 模式下的 Master Method (主方法) 视图的下列页面包括快捷菜单:

- 化合物页面
- 质保质控页面
- 开发批次视图

Master Method 视图的 Compounds (化合物) 页面包括几个快捷菜单。

The screenshot displays the 'Compounds' page in the software. On the left, a table lists compounds with their retention times (RT) and names:

RT	Compound
1 3.14	Propanenitri
2 3.15	Pyrazinamid
3 3.67	1,3-Dioxolan
4 4.70	Pyrazinamid

Annotations on the screenshot include:

- 化合物列表**: Points to the compound table.
- 标题**: Points to the 'Confirming peak 1' header.
- 比率页面**: Points to the 'Ratios' control panel, which includes:
 - Enable:
 - Target ratio (%): 62.27
 - Window type: Absolute
 - Window (+/- %): 20.00
 - Ion coelution (min): 0.025
- 时间页面**: Points to the 'Trace' section.
- 信号页面**: Points to the 'Spectrum' section.
- 检测页面**: Points to the 'Detect' section.
- 适用性页面**: Points to the 'Suitability' section.
- 质谱图页面**: Points to the 'Library' section.
- 库页面**: Points to the 'Library' section.
- 色谱图窗格**: Points to the 'Trace' plot showing relative intensity vs. RT (min).
- 质谱图窗格**: Points to the 'Spectrum' plot showing relative intensity vs. m/z.

化合物列表

在化合物列表窗格任意处右击，可以使用快捷菜单命令管理、复制或导出化合物。下列 Compounds 页面上的所有化合物列表都使用这一快捷菜单：**Identification**（识别）、**Detection**（检测）、**Calibration**（校正）、**Calibration Levels**（校正水平）和 **Chk Std Levels**（检查标样水平）。

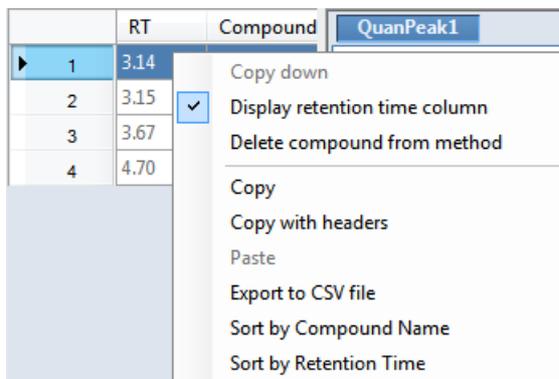


表 8. 化合物列表快捷菜单命令

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。
Display Retention Time Column（显示保留时间列）	显示或隐藏化合物列表中的保留时间列。
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，如 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中，但可以将该复制的数据粘贴至 TraceFinder 应用程序的其他区域。
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 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。
Sort By Retention Time（按保留时间排序）	按保留时间从短到长对化合物进行排序。
Add This Compound to CDB（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。 只在 Identification 页面快捷菜单上可用。
Add All Compound to CDB（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。当任意这些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。 只在 Identification 页面快捷菜单上可用。

标题

通过在定量峰和确认峰窗格的标题栏上右击，可以使用快捷菜单命令添加、替换或移除峰。当在 Acquisition 模式下执行采集或在 Method Development 模式下采集开发批次时，还可以在 Real Time Status 窗格中添加一个定量或确认峰。

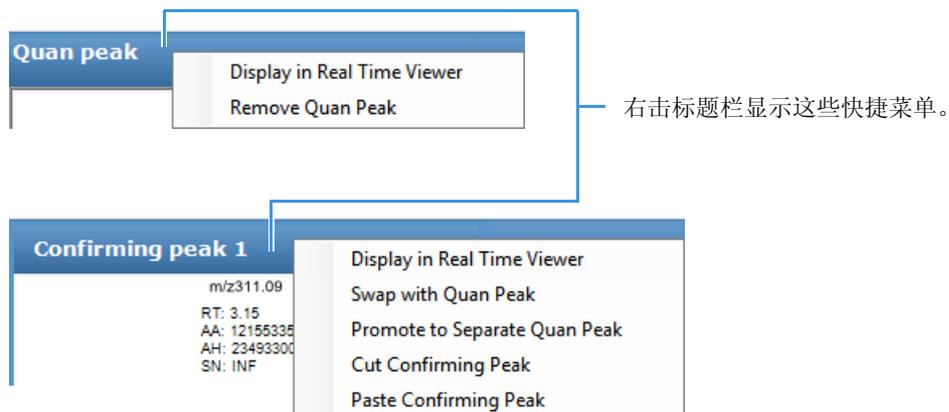


表 9. 标题快捷菜单命令

命令	描述
Display in Real Time Viewer (显示在实时查看器中)	将定量峰或确认峰添加到 Real Time Status 窗格中。
Remove Quan Peak (移除定量峰)	移除已选定量峰。如果只有一个定量峰，会出现一个信息警告用户正在移除整个化合物。
Swap with Quan Peak (替换定量峰)	利用确认离子峰替换定量峰。
Promote to Separate Quan Peak (设为单个定量峰)	将确认离子峰设置为额外的定量峰。
Cut Confirming Peak (剪切确认峰)	剪切已选确认峰。
Paste Confirming Peak (粘贴确认峰)	粘贴之前剪切的确认峰。

Times（时间）页面

在 Times 页面任意处右击，可以使用快捷菜单命令将已选峰的窗口设置复制到化合物中的所有峰，或复制到方法中的所有峰。

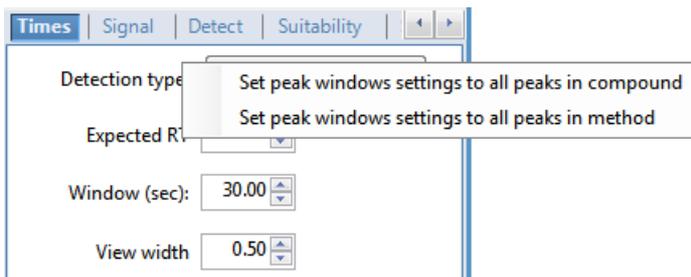


表 10. Times 页面快捷菜单命令

命令	描述
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（视图宽度）和 Window（窗口）值应用到化合物的所有峰，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 值应用到方法中的所有峰，并更新这个方法。

Signal（信号）页面

在 Signal 页面任意处右击，可以使用快捷菜单命令将已选峰的过滤选项设置复制到化合物中的所有峰，或复制到方法中的所有峰。

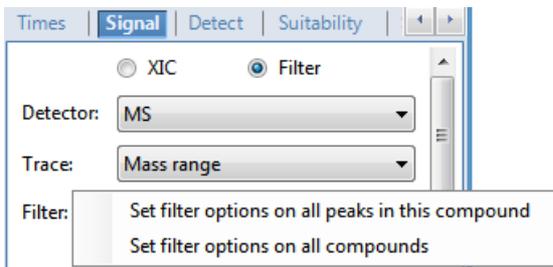


表 11. Signal 页面快捷菜单命令

命令	描述
Set Filter Option on All Peaks in This Compound (对该化合物所有峰应用过滤选项)	将已选峰的过滤设置应用到化合物中所有其他峰。
Set Filter Option on All Compounds (对所有化合物应用过滤选项)	将已选峰的过滤设置应用到方法中所有其他峰。

Detect（检测）页面

在 Detect 页面任意处右击，可以使用快捷菜单命令将已选峰的检测设置复制到化合物中的所有峰，或复制到方法中的所有峰。

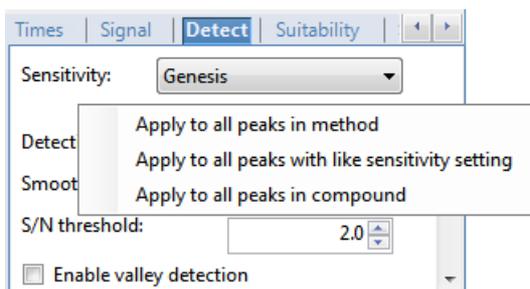


表 12. Detect 页面快捷菜单命令

命令	描述
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 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（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。对定量和确认离子峰应用这些更新。

Suitability（适用性）页面

在 Suitability 页面任意处右击，可以使用快捷菜单命令将已选峰的适用性设置复制到化合物中的所有峰，或复制到方法中的所有峰。

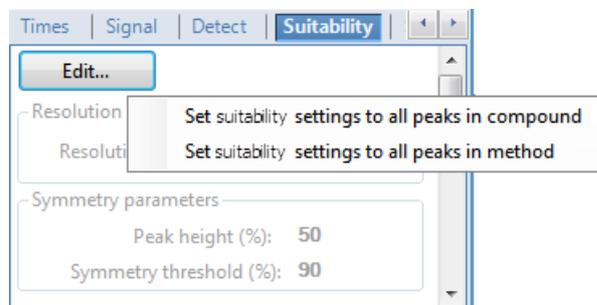


表 13. Suitability 页面快捷菜单命令

命令	描述
Set Suitability Settings to All Peaks in Compound（对化合物所有峰应用适用性设置）	将适用性设置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 Suitability Settings to All Peaks in Method（对方法中所有峰应用适用性设置）	将适用性设置复制到方法的所有定量峰，并更新这个方法。

Spectrum（质谱图）页面

在 Spectrum 页面任意处右击，可以利用快捷菜单命令添加和修改定量峰和确认离子。

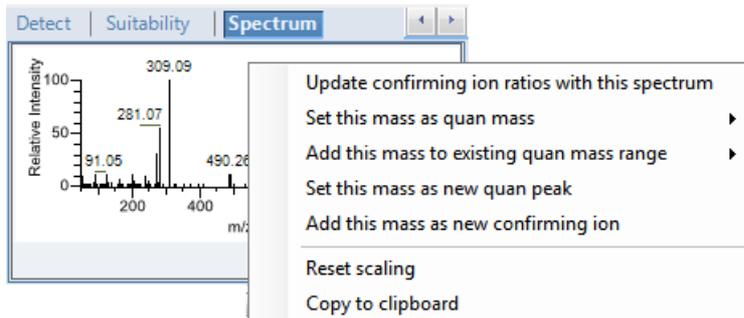


表 14. Spectrum 页面快捷菜单命令

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 (将该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。用户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已有化合物。
Reset Scaling (重置缩放比例)	将色谱图或质谱图显示恢复为原始大小。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。

Library (库) 页面

在 Library 页面上任意处右击，可以利用快捷菜单命令将库设置应用至化合物或方法中的其他峰。

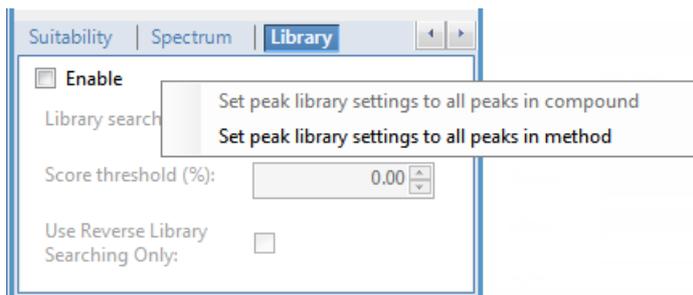


表 15. Library 页面快捷菜单命令

命令	描述
Set Peak Library Settings to All Peaks in Compound (对化合物所有峰应用峰库设置)	将 Library Search Type (库检索类型)、Score Threshold (分数阈值) 和 Reverse Library Search (反库检索) 值复制到化合物的所有峰，并更新这个化合物。
Set Peak Library Settings to All Peaks in Method (对方法中所有峰应用峰库设置)	将 Library Search Type、Score Threshold 和 Reverse Library Search 值复制到方法中的所有峰，并更新这个方法。

Ratios (比率) 页面

在 Ratios 页面上任意处右击，可以利用快捷菜单命令将离子比率设置应用至化合物或方法中的其他峰。

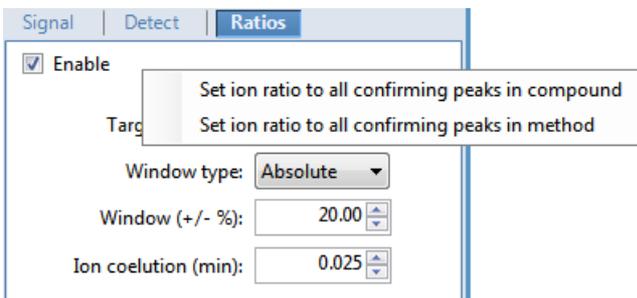


表 16. Ratios 页面快捷菜单命令

命令	描述
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 (离子共洗脱) 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。

Chromatogram (色谱图) 窗格

在 Chromatogram 窗格中任意处右击，可以使用快捷菜单命令将化合物或定量峰添加到方法。

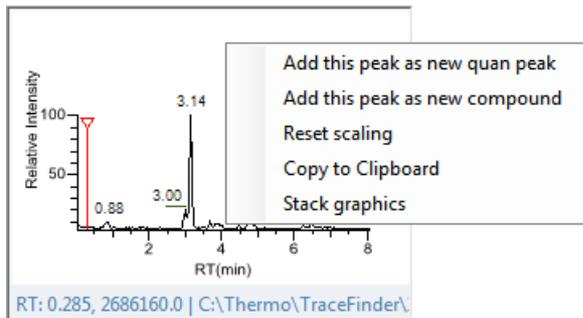


表 17. Chromatogram 窗格快捷菜单命令

命令	描述
Add This Peak As New Quan Peak (添加该峰作为新定量峰)	将该已选峰添加到所选化合物，并显示该化合物的定量峰信息。
Add This Peak As New Compound (添加该峰作为新化合物)	打开 Add New Compound (添加新化合物) 对话框以选择要添加到方法的化合物。
Reset Scaling (重置缩放比例)	将色谱图画面恢复为原始大小。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。
Show Graphics Side by Side (并排显示图像)	并排显示 Chromatogram 和 Spectra (质谱图) 窗格。
- 或 -	- 或 -
Stack Graphics (层叠图像)	在 Spectra 窗格上方层叠 Chromatogram 窗格。

Spectra (质谱图) 窗格

在 Spectra 窗格中任意处右击，可以使用快捷菜单命令将化合物或定量峰添加到方法。

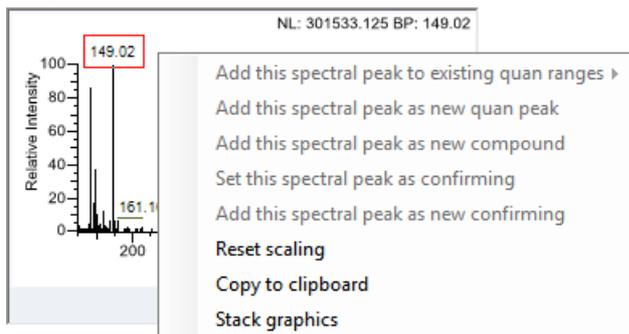


表 18. Spectra 窗格快捷菜单命令

命令	描述
Add This Spectral Peak to Existing Quan Ranges (将该质谱峰添加到现有定量范围)	提示用户更新或不更新离子比率，然后将所选峰添加到已有定量质量数范围。
Add This Spectral Peak as New Quan Peak (添加该质谱峰作为新定量峰)	将所选峰作为新定量峰添加到所选化合物。
Add This Spectral Peak as New Compound (添加该质谱峰作为新化合物)	打开 Add New Compound 对话框以选择要添加到方法的化合物。
Set This Spectral Peak as Confirming (将该质谱峰设为确认峰)	将所选峰设置为确认峰。
Add This Spectral Peak as New Comfirming (添加该质谱峰作为新确认峰)	将确认离子添加到所选定量峰。
Reset Scaling (重置缩放比例)	将质谱图画面恢复为原始比例。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。
Show Graphics Side by Side (并排显示图像)	并排显示 Chromatogram 和 Spectra 窗格。
- 或 -	- 或 -
Stack Graphics (层叠图像)	在 Spectra 窗格上方层叠 Chromatogram 窗格。

质保质控页面

在 QAQC（质保质控）页面任意处右击，可以使用快捷菜单命令管理、复制和导出化合物。

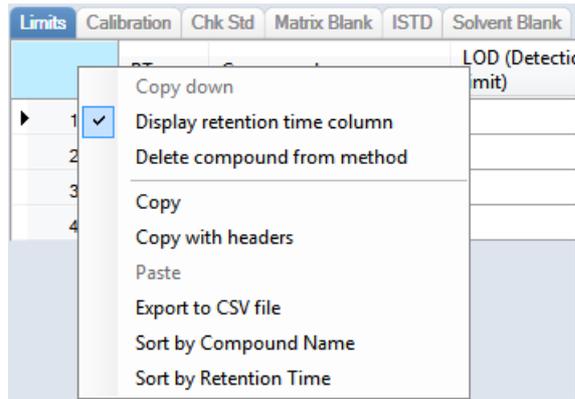


表 19. QAQC 页面快捷菜单命令

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。
Display Retention Time Column (显示保留时间列)	显示或隐藏化合物列表中的保留时间列。
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到剪贴板。利用该命令将化合物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，但可以将该复制的数据粘贴至 TraceFinder 应用程序的其他区域。
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到剪贴板。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 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。
Sort By Retention Time (按保留时间排序)	按保留时间从短到长对化合物进行排序。

开发批次视图

在 Development Batch（开发批次）视图上任意处右击，可以使用快捷菜单命令创建开发样品列表。

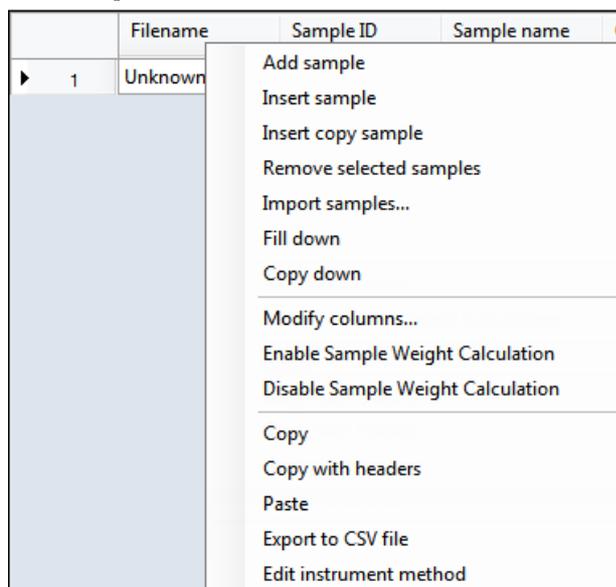


表 20. Development Batch 视图快捷菜单命令（第 1 页，共 2 页）

命令	描述
Add Sample（添加样品）	在样品表格中添加一个空行。
Insert Sample （插入样品）	在样品表格中所选行上方插入单个空行。
Insert Copy Sample （插入复制的样品）	复制当前选择行并在该行上方插入复制行。
Remove Selected Samples （移除所选样品）	从样品表格中移除所选样品。
Import Samples （导入样品）	打开 Sample Import Tool，从 .CSV、.XML 或 .SLD 文件中导入样品。
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。
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。
Modify Columns （修改列）	打开 Modify Columns 对话框，以选择显示的列并更改这些列的显示次序。
Enable/Disable Sample Weight Calculation（启动 / 禁止样品质量计算）	显示或隐藏 Sample Volume、Dilution Factor、Sample Weight、Calculation Type 和 Final Units 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 Excel 工作表。无法将该数据粘贴回方法开发化合物列表中。
Paste（粘贴）	将来自其他应用程序如 Excel 工作表的单列数据粘贴至所选列。
Undo Last Paste （撤销上次粘贴）	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 对话框将该批次保存为 .csv 文件。

表 20. Development Batch 视图快捷菜单命令 (第 2 页, 共 2 页)

命令	描述
Edit Instrument Method (编辑仪器方法)	打开 Instrument Setup 窗口, 在此可以编辑仪器方法中的参数。 <ul style="list-style-type: none"> 在编辑外部方法时, 应用程序更新了 ...\Xcalibur\methods 文件夹中的方法。 在编辑内部方法时, 应用程序更新 ...\TraceFinderData\Projects\project\subproject\batch\Methods\method 文件夹中的方法。

术语表

A

Absolute 绝对

Acquisition 采集

Add All Compound to CDB 将所有化合物添加到化合物数据库

Add New Compound 添加新化合物

Add Quan Peak 添加定量峰

Add Sample 添加样品

Add This Compound to CDB 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 Range 将该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 Peak As New Quan Peak 添加该峰作为新定量峰

Add This Spectral Peak as New Confirming 添加该质谱峰作为新确认峰

Add This Spectral Peak as New Compound 添加该质谱峰作为新化合物

Add This Spectral Peak to Existing Quan Ranges 将该质谱峰添加到已有定量范围

Analysis 分析

Apply Selection(s) to All Samples 将选择应用到所有样品

Apply To All Peaks In Compound 应用到化合物中的所有峰

Apply To All Peaks In Method 应用到方法中的所有峰

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

Automated Batch Reports 自动批次报告

Average 平均

B

Batch Level 批次水平

Batch View 批次视图

Browse In Raw File (Copy) 浏览原始文件, 复制

Browse In Raw File (Move) 浏览原始文件, 移动

C

Calculation Type 计算类型

Calibration 校正

Calibration Levels 校正水平

Cancel Add Peak 取消添加峰

Chk Std Levels 检查标样水平

Chromatogram 色谱图

Compounds 化合物

Confirming Ion List 确认离子列表

Confirming Ions 确认离子

Copy 复制

Copy Down 向下复制

Copy to Clipboard 复制到剪贴板

Copy With Headers 带标题复制

Cut Confirming Peak 剪切确认峰

D

Data Review 数据查看

Delete Compound From Method 从方法中删除化合物

Detect 检测

Detection 检测

Development Batch 开发批次

Dilution Factor 稀释因子

Display in Real Time Viewer 显示在实时查看器中

Display Retention Time Column 显示保留时间列

E

Edit Instrument Method 编辑仪器方法

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

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

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

Export to CSV File 导出至 CSV 文件

F

Fill Down 向下填充

Final Units 最终单位

Finish 完成

I

Identification 识别

Import Samples 导入样品

Insert Copy Sample 插入复制的样品

Insert Sample 插入样品

Instrument Setup 仪器设置

Ion Coelution 离子共洗脱

L

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

Level 水平

Library 库

Library Search Type 库检索类型

M

Manual 手动

Manual Integration Settings 手动积分设置

Map Raw Files To Samples 选择样品的原始文件

Master Method 主方法

Method Development 方法开发

Method Integration Settings 方法积分设置

Modify Columns 修改列

O

Off 关机

On 开机

P

Paste 粘贴

Paste Confirming Peak 粘贴确认峰

Peak Detection Settings 峰检测设置

Pause Queue 暂停队列

Peak Labels 峰标签

Processing 处理

Promote to Separate Quan Peak 设为单个定量峰

Q

QAQC 质保质控

Quan Peak 定量峰

Queues 队列

R

Range Calc Level 范围计算水平

Range Calc Method 范围计算方法

Ratios 比率

Reactivate All Batches 重新激活所有批次

Real Time Status 实时状态

Reinject Selected Samples 重新进样所选样品

Relative 相对

Remove Pending Batches 移除待定批次

Remove Pending Samples 移除待定样品

Remove Quan Peak 移除定量峰

Remove Sample 移除样品

Remove Selected Samples 移除所选样品

Reset Scaling 重置缩放比例

Reverse Library Search 反库检索

S

Sample Definition 样品定义

Sample Import Tool 样品导入工具

Sample Level 样品水平

Sample View 样品视图

Sample Volume 样品体积

Sample Weight 样品质量

Save As 另存为

Score Threshold 分数阈值

Set Filter Option on All Compounds 对所有化合物应用过滤选项

Set Filter Option on All Peaks in This Compound 对该化合物所有峰应用过滤选项

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 Library Settings to All Peaks in Compound 对化合物所有峰应用峰库设置

Set Peak Library Settings to All Peaks in Method 对方法中所有峰应用峰库设置

Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound 对化合物所有峰应用峰窗口设置

Set Suitability Settings to All Peaks in Method 对方法中所有峰应用适用性设置

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 将该质谱峰设为确认峰

Show Graphics Side by Side 并排显示图像

Show Peak Info 显示峰信息

Signal 信号

Sort by Compound Name 按化合物名称排序

Sort By Retention Time 按保留时间排序

Spectrum/Spectra 质谱图

Standby 待机

Stop Active Batch 停止活动批次

Stop All Batches 停止所有批次

Stop Batch 停止批次

Swap with Quan Peak 替换定量峰

T

Target Ratio 目标比率

Times 时间

Turn Device Off 关闭设备

Turn Device On 开启设备

Turn Device Standby 使设备待机

U

Undo Last Paste 撤销上次粘贴

Update Confirming Ion Ratios With This Spectrum 利用该质谱图更新确认离子比率

Use Local Method Peak Detection Settings 使用本地方法峰检测设置

Use User Peak Detection Settings 使用用户定义的峰检测设置

V

View Width 视图宽度

W

Weighted Average 加权平均

Window 窗口

Window Type 窗口类型

商标

TraceFinder 是 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的一个商标，而 Xcalibur 是其注册商标。Excel 和 Microsoft 是 Microsoft Corporation 在美国和其它国家（地区）的注册商标。