

Thermo

# TraceFinder

## 用户手册

软件版本 3.1  
适用于法医毒物学

XCALI-97682 修订版 A 2013 年 6 月

DOCUMENTATION  
SURVEY

**Thermo**  
SCIENTIFIC

© 2013 Thermo Fisher Scientific Inc. 保留所有权利。

Aria、Q Exactive、FOCUS、LCquan、ToxID、TSQ 8000 和 TriPlus 均为 Thermo Fisher Scientific Inc. 在美国的商标。而 Accela、Dionex、Exactive、Thermo Scientific、Trace GC Ultra、TSQ Quantum、TSQ Endura、TSQ Quantiva、TurboFlow 和 Xcalibur 均为其在美国的注册商标。

NIST 是 National Institute of Standards and Technology 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. 在美国及其他国家和地区的注册商标。

Waters 和 ACQUITY 是 Waters Corporation 的注册商标。

所有其他商标都是 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中的任何部分。

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。**

本文档不属于 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，2013 年 6 月

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

**仅供研究使用。不可用于诊断。**

# 目录

	<b>前言</b> .....	<b>vii</b>
	相关文档 .....	vii
	安全和特殊注意事项 .....	viii
	系统激活 .....	ix
	联系我们 .....	xi
<b>第 1 章</b>	<b>简介</b> .....	<b>1</b>
	关于 TraceFinder 应用程序 .....	1
	TraceFinder 特性总结 .....	3
	TraceFinder 工作流程 .....	4
	报告功能 .....	5
	标准报告类型 .....	5
	自定义报告类型 .....	6
	目标筛选报告类型 .....	6
	ToxID 报告类型 .....	6
<b>第 2 章</b>	<b>使用入门</b> .....	<b>7</b>
	安装 TraceFinder 应用程序 .....	7
	安装 Power Modules (功能模块) .....	12
	安装 NIST 和 QED 库 .....	13
	启动 NIST Library Browser (库浏览器) .....	16
	启动 Qual Browser (定性浏览器) .....	17
	转换遗留数据 .....	18
	版本兼容性 .....	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
	选择一种模式或控制台 .....	29

<b>第 3 章</b>	<b>使用 Configuration (配置) 控制台</b>	<b>35</b>
	指定 Reports (报告)	37
	指定应用程序默认值	42
	指定默认 Peak Detection Parameters (峰检测参数)	44
	指定 Adducts (加合物)	56
	激活可选特性	59
	ToxID	60
	Quick Acquisition (快速采集)	60
	Delay Calibration (延迟校正)	60
	用户峰检测设置	61
	自动进样器托盘配置	61
	Batch Wizard Style (批次向导类型)	61
	采集提交选项	62
	筛选库	63
	Multiplexing (多通道)	65
	Intelligent Sequencing (智能排序)	65
	创建 Custom Columns (自定义列)	66
	创建自定义标记	69
<b>第 4 章</b>	<b>使用 Method Development (方法开发) 模式</b>	<b>75</b>
	使用主方法	79
	创建新主方法	80
	编辑定量主方法	101
	编辑目标筛选主方法	207
	以新名称另存主方法	234
	创建方法模板	235
	导入已发布的主方法	244
	导出质量数数据	245
	使用 Compound Database (化合物数据库)	247
	打开和保存数据库	247
	导出和导入化合物	251
	Compound Detail (化合物详细信息) 页面	255
	Grid (表格) 页面	267
	化合物参数	271
	Experiment Types (实验类型)	277
	化合物数据库名映射到 CSV 列名	280
	使用仪器方法	285
	使用开发批次	291
	创建开发批次	291
	编辑开发批次中的样品	294
	采集开发批次中的样品	296
	在定性浏览器中查看原始数据文件	297
	使用快速采集	299

<b>第 5 章</b>	<b>使用 Acquisition (采集) 模式.....</b>	<b>301</b>
	使用批次 .....	302
	打开和浏览 Acquisition (采集) 模式 .....	302
	创建和提交批次 .....	304
	使用 Quick Acquisition (快速采集) .....	337
	Real Time Status (实时状态) 窗格.....	339
	Acquisition (采集) 页面 .....	340
	Instrument (仪器) 页面 .....	341
	Devices (设备) 页面.....	342
	Queues (队列) 页面 .....	347
	实时谱图显示 .....	352
	样品类型 .....	354
<b>第 6 章</b>	<b>使用 Analysis (分析) 模式.....</b>	<b>355</b>
	使用 Quick Acquisition (快速采集) .....	357
	使用 Batch View (批次视图).....	359
	Samples (样品) 页面.....	360
	Auto Samples (自动样品) 页面 .....	398
	Reference Samples (参考样品) 页面 .....	400
	Threshold Samples (阈值样品) 页面 .....	401
	利用 Batch Wizard (批次向导) 创建批次.....	402
	使用定量方法的 Data Review (数据查看) .....	415
	Sample View (样品视图) .....	416
	Compound View (化合物视图).....	428
	Comparative View (对比视图).....	437
	Qualitative View (定性视图) .....	446
	所有 Data Review (数据查看) 页面通用的功能 .....	461
	使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看) .....	485
	Samples (样品) 窗格.....	487
	Compounds (化合物) 窗格 .....	488
	Chromatogram (色谱图) 窗格.....	502
	Spectrum (质谱图) 窗格 .....	503
	使用 Report View (报告视图) .....	514
	查看报告 .....	515
	生成报告 .....	519
	使用报告 .....	523
	使用 Active View (活动视图) .....	526
	使用 Local Method (本地方法) 视图 .....	540
	使用 Batch Template Editor (批次模板编辑器) .....	542

<b>附录 A</b>	<b>报告</b> .....	<b>551</b>
	指定报告 .....	551
	Standard Reports (标准报告) .....	552
	Custom Reports (自定义报告) .....	553
	Target Screening Reports (目标筛选报告) .....	553
	ToxID Reports (ToxID 报告) .....	553
	报告标记 .....	554
	样品标准报告 .....	555
	Batch Report (批次报告) .....	556
	Batch Report Rev 1 (批次报告版本 1) .....	557
	Calibration Report (校正报告) .....	558
	Calibration Density Report (校正密度报告) .....	561
	Chromatogram Report (色谱图报告) .....	562
	Compound Calibration Report (化合物校正报告) .....	563
	Compound Calibration Report - Alternate (化合物校正报告 - 备用) .....	565
	Confirmation Report (确认报告) .....	567
	Confirmation Report 2 (确认报告 2) .....	568
	High Density Calibration Report (高密度校正报告) .....	569
	High Density Internal Standard Report (高密度内标报告) .....	570
	High Density Internal Standard Report Long (高密度内标长报告) .....	571
	High Density Sample Report 1 (高密度样品报告 1) .....	572
	High Density Sample Report 1 Long (高密度样品长报告 1) .....	573
	High Density Sample Report 2 (高密度样品报告 2) .....	574
	High Density Sample Report 2 Long (高密度样品长报告 2) .....	575
	High Density Sample Report 3 (高密度样品报告 3) .....	576
	High Density Sample Report 3 Long (高密度样品长报告 3) .....	577
	Internal Standard Summary Report (内标总结报告) .....	578
	Ion Ratio Failure Report (离子比率未通过报告) .....	579
	Manual Integration Report (手动积分报告) .....	580
	Method Report (方法报告) .....	581
	Method Validation Report (方法验证报告) .....	584
	Quality Control Report (质控报告) .....	588
	Quantitation Report (定量报告) .....	589
	Quantitation Report - 2 (定量报告 -2) .....	590
	Solvent Blank Report (溶剂空白报告) .....	592
<b>附录 B</b>	<b>同位素分布详细信息</b> .....	<b>593</b>
	准确质量数质谱图中的同位素分布 .....	593
	同位素分布分数计算 .....	597
	数据组示例 .....	597
	计算质量数和强度偏差 .....	599
	计算同位素分布分数 .....	601
	查找噪声值 .....	605
<b>附录 C</b>	<b>使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)</b> .....	<b>607</b>
	<b>索引</b> .....	<b>611</b>

## 前言

Thermo TraceFinder™ 3.1 是 Thermo Scientific™ GC/MS 和 LC/MS 分析软件系列的最新应用程序。

### 目录

- [相关文档](#)
- [安全和特殊注意事项](#)
- [系统激活](#)
- [联系我们](#)

### ❖ 若要对文档或 Help（帮助）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

TraceFinder 包括 Help（帮助）和 PDF 格式的以下手册：

- *TraceFinder 用户手册 (TraceFinder User Guide)*
- *TraceFinder 管理员控制台用户手册 (TraceFinder Administrator Console User Guide)*
- *TraceFinder 采集快速参考手册 (TraceFinder Acquisition Quick Reference Guide)*
- *TraceFinder 分析快速参考手册 (TraceFinder Analysis Quick Reference Guide)*
- *TraceFinder 快捷菜单快速参考手册 (TraceFinder Shortcut Menus Quick Reference Guide)*
- *TraceFinder 自定义报告指南 (TraceFinder Custom Reports Tutorial)*

❖ 若要利用 **Start**（开始）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**（TraceFinder 帮助）和访问相关文档

1. 打开 **TraceFinder** 应用程序，然后选择 **Help**（帮助） > **TraceFinder Help**（TraceFinder 帮助）。

- 若要查找特定主题，可使用 **Contents**（目录）、**Index**（索引）或 **Search**（检索）窗格。
- 若要创建自己的书签，使用 **Favorites**（收藏夹）窗格。

2. 若要查看其中一个用户手册或快速参考手册，选择 **Help**（帮助） > **Manuals**（手册） > \* **User Guide**（某用户手册）或 \* **Quick Reference Guide**（某快速参考手册）。

选中手册的 PDF 文件在新窗口中打开。

## 安全和特殊注意事项

确保遵循本手册中发布的事先声明。安全和其他特殊注意事项显示在方框中。

安全和其他特殊注意事项包括以下内容：

**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。

## 系统激活

**提示** 强调能够帮助简化工作的信息。

首次打开 TraceFinder 应用程序时，出现一个显示 120 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。

You don't have a valid license. To obtain a activation key, send the license code below to Thermo Fisher Scientific.  
Email: [ThermoMSLicensing@Thermo.com](mailto:ThermoMSLicensing@Thermo.com).  
You will get an activation key.

User Info:

Name:  Street Name:   
Company:  City:   
E-Mail:  Zip Code:   
Telephone:  Country:

Feature Info:

Barcode:  Product:

License Text:

```
<LicenseRequest version="3.1"><UserInfos><UserInfo name="Name"></UserInfo><UserInfo name="Company"></UserInfo><UserInfo name="Email"></UserInfo><UserInfo name="Telephone"></UserInfo><UserInfo name="Street"></UserInfo><UserInfo name="City"></UserInfo><UserInfo name="Zip Code"></UserInfo><UserInfo name="Country">UNITED STATES</UserInfo></UserInfos><Features><Feature name="TraceFinder_General"></Feature></Features><HostIDs><Client>00f88b44a88</Client><Server>00f88b44a88</Server></HostIDs><License Term>FEATURE TraceFinder_General THERMOCO 3.1 17jun-2013 uncounted TS_OK HOSTID=00f88b44a88 SIGN=</License Term></LicenseRequest>
```

Copy Paste Set

**注释** 在试用期间可以从 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得到完整授权。

以下两种类型的许可证可用：

- 120-Day Evaluation Version（120 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 120 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。

每个激活码仅对单个许可证有效。进行其他安装时都将生成不同的许可证，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](mailto:ThermoMSLicensing@thermofisher.com)
- 传真：408-965-6120

## ❖ 若要获取激活码

1. 在 License Activation（许可证激活）窗口的 User Info（用户信息）区域输入用户信息。在输入的同时，License Text（许可证文本）框创建该信息的 XML 文本串。

User Info:			
Name:	Jane User	Street Name:	River Oaks Pkwy
Company:	Thermo	City:	San Jose
E-Mail:	jane.user@thermofisher.com	Zip Code:	95134
Telephone:	1234567890	Country:	UNITED STATES ▼
Feature Info:			
Barcode:	XXXX-XXXX-XXXX	Product:	TraceFinder_General ▼
License Text:			
<pre>&lt;LicenseRequest version="3.1"&gt;&lt;UserInfos&gt;&lt;UserInfo name="Name"&gt;Jane User&lt;/UserInfo&gt; &lt;UserInfo name="Company"&gt;Thermo&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Email"&gt; jane.user@thermofisher.com&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Telephone"&gt;1234567890&lt;/UserInfo&gt; &lt;UserInfo name="Street"&gt;River Oaks&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="City"&gt;San Jose&lt;/UserInfo&gt; &lt;UserInfo name="Zip Code"&gt;95134&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Country"&gt;UNITED STATES &lt;/UserInfo&gt;&lt;/UserInfos&gt;&lt;Features&gt;&lt;Feature name="TraceFinder_General"&gt;XXXX-XXXX-XXXX &lt;/Feature&gt;&lt;/Features&gt;&lt;HostIDs&gt;&lt;Client&gt;00ff88b44a88&lt;/Client&gt;&lt;Server&gt;00ff88b44a88 &lt;/Server&gt;&lt;/HostIDs&gt;&lt;LicenseTerm&gt;FEATURE TraceFinder_General THERMOCO 3.1 17-jun- 2013 uncounted TS_OK HOSTID=00ff88b44a88 SIGN=&lt;/LicenseTerm&gt;&lt;/LicenseRequest&gt;</pre>			

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*。

**注释** 条形码或许已经为用户填充。

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，一个指示缺失信息的框将弹出。
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](mailto:ThermoMSLicensing@thermofisher.com)。

Send	To...	ThermoMSLicensing@thermofisher.com
	Cc...	
	Subject:	request for TraceFinder license
<pre>&lt;LicenseRequest version="3.1"&gt;&lt;UserInfos&gt;&lt;UserInfo name="Name"&gt;Jane User&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Company"&gt;Thermo&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Email"&gt;jane.user@thermofisher.com&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Telephone"&gt;1234567890&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Street"&gt;River Oaks&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="City"&gt;San Jose&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Zip Code"&gt;95134&lt;/UserInfo&gt;&lt;UserInfo name="Country"&gt;UNITED STATES&lt;/UserInfo&gt;&lt;/UserInfos&gt;&lt;Features&gt;&lt;Feature name="TraceFinder_General"&gt;XXXX-XX XXXX&lt;/Feature&gt;&lt;/Features&gt;&lt;HostIDs&gt;&lt;Client&gt;00ff88b44a88&lt;/Client&gt;&lt;Server&gt;00ff88b44a88 TraceFinder_General THERMOCO 3.1 17-jun-2013 uncounted TS_OK HOSTID=00ff88b44a88 SIGN=&lt;/LicenseTerm&gt;&lt;/LicenseRequest&gt;</pre>		

用户就会收到一封包含激活码的邮件回复。

### ❖ 若要使用激活码

1. 收到激活码后，将其从电子邮件中复制。
2. 从 TraceFinder 菜单中选择 **Help（帮助） > License Activation（许可证激活）**。  
License Activation（许可证激活）窗口打开。

**注释** 当用户试图启用 Configuration（配置）控制台上的功能模块功能时，功能模块的 License Activation（许可证激活）窗口自动打开。

3. 点击 **Paste（粘贴）**。  
应用程序将剪贴板中的内容粘贴至 License Text（许可证文本）框中。
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。

### ❖ 若要联系技术支持中心

电话	800-532-4752
传真	561-688-8736
电子邮件	<a href="mailto:us.techsupport.analyze@thermofisher.com">us.techsupport.analyze@thermofisher.com</a>
知识库	<a href="http://www.thermokb.com">www.thermokb.com</a>

若要下载更新和配套软件，访问：[mssupport.thermo.com](http://mssupport.thermo.com)。

### ❖ 若要联系客户服务中心，获取订购信息

电话	800-532-4752
传真	561-688-8731
电子邮件	<a href="mailto:us.customer-support.analyze@thermofisher.com">us.customer-support.analyze@thermofisher.com</a>
网站	<a href="http://www.thermo.com/ms">www.thermo.com/ms</a>

### ❖ 若要获得本地销售或服务联系信息

转至 [www.thermoscientific.com/wps/portal/ts/contactus](http://www.thermoscientific.com/wps/portal/ts/contactus)。



## 简介

本章描述了 TraceFinder 软件的常规功能。

### 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。它提供集成化的定量工作流程，用于特定的非生物分析实验室、仪器控制和方法开发。TraceFinder 是 TSQ Quantum™ XLS 三重四极杆质谱仪的主要应用软件。

TraceFinder 可以将 Acquisition List（采集列表）中的质量数导出成 XML 格式，以便其他应用软件（包括 TSQ 8000、TSQ Quantum™、ISQ 和 Q Exactive™）可将该文件导入至其数据库中。

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 314 页上的“[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  
有关创建处理方法的详细信息，参阅第 79 页上的“[使用主方法](#)”。  
有关创建仪器方法的详细信息，参阅第 285 页上的“[使用仪器方法](#)”。
- 采用数据库（.xml 或 .cdb）格式的文件中的化合物  
参阅第 260 页上的“[编辑数据库中的化合物](#)”。
- 来自以下应用程序的批次、方法或模板：
  - TraceFinder 1.0、1.1、2.0、2.1 或 3.0
  - QuanLab Forms 或 ToxLab Forms 2.5 或 3.0参阅第 18 页上的“[转换遗留数据](#)”。

TraceFinder 应用程序在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，对数据的准确度和精密度进行检查。

## 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）：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，这种格式可以采用文本编辑器读取。文本文件中的行代表表格中的行，文本行中的逗号隔开了表格行中的字段。
- 可扩展标记语言（.xml）：一种通用的框架，用于存储任意数量的文本或数据，其结构可以表示成树。唯一不可或缺的语法要求是文档必须有一个精确的根元素，也称文档元素。这意味着文本必须附在根起始标记和对应的结束标记之间。
- 仪器方法（.meth）：Xcalibur 软件包专有的文件格式，包含让科学仪器执行数据采集的特定指令。
- 处理方法（.pmd）：Xcalibur 软件包专有的文件格式，包含用于处理连接系统的仪器已采集数据的特定指令。
- 原始数据（.raw）：系统采集样品的文件类型。
- 化合物数据库（.cdb）：TraceFinder 或 ExactFinder 化合物数据库中数据的文件类型。
- 数据库（.db）：用于目标筛选的数据库。

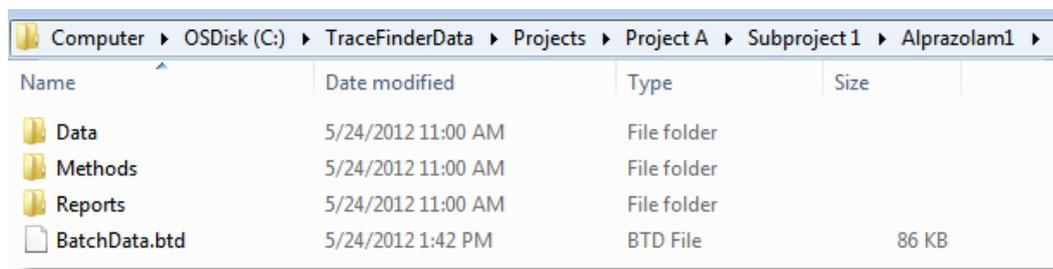
## TraceFinder 目录结构

TraceFinder 应用程序在 ...\TraceFinderData 目录中为批次、方法和模板创建文件夹。在每个批次的文件夹中，应用程序分别为数据、方法和报告创建文件夹。

用户可以在 TraceFinderData\Projects 文件夹中创建批次，或者在 Projects（项目）文件夹中创建批次的子文件夹。用户可以随意创建批次的子文件夹，但是不可以在其他批次文件夹中创建批次。

**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



Name	Date modified	Type	Size
Data	5/24/2012 11:00 AM	File folder	
Methods	5/24/2012 11:00 AM	File folder	
Reports	5/24/2012 11:00 AM	File folder	
BatchData.btd	5/24/2012 1:42 PM	BTD File	86 KB

## TraceFinder 特性总结

TraceFinder 系统为高通量定量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、上样、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 软件包括数据采集、处理、查看和报告等功能，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分析模式。可以使用数据采集系统来创建和提交批次，并实时监控结果视图。

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，也提供查看和报告。此外，还能比较质谱图，并整合数据查看和出报告过程。

主要特性如下：

- 具有 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）的授权职务
- 用于保障用户安全的 Administrator Console（管理员控制台）和数据存储库（有权限的用户）
- Configuration Console（配置控制台），用于报告配置、检测和采集默认值、选择筛选库、自定义列和标记
- Method Development（方法开发）模式，用于编辑仪器方法、设置处理参数和错误标记参数、设置报告选项
- 采集向导的选项：
  - Acquisition batch（采集批次）模式，指导用户创建批次和运行样品
  - 批次模版向导类似于 ToxLab Forms 应用程序中用到的界面
- Analysis（分析）模式包含批次视图、数据查看、本地方法视图和报告视图
- 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
- 目标筛选工作流程
- 标准和自定义报告格式

常规工作流程核心的特性包括：

- 采集和处理
- 峰检测
- 包括校正的定量
- 错误分析和标记设置
- 生成报告
- 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，随后系统将样品注入仪器中、运行样品、分析数据然后生成报告。可以为准备在实验室运行的特定化合物组或者实验设置主方法。当用户准备运行特殊类型的样品时，先选择适当的方法，然后开始运行。

使用 TraceFinder 应用程序时，按照以下基本步骤进行：

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

一个主方法结合仪器方法和处理方法，有以下规定：

- 如何采集和处理原始数据
- 错误检查信息如何评价结果
- 结果如何在报告中出现

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。批次中的每一行代表一个唯一的样品。

3. 监控 Real Time Status（实时状态）视图中的批次状态。

可从所有 TraceFinder 模式中查看实时显示。可以在查看当前采集批次实时视图的同时开始运行另一个批次。

**注释** 可以在任何时候通过 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（分析）模式中的数据。

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

使用 Report View（报告视图）查看或打印当前选定批次的报告。

## 报告功能

报告引擎能够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 系统的性能和方法。报告分为四组：[Standard（标准）](#)、[Custom（自定义）](#)、[Target Screening（目标筛选）](#)和 [ToxID](#)。

有关标准、自定义、目标筛选或 ToxID™ 报告的更多信息，以及每个标准报告类型的示例，参阅第 551 页上的“报告”。

标准报告（PDF 文件）的示例也位于以下文件夹中：

C:\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\ExampleReports

## 标准报告类型

- Batch Report（批次报告）
- Batch Summary Report（批次总结报告）
- Batch Report Rev 1（批次报告版本 1）
- 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）
- Intelligent Sequencing Report（智能排序报告）
- 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（质控报告）
- 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

- Target Screening High Density Sample Report (目标筛选高密度样品报告)
- Target Screening Summary Report (目标筛选总结报告)

## ToxID 报告类型

- 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 Power Modules（功能模块）
- 安装 NIST 和 QED 库
- 启动 NIST Library Browser（库浏览器）
- 启动 Qual Browser（定性浏览器）
- 转换遗留数据
- 选择一种模式或控制台

## 安装 TraceFinder 应用程序

初次安装 TraceFinder 3.1 应用程序时，按照 *TraceFinder 安装说明*（*TraceFinder Installation Instructions*）中的说明进行。以后可能还需要重新安装 TraceFinder 应用程序或安装 InstallShield Wizard（InstallShield 向导）上的其他功能模块，例如 Power Modules（功能模块）。

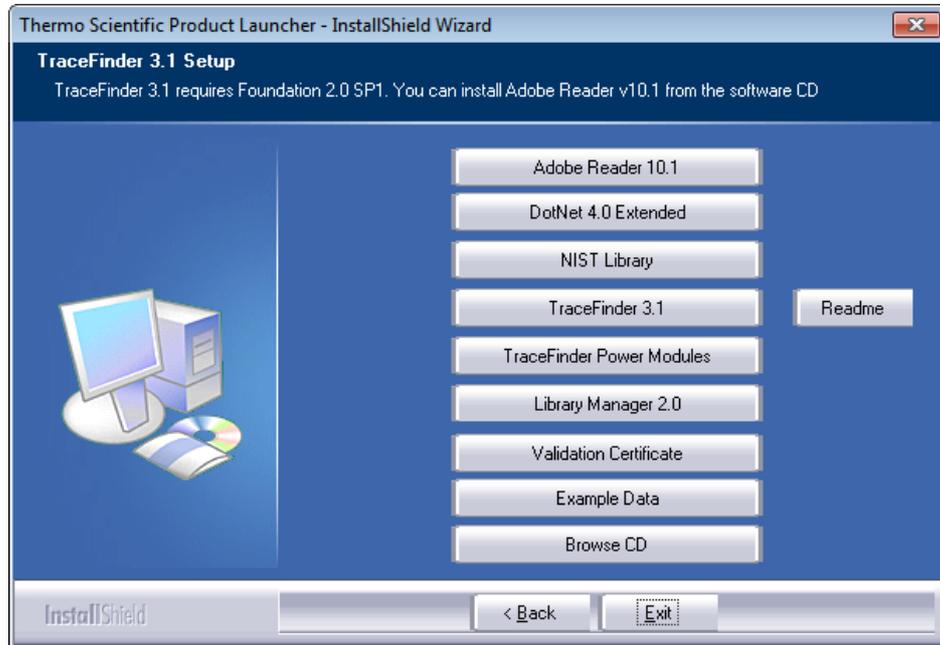
按照以下说明重装、启动和登录 TraceFinder 应用程序。

### ❖ 若要重装 TraceFinder 应用程序

1. 通过 Thermo Foundation Instrument Configuration（Thermo Foundation 仪器配置）窗口移除所有仪器。
2. 通过 Windows™ Control Panel（Windows™ 控制面板）卸载 TraceFinder 应用程序，然后卸载所有 Thermo 仪器驱动。

3. 插入 TraceFinder CD (TraceFinder 光盘), 按照以下步骤安装 TraceFinder 3.1 应用程序和 NIST 库:
  - a. 打开 TraceFinder 安装文件, 然后点击 **Next (下一步)**。

InstallShield Wizard (InstallShield 向导) 打开。



- b. 点击 **TraceFinder 3.1** 按钮, 按照 InstallShield Wizard (InstallShield 向导) 中的说明进行。

安装程序验证是否有适合版本的 Thermo Foundation™、Thermo Xcalibur™ 和 ToxID 应用程序, 并根据需要进行更新。

- c. 在出现的对话框中点击 **Yes (是)**, 以完全移除以前安装的 TraceFinder 应用程序。
- d. 再次打开 TraceFinder 安装文件, 然后点击 **Next (下一步)**。
- e. 点击 **TraceFinder 3.1** 按钮, 按照 InstallShield Wizard (InstallShield 向导) 中的说明继续。

**重要信息** 为了正确安装 TraceFinder 应用程序, 可能会提示用户卸载 Thermo Foundation™。执行以下操作:

1. 点击 **Yes (是)**, 当提示重启计算机时, 点击 **OK (确定)**。

根据向导继续安装 TraceFinder。

2. 若提示安装 Thermo Foundation, 点击 **Yes (是)**, 当提示重启计算机时, 点击 **OK (确定)**。

根据向导继续进行下一步安装。

- f. 当出现提示时, 选择安装该软件的 **GC (气相色谱)** 或 **LC (液相色谱)** 版本。
- g. 安装完成以后, 再次打开 TraceFinder 安装文件, 然后点击 **Next (下一步)**。
- h. (ToxID 必需) 若以前未安装 NIST 库, 点击 **NIST Library (NIST 库)** 按钮, 然后按照说明安装该库。

3. (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。
4. 安装合适的仪器驱动, 在 Thermo Foundation Instrument Configuration (Thermo Foundation 仪器配置) 窗口中配置仪器。

根据说明启动 TraceFinder 应用程序。

#### ❖ 若要启动 TraceFinder 应用程序

1. 配置仪器。  
用户在配置仪器之前必须关闭 TraceFinder 应用程序。
2. 双击桌面上的 **TraceFinder** 图标, 或者选择 **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, 用户安全功能未激活, 应用程序无需密码。若要激活用户安全, 参阅第 60 页上的“**ToxID**”。

#### ❖ 若要登录 TraceFinder 应用程序 (当用户安全激活时)

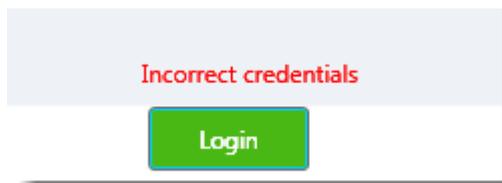
**注释** 在登录 TraceFinder 应用程序之前, 当用户安全被激活时, 系统管理员必须为用户设置一个用户帐户。管理员指定用户名和密码, 并授予用户特定模式的访问权限。

1. 在 TraceFinder 登录窗口上输入指定的用户名。参阅第 11 页上的“**TraceFinder Login (登录) 窗口**”。

**重要信息** 若在激活用户安全的情况下, 以管理员权限首次登录时, 使用 **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 登录窗口打开。参阅 [TraceFinder 主窗口](#)。

## 2 使用入门

安装 TraceFinder 应用程序

图 2. TraceFinder 主窗口

仅当激活用户安全时，User（用户）和 Log Off（注销）按钮才可用

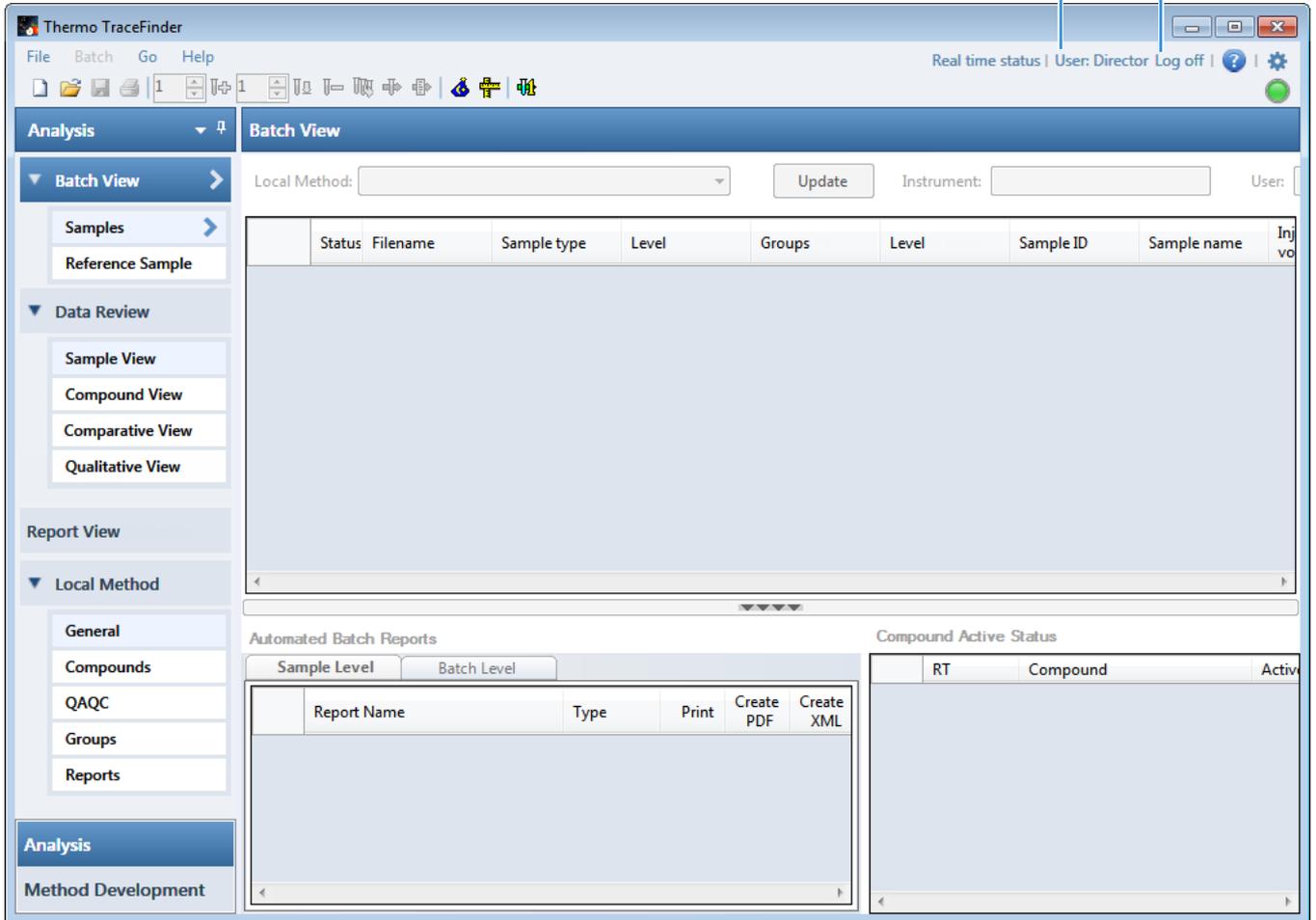


图 3. TraceFinder Login（登录）窗口

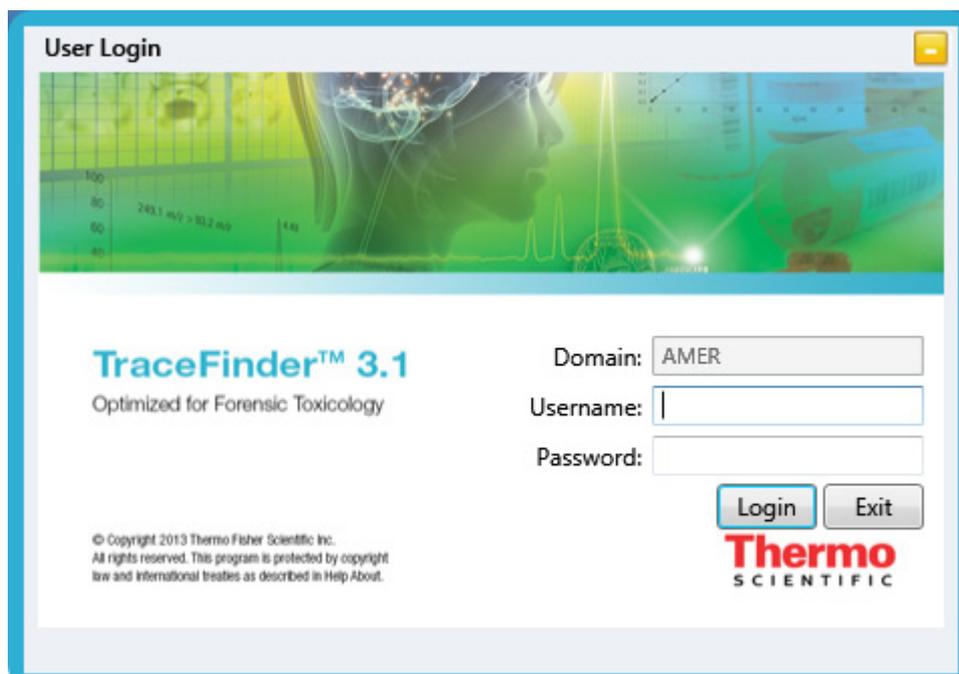


表 1. Login（登录）窗口参数

参数	描述
Domain（地区）	验证方法。
Username（用户名）	用户指定的用户名。
Password（密码）	为用户名指定的密码。
Login（登录）	验证用户名和密码，打开 TraceFinder 应用程序。
Exit（退出）	关闭 TraceFinder 登录窗口。

# 安装 Power Modules (功能模块)

根据以下说明安装和激活 TraceFinder 功能模块以实现多通道和智能排序。

### ❖ 若要安装功能模块

1. 根据说明安装 TraceFinder 应用程序。

参阅第 7 页上的“[安装 TraceFinder 应用程序](#)”。

2. 再次打开 TraceFinder 安装文件，然后单击 **Next (下一步)**。
3. 单击 **TraceFinder Power Modules (TraceFinder 功能模块)** 按钮，按照说明安装多通道和智能排序模块。
4. 对功能模块进行授权。

若要授权功能模块，按照授权 TraceFinder 应用程序的步骤进行。参阅第 ix 页上的“[系统激活](#)”。

与这些功能模块关联的功能是相互排斥的，不能自动激活。

5. 若要激活这些功能模块，参阅第 59 页上的“[激活可选特性](#)”。

## 安装 NIST 和 QED 库

当使用三重四极杆仪器时，例如 TSQ Quantum XLS，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，然后单击 **Next**（下一步）。
2. 单击 **NIST Library**（NIST 库）。

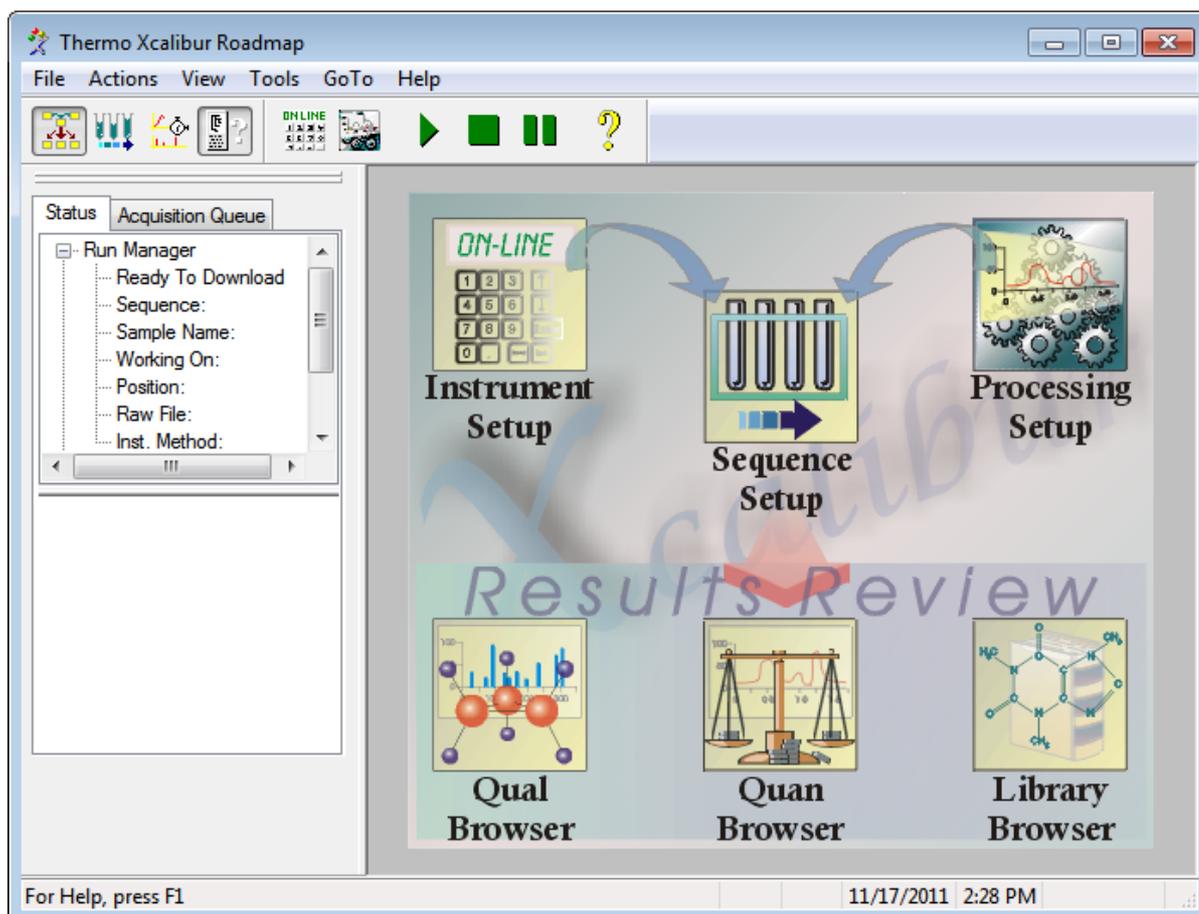
NIST 08 MS Search and AMDIS Setup（NIST 08 质谱图检索和 AMDIS 设置）向导打开。

3. 按照设置向导中的说明进行。
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

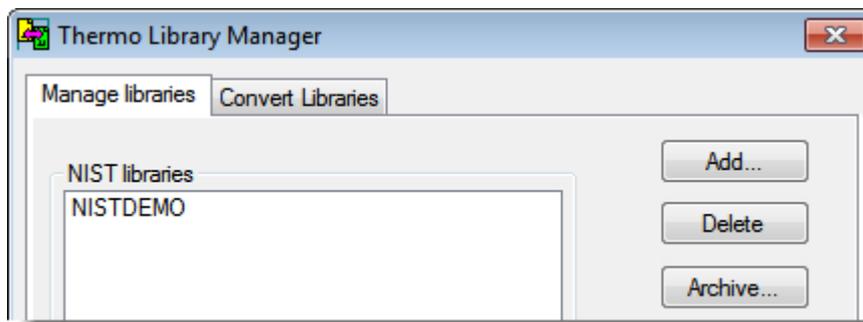
1. 双击桌面上的 **Xcalibur** 图标，。

Thermo Xcalibur Roadmap（Thermo Xcalibur 导航图）打开。



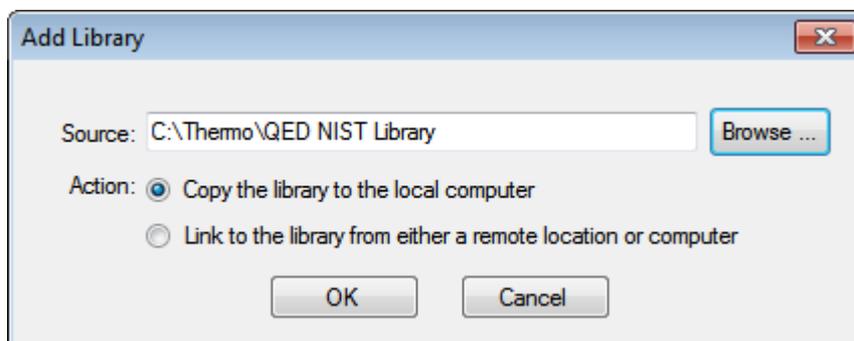
2. 从主菜单中选择 **Tools (工具) > Library Manager (库管理器)**。

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



3. 点击 **Add (添加)**。

Add Library (添加库) 对话框打开。

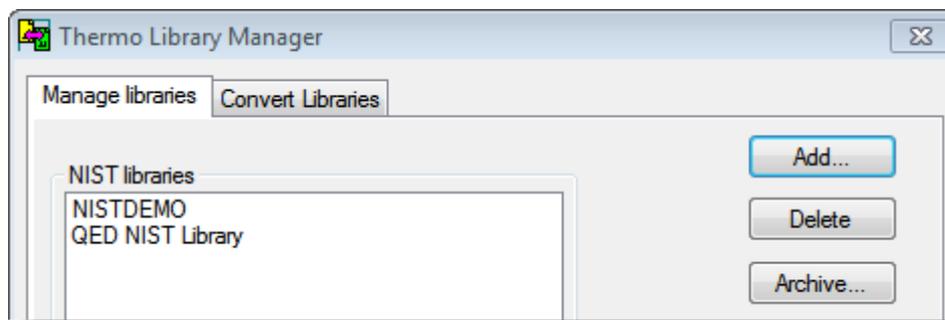


4. 点击 **Browse (浏览)**, 然后在 C:\Thermo 文件夹中找到 QED 库。
5. 点击 **OK (确定)**。

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。

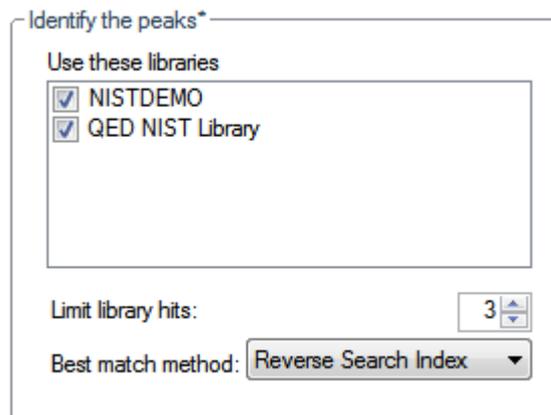
Xcalibur 应用程序将 QED 库添加至 Library Manager (库管理器) 对话框中的 NIST Libraries (NIST 库) 列表中。



7. 点击 Thermo Library Manager (Thermo 库管理器) 对话框中的 **Exit (退出)**。

8. 若要确定该库是否安装，按照以下步骤进行：
  - a. 启动 TraceFinder 应用程序。
  - b. 点击位于导航窗格的 **Method Development**（方法开发）。
  - c. 点击位于 Method Development（方法开发）导航窗格的 **Method View**（方法视图）。
  - d. 从主菜单上选择 **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）。

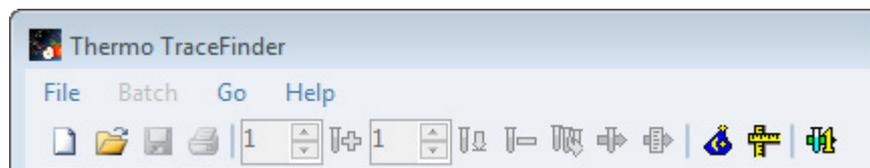


## 启动 NIST Library Browser (库浏览器)

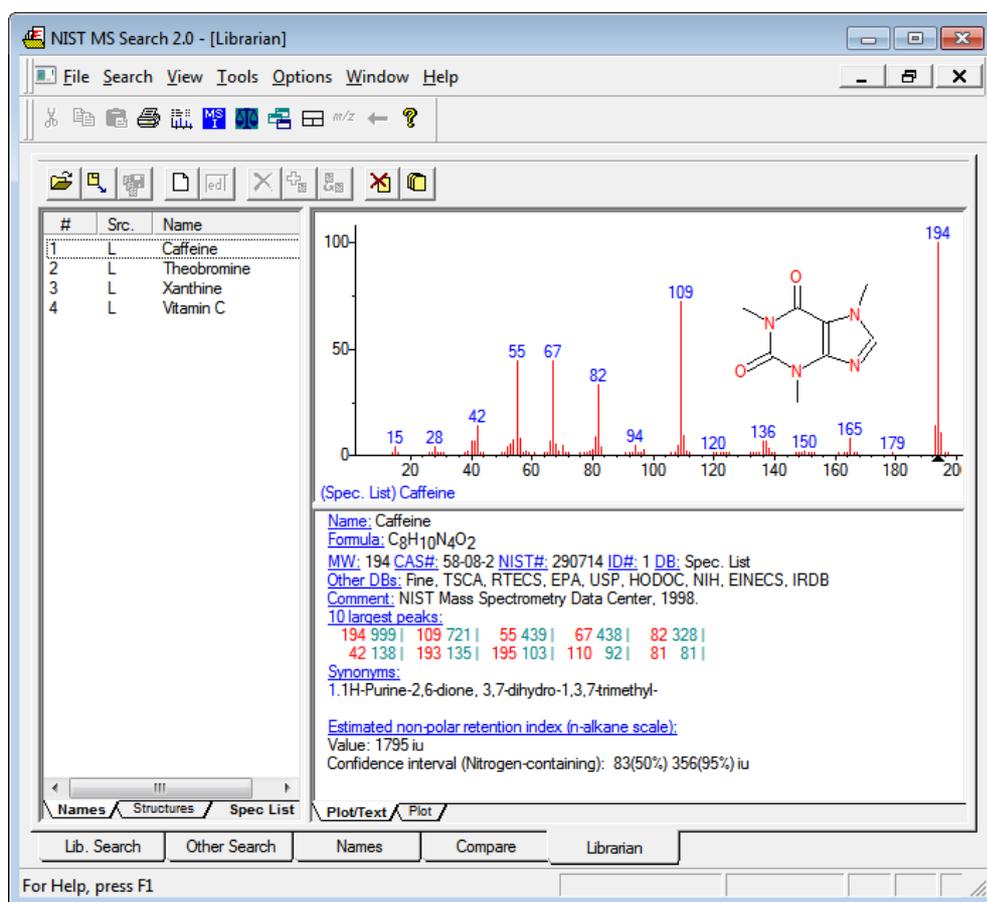
利用 NIST MS Search (NIST 质谱图检索) 工具检索 NIST 库。

### ❖ 若要打开 NIST 库浏览器

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



NIST MS Search (NIST 质谱图检索) 窗口打开。



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

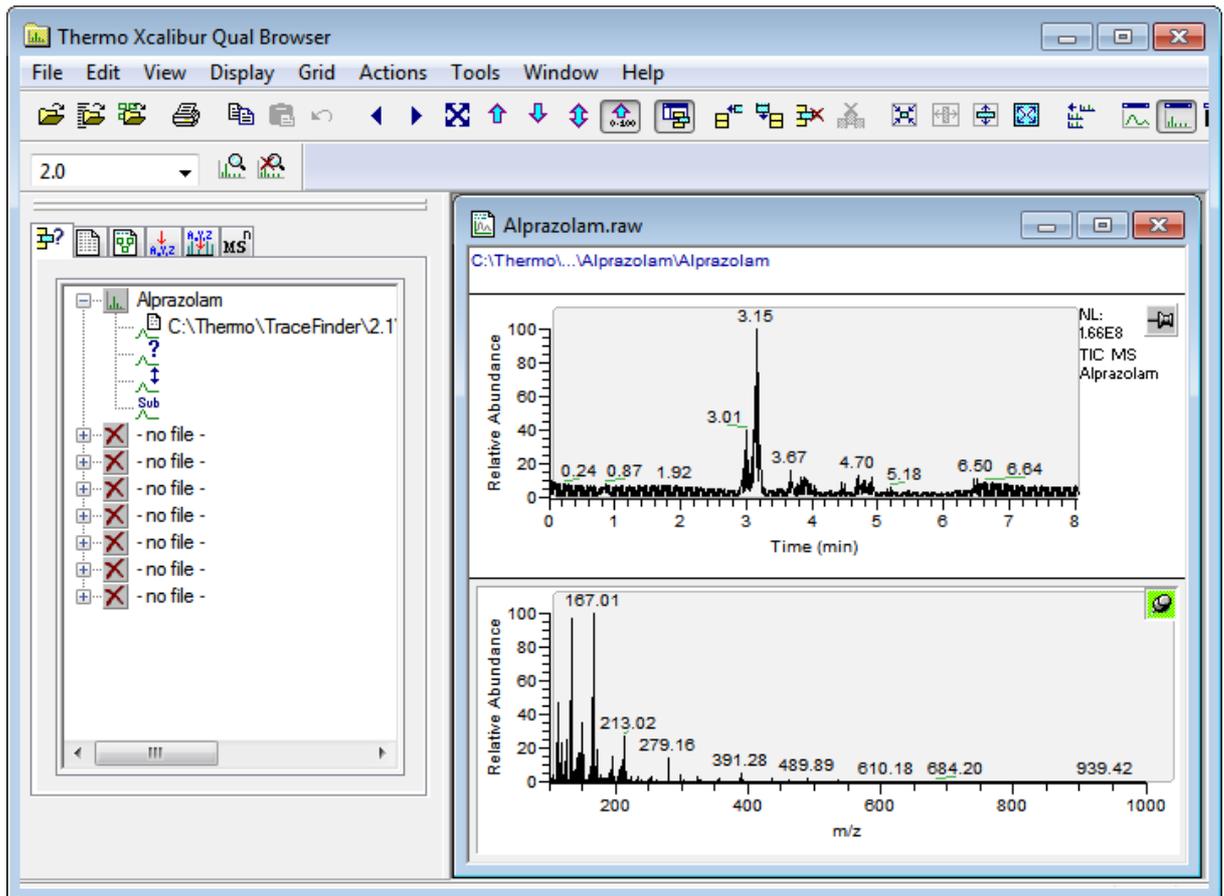
## 启动 Qual Browser (定性浏览器)

利用 Xcalibur 应用程序的 Qual Browser (定性浏览器) 从原始数据文件或定性处理结果中查看色谱图和质谱图。

### ❖ 若要打开 Qual Browser (定性浏览器)

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 (Thermo Xcalibur 定性浏览器) 打开。



有关使用 Qual Browser (定性浏览器) 的详细说明, 参阅 Qual Browser (定性浏览器) 窗口上的 Help (帮助)。

## 转换遗留数据

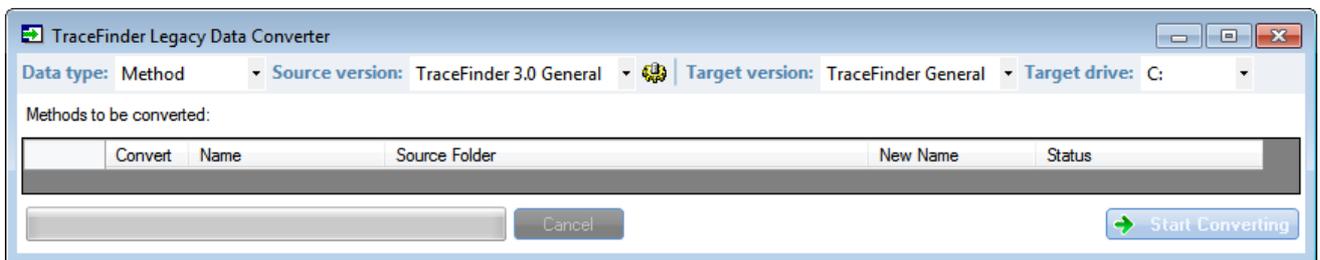
利用 TraceFinder Legacy Data Converter（TraceFinder 遗留数据转换器）将方法、批次、方法模板或批次模板从原始版本转换为可兼容的 TraceFinder 3.1 目标配置。参阅 [版本兼容性](#)。

- 用户可以从 TraceFinder 1.0.1、1.1、2.0、2.1 或 3.0 版本转换遗留数据。
- 用户可以从 EnviroLab Forms、QuanLab Forms 或 ToxLab Forms 中转换数据。
- 用户可以将数据从 TraceFinder 3.1 常规定量转换成另外一种 TraceFinder 3.1 安装配置。

### ❖ 若要打开 TraceFinder Legacy Data Converter（TraceFinder 遗留数据转换器）

从 TraceFinder 主菜单上选择 **Go（运行） > Launch Legacy Data Converter（启动遗留数据转换器）**。

TraceFinder Legacy Data Converter（TraceFinder 遗留数据转换器）窗口打开。



本部分包含以下主题：

- [版本兼容性](#)
- [转换方法](#)
- [转换批次](#)
- [转换方法模板](#)
- [转换批次模板](#)

## 版本兼容性

该表格显示了哪些原始版本的方法、批次、方法模板或批次模板与 TraceFinder 3.1 目标配置兼容。

**表 2.** 版本兼容性

原始版本	TraceFinder 3.1 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 3.1 General		✓	✓	✓
TraceFinder 3.0 General	✓	✓	✓	✓
TraceFinder 2.1 General	✓	✓	✓	✓
TraceFinder 2.1 EFS		✓		
TraceFinder 2.1 Clinical Research			✓	✓
TraceFinder 2.1 Forensic Toxicology			✓	✓
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			✓	✓

## 转换方法

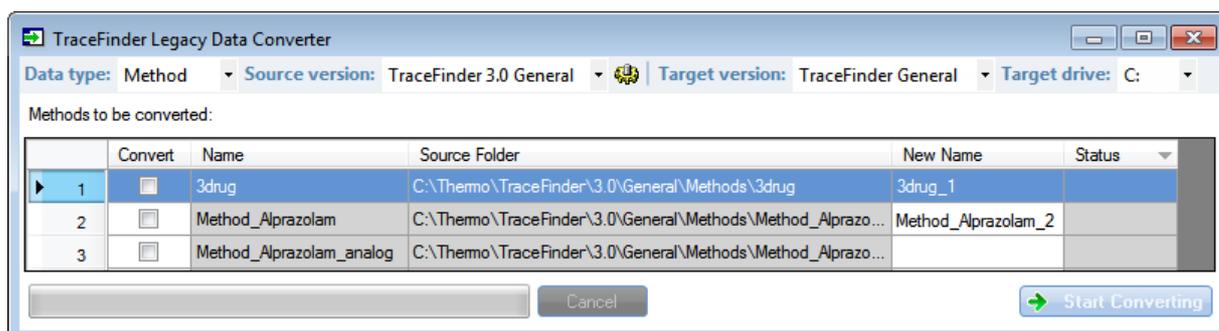
使用数据转换器将遗留方法转换为 TraceFinder 3.1 方法。

### ❖ 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（TraceFinder 遗留数据转换器）显示转换方法的界面。

以下示例显示了用户可以将 TraceFinder 3.0 General（TraceFinder 3.0 常规）配置中的方法转换为现行 General（常规）配置。有关版本兼容性的完整列表，参阅第 19 页上的“版本兼容性”。



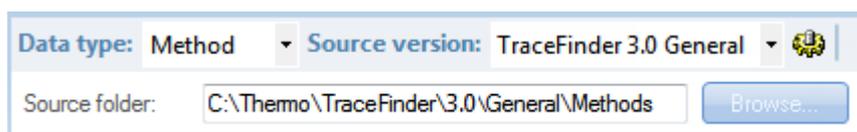
2. 在 Source Version（原始版本）列表中，选择希望转换的方法版本。

Methods to be Converted（待转换方法）显示已选原始版本 Methods（方法）文件夹中的方法。应用程序验证方法文件是否为 .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 **Change Default Source Folder（更改默认原始文件夹）** 图标，

应用程序将 Source Folder（原始文件夹）框添加至窗口。



- b. 点击 **Browse（浏览）** 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 Browse for Folder（文件夹浏览）对话框中的 **OK（确定）**。

应用程序在 Methods to be Converted（待转换方法）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（目标版本）列表中，选择将要转化成的版本。

列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页上的“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 (待转换方法) 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具有该名称的方法。

- 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, 你必须验证该名称是否已存在。

7. 选中将要转换的每个方法的复选框,

然后单击 。

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。可以取消待处理的转换, 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 ...\\TraceFinderData\\Methods 文件夹中。

**注释** 若方法转换失败, 则 Status (状态) 栏显示错误图标。将光标停留在图标上方以显示错误消息。

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 4. 转换方法的日志文件示例

```
===== Start Converting Method from TraceFinder 3.0 General to TraceFinder General ==  
--- Converting master method from  
    'C:\\Thermo\\TraceFinder\\3.0\\General\\Methods\\Alprazolom1\\Alprazolom1.mmx'  
--- Creating master method  
--- Importing properties of object 'MethodData' from XML file  
    'C:\\Thermo\\TraceFinder\\3.0\\General\\Methods\\Alprazolom1\\Alprazolom1.mmx'  
--- Saving master method  
--- Copying instrument method  
--- Successfully converted master method from  
    'C:\\Thermo\\TraceFinder\\3.0\\General\\Methods\\Alprazolom1\\Alprazolom1.mmx'  
    to 'C:\\TraceFinderData\\Methods\\Alprazolom1_4\\Alprazolom1_4.mmx'  
-----  
--- Converting master method from  
    'C:\\Thermo\\TraceFinder\\3.0\\General\\Methods\\XC_method\\XC_method.mmx'  
--- Creating master method  
--- Importing properties of object 'MethodData' from XML file  
    'C:\\Thermo\\TraceFinder\\3.0\\General\\Methods\\XC_method\\XC_method.mmx'  
--- Saving master method  
--- Copying instrument method  
--- Successfully converted master method from  
    'C:\\Thermo\\TraceFinder\\3.0\\General\\Methods\\XC_method\\XC_method.mmx'  
    to 'C:\\TraceFinderData\\Methods\\XC_method_4\\XC_method_4.mmx'  
-----  
===== conversion completed. 2 total, 2 successful, 0 failed. =====  
=====
```

## 转换批次

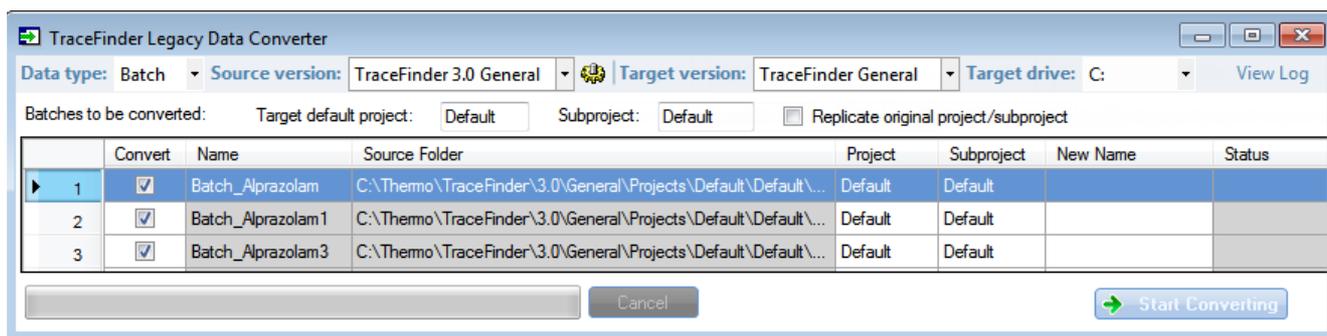
使用数据转换器将遗留批次转换为 TraceFinder 3.1 批次。

### ❖ 若要转换批次

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

TraceFinder Legacy Data Converter（TraceFinder 遗留数据转换器）显示转换批次的界面。

以下示例显示了用户可以将批次从 TraceFinder 3.0 General（常规）配置转换成现行 General（常规）配置。有关版本兼容性的完整列表，参阅第 19 页上的“版本兼容性”。



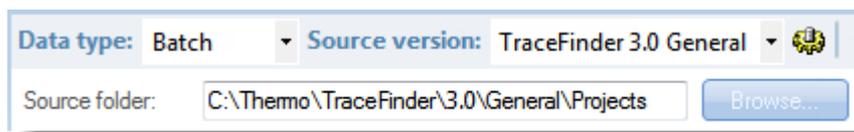
2. 在 Source Version（原始版本）列表中，选择希望转换的批次的版本。

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

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（原始文件夹）** 图标，.

应用程序将 Source Folder（原始文件夹）框添加至窗口。



- b. 点击 **Browse（浏览）** 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 Browse for Folder（文件夹浏览）对话框中的 **OK（确定）**。

应用程序在 Batches to be Converted（待转换批次）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。

应用程序在 Notepad 文本编辑器窗口中打开该期间累积的日志文件。

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

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

5. 在 Target Drive（目标驱动器）列表中，选择一个驱动器。

6. 执行下列操作之一，为已转换批次创建一个项目和子项目：

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（新名称）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（待转换批次）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名称相同，则转换失败。当手动输入一个新名称时，你必须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，

然后单击 。

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（取消）按钮。可以取消待处理的转换，但是无法取消当前正在转换的批次。

当 Status（状态）栏报告批次已成功转化时，应用程序将已转换批次写入 ...\\TraceFinderData\\Projects 文件夹，该文件夹可以使用原始项目和子项目名称，或者使用输入的新名称。

**注释** 若批次转换失败，则 Status（状态）栏显示错误图标。将光标停留在图标上方以显示错误消息。

9. 若要查看转换日志，单击 **View Log（查看日志）**。

图 5. 转换批次的日志文件示例

```
===== Start Converting Batch from TraceFinder 3.0 General to TraceFinder General =====
--- Converting batch
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\BatchData.btd'
Loading data from source batch database
--- Copying raw file
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA1.raw'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA1.raw'
--- Copying chrospec file
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA1.chrospec'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA1.chrospec'
--- Copying raw file
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA2.raw'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA2.raw'
--- Copying chrospec file
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA2.chrospec'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA2.chrospec'
--- Copying raw file
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA3.raw'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA3.raw'
--- Copying chrospec file
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA3.chrospec'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Data\UnknownA3.chrospec'
--- ----- Completed sample import -----
--- Importing local method for 'Batch_alprazolam'
--- Importing properties of object 'MethodData'
from XML file 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\Methods\...|
--- Saving local method data for 'Batch_alprazolam_A1prazolam'
--- Copying reference files method
--- Copying instrument method
--- Saving batch data for 'Batch_alprazolam'
--- Successfully converted batch
from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam\BatchData.btd'
to 'C:\TraceFinderData\Projects\Default\Default\Batch_alprazolam'
-----
===== Conversion completed. 1 total, 1 successful =====
=====
```

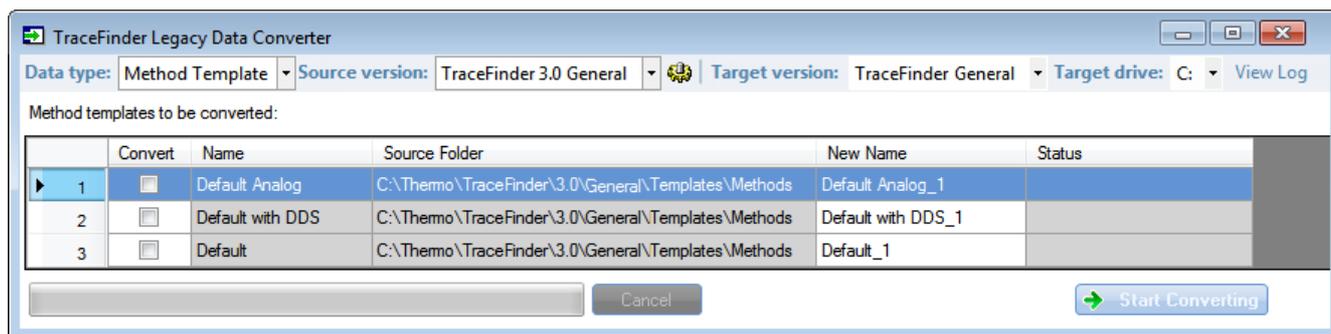
## 转换方法模板

使用数据转换器将遗留方法模板转换为 TraceFinder 3.1 方法模板。

### ❖ 若要转换方法模板

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

TraceFinder Legacy Data Converter （TraceFinder 遗留数据转换器）显示转换方法模板的界面。



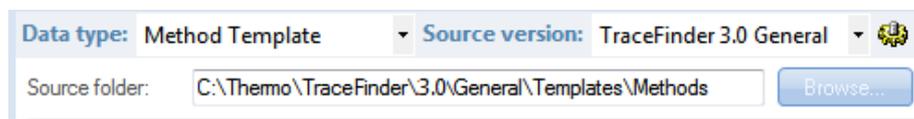
2. 在 Source Version （原始版本）列表中，选择希望转换的方法模板的版本。

Method Templates to be Converted （待转换方法模板）显示已选原始版本的 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否是 .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 （原始文件夹）** 图标，。

应用程序将 Source Folder （原始文件夹）框添加至窗口。



- b. 点击 **Browse （浏览）** 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 Browse for Folder （文件夹浏览）对话框中的 **OK （确定）**。

应用程序显示 Method Templates to be Converted （待转换方法模板）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 （原始版本）列表中，选择将要转化成的版本。

列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页上的“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模板的默认新名称。  
当填充 Method Templates to be Converted (待转换方法模板) 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,

然后单击 。

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 (取消) 按钮。可以取消待处理的转换, 但是无法取消当前正在转换的模板。

当 Status (状态) 栏报告模板已成功转换时, 应用程序将已转换模板写入以下文件夹:  
...\TraceFinderData\Templates\Methods\Forensic 文件夹

**注释** 若模板转换失败, 则 Status (状态) 栏显示错误图标。将光标停留在图标上方以显示错误消息。

8. 若要查看转换日志, 点击 **View Log (查看日志)**。

应用程序在 Notepad 文本编辑器窗口中打开该期间累积的日志文件。

图 6. 转换方法模板的日志文件示例

```
=== Start Converting Method Template from TraceFinder 3.0 General to TraceFinder General ===  
- Converting method template  
  from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Templates\Methods\Default Analog.pmtx'  
- Importing properties of object 'ProcMethodTemplateData'  
  from XML file 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Templates\Methods\Default Analog.pmtx'  
- Saving the method template  
- Successfully converted method template  
  from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Templates\Methods\Default Analog.pmtx'  
  to 'C:\Thermo\TraceFinder\3.1\General\Templates\Methods\Default Analog_1.pmtx'  
-----  
===== Conversion completed. 1 total, 1 successful, 0 failed. =====  
=====
```

## 转换批次模板

使用数据转换器将遗留批次模板转换为 TraceFinder 3.1 批次模板。

### ❖ 若要转换批次模板

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

用户可以选择 LabForms 批次模板或 TraceFinder 批次模板。

TraceFinder Legacy Data Converter（TraceFinder 遗留数据转换器）显示转换批次模板的界面。

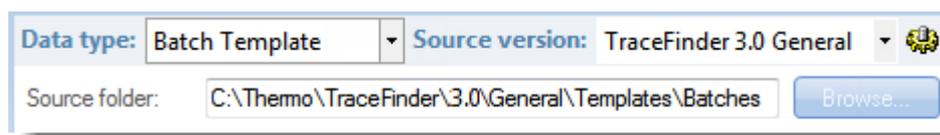
2. 在 Source Version（原始版本）列表中，选择希望转换的批次模板的版本。

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

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（原始文件夹）** 图标，。

应用程序将 Source Folder（原始文件夹）框添加至窗口。



- b. 点击 **Browse（浏览）** 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 Browse for Folder（文件夹浏览）对话框中的 **OK（确定）**。

应用程序显示 Batch Templates to be Converted（待转换批次模板）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（原始版本）列表中，选择将要转化成的版本。

列表仅显示具有可兼容数据的 TraceFinder 配置。参阅第 19 页上的“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批次模板的默认新名称。

当填充 Batch Templates to be Converted（待转换批次模板）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 .btm 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。可以取消待处理的转换，但是无法取消当前正在转换的模板。

当 Status（状态）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 ...\TraceFinderData\Templates\Batches 文件夹。

**注释** 若模板转换失败，则 Status（状态）栏显示错误图标。将光标停留在图标上方以显示错误消息。

8. 若要查看转换日志，点击 **View Log（查看日志）**。

应用程序在 Notepad 文本编辑器窗口中打开该期间累积的日志文件。

**图 7.** 转换批次模板的日志文件示例

```
= Start Converting Batch Template (LabForm type) from TraceFinder 3.0 General to TraceFinder Gener
- Converting batch template from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Templates\Batches\Batch_Templa
- Importing properties of object 'BatchTemplateData' from XML file
  'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Templates\Batches\Batch_Template_A1praz.btm'
-- Saving batch template to 'C:\Thermo\TraceFinder\3.1\General\Templates\Batches\Batch_Template_A1
- Successfully converted batch template from 'C:\Thermo\TraceFinder\3.0\General\Templates\Batches\
  to 'C:\Thermo\TraceFinder\3.1\General\Templates\Batches\Batch_Template_A1praz.btm'
=== Conversion completed. 1 total, 1 successful, 0 failed. =====
```

## 选择一种模式或控制台

当激活用户安全时，导航窗格显示当前用户的指定职务和权限可用的模式或控制台。以下表格显示每种用户职务的可用模式和控制台。

**表 3.** 用户职务和默认权限

用户职务	Method Development (方法开发)	Acquisition (采集)	Analysis (分析)	Configuration Console (配置控制台)	Administrator Console (管理员控制台)
Security (安全)					仅有 Security (安全)
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** 当用户安全未激活时，所有模式对所有用户开放。

按照以下步骤进行操作：

- 若要选择模式
- 若要打开 Configuration (配置) 控制台
- 若要打开 Administrator Console (管理员控制台)
- 若要显示仪器错误日志
- 若要监测仪器状态
- 若要查看实时采集和处理

## ❖ 若要选择模式

在导航窗格上点击要使用的模式。

导航窗格上仅显示有权使用的模式。



模式	描述
Acquisition (采集)	打开 Acquisition (采集) 模式, 在该模式下可以创建和查看批次、批次数据、报告和本地方法。参阅第 5 章, “使用 Acquisition (采集) 模式”。  仅当在 Configuration (配置) 模式中选中 Acquisition Batch Wizard (采集批次向导) 时, 该模式才可用。参阅第 61 页上的 “Batch Wizard Style (批次向导类型)”。
Analysis (分析)	打开 Analysis (分析) 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 (分析) 模式”。
Method Development (方法开发)	打开 Method Development (方法开发) 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 (方法开发) 模式”。

## ❖ 若要打开 Configuration (配置) 控制台

点击 TraceFinder 窗口右上角的 **Application Configuration (应用程序配置)** 图标, 。

当用户安全激活时, 仅具有 Configuration (配置) 权限的用户可以访问 Configuration (配置) 控制台。参阅第 3 章, “使用 Configuration (配置) 控制台”。

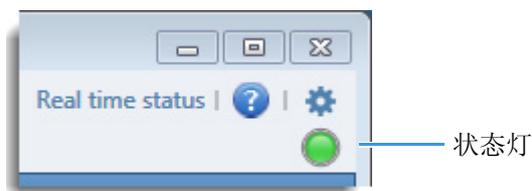
## ❖ 若要打开 Administrator Console (管理员控制台)

从 TraceFinder 主菜单中选择 **Tools (工具) > Administrator Console (管理员控制台)**。

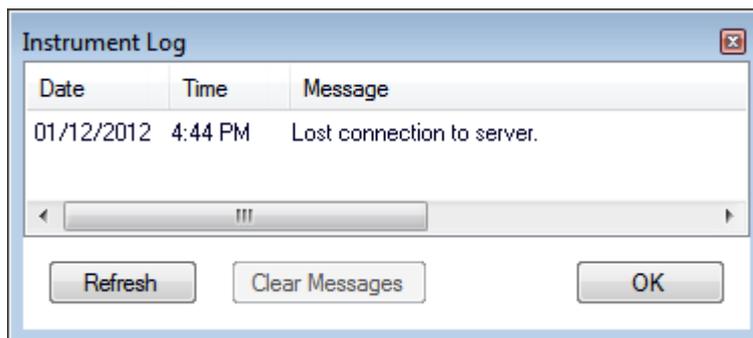
当用户安全激活时, 仅具有 Administrator (管理员) 权限的用户可以访问 Administrator Console (管理员控制台)。参阅 *TraceFinder 管理员控制台用户手册 (TraceFinder Administrator Console User Guide)*。

### ❖ 若要显示仪器错误日志

1. 点击 TraceFinder 窗口右上角的状态灯。



Instrument Log (仪器日志) 对话框打开。



Instrument Log (仪器日志) 对话框显示从 TraceFinder 应用程序启动时或从上次清除消息日志开始时发生的所有仪器错误。

2. 执行下列操作之一：

- 点击 **Refresh (刷新)** 以显示打开 Instrument Log (仪器日志) 对话框后发生的错误。
- 点击 **Clear Messages (清除消息)** 以清除 Instrument Log (仪器日志) 中显示的消息。

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

C:\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Logs\TraceFinder.log

- 单击 **OK (确定)** 退出 Instrument Log (仪器日志) 对话框。

### ❖ 若要监测仪器状态

查看 TraceFinder 窗口右上角的状态灯。



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。



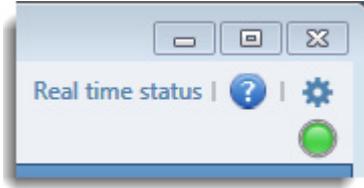
红色代表仪器已关闭或没有配置任何设备。

## 2 使用入门

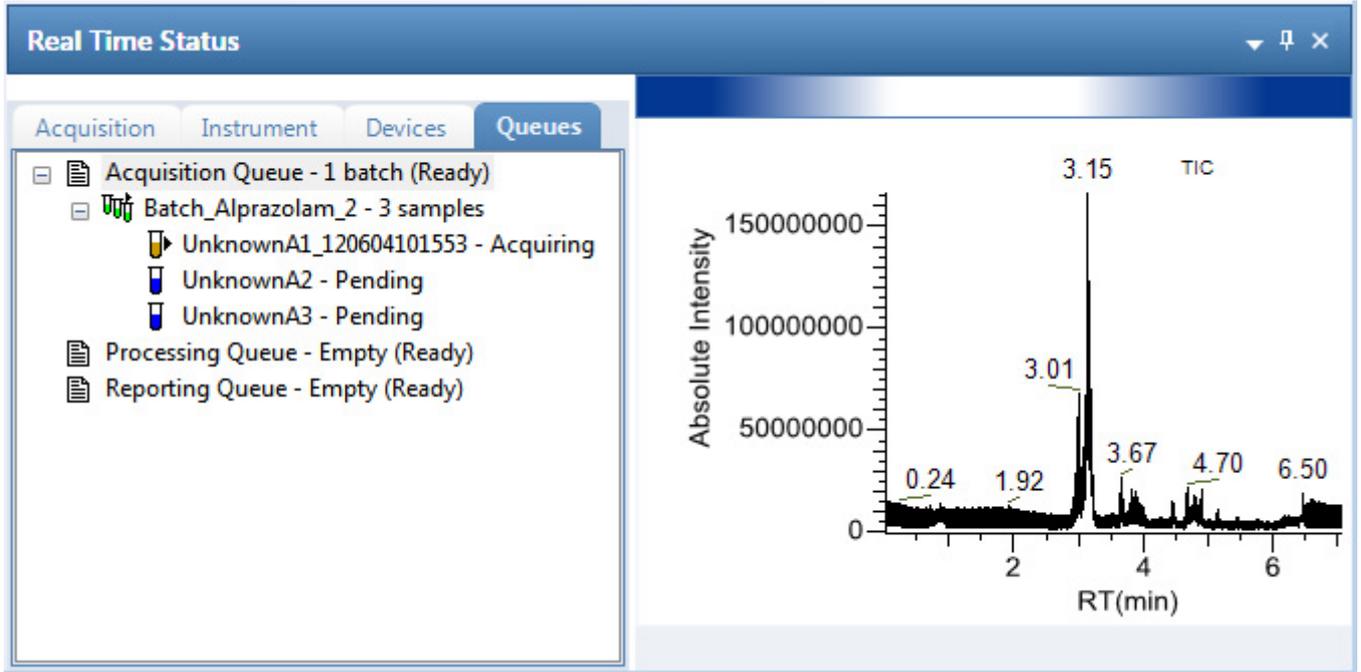
选择一种模式或控制台

### ❖ 若要查看实时采集和处理

点击 TraceFinder 窗口右上角的 **Real Time Status**（实时状态）。



该应用程序在窗口的底部显示 Real Time Status（实时状态）窗格。



有关 Real Time Status（实时状态）窗格所有特性的描述，参阅第 339 页上的“Real Time Status（实时状态）窗格”。

## TraceFinder 窗口特征

对于默认具有 LabDirector（实验室主任）职务的用户，用户安全已激活时，TraceFinder 窗口具有这些功能。



表 4. TraceFinder 窗口参数

参数	描述
Real Time Status (实时状态)	为当前数据采集打开 Real Time Status（实时状态）窗格。采集进程显示在当前模式的窗口中。
<i>CurrentUserName</i> (当前用户名)	显示当前用户的名称。仅当用户安全激活时显示。
Log Off（注销）	注销当前用户并显示登录界面。该功能仅当用户安全激活时可用。
Help（帮助）	打开 TraceFinder Help（帮助）。
Configuration Console (配置控制台)	打开 Configuration（配置）控制台，在此可以为使用 TraceFinder 应用程序进行几种配置。参阅第 3 章，“使用 Configuration（配置）控制台”。
	



## 使用 Configuration（配置）控制台

本章描述了 Configuration（配置）控制台的特性。当用户安全已激活时，具有 Configuration（配置）权限的用户可使用该控制台。当用户安全未激活时，所有用户都可以使用 Configuration（配置）控制台上的所有特性。

若用户是本地管理员组里的一员，且第一次启动 TraceFinder 应用程序，则默认用户具有 LabDirector（实验室主任）的权限。参阅 *TraceFinder 管理员控制台用户手册*（*TraceFinder Administrator Console User Guide*）。

采用 Configuration（配置）控制台上的一些特性，用户可以激活如下功能：可用的报告、用户安全、报告默认值、多通道、检测算法和目标筛选。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。

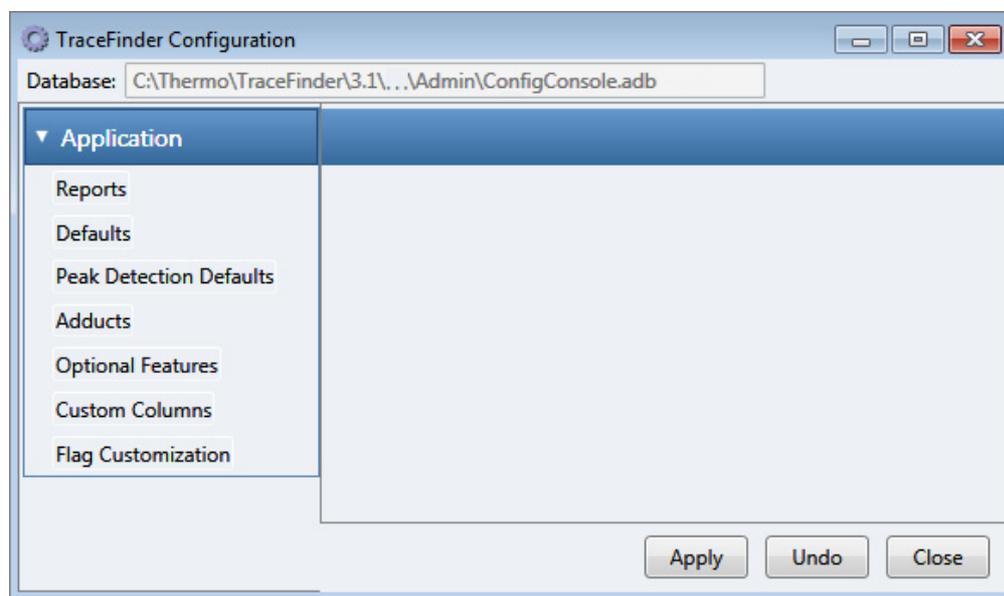
### 目录

- 指定 Reports（报告）
- 指定应用程序默认值
- 指定默认 Peak Detection Parameters（峰检测参数）
- 指定 Adducts（加合物）
- 激活可选特性
- 创建 Custom Columns（自定义列）
- 创建自定义标记

## ❖ 若要访问 Configuration (配置) 控制台

点击任意窗口右上角的 **Application Configuration (应用程序配置)** 图标, 。

TraceFinder Configuration (TraceFinder 配置) 控制台打开。



**表 5.** Configuration (配置) 控制台上 Navigation (导航) 窗格的功能

功能	描述
Reports (报告)	通过 Reports (报告) 视图, 配置标准、自定义、ToxID 或目标筛选报告。参阅第 37 页上的“指定 Reports (报告)”。
Defaults (默认)	通过 Defaults (默认) 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。参阅第 42 页上的“指定应用程序默认值”。
Peak Detection Defaults (峰检测默认值)	通过 Peak Detection Defaults (峰检测默认值) 视图指定峰检测算法及其选项, 并测量曲线下面积。参阅第 44 页上的“指定默认 Peak Detection Parameters (峰检测参数)”。
Adducts (加合物)	通过 Adducts (加合物) 视图, 指定在方法开发中可用的加合物。参阅第 56 页上的“指定 Adducts (加合物)”。
Optional Features (可选特性)	通过 Optional Features (可选特性) 视图, 启动如下特性, 例如 ToxID、快速采集、批次向导类型、多通路、智能排序和筛选库。参阅第 59 页上的“激活可选特性”。
Custom Columns (自定义列)	通过 Custom Columns (自定义列) 视图, 将另外六列添加至批次的样品列表中。参阅第 66 页上的“创建 Custom Columns (自定义列)”。
Flag Customization (标记自定义)	通过 Flag Customization (标记自定义) 视图, 自定义错误标记和条件, 以指示定量批次 Data Review (数据查看) 中出现的化合物错误。参阅第 69 页上的“创建自定义标记”。

## 指定 Reports（报告）

当用户安全激活时，默认为 LabDirector（实验室主任）或 ITAdmin（IT 管理员）职务的用户可以配置报告列表，该列表在所有用户从 Method Development（方法开发）、Analysis（分析）或 Acquisition（采集）模式下生成报告时可用。通过 Reports（报告）视图，可以配置标准、自定义、ToxID 或目标筛选报告。

当用户首次打开报告配置时，所有报告类型都包含在 Displayed Reports（显示的报告）窗格中，可用于用户创建的所有方法。默认情况下，Intelligent Sequencing Report（智能排序报告）不包含在 Displayed Reports（显示的报告）窗格中。

**注释** 仅当用户已安装 Intelligent Sequencing（智能排序）功能模块且启用了 Intelligent Sequencing（智能排序）功能时，Intelligent Sequencing Report（智能排序报告）才可用。参阅第 12 页上的“安装 Power Modules（功能模块）”和第 65 页上的“Intelligent Sequencing（智能排序）”。

**注释** 仅当激活 ToxID 特性时，ToxID 报告才可用。参阅第 60 页上的“ToxID”。

报告格式的 PDF 示例文件位于以下文件夹中：

C:\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\ExampleReports

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开 Reports（报告）视图
  - 若要指定可用的报告
  - 若要导入自定义报告
- ❖ **若要打开 Reports（报告）视图**

在 Configuration（配置）控制台导航窗格上，点击 **Reports（报告）**。

Application - Reports（应用程序 - 报告）视图打开。关于 临床研究 Forensic Toxicology（法医毒物学）市场所有报告的列表，参阅第 39 页上的“Reports（报告）”。

❖ **若要指定可用的报告**

1. 选中想要激活的每项报告的 **Display（显示）** 复选框。

在 Method Development（方法开发）、Analysis（分析）和 Acquisition（采集）模式下，用户可以访问已选择显示的所有报告。

2. 若要为整个批次创建一份组合报告（而不是为每个样品单独创建报告），为报告选中 **Batch Level（批次水平）** 复选框。

该方法不会为每个样品单独创建报告，应用程序综合所有样品的数据，为整个批次创建一份报告。该应用程序在所有批次水平的报告名称前面加一个 **B**，以用于区分。

**注释** 只有能够整合批次水平数据的报告，才激活其 **Batch Level（批次水平）** 复选框。默认情况下，应用程序为所有报告选中 Batch Level（批次水平）特性。

3. 执行下列操作之一：

- 若要将报告选择恢复至初始状态（初次打开此视图时的状态），点击 **Undo**（撤销）。
- 若要保存修改，单击 **Apply**（应用）。

用户的报告设置在 TraceFinder 应用程序中立即可用。

❖ **若要导入自定义报告**

1. 点击 **Import**（导入）。
2. 查找一份自定义报告（.xltm）并点击 **Open**（打开）。
3. 若要保存修改，单击 **Apply**（应用）。

该应用程序将自定义报告添加至可用的自定义报告列表中。

## Reports (报告)

该应用程序采用以下报告：[标准](#)，[自定义](#)，[目标筛选](#)和 [ToxID](#) 报告。有关 Reports (报告) 视图上参数的描述，参阅第 41 页上的“[Reports \(报告\) 视图参数](#)”。

图 8. Reports (报告) 视图显示标准报告

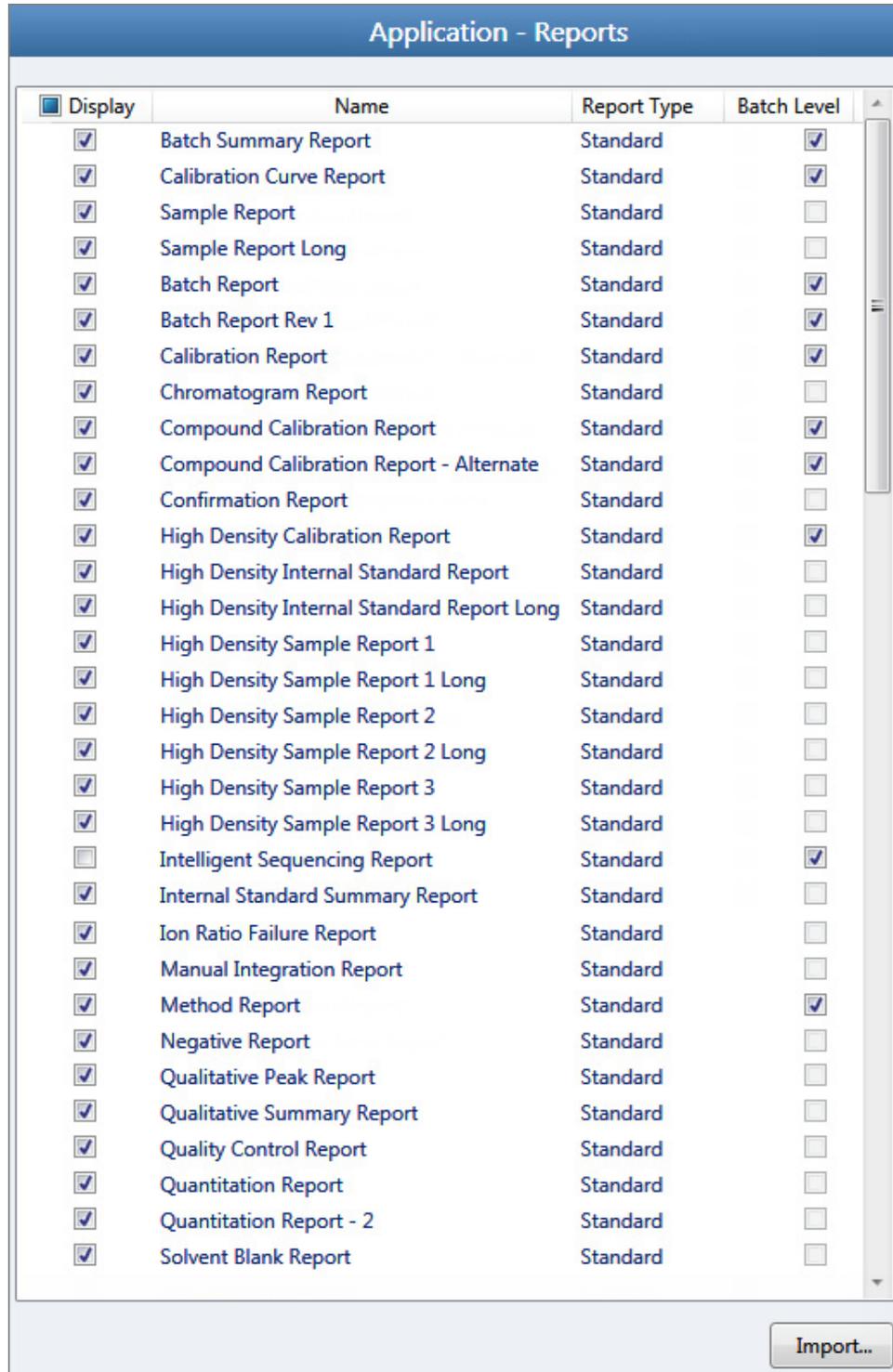


图 9. Reports (报告) 视图显示自定义报告

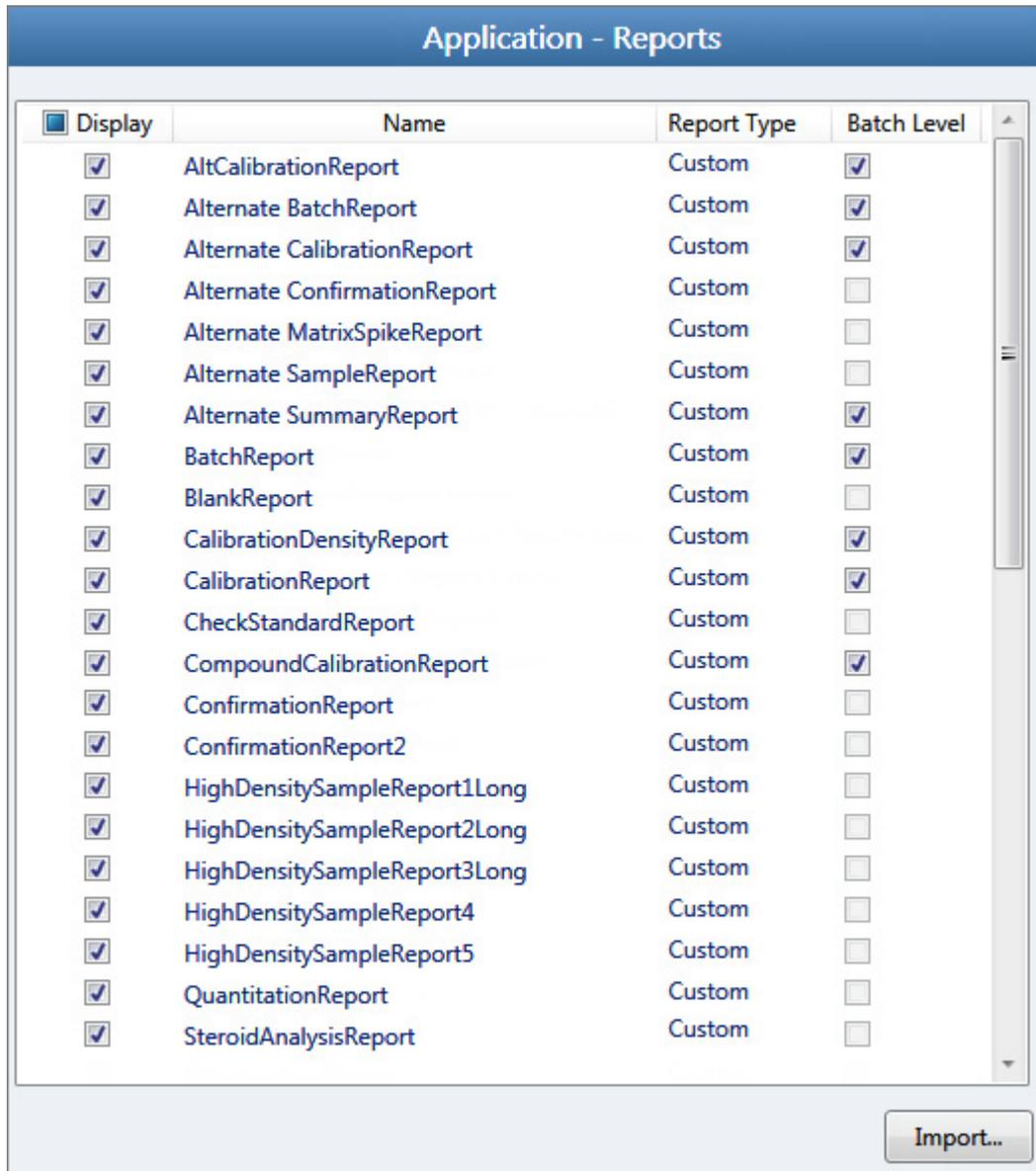


图 10. Reports (报告) 视图显示目标筛选报告

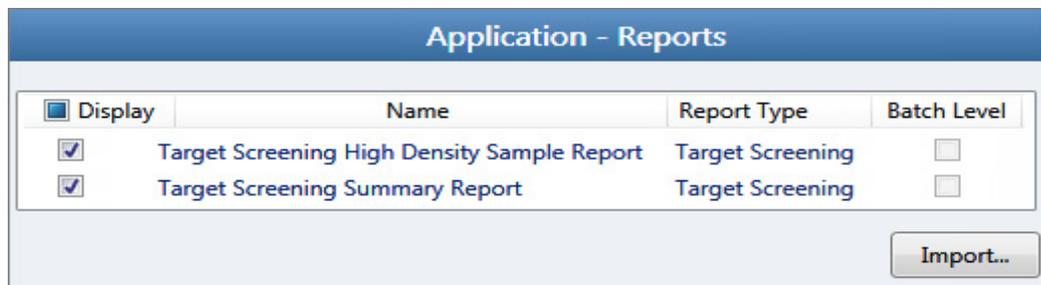


图 11. Reports (报告) 视图显示 ToxID 报告



**注释** 仅当已安装 ToxID™ 软件并激活 ToxID 特性时，ToxID 报告才可用。有关激活 ToxID 特性的详细步骤，参阅第 60 页上的“ToxID”。

表 6. Reports (报告) 视图参数

参数	描述
Display (显示)	指定已选择用于该应用程序的报告。
Name (名称)	显示该应用程序可用的所有报告。
Report Type (报告类型)	指定报告类型: Standard (标准)、Custom (自定义)、Target Screening (目标筛选) 或 ToxID。
Batch Level (批次水平)	默认情况下，该应用程序为所有报告选中 Batch Level (批次水平) 特性，以便在批次水平上整合数据。
Import (导入)	打开浏览器，查找一份自定义报告并添加至可用自定义报告列表中。

## 指定应用程序默认值

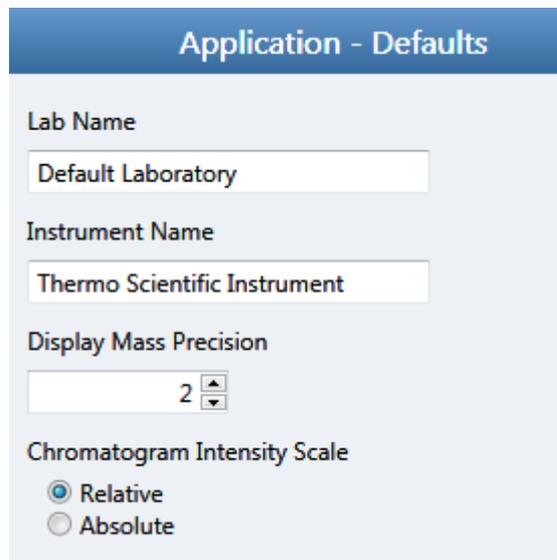
通过 Configuration（配置）控制台的 Application - Defaults（应用程序 - 默认值）视图，指定用于报告的默认实验室和仪器名称、显示的质量数精度和色谱图强度范围。当用户安全已激活时，仅默认为 LabDirector（实验室主任）或 ITAdmin（IT 管理员）职务的用户可以访问这些特性。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开 Defaults（默认值）视图
  - 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 Defaults（默认值）视图

在 Configuration（配置）控制台的导航窗格上，点击 **Defaults（默认值）**。

Application - Defaults（应用程序 - 默认值）视图打开。



❖ 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 Method（方法）视图 General（常规）页面的 Laboratory Name（实验室名称）。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以前创建的方法中。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）框中输入仪器的名称。

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

3. 若要保存修改，单击 **Apply（应用）**。

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

❖ 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, 将质量数精度的小数位值设置为 2 到 6 之间的整数, 包括 2 和 6。

默认显示的数字是 2。TraceFinder 应用程序采用该质量数精度值, 显示以下位置中的质量数:

- Reports (报告):
  - 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 (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 (方法开发) 模式下 Detection (检测) 页面上的所有峰
- Analysis (分析) 模式下的质谱图显示
- 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; 而当显示不包含在过滤器表达式内的质量数, 以及显示质谱图的质量数时, TraceFinder 应用程序使用 Display Mass Precision (显示质量数精度) 值。

2. 选择 **Relative (相对)** 或 **Absolute (绝对)** 选项用于 Chromatogram Intensity Scale (色谱图强度范围)。

这样可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. 若要保存修改, 单击 **Apply (应用)**。

## 指定默认 Peak Detection Parameters (峰检测参数)

当用户安全激活时，默认为 LabDirector (实验室主任) 或 ITAdmin (IT 管理员) 职务的用户可以为 Genesis、ICIS 或 Avalon 检测算法指定默认峰检测参数。使用 Peak Detection Defaults (峰检测默认值) 视图指定峰检测算法及其选项，并测量曲线下面积。这些参数仅适用于定量方法。

本部分包含指定常用峰检测参数的步骤和指定以下每种检测算法所用参数的步骤：

- [Genesis Detection Method \(检测方法\)](#)
- [ICIS Detection Method \(检测方法\)](#)
- [Avalon Detection Method \(检测方法\)](#)

### ❖ 若要打开 Peak Detection Defaults (峰检测默认值) 视图

在 Configuration (配置) 控制台的导航窗格上，点击 **Peak Detection Defaults (峰检测默认值)**。

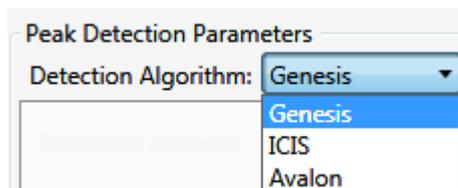
Application – Peak Detection Defaults (应用程序 – 峰检测默认值) 视图打开。

- 有关所有检测算法所用检测参数的详细描述，参阅第 45 页上的“[常见峰检测参数](#)”。
- 有关 Genesis 检测算法所用检测参数的详细描述，参阅第 47 页上的“[Genesis 峰检测参数](#)”。
- 有关 ICIS 检测算法所用检测参数的详细描述，参阅第 50 页上的“[ICIS 峰检测参数](#)”。
- 有关 Avalon 检测算法所用检测参数的详细描述，参阅第 52 页上的“[Avalon 峰检测参数](#)”。

### ❖ 若要指定常用检测参数

1. 从 Detector Type (检测器类型) 列表中选择一种检测器类型。  
对于可用检测器类型的详细描述，参阅第 45 页上的“[常见峰检测参数](#)”。
2. 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 (MMU 或 PPM)。
  - b. 在 Value (值) 框中，指定上限所使用的毫质量数单位值或 ppm 数值。  
应用程序将质量数容许偏差应用至提取色谱图中。默认值为 500 MMU。
3. 在 Retention Time (保留时间) 区域执行以下操作：
  - a. 在 Window (窗口) 框中，指定窗口宽度 (以秒为单位)，以表示系统用于查看峰尖预期保留时间的范围。
  - b. 在 View Width (查看宽度) 框中，指定离子色谱图显示的可查看尺寸 (单位为分钟)。
4. 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 (绝对)** 或 **Relative (相对)** 作为确定可接受离子比率范围所用的计算方法。
  - 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之间保留时间的最大差值。
5. 在 Peak Detection Parameters (峰检测参数) 区域选择其中一种检测算法: **Genesis**、**ICIS** 或 **Avalon**。



6. 指定当前所选检测算法的参数。  
有关参数的详细描述, 参阅以下其中之一:

  - [Genesis Detection Method \(检测方法\)](#)
  - [ICIS Detection Method \(检测方法\)](#)
  - [Avalon Detection Method \(检测方法\)](#)

## 常见峰检测参数

Detector Type (检测器类型)、Mass Tolerance (质量数容许偏差)、Retention Time (保留时间) 和 Ion Ratio (离子比率) 检测参数可用于所有检测算法。

图 12. 常见峰检测区域

**Detector Type**  
MS

**Mass Tolerance**  
Units:  MMU  PPM  
Value: 500.00

**Retention Time**  
Window (sec): 30.00  
View Width (min): 0.50

**Ion Ratio Parameters**  
Window type: Relative  
Window (+/- %): 20.00  
Ion coelution (min): 0.10

表 7. 常见峰检测参数

参数	描述
Detector Type (检测器类型)	<p>MS (质谱仪): 质谱仪电离样品分子, 使离子根据质荷比 (<math>m/z</math>) 分离。</p> <p>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。它位于质谱仪的像平面, 以便同时检测一系列波长。</p> <p>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 QIon 值的报告显示该值为 <b>Analog (模拟)</b>, 而显示质谱图的任何报告将质谱图显示为 <b>Not Available (不可用)</b>。</p> <p>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。</p> <p>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。</p>
<b>Mass Tolerance (质量数容许偏差)</b>	
Units (单位)	<ul style="list-style-type: none"> <li>(默认) MMU (毫质量数单位) MMU 是提取质量数的静态计算。</li> <li>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。</li> </ul>
Value (值)	<p>MMU 或 PPM 上限值。 默认: 500 范围: 0.1 至 50 000</p>
<b>Retention Time (保留时间)</b>	
Window (sec) (窗口, 秒)	窗口宽度 (以秒为单位) 表示系统查看峰尖预期保留时间的范围。
View Width (min) (视图宽度, 分钟)	离子色谱图的显示尺寸 (单位为分钟)。更改查看宽度并不影响峰检测的处理; TraceFinder 应用程序仅将其用于图形显示。
<b>Ion Ratio Parameters (离子比率参数)</b>	
Window Type (窗口类型)	用于确定可接受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之间保留时间的最大差值。

## Genesis Detection Method (检测方法)

TraceFinder 应用程序为反向兼容 Xcalibur 1.0 研究提供了 Genesis 峰检测算法。

图 13. Genesis 峰检测

表 8. Genesis 峰检测参数 (第 1 页, 共 3 页)

参数	描述
Detection Algorithm (检测算法)	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 (最接近的保留时间): 使用色谱图中具有最接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, 确定要对当前成分峰数据执行的平滑程度。ICIS 峰检测算法使用此值。 默认: 1 范围: 从 1 至 15 点之间的任意奇数整数
S/N threshold (信噪比阈值)	用于峰积分的现行信噪比阈值。小于此信噪比值的峰将不会进行积分。大于此信噪比值的峰将进行积分。 范围: 0.0 至 999.0

表 8. Genesis 峰检测参数 (第 2 页, 共 3 页)

参数	描述
Enable Valley Detection (启用峰谷检测)	使用峰谷检测近似方法来检测未解析的峰。该方法从未解析峰之间的谷尖到基线作一条垂直线。垂直线和基线的交叉指定了首个峰的结束以及第二个峰的开始。
Expected Width (sec) (预期宽度, 秒)	<p>预期的峰宽参数 (以秒为单位)。如果已启用峰谷检测, 该参数可控制预期的最小峰宽度。</p> <p>启用峰谷检测时, 任何距离峰尖小于 <i>预期宽度</i> 一半的谷点将被忽略。如果谷点处于预期峰宽范围之外, TraceFinder 数据系统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。</p> <p>范围: 0.0 至 999.0</p>
Constrain Peak Width (限定峰宽)	在色谱图峰积分时限定化合物的峰宽。然后通过设置阈值和拖尾因子来控制峰积分何时打开和关闭。选择 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框会激活 Peak Height (%) (峰高, %) 和 Tailing Factor (拖尾因子) 选项。
Peak Height (%) (峰高, %)	<p>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 (限定峰宽) 复选框时, 该文本框才激活。</p> <p>范围: 0.0 至 100.0%</p>
Tailing Factor (拖尾因子)	<p>控制 TraceFinder 应用程序如何进行峰拖尾积分的因子。该因子是指一个限定峰的拖尾对前延的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框时, 该文本框才激活。</p> <p>范围: 0.5 至 9.0</p>
Peak S/N Cutoff (峰信噪比截止值)	<p>将峰边缘设置为低于该信噪比的值。</p> <p>当边缘的基线调整高度小于基线调整峰尖高度与峰信噪比截止值比率的比值时, 该测试认为应用程序已找到一个峰的边缘。</p> <p>当峰尖的信噪比为 500, 峰的信噪比截止值为 200, 峰信噪比值小于 200 时, TraceFinder 应用程序会指定此峰的左右边缘。</p> <p>范围: 50.0 至 10000.0</p>
Valley Rise (%) (峰谷上升, %)	<p>峰谱图可在通过一个最小值 (在峰之前或之后) 后向上, 超出基线的部分达到该百分比值。该标准对于具有长拖尾的积分峰特别有用。</p> <p>该方法从未解析峰之间的谷尖到基线作一条垂直线。垂直线和基线的交叉指定了首个峰的结束以及第二个峰的开始。</p> <p>当谱图上升部分超过该百分比时, TraceFinder 应用程序应用谷检测峰积分标准。此测试应用于峰的左右两边缘。</p> <p>范围: 0.1 至 500.0</p>
Valley S/N (峰谷信噪比)	<p>指定一个值以评估峰谷的底端。使用此参数确保其周围的测量值更高。</p> <p>默认: 2.0</p> <p>范围: 1.0 至 100.0</p>

表 8. Genesis 峰检测参数 (第 3 页, 共 3 页)

参数	描述
# Background Scans (背景扫描数)	TraceFinder 应用程序执行的背景扫描次数。
Report Noise As (将噪声报告为)	确定是否使用 RMS (均方根) 或峰与峰之间的分离度阈值, 来计算用于 S/N (信噪比) 值的噪声。选项有 RMS (均方根) 或 Peak To Peak (峰对峰)。

### ICIS Detection Method (检测方法)

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

图 14. ICIS 峰检测

The screenshot shows the 'Peak Detection Parameters' dialog box with the 'Detection Algorithm' set to 'ICIS'. The parameters are as follows:

- Detection Algorithm: ICIS
- Detection method: Nearest RT
- Smoothing: 1
- Area noise factor: 5
- Peak noise factor: 10
- Baseline window: 40
- Constrain peak width
- Peak height (%): 5.00
- Tailing factor: 1.00
- Noise method: Incos
- Min peak width: 3
- Multiplet resolution: 10
- Area tail extension: 5
- Area scan window: 0
- RMS

表 9. ICIS 峰检测参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Detection Algorithm (检测算法)	指定 ICIS 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 (最接近的保留时间): 使用色谱图中具有最接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, 确定要对当前成分峰数据执行的平滑程度。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 从 1 至 15 点之间的任意奇数整数 默认: 1
Area Noise Factor (峰面积噪声因子)	用于确定可能存在的峰位边缘的噪声水平倍数。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 1 至 500 默认: 5
Peak Noise Factor (峰噪声因子)	用于确定潜在峰信号阈值的噪声水平倍数。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 1 至 1000 默认: 10
Baseline Window (基线窗口)	TraceFinder 应用程序进行几次扫描后查找一个局部最小值。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 1 至 500 默认: 40
Constrain Peak Width (限定峰宽)	在色谱图峰积分时限定化合物的峰宽。然后, 可以通过设置峰高阈值和拖尾因子控制峰积分何时打开和关闭。选中 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框, 激活 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 (限定峰宽) 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。该因子是指一个限定峰的拖尾对前延的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框时, 该文本框才激活。  范围: 0.5 至 9.0

表 9. ICIS 峰检测参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Noise Method (噪声方法)	选项有 INCOS (单遍算法) 或 Repetitive (多遍算法)。  INCOS (单遍算法): 利用单遍算法来确定噪声水平。ICIS 峰检测算法使用此值。  Repetitive (多遍算法): 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 (单遍算法) 噪声算法更准确, 但分析所需时间更长。
Min Peak Width (最小峰宽)	峰所要求的最小扫描次数。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 0 至 100 次扫描 默认: 3
Multiplet Resolution (多重分离度)	在两个潜在峰的峰尖之间扫描的最小间距。这是确定两个峰是否已解析的标准。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 1 至 500 次扫描 默认: 10
Area Tail Extension (峰面积尾扩展)	超过峰端点进行的扫描次数, 用于均分强度。ICIS 峰检测算法使用此值。  范围: 0 至 100 次扫描 默认: 5
Area Scan Window (峰面积扫描窗口)	输入峰尖两侧允许的扫描次数。零值是指峰面积积分中包括所有扫描 (峰起点到峰终点)。  范围: 0 至 100 次扫描 默认: 0
RMS (均方根)	指定 TraceFinder 应用程序计算噪声为 RMS (均方根) 值。默认情况下, 应用程序使用 Peak To Peak (峰对峰) 进行噪声计算。如果手动确定噪声区域, RMS (均方根) 将自动选中。

## Avalon Detection Method (检测方法)

Avalon 峰检测算法专为 UV (紫外) 数据设计。Avalon 峰检测算法也支持负峰。可以从 [Avalon Event List \(Avalon 事件列表\)](#) 中编辑 Event (事件) 值。

图 15. Avalon 峰检测

Peak Detection Parameters

Detection Algorithm: Avalon

Detection method: Nearest RT

Smoothing: 1

Time	Event	Value
Initial	Start Threshold	10000.000
Initial	End Threshold	10000.000
Initial	Area Threshold	10000.000
Initial	P-P Threshold	1.000
Initial	Bunch Factor	1.000
Initial	Negative Peaks	Off
Initial	Tension	1.000

Autocalc initial events Edit

表 10. Avalon 峰检测参数

参数	描述
Detection Algorithm (检测算法)	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 (最接近的保留时间): 使用色谱图中具有最接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, 确定要对当前成分峰数据执行的平滑程度。ICIS 峰检测算法使用此值。 默认: 1 范围: 从 1 至 15 点之间的任意奇数整数
Time/Event/Value (时间 / 事件 / 值)	显示 Avalon Event List (Avalon 事件列表) 对话框中指定的事件。起初只显示无法编辑或删除的默认事件。
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, 在此可以编辑 Time/Event/Value (时间 / 事件 / 值) 参数。参阅 <a href="#">“Avalon Event List (Avalon 事件列表)”</a> 。

### Avalon Event List (Avalon 事件列表)

该事件列表包含用户自定义的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或值。有关事件和值范围的详细列表，参阅 [Event \(事件\) 类型](#)。

图 16. Avalon Event List (Avalon 事件列表) 对话框

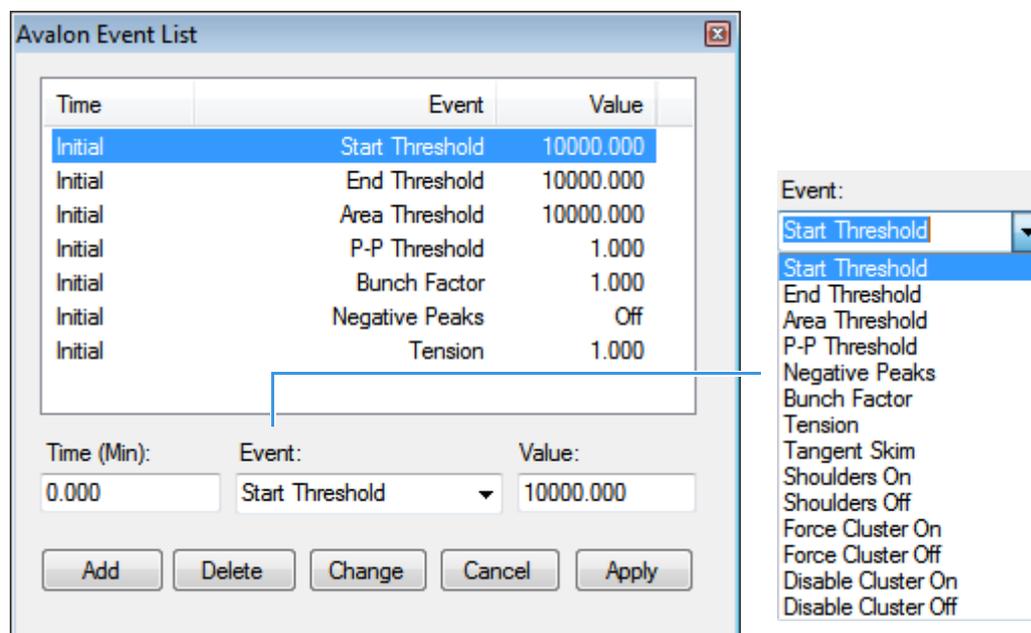


表 11. Avalon Event List (Avalon 事件列表) 对话框参数

参数	描述
Time (Min) (时间, 分钟)	指定事件的起始时间。
Event (事件)	指定事件的类型。有关事件和值范围的详细列表，参阅 <a href="#">“Event (事件) 类型”</a> 。
Value (值)	指定事件的值。
Add (添加)	采用当前的 Time/Event/Value (时间 / 事件 / 值) 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 (时间 / 事件 / 值) 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。将所有添加、删除或更改恢复至原始状态。
Apply (应用)	关闭对话框。

图 17. Event (事件) 类型

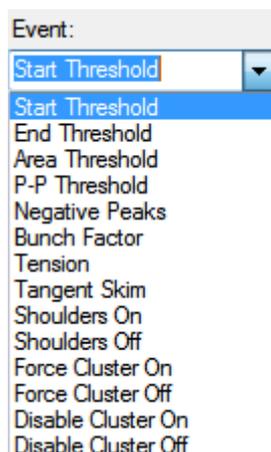


表 12. Event (事件) 类型描述 (第 1 页, 共 2 页)

事件类型	描述
Start Threshold (起始阈值)	指定峰起始处的阈值。Start Threshold (起始阈值) 与色谱图中的 RMS (均方根) 噪声直接相关。 范围: 0 至 999 999 999
End Threshold (结束阈值)	指定峰结束时的阈值。End Threshold (结束阈值) 与色谱图中的 RMS (均方根) 噪声直接相关。 范围: 0 至 999 999 999
Area Threshold (峰面积阈值)	控制峰面积截止值。系统不会检测峰面积小于面积阈值的任何峰。该控制参数的数据单位与峰面积相同。 范围: 0 至 999 999 999
P-P Threshold (峰对峰阈值)	在采用两个或多个邻近峰创建一个峰组之前, 峰对峰分离度阈值用于控制必须出现的峰重叠程度。峰组具有一个基线下降, 代替了峰谷到峰谷的基线。指定为峰高重叠百分比。 范围: 0.1 至 99.99
Negative Peaks (负峰)	允许检测负峰。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。该事件用于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, 则将峰归成多组。 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, 则基线更紧密接近色谱图的变化。基线接近张力高, 使基线在更长的时间间隔内接近程度更低。 范围: 0 至 999.99 分钟
Tangent Skim (切线撇去)	可以利用该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某个峰作为基准。应用程序会在基准峰的一侧 (或两侧) 检测切线撇去峰。切线撇去在峰组的末端自动重设。 范围: 0 至 1

表 12. Event (事件) 类型描述 (第 2 页, 共 2 页)

事件类型	描述
Shoulders On (肩峰打开)	允许检测肩峰 (那些由弯折而不是峰谷分离的峰), 为其衍生设置一个阈值。
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。

## 指定 Adducts (加合物)

加合离子从母离子形成，它包含母离子的所有组成原子和附加的原子或分子。加合离子通常在质谱仪离子源部位形成。加合物可以是正离子或负离子。

通过 Application - Adducts (应用程序 - 加合物) 视图，指定在方法开发中可用的加合物。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开 Adducts (加合物) 视图
- 若要添加加合物
- 若要移除加合物

### ❖ 若要打开 Adducts (加合物) 视图

在 Configuration (配置) 控制台的导航窗格上，点击 **Adducts (加合物)**。

Application - Adducts (应用程序 - 加合物) 视图打开，显示默认的正离子和负离子加合物。

Application - Adducts									
Positive Adducts  					Negative Adducts  				
	Name	Formula	Type	Neutral Mass		Name	Formula	Type	Neutral Mass
▶	Ammonium	M+NH <sub>4</sub>	Gain	18.03	▶	Hydrogen-Loss	M-H	Loss	-1.01
▶	Hydrogen	M+H	Gain	1.01	▶	Acetate	M+H <sub>3</sub> C <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	Gain	59.01
▶	Sodium	M+Na	Gain	22.99	▶	Formate	M+HCO <sub>2</sub>	Gain	45.00
▶	Potassium	M+K	Gain	38.96					

### ❖ 若要添加加合物

1. 在 Positive Adducts (正离子加合物) 或 Negative Adducts (负离子加合物) 窗格上，点击 **Add New Adduct (添加新加合物)** 图标，。

应用程序将在 Adducts (加合物) 列表的底部添加一个新的可编辑行。

Positive Adducts  				
	Name	Formula	Type	Neutral Mass
▶	Ammonium	M+NH <sub>4</sub>	Gain	18.03
▶	Hydrogen	M+H	Gain	1.01
▶	Sodium	M+Na	Gain	22.99
▶	Potassium	M+K	Gain	38.96
▶	New Adduct	M+H	Gain	1.01

2. 输入新加合离子的分子式。

分子式以字母顺序进行排列，区分大小写。分子式可以包含圆括号和方括号。

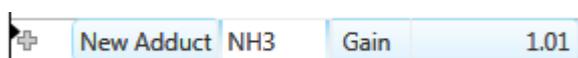
该分子式指定中性分子的区别和希望在结果中看到的带电离子。

例如，钠的一种预期带电离子是  $[M+Na]^+$  (其中 M 是中性分子)，分子式中应输入“Na”。一种水加合物的预期带电离子是  $[M+H+H_2O]^+$ ，分子式中应输入“H3O”。

**重要信息** 当创建一个加合物分子式时，用户既可以输入大写字母又可以输入小写字母；但是，TraceFinder 应用程序将所有大写字母识别为单字母元素，所有小写字母识别为双字母元素。

例如，它将字母串“inau”解析为 In Au，将“COSI”解析为 C O S I。

该应用程序显示用户输入的加合物分子式的类型和中性质量数。



3. 选中默认名称 (New Adduct [新加合物])，并输入加合物的名称。

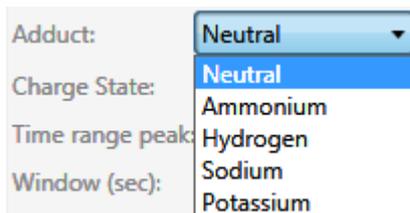
用户不能更改类型或中性质量数，但是应用程序随后将会正确计算这些值。

4. 按 Return (回车键)。

该应用程序将加合物添加至加合物列表中，并计算其正确的类型 (Gain [增加] 或 Loss [丢失]) 和中性质量数。

Positive Adducts				
	Name	Formula	Type	Neutral Mass
▶	Ammonium	M+NH4	Gain	18.03
▶	Hydrogen	M+H	Gain	1.01
▶	Sodium	M+Na	Gain	22.99
▶	Potassium	M+K	Gain	38.96
▶	Neutral	M+NH3	Gain	17.03

当用户指定目标峰的参数值时，这些加合物可用于用户在 Method Development (方法开发) 模式下的 Compound Database (化合物数据库) 视图进行选择。参阅第 260 页上的“编辑数据库中的化合物”。



❖ **若要移除加合物**

1. 在 Positive Adducts (正离子加合物) 或 Negative Adducts (负离子加合物) 窗格上, 选择想要移除的加合物。
2. 按 DELETE 并确认删除所选加合物。

用户只能删除自己添加至加合物列表中的加合物。不能删除 TraceFinder 安装时定义的默认加合物。

## 激活可选特性

采用 Application - Optional Features (应用程序 - 可选特性) 视图激活以下特性:

- ToxID
- Quick Acquisition (快速采集)
- Delay Calibration (延迟校正)
- 用户峰检测设置
- 自动进样器托盘配置
- Batch Wizard Style (批次向导类型)
- Multiplexing (多通道)
- Intelligent Sequencing (智能排序)
- 采集提交选项
- 筛选库

### ❖ 若要打开 Optional Features (可选特性) 页面

在 Configuration (配置) 控制台的导航窗格上, 点击 **Optional Features (可选特性)**。

Application - Optional Features (应用程序 - 可选特性) 页面打开。

Application - Optional Features

General Settings

- ToxID
- Quick acquisition (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms)
- Delay calibration
- User peak detection settings allowed
- Allow auto sampler to automatically determine tray configuration (disable for Waters Acquity)

Batch wizard style:

- Acquisition batch wizard (TraceFinder)
- Batch template wizard (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms)

Acquisition submission options:

- Full Sequence Submission (Not permitted with Intelligent Sequencing)
- Single Sample Submission

Screening Libraries:

Library Manager:

NIST Libraries:

Multiplexing

Available Channels :  Channel 1  Channel 2  Channel 3  Channel 4

Intelligent Sequencing

## ToxID

在生成 ToxID 报告之前，用户必须激活 ToxID 选项。

### ❖ 若要激活 ToxID

1. 选择 **ToxID** 复选框。
2. 若要保存修改，单击 **Apply（应用）**。  
应用程序立即应用这项更改的特性。

有关可用 ToxID 报告的列表，参阅第 39 页上的“[Reports（报告）](#)”。

## Quick Acquisition（快速采集）

快速采集选项激活了 Acquisition（采集）、Analysis（分析）或 Method Development（方法开发）模式下的 Quick Acquisition（快速采集）特性。

**注释** 当激活 Multiplexing（多通道）时，Quick Acquisition（快速采集）特性不可用。参阅第 65 页上的“[Multiplexing（多通道）](#)”。

### ❖ 若要激活快速采集

1. 选中 **Quick Acquisition (EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms)（快速采集，EnviroLab/ToxLab/QuanLab Forms）** 复选框。
2. 若要保存修改，单击 **Apply（应用）**。  
应用程序立即应用这项更改的特性。

有关 Quick Acquisition（快速采集）特性的描述，参阅第 79 页上的“[使用主方法](#)”。

## Delay Calibration（延迟校正）

用户可以决定该应用程序何时采用 Delay Calibration（延迟校正）选项计算校正曲线。延迟重新校正，直到当应用程序处理批次中的最后一个校正样品比在每个校正样品之后进行重新校正速度更快但响应更低时。

### ❖ 若要延迟计算校正曲线

1. 选中 **Delay Calibration（延迟校正）** 复选框。
2. 若要保存修改，单击 **Apply（应用）**。  
应用程序立即应用这项更改的特性。

## 用户峰检测设置

使用 User Peak Detection Settings Allowed (允许用户峰检测设置) 选项, 用于用户修改 Data Review (数据查看) 中指定化合物的方法积分设置。有关修改峰检测参数的说明, 参阅第 471 页上的“若要修改峰检测设置”。

### ❖ 若要允许用户修改峰检测设置

1. 选择 **User Peak Detection Settings Allowed (允许用户峰检测设置)** 复选框。
  2. 若要保存修改, 单击 **Apply (应用)**。
- 应用程序立即应用这项更改的特性。

## 自动进样器托盘配置

默认情况下, TraceFinder 应用程序使自动进样器自动进行托盘配置。当用户使用 Waters™ ACQUITY™ 系统时, 在创建批次时, 不得使用这项特性且必须明确指出生托盘配置。

### ❖ 若要不允许进行自动托盘配置

1. 选中 **Allow Auto Sampler to Automatically Determine Tray Configuration (允许自动进样器自动进行托盘配置)** 复选框。
  2. 若要保存修改, 单击 **Apply (应用)**。
- 应用程序立即应用这项更改的特性。

## Batch Wizard Style (批次向导类型)

利用 Batch Wizard Style (批次向导类型) 选项选择两种类型中的一种用于批次向导。

### ❖ 若要选择向导类型

1. 在 Batch Wizard Style (批次向导类型) 列表中, 选择一个向导类型:
  - **Acquisition Batch Wizard (采集批次向导)**: 将 Acquisition (采集) 模式添加至导航窗格。该模式与 TraceFinder 1.1 应用程序中的 Acquisition (采集) 模式类似。参阅第 5 章, “使用 Acquisition (采集) 模式”。

当激活多通路时, 应用程序自动激活该向导类型。

  - **Batch Template Wizard (批次模板向导)**: 默认向导类型与 EnviroLab Forms、ToxLab Forms 和 QuanLab Forms 应用程序中的采集向导类似。参阅第 402 页上的“利用 Batch Wizard (批次向导) 创建批次”。

**注释** 当激活 Multiplexing (多通道) 时, Batch Template Wizard (批次模板向导) 不可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。

2. 若要保存修改, 单击 **Apply (应用)**。
- 应用程序立即应用这项更改的特性。

## 采集提交选项

若要控制采集，用户可以激活任一提交选项：完整序列或单个样品。当在 Acquisition (采集) 模式下提交批次、在 Method Development (方法开发) 模式下提交开发批次，或者在任意模式下提交 Quick Acquisition (快速采集) 批次时，按最先提交的批次最后运行的顺序运行。最新提交的那个批次会首先运行，除非在 Acquisition (采集) 模式下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. 选择 **Full Sequence Submission (完整序列提交)** 或 **Single Sample Submission (单样品提交)** 选项：
  - Full Sequence Submission (完整序列提交)：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，指导自动进样器至下一个进样位置。

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。

**注释** 当激活 Intelligent Sequencing (智能排序) 时，Full Sequence Submission (完整序列提交) 特性不可用。

- Single Sample Submission (单样品提交)：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** 当激活 Multiplexing (多通道) 时，Single Sample Submission (单样品提交) 特性不可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。

2. 若要保存修改，单击 **Apply (应用)**。

应用程序立即应用这项更改的特性。

## 筛选库

定量方法和目标筛选方法在这里使用指定的筛选库。有关如何在定量方法中使用筛选库的更多信息，参阅[定量方法中的筛选库](#)。有关如何在目标筛选方法中使用筛选库的更多信息，参阅[目标筛选方法中的筛选库](#)。

当用户为筛选方法指定 General (常规) 页面上的 Library Search Type (库检索类型) 时，用户可以选择 Library Manager (库管理器) 检索类型也可以选择 NIST 检索类型。参阅[第 210 页](#)上的“[编辑 General \(常规\) 页面](#)”。

- 当为方法选择 Library Manager (库管理器) 作为 Library Search Type (库检索类型) 时，应用程序采用 Configuration (配置) 控制台中指定的 Library Manager (库管理器) 库文件 (.db) 格式。在处理样品时，用户仅能检索一个质谱图库。
- 当为方法选择 NIST 作为 Library Search Type (库检索类型) 时，应用程序采用 Configuration (配置) 控制台中指定的 NIST 库。在处理样品时，用户可以选择检索多个 NIST 库。

### ❖ 若要指定 Library Manager (库管理器) 筛选库

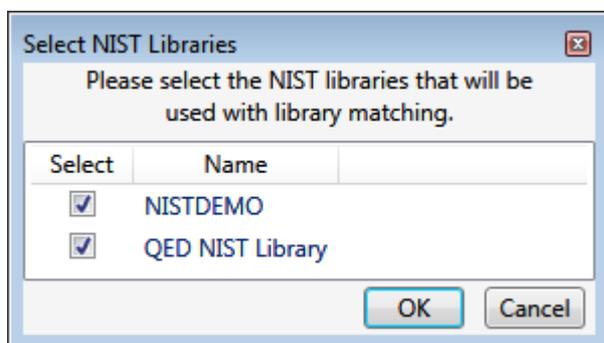
点击 **Browse (浏览)** 并找到用户想要用于筛选的库。

**注释** 在处理样品时，用户仅能使用一种检索类型。当选择 NIST 作为方法的 Library Search Type (库检索类型) 时，应用程序不使用用户在这里指定的筛选库。

### ❖ 若要指定 NIST 筛选库

1. 点击 **Select (选择)**。

Select NIST Libraries (选择 NIST 库) 对话框打开，列出为应用程序安装的库。



2. 选中希望用于筛选的每个 NIST 库的复选框，点击 **OK (确定)**。

**注释** 在处理样品时，用户仅能使用一种检索类型。当选择 Library Manager (库管理器) 作为方法的 Library Search Type (库检索类型) 时，应用程序不使用用户在这里指定的 NIST 库。

3. 若要保存修改，单击 **Apply (应用)**。

应用程序立即应用这项更改的特性。

该应用程序检索指定的筛选库以识别或确认一个样品化合物，将库中的碎片离子质谱图与化合物的离子质谱图进行匹配，返回最高分数（最佳匹配）。

应用程序执行正向库检索或逆向库检索。正向检索将未知化合物的质谱图与库条目中的质谱图进行对比，而逆检索将库条目与未知化合物质谱图进行对比。

## 定量方法中的筛选库

在定量主方法中，用户可以启用库匹配功能，并设置一个分数阈值以尽量减少最差匹配。参阅第 160 页上的“[Library \(库\)](#)”。若要匹配一个化合物，从库检索中得到的分数必须高于指定的阈值。

## 目标筛选方法中的筛选库

在目标筛选主方法中，用户可以指定库检索，以识别或确认库匹配，并设置一个分数阈值以尽量减少最差匹配。参阅第 219 页上的“[指定识别和确认设置](#)”。

- **Identify (识别) 或 Confirm (确认)**：应用程序通过检索指定的检索库，及返回库中碎片离子质谱图与化合物离子质谱图匹配的最高分数（以百分比值表示），来识别或确认化合物。
- **Score Threshold (分数阈值)**：若要识别或确认是否存在一个化合物，从库检索中得到的分数必须高于指定的阈值。

**重要信息** 若要采用库检索进行识别或确认，应用程序需要满足以下条件：

- 原始数据文件必须包含较高的碰撞诱导解离能量（HCD），离子源碰撞诱导解离（CID）或全离子裂解（AIF）离子质谱图。
- 在化合物洗脱时间范围内的某个时间点时必须存在质谱图。

## Multiplexing (多通道)

仅当安装 Multiplexing Power Module (多通道功能模块) 时, Multiplexing (多通道) 选项才可用。参阅第 12 页上的“安装 Power Modules (功能模块)”。

**注释** 当激活 Intelligent Sequencing (智能排序) 时, Multiplexing (多通道) 不可用。参阅 Intelligent Sequencing (智能排序)。

### ❖ 若要指定多通道特性

1. 选中 **Multiplexing (多通道)** 复选框。
2. 选中想要用于采集的每个通道的复选框。
3. 若要保存修改, 单击 **Apply (应用)**。

应用程序立即应用这项更改的特性。

当用户为批次中的每个样品指定通道 (参阅第 314 页上的“定义样品列表”) 或监测采集 (参阅第 342 页上的“Devices (设备) 页面”) 时, 应用程序在 Acquisition (采集) 模式下使用多通道特性。

**注释** 当激活多通道时, 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, 智能排序)

## Intelligent Sequencing (智能排序)

仅当安装 Intelligent Sequencing Power Module (智能排序功能模块) 时, Intelligent Sequencing (智能排序) 选项才可用。参阅第 12 页上的“安装 Power Modules (功能模块)”。

为单个样品提交采用 Intelligent Sequencing (智能排序)。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。

### ❖ 若要激活智能排序特性

1. 选中 **Intelligent Sequencing (智能排序)** 复选框。

**注释** 当激活 Multiplexing (多通道) 时, Intelligent Sequencing (智能排序) 不可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。

Acquisition Submission (采集提交) 选项默认为 Single Sample Submission (单样品提交)。当选中 Intelligent Sequencing (智能排序) 选项时, Full Sequence Submission (单样品提交) 选项不可用。

2. 若要保存修改, 单击 **Apply (应用)**。

应用程序立即应用这项更改的特性。

## 创建 Custom Columns (自定义列)

通过 Custom Columns (自定义列) 页面, 将另外六列添加至批次的样品列表中。当用户将数据导出至 Microsoft Excel™ 电子数据表或 CSV 文件中时, 该应用程序将这些自定义列与其他列同等对待。

用户可以使用 Modify Columns (修改列) 对话框来显示并更改样品列表中这些列的显示顺序 (参阅第 361 页上的“列显示”)。

用户可以使用 Field Chooser (字段选择器) 来显示并更改 Data Review Samples (数据查看样品) 窗格中这些列的显示顺序 (参阅第 417 页上的“Samples (样品) 窗格”)。

当用户使用配置 Phoenix 或 TLX 数据系统的 TurboFlow™ 方法时, 多通道或进样口及多列模块端口使用 Aria™ MX 时, 用户可以使用这些列 (例如) 的信息进行温度控制。

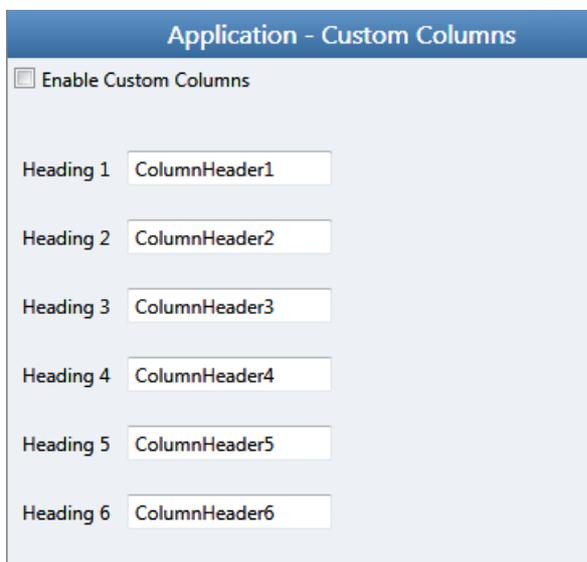
按照以下步骤进行操作:

- 若要打开 Custom Columns (自定义列) 页面
- 若要添加自定义列至新批次
- 若要创建无自定义列的新批次
- 若要控制自定义列的显示

### ❖ 若要打开 Custom Columns (自定义列) 页面

单击位于导航窗格的 Custom Columns (自定义列)。

Application – Custom Columns (应用程序 - 自定义列) 页面打开。



The screenshot shows a configuration window titled "Application - Custom Columns". At the top left, there is a checkbox labeled "Enable Custom Columns" which is checked. Below this, there are six rows, each representing a custom column. Each row consists of a label "Heading 1" through "Heading 6" followed by a text input field containing the text "ColumnHeader1" through "ColumnHeader6" respectively.

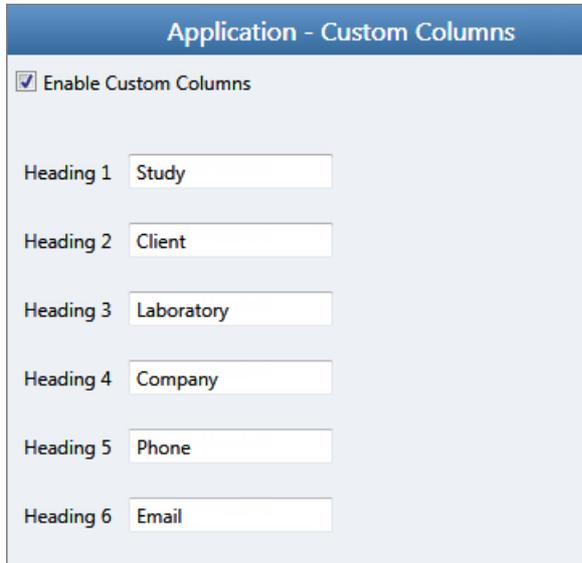
❖ 若要添加自定义列至新批次

1. 选中 **Enable Custom Columns (启用自定义列)** 复选框。

该应用程序将另外六列添加至用户创建的所有新批次的样品列表中。

2. 对于每个自定义列，选中默认的列名称并输入自定义名称。

例如：



The screenshot shows a window titled "Application - Custom Columns". At the top, there is a checked checkbox labeled "Enable Custom Columns". Below this, there are six rows, each with a label "Heading X" and an input field. The input fields contain the following text: "Study", "Client", "Laboratory", "Company", "Phone", and "Email".

3. 点击 **Apply (应用)**。

应用程序将六个自定义列添加至用户创建的所有新批次中。

**注释** 仅新批次包含这些自定义列。应用程序不将自定义列添加至以前创建的批次中。

**注释** 若返回至该页面，更改自定义列的名称，应用程序仅为以后的批次使用该新名称。

❖ 若要创建无自定义列的新批次

清除 **Enable Custom Columns (启用自定义列)** 复选框，并点击 **Apply (应用)**。

当用户创建新批次时，这些批次中不包含自定义列，该应用程序隐藏了用户所创建的以前批次中的自定义列。

❖ **若要控制自定义列的显示**

Enable Custom Columns (启用自定义列) 复选框用于控制在新批次中是否创建自定义列, 以及在 Batch View (批次视图) 的 Modify Columns (修改列) 对话框和 Data Review Samples (数据查看样品) 窗格的 Field Chooser (字段选择器) 上是否显示自定义列。

执行下列操作之一:

- 若要使自定义列在所有批次中可用, 选中 **Enable Custom Columns (启用自定义列)** 复选框并点击 **Apply (应用)**。
- 若要使自定义列在所有批次中均不可用, 清除 **Enable Custom Columns (启用自定义列)** 复选框并点击 **Apply (应用)**。

## 创建自定义标记

通过 Flag Customization (标记自定义) 视图, 自定义错误标记和条件, 以指示定量批次 Data Review (数据查看) 中出现的化合物错误。用户可以编辑指定错误条件 (标记规则) 的优先级, 也可以编辑用于指示错误的图标的形状和颜色。用户也可以删除一个错误条件或创建一个新条件。

### ❖ 若要打开 Flag Customization (标记自定义) 视图

点击位于导航窗格上的 **Flag Customization (标记自定义)**。

Application - Flag Customization (应用程序 - 标记自定义) 视图打开。

**Application - Flag Customization**

**Priority Groups**

Priority	Name	Shape	Color
1000	Green Flag	Flag	Green
10	Orange Flag	Flag	Orange
1	Red Flag	Flag	Red
100	Yellow Flag	Flag	Yellow

**Create New Priority Group**

Priority: 0, Name: [Red Box], Shape: Circle, Color: Black, Create

**Flag Rules**

Name	Description	Flags	PriorityGroup
Confirming Ion Coelution	Flag is shown when RT diffe	Confirming Ion Coelution	Red Flag
Ion Ratio Failure	Flag is shown when ion ratic	Ion Ratio Failure	Red Flag
QC Amount Out Of Range	Flag is shown when calculat	QC Amount out of range	Red Flag
QC RF Diff Out Of Range	Flag is shown when respons	QC RF Diff out of range	Red Flag
QC RF Out of Range	Flag is shown when respons	QC RF out of range	Red Flag
QC Out of Range	Flag is shown when respons	Out of range	Red Flag
Library Search	Flag is shown when library n	Library result not found	Red Flag
LOD	Flag is shown when calculat	Limit Of Detection	Orange Flag

**Create New Flag Rule**

Name: [Red Box], Description: [Red Box], Flags: [Dropdown], PriorityGroup: [Dropdown], Create

Reset to Factory Default

### 3 使用 Configuration (配置) 控制台 创建自定义标记

按照以下步骤进行操作：

- 若要编辑优先级组
- 若要创建新优先级组
- 若要编辑标记规则
- 若要创建新标记规则
- 若要移除所有自定义内容

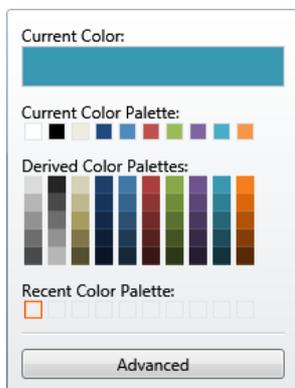
#### ❖ 若要编辑优先级组

Priority Groups				
Priority	Name	Shape	Color	
1000	Green Flag	Flag		
10	Orange Flag	Flag		
1	Red Flag	Flag		
100	Yellow Flag	Flag		

在 Priority Groups (优先级组) 区域，用户可以编辑标记的优先级、形状或颜色。用户也可以删除一个标记或创建一个新标记。不能修改标记的名称。

执行下列操作之一：

- 选中默认 Priority (优先级) 值，输入新值。
- 双击 Shape (形状) 值，从列表中选择一个新形状。
- 点击 Color (颜色) 箭头，并从调色板中选择一种新颜色。

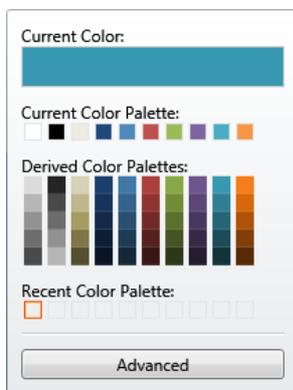


4. 完成所有更改后，点击 **Apply (应用)** 以保存修改。

❖ 若要创建新优先级组



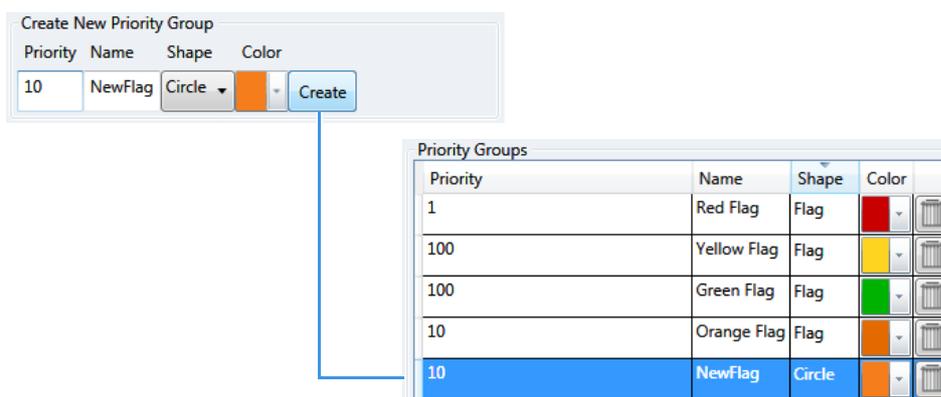
1. 在 Priority (优先级) 框中, 输入优先级值。  
用户可以输入正数或负数。数值越小, 优先级越高。
2. 在 Name (名称) 框中, 输入新优先级组的名称。
3. 从 Shape (形状) 列表中选择一种标记形状: **Circle (圆形)**、**Square (方形)** 或 **Flag (旗帜形)**。
4. 点击 Color (颜色) 列表, 并从调色板中选择一种颜色。



5. (可选) 点击 **Advanced (高级)** 并从 RGB、HSL 或 CMYK 调色板中选择一种颜色。参阅第 73 页上的“Advanced (高级) 对话框”。
6. 点击 **Create (创建)**。

应用程序将新标记添加到 Priority Groups (优先级组) 列表中。

例如:



### ❖ 若要编辑标记规则

**注释** 用户可以编辑对标记规则的描述和优先级组，也可以删除规则。用户不能编辑规则的名称或标记类型。

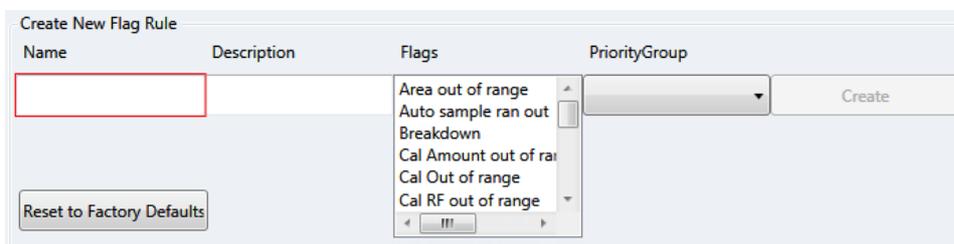
1. 执行下列操作之一：

- 在 Description (描述) 一列中，选中当前的文本并输入新的描述。
- 双击 PriorityGroup (优先级组) 值，从列表中选择一个新组。
- 点击 **Delete (删除)**。

应用程序立刻移除标记规则。若要恢复已删除的规则，点击 **Undo (撤销)**。

2. 完成所有更改后，点击 **Apply (应用)** 以保存修改。

### ❖ 若要创建新标记规则



1. 在 Name (名称) 框内，输入新规则的名称。

保证名称简洁直观。

2. 在 Description (描述) 框内，输入对新标记规则的描述。

该描述可以是任意内容，任意数量的字符。

3. 从 Flags (标记) 列表中，选择一种错误条件。

4. 从 PriorityGroup (优先级组) 列表中，选择一个优先级组。

该列表包含默认的优先级组 and 用户创建的所有优先级组。参阅第 71 页上的“若要创建新优先级组”。

5. 点击 **Create (创建)**。

应用程序将新标记规则添加至 Flag Rules (标记规则) 列表的末尾。

### ❖ 若要移除所有自定义内容

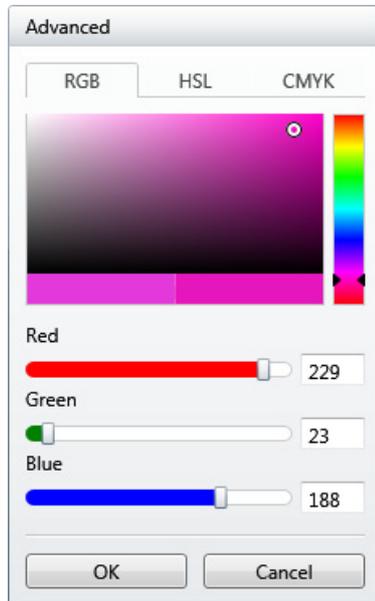
点击 **Reset to Factory Defaults (恢复出厂设置)**。

应用程序移除所有新的优先级组、新标记规则和对组或规则进行的所有编辑。

### Advanced（高级）对话框

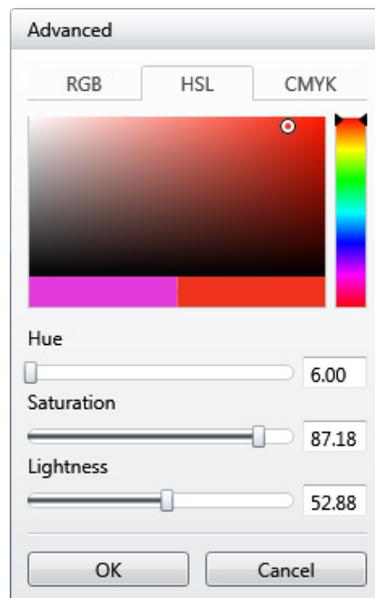
通过 Advanced（高级）对话框上的特性，采用 RGB、HSL 或 CMYK 颜色标准为标记选择自定义颜色。

图 18. 高级 RGB 颜色



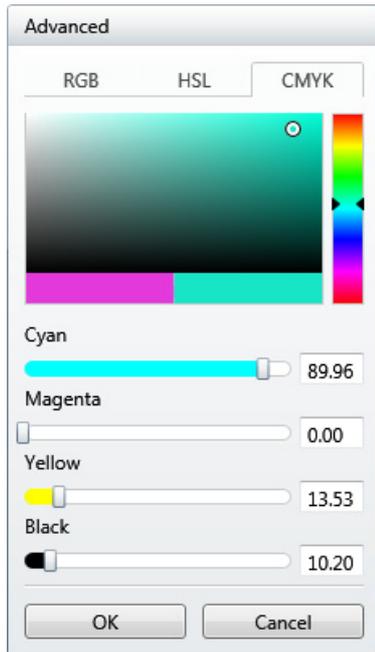
从红 / 绿 / 蓝（RGB）调色板中选择一种指定 RGB 值的颜色，如计算机显示器上所示。

图 19. 高级 HSL 颜色



从色相 / 饱和度 / 亮度（HSL）调色板中选择一种指定 HSL 值的颜色，常用于计算机图形。

图 20. 高级 CMYK 颜色



从青 / 品红 / 黄 / 黑 (CMYK) 调色板中选择一种指定 CMYK 值的颜色，如用户在彩色打印机中指定一样。打印机中使用的主要 (K) 颜色一直为黑色。

## 使用 Method Development（方法开发）模式

本章讨论了当激活用户安全时，分配给默认 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 Compound Database（化合物数据库）
- 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）模式可以创建定量或筛选主方法、仪器方法或一个简单的用于测试仪器方法的开发批次。

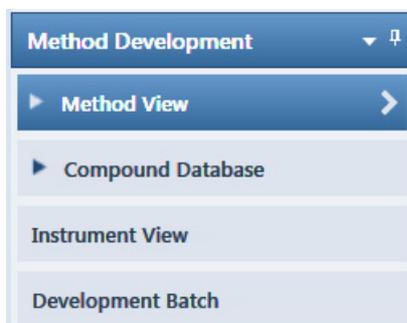
也可以使用 Quick Acquisition（快速采集）功能快速通过 Method Development（方法开发）模式下的任意视图提交单样品。

### ❖ 若要访问 Method Development（方法开发）模式

点击位于导航窗格上的 **Method Development（方法开发）**。

A blue rectangular button with the text "Method Development" in white.

Method Development（方法开发）导航窗格打开。



有关定量方法 Method Development（方法开发）导航窗格上所有功能的详细描述，参阅“[定量方法的 Method Development（方法开发）导航窗格](#)”。

有关筛选方法 Method Development（方法开发）导航窗格上所有功能的详细描述，参阅第 78 页上的“[筛选方法的 Method Development（方法开发）导航窗格](#)”。

图 21. 定量方法的 Method Development（方法开发）导航窗格



表 13. 定量方法的 Method Development（方法开发）导航窗格命令（第 1 页，共 2 页）

命令	描述
<b>Method View</b> (方法视图)	显示主方法的 Method View（方法视图）。参阅第 79 页上的“使用主方法”。
General（常规）	显示 Method View（方法视图）的 General（常规）页面。参阅第 105 页上的“编辑 General（常规）页面”。
Compounds (化合物)	显示 Method View（方法视图）的 Compounds（化合物）页面。参阅第 112 页上的“编辑 Compounds（化合物）页面”。
QAQC (质保质控)	显示 Method View（方法视图）的 QAQC（质保质控）页面。参阅第 178 页上的“编辑 QAQC（质保质控）页面”。
Groups（组）	显示 Method View（方法视图）的 Groups（组）页面。参阅第 188 页上的“编辑 Groups（组）页面”。
Intel Seq (智能排序)	显示 Method View（方法视图）的 Intelligent Sequencing（智能排序）页面。参阅第 190 页上的“编辑 Intelligent Sequencing（智能排序）页面”。
Reports（报告）	显示 Method View（方法视图）的 Reports（报告）页面。参阅第 194 页上的“编辑 Reports（报告）页面”。
<b>Compound Database</b> (化合物数据库)	参阅第 247 页上的“使用 Compound Database（化合物数据库）”。

表 13. 定量方法的 Method Development（方法开发）导航窗格命令（第 2 页，共 2 页）

命令	描述
<b>Instrument View</b> (仪器视图)	参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。
<b>Development Batch</b> (开发批次)	参阅第 291 页上的“使用开发批次”。

图 22. 筛选方法的 Method Development（方法开发）导航窗格



表 14. 筛选方法的 Method Development（方法开发）导航窗格命令

命令	描述
<b>Method View</b> (方法视图)	显示主方法的 Method View（方法视图）。参阅第 79 页上的“使用主方法”。
General（常规）	显示 Method View（方法视图）的 General（常规）页面。参阅第 210 页上的“编辑 General（常规）页面”。
Reports（报告）	显示 Method View（方法视图）的 Reports（报告）页面。参阅第 194 页上的“编辑 Reports（报告）页面”。
Screening（筛选）	显示 Method View（方法视图）的 Screening（筛选）页面。参阅第 217 页上的“编辑 Screening（筛选）页面”。
Peak Detection (峰检测)	显示 Method View（方法视图）的 Peak Detection（峰检测）页面。参阅第 231 页上的“编辑 Peak Detection（峰检测）页面”。
<b>Compound Database</b> (化合物数据库)	参阅第 247 页上的“使用 Compound Database（化合物数据库）”。
<b>Instrument View</b> (仪器视图)	参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。
<b>Development Batch</b> (开发批次)	参阅第 291 页上的“使用开发批次”。

## 使用主方法

TraceFinder 应用程序使用主方法指定样品批次采集、处理和报告的性质和类型。当检测实验中的化合物时，可以创建专为该应用类型设计的方法。

一个定量主方法包含一个化合物列表和用于检测、处理和报告这些化合物的设置。

一个目标筛选主方法包含化合物数据库、用于检测处理的识别和确认标准，以及用于报告化合物的设置。

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组，以提供有意义的结果。应用程序利用仪器方法来指定如何采集原始数据。主方法的剩余部分用来指定如何处理原始数据、如何使用标记信息来显示结果，以及如何使用报告功能来指定数据和结果的输出。

TraceFinder 应用程序将主方法应用至批次中，也就是要处理和报告的一个或多个样品列表中。同时，主方法和批次为样品批次的数据处理和信息报告提供了以工作流程为导向的方法。

若要快速创建主方法，用户可以创建一个方法模板。使用方法模板有助于更快地开发方法，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性扫描的使用）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](#)
- [编辑定量主方法](#)
- [编辑目标筛选主方法](#)
- [以新名称另存主方法](#)
- [创建方法模板](#)
- [导入已发布的主方法](#)
- [导出质量数数据](#)

## 创建新主方法

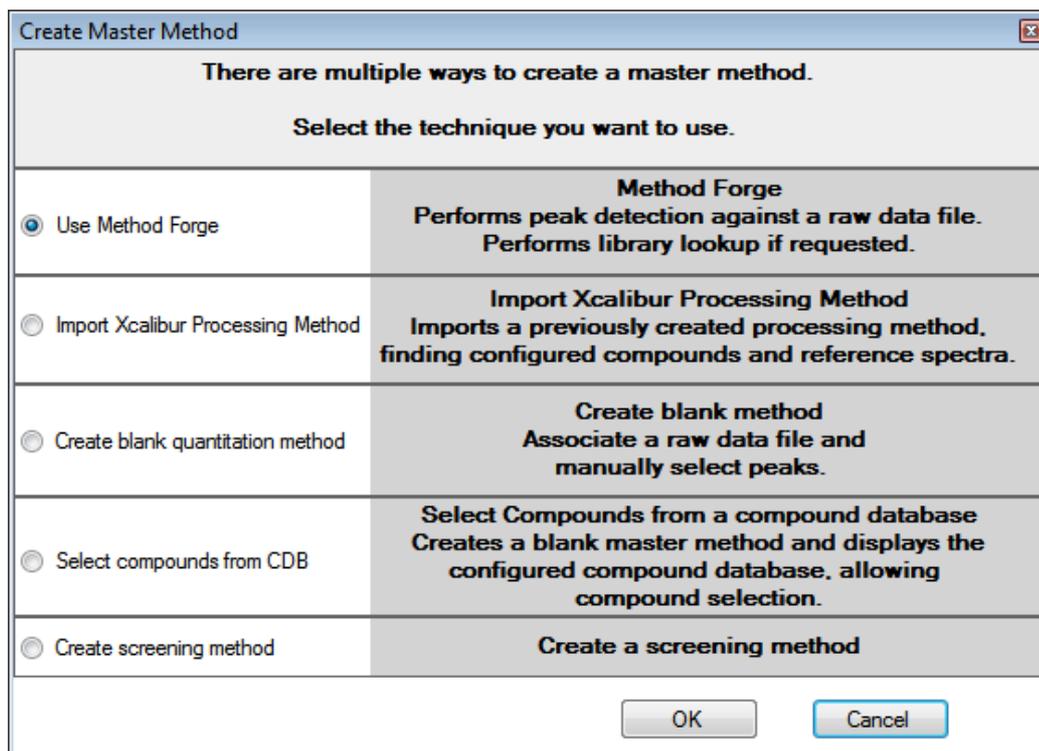
若要创建或启动一个特定方法，根据适用情况从 Create Master Method (创建主方法) 对话框中的五种不同程序 (或技术) 中进行选择：

- 使用 Method Forge (方法向导) 创建新方法
- 导入 Xcalibur 主方法
- 创建空白定量方法
- 从化合物数据库中选择化合物
- 创建筛选方法

然后，使用 Method View (方法视图) 上的通用功能完成创建，并将其另存为主方法。

若要打开 Create Master Method (创建主方法) 对话框，从主菜单上选择 **File (文件) > New (新建) > Master Method (主方法)**。

图 23. Create Master Method (创建主方法) 对话框



## 使用 Method Forge (方法向导) 创建新方法

利用 Method Forge (方法向导) 可以手动选择峰、选择多个化合物、对峰进行重命名, 或与库检索中的质谱图进行对比来创建一个新的主方法。也可以选择使用 TraceFinder 应用程序自动创建主方法。有关所有 Method Forge (方法向导) 参数的详细描述, 参阅第 89 页上的“Method Forge (方法向导) 对话框”。

当 TraceFinder 应用程序自动为用户创建主方法时, 其执行以下功能:

- 检查原始数据文件和识别存在于样品中的化合物。
- 使用参考质谱库指定化合物的名称和 CAS 号。
- 使用质谱信息选择可能存在的定量离子、确认离子以及化合物的参考质谱图。

**注释** 当识别峰来自模拟谱图时, 应用程序不会执行库检索, 也不会识别任何确认离子。

按照以下步骤进行操作:

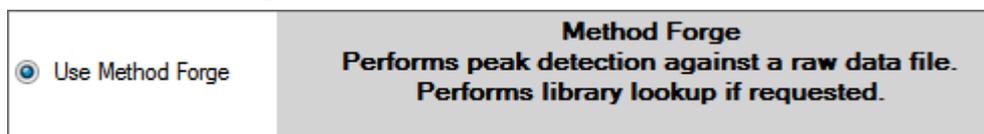
- 若要自动选择化合物创建新方法
- 若要手动选择化合物以创建新方法

### ❖ 若要自动选择化合物创建新方法

1. 从 File (文件) 菜单上选择 **New (新建) > Master Method (主方法)**。

Create Master Method (创建主方法) 对话框打开。若要查看所有创建主方法的方式, 参阅第 80 页上的“Create Master Method (创建主方法) 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 (方法向导) 对话框打开。有关 Method Forge (方法向导) 对话框中所有功能的详细描述, 参阅第 89 页上的“Method Forge (方法向导) 对话框”。

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

每种方法要求一个处理方法模板。应用程序在模板列表中显示所有已保存的方法模板。

Template	Libraries
Default Analog	1
Default	1

3. 若要选择一个处理方法模板, 执行以下其中一种操作:

- 点击 **Open Method Template Editor (打开方法模板编辑器)**, 创建并保存一个新的方法模板。

参阅第 235 页上的“创建方法模板”。

- 从模板列表选择一个方法模板, 点击 **Open Method Template Editor (打开方法模板编辑器)**, 编辑并保存该方法模板。

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式 使用主方法

- 从模板列表选择一个方法模板。

现在，用户每次打开 Method Forge (方法向导) 对话框时，默认选中该已选模板，直到用户重启 TraceFinder 应用程序。若要查看每个可用方法模板中的参数，将光标停留在模板名称上方。

图 24. 示例方法模板参数



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

用户在创建方法时，可以输入一个新的方法名称，或者输入一个已存在的方法名称覆盖原方法。若不选择该选项，则采用创建此方法时所用的原始数据文件的名称。

**重要信息** 当选中 Name the Master Method (命名主方法) 复选框时，用户必须输入一个方法名称。若让应用程序采用原始数据文件名来命名方法，则清除 Name the Master Method (命名主方法) 复选框。

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一个原始数据文件:
- 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)**。
  - 单击 Browse (浏览) 按钮并找到要用于该方法的原始数据文件。
  - 转至 [步骤 8](#)。
- 或 –
- 在 Raw File Selection (原始文件选择) 区域, 选择 **Acquire a New Raw Data File (采集新的原始数据文件)**。
  - 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。
  - 在 Raw Filename (原始文件名) 框中, 输入 TraceFinder 应用程序将在其中写入原始数据文件的文件名称。
  - 在 Path (路径) 框中输入路径, 或点击浏览按钮并找到应用程序将用于保存原始数据文件的文件夹。
  - (可选) 输入关于已采集样品或数据文件的注释。
7. 若要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:
- 选择 **Use Autosampler (采用自动进样器)**。
  - 在 Vial Position (样品瓶位置) 框中输入样品瓶的位置。
  - 在 Injection Volume (进样体积) 框中输入进样体积。  
范围: 0.1 到 2000  $\mu\text{L}$
8. 若要自动创建主方法, 点击 **OK (确定)** (或 **Overwrite [覆盖]**)。Method Forge (方法向导) 建立方法时, 会显示以下状态栏:

Alprazolam		RT (min)	Compound Name
<b>Total Progress</b>		3.15	EDIFENPHOS-CE5-R20-TL85-QED
<b>Detecting Peaks</b>		3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-
<b>Analyzing Spectrum</b>		4.70	Pyrazinamide
		<b>3.14</b>	<b>Propanenitrile</b>

- 对于模拟峰, Method Forge (方法向导) 将检测峰显示为 *Peak@(RT)Analog*。Method Forge (方法向导) 不会对模拟谱图中找到的峰执行库检索。
- 对于质谱峰, Method Forge (方法向导) 检索相关的库, 并显示识别的化合物名称而不是峰时间。

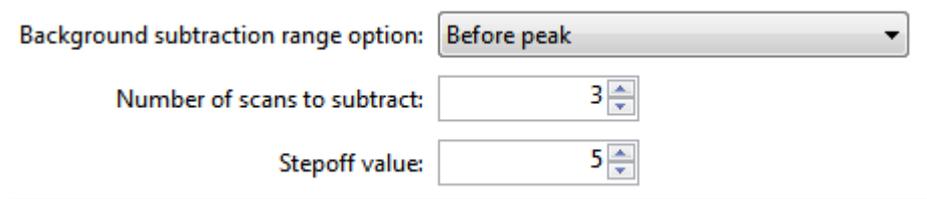
采集完成时, Method Forge (方法向导) 进行峰检测、库检索 (模拟峰除外)、特征离子和参考质谱图的识别。随后, Method Forge (方法向导) 将这一信息载入新的主方法中。如果选择以前已采集的原始数据文件, 则会立即出现这个流程。

9. 从 Instrument Method (仪器方法) 列表中选择一种仪器方法。
10. 从 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所用的方法模板。
11. (可选) 从 Background Subtraction Range Option (背景扣除范围选项) 列表中, 选择以下其中一个选项来确定如何决定背景扣除范围:
  - **Before Peak (峰前)**: 在峰尖之前平均和扣除指定数量的扫描。
  - **After Peak (峰后)**: 在峰尖之后扣除指定数量的扫描。
  - **Both Sides of Peak (峰两边)**: 在峰尖两边分别扣除指定数量的扫描。

当用户采用背景扣除创建参考质谱图时, 应用程序在定量处理过程中采用已选的方法执行峰质谱背景扣除, 并将该已扣除背景的参考质谱图 (在扫描标题上标记 BS) 报告为 Quantitation Report - 2 (定量报告 -2) 报告上每个化合物的最后扫描。定性处理时, 该应用程序不进行背景扣除。

12. 在 Steppoff Value (放弃值) 框内输入一个值。

TraceFinder 应用程序利用该补偿值平均和扣除那些与峰尖不相邻的扫描。例如:



Background subtraction range option: Before peak

Number of scans to subtract: 3

Steppoff value: 5

如果在 Number of Scans to Subtract (扣除的扫描数) 框中输入 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。

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

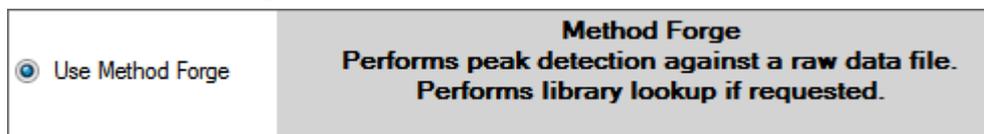
有关如何修改主方法中所有参数的详细说明, 参阅第 101 页上的“编辑定量主方法”。

## ❖ 若要手动选择化合物以创建新方法

1. 从 File (文件) 菜单上选择 **New (新建) > Master Method (主方法)**。

Create Master Method (创建主方法) 对话框打开。参阅第 80 页上的“[Create Master Method \(创建主方法\) 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 (方法向导) 对话框打开。有关 Method Forge (方法向导) 对话框中所有功能的详细描述，参阅第 91 页上的“[导入 Xcalibur 主方法](#)”。

每种方法要求一个定性峰处理模板。应用程序在模板列表中显示所有已保存的方法模板。

Template	Libraries
Default Analog	1
Default	1

3. 若要选择一个定性峰处理模板，执行以下其中一种操作：

- 点击 **Open Method Template Editor (打开方法模板编辑器)**，创建并保存一个新的方法模板。

参阅第 235 页上的“[创建方法模板](#)”。

- 从模板列表中选择一个方法模板，点击 **Open Method Template Editor (打开方法模板编辑器)**，编辑并保存该方法模板。应用程序将方法保存至以下文件夹中：

...\TraceFinderData\Templates\Methods\Forensic 文件夹

- 从模板列表中选择一个方法模板。

现在，用户每次打开 Method Forge (方法向导) 对话框时，默认选中该已选模板，直到用户重启 TraceFinder 应用程序。

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式 使用主方法

若要查看每个可用方法模板中的参数，将光标停留在模板名称上方。例如：



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

用户在创建方法时，可以输入一个新的方法名称，或者输入一个已存在的方法名称覆盖原方法。若不选择该选项，则采用创建此方法时所用的原始数据文件的名称。

**重要信息** 当选中 Name the Master Method (命名主方法) 复选框时，用户必须输入一个方法名称。若让应用程序采用原始数据文件名来命名方法，则清除 Name the Master Method (命名主方法) 复选框。

5. 确保已清除 **Automatically Create the Master Method (自动创建主方法)** 复选框。
6. 若要选择原始数据文件，浏览至文件所在位置。

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

方法向导结果视图打开，列出在原始数据文件中找到的所有峰。

对于 RT (保留时间) 列中列出的每个峰，该应用程序在 Libraries (库) 窗格上列出可能的匹配项。TraceFinder 应用程序选择最佳匹配项，在 Compound Name (化合物名称) 列表中显示名称，并在首个 Libraries (库) 窗格上显示该化合物的峰质谱图。

最佳匹配化合物质谱图

在原始数据文件中找到的峰      最佳匹配化合物名称      可能匹配项

The screenshot displays the 'Method View' window for 'Alprazolam'. It shows a table of peaks found in the original data file and a list of potential matches from the 'Libraries: NISTDEMO' database. The best match, 'Pyrazinamide', is selected, and its mass spectrum is shown. Below it, another potential match, 'Methanesulfonic acid, 1-methylethyl ester', is also shown with its mass spectrum.

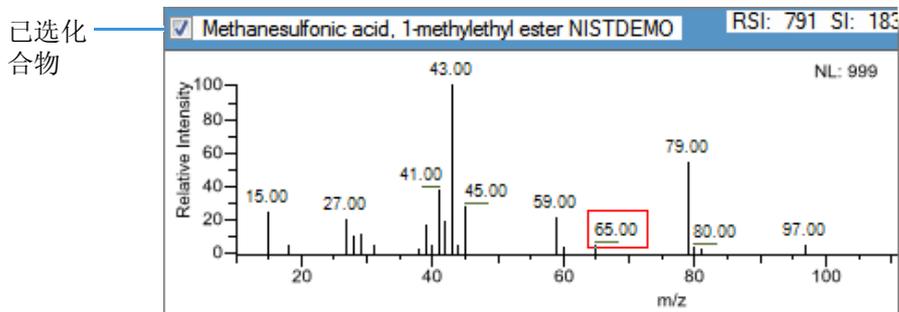
RT (min)	Compound Name
3.15	Pyrazinamide
3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-
4.70	Pyrazinamide *2*
3.14	Propanenitrile

**Pyrazinamide** (Best Match): NL: 66080372 BP: 309.09

**Pyrazinamide NISTDEMO** (Selected): RSI: 792 St: 102 MP: 0

**Methanesulfonic acid, 1-methylethyl ester NISTDEMO**: RSI: 791 St: 183 MP: 3

8. (可选) 若要使用库化合物, 而不使用由 TraceFinder 应用程序选择的化合物, 执行以下操作:
  - a. 在 RT (保留时间) 列选择一个峰。
  - b. 在 Libraries (库) 窗格上, 滚动至质谱图上用户想要使用的化合物。
  - c. 选中质谱图窗格标题上的复选框。



- d. 为要替换的每个峰重复这些步骤。
9. 在 Compound Name (化合物名称) 列表中, 使用 CTRL 或 SHIFT 键选择每个想要包含至方法化合物中的化合物。

**注释** 当用户选择多个化合物时, 方法向导结果视图不显示任何质谱图窗格。

10. (可选) 若要退出方法向导结果视图而不创建方法, 点击 **Cancel (取消)**。  
方法向导结果视图关闭, 应用程序返回至 Method View (方法视图), 而不创建方法。

**注释** 若要返回至方法向导结果视图, 采用同样的结果创建一个方法, 从主菜单上选择 **Method View (方法视图) > View Method Forge Results (查看方法向导结果)**。

11. 点击 **Create (创建)**。

TraceFinder 应用程序使用所有已选化合物创建方法, 并显示 Method View (方法视图) 上的 General (常规) 页面。有关 General (常规) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 109 页上的“[定量方法的 General \(常规\) 页面](#)”。

12. 从 Instrument Method (仪器方法) 列表中选择一种仪器方法。
13. 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 101 页上的“[编辑定量主方法](#)”。

## Method Forge (方法向导) 对话框

使用 Method Forge (方法向导) 对话框创建新主方法。

图 25. Method Forge (方法向导) 对话框

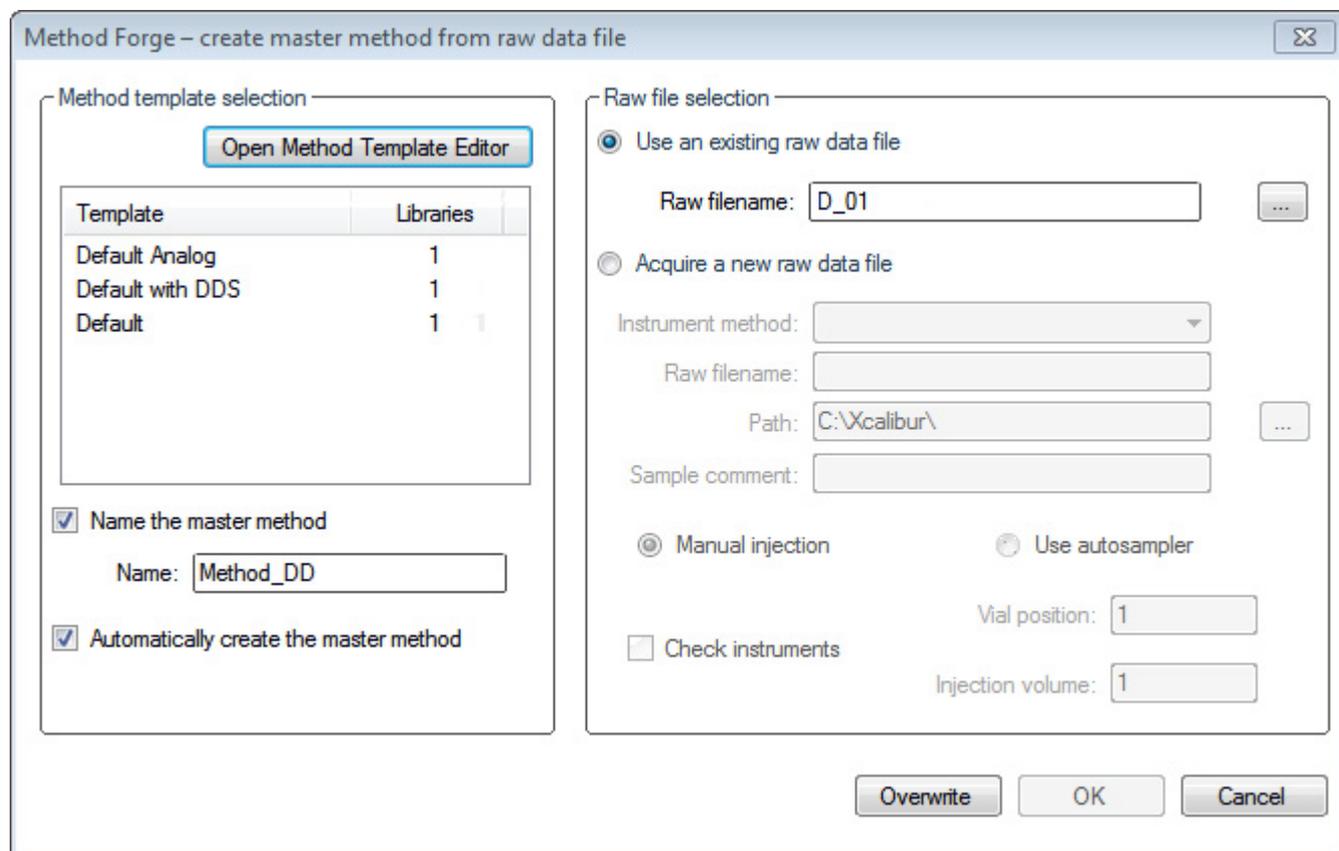


表 15. Method Forge (方法向导) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
<b>Method template selection (方法模板选择)</b>	
Open Method Template Editor (打开方法模板编辑器)	打开 Method Template Editor (方法模板编辑器), 在此可以编辑当前已选的方法模板。参阅第 235 页上的“创建方法模板”。
Template (模板)	用于创建主方法的方法模板。所有方法都要求一个方法模板。若要查看每个模板的参数, 将光标停留在方法名称上方。参阅第 81 页上的“若要自动选择化合物创建新方法”中的 Method Template Parameters (方法模板参数) 示例。
Name the Master Method (命名主方法)	新主方法的名称。若不指定方法名称, 则应用程序使用原始数据文件名称命名该方法。
Automatically Create the Master Method (自动创建主方法)	采集完成时, Method Forge (方法向导) 进行峰检测、库检索、特征离子和参考质谱图识别。该信息被加载至新主方法中。如果选择已经存在的原始数据文件, 则会立即出现这个流程。
<b>Raw file selection (原始文件选择)</b>	
Use an Existing Raw Data File (使用现有的原始数据文件)	激活 Raw Filename (原始文件名) 框, 可在其中选择用于创建主方法的原始数据文件。

## 4 使用 Method Development（方法开发）模式

### 使用主方法

表 15. Method Forge（方法向导）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）	激活该功能进行数据采集，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量（单位为毫升）。
Check Instruments（检测仪器）	打开 Submit to Acquisition（提交以采集）对话框，提示用户在采集样品以创建方法之前先准备仪器。仅当选择 Acquire a New Raw Data File（采集新的原始数据文件）选项时才可用。
<b>功能按钮</b>	
Overwrite（覆盖）	覆盖指定的主方法名称。仅当指定的主方法名称已经存在时，该功能才被激活。
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（方法向导）而不创建主方法。

## 导入 Xcalibur 主方法

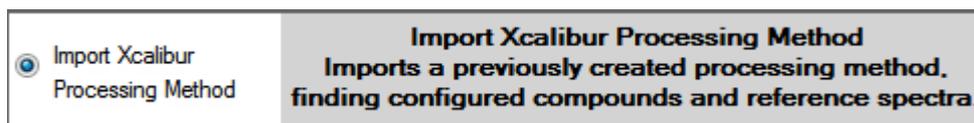
可以根据现有的 Xcalibur 处理方法创建新的主方法。

### ❖ 若要导入 Xcalibur 主方法

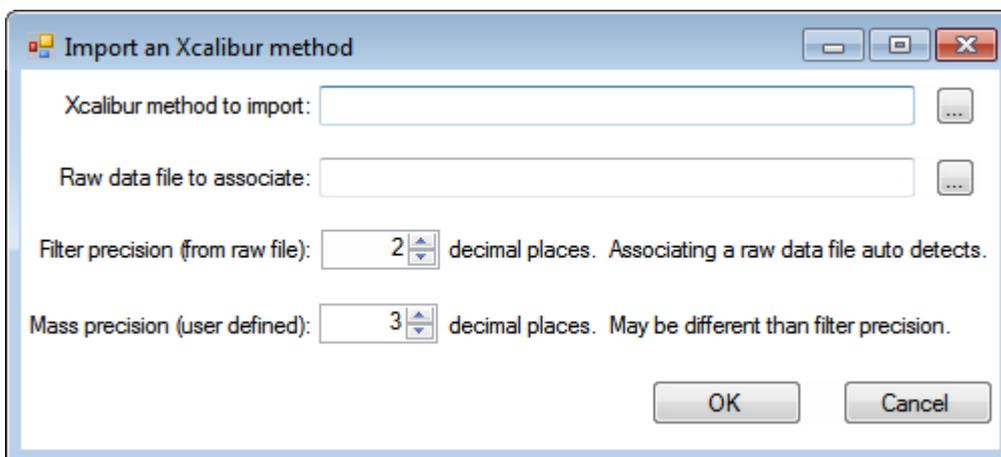
1. 从主菜单上选择 **File (文件) > New (新建) > Master Method (主方法)**。

Create Master Method (创建主方法) 对话框打开。若要查看所有创建主方法的方式, 参阅第 80 页上的“[Create Master Method \(创建主方法\) 对话框](#)”。

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



Import an Xcalibur Method (导入 Xcalibur 方法) 对话框打开。



3. 对于 Xcalibur Method to Import (导入的 Xcalibur 方法) 框, 浏览至 Xcalibur 处理方法文件的位置并打开该文件。

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

4. (可选) 对于 Raw Data File to Associate (相关的原始数据文件) 框, 浏览至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中选择) 的位置并打开该文件。

若要确保该原始数据文件对于该方法总是可用 (例如, 如果将方法移动到了其他系统上), 应用程序将原始数据文件保存在方法文件夹中:

...\\TraceFinderData\\Methods\\Methodname

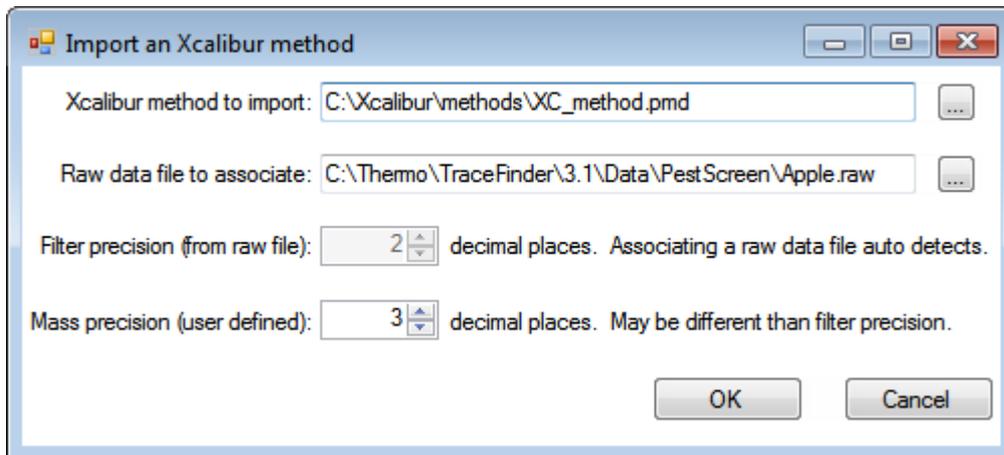
5. (可选) 在 Filter Precision (过滤器精度) 框中更改小数位数。

用户可以将过滤器精度的小数位数设置为 2 到 5 之间包括 2 和 5 的整数。

**注释** 当用户选择原始数据文件进行关联时, 应用程序从该文件中读取过滤器精度, 该参数设置功能不可用。

6. (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 之间包括 2 和 6 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中读取过滤器精度，因此用户无法更改 Filter Precision (过滤器精度) 值。

7. 点击 **OK (确定)**。

TraceFinder 应用程序将添加在已导入 Xcalibur 方法中找到的所有化合物，并在 Method View (方法视图) 中显示 General (常规) 页面。有关 General (常规) 页面上功能的详细说明，参阅第 109 页上的“[定量方法的 General \(常规\) 页面](#)”。

8. 从 Instrument Method (仪器方法) 列表中选择一种仪器方法。
9. 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 101 页上的“[编辑定量主方法](#)”。

## 创建空白定量方法

可以使用先前采集的原始数据文件中的化合物创建新的定量主方法。

### ❖ 若要创建空白定量方法

1. 从 File (文件) 菜单上选择 **New (新建) > Master Method (主方法)**。

Create Master Method (创建主方法) 对话框打开。若要查看所有创建主方法的方式, 参阅第 80 页上的“[Create Master Method \(创建主方法\) 对话框](#)”。

2. 选择 **Create Blank Quantitation Method (创建空白定量方法)** 选项并点击 **OK (确定)**。



新未命名方法的 Method View (方法视图) 打开。该方法没有相关数据。可以使用先前采集的原始数据文件中的化合物创建新的定量主方法。

3. 从 Method View (方法视图) 菜单上选择 **Associate a Raw Data File (关联原始数据文件)**。

Associate a Raw Data File (关联原始数据文件) 对话框打开。



4. 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中选择) 的位置并打开该文件。

若要确保该原始数据文件对于该方法总是可用 (例如, 如果将方法移动到了其他系统上), 应用程序将原始数据文件保存在方法文件夹中:

...\TraceFinderData\Methods\Methodname

5. 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中读取 Detector (检测器) 和 Trace (谱图) 选项。在 Detection (检测) 页面上, 只能使用原始数据文件中指定的检测器类型和谱图。对于可用 Detector (检测器) 和 Trace (谱图) 值的详细说明, 参阅第 133 页上的“Signal (信号)”。
- **Update Target Ion Ratio Values (更新目标离子比率值)**: 从关联的原始数据文件中读取离子比率值。
- **Update Scan Filters for All Peaks (更新所有峰的扫描过滤器)**: 根据关联的原始数据文件的扫描过滤器更新所有峰。
- **Automatically Set Reference Spectrum (自动设置参考质谱)**: 从关联的原始数据文件中读取参考质谱。

当用户也选择 Yes (是) 时, 应用程序采用 Background Subtraction (背景扣除) 功能, 在定量处理期间使用已扣除背景参考质谱图, 并将该已扣除背景参考质谱图 (在扫描标题上标记有 BS) 报告为 Quantitation Report - 2 (定量报告 -2) 报告上每个化合物的最后扫描。

**注释** 仅当用户在主方法的 General (常规) 页面上选择了一个背景扣除方法时, 背景扣除选项才可用。参阅第 105 页上的“编辑 General (常规) 页面”。

设置为 No (否) 的选项采用方法中的标准值。

6. 点击 **OK (确定)**。

TraceFinder 应用程序显示 Method View (方法视图) 的 General (常规) 页面。

7. 从列表选择一个定性峰处理模板。

应用程序使用模板中的库来识别方法中的化合物。若方法模板中没有选择任何库, 已找到峰将在 Compounds (化合物) 页面上被识别为 peak@RT。

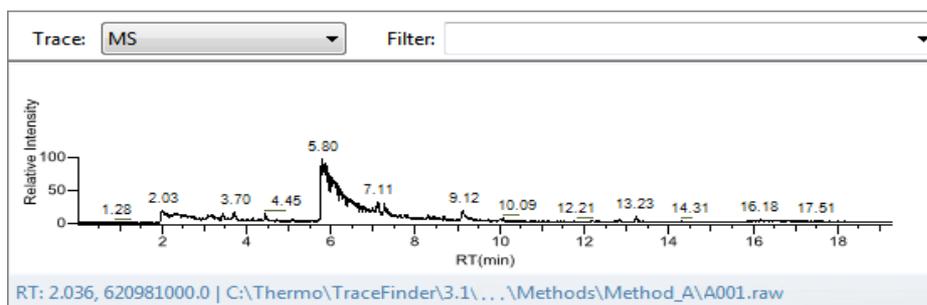
若要在定性峰处理模板中指定库, 打开 Method Template Editor (方法模板编辑器) 中的模板, 然后根据第 237 页上的“若要识别峰”中的说明进行。

8. 点击导航窗格上的 **Compounds (化合物)**。

该方法必须至少包括一个化合物。

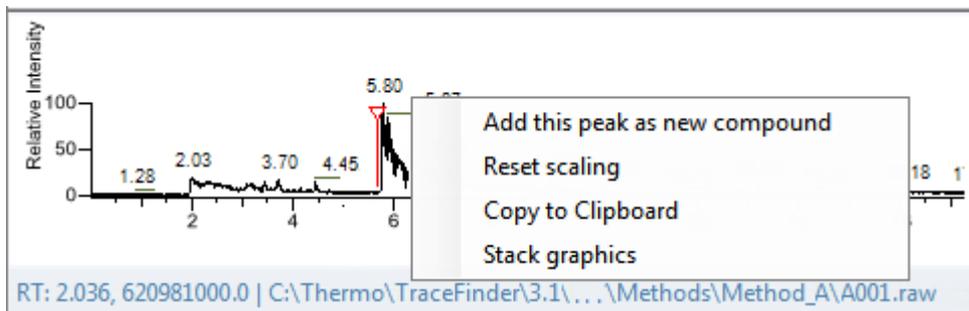
9. 点击 **Detection (检测)** 选项卡。

Detection (检测) 页面上显示一个空白的 Compound (化合物) 列表, 原始数据文件中显示化合物的色谱图数据。



10. 从 Filter (过滤器) 列表选择一个过滤器。

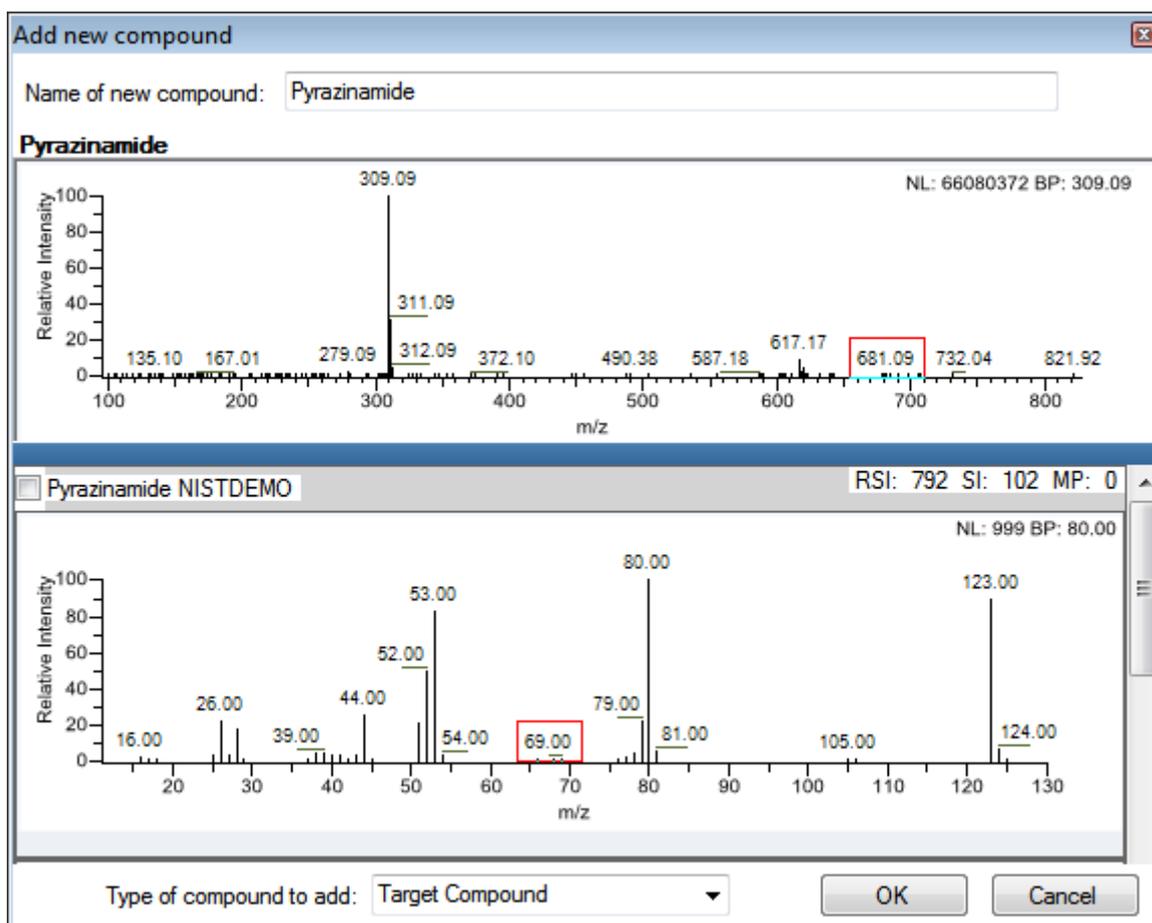
11. 从要添加至方法的化合物色谱图中选择峰。
12. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Peak as New Compound** (添加该峰作为新化合物)。



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，将强度第二和第三大的离子作为确认离子峰。

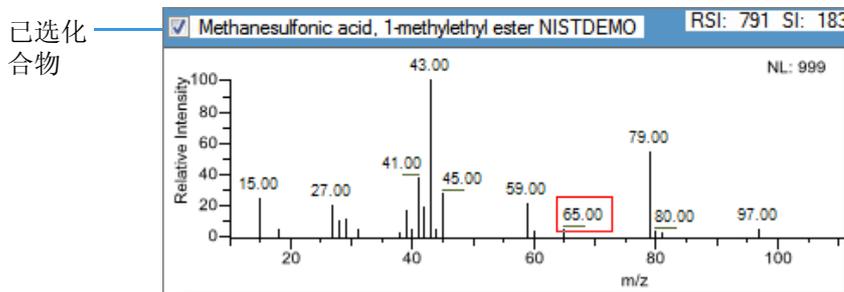
**注释** 当峰来自模拟谱图时，应用程序不会执行库检索，也不会识别任何确认离子。

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。



13. (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) 列表选择一个化合物类型。  
c. 点击 **OK (确定)**。

14. 为要添加到方法中的每个化合物重复这些步骤。

有关 Detection (检测) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 112 页上的“[编辑 Compounds \(化合物\) 页面](#)”。

15. 点击导航窗格上的 **General (常规)**。

方法的 General (常规) 页面打开。有关 General (常规) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 109 页上的“[定量方法的 General \(常规\) 页面](#)”。

16. 从 Instrument Method (仪器方法) 列表选择一个仪器方法。

17. 若要保存新方法, 从主菜单中选择 **File (文件) > Save (保存)** 并为该方法命名。

有关如何修改主方法中参数的详细说明, 参阅第 101 页上的“[编辑定量主方法](#)”。

## 从化合物数据库中选择化合物

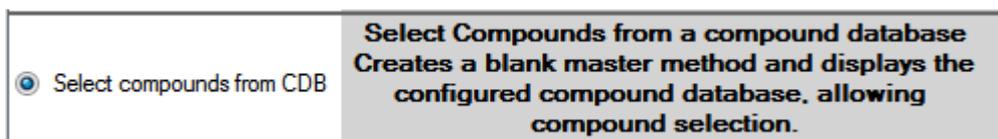
可以从化合物数据库中选择化合物以创建新的主方法。

### ❖ 若要从化合物数据库中选择化合物

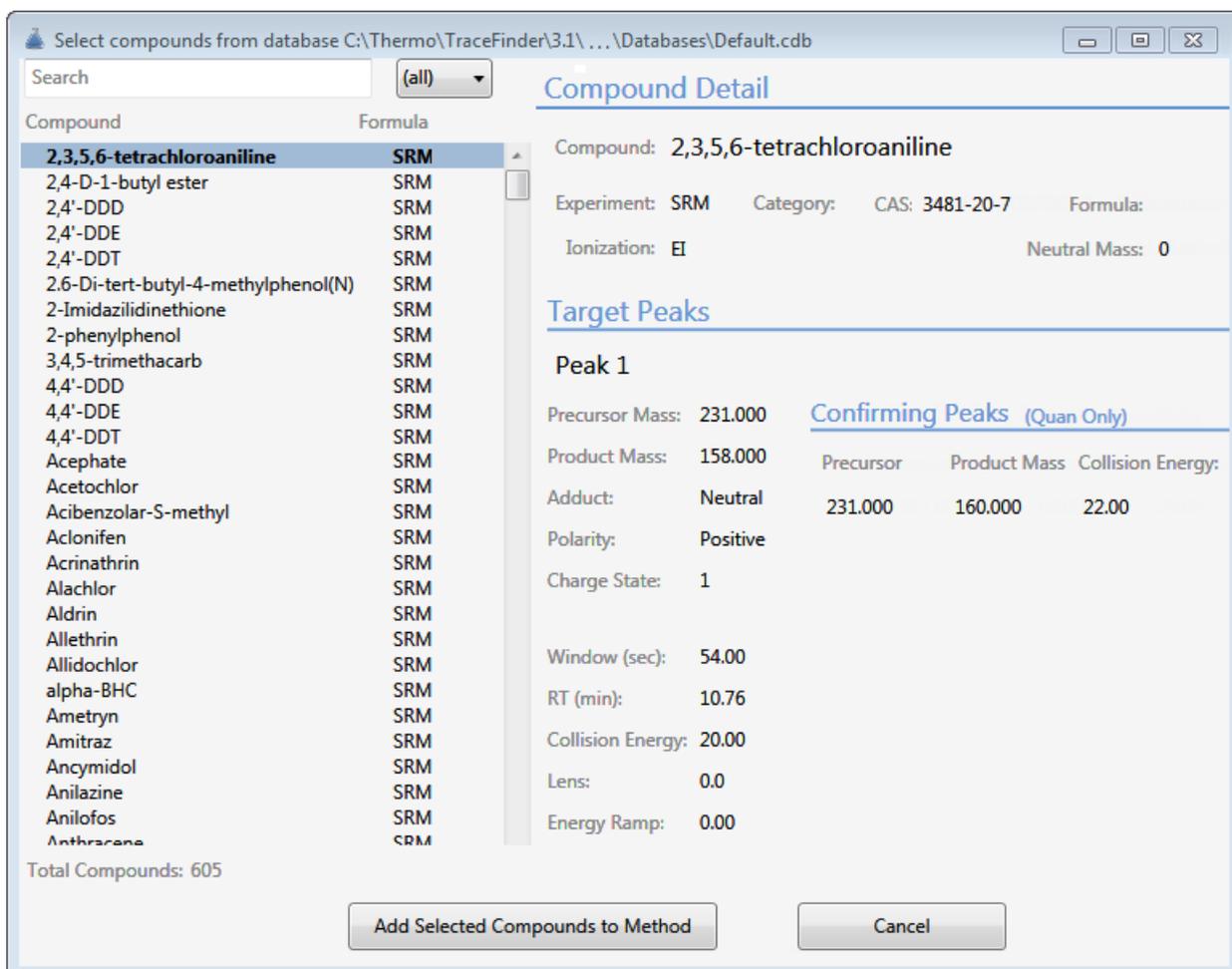
1. 从主菜单上选择 **File (文件) > New (新建) > Master Method (主方法)**。

Create Master Method (创建主方法) 对话框打开。若要查看所有创建主方法的方式，参阅第 80 页上的“[Create Master Method \(创建主方法\) 对话框](#)”。

2. 选择 **Select Compounds from CDB (从化合物数据库选择化合物)** 选项并单击 **OK (确定)**。



Select Compounds from Database (从数据库中选择化合物) 对话框打开，列出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个化合物的复选框。

4. 若要选择数据库中的所有化合物，选中列表顶部的 **Compound（化合物）** 复选框。
5. 点击 **Apply（应用）**。

TraceFinder 应用程序将选中的化合物添加到方法。

6. 点击导航窗格上的 **General（常规）**。

方法的 **General（常规）** 页面打开。有关 **General（常规）** 页面上所有功能的详细说明，参阅第 109 页上的“[定量方法的 General（常规）页面](#)”。

7. 从 Instrument Method（仪器方法）列表中选择 一个仪器方法。
8. 若要保存新方法，从主菜单中选择 **File（文件） > Save（保存）** 并为该方法命名。

有关如何修改主方法的详细说明，参阅第 101 页上的“[编辑定量主方法](#)”。

## 创建筛选方法

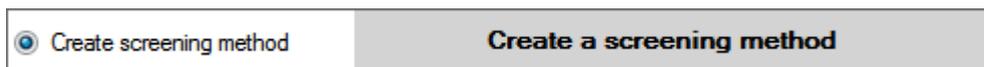
用户可以创建一个专门用于目标筛选的新主方法。

### ❖ 若要创建目标筛选方法

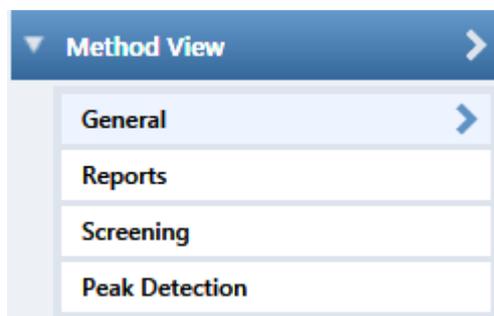
1. 从主菜单上选择 **File (文件) > New (新建) > Master Method (主方法)**。

Create Master Method (创建主方法) 对话框打开。若要查看所有创建主方法的方式, 参阅第 80 页上的“[Create Master Method \(创建主方法\) 对话框](#)”。

2. 选择 **Create Screening Method (创建筛选方法)** 选项并点击 **OK (确定)**。

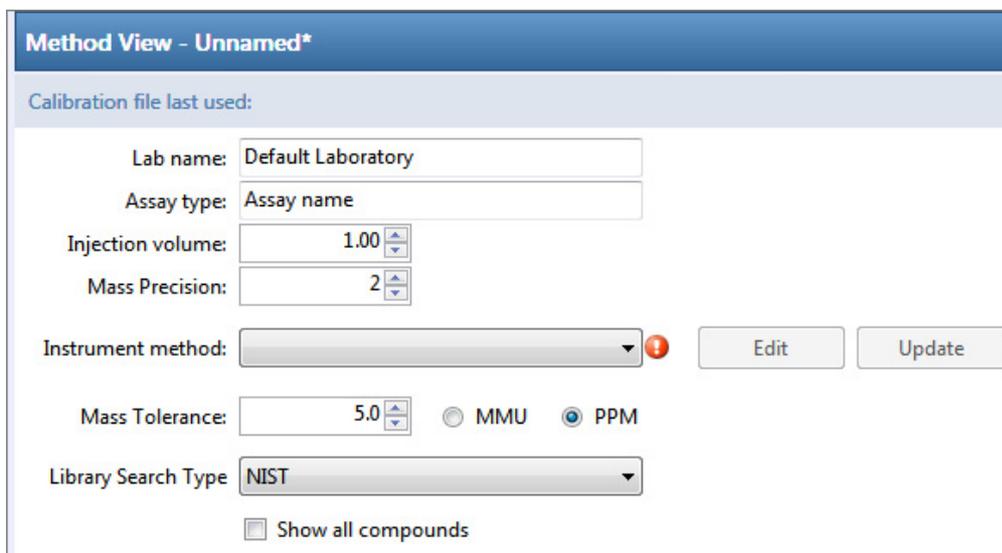


目标筛选方法的 Method View (方法视图) 包括 General (常规)、Reports (报告)、Screening (筛选) 和 Peak Detection (峰检测) 页面。



这些说明指出了用户必须为创建和保存一个筛选主方法所指定的最小参数。有关如何修改筛选主方法中所有参数的详细说明, 参阅第 207 页上的“[编辑目标筛选主方法](#)”。

筛选方法的 General (常规) 页面打开。



3. 从 Instrument Method (仪器方法) 列表选择一个仪器方法。
4. 点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Screening (筛选)**。

筛选方法的 Screening (筛选) 页面打开。

Target Screening Settings (目标筛选设置) 窗格显示了存储在以下文件夹中的化合物数据库:

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Databases

Compound Databases			
	Enabled	Database Name	
▶	<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines Example Database	<a href="#">open</a>
▶	<input type="checkbox"/>	Default	<a href="#">open</a>
▶	<input type="checkbox"/>	Converted_Database	<a href="#">open</a>

5. 至少选择一个化合物数据库的 **Enabled (启用)** 复选框。  
用户在保存方法之前, 必须至少选择一个化合物数据库。
6. 若要保存新方法, 从主菜单中选择 **File (文件) > Save (保存)**。
7. 在 Save Master Method (保存主方法) 对话框中, 输入方法的名称并点击 **OK (确定)**。

有关如何修改主方法的详细说明, 参阅第 207 页上的“编辑目标筛选主方法”。

## 编辑定量主方法

用户可以打开一个主方法以查看或编辑方法中的化合物、方法说明和报告选项。

本部分包括对下列任务的说明：

- [打开定量主方法](#)
- [编辑 General \(常规\) 页面](#)
- [编辑 Compounds \(化合物\) 页面](#)
- [编辑 QAQC \(质保质控\) 页面](#)
- [编辑 Groups \(组\) 页面](#)
- [编辑 Intelligent Sequencing \(智能排序\) 页面](#)
- [编辑 Reports \(报告\) 页面](#)

## 打开定量主方法

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，或从以前版本的 TraceFinder、EnviroLab Forms、QuanLab Forms 或 ToxLab Forms 遗留下来的应用程序中转换过来的主方法。若要转换遗留方法，参阅第 18 页上的“转换遗留数据”。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开已保存的主方法
- 若要修改方法中的保留时间

### ❖ 若要打开已保存的主方法

1. 点击位于导航窗格上的 **Method Development (方法开发)**。

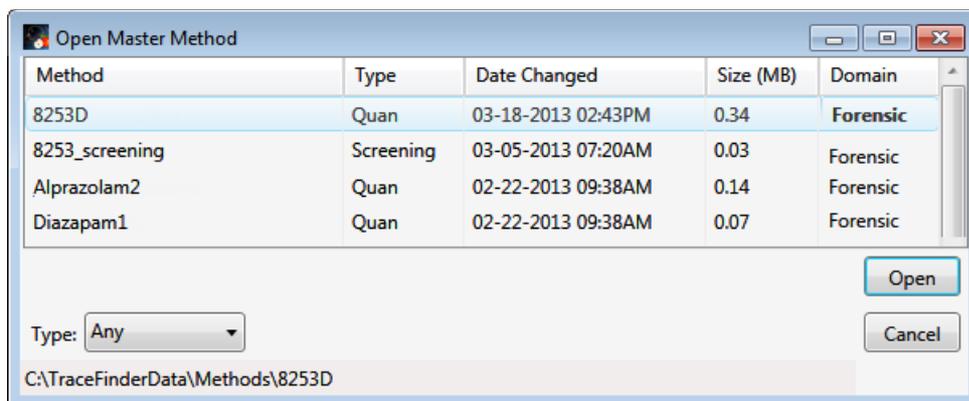
**Method Development**

2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Open (打开) > Master Method (主方法)**

**提示** 用户也可以打开其中一个用户最近使用的主方法文件。选择 **Files (文件) > Recent Files (最近使用的文件) > Method (方法)**。

Open Master Method (打开主方法) 对话框打开，显示所有可用的方法。

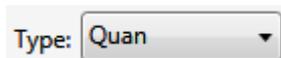
**图 26.** Open Master Method (打开主方法) 对话框



**表 16.** Open Master Method (打开主方法) 对话框参数

参数	描述
Method (方法)	已选类型的方法名称。
Type (类型)	方法的类型: Quan (定量) 或 Screening (筛选)。
Date Changed (更改日期)	方法的最后更新日期。
Size (大小)	单位为兆字节。
Domain (领域)	TraceFinder 中创建方法的应用领域: General (常规)、EFS (环境和食品安全)、Clinical (临床) 或 Forensic (法医学)。
Type (类型)	要显示的方法类型: Quan (定量)、Screening (筛选) 或 Any (任意)。
Path (路径)	TraceFinderData\Methods 文件夹中已选方法的路径。

- 在 Type (类型) 列表中选择 **Quan (定量)**。



方法列表显示了所有定量方法。

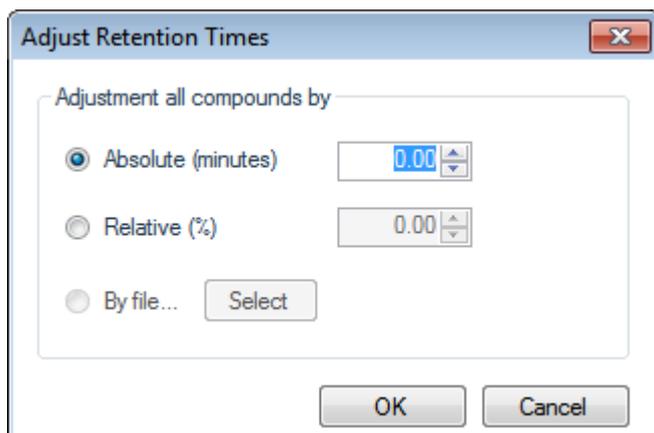
- 选择一个定量主方法并点击 **Open (打开)**。

已选方法的 General (常规) 页面打开。有关 General (常规) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 109 页上的“定量方法的 General (常规) 页面”。

#### ❖ 若要修改方法中的保留时间

- 从 Method View (方法视图) 或 Local Method (本地方法) 视图的任意页面上执行以下其中一种操作:
  - 从 Method Development (方法开发) 模式 Method View (方法视图) 的主菜单上选择 **Method View (方法视图) > Adjust Retention Times (调整保留时间)**。
  - 从 Analysis (分析) 模式 Local Method (本地方法) 视图的主菜单上选择 **Local Method (本地方法) > Adjust Retention Times (调整保留时间)**。

Adjust Retention Times (调整保留时间) 对话框打开。



- 执行下列操作之一:

- 选择 **Absolute (绝对)** 选项。
- 指定一个正值或负值以增加或减少预期保留时间。  
有效值: -100.00 至 100.00
- 点击 **OK (确定)**。

应用程序通过指定的分钟数增加或减少方法中所有化合物的预期保留时间。

– 或 –

- 选择 **Relative (相对)** 选项。
- 指定一个正值或负值以增加或减少预期保留时间。  
有效值: -100.00 至 100.00
- 点击 **OK (确定)**。

应用程序通过指定的百分比增加或减少方法中所有化合物的预期保留时间。

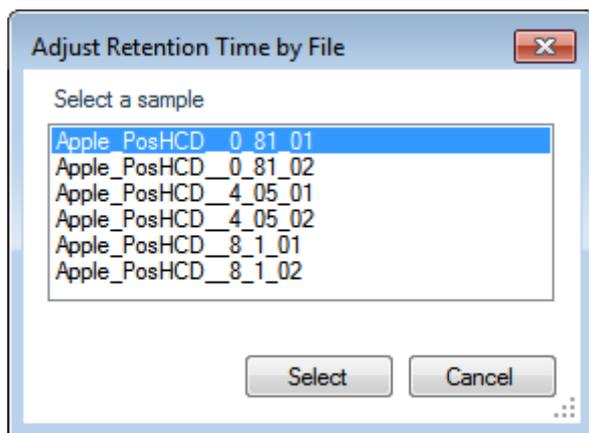
– 或 –

- a. 选择 **By File (通过文件)** 选项。

**注释** 该选项仅在用户处理批次中的样品后，在 Local Method (本地方法) 视图上可用。

- b. 点击 **Select (选择)**。

Adjust Retention Time by File (通过文件调整保留时间) 对话框打开，显示出所有已处理的样品。



- c. 选择想要在方法中使用其保留时间的样品。
- d. 点击 **Select (选择)**。
- e. 点击 **OK (确定)**。

对于已选、已处理样品中的每个已检测到的峰，应用程序覆盖方法中匹配化合物的保留时间。若方法中包含已选样品中未检测到的化合物，这些化合物的保留时间不受影响。

## 编辑 General (常规) 页面

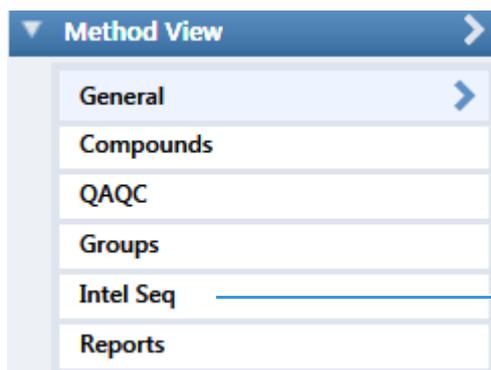
General (常规) 页面上指定了有关主方法的基本信息。有关所有功能的详细说明, 参阅第 109 页上的“定量方法的 General (常规) 页面”。

按照以下步骤进行操作:

- 若要打开 General (常规) 页面
- 若要指定主方法的常规信息
- 若要编辑仪器方法
- 若要选择定性峰处理模板
- 若要设置自动背景扣除选项
- 若要指定质量数容许偏差
- 若要包含数据依赖过滤器
- 若要输入方法的注释

### ❖ 若要打开 General (常规) 页面

点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **General (常规)**。



仅当用户激活 Configuration (配置) 控制台上的 Intelligent Sequencing (智能排序) 时才可用。

### ❖ 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 (进样体积) 框中, 选择进样时所用的进样体积 (在 0.1 和 2000  $\mu\text{L}$  之间)。  
使用向上 / 向下箭头以 1  $\mu\text{L}$  的增量 / 减量改变体积, 或使用键盘输入非整数的进样体积。

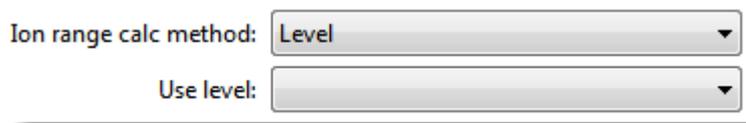
**重要信息** TraceFinder 应用程序使用主方法中的进样体积, 而不是仪器方法中的进样体积。

4. 在 Mass Precision (质量数精度) 框中, 选择一个精度值 (在 2 和 6 之间, 包括 2 和 6) 作为在报告、峰和质谱图显示中使用的小数点位数。

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式 使用主方法

5. 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, 在此可以选择一个校正水平。若要在 Compounds (化合物) 页面上指定可用的校正水平, 参阅第 112 页上的“编辑 Compounds (化合物) 页面”。



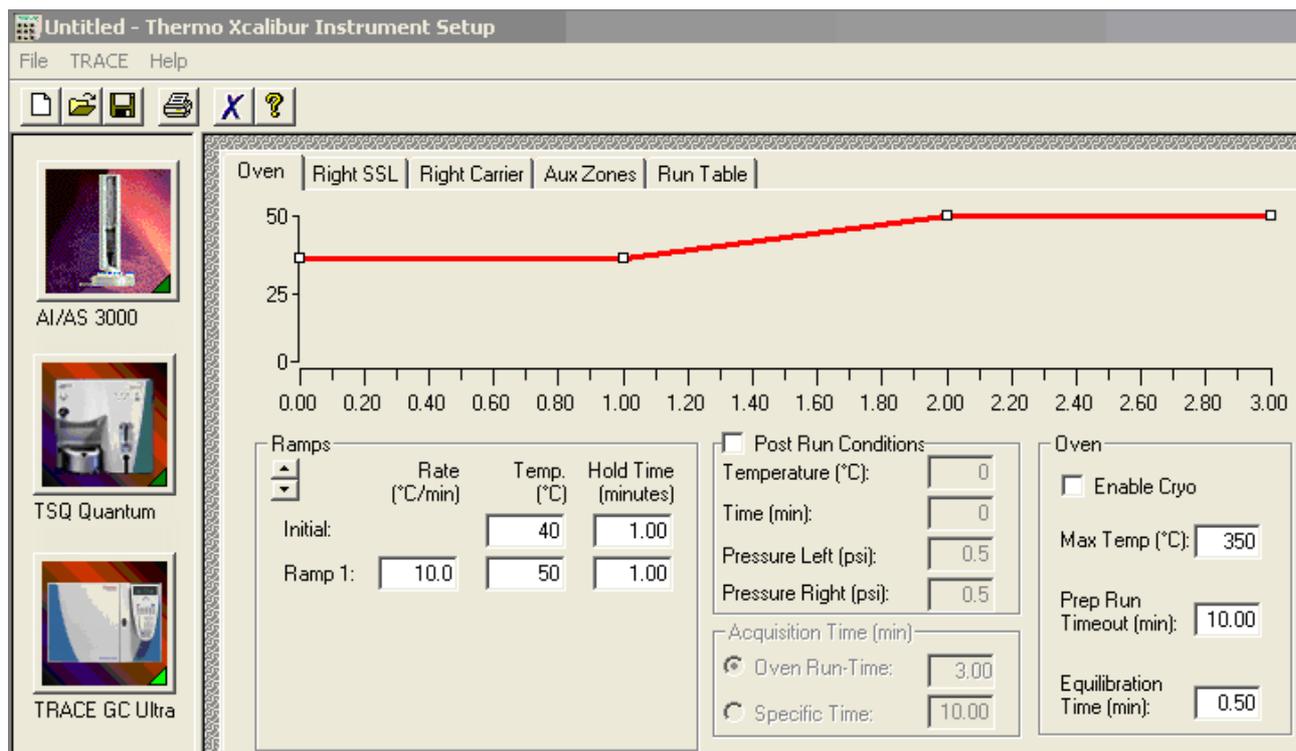
### ❖ 若要编辑仪器方法

1. 从 General (常规) 页面的 Instrument Method (仪器方法) 列表中选择一种仪器方法。



2. 若要编辑已选仪器方法, 点击 **Edit (编辑)**。

Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 对话框打开。仪器设置示例中显示了多个已配置的仪器。

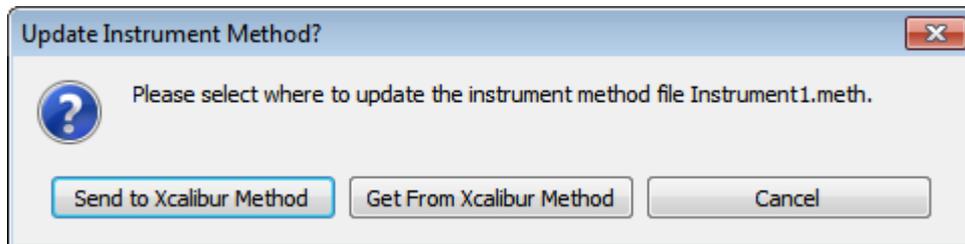


3. 为仪器编辑仪器页面上的值。
4. 在 Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 对话框的主菜单中, 选择 **File (文件) > Save (保存)**, 然后选择 **File (文件) > Exit (退出)**。

TraceFinder 应用程序返回至 General (常规) 页面。参阅第 109 页上的“定量方法的 General (常规) 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. 选择以下其中一个选项：

- **Send to Xcalibur Method (发送至 Xcalibur 方法)**：采用当前仪器方法覆盖 C:\Xcalibur\methods 文件夹中的仪器方法。
- **Get From Xcalibur Method (从 Xcalibur 方法获得)**：采用 C:\Xcalibur\methods 文件夹中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动。

#### ❖ 若要选择定性峰处理模板

在 Qualitative Peak Processing Template (定性峰处理模板) 列表中，选择一个在化合物分析完成以后，对定量样品进行峰检测时所要使用的模板。

应用程序在以下文件夹中列出了所有方法模板 (.pmtx 文件)：

...\TraceFinderData\Templates\Methods\Forensic 文件夹

#### ❖ 若要设置自动背景扣除选项

1. 从 Background Subtraction Range Option (背景扣除范围选项) 列表中。选择以下其中一个选项来确定背景扣除范围：

- **Before Peak (峰前)**：在峰尖之前平均和扣除指定数量的扫描。
- **After Peak (峰后)**：在峰顶之后扣除指定数量的扫描。
- **Both Sides of Peak (峰两边)**：在峰尖两边扣除指定数量的扫描。

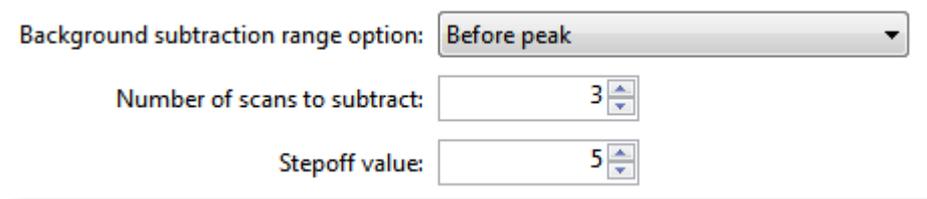
当用户采用背景扣除创建参考质谱图时，应用程序在定量处理过程中采用已选的方法执行质谱峰背景扣除，并将该已扣除背景的参考质谱图（在扫描标题上标记 BS）报告为 Quantitation Report - 2 (定量报告 -2) 报告上每个化合物的最后扫描。定性处理时，该应用程序不进行背景扣除。

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。如果选择了 Both Sides of Peak (峰两边) 选项，则应用程序从峰的**每一边**扣除该数量的扫描。

3. 在 Steppoff Value (放弃值) 框内输入一个值。

TraceFinder 应用程序利用该补偿值平均和扣除那些与峰尖不相邻的扫描。例如:



Background subtraction range option: Before peak

Number of scans to subtract: 3

Steppoff value: 5

Before Peak (峰前) 示例:

当 Number of Scans To Subtract (扣除的扫描数) 值为 3, Steppoff Value (放弃值) 为 5 时, 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。

After Peak (峰后) 示例:

当 Number of Scans To Subtract (扣除的扫描数) 值为 3, Steppoff Value (放弃值) 为 5 时, 则 TraceFinder 应用程序忽略峰右侧的前 5 次扫描, 而对峰右侧的第 6、7 和 8 次扫描执行平均和背景扣除。

Both Sides of Peak (峰两边) 示例:

当 Number of Scans To Subtract (扣除的扫描数) 值为 3, Steppoff Value (放弃值) 为 5 时, 则 TraceFinder 应用程序忽略峰左右两侧的前 5 次扫描, 而对峰左右两侧的第 6、7 和 8 次扫描均执行平均和背景扣除。

#### ❖ 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  $m/z \pm$  质量数容许偏差的毫质量单位数值或 ppm 值。

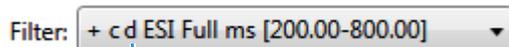
应用程序将质量数容许偏差应用至提取色谱图中。

#### ❖ 若要包含数据依赖过滤器

选中 **Include Data Dependent Filters (包含数据依赖过滤器)** 选项。

当用户在方法中指定过滤器时, 应用程序包含数据依赖过滤器。参阅第 133 页上的“Signal (信号)”。

数据依赖过滤器标记有“d”。



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

数据依赖过滤器

当采用数据依赖过滤器处理样品时, 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<sup>n</sup> 扫描执行库检索。

#### ❖ 若要输入方法的注释

在 Notes (注释) 框中键入文本或使用 CTRL+V 键从其它应用程序中粘贴文本。

可以添加注释, 使其区别于其他方法。

## 定量方法的 General (常规) 页面

使用 General (常规) 页面上的功能指定有关主方法的基本信息。

图 27. 定量方法的 General (常规) 页面

The screenshot displays the 'Method View - Method\_Benzos' interface. At the top, it indicates 'Calibration file last used:'. Below this, several configuration fields are visible:

- Lab name: Default Laboratory
- Assay type: Assay name
- Injection volume: 10.00
- Mass Precision: 2
- Ion range calc method: Level
- Use level: (empty dropdown)
- Instrument method: Instrument1
- Qualitative peak processing template: Default
- Background subtraction range option: Before peak
- Number of scans to subtract: 3
- Stepoff value: 5
- Mass Tolerance: 500.0

There are two radio buttons for 'Mass Tolerance': MMU (selected) and PPM. To the right of the 'Instrument method' field are 'Edit' and 'Update' buttons. At the bottom, there is a 'Notes' section with a text area.

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式

使用主方法

表 17. General (常规) 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 (默认实验室) 若要指定默认实验室名称, 参阅第 42 页上的“指定应用程序默认值”。
Assay Type (实验类型)	输入方法的目标分析类型名称。实验类型将方法与化合物分析或特定类别化合物联系起来 (例如, PAH 的实验类型可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 $\mu\text{L}$ )。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 到 2000 $\mu\text{L}$
Mass Precision (质量数精度)	报告中、峰以及质谱图显示中所用的小数点位数。 有效值: 2 到 6 之间 (包括 2 和 6) 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的范围窗口: Manual (手动, 默认)、Average (平均)、Level (水平) 或 Weighted Average (加权平均)。当选择 Level (水平) 时, 会显示一个额外的列表框, 在此可以选择一个校正水平量。若要指定 Compounds (化合物) 页面上的校正水平, 参阅第 112 页上的“编辑 Compounds (化合物) 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 (Thermo Xcalibur 仪器设置) 对话框, 在此可以编辑仪器方法。
Update (更新)	执行以下其中一种操作:  <b>Send to Xcalibur Method (发送至 Xcalibur 方法):</b> 采用当前仪器方法覆盖 Xcalibur 方法。  <b>Get From Xcalibur Method (从 Xcalibur 方法获得):</b> 采用 Xcalibur 方法覆盖当前仪器方法。
Qualitative Peak Processing Template (定性峰处理模板)	TraceFinder 应用程序在化合物分析完成以后, 使用定性峰处理模板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 (无)、Before Peak (峰前)、After Peak (峰后)、Both Sides of Peak (峰两边) 默认: None (无)
Number of Scans To Subtract (扣除扫描数)	有效值: 偶数整数 默认: 0
Stepoff Value (放弃值)	所选峰至首个扣除背景峰的偏移值。

表 17. General (常规) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

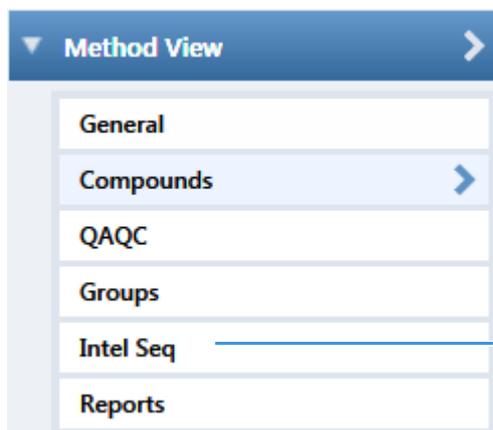
参数	描述
Mass Tolerance (质量数容许偏差)	MMU 或 PPM 上限值。 默认: 500 范围: 0.1 至 50 000 <ul style="list-style-type: none"><li>(默认) MMU (毫质量数单位): MMU 是提取质量数的静态计算。</li><li>PPM (百万分之一): PPM 是一个取决于实际质量数的可变计算。质量数越小, 容许偏差范围越窄。质量数越大, 容许偏差范围越宽。</li></ul>
Include Data Dependent Filters (包 含数据依赖过滤器)	只对定量方法可用。
Notes (注释)	用户添加的可选方法注释。

## 编辑 Compounds (化合物) 页面

利用 Compounds (化合物) 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。

### ❖ 若要打开 Compounds (化合物) 页面

点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Compounds (化合物)**。



仅当用户激活 Configuration (配置) 控制台上的 Intelligent Sequencing (智能排序) 时才可用。

从 Method View (方法视图) 的 Compounds (化合物) 页面上，可以访问下列页面：

[Acquisition List \(采集列表\)](#)

也参阅 [Acquisition List \(采集列表\)](#)。

[Identification \(识别\)](#)

也参阅第 116 页上的“[Identification \(识别\) 页面参数](#)”。

[Detection \(检测\)](#)

也参阅第 130 页上的“[Detection \(检测\) 页面窗格](#)”。

[Calibration \(校正\)](#)

也参阅第 166 页上的“[Calibration \(校正\) 页面参数](#)”。

[Calibration Levels \(校正水平\)](#)

也参阅第 169 页上的“[Calibration Levels \(校正水平\) 页面参数](#)”。

[QC Check Levels \(质控标样水平\) 页面](#)

也参阅第 171 页上的“[QC Check Levels \(质控标样水平\) 页面参数](#)”。

[Real Time Viewer \(实时查看器\)](#)

也参阅第 175 页上的“[Real Time Viewer \(实时查看器\) 页面参数](#)”。

Compounds (化合物) 页面上的每一页 (除 Acquisition List [采集列表] 和 Real Time Viewer [实时查看器] 页面外) 都使用右击快捷菜单。参阅第 177 页上的“[使用快捷菜单命令](#)”。

## Acquisition List (采集列表)

Acquisition List (采集列表) 页面显示了当前方法中指定的所有化合物，该显示与 Compound Database (化合物数据库) 视图相似。在 Acquisition List (采集列表) 页面上，用户可以从 Compound Database (化合物数据库) 中添加其他化合物，或者从方法中删除化合物。

有关 Compound Database (化合物数据库) 视图上所有功能的详细说明，参阅第 247 页上的“使用 Compound Database (化合物数据库)”。

### ❖ 若要从方法中移除化合物

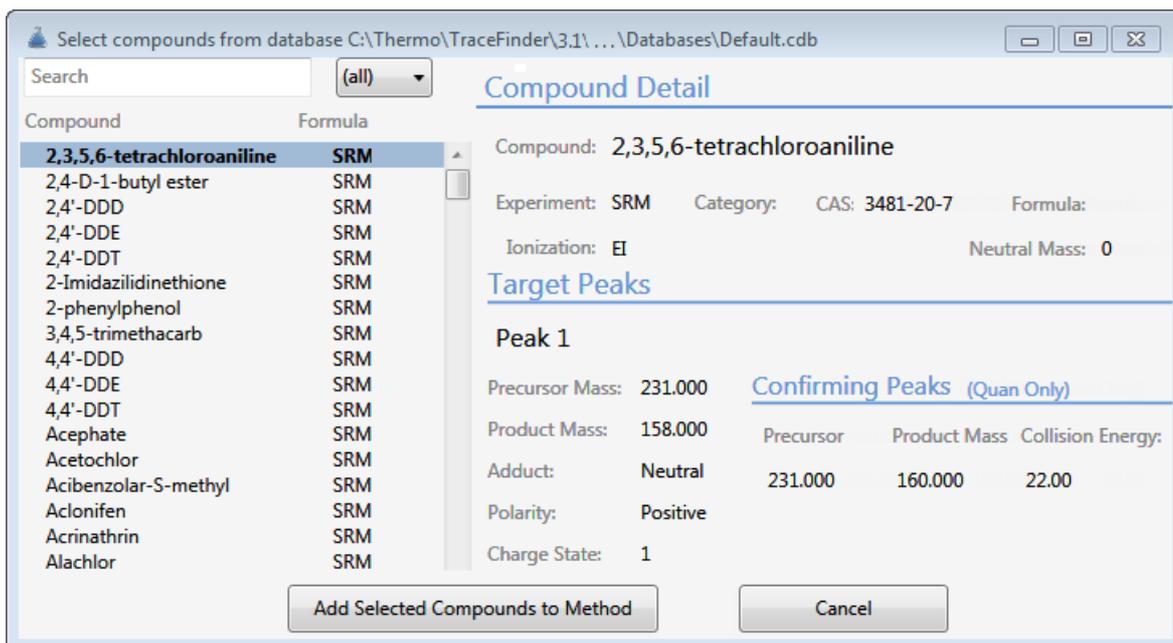
1. 在 Compound (化合物) 列表中选择化合物。
2. 点击 **Remove Compound (移除化合物)** 图标，。
3. 若要确定要删除的已选化合物，在出现提示信息后点击 **OK (确定)**。  
应用程序移除已选化合物及其峰信息。
4. 若要移除多个化合物，使用 CTRL 或 SHIFT 键。  
应用程序确认用户希望移除已选化合物。

### ❖ 若要将化合物添加到方法

1. 点击 **Add Compound from Compound Database (从化合物数据库中添加化合物)** 图标，。

Select Compounds from Database (从数据库选择化合物) 对话框打开，列出在化合物数据库中指定的所有化合物。除用户无法在此处编辑化合物数据外，该对话框与 Compound Database (化合物数据库) 相同；用户只能选择想要添加至方法的化合物。

**图 28.** Select Compounds from Database (从数据库选择化合物) 对话框



## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式 使用主方法

2. 选择化合物以添加至方法中。

用户可以使用 SHIFT 或 CTRL 键选择多个样品。

3. 点击 **Add Selected Compounds to Method (添加已选化合物至方法)**。

TraceFinder 应用程序将选中的化合物添加到方法的采集列表中。

The screenshot displays the TraceFinder software interface with the following components:

- Navigation Tabs:** Acquisition List, Identification, Detection, Calibration, Calibration levels, QC levels, Real Time Viewer.
- Search Bar:** Search (all) [dropdown]
- Compound List Table:**

Compound	Formula
4-Methyl-2,6,7-tri	XIC C5H9O3PS
4-Methyl-2,6,7-tri	XIC C5H9O3PS
METAMITRON-R2	XIC C10H10N4O
1-Butanol, 4-(buty	XIC C8H18N2O2
FENFURAM-CE10-	XIC C12H11NO2
FENFURAM-CE10-	XIC C12H11NO2
Phenol, 4-methyl-	XIC C7H6N2O5
DIMEFURON-CE1:	XIC C15H19CIN4O3
3,3'-Diaminodiphe	XIC C13H14N2
- Compound Detail Panel:**
  - Compound:** 1-Butanol, 4-(butylnitrosoamino)-
  - Experiment:** XIC | **Category:** | **CAS:** 3817116 | **Formula:** C8H18N2O2
  - Ionization:** None | **Response Threshold:** 0 | **Neutral Mass:** 0
- Target Peaks:**
  - Peak 1**
  - Polarity:** +
  - Adduct:** Neutral
  - Charge State:** 1
  - MS Order:** ms1
  - Precursor Mass:**
  - Extracted Mass:** 277.12759
  - Window (sec):** 30
  - RT (min):** 5.87784
  - Lens:** 0
  - Energy Ramp:** 0
- Confirming Peaks Table:**

Precursor	Extracted Mass	MS Order
	294.15396	ms1
	203.09102	ms1
- Fragments:**

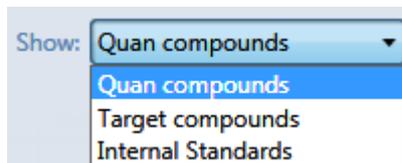
Extracted Mass	Scan Type
----------------	-----------

## Identification (识别)

Identification (识别) 页面会列出用于分析、报告和其他特定化合物值的化合物。有关 Identification (识别) 页面上所有值的详细说明, 参阅“[Identification \(识别\) 页面](#)”。

### ❖ 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 (内标化合物)	仅显示内标化合物。

图 29. Identification (识别) 页面

Acquisition List		Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	QC levels	Real Time Viewer	
	RT	Compound	Compound type	Active	CAS No	LIMS ID	Use as RT Reference	Reference compound
1	3.14	Propanenitrile	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	107120		<input type="checkbox"/>	
2	3.15	Pyrazinamide	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	98964		<input type="checkbox"/>	
3	3.67	1,3-Dioxolane, 2-...	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	4359573		<input type="checkbox"/>	

表 18. Identification (识别) 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。该时间为化合物保留在色谱柱中的总时间。  TraceFinder 应用程序使用 RT (保留时间) 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 = 保留时间 - (窗口 / 2) 停止时间 = 保留时间 + (窗口 / 2) 开始和停止范围: 0.00 至 999.00
Compound (化合物)	已识别化合物的列表。若要自定义化合物名称, 右击单元格然后输入新名称。若要显示化合物的已过滤列表, 使用 Show (显示) 列表。
Compound Type (化合物类型)	化合物类型为 Target Compound (目标化合物) 和 Internal Standard (内标化合物)。TraceFinder 应用程序在定量分析中采用目标化合物和内标化合物。
Active (激活)	识别将要显示在数据视图中并进行报告的每个化合物。默认情况下, 所有添加的化合物会被设置为激活。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) 视图上。
CAS No (CAS 登记号)	TraceFinder 应用程序对每一个化合物进行匹配得到的化学文摘社 (CAS) 登记号。若要更改或添加登记号, 点击 CAS No (CAS 登记号) 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视作保留时间标准的那些化合物, 并且使用它们的观察保留时间来调整任何相关的目标化合物。
Reference Compound (参考化合物)	用于调整化合物保留时间。该列表包括 Use as RT Reference (用作保留时间参考) 列中选取的所有化合物。
快捷菜单	Identification (识别) 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 177 页上的“使用快捷菜单命令”。

## Detection (检测)

采用 Detection (检测) 页面自定义峰和化合物的任何离子的峰检测及积分。

从 Detection (检测) 页面, 可以访问下列页面:

Times (时间)	也参阅第 131 页上的“Times (时间) 页面参数”。
Signal (信号)	也参阅第 139 页上的“Signal (信号) 页面参数”。
Detect (检测)	也参阅第 142 页上的“Genesis 的 Detect (检测) 页面参数”。 也参阅第 146 页上的“ICIS 的 Detect (检测) 页面参数”。 也参阅第 148 页上的“Avalon 的 Detect (检测) 页面参数”。
Suitability (适用性)	也参阅第 152 页上的“System Suitability (系统适用性) 对话框”。
Spectrum (质谱图)	也参阅第 159 页上的“Spectrum (质谱图) 页面快捷菜单命令”。
Library (库)	也参阅第 161 页上的“Library (库) 页面快捷菜单命令”。
Ratios (比率)	也参阅第 163 页上的“Ratios (比率) 页面参数”。

在 Detection (检测) 页面上 (参阅第 129 页上的“Detection (检测) 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征离子列表。细调主方法中每一个化合物及其离子的这些参数, 可减少其要求手动积分的几率。

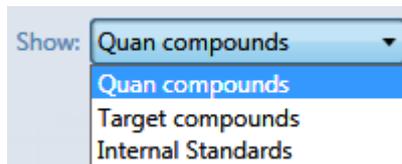
可以更改用于识别定量峰、质量数范围或确认离子峰的参数。TraceFinder 应用程序自动将首个匹配的化合物作为化合物名称, 将质谱图的基峰作为定量峰, 将强度第二和第三大的离子作为确认离子峰。

按照以下步骤进行操作:

- 若要过滤显示的化合物
- 若要更改已检测峰的显示信息
- 若要将化合物添加到方法
- 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
- 若要添加质谱峰为新化合物
- 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
- 若要在 Real Time Status (实时状态) 窗格上添加谱图
- 若要替换确认离子峰
- 若要添加质量数为新确认离子峰
- 若要对确认离子峰使用剪切粘贴功能
- 若要保存新方法

❖ 若要过滤显示的化合物

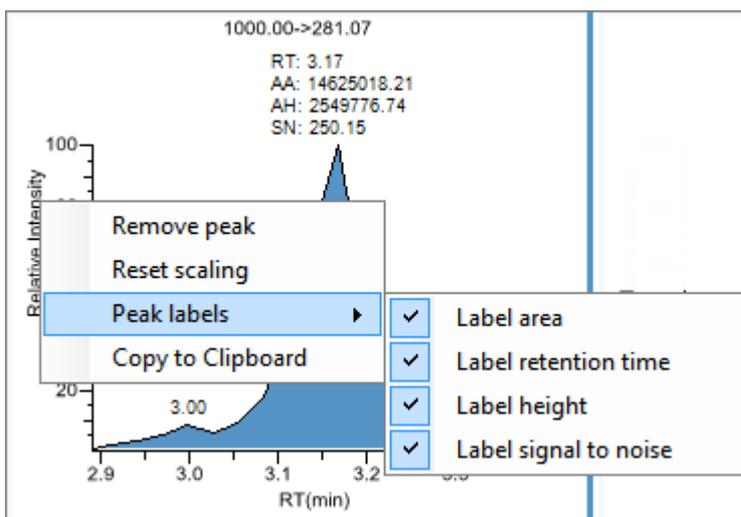
从 Show (显示) 列表中, 选择要在化合物列表中显示的化合物的类型。



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 (内标化合物)	仅显示内标化合物。

❖ 若要更改已检测峰的显示信息

1. 右击色谱图上任意定量或确认峰, 然后将光标停留在 **Peak Labels (峰标签)** 上方。
2. 选择显示峰面积、峰保留时间、峰高、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。

❖ 若要将化合物添加到方法

**提示** 用户可以添加当前原始数据文件中的化合物 (从步骤 7 开始), 或者关联其他原始数据文件并添加该文件中的化合物 (从步骤 1 开始)。

1. 从主菜单上选择 **Method View (方法视图) > Associate a Raw Data File (关联原始数据文件)**。

Associate a Raw Data File (关联原始数据文件) 对话框打开。



2. 浏览到与方法相关的原始数据文件 (或点击箭头并从之前相关的原始数据文件列表中选择) 的位置并打开该文件。

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

...\TraceFinderData\Methods\Methodname

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 (是)** 选项。
4. 若要在关联原始数据文件时更新扫描过滤器, 选中 **Yes (是)** 选项。
5. 若要设置参考谱图, 执行下列操作之一:  
选中 **Yes (是)** 选项。

– 或 –

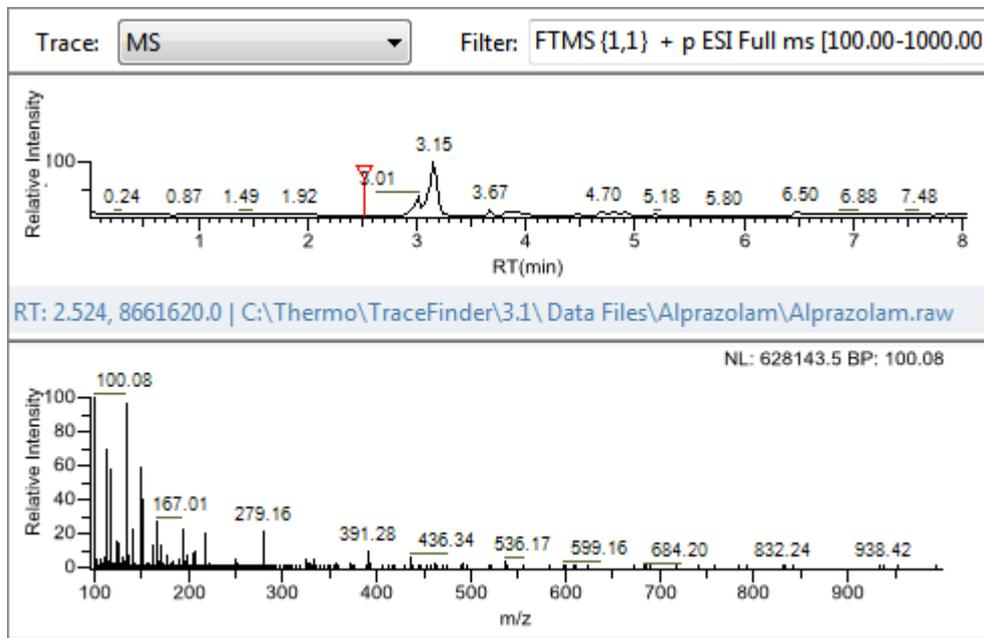
选中 **Yes, with Background Subtraction (是, 使用背景扣除)** 选项。

应用程序在定量处理期间使用已扣除背景的参考质谱图, 并将该已扣除背景的参考质谱图 (在扫描标题上标记有 BS) 报告为 Quantitation Report - 2 (定量报告 -2) 报告上每个化合物的最后扫描。

**注释** 仅当用户在主方法的 General (常规) 页面上选择了一个背景扣除方法时, 该选项才可用。参阅第 105 页上的“编辑 General (常规) 页面”。

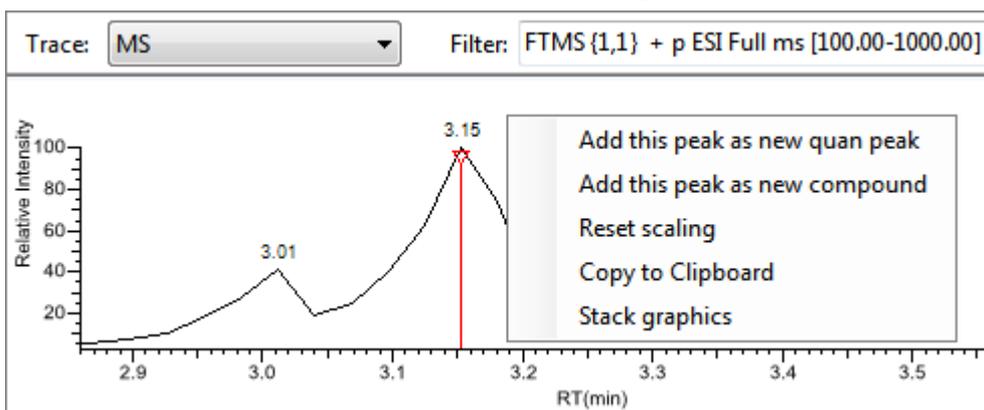
6. 点击 **OK (确定)**。

TraceFinder 应用程序会显示相关原始数据文件中化合物的色谱和质谱数据。



**重要信息** 当质谱图窗格上显示相关原始数据文件时，用户无法显示 Compound (化合物) 列表中原始化合物的峰信息。用户只能显示相关原始数据文件中化合物的峰信息。若要返回方法中所有化合物的显示功能，保存该方法。

7. 从 Filter (过滤器) 列表中选择 一个过滤器。
8. 点击以选中 色谱图内 想要添加至方法的化合物峰。
9. 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)**。

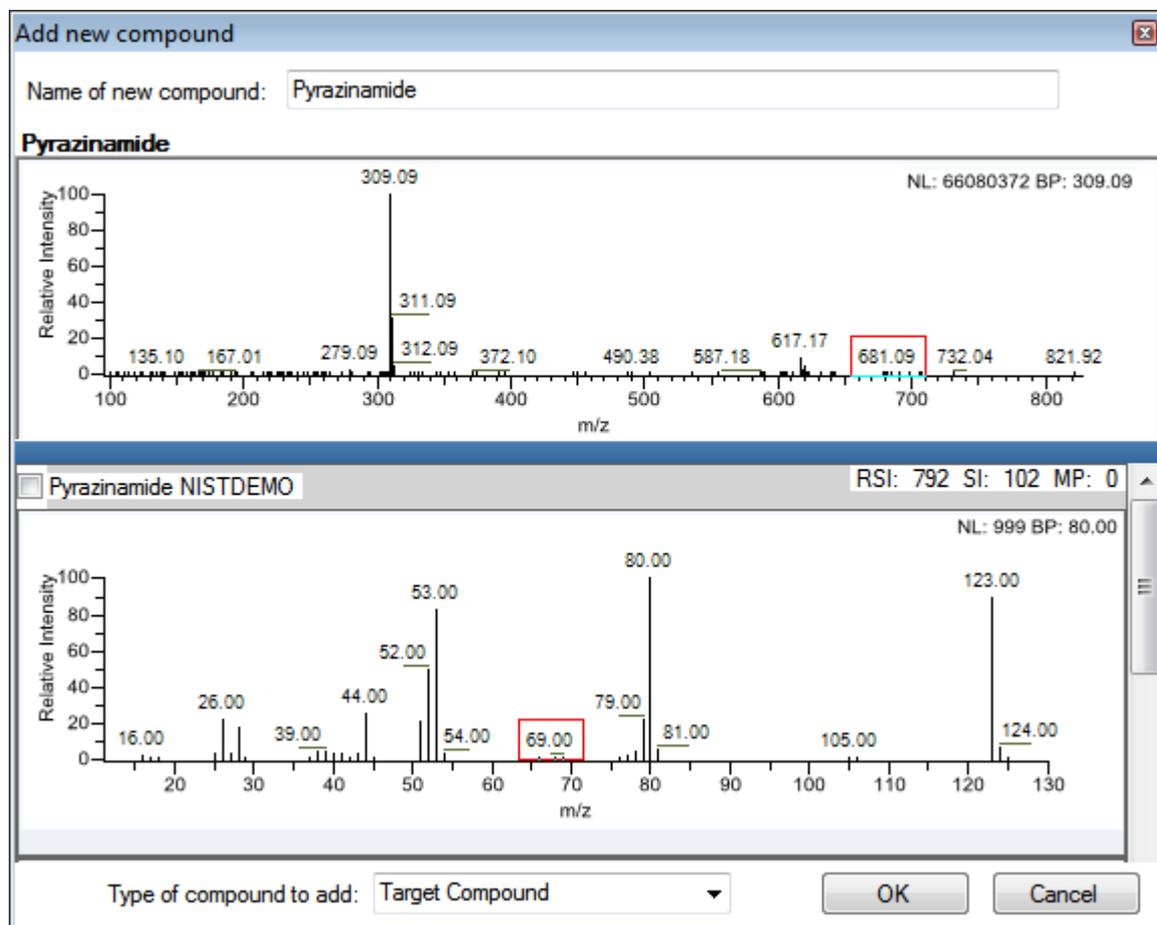


TraceFinder 应用程序为所选化合物进行库检索。应用程序将首个匹配的化合物作为化合物名称，将质谱图的基峰作为定量峰，将第二和第三大的离子作为确认离子峰。

- 当方法中不存在首个匹配化合物的名称时，应用程序将该化合物添加至方法中并在 Compound (化合物) 列表中显示其名称。用户可以查看并编辑该化合物的参数。

- 如果方法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。用户无法覆盖方法中的化合物名称。若已选峰已经存在于方法中，用户必须给出一个新名称并将其添加至方法中。或者选择一个不同的化合物添加至方法中，按照以下步骤 10 至步骤 12 进行。

图 30. Add New Compound (添加新化合物) 对话框



10. 执行下列操作之一：

- 为首个已匹配化合物输入一个新名称。

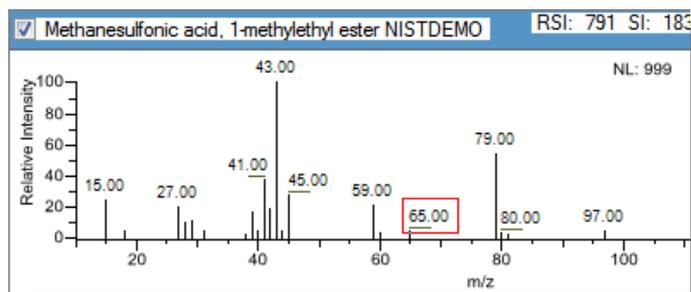
当已选化合物名称已经存在于方法中时，应用程序显示红色警告。用户无法覆盖化合物名称，也无法在方法中创建一个重复的名称。用户必须输入一个唯一的名称。

Name of new compound:  

– 或 –

- 若要使用除首个匹配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相应的复选框。

所选化合物



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

12. 点击 **OK (确定)**。

#### ❖ 若要更改化合物参考质谱图

1. 在色谱图窗格上点击一个峰。

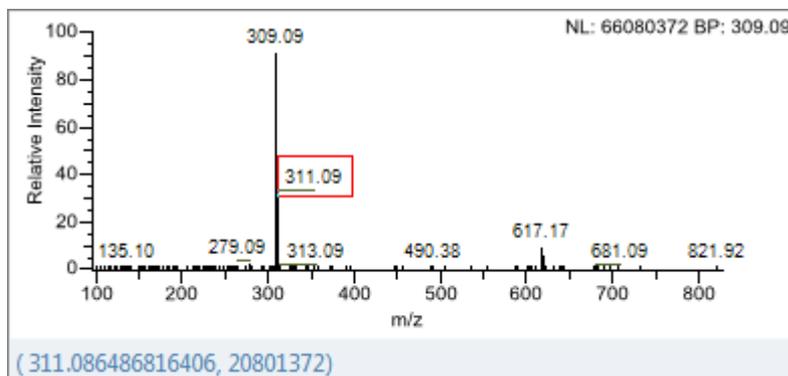
TraceFinder 应用程序在质谱图窗格中显示所选峰的质谱图。

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 (将该质谱图用作化合物参考质谱图)**。

❖ 若要替换定量质量数

1. 点击希望替换的定量质量数的数据窗格。
2. 在质谱图窗格中，将光标停留在峰上方。

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 Quan Value** (设置该质谱峰为定量值)。
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 162 页上的“Ratios (比率)”。

❖ 若要将质量数添加到已有定量质量数范围中

1. 在质谱图窗格中，将光标停留在峰上方。  
红色框代表选中的峰。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Add This Spectral Peak to Existing Quan Ranges** (将该质谱峰添加到已有定量质量数范围)。
3. 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)。

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，则可以在确认离子峰的 Ratios (比率) 页面上看到已更新的离子比率。参阅第 162 页上的“Ratios (比率)”。

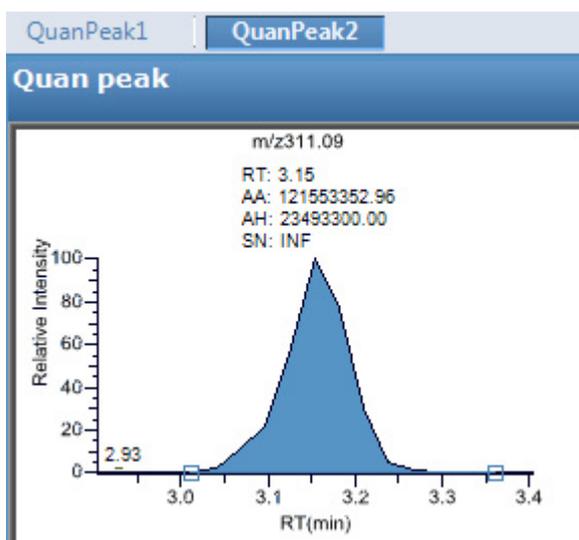
❖ 若要添加定量峰

1. 在质谱图窗格中，将光标停留在峰上方。

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 Quan Peak** (添加该质谱峰为新定量峰)。

应用程序将新定量峰添加到化合物。



可以使用该新定量峰质谱图窗格中的快捷菜单来执行原始定量峰的任意任务。

❖ 若要添加质谱峰为新化合物

1. 在原始数据文件质谱图窗格上，将光标停留在峰上方。

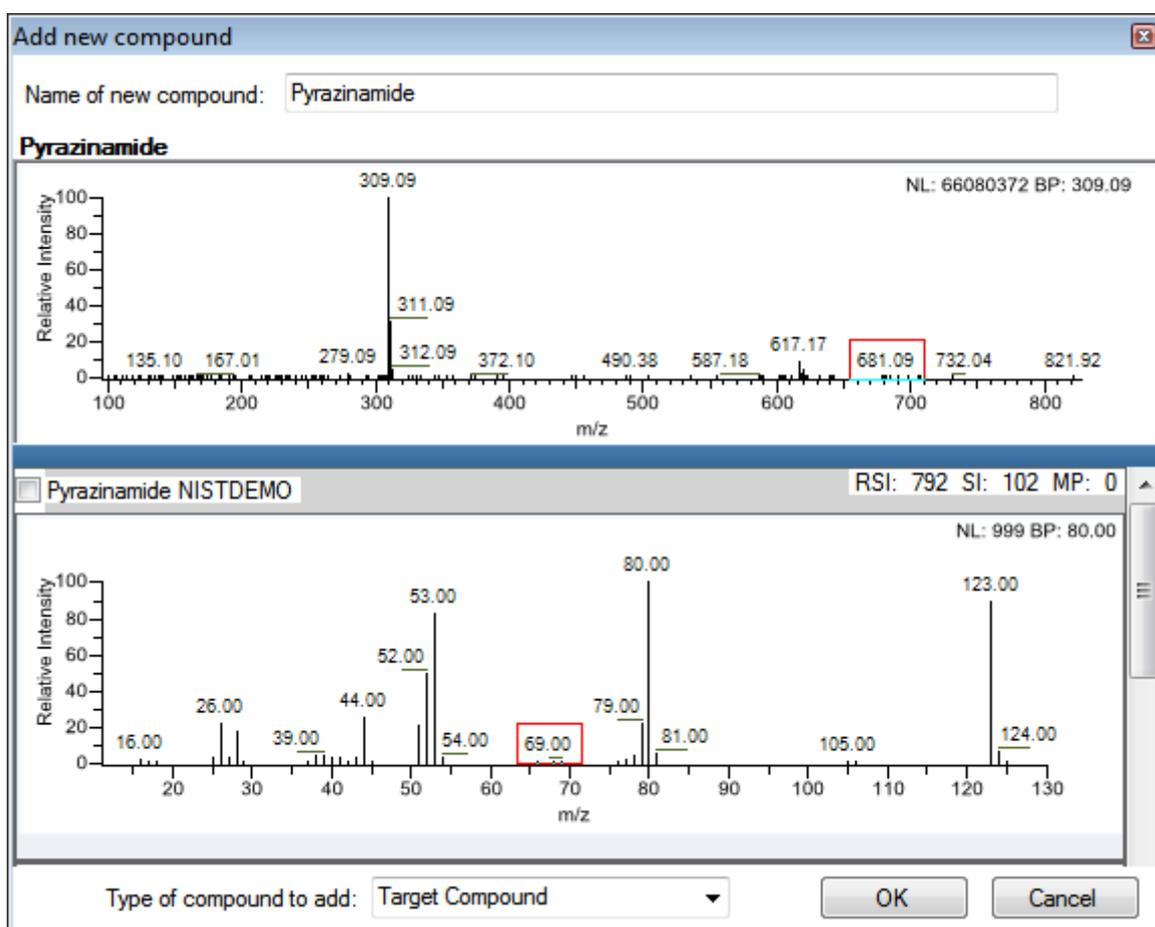
红色框代表选中的峰。

2. 右击并从快捷菜单选择 **Add This Spectral Peak as New Compound** (添加该质谱峰作为新化合物)。

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，将强度第二和第三大的离子作为确认离子峰。

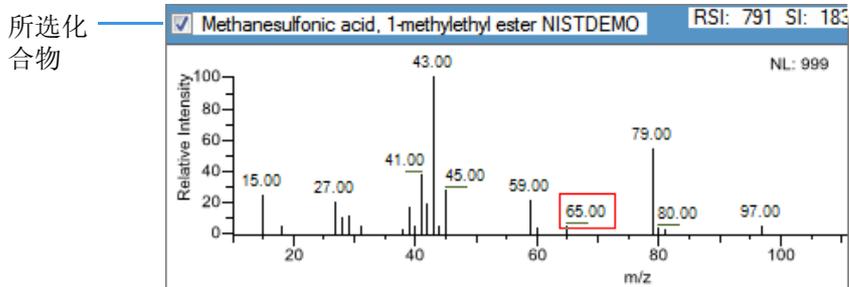
如果有多个匹配，Add New Compound (添加新化合物) 对话框打开。如果库中已有首个匹配的化合物名称，则此对话框随所选的匹配化合物打开。

图 31. Add New Compound (添加新化合物) 对话框



3. (可选) 作出下列修改之一:

- 更改 Name of New Compound (新化合物名称) 框中的化合物名称。
- 使用 TraceFinder 应用程序所选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。



- 在 Type of Compound to Add (添加化合物的类型) 列表选择一个化合物类型。

4. 点击 **OK (确定)**。

#### ❖ 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)**。

应用程序将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。

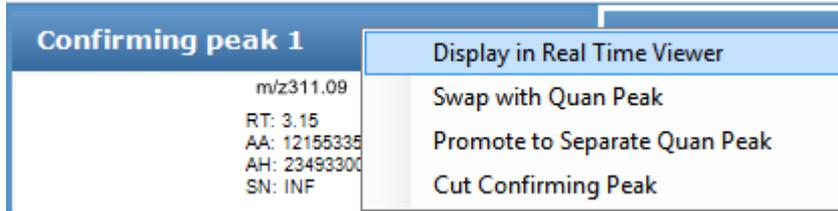
#### ❖ 若要将确认离子峰设置为额外的定量峰

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

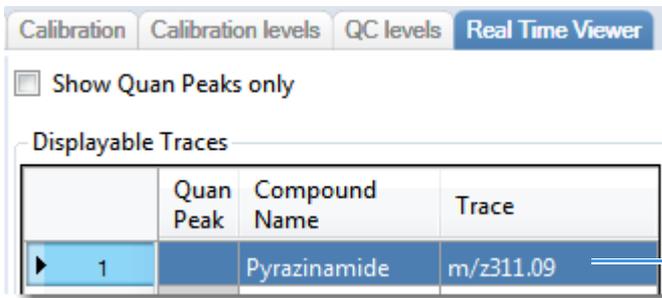
应用程序利用确认离子峰的信息创建一个新定量峰。这包括确认离子峰从原始定量峰那里继承的预期保留时间。应用程序从方法中移除确认离子峰的所有参考值。

❖ 若要在 Real Time Status (实时状态) 窗格上添加谱图

右击准备添加到 Real Time Status (实时状态) 窗格上的定量峰或者确认离子峰的标题栏，从快捷菜单中选择 **Display in Real Time Viewer (在实时查看器中显示)**。

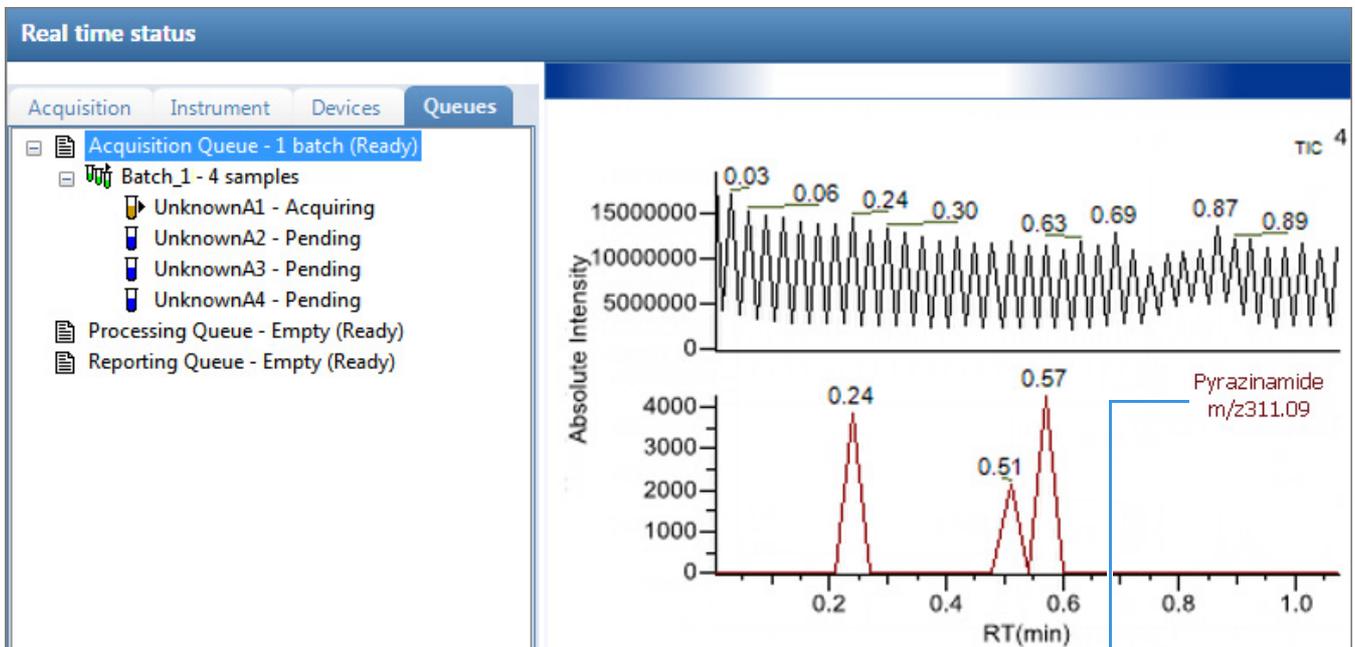


应用程序将峰移动到 Real Time Viewer (实时查看器) 页面的 Traces To Display in Real Time Viewer (显示在实时查看器中的谱图) 窗格内。参阅第 175 页上的“Real Time Viewer (实时查看器)”。



将  $m/z$  311.09 谱图添加到 Real Time Viewer (实时查看器) 中

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  $m/z$  311.09 谱图以及总离子流图。



将  $m/z$  311.09 谱图添加到 Real Time Status (实时状态) 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，将光标停留在峰上方。  
红色框代表选中的峰。
  3. 右击并从快捷菜单中选择 **Set This Spectral Peak as Confirming** (设置该质谱峰为确认峰)。
- TraceFinder 应用程序采用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. 在质谱图窗格中，将光标停留在峰上方。  
红色框代表选中的峰。
  2. 右击并从快捷菜单中选择 **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峰添加至定量峰。



可以使用新确认离子峰质谱图窗格中的快捷菜单执行将要在原始确认离子峰上执行的任意任务。

❖ 若要对确认离子峰使用剪切粘贴功能

1. 右击准备移除的确认离子峰的标题栏，从快捷菜单中选择 **Cut Confirming Peak** (剪切确认峰)。
  2. 右击准备替换的确认离子峰的标题栏，从快捷菜单中选择 **Paste Confirming Peak** (粘贴确认峰)。
- 应用程序粘贴刚移除的确认离子峰。可以将一个已删除峰粘贴回它被移除时所在的定量峰，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上。

❖ 若要保存新方法

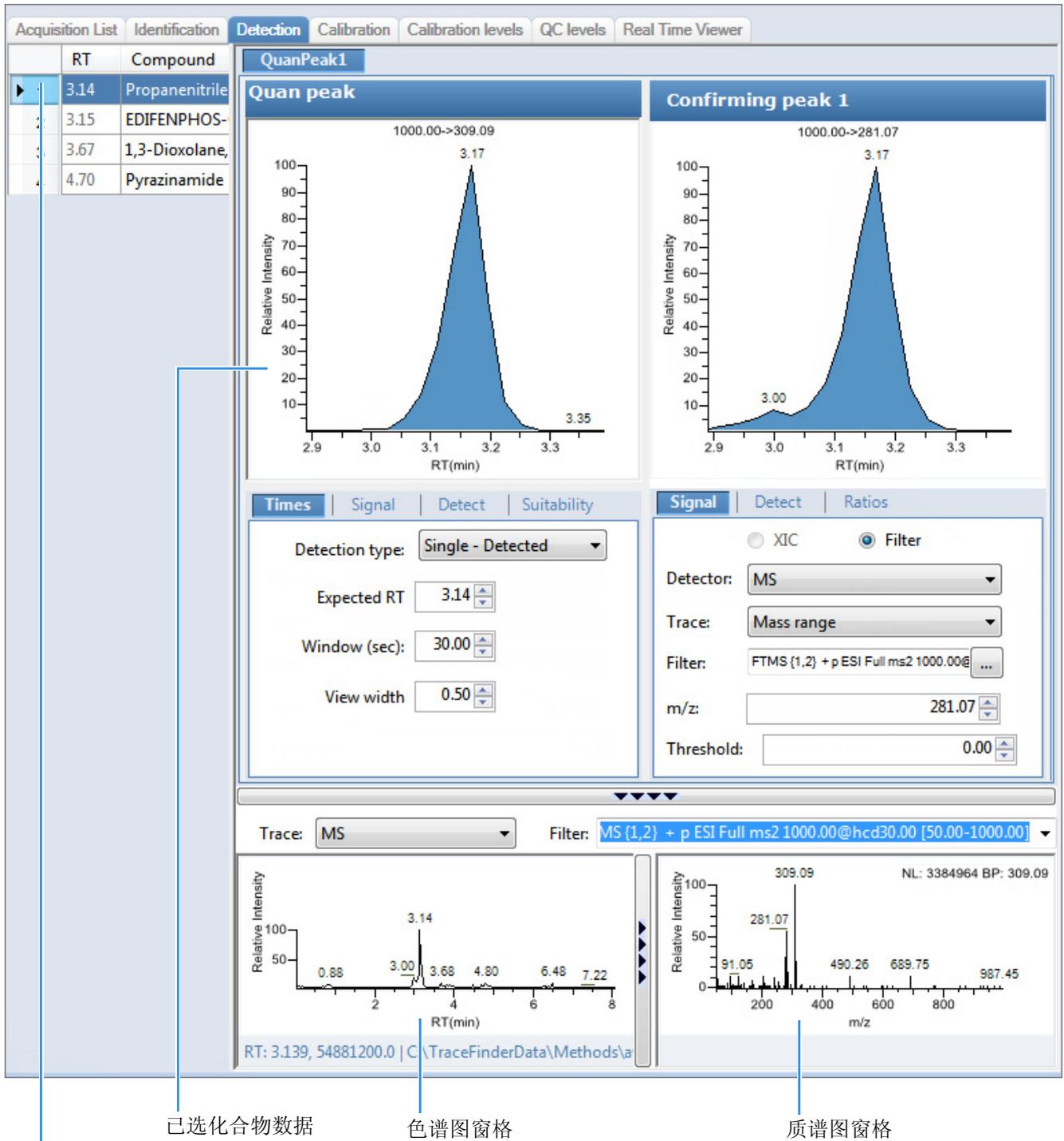
1. 选择 **File (文件) > Save (保存)**。  
Save Master Method (保存主方法) 对话框打开。
  2. 为主方法输入新名称并点击 **OK (确定)**，或者选择一个方法名称进行覆盖，点击 **Overwrite (覆盖)**。
- TraceFinder 应用程序将新方法数据保存在以下文件夹中：

...\TraceFinderData\Methods

### Detection (检测) 页面

使用 Detection (检测) 页面上的功能自定义用于鉴定峰和化合物的任何离子的峰检测及积分。

图 32. Detection (检测) 页面



所选化合物

已选化合物数据

色谱图窗格

质谱图窗格

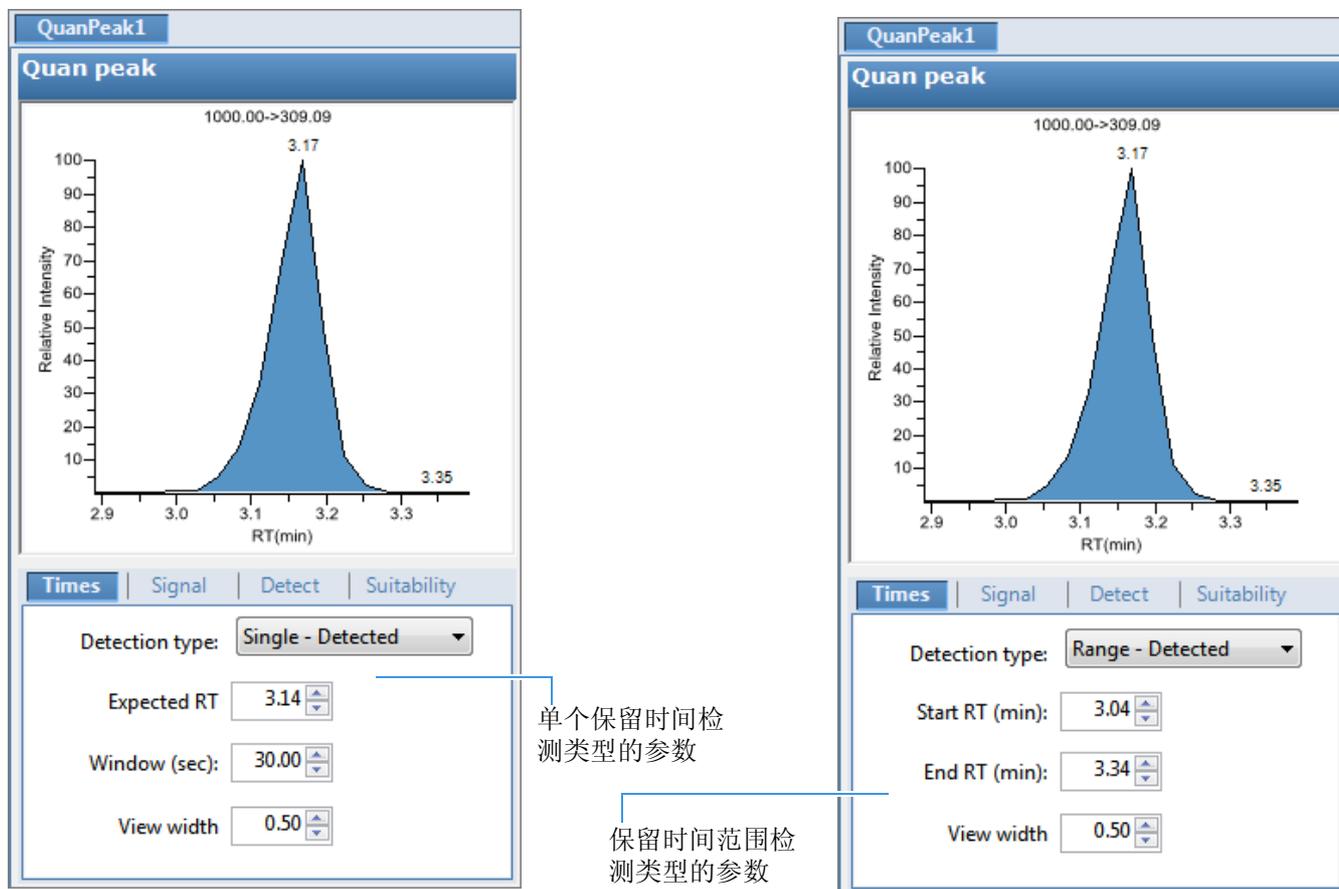
表 19. Detection (检测) 页面窗格

窗格	描述
Compound (化合物)	列出主方法中的所有化合物。Compound (化合物) 列表使用右击出现的快捷菜单。参阅第 177 页上的“使用快捷菜单命令”。
QuanPeak <i>n</i> (定量峰 <i>n</i> )	显示定量峰的色谱图及其确认离子峰。定量峰及确认峰窗格包括已选化合物的保留时间、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 (检测器) 和 Trace (谱图) 值的组合。  不要将该 Trace (谱图) 参数与 Signal (信号) 页面上的 Trace (谱图) 参数搞混。该 Trace (谱图) 参数是 Signal (信号) 页面上指定的 Detector (检测器) 和 Trace (谱图) 的组合。参阅第 138 页上的“质谱检测器的 Signal (信号) 页面”。
	<b>注释</b> 当用户选择一个除 MS (质谱仪) 或 PDA (光电二极管阵列) 以外的检测器选项, 质谱图窗格将其报告为“Not Available (不可用)”。
Filter (过滤器)	显示用于原始数据文件的过滤器。仅当用户将 Trace (谱图) 参数设置为 MS (质谱仪) 时才可用。
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, 没有质谱图显示。若要关闭质谱窗格, 并使用全宽模式显示色谱图, 单击  。
<b>附加页面</b>	
Times (时间)	指定定量峰的保留时间和窗口。 参阅第 131 页上的“Times (时间)”。
Signal (信号)	指定用于显示每个色谱图的检测器和检测参数。参阅第 133 页上的“Signal (信号)”。
Detect (检测)	指定峰检测算法及其选项。 参阅第 141 页上的“Detect (检测)”。
Spectrum (质谱图)	指定用于定量峰或化合物的参考质谱图。参阅第 154 页上的“Spectrum (质谱图)”。
Ratios (比率)	指定评估、确认或定性离子的标准。参阅第 162 页上的“Ratios (比率)”。

## Times (时间)

使用 Times (时间) 页面指定定量峰的预期保留时间或保留时间范围。

图 33. Times (时间) 页面



单个保留时间检测类型的参数

保留时间范围检测类型的参数

表 20. Times (时间) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Detector Type (检测器类型)	<p><b>Single - Detected (单个 - 检测)</b>: (默认) 指定为一个居中的保留时间窗口。应用程序对明显的峰进行积分。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)。</p> <p><b>Range - Detected (范围 - 检测)</b>: 指定为保留时间开始 / 结束的范围。</p> <p><b>Range - Integrated (范围 - 积分)</b>: 指定为保留时间开始 / 结束的范围。应用程序对指定时间范围内的所有峰进行积分。</p>
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 (单个 - 检测) 检测类型。
Window (sec) (窗口, 秒)	窗口宽度 (单位为秒) 是指系统查找峰尖时距离预期保留时间的范围。只适用于 Single - Detected (单个 - 检测) 检测类型。
Start/End RT (min) (起始 / 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。仅适用于 Range - Detected (范围 - 检测) 和 Range - Integrated (范围 - 积分) 检测类型。当从 Single - Detected (单个 - 检测) 检测类型进行修改时, 这些值默认为从 Expected RT (预期保留时间) 和 Window (窗口) 值计算的以前的开始和结束时间。

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式

使用主方法

表 20. Times (时间) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
View Width (min) (视图宽度, 分钟)	显示离子色谱图的可查看尺寸。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 (范围 - 检测) 或者 Range - Integrated (范围 - 积分) 检测类型时, 无法选择小于保留时间范围的 View Width (视图宽度) 值 (结束时间减去起始时间)。
<b>快捷菜单</b>	
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) 值复制到化合物中的所有定量峰上, 并更新该化合物。  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 (视图宽度) 和 Window (窗口) 值复制到方法中的所有定量峰上, 并更新该方法。

## Signal (信号)

使用 Signal (信号) 页面指定显示每个色谱图时的检测器和过滤器参数。有关 Signal (信号) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 138 页上的“Signal (信号) 页面”。TraceFinder 应用程序可以使用模拟检测器和质谱检测器。参阅第 138 页上的“质谱检测器的 Signal (信号) 页面”或第 139 页上的“模拟检测器的 Signal (信号) 页面”。

按照以下步骤进行操作:

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

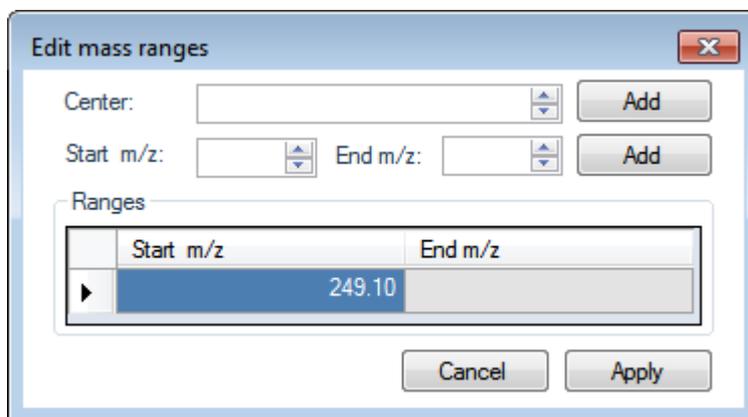
### ❖ 若要指定用于检测和积分的离子范围

1. 在 Detector (检测器) 列表中选择 MS (质谱仪)。
2. 从 Trace (谱图) 列表中选择 Mass Range (质量数范围)。
3. 在 Ranges (范围) 区域, 点击 Edit (编辑)。

**注释** 仅当将 Detector (检测器) 参数设置为 MS (质谱仪), Trace (谱图) 参数设置为 Mass Range (质量数范围) 时, Ranges (范围) 区域上的参数才可用。

Edit Mass Ranges (编辑质量数范围) 对话框打开, 在此可以采用质量数中心值或起始和结束值来指定质量数范围。

**图 34.** Edit Mass Ranges (编辑质量数范围) 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 (范围) 下面。Start m/z (起始质荷比) 列中列出了中心质量数值。应用程序以该值为中心值, 使用左右相差共 1 amu 的范围。
5. 在 Start m/z (起始质荷比) 和 End m/z (结束质荷比) 列中输入值, 然后点击 Add (添加)。应用程序添加包含这些起始和结束值的行。
6. 可以根据需要添加多个范围。当采用该方法处理批次时, 应用程序合计由这些范围指定的多个离子。

7. 点击 **Apply (应用)**。

应用程序将这些参数应用至范围列表中。

❖ **若要指定 XIC Filter (XIC 过滤器)**

1. 在 Detector (检测器) 列表中选择 **MS (质谱仪)**。
2. 从 Trace (谱图) 列表中选择 **Mass Range (质量数范围)**。
3. 选择 **XIC (提取离子色谱图)** 选项。

**注释** 仅当将 Detector (检测器) 参数设置为 MS (质谱仪), Trace (谱图) 参数设置为 Mass Range (质量数范围) 时, XIC 选项才可用。

4. 单击 Filter (过滤器) 的浏览按钮。

XIC Filter (XIC 过滤器) 对话框打开。参阅 [XIC Filter \(XIC 过滤器\) 对话框](#)。

5. 指定过滤器选项。
6. 点击 **OK (确定)**。

应用程序使用指定的 XIC 过滤器选项更新色谱数据。

Filter (过滤器) 框给出了指定 XIC 过滤器的参数。例如:

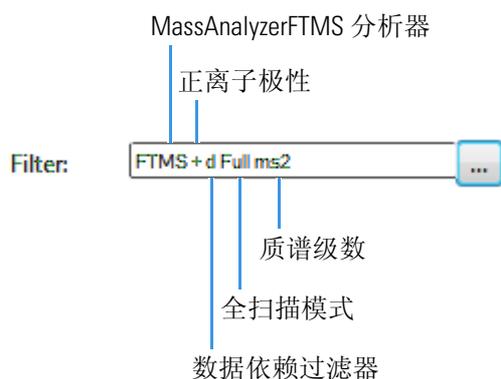


图 35. XIC Filter (XIC 过滤器) 对话框

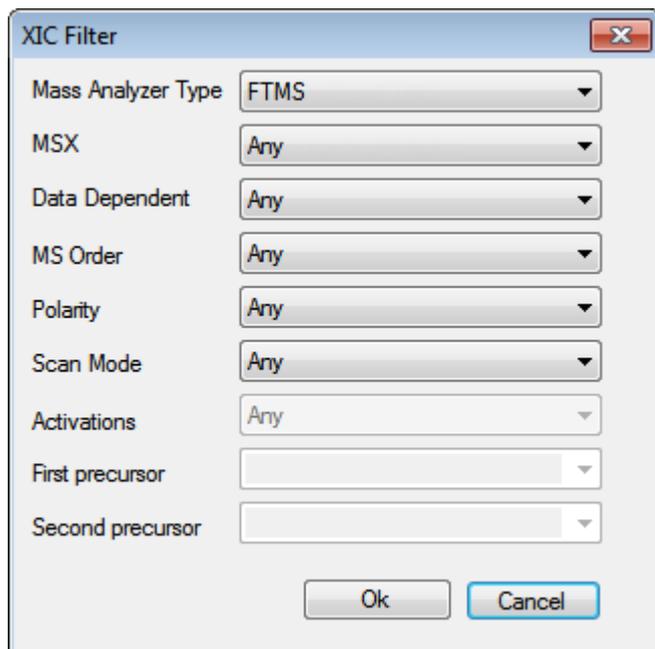


表 21. XIC Filter (XIC 过滤器) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

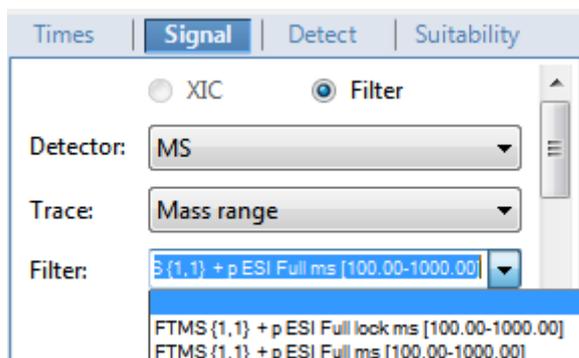
参数	描述
Mass Analyzer Type (质量分析器类型)	Any: 允许使用任何质谱分析器。 FTMS: 傅里叶变换质谱仪 ITMS: 离子阱质谱仪 Sector: 静电场或磁式扇形分析器, 或两者的结合 SQMS: 单四极杆质谱仪 TOFMS: 飞行时间质谱仪 TQMS: 三重四极杆质谱仪
MSX (多重)	Any: 允许 MSX 和 non-MSX 扫描。 On: 仅允许 MSX 扫描。 Off: 仅允许 non-MSX 扫描。
Data Dependent (数据依赖)	Any: 允许数据依赖和非数据依赖过滤器。 On: 仅允许数据依赖过滤器。 Off: 仅允许非数据依赖过滤器。
MS Order (质谱级数)	Any: 允许任何质谱级数。 MS: 一级质谱 MS2-MS3: 多级质谱
Polarity (极性)	Any: 允许正离子和负离子模式。 Positive (正离子) Negative (负离子)

表 21. XIC Filter (XIC 过滤器) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Scan Mode (扫描模式)	Any: 允许任何扫描模式。 Full: 全扫描模式 SIM: 选择离子监测 SRM: 选择反应监测 CRM: 连续反应监测 Q1MS: 使用四极杆 1 的质谱 Q3MS: 使用四极杆 3 的质谱
Activations (激活)	Any: 允许任何激活方法。 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 仅当 MS Order (质谱级数) 设置为 MS2 (二级质谱) 或 MS3 (三级质谱) 时, 该参数才可用。
First Precursor (一级母离子)	仅当 MS Order (质谱级数) 设置为 MS2 (二级质谱) 或 MS3 (三级质谱) 时, 该参数才可用。
Second Precursor (二级母离子)	仅当 MS Order (质谱级数) 设置为 MS3 (三级质谱) 时, 该参数才可用。

## ❖ 若要指定 MS (质谱仪) 过滤器

1. 选中 **Filter (过滤器)** 选项。
2. 在 Detector (检测器) 列表中选择 **MS (质谱仪)**。
3. 从 Trace (谱图) 列表中选择 Trace 类型。
4. 从 Filter (过滤器) 列表选择一个过滤器。



Filter (过滤器) 类型可以是以下任一:

- MS (一级质谱)
  - MS2 (二级质谱)
  - MS2 CID (二级质谱 碰撞诱导解离)
  - MS2 HCD (二级质谱 高能碰撞诱导解离)
5. 若要更新新过滤器选项, 点击 Signal (信号) 窗格的外面。  
只要该过滤器仍以蓝色高亮显示, 该新选择就还没有得到应用。
  6. (对定量峰可选) 若要将相同的定量峰过滤器应用到其他峰, 右击并从快捷菜单选择下列之一:
    - **Set Filter Options on All Peaks in This Compound (对该化合物所有峰应用过滤选项):** 对化合物内所有其他峰应用这个过滤器。
    - **Set Filter Options on All Compounds (对所有化合物应用过滤选项):** 对方法内所有化合物的所有峰应用这个过滤器。
    - **Set Quan Peak Filter Options on All Compounds (对所有化合物应用定量峰过滤选项):** 将为定量峰指定的过滤器应用到方法中所有化合物的定量峰上。
  7. (对确认峰可选) 若要将相同的确认峰过滤器应用到其他峰, 右击并从快捷菜单选择下列之一:
    - **Set Filter Options on All Peaks in This Compound (对该化合物所有峰应用过滤选项):** 对化合物内所有其他峰应用这个过滤器。
    - **Set Filter Options on All Compounds (对所有化合物应用过滤选项):** 对方法内所有化合物的所有峰应用这个过滤器。
    - **Set Confirm Peak Filter Options on All Compounds (对所有化合物应用确认峰过滤选项):** 将为确认峰指定的过滤器应用到方法中所有化合物的确认峰上。

- **Set Confirm Peak 1 Filter Options on All Compounds (对所有化合物应用确认峰 1 过滤选项)**: 将为确认峰 1 指定的过滤器应用到方法中所有化合物的确认峰上。

### Signal (信号) 页面

当为模拟检测器或质谱检测器显示每张色谱图时, 使用 Signal (信号) 页面上的功能定义检测器和过滤器。有关 Signal (信号) 页面上所有参数的详细说明, 参阅第 139 页上的“Signal (信号) 页面参数”。

- 质谱检测器的 Signal (信号) 页面
- 模拟检测器的 Signal (信号) 页面

图 36. 质谱检测器的 Signal (信号) 页面

The screenshot displays the Signal (Signal) page for a mass spectrometer detector. It is divided into two main sections: 'Quan peak' and 'Confirming peak 1'.

**Quan peak section:**

- Chromatogram: Shows a peak at RT 4.48 min with m/z 249.10. Other peaks are labeled at RT 4.32 and 4.65 min.
- Parameters: XIC (unchecked), Filter (checked), Detector: MS, Trace: Mass range, Filter: FTMS {1,1} + p ESI Full ms [100.00-100].
- Ranges table:

Start m/z	End m/z
249.10	
- Threshold: 0.00

**Confirming peak 1 section:**

- Chromatogram: Shows a peak at RT 4.49 min with m/z 266.12. Other peaks are labeled at RT 4.32 and 4.65 min.
- Parameters: XIC (unchecked), Filter (checked), Detector: MS, Trace: Mass range, Filter: FTMS {1,1} + p ESI Full ms [100.00-100].
- m/z: 266.12
- Threshold: 0.00

图 37. 模拟检测器的 Signal (信号) 页面

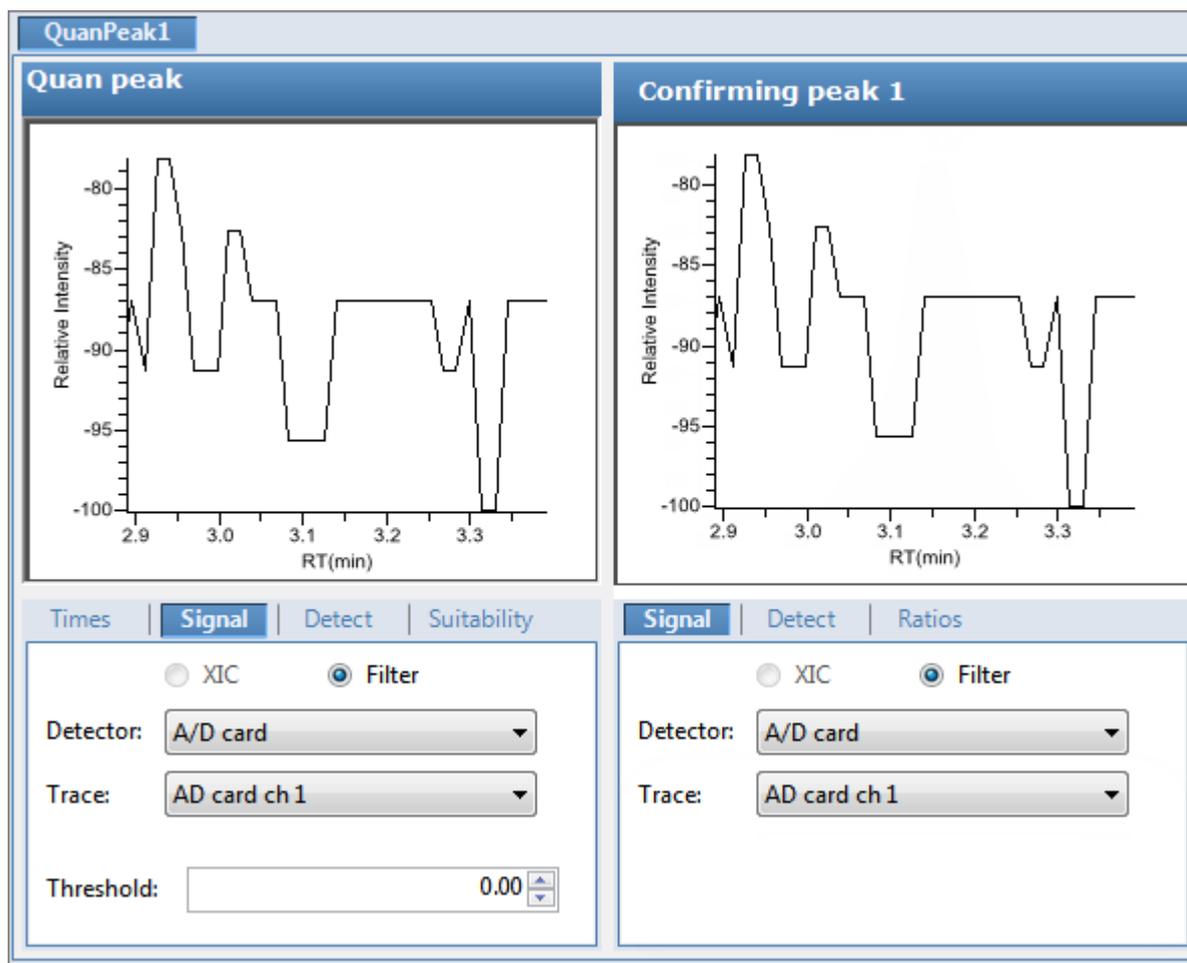


表 22. Signal (信号) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
XIC (提取离子色谱图)	仅当选择 MS (质谱仪) 检测器时可用。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)	仅当选择 MS (质谱仪) 检测器时可用。从质量过滤器列表选择用于处理化合物的过滤器。

表 22. Signal (信号) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Detector (检测器)	<p>选项由创建方法的检测选项确定。该方法可以使用标准选项 (所有列出的选项), 或者仅使用采集相关原始数据文件的检测选项。</p> <p>MS (质谱仪): 质谱仪电离样品分子, 使离子根据质荷比 (<math>m/z</math>) 分离。</p> <p>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。</p> <p>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 QIon (定量离子) 值的报告显示该值为 <b>Analog (模拟)</b>, 而显示质谱图的任何报告将质谱图显示为 <b>Not Available (不可用)</b>。</p> <p>A/D card (A/D 卡): 如果检测器不在数据系统控制之下, 你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数据文件中。</p> <p>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。</p>
Trace (谱图)	<p>代表一个指定数据范围。TraceFinder 应用程序利用谱图鉴定化合物的特征离子。</p> <p>MS (质谱仪) 检测器选项: Mass Range (质量数范围)、TIC (总离子流图) 或 Base Peak (基峰)。当用户选择 Mass Range (质量数范围) 时, 弹出的提示框立即提醒用户输入 <math>m/z</math> 范围的起止值。</p> <p>PDA (光电二极管阵列) 检测器选项: Spectrum Maximum (质谱最高峰)、Wavelength Range (波长范围) 或 Total Scan (全扫描)。</p> <p>Analog (模拟) 检测器选项: Analog 1 (模拟 1)、Analog 2 (模拟 2)、Analog 3 (模拟 3) 或者 Analog 4 (模拟 4)。可以在仪器配置中配置这些通道名称。</p> <p>A/D Card (A/D 卡) 检测器选项: AD Card ch1 (AD 卡通道 1)、AD Card ch2 (AD 卡通道 2)、AD Card ch3 (AD 卡通道 3) 或者 AD Card ch4 (AD 卡通道 4)。可以在仪器配置中配置这些通道名称。</p> <p>UV (紫外) 检测器选项: Channel A (通道 A)、Channel B (通道 B)、Channel C (通道 C) 或者 Channel D (通道 D)。可以在仪器配置中配置这些通道名称。</p>
Filter (过滤器)	<p>仅当选择 MS (质谱仪) 检测器时可用。代表一个特定的数据采集通道。</p> <p>例如, 过滤器选项 + <i>c Full ms [35.00-500.00]</i> 代表正离子棒状图信号是在 <math>m/z</math> 35 至 500 的单级全扫描模式中采集的。</p>
Ranges (范围)	<p>仅当选择 MS (质谱仪) 检测器的 Mass Range (质量数范围) 谱图时可用。</p>
Edit (编辑)	<p>打开 Edit Mass Ranges (编辑质量数范围) 对话框, 在此可以指定用于检测和积分的离子范围。参阅第 133 页上的“若要指定用于检测和积分的离子范围”。</p>
Start $m/z$ (起始质荷比)	<p>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。</p>
End $m/z$ (结束质荷比)	<p>由中心质量数值指定的范围以单个值的形式列在 Start <math>m/z</math> (起始质荷比) 列中。应用程序以该值为中心值, 使用左右相差共 1 amu 的范围。</p>

## Detect（检测）

Detect（检测）页面用于指定峰检测算法（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](#)。Genesis 和 Avalon 灵敏度模式用于质谱检测。ICIS 灵敏度模式主要用于模拟检测。

在此页上，用户可以指定每个模式的运行方式。有关 Detect（检测）页面上所有功能的详细说明，参阅下列说明：

- 对于 Genesis 灵敏度，参阅第 142 页上的“Genesis 的 Detect（检测）页面参数”。
- 对于 ICIS 灵敏度，参阅第 146 页上的“ICIS 的 Detect（检测）页面参数”。
- 对于 Avalon 灵敏度，参阅第 148 页上的“Avalon 的 Detect（检测）页面参数”。

图 38. Genesis 的 Detect (检测) 页面

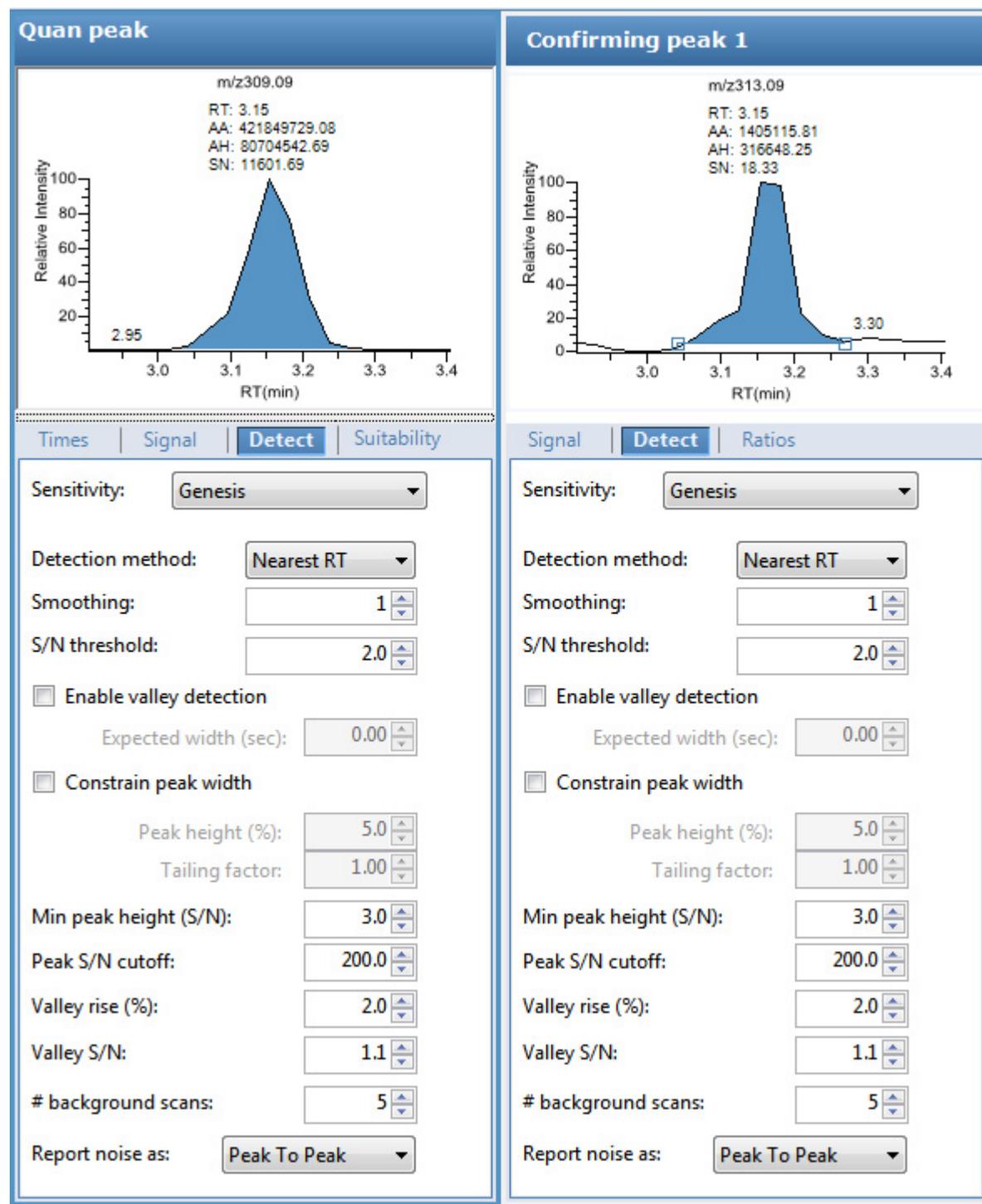


表 23. Genesis 的 Detect (检测) 页面参数 (第 1 页, 共 3 页)

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 (最接近的保留时间): 使用色谱图中具有最接近保留时间的峰进行化合物鉴定。

表 23. Genesis 的 Detect (检测) 页面参数 (第 2 页, 共 3 页)

参数	描述
Smoothing (平滑)	在峰检测和积分前, 确定要对当前成分峰数据执行的平滑程度。 默认: 1 范围: 从 1 至 15 点之间的任意奇数整数
S/N Threshold (信噪比阈值)	用于峰积分的现行信噪比阈值。小于此信噪比值的峰将不会进行积分。大于此信噪比值的峰将进行积分。 范围: 0.0 至 999.0
Enable Valley Detection (启用峰谷检测)	使用峰谷检测近似方法来检测未解析的峰。该方法从未解析峰之间的谷尖到基线作一条垂直线。垂直线和基线的交叉定义了首个峰的结束以及第二个峰的开始。
Expected Width (sec) (预期宽度, 秒)	预期的峰宽参数 (以秒为单位)。如果已启用峰谷检测, 该参数可控制峰预期的最小宽度。  启用峰谷检测时, 任何距离谷尖小于 <i>预期宽度</i> 一半的谷点将被忽略。如果谷点处于预期峰宽之外, TraceFinder 数据系统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)	在色谱图峰积分时限定化合物的峰宽。然后, 可以通过设置峰高阈值和拖尾因子控制峰积分何时打开和关闭。选中 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框, 激活 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 (限定峰宽) 复选框时, 该文本框才被激活。 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。该因子是指一个限定峰的拖尾对前延的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框时, 该文本框才被激活。 范围: 0.5 至 9.0
Min Peak Height (S/N) (最小峰高, 信噪比)	谷值检测近似方法若使用 Nearest RT Peak Identification (最接近保留时间峰识别) 标准, 峰信噪比值必须大于或等于此参数。为了识别化合物, TraceFinder 应用程序会忽略信噪比值小于 S/N Threshold (信噪比阈值) 的所有色谱图峰。 范围: 0.0 (所有峰) 至 999.0  只对定量方法可用。
Peak S/N Cutoff (峰信噪比截止值)	将峰边缘设置为低于该信噪比的值。  当基线调整过的边缘高度小于基线调整过的峰尖高度与峰的信噪比截止值比率的比率时, 该测试可以识别峰的边缘。  当峰尖的信噪比为 500, 峰的信噪比截止值为 200, 当峰边缘信噪比值小于 200 时, TraceFinder 应用程序会指定此峰的左右边缘。  范围: 50.0 至 10000.0

表 23. Genesis 的 Detect (检测) 页面参数 (第 3 页, 共 3 页)

参数	描述
Valley Rise (%) (峰谷上升, %)	<p>峰谱图可在通过一个最小值 (在峰之前或之后) 后向上, 超出基线的部分达到该百分比值。</p> <p>该方法从未解析峰之间的谷尖到基线作一条垂直线。垂直线和基线的交叉定义了首个峰的结束以及第二个峰的开始。</p> <p>当谱图超过峰谷上升百分比参数时, TraceFinder 应用程序应用谷检测峰积分标准。</p> <p>TraceFinder 应用程序将此测试应用至峰的左右边缘。</p> <p>该上升百分比标准对于具有长拖尾的积分峰特别有用。</p> <p>范围: 0.1 至 500.0</p>
Valley S/N (峰谷信噪比)	<p>指定一个值以评估谷的底端。使用此参数确保其周围的测量值更高。</p> <p>默认: 2.0</p> <p>范围: 1.0 至 100.0</p>
# Background Scans (背景扫描数)	TraceFinder 应用程序执行的背景扫描次数。
Report Noise As (将噪声报告为)	确定使用 RMS (均方根) 或峰与峰之间的分离度阈值来计算 S/N (信噪比) 值的噪声。选项有 RMS (均方根) 或 Peak To Peak (峰对峰)。
<b>快捷菜单</b>	
Apply to All Peaks in Method (应用至方法中的所有峰)	采用 Detect (检测) 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)	应用程序采用 Detect (检测) 页面上的当前设置更新方法中 Genesis 灵敏度模式下的所有化合物。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)	采用 Detect (检测) 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。

图 39. ICIS 的 Detect (检测) 页面

### Quan peak

m/z309.09  
RT: 3.15  
AA: 426081064.33  
AH: 80709266.84  
SN: 282728.55

Relative Intensity

RT(min)

### Confirming peak 1

m/z313.09  
RT: 3.15  
AA: 1832356.20  
AH: 332551.46  
SN: 722.60

Relative Intensity

RT(min)

Times | Signal | **Detect** | Suitability

Sensitivity: ICIS

Detection method: Nearest RT

Smoothing: 1

Area noise factor: 5

Peak noise factor: 10

Baseline window: 40

Constrain peak width

Peak height (%): 5.0

Tailing factor: 1.00

Min peak height (S/N): 3.0

Noise method: Incos

Min peak width: 3

Multiplet resolution: 10

Area tail extension: 5

Area scan window: 0

RMS

Signal | **Detect** | Ratios

Sensitivity: ICIS

Detection method: Nearest RT

Smoothing: 1

Area noise factor: 5

Peak noise factor: 10

Baseline window: 40

Constrain peak width

Peak height (%): 5.0

Tailing factor: 1.00

Min peak height (S/N): 3.0

Noise method: Incos

Min peak width: 3

Multiplet resolution: 10

Area tail extension: 5

Area scan window: 0

RMS

表 24. ICIS 的 Detect (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, 主要用于模拟检测器。
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 (最接近的保留时间): 使用色谱图中具有最接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, 确定要对当前成分峰数据执行的平滑程度。 默认: 1 范围: 从 1 至 15 点之间的任意奇数整数
Area Noise Factor (峰面积噪声因子)	用于确定可能存在的峰位之后峰缘的噪声水平倍数。 默认: 5 范围: 1 至 500
Peak Noise Factor (峰噪声因子)	用于确定潜在峰信号阈值的噪声水平倍数。 默认: 10 范围: 1 至 1000
Baseline Window (基线窗口)	TraceFinder 应用程序进行几次扫描后查找一个局部最小值。 默认: 40 范围: 1 至 500
Constrain Peak Width (限定峰宽)	在色谱图峰积分时限定化合物的峰宽。然后, 可以通过设置峰高阈值和拖尾因子控制峰积分何时打开和关闭。选中 Constrain Peak Width (限定峰宽) 复选框, 激活 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 (限定峰宽) 复选框时, 该文本框才被激活。 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。该因子是指一个限定峰的拖尾对前延的最大比率。仅当选择 Constrain Peak Width (限定峰宽) 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)	谷值检测近似方法若使用 Nearest RT Peak Identification (最接近保留时间峰识别) 标准, 峰信噪比值必须大于或等于该参数值。为了识别化合物, TraceFinder 应用程序会忽略信噪比值小于 S/N Threshold (信噪比阈值) 的所有色谱图峰。 范围: 0.0 (所有峰) 至 999.0  只对定量方法可用。
Noise Method (噪声方法)	选项有 INCOS (单遍算法) 或 Repetitive (多遍算法)。  INCOS (单遍算法): 利用单遍算法来确定噪声水平。  Repetitive (多遍算法): 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 (单遍算法) 噪声算法更准确, 但分析所需时间更长。
Min Peak Width (最小峰宽)	一个峰所要求的最小扫描次数。 默认: 3 范围: 0 至 100 次扫描

表 24. ICIS 的 Detect (检测) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Multiplet Resolution (多重分辨率)	两个潜在峰的峰尖之间扫描的最小间距。这是确定两个峰是否已解析的过滤器。 默认: 10 范围: 1 至 500 次扫描
Area Tail Extension (峰面积尾扩展)	超过峰端点进行的扫描次数, 用于均分强度。 默认: 5 范围: 0 至 100 次扫描
Area Scan Window (峰面积扫描窗口)	峰尖两侧允许的扫描次数。零值是指包括在峰面积积分中的所有扫描 (峰起点到峰终点)。 默认: 0 范围: 0 至 100 次扫描
RMS (均方根)	指定 TraceFinder 应用程序计算噪声为 RMS (均方根) 值。默认情况下, 应用程序使用 Peak To Peak (峰对峰) 进行噪声计算。如果手动确定噪声区域, RMS (均方根) 将自动选中。
<b>快捷菜单</b>	
Apply to All Peaks in Compound (应用至化合物中的所有峰)	采用 Detect (检测) 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。
Apply to All Peaks in Method (应用至方法中的所有峰)	采用 Detect (检测) 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)	采用 Detect (检测) 页面上的当前设置, 更新方法中 ICIS 灵敏度模式下的所有化合物。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 40. Avalon 的 Detect (检测) 页面

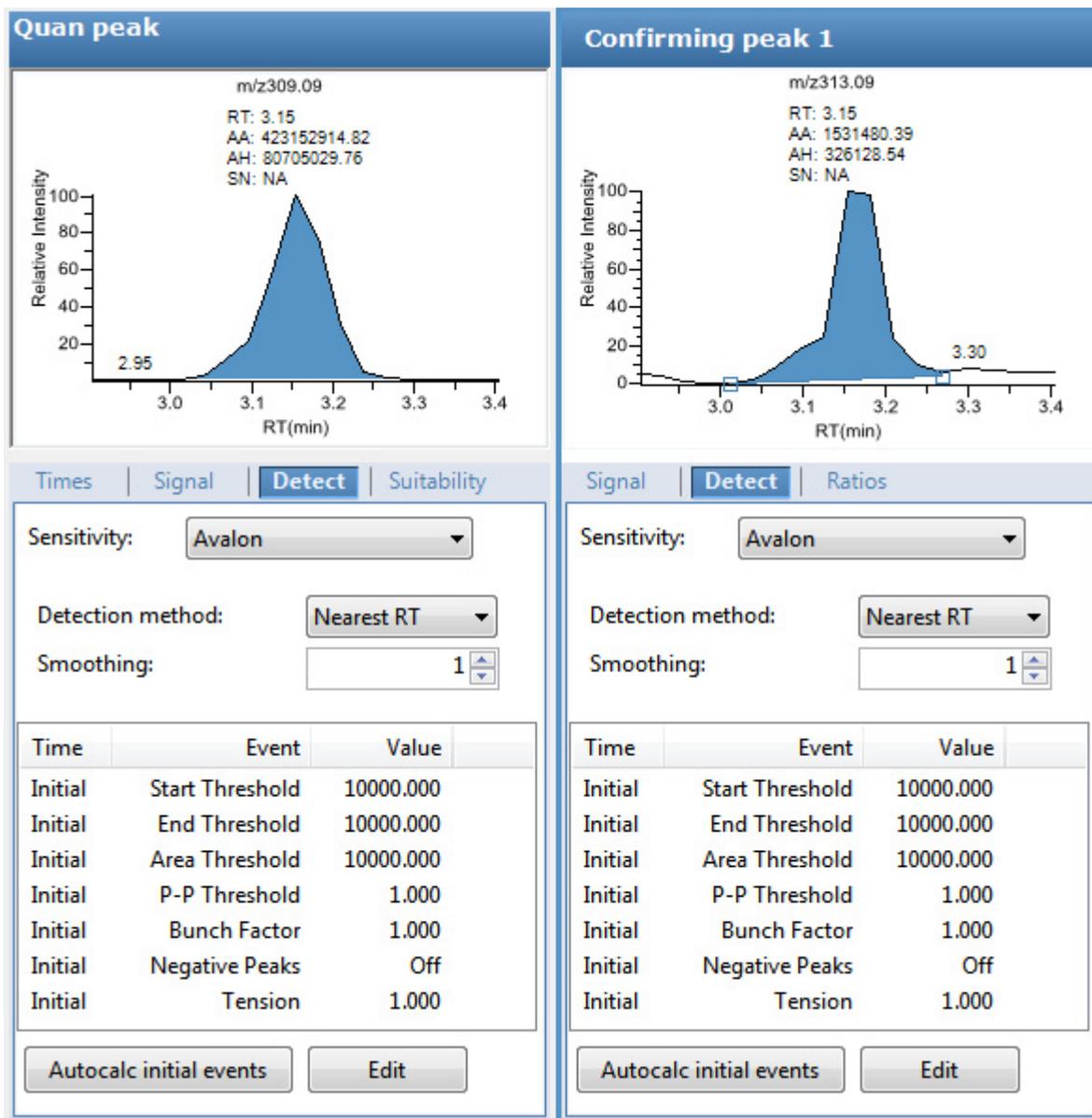


表 25. Avalon 的 Detect (检测) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

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 (最接近的保留时间): 使用色谱图中具有最接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, 确定要对当前成分峰数据执行的平滑程度。 默认: 1 范围: 从 1 至 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。

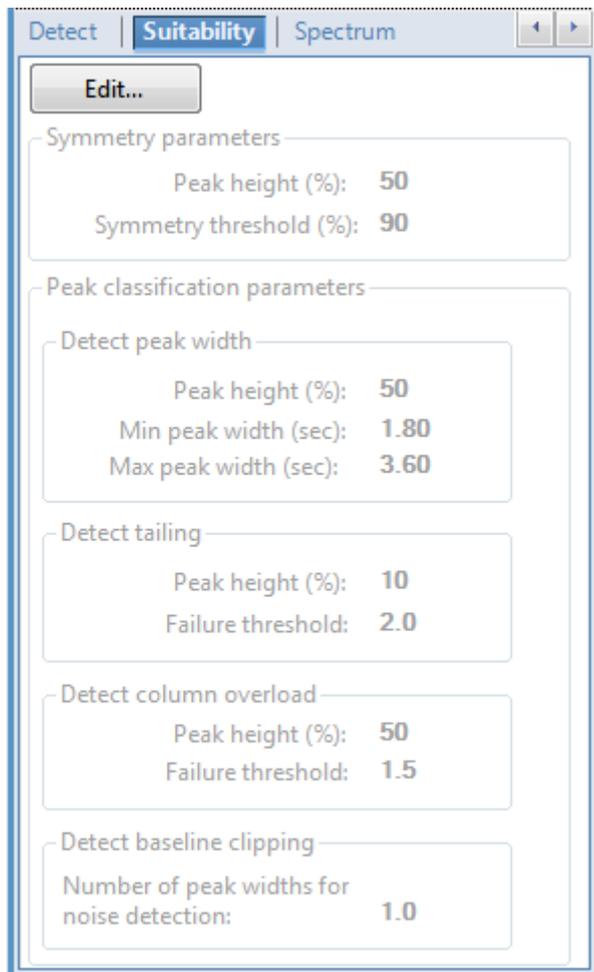
表 25. Avalon 的 Detect (检测) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Edit (编辑)	打开 Avalon Event List (Avalon 事件列表) 对话框。参阅第 53 页上的“Avalon Event List (Avalon 事件列表)”。
<b>快捷菜单</b>	
Apply to All Peaks in Compound (应用至化合物中的所有峰)	采用 Detect (检测) 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。
Apply to All Peaks in Method (应用至方法中的所有峰)	采用 Detect (检测) 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)	应用程序采用 Detect (检测) 页面上的当前设置更新方法中 Avalon 灵敏度模式下的所有化合物。对 Avalon 灵敏度模式下的定量和确认离子峰都应用这些更新。

## Suitability (适用性)

通过 Suitability (适用性) 页面来确定色谱柱是否正在降解, 并识别与目标物同时洗脱的可疑峰。前次进样过程中残留的高度保留的化合物可能会产生与目标物同时洗脱的可疑峰, 这个峰一般比预期峰形更宽。频繁出现拖尾峰通常表示色谱柱正在降解。

Suitability (适用性) 页面显示了处理过程中用于检查色谱峰适用性的参数值。用户可以在 System Suitability (系统适用性) 对话框中编辑这些参数。



### ❖ 若要设置系统适用性参数

1. 单击 **Edit (编辑)**。

System Suitability (系统适用性) 对话框打开。参阅 [System Suitability \(系统适用性\) 对话框](#)。

2. 若要执行对称性检测, 执行以下操作:
  - a. 选中 Symmetry Parameters (对称性参数) 复选框。
  - b. 在 Peak Height (峰高) 框内输入一个用于对称性检测的峰高。
  - c. 在 Symmetry Threshold (对称性阈值) 框内输入一个用于对称性检测的阈值。

3. 若要执行分类检测，执行以下操作：
  - a. 选中 Peak Classification Parameters (峰分类参数) 复选框。
  - b. 若要调整 Xcalibur 峰宽测试阈值，在 Detect Peak Width (检测峰宽) 区域输入参数。
    - 若要输入检测峰高，在 Peak Height (峰高) 框内输入一个值。
    - 若要输入最小峰宽阈值，在 Min Peak Width (最小峰宽) 框内输入一个值。
  - c. 若要调整 Xcalibur 峰拖尾检测，在 Detect Tailing (检测拖尾) 区域输入参数。
    - 若要输入检测峰高，在 Peak Height (峰高) 框内输入一个值。
    - 若要输入峰拖尾的阈值，在 Failure Threshold (失效阈值) 框内输入一个值。
  - d. 若要调整 Xcalibur 色谱柱过载测试，在 Detect Column Overload (检测色谱柱过载) 区域输入参数。
    - 若要输入检测峰高，在 Peak Height (峰高) 框内输入一个值。
    - 若要输入峰拖尾的阈值，在 Failure Threshold (失效阈值) 框内输入一个值。
  - e. 若要调整 Xcalibur 基线裁剪检测，在 Detect Baseline Clipping (检测基线裁剪) 区域输入参数。

若要指定检测窗口，在 Number of Peak Widths for Noise Detection (噪声检测的峰宽数) 框内输入一个值。
4. 若要保存设置，单击 **OK (确定)**。

图 41. System Suitability (系统适用性) 对话框

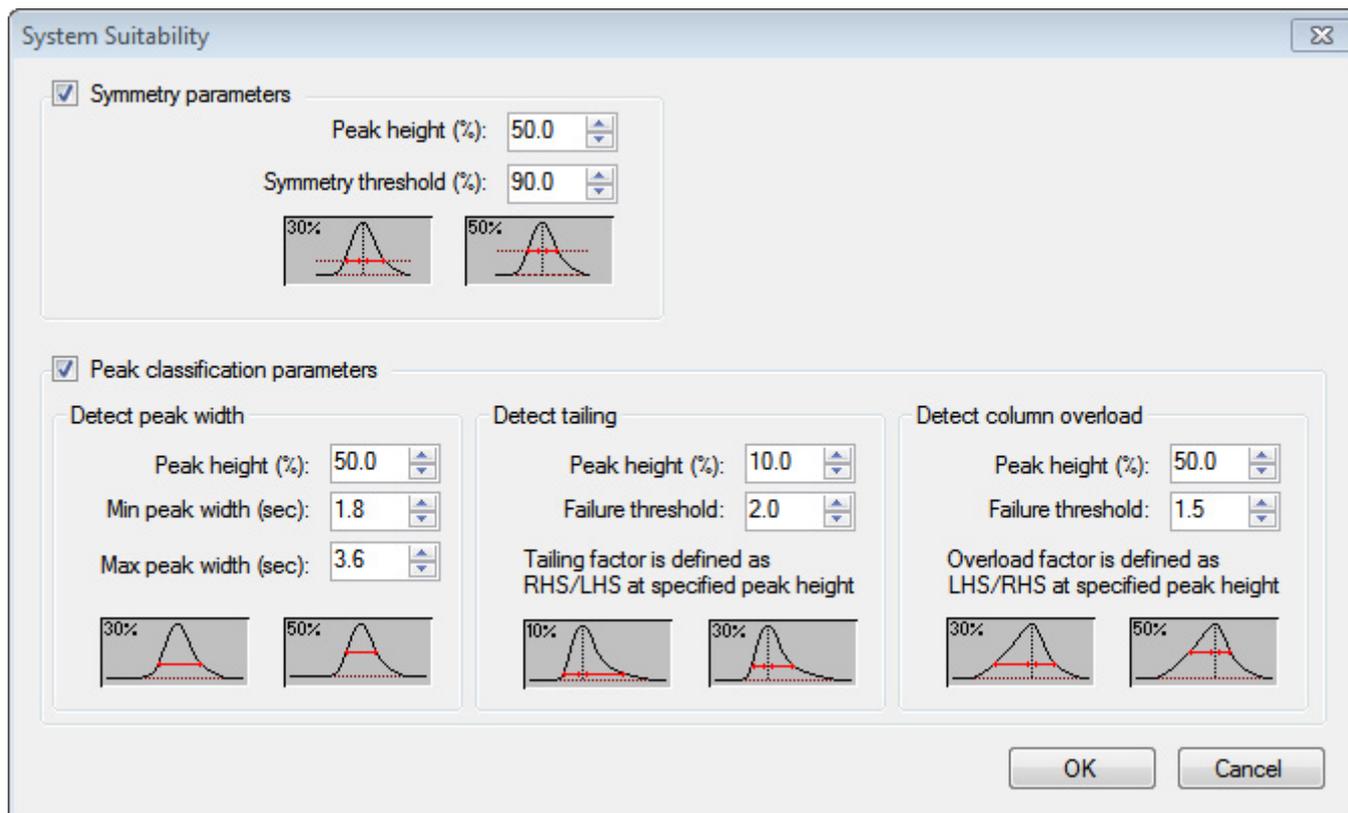


表 26. System Suitability (系统适用性) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
<b>Symmetry Parameters (对称性参数)</b>	
Peak Height (峰高)	用于对比左右两侧峰宽对称性的峰高百分比值。  在峰高的 30% 和 50% 处测量左右两侧的峰宽
Symmetry Threshold (对称性阈值)	被认为对称且通过适用性测试的最小百分比差值。
<b>Peak Classification Parameters (峰分类参数)</b>	
Detect Peak Width (检测峰宽)	确定在指定峰高百分比处测得的峰两侧的最小峰宽值。
Peak Height (峰高)	用于测量全部峰宽的峰高百分比值。  在峰高的 30% 和 50% 处测量的全部峰宽
Min Peak Width (最小峰宽)	通过适用性测试所要求的最小峰宽 (在指定峰高百分比处测得的)。
Max Peak Width (最大峰宽)	通过适用性测试所要求的最大允许峰宽 (在指定峰高百分比处测得的)。

表 26. System Suitability (系统适用性) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Detect Tailing (检测拖尾)	在指定峰高百分比处, 峰右侧的宽度除以峰左侧的宽度。
Peak Height (峰高)	用于测量左右两侧峰宽的峰高百分比值。  <span style="margin-left: 20px;">在峰高的 10% 和 30% 处测量左右两侧的峰宽</span>
Failure Threshold (失效阈值)	通过适用性测试所要求的 Minimum Detect Tailing (最小检测拖尾) 值 (RHS/LHS)。
Detect Column Overload (检测色谱柱过载)	在指定峰高百分比处, 峰左侧的宽度除以峰右侧的宽度。
Peak Height (峰高)	用于测量左右两侧峰宽的峰高百分比值。  <span style="margin-left: 20px;">在峰高的 30% 和 50% 处测量左右两侧的峰宽</span>
Failure Threshold (失效阈值)	通过适用性测试所要求的 Minimum Detect Column Overload (最小检测色谱柱过载) 值 (LHS/RHS)。

## Spectrum (质谱图)

利用 Spectrum (质谱图) 页面保存定量峰或化合物的参考质谱。

有关 Spectrum (质谱图) 页面上所有快捷菜单命令的详细说明, 参阅第 159 页上的“Spectrum (质谱图) 页面”。

按照以下步骤进行操作:

- 若要创建参考质谱图
- 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

### ❖ 若要创建参考质谱图

1. 点击定量峰色谱图窗格中的一个峰。

该峰的质谱图显示在 Spectrum (质谱图) 窗格中。

2. 右击 Spectrum (质谱图) 窗格并从快捷菜单中选择 **Apply Background Subtraction to Peak and Set as Reference Spectrum (应用峰背景扣除并设置为参考质谱图)**。

应用程序在定量处理期间使用已扣除背景的参考质谱图, 并将该已扣除背景的参考质谱图 (在扫描标题上标记有 BS) 报告为 Quantitation Report - 2 (定量报告 -2) 报告上每个化合物的最后扫描。

**注释** 仅当用户在主方法的 General (常规) 页面上选择了一个背景扣除方法时, 该命令才可用。参阅第 105 页上的“编辑 General (常规) 页面”。

### ❖ 若要更新确认离子比率

1. 点击定量峰色谱图窗格中的一个峰。

该峰的质谱图显示在 Spectrum (质谱图) 窗格中。

2. 右击 Spectrum (质谱图) 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. 点击色谱图窗格中的一个峰。

该峰的质谱图显示在 Spectrum (质谱图) 窗格中。

2. 在 Spectrum (质谱图) 窗格中, 将光标停留在某个离子的  $m/z$  值上方。

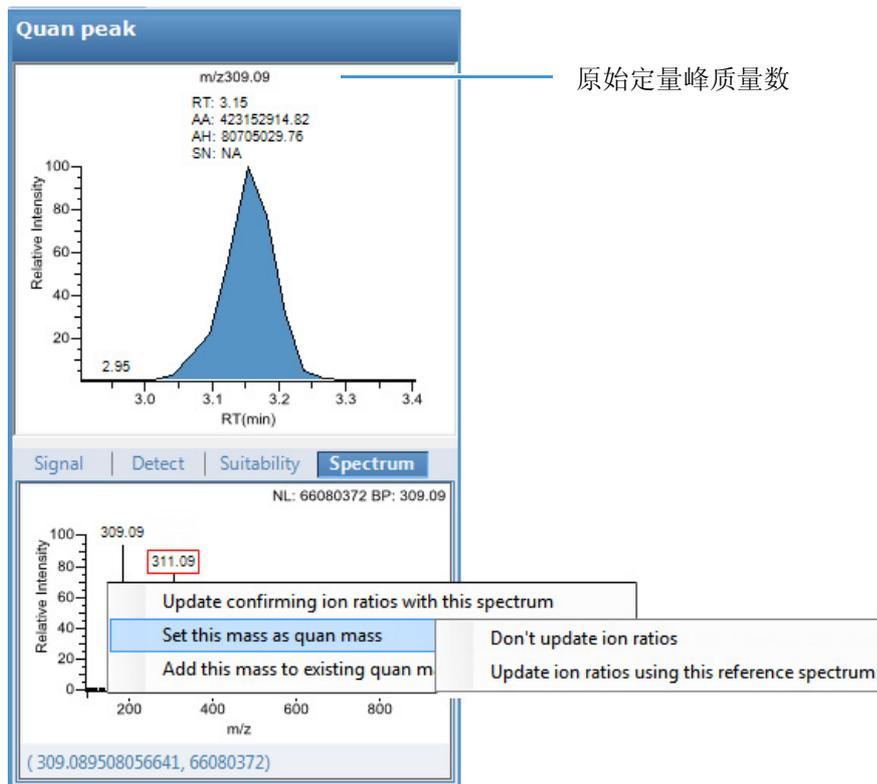
该离子的  $m/z$  值周围出现一个红色框, 表示已选中该离子。

3. 右击并从快捷菜单中选择以下命令之一：

- Set This Mass as Quan Mass (设置该质量数为定量质量数) > Don't Update Ion Ratios (不更新离子比率)
- Set This Mass as Quan Mass (设置该质量数为定量质量数) > Update Ion Ratios Using This Reference Spectrum (利用该参考谱图更新离子比率)

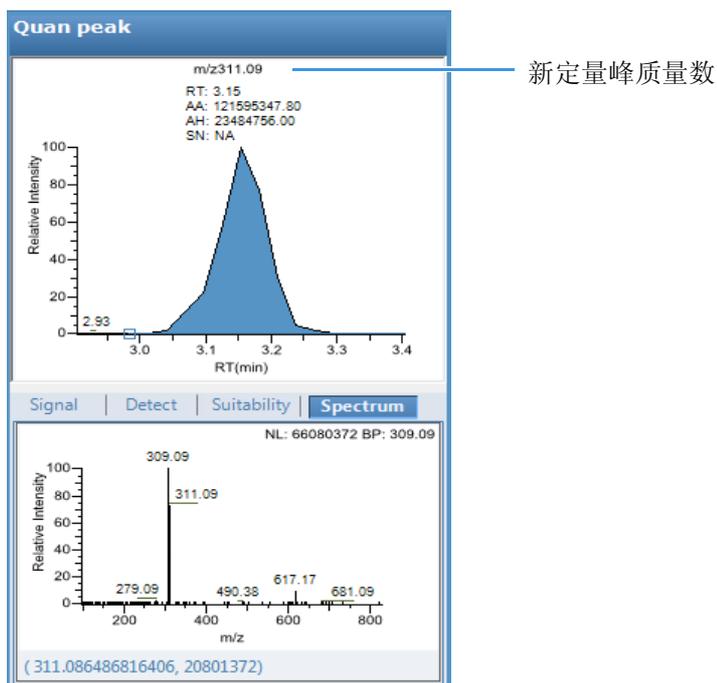
以下示例显示了一个原始定量峰和一个具有已更新定量质量数的定量峰。

图 42. 原始定量峰质量数示例



TraceFinder 应用程序采用所选质量数替换原始定量质量数。

图 43. 已更新定量峰质量数示例



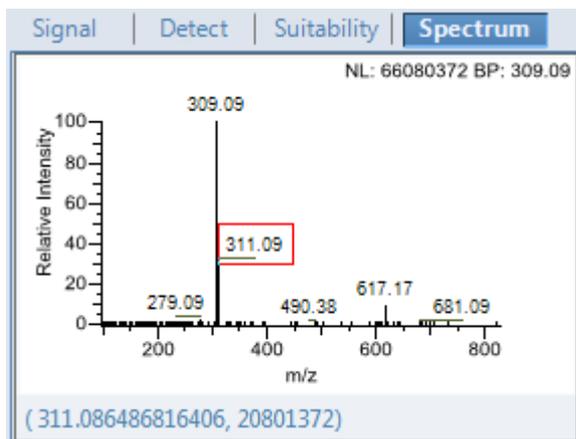
❖ 若要将离子叠加得到累积信号

1. 在 Spectrum (质谱图) 窗格中, 将光标停留在某个离子的  $m/z$  值上方。  
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** (将该质量数添加到已有定量质量数范围)。

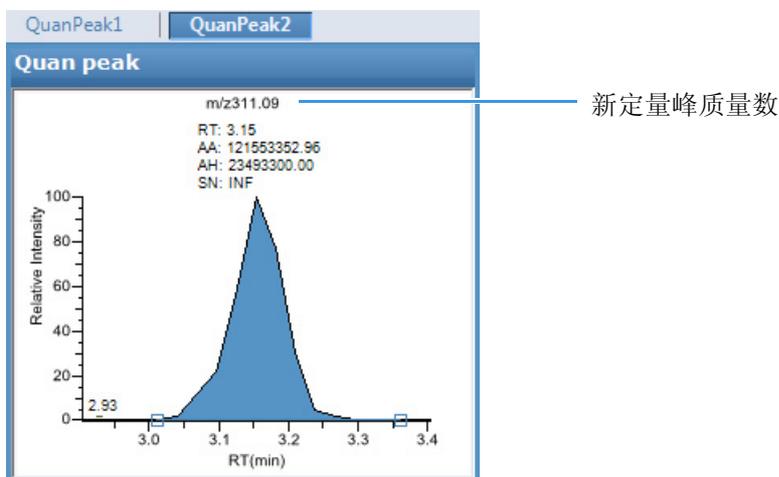
现在可以更新离子比率, 以调整确认离子与新定量峰总信号的对比。

❖ 若要将定量峰添加到现有的化合物

1. 点击 Quan Peak (定量峰) 色谱图窗格中的峰。  
该峰的质谱图显示在 Spectrum (质谱图) 窗格中。
2. 在 Spectrum (质谱图) 窗格中, 将光标停留在某个离子的  $m/z$  值上方。  
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. 点击色谱图窗格中的定量峰。

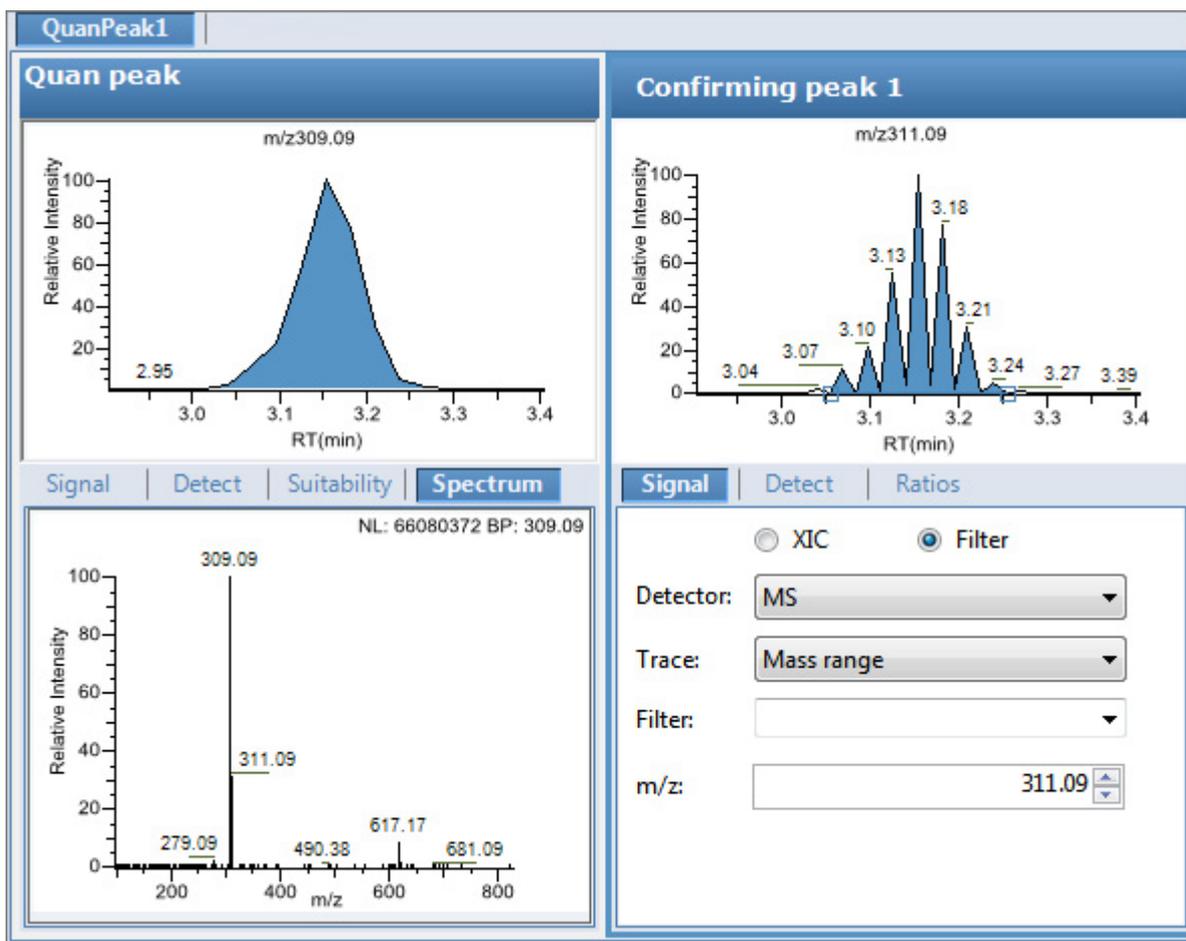
该峰的质谱图显示在 Spectrum (质谱图) 窗格中。

2. 在 Spectrum (质谱图) 窗格中, 将光标停留在某个离子的  $m/z$  值上方。

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证峰。



❖ 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)。

## Spectrum (质谱图) 页面

利用 Spectrum (质谱图) 页面上的快捷菜单命令保存定量峰或化合物的参考质谱。

图 44. Spectrum (质谱图) 页面

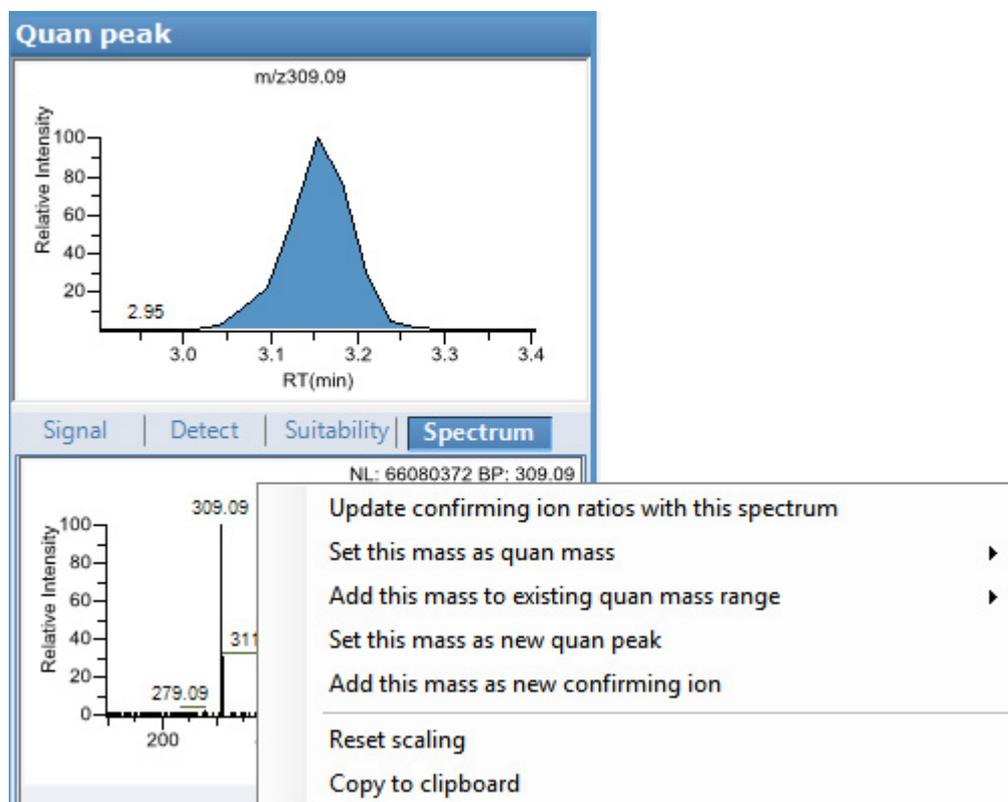


表 27. Spectrum (质谱图) 页面快捷菜单命令

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数添加到定量峰所使用的定量质量数上。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中。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对比。
Set This Mass as New Quan Peak (设置该质量数为新定量峰)	将新定量峰添加到已存在的化合物中。
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峰添加到现有的化合物中。
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)

使用 Library (库) 页面指定库匹配的标准。有关 Library (库) 页面上所有功能的详细说明, 参阅 [Library \(库\) 页面](#)。

### ❖ 若要激活库匹配

1. 选择 **Enable (启动)** 复选框。
2. 从 Library Search Type (库检索类型) 列表中, 选择用于匹配的库的类型。
  - **NIST**: 使用随 TraceFinder 应用程序一起安装的 NIST 库。参阅第 13 页上的“[安装 NIST 和 QED 库](#)”。

**注释** 由于 NIST 库很大, 因此使用该库时减慢了样品处理的速度。

- **Library Manager (库管理器)**: 使用用户在 Configuration (配置) 控制台上指定的库。参阅第 63 页上的“[筛选库](#)”。

应用程序检索该库, 将库中的碎片离子质谱图与化合物的离子质谱图进行匹配, 得到最高分数 (最佳匹配)。

3. 在 Score Threshold (分数阈值) 框内输入一个阈值。  
若要匹配一个化合物, 从库检索中得到的分数值必须高于用户输入的阈值。
4. (可选) 选中 **Use Reverse Library Searching Only (仅使用逆向库检索)** 复选框。  
逆向检索方法将库条目与未知化合物进行对比 (正向检索将未知化合物的质谱图与库条目的质谱图进行对比)。

图 45. Library (库) 页面

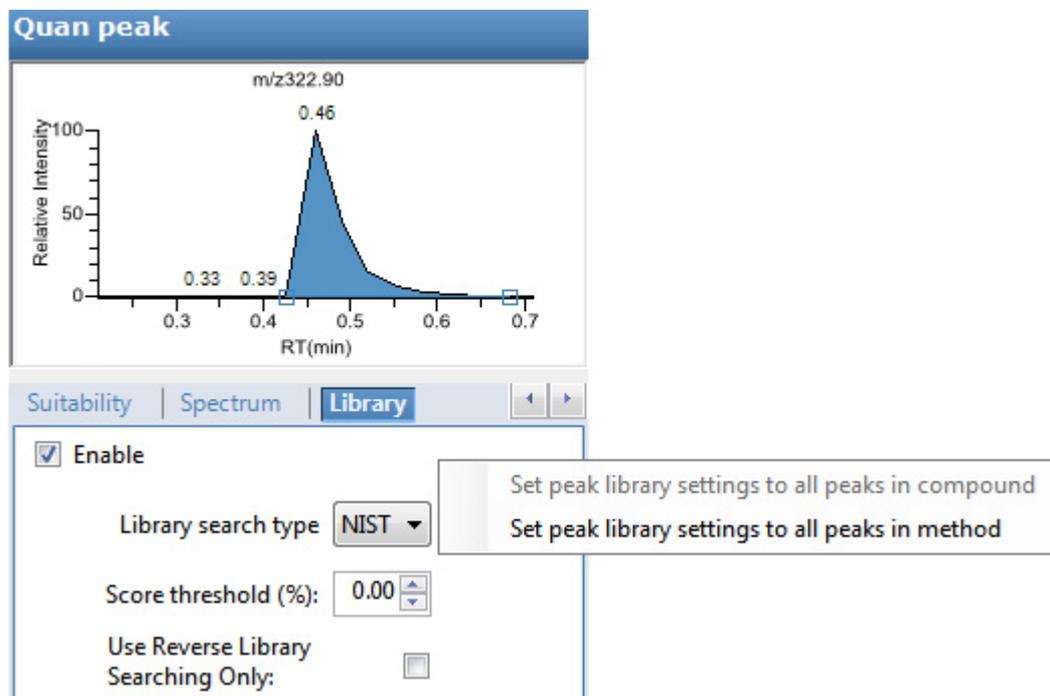


表 28. Library (库) 页面快捷菜单命令

命令	描述
Library Search Type (库检索类型)	指定库的类型, 以用于目标筛选。 <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>NIST</b>: 使用随 TraceFinder 应用程序一起安装的 NIST 库。参阅第 13 页上的“安装 NIST 和 QED 库”。</li> <li>• <b>Library Manager (库管理器)</b>: 使用用户在 Configuration (配置) 控制台上指定的库。参阅第 63 页上的“筛选库”。</li> </ul>
Score Threshold (分数阈值)	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。 默认: 0%
Use Reverse Library Searching Only (仅使用逆向库检索)	将库条目与未知化合物进行对比 (正向检索将未知化合物的质谱图与库条目的质谱图进行对比)。
<b>快捷菜单命令</b>	
Set Peak Library Settings to All Peaks in Compound (对化合物所有峰应用峰库设置)	采用 Library (库) 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。应用程序重新处理化合物中的所有峰并进行新的库检索。
Set Peak Library Settings to All Peaks in Method (对方法中所有峰应用峰库设置)	采用 Library (库) 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。当用户为一个已处理批次在本地方法中使用该命令时, 应用程序立即提示用户重新处理该批次以更新库设置。

## Ratios (比率)

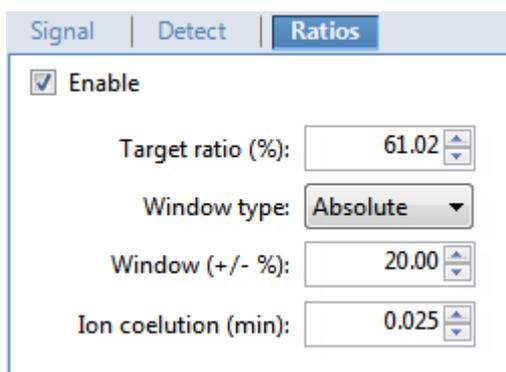
使用 Ratios (比率) 页面指定用于评估确认离子或定性离子的标准。TraceFinder 应用程序检测包含确认离子值但超出其可接受窗口的化合物，并将其在 Acquisition (采集) 模式和报告中标记出来。

有关 Ratios (比率) 页面上所有功能的详细说明，参阅 [Ratios \(比率\) 页面](#)。

### ❖ 若要指定离子比率标准

1. 选择 **Enable (启用)** 复选框以激活确认离子。
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) 列表中，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之间保留时间的最大差值。

在以下示例中，目标比率的预期值为 61.02%，窗口为 Absolute (绝对) 20%，因此该确认离子峰的可接受窗口为 41.02% 到 81.02%。



Signal	Detect	Ratios
<input checked="" type="checkbox"/> Enable		
Target ratio (%):		61.02
Window type:		Absolute
Window (+/- %):		20.00
Ion coelution (min):		0.025

然而，如果窗口类型为 Relative (相对)，则加减值为 61.02% 的 20% (即 12.20%)，因此该确认离子峰的可接受窗口为 48.82% 到 73.22%。

图 46. Ratios (比率) 页面

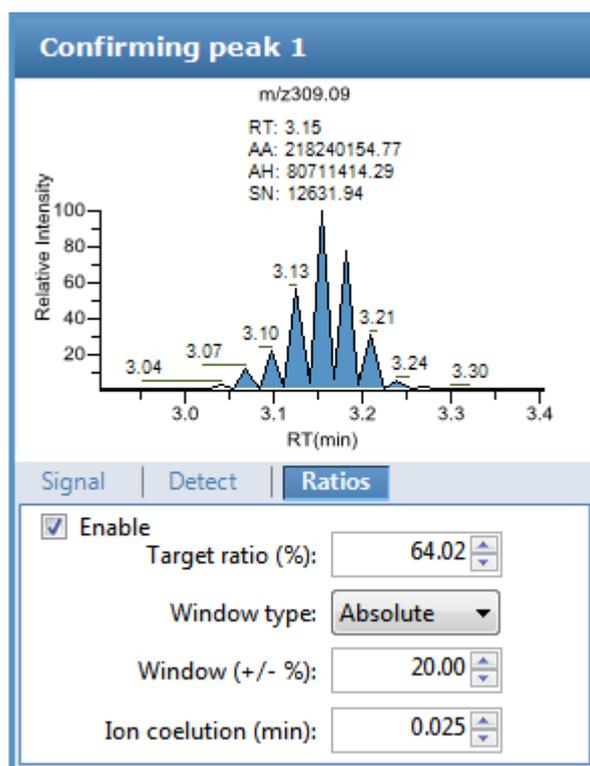


表 29. Ratios (比率) 页面参数

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值之间的理论比率。
Window Type (窗口类型)	用于确定可接受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之间保留时间的最大差值。
<b>快捷菜单命令</b>	
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 (窗口类型)、Window (窗口) 和 Ion Coelution (离子共洗脱) 值复制到化合物的所有确认离子峰上, 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 (窗口类型)、Window (窗口) 和 Ion Coelution (离子共洗脱) 值复制到方法的所有定量峰上, 并更新该方法。

## Calibration (校正)

通过 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品的初始校正评估。

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 (采集) 模式中修改校正方法。

通常, 常规定量采用一个已测得的响应值 (峰面积或峰高) 来确定样品中化合物的含量。应用程序通过建立校正曲线, 对比一个未知量目标化合物的响应值与一个含已知量化合物的校正样品的响应值, 来内推目标化合物中的含量。

若要使用半定量处理, 用户将化合物的标准类型指定为 Estimated (评估), 然后将其他化合物识别为关联化合物。应用程序使用关联化合物的校正曲线来计算目标化合物中的含量, 而不是使用目标化合物来创建校正曲线。

若要使用一个真实的样品进行校正, 将化合物的标准类型指定为 Std Addition (加标)。自动进样器将样品分成几个部分 (一部分未加标, 至少两部分加标)。若要使所有样品条件保持一致, 自动进样器将已选量的标准品加入样品瓶中, 并添加一定体积的溶剂, 计算该溶剂体积以保持每个样品瓶中液体总体积恒定。

有关 Calibration (校正) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 166 页上的“Calibration (校正) 页面”。

按照以下步骤进行操作:

- 若要指定化合物的内标物类型
- 若要指定化合物的评估标样类型
- 若要指定化合物的加标标样类型

### ❖ 若要指定化合物的内标物类型

1. 在 Identification (识别) 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 115 页上的“Identification (识别)”。
2. 在 Calibration (校正) 页面上执行以下操作:
  - a. 在 Standard Type (标样类型) 列表中, 选择 **Internal (内标化合物)**。
  - b. 在 ISTD (内标化合物) 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 (识别) 页面上指定为内标的化合物。

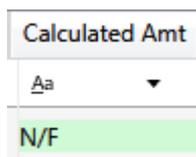
若要查看 Analysis (分析) 模式下的内标峰, 参阅第 467 页上的“Compound Details (化合物详细信息)”。

## ❖ 若要指定化合物的评估标样类型

1. 在 Standard Type (标样类型) 列表中, 选择 **Estimated (评估)**。
2. 在 Linked Compound (关联化合物) 列, 选择用户想要链接到该化合物的方法中的任意其他化合物。

Estimation Method (评估方法) 值默认为 Ext Curve (外推曲线), 且为只读。

Data Review (数据查看) 中的 Compound Results (化合物结果) 将 Calculated Amt (计算量) 值采用绿色高亮显示为 N/F (未找到)。



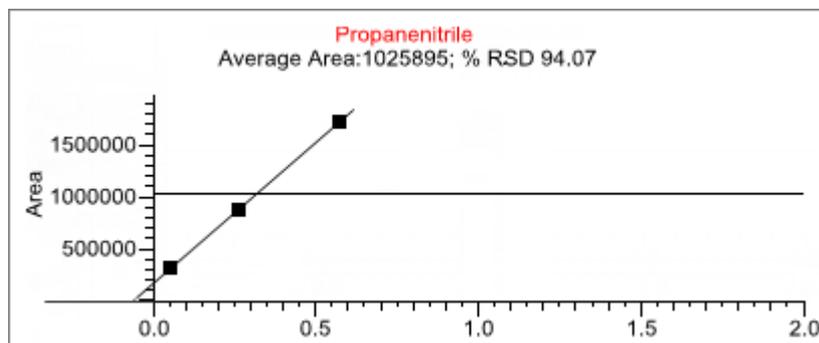
## ❖ 若要指定化合物的加标标样类型

在 Standard Type (标样类型) 列表中, 选择 **Std Addition (加标)**。

- Curve Type (曲线类型) 列值默认为 Linear (线性), 且为只读。
- Origin (原点) 列值默认为 Ignore (忽略), 且为只读。
- Weighting (加权) 列值默认为 Equal (相等), 且为只读。

当处理该样品时, 应用程序将样品分成几部分: 一部分不加标, 至少两部分加标。应用程序根据 *截距/斜率* 计算分析物的浓度, 其中 *截距* 是回归线的  $y$ - 截距, *斜率* 是回归线的斜率。

当使用 Std Addition (加标) 校正时, 校正曲线上的  $y$ - 斜率可能不是 0, 如下图所示:



Data Review (数据查看) 中的 Compound Results (化合物结果) 显示以下内容:

- Calculated Amt (计算量) 值是根据校正曲线计算得到的加标量。
- Theoretical Amt (理论量) 值是方法中指定的水平值。
- Sample Amt (样品量) 值是加标标样中的实际量加上每个标样中的加标量。

## Calibration (校正) 页面

通过 Calibration (校正) 页面上的功能指定数学模型, 该模型用于准备一个或多个校正标样的初始校正评估。

图 47. Calibration (校正) 页面

Acquisition List		Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	Chk Std levels	Real Time Viewer		
	RT	Compound	Compound type	Standard type	Response via	Curve type	Origin	Weighting	
1	0.00	Naphthalene, 1,5-dichlor...	Target Compound	Internal	Area	Linear	Ignore	Equal	
2	0.01	Pyrazinamide	Target Compound	External	Area	Linear	Ignore	Equal	
3	1.07	Methyl 2-furoate	Target Compound	Estimated					
4	1.32	Methyl 2-furoate *2*	Target Compound	Std Addition	Area	Linear	Ignore	Equal	

表 30. Calibration (校正) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

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 (目标化合物) 或 Internal Standard (内标化合物)。
Standard Type (标样类型)	指定为 Internal (内标化合物)、External (外标化合物)、Estimated (评估) 或 Std Addition (加标) 标样。
Response Via (响应方式)	使用峰面积或峰高。如果将标样类型设置为 Estimated (评估), 此列不被激活。
Curve Type (曲线类型)	指定为 Linear (线性)、Quadratic (二次方) 或 AverageRF (平均响应因子) 曲线类型。如果将标样类型设置为 Estimated (评估), 此列不被激活。如果将标样类型设置为 Std Addition (加标), 该列值默认为 Linear (线性) 且为只读。
Origin (原点)	对原点的处理包括 Ignore (忽略)、Include (包括) 或 Force (强制)。Origin (原点) 和 Weighting (加权) 列只在使用 Linear (线性) 或 Quadratic (二次方) 曲线类型时才可用。如果将标样类型设置为 Estimated (评估), 此列不被激活。如果将标样类型设置为 Std Addition (加标), 该列值默认为 Ignore (忽略) 且为只读。
Weighting (加权)	指定加权为 Equal (相等)、1/X、1/X <sup>2</sup> 、1/Y 或 1/Y <sup>2</sup> 。如果将标样类型设置为 Estimated (评估), 此列不被激活。如果将标样类型设置为 Std Addition (加标), 该列值默认为 Equal (相等) 且为只读。
Units (单位)	该单位和计算所得的值一起显示。
ISTD (内标化合物)	目标化合物或替代物的内标 (ISTD)。该列表显示所有化合物类型为 Internal Standard (内标化合物) 的化合物。仅当用户将标样类型设置为 Internal (内标化合物) 时, 该列才可用。
Amount (量)	ISTD (内标化合物) 的量。如果将标样类型设置为 Estimated (评估), 此列不被激活。

表 30. Calibration (校正) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Linked Compound (关联化合物)	仅当将标样类型设置为 Estimated (评估) 时, 该列才可用。欲建立链接的可用化合物列表不包含标样类型设置为 Estimated (评估) 的化合物。
Estimation Method (评估方法)	将标样类型设置为 Estimated (评估) 时, 该列不可用于编辑。 <ul style="list-style-type: none"><li>当关联化合物的化合物类型为 Target Compound (目标化合物) 时, 评估方法自动设置为 Ext Curve (外推曲线)。</li><li>当关联化合物的化合物类型为 Internal Standard (内标化合物) 时, 评估方法自动设置为 Ratio (比率)。</li></ul>
快捷菜单	Calibration (校正) 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 177 页上的“使用快捷菜单命令”。

## Calibration Levels (校正水平)

在主方法的 Calibration Levels (校正水平) 页面上, 可以指定用于校正的标样。只能编辑主方法的校正水平和浓度。当编辑本地方法时, 本页内容为只读。

有关 Calibration Levels (校正水平) 页面上所有功能的详细说明, 参阅 [Calibration Levels \(校正水平\) 页面](#)。

用户可以使用快捷菜单上的复制、粘贴功能, 将校正水平从一列复制到另一列中, 或者从一个主方法复制到其他主方法中。有关详细说明, 参阅第 172 页上的“复制和粘贴列值”。

### ❖ 若要指定校正水平和浓度

1. 选择要为其指定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-			

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。

	Level
1	Cal1
 2	Cal2
* 3	

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. 再次点击该单元格使其变为可编辑状态。
  - c. 输入浓度值。

5. 为与第一个化合物相关的所有校正水平重复步骤 4。

	RT	Compound	Cal1	Cal2	Cal3
1	3.15	Pyrazinamide	5.000	10.000	15.000
2	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-			

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 (向下复制)**。

图 48. Calibration Levels (校正水平) 页面

Acquisition List	Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	QC Check levels	Real Time V
	RT	Compound	Cal1	Cal2	Cal3	
1	3.14	Propanenitrile	5.000	10.000	15.000	
2	3.15	Pyrazinamide				
▶ 3	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-				
4	4.70	Pyrazinamide *2*				

Manage Calibration levels	
	Level
1	Cal1
2	Cal2
3	Cal3

表 31. Calibration Levels (校正水平) 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。该时间为化合物保留在色谱柱中的总时间。
Compound (化合物)	化合物名称。
CalLevel_1-CalLevel_n (校正水平 1- 校正水平 n)	用户指定的化合物的校正水平。用户在此输入的名称变成了校正水平的列标题。
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 (校正水平) 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 177 页上的“使用快捷菜单命令”。

## QC Check Levels (质控标样水平)

使用主方法的 QC Check Levels (质控标样水平) 页面指定 QC Check (质控标样) 水平的标样。用户只能编辑主方法的 QC Check (质控标样) 水平。当编辑本地方法时, 本页内容为只读。有关 QC Check Levels (质控标样水平) 页面上所有功能的详细说明, 参阅 [QC Check Levels \(质控标样水平\) 页面](#)。

用户可以使用快捷菜单上的复制、粘贴功能, 将 QC Check (质控标样) 水平从一列复制到另一列中, 或者从一个主方法复制到其他主方法中。有关详细说明, 参阅第 172 页上的“复制和粘贴列值”。

### ❖ 若要指定 QC Check (质控标样) 水平和浓度

1. 选择要为其定义 QC Check (质控标样) 水平、百分比测试值和浓度的化合物。

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

2. 在 Manage QC Check Levels (管理质控标样水平) 区域, 为首个 QC Check (质控标样) 水平输入名称。

TraceFinder 应用程序在正在编辑的行下方添加一个新的空白 QC Check Levels (质控标样水平) 行。

3. 输入 % Test (测试百分比) 值。

% Test 是每个 QC Check (质控标样) 水平的已知量与计算量 (测量值) 之间的可接受差值 (以百分比表示)。

	Level	% Test
1	Level1	5.00
* 2		NA

4. 继续为百分比测量添加 QC Check (质控标样) 水平和值。

	Level	% Test
1	Level1	5.00
2	Level2	5.00
▶ 3	Level3	5.00

添加完 QC Check (质控标样) 水平之后, 可以指定每种化合物每个水平的浓度。

5. 若要向表中输入浓度值, 执行下列操作:
  - a. 选择首个 QC Check (质控标样) 水平表单元格。
  - b. 再次点击该单元格使其变为可编辑状态。
  - c. 输入浓度值。

6. 为与第一个化合物相关的所有 QC Check (质控标样) 水平重复步骤 5。

Acquisition List	Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	QC Check levels	Real Time \
	RT	Compound		Level1	Level2	Level3
1	3.14	Propanenitrile		5.000	10.000	15.000
2	3.15	Pyrazinamide				

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 (向下复制)**。

图 49. QC Check Levels (质控标样水平) 页面

Acquisition List	Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	QC Check levels	Real Time V
	RT	Compound		Level1	Level2	Level3
▶ 1	3.14	Propanenitrile		5.000	10.000	15.000
2	3.15	Pyrazinamide		5.000	10.000	15.000
3	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-		5.000	10.000	15.000

Manage QC Check levels		
	Level	% Test
▶ 1	Level1	5.00
2	Level2	5.00
3	Level3	5.00

表 32. QC Check Levels (质控标样水平) 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。
Level_1–Level_n (水平 1- 水平 n)	用户指定的化合物的质量控制水平。
<b>Manage QC Check Levels (管理质控标样水平)</b>	
Level (水平)	用户指定的质量控制水平名称。用户在此输入的名称变成了 QC Check (质控标样) 水平的列标题。
% Test (测试百分比)	每个 QC Check (质控标样) 水平的已知量与计算量 (测量值) 之间的可接受差异值 (以百分比表示)。
快捷菜单	QC Check Levels (质控标样水平) 页面使用右击出现的快捷菜单。参阅第 177 页上的“使用快捷菜单命令”。

## 复制和粘贴列值

用户可以使用快捷菜单上的复制、粘贴功能，将校正水平从主方法中的一列复制到另一列中，或者从一个主方法复制到其他主方法中。用户可以在任意 Compounds (化合物) 和 QAQC (质保质控) 视图中含数据表的页面上使用复制、粘贴功能。

用户将表格中的值复制到剪切板后，可以将其粘贴至文本应用程序，如记事本、电子邮箱、电子数据表、同一主方法中的其他表格中，或者粘贴至其他主方法中。

**提示** 当将数据复制至应用程序而不是 TraceFinder 主方法表格中时，采用快捷菜单上的 Copy with Headers (带标题复制) 命令而不是 Copy (复制) 命令以保存列标题。

按照以下步骤进行操作：

- 若要将值从一个单元格复制到其他单元格
- 若要将一列中的所有值复制至其他列
- 若要复制多列
- 若要将整个表格复制至其他主方法

### ❖ 若要将值从一个单元格复制到其他单元格

1. 选中某个单元格中的值，复制到剪切板。

可以选择整个表格或只选择一个单元格中的值。



2. 右击并从快捷菜单中选择 **Copy (复制)**。

应用程序将已选单元格值或已选的单元格复制至剪切板。

3. 在本主方法或其他主方法中，选中想要覆盖的单元格值或表格。

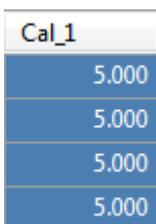
- 若要复制单元格值，可以选中单元格值或只点击单元格。
- 若要复制整个单元格，必须选中要覆盖的表格。

4. 右击并从快捷菜单中选择 **Paste (粘贴)**。

应用程序采用已复制至剪切板的值替换选中的值。

### ❖ 若要将一列中的所有值复制至其他列

1. 使用 SHIFT 键选中要复制的列。



Cal_1
5.000
5.000
5.000
5.000

2. 右击并从快捷菜单中选择 **Copy (复制)**。

3. 在本主方法或其他主方法中，使用 SHIFT 键选中要覆盖的列。

Cal_3
10.000
10.000

4. 右击并从快捷菜单中选择 **Paste (粘贴)**。

应用程序采用已复制至剪切板的单元格覆盖选中的单元格。

Cal_3
5.000
5.000
5.000
5.000

#### ❖ 若要复制多列

1. 使用 SHIFT 键选中要复制的列。

Cal_1	Cal_2
5.000	10.000
5.000	10.000
5.000	10.000
5.000	10.000

2. 右击并从快捷菜单中选择 **Copy (复制)**。
3. 在本主方法或其他主方法中，使用 SHIFT 键选中要覆盖的列。

Cal_A	Cal_B

4. 右击并从快捷菜单中选择 **Paste (粘贴)**。

应用程序采用已复制至剪切板的单元格覆盖选中的单元格。

Cal_A	Cal_B
5.000	10.000
5.000	10.000
5.000	10.000
5.000	10.000

❖ 若要将整个表格复制至其他主方法

1. 使用 SHIFT 键选中表格中的所有列。

LOD (Detection limit)	LOQ (Quantitation limit)	LOR	ULOL (Linearity limit)	Carryover limit
10.000	20.000	30.000	0e0	0e0
10.000	20.000	30.000	0e0	0e0

2. 右击并从快捷菜单中选择 **Copy (复制)**。
3. 在其他主方法中，使用 SHIFT 键选中要覆盖的列。

LOD (Detection limit)	LOQ (Quantitation limit)	LOR	ULOL (Linearity limit)	Carryover limit
0.000	0.000	0.000	0e0	0e0
0.000	0.000	0.000	0e0	0e0

4. 右击并从快捷菜单中选择 **Paste (粘贴)**。

应用程序采用已复制至剪切板的单元格覆盖选中的单元格。

**注释** 当剪切板中的数据单元格比要粘贴的已选目标单元格多时，应用程序覆盖选中的单元格并报告：剪切板中的内容已被缩减以适应该表格。

## Real Time Viewer (实时查看器)

当在 Acquisition (采集) 模式下执行采集或在 Method Development (方法开发) 模式下采集开发批次时, 利用 Real Time Viewer (实时查看器) 页面指定在 Real Time Status (实时状态) 窗格中显示的谱图。参阅第 339 页上的“Real Time Status (实时状态) 窗格”。

图 50. Real Time Viewer (实时查看器) 页面

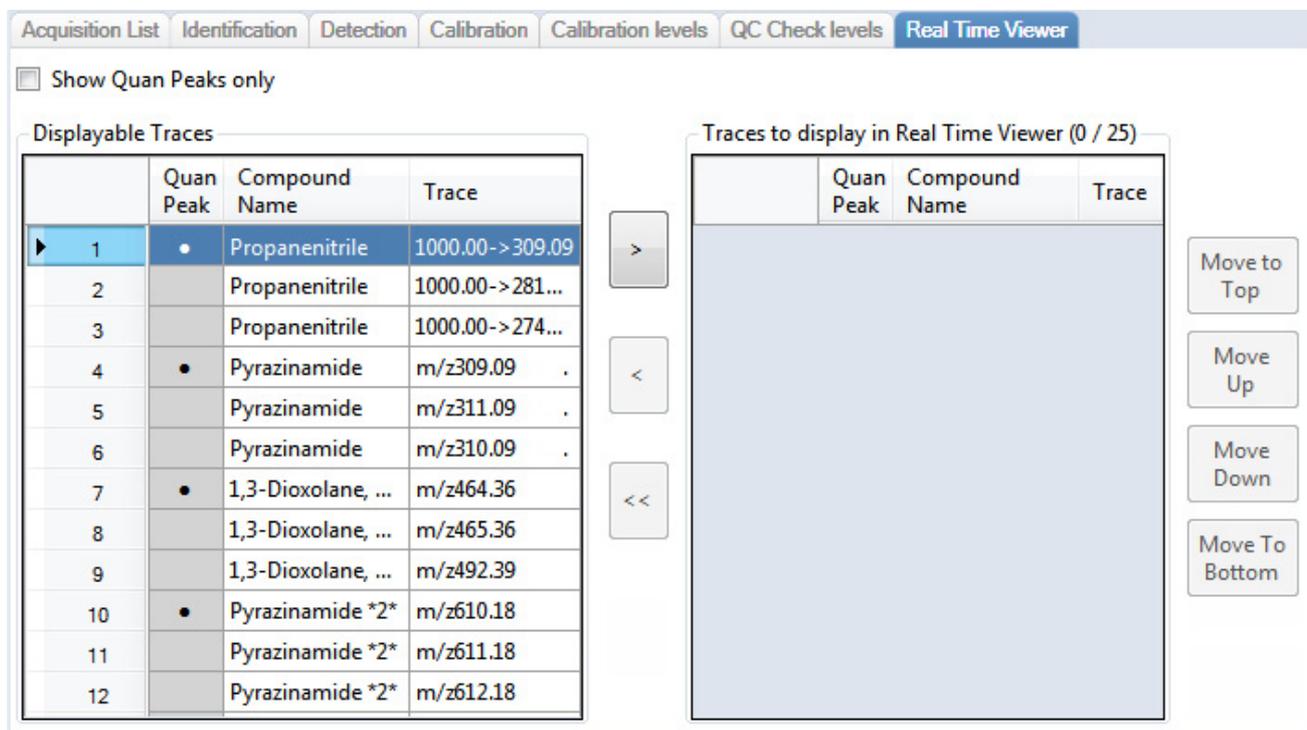


表 33. Real Time Viewer (实时查看器) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述															
Show Quan Peaks Only (仅显示定量峰)	化合物列表中仅显示定量峰。在 Quan Peak (定量峰) 列中以黑点标示出定量峰。 <input checked="" type="checkbox"/> Show Quan Peaks only															
<b>Displayable Traces</b> (可显示谱图)	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Quan Peak</th> <th>Compound Name</th> <th>Trace</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>Propanenitrile</td> <td>1000.00-&gt;309.09</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Pyrazinamide</td> <td>m/z309.09</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>1,3-Dioxolane, ...</td> <td>m/z464.36</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>Pyrazinamide *2*</td> <td>m/z610.18</td> </tr> </tbody> </table>	Quan Peak	Compound Name	Trace	1	Propanenitrile	1000.00->309.09	2	Pyrazinamide	m/z309.09	3	1,3-Dioxolane, ...	m/z464.36	4	Pyrazinamide *2*	m/z610.18
Quan Peak	Compound Name	Trace														
1	Propanenitrile	1000.00->309.09														
2	Pyrazinamide	m/z309.09														
3	1,3-Dioxolane, ...	m/z464.36														
4	Pyrazinamide *2*	m/z610.18														
Quan Peak (定量峰)	圆点代表定量峰谱图。未做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。															

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式

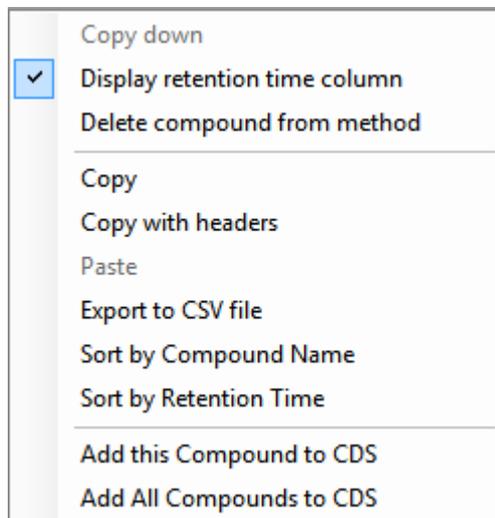
### 使用主方法

表 33. Real Time Viewer (实时查看器) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
	将所选谱图移动到 Traces to Display in Real Time Viewer (显示在实时查看器中的谱图) 窗格。
	将所选谱图移动到 Displayable Traces (可显示谱图) 窗格。
	将所有谱图移动到 Displayable Traces (可显示谱图) 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  。
<b>Traces to Display in Real Time Viewer (n/25)</b> (显示在实时查看器中的谱图, n/25)	在 Acquisition (采集) 模式下, 在实时显示中列出需要显示的谱图和显示次序。参阅第 352 页上的“实时谱图显示”。 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... (待显示谱图) 列表的顶部及实时显示中的第二位置。在 Acquisition (采集) 模式下的实时显示中, 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 (命令) 页面上的每个页面 (除 Acquisition List [采集列表] 和 Real Time Viewer [实时查看器] 页面外) 都使用右击快捷菜单命令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 34.** Compounds (命令) 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。参阅附录 C, “使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)”。
Display Retention Time Column (显示保留时间列)	显示或隐藏化合物列表中的 RT (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 电子数据表。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 电子数据表。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 电子数据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 34. Compounds (命令) 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。
Add All Compounds 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。

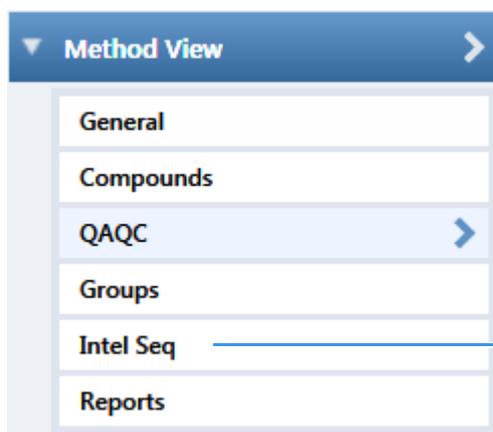
## 编辑 QAQC (质保质控) 页面

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。

在大多数 QAQC (质保质控) 页面上, 用户可以使用快捷菜单上的复制粘贴功能, 将表格中的值从一列复制到另一列中, 或者从一个主方法复制到其他主方法中。有关详细说明, 参阅第 172 页上的“复制和粘贴列值”。

### ❖ 若要打开 QAQC (质保质控) 页面

点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 QAQC (质保质控)。



仅当用户激活 Configuration (配置) 控制台上的 Intelligent Sequencing (智能排序) 时可用

从 Method View (方法视图) 的 QAQC (质保质控) 页面可以访问下列页面:

- Limits (限制)
- Calibration (校正)
- QC Check (质控标样)
- Negative (阴性对照)
- ISTD (内标化合物)
- Solvent Blank (溶剂空白)
- Threshold (阈值)
- Hydrolysis (水解)

## Limits (限制)

使用 Limits (限制) 页面指定用于定量结果的检查水平。定量结果出现在打印和电子报告上。用户还可以指定何时报告定量值, 取消在小于特定限制值时出报告。

图 51. Limits (限制) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Threshold	Hydrolysis
	RT	Compound	LOD (Detection limit)	LOQ (Quantitation limit)	LOR	ULOL (Linearity limit)	Carryover limit
▶ 1	3.14	Propanenitrile	0.000	0.000	0.000	0e0	0e0

表 35. Limits (限制) 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 (检测限)	检测限。可被检测到的最低量。通常取自方法检测限 (mdl) 研究。
LOQ (定量限)	定量限。能够可靠且精确地定量的最低量。这通常是最低校正量。
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 (线性上限)	线性上限。这通常是最高校正量。
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 (校正)

使用 Calibration (校正) 页面来指定可接受的初始校正标准。TraceFinder 应用程序将样品中每个化合物的初始校正结果与本页中的指定值进行对比。

在 Calibration (校正) 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 52. Calibration (校正) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Threshold	Hydrolysis
	RT	Compound	R <sup>2</sup> threshold	Max RSD (%)	Min RF	Max Amt Diff (%)	CV Test (%)
1	3.14	Propanenitrile	0.9900	20.00	0.000	20.00	0.000

表 36. Calibration (校正) 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。该时间为化合物保留在色谱柱中的总时间。
Compound (保留时间)	化合物名称。
R <sup>2</sup> Threshold (相关系数阈值)	用于可接受校正 (当处于线性或二次方模式中时) 的最小相关系数 ( $r^2$ )。
Max RSD (%) (最大相对标准偏差, %)	用于可接受校正 (当处于平均 RF 模式中时) 的最大相对标准偏差 (RSD)。 <b>注释</b> 该 RSD 值与 Data Review (数据查看) 中或 Compound Calibration Report (化合物校正报告) 中所使用的值不同。当用户选择 AverageRF (平均响应因子) 作为方法的曲线类型时, 应用程序使用该 RSD 值。参阅第 166 页上的“Calibration (校正) 页面”。
Min RF (最小响应因子)	用于可接受校正 (当处于平均 RF 模式中时) 的最小平均响应因子 (RF)。
Max Amt Diff (%) (最大偏差, %)	校正曲线数据点 (当处于线性或二次方模式中) 的计算浓度和理论浓度之间的最大偏差。
CV Test (%) (变异系数测试, %)	Coefficient of Variance (变异系数) 测试。变异系数百分比是指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。该计算是基于峰面积进行的。

## QC Check (质控标样)

利用 QC Check (质控标样) 页面查看持续进行的校正。TraceFinder 应用程序将样品中每个化合物的质控标样结果与使用本页中指定值的初始校正进行对比。

在 Quality Control (质控标样) 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 (质控标样) 样品中的计算浓度与理论值相比的最大偏差将设置在 Compounds (化合物) 页面中的 QC Levels (质控水平) 页中。

图 53. QC Check (质控标样) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Threshold	Hydrolys
	RT	Compound		Max RF Diff (%)	Min RF	CV Test (%)	
1	3.14	Propanenitrile		20.00	0.000	0.00	

表 37. QC Check (质控标样) 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 (%) (响应因子的最大偏差, %)	QC (质控标样) 样品的响应因子 (RF) 和校正 (当处于平均 RF 模式中时) 的平均响应因子之间的最大偏差。
Min RF (最小响应因子)	QC (质控标样) 样品的最小响应因子 (当处于平均 RF 模式下时)。
CV Test (%) (变异系数测试, %)	Coefficient of Variance (变异系数) 测试。变异系数百分比是指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。该计算是基于峰面积进行的。

## Negative (阴性对照)

Negative (阴性对照) 页面用于指定空白样品中目标化合物的可接受水平。TraceFinder 应用程序将样品中每个化合物的计算浓度与本页面中指定的最大浓度进行对比。可采用标记值的百分比形式或指定值的形式来输入最大浓度。

有关 Negative (阴性对照) 页面上所有功能的详细说明, 参阅 [Negative \(阴性对照\) 页面参数](#)。

在 Negative (阴性对照) 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

- 从 Method (方法) 列表框中选择下列方法之一:
  - % of LOD (检测限百分比)
  - % of LOQ (定量限百分比)
  - % of LOR (报告限百分比)
- 在 Percentage (百分比) 列中, 输入百分比值。

### ❖ 若要指定最大浓度

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

图 54. Negative (阴性对照) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Threshold	Hydrolysis
	RT	Compound	Method	Percentage	Max Conc		
▶ 1	3.14	Propanenitrile	Concentration		0.000		
2	3.15	Pyrazinamide	None		0.000		
3	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-	Concentration		0.000		
4	4.70	Pyrazinamide *2*	% of LOD		0.000		
			% of LOQ				
			% of LOR				

表 38. Negative (阴性对照) 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。该时间为化合物保留在色谱柱中的总时间。
Compound (化合物)	化合物名称。
Method (基质空白)	用于比较计算浓度的评估过程。可以指定非最大值、具体浓度值, 或者报告限、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 (内标化合物)

ISTD (内标化合物) 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进行对比。

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 55. ISTD (内标化合物) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Threshold	Hydrolysis
	RT	Compound	Min recovery (%)	Max recovery (%)	Min RT (-min)	Max RT (+min)	CV Test (%)
▶ 1	3.14	Propanenitrile	50.00	150.00	0.25	0.25	

表 39. ISTD (内标化合物) 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, %)	内标物的最大和最小回收率百分比指定了一个可接受范围。对于质控样, TraceFinder 应用程序将每个样品中每个内标化合物的响应值, 与以所有校正标样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质控标样, 则应用程序会计算以质控标样响应值为中心的对比如。如果没有可用的质控标样, 则应用程序会根据初始校正进行检测。
Max Recovery (%) (最大回收率, %)	
Min RT (-min) (最小保留时间, 分钟)	内标物的最大和最小偏移值 (单位为分钟) 指定了一个可接受范围。对于质控样, TraceFinder 应用程序将每个样品中每个内标的保留时间, 与以所有校正标样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质控标样, 则应用程序会计算以质控标样保留时间为中心的对比如。如果没有可用的质控标样, 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, %)	Coefficient of Variance (变异系数) 测试。变异系数百分比是指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。该计算是基于峰面积进行的。

## Solvent Blank (溶剂空白)

Solvent Blank (溶剂空白) 页面用于查看或编辑溶剂报告的 QC (质控) 值。应用程序将样品中每个化合物的计算响应值与本页中指定的最大响应值进行对比。

在 Solvent Blank (溶剂空白) 报告中, TraceFinder 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 56. Solvent Blank (溶剂空白) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Threshold	Hydrolysis
	RT	Compound	Method		Upper Limit		
1	3.14	Propanenitrile	None				
2	3.15	Pyrazinamide	All Ion RT			0	
3	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-	Quan Ion RT			0	

表 40. Solvent Blank (溶剂空白) 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检测, 选择 <b>None (无)</b> 。
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值。这些值不是浓度值, 而是原始响应值。

## Threshold (阈值)

通过 Threshold (阈值) 页面 (参阅第 186 页上的“Threshold (阈值) 页面”) 指定如何创建阈值线以覆盖 Data Review (数据查看) 模式下 Comparative View (对比视图) 上的化合物。用户可以指定每个化合物的绝对值或峰高百分比值。应用程序采用选中的阈值方法和指定的量在 Comparative View (对比视图) 色谱图上创建一条阈值线。参阅第 437 页上的“Comparative View (对比视图)”。

当用户创建批次时, 可以为样品分组, 然后指定组中一个样品作为 Comparative View (对比视图) 中所用的阈值样品。有关指定阈值样品的信息, 参阅第 401 页上的“Threshold Samples (阈值样品) 页面”。

下图中, 酞酸二丁酯化合物的阈值是阈值样品峰高的 50%, 样品 Benzo26473、Benzo25557 和 Benzo26154 属于 groupB, 该组的阈值样品是 Benzo26473。在 Comparative Data (对比数据) 视图中, 用户可以很容易地观察到该组中其他样品中酞酸二丁酯的峰高小于阈值样品中峰高的 50%。

图 57. Method View (方法视图) 中的 QAQC (质保质控) 页面

Master method: <a href="#">Benzos1</a>							
Limits		Calibration	Chk Std	Matrix Blank	ISTD	Solvent Blank	Threshold
	RT	Compound	Method	Threshold	Percentage		
	1.91	Benzoic acid, 2-[[[4-[(ace...	% of Thresh...		50		
▶	2.72	Dibutyl phthalate	% of Thresh...		50		

阈值方法
 阈值样品中峰高 50% 时的阈值

图 58. Batch View (批次视图) 中的 Samples (样品) 页面

	Status	Groups	Filename
1	●	groupb	Benzo26473
2	●	groupb	Benzo25557
▶ 3	●	groupb	Benzo26154

属于同一组的样品

图 59. Batch View (批次视图) 中的 Threshold Samples (阈值样品) 页面

	Group	Sample
▶	groupb	Benzo26473

被选为 groupb 阈值样品的 Benzo26473。

图 60. Data Review (数据查看) 中的 Comparative View (对比视图)

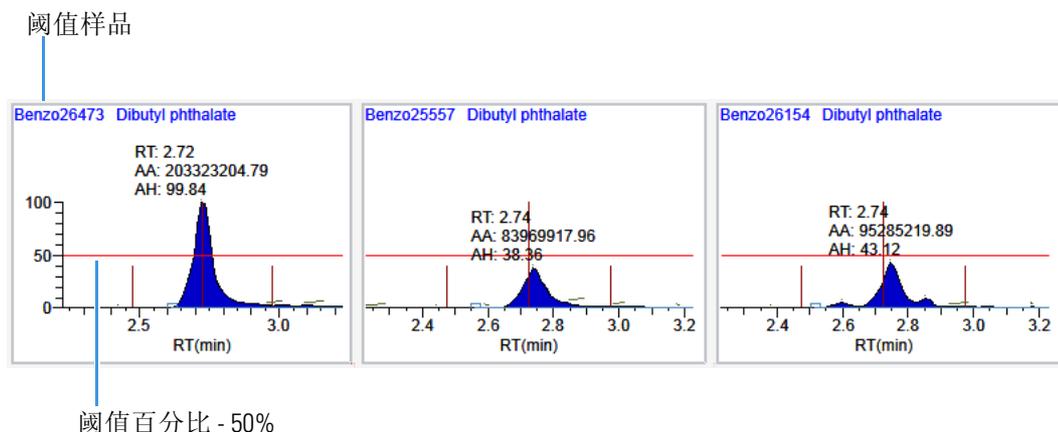


图 61. Threshold (阈值) 页面

Limits	Calibration	Chk Std	Matrix Blank	ISTD	Solvent Blank	Threshold
RT	Compound	Method	Threshold	Percentage		
3.14	Propanenitrile	Threshold	1.000			
3.15	Pyrazinamide	Threshold	1.000			
3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-	% of Threshold Sample		0.1		
4.70	Pyrazinamide *2*	% of Threshold Sample		0.1		

表 41. Threshold (阈值) 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)	将阈值方法指定为具体的峰高值或者指定为阈值样品中峰高的百分比。
Threshold (阈值)	当选定 Threshold (阈值) 方法时, 指定要使用的绝对峰高值。当用户未指定样品组的 Threshold Sample (阈值样品) 时, 该值代表要使用的默认阈值。 默认: 1.000
Percentage (百分比)	当选定 % of Threshold Sample (阈值样品百分比) 方法时, 指定要使用的峰高百分比值。该值代表用户为样品组选择的 Threshold Sample (阈值样品) 的实际峰高的某个百分比。有关指定 Threshold Sample (阈值样品) 的信息, 参阅第 401 页上的“Threshold Samples (阈值样品) 页面”。 默认: 0.1 范围: 0.1 至 100.1

## Hydrolysis (水解)

利用 Hydrolysis (水解) 页面指定化合物的水解参数。

图 62. Hydrolysis (水解) 页面

Limits	Calibration	QC Check	Negative	ISTD	Solvent Blank	Hydrolysis
	RT	Compound	Method	Threshold/Lower limit	Upper limit	
	3.14	Propanenitrile	None			
	3.15	EDIFENPHOS-CE5-R20-T...	None			
	3.67	1,3-Dioxolane, 2-heptyl-	Threshold Range			
	4.70	Pyrazinamide	None			

表 42. Hydrolysis (水解) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

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 <b>None (无)</b> 。
Threshold/Lower Limit (阈值 / 下限)	为使用 Threshold (阈值) 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 (水解) 报告中。 对于使用 Range (范围) 方法的化合物, 该参数将指定范围下限。
Upper Limit (上限)	对于使用 Range (范围) 方法的化合物, 该参数将指定范围的上限。
<b>快捷菜单</b>	
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 (向下复制) 命令的详细说明, 参阅附录 C, “使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)”。
Display Retention Time Column (显示保留时间列)	显示或隐藏化合物列表中的 RT (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 电子数据表。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 电子数据表。
Paste (粘贴)	将来自其他应用程序如 Excel 电子数据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。

表 42. Hydrolysis (水解) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
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。

## 编辑 Groups (组) 页面

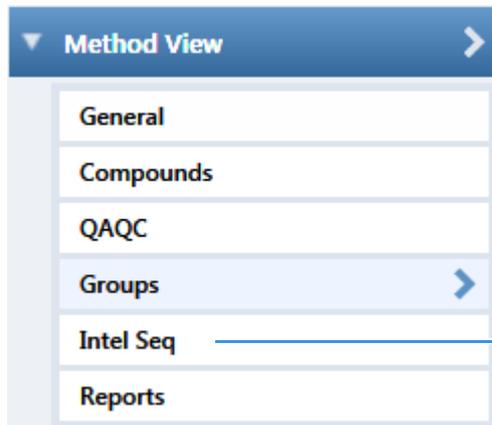
利用 Method View (方法视图) 的 Groups (组) 页面将化合物分配到功能组或逻辑组中。可以使用这些组来创建目标化合物的子集。有关 Groups (组) 页面上所有功能的详细说明, 参阅“Groups (组) 页面”。

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 (采集) 模式下只显示所选组中的化合物。将显示的化合物限定为仅显示所选组中的化合物, 这在当所处理的主方法中包含较大的化合物列表, 但特定样品分析只需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, 因此可以减少得到的结果。若要仅显示用于定量处理的化合物, 从 Show (显示) 列表框中选择 **Quan Compounds (定量化合物)**。

可以创建多个含相同化合物的组。

### ❖ 若要打开 Groups (组) 页面

点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Groups (组)**。

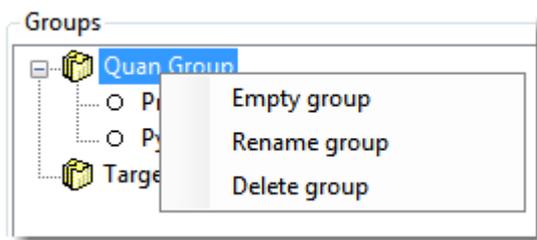


仅当用户激活 Configuration (配置) 控制台上的 Intelligent Sequencing (智能排序) 时可用

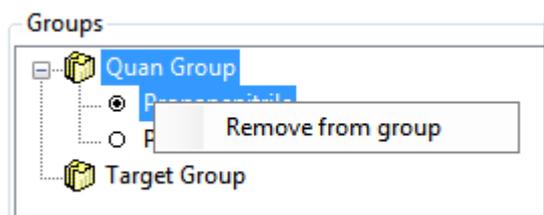
### ❖ 若要创建组

1. 在 Groups (组) 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。
2. 输入新组的名称, 然后点击 **OK (确定)**。  
新组显示在 Groups (组) 区域中。
3. 从 Compounds (化合物) 区域拖曳化合物到组名上 (就象移动文件到文件夹中一样)。

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



5. 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)。



### Groups (组) 页面

利用 Groups (组) 页面上的功能将化合物分配到功能组或逻辑组中。

图 63. Groups (组) 页面

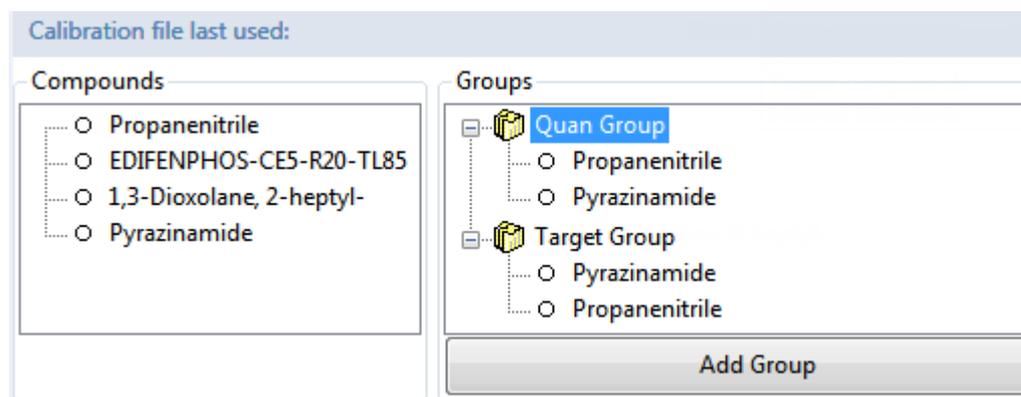


表 43. Groups (组) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Compounds (化合物)	列出所有可用的化合物。
Groups (组)	列出所有可用组。
Add Group (添加组)	打开 Add a New Group (添加新组) 对话框, 可在此创建新组。
<b>快捷菜单</b>	
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。

表 43. Groups (组) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

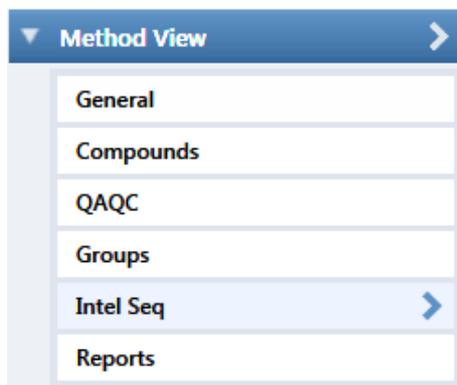
参数	描述
Delete Group (删除组)	删除所选组及其中的所有化合物。
Remove From Group (从组中移除)	将所选化合物从其组中移除。

## 编辑 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面

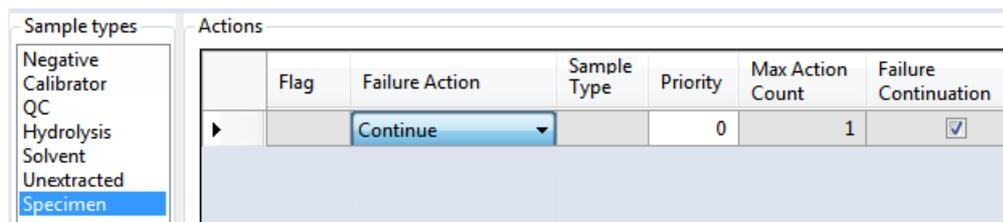
当样品类型出现采集失败时, 采用 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面指定想要应用程序进行的操作。仅当激活 Configuration (配置) 控制台上的 Intelligent Sequencing (智能排序) 时, Intelligent Sequencing (智能排序) 页面才可用。参阅第 65 页上的“[Intelligent Sequencing \(智能排序\)](#)”。

### ❖ 若要打开 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面

点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Intel Seq (智能排序)**。



Intelligent Sequencing (智能排序) 页面打开。

A screenshot of the Intelligent Sequencing page. On the left is a 'Sample types' list with items: 'Negative Calibrator', 'QC', 'Hydrolysis Solvent', 'Unextracted', and 'Specimen'. 'Specimen' is selected. On the right is an 'Actions' table.

	Flag	Failure Action	Sample Type	Priority	Max Action Count	Failure Continuation
▶		Continue		0	1	<input checked="" type="checkbox"/>

## ❖ 若要指定样品采集失败时的操作

1. 从 Sample Types (样品类型) 列表中选择一种样品类型。

每种样品类型具有一组指定的失败标记。参阅第 193 页上的“特定样品的失败标记”。

2. 为每个失败标记选择一个失败操作。

除 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品类型的失败标记外, 每个失败标记的失败操作选项都相同。Solvent (溶剂) 和 Negative (阴性对照) 样品类型没有 Auto Sample (自动进样) 和 Auto Sample and Reinject (自动进样和重新进样) 失败操作。

Sample types	Actions					
	Flag	Failure Action	Sample Type	Priority	Max Action Count	Failure Continuation
Negative		Continue		0	1	<input checked="" type="checkbox"/>
Calibrator		Continue				
QC		Continue				
Hydrolysis		Continue				
Solvent		Continue				
Unextracted		Continue				
Specimen		Continue				
		Stop				
		Auto Sample				
		Reinject				
		Auto Sample and Reinject				

每种失败操作都要求一个或多个以下值:

- Sample Type (样品类型)
- Priority (优先级)
- Max Action Count (最大操作次数)
- Failure Continuation (失败后操作)

有关每种参数的详细说明, 参阅第 192 页上的“Actions (操作)”。

3. 选择一种样品类型以用于失败操作。

该值仅对 Auto Sample (自动进样) 和 Auto Sample and Reinject (自动进样和重新进样) 失败操作可用。当用户在 Auto Samples (自动进样) 页面上创建样品列表时, 必须至少含有一个该样品类型的样品, 以预防自动进样器出现这类错误。参阅第 398 页上的“Auto Samples (自动样品) 页面”。

4. 在 Priority (优先级) 列, 输入该步操作的优先级值。

优先级值可以是任意正整数或负整数。

- 应用程序执行其所碰到的最高级别失败情况的失败操作并忽略所有其他级别。
- 当用户为两个或更多失败情况指定同一优先级别时, 应用程序执行其首先碰到的失败情况的操作并忽略其他。

5. 在 Max Action Count (最大操作次数) 列, 输入应用程序重复一个样品的最大次数。

6. 在 Failure Continuation (失败后操作) 列, 进行以下其中一种操作:

- 当此样品超过 Max Action Count (最大操作次数) 值时, 选中该复选框以跳过该样品, 并前进至下一个样品。
- 当此样品超过 Max Action Count (最大操作次数) 值时, 清除该复选框以停止该批次。

## Actions (操作)

当碰到与样品类型相关的失败标记类型出现提交失败时，通过 Actions (操作) 窗格指定该应用程序所采取的操作。

Actions						
	Flag	Failure Action	Sample Type	Priority	Max Action Count	Failure Continuation
▶	Negative	Continue		0	1	<input checked="" type="checkbox"/>

表 44. Actions (操作) 参数

参数	描述
Flag (标记)	每种样品类型指定的标记 (错误) 类型。参阅 <a href="#">特定样品的失败标记</a> 。每种标记类型含有一组用户指定的应用程序碰到错误时所遵循的操作行为。
Failure Action (操作失败)	对于未通过的样品，应用程序执行以下其中一种操作： <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Continue (继续)</b>：继续至批次中的下一样品。</li> <li>• <b>Stop (停止)</b>：停止该批次。</li> <li>• <b>Auto Sample (自动进样)</b>：进样为 Auto Sample Type (自动进样类型) 参数指定的样品类型，并前进至下一样品。</li> <li>• <b>Reinject (重新进样)</b>：通过在批次中插入一个“重新进样”的样品来重新进样当前的样品。</li> <li>• <b>Auto Sample and Reinject (自动进样和重新进样)</b>：进样为 Auto Sample Type (自动进样类型) 参数指定的样品类型，然后重新进样未通过的样品。</li> </ul>
Sample Type (样品类型)	指定一个 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品类型以用于自动样品进样。 默认：Solvent (溶剂)
Priority (优先级)	优先级值可以是任意正整数或负整数。  当两个或更多失败情况具有同一优先级别时，应用程序执行其首先碰到的失败情况的失败操作并忽略其他。  应用程序执行最高级别失败情况的失败操作并忽略所有其他级别。
Max Action Count (最大操作次数)	指定应用程序在前进至下一样品或者停止序列之前，重复一个样品的最大次数，继续或者停止由 Failure Continuation (失败后操作) 参数值决定。 默认：1
Failure Continuation (失败后操作)	当选中该复选框时，超过 Max Action Count (最大操作次数) 参数指定值的样品会导致应用程序跳过该样品，并前进至下一样品。默认：已选  当清除该复选框时，超过 Max Action Count (最大操作次数) 参数指定值的样品会导致应用程序停止该批次。

## 特定样品的失败标记

每种样品类型具有一组指定的失败标记。

样品类型	标记
Negative (阴性对照)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Negative (阴性对照)</li></ul>
Calibrator (校正标样)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Cal Out of Range (校正标样超出范围量)</li><li>• Ion Ratio Failure (离子比率未通过)</li><li>• Carryover (残留)</li></ul>
QC (质控标样)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ion Ratio Failure (离子比率未通过)</li><li>• Out of Range (超出范围)</li></ul>
Hydrolysis (水解)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ion Ratio Failure (离子比率未通过)</li><li>• Hydrolysis (水解)</li></ul>
Solvent (溶剂)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Solvent Flag (溶剂标记)</li></ul>
Unextracted (未提取)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ion Ratio Failure (离子比率未通过)</li></ul>
Specimen (定量样品)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ion Ratio Failure (离子比率未通过)</li><li>• Carryover (残留)</li></ul>

## 编辑 Reports（报告）页面

利用 Reports（报告）指定保存或打印报告的方式。有关 Reports（报告）页面上所有功能的详细说明，参阅 [Reports（报告）页面](#)。

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 ToxID 报告类型，可以修改 Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）页面上的默认报告选项、半定量结果选项、离子比率计算方法、精确质量数窗口以及 Exactive™ 选项。

本部分包括对下列任务的说明：

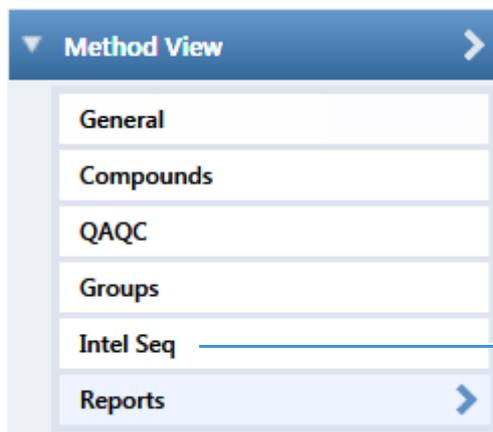
- [指定报告格式](#)
- [指定定量报告设置](#)
- [指定 Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）（对 ToxID 报告而言）](#)

### 指定报告格式

- 可以为每份 Standard（标准）报告类型创建硬拷贝打印件、PDF 文件或 XML 文件。
- 可以为每份 Custom（自定义）报告类型创建硬拷贝打印件或 Excel 宏启用工作簿（.xlsm）文件。
- 可以为每份 ToxID 报告类型创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。

### ❖ 若要打开 Reports（报告）页面

点击 Method View（方法视图）导航窗格上的 **Reports（报告）**。



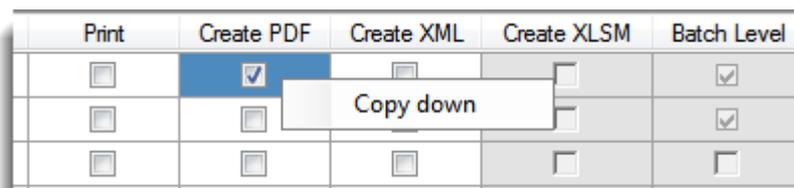
仅当用户激活 Configuration（配置）控制台上的 Intelligent Sequencing（智能排序）时可用

含所有配置报告列表的 Reports（报告）页面打开。

若要在创建主方法时配置哪些为可用报告或哪些报告可以创建批次水平报告，参阅第 37 页上的“[指定 Reports（报告）](#)”。

❖ 若要指定报告类型和导出格式

- 若要编辑 Report Title (报告标题), 双击该名称然后输入新自定义名称。  
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 Title (报告标题)。
- 若要为每个报告类型指定要创建的报告输出类型, 在适合的列中选中复选框。
- 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中选择 **Copy Down (向下复制)**。



列表中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元中的选取或未选取状态。该操作仅应用于那些该输出格式可用的报告。默认情况下, 所有报告类型都被清除。

**Reports (报告) 页面**

利用 Reports (报告) 页面上的功能指定保存或打印报告的方式。

图 64. Reports (报告) 页面

	Example	Report Name	Report Title	Report Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM	Batch Level
1		Batch Report	Batch	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
2		Alternate Batch Report	Alternate Batch	Custom	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
3		Target Screening Long Report	Target Screening Long	ToxID	<input type="checkbox"/>				

表 45. Reports (报告) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

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 Title (报告标题)	报告所使用的用户自定义描述。
Report Type (报告类型)	报告类型: Standard (标准)、Custom (自定义) 或 ToxID。
Print (打印)	发送报告至打印机。对所有报告类型可用。
Create PDF (创建 PDF)	将报告保存为 PDF 文件。仅对 Standard (标准) 和 ToxID 报告类型可用。
Create XML (创建 XML)	将报告导出为 XML 格式。仅对 Standard (标准) 报告类型可用。

表 45. Reports (报告) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Create XLSM (创建 XLSM)	将报告导出为 Excel 宏启用工作簿 (.xslm) 格式。仅对 Custom (自定义) 报告类型可用。
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>B</b> 以示区别。 用户无法从 Reports (报告) 页面选择该选项。必须为报告配置中的报告选择 Batch Level (批次水平) 选项。参阅第 37 页上的“指定 Reports (报告)”。

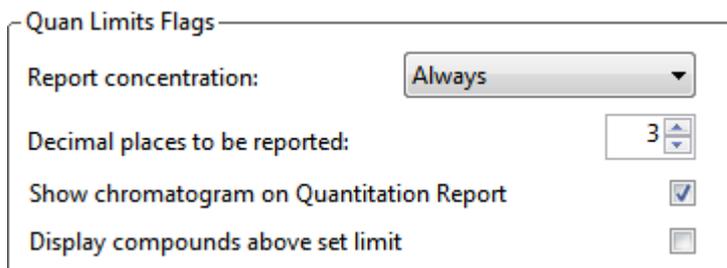
### 指定定量报告设置

利用 Quan Report Settings (定量报告设置) 页面上的选项为标准报告类型中的标记值和显示信息选择参数。参阅第 198 页上的“Quan Report Settings (定量报告设置) 页面”。

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. 若要报告所有情况下或只在定量值超过 LOD、LOQ 或 LOR 情况下的计算浓度, 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 178 页上的“编辑 QAQC (质保质控) 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

User Interface Options	
Shade row when sample is outside of evaluation criteria	<input type="checkbox"/>
Separate ion overlay display	<input checked="" type="checkbox"/>
Use alternate calibration report format	<input type="checkbox"/>
Display Quan flags and legend	<input type="checkbox"/>

1. 若要在某个值不符合其中一项评估标准时在任一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中将离子重叠窗格分离开来，选中 **Separate Ion Overlay Display (分离离子重叠显示)** 复选框。
3. 若要使用专为简洁打印目的而设计的 Calibration Report (校正报告) 替代格式，并将报告限制为最多 7 个校正标样，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图例，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

Quan Flag Options	
Flag values below LOD	<input checked="" type="checkbox"/>
Flag values below LOQ	<input checked="" type="checkbox"/>
Flag values above Cutoff	<input checked="" type="checkbox"/>
Flag values above ULOL	<input checked="" type="checkbox"/>
Flag values above Carryover	<input checked="" type="checkbox"/>
Flag values between LOD and LOQ	<input checked="" type="checkbox"/>

选取希望在报告中显示的值。

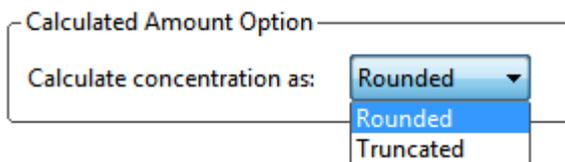
该值高于或低于 Quan (定量) 页面上指定的界限。

这些标记出现在各种报告上并在第 200 页上的“[Quan Report Settings \(定量报告设置\) 页面参数](#)”中指定。

## Quan Report Settings (定量报告设置) 页面

利用 Quan Report Settings (定量报告设置) 页面上的功能为标准报告类型中的标记值和显示信息指定参数。

### ❖ 若要指定浓度计算方法

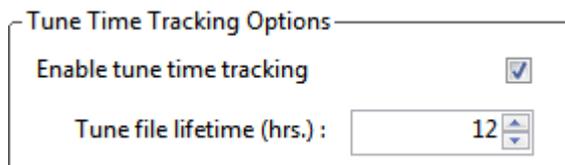


在 Calculate Concentration As (浓度计算为) 框中, 选中 **Rounded (四舍五入)** 或 **Truncated (截取)**。

- **Rounded (四舍五入)**: 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接近的值。
- **Truncated (截取)**: 将计算量按 Quan Limits Flags (定量限标记) 区域指定的小数位数进行截取。

参阅第 196 页上的“若要指定定量限”。

### ❖ 若要跟踪调谐文件的使用



1. 选中 **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在 Batch (批次) 报告中进行标记。

图 65. Quan Report Settings (定量报告设置) 页面

The screenshot displays the 'Quan Report Settings' window, which is organized into several sections:

- Quan Limits Flags:**
  - Report concentration: Always (dropdown)
  - Decimal places to be reported: 3 (spinner)
  - Show chromatogram on Quantitation Report:
  - Display compounds above set limit:
- User Interface Options:**
  - Shade row when sample is outside of evaluation criteria:
  - Separate ion overlay display:
  - Use alternate calibration report format:
  - Display Quan flags and legend:
- Quan Flag Options:**
  - Flag values below LOD:
  - Flag values below LOQ:
  - Flag values above Cutoff:
  - Flag values above ULOL:
  - Flag values above Carryover:
  - Flag values between LOD and LOQ:
- Calculated Amount Option:**
  - Calculate concentration as: Rounded (dropdown)
- Tune Time Tracking Options:**
  - Enable tune time tracking:
  - Tune file lifetime (hrs.): 12 (spinner)

表 46. Quan Report Settings (定量报告设置) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
<b>Quan Limits Flags (定量限标记)</b>	
Report Concentration (报告浓度)	报告任何时候的浓度, 或者只报告定量值超过检测限 (LOD)、定量限 (LOQ) 或报告限 (LOR) 时的浓度。Report concentration (报告浓度): Always (总是)、>LOD (大于检测限)、>LOQ (大于定量限) 或 >LOR (大于报告限)。
Decimal Places to Be Reported (需报告的小数位)	需包含在报告中的小数点位数。最大值是 6。
Show Chromatogram on Quantitation Report (定量报告显示色谱图)	在定量报告上显示样品的色谱图 (TIC 总离子流图)。
Display Compounds Above Set Limit (显示设置限以上的化合物)	仅打印样品中发现的化合物的报告。如果某个化合物超出了指定的 Quan Flag Options (定量标记选项) 限制, 则 TraceFinder 应用程序会报告该化合物。这样就防止了为未发现的化合物生成“空白”报告。
<b>User Interface Options (用户界面选项)</b>	
Shade Row When Sample is Outside of Evaluation Criteria (样品超评估标准时对该行加阴影)	当某个值不符合其中一个评估标准时, 在所有报告上对该化合物行加阴影。
Separate Ion Overlay Display (分离离子重叠显示)	从分析的确证离子绘图中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 Calibration Report (校正报告) 替代格式 (此报告限制为最多 7 个校正标样)。
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、定量标记和图例。
<b>Quan Flag Options (定量标记选项)</b>	
Flag Values Below LOD (标记低于检测限的值)	标记低于检测限 (LOD) 的值。
Flag Values Below LOQ (标记低于定量限的值)	标记低于定量限 (LOQ) 的值。
Flag Values Above LOR (标记高于报告限的值)	标记高于报告限 (LOR) 的值。

表 46. Quan Report Settings（定量报告设置）页面参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Flag Values Above ULOL（标记高于线性上限的值）	标记高于线性上限（ULOL）的值。
Flag Values Above Carryover（标记高于残留限的值）	标记高于残留限的值。
Flag Values Between LOD and LOQ（标记介于检测限和定量限之间的值）	将介于检测限和定量限之间的值标记为 J。
<b>Calculated Amount Option（计算量选项）</b>	
Calculate Concentration As（浓度计算为）	为报告浓度量指定 Rounded（四舍五入）或 Truncated（截取）方法。
<b>Tune Time Tracking Options（调谐时间跟踪选项）</b>	
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在 Batch（批次）报告中进行标记。

## 指定 Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）（对 ToxID 报告而言）

利用 Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）页面上的选项设置生成 ToxID 报告所需的参数。有关 Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）页面上功能的详细说明，参阅第 205 页上的“Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）页面”。

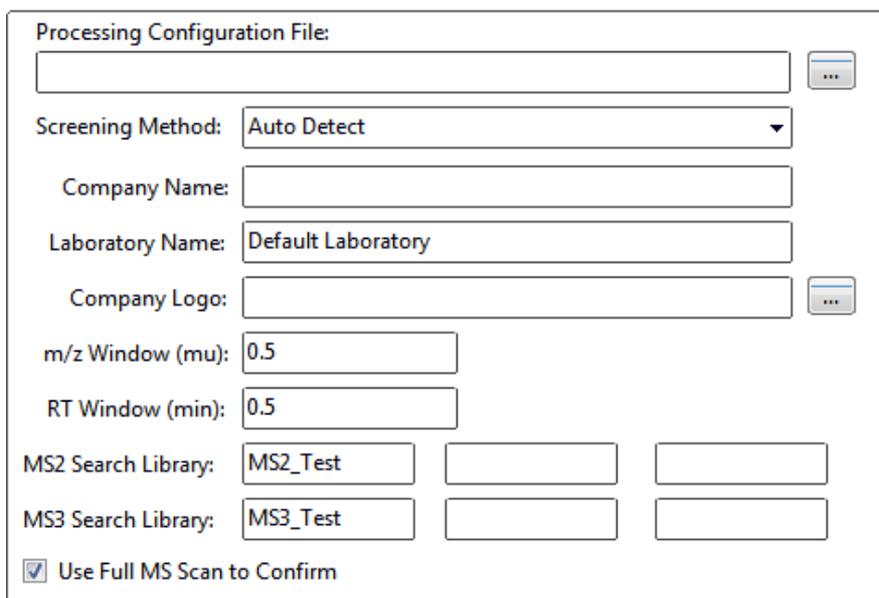
TraceFinder 应用程序使用这些参数处理原始数据文件，并创建与 ToxID 报告类似的报告。

**注释** 仅当用户激活 ToxID 功能时，Target Screening Export Settings（目标筛选导出设置）页面才可用。参阅第 60 页上的“ToxID”。

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

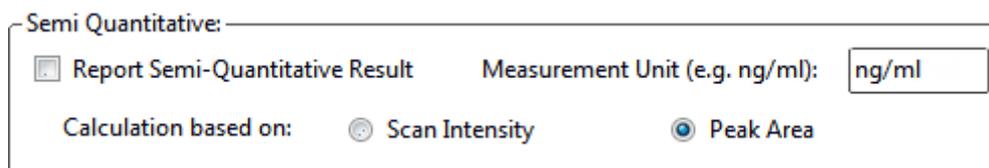


1. 点击 Processing Configuration File（处理配置文件）浏览按钮并选择一个配置文件（.csv）。
2. 从 Screening Method（筛选方法）列表框中选择下列化合物筛选方法之一。
  - （默认） Auto Detect（自动检测）
  - Based on Full MS2 scans（基于 MS2 全扫描）
  - Based on SRM and MS2 scans（基于 SRM 和 MS2 扫描）
  - Based on MS2 and MS3 scans（基于 MS2 和 MS3 扫描）
  - Based on MS3 scans（基于 MS3 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, 为高于和低于化合物保留时间值的窗口输入一个值。
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<sup>3</sup> 谱图的三个检索库的名称。
10. 若希望采用全扫描中的母离子峰检测确认库检索结果, 选中 **Use Full MS Scan to Confirm (使用质谱全扫描进行确认)** 复选框。

当应用程序没有在全扫描中检测到峰时, 该化合物不被报告为结果化合物。

#### ❖ 若要计算和报告半定量结果



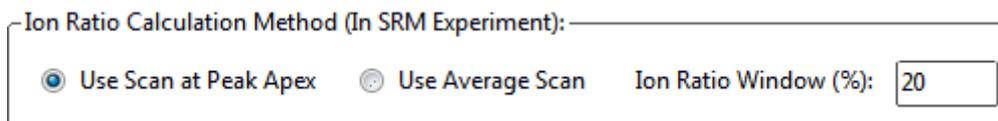
Semi Quantitative:

Report Semi-Quantitative Result      Measurement Unit (e.g. ng/ml):

Calculation based on:       Scan Intensity       Peak Area

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。
2. 选中 **Scan Intensity (扫描强度)** 或 **Peak Area (峰面积)** 选项。
  - Scan Intensity (扫描强度): 应用程序测量 MS/MS 峰的强度, 不执行背景扣除。
  - Peak Area (峰面积): 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 (峰面积) 时, Use Full MS Scan to Confirm (使用质谱全扫描进行确认) 复选框自动选中。

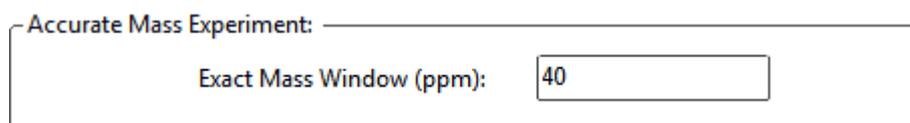
❖ 若要指定离子比率计算方法



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 (使用峰顶处扫描): 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): 应用程序基于半峰高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, 输入定性离子与定量离子的可接受强度百分比。

例如, 当 Ion Ratio Window (离子比率窗口) 为 20% 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 才被视作已找到。

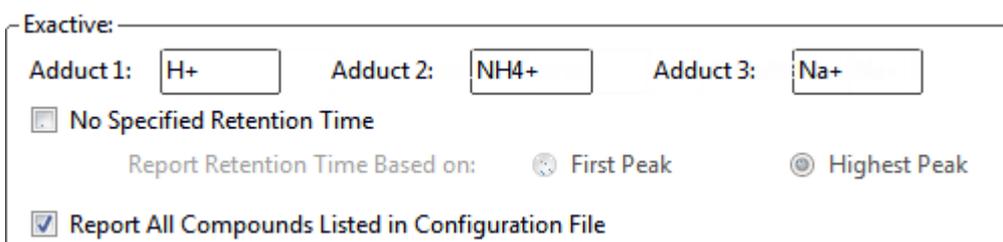
❖ 若要指定准确质量数窗口



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 且窗口宽度为 2 的结果时, 算法会基于所有在 49 至 51 质量数范围内响应的结果创建一个 XIC。

❖ 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<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup> 和 Na<sup>+</sup>。  
若要从默认列表中添加或移除加合物, 参阅第 56 页上的“指定 Adducts (加合物)”。
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。  
当检索期间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, 无论是否找到这些化合物的匹配。

默认仅报告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。

### Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置) 页面

利用 Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置) 页面上的功能指定生成 ToxID 报告所需的参数。

图 66. Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置) 页面

表 47. Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置) 页面参数 (第 1 页, 共 3 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: <ul style="list-style-type: none"> <li>(默认) Auto Detect (自动检测)</li> <li>Based on Full MS2 scans (基于 MS2 全扫描)</li> <li>Based on SRM and MS2 scans (基于 SRM 和 MS2 扫描)</li> <li>Based on MS2 and MS3 scans (基于 MS2 和 MS3 扫描)</li> <li>Based on MS3 scans (基于 MS3 扫描)</li> <li>Based on accurate mass scans (基于准确质量数扫描)</li> <li>Based on SRM scans (基于 SRM 扫描)</li> <li>Based on Exactive screening method (基于 Exactive 筛选方法)</li> </ul> <p><b>注释</b> ToxID 应用程序可以采用 Auto Detect (自动检测) 方法识别采集数据文件中进行的筛选实验。</p>
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。

表 47. Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置) 页面参数 (第 2 页, 共 3 页)

参数	描述
Company Logo (公司徽标)	指定打印在报告上的图片文件 (.jpg、.gif 或 .bmp)。
<i>m/z</i> Window (mu) (质荷比窗口, mu)	指定高于和低于化合物 <i>m/z</i> 值的窗口值。
RT Window (min) (保留时间窗口, min)	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 <sup>3</sup> 质谱图的三个检索库的名称。
Use Full MS Scan to Confirm (使用质谱 全扫描进行确认)	指定应用程序采用全扫描中母离子峰检测确认库检索结果。当应用程序没有在全扫描中检测到峰时, 该化合物不被报告为结果化合物。
<b>Semi Quantitative (半定量)</b>	
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)	用于标记的单位。
Calculation Based On (计算基于)	指定以下其中一种计算方法: <ul style="list-style-type: none"> <li>Scan Intensity (扫描强度): 指定应用程序测量 MS/MS 峰的强度, 不执行背景扣除。</li> <li>Peak Area (峰面积): 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 (峰面积) 时, Use Full MS Scan to Confirm (使用质谱全扫描进行确认) 复选框自动选中。</li> </ul>
<b>Ion Ratio Calculation Method (In SRM Experiment) (离子比率计算方法, 在 SRM 实验中)</b>	
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, %)	指定可接受的离子比率范围。
<b>Accurate Mass Experiment (准确质量数实验)</b>	
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。

表 47. Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置) 页面参数 (第 3 页, 共 3 页)

参数	描述
<b>Exactive</b>	
Adduct 1- <i>n</i> (加合物 1- <i>n</i> )	指定在配置文件中列出和应用的加合物。加合物代表中性质量数的增加或损失。对于负离子化, 输入负加合物值。 默认: Adduct 1 (加合物 1): H+, Adduct 2 (加合物 2): NH4+, 和 Adduct 3 (加合物 3): Na+
No Specified Retention Time (无指定保留时间)	当检索期间在原始数据文件中找到多个 <i>m/z</i> 匹配结果时, 指定处理采用的 First Peak (首个峰) 或 Highest Peak (最高峰)。
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, 无论是否找到这些化合物的匹配。 默认: 仅报告那些在原始数据文件中找到匹配的化合物。

## 编辑目标筛选主方法

用户可以打开一个目标筛选主方法, 指定方法说明、报告选项、峰过滤器设置、筛选数据库、识别和确认设置、峰检测参数。

本部分包括对下列任务的说明:

- [打开目标筛选主方法](#)
- [编辑 General \(常规\) 页面](#)
- [编辑 Reports \(报告\) 页面](#)
- [编辑 Screening \(筛选\) 页面](#)
- [编辑 Peak Detection \(峰检测\) 页面](#)

## 打开目标筛选主方法

对于目标筛选方法，选择用户想要用于 Target Screening Settings (目标筛选设置) 窗格上 Compound Databases (化合物数据库) 区域的数据库。应用程序列出了存储于以下文件夹中的化合物数据库：

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Databases\filename.cdb

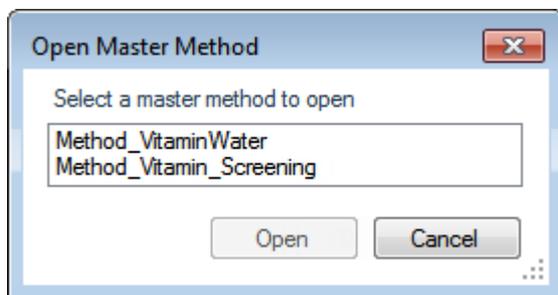
目标筛选方法仅使用已选化合物数据库中的目标化合物列表来识别样品中的化合物。

### ❖ 若要打开已保存的主方法

1. 点击位于导航窗格上的 **Method Development (方法开发)**。



2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Open (打开) > Master Method (主方法)**



Open Master Method (打开主方法) 对话框打开，显示所有可用的方法。

图 67. Open Master Method (打开主方法) 对话框

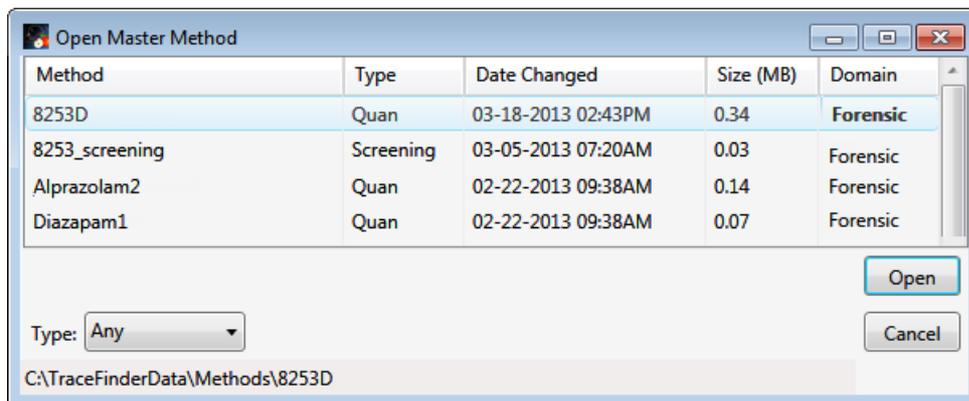


表 48. Open Master Method (打开主方法) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Method (方法)	已选类型的方法名称。
Type (类型)	方法的类型: Quan (定量) 或 Screening (筛选)。
Date Changed (更改日期)	方法的最后更新日期。
Size (大小)	单位为兆字节。

表 48. Open Master Method (打开主方法) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Domain (领域)	TraceFinder 中创建方法的领域: General (常规)、EFS (环境和食品安全)、Clinical (临床) 或 Forensic (法医学)。
Type (类型)	要显示的方法类型: Quan (定量)、Screening (筛选) 或 Any (任意)。
Path (路径)	TraceFinderData\Methods 文件夹中已选方法的路径。

**提示** 用户也可以打开其中一个最近使用最频繁的主方法文件。选择 **Files (文件) > Recent Files (最近使用的文件) > Method (方法)**。

- 在 Type (类型) 列表中选择 **Screening (筛选)**。



方法列表仅显示目标筛选方法。

- 选中一个目标筛选主方法并点击 **Open (打开)**。

已选方法的 General (常规) 页面打开。有关 General (常规) 页面上所有功能的详细说明, 参阅第 213 页上的“[General \(常规\) 页面参数](#)”。

目标筛选方法的 Method View (方法视图) 包括 General (常规)、Reports (报告)、Screening (筛选) 和 Peak Detection (峰检测) 页面。

## 编辑 General (常规) 页面

通过 General (常规) 页面指定有关主方法的基本信息。

### ❖ 若要编辑 General (常规) 页面上的参数

1. 点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **General (常规)**。

筛选方法的 General (常规) 页面打开。参阅第 213 页上的“筛选方法的 General (常规) 页面”。

2. 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)。

3. 在 Assay Type (实验类型) 框中, 输入方法的目标分析类型。

4. 在 Injection Volume (进样体积) 框中, 选择进样时所用的进样体积 (单位为  $\mu\text{L}$ )。

范围: 0.1 到 2000  $\mu\text{L}$

使用向上 / 向下箭头以 1  $\mu\text{L}$  的增量 / 减量改变体积, 或使用键盘输入非整数的进样体积。

**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。

5. 在 Mass Precision (质量数精度) 框中, 选择在报告中、峰和质谱图显示中使用的小数点位数。

有效值: 2 到 6 之间 (包括 2 和 6) 的整数

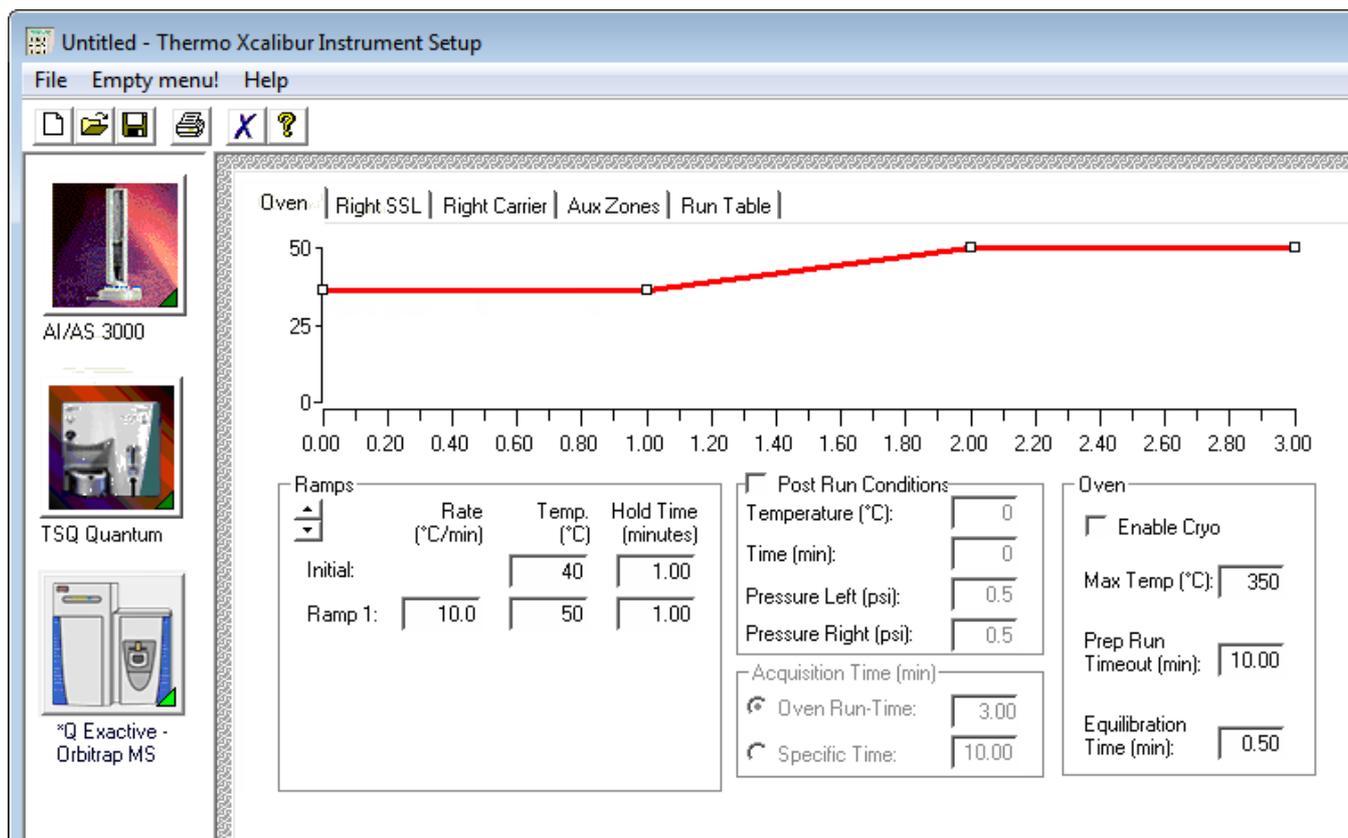
6. 从 Instrument Method (仪器方法) 列表选择一个仪器方法。



7. 若要编辑仪器方法, 点击 **Edit (编辑)**。

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

图 68. Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口



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

TraceFinder 应用程序返回 Method View (方法视图) 的 General (常规) 页面。

10. 选择希望使用的测量单位。
  - (默认) MMU (毫质量数单位): 提取质量数的静态计算。
  - PPM (百万分之一): 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。
11. 从 Mass Tolerance (质量数容许偏差) 框中选择  $m/z \pm$  质量数容许偏差的毫质量数值或 ppm 值。

使用向上 / 向下箭头以 1 单位的增量 / 减量改变体积, 或使用键盘输入非整数的容许偏差。

应用程序将质量数容许偏差应用至提取色谱图中。

12. 从 Library Search Type (库检索类型) 列表中, 选择用于目标筛选的库类型。
  - **NIST:** 使用用户在 Configuration (配置) 控制台上指定的 NIST 库。参阅第 63 页上的“筛选库”。

**注释** 由于 NIST 库很大, 因此使用该库时减慢了样品处理的速度。

- **Library Manager (库管理器):** 使用用户在 Configuration (配置) 控制台上指定的库。参阅第 63 页上的“筛选库”。

该应用程序检索库以识别或确认样品化合物, 将库中的碎片离子质谱图与化合物的离子质谱图进行匹配, 返回最高分数 (最佳匹配)。

13. 若要显示方法中指定的所有化合物, 包括样品中发现的那些, 选中 **Show All Compounds (显示所有化合物)** 复选框。
14. 在 Notes (注释) 框中键入文本或使用 CTRL+V 键从其它应用程序中粘贴文本。  
可以添加注释, 使其区别于其他方法。

## 筛选方法的 General (常规) 页面

使用 General (常规) 页面上的功能指定有关目标筛选主方法的基本信息。

图 69. 筛选方法的 General (常规) 页面

表 49. General (常规) 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 (默认实验室) 若要指定默认实验室名称, 参阅第 42 页上的“指定应用程序默认值”。
Assay Type (实验类型)	方法的目标分析类型名称。实验类型将方法与某个化合物分析或特定类别化合物联系起来 (例如, PAH 的实验类型可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 $\mu\text{L}$ )。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 到 2000 $\mu\text{L}$
Mass Precision (质量数精度)	报告中、峰以及质谱图显示中所用的小数点位数。 有效值: 2 到 6 之间 (包括 2 和 6) 的整数。
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 (Thermo Xcalibur 仪器设置) 对话框, 在此可以编辑仪器方法。

表 49. General (常规) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Update (更新)	执行以下其中一种操作:  <b>Send to Xcalibur Method (发送至 Xcalibur 方法):</b> 以当前仪器方法覆盖 Xcalibur 方法。  <b>Get From Xcalibur Method (从 Xcalibur 方法获得):</b> 以 Xcalibur 方法覆盖当前仪器方法。
Mass Tolerance (质量数容许偏差)	MMU 或 PPM 的上限值。 默认: 500 范围: 0.1 至 50 000 <ul style="list-style-type: none"><li>• (默认) MMU (毫质量数单位): 提取质量数的静态计算。</li><li>• PPM (百万分之一): 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。</li></ul>
Library Search Type (库检索类型)	指定库的类型, 以用于目标筛选。 <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>NIST:</b> 使用随 TraceFinder 应用程序一起安装的 NIST 库。参阅第 13 页上的“安装 NIST 和 QED 库”。</li><li>• <b>Library Manager (库管理器):</b> 使用用户在 Configuration (配置) 控制台上指定的库。参阅第 63 页上的“筛选库”。</li></ul>
Show All Compounds (显示所有化合物)	显示方法中指定的所有化合物, 包括样品中没有发现的那些。
Notes (注释)	对方法的可选注释。

## 编辑 Reports（报告）页面

通过 Reports（报告）页面指定报告和想要为方法创建的报告导出格式。参阅[目标筛选方法的 Reports（报告）页面](#)。

按照如下步骤进行操作：

- 若要打开 Reports（报告）页面
- 若要指定报告类型和导出格式

### ❖ 若要打开 Reports（报告）页面

点击 Method View（方法视图）导航窗格上的 **Reports（报告）**。

筛选方法的 Reports（报告）页面打开。参阅第 216 页上的“[目标筛选方法的 Reports（报告）页面](#)”。该报告列表仅显示了 Target Screening（目标筛选）报告类型。

当创建目标筛选方法时，有关配置 Target Screening Summary Report（目标筛选总结报告）或 Target Screening High Density Sample Report（目标筛选高密度样品报告）的相关信息，参阅第 37 页上的“[指定 Reports（报告）](#)”。

### ❖ 若要指定报告类型和导出格式

1. 若要编辑 Report Title（报告标题），双击该名称并输入新名称。

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 Title（报告标题）。

2. 若要为每个报告类型指定要创建的报告输出类型，在适合的列中选中复选框。
3. 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中选择 **Copy Down（向下复制）**。

Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM	Batch Level
<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

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

默认情况下会清除所有报告类型。

## 目标筛选方法的 Reports（报告）页面

通过 Reports（报告）页面上的功能指定报告和想要为方法创建的报告导出格式。

图 70. 目标筛选方法的 Reports（报告）页面

	Example	Report Name	Report Title	Report Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM	Batch Level
1		Batch Report	TS Summary	Target Screening	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
2		Batch Report Rev 1	TS Summary	Target Screening	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
3		Target Screening Summary Report	TS Summary	Target Screening	<input type="checkbox"/>				
4		Target Screening High Density Sar...	TS Summary	Target Screening	<input type="checkbox"/>				

表 50. Reports（报告）页面参数

参数	描述
<b>报告列表列</b>	
Example（示例）	此选项不适用于目标筛选报告。
Report Name （报告名称）	报告的名称。
Report Title （报告标题）	报告所使用的用户自定义描述。
Report Type （报告类型）	在目标筛选方法中，所有报告均为 Target Screening（目标筛选）报告类型。
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。
Create XML （创建 XML）	将报告导出为 XML 文件。
Create XLSM （创建 XLSM）	此选项不适用于目标筛选报告。
Batch Level （批次水平）	此选项不适用于目标筛选报告。

## 编辑 Screening（筛选）页面

使用 Screening（筛选）页面指定筛选方法的峰过滤设置、筛选数据库、识别和确认设置。

### ❖ 若要打开 Screening（筛选）页面

点击 Method View（方法视图）导航窗格上的 **Screening（筛选）**。

筛选方法的 Screening（筛选）页面打开。参阅第 227 页上的“Screening（筛选）页面”。

本部分包括对下列任务的说明：

- 指定峰过滤器设置
- 指定化合物数据库
- 指定识别和确认设置

### 指定峰过滤器设置

Peak Filter Settings（峰过滤器设置）窗格显示了限制不想要的数据的参数。

Peak Filter Settings			
Use RT Limits	<input type="checkbox"/>	Search from	<input type="text" value="0.00"/> minutes
		to	<input type="text" value="999.00"/> minutes
Use Matrix Blank	<input type="checkbox"/>	Amplifier	<input type="text" value="1.00"/>
Chromatogram View Width			<input type="text" value="0.75"/> minutes
Use Source CID Scans	<input type="checkbox"/>		

### ❖ 若要指定峰过滤器设置

- 若要设置保留时间范围，以避免检索该范围之外的峰，执行以下操作：
  - 选中 **Use RT Limits（使用保留时间限值）** 复选框。  
应用程序激活 Search From（检索起点）和 To（至）选项。
  - 在 Search From（检索起点）框中，输入下限值；在 To（至）框中，输入上限值。
- 若要使用一个或多个用于扣除的阴性对照样品来过滤结果峰，执行以下操作：
  - 选中 **Use Matrix Blank（使用基质空白）** 复选框。

应用程序激活 Amplifier（放大器）选项。

在自动处理过程中，TraceFinder 应用程序从定量样品的峰面积中扣除与阴性对照样品匹配的峰面积。

若要确定互相扣除的一对峰，应用程序选择质量数和保留时间（RT）最接近的两个峰（在化合物数据库中指定的），这两个峰处于方法中指定的质量数容许偏差范围内。

如果同一个化合物峰（在预定义容许偏差窗口中具有相同的质量数和保留时间）出现在多个已选阴性对照样品中，应用程序仅扣除峰面积最高的那个。

当 阴性对照样品中的一个化合物峰与其他 阴性对照样品中另一个峰具有相同的初级离子但不同的加合物时, 则应用程序使用这两个峰的所有加合物进行扣除。例如, 若 阴性对照样品中的一个化合物具有 M+H 和 M+Na 离子, 在另一 阴性对照样品中该化合物具有 M+H 和 M+NH<sub>4</sub> 离子, 应用程序将使用所有这些离子的峰面积进行扣除。

若序列中不存在 阴性对照样品, 或存在一个或多个 阴性对照样品但没有选中 Use Matrix Blank (使用基质空白) 复选框时, 则不执行扣除。若执行扣除且扣除峰面积小于 0, 应用程序将扣除峰面积设置为 0。

- b. 在 Amplifier (放大器) 框中, 设置一个放大器值。

使用向上 / 向下箭头以 1 单位的增量 / 减量改变该值, 或使用键盘输入非整数值。

在执行扣除之前, TraceFinder 应用程序将 阴性对照面积乘以该值。放大器值越大, 应用程序在最终结果中过滤的峰越多。

在采用该方法创建的队列的 Batch View (批次视图) 中, 用户可以选择哪个 阴性对照样品用于扣除。参阅第 365 页上的“在目标筛选批次中进行空白扣除”。

3. 在 Chromatogram View Width (色谱图查看宽度) 框中, 输入一个值, 以指定 Data Review (数据查看) 视图中色谱图的查看范围。
4. 若要使用源 CID 扫描进行目标筛选确认 (碎片离子或库检索), 选中 Use Source CID Scans (使用源 CID 扫描) 复选框。

当选中该复选框时, 若数据文件中源 CID 扫描可用时, 则 TraceFinder 应用程序使用该扫描方式。若该扫描不可用, 应用程序使用 AIF 或 MS/MS 扫描 (当可用时)。

## 指定化合物数据库

Target Screening Settings (目标筛选设置) 窗格显示了存储在以下文件夹中的化合物数据库:

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Databases

Compound Databases			
	Enabled	Database Name	
▶	<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines Example Database	<a href="#">open</a>
▶	<input type="checkbox"/>	Default	<a href="#">open</a>
▶	<input type="checkbox"/>	Converted_Database	<a href="#">open</a>

### ❖ 若要指定化合物数据库

1. 至少选择一个化合物数据库的 Enabled (启用) 复选框。
2. (可选) 若要编辑数据库, 点击 Open (打开) 并执行以下操作:
  - a. 编辑数据库。

参阅第 260 页上的“编辑数据库中的化合物”。
  - b. 当用户编辑完数据库时, 点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 Screening (筛选), 返回至 Screening (筛选) 页面。

## 指定识别和确认设置

默认情况下，TraceFinder 应用程序使用质荷比 ( $m/z$ ) 过滤化合物峰。在 Identification and Confirmation Settings (识别和确认设置) 区域，用户可以使用以下任意操作来选择其他标准以帮助增加置信度：

- 化合物识别用于识别样品化合物，并将其作为结果中所显示匹配的最低要求。

若要识别一个化合物，应用程序在指定保留时间窗口（或方法中指定的优先保留时间窗口）内进行检索，并将样品峰的测量  $m/z$  与目标化合物的预期  $m/z$  进行比较。当样品峰的  $m/z$  处于目标化合物  $m/z \pm 5$  ppm 默认容许偏差范围内，应用程序将该目标化合物视为已识别出来。

- 化合物确认用于确认样品化合物并增加匹配结果的置信度。

若要确认化合物，应用程序检索整个原始数据文件，并将样品峰的测量  $m/z$  与目标化合物的预期  $m/z$  进行比较。当样品峰的  $m/z$  处于目标化合物  $m/z$  的容许偏差范围内时，应用程序将该目标化合物视为已确认。

Identification and Confirmation Settings			
Peaks	<input checked="" type="checkbox"/> $m/z$	Threshold Override	<input type="checkbox"/> 5,000
		S/N Ratio Threshold	5.0
Retention Time	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Ignore if Not Defined	<input type="checkbox"/>
		Window Override (sec)	<input type="checkbox"/> 30
Fragment Ions	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Ignore if Not Defined	<input type="checkbox"/>
		Min. # of Fragments	1
		Intensity Threshold	10,000
		Mass tolerance	5 ppm
Isotopic Pattern	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Fit Threshold (%)	90
		Allowed Mass Deviation (ppm)	5
		Allowed Intensity Deviation (%)	10
		Use Internal Mass Calibration	<input type="checkbox"/>
Library Search	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Score Threshold (%)	80
		Use Reverse Library Searching Only	<input type="checkbox"/>

❖ 若要指定识别和确认设置

1. 若要设置目标优先阈值及仅包括峰面积超出该指定阈值的峰，执行以下操作：

- a. 选中 **Threshold Override (优先阈值)** 复选框。
- b. 在相关框中，输入峰面积作为阈值。

优先考虑该阈值，而不是化合物数据库中的 Response Threshold (响应阈值) 值。应用程序忽略峰面积低于指定阈值的峰。

- c. 若要仅包含信噪比 (S/N) 高于指定值的峰，在 S/N Ratio Threshold (信噪比值) 框中输入一个比率值作为阈值。

应用程序忽略 S/N 低于指定阈值的峰。

2. 若要指定 Retention Time (保留时间) 选项，执行以下操作：

- a. 选中 **Identity (识别)** 或 **Confirm (确认)** 复选框。
- b. 选中 **Window Override (优先窗口)** 复选框并输入窗口值。

该窗口值优先于在化合物数据库中设置的 RT Window (保留时间窗口) 值，并仅包含指定窗口范围内的峰。在指定的 Window Override (优先窗口) 保留时间范围内，仅当化合物的测量保留时间与目标化合物的预期保留时间匹配时，应用程序才识别或确认该化合物的存在。

有关应用程序如何识别保留时间的其他信息，参阅第 223 页上的“Retention Time (保留时间)”。

3. 若要指定 Fragment Ions (碎片离子) 选项，执行以下操作：

- a. 选中 **Identity (识别)** 或 **Confirm (确认)** 复选框。
- b. 当化合物数据库中未指定任何碎片时，若要忽略 Fragment Ions (碎片离子) 选项，选中 **Ignore if Not Defined (未指定时忽略)** 复选框。

当化合物数据库中没有指定化合物的碎片时，应用程序在目标筛选结果中不包含碎片离子识别或确认的结果。

- c. 在 Min. # of Fragments (最少碎片数) 框中，为识别或确认一个化合物输入所需的最少碎片数量。

- d. 在 Intensity Threshold (强度阈值) 框中，输入强度阈值。

碎片强度必须高于识别或确认阈值。

- e. 在 Mass Tolerance (质量数容许偏差) 框中，输入质量数容许偏差值，然后选择质量数容许偏差的单位 (**ppm** 或 **mmu**)。

该质量数容许偏差值表示碎片离子的  $m/z \pm$  容许偏差的毫质量数值或 ppm 值。该参数与为母离子指定的质量数容许偏差值区分开。参阅第 210 页上的“编辑 General (常规) 页面”。

**注释** 当使用离子阱数据时，应用程序采用 300 mmu，忽略用户在此输入的值。

有关应用程序如何识别碎片离子的其他信息，参阅第 224 页上的“Fragment Ions (碎片离子)”。

4. 若要指定 Isotopic Pattern (同位素分布) 选项, 执行以下操作:
  - a. 选中 **Identity (识别)** 或 **Confirm (确认)** 复选框。
  - b. 在 Fit Threshold (匹配阈值) 框中, 输入匹配阈值百分比。

为了识别或确认一个化合物的存在, 同位素分布匹配的分数的百分比必须高于指定的匹配阈值百分比。
  - c. 在 Allowed Intensity Deviation (允许强度偏差) 框中, 输入相对于单同位素离子的质谱仪允许强度偏差, 以基峰高的百分比表示。

若同位素峰强度相对于单同位素离子强度值高于该同位素离子理论相对强度的偏差百分比值, TraceFinder 同位素分布算法认为该同位素峰未找到。为了得到最好的结果, 可将该值设置为使多达 98% 的强度偏差都小于该允许强度偏差值。
  - d. 若要指定同位素分布计算使用内标质量数校正而不是外标质量数校正, 选中 **Use Internal Mass Calibration (使用内标质量数校正)** 复选框。

当选中该复选框时, 应用程序要求同位素  $m/z$  必须更接近于其理论值以避免损失分数。

有关应用程序如何计算同位素分布分数的其他信息, 参阅第 225 页上的“[Isotopic Pattern \(同位素分布\)](#)”。
5. 若要指定 Library Search (库检索) 选项, 执行以下操作:
  - a. 选中 **Identity (识别)** 或 **Confirm (确认)** 复选框。
  - b. 在 Score Threshold (分数阈值) 框内输入阈值。

由库检索匹配所得的结果分数百分比必须高于所输入的阈值以识别或确认某个化合物的存在。

有关应用程序如何执行库检索的其他信息, 参阅第 225 页上的“[Library Search \(库检索\)](#)”。

## 认识识别和确认的过程

TraceFinder 应用程序采用特定的顺序处理识别和确认设置。当化合物在处理顺序的每个阶段都通过了识别时, 应用程序继续执行下一步自动的或已选的识别或确认测试。

**注释** 当用户选择 Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 选项且未在化合物数据库中指定相关的数据时, 应用程序跳过该项标准测试。

当某个化合物在处理过程中某个点未通过识别时, 应用程序会跳过所有剩下的标准测试, 即便是已将其选中, 并且那些标准标记为空白。

TraceFinder 应用程序采用以下顺序处理识别和确认设置:

1.  $m/z$  和 Retention Time (保留时间)

应用程序自动识别所有化合物的质荷比。当用户选择 Retention Time (保留时间) 设置时, 化合物必须首先通过该项标准测试。当化合物未通过  $m/z$  或 Retention Time (保留时间) 识别测试时, 应用程序不对处理顺序更靠后的其他标准执行识别或确认测试。

有关  $m/z$  和 Retention Time (保留时间) 参数的其他信息, 参阅第 222 页上的“[质荷比 \( \$m/z\$ \)](#)”和第 223 页上的“[Retention Time \(保留时间\)](#)”。

## 2. Threshold (阈值)

化合物通过  $m/z$  和 Retention Time (保留时间) 标准测试后, 应用程序自动识别化合物的默认峰面积阈值 (5000)。当用户指定一个 Threshold Override (优先阈值) 时, 应用程序使用该指定阈值。

当化合物未通过 Threshold (阈值) 识别测试时, 应用程序不执行用于识别或确认的 Fragment Ions (碎片离子) 或 Library Search (库检索) 测试。

有关 Threshold (阈值) 参数的其他信息, 参阅第 222 页上的“Threshold (阈值)”。

## 3. Isotopic Pattern (同位素分布)

有关 Isotopic Pattern (同位素分布) 参数的其他信息, 参阅第 225 页上的“Isotopic Pattern (同位素分布)”。

## 4. Fragment Ions (碎片离子)

有关 Fragment Ions (碎片离子) 参数的其他信息, 参阅第 224 页上的“Fragment Ions (碎片离子)”。

## 5. Library Search (库检索)

有关 Library Search (库检索) 参数的其他信息, 参阅第 225 页上的“Library Search (库检索)”。

## 质荷比 ( $m/z$ )

应用程序自动采用  $m/z$  和质量数容许偏差值对每个化合物进行识别, 采用在 General (常规) 页面上指定的质量数容许偏差值。参阅第 210 页上的“编辑 General (常规) 页面”。

应用程序将样品峰的测量  $m/z$  与目标化合物的预期  $m/z$  进行比较。若测量  $m/z$  处于预期  $m/z$  的质量数容许偏差范围内, 应用程序将该目标化合物视为已找到且通过  $m/z$  标准测试。

在 Data Review (数据查看) 的 Target Screening (目标筛选) 页面上, Compounds (化合物) 表格中的 MZ (质荷比) 列表示是否通过该标准测试。Flag (标记) 列表示目标化合物是否被识别、完全确认或同时被识别和确认。有关详细信息, 参阅第 429 页上的“Compounds (化合物) 窗格”。

Compounds (化合物) 表格中也显示了每种化合物的  $m/z$  预期值、 $m/z$  测量值和  $m/z$  差值。

## Threshold (阈值)

应用程序自动采用已选化合物数据库中指定的峰面积和阈值识别每个样品化合物。

在 Identification and Confirmation Settings (识别和确认设置) 窗格中, 用户可以指定要使用的 Threshold Override (优先阈值), 而不采用化合物数据库中指定的峰面积阈值。

应用程序将样品峰的峰面积与指定的峰面积阈值进行对比。当样品峰的峰面积高于或等于化合物数据库中相应的峰面积阈值或优先峰面积阈值时, 可以识别出目标化合物。

在 Data Review (数据查看) 的 Target Screening (目标筛选) 页面上, Compounds (化合物) 表格中的 Flag (标记) 列是指是否通过该标准测试。Flag (标记) 列是指目标化合物是否被识别、完全确认或同时被识别和确认。有关详细信息, 参阅第 429 页上的“Compounds (化合物) 窗格”。

Compounds (化合物) 表格中也显示 Measured Area (测量峰面积) 列, 以绿色显示峰面积值以表示峰面积高于或等于峰面积阈值; 否则将该列峰面积值显示为红色。

### Retention Time (保留时间)

应用程序采用已选化合物数据库中指定的预期保留时间和保留时间窗口值来识别或确认每个样品化合物。

在 Identification and Confirmation Settings (识别和确认设置) 窗格中, 用户可以设置要使用的优先保留时间窗口值, 而不采用化合物数据库中指定的保留时间窗口值。

当化合物数据库为化合物指定了预期保留时间时, 采用以下步骤对化合物进行识别或确认。

- 识别: 应用程序在指定保留时间窗口 (或优先保留时间窗口) 内进行检索, 并将样品峰的测量  $m/z$  与目标化合物的预期  $m/z$  进行对比。当测量  $m/z$  处于预期  $m/z$  的质量数容许偏差范围内时, 该目标化合物被视为已识别出。
- 确认: 应用程序检索整个原始数据文件, 并将样品峰的测量  $m/z$  与目标化合物的预期  $m/z$  进行对比。当测量  $m/z$  处于预期  $m/z$  指定的质量数容许偏差范围内时, 该目标化合物被视为已确认。

当化合物数据库未为化合物指定预期保留时间时, 应用程序无法对化合物进行识别或确认。若用户选择了 Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 选项, 应用程序不执行测试, 因为 Data Review (数据查看) 的 Target Screening (目标筛选) 页面上的保留时间和 RT (保留时间) 标记为空白。

在 Data Review (数据查看) 的 Target Screening (目标筛选) 页面上, Compounds (化合物) 表格中的 RT (保留时间) 列表示是否通过该标准测试。RT (保留时间) 列表示目标化合物是否被识别、完全确认或同时被识别和确认。有关详细信息, 参阅第 429 页上的“Compounds (化合物) 窗格”。Compounds (化合物) 表格中也显示了每种化合物的 RT (保留时间) 预期值、RT (保留时间) 测量值和 RT (保留时间) 差值。

## Fragment Ions (碎片离子)

若要采用碎片离子进行识别或确认, 应用程序要求以下条件:

- 已选化合物数据库中包含目标列表中每个化合物指定的目标碎片离子的荷电质量数。
- HCD (高能碰撞诱导解离)、源内 CID (源内碰撞诱导解离)、AIF (所有离子裂解) 离子质谱图在化合物洗脱时间范围内的某一时间点同时存在。

当化合物数据库中未为目标化合物指定碎片时, 以下内容适用:

- 当选中方法中的 Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 选项时, 应用程序不执行 Fragment Ions (碎片离子) 的过滤。在 Data Review (数据查看) 视图中, FI (碎片离子) 列为空白。
- 当未选中方法中的 Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 选项时, 应用程序认为该目标化合物未识别出。Fragment Ions (碎片离子) 过滤未通过。
- 当选中方法中的 Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 选项时, 应用程序不执行 Fragment Ions (碎片离子) 的过滤且在 Data Review (数据查看) 视图中, FI (碎片离子) 列为空白。

当应用程序处理样品的碎片离子时, 它采用化合物数据库中指定的碎片质量数的数量。用户指定的 Min. # of Fragments (最少碎片数) 值不能高于化合物数据库中指定的碎片数量。

例如, 若化合物数据库中指定某个化合物含有三个碎片离子质量数, 会发生以下情况:

- 在筛选方法的 Min. # of Fragments (最少碎片数) 框中输入“2”时, 应用程序至少找到三个指定碎片离子中的两个。Fragment Ions (碎片离子) 过滤器通过。
- 在筛选方法的 Min. # of Fragments (最少碎片数) 框中输入“4”时, 应用程序只找到三个指定的碎片离子。Fragment Ions (碎片离子) 过滤器未通过。
- 在筛选方法的 Min. # of Fragments (最少碎片数) 框中输入“2”时, 但是应用程序只能找到三个指定碎片离子中的一个。Fragment Ions (碎片离子) 过滤器未通过。

应用程序为每个碎片离子重复以下步骤:

1. 当母离子的质量数 (加上或减去已采集原始数据文件中隔离窗口值的一半质量数) 不在 Data Review (数据查看) 视图的 Chromatogram (色谱图) 窗格内显示的提取离子色谱图的质量数范围内时, 应用程序将该碎片离子视为未找到, 且应用程序未通过 Fragment Ions (碎片离子) 过滤器; 否则, 应用程序继续下一步。
2. 应用程序检查与目标化合物的预期保留时间最接近的且已处理的碎片离子扫描, 并找出与化合物峰顶最接近的 MS/MS 质谱图。

在该质谱图中, 应用程序找到最高的碎片强度, 其质量数处于已输入碎片离子质量数的容许偏差内。当未找到该强度或者强度小于筛选方法中指定的强度阈值时, 应用程序判定未找到已输入的碎片离子; 否则, 判定已找到该碎片离子。

## Isotopic Pattern (同位素分布)

用户可以为批次中的所有化合物选择识别或确认同位素分布。TraceFinder 应用程序采用目标化合物的分子式计算同位素分布分数 (采用百分比值表示)。

对于同位素分布过滤器, 在处理方法中输入其同位素分布参数, 包括匹配阈值。若要识别或确认一个化合物是否存在, 同位素分布匹配得到的分数必须高于匹配阈值。

若要识别或确认某个同位素分布, 应用程序必须至少检测其中一个指定的化合物加合离子。应用程序采用与最大强度加合峰相关的分子式识别要匹配的元素组成。然后, 应用程序为计算得到的元素组分的测量同位素分布和预期同位素分布之间的匹配生成同位素分布分数 (采用百分比值表示)。

- 对于轮廓图数据, 应用程序利用所有扫描的平均值 (与化合物峰顶保留时间最接近的质谱图允许强度偏差范围内的所有扫描) 计算得到同位素分布测量值。在 Data Review (数据查看) 视图中, 应用程序在轮廓图模式下显示预期质谱图和测量质谱图。
- 对于棒状图数据, 应用程序利用峰顶扫描计算同位素分布测量值。在 Data Review (数据查看) 视图中, 应用程序在棒状图模式下显示预期质谱图。

当测量同位素分布、预期同位素分布及强度几乎一致时, 可以采用处理方法中指定的打分参数获取较高的同位素分布分数 (接近 100%)。当分布不相似时, 分数更接近 0%。当分数高于或等于用户输入的匹配阈值且已匹配的同位素数量不是 1 对 1 时, 该过滤器通过。

当用户查看 Data Review (数据查看) 视图中的结果时, IP (同位素分布) 列采用绿色或红色标记显示, 以表示根据方法中指定的标准该化合物是否通过。

## Library Search (库检索)

对于目标筛选分析, 可以在处理方法中为识别或确认选择 Library Search (库检索) 标准。TraceFinder 应用程序通过检索所选库识别或确认样品化合物, 并返回匹配分数 (以百分比形式) 最高的库条目, 这里指库中碎片离子质谱图和化合物离子质谱图的匹配。

- 对于该标准, 可以在处理方法中输入分数阈值。库检索匹配所得的分数必须高于输入的阈值, 且库条目必须匹配化合物名称、化合物分子式或两者均匹配, 以识别或确认化合物的存在。

应用程序采用以下方法来判断匹配何时成功:

- 当库条目中有可用的分子式且该分子式与目标化合物分子式相匹配时:
  - 当库分数高于或等于分数阈值时, 该标准通过。
  - 当库分数低于分数阈值时, 该标准未通过。
- 当库条目中有可用的分子式且库条目中的名称与目标化合物的名称相匹配, 但是库中分子式与目标化合物分子式不匹配时 (或者分子式不可用):
  - 当库分数高于或等于分数阈值时, 该标准通过。
  - 当库分数低于分数阈值时, 该标准未通过。

- 当分子式或库条目名称均与目标化合物不匹配时，该标准未通过且 Lib Match Name (库匹配名称)、Library Score (库分数) 和 Library Match Rank (库匹配排序) 列以黑色文本的形式显示 N/A。

**注释** 当化合物已识别但是没有执行 MS/MS 扫描时，Lib Match Name (库匹配名称)、Library Score (库分数) 和 Library Match Rank (库匹配排序) 列以红色文本的形式显示 N/A。

- 当已执行 MS/MS 扫描且库条目和分子式均与目标化合物相匹配时：
  - 当库分数高于或等于分数阈值时，该标准通过。Lib Match Name (库匹配名称)、Library Score (库分数) 和 Library Match Rank (库匹配排序) 列以绿色文本的形式显示其值。
  - 当库分数低于分数阈值时，该标准未通过。Lib Match Name (库匹配名称)、Library Score (库分数) 和 Library Match Rank (库匹配排序) 列以红色文本的形式显示其值。

若要采用库检索进行识别或确认，TraceFinder 应用程序要求数据满足以下条件：

- 原始数据文件包含 HCD (高能碰撞诱导解离)、源内 CID (源内碰撞诱导解离) 或 AIF (所有离子裂解) 离子质谱图。
- 在化合物洗脱时间范围内的某个时间点上存在质谱图。

应用程序执行正向库检索或逆向库检索。正向检索将未知化合物的质谱图与库条目中的质谱图进行对比，而逆检索将库条目与未知化合物质谱图进行对比。

当某个已选择母离子的 MS/MS 质谱图不存在时，由于化合物扫描包含所有共洗脱母离子的混合碎片，因此应用程序执行逆向库检索。当存在混合碎片时，执行正向检索将使结果趋向于最强母离子，因为其碎片将成为主导，同时由于应用程序必须检索库中的每个质谱图，因此正向检索所花费的时间也更长。

当某个已选择母离子的 MS/MS 质谱图存在时，由于扫描通常仅包含一个或两个母离子的碎片，因此应用程序执行正向库检索，即将该质谱图与库条目进行匹配更快速且更准确。当用户选择处理方法中的 Use Reverse Library Searching Only (仅使用逆向库检索) 复选框时，应用程序仅执行逆向库检索。

当用户使用轮廓图数据时，应用程序使用未知峰的平均质谱图作为库检索的导入质谱图。该平均质谱图基于与峰顶保留时间最接近的 10% 范围内的所有扫描质谱图的平均。当用户使用棒状图数据时，应用程序使用峰顶扫描作为库检索的导入质谱图。

当应用程序找到匹配时，即为该匹配库条目生成分数百分比。该库检索能够获得具有不同分数的多个匹配。

根据导入质谱图中的  $m/z$  进行检索之后，应用程序仅针对首次库检索找到的匹配项目进行其他检索，但是这次检索根据目标化合物的名称进行，然后根据分子式进行。若至少找到一个匹配条目，应用程序显示来自第二次检索分数最高的匹配，供数据查看。若第二次检索未找到匹配，应用程序显示来自第一次检索分数最高的匹配。

## Screening (筛选) 页面

使用 Screening (筛选) 页面上的功能指定筛选方法的峰过滤设置、筛选数据库、识别和确认设置。

图 71. 目标筛选方法的 Screening (筛选) 页面

▼ Settings

**Peak Filter Settings**

<input type="checkbox"/> Use RT Limits	<input type="checkbox"/>	Search from	<input type="text" value="0.00"/>	minutes
		to	<input type="text" value="999.00"/>	minutes
<input type="checkbox"/> Use Matrix Blank	<input type="checkbox"/>	Amplifier	<input type="text" value="1.00"/>	
Chromatogram View Width			<input type="text" value="0.75"/>	minutes
<input type="checkbox"/> Use Source CID Scans	<input type="checkbox"/>			

▼ Target Screening Settings

**Compound Databases**

	Enabled	Database Name	
▶	<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines Example Database	<a href="#">open</a>
▶	<input type="checkbox"/>	Default	<a href="#">open</a>

**Identification and Confirmation Settings**

<b>Peaks</b>	<input checked="" type="checkbox"/> <i>m/z</i>	Threshold Override	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="5,000"/>
		S/N Ratio Threshold		<input type="text" value="5.0"/>
<b>Retention Time</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Ignore if Not Defined	<input type="checkbox"/>	
		Window Override (sec)	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="30"/>
<b>Fragment Ions</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Ignore if Not Defined	<input type="checkbox"/>	
		Min. # of Fragments		<input type="text" value="1"/>
		Intensity Threshold		<input type="text" value="10,000"/>
		Mass tolerance		<input type="text" value="5"/> ppm ▼
<b>Isotopic Pattern</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Fit Threshold (%)		<input type="text" value="90"/>
		Allowed Mass Deviation (ppm)		<input type="text" value="5"/>
		Allowed Intensity Deviation (%)		<input type="text" value="10"/>
		Use Internal Mass Calibration	<input type="checkbox"/>	
<b>Library Search</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Identify <input type="checkbox"/> Confirm	Score Threshold (%)		<input type="text" value="80"/>
		Use Reverse Library Searching Only	<input type="checkbox"/>	

表 51. Screening (筛选) 页面参数 (第 1 页, 共 3 页)

参数	描述
<b>Peak Filter Settings (峰过滤器设置)</b>	
Use RT Limits (使用保留时间限值)	指定检索的上限和下限。 范围: 0.00 至 999.99 分钟 默认: 下限值为 0.00 分钟; 上限值为 9999.00 分钟
Use Matrix Blank (使用基质空白)	指定在自动处理过程中, TraceFinder 应用程序从定量样品的匹配峰面积中扣除已选阴性对照样品的峰面积。
Amplifier (放大器)	在执行扣除之前, TraceFinder 应用程序将阴性对照面积乘以该值。放大器值越大, 应用程序在最终结果中过滤的峰越多。 范围: .01 至 1000.00 默认: 1.00
Chromatogram View Width (色谱图视图宽度)	指定一个窗口宽度, 以指定 Data Review (数据查看) 视图中色谱图的查看范围。 范围: 0.10 至 999.00 分钟 默认: 0.75 分钟
Use Source CID Scans (使用源 CID 扫描)	指定应用程序使用源 CID 扫描 (当其在数据文件中可用时)。若这些扫描不可用, 应用程序使用 AIF 或 MS/MS 扫描 (当可用时)。
<b>Compound Databases (化合物数据库)</b>	
Enabled (启用)	指定用于目标筛选处理的数据库。
Database Name (数据库名称)	列出了 Databases (数据库) 文件夹中可用的数据库。
<b>Identification and Confirmation Settings (识别和确认设置)</b>	
Peaks (峰)	指定应用程序使用质荷比 ( $m/z$ ) 过滤化合物峰。
Threshold Override (优先阈值)	优先考虑该阈值, 而不是化合物数据库中的 Response Threshold (响应阈值) 值。应用程序忽略峰面积低于指定阈值的峰。 范围: 1000 至 1 000 000 000 默认: 5000
S/N Ratio Threshold (信噪比阈值)	仅包含信噪比 (S/N) 高于指定值的峰。 范围: 1.0 至 100 000 默认: 5.0
Retention Time (保留时间)	指定用于保留时间检索的 Identify (识别) 或 Confirm (确认) 选项。若要识别某个化合物, 应用程序检索指定的 RT (保留时间) 窗口进行匹配。若要确认某个化合物, 应用程序检索整个原始数据文件。
Ignore if Not Defined (未指定时忽略)	当化合物数据库中未指定任何保留时间且 Data Review (数据查看) 目标筛选结果中不含保留时间识别或确认结果时, 忽略用户为 Retention Time (保留时间) 选项指定的值。

表 51. Screening (筛选) 页面参数 (第 2 页, 共 3 页)

参数	描述
Window Override (优先窗口)	指定秒数以覆盖化合物数据库中设置的 RT Window (保留时间窗口) 值并仅包含该指定窗口范围内的峰。在指定的 Window Override (优先窗口) 保留时间范围内, 仅当化合物的测量保留时间与目标化合物的预期保留时间匹配时, 应用程序才识别或确认该化合物存在。 范围: 0 至 999 秒 默认: 30 秒
Fragment Ions (碎片离子)	指定用于碎片离子匹配的 Identify (识别) 或 Confirm (确认) 选项。若要识别某个碎片, 应用程序检索指定的 RT (保留时间) 窗口进行匹配。若要确认某个碎片, 应用程序检索整个原始数据文件。
Ignore if Not Defined (未指定时忽略)	当化合物数据库中未指定任何碎片且 Data Review (数据查看) 目标筛选结果中不含碎片离子识别或确认结果时, 忽略用户为 Fragment Ions (碎片离子) 选项指定的值。
Min. # of Fragments (最少碎片数)	指定识别或确认是否存在一个化合物所需的最少碎片数量。 范围: 1 至 5 默认: 1
Intensity Threshold (强度阈值)	指定碎片离子峰的最小峰高。碎片离子峰必须高于识别或确认强度阈值。  范围: 1 至 1e9 默认: 10 000
Mass Tolerance (质量数容许偏差)	指定碎片离子的 $m/z \pm$ 容许偏差值的毫质量数或 ppm 值, 与为母离子指定的质量数容许偏差区分开 (参阅第 210 页上的“编辑 General (常规) 页面”)。  范围: 0 至 500 默认: 5 单位: mmu 或 ppm  <b>注释</b> 当使用离子阱数据时, 应用程序采用 300 mmu, 忽略用户在此输入的值。
Isotopic Pattern (同位素分布)	指定用于同位素分布匹配的 Identify (识别) 或 Confirm (确认) 选项。若要识别某个化合物, 应用程序检索指定的 RT (保留时间) 窗口进行匹配。若要确认某个化合物, 应用程序检索整个原始数据文件。
Fit threshold (匹配阈值)	为了识别或确认一个化合物的存在, 同位素分布匹配的分数百分比必须高于指定的匹配阈值百分比。 默认: 90%

表 51. Screening (筛选) 页面参数 (第 3 页, 共 3 页)

参数	描述
Allowed Mass Deviation (允许质量数偏差)	<p>指定质谱图数据中的允许质量数偏差。</p> <p>若同位素峰的测量 <math>m/z</math> 相对于其预期 <math>m/z</math> 的偏差低于该值, TraceFinder 同位素分布算法将其认定为已找到。为了得到最好的结果, 可将该值设置为使多达 98% 的质量数偏差都小于该允许质量数偏差值。</p> <p>范围: 3 至 100 ppm 默认: 3 ppm</p>
Allowed Intensity Deviation (允许强度偏差)	<p>指定相对于单同位素离子的质谱仪允许强度偏差, 以基峰高的百分比表示。</p> <p>若同位素峰强度相对于单同位素离子强度值高于该同位素离子理论相对强度的偏差百分比, TraceFinder 同位素分布算法认为该同位素峰未找到。为了得到最好的结果, 可将该值设置为使多达 98% 的强度偏差都小于该允许强度偏差值。</p> <p>默认: 10%</p>
Use Internal Mass Calibration (使用内标质量数校正)	<p>指定应用程序要求同位素 <math>m/z</math> 必须更接近于其理论值以避免损失分数。</p>
Library Search (库检索)	<p>指定用于库检索的 Identify (识别) 或 Confirm (确认) 选项。若要识别某个化合物, 应用程序检索指定的 RT (保留时间) 窗口进行匹配。若要确认某个化合物, 应用程序检索整个原始数据文件。</p>
Score Threshold (分数阈值)	<p>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。</p> <p>默认: 80%</p>
Use Reverse Library Searching Only (仅使用逆向库检索)	<p>将库条目与未知化合物进行对比 (正向检索将未知化合物的质谱图与库条目的质谱图进行对比)。该选项对 NIST 和 Library Manager (库管理器) 检索均可用。</p>

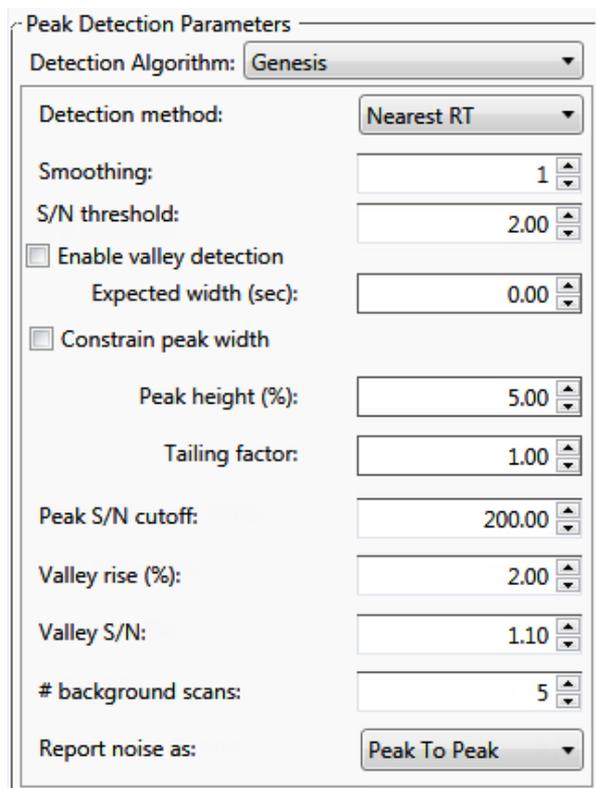
## 编辑 Peak Detection (峰检测) 页面

TraceFinder 应用程序可以使用以下任一峰检测算法: Genesis、ICIS 或 Avalon。

### ❖ 若要指定峰检测参数

1. 点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Peak Detection (峰检测)**。  
筛选方法的 Peak Detection (峰检测) 页面打开。
2. 选择一种检测算法: **Genesis**、**ICIS** 或 **Avalon**。
  - 为与 Xcalibur 1.0 分析反向兼容提供了 Genesis 峰检测算法。
  - ICIS 峰检测算法设计用于处理 MS (质谱仪) 数据, 在 MS (质谱仪) 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/Vis (紫外可见) 数据积分和模拟色谱图而设计。
3. 指定方法的峰检测参数。

**图 72.** 目标筛选方法的 Genesis 峰检测页面上的参数



Peak Detection Parameters	
Detection Algorithm:	Genesis
Detection method:	Nearest RT
Smoothing:	1
S/N threshold:	2.00
<input type="checkbox"/> Enable valley detection	
Expected width (sec):	0.00
<input type="checkbox"/> Constrain peak width	
Peak height (%):	5.00
Tailing factor:	1.00
Peak S/N cutoff:	200.00
Valley rise (%):	2.00
Valley S/N:	1.10
# background scans:	5
Report noise as:	Peak To Peak

筛选方法的 Genesis 峰检测参数与定量方法的参数相同。参阅第 142 页上的“Genesis 的 Detect (检测) 页面参数”。

图 73. 目标筛选方法的 ICIS 峰检测页面上的参数

The image shows a software dialog box titled "Peak Detection Parameters". At the top, "Detection Algorithm:" is set to "ICIS". Below this, several parameters are listed with their current values and controls:

- Detection method: Nearest RT (dropdown)
- Smoothing: 1 (spin box)
- Area noise factor: 5 (spin box)
- Peak noise factor: 10 (spin box)
- Baseline window: 40 (spin box)
- Constrain peak width
- Peak height (%): 5.00 (spin box)
- Tailing factor: 1.00 (spin box)
- Noise method: Incos (dropdown)
- Min peak width: 3 (spin box)
- Multiplet resolution: 10 (spin box)
- Area tail extension: 5 (spin box)
- Area scan window: 0 (spin box)
- RMS

筛选方法的 ICIS 峰检测参数与定量方法的参数相同。参阅第 146 页上的“ICIS 的 Detect (检测) 页面参数”。

图 74. 目标筛选方法的 Avalon 峰检测页面上的参数

- Peak Detection Parameters

Detection Algorithm: Avalon

Detection method: Nearest RT

Smoothing: 1

Time	Event	Value
Initial	Start Threshold	10000.000
Initial	End Threshold	10000.000
Initial	Area Threshold	10000.000
Initial	P-P Threshold	1.000
Initial	Bunch Factor	1.000
Initial	Negative Peaks	Off
Initial	Tension	1.000

Autocalc initial events Edit

筛选方法的 Avalon 峰检测参数与定量方法的参数相同。参阅第 148 页上的“[Avalon 的 Detect \(检测\) 页面参数](#)”。

## 以新名称另存主方法

用户可以将任意定量或目标筛选方法保存成新名称，或者采用当前方法数据覆盖已存在的方法。新方法包含所有已保存方法中的数据。

### ❖ 若要以新名称另存方法

1. 从主菜单中选择 **File（文件） > Save As（另存为）**。

Save Master Method As（将主方法另存为）对话框打开，显示所有定量和目标筛选方法。

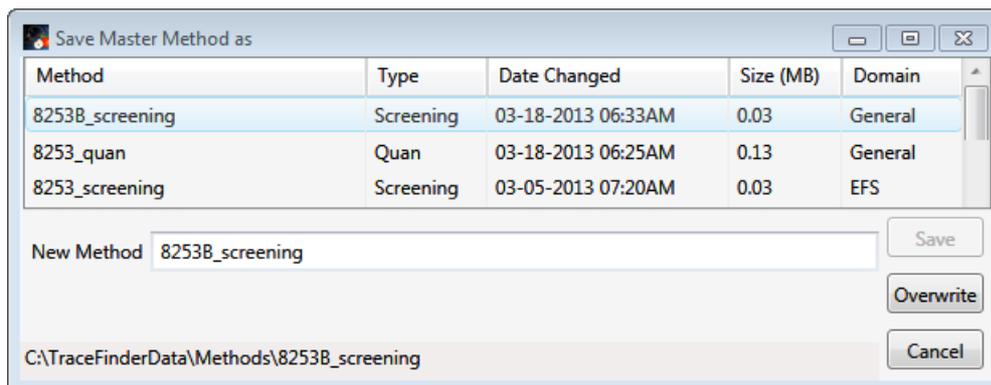


表 52. Save Master Method As（将主方法另存为）对话框参数

参数	描述
Method（方法）	已选类型的方法名称。
Type（类型）	方法的类型：Quan（定量）或 Screening（筛选）。
Date Changed（更改日期）	方法的最后更新日期。
Size（大小）	单位为兆字节。
Domain（领域）	TraceFinder 中创建方法的领域：General（常规）、EFS（环境和食品安全）、Clinical（临床）或 Forensic（法医学）。
New Method（新方法）	要创建的新方法的名称。
Path（路径）	Methods（方法）文件夹中已选方法的路径。

2. 执行下列操作之一：

- 在 New Method（新方法）框内，输入新方法的名称。  
应用程序启用 Save（保存）按钮。
- 在 Method（方法）列中选择要覆盖的方法。  
应用程序启用 Overwrite（覆盖）按钮。

3. 点击 **Save（保存）** 或 **Overwrite（覆盖）**。

应用程序将所有方法数据保存成指定的名称并打开新方法的 General（常规）页面。

## 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。可以创建一个指定峰检测标准、筛选库、确认离子标准、化合物校正和定性峰处理的方法模板。有关 Method Template Editor（方法模板编辑器）上功能的完整说明，参阅第 241 页上的“Method Template Editor（方法模板编辑器）”。

应用程序使用方法模板中的设置进行数据识别，以显示在 Qualitative View（定性视图）上。参阅第 446 页上的“Qualitative View（定性视图）”。

仅定量方法使用方法模板。目标筛选方法不使用方法模板。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开 Method Template Editor（方法模板编辑器）
- 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（方法模板编辑器）

1. 点击位于导航窗格的 **Method Development（方法开发）**。

A blue rectangular button with the text "Method Development" in white.

Method Development（方法开发）导航窗格打开。

2. 点击 **Method View（方法视图）**。

A blue rectangular button with a white downward-pointing triangle on the left, the text "Method View" in white, and a white right-pointing arrow on the right.

3. 从主菜单中选择 **File（文件） > New（新建） > Method Template（方法模板）**。

Method Template Editor（方法模板编辑器）打开。参阅第 241 页上的“Method Template Editor（方法模板编辑器）”。

❖ 若要指定峰标准

Find the peaks\*

Sensitivity: Genesis

Limit the retention time range:  
Min RT (min): 0.00  
Max RT (min): 999.00

Enable peak threshold  
% of largest peak: 10  
 By height  
 By area

Only select top peaks  
Select the top: 10  
 By height  
 By area

\* These parameters may also be used for qualitative peak processing.

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, 指定峰检测器算法检索低水平峰时的范围。
  - 为与 Xcalibur 1.0 分析反向兼容提供了 Genesis 峰检测算法。
  - ICIS 峰检测算法设计用于处理 MS (质谱仪) 数据, 在 MS (质谱仪) 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/Vis (紫外可见) 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导致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 (启用峰阈值) 过滤器来确定哪些峰符合指定的最大峰峰高或峰面积的百分比。
4. 若要按峰高或峰面积显示指定数量的最大峰, 选中 **Only Select Top Peaks (仅选择最高峰)** 复选框并输入要显示的峰数目。

## ❖ 若要识别峰

Identify the peaks\*

Use these libraries

NISTDEMO  
 QED NIST Library

Limit library hits:

Best match method:

\* These parameters may also be used for qualitative peak processing.

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 (使用这些库) 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 (限制谱库匹配数) 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

Handle confirming ions

Include confirming ions  
Number of confirming ions:

Specify default ion ratio ranges  
Ion coelution (min):

Window type:

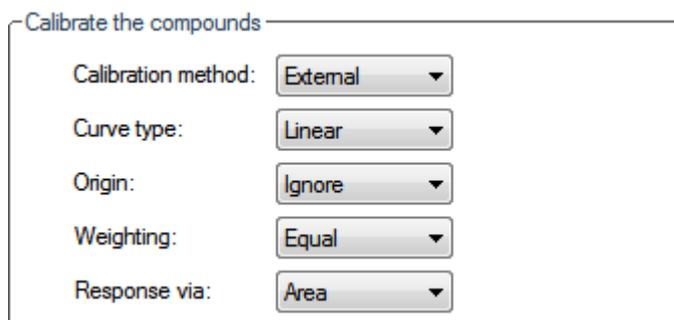
Window(+/- %):

Include compound peak spectrum as reference spectrum

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。  
该值是质谱图中其它离子的数量, 其离子比率与定量离子相比较。使用该比率, 即可确定它是目标化合物还是其它类型。可以将该值设置为 1 至 10 之间包括 1 和 10 的任意整数。该值默认为 **2**, 因为用户通常使用一个定量质量数离子和两个确认离子进行 3-离子实验。  
系统选择强度最大的离子为定量离子, 并采用该质量数进行数学运算。
2. 若要指定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之间的保留时间最大差值, 在 Ion Coelution (min) (离子共洗脱, 分钟) 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 (窗口类型) 列表中选择 **Absolute (绝对)** 或 **Relative (相对)**。
  - c. 若要指定可接受离子比率范围, 在 Window (+/- %) (窗口, +/- %) 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



Calibrate the compounds

Calibration method: External

Curve type: Linear

Origin: Ignore

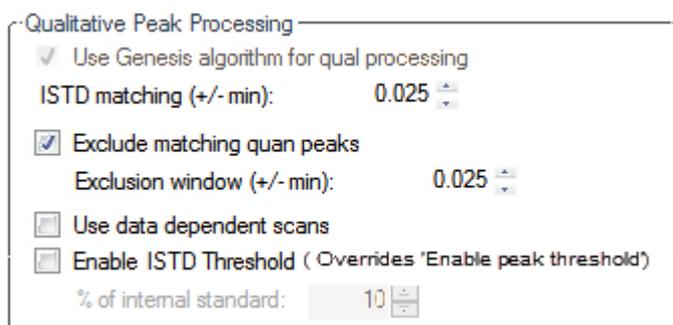
Weighting: Equal

Response via: Area

1. 在 Calibration Method (校正方法) 列表中选择 **Internal (内标化合物)** 或 **External (外标化合物)**。
2. 在 Curve Type (曲线类型) 列表中选择下列选项之一:
  - **Linear (线性)**: 除此之外, 所有其他设置均可用: 当在 Origin (原点) 列表选择了 Include (包括) 时, Weighting (加权) 参数不可用。
  - **Quadratic (二次方)**: 除此之外, 所有其他设置均可用: 当在 Origin (原点) 列表选择了 Include (包括) 时, Weighting (加权) 参数不可用。
  - **Average RF (平均响应因子)**: Weighting (加权) 和 Origin (原点) 参数不可用。
3. 在 Origin (原点) 列表中选择下列选项之一:
  - **Ignore (忽略)**: 当生成曲线时, 指定不将原点作为校正曲线的有效点。当选择 Ignore (忽略) 时, 校正曲线不一定经过原点。
  - **Force (强制)**: 当生成校正曲线时, 指定校正曲线通过数据点原点。
  - **Include (包括)**: 指定在计算校正曲线时, 将原点作为单个数据点。当选择 Include (包括) 时, 校正曲线不一定经过原点。
4. 在 Weighting (加权) 列表中, 选择下列选项之一:
  - **Equal (相等)**: 指定在计算校正曲线时, 将原点作为单个数据点。当选择 Equal (相等) 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。校正物的权重为其量的倒数。
  - **1/X<sup>2</sup>**: 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<sup>2</sup>。校正物的权重为其量平方的倒数。
  - **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<sup>2</sup>**: 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<sup>2</sup>。校正物的权重为其响应值 (或响应比率) 平方的倒数。
5. 在 Response Via (响应方式) 列表中, 选择 **Area (峰面积)** 或 **Height (峰高)**。
- **Area (峰面积)**: 指定 TraceFinder 应用程序在响应计算中使用该面积值。
  - **Height (峰高)**: 指定应用程序在响应计算中使用该峰高值。

#### ❖ 若要指定定性峰处理



1. 选中 **Use Genesis Algorithm for Qual Processing (采用 Genesis 算法进行定性处理)** 复选框, 并指定内标匹配的值。

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 47 页上的“Genesis Detection Method (检测方法)”。

仅当 Find the Peaks (查找峰) 区域的 Sensitivity (灵敏度) 参数被设为 ICIS 或 Avalon 时, 该参数才可用。当用户选中 Use Genesis Algorithm for Qual Processing (采用 Genesis 算法进行定性处理) 复选框时, 应用程序忽略 Find the Peaks (查找峰) 区域的 Sensitivity (灵敏度) 参数。

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。

当采用该功能处理样品时, 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<sup>n</sup> 扫描执行库检索。

该选项仅限制数据依赖扫描质谱的 Data Review (数据查看)。参阅第 514 页上的“使用 Report View (报告视图)”。

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”。

- 若要指明是否选择大于最接近内标峰 (可决定化合物选择的峰) 最小百分比的峰, 选中 **Enable ISTD Threshold (启用内标阈值)** 复选框并指定一个最小百分比。

若要考虑用于处理方法的峰, TraceFinder 应用程序使用 Enable ISTD Threshold (启用内标阈值) 过滤器来确定哪些峰符合最接近内标峰峰高的指定百分比。

当用户选择 Enable ISTD Threshold (启用内标阈值) 参数时, 该方法忽略为 Enable Peak Threshold (启用峰阈值) 和 Only Select Top Peaks (仅选择最高峰) 参数设置的值。参阅第 236 页上的“若要指定峰标准”。

**注释** 当用户采用 Method Forge (方法向导) 创建方法时, 应用程序忽略 Qualitative Peak Processing (定性峰处理) 区域的参数。

#### ❖ 若要为方法输入注释

在 Notes (注释) 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

- 从 Method Template Editor (方法模板编辑器) 菜单中选择 **File (文件) > Save (保存)**。

Save Method Template (保存方法模板) 对话框打开。

- 执行下列操作之一:

输入主方法的新名称, 然后点击 **OK (确定)**。

– 或 –

选择要覆盖的方法名称, 然后点击 **Overwrite (覆盖)**。

TraceFinder 应用程序将新方法模板保存在以下文件夹中:

...\TraceFinderData\Templates\Methods\Forensic

当用户采用 Method Forge (方法向导) 创建方法时, 可以采用已保存的方法模板。参阅第 81 页上的“使用 Method Forge (方法向导) 创建新方法”。

## Method Template Editor (方法模板编辑器)

采用 Method Template Editor (方法模板编辑器) 上的功能可以指定峰检测标准、筛选库、确认离子标准、化合物校正和定性峰处理方法。

图 75. Method Template Editor (方法模板编辑器) 对话框

The dialog box is titled "Method Template Editor - Default" and contains the following sections:

- Find the peaks\***
  - Sensitivity: Genesis
  - Limit the retention time range:
    - Min RT (min): 0.00
    - Max RT (min): 999.00
  - Enable peak threshold
    - % of largest peak: 10
    - By height
    - By area
  - Only select top peaks
    - Select the top: 10
    - By height
    - By area
- Identify the peaks\***
  - Use these libraries:
    - NISTDEMO
    - QED NIST Library
  - Limit library hits: 3
  - Best match method: Reverse Search Index
- Handle confirming ions**
  - Include confirming ions
    - Number of confirming ions: 2
  - Specify default ion ratio ranges
    - Ion coelution (min): 0.025
    - Window type: Absolute
    - Window(+/- %): 20.00
  - Include compound peak spectrum as reference spectrum
- Calibrate the compounds**
  - Calibration method: External
  - Curve type: Linear
  - Origin: Ignore
  - Weighting: Equal
  - Response via: Area
- Qualitative Peak Processing**
  - Use Genesis algorithm for qual processing
    - ISTD matching (+/- min): 0.025
  - Exclude matching quan peaks
    - Exclusion window (+/- min): 0.025
  - Use data dependent scans
  - Enable ISTD Threshold ( Overrides 'Enable peak threshold')
    - % of internal standard: 10
- Notes**
  - \* These parameters may also be used for qualitative peak processing.

表 53. Method Template Editor (方法模板编辑器) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
<b>Find the peaks (查找峰)</b>	
Sensitivity (灵敏度)	指定峰检测器算法检索低水平峰的范围。
Limit the Retention Time Range (限制保留时间范围)	Min RT (最小保留时间) 指定了范围的开始。Max RT (最大保留时间) 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决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)	通过峰高或峰面积显示指定数量的最高峰。
<b>Identify the peaks (识别峰)</b>	
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检索质谱图时返回的匹配数。
Best Match Method (最佳匹配方法)	指定库检索的排序方式。 有效值: Search Index (检索索引)、Reverse Search Index (逆向检索索引)、Match Probability (检索概率)
<b>Handle confirming ions (处理确认离子)</b>	
Include Confirming Ions/ Number Of Confirming Ions (包括确认离子 / 确认离子数)	指定确认离子数量, 这些离子是指质谱图中与定量离子比率进行对比以识别化合物的那些离子。 该值默认为 2, 因为用户通常使用一个定量质量数离子和两个确认离子进行 3-离子实验。 范围: 1 到 10 之间 (包括 1 和 10) 的整数。
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 (离子共洗脱) 指定了确认离子峰与定量离子峰之间的保留时间最大差值。 Window Type (窗口类型) 指定了确定可接受离子比率范围的 Absolute (绝对) 或 Relative (相对) 计算方法。 Window (+/-%) (窗口, +/-%) 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)	处理方法中包括峰质谱图。使用该设置在 Data Review (数据查看) 模式下进行质谱图比较。
<b>Calibrate the compounds (校正化合物)</b>	
Calibration Method (校正方法)	指定一个内标或外标校正方法。
Curve Type (曲线类型)	指定一个线性、二次方或平均响应因子曲线类型。

表 53. Method Template Editor (方法模板编辑器) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Origin (原点)	<p>指定在生成校正曲线时忽略、强制经过还是包括原点。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Ignore (忽略): 指定当生成曲线时不将原点作为校正曲线的有效点。当选择 Ignore (忽略) 时, 校正曲线不一定经过原点。</li> <li>Force (强制): 当生成校正曲线时, 指定校正曲线通过数据点原点。</li> <li>Include (包括): 指定在计算校正曲线时, 将原点作为单个数据点。当选择 Include (包括) 时, 校正曲线不一定经过原点。</li> </ul>
Weighting (加权)	<p>指定校正数据点的权重。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Equal (相等): 指定在计算校正曲线时, 将原点作为单个数据点。当选择 Equal (相等) 时, 校正曲线不一定经过原点。</li> <li>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。校正物的权重为其量的倒数。</li> <li>1/X<sup>2</sup>: 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<sup>2</sup>。校正物的权重为其量平方的倒数。</li> <li>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。</li> <li>1/Y<sup>2</sup>: 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<sup>2</sup>。校正物的权重为其响应值 (或响应比率) 平方的倒数。</li> </ul>
Response Via (响应方式)	<p>指定 TraceFinder 应用程序在响应计算中是否使用峰面积或峰高。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Area (峰面积): 指定应用程序在响应计算中使用峰面积值。</li> <li>Height (峰高): 指定应用程序在响应计算中使用峰高值。</li> </ul>
<b>Qualitative Peak Processing (定性峰处理)</b>	
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 (总离子流图报告) 或 Data Review (数据查看) 视图的 Qual Mode (定性模式) 视图中列出这些化合物。
Exclude Matching Quant 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 (排除窗口) 范围外的峰。
Exclusion Window (排除窗口)	指定一个范围, 然后加 / 减指定 Exclusion Window (排除窗口) 值。
Use Data Dependent Scans (使用数据依赖扫描)	将 Data Review (数据查看) 限制为只有数据依赖扫描质谱。参阅第 514 页上的“使用 Report View (报告视图)”。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。
Enable ISTD Threshold (启用内标阈值)	当进行峰识别时, 指定采用最小阈值 (指定为最接近内标峰的百分比), 而不是在 Enable Peak Threshold (启用峰阈值) 和 Only Select Top Peaks (仅选择最高峰) 参数中指定的阈值来处理定性峰。在参数表中参阅 <a href="#">Enable Peak Threshold (启用峰阈值)</a> 或 <a href="#">Only Select Top Peaks (仅选择最高峰)</a> 。
% of Internal Standard (内标百分比)	最接近内标峰的百分比, 用作识别峰的最小阈值。

## 导入已发布的主方法

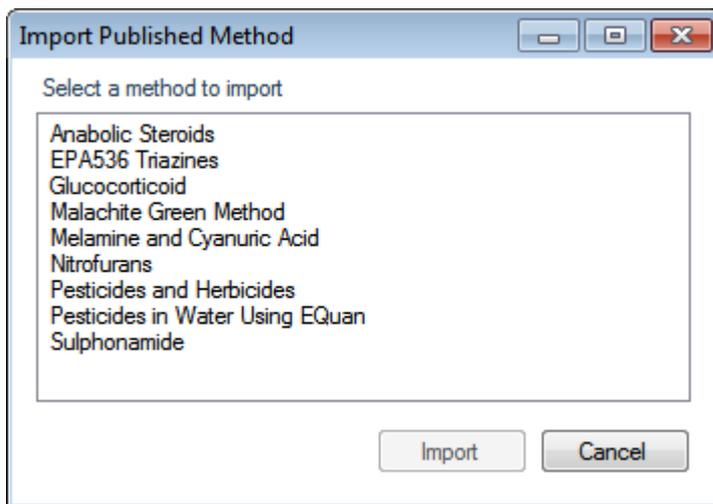
在 TraceFinder 应用程序中，可以导入已发布的方法用于检测、处理和报告。TraceFinder 安装提供已发布方法的以下文件夹：

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Published Master Methods

### ❖ 若要导入已发布主方法

1. 从主菜单中选择 **Method View（方法视图） > Import Published Method（导入已发布方法）**。

Import Published Method（导入已发布方法）对话框显示。



2. 选择要导入的方法。
3. 点击 **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：

...\TraceFinderData\Templates\Methods\Forensic

可以使用任意 **Open Method（打开方法）** 命令打开这个方法，如同打开创建的方法一样。

## 导出质量数数据

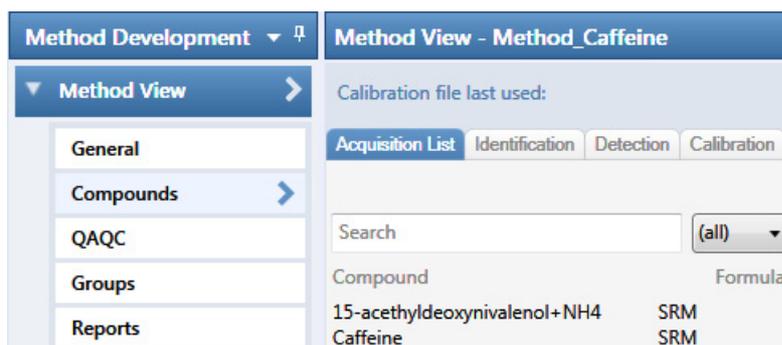
在 TraceFinder 应用程序中，用户可以从一个定量方法中导出质量数数据列表，导入至可由 TSQ、ISQ、Q Exactive、TSQ Endura 或 TSQ Quantiva 应用程序读取的 XML 文件。用户只能从定量数据中导出质量数数据。

本章包括以下导出数据格式的示例：

- Triple Quadruple（三重四极杆）格式
- Q Exactive 格式
- TSQ Quantiva/Endura SIM 格式
- TSQ Quantiva/Endura SRM 格式

### ❖ 若要将质量数数据列表导出至 XML 文件

1. 打开希望导出其质量数数据列表的主方法。  
若用户改动了方法，用户必须在导出质量数数据列表之前保存方法。
2. 若要查看质量数数据列表，点击 Compounds（化合物）页面上的 **Acquisition List（采集列表）** 选项卡。



导出数据不需要显示 Acquisition List（采集列表），但是 Acquisition List（采集列表）中的化合物必须至少包含一种适合导出文件格式的实验类型。有关显示 Acquisition List（采集列表）的信息，参阅第 113 页上的“Acquisition List（采集列表）”。有关编辑化合物实验类型的信息，参阅第 260 页上的“编辑数据库中的化合物”。

3. 从主菜单中选择 **Method View（方法视图） > Export Mass List（导出质量数列表）**。

**重要信息** 若用户没有配置 TSQ、ISQ、Q Exactive、TSQ Endura 或 TSQ Quantiva 仪器，一则消息出现询问想要导出哪种格式：Triple Quadrupole（三重四极杆）、Q Exactive、TSQ Quantiva/Endura SIM 或 TSQ Quantiva/Endura SRM。

应用程序采用一种与已配置仪器相兼容的格式将 Acquisition List（采集列表）中的质量数数据写入以下文件夹中：

...\\TraceFinderData\\Methods\\*Methodname*

## Triple Quadruple (三重四极杆) 格式

**注释** 用户只能将 SRM 或 SIM 数据类型导出为 Triple Quadrupole (三重四极杆) 格式。

TraceFinder 应用程序将质量数数据写至以下文件中:

```
...\TraceFinderData\Methods\Methodname\*.xml
```

该文件中的数据与 TSQ XML 数据匹配, 可用于应用程序的仪器方法编辑器中。

## Q Exactive 格式

**注释** 用户只能将 XIC 数据类型导出为 Q Exactive 格式。

TraceFinder 应用程序将质量数数据写至以下文件中:

```
...\TraceFinderData\Methods\Methodname\Methodname.xml.include-masses
```

该文件中的数据与 Exactive XML 数据匹配, 可用于应用程序的仪器方法编辑器中。

## TSQ Quantiva/Endura SIM 格式

**注释** 用户只能将 SIM 数据类型导出为 TSQ Quantiva/Endura SIM 格式。

TraceFinder 应用程序将质量数数据写至以下文件中:

```
...\TraceFinderData\Methods\Methodname\Methodname.xml
```

该文件中的数据与 TSQ Endura™、TSQ Quantiva™ 和 Xcalibur XML 数据匹配, 可用于这些应用程序的仪器方法编辑器中。TraceFinder 应用程序只将以下化合物参数导出至 XML 文件:

- Compound (化合物, 如同 XML 文件中的 Name [名称])
- Product Mass (子离子质量数, 如同 XML 文件中的 Mass [质量数])
- RT range (保留时间范围, 正如 XML 文件中的 StartTime [起始时间] 和 StopTime [停止时间] 之间的范围)
- Polarity (极性)
- Lens (透镜, 正如 XML 文件中的 TubeLens 或 S-Lens)

## TSQ Quantiva/Endura SRM 格式

**注释** 用户只能将 SRM 数据类型导出为 TSQ Quantiva/Endura SRM 格式。

TraceFinder 应用程序将质量数数据写至以下文件中:

```
...\TraceFinderData\Methods\Methodname\Methodname.xml
```

该文件中的数据与 TSQ Endura、TSQ Quantiva 和 Xcalibur XML 数据匹配, 可用于这些应用程序的仪器方法编辑器中。TraceFinder 应用程序只将以下化合物参数导出至 XML 文件:

- Compound (化合物, 如同 XML 文件中的 Name [名称])
- Precursor Mass (母离子质量数)

- Product Mass (子离子质量数)
- RT range (保留时间范围, 正如 XML 文件中的 StartTime [起始时间] 和 StopTime [停止时间] 之间的范围)
- Polarity (极性)
- Lens (透镜, 正如 XML 文件中的 TubeLens 或 S-Lens)
- Collision Energy (碰撞能量)

## 使用 Compound Database (化合物数据库)

当用户安全已经激活, 具有 Method Development (方法开发) 权限的用户可以从 Compound Database (化合物数据库) 视图的 [Compound Detail \(化合物详细信息\)](#) 页面或 [Grid \(表格\)](#) 页面的当前数据库中管理化合物的定义:

- 这两个显示页面上的打开、保存和创建新数据库的命令是相同的。参阅第 247 页上的“[打开和保存数据库](#)”。
- 这两个显示页面上的导入和导出化合物命令是相同的。参阅第 251 页上的“[导出和导入化合物](#)”。
- Compound Detail (化合物详细信息) 和 Grid (表格) 页面上使用的参数相同, 尽管名称稍有不同。参阅第 271 页上的“[化合物参数](#)”。
- 这两个显示页面的化合物数据库上使用的 Experiment (实验) 类型相同。参阅第 277 页上的“[Experiment Types \(实验类型\)](#)”。

## 打开和保存数据库

用户可以加载一个与 TraceFinder 一起安装的数据库, 或者创建一个自己的数据库。用户可以在 Compound Detail (化合物详细信息) 页面或 Grid (表格) 页面上显示数据库参数。

当为化合物保存编辑时, 应用程序将更改保存至化合物数据库文件中。

- 有关编辑 Compound Detail (化合物详细信息) 页面上化合物的说明, 参阅第 260 页上的“[编辑数据库中的化合物](#)”。
- 有关编辑 Grid (表格) 页面上化合物的说明, 参阅第 269 页上的“[若要编辑化合物数据库表格中的值](#)”。

按照以下步骤进行操作:

- [若要打开 Compound Database \(化合物数据库\) 编辑器](#)
- [若要向编辑器中加载化合物数据库](#)
- [若要创建新化合物数据库](#)
- [若要将更改保存至数据库](#)
- [若要以新名称另存数据库](#)

❖ 若要打开 Compound Database (化合物数据库) 编辑器

1. 点击 Method Development (方法开发) 导航窗格上的 Compound Database (化合物数据库)。



Compound Database (化合物数据库) 视图打开, 显示当前数据库的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面。

**Compound Database - Default**

Search (all)

Compound	Formula
2,3,5,6-tetrachloroaniline	SRM
2,4-D-1-butyl ester	SRM
2,4'-DDD	SRM
2,4'-DDE	SRM
2,4'-DDT	SRM
2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol(N)	SRM
2-Imidazolidinethione	SRM
2-phenylphenol	SRM
3,4,5-trimethacarb	SRM
4,4'-DDD	SRM
4,4'-DDE	SRM
4,4'-DDT	SRM
Acephate	SRM
Acetochlor	SRM
Acibenzolar-S-methyl	SRM

**Compound Detail**

Compound: 2,3,5,6-tetrachloroaniline

Experiment: SRM    Category:    CAS: 3481-20-7    Formula:

Ionization: EI    Neutral Mass: 0

**Target Peaks**

Peak 1

Precursor Mass: 231.000    **Confirming Peaks (Quan Only)**

Precursor	Product Mass	Collision Energy:
231.000	160.000	22.00

Product Mass: 158.000

Polarity: Positive

若编辑器中没有显示化合物数据库, 按照[若要向编辑器中加载化合物数据库](#)中的说明操作。

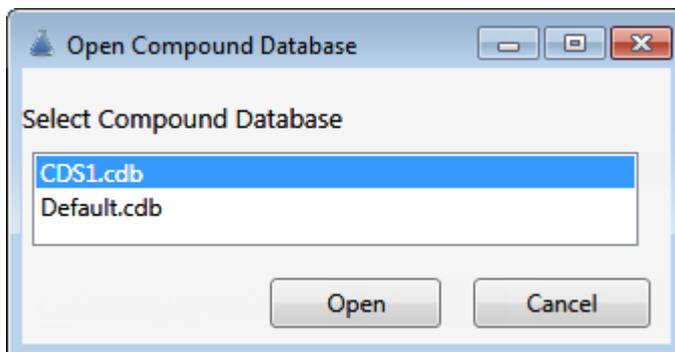
**注释** 若当前打开一个未保存更改的化合物数据库, 立即出现一则消息提示用户保存更改。点击 **Yes (是)** 以保存更改并继续打开其他化合物数据库。

可以通过将化合物文件导入至新数据库的方式向数据库中添加化合物, 或者手动逐个添加化合物。参阅第 253 页上的“若要导入化合物”或第 261 页上的“若要将化合物添加至数据库中”。

❖ 若要向编辑器中加载化合物数据库

1. 选择 **File (文件) > Open Compound Database (打开化合物数据库)**。

Open Compound Database (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。

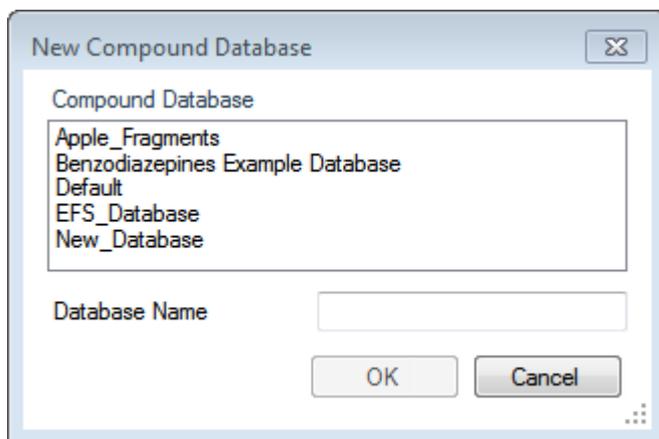
已选数据库在 Compound Database (化合物数据库) 视图的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面上打开。参阅第 255 页上的“[Compound Detail \(化合物详细信息\) 页面](#)”。

**注释** 或者，可以从主菜单上选择 **File (文件) > Recent Files (最近的文件) > filename (文件名)** 来加载之前打开的数据库。

❖ 若要创建新化合物数据库

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > New Compound Database (新化合物数据库)**。

New Compound Database (新化合物数据库) 对话框打开。



2. 输入新数据库的文件名称，然后点击 **OK (确定)**。

应用程序将数据库保存为

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Databases\filename.cdb

❖ 若要将更改保存至数据库

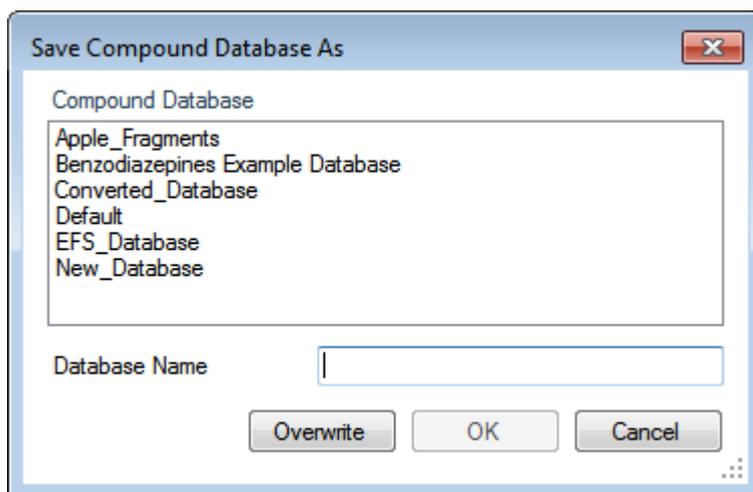
**注释** 未保存更改的数据库在 Compound Database (化合物数据库) 页面标题上标注, 即数据库名称后面标有星号。

从主菜单上选择 **File (文件) > Save Compound Database (保存化合物数据库)**。

❖ 若要以新名称另存数据库

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > Save Compound Database As (化合物数据库另存为)**。

Save Compound Database As (化合物数据库另存为) 对话框打开。



2. 执行下列操作之一:

输入新数据库的文件名称, 然后点击 **OK (确定)**。

– 或 –

选择数据库的名称进行覆盖, 然后点击 **Overwrite (覆盖)**。

若用户想要覆盖当前已打开的化合物数据库, 应用程序会提示用户无法覆盖该化合物数据库, 因为其在使用中。

应用程序将数据库保存为

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Databases\filename.cdb.

## 导出和导入化合物

可以从 Compound Database (化合物数据库) 视图的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面或 Grid (表格) 页面上导出化合物至 CSV 文件或质量数列表中, 或者从 XML、CSV 或 CDB 文件中导入化合物。

按照以下步骤进行操作:

- 若要将化合物导出至 CSV 文件
- 若要将化合物导出至质量数列表
- 若要导入化合物

除导入和导出化合物数据的步骤外, 本部分也包含以下标题:

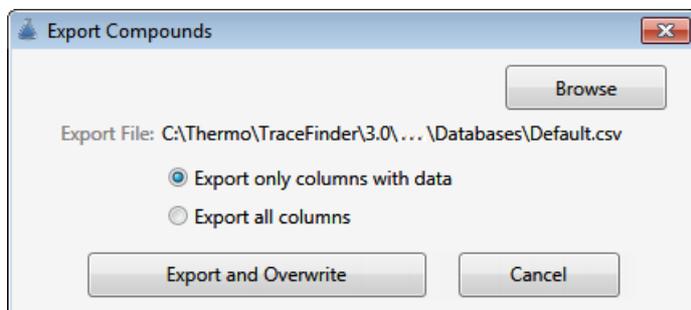
- 化合物数据库名映射到 CSV 列名
- 含默认值的数据列

### ❖ 若要将化合物导出至 CSV 文件

1. 从主菜单上选择 **Compound Database (化合物数据库) > Export All Compounds to CSV File (导出所有化合物至 CSV 文件)**。

**注释** 若当前化合物数据库中含未保存的更改, 会立即出现一则消息提示用户保存更改。点击 **Yes (是)** 以保存更改并继续进行导出步骤。

Export Compounds (导出化合物) 对话框打开。



2. (可选) 点击 **Browse (浏览)** 并找到一个用户想要写入已导出化合物数据库的其他文件夹或文件名称。

电子数据表中的一个数据列代表化合物数据库编辑器中的一个参数。当用户导出化合物数据至 CSV 文件时, 各个参数被分配至各列, 各个化合物被分配至各行中。

3. 从以下选项选择其一:

- **Export Only Columns with Data (仅导出含数据的列)**: 至少为一个化合物仅写入含非默认数据的列值。该选项不导出仅含默认数据的列。参阅第 284 页上的“[含默认值的数据列](#)”。
- **Export All Columns (导出所有列)**: 将所有列写入 CSV 文件, 包括不含任何化合物数据的列。

4. 点击 **Export and Overwrite (导出并覆盖)**。

应用程序将数据库保存为

...\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Databases\*databaseName*.csv

一个 Excel 窗口打开，其中的化合物数据均为电子数据表格式。

**图 76.** Excel 电子数据表中的化合物数据

	A	B	C
1	TraceFinder Compound Database Export	Schema Version 1	
2			PEAK 1
3	CompoundName	ExperimentType	Precursor
4	15-acetyldeoxynivalenol	SRM	339.1
5	15-acetyldeoxynivalenol+NH4	SRM	356.1
6	17beta-estradiol_neg	SRM	271
7	1-Naphthylacetic_acid_neg	SRM	185.04
8	2,3,5-Trimethacarb	SRM	194
9	2,4-DB_neg	SRM	247

已导出 Excel 电子数据表中的列名不总是与化合物数据库编辑器中的参数名相匹配。参阅第 280 页上的“化合物数据库名映射到 CSV 列名”。

用户可以使用电子数据表中的工具来编辑化合物数据库中的数据，然后将 CSV 文件中的数据导回至 TraceFinder 应用程序中。若用户从电子数据表中删除了一列，然后导入了该 CSV 文件，应用程序采用默认值来替换已删除列中的数据。有关默认值列表的信息，参阅第 284 页上的“含默认值的数据列”。

❖ **若要将化合物导出至质量数列表**

1. 选择要导出的化合物。

用户可以将任一实验类型导出至任意仪器格式中。应用程序采用与指定仪器兼容的格式将数据写入 XML 文件中，忽略原始实验类型。

2. 从主菜单上选择 **Compound Database (化合物数据库) > Export Selected Compounds to Mass List (导出已选化合物至质量数列表)**。

**注释** 若当前化合物数据库中含未保存的更改，会立即出现一则消息提示用户保存更改。点击 **Yes (是)** 以保存更改并继续进行导出步骤。

应用程序采用一种与配置仪器兼容的格式将已选化合物的质量数数据写入以下文件夹中：

...\TraceFinderData\Methods\*Methodname*\\*.xml

**注释** 若用户没有配置 TSQ、ISQ、Q Exactive、TSQ Endura 或 TSQ Quantiva 仪器，一则消息出现询问想要导出哪种格式：Triple Quadrupole (三重四极杆)、Q Exactive、TSQ Quantiva/Endura SIM 或 TSQ Quantiva/Endura SRM。

有关已导出质量数列表的示例，参阅以下内容：

- 第 246 页上的“Triple Quadruple (三重四极杆) 格式”
- 第 246 页上的“Q Exactive 格式”
- 第 246 页上的“TSQ Quantiva/Endura SIM 格式”
- 第 246 页上的“TSQ Quantiva/Endura SRM 格式”

#### ❖ 若要导入化合物

1. 从主菜单上选择 **Compound Database (化合物数据库) > Import Compounds (导入化合物)**。

**注释** 若当前化合物数据库中含未保存的更改，会立即出现一则消息提示用户保存更改。点击 **Yes (是)** 以保存更改并继续进行导入步骤。

Select File to Import into the Current Compound Database (选择文件以导入当前化合物数据库中) 对话框打开。

用户可以从以下文件类型中导入化合物：

- ToxID Exactive CSV
- ToxID MS2 CSV
- TraceFinder CSV
- TraceFinder Mass List XML
- TraceFinder 3.0 Legacy CDB
- ExactFinder 2.0 CDB

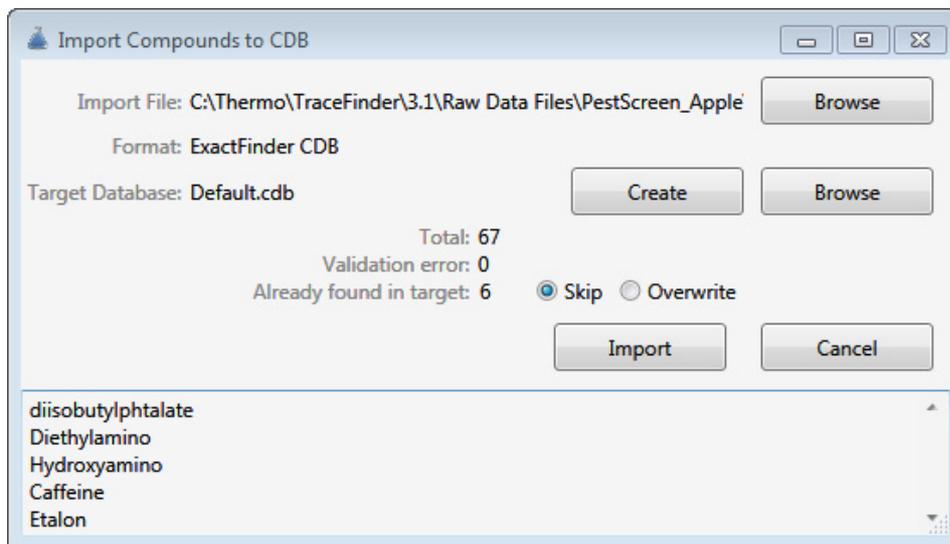
**重要信息** 在用户从 CSV 文件中导入数据之前，确保以下所需列中含有各个化合物的数据。这些列中不含默认值，在用户将 CSV 数据导入至 TraceFinder 化合物数据库之前必须含有值：

- CompoundName (化合物名称)
- ExperimentType (实验类型)
- ProductMass (子离子质量数，目标峰)
- Confirm Product (确认子离子，确认峰)
- Fragment (碎片)

若用户从电子数据表中删除了其中一列，并试图将 CSV 数据导入至 TraceFinder 应用程序，该应用程序会提醒用户无法解析该文件并识别出缺失列。

2. 找到要导入的 CDB、CSV 或 XML 化合物数据库文件并点击 **Open (打开)**。

Import Compounds to CDB (导入化合物至化合物数据库) 对话框打开。



**注释** 若导入文件缺少所需的化合物信息，应用程序会提醒用户无法解析该文件并识别出所存在的缺失列。有关所需列列表的信息，参阅第 255 页上的“[Compound Detail \(化合物详细信息\) 页面](#)”。

3. 若要选择一个不同的化合物数据库，点击 **Browse (浏览)**，找到 XML、CSV 或 CDB 化合物文件，点击 **Open (打开)**。
4. 若要选择一个不同的目标数据库，执行以下其中一种操作：
  - a. 点击 **Browse (浏览)**。
  - b. 找到 XML、CSV 或 CDB 化合物文件的位置。
  - c. 点击 **Open (打开)**。– 或 –
  - a. 点击 **Create (创建)**。
  - b. 输入新化合物数据库的名称。
  - c. 点击 **OK (确定)**。

5. 确认导入文件和目标数据库正确。

对话框中报告了导入文件中的化合物总数，验证错误的化合物数以及已经存在于目标数据库中的化合物数。

6. (可选) 从以下选项选择其一：

- **Skip (跳过)**：仅导入那些目标数据库中不存在的化合物。
- **Overwrite (覆盖)**：采用已导入的化合物替换那些已经存在于目标数据库中的化合物。

7. 点击 **Import (导入)**。

TraceFinder 应用程序导入已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中，并按字母顺序排序。

应用程序报告已导入化合物的数量。



8. 点击 **OK (确定)**。

## Compound Detail (化合物详细信息) 页面

当用户打开 Compound Database (化合物数据库) 视图时，默认为 Compound Detail (化合物详细信息) 页面。

The screenshot shows the 'Compound Database - Default' window. On the left is a search table with columns 'Compound' and 'Formula'. The first row is highlighted: '2,3,5,6-tetrachloroaniline SRM'. Below it are other compounds like '2,4-D-1-butyl ester SRM', '2,4'-DDD SRM', etc. The main area is titled 'Compound Detail' and shows information for '2,3,5,6-tetrachloroaniline'. It includes fields for 'Experiment: SRM', 'Category:', 'CAS: 3481-20-7', and 'Formula:'. Below that, 'Ionization: EI' and 'Neutral Mass: 0' are shown. A section titled 'Target Peaks' contains 'Peak 1' with 'Precursor Mass: 231.000' and 'Product Mass: 158.000'. A sub-section 'Confirming Peaks (Quan Only)' shows a table with columns 'Precursor', 'Product Mass', and 'Collision Energy', with one row: '231.000', '160.000', '22.00'.

根据所选化合物所使用的实验类型，化合物的详细信息会有所不同。

- SRM 实验的 [Compound Detail \(化合物详细信息\) 页面](#)
- SIM 实验的 [Compound Detail \(化合物详细信息\) 页面](#)
- XIC 实验的 [Compound Detail \(化合物详细信息\) 页面](#)

本部分包含以下主题：

- [数据库中的化合物排序](#)
- [编辑数据库中的化合物](#)

图 77. SRM 实验的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面

Compound Database - Default

(all) ▾

Compound	Formula
Bensulide	SRM
Bensulide_neg	SRM
Bentazone	SRM
Bentazone_neg	SRM
Benzobicyclon	SRM
Benzofenap	SRM
Benzophenone	SRM
Benzoyl_peroxide+NH4	SRM
Bifenox	SRM
Bifenthrin+NH4	SRM
Bioresmethrin	SRM
Bisphenol_A_neg	SRM
Bispyribac	SRM
bitertanol	SRM
Bromochloroacetonitrile_neg	SRM
Bromoxynil_neg	SRM
Buprofezin	SRM
Buspirone	SRM
Butachlor	SRM
Butafenacil+NH4	SRM
Butamifos	SRM
butocarboxim	SRM
Butocarboxim_sulfoxide	SRM
Butocarboxim+NH4	SRM
Butylate	SRM
Cadusafos	SRM
Cafenstrole	SRM
<b>Caffeine</b>	<b>SRM</b>

### Compound Detail

▬ + ↵

Compound: **Caffeine**

Experiment: SRM    Category:    CAS: 58082    Formula: C8H10N4O2

Ionization: None    Neutral Mass: 194.0803755

---

#### Target Peaks

**Peak 1**

Precursor Mass: 194.08038    [Confirming Peaks \(Quan Only\)](#)

Product Mass: 194.07983

Adduct:	Neutral	Precursor	Product Mass	Collision Energy:
Polarity:	Positive	194.08038	193	30

Charge State: 1

---

Window (sec): 60

RT (min): 5

Collision Energy: 19

Lens: 0

Energy Ramp: 0

图 78. SIM 实验的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面

**Compound Database - Default**

Search  (all) ▼

Compound	Formula
<b>Caffeine</b>	<b>SIM</b>
captafol+NH4	SIM
captafol+NH4	SIM
Captan_MeOH-a	SIM
Captan_MeOH-b	SIM
Captan_neg-a	SIM
Captan_neg-b	SIM
Captan+NH4-a	SIM
Captan+NH4-b	SIM
Carbamazepine	SIM
Carbaryl	SIM
Carbaryl_fragment	SIM
CARBENDAZIM	SIM
Carbofuran	SIM
Carbofuran-3-hydroxy	SIM
Carbosulfan	SIM
Carpropamid	SIM
Carpropamid+HCOOH_neg	SIM
Dicamba	SIM
Diethofencarb	SIM
Diflufenican	SIM
Dioxacarb	SIM
Esprocarb	SIM
ethiofencarb	SIM
Fenobucarb	SIM
Cadusafos	SIM

**Compound Detail** + - ↵

Compound: **Caffeine**

Experiment: **SIM**    Category:    CAS: **58082**    Formula: **C8H10N4O2**

Ionization: **None**    Neutral Mass: **194.0803755**

---

**Target Peaks**

**Peak 1**

<u>Confirming Peaks (Quan Only)</u>	
Mass:	Mass
194.07983	193

Adduct: **Neutral**

Polarity: **Positive**

Charge State: **1**

Window (sec): **60**

RT (min): **5**

Lens: **0**

Energy Ramp: **0**

4 使用 Method Development (方法开发) 模式  
使用 Compound Database (化合物数据库)

图 79. XIC 实验的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面

Compound Database - Default

(all)

Compound Detail

Compound	XIC	Formula
17a-Estradiol	XIC	C18H24O2
17a-Ethinylestradiol	XIC	C20H24O2
1-Naphthyl_acetic_acid	XIC	C12H10O2
245-T	XIC	C8H5Cl3O3
24D	XIC	C8H6Cl2O3
24-Diaminotoluene	XIC	C7H10N2
24-Dimethylaniline	XIC	C8H11N
26-dichlorobenzamide	XIC	C7H5Cl2NO
26-Difluorobenzoic_acid	XIC	C7H4F2O2
33'-Dimethoxybenzidine	XIC	C14H16N2O2
34-Dichloroaniline	XIC	C6H5Cl2N
3-Amino-2-oxazolidin	XIC	C3H6N2O2
4-Aminobiphenyl	XIC	C12H11N
4-Aminophenol	XIC	C6H7NO
4-Bromo-3,5-dimethyl	XIC	C10H12BrNO2
4-Chlorophenoxyacetic	XIC	C8H7ClO3
6a_Methylprednisolon	XIC	C22H30O5
Acemetacin	XIC	C21H18ClNO6
Acephate	XIC	C4H10NO3PS
Aceprometazine	XIC	C19H22N2OS
<b>Acetaminophen</b>	<b>XIC</b>	<b>C8H9NO2</b>
Acetamidiprid	XIC	C10H11ClN4
Acetochlor	XIC	C14H20ClNO2
Acetylsalicylic_acid	XIC	C9H8O4
Acibenzolar-S-methyl	XIC	C8H6N2OS2
Acifluorfen	XIC	C14H7ClF3NO5
Aclonifen	XIC	C12H9ClN2O3
Acrinathrin	XIC	C26H21F6NO5

**Compound: Acetaminophen**

Experiment: XIC    Category:    CAS:    Formula: C8H9NO2

Ionization: None    Response Threshold: 5000    Neutral Mass: 151.06332

---

**Target Peaks**

**Peak 1**

Extracted Mass: 152.0706	<u>Confirming Peaks (Quan Only)</u>		
MS Order: ms1	Precursor	Extracted Mass	MS Order
Adduct: H-Gain		152	ms1
Polarity: Positive			
Charge State: 1	<u>Fragments (Screening Only)</u>		
	Extracted Mass		
Window (sec): 10	111		
RT (min): 0			
Lens: 0			
Energy Ramp: 0			

## 数据库中的化合物排序

在 Compound Detail (化合物详细信息) 页面上, 用户可以对要显示的化合物列表进行排序。

Compound Database - database1		
Search		(all) ▼
Compound	XIC	Formula
<b>Aldicarb</b>	<b>XIC</b>	<b>C7H14N2O2S</b>
Azinphos-methyl	XIC	C10H12N3O3PS2
Bendiocarb	XIC	C11H13NO4
Carbaryl	XIC	C12H11NO2
Dioxacarb	XIC	C11H13NO4
Ethiofencarb	XIC	C11H15NO2S
Fenpyroximate	XIC	C24H27N3O4
Flusilazole	XIC	C16H15F2N3Si
Linuron	XIC	C9H10Cl2N2O2
Methiocarb	XIC	C11H15NO2S
Monocrotophos	XIC	C7H14NO5P
Napropamide	XIC	C17H21NO2
Omethoate	XIC	C5H12NO4P5
Phosalone	XIC	C12H15ClNO4P5S2
Pyriproxyfen	XIC	C20H19NO3
Tolyfluanid	XIC	C10H13Cl2FN2O2S2
Triflumuron	XIC	C15H10ClF3N2O3

按照以下步骤进行操作:

- 若要通过名称检索化合物
- 若要通过实验类型显示化合物
- 若要显示缩减的化合物名称

### ❖ 若要通过名称检索化合物

在 Search (检索) 框中, 输入化合物名称的任意部分。

随着用户输入, 显示的化合物列表缩减, 以匹配输入的文本。

例如, 用户可以将该功能与实验类型列表联用, 仅显示开头带字母 “a” 的 SIM 化合物。

### ❖ 若要通过实验类型显示化合物

从 (all) ▼ 列表中选择一种实验类型。

该列表显示所有实验类型, 每一类型都使用一个不同的质量数过滤器结构。

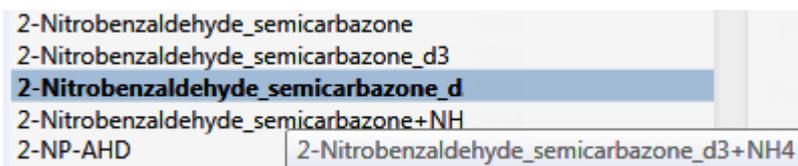
- SRM: 选择反应监测
- XIC: 提取离子色谱图
- SIM: 选择离子监测

有关每种实验类型的详细说明, 参阅第 277 页上的 “Experiment Types (实验类型)”。

例如, 用户可以将该功能与文本检索联用, 仅显示开头带字母 “f” 的 SRM 化合物。

❖ 若要显示缩减的化合物名称

将光标停留在长的、缩减的名称上方时，显示出一个带完整名称的 Tooltip (提示框)。



## 编辑数据库中的化合物

在 Compound Database (化合物数据库) 视图的 Compound Detail (化合物详细信息) 页面上，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、将目标峰或确认峰添加至化合物中、或从化合物移除目标峰或确认峰。

按照以下步骤进行操作：

- 若要将化合物添加至数据库中
- 若要移除化合物
- 若要使化合物可编辑
- 若要将目标峰添加至化合物
- 若要将确认峰添加至目标峰
- 若要将目标峰从一个化合物复制到其他化合物
- 若要将窗口值从一个峰复制到其他峰
- 若要将碎片添加至目标峰

❖ 若要将化合物添加至数据库中

1. 点击 **Add Compound (添加化合物)** 图标, 。  
应用程序添加新的空白化合物页面, 并采用红色高亮显示所需参数。
2. 单击 Compound (化合物) 框, 输入所需的 Compound (化合物) 名称。
3. 选择 Experiment (实验) 类型: **SRM**、**SIM** 或 **XIC**。  
每种实验类型所需的参数不同。参阅第 277 页上的“[Experiment Types \(实验类型\)](#)”。
4. 在 Target Peaks (目标峰) 区域, 执行以下操作:
  - 对于 SRM 实验, 输入 Precursor Mass (母离子质量数) 和 Product Mass (子离子质量数) 的值。
  - 对于 SIM 或 XIC 实验, 输入 Extracted Mass (提取质量数) 的值。
5. 在 Confirming Peaks (确认峰) 区域, 执行以下操作:
  - 对于 SRM 实验, 输入 Precursor Mass (母离子质量数) 和 Product Mass (子离子质量数) 的值。
  - 对于 SIM 或 XIC 实验, 输入 Precursor Mass (母离子质量数) 和 Extracted Mass (提取质量数) 的值。
6. 输入或编辑第 271 页上的“[化合物参数](#)”中描述的所有其他可选参数。
7. 当已完成更改时, 点击 **Complete Edit (完成编辑)** 图标, 。

**提示** 直到用户完成编辑才能添加其他新化合物或使用菜单命令, , 或取消编辑, 。

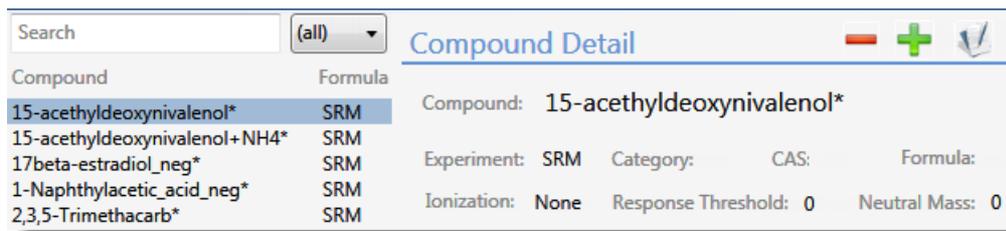
**重要信息** 完成化合物的编辑后, Compound Database (化合物数据库) 页面上的标题采用星号标记数据库的名称, 以表示该数据库未保存。若要保存化合物已更改的数据库, 从主菜单上选择 **File (文件) > Save Compound Database (保存化合物数据库)**。

#### ❖ 若要移除化合物

1. 在 Compound (化合物) 列表中, 选择要删除的化合物。

该应用程序支持采用以下方法删除多个化合物:

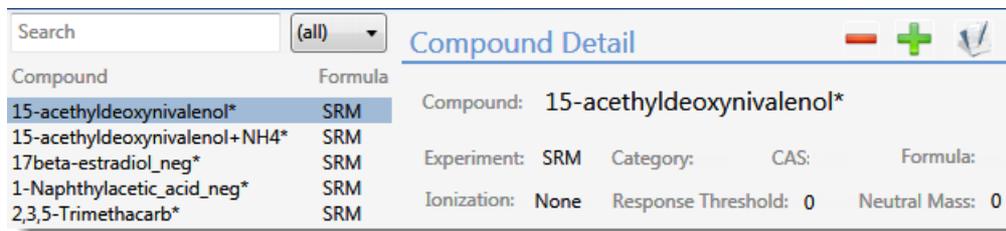
- CTRL+A 以选择所有化合物
- CTRL+ 单击以选择不连续的化合物
- SHIFT+ 单击以选择连续的化合物



2. 点击 **Delete Selected Compounds (删除已选化合物)** 图标, 。
3. 若要确定要删除已选化合物, 在出现提示信息后点击 **OK (确定)**。  
应用程序移除已选化合物及其峰信息。

#### ❖ 若要使化合物可编辑

1. 在 Compound (化合物) 列表中, 选择要编辑的化合物。



2. 点击 **Edit Compound (编辑化合物)** 图标, 。

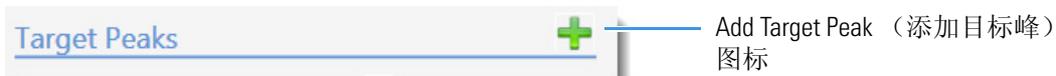
应用程序使化合物参数可编辑并显示

**Add (添加)** 图标, , 以将目标峰、确认峰和碎片添加至化合物详细信息中。

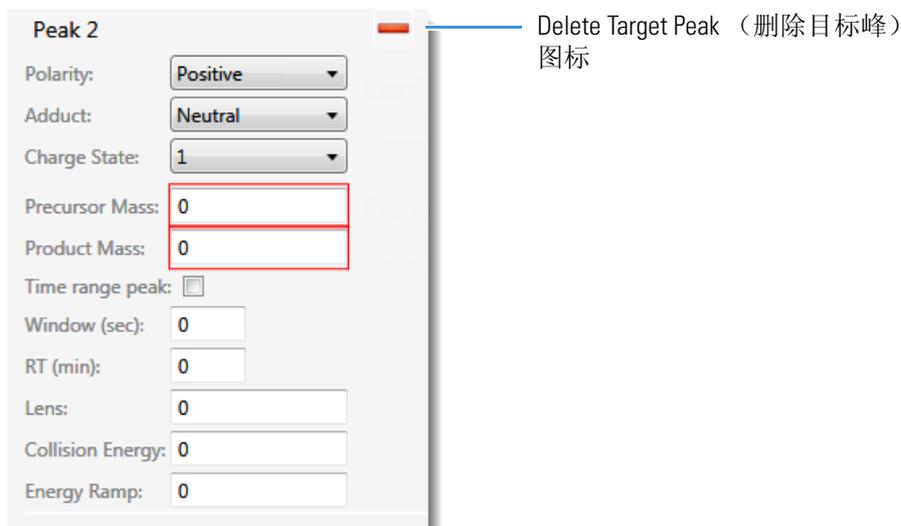
**注释** 若正在添加一个新化合物, 默认情况下为可编辑状态。

❖ 若要将目标峰添加至化合物

1. 在 Target Peaks (目标峰) 标题上, 点击 **Add Target Peak (添加目标峰)** 图标。



应用程序将新目标峰添加到化合物中。目标峰包括用于化合物的定量值。



2. 输入所有必填的参数。

不同实验类型的所需目标峰值会有所不同。参阅第 277 页上的“[Experiment Types \(实验类型\)](#)”。

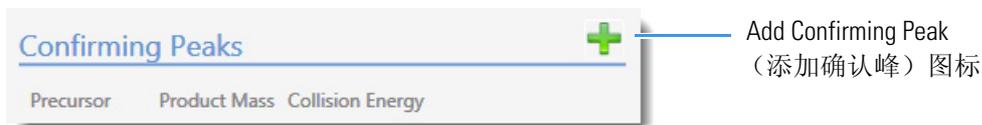
有关必填和可选的参数列表, 参阅第 271 页上的“[化合物参数](#)”列表。

**提示** 直到用户输入所有必填的峰参数或者删除  新目标峰, 才能添加其他新目标峰或保存该化合物。

3. 重复这些步骤以将六个目标峰添加到化合物。

❖ 若要将确认峰添加至目标峰

1. 在 Confirming Peaks (确认峰) 标题上, 点击 **Add Confirming Peak (添加确认峰)** 图标。



应用程序将新确认峰添加到目标峰。



2. 为确认峰输入必填值。

不同实验类型的必填确认峰值会有所不同。参阅第 277 页上的“[Experiment Types \(实验类型\)](#)”。

有关必填和可选的参数列表, 参阅第 271 页上的“[化合物参数](#)”。

3. 重复这些步骤以将 10 个确认峰添加到目标峰。

**提示** 直到用户输入所有必填的峰参数或者删除  新确认峰, 才能添加其他新确认峰或保存该化合物。

❖ 若要将目标峰从一个化合物复制到其他化合物

1. 在化合物列表中, 选择要复制其目标峰的化合物。

The screenshot shows a table with two columns: 'Compound' and 'Formula'. The row for 'AflatoxinB1' is highlighted in blue. A blue line points from the text '源化合物' to this row.

Compound	Formula
Acrinathrin+NH4	SRM
<b>AflatoxinB1</b>	<b>SRM</b>
AflatoxinB2	SRM
AflatoxinG1	SRM
AflatoxinG2	SRM
Alachlor	SRM

2. 当目标峰包含不止一个峰时, 在已选化合物的 Target Peaks (目标峰) 区域, 滚动至要复制的峰。

The screenshot shows the 'Target Peaks' panel. It has a section for 'Peak 1' and a sub-section for 'Confirming Peaks (Quan Only)'. The table below shows precursor and product masses and collision energy.

Peak 1		Confirming Peaks (Quan Only)		
Precursor Mass:	313	Precursor	Product Mass	Collision Energy:
Product Mass:	285	313	241	40

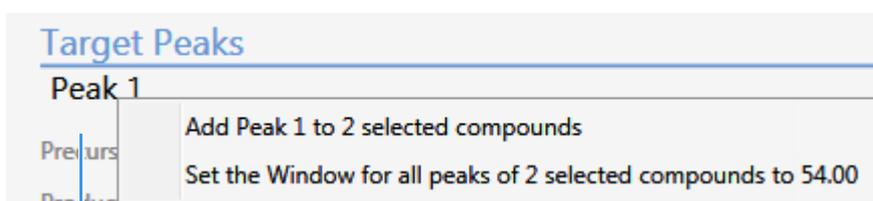
- 在化合物列表中，保持源化合物已选并使用 SHIFT 或 CTRL 键选择要为其复制目标峰的化合物。

Compound	Formula
Acrinathrin+NH4	SRM
<b>AflatoxinB1</b>	<b>SRM</b>
AflatoxinB2	SRM
AflatoxinG1	SRM
AflatoxinG2	SRM
Alachlor	SRM

源化合物

**重要信息** 注意保持源化合物已选。

- 在已选化合物的 Target Peaks (目标峰) 区域，右击目标峰区域并从快捷菜单中选择 **Add Peak 1 to N Selected Compounds (添加峰 1 至 N 个已选化合物)**。



右击目标峰区域。

应用程序报告，该峰已被复制到指定数量的化合物中。

应用程序将峰信息复制到已选化合物中，将该峰添加至已为化合物指定的峰中。

- 点击 **OK (确定)**。

❖ **若要将窗口值从一个峰复制到其他峰**

- 在化合物列表中，选择要复制其窗口值的化合物。

Compound	Formula
Acrinathrin+NH4	SRM
<b>AflatoxinB1</b>	<b>SRM</b>
AflatoxinB2	SRM
AflatoxinG1	SRM
AflatoxinG2	SRM
Alachlor	SRM

源化合物

2. 在已选化合物的 Target Peaks (目标峰) 区域, 识别要复制其窗口的峰。

Target Peaks	
<b>Peak 1</b>	
Precursor Mass:	231
Product Mass:	158
Adduct:	Neutral
Polarity:	Positive
Charge State:	1
Window (sec):	54
RT (min):	10.76
Collision Energy:	20
Lens:	0
Energy Ramp:	0

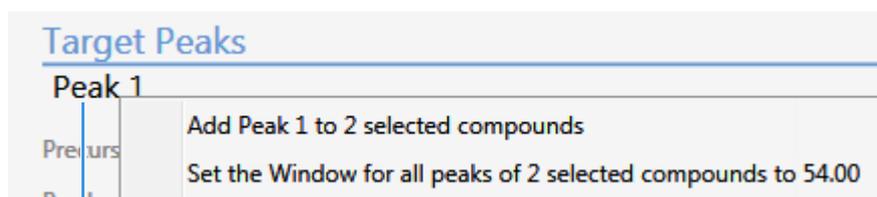
Confirming Peaks (Quan Only)		
Precursor	Product Mass	Collision Energy:
231	160	22

3. 在化合物列表中, 保持源化合物已选并使用 CTRL 键选择要为其复制窗口的化合物。

Compound	Formula
Acrinathrin+NH4	SRM
<b>AflatoxinB1</b>	<b>SRM</b>
AflatoxinB2	SRM
AflatoxinG1	SRM
AflatoxinG2	SRM
Alachlor	SRM

**重要信息** 注意保持源化合物已选。

4. 在已选化合物的 Target Peaks (目标峰) 区域, 右击目标峰区域并从快捷菜单中选择 **Set the Window for All Peaks of selectedCompounds to windowValue** (将已选化合物所有峰的窗口设置成窗口值)。



右击目标峰区域。

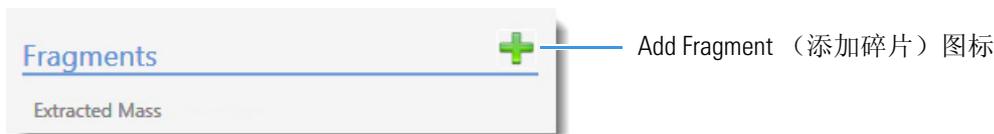
应用程序报告, 已将保留时间和窗口复制到指定数量的化合物中, 包括源化合物 (当它含多个峰时)。

应用程序将保留时间和窗口信息复制到已选化合物的所有峰以及源化合物的所有其他峰上, 覆盖这些参数值。

5. 点击 **OK (确定)**。

#### ❖ 若要将碎片添加至目标峰

1. 在 Fragments (碎片) 标题上, 点击 **Add Fragment (添加碎片)** 图标。



应用程序将新碎片添加到目标峰。



2. 点击 Extracted Mass (提取质量数) 框, 输入一个 **10** 至 **2999.999** 之间的值。
3. 重复这些步骤以添加想要添加的碎片。

**提示** 直到用户输入所有必填的碎片参数或者删除  新碎片, 才能保存该化合物。

## Grid (表格) 页面

Compound Database (化合物数据库) 视图的 Grid (表格) 页面将化合物数据库中的数据 displays 为类似于电子数据表的表格。Grid (表格) 页面上的数据反应了 Compound Detail (化合物详细信息) 页面上的所有填充值。

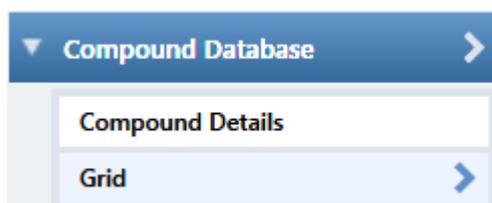
- 化合物数据库中必须至少含有一个化合物以查看 Grid (表格) 页面。
- Grid (表格) 页面上没有空白列。化合物数据库中的每个参数必须至少有一个值, 或者不显示该参数列。

**注释** 若目标列未显示在 Grid (表格) 页面上, 返回至 Compound Detail (化合物详细信息) 页面, 至少编辑一个化合物以包含该参数值, 然后返回至 Grid (表格) 页面。

在 Grid (表格) 页面上, 可以将化合物导入数据库中、将化合物添加至数据库中或者从数据库中移除化合物、将目标峰或确认峰添加至化合物中、或从化合物移除目标峰或确认峰。

#### ❖ 若要在 Grid (表格) 页面上显示化合物数据库

点击 Compound Database (化合物数据库) 导航窗格上的 **Grid (表格)**。



当前数据库在 Grid (表格) 页面上打开。

## 4 使用 Method Development (方法开发) 模式 使用 Compound Database (化合物数据库)

Compound Database - Default									
	Compound Name	Experiment Type	Ionization	CAS	Neutral Mass	Peak 1	Peak 1 Precursor Mass	Peak 1 Polarity	Peak 1
1	2,3,5,6-tetrachloroan	SRM	EI	3481-20-7	0	158.000	231.000	Positive	1
2	2,4-D-1-butyl ester	SRM	EI	94-80-4	0	240.000	285.000	Positive	1
3	2,4'-DDD	SRM	EI	53-19-0	0	91.000	238.000	Positive	1
4	2,4'-DDE	SRM	EI	3424-82-6	0	302.000	359.000	Positive	1
5	2,4'-DDT	SRM	EI	789-02-6	0	299.840	406.780	Positive	1

根据所选化合物所使用的实验类型，化合物数据库中的显示参数会有所不同。有关化合物数据库中所使用的所有参数的详细说明，参阅第 271 页上的“化合物参数”。

按照以下步骤进行操作：

- 若要添加化合物
- 若要移除化合物
- 若要编辑化合物数据库表格中的值
- 若要编辑化合物数据库中的 Experiment Type (实验类型) 值
- 若要根据列数据整理表格
- 若要按列数据整理化合物

### ❖ 若要添加化合物

1. 滚动至化合物数据库表格的底部。  
表格中总是有一个空白行。
2. 在空白行中，将值输入或粘贴到列中。

**注释** 某些列含有下拉菜单，可以从中选择值。

3. 按住 ENTER 以将另一个空白行添加至表格中。

### ❖ 若要移除化合物

1. 点击行中的任意位置以选择化合物。

18	Alachlor	SRM	EI	15972-60-8	0	93.000	286.000
19	Aldrin	SRM	EI	309-00-2	0	193.000	263.000

2. 按下 DELETE 键。

**注释** 不要使用 CTRL+X 删除化合物。CTRL+X 仅删除已选单元格中的参数值。

3. 提示用户确定要删除该化合物，点击 **OK (确定)**。  
应用程序从数据库表格中移除该化合物。

## ❖ 若要编辑化合物数据库表格中的值

执行下列操作之一：

- 选中当前列值，输入新值。

– 或 –

- 选中要复制其值的单个单元格或整列，使用复制、粘贴进行操作。

用户可以使用该方法复制整列。点击列标题以选中整列，然后使用 CTRL+C 和 CTRL+V 复制列值。

当用户编辑 Formula (分子式) 列中的值时，应用程序计算母离子和子离子的  $m/z$  质量数值。

当用户更改化合物的电荷态、加合物或极性时，应用程序重新计算母离子和子离子的  $m/z$  质量数值。

**注释** 不要使用 CTRL+X 删除化合物。CTRL+X 仅删除已选单元格中的参数值。

## ❖ 若要编辑化合物数据库中的 Experiment Type (实验类型) 值

1. 从 Experiment Type (实验类型) 列表中为化合物选择一个新实验类型。

Compound Name	Experiment Type
2,3,5,6-tetrachloroan	SRM
2,4-D-1-butyl ester	SRM
2,4'-DDD	SIM
	XIC

2. 双击单元格中的新类型并按 CTRL+C。
3. 选中数据库中所有化合物的所有 Experiment Type (实验类型) 单元格。
4. 按 CTRL+V。

应用程序将已复制的实验类型粘贴至数据库中的所有化合物中。

**重要信息** 若改动一个实验类型，用户必须更改所有化合物的实验类型。除非所有化合物使用相同的实验类型，否则 Grid (表格) 页面无法显示数据库。

## ❖ 若要根据列数据整理表格

1. 点击列标题。

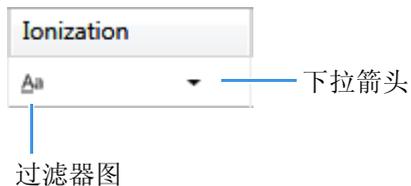
应用程序按列值递增的顺序 (按字母或数字顺序) 来整理表格。

**注释** 含字母和数字的列，先按 1–n 排列，再按 A–Z 排列。

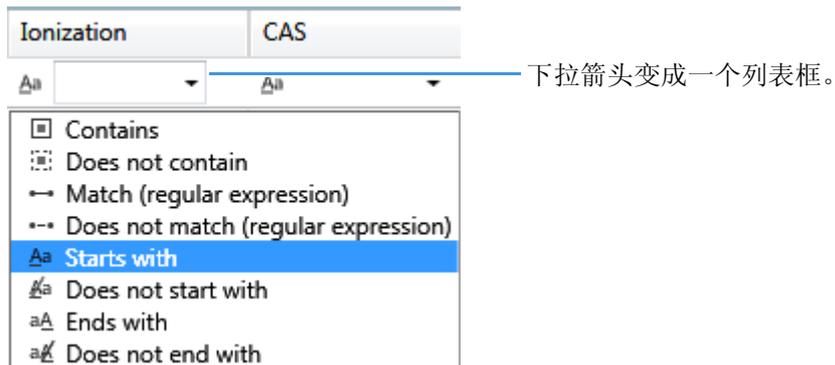
2. 再次点击标题，按列值递减的顺序整理。

❖ 若要按列数据整理化合物

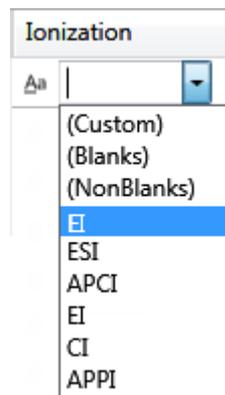
1. 在列顶部的标题上，点击过滤器图标。



2. 选择其中一种过滤器选项，例如， **Starts With (始于)**。



3. 点击下拉箭头并从列表中选择其中一个列值， **EI**。



表格上仅显示与已选过滤器和数据相匹配的化合物。

Ionization	
Δ <sup>0</sup> EI	▼
EI	▼
EI	▼
EI	▼
EI	▼
EI	▼
EI	▼

## 化合物参数

根据已选化合物所使用的实验类型，Compound Detail (化合物详细信息) 页面或 Grid (表格) 页面上化合物数据库中所显示的参数会有所不同。以下表格中的描述列用于说明一个参数是否仅应用于指定的实验类型。

Compound Detail (化合物详细信息) 页面和 Grid (表格) 页面上的同一参数偶尔使用不同的名称。以下表格中的 Parameter (参数) 列用于说明同一参数在 Compound Detail (化合物详细信息) 页面和 Grid (表格) 页面上是否使用了不同的名称。

表 54. 化合物参数 (第 1 页, 共 6 页)

参数	描述
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Compound (化合物)	为化合物指定的由字母组成的名称。
Grid (表格) 页面: Compound Name (化合物名称)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Experiment (实验)	实验类型为: SRM、XIC 或 SIM。有关差异的详细信息, 参阅第 277 页上的“ <a href="#">Experiment Types (实验类型)</a> ”。
Grid (表格) 页面: Experiment Type (实验类型)	
Category (类别)	(可选) 字母数字标识符。
CAS (化学文摘社)	TraceFinder 应用程序使用化学文摘社 (CAS) 登记号匹配化合物。
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Formula (分子式)	化合物的化学分子式。用于计算化合物的中性质量数。
Grid (表格) 页面: Chemical Formula (化学分子式)	
Ionization (离子化)	字母数字标识符。  有效值: None (无)、ESI、APCI、EI、CI、APPI 默认: None (无)
Response Threshold (响应阈值)	应用程序仅对响应值高于该阈值的峰进行积分。响应阈值是指符合允许峰确认要求的最小响应值。仅用于目标筛选方法。仅对 XIC 实验可用。  默认: 5000 范围: 1000 或更高
Neutral Mass (中性质量数)	根据化学式计算的质量数。中性质量数是化合物中所有 AMU 元素的总和。该参数仅用于报告; 不用于峰检测。

表 54. 化合物参数 (第 2 页, 共 6 页)

参数	描述
<b>Target Peaks (目标峰)</b>	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Precursor Mass (母离子质量数)	目标峰的质荷比 ( $m/z$ )。目标母离子峰的中心位置, 单位为质荷比。 在确认峰中, 母离子质量数与目标峰母离子质量数相同。 默认: 0.0 范围: 10.000 至 2999.999
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Precursor Mass (峰 $n$ 母离子质量数)	将 MS Order (质谱级数) 设置为 MS2 (二级质谱), 对所有 SRM 实验和 XIC 实验可用。  <div data-bbox="432 629 852 786" style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px; margin-bottom: 10px;">                     Precursor Mass: <input type="text" value="152.0706"/>                      Product Mass: <input type="text" value="152.0706"/>                      MS Order: <input type="text" value="ms2"/> </div> 对于 XIC 实验中的质量数值, 当 MS Order (质谱级数) 设置为 MS1 (一级质谱) 时, 参阅 <a href="#">Extracted Mass (提取质量数)</a> 。
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Product Mass (子离子质量数)	确认峰的质荷比。目标定量离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( $m/z$ )。 默认: 0.0 范围: 10.000 至 2999.999
Grid (表格) 页面: Peak $n$ (峰 $n$ )	将 MS Order (质谱级数) 设置为 MS2 (二级质谱), 对所有 SRM 实验和 XIC 实验可用。  <div data-bbox="432 1128 852 1285" style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px; margin-bottom: 10px;">                     Precursor Mass: <input type="text" value="152.0706"/>                      Product Mass: <input type="text" value="152.0706"/>                      MS Order: <input type="text" value="ms2"/> </div> 对于 XIC 实验中的质量数值, 当 MS Order (质谱级数) 设置为 MS1 (一级质谱) 时, 参阅 <a href="#">Extracted Mass (提取质量数)</a> 。
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Mass (质量数)	确认峰的质荷比。目标定量离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( $m/z$ )。 仅对 SIM 实验可用。
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Mass (峰 $n$ 质量数)	

表 54. 化合物参数 (第 3 页, 共 6 页)

参数	描述
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Extracted Mass (提取质量数)	目标峰的质荷比。目标定量离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( $m/z$ )。用户可以输入一个 Extracted Mass (提取质量数) 值, 但是当用户更改 Formula (分子式)、Adduct (加合物)、Polarity (极性) 或 Charge State (电荷态) 的值时, 应用程序重新计算 Extracted Mass (精确质量数) 值, 覆盖用户已输入的值。 默认: 0.0
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Extracted Mass (峰 $n$ 提取质量数)	范围: 10.000 至 2999.999  将 MS Order (质谱级数) 设置为 MS1 (一级质谱), 对所有 XIC 实验可用。
	
对于 XIC 实验中的质量数值, 当 MS Order (质谱级数) 设置为 MS2 (二级质谱) 时, 参阅 Precursor Mass (母离子质量数) 或 Product Mass (子离子质量数)。	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Polarity (极性)	Positive (正离子) 或 Negative (负离子)
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Polarity (峰 $n$ 极性)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Adduct (加合物)	列出配置文件中指定的加合物。若要从默认列表中添加或删除加合物, 参阅第 56 页上的“指定 Adducts (加合物)”。
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Adduct (峰 $n$ 加合物)	从中性质量数中添加或删除时, 加合物会影响已提取质量数的计算量。  加合物对极性敏感。在选择 Adduct (加合物) 值之前, 选择 Polarity (极性) 参数。  默认 Positive (正离子) 有效值: Neutral (中性的)、NH <sub>4</sub> 、H、Na、K 默认 Negative (负离子) 有效值: Neutral (中性的)、H、H <sub>3</sub> C <sub>2</sub> O <sub>2</sub> 、HCO <sub>2</sub> 默认: Neutral (中性的)
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Charge State (电荷态)	指定离子的电荷态 (也就是 $m/z$ 中的 $z$ 值)。例如, 电荷态为 2 的负离子是指化合物的电子比质子多 2 个。
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Charge State (峰 $n$ 电荷态)	有效值: 1 至 10 默认: 1
MS Order (质谱级数)	指定确认峰是否来源于同一种扫描 (MS1), 或者碎片是否来源于紧接着的扫描方式 (MS2)。仅对 XIC 实验可用。

表 54. 化合物参数 (第 4 页, 共 6 页)

参数	描述
Time Range Peak (时间范围峰)	指定是否将采集时间指定为特定 RT (保留时间) 值周围的窗口, 还是指定为一个保留时间范围, 单位为分钟。  仅当编辑化合物时, 该参数可见。
Window (sec) (窗口, 秒)	应用程序使用 RT (保留时间) 和 Window (窗口) 值确定采集的开始和停止时间。仅当 Time Range Peak (时间范围峰) 选项未选中时可用。  范围: 0.00 至 499.50 开始时间 = 保留时间 - (窗口 / 2) 停止时间 = 保留时间 + (窗口 / 2) 开始和停止范围: 0.00 至 999.00
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: RT (min) (保留时间, min)	保留时间。应用程序使用 RT (保留时间) 和 Window (窗口) 值确定采集的开始和停止时间。当选中 Time Range Peak (时间范围峰) 选项时, 将 RT (保留时间) 值指定为一个范围。  范围: 0.00 至 999.00
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> RT (峰 <i>n</i> 保留时间)	开始时间 = 保留时间 - (窗口 / 2) 停止时间 = 保留时间 + (窗口 / 2) 开始和停止范围: 0.00 至 999.00
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Lens (透镜)	范围: -400 至 400
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Lens (峰 <i>n</i> 透镜)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Collision Energy (碰撞能量)	离子与碰撞气体碰撞时消耗的能量。仅对 SRM 实验可用。  范围: -250.00 至 250.00
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Collision Energy (峰 <i>n</i> 碰撞能量)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Energy Ramp (能量递变)	范围: 0.00 至 200.00
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Energy Ramp (峰 <i>n</i> 能量递变)	

表 54. 化合物参数 (第 5 页, 共 6 页)

参数	描述
<b>Confirming Peaks (确认峰)</b>	确认峰参数仅用于定量方法。
Compound Detail (化合物详细信息) 页面 Precursor (母离子)	母离子的质荷比。目标母离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( $m/z$ )。 将 MS Order (质谱级数) 设置为 MS2 (二级质谱), 对所有 SRM 实验和 XIC 实验可用。
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Confirming $n$ Precursor (峰 $n$ 确认 $n$ 母离子)	默认: 0.0 范围: 10.000 至 2999.999
Compound Detail (化合物) 页面: 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
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Confirming $n$ (峰 $n$ 确认 $n$ )	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面 Mass (质量数)	确认峰的质荷比。目标定量离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( $m/z$ )。 仅对 SIM 实验可用。
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Confirming $n$ Extracted Mass (峰 $n$ 确认 $n$ 提取质量数)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面 Extracted Mass (提取质量数)	目标峰的质荷比。目标定量离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( $m/z$ )。 仅对 XIC 实验可用。 默认: 0.0 范围: 10.000 至 2999.999
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Confirming $n$ Extracted Mass (峰 $n$ 确认 $n$ 提取质量数)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Collision Energy (碰撞能量)	离子与碰撞气体碰撞时消耗的能量。 仅对 SRM 实验可用。 范围: -250.00 至 250.00
Grid (表格) 页面: Peak $n$ Confirming $n$ Collision Energy (峰 $n$ 确认 $n$ 碰撞能量)	

表 54. 化合物参数 (第 6 页, 共 6 页)

参数	描述
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: MS Order (质谱级数)	指定确认峰或碎片是否来源于同一种扫描 (MS1) 或者紧跟着的扫描方式 (MS2)。 仅对 XIC 实验可用。
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Confirming <i>n</i> MS Order (峰 <i>n</i> 确认 <i>n</i> 质谱级数)	
<b>Fragments (碎片)</b>	Fragment (碎片) 参数用于目标筛选方法的 XIC 实验类型。应用程序使用碎片来指定出现在紧跟着的扫描 (MS2) 中的质量数。
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Extracted Mass (提取质量数)	目标峰的质荷比。目标定量离子峰的中心位置, 单位为质荷比 ( <i>m/z</i> )。 仅对 XIC 实验可用。 默认: 0.0 范围: 10.000 至 2999.999

## Experiment Types (实验类型)

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

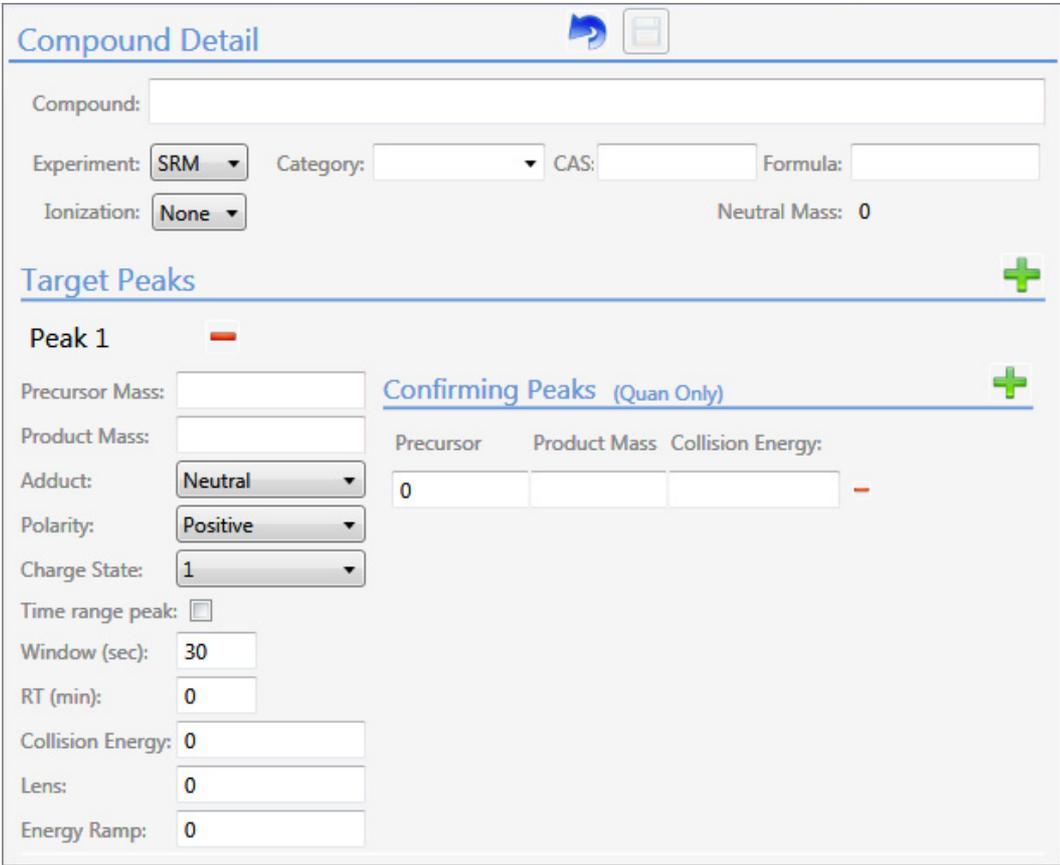
每种实验类型都使用一个不同的质量数过滤器结构。第 271 页上的“化合物参数”中指定了每种实验类型的目标峰和确认峰参数。

化合物数据库可以包含单个化合物的多种实验类型; 但是每个化合物的名称和实验类型的组合必须是唯一的。

### SRM: 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。

确认峰包含母离子质量数、子离子质量数和碰撞能量。



Compound Detail

Compound:

Experiment: SRM Category:  CAS:  Formula:

Ionization: None Neutral Mass: 0

Target Peaks +

Peak 1 -

Precursor Mass:  Product Mass:

Adduct: Neutral Polarity: Positive Charge State: 1

Time range peak:

Window (sec): 30 RT (min): 0 Collision Energy: 0 Lens: 0 Energy Ramp: 0

Confirming Peaks (Quan Only) +

Precursor	Product Mass	Collision Energy
0	<input type="text"/>	<input type="text"/>

## SIM: 单离子监测

SIM 实验类型支持单四级杆 LC/MS、GC/MS 和 Exactive 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。

确认峰包含一个已提取的质量数值。

The screenshot displays the 'Compound Detail' window in a software application. At the top, there are navigation icons for back and save. Below the title bar, a 'Compound:' text box is present. The main configuration area includes: 'Experiment:' set to 'SIM', 'Category:' with a dropdown arrow, 'CAS:' with a text box, and 'Formula:' with a text box. 'Ionization:' is set to 'None', and 'Neutral Mass:' is '0'. A green '+' icon is on the right. The 'Target Peaks' section is expanded to show 'Peak 1', which has a red minus icon. To the right of 'Peak 1' is the 'Confirming Peaks (Quan Only)' section, also with a green '+' icon. Under 'Peak 1', the following parameters are listed: 'Mass:' (text box), 'Adduct:' (dropdown menu set to 'Neutral'), 'Polarity:' (dropdown menu set to 'Positive'), 'Charge State:' (dropdown menu set to '1'), 'Time range peak:' (checkbox), 'Window (sec):' (text box with '30'), 'RT (min):' (text box with '0'), 'Lens:' (text box with '0'), and 'Energy Ramp:' (text box with '0'). The 'Confirming Peaks' section has a 'Mass:' text box and a red minus icon.

## XIC: 提取离子色谱图

质量数过滤器是单次全扫描，经后处理可以提取目标离子峰。

确认峰包含一个已提取的质量数值和一个选取的质谱级数：**MS1 (一级质谱)** 或 **MS2 (二级质谱)**。

### Compound Detail

Compound:

Experiment: XIC Category:   CAS:  Formula:

Ionization: None Response Threshold: 5000 Neutral Mass: 0

### Target Peaks +

**Peak 1** -

#### Confirming Peaks (Quan Only) +

Precursor	Extracted Mass	MS Order
	<input type="text"/>	<span style="border: 1px solid #ccc; padding: 2px;">ms1</span> <span style="color: red; font-weight: bold;">-</span>

#### Fragments (Screening Only) +

Extracted Mass

Extracted Mass:

MS Order: ms1

Adduct: Neutral

Polarity: Positive

Charge State: 1

Time range peak:

Window (sec): 30

RT (min): 0

Lens: 0

Energy Ramp: 0

## 化合物数据库名映射到 CSV 列名

Excel 电子数据表中的列名不总是与化合物数据库编辑器中的参数名相匹配。以下表格将 Compound Detail (化合物详细信息) 页面和 Grid (表格) 页面上的参数名映射到 CSV 电子数据表中的列标题上。

表 55. 化合物参数的 CSV 列名 (第 1 页, 共 4 页)

化合物数据库参数	CSV 列标题
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Compound (化合物)	CompoundName (化合物名称)
Grid (表格) 页面: Compound Name (化合物名称)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Experiment (实验)	ExperimentType (实验类型)
Grid (表格) 页面: Experiment Type (实验类型)	
Category (类别)	Category (类别)
CAS (化学文摘社)	CAS (化学文摘社)
Formula (分子式)	ChemicalFormula (化学分子式)
Ionization (离子化)	Ionization (离子化)
Response Threshold (响应阈值)	ResponseThreshold (响应阈值) (仅 XIC)
<b>Target Peaks (目标峰)</b>	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Precursor Mass (母离子质量数)	PrecursorMass (母离子质量数) (仅 SRM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Precursor Mass (峰 <i>n</i> 母离子质量数)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Product Mass (子离子质量数)	ProductMass (子离子质量数) (仅 SRM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> (峰 <i>n</i> )	

表 55. 化合物参数的 CSV 列名 (第 2 页, 共 4 页)

化合物数据库参数	CSV 列标题
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Mass (质量数)	ProductMass (子离子质量数) (仅 SIM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Mass (峰 <i>n</i> 质量数)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Extracted Mass (提取质量数)	Extracted Mass (提取质量数) (仅 XIC)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Extracted Mass (峰 <i>n</i> 提取质量数)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Product Mass (子离子质量数) Mass (质量数) Extracted Mass (提取质量数)	Extracted Mass (提取质量数) (当化合物数据库的 Compound Detail [化合物详细信息] 页面包含 SRM、XIC 和 SIM 实验的任意组合时)
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Adduct (加合物)	Adduct (加合物)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Adduct (峰 <i>n</i> 加合物)	
Polarity (极性)	Polarity (极性)
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Charge State (电荷态)	ChargeState (电荷态)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Charge State (峰 <i>n</i> 电荷态)	
Window (窗口)	Window (窗口)
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: RT (min) (保留时间, 分钟)	RT (保留时间)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> RT (峰 <i>n</i> 保留时间)	

表 55. 化合物参数的 CSV 列名 (第 3 页, 共 4 页)

化合物数据库参数	CSV 列标题
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Collision Energy (碰撞能量)	CollisionEnergy (碰撞能量) (仅 SRM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Collision Energy (峰 <i>n</i> 碰撞能量)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Lens (透镜)	Lens (透镜)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Lens (峰 <i>n</i> 透镜)	
Energy Ramp (能量递变)	EnergyRamp (能量递变)
<b>Confirming Peaks (确认峰)</b>	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Precursor (母离子)	Confirm Precursor (确认母离子) (仅 SRM 和 XIC)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Confirming <i>n</i> Precursor (峰 <i>n</i> 确认 <i>n</i> 母离子)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Product Mass (子离子质量数)	Confirm Product (确认子离子) (仅 SRM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Confirming <i>n</i> (峰 <i>n</i> 确认 <i>n</i> )	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Mass (质量数)	Confirm Product (确认子离子) (仅 SIM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Confirming <i>n</i> Extracted Mass (峰 <i>n</i> 确认 <i>n</i> 提取质量数)	

表 55. 化合物参数的 CSV 列名 (第 4 页, 共 4 页)

化合物数据库参数	CSV 列标题
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Extracted Mass (提取质量数)	Confirm Extracted (确认提取质量数) (仅 XIC)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Confirming <i>n</i> Extracted Mass (峰 <i>n</i> 确认 <i>n</i> 提取质量数)	
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Product Mass (子离子质量数) Mass (质量数) Extracted Mass (提取质量数)	Confirm Extracted (确认提取质量数) (当化合物数据库的 Compound Detail [化合物详细信息] 页 面包含 SRM、XIC 和 SIM 实验的任意组合时)
Compound Detail (化合物详细信息) 页面: Collision Energy (碰撞能量)	Confirm Energy (确认碰撞能量) (仅 SRM)
Grid (表格) 页面: Peak <i>n</i> Confirming <i>n</i> Collision Energy (峰 <i>n</i> 确认 <i>n</i> 碰撞能量)	
<b>Fragments (碎片)</b>	
Extracted Mass (提取质量数)	Fragment (碎片) (仅 XIC)

## 含默认值的数据列

当用户采用 Export Only Columns with Data (仅导出含数据的列) 选项将化合物导出至一个 CSV 文件时, 应用程序至少为一个化合物仅写入含非默认值数据的列。该选项不导出仅含默认数据的列值。

当用户从含缺失列的 CSV 数据文件中导入化合物时, 应用程序替换缺失列并为所有化合物的缺失列使用默认值。

表 56. 化合物参数的默认值

化合物数据库参数	默认值
<b>Compound Detail</b> (化合物详细信息)	
Formula (分子式)	Blank (空白样)
CAS (化学文摘社)	Blank (空白样)
Category (类别)	Blank (空白样)
Ionization (离子化)	None (无)
Response Threshold (响应阈值) (仅 XIC)	5000
<b>Target Peaks (目标峰)</b>	
Precursor Mass (母离子质量数)	Blank (空白样)
Collision Energy (碰撞能量)	0
Adduct (加合物)	Neutral (中性的)
Lens (透镜)	0
Energy Ramp (能量递变)	0
<b>Confirming Peaks (确认峰)</b>	
Precursor (母离子)	0
Collision Energy (碰撞能量)	Blank (空白样)

## 使用仪器方法

仪器方法是一组实验参数，用于指定自动进样器和质谱仪等装置的操作设置。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（Thermo Foundation 仪器配置）窗口。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开 Instrument View（仪器视图）
- 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（仪器视图）**

1. 点击位于导航窗格上的 **Method Development（方法开发）**。

A blue rectangular button with the text "Method Development" in white.

Method Development（方法开发）导航窗格打开。

2. 点击 **Instrument View（仪器视图）**。

A blue rectangular button with the text "Instrument View" in white and a white right-pointing arrow on the right side.

Instrument View（仪器视图）打开。

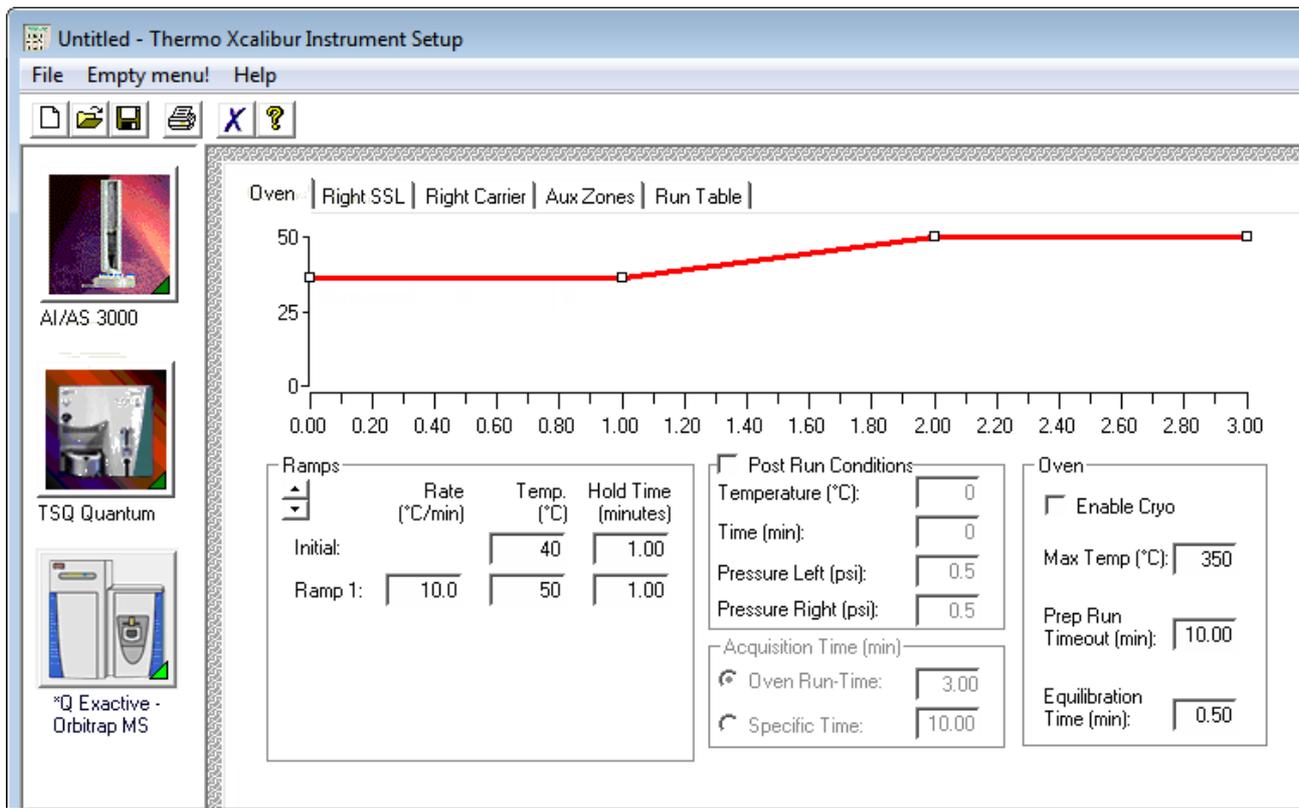


❖ 若要创建新仪器方法

1. 从主菜单中选择 **File (文件) > New Instrument Method (新仪器方法)**。

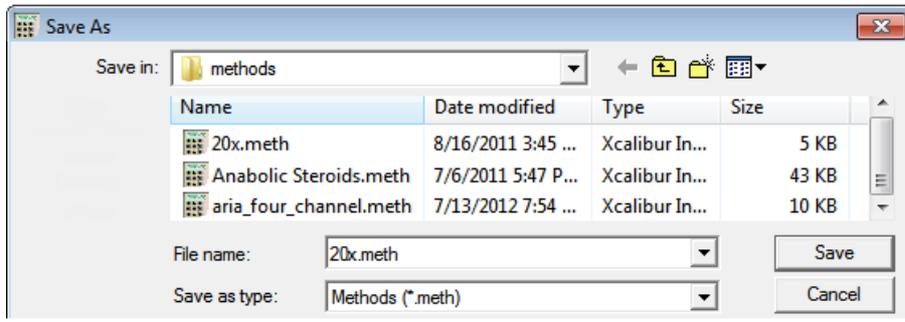
Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口打开。

图 80. 仪器设置示例显示多个已配置仪器



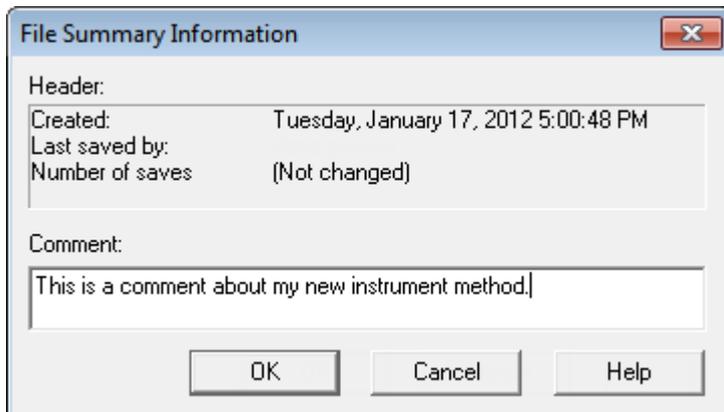
2. 点击用于该方法的仪器图标。
3. 编辑仪器页面上的值。
4. 从 Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口的主菜单中选择 **File (文件) > Save As (另存为)**。

Save As (另存为) 对话框打开。



- 选中需覆盖的仪器方法名称或者输入一个新仪器方法名称，然后单击 **Save (保存)**。

File Summary Information (文件总结信息) 对话框打开。



- (可选) 输入有关新仪器方法的注释。
- 单击 **OK (确定)**。

TraceFinder 应用程序将新仪器方法保存在以下文件夹中:

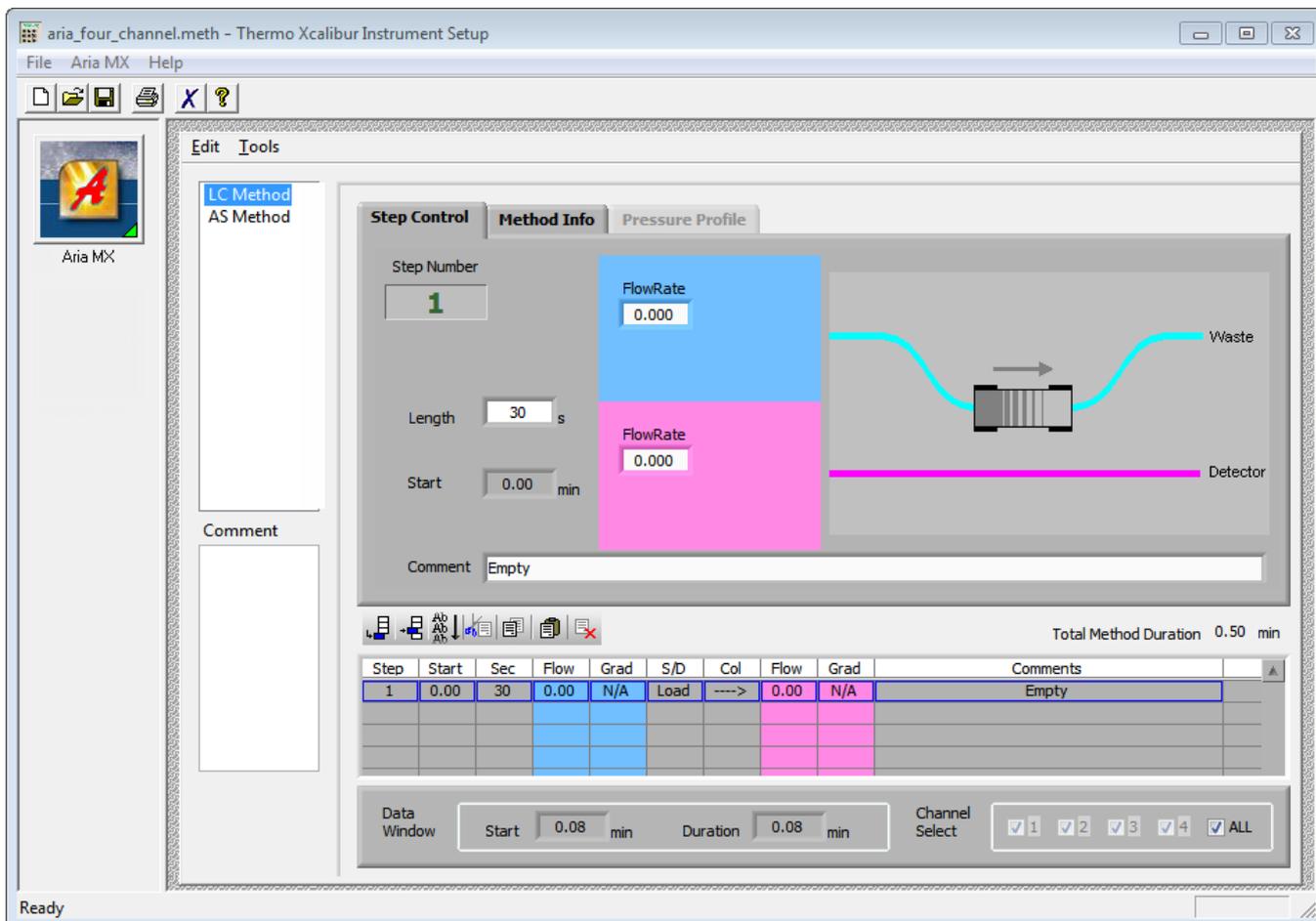
...\Xcalibur\methods

❖ 若要创建新多通道仪器方法

1. 从主菜单中选择 **File (文件) > New Instrument Method (新仪器方法)**。

Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口打开。

图 81. 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：

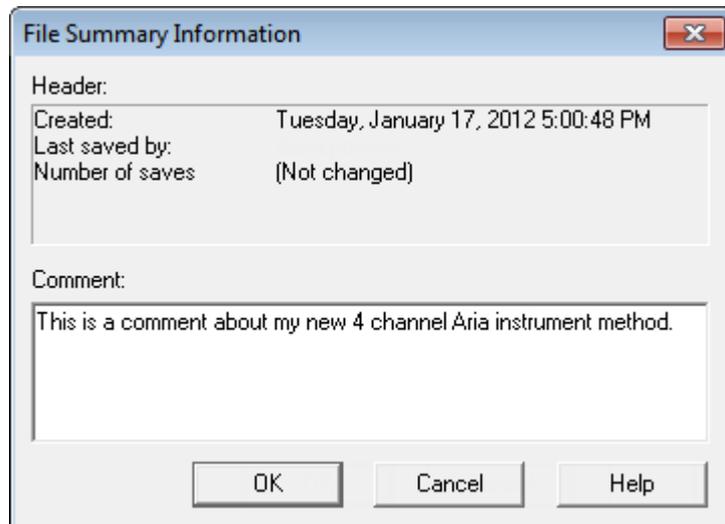


5. 从 Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口的主菜单中选择 **File (文件) > Save As (另存为)**。

Save As (另存为) 对话框打开。

- 选中需覆盖的仪器方法名称或者输入一个新仪器方法名称，然后点击 **Save (保存)**。

File Summary Information (文件总结信息) 对话框打开。



- (可选) 输入有关新仪器方法的注释。

- 点击 **OK (确定)**。

TraceFinder 应用程序将新仪器方法保存在以下文件夹中：

...\Xcalibur\methods

#### ❖ 若要打开仪器方法

- 在 Instrument View (仪器视图) 导航窗格中，点击 **Open Instrument Method (打开仪器方法)**。

仪器方法浏览器打开。

- 在浏览器中，进行下列操作之一：
  - 从列表中选择一种仪器方法，然后点击 **Open (打开)**。
  - 单击 **Xcalibur Instrument Method (Xcalibur 仪器方法)**，从最近使用的方法列表选择一个方法，并单击 **Open (打开)**。

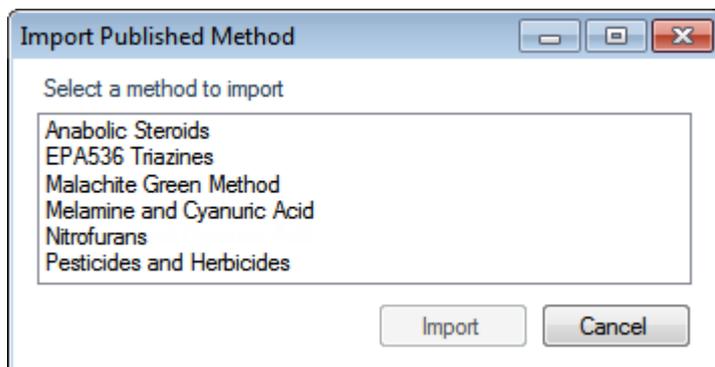
所选方法在 Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口中打开。可以编辑该方法并保存更改，也可将其另存为其它名称。

**注释** 若要打开已配置仪器的 Help (帮助)，点击仪器页面上的 **Help (帮助)**。

❖ 若要导入仪器方法

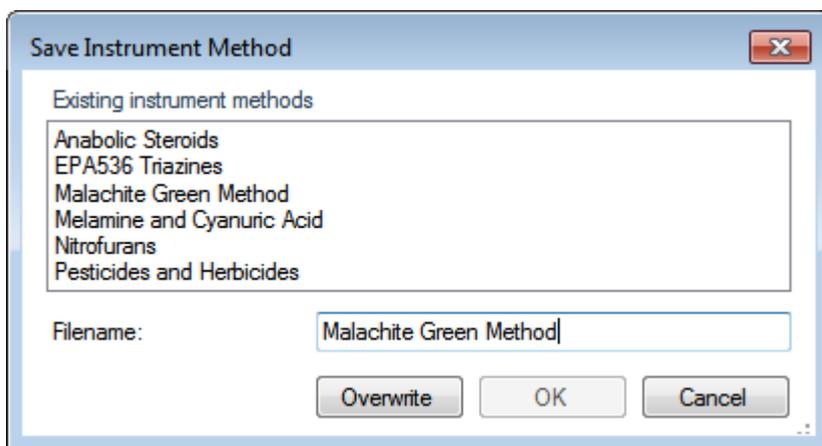
1. 从主菜单上选择 **Instrument View (仪器视图) > Import Published Method (导入已发布方法)**。

Import Published Method (导入已发布方法) 对话框打开。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. 选中一个含希望导入仪器方法的方法。  
有关导入主方法的说明，参阅第 244 页上的“导入已发布的主方法”。
3. 点击 **Import (导入)**。

Save Instrument Method (保存仪器方法) 对话框打开。



4. 执行下列操作之一：  
输入仪器方法的新名称，然后点击 **OK (确定)**。  
– 或 –  
选择要覆盖的仪器方法名称，然后点击 **Overwrite (覆盖)**。  
应用程序会报告方法已导入成功。

可以使用任一 **Open Instrument Method (打开仪器方法)** 命令来打开这个方法，如同打开所创建的仪器方法一样。

## 使用开发批次

在 Development Batch（开发批次）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](#)

## 创建开发批次

用户可以创建一个开发批次来检测仪器方法，并仅用其进行一次采集样品。无法保存开发批次；可以保存采集批次样品时创建的原始数据文件。

按照以下步骤进行操作：

- [若要打开 Development Batch（开发批次）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（开发批次）视图

1. 点击位于导航窗格的 **Method Development（方法开发）**。



Method Development（方法开发）导航窗格打开。

2. 点击 **Development Batch（开发批次）**。



Development Batch（开发批次）视图会打开一个新的空白批次。

Development Batch - [C:\Thermo\TraceFinder\3.0\...\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（配置）控制台上激活多通道时，Channel（通道）列才可用。参阅第 65 页上的“[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，从主菜单中选择 **Development Batch (开发批次) > Select Batch Location (选择批次位置)**。

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\3.1\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 (确定)**。

– 或 –

创建一个新文件夹：

- a. 找到并选择要为批次文件新建文件夹所在的文件夹位置。
- b. 点击 **Make New Folder (创建新文件夹)**。

TraceFinder 应用程序会在所选的文件夹内新建一个文件夹。

- c. 右击新文件夹的文件名，然后从快捷菜单中选择 **Rename (重命名)**。
- d. 为该文件夹输入名称。
- e. 点击 **OK (确定)**。

TraceFinder 应用程序会在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，输入行数然后点击 **Add Sample (添加样品)** 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。

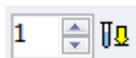
❖ **若要将样品插入到开发批次中**

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，输入行数然后单击 **Insert Sample (插入样品)** 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** 无法将样品插入到空白批次中。在使用该图标前，必须至少已选中一个样品。

❖ **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

开发批次比实际批次要求的参数少，但是管理信息的机制是相同的。

关于使用 Copy Down (向下复制) 或 Fill Down (向下填充) 命令来输入列值的详细说明，参阅附录 C，“使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)”。

在 Analysis (分析) 模式下，开发批次与 Batch View (批次视图) 中的批次使用相同的快捷菜单功能。有关右击快捷菜单的详细说明，参阅第 373 页上的“Batch View (批次视图) 快捷菜单”。

已完成开发批次的示例，参阅第 295 页上的“已完成的开发批次”。

按照以下步骤进行操作：

- 若要输入列值
- 若要重新调整列尺寸或重新组织列
- 若要从列表中移除已选样品
- 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为 0.1  $\mu\text{L}$ ；允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
5. (可选) 若要为样品更改仪器方法，点击 Instrument Method (仪器方法) 列中的向下箭头，然后从列表中选择一种方法。

该列表包含所有可用的仪器方法。来自外部文件的仪器方法，前缀为“Ext:”。

**注释** 仪器方法参数默认为在主方法中指定的仪器方法。

6. 若要为每个样品输入通道，点击 Channel (通道) 列中的向下箭头，然后从列表中选择一种通道。

无法在开发批次中指定自动通道选择。

**注释** 仅当在 Configuration (配置) 控制台上激活多通道时，Channel (通道) 列才可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。

### ❖ 若要重新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，拖曳列标题。

Filename (文件名) 列无法移动。

❖ 若要从列表中移除已选样品

1. 选择要移除的样品。

使用首列以确保样品被选中。

	Filename	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume
1	File1	1		1	10.0
2	File2	2		2	10.0
3	File3	3		3	10.0
4	File4	4		4	10.0

2. 右击并从快捷菜单中选择 **Remove Selected Samples (移除已选样品)**。

❖ 若要从列表中移除所有样品

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > New Sample List (新样品列表)**。

会出现下列情况之一：

- 若当前批次中的样品均已采集完成，该列表为空。
- 若当前批次中的样品尚未采集，则会出现一则消息，询问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 (是)**。

**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。

已完成的开发批次

开发批次中的所有参数完成以后，批次表如下所示：

图 82. 已完成的开发批次

Development Batch - [C:\Thermo\TraceFinder\3.1\...\Temp]											
	Filename	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume	Instrument Method	Sample Volume	Dilution Factor	Sample Weight	Calculation Type	Final Units
▶ 1	Unknown1	A1		1	1.0	Ext: Glucocorticoid	1	1	1	Liquid	▼
2	Unknown2	A2		2	1.0	Ext: Glucocorticoid	1	1	1	Liquid	▼
3	Unknown3	A3		3	1.0	Ext: Glucocorticoid	1	1	1	Liquid	▼
4	Unknown4	A4		4	1.0	Ext: Glucocorticoid	1	1	1	Liquid	▼

## 采集开发批次中的样品

在开发批次中，既可以提交整个批次供采集，也可以仅提交选定的样品。

按照以下步骤进行操作：

- 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. 右击并从快捷菜单中选择 **Submit Selected Samples（提交已选样品）**，

或点击 **Submit Selected Samples（提交已选样品）** 图标，。

TraceFinder 应用程序为所选的每个样品创建一个原始数据文件。其将原始数据文件和所有的临时工作文件写入下列文件夹中：

C:\Thermo\TraceFinder\3.1\Forensic\Temp

当采集完成时，应用程序删除所有临时工作文件。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（提交批次）** 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，应用程序删除所有临时工作文件。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。

## 在定性浏览器中查看原始数据文件

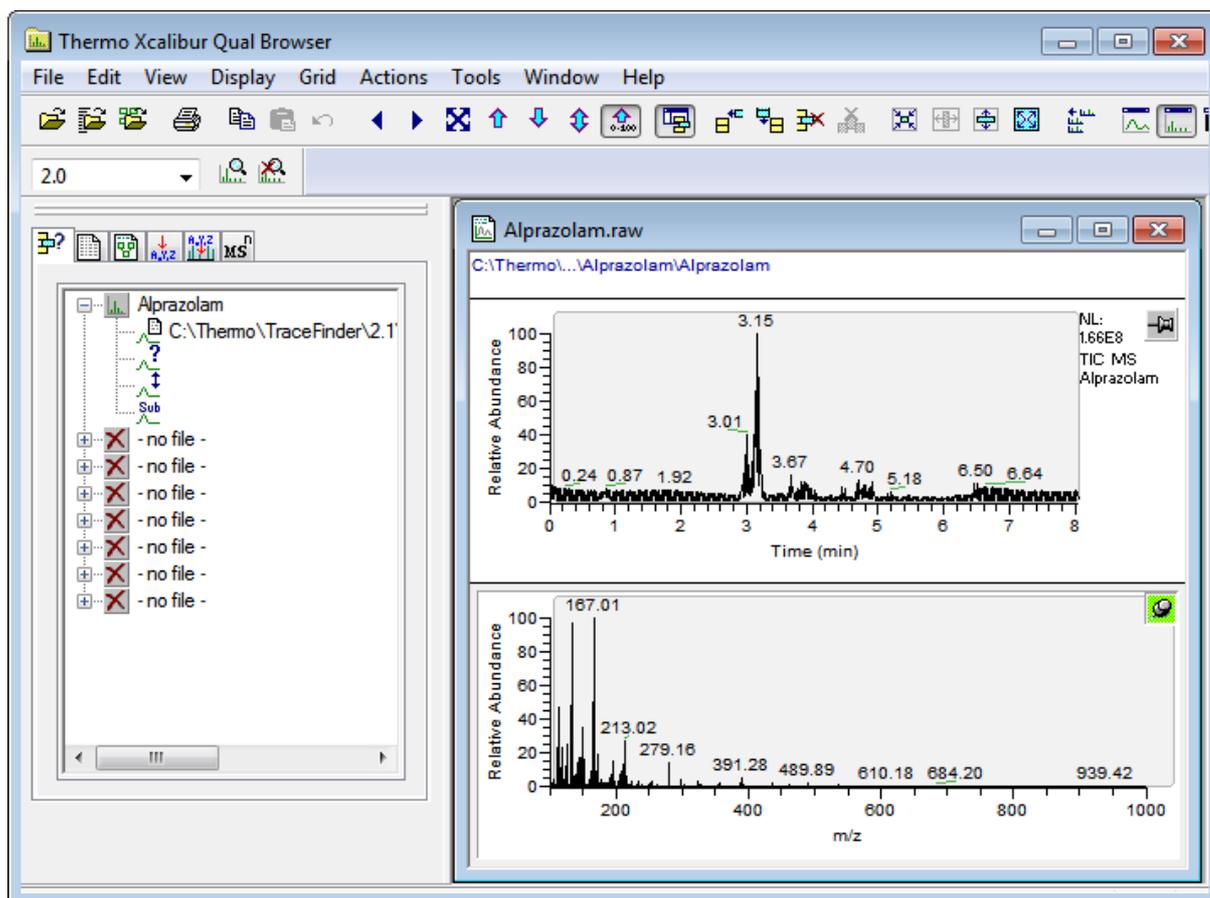
可以查看开发批次中已完成样品的色谱图和质谱图。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打开 Qual Browser（定性浏览器）
  - 若要在 Qual Browser（定性浏览器）中显示最后完成的原始数据文件
- ❖ 若要打开 Qual Browser（定性浏览器）

从主菜单上选择 **Go（转至） > Launch Qual Browser（打开定性浏览器）**。

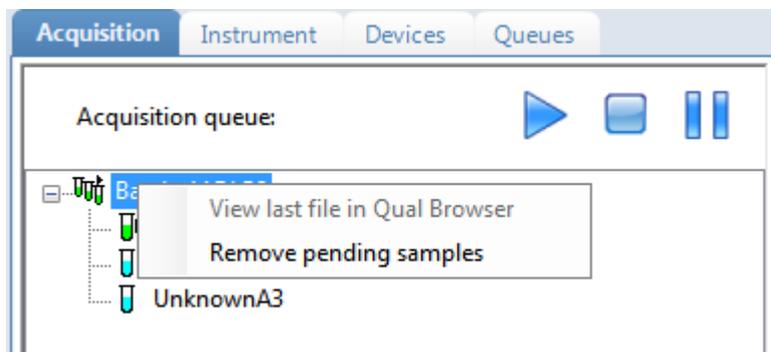
Thermo Xcalibur Qual Browser（Thermo Xcalibur 定性浏览器）窗口打开。



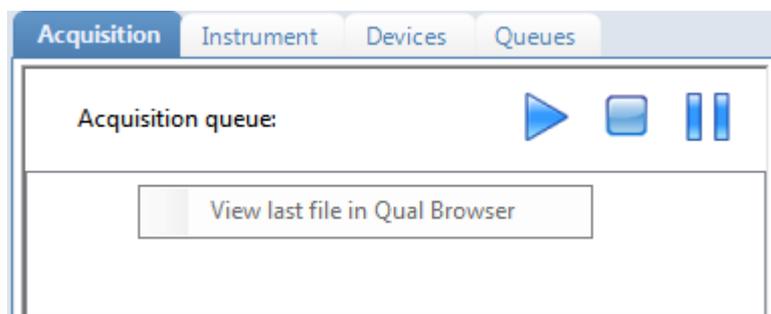
有关使用 Qual Browser（定性浏览器）的详细说明，参阅 Qual Browser Help（定性浏览器帮助）。

❖ 若要在 Qual Browser (定性浏览器) 中显示最后完成的原始数据文件

在实时查看器的 Acquisition (采集) 页面上, 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)**。



最后一个完成的文件在 Qual Browser (定性浏览器) 中打开。  
当所有样品完成后, 可以查看该批次的最后一个原始数据文件。



## 使用快速采集

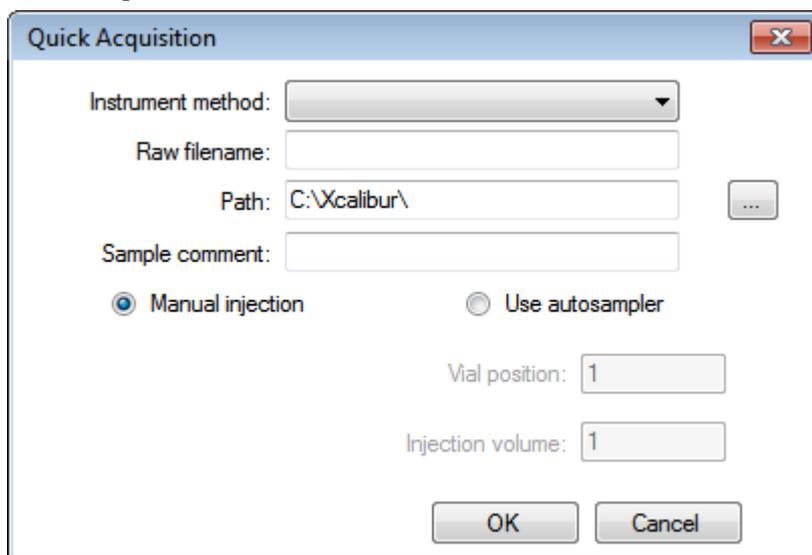
通过快速采集功能，用户可以通过 Acquisition（采集）模式下的任意视图快速提交单个样品。

**注释** 仅在 Configuration（配置）控制台中将其激活时，Quick Acquisition（快速采集）特性才可用。参阅第 60 页上的“Quick Acquisition（快速采集）”。

### ❖ 若要运行快速采集

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

Quick Acquisition（快速采集）对话框打开。

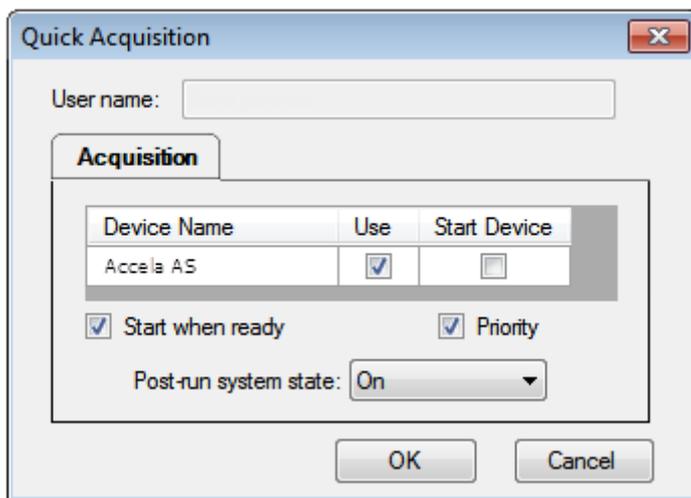


2. 选择仪器方法。
3. 输入采集的原始数据文件名。  
不要输入 .raw 文件后缀。
4. 对于路径，浏览至希望写入已采集原始数据文件的文件夹。
5. 选择手动进样或自动进样器选项：
  - 若要执行手动进样，执行以下操作：
    - i. 选中 **Manual Injection（手动进样）** 选项。
    - ii. 点击 **OK（确定）**。

应用程序将样品提交至 Acquisition（采集）队列。参阅第 340 页上的“Acquisition（采集）页面”。

- 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) 框中输入样品瓶的位置。
  - iii. 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  $\mu\text{L}$ ；允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
  - iv. 点击 **OK (确定)**。

Quick Acquisition (快速采集) 对话框打开。



- v. 选择要用于采集的设备的 **Use (使用)** 复选框。
- vi. (可选) 选中 **Start Device (启动设备)** 复选框表示该设备将会启动与其它仪器的通信连接。  
这通常是自动进样器。
- vii. (可选) 选中 **Start When Ready (准备就绪时启动)** 复选框，在所有仪器准备就绪时将其全部启动。  
清除该选项时，不同的仪器在不同的时间启动且必须等待最后一个仪器准备就绪。
- viii. (可选) 选中 **Priority (优先级)** 复选框，在当前样品采集完成后立即放置该样品。
- ix. (可选) 选择一个 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 **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。
- x. 点击 **OK (确定)**。

应用程序将样品提交至 Acquisition (采集) 队列。参阅第 340 页上的“Acquisition (采集) 页面”。

## 使用 Acquisition（采集）模式

本章介绍与 Acquisition（采集）模式相关的任务。

仅当在 Configuration（配置）控制台中选择 Acquisition Batch Wizard（采集批次向导）时，该模式才可用。参阅第 61 页上的“Batch Wizard Style（批次向导类型）”。

### 目录

- 使用批次
- 使用 Quick Acquisition（快速采集）
- Real Time Status（实时状态）窗格
- 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（采集）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），用户可以指定一个批次模板以提供批次的基本结构。

**注释** 当用户安全激活时，仅具有 Acquisition Wizard（采集向导）、Template Editing（模板编辑）权限职务的用户可以创建批次模板。

采用主方法，用户可以创建批次和运行样品。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。

也可以设置含已知浓度目标化合物的校正批次，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）特性从 Acquisition（采集）模式下的任一页面上快速提交单个样品。参阅第 337 页上的“使用 Quick Acquisition（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 Acquisition（采集）模式
- 创建和提交批次

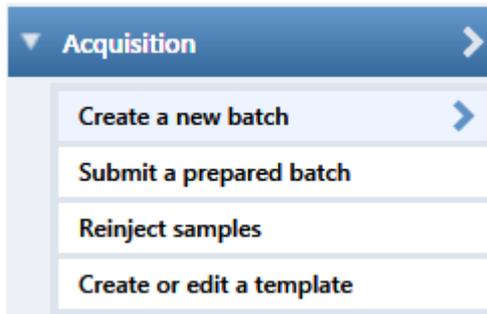
### 打开和浏览 Acquisition（采集）模式

#### ❖ 若要访问 Acquisition（采集）模式

点击导航窗格上的 **Acquisition（采集）**。

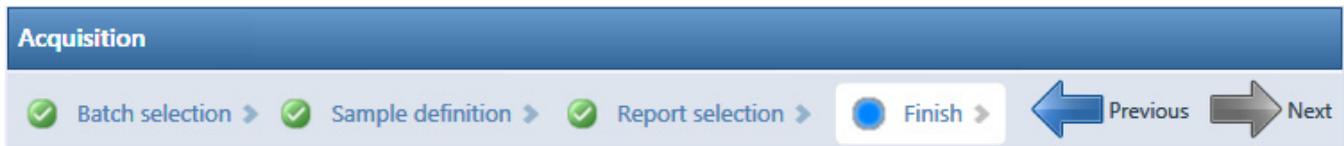


Acquisition（采集）模式的导航窗格打开。

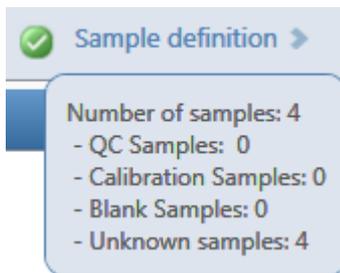
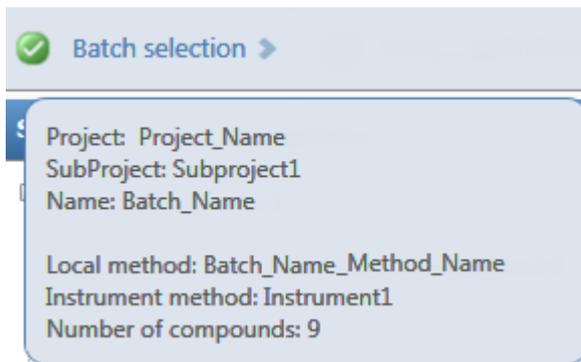


随着用户采用这些方法创建批次并在 Acquisition（采集）模式下运行，视图顶部的任务窗格监测运行进程。在每个阶段完成以后，用户可以在任务窗格视图名称上保持光标，以显示批次的指定参数。参阅[完成 Acquisition（采集）模式后的任务窗格示例](#)。

图 83. 完成 Acquisition (采集) 模式后的任务窗格示例



将光标停留在 Batch Selection (批次选择)、Sample Definition (样品定义) 或 Report Selection (报告选择) 上方, 以查看批次的参数。



Sample Definition (样品定义) 列表目录:

QC Samples (质控样品): QC (质控标样)

Calibration Samples (校正样品): Calibrator (校正标样)

Blank Samples (空白样品): Negative (阴性对照)

Unknown Samples (未知样): 所有其他样品



## 创建和提交批次

若要创建和提交批次，Acquisition（采集）模式采用一种向导界面，引导用户进行以下主要步骤：

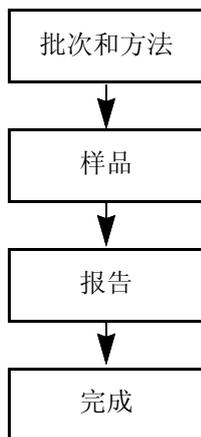
1. 选择批次
2. 定义样品列表
3. 选择和检查报告
4. 提交批次

Acquisition（采集）模式为创建批次或批次模板提供了多种技术。

- 若要运行新定量批次
- 若要运行新筛选批次
- 若要使用模板运行新批次
- 若要选择已制备的批次
- 若要重新进样以前已采集批次中的样品
- 若要创建定量批次模板
- 若要创建筛选批次模板

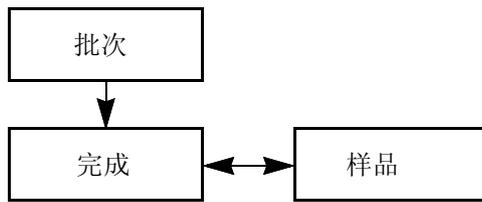
每种批次创建技术具有一套相关的工作流程，如以下流程图所示。每种工作流程结合不同的 Acquisition（采集）模式页面。

### 创建原始批次的工作流程



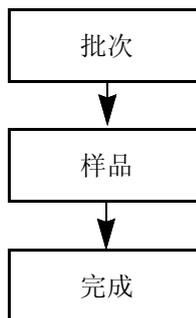
若要创建原始批次，从第 306 页上的“若要运行新定量批次”或第 308 页上的“若要运行新筛选批次”中的说明开始。

### 采集已制备批次的工作流程



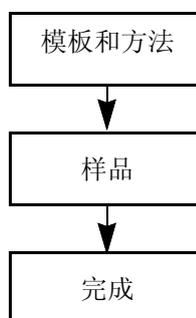
若要采集已制备批次，从第 310 页上的“若要选择已制备的批次”中的说明开始。

### 重新进样以前已采集批次的工作流程



若要处理以前已采集的批次，从第 311 页上的“若要重新进样以前已采集批次中的样品”中的说明开始。

### 创建或编辑批次模板的工作流程



**注释** 当用户安全激活时，默认为 LabDirector (实验室主任) 或 ITAdmin (IT 管理员) 职务的用户可以创建批次模板。

若要创建批次模板，从第 312 页上的“若要创建定量批次模板”或第 313 页上的“若要创建筛选批次模板”中的说明开始。

## 选择批次

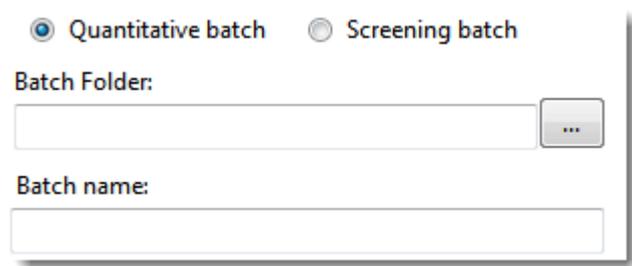
在 Acquisition（采集）模式下的 Batch Selection（批次选择）页面上，可以在任意当前项目 / 子项目中创建新的定量或筛选批次。或者，提交一个用户以前已制备和保存的批次，重新进样以前已采集的批次中的样品，或者创建批次模板以备以后的批次使用。

按照以下步骤进行操作：

- 若要运行新定量批次
- 若要运行新筛选批次
- 若要使用模板运行新批次
- 若要选择已制备的批次
- 若要重新进样以前已采集批次中的样品
- 若要创建定量批次模板
- 若要创建筛选批次模板

### ❖ 若要运行新定量批次

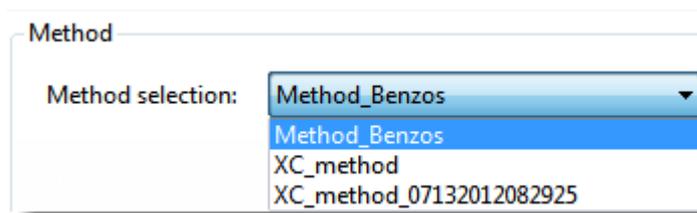
1. 在导航窗格上点击 **Create a New Batch（创建新批次）**。
2. 选择 **Quantitative Batch（定量批次）** 选项。
3. 选择要创建新批次所在的批次文件夹。
4. 在 Batch Name（批次名称）框中为新批次输入唯一的名称。



The screenshot shows a dialog box for creating a new batch. At the top, there are two radio buttons: "Quantitative batch" (which is selected) and "Screening batch". Below the radio buttons, there are two input fields. The first is labeled "Batch Folder:" and consists of a text input box followed by a small button with three dots (a browse button). The second is labeled "Batch name:" and is a simple text input box.

如果输入的名称不是唯一的，红色警告闪烁。

5. 从 Method Selection (方法选择) 列表选择一个方法。



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

The screenshot shows the 'Method Compound Data' window. At the top, the 'Method selection:' dropdown is set to 'Method\_Benzos'. Below it is a table with the following data:

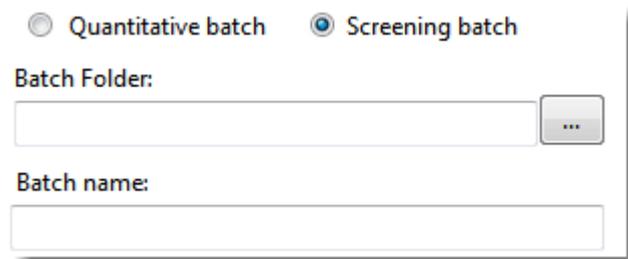
	RT	Compound	Compound type	Active	CAS No
▶	1.91	FENTHION-CE20-R20-TL...	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	55389
	2.72	Sulfisomidine	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	515640

6. 若要继续前进至下一页面，点击 **Next (下一步)**。

Sample Definition (样品定义) 页面打开。参阅第 314 页上的“定义样品列表”。

❖ 若要运行新筛选批次

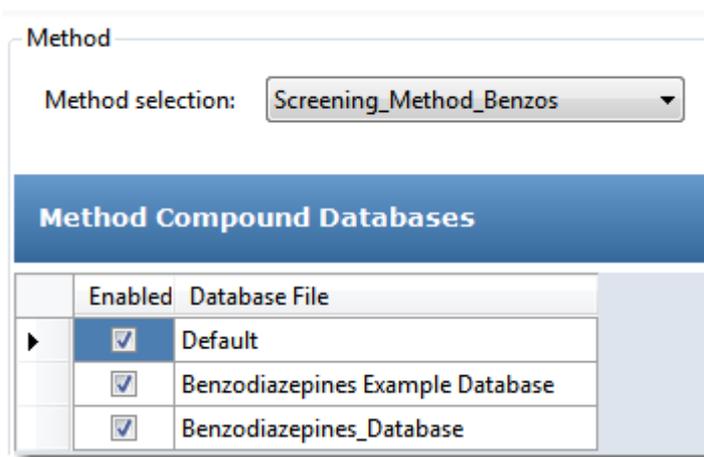
1. 在导航窗格上点击 **Create a New Batch（创建新批次）**。
2. 选择 **Screening Batch（筛选批次）** 选项。
3. 选择要创建新批次所在的批次文件夹。
4. 在 Batch Name（批次名称）框中为新批次输入名称。



如果输入的名称不是唯一的，红色警告闪烁。

5. 从 Method Selection（方法选择）列表选择一个方法。

Method Compound Databases（方法化合物数据库）窗格显示该方法中的化合物数据库。应用程序使用这些数据库鉴定样品中的化合物。在 Acquisition（采集）模式下无法编辑化合物数据库列表。



	Enabled	Database File
▶	<input checked="" type="checkbox"/>	Default
	<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines Example Database
	<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines_Database

6. 若要继续前进至下一页面，点击 **Next（下一步）**。

Sample Definition（样品定义）页面打开。参阅第 314 页上的“定义样品列表”。

❖ 若要使用模板运行新批次

1. 在导航窗格上点击 **Create a New Batch (创建新批次)**。
2. 选择 **Screening Batch (筛选批次)** 或 **Quantitative Batch (定量批次)** 选项。  
Available Templates (可用模板) 窗格上仅显示已选选项的批次模板。
3. 在 Available Templates (可用模板) 窗格中选择要采用的模板和方法组合。

Batch name:	
Benzos_template_083012_0955	
<b>Available Templates</b>	
Template name	Method
Benzos_template	Method_Benzos

系统使用所选的模板名称和日期 / 时间戳创建批次名称。可以更改默认批次文件夹或与模板关联的方法。

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

Method selection: Method\_Benzos ▼

- Method\_Benzos
- XC\_method
- XC\_method\_07132012082925

6. 若要继续前进至下一页面，点击 **Next (下一步)**。

Acquisition (采集) 模式的 Sample Definition (样品定义) 页面打开。参阅第 314 页上的“定义样品列表”。

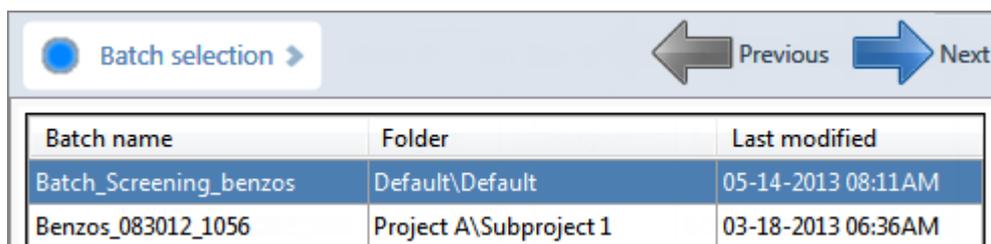
❖ 若要选择已制备的批次

1. 在导航窗格上点击 **Submit a Prepared Batch**（提交已制备的批次）。

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

...\TraceFinderData\Projects\...

2. 选择要采集的批次。



Batch name	Folder	Last modified
Batch_Screening_benzos	Default\Default	05-14-2013 08:11AM
Benzos_083012_1056	Project A\Subproject 1	03-18-2013 06:36AM

3. 若要继续前进至下一页面，点击 **Next**（下一步）。

Acquisition（采集）模式的 Finish（完成）页面打开。在 Finish（完成）页面上，用户可以保存批次、提交批次进行采集，或转到 Sample Definition（样品定义）页面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。或者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：

- 若要编辑样品列表，单击 **Previous**（上一步）。  
有关详细说明，参阅第 314 页上的“定义样品列表”。

– 或 –

- 若要准备待采集的批次，单击 **Submit**（提交）， Submit。  
有关详细说明，参阅第 330 页上的“提交批次”。

– 或 –

- 若要保存批次以备进行采集，单击 **Save**（保存）， Save。

TraceFinder 应用程序在下列文件夹内保存批次：

...\TraceFinderData\Projects\...

TraceFinder 应用程序关闭 Acquisition（采集）模式，并返回至用户最后一次使用的模式。

❖ 若要重新进样以前已采集批次中的样品

1. 在导航窗格上单击 **Reinject Samples (重新进样)**。
2. 在 Batch (批次) 页面上, 选择要重新采集的批次。

Batch (批次) 页面上显示所有以前已采集的定量和筛选批次。

3. 若要继续前进至下一页, 单击 **Next (下一步)**。

Acquisition (采集) 模式的 Sample Definition (样品定义) 页面打开。参阅第 314 页上的“[定义样品列表](#)”。

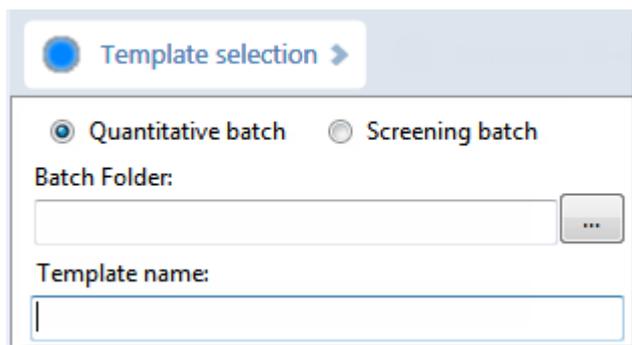
- 如果批次不可读, 应用程序报告该批次文件无效且无法打开。
- 若批次中的某一样品不可读, 应用程序以相同名称创建新样品, 并标记该样品。必须填写如 Sample Type (样品类型)、Level (水平) 等缺失信息, 然后在提交进行采集前保存批次。或者浏览至一个新的原始数据文件以替换损坏文件。

❖ 若要创建定量批次模板

1. 在导航窗格上点击 **Create or Edit a Template（创建或编辑模板）**。

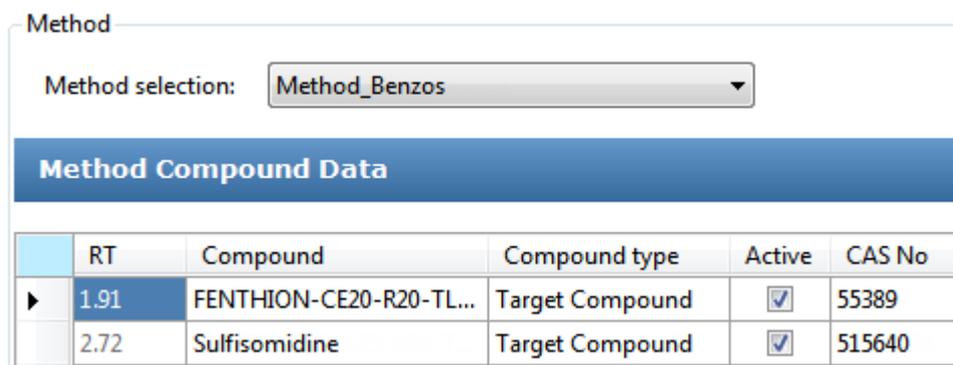
**注释** 当用户安全激活时，该页面仅对具有模板编辑权限职务的用户可用。

2. 选择 **Quantitative Batch（定量批次）** 选项。
3. 点击 ，选择要创建新批次模板所在的文件夹。
4. 在 Template Name（模板名称）框中输入新批次模板的名称。



5. 从 Method Selection（方法选择）列表中选择一种方法。

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



RT	Compound	Compound type	Active	CAS No
1.91	FENTHION-CE20-R20-TL...	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	55389
2.72	Sulfisomidine	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	515640

6. 若要继续前进至下一页面，点击 **Next（下一步）**。

Acquisition（采集）模式的 Sample Definition（样品定义）页面打开。参阅“[定义样品列表](#)”。

❖ 若要创建筛选批次模板

1. 在导航窗格上点击 **Create or Edit a Template (创建或编辑模板)**。

**注释** 当用户安全激活时，该页面仅对具有模板编辑权限职务的用户可用。

2. 选择 **Screening Batch (筛选批次)** 选项。
3. 点击 ，选择要创建新批次模板所在的文件夹。
4. 在 Template Name (模板名称) 框中输入新批次模板的名称。

5. 从 Method Selection (方法选择) 列表选择一个方法。

Method Compound Databases (方法化合物数据库) 窗格显示已选方法可用的筛选数据库。

Enabled	Database File
<input checked="" type="checkbox"/>	Default
<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines Example Database
<input checked="" type="checkbox"/>	Benzodiazepines_Database

6. 选中想要用于筛选的每个数据库的复选框。
7. 若要继续前进至下一页面，点击 **Next (下一步)**。

Acquisition (采集) 模式的 Sample Definition (样品定义) 页面打开。参阅“[定义样品列表](#)”。

## 定义样品列表

在 Acquisition（采集）模式下 Sample Definition（样品定义）页面上的 Samples（样品）页面上，创建批次的样品列表。参阅第 323 页上的“Samples（样品）”。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。用户可以在 Reference Sample（参考样品）页面上选择一个参考样品，用作 Data Review（数据查看）上的参考峰。参阅第 326 页上的“Reference Sample（参考样品）”。

若要创建样品列表，可以使用两组功能按钮中的一组（在下图中说明），或者使用快捷菜单上的命令（参阅第 323 页上的“Samples（样品）页面上的参数”上的 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）命令快速输入列中的值。有关使用 Copy Down（向下复制）和 Fill Down（向下填充）命令来输入列值的详细说明，参阅附录 C，“使用 Copy Down（向下复制）和 Fill Down（向下填充）”。

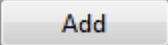
使用下列任一步骤来创建样品列表。当完成样品列表的定义时，点击 **Next（下一步）**。

- 当从草稿或模板创建批次或者编辑批次模板并点击 Next（下一步）时，Report Selection（报告选择）页面打开。参阅第 327 页上的“选择和检查报告”。
- 当编辑一个已制备批次或重新进样并点击 Next（下一步）时，Finish Selection（完成选择）页面打开。参阅第 330 页上的“提交批次”。

按照以下步骤进行操作：

- 若要添加样品至列表
- 若要在列表中插入样品
- 若要将样品导入至列表
- 若要移除列表中的样品
- 若要重新进样以前已采集批次中的样品
- 若要为批次选择通道
- 若要为样品指定特定通道
- 若要选择参考样品
- 若要添加自动样品类型
- 若要为样品指定不同的仪器方法

### ❖ 若要添加样品至列表

1. 选择要添加的样品行数 ，然后单击 **Add（添加）** 图标， 或 。
2. 在 Filename（文件名）列中为每个样品输入文件名。  
每个文件名必须唯一。
3. 从 Sample Type（样品类型）框中为每个样品选择样品类型。

#### 可用样品类型

Specimen（定量样品）	Hydrolysis（水解）	Solvent（溶剂）	QC（质控标样）
Unextracted （未提取）	Calibrator （校正标样）	Negative （阴性对照）	

有关样品类型的详细说明，参阅第 354 页上的“样品类型”。

- 为每个 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 样品, 从 Level (水平) 列表中选择水平。

样品水平已在主方法中定义。如果 Level (水平) 列表中没有可供选择的水平, 让具有 Method Development (方法开发) 权限的用户编辑该方法并指定水平。返回至 Acquisition (采集) 模式, 再次开始采集该批次。当用户离开 Acquisition (采集) 模式时, 应用程序无法保存批次。

若用户具有 Method Development (方法开发) 权限, 按以下步骤进行:

- 返回至 Method Development (方法开发) 模式。
- 打开该方法。
- 点击 **Compounds (化合物)** 选项卡。
- 点击 **Calibration Levels (校正水平)** 选项卡。
- 添加水平。
- 保存方法。

有关详细说明, 参阅第 168 页上的“Calibration Levels (校正水平)”。

- 输入每个样品在 Vial Position (样品瓶位置) 列中的样品瓶位置。

**提示** 使用 Fill Down (向下填充) 命令简化输入样品瓶位置。

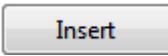
- 在 Injection Volume (进样体积) 列中输入每个样品的进样体积。  
允许的最小进样体积为 0.1  $\mu\text{L}$ ; 允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
- (可选) 输入或编辑其它列中的值。

**注释** 当使用样品列表底部的水平滚动条时, Status (状态)、Filename (文件名) 和 Sample Type (样品类型) 列将固定不动, 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 C, “使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)”。

#### ❖ 若要在列表中插入样品

- 选择要在其上方插入新 Specimen (定量样品) 的样品。  
无法使用 Insert (插入) 命令来创建第一个样品行。

- 选择要添加的样品数 ，然后点击 **Insert (插入)** 图标,  或 。

应用程序会将 Specimen (定量样品) 样品插入到所选样品上方。

	Status	Filename	Sample type	Groups	Qual Processing	Level
		cal_std_5	Calibrator		<input type="checkbox"/>	5
插入的 样品		Unknown2	Specimen		<input type="checkbox"/>	
		Unknown1	Specimen		<input type="checkbox"/>	
		cal_std_10	Calibrator		<input type="checkbox"/>	10

- 输入每个样品在 Filename (文件名) 列中的文件名。  
每个文件名必须唯一。

4. 在 Sample Type (样品类型) 列中选择每个样品的样品类型。

**可用样品类型**

Specimen (定量样品)	Hydrolysis (水解)	Solvent (溶剂)	QC (质控标样)
Unextracted (未提取)	Calibrator (校正标样)	Negative (阴性对照)	

5. 对于每个 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 样品, 从列表单击 Level (水平) 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 (水平) 列表中没有可供选择的水平, 让具有 Method Development (方法开发) 权限的用户编辑该方法并指定水平。然后, 返回至 Acquisition (采集) 模式, 再次开始采集该批次。当用户离开 Acquisition (采集) 模式时, 应用程序无法保存批次。

若用户具有 Method Development (方法开发) 权限, 按照第 314 页上的“若要添加样品至列表”中步骤 4 的说明进行。

6. 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 (向下填充) 命令简化输入样品瓶位置。

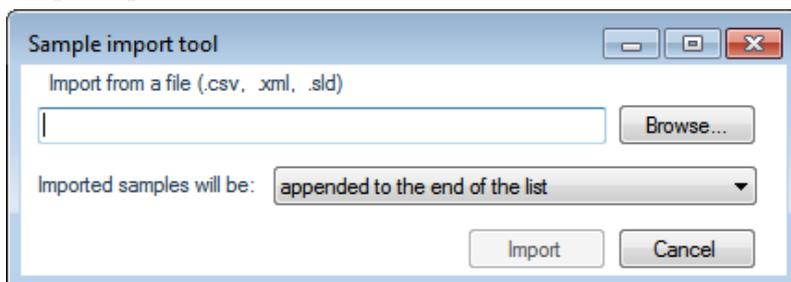
7. 在 Injection Volume (进样体积) 列中输入每个样品的进样体积。  
允许的最小进样体积为 0.1 µL; 允许的最大进样体积为 5000 µL。
8. (可选) 输入或编辑其它列中的值。

**注释** 当使用样品列表底部的水平滚动条时, Status (状态)、Filename (文件名) 和 Sample Type (样品类型) 列将固定不动, 其他列可左右滚动。

❖ **若要将样品导入至列表**

1. 点击 **Import (导入)**, 。

Sample Import Tool (样品导入工具) 对话框打开。



通过该对话框从 CSV 文件、XML 文件或 SLD 文件中导入样品列表。

2. 点击 **Browse (浏览)**, 选择包含要导入样品定义的 CSV, XML 或 SLD 文件。

**注释** 该 .csv、.xml 或 .sld 文件格式必须与 TraceFinder 文件格式匹配。

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. 点击 **Import (导入)**。

Sample Import Tool (样品导入工具) 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 (阴性对照)
Std Bracket (标曲更新)	Calibrator (校正标样)

对于每个已导入的样品, 应用程序采用在本地方法中指定的 Instrument Method (仪器方法)。

## 5. 对于每个 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 样品, 从列表单击 Level (水平) 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 (水平) 列表中没有可供选择的水平, 让具有 Method Development (方法开发) 权限的用户编辑该方法并指定水平。然后, 返回至 Acquisition (采集) 模式, 再次开始采集该批次。当用户离开 Acquisition (采集) 模式时, 应用程序无法保存批次。

若用户具有 Method Development (方法开发) 权限, 按照第 314 页上的“若要添加样品至列表”中步骤 4 的说明进行。

有关定义校正水平的详细说明, 参阅第 168 页上的“Calibration Levels (校正水平)”。

## 6. 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 (向下填充) 命令简化输入样品瓶位置。

## 7. 在 Injection Volume (进样体积) 列中输入每个样品的进样体积。

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

## 8. (可选) 输入或编辑其它列中的值。

**注释** 当使用样品列表底部的水平滚动条时, Status (状态)、Filename (文件名) 和 Sample Type (样品类型) 列将固定不动, 其他列可左右滚动。

## 9. (可选) 当使用多通道时, 为每个导入的样品选择通道。

导入样品默认为 Auto (自动)。

❖ 若要移除列表中的样品

1. 选择要移除的样品。

**提示** 使用 CTRL 或 SHIFT 键选择多个样品。

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

❖ 若要重新进样以前已采集批次中的样品

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 Selected Samples（重新进样所选样品）**。

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

TraceFinder 应用程序从原始样品中复制所有的参数值。

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	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（配置）控制台上激活多通道时，这些特性才可用。参阅第 65 页上的“[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通道。已配置通道由 Configuration（配置）控制台中的多通道设置决定。参阅第 65 页上的“[Multiplexing（多通道）](#)”。

清除 Multiplexing Channels（多通道）区域的通道不会从 Channels（通道）列表中移除为每个样品选择的通道。当为某个样品指定通道时，注意不要指定无效的通道。

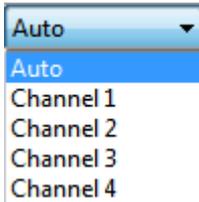
❖ 若要为样品指定特定通道

1. 滚动到 Channel (通道) 列。

**注释** 仅当在 Configuration (配置) 控制台上激活多通道时, Channel (通道) 列才可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。

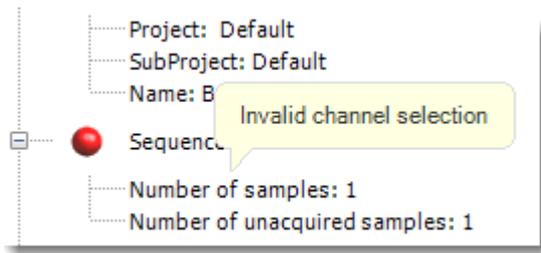
所有样品默认为 Auto (自动)。

2. 从 Channel (通道) 列表选择一个通道。



当提交样品批次时, 设置为 Auto (自动) 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设置通道上运行。

若选择了该批次不可用的通道, 应用程序在 Acquisition (采集) 模式的 Finish (完成) 页面上标记该样品队列。参阅前面的步骤, [若要为批次选择通道](#)。



3. 若看到这一错误, 按照以下操作进行:
  - a. 点击 **Previous (上一步)** 返回至 Sample Definition (样品定义) 页面。  
不正确样品标记有错误标记。
  - b. 更正通道选择。

❖ 若要选择参考样品

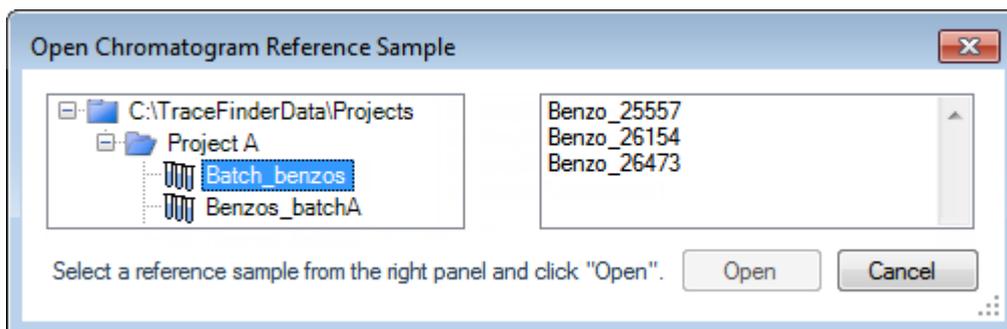
1. 点击 **Reference Sample（参考样品）** 选项卡。

Sample Definition（样品定义）页面上的 Reference Sample（参考样品）页面打开。参阅第 326 页上的“Reference Sample（参考样品）”。

用户可以选择一个参考样品，用作 Data Review（数据查看）上的参考峰。

2. 右击 Reference Sample（参考样品）页面并从快捷菜单上选择 **Add Reference Sample（添加参考样品）**。

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



**注释** 如果正在使用一个新方法，则在此处不会看到任何样品。必须采用当前方法创建和保存批次，以在列表中看到可用的样品。

3. 从列表中选择个项目 / 子项目 / 批次。

TraceFinder 应用程序仅显示采用当前主方法创建的批次。

4. 从右侧已处理样品列表中选择一个样品。

TraceFinder 应用程序显示所选批次中所有已处理的样品。若要使用某个样品作为参考样品，该样品必须采用当前主方法进行处理。

5. 点击 **Open（打开）**。

6. 应用程序将参考样品添加至 Reference Sample（参考样品）页面。

- 7.（可选）输入 Sample ID（样品识别号）、Sample Name（样品名称）、Comment（注释）和 Barcode Actual（实际条形码）。

- 8.（可选）更改样品的 Vial Position（样品瓶位置）。

在 Analysis（分析）模式下，应用程序采用该样品中的峰作为参考峰。参阅第 480 页上的“Reference Peak（参考峰）”。

## ❖ 若要添加自动样品类型

1. 点击 **Auto Samples (自动样品)** 选项卡。

Auto Samples (自动样品) 页面打开。参阅第 325 页上的“Auto Samples (自动样品)”。

2. 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 Solvent (溶剂) 样品添加至样品列表中。

用户可以从该列表或任何样品列表中添加、插入或删除样品。

3. 若要将样品类型更改为 Negative (阴性对照)，点击 Sample Type (样品类型) 列，并从列表中选择 Negative (阴性对照)。

4. 在样品的 Injection Volume (进样体积) 列，输入进样量。

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

5. 在 Number of Injections (进样次数) 列，输入指定的 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品瓶的可用进样次数。

自动样品进样发生以后，用户可以返回至该页面查看每个样品瓶的 Injections Used (已使用的进样) 次数。

6. 在 Vial Position (样品瓶位置) 列中，输入 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品的样品瓶位置。

## ❖ 若要为样品指定不同的仪器方法

**注释** 默认情况下，Instrument Method (仪器方法) 列不显示在 Sample Definition (样品定义) 页面上。参阅 [Instrument Method \(仪器方法\) 列](#)。

1. 在样品列表中显示 Instrument Method (仪器方法) 列：

- a. 右击样品列表，然后从快捷菜单中选择 **Modify Columns (修改列)**。

Modify Columns (修改列) 对话框打开。

- b. 在 Available Columns (可用列) 窗格上，选择 **Instrument Method (仪器方法)**。

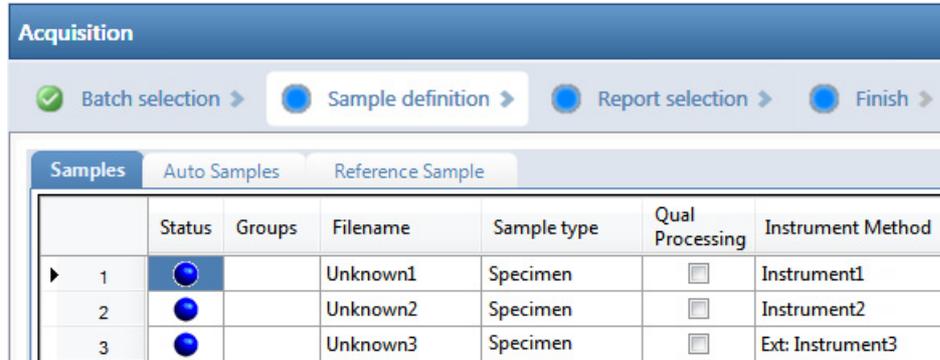
- c. 点击  将 Instrument Method (仪器方法) 列移至 Displayed Columns (已显示列) 窗格上。

- d. 点击 **OK (确定)**。

该应用程序显示 Instrument Method (仪器方法) 列，默认为在主方法中指定的仪器方法。

2. 点击 Instrument Method (仪器方法) 列, 并从列表中选择一种仪器方法。  
该列表包含所有可用的仪器方法。应用程序将来源于外部的仪器方法加前缀“Ext:”。  
用户可以为每个样品指定不同的仪器方法。

图 84. Instrument Method (仪器方法) 列



	Status	Groups	Filename	Sample type	Qual Processing	Instrument Method
▶ 1	<input checked="" type="radio"/>		Unknown1	Specimen	<input type="checkbox"/>	Instrument1
2	<input checked="" type="radio"/>		Unknown2	Specimen	<input type="checkbox"/>	Instrument2
3	<input checked="" type="radio"/>		Unknown3	Specimen	<input type="checkbox"/>	Ext: Instrument3

当用户提交批次时, 应用程序为已选仪器方法保存副本至以下文件夹中:

外部的仪器方法:

...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\*batch*\\Methods\\*method*\\*ExternalMethods*

本地的仪器方法:

...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\*batch*\\Methods\\*method*

## Samples (样品)

通过 Samples (样品) 页面上的特性为批次创建样品列表。

图 85. Sample Definition (样品定义) 页面上的 Samples (样品) 页面

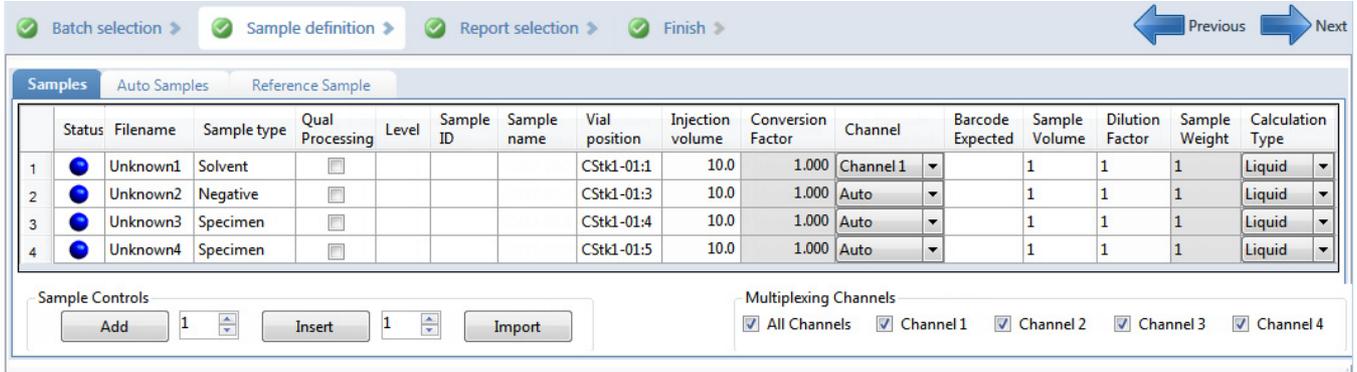


表 57. Samples (样品) 页面上的参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	定义
Previous (上一步)	返回至上一页面。
Next (下一步)	转到下一页面。
Status color codes (状态颜色代码)	<ul style="list-style-type: none"> <li><span style="color: blue;">●</span> 样品未采集。</li> <li><span style="color: yellow;">●</span> 样品已采集但未处理。</li> <li><span style="color: green;">●</span> 样品已采集并处理。</li> <li><span style="color: orange;">●</span> 样品正在采集中。</li> </ul>
<b>Sample Controls (样品控制)</b>	
Add (添加)	在样品表格中添加指定的空白行数。
Insert (插入)	在所选行上方插入指定的空白行数。
Import (导入)	打开 Sample Import Tool (样品导入工具), 在此导入 CSV 或 XML 文件中规定的样品。
<b>Multiplexing Channels (多通道)</b>	
All Channels (所有通道)	仅当在 Configuration (配置) 控制台上激活多通道时, 这些特性才可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。
Channel 1-n (通道 1-n)	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。
<b>快捷菜单命令</b>	
Add Sample (添加样品)	在样品表格中添加一个空行。
Insert Sample (插入样品)	在所选行上面的样品表格中插入一个空行。
Insert Copy Sample (插入复制样品)	复制当前已选行, 并在该行上方插入复制行。

表 57. Samples（样品）页面上的参数（第 2 页，共 2 页）

参数	定义
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)	从样品表格中移除所选样品。
Import Samples (导入样品)	打开 Sample Import Tool（样品导入工具）。参阅第 316 页上的“若要将样品导入至列表”。
Copy Down (向下复制)	将所选行中的值复制到你下方的所有行中。有关使用 Copy Down（向下复制）命令的详细说明，参阅附录 C，“使用 Copy Down（向下复制）和 Fill Down（向下填充）”。
Fill Down (向下填充)	在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（向下填充）命令的详细说明，参阅附录 C，“使用 Copy Down（向下复制）和 Fill Down（向下填充）”。
Modify Columns (修改列)	打开 Modify Columns（修改列）对话框。参阅第 361 页上的“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 电子数据表。无法将该数据粘贴回 Acquisition（采集）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 电子数据表。无法将该数据粘贴回 Acquisition（采集）模式样品列表中。
Paste（粘贴）	将来自其他应用程序如 Excel 电子数据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（采集）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。
Edit Instrument Method (编辑仪器方法)	<p>打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口，在此可以编辑仪器方法中的参数。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>在编辑外部方法时，应用程序更新了 ...\Xcalibur\methods 文件夹中的方法。</li> <li>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。</li> </ul> <p>有关编辑仪器方法的详细信息，参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。</p>

## Auto Samples (自动样品)

通过 Auto Samples (自动样品) 页面上的特性识别 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品, 以用于方法的 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面上指定的所有 Auto Sample (自动样品) 或 Auto Sample and Reinject (自动样品并重新进样) 失败的运行。参阅第 190 页上的“编辑 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面”。

用户指定用于 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面上运行失败的所有样品类型都必须包含在 Auto Samples (自动样品) 页面的样品列表中。

图 86. Sample Definition (样品定义) 页面上的 Auto Samples (自动样品) 页面

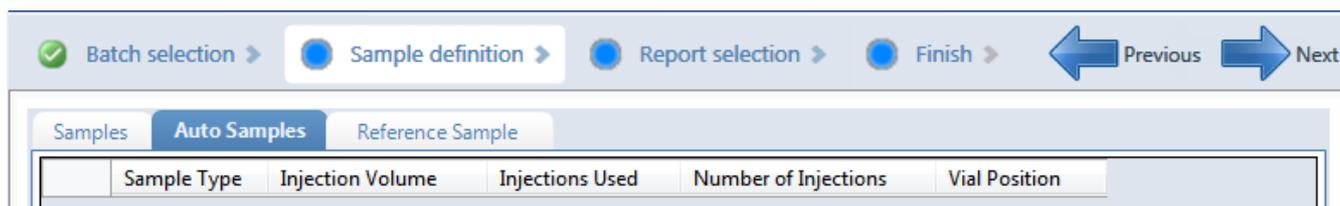


表 58. Auto Samples (自动样品) 页面参数

列	描述
Sample Type (样品类型)	方法的 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面上指定的自动进样的样品类型可以是 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照)。默认: Solvent (溶剂)
Injection Volume (进样体积)	Samples (样品) 页面上指定的用于样品采集的进样体积。范围: 0.1 至 5000 $\mu$ L
Injections Used (已使用的进样)	一个样品瓶使用的次数。该数量随整个批次逐渐增加。
Number of Injections (进样次数)	Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品瓶指定的可用进样次数。
Vial Position (样品瓶位置)	Samples (样品) 页面上指定的样品类型的样品瓶位置。

## Reference Sample (参考样品)

用户可以通过 Reference Sample (参考样品) 页面上的特性选择一个参考样品, 用作 Data Review (数据查看) 上的参考峰。

图 87. Sample Definition (样品定义) 页面上的 Reference Sample (参考样品) 页面

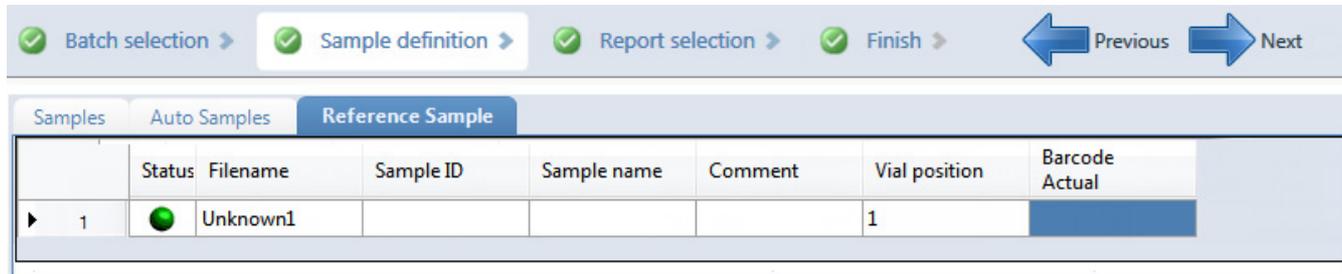


表 59. Reference Sample (参考样品) 页面上的参数

参数	描述
Status (状态)	<ul style="list-style-type: none"> <li><span style="color: blue;">●</span> 样品未采集。</li> <li><span style="color: yellow;">●</span> 样品已采集但未处理。</li> <li><span style="color: green;">●</span> 样品已采集并处理。</li> <li><span style="color: orange;">●</span> 样品正在采集中。</li> </ul>
Filename (文件名)	包含样品数据的原始数据文件的名称。
Sample ID (样品识别号)	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。
Barcode Actual (实际条形码)	用户输入的样品瓶条形码。
<b>快捷菜单命令</b>	
Add Reference Sample (添加参考样品)	打开 Open Chromatogram Reference Sample (打开色谱图参考样品) 对话框, 在此选择一个参考样品。
Delete Selected (删除已选)	删除参考样品。
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 电子数据表。无法将该数据粘贴回参考样品列表中。
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 电子数据表。无法将该数据粘贴回参考样品列表中。
Paste (粘贴)	将来自其他应用程序如 Excel 电子数据表的单列数据粘贴至所选列。
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。

## 选择和检查报告

在 Report Selection (报告选择) 页面上, 可以指定要创建的报告类型。参阅第 329 页上的“Report Selection (报告选择)”。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。
- 对于生成的每份自定义报告, 可以创建硬拷贝打印件或 XLSM 文件。
- 对于生成的每份目标筛选报告, 可以创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。
- 对于生成的每份 ToxID 报告, 可以创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。

使用下列其中一个步骤来创建报告列表。当完成指定报告选项后, 点击 **Next (下一步)** 转至 **Finish (完成)** 视图并提交批次。参阅第 330 页上的“提交批次”。

应用程序报告的输出文件被写入以下文件夹:

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

按照以下步骤进行操作:

- 若要编辑报告说明
- 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
- 若要指定打印版或 XLSM 格式的自定义报告
- 若要将 ToxID 或目标筛选报告指定为硬拷贝格式或 PDF 文件
- 若要将报告导出至指定文件夹

### ❖ 若要编辑报告说明

选择 Report Title (报告标题) 列并编辑该默认标题。

默认的报告标题与报告名称相同。

### ❖ 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。  
页面右边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 。

**注释** 仅 Standard (标准) 报告类型有预览文档。

❖ 若要将标准报告指定为打印格式或 PDF、XML 或 XLSM 文件

1. 对于要创建的每种报告类型，选中 Print（打印）、Create PDF（创建 PDF）或 Create XML（创建 XML）列中的复选框。
2. 若要为所有报告复制输出类型，右击单元格并从快捷菜单中选择 **Copy Down（向下复制）**。

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

❖ 若要指定打印版或 XLSM 格式的自定义报告

1. 对于要创建的每一个报告，选中 Print（打印）或 Create XLSM（创建 XLSM）列中的复选框。
2. 若要为所有报告复制输出类型，右击单元格并从快捷菜单中选择 **Copy Down（向下复制）**。

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

❖ 若要将 ToxID 或目标筛选报告指定为硬拷贝格式或 PDF 文件

1. 对于要创建的每一个目标筛选报告，选中 Print（打印）或 Create PDF（创建 PDF）列中的复选框。
2. 若要为所有报告复制输出类型，右击单元格并从快捷菜单中选择 **Copy Down（向下复制）**。

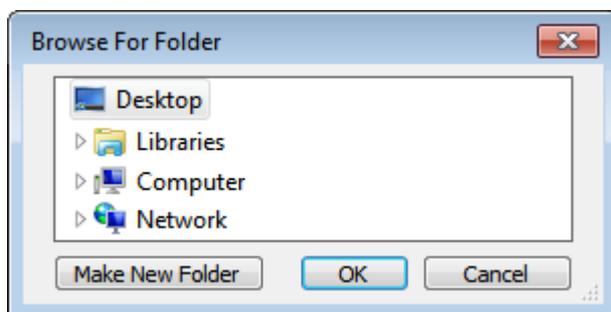
位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元中的选取或未选取状态。该操作仅应用于该输出格式可用的报告类型。

❖ 若要将报告导出至指定文件夹

1. 选择页面左下角的 **Export Results（导出结果）** 复选框。

Export Results

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.（可选）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）** 并输入新文件夹名称。

4. 点击 **OK (确定)**。

除了批次 Reports (报告) 文件夹外, 应用程序也会将所有报告写入指定文件夹。

## Report Selection (报告选择)

使用 Report Selection (报告选择) 页面上的特性指定要创建的报告类型。

图 88. Report Selection (报告选择) 视图

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

表 60. Report Selection (报告选择) 页面上的参数

参数	描述
Example (示例)	显示报告类型的 PDF 文件示例。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)	可供用户编辑的报告描述。
Report Type (报告类型)	报告类型: Standard (标准)、Custom (自定义)、ToxID 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、ToxID 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)	导出为 Excel 宏启用工作簿文件 (.xslm) 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单独创建报告, 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>B</b> 以示区别。 用户无法从 Report Selection (报告选择) 页面上选择该选项。必须为报告配置中的报告选择 Batch Level (批次水平) 选项。参阅第 37 页上的“指定 Reports (报告)”。
快捷菜单: Copy Down (向下复制)	将选取或未选取的状态复制到列中的所有后续报告中。
Export Results (导出结果)	除了批次 Reports (报告) 文件夹外, 将所有报告写入指定文件夹中。

## 提交批次

在 Acquisition（采集）模式的 Finish（完成）页面上指定启动方法、关闭方法或校正批次。可保存该批次以供以后采集，或者可以采集、处理数据或创建报告。参阅第 336 页上的“Finish（完成）页面”。

**注释** 如果正在处理批次模板，则唯一可用的功能是 Save（保存）。

按照以下步骤进行操作：

- 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
- 若要查看导出文件

### ❖ 若要指定启动或关闭方法

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

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

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

TraceFinder 应用程序会在运行该批次之后运行此方法。并非所有仪器都提供此功能。

System startup method:

AS Method 1

System shutdown method:

AS Method 3

### ❖ 若要自动更新定时 SRM 信息

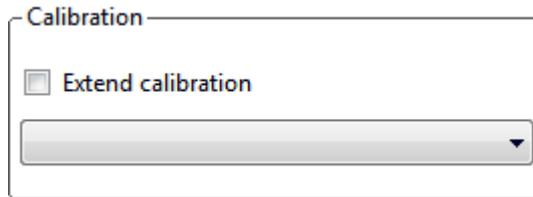
选中 **Auto TSRM Update（自动更新 TSRM）** 复选框。

Auto TSRM Update

当提交批次时，应用程序为 TSRM 功能更新 TSQ 方法中的离子对、碰撞能量和其他适合的数据。

❖ 若要指定校正批次

1. 在 Calibration (校正) 区域内, 从列表选择一个校正 (.calx) 文件。



**注释** 必须采用当前方法至少采集一个批次以创建 .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。

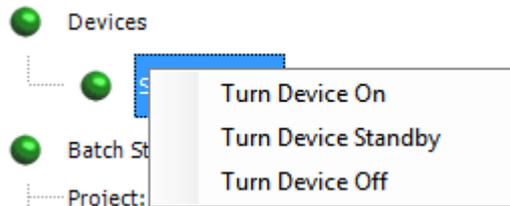


表 61. 仪器状态 (第 1 页, 共 2 页)

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 On (开机) 状态, 这样无需等待即可开始下一次运行。所有功率和流量均保持在工作水平。 默认: On (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) 状态, 这样在开始下一次运行前只需短暂延迟。 某些设备没有 Standby (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, 且约 15 分钟就可以将设备恢复到正常工作状态。该状态会关闭液体流速, 但加热器和其它子系统保持 On (开机) 状态, 因此从 Standby (待机) 转换为 On (开机) 时无需预热时间, 具体情况取决于设备。
Turn Device Off (关闭设备)	在当前运行完成后使设备一直处于 Off (关机) 状态。 Off (关机) 状态表示由 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除外。 某些设备没有 Off (关机) 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, 且可将设备恢复到正常工作状态。当几个运行已进入队列时, 应用程序采用最后一次提交运行的系统电源方案。

表 61. 仪器状态 (第 2 页, 共 2 页)

仪器状态	描述
<b>仪器状态指示器</b>	
	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 (完成) 页面上单击 **Save (保存)**,  Save 。  
TraceFinder 应用程序将批次另存为已制备文件。

❖ **若要开始采集**

1. 点击 **Submit (提交)**,  Submit 。

Submit Options (提交选项) 对话框打开。有关参数的详细说明, 参阅第 333 页上的“Submit Options (提交选项) 对话框”。

2. 若要采集 (或重新采集) 已提交的样品, 选中 **Acquire Data (采集数据)** 复选框。

- 当所有已提交的样品以前已采集时, 默认未选中该选项。
- 当已提交的样品中有部分未采集时, 默认选中该选项。

3. 若要处理已提交的样品, 选中 **Process Data (处理数据)** 复选框。

可以处理执行峰检测或未执行峰检测的数据。例如, 用户或许希望在重新处理样品时关闭峰检测。

4. (可选) 选中 **Create Reports (创建报告)** 复选框。

5. (多通道激活时可选) 选中 **Priority Sequence (优先序列)** 复选框。

应用程序在下一个可用通道或指定通道中采集优先批次。

6. (多通道未激活时可选) 选中 **Priority Sequence (优先序列)** 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批次之后。
- Next Available Sample (下一可用样品) 将批次放入当前采集样品之后。

**注释** 当选择 Configuration (配置) 控制台上的 Full Sequence Submission (完整序列提交) 时, 这些选项不可用, 因为实际上当前批次和当前样品是一样的。

7. 选择要用于采集的设备的 **Use (使用)** 复选框。

8. (可选) 选中 **Start Device (启动设备)** 复选框表示该设备将会与其它仪器建立通信连接。

通常是自动进样器。

9. (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。

10. 执行下列操作之一：

若要开始所选的流程，点击 **OK (确定)**。

所选的流程开始运行，TraceFinder 应用程序在当前窗口的底部显示实时画面。在查看当前采集批次的实时显示时，可在 Acquisition (采集) 模式下启动另一个批次。

– 或 –

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

图 89. Submit Options (提交选项) 对话框

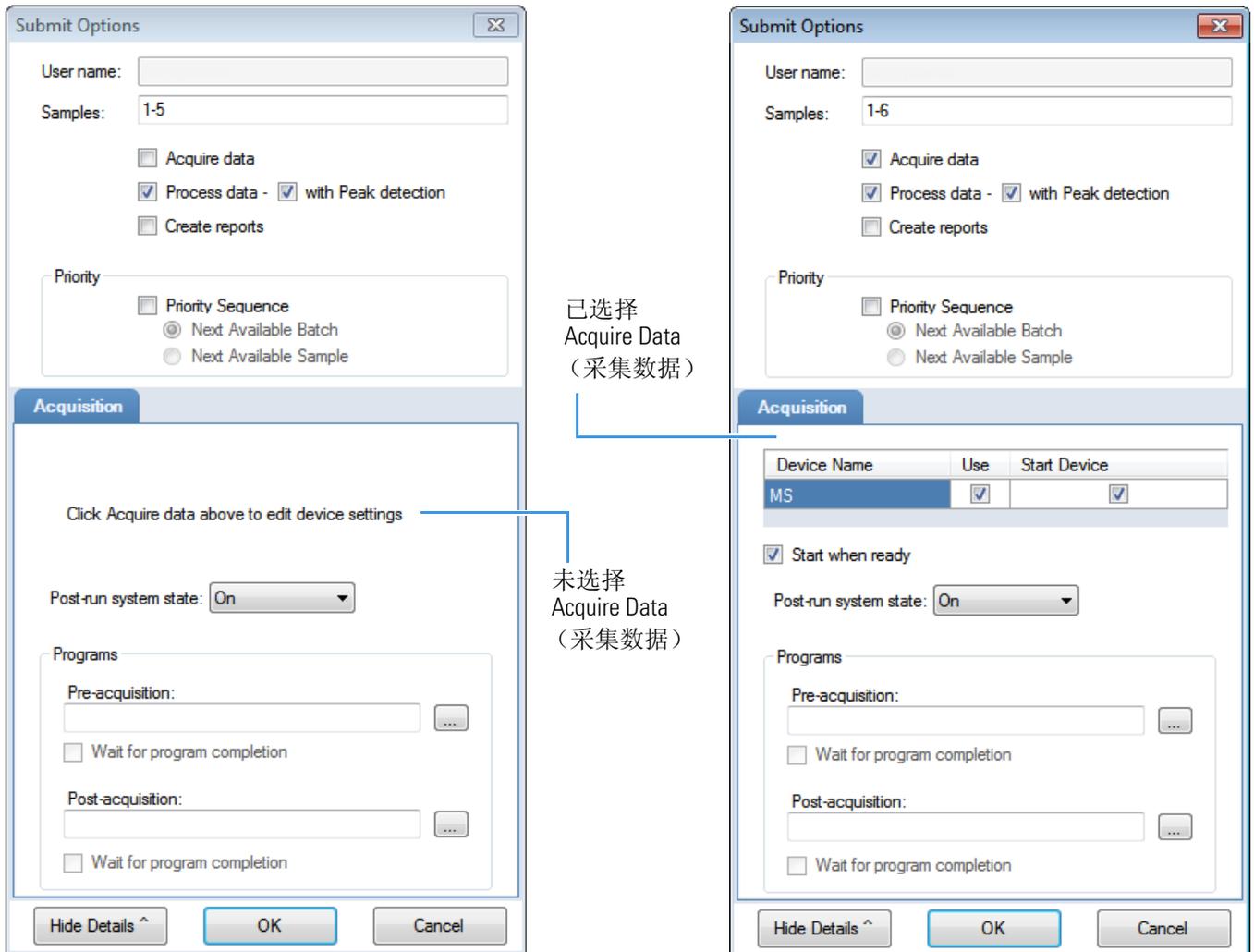


表 62. Submit Options (提交选项) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

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、处理或报告的样品数量。
Acquire Data (采集数据)	提交当前批次供采集。 <ul style="list-style-type: none"> <li>当所有已提交的样品以前已采集时，默认未选中该选项。</li> <li>当已提交的样品中有部分未采集时，默认选中该选项。</li> </ul>

表 62. Submit Options（提交选项）对话框参数（第 2 页，共 2 页）

参数	描述
Process Data (处理数据)	(默认) 处理当前批次的的数据。
With Peak Detection (进行峰检测)	(默认) 处理进行峰检测的数据。 清除该选项时，选项让用户重新处理样品而不执行峰检测。
Create Reports (创建报告)	创建当前批次的报告。
Priority Sequence (优先序列)	多通道激活时，将批次放在当前采集批次之后。 多通道未激活时，指定以下其中一种优先级选项，将批次放入队列中： <b>Next Available Batch（下一可用批次）</b> ：将批次放入当前采集批次之后。 <b>Next Available Sample（下一可用样品）</b> ：将批次放入当前采集样品之后。
	<b>注释</b> 当选择 Configuration（配置）控制台上的 Full Sequence Submission（完整序列提交）时，这些选项不可用，因为实际上当前批次和当前样品是一样的。

**Acquisition（采集）窗格**

Device Name (设备名称)	列出已配置的所有仪器。 如果要使用的仪器尚未配置，则关闭 TraceFinder 应用程序，进行仪器配置，然后重新打开应用程序。当 TraceFinder 应用程序正在运行时无法配置仪器。 仅当 Acquire Data（采集数据）复选框已选时可用。
Use（使用）	指定本次采集所用的仪器。 仅当 Acquire Data（采集数据）复选框已选时可用。
Start Device (启动设备)	指定与其它仪器建立通信连接的仪器。通常是自动进样器。 仅当 Acquire Data（采集数据）复选框已选时可用。
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)	指定系统采集完最后一个批次时的状态。 On（默认，开机）、Standby（待机），或 Off（关机）。
Hide/Show Details (隐藏 / 显示详细信息)	折叠或展开 Submit Options（提交选项）对话框的详细采集信息。
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（提交选项）对话框。

❖ 若要查看导出文件

从以下目录中找到要查看的文件：

- TraceFinder 应用程序将批次保存至子文件夹中：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...
- 对于采集的每个样品，应用程序写入一个 RSX 文件至批次 Data（数据）文件夹中：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\Data
- 应用程序将方法信息保存到批次 Methods（方法）文件夹中：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\Methods\\*method*
- 应用程序将报告写入批次 Reports（报告）文件夹中：  
...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\*batch*\\Reports

## Finish（完成）

采用 Finish（完成）页面上的特性保存以后待采集的批次，或采集和处理数据并选择性地创建报告。

图 90. Finish（完成）页面

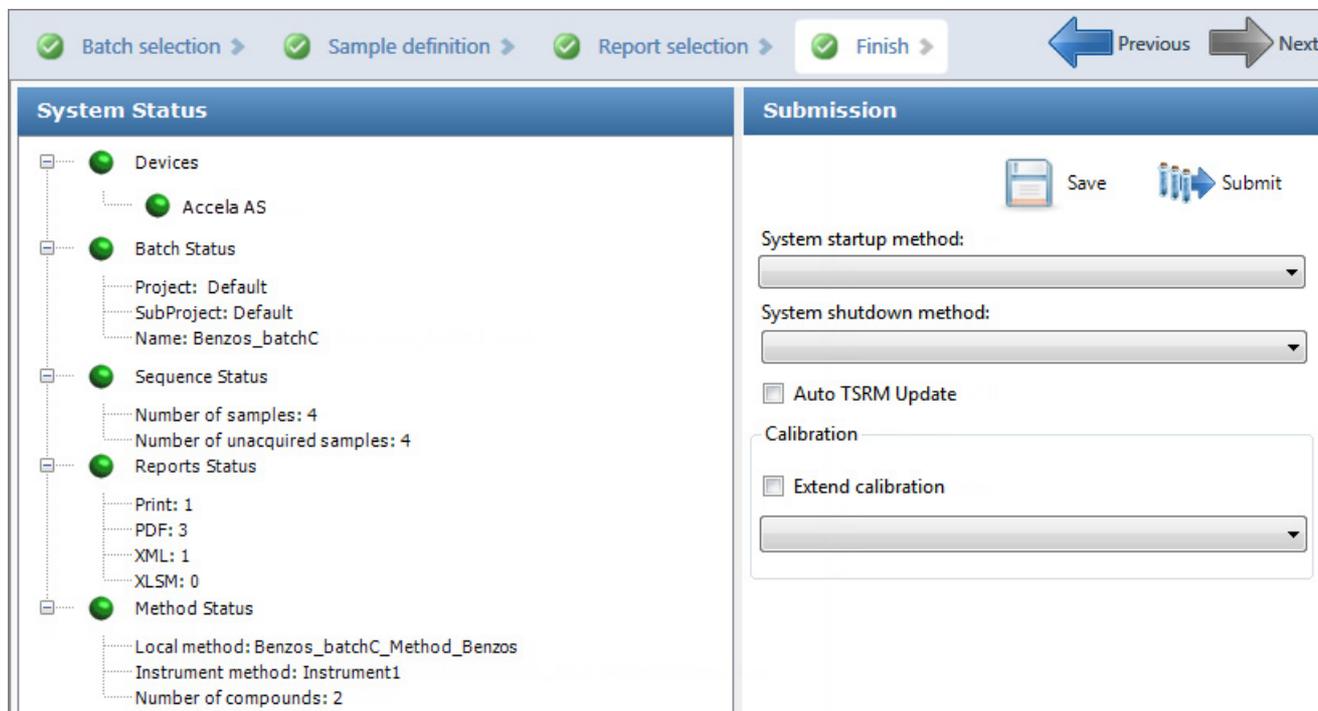


表 63. Finish（完成）页面上的参数

参数	描述
System Status (系统状态)	System Status（系统状态）窗格显示以下内容： <ul style="list-style-type: none"> <li>• 用于采集的设备</li> <li>• 批次的项目、子项目和名称</li> <li>• 批次中已采集和未采集的样品数</li> <li>• 待打印并保存为 PDF、XML 或 XLSM 文件的标准报告和自定义报告的数量</li> <li>• 用于该批次的本地方法和仪器方法</li> <li>• 方法中的化合物数</li> </ul>
System Startup Method (系统启动方法)	在该批次之前和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这些功能。
System Shutdown Method (系统关闭方法)	
Auto TSRM Update (自动更新 TSRM)	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 TSRM 功能。
Calibration（校正）	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 使用校正：使用所选的校正文件来处理当前数据。</li> <li>• 扩展校正：从当前批次添加校正数据到所选的校正文件中。</li> </ul>
Save（保存）	将当前批次保存为已准备批次。
Submit（提交）	打开 Submit Options（提交选项）对话框，在此可以选择生成报告。

## 使用 Quick Acquisition（快速采集）

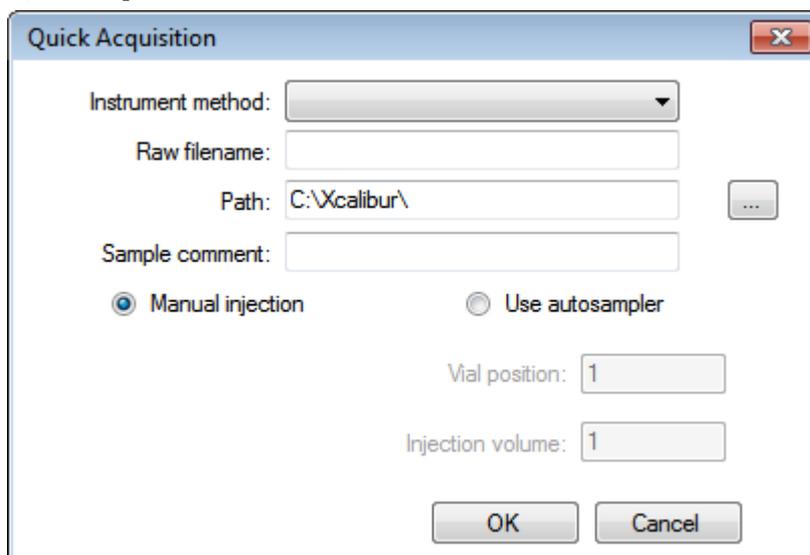
利用快速采集特性，用户可以从 Acquisition（采集）模式下的任意视图快速提交单个样品。

**注释** 仅在 Configuration（配置）控制台中将其激活时，Quick Acquisition（快速采集）特性才可用。参阅第 60 页上的“Quick Acquisition（快速采集）”。

### ❖ 若要运行快速采集

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

Quick Acquisition（快速采集）对话框打开。

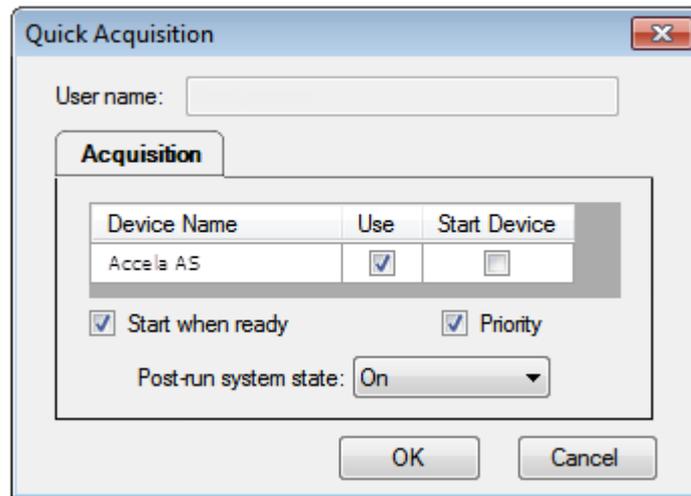


2. 选择仪器方法。
3. 输入采集的原始数据文件名。  
不要输入 .raw 文件后缀。
4. 对于路径，浏览至希望写入已采集原始数据文件的文件夹。
5. 选择手动进样或自动进样器选项：
  - 若要指定手动进样，执行以下操作：
    - i. 选中 **Manual Injection（手动进样）** 选项。
    - ii. 点击 **OK（确定）**。

应用程序将样品提交至 Acquisition（采集）队列。参阅第 340 页上的“Acquisition（采集）页面”。

- 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) 框中输入样品瓶的位置。
  - iii. 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  $\mu\text{L}$ ；允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
  - iv. 点击 **OK (确定)**。

Quick Acquisition (快速采集) 对话框打开。



- v. 选择要用于采集的设备的 **Use (使用)** 复选框。
- vi. (可选) 选中 **Start Device (启动设备)** 复选框表示该设备将会与其它仪器建立通信连接。  
通常是自动进样器。
- vii. (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。  
清除该选项时，不同的仪器在不同的时间启动且必须等待最后一个仪器准备就绪。
- viii. (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。
- ix. (可选) 选择一个 Post-run System State (运行后仪器状态) 的值：**Unknown (未知)**、**On (默认, 开机)**、**Off (关机)** 或 **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。
- x. 点击 **OK (确定)**。

应用程序将样品提交至 Acquisition (采集) 队列。参阅第 340 页上的“Acquisition (采集) 页面”。

## Real Time Status (实时状态) 窗格

用户可以在 TraceFinder 应用程序的任一模式下访问 Real Time Status (实时状态) 窗格。

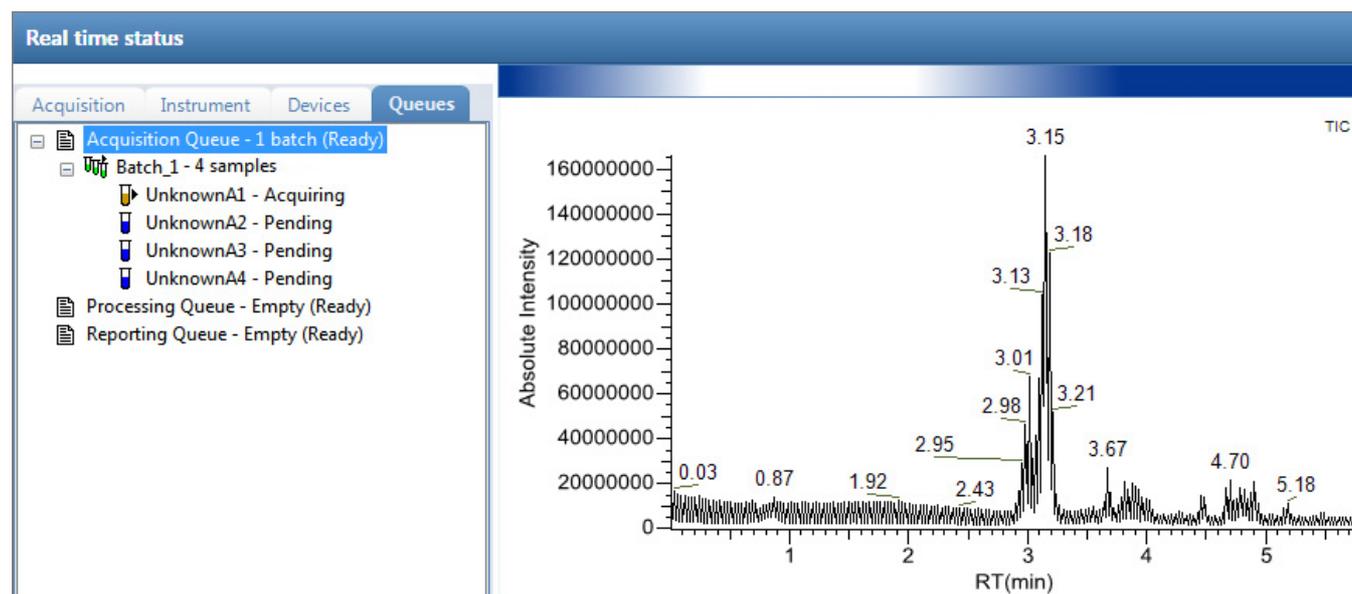
### ❖ 若要在任意模式下访问 Real Time Status (实时状态) 窗格

点击 TraceFinder 窗口右上角的 **Real Time Status (实时状态)**。

Real time status

Real Time Status (实时状态) 窗格在当前视图底部打开。

图 91. Real Time Status (实时状态) 窗格

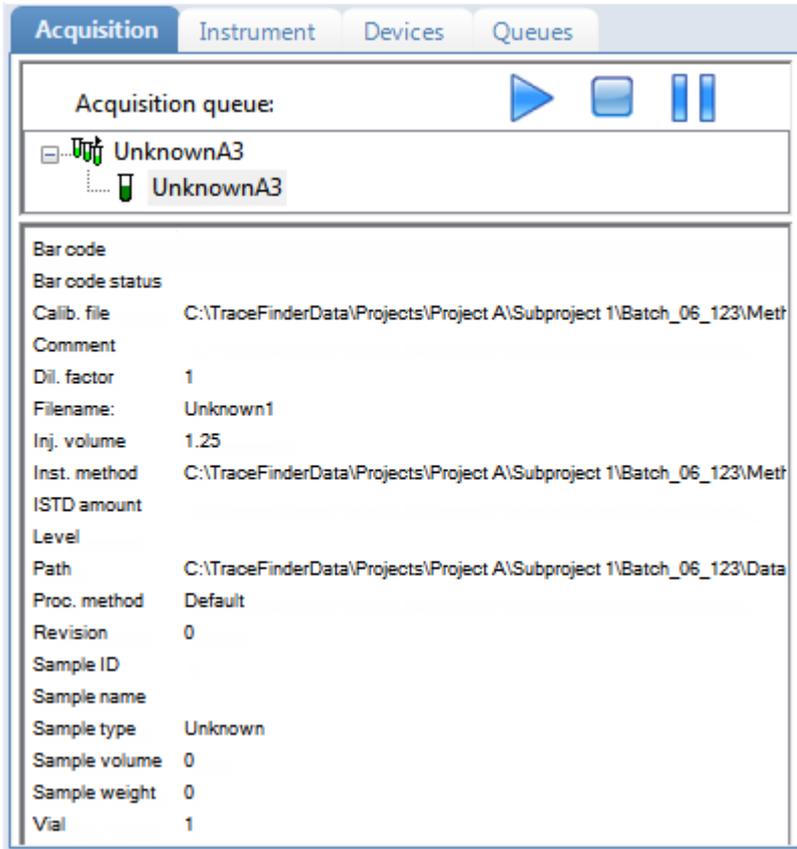


Real Time Status (实时状态) 窗格包含四个信息页面和一个实时追踪窗格：

- Acquisition (采集) 页面
- Instrument (仪器) 页面
- Devices (设备) 页面
- Queues (队列) 页面
- 实时谱图显示

## Acquisition（采集）页面

利用 Acquisition（采集）页面监测应用程序采集样品的进程。



使用 Start（启动），,  
Stop（停止），,  
或 Pause（暂停），, 图标控制  
Acquisition（采集）队列中的批次。

### ❖ 若要在 Qual Browser（定性浏览器）中查看上一次的采集文件

在 Acquisition（采集）页面上的任意位置右击并从快捷菜单中选择 **View Last File in Qual Browser（在定性浏览器中查看上一次的文件）**。

Thermo Xcalibur Qual Browser（Thermo Xcalibur 定性浏览器）打开，显示上一次处理的文件。

### ❖ 若要打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口

在 Acquisition（采集）页面上的任意位置右击并从快捷菜单中选择 **Open Instrument Method Editor（打开仪器方法编辑器）**。

Thermo Xcalibur Instrument Setup（Thermo Xcalibur 仪器设置）窗口打开，显示当前运行的仪器方法。

有关编辑仪器方法的详细信息，参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。

**注释** 更改和保存仪器方法不会影响当前正在运行的批次。

## Instrument (仪器) 页面

通过 Instrument (仪器) 页面监测当前正在采集的样品。

当运行一个样品提交时，这里显示样品名称而不是批次名称。

### ❖ 若要在 Qual Browser (定性浏览器) 中查看最后一个采集文件

在 Instrument (仪器) 页面窗格顶部的任意位置右击并从快捷菜单中选择 **View Last File in Qual Browser (在定性浏览器中查看上一次的文件)**。

Thermo Xcalibur Qual Browser (Thermo Xcalibur 定性浏览器) 打开，显示上一次处理的文件。

### ❖ 若要打开 Instrument Setup (仪器设置) 窗口

在 Instrument (仪器) 页面窗格顶部的任意位置右击并从快捷菜单中选择 **Open Instrument Method Editor (打开仪器方法编辑器)**。

Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口打开，显示当前运行的仪器方法。

有关编辑仪器方法的详细信息，参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。

**注释** 更改和保存仪器方法不会影响当前正在运行的批次。

## Devices (设备) 页面

通过 Devices (设备) 页面监测仪器状态。在 Devices (设备) 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

The screenshot shows the 'Devices' tab for 'Accela AS'. The 'Status' sub-tab is active, displaying the following information:

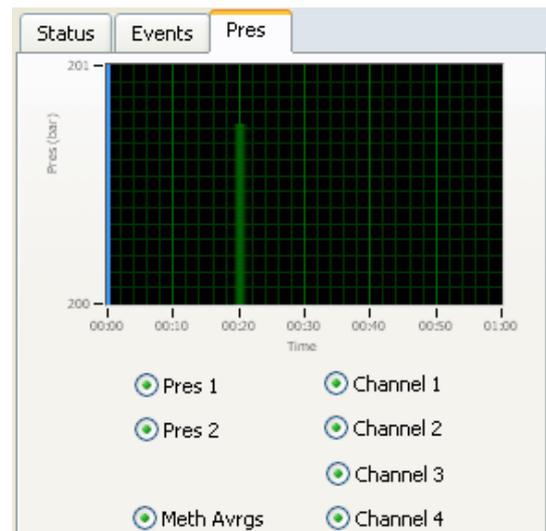
- Status: Stopped
- Scan speed (x): 5
- First scan: 1
- Last scan: 534
- Scan number: 534
- Start time (min): 8.041820
- Real time elapsed (min): 1.608350
- Repeat count: 0

### Aria 多通道反馈

The screenshot shows the 'Devices' tab for 'Aria MX'. It features 'Hold Autosampler' and 'Direct Control' buttons. The 'Status' sub-tab is active, showing the following status indicators:

- Autosampler 1: READY (green bar)
- Channel 1: READY (green bar)
- 40 bar
- Channel 3: READY (green bar)
- Detector: NOT READY (yellow bar)
- 1 | Inline (green bar)

Time	Ch	Msg
11:40:38.48	1	Chan Status NOT READY
11:40:36.48	1	(Channel1\Pump1) Std Pump 1
11:35:38.76		Detector NOT READY
11:35:36.30	1	Chan Status READY
11:33:24.39		System Init



按照以下步骤进行操作：

- 若要暂停自动进样器
- 若要控制通道
- 若要显示压力图
- 若要访问 Aria 多通道控件
- 若要在 Qual Browser (定性浏览器) 中查看上一次的采集文件
- 若要打开 Instrument Setup (仪器设置) 窗口

#### ❖ 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 泵继续运行，自动进样器继续洗针。

2. 若要重启自动进样器，再次点击 **Hold Autosampler (暂停自动进样器)**。

#### ❖ 若要控制通道

右击通道名称并从快捷菜单中选择一个命令。

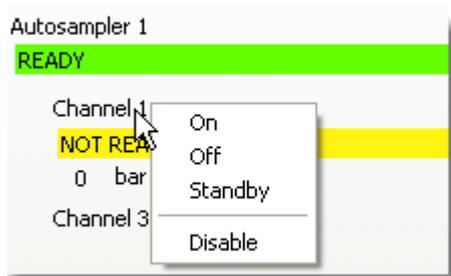


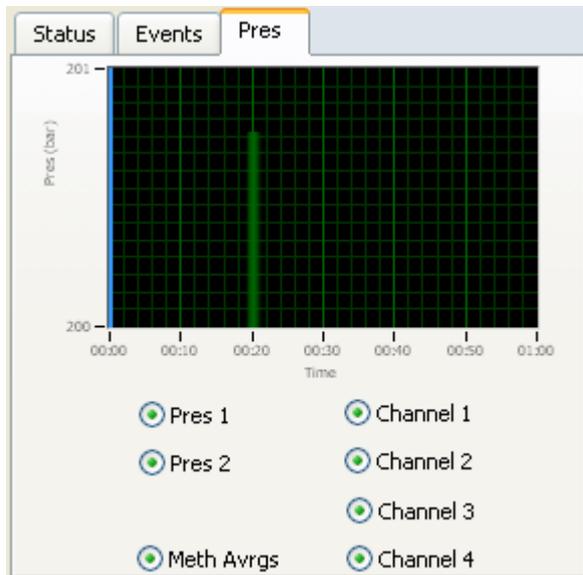
表 64. Autosampler (自动进样器) 快捷菜单命令

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)	<p><b>Disable (禁用)</b>：阻止通道接收样品。当在运行过程中选择 <b>Disable (禁用)</b> 时，应用程序完成该通道上当前样品的采集后停止。</p> <p><b>Enable (启用)</b>：允许通道接收样品。</p> <p>当不启用设置为 <b>On (开机)</b> 的通道时，该通道高亮显示为绿色且状态为 <b>READY (准备就绪)</b>。可以将该通道设为 <b>Off (关机)</b> 或 <b>Standby (待机)</b>。</p>

❖ 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表示色谱图条件的改变。

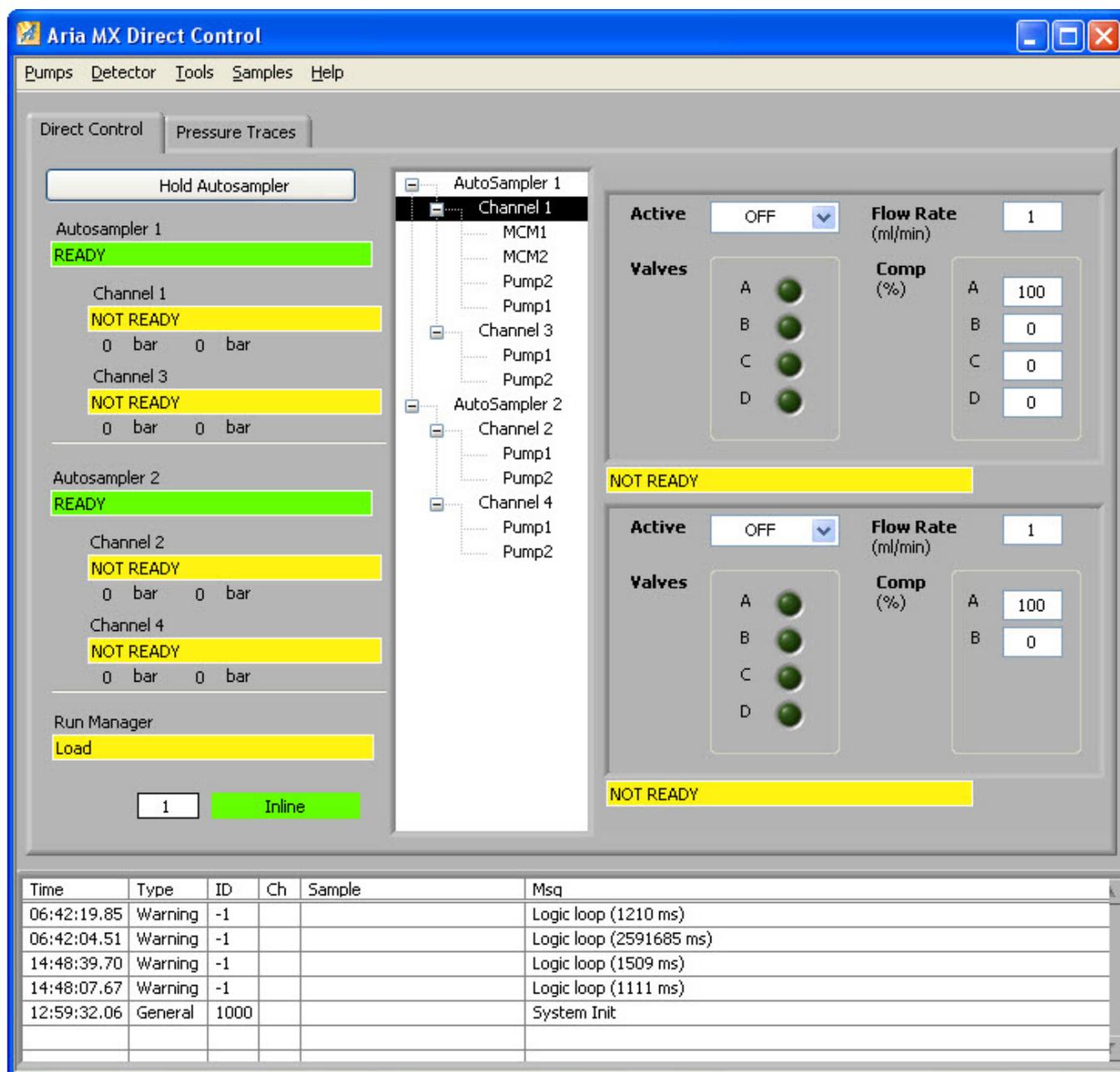


2. 若要查看特定泵的压力，选择 **Pres 1 (压力 1)** 或 **Pres 2 (压力 2)** 选项。  
默认情况下，显示所有泵的压力。
3. 若要查看特定通道的压力，选择相应的通道编号。  
默认情况下，显示所有通道的压力。

❖ 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)*。

❖ 若要在 Qual Browser (定性浏览器) 中查看上一次的采集文件

在 Devices (设备) 页面标题上右击并从快捷菜单中选择 **View Last File in Qual Browser (在定性浏览器中查看上一次的文件)**。

Thermo Xcalibur Qual Browser (Thermo Xcalibur 定性浏览器) 打开，显示上一次处理的文件。

❖ **若要打开 Instrument Setup（仪器设置）窗口**

在 Devices（设备）页面的标题上右击并从快捷菜单中选择 **Open Instrument Method Editor（打开仪器方法编辑器）**。

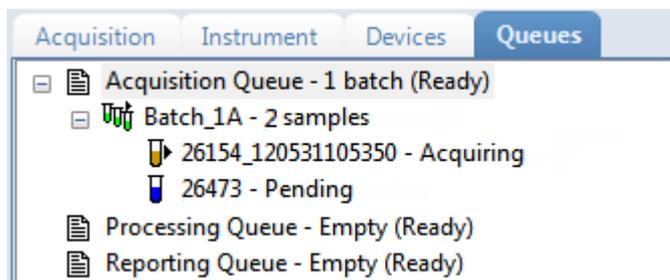
Thermo Xcalibur Instrument Setup（Thermo Xcalibur 仪器设置）窗口打开，显示当前运行的仪器方法。

有关编辑仪器方法的详细信息，参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。

**注释** 更改和保存仪器方法不会影响当前正在运行的批次。

## Queues（队列）页面

通过 Queues（队列）页面监测和控制 Acquisition（采集）、Processing（处理）和 Reporting（报告）页面。



- 利用 Queue-Level（队列 - 水平）命令暂停或移除任意队列中的批次。
- 利用 Batch-Level（批次 - 水平）命令暂停或移除任意队列的批次中的所有批次或样品。
- 通过其他命令打开 Qual Browser（定性浏览器）或 Instrument Setup（仪器设置）窗口。

### Queue-Level（队列 - 水平）命令

利用队列 - 水平命令暂停或移除 Queues（队列）页面上任意队列中的批次。参阅第 349 页上的“Queue-level（队列 - 水平）快捷菜单”。

按照以下步骤进行操作：

- 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

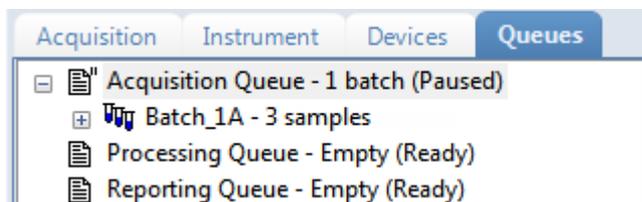
#### ❖ 若要暂停队列中的所有批次

1. 选择一个队列（Acquisition [采集]、Processing [处理] 或 Reporting [报告]）。

**注释** 当激活多通道时，用户可以一次采集四个样品。暂停 Acquisition（采集）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 [采集]、Processing [处理] 或 Reporting [报告])。
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 [采集]、Processing [处理] 或 Reporting [报告])。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **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 [采集]、Processing [处理] 或 Reporting [报告])。
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。

## Queue-level (队列 - 水平) 快捷菜单

通过快捷菜单上的命令暂停或移除 Queues (队列) 页面上任意队列中的批次。

图 92. Queue-level (队列 - 水平) 快捷菜单

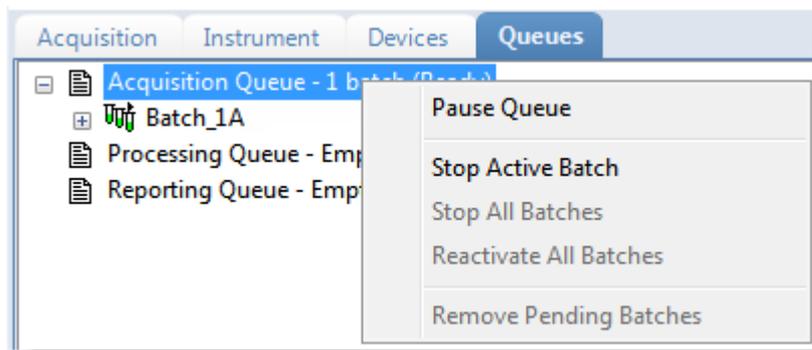


表 65. Queue-level (队列 - 水平) 快捷菜单命令

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。
Resume Queue (继续队列)	使所有暂停队列返回至活动状态。
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。
Reactivate All Batches (重新激活所有批次)	使所有暂停批次返回至活动状态。
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。

## Batch-Level (批次 - 水平) 命令

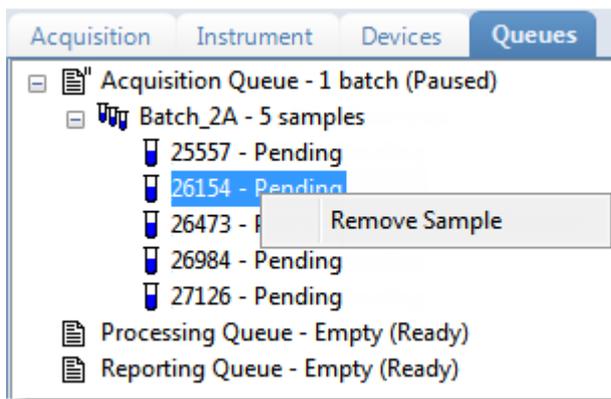
利用批次水平命令暂停或移除 Queues (队列) 页面上任意队列批次中的整个批次或样品。  
参阅“Batch-level (批次 - 水平) 快捷菜单”。

按照以下步骤进行操作：

- 若要从批次中移除单个待定样品
- 若要从批次中移除所有待定样品
- 若要停止批次
- 若要移除一个待定批次

### ❖ 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)**。



应用程序确认用户想要移除批次中的所选样品，然后移除该样品。

### ❖ 若要从批次中移除所有待定样品

1. 选择任意队列中的批次 (Acquisition [采集]、Processing [报告] 或 Reporting [处理])。  
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)**。

应用程序确认用户想要移除批次中的所有待定样品，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。

### ❖ 若要停止批次

1. 选择任意队列中的一个活动批次 (Acquisition [采集]、Processing [处理] 或 Reporting [报告])。

**注释** 该批次必须至少包含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. 选择任意队列中的一个待定批次 (Acquisition [采集]、Processing [处理] 或 Reporting [报告])。

**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)**。

应用程序确认用户想要移除队列中的所选批次，然后将该批次从队列中移除。

图 93. Batch-level (批次 - 水平) 快捷菜单

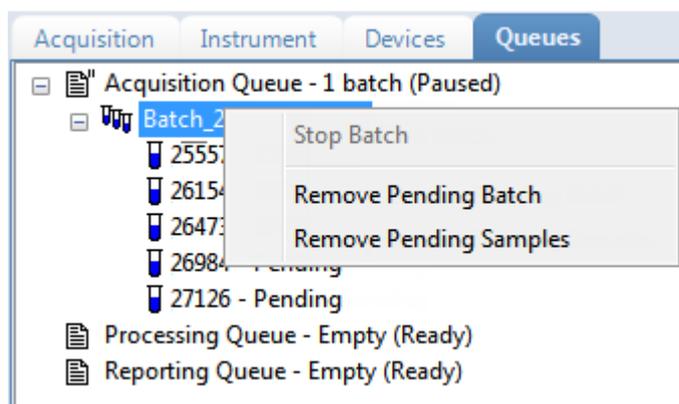


表 66. Batch-level (批次 - 水平) 快捷菜单命令

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。

其他命令

通过这个快捷菜单上的命令打开 Qual Browser (定性浏览器) 或 Instrument Setup (仪器设置) 窗口。

❖ 若要在 Qual Browser (定性浏览器) 中查看上一次的采集文件

在 Queues (队列) 页面的队列列表下方右击并从快捷菜单中选择 **View Last File in Qual Browser (在定性浏览器中查看上一次的文件)**。

**注释** 用户必须在队列列表下方的白色区域点击。点击队列或队列右侧，显示队列 -、批次 - 或样品 - 水平快捷菜单。

Thermo Xcalibur Qual Browser (Thermo Xcalibur 定性浏览器) 打开，显示上一次处理的文件。

#### ❖ 若要打开 Instrument Setup (仪器设置) 窗口

在 Queues (队列) 页面队列列表的下方右击并从快捷菜单中选择 **Open Instrument Method Editor (打开仪器方法编辑器)**。

**注释** 用户必须在队列列表下方的白色区域点击。点击队列或队列右侧，显示队列 -、批次 - 或样品 - 水平快捷菜单。

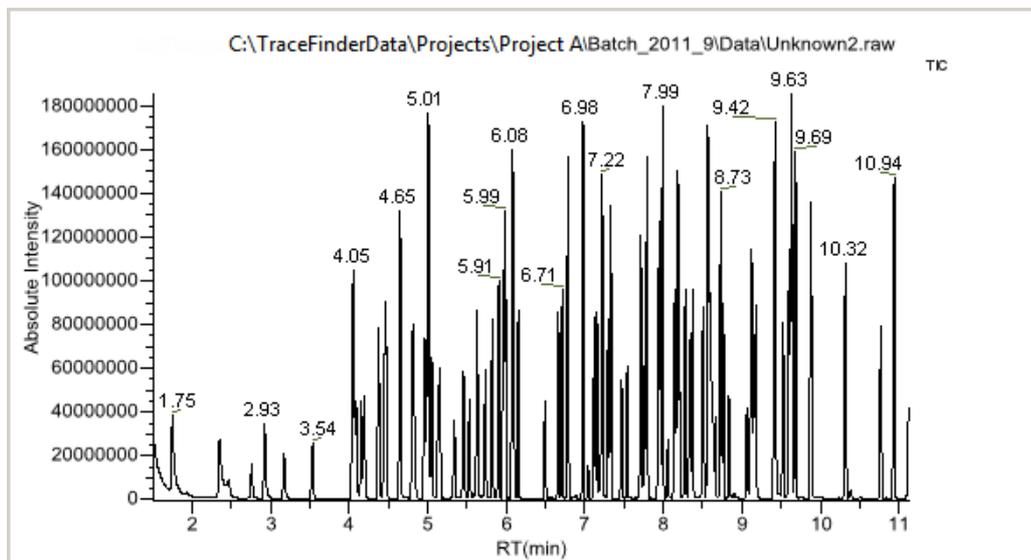
Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 窗口打开，显示当前运行的仪器方法。

有关编辑仪器方法的详细信息，参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。

**注释** 更改和保存仪器方法不会影响当前正在运行的批次。

## 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。

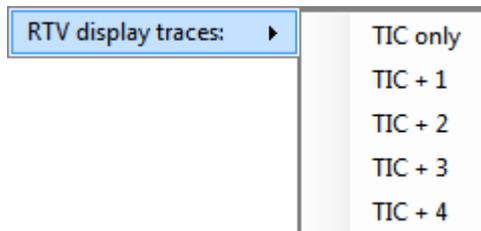


默认情况下，随着每个样品的采集，Real Time Status (实时状态) 窗格仅显示 TIC 谱图。若要查看特定谱图如内标等，使用 RTV Display Traces (RTV 显示谱图) 功能显示多个谱图。

当用户创建方法时，指定在实时查看器中显示的其他谱图以及这些谱图显示的顺序。应用程序总是在窗格顶部显示 TIC 图。参阅第 175 页上的“Real Time Viewer (实时查看器)”。

❖ 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。

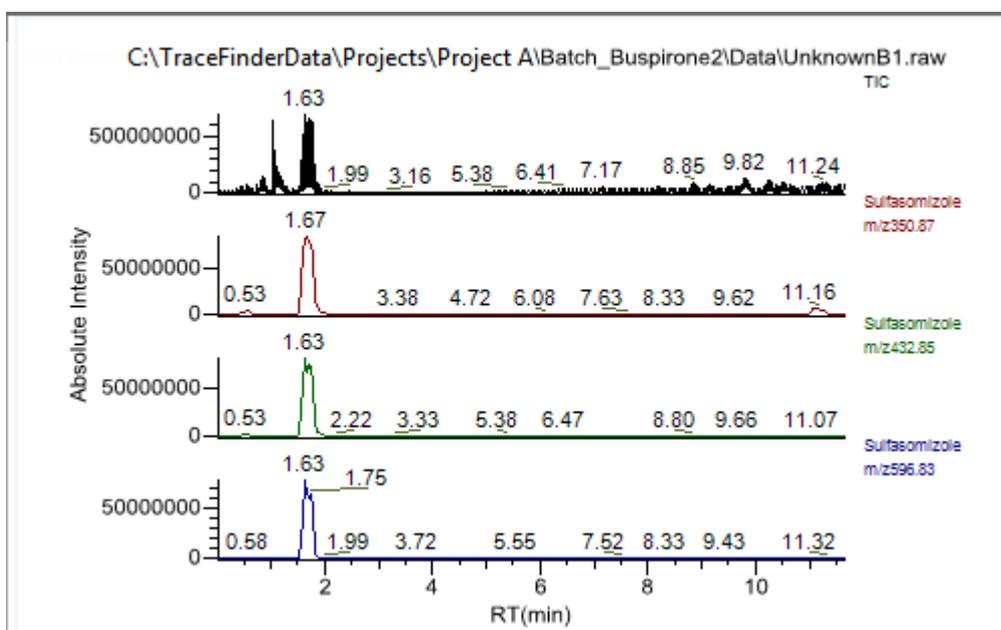


色谱图窗格上显示所选谱图数的实时色谱图。

TIC 图总是显示在最上方。当窗格上的谱图数超过可容纳数量时，可以滚动查看这些谱图。

应用程序为每个谱图显示质量数或母离子质量数。

图 94. 多个谱图的实时谱图显示



## 样品类型

TraceFinder 应用程序在所有样品定义和报告中使用了下列样品类型。若要查看某个样品类型的具体标准报告示例，参阅附录 A，“报告”。

表 67. 样品类型定义

样品类型	定义
Negative (阴性对照)	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（阴性对照）样品类似，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 (校正标样)	（校正标样）包含已知量的所有目标化合物。标样的目的是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正曲线。
QC（质控标样）	（质控标样）包含已知量的一种或多种特定目标化合物。应用程序将质控标样放入序列，以测试定量分析结果，从而确保得到高质量定量分析结果。应用程序分析完 QC（质控标样）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（质控标样）样品定量分析判定为 <i>已通过</i> 。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（质控标样）样品定量分析判定为 <i>未通过</i> 。
Solvent（溶剂）	仅包含溶剂。
Specimen (定量样品)	用于样品定量分析。
Hydrolysis (水解)	检查溶于水时化合物的降解。

## 使用 Analysis（分析）模式

本章包含有关使用 Analysis（分析）模式上特性的说明。

### 目录

- 使用 Quick Acquisition（快速采集）
- 使用 Batch View（批次视图）
- 利用 Batch Wizard（批次向导）创建批次
- 使用定量方法的 Data Review（数据查看）
- 使用 Target Screening Methods（目标筛选方法）的 Data Review（数据查看）
- 使用 Report View（报告视图）
- 使用 Local Method（本地方法）视图
- 使用 Batch Template Editor（批次模板编辑器）

利用 Analysis（分析）模式执行下列操作：

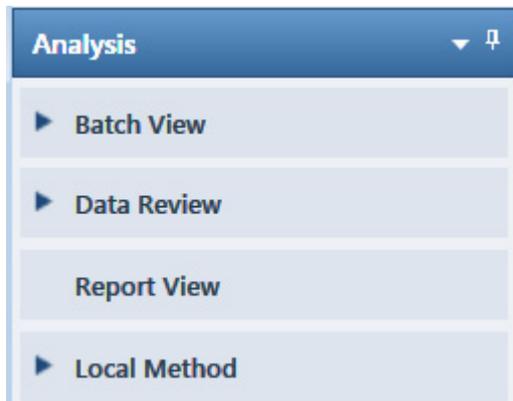
- 提交单个样品进行快速采集。
- 提交批次进行采集、处理或报告。
- 查看批次、批次数据、报告和本地方法。

### ❖ 若要进入 Analysis（分析）模式

点击导航窗格上的 **Analysis（分析）**。



Analysis（分析）导航窗格打开。



## 使用 Quick Acquisition (快速采集)

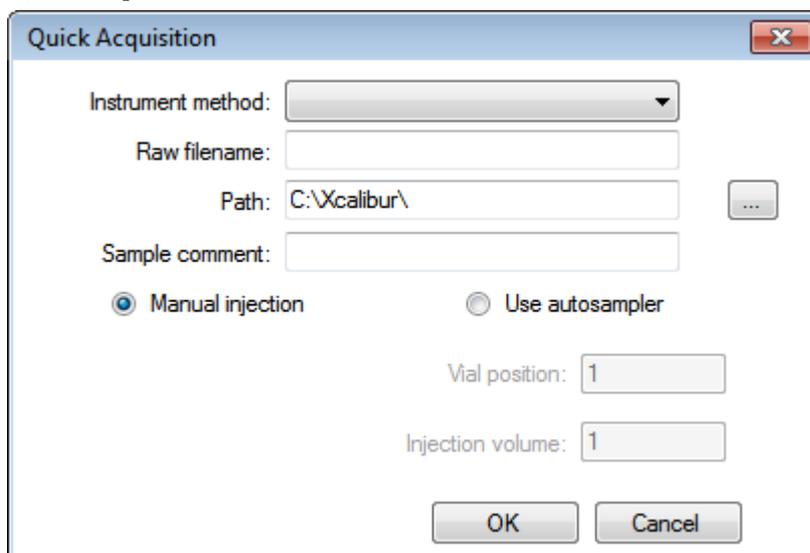
利用快速采集功能，用户可以从 Acquisition (采集) 模式下的任意视图快速提交单个样品。

**注释** 仅在 Configuration (配置) 控制台中将其激活时，Quick Acquisition (快速采集) 功能才可用。参阅第 60 页上的“Quick Acquisition (快速采集)”。

### ❖ 若要运行快速采集

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

Quick Acquisition (快速采集) 对话框打开。

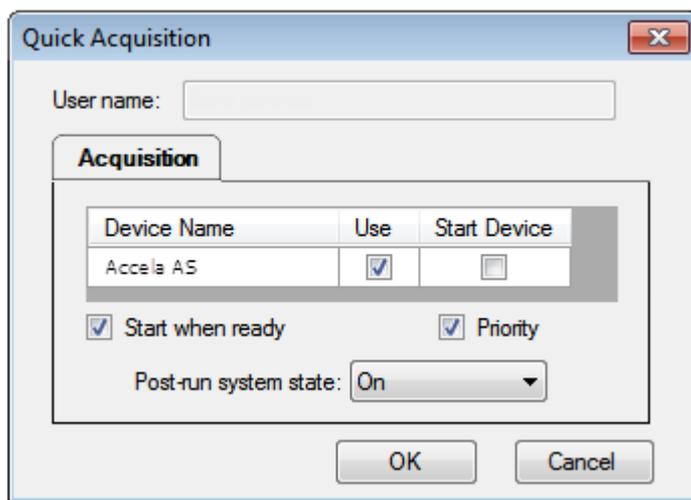


2. 选择仪器方法。
3. 输入采集的原始数据文件名。  
不要输入 .raw 文件后缀。
4. 对于路径，浏览至希望写入已采集原始数据文件的文件夹。
5. 选择手动进样或自动进样器选项：
  - 若要进行手动进样，执行以下操作：
    - i. 选中 **Manual Injection (手动进样)** 选项。
    - ii. 点击 **OK (确定)**。

应用程序将样品提交至 Acquisition (采集) 队列。参阅第 340 页上的“Acquisition (采集) 页面”。

- 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) 框中输入样品瓶的位置。
  - iii. 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  $\mu\text{L}$ ；允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
  - iv. 点击 **OK (确定)**。

Quick Acquisition (快速采集) 对话框打开。



- v. 选择要用于采集的设备的 **Use (使用)** 复选框。
- vi. (可选) 选中 **Start Device (启动设备)** 复选框表示该设备将会与其它仪器建立通信连接。  
通常是自动进样器。
- vii. (可选) 选中 **Start When Ready (准备就绪时启动)** 复选框，在所有仪器准备就绪时将其全部启动。  
清除该选项时，不同的仪器在不同的时间启动且必须等待最后一个仪器准备就绪。
- viii. (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。
- ix. (可选) 选择一个 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 **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。
- x. 点击 **OK (确定)**。

应用程序将样品提交至 Acquisition (采集) 队列。参阅第 340 页上的“Acquisition (采集) 页面”。

## 使用 Batch View（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、处理或创建所提交样品的报告。

Analysis（分析）模式包括一个工具栏：



利用 Batch View（批次视图）快捷菜单上的工具栏或等效的命令，创建样品列表并提交样品进行采集。参阅第 369 页上的“工具栏”或第 373 页上的“Batch View（批次视图）快捷菜单”。

本部分包含以下主题：

- Samples（样品）页面
- Auto Samples（自动样品）页面
- Reference Samples（参考样品）页面
- Threshold Samples（阈值样品）页面

### ❖ 若要打开 Batch View（批次视图）

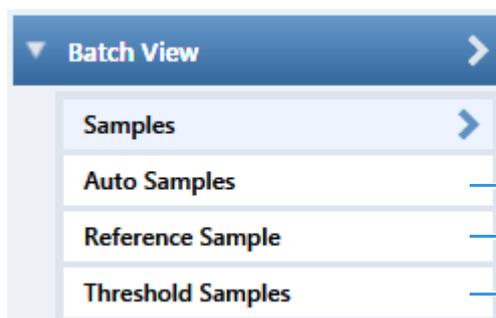
1. 在当前模式下，点击导航窗格上的 **Analysis（分析）**。

Analysis

2. 在 Analysis（分析）导航窗格上点击 **Batch View（批次视图）**。

▶ Batch View

Batch View（批次视图）导航窗格打开。



当用户激活 Configuration（配置）控制台上的 Intelligent Sequencing（智能排序）时，只能用于定量批次。

只对定量批次可用。

## Samples (样品) 页面

若要打开 Samples (样品) 页面, 点击 Batch View (批次视图) 导航窗格上的 **Samples (样品)**。

本部分包含下列信息:

- [Samples \(样品\) 页面特性](#)
- [创建新批次](#)
- [编辑批次](#)
- [提交批次](#)

### Samples (样品) 页面特性

Samples (样品) 页面分为三个窗格:

- **Samples (样品) 窗格**  
通过样品列表窗格创建批次。参阅第 361 页上的“[Samples \(样品\) 窗格](#)”。
- **Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格**  
利用 Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格选择生成报告的导出格式类型。参阅第 375 页上的“[Automated Batch Reports \(自动批次报告\) 窗格](#)”。
- **Compound Active Status (化合物活动状态) 窗格**  
利用 Compound Active Status (化合物活动状态) 窗格激活或取消激活特定化合物。参阅第 376 页上的“[Compound Active Status \(化合物活动状态\) 窗格](#)”。

Samples (样品) 窗格

The screenshot displays the 'Batch View - Batch\_Benzos\_1A' interface. At the top, there are controls for 'Local Method: Method\_Benzo\_1', 'Update', 'Instrument: Thermo Scientific Instrument', 'User:', and 'Auto TSRM Update'. Below this is a table with columns: Status, Filename, Sample type, Qual Processing, Level, Sample ID, Sample name, Vial position, Injection volume, Conversion Factor, Channel, Barcode Expected, Barcode Actual, and Sample Volume. The table contains three rows of data for samples 1, 2, and 3. Below the table is a 'Multiplexing Channels' section with checkboxes for 'All Channels', 'Channel 1', 'Channel 2', 'Channel 3', and 'Channel 4'. At the bottom, there are two sub-panels: 'Automated Batch Reports' and 'Compound Active Status'. The 'Automated Batch Reports' panel has tabs for 'Sample Level' and 'Batch Level', and a table with columns: Report Name, Type, Print, Create PDF, Create XML, and Create XLSM. The 'Compound Active Status' panel has a table with columns: RT, Compound, and Active.

Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格

Compound Active Status (化合物活动状态) 窗格

**提示** 若要调整窗格尺寸, 可拖曳分隔窗格的分隔线。

## Samples (样品) 窗格

Samples (样品) 窗格包含以下特性:

- 列显示
- 状态指示器
- Groups (组)
- 在目标筛选批次中进行空白扣除
- 样品质量计算
- Instrument Methods (仪器方法)
- 工具栏
- Batch View (批次视图) 样品列表
- Batch View (批次视图) 快捷菜单

## 列显示

样品列表包含许多信息列。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。

按照以下步骤进行操作:

- 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查看所有信息。

当使用样品列表底部的滚动条时, Status (状态)、Filename (文件名) 和 Sample Type (样品类型) 列将固定不动, 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 (修改列) 对话框打开。参阅“[Modify Columns \(修改列\) 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。

这些列显示在 Status (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 列之后。

3. 若要安排列的次序，执行下列操作：

- a. 在 Displayed Columns (已显示列) 窗格上选中一个列名称。
- 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 (批次视图) 样品列表中的最左列；列表中的末列代表 Batch View (批次视图) 样品列表中的最右列。

**注释** 无法移动 Status (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 或 Level (水平) 列。

4. 若要更改列宽，执行下列操作：

- a. 在 Displayed Columns (已显示列) 窗格中选择列宽。

5	Sample ID	100
▶ 6	Sample name	100
7	Vial position	100

- 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 (确定)**。

样品列表中的列立刻反映出所作的更改。应用程序对 Batch View (批次视图) 中的所有样品列表采用这些设置。

图 95. Modify Columns (修改列) 对话框

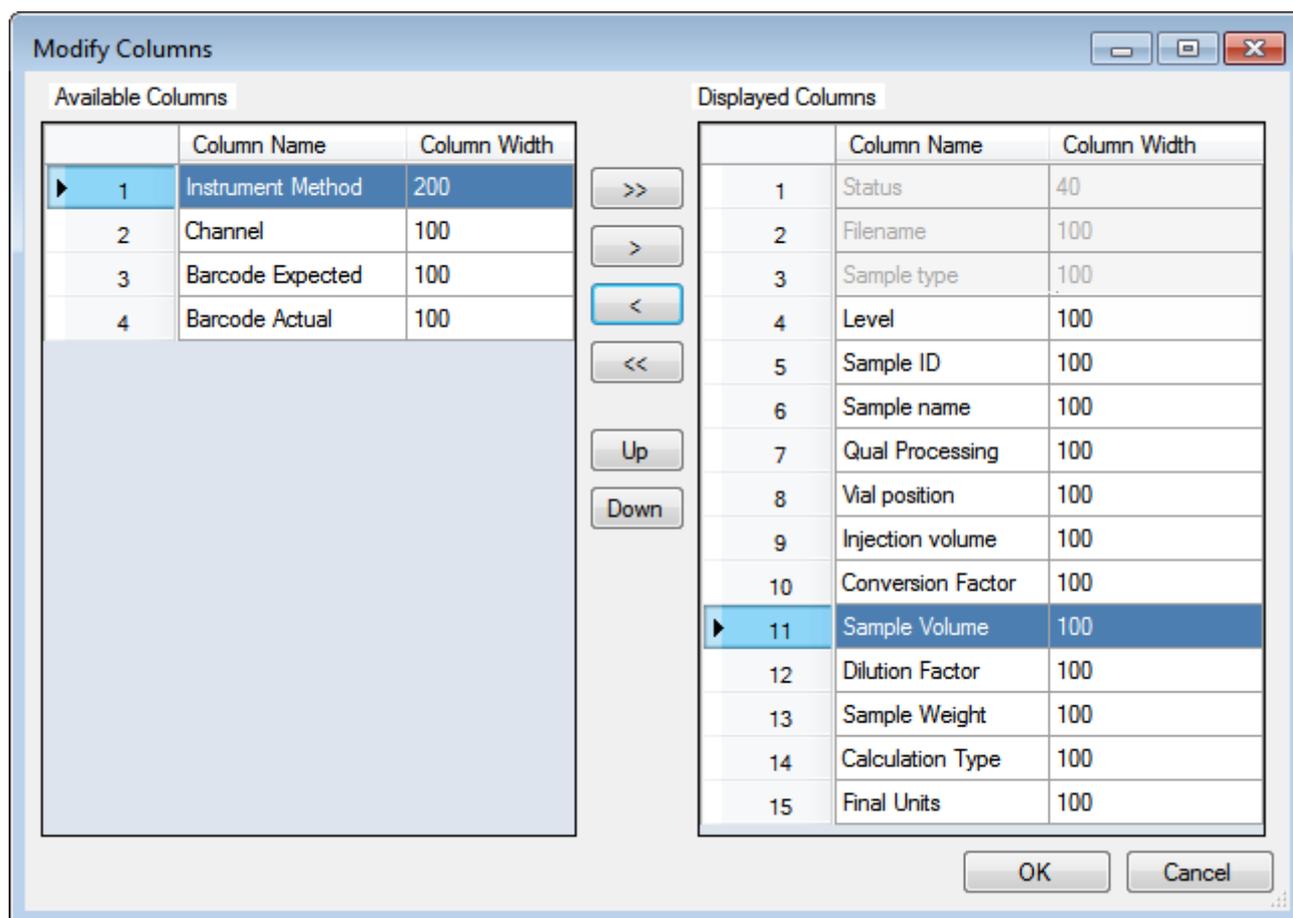


表 68. Modify Columns (修改列) 功能按钮

功能	描述
	将所有列移动到 Displayed Columns (已显示列) 窗格。
	将所选列移动到 Displayed Columns (已显示列) 窗格。
	将所选列移动到 Available Columns (可用列) 窗格。无法移动 Status (状态)、Filename (文件名) 或 Sample Type (样品类型) 列。
	将除 Status (状态)、Filename (文件名) 和 Sample Type (样品类型) 列之外的所有列移动到 Available Columns (可用列) 窗格。
	将 Displayed Columns (已显示列) 窗格中所选列名称依序上移一行。无法移动 Status (状态)、Filename (文件名) 或 Sample Type (样品类型) 列。
	将 Displayed Columns (已显示列) 窗格中所选列名称依序下移一行。无法移动 Status (状态)、Filename (文件名) 或 Sample Type (样品类型) 列。

**注释** 仅在目标筛选批次中，Blank Subtraction (空白扣除) 列被加入固定列中。

## 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。
- 样品正在采集中。

Local Method: Method\_Alprazolam Update

	Status	Filename	Sample type	Groups	Qual Processing	Sample ID	Sample name	V p
1	●	Solvent_A	Solvent		<input type="checkbox"/>			1
2	●	Cal_5	Calibrator		<input type="checkbox"/>			2
3	●	Unknown1	Specimen		<input type="checkbox"/>			3

状态指示器

## Groups (组)

使用 Groups (组) 特性将样品归为一个组。

创建组后, 用户可以从选择一个样品作为该组的阈值样品, 然后在 Analysis (分析) 模式的 Comparative View (对比视图) 中查看组中的样品。

### ❖ 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将被分配到“groupa”。

2. 为每个要加入该组的样品重复步骤 1。
3. 创建所需数目的组。

**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
	Benzo26154	groupB, groupA

有关为样品组指定阈值样品的信息, 参阅第 401 页上的“Threshold Samples (阈值样品) 页面”。

有关在 Data Review (数据查看) 上查看已分组样品的相关信息, 参阅第 437 页上的“Comparative View (对比视图)”。

## 在目标筛选批次中进行空白扣除

仅在目标筛选批次中, 采用 Blank Subtraction (空白扣除) 功能来选择用户想要用哪个阴性对照样品进行峰扣除。该应用程序从定量样品的峰面积中扣除与已选阴性对照样品的峰面积。

Status	Filename	Sample type	Blank Subtraction
	Benzo25557	Negative	<input checked="" type="checkbox"/>
	Benzo25558	Specimen	<input type="checkbox"/>
	Benzo25559	Negative	<input checked="" type="checkbox"/>
	Benzo25560	Specimen	<input type="checkbox"/>

当用户处理批次队列时, 该应用程序从所有定量样品中扣除紧随其后的已选阴性对照样品中的峰, 直到该程序发现另一个阴性对照样品。

若要激活 Blank Subtraction (空白扣除) 功能, 参阅第 217 页上的“若要指定峰过滤器设置”。

## 样品质量计算

使用样品质量功能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。

**Liquid (液体):**  $\text{样品体积} \div \text{稀释因子}$

**Solid (固体):**  $(\text{样品体积} \times \text{稀释因子}) \div \text{样品质量}$

**Manual (手动):** 应用程序不计算 Conversion Factor (换算系数)。但是可以输入 Conversion Factor (换算系数) 值。

按照以下步骤进行操作:

- 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 (换算系数)、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) 列都不可见, 右击并从快捷菜单中选择 **Enable Sample Weight Calculation (启用样品质量计算)**。

Conversion Factor	Sample Volume	Dilution Factor	Sample Weight	Calculation Type	Final Units
1.000	1	1	1	Liquid	▼
1.000	1	1	1	Solid	▼
1.000	1	1	1	Manual	▼

### ❖ 若要计算液体样品的换算系数

1. 从 Calculation Type (计算类型) 列表中选择 **Liquid (液体)**。

对于液体样品, Sample Weight (样品质量) 值是不可编辑的。

2. 在 Sample Volume (样品体积) 列中, 输入样品体积, 单位 ng/mL。
3. 在 Dilution Factor (稀释因子) 列中输入稀释因子值。

例如, 如果某个物质的浓度为 1000 ng/mL, 对于质谱仪来说浓度太高, 用户可以将其稀释 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 (最终单位) 列中, 为 Data Review (数据查看) 视图, Report View (报告视图) 的 Active View (当前视图) 页面, 或报告中的计算值输入单位。

应用程序利用下列公式计算 Conversion Factor (换算系数):

$$\text{样品体积} \div \text{稀释因子}$$

❖ 若要计算固体样品的换算系数

1. 从 **Calculation Type (计算类型)** 列表中选择 **Solid (固体)**。
2. 在 **Sample Weight (样品质量)** 列中，输入样品质量，单位 ng。
3. 在 **Sample Volume (样品体积)** 列中，输入样品体积，单位 ng/mL。
4. 在 **Dilution Factor (稀释因子)** 列中输入稀释因子值。

例如，如果某个物质的浓度为 1000 ng/mL，对于质谱仪来说浓度太高，可以将其稀释 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 (最终单位)** 列中，为 **Data Review (数据查看)** 视图，**Report View (报告视图)** 的 **Active View (当前视图)** 页面，或报告中的计算值输入单位。

应用程序利用下列公式计算 **Conversion Factor (换算系数)**：

$$(\text{样品体积} \times \text{稀释因子}) \div \text{样品质量}$$

❖ 若要手动指定样品的换算系数

1. 从 **Calculation Type (计算类型)** 列表中选择 **Manual (手动)**。  
对于手动计算样品，可用列仅包括 **Conversion Factor (换算系数)** 和 **Final Units (最终单位)**。
2. 在 **Conversion Factor (换算系数)** 列中，输入换算系数。
3. 在 **Final Units (最终单位)** 列中，为 **Data Review (数据查看)** 视图，**Report View (报告视图)** 的 **Active View (当前视图)** 页面，或报告中的计算值输入单位。

当应用程序计算样品量时，其使用指定的换算系数。

## Instrument Methods (仪器方法)

通过 Instrument Methods (仪器方法) 列指定样品的仪器方法。

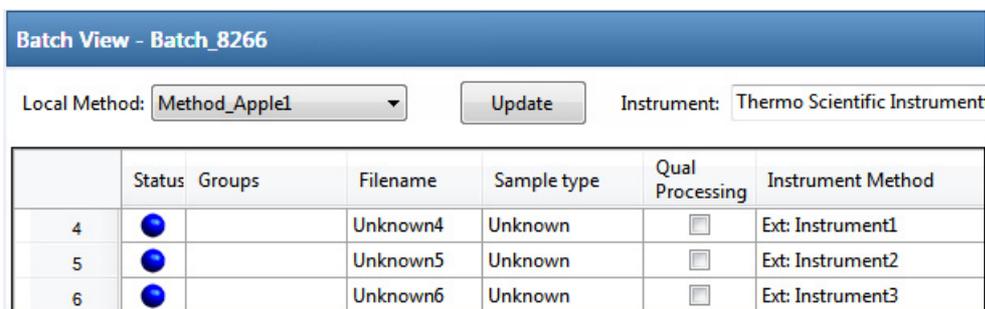
**注释** 默认情况下, Instrument Method (仪器方法) 列不显示在 Batch View (批次视图) 样品列表中。

### ❖ 若要为样品指定仪器方法

- 在样品列表中显示 Instrument Method (仪器方法) 列:
  - 右击样品列表, 然后从快捷菜单中选择 **Modify Columns (修改列)**。  
Modify Columns (修改列) 对话框打开。
  - 在 Available Columns (可用列) 窗格上, 选择 **Instrument Method (仪器方法)**。
  - 点击  将 Instrument Method (仪器方法) 列移至 Displayed Columns (已显示列) 窗格上。
  - 点击 **OK (确定)**。

该应用程序显示 Instrument Method (仪器方法) 列, 默认为在主方法中指定的仪器方法。

- 点击 Instrument Method (仪器方法) 列, 并从列表中选择一种仪器方法。  
该列表包含所有可用的仪器方法。来自外部文件的仪器方法, 前缀为“Ext:”。  
用户可以为每个样品指定不同的仪器方法。



	Status	Groups	Filename	Sample type	Qual Processing	Instrument Method
4			Unknown4	Unknown	<input type="checkbox"/>	Ext: Instrument1
5			Unknown5	Unknown	<input type="checkbox"/>	Ext: Instrument2
6			Unknown6	Unknown	<input type="checkbox"/>	Ext: Instrument3

当用户提交批次进行采集时, 应用程序为已选仪器方法保存副本至以下文件夹中:  
外部的仪器方法:

...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\batch\\Methods\\method\\ExternalMethods

本地的仪器方法:

...\\TraceFinderData\\Projects\\...\\batch\\Methods\\method

## 工具栏

Analysis (分析) 模式包括用于创建和提交批次的工具栏。

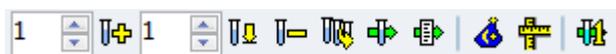


表 69. 工具栏功能

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 380 页上的“若要添加样品到列表”中的说明。
	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 380 页上的“若要在列表中插入样品”中的说明。
	从样品列表中移除所选样品。参阅第 381 页上的“若要移除列表中的样品”中的说明。
	将 CSV、XML 或 SLD 文件中已导入的样品添加到样品列表中。参阅第 380 页上的“若要在列表中导入样品”中的说明。
	仅提交所选样品用于采集、处理或生成报告。参阅第 390 页上的“若要提交批次中的样品”中的说明。
	提交批次用于采集、处理或生成报告。参阅第 390 页上的“若要提交批次中的样品”中的说明。
	打开 Batch Wizard (批次向导)，使用批次模板制定一个标准队列，该队列包含用于组成样品批次的各种类型的样品。参阅第 402 页上的“利用 Batch Wizard (批次向导) 创建批次”。
	打开 Batch Template Editor (批次模板编辑器)，创建一个包含批次基本设置和样品类型的批次模板。参阅第 542 页上的“使用 Batch Template Editor (批次模板编辑器)”。
	打开 Quick Acquisition (快速采集) 对话框，在此可以快速提交单个样品。参阅第 357 页上的“使用 Quick Acquisition (快速采集)”。

### Batch View (批次视图) 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用于表示该样品是未采集、采集中、已采集还是已处理。

样品列表包含下列信息列：

图 96. Batch View (批次视图) 样品列表

Local Method:   Instrument:

	Status	Groups	Filename	Sample type	Qual Processing	Level	Sample ID	Sample name	Vial position	Injection volume
1			UnknownA1	Specimen	<input type="checkbox"/>		1		CStk1-01:7	10.0
2			UnknownA2	Specimen	<input type="checkbox"/>		1		CStk1-01:7	10.0
3			UnknownA3	Specimen	<input type="checkbox"/>		1		CStk1-01:7	10.0

Calculation Type	Conversion Factor	Barcode Expected	Barcode Actual	Sample Volume	Final Units
Liquid	1.000			1	
Liquid	1.000			1	
Liquid	1.000			1	

Instrument Method	Channel	Barcode Expected	Barcode Actual	Comment
Instrument1	Auto			
Instrument1	Auto			
Instrument1	Auto			

#### 注释

- 仅在目标筛选批次中，样品列表的 Sample Type (样品类型) 列后面还有一个 Blank Subtraction (空白扣除) 列。
- 样品列表中的单元格不可编辑，例如 Barcode Actual (实际条形码) 加阴影且为空白。

表 70. Batch View (批次视图) 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。  样品正在采集中。
Groups (组)	样品所属的阈值组。在 Data Review (数据查看) 的 Comparative View (对比视图) 中, 可按组查看样品。
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)	<p>指定 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:</p> <p>Specimen (定量样品)、QC (质控标样)、Solvent (溶剂)、Calibrator (校正标样)、Hydrolysis (水解)、Unextracted (未提取) 或 Negative (阴性对照)。</p> <p>默认: Specimen (定量样品)</p>
Qual Processing (定性处理)	表示采用方法中指定的定性峰处理标准来处理样品。Qualitative View (定性视图) 显示所选样品的处理数据。
Blank Subtraction (空白扣除)	指定用于空白扣除的 阴性对照样品。
Level (水平)	为校正样品或质控样品指定的水平。
Sample ID (样品识别号)	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)	<p>要进样的样品体积, 单位为微升。</p> <p>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 Autosampler (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。</p> <p>主方法中设置的 Injection Volume (进样体积) 值覆盖了仪器方法中的值。</p> <p>范围: 0.1 至 5000 <math>\mu</math>L</p>

表 70. Batch View (批次视图) 样品列表列 (第 2 页, 共 2 页)

列	描述
Calculation Type (计算类型)	<p><b>Liquid (液体)</b>: 应用程序按以下公式计算换算系数 <math>\text{样品体积} \div \text{稀释因子}</math></p> <p><b>Solid (固体)</b>: 应用程序按以下公式计算换算系数 <math>(\text{样品体积} \times \text{稀释因子}) \div \text{样品质量}</math></p> <p><b>Manual (手动)</b>: Sample Volume (样品体积)、Dilution Factor (稀释因子)、Sample Weight (样品质量) 和 Final Units (最终单位) 列均不可用, 但可以编辑 Conversion Factor (换算系数) 值。</p>
Conversion Factor (换算系数)	仅当 Calculation Type (计算类型) 为手动时可以编辑。默认: 1
Sample Volume (样品体积)	默认: 1
Dilution Factor (稀释因子)	默认: 1
Sample Weight (样品质量)	仅当 Calculation Type (计算类型) 为 Solid (固体) 时可用。默认: 1
Final Units (最终单位)	在 Data Review (数据查看) 视图中, 在 Report View (报告视图) 的 Active View (活动视图) 页面上, 或在报告中, 指定计算量的单位。 默认: 1
Instrument Method (仪器方法)	指定用于采集的仪器。默认隐藏该列。若要显示该列, 参阅第 362 页上的“若要自定义列显示”。
Channel (通道)	指定样品运行的通道。若样品未采集, 则该值的状态为 Pending (等待)。仅当在 Configuration (配置) 控制台上激活多通道时, Channel (通道) 列才可用。参阅第 65 页上的“Multiplexing (多通道)”。
Barcode Expected (预期条形码)	用户输入的样品瓶条形码。
Barcode Actual (实际条形码)	样品瓶的实际条形码。该值不可编辑。
Comment (注释)	用户自定义的样品注释。

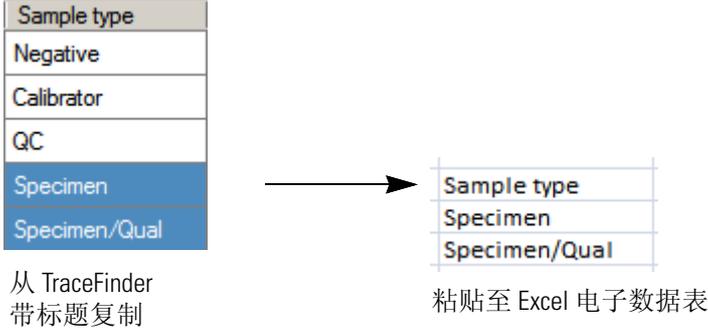
**Batch View (批次视图) 快捷菜单**

Batch View (批次视图) 包含一个用于创建批次的快捷菜单。

**表 71.** Batch View (批次视图) 快捷菜单命令 (第 1 页, 共 2 页)

命令	描述
Add Sample (添加样品)	在样品格中添加单个空行。
Insert Sample (插入样品)	在所进行上面的样品格中插入一个空行。
Insert Copy Sample (插入复制样品)	复制当前已选行, 并在该行上方插入复制行。
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)	从样品表格中移除所选样品。
Import Samples (导入样品)	打开 Sample Import Tool (样品导入工具)。参阅第 380 页上的“ <a href="#">若要在列表导入样品</a> ”。
Browse In Raw File (Move) (浏览原始文件, 移动)	打开一个对话框, 从中选择所选样品行所需的原始数据文件。应用程序从原来的位置移动原始数据文件。
Browse In Raw File (Copy) (浏览原始文件, 复制)	打开一个对话框, 从中选择所选样品行所需的原始数据文件。应用程序从原来的位置复制原始数据文件。
Map Raw Files To Samples (选择样品的原始文件)	打开一个对话框, 从中选择所选样品行所需的多个原始数据文件。
Copy Down (向下复制)	将所选行中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 (修改列) 对话框。参阅第 361 页上的“ <a href="#">列显示</a> ”。
Disable Sample Weight Calculation (禁用样品质量计算)	
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 电子数据表。无法将数据粘贴回 Batch View (批次视图) 样品列表中。

表 71. Batch View (批次视图) 快捷菜单命令 (第 2 页, 共 2 页)

命令	描述
Copy With Headers (带标题复制)	<p>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 电子数据表。无法将数据粘贴回样品列表中。</p> <p>例如</p>  <p>从 TraceFinder 带标题复制</p> <p>粘贴至 Excel 电子数据表</p>
Paste (粘贴)	将来自其他应用程序如 Excel 电子数据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 (批次视图) 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。
Edit Instrument Method (编辑仪器方法)	<p>打开 Instrument Setup (仪器设置) 窗口, 在此可以编辑仪器方法中的参数。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>在编辑外部方法时, 应用程序更新了 ...\Xcalibur\methods 文件夹中的方法。</li> <li>当编辑内部方法时, 应用程序更新 ...\TraceFinderData\Projects\...\batch\Methods\method 文件夹中的方法。</li> </ul> <p>有关编辑仪器方法的详细信息, 参阅第 285 页上的“使用仪器方法”。</p>

## Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格

在 Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格中, 可以查看为该批次选择的报告和为每份报告修改输出格式。

### ❖ 若要编辑样品 - 水平输出格式

1. 点击 **Sample Level (样品水平)** 选项卡。

应用程序显示在方法中指定的报告和输出格式。

Sample Level		Batch Level				
	Report Name	Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM
▶ 1	Sample Report	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
2	Sample Report Long	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3	Chromatogram Report	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

有关指定生成哪些报告和哪种输出格式的详细说明, 参阅第 37 页上的“指定 Reports (报告)”。

2. 选中或清除报告的任意复选框。
3. 若要为样品的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 (向下复制)**。

位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元中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上选择 **Apply Selection to All Samples (将选择应用于所有样品)**。

**提示** 在 Batch View (批次视图) 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。

应用程序显示方法中指定的报告和输出格式。

Sample Level		Batch Level				
	Report Name	Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM
▶ 1	Batch Summary Report	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
2	Calibration Curve Report	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3	Batch Report	Standard	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

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 - 水平的详细说明, 参阅第 37 页上的“指定 Reports (报告)”。

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上选择 **Copy Down (向下复制)**。

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中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 (批次视图) 中，可以更改输出格式，但是无法更改哪些报告可用。

## Compound Active Status (化合物活动状态) 窗格

通过 Compound Active Status (化合物活动状态) 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 (化合物活动状态) 窗格中。

#### Compound Active Status

	RT	Compound	Active
▶ 1	1.91	FENTHION-CE20-R20-TL75-QED	<input checked="" type="checkbox"/>
2	2.72	Sulfisomidine	<input checked="" type="checkbox"/>

默认活动 / 非活动状态取决于本地方法的 Identification (识别) 设置。有关设置 Identification (识别) 参数的更多信息，参阅第 115 页上的“[Identification \(识别\)](#)”。

- 若要按照字母顺序显示化合物，右击并从快捷菜单上选择 **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，右击并从快捷菜单上选择 **Sort by Retention Time (按保留时间排序)**。

2. 选中或清除化合物的 **Active (激活)** 复选框。

有关在 Data Review (数据查看) 视图中更改活动 / 非活动状态的说明，参阅第 465 页上的“[停用和排除化合物](#)”。

## 化合物的激活 / 非激活状态

可以在 Local Method View (本地方法视图) 或 Batch View (批次视图) 上指定哪些化合物为活动或非活动状态。

图 97. Local Method View (本地方法视图) 上的活动和非活动化合物

Local Method View - Batch_1_Method_Benzos						
Master method: <a href="#">Method_Benzos</a>						
Acquisition List	Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	Chk Std levels	Real T
	RT	Compound	Compound type	Active	CAS No	
1	1.91	FENTHION-CE20-R20-TL...	Target Compound	<input type="checkbox"/>	55389	
▶ 2	2.72	Sulfisomidine	Target Compound	<input checked="" type="checkbox"/>	515640	

有关 Identification (识别) 页面上所有状态设置的详细说明, 参阅第 115 页上的“Identification (识别)”。

图 98. Batch View (批次视图) 上的活动和非活动化合物

Batch View - Batch_1 [Quan]							
Local Method:		Method_Benzos		Update			
	Status	Filename	Sample type	Qual Processing	Level	Sample ID	Sample name
▶ 1	<input checked="" type="radio"/>	Unknown1	Specimen	<input type="checkbox"/>			

Automated Batch Reports		Compound Active Status		
Sample Level	Batch Level	RT	Compound	Active
	Report Name			
1	Sample Report			
▶ 1		1.91	FENTHION-CE20-R20-TL75-QED	<input type="checkbox"/>
2		2.72	Sulfisomidine	<input checked="" type="checkbox"/>

有关 Batch View (批次视图) 上状态设置的详细说明, 参阅第 376 页上的“Compound Active Status (化合物活动状态) 窗格”。

## 创建新批次

在 Batch View（批次视图）上，可以创建新批次。

按照以下步骤进行操作：

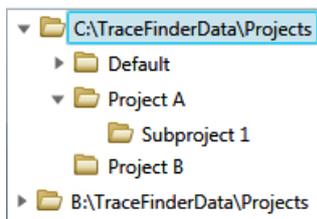
- 若要创建新批次
- 若要添加样品到列表
- 若要在列表中插入样品
- 若要在列表中导入样品
- 若要移除列表中的样品
- 若要复制样品
- 若要重新进样
- 若要编辑样品值
- 若要浏览原始数据文件
- 若要自定义列显示

❖ 若要创建新批次

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > New (新建) > Batch (批次)**。

Create New Batch (创建新批次) 对话框打开, 显示包含项目的所有驱动器。参阅第 385 页上的“Create New Batch (创建新批次)”。

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文件夹。

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 (创建) 按钮未激活, 则可能是因为输入的名称已经被使用。

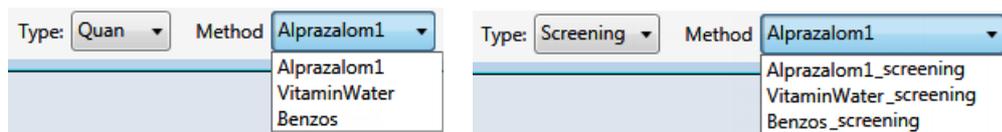
若要为存放位置创建一个新文件夹, 参阅第 387 页上的“编辑批次的文件夹”。

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

批次列表上显示已选文件夹中的所有批次。Method (方法) 列表上显示已选类型 (定量或目标筛选) 的所有方法。

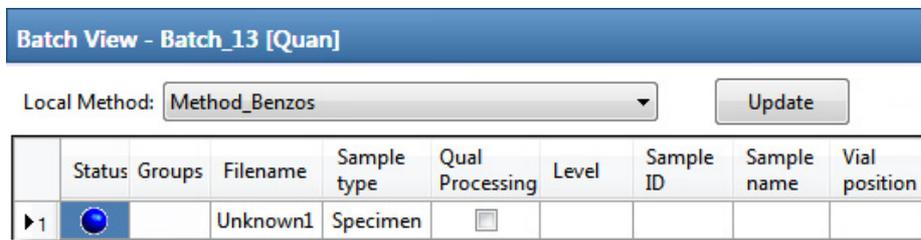
5. 从 Method (方法) 列表选择一个主方法。

该列表上显示已选类型 (定量或目标筛选) 的所有可用方法。



6. 点击 **Create (创建)**。

含一个 Specimen (定量样品) 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

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 (添加样品)**。
2. 若要添加多个样品行，选择行数然后单击 **Add Sample (添加样品)** 图标，。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

选择将会在其上方插入新 Specimen (定量样品) 样品的样品，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 (插入样品)**。
- 若要插入多个样品行，选择行数然后单击 **Insert Sample (插入样品)** 图标 。

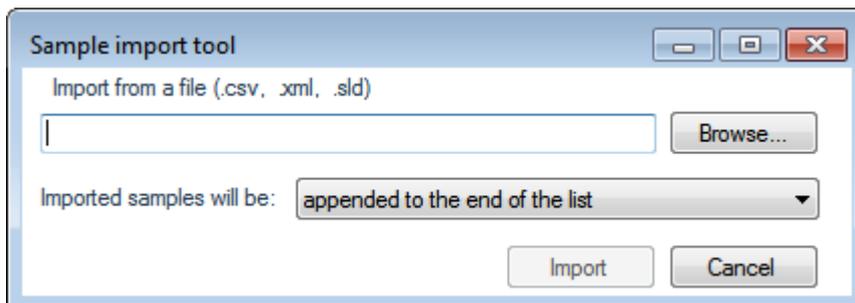
应用程序会将 Specimen (定量样品) 样品插入到所选样品上方。

	Status	Filename	Sample type	Groups	Qual Processing	Level
		cal_std_5	Calibrator		<input type="checkbox"/>	5
插入的 样品		Unknown2	Specimen		<input type="checkbox"/>	
		Unknown1	Specimen		<input type="checkbox"/>	
		cal_std_10	Calibrator		<input type="checkbox"/>	10

❖ 若要在列表中导入样品

1. 从主菜单中选择 **Batch (批次) > Import Samples (导入样品)**，或单击 **Import Samples** 图标，。

Sample Import Tool (样品导入工具) 对话框打开。



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样品的 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. 点击 **Import (导入)**。

Sample Import Tool (样品导入工具) 对话框关闭, 应用程序将指定的样品添加至样品列表中。

当从 Xcalibur 队列文件 (SLD) 中导入样品时, TraceFinder 应用程序替换下列名称:

Xcalibur 列	TraceFinder 列
Position (样品瓶位置)	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 队列文件 (.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 (阴性对照)
Std Bracket (标曲更新)	Calibrator (校正标样)

## 5. (可选) 当使用多通道时, 为每个导入的样品选择一个通道。

导入样品默认为 Auto (自动)。

**注释** 仅当在 Configuration (配置) 控制台上激活多通道时, Channel (通道) 列才可用。参阅第 65 页上的“**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 键选择多个样品。

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

❖ **若要复制样品**

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

TraceFinder 应用程序将复制的样品插入到选定样品上方。

❖ **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中复制所有的参数值。

### ❖ 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 (文件名) 列并找到要用于该样品的原始数据文件。

– 或 –

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

默认情况下，应用程序将 Sample Type (样品类型) 设置为 Unknown (未知样)。

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

Specimen (定量样品)	Hydrolysis (水解)	Solvent (溶剂)	QC (质控标样)
Unextracted (未提取)	Calibrator (校正标样)	Negative (阴性对照)	

3. 为每个 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 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 (水平) 列表中无任何水平选项，执行下列步骤：

- a. 返回至 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 (分析) 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 (方法开发) 模式”。

4. 在 Vial Position (样品瓶位置) 列中为每个样品输入样品瓶位置。
5. 在 Injection Volume (进样体积) 列中为每个样品输入体积。  
允许的最小进样体积为 0.1  $\mu\text{L}$ ；允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
6. (可选) 输入或编辑其它列中的值。

**注释** 当使用样品列表底部的水平滚动条时，Status (状态)、Filename (文件名) 和 Sample Type (样品类型) 列将固定不动，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 C，“使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)”。

❖ 若要浏览原始数据文件

1. 执行下列操作之一：

双击 Filename (文件名) 列。

– 或 –

右击并从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File (浏览原始文件)**。

What Raw File Would You Like to Use (您希望使用什么原始文件) 对话框打开。

2. 选择用于样品的原始数据文件，或使用 CTRL 键选择多个文件，然后点击 **Open (打开)**。

应用程序采用首个“浏览到”的文件覆盖批次中已选择且尚未采集的样品，然后将其他浏览到的文件插入到所选样品的下方。

对于所有浏览到的原始数据文件，应用程序将 Status (状态) 设置为 Acquired (已采集)，，将 Sample Type (样品类型) 设置为 Specimen (定量样品)。

**注释** 无法覆盖一个已采集的样品。当选择了已采集的样品时，应用程序将浏览到的文件插入到所选样品下方。

❖ 若要自定义列显示

1. 右击 Batch View (批次视图) 样品列表，然后从快捷菜单中选择 **Modify Columns (修改列)**。

Modify Columns (修改列) 对话框打开。

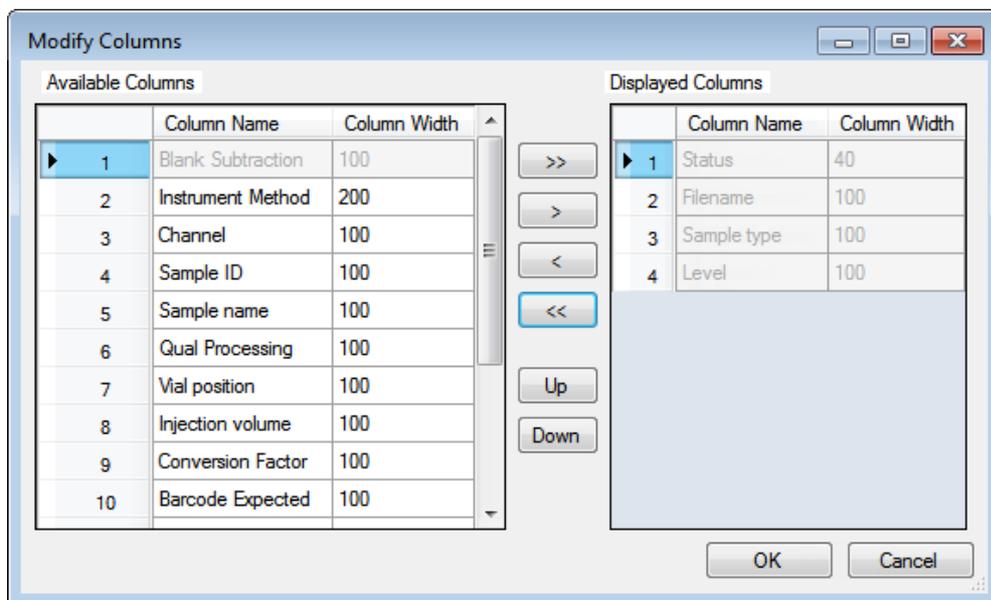


表 72. Modify Columns (修改列) 对话框功能按钮

功能	描述
	将所有列移动到 Displayed Columns (已显示列) 窗格。
	将所选列移动到 Displayed Columns (已显示列) 窗格。
	将所选列移动到 Available Columns (可用列) 窗格。无法移动 Status (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 或 Level (水平) 列。
	将除 Status (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 或 Level (水平) 列之外的所有列移动到 Available Columns (可用列) 窗格。
	将 Displayed Columns (已显示列) 窗格中所选列名称依序上移一行。无法移动 Status (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 或 Level (水平) 列。
	将 Displayed Columns (已显示列) 窗格中所选列名称依序下移一行。无法移动 Status (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 或 Level (水平) 列。

- 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 (状态)、Filename (文件名)、Sample Type (样品类型) 或 Level (水平) 列之后。
- 若要安排列的次序, 执行下列操作:
  - 在 Displayed Columns (已显示列) 窗格上选中一个列名称。
  - 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 (批次视图) 样品列表中的最左列; 列表中的末列代表 Batch View (批次视图) 样品列表中的最右列。

**注释** 无法移动 Status (状态)、Filename (文件名) 或 Sample Type (样品类型) 列。

- 若要更改列宽, 执行下列操作:
  - 在 Displayed Columns (已显示列) 窗格中选择列宽。

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

- 输入一个新的宽度值。
- 完成更改后, 点击 **OK (确定)**。

样品列表中的列立刻反映出所作的更改。应用程序对 Batch View (批次视图) 中的所有样品列表采用这些设置。

## Create New Batch (创建新批次)

通过 Create New Batch (创建新批次) 对话框为批次选择一个文件夹和方法并对新批次进行命名。

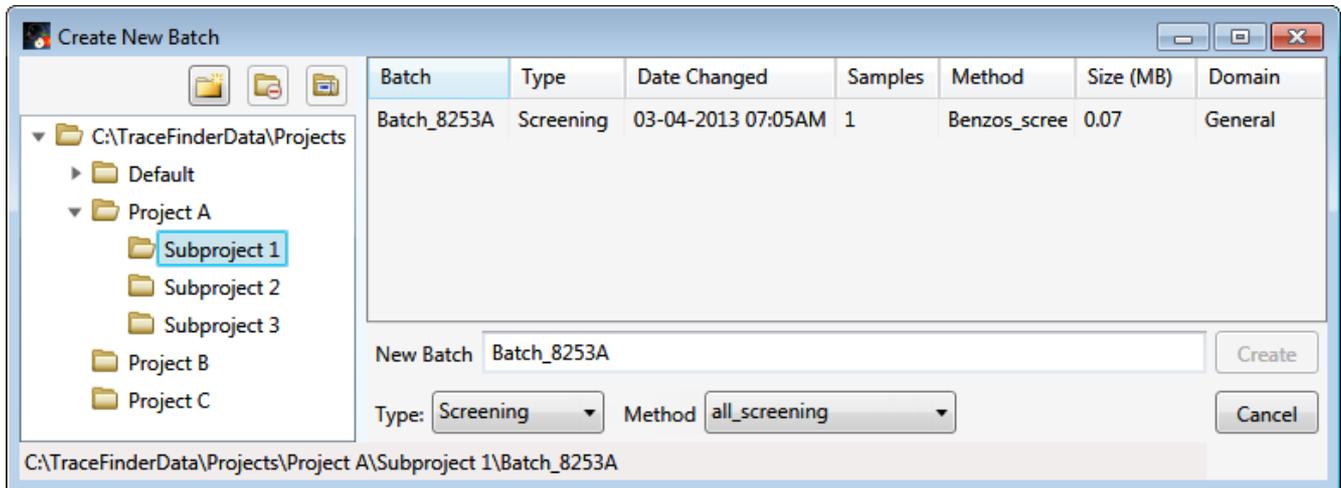


表 73. Create New Batch (创建新批次) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
 Create New Folder (创建新文件夹)	<p>补充下列操作之一：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>选中一个驱动器后，为驱动器添加一个新项目水平文件夹。</li> <li>当项目文件夹选中后，为已选项目添加一个子项目水平文件夹。</li> <li>当子项目文件夹选中后，为子项目添加一个次级文件夹。</li> </ul> <p>或者，右击并从快捷菜单中选择 <b>Create Folder (创建文件夹)</b>。</p>
 Delete Folder (删除文件夹)	<p>立即移除已选文件夹，没有任何确认提示。</p> <p>用户无法删除含次级文件夹的文件夹；用户必须首先删除次级文件夹。</p> <p>或者，右击并从快捷菜单中选择 <b>Delete (删除)</b>。</p>
 Rename Folder (重命名文件夹)	<p>重命名已选文件夹。</p> <p>或者，右击并从快捷菜单中选择 <b>Rename (重命名)</b>。</p>
批次表	
Batch (批次)	已选项目中的批次名。
Type (类型)	批次的类型：Quan (定量) 或 Screening (筛选)。
Date Changed (更改日期)	批次的最后更新日期。
Samples (样品)	批次中的样品数。
Method (方法)	用于创建批次的方法名称。
Size (大小)	批次的大小，单位为兆字节。
Domain (领域)	TraceFinder 中创建批次的领域：General (常规)、EFS (环境和食品安全)、Clinical (临床) 或 Forensic (法医)。

表 73. Create New Batch (创建新批次) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
<b>新批次参数</b>	
New Batch (新批次)	要创建的新批次的名称。 <b>注释</b> 若 Create (创建) 按钮未激活, 则可能是因为输入的名称已经存在或者尚未选择方法。
Type (类型)	要创建的批次类型: Quan (定量) 或 Screening (筛选)。
Method (方法)	用于创建新批次的方法。
Path (路径)	TraceFinderData\Projects 文件夹中的项目路径, 可以在此创建批次。
<b>功能按钮</b>	
Create (创建)	创建指定的批次并打开新批次的 Batch View (批次视图)。
Cancel (取消)	关闭 Create New Batch (创建新批次) 对话框, 不创建任何批次。

## 编辑批次的文件夹

通过 Create New Batch (创建新批次) 对话框为批次创建新文件夹。也可以删除或重命名文件夹。

按照如下步骤进行操作：

- 若要创建新项目文件夹
- 若要删除项目文件夹
- 若要重命名项目文件夹

### ❖ 若要创建新项目文件夹

1. 在 Create New Batch (创建新批次) 对话框中，选择欲在其中创建次级新文件夹的文件夹。

- 用户可以选择 TraceFinderData\Projects 主文件夹，并在其中创建新文件夹。
- 用户可以选择其中一个已存在的文件夹，并在其中创建一个次级文件夹。

2. 点击 **Create Folder (创建文件夹)** 图标，。

应用程序在已选文件夹下添加一个新的次级文件夹。

3. 选中新文件夹的名称并为该文件夹命名。

文件夹名称最多为 30 个字符，可包含空格和特殊字符，但以下特殊字符除外：\ / : + ? " < >

**注释** 次级文件夹添加完成以后，无法重命名父文件夹。

### ❖ 若要删除项目文件夹

1. 在 Create New Batch (创建新批次) 对话框中，选择要删除的文件夹。

2. 点击 **Delete Folder (删除文件夹)** 图标，。

该应用程序立即移除已选文件夹，没有任何确认提示。

**注释** 用户无法删除含次级文件夹的文件夹；用户必须首先删除次级文件夹。

### ❖ 若要重命名项目文件夹

1. 在 Create New Batch (创建新批次) 对话框中，选择要重命名的文件夹。

2. 点击 **Rename Folder (重命名文件夹)** 图标，。

**注释** 用户不能重命名含次级文件夹的文件夹。

3. 输入文件夹的新名称，然后按下 ENTER。

应用程序保存新文件夹的名称。

## 编辑批次

在 Batch View (批次视图) 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。如果批次已采集完成, 可以选择指定的样品进行重新进样。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“待采集”批次。

按照以下步骤进行操作:

- 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
- 若要重新进样以前已采集批次中的样品

### ❖ 若要打开已保存的批次

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > Open (打开) > Batch (批次)**。

Open Batch (打开批次) 对话框打开。参阅 [Open Batch \(打开批次\) 对话框](#)。

2. 选中一个项目和子项目。

3. 从 Type (类型) 列表选择 **Quan (定量)**、**Screening (筛选)**, 或 **Any (任意)**。

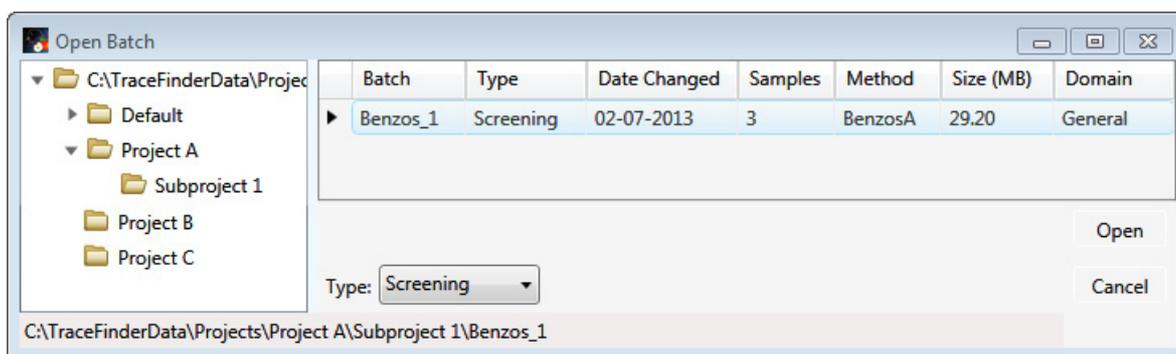
批次列表上显示所有采用已选方法类型创建的批次。

4. 从列表中选择一個批次。

5. 点击 **Open (打开)**。

所选批次在 Batch View (批次视图) 中打开。

**图 99.** Open Batch (打开批次) 对话框



**表 74.** Open Batch (打开批次) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

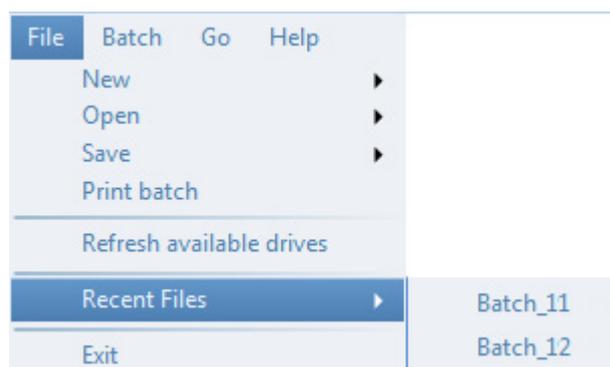
参数	描述
Batch (批次)	已选项目中的批次名。
Type (类型)	批次的类型: Quan (定量) 或 Screening (筛选)。
Date Changed (更改日期)	批次的最后更新日期。
Samples (样品)	批次中的样品数。
Method (方法)	用于创建批次的方法名称。

表 74. Open Batch (打开批次) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Size (大小)	批次的大小, 单位为兆字节。
Domain (领域)	TraceFinder 中创建批次的领域: General (常规)、EFS (环境和食品安全)、Clinical (临床) 或 Forensic (法医学)。
Path (路径)	TraceFinderData\Projects 文件夹中的项目路径, 可以在此保存批次。
<b>功能按钮</b>	
Type (类型)	欲显示在 Batch (批次) 列表中的批次类型: Quan (定量)、Screening (筛选) 或 Any (任意)。
Open (打开)	打开所选批次的 Batch View (批次视图)。
Cancel (取消)	关闭 Open Batch (打开批次) 对话框, 不打开任何批次。

❖ 若要打开最近的批次

从主菜单中选择 **File (文件) > Recent Files (最近使用的文件) > Batch (批次)**。



所选批次在 Batch View (批次视图) 中打开。

❖ 若要编辑批次中的样品

采用第 359 页上的“使用 Batch View (批次视图)”中描述的命令。

可以添加、编辑或移除样品。

❖ 若要重新进样以前已采集批次中的样品

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，并会在文件名称上附加 INJ001。多次重新进样的同一样品将依进样顺序编号为 INJ002、INJ003，以此类推。

TraceFinder 应用程序从原始样品中复制所有的参数值。

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而创建的样品（未采集）。

	cal_50_INJ001	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（包括先前已采集的样品）。

3. 若要保存此添加新样品的批次以重新进样，可从主菜单上选择 **File (文件) > Save (保存) > Batch (批次)**。

该批次被保存为一个已制备的批次，等待提交。可以从 Acquisition (采集) 模式的 Reinject Samples (重新进样) 页面打开并提交该批次。该应用程序仅采集以前未采集的样品。

## 提交批次

在 Batch View (批次视图) 中，可以提交整个批次或仅提交批次中选定的样品。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 392 页上的“[Submit Options \(提交选项\) 对话框](#)”。

有关快捷菜单上命令的描述，参阅第 373 页上的“[Batch View \(批次视图\) 快捷菜单命令](#)”。

❖ 若要提交批次中的样品

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，。
  - 若要提交指定样品，选择这些样品并点击

**Submit Selected Samples (提交已选样品)** 图标，。

Submit Options (提交选项) 对话框打开。参阅第 392 页上的“[Submit Options \(提交选项\) 对话框](#)”。

2. 若要采集（或重新采集）已提交的样品，选中 **Acquire Data (采集数据)** 复选框。
  - 当所有已提交的样品以前已采集时，默认不选中该选项。
  - 当已提交的样品中有部分未采集时，默认选中该选项。
3. 若要处理已提交的样品，选中 **Process Data (处理数据)** 复选框。

可以处理执行峰检测或未执行峰检测的数据。例如，用户或许希望在重新处理样品时关闭峰检测。

4. (可选) 选中 **Create Reports (创建报告)** 复选框。
5. (多通道激活时可选) 选中 **Priority Sequence (优先序列)** 复选框。  
应用程序在下一个可用通道或指定通道中采集优先批次。
6. (多通道未激活时可选) 选中 **Priority Sequence (优先序列)** 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批次之后。
  - **Next Available Sample (下一可用样品)** 将批次放入当前采集样品之后。
7. (可选) 点击 **Show Details (显示详细信息)** 以显示其他 Acquisition (采集) 参数。
8. 选择要用于采集的设备的 **Use (使用)** 复选框。
9. (可选) 选中 **Start Device (启动设备)** 复选框, 表示该设备将与其它仪器建立通信连接。  
该仪器通常为自动进样器。
10. (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。
11. 若要启动所选的流程, 点击 **OK (确定)**。

图 100. Submit Options (提交选项) 对话框

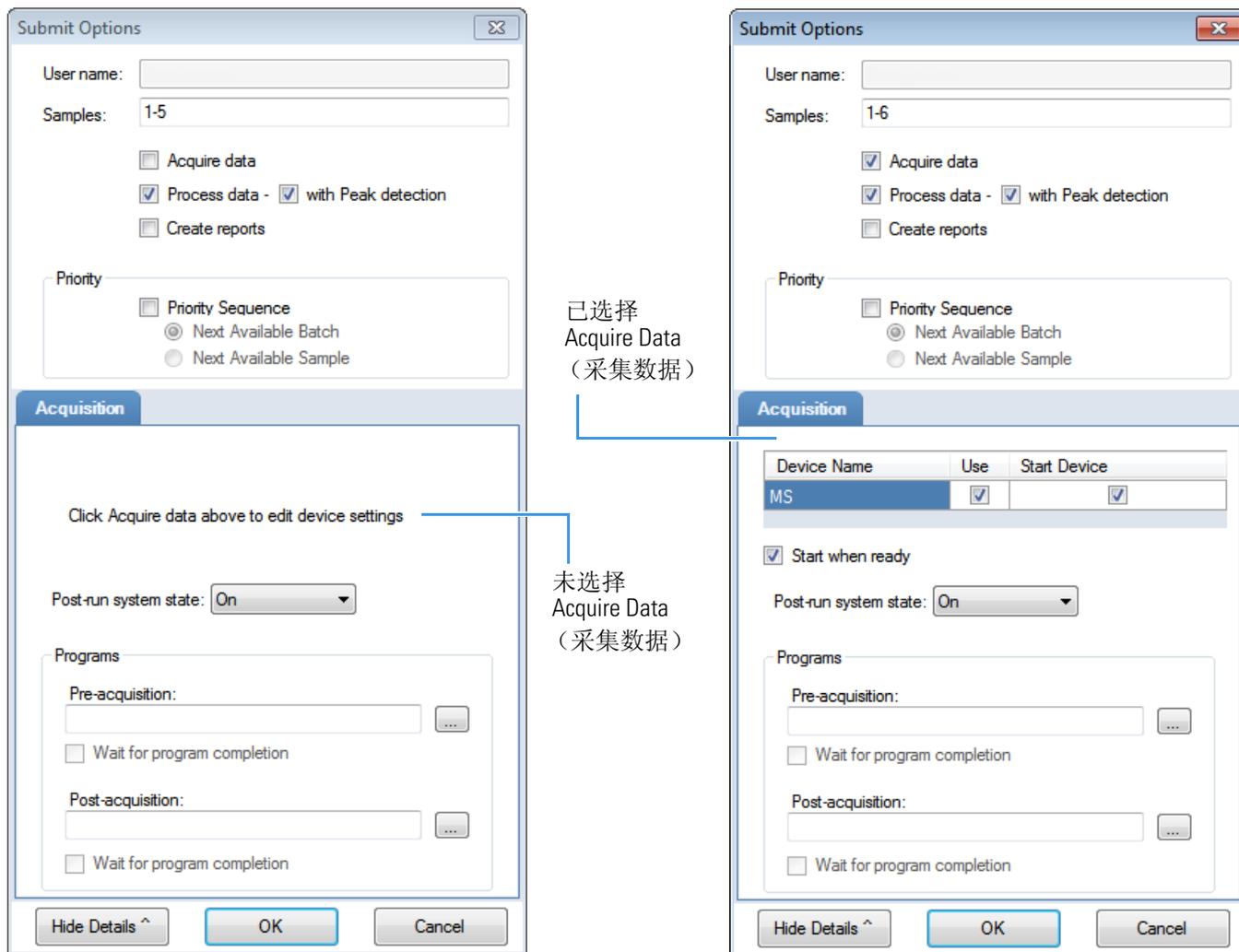


表 75. Submit Options (提交选项) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

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)	提交当前批次进行采集。 <ul style="list-style-type: none"> <li>当所有已提交的样品以前已采集时, 默认未选中该选项。</li> <li>当已提交的样品中有部分未采集时, 默认选中该选项。</li> </ul>
Process Data (处理数据)	(默认) 处理当前批次的的数据。
With Peak Detection (进行峰检测)	(默认) 处理进行峰检测的数据。 清除该选项时, 该选项让用户重新处理样品而不执行峰检测。
Create Reports (创建报告)	创建当前批次的报告。

表 75. Submit Options (提交选项) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Priority Sequence (优先序列)	多通道激活时, 将批次放在当前采集批次之后。  多通道未激活时, 指定以下其中一种优先级选项, 将批次放入队列中: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Next Available Batch (下一可用批次)</b> 将批次放入当前采集批次之后。</li> <li>• <b>Next Available Sample (下一可用样品)</b> 将批次放入当前采集样品之后。</li> </ul>
<b>Acquisition (采集) 窗格</b>	
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, 进行仪器配置, 然后重新打开 TraceFinder 应用程序。TraceFinder 应用程序正在运行时无法配置仪器。  仅当 Acquire Data (采集数据) 复选框已选时可用。
Use (使用)	指定本次采集所用的仪器。  仅当 Acquire Data (采集数据) 复选框已选时可用。
Start Device (启动设备)	指定与其它仪器建立通信连接的仪器。该仪器通常为自动进样器。  仅当 Acquire Data (采集数据) 复选框已选时可用。
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一个批次的状态。 On (默认, 开机)、Standby (待机), 或 Off (关机)。
<b>功能按钮</b>	
Hide/Show Details (隐藏 / 显示详细信 息)	折叠或展开 Submit Options (提交选项) 对话框的详细采集信息。
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 (提交选项) 对话框。

## 将批次保存到新位置

可以将当前的批次移动到不同的项目文件夹中，或者复制当前的批次并将副本保存至一个不同的项目文件夹中。

按照以下步骤进行操作：

- 若要将批次保存到其他项目文件夹中
- 若要将批次移动到其他文件夹中
- 若要创建新项目文件夹
- 若要删除项目文件夹
- 若要重命名项目文件夹

### ❖ 若要将批次保存到其他项目文件夹中

1. 从 Analysis (分析) 模式的主菜单中选择 **File (文件) > Save (保存) > Save Batch As (批次另存为)**。

Save Batch As (批次另存为) 对话框打开。参阅第 396 页上的“[Save Batch As \(批次另存为\) 对话框](#)”。

2. 选择一个存储位置。

默认存储位置为 C:\TraceFinderData\Projects。

3. 选择或创建项目文件夹。

4. 为新批次输入名称。

如果将批次保存到其他文件夹中，其名称必须是唯一的。无法覆盖文件夹中已存在的批次。

5. 点击 **Save (保存)**。

在将批次保存到其他文件夹中时，报告仅显示原始的项目文件夹，应用程序不会保存修改历史。

### ❖ 若要将批次移动到其他文件夹中

1. 从 Analysis (分析) 模式的主菜单中选择 **File (文件) > Save (保存) > Move Batch (移动批次)**。

Save Batch As (批次另存为) 对话框打开。参阅第 396 页上的“[Save Batch As \(批次另存为\) 对话框](#)”。

2. 选择一个存储位置。

默认存储位置为 C:\TraceFinderData\Projects。

3. 选择或创建项目文件夹。

4. 为新批次输入名称。

必须为新的子项目文件夹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。

5. 点击 **Save (保存)**。

当移动批次时，报告仅显示原始的项目和子项目文件夹，应用程序不会保存修改历史。

❖ **若要创建新项目文件夹**

1. 在 Save Batch As (批次另存为) 对话框中，选择欲在其中创建次级新文件夹的文件夹。

- 用户可以选择 TraceFinderData\Projects 主文件夹，并在其中创建新文件夹。
- 用户可以选择其中一个已存在的文件夹，并在其中创建次级文件夹。

2. 点击 **Create Folder (创建文件夹)** 图标，。

应用程序在已选文件夹下添加新的次级文件夹。

3. 选中新文件夹的名称并为该文件夹命名。

文件夹名称可以包含空格和特殊字符，但以下特殊字符除外：\ / : + ? " < >

**注释** 次级文件夹添加完成以后，无法重命名父文件夹。

❖ **若要删除项目文件夹**

1. 在 Save Batch As (批次另存为) 对话框中，选择要删除的文件夹。

2. 点击 **Delete Folder (删除文件夹)** 图标，。

该应用程序立即移除已选文件夹，没有任何确认提示。

**注释** 对于含次级项目或批次文件夹的文件夹，该功能不可用；用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。

❖ **若要重命名项目文件夹**

1. 在 Save Batch As (批次另存为) 对话框中，选择要重命名的文件夹。

2. 点击 **Rename Folder (重命名文件夹)** 图标，。

**注释** 对于含次级项目或批次文件夹的文件夹，该功能不可用；用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。

3. 输入文件夹的新名称，然后按下 ENTER。

应用程序保存新文件夹的名称。

## Save Batch As (批次另存为) 对话框

采用 Save Batch As (批次另存为) 对话框上的功能将批次保存为新名称, 或者将批次移动到其他项目文件夹中。

图 101. Save Batch As (批次另存为) 对话框

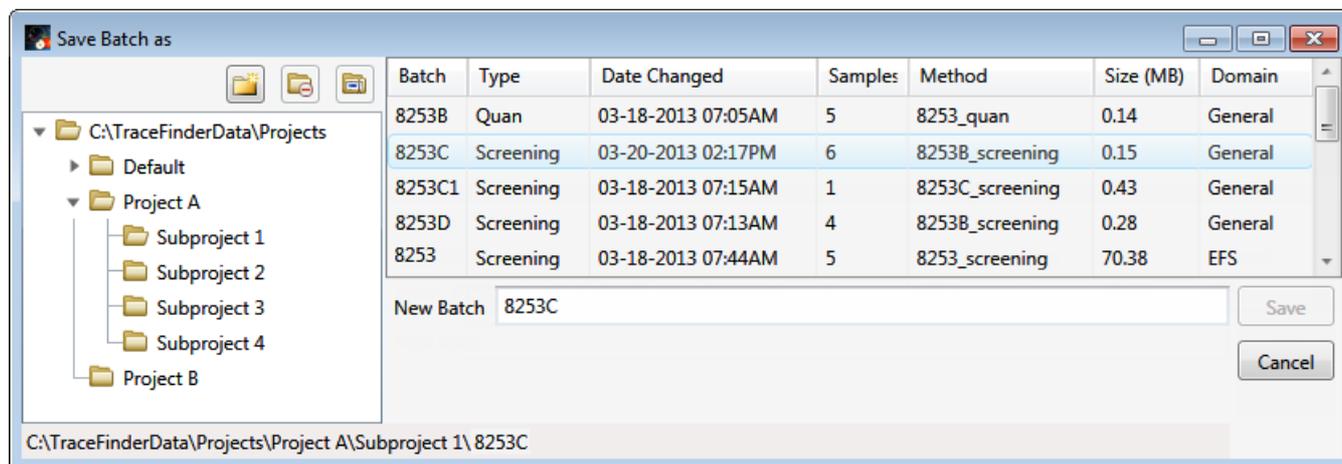


表 76. Save Batch As (批次另存为) 对话框参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
 Create New Folder (创建新文件夹)	<p>执行下列操作之一:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>选中一个驱动器后, 为驱动器添加一个新项目水平文件夹。</li> <li>当项目文件夹选中后, 为已选项目添加一个子项目水平文件夹。</li> <li>当子项目文件夹选中后, 为子项目添加一个次级文件夹。</li> </ul> <p>或者, 右击并从快捷菜单中选择 <b>Create Folder (创建文件夹)</b>。</p>
 Delete Folder (删除文件夹)	<p>立即移除已选文件夹, 没有任何确认提示。</p> <p>用户无法删除含次级项目或批次文件夹的文件夹; 用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。</p> <p>或者, 右击并从快捷菜单中选择 <b>Delete (删除)</b>。</p>
 Rename Folder (重命名文件夹)	<p>重命名已选文件夹。</p> <p>用户无法重命名含次级项目或批次文件夹的文件夹; 用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。</p> <p>或者, 右击并从快捷菜单中选择 <b>Rename (重命名)</b>。</p>
<b>批次表</b>	
Batch (批次)	已选项目中的批次名。
Type (类型)	批次的类型: Quan (定量) 或 Screening (筛选)。
Date Changed (更改日期)	批次的最后更新日期。
Samples (样品)	批次中的样品数。
Method (方法)	用于创建批次的方法名称。
Size (大小)	批次的大小, 单位为兆字节。

表 76. Save Batch As (批次另存为) 对话框参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Domain (领域)	TraceFinder 中创建批次的领域: General (常规)、EFS (环境和食品安全)、Clinical (临床) 或 Forensic (法医学)。
<b>新批次参数</b>	
New Batch (新批次)	要创建的新批次的名称。 <b>注释</b> 若 Create (创建) 按钮未激活, 则可能是因为输入的名称已经存在或者尚未选择方法。
Path (路径)	TraceFinderData\Projects 文件夹中的项目路径, 可以在此创建批次。
<b>功能按钮</b>	
Save (保存)	将批次保存为指定的名称, 并保存至指定的文件夹中, 打开新批次的 Batch View (批次视图)。
Cancel (取消)	关闭 Save Batch As (批次另存为) 对话框, 而不保存该批次。
<b>快捷菜单命令</b>	
Create Folder (创建文件夹)	执行下列操作之一: <ul style="list-style-type: none"> <li>选中一个驱动器后, 为驱动器添加一个新项目水平文件夹。</li> <li>当项目文件夹选中后, 为已选项目添加一个子项目水平文件夹。</li> <li>当子项目文件夹选中后, 为子项目添加一个次级文件夹。</li> </ul>
Delete Folder (删除文件夹)	立即移除已选文件夹。没有确认是否删除所选文件夹的任何提示。 用户无法删除含次级项目或批次文件夹的文件夹; 用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。
Rename Folder (重命名文件夹)	重命名所选文件夹。 用户无法重命名含次级项目或批次文件夹的文件夹; 用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。
Expand Child Nodes (展开子节点)	展开 Project (项目) 树下面的所有项目和子项目文件夹。
Collapse Child Nodes (折叠子节点)	折叠 Project (项目) 树下面的所有项目和子项目文件夹。

## Auto Samples (自动样品) 页面

Auto Samples (自动样品) 页面识别 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品, 将其用于任何 Auto Sample (自动样品) 或 Auto Sample and Reinject (自动进样和重新进样) 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。参阅第 190 页上的“编辑 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面”。

用户指定用于 Intelligent Sequencing (智能排序) 页面上运行失败的所有样品类型, 都必须存在于 Auto Samples (自动样品) 页面的样品列表中。

### ❖ 若要打开 Auto Samples (自动样品) 页面

点击 Batch View (批次视图) 导航窗格中的 **Auto Samples (自动样品)**。

Auto Samples (自动样品) 页面打开。参阅 [Auto Samples \(自动样品\) 页面](#)。

### ❖ 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 Solvent (溶剂) 样品添加至样品列表中。

用户可以从该列表或任何样品列表中添加、插入或删除样品。参阅第 360 页上的“[Samples \(样品\) 页面](#)”。

2. 若要将样品类型更改为 Negative (阴性对照), 点击 Sample Type (样品类型) 列, 并从列表中选择 Negative (阴性对照)。
3. 在样品的 Injection Volume (进样体积) 列, 输入进样量。

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

4. 在 Number of Injections (进样次数) 列, 输入指定的 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品瓶的可用进样次数。

自动样品进样发生以后, 用户可以返回至该页面查看每个样品瓶的 Injections Used (已使用的进样) 次数。

5. 在 Vial Position (样品瓶位置) 列中, 输入 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品的样品瓶位置。

图 102. Auto Samples (自动样品) 页面

	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

表 77. Auto Samples (自动样品) 页面参数

列	描述
Sample Type (样品类型)	Intelligent Sequencing (智能排序) 页面上指定的自动进样的样品类型可以是 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照)。 默认: Solvent (溶剂)
Injection Volume (进样体积)	Samples (样品) 页面上指定的用于样品采集的进样体积。 范围: 0.1 至 5000 µL
Injections Used (已使用的进样)	一个样品瓶已经使用的进样次数。该数量随整个批次逐渐增加。
Number of Injections (进样次数)	Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品瓶指定的可用进样次数。
Vial Position (样品瓶位置)	Samples (样品) 页面上指定的样品类型的样品瓶位置。

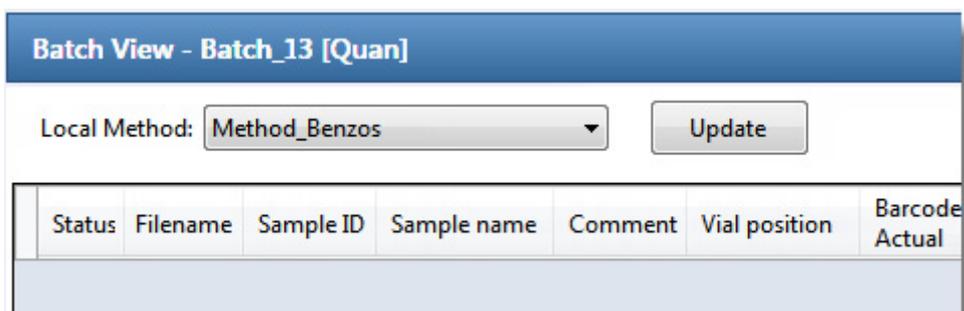
## Reference Samples (参考样品) 页面

Reference Samples (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

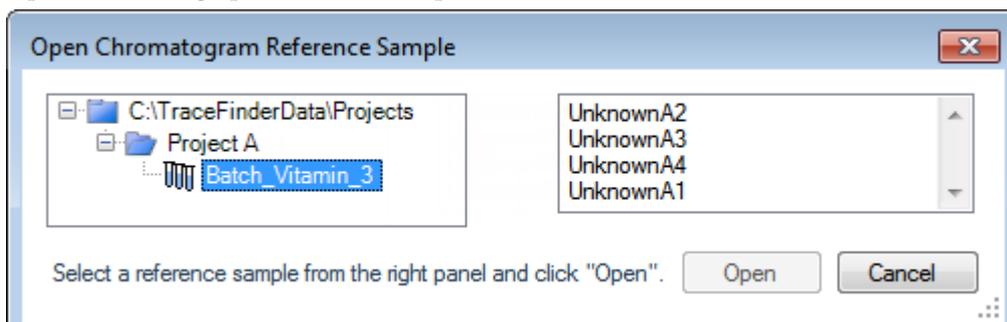
1. 在 Batch View (批次视图) 中, 点击 **Reference Samples (参考样品)**。

一个空白的参考样品表打开。



2. 点击 **Add Reference Sample (添加参考样品)** 图标, , 或右击并从快捷菜单中选择 **Add Reference Sample (添加参考样品)**。

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



**注释** 如果正在使用一个新方法, 此处不会出现任何参考样品。必须首先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)**。

## Threshold Samples (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 (对比视图) 中所用的阈值样品。

### ❖ 若要指定一个阈值样品

1. 在 Batch View (批次视图) 中，点击 **Threshold Samples (阈值样品)**。
2. 点击每个组的 Samples (样品) 列表并从组中选择一个样品作为阈值样品。

	Group	Sample
▶	groupb	Benzo26473 ▼
		Benzo26473
		Benzo25557
		Benzo26154

Comparative View (对比视图) 使用方法中指定的阈值方法和量、在 Samples (样品) 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线。

有关指定用于创建阈值线方法的相关信息，参阅第 185 页上的“Threshold (阈值)”。

有关创建组的信息，参阅第 365 页上的“Groups (组)”。

有关在 Comparative View (对比视图) 中使用阈值线的信息，参阅第 437 页上的“Comparative View (对比视图)”。

## 利用 Batch Wizard（批次向导）创建批次

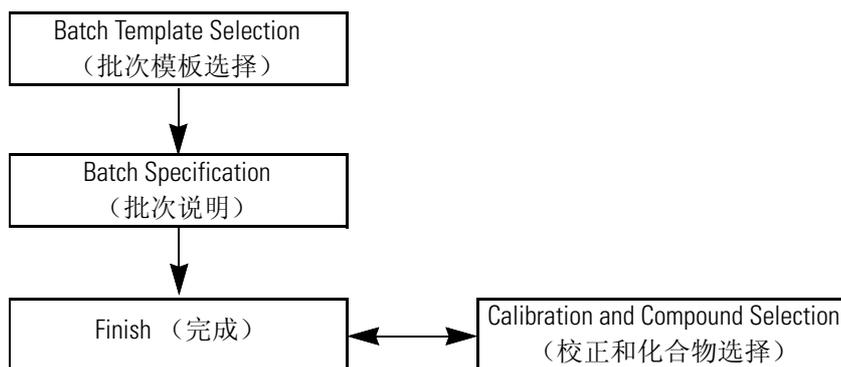
利用 Batch Wizard（批次向导），可以定义由待分配到样品批次中的各种样品类型组成的序列。在利用 Batch Wizard（批次向导）创建批次之前，必须已有一个主方法和一个批次模板。参阅第 80 页上的“创建新主方法”和第 542 页上的“使用 Batch Template Editor（批次模板编辑器）”。

**注释** 仅当在 Configuration（配置）控制台中选择 Batch Template Wizard（批次模板向导，EnviroLab/ToxLab/QuanLab 格式）类型时，批次向导才可用。参阅第 61 页上的“Batch Wizard Style（批次向导类型）”。

按照 Batch Wizard（批次向导）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（批次向导）工作流程使用以下页面：



### ❖ 若要打开 Batch Wizard（批次向导）

从 Analysis（分析）模式的主菜单中选择 **File（文件） > New（新建） > Batch Using Wizard（使用向导的批次）**，

或者点击 **Batch Wizard（批次向导）** 图标，。

**注释** 使用 Batch Wizard（批次向导）创建批次要求以前至少创建过一个批次模板。参阅第 542 页上的“使用 Batch Template Editor（批次模板编辑器）”。

Batch Wizard（批次向导）的 Batch Template Selection（批次模板选择）页面打开。有关 Batch Template Selection（批次模板选择）页面上参数的描述，参阅第 404 页上的“Batch Template Selection（批次模板选择）页面”。

## 选择批次模板

从 Batch Template Selection (批次模板选择) 页面上可以创建用于采集或处理的样品列表。有关 Batch Template Selection (批次模板选择) 页面上参数的描述, 参阅“[Batch Template Selection \(批次模板选择\) 页面](#)”。

### ❖ 若要创建样品列表

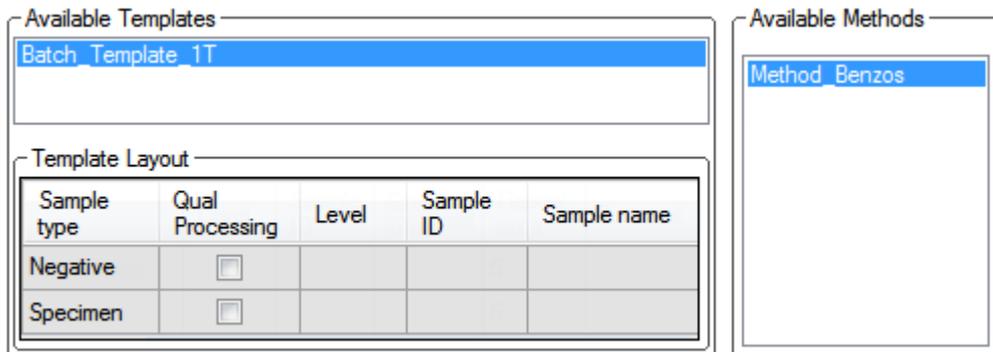
1. 从 Project (项目) 列表选择一个项目。
2. 从 Subproject (子项目) 列表选择一个子项目。  
Available Templates (可用模板) 区域列出了指定子项目中的所有模板。
3. 选择一个起始样品瓶位置。  
默认样品瓶位置为 1, 但用户可以选择从任意样品瓶位置开始采集。
4. (可选) 若要简化样品列表, 选中 **Quick Mode (快速模式)** 复选框。

Quick Mode (快速模式) 将 Batch Specification (批次说明) 页面上的列信息限制为以下:

- 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)

5. 从 Available Templates (可用模板) 列表中选择希望采用的布局模板。

Template Layout (模板布局) 区域显示已选批次模板中的样品信息, 及与模板实验类型相同的方法列表。



6. 选择一个可用方法。  
默认情况下, 应用程序选择用于创建批次模板的方法, 但用户可以选择 Available Methods (可用方法) 列表中的任意方法。
7. 若要转至下一向导页面, 点击 **Next (下一步)**。  
从向导的 Batch Specification (批次说明) 页面可以自定义批次。

图 103. Batch Template Selection (批次模板选择) 页面

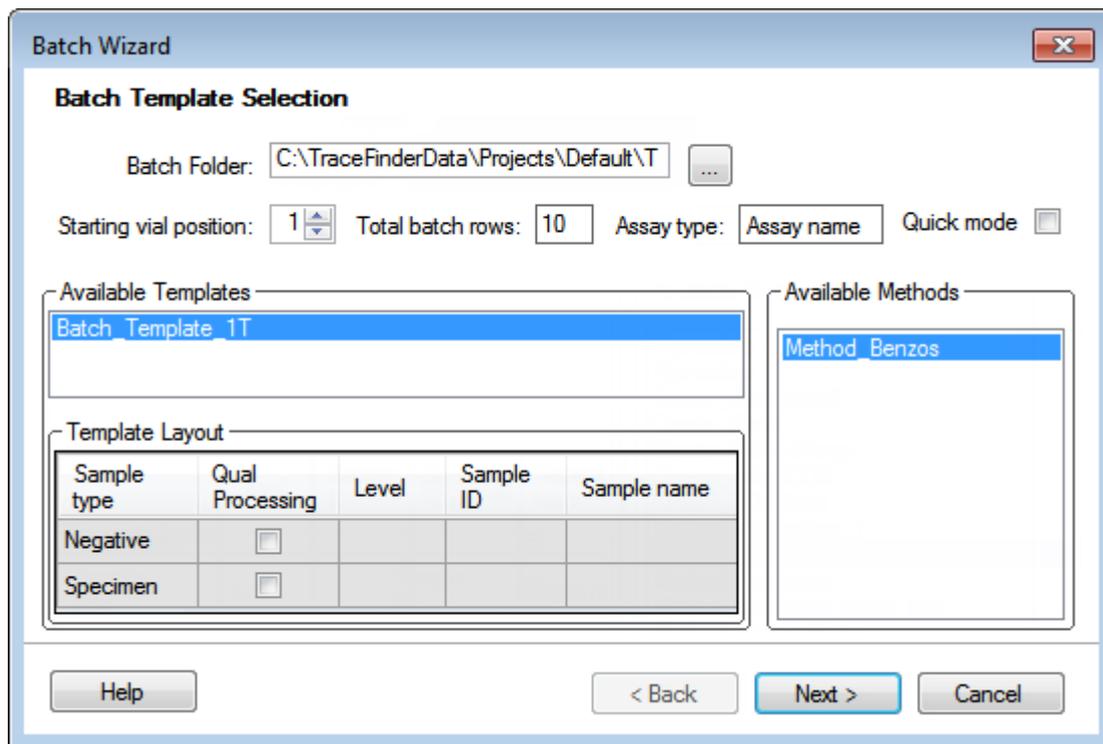


表 78. Batch Template Selection (批次模板选择) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Batch Folder (批次文件夹)	批次的项目文件夹。
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: 1
Total Batch Rows (总批次行)	批次模板中的样品行数。
Assay Type (实验类型)	主方法中指定的用于创建批次模板的实验类型。
Quick Mode (快速模式)	将 Batch Specification (批次说明) 页面上的列信息限制为以下: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Sample Type (样品类型)</li> <li>• Sample ID (样品识别号)</li> <li>• Injection Volume (进样体积)</li> <li>• Conversion Factor (换算系数)</li> </ul>
Available Templates (可用模板)	所有批次模板保存在下列文件夹中: ... \TraceFinderData\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)	列出所有采用与所选批次模板一致的实验类型创建的主方法。

表 78. Batch Template Selection (批次模板选择) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Help (帮助)	在应用程序的 Help (帮助) 工具中打开“Creating a Batch Using the Batch Wizard (采用批次向导创建批次)”主题 (该主题)。
Next (下一步)	返回至 Batch Specification (批次说明) 页面, 在此可以输入样品识别号、样品名称或注释。也可以从样品列表中添加或删除样品或编辑样品的列值。参阅第 405 页上的“指定批次”。
Cancel (取消)	立刻退出 Batch Wizard (批次向导) 且不保存批次。没有确认信息。

## 指定批次

从 Batch Specification (批次说明) 页面上, 必须输入样品识别号、样品名称或注释。也可以从样品列表中添加或删除样品或编辑样品的列值。批次模板中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识别号、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 (批次说明) 页面上参数的描述, 参阅第 409 页上的“Batch Specification (批次说明) 页面”。

### ❖ 若要输入样品识别号、样品名称或注释

1. 在 Sample ID (样品识别号) 列中输入识别号。  
识别号可以为任意文本串。
2. 在 Sample Name (样品名称) 列中输入名称。  
名称可以为任意文本串。
3. 在 Comment (注释) 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, 应用程序舍弃那些不含字段值的样品。

### ❖ 若要简化样品列表

选中 **Quick Mode (快速模式)** 复选框。

在 Quick Mode (快速模式) 中, Batch Specification (批次说明) 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 (快速模式) 中, 无法从样品列表中添加或删除样品。仅可以为在模板中指定的样品编辑这四列值。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

利用 Batch Wizard (批次向导) 创建批次

当未使用 Quick Mode (快速模式) 时, 执行以下步骤:

- 若要更改文件名
- 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

### ❖ 若要更改文件名

1. 选中文件名。

Filename	Sample type
9262012_a001	Matrix Blank

选中进行重命名

Filename	Sample type
9262012_a001	Matrix Blank

未选中进行重命名

默认情况下, Batch Template Selection (批次模板选择) 页面上指定的所有样品名称中都含有日期和指定名称“aNNN”, 示例如下: 9262012\_a001。

2. 输入一个新文件名。

**注释** 或者, 右击并从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File (浏览原始文件)**。按照第 408 页上的“若要浏览原始数据文件”中的说明进行操作。

### ❖ 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 (添加样品)**, 或者点击 Add Sample (添加样品) 图标, 。

应用程序将新的 Specimen (定量样品) 样品添加到样品列表的末尾。

2. 在每个样品的 Filename (文件名) 列, 执行以下其中一种操作:

- 接受默认文件名: Unknown/N.
- 更改默认文件名。按照“若要更改文件名”中的说明进行操作。
- 浏览原始数据文件名。按照第 408 页上的“若要浏览原始数据文件”中的说明进行操作。

3. 从 Sample Type (样品类型) 列表中为每个样品选择样品类型。

#### 可用样品类型

Specimen (定量样品)	QC (质控标样)	Hydrolysis (水解)
Solvent (溶剂)	Calibrator (校正标样)	
Unextracted (未提取)	Negative (阴性对照)	

4. 有关样品类型的详细说明, 参阅第 354 页上的“样品类型”。

- 为每个 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 样品, 从 Level (水平) 列表中选择水平。

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

- 点击 Batch Wizard (批次向导) 中的 **Cancel (取消)**。
- 返回至 Method Development (方法开发) 模式。
- 打开该方法。
- 点击 **Compounds (化合物)** 选项卡。
- 点击 **Calibration Levels (校正水平)** 选项卡。
- 添加水平。
- 保存方法。
- 返回至 Analysis (分析) 模式, 打开 Batch Wizard (批次向导), 然后再次创建批次。

有关定义样品水平的详细说明, 参阅第 4 章, “使用 Method Development (方法开发) 模式”。

- 在新样品的 Vial Position (样品瓶位置) 列, 输入样品瓶位置。
- 在新样品的 Injection Volume (进样体积) 列, 输入进样量。  
允许的最小进样体积为 0.1  $\mu\text{L}$ ; 允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
- (可选) 输入或编辑其它列的值。

**注释** 在 Quick Mode (快速模式) 中, Add Sample (添加样品) 功能不可用。

#### ❖ 若要移除批次中的样品

- 选择要移除的样品。
- 右击然后从快捷菜单中选择 **Remove Selected Samples (移除所选样品)**, 或点击移除样品图标, 。

应用程序从样品列表中移除所选样品。

**注释** 在 Quick Mode (快速模式) 中, Remove Selected Samples (移除所选样品) 功能不可用。

#### ❖ 若要在批次中插入样品

- 选择要在其上方插入新样品的样品。
- 右击并从快捷菜单中选择 **Insert Sample (插入样品)**。

应用程序会将新 Specimen (定量样品) 样品插入到所选样品上方。

**注释** 在 Quick Mode (快速模式) 中, Insert Sample (插入样品) 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 (插入复制样品)**。

应用程序将复制的样品插入到选定样品上方。

**注释** 在 Quick Mode (快速模式) 中, Insert Copy Sample (插入复制样品) 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 (快速模式) 中, Move Sample (移动样品) 功能不可用。

❖ **若要浏览原始数据文件**

1. 双击 Filename (文件名) 列或右击并从快捷菜单中选择 **Browse in Raw File (浏览原始文件)**。

一个对话框打开, 可以在其中选择要用于样品的原始数据文件。也可以浏览多个原始数据文件以创建多个样品。

2. 找到要用于样品的原始数据文件, 然后点击 **Open (打开)**。

**注释** 在 Quick Mode (快速模式) 中, Browse in Raw File (浏览原始文件) 功能不可用。

## Batch Specification (批次说明)

使用 Batch Specification (批次说明) 页面上的功能, 根据批次模板创建批次队列。

图 104. Batch Specification (批次说明) 页面

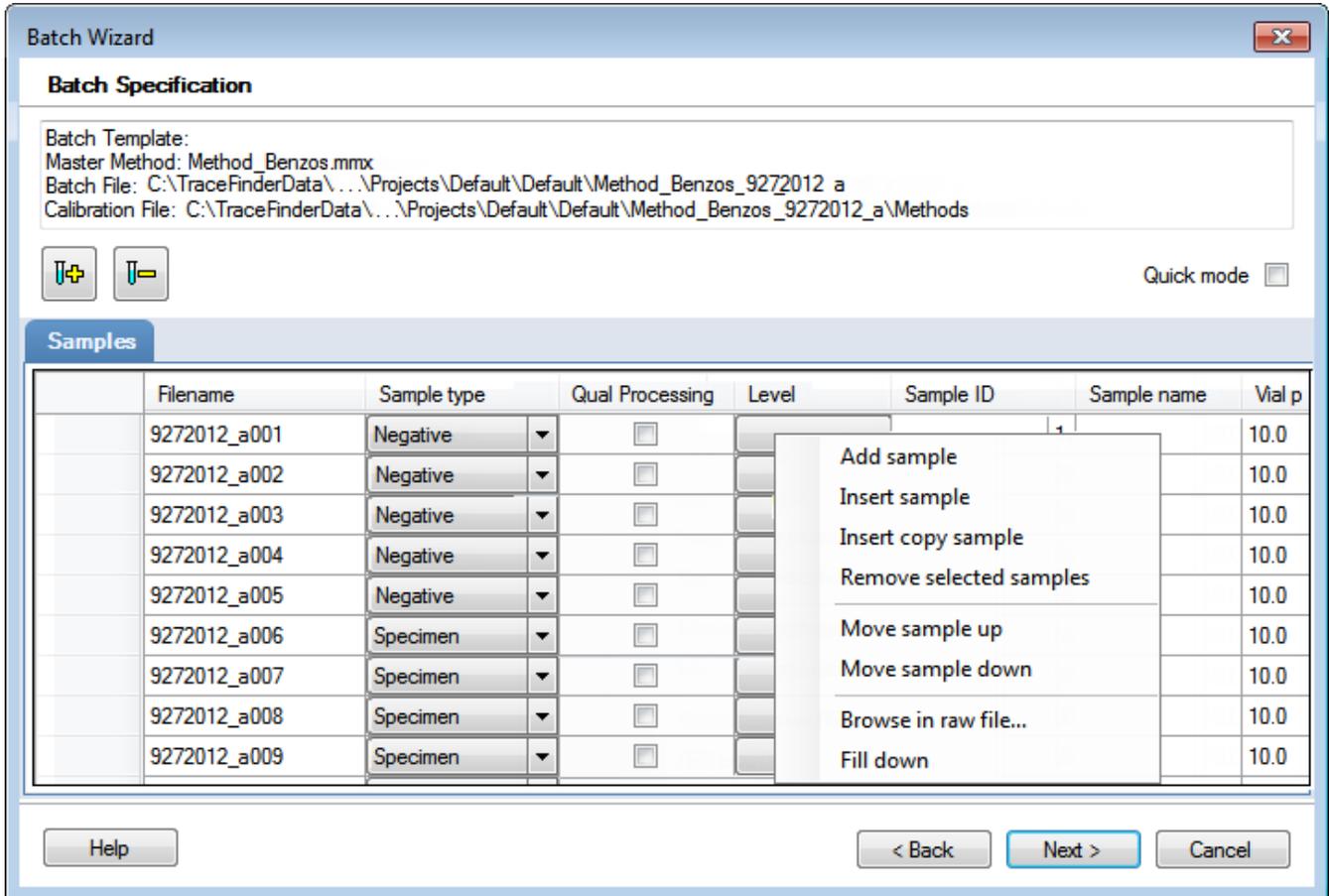


表 79. Batch Specification (批次说明) 页面参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Batch Template (批次模板)	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。
Master Method (主方法)	
Batch File (批次文件)	
Calibration File (校正文件)	
	将新的 Specimen (定量样品) 样品添加到样品列表的末尾。 在 Quick Mode (快速模式) 中, 该功能不可用。
	移除所选样品。 在 Quick Mode (快速模式) 中, 该功能不可用。

表 79. Batch Specification (批次说明) 页面参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Quick Mode (快速模式)	<p>将 Batch Specification (批次说明) 页面上的列信息限制为以下:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Sample Type (样品类型)</li> <li>• Sample ID (样品识别号)</li> <li>• Injection Volume (进样体积)</li> <li>• Conversion Factor (换算系数)</li> </ul> <p>在 Quick Mode (快速模式) 中, 快捷菜单和添加 / 移除图标不可用。</p>
Help (帮助)	在应用程序的 Help (帮助) 工具中打开“Creating a Batch Using the Batch Wizard (采用批次向导创建批次)”主题 (该主题)。
Back (返回)	返回至 Batch Template Selection (批次模板选择) 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“ <a href="#">提交批次</a> ”。
Cancel (取消)	立刻退出 Batch Wizard (批次向导) 且不保存批次。没有确认信息。
<b>快捷菜单</b>	
Add Sample (添加样品)	在样品列表中添加单个空行。
Insert Sample (插入样品)	将新的 Specimen (定量样品) 样品插入到所选行上方。
Insert Copy Sample (插入复制样品)	复制当前已选行, 并在该行上方插入复制行。
Remove Selected Samples (移除已选样品)	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。也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 (向下填充) 命令的详细说明, 参阅附录 C, “ <a href="#">使用 Copy Down (向下复制) 和 Fill Down (向下填充)</a> ”。
Renumber Vial Positions (重新编号样品瓶位置)	在当前所选样品之后, 为所有样品的样品瓶位置进行重新编号。已选样品保留其样品瓶位置。其后所有样品按序进行重新编号。仅在添加或移除样品之后可用。

## 提交批次

可以通过 Finish (完成) 页面更改批次名称, 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, 或保存批次并将其在 Batch View (批次视图) 中打开。有关 Finish (完成) 页面上参数的详细说明, 参阅“[Finish \(完成\) 页面](#)”。

按照以下步骤进行操作:

- 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) 框内编辑名称。

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 (完成) 时, 出现 Batch Save (批次保存) 对话框要求用户输入其他名称。

### ❖ 若要保存批次

点击 **Finish (完成)**。

应用程序保存批次并将其显示在 Batch View (批次视图) 中。可以通过 Batch View (批次视图) 提交批次用于采集、处理或生成报告。参阅第 390 页上的“[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 (下一步) 按钮替换 Finish (完成) 按钮。

2. 点击 **Next (下一步)**。

Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面打开。参阅第 413 页上的“[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 (通过组修改校正或活动化合物)** 复选框。

应用程序以 Next (下一步) 按钮替换 Finish (完成) 按钮。

2. 点击 **Next (下一步)**。

Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面打开。参阅第 413 页上的“[选择校正文件和化合物](#)”。

## Finish (完成) 页面

可以通过 Finish (完成) 页面上的功能更改批次名称, 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, 或保存批次并将其在 Batch View (批次视图) 中打开。

图 105. Finish (完成) 页面



表 80. Finish (完成) 页面上的参数 (第 1 页, 共 2 页)

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 (下一步) 按钮, 可以访问 Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面。若已使用 Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面, 该选项不可用。
Batch Name (批次名称)	默认批次名称的形式如下: <i>MasterMethod_MMDDYYYY_</i>
Help (帮助)	在应用程序 Help (帮助) 工具中打开 <a href="#">利用 Batch Wizard (批次向导) 创建批次主题</a> (该主题)。
Back (返回)	返回至 Batch Specification (批次说明) 页面, 在此可以输入样品识别号、样品名称或注释。也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 <a href="#">第 405 页</a> 上的“指定批次”。
Finish (完成)	保存批次并将其显示在 Batch View (批次视图) 中。从 Batch View (批次视图) 中可以提交批次用于采集、处理或生成报告。参阅 <a href="#">第 390 页</a> 上的“提交批次”。

表 80. Finish (完成) 页面上的参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Next (下一步)	打开 Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 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 (通过组修改校正或活动化合物) 选中时才可用。
Cancel (取消)	立刻退出 Batch Wizard (批次向导) 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 (校正和化合物选择) 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 (校正和化合物选择) 页面上参数的描述, 参阅“[Calibration and Compound Selection \(校正和化合物选择\) 页面](#)”。

按照以下步骤进行操作:

- 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中, 选中 **Extend Calibration (扩展校正)** 选项。

Select Calibration File to Use (选择要使用的校正文件) 对话框打开。该对话框仅列出与当前批次主方法相同的校正批次。

2. 选择要附加到当前校正文件上的校正文件, 然后点击 **OK (确定)**。

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保存为该批次的单个文件, 点击 **Create New (创建新文件)**。

4. 当完成 Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面上的设置时, 点击 **Next (下一步)**。

Finish (完成) 页面打开。参阅第 411 页上的“[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, 选中包含样品中希望识别化合物的组。
2. 在 Included Compounds (已包括化合物) 区域, 选中样品中希望识别化合物的 **Active (激活)** 复选框。
3. 当完成 Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面上的设置时, 点击 **Next (下一步)**。

Finish (完成) 页面打开。参阅第 411 页上的“[提交批次](#)”。

## Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面

使用 Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面上的功能, 可以编辑校正文件或编辑希望识别的化合物列表。

图 106. Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面

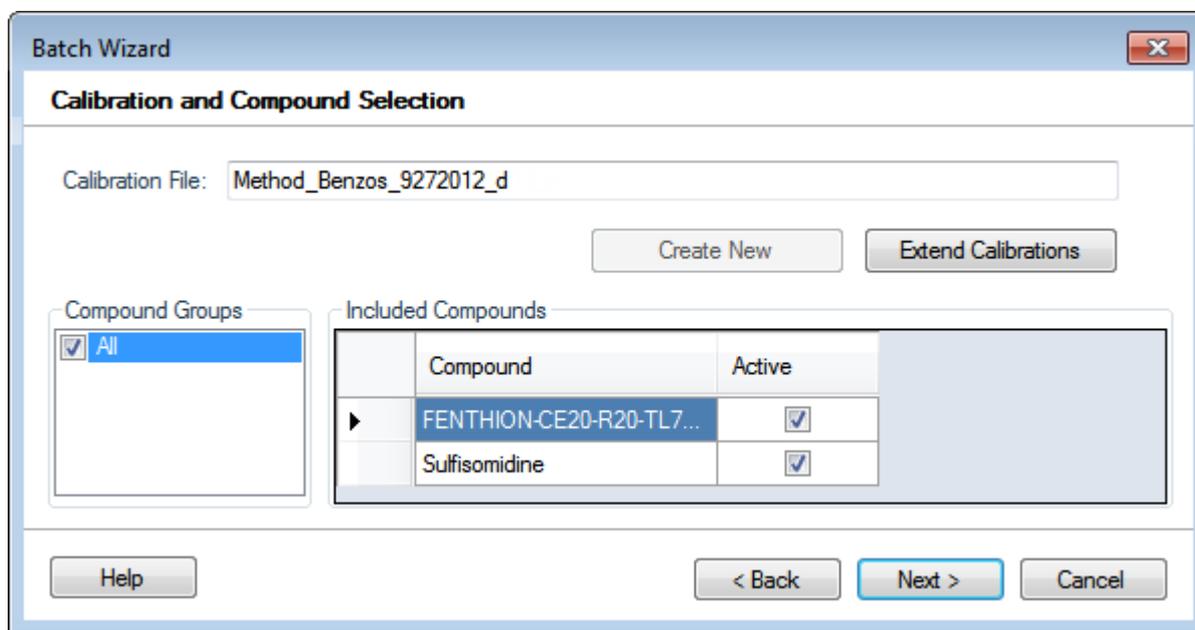


表 81. Calibration and Compound Selection (校正和化合物选择) 页面参数

参数	描述
Calibration File (校正文件)	以下列形式命名的当前批次: <i>MasterMethod_MMDDYYYY_</i>
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中。 仅当使用 Extend Calibrations (扩展校正) 附加来自另一个校正文件的校正数据之后, 该命令才可用。
Extend Calibrations (扩展校正)	将当前批次中的校正数据添加到所选的校正文件中。
Compound Groups (化合物组)	显示 Method View (方法视图) 的 Groups (组) 页面上定义的所有可用组。参阅第 188 页上的“编辑 Groups (组) 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 (激活) 的化合物在批次样品中被识别。
Help (帮助)	在应用程序的 Help (帮助) 工具中打开“Creating a Batch Using the Batch Wizard (采用批次向导创建批次)”主题 (该主题)。
Back (返回)	返回至 Batch Specification (批次说明) 页面, 在此可以输入样品识别号、样品名称或注释。也可以从样品列表中添加或删除样品或编辑样品的列值。参阅第 405 页上的“指定批次”。
Next (下一步)	打开 Finish (完成) 页面, 在此可以更改批次名称或将批次保存到 Batch View (批次视图)。参阅第 411 页上的“提交批次”。
Cancel (取消)	立刻退出 Batch Wizard (批次向导) 且不保存批次。没有确认信息。

## 使用定量方法的 Data Review（数据查看）

在 Data Review（数据查看）视图中，可以查看由定量主方法生成的数据。在生成报告之前，使用 Data Review（数据查看）来验证化合物的数据。

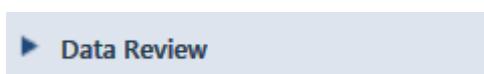
### ❖ 若要打开 Data Review（数据查看）视图

1. 点击导航窗格上的 **Analysis（分析）**。

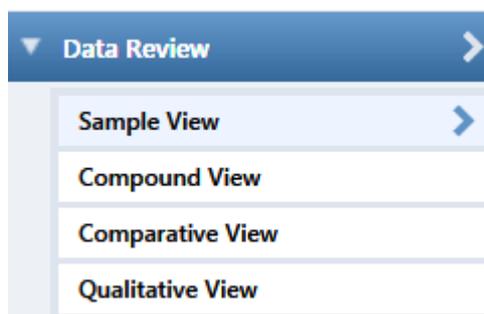


Analysis（分析）导航窗格打开。

2. 单击 **Data Review（数据查看）**。



Data Review（数据查看）导航窗口打开。



选择一个 Sample View（样品视图）、Compound View（化合物视图）、Comparative View（对比视图）或 Qualitative View（定性视图），分析由主方法生成的数据。

本部分包含以下主题：

- [Sample View（样品视图）](#)
- [Compound View（化合物视图）](#)
- [Comparative View（对比视图）](#)
- [Qualitative View（定性视图）](#)
- [所有 Data Review（数据查看）页面通用的功能](#)

## Sample View (样品视图)

Sample View (样品视图) 采用三个不同的窗格显示当前批次中的所有样品列表, 方法中所有的化合物结果以及当前所选样品中找到的所有化合物的峰图。

以下是默认的窗格及其位置:

Sample Peaks (样品峰) 窗格      Samples (样品) 窗格      Compound Results (化合物结果) 窗格

Samples					Compound Results		
Flags	Status	Sample Name	Sample Type	Flags	Compound	Compound Type	
	●	B_25557	Specimen		FENTHION-CE20	Target Compound	
	●	B_26154	Specimen		Sulfisomidine	Target Compound	

Sample Peaks

Peak Plot Size

FENTHION-CE20-R20-TL75-QED  
RT: 2.05  
AA: 67156904.79  
AH: 8297169.53  
SN: 128.06

Sulfisomidine  
RT: 2.74  
AA: 83969917.96  
AH: 13279603.06  
SN: 488.86

当从 Samples (样品) 窗格中选一个样品时, 相关的 Compound Results (化合物结果) 窗格标记出所选样品中有错误的的所有化合物。相关的 Sample Peaks (样品峰) 窗格显示所选样品中所有化合物的色谱图、保留时间、峰面积、峰高和信噪比。Sample Peaks (样品峰) 窗格高亮显示 Compound Results (化合物结果) 窗格中所选的化合物。

Sample View (样品视图) 包含以下特性:

- Samples (样品) 窗格
- Compound Results (化合物结果) 窗格
- Sample Peaks (样品峰) 窗格
- 警告标记
- 查看 Sample View (样品视图) 窗格

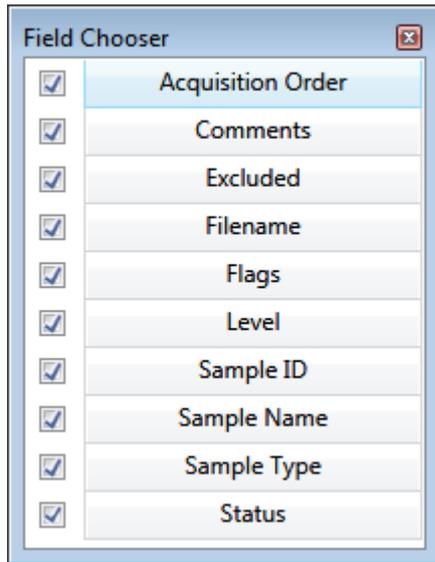
## Samples (样品) 窗格

使用 Sample View (样品视图) 上的 Samples (样品) 窗格选择一个特定样品。相关的 Compound Results (化合物结果) 窗格显示方法中的所有化合物，并标记所选样品中有错误的任何化合物。

### ❖ 若要隐藏或显示 Samples (样品) 窗格上的列

1. 点击结果表左上角处的 Field Chooser (域选择器) 图标，。

Field Chooser (域选择器) 显示 Samples (样品) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框，或者清除想要隐藏的每列的复选框。

该应用程序立即在 Samples (样品) 窗格上显示或隐藏该列。

3. 当修改完列显示以后，点击 ，关闭 Field Chooser (域选择器)。

图 107. Samples (样品) 窗格

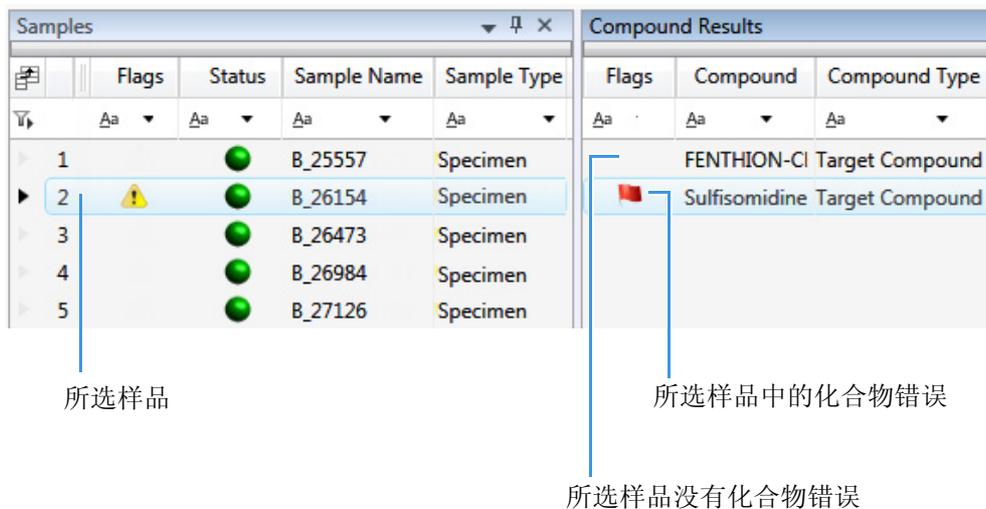


表 82. Samples (样品) 窗格列

列	描述
Flags (标记)	仅当样品内的化合物出错时显示警告标记。参阅第 422 页上的“警告标记”。
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。  样品正在采集中。
Sample Name (样品名称)	用户定义的用以识别样品的名称。
Sample Type (样品类型)	指定 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)、QC (质控标样)、Solvent (溶剂)、Calibrator (校正标样)、Hydrolysis (水解)、Unextracted (未提取) 或 Negative (阴性对照)。

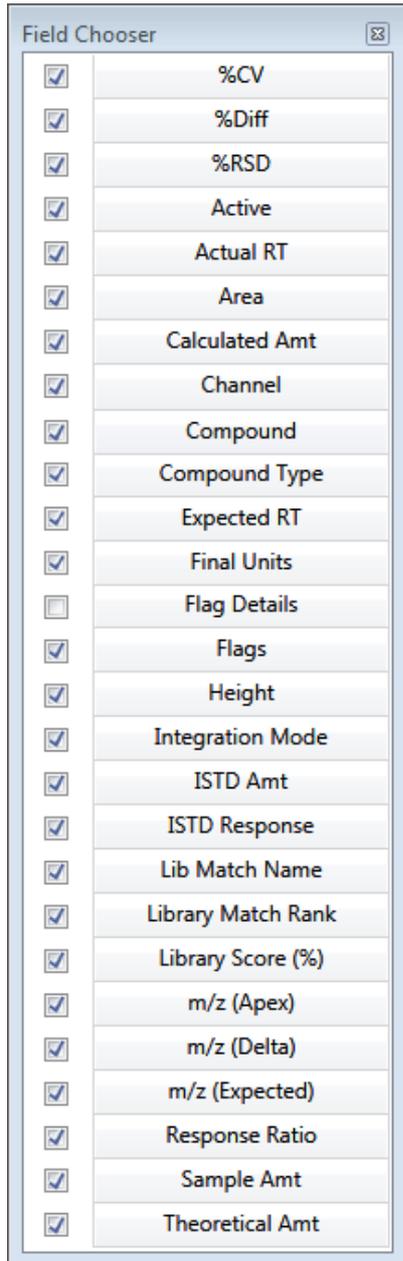
## Compound Results (化合物结果) 窗格

在 Sample View (样品视图) 的 Compound Results (化合物结果) 窗格上, 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。

### ❖ 若要隐藏或显示 Compound Results (化合物结果) 窗格上的列

1. 点击结果表左上角处的 Field Chooser (域选择器) 图标, 。

Field Chooser (域选择器) 显示 Compound Results (化合物结果) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框, 或者清除想要隐藏的每列的复选框。

该应用程序立即在 Compound Results (化合物结果) 窗格上显示或隐藏该列。

3. 当修改完列显示以后, 点击 , 关闭 Field Chooser (域选择器)。

图 108. Compound Results (化合物结果) 窗格

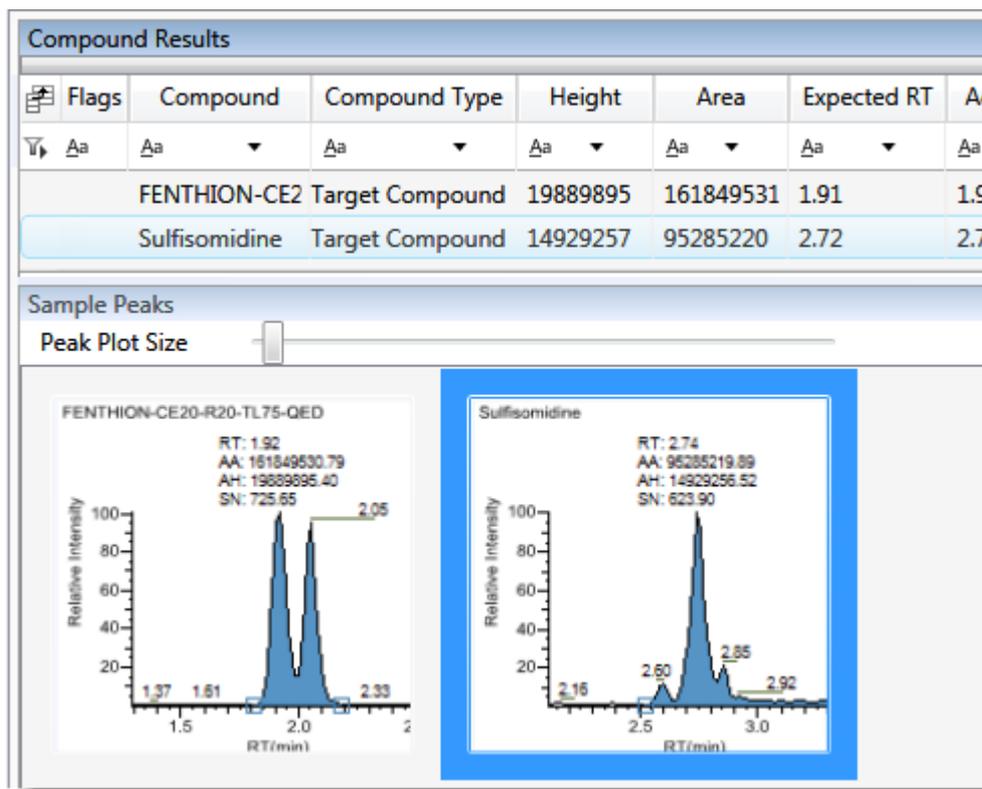


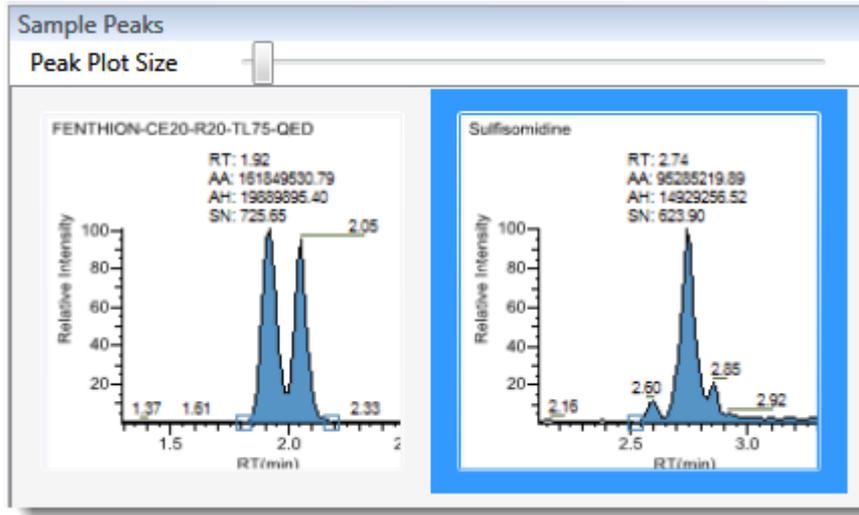
表 83. Compound Results (化合物结果) 窗格列

列	描述
Flags (标记)	当化合物出错时显示警告标记。参阅第 422 页上的“警告标记”。
Compound (化合物)	库中定义的化合物名称。
Compound Type (化合物类型)	指定的化合物类型: Target Compound (目标化合物) 或 Internal Standard (内标)。

结果列表中的其余部分与 Sample View (样品视图) 的 Compound Results (化合物结果) 窗格以及 Compound View (化合物视图) 和 Comparative View (对比视图) 的 Sample Results (样品结果) 窗格相同。参阅第 461 页上的“通用列参数”。

## Sample Peaks (样品峰) 窗格

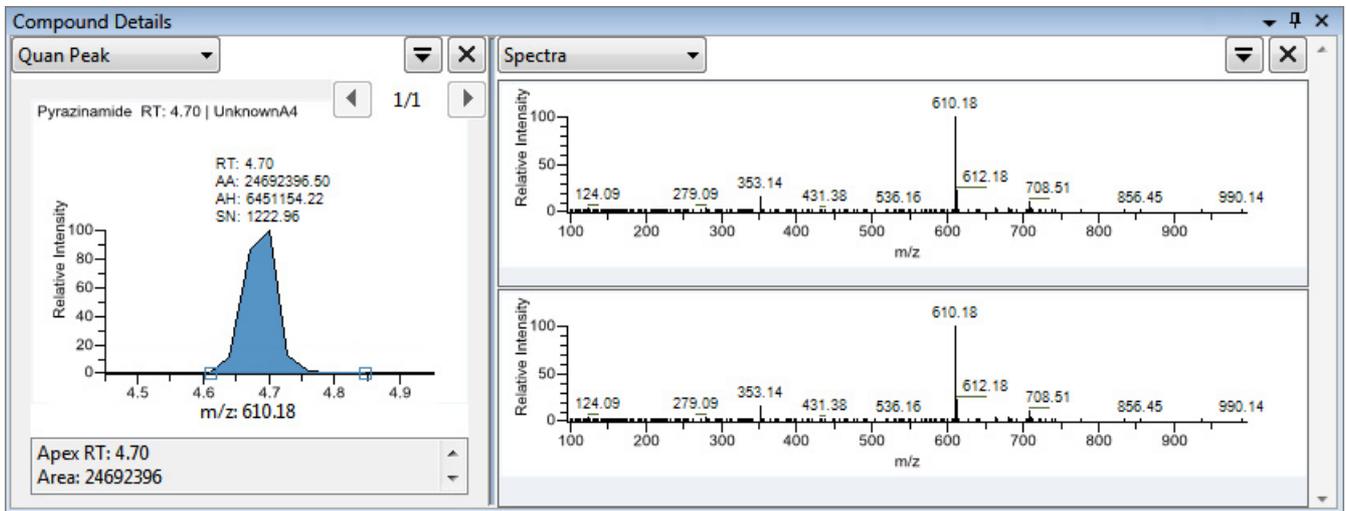
Sample View (样品视图) 上的 Sample Peaks (样品峰) 窗格显示 Compound Results (化合物结果) 窗格中所有化合物的色谱图、保留时间、峰面积、峰高和信噪比。该应用程序高亮显示 Compound Results (化合物结果) 窗格中目前所选化合物的色谱图。



### ❖ 若要显示某个化合物的详细信息

双击 Sample Peaks (样品峰) 窗格内的色谱图。

Compound Details (化合物详细信息) 窗格打开。



Compound Details (化合物详细信息) 窗格显示有关化合物的定量峰、校正曲线、确认离子、内标化合物、参考峰、离子重叠和质谱图的相关信息。

有关 Compound Details (化合物详细信息) 窗格上可用信息的详细描述, 参阅第 467 页上的“Compound Details (化合物详细信息)”。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用定量方法的 Data Review (数据查看)

### 警告标记

在 Sample View (样品视图) 上, 该应用程序可以在 Samples (样品) 窗格和 Compound Results (化合物结果) 窗格上显示警告标记。

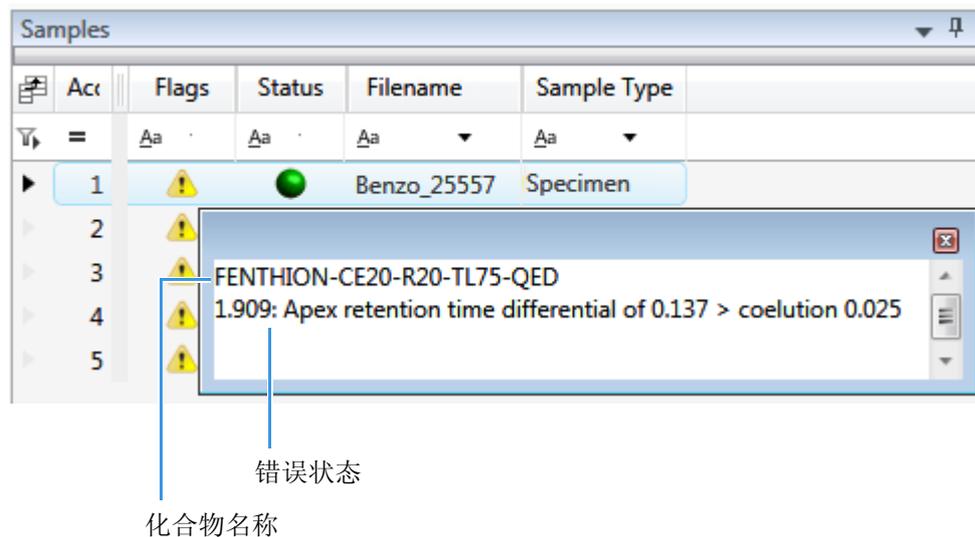
本部分包含以下主题:

- Samples (样品) 窗格上的标记
- Compound Results (化合物结果) 窗格上的标记
- Sample Peaks (样品峰) 窗格上的错误指示

#### Samples (样品) 窗格上的标记

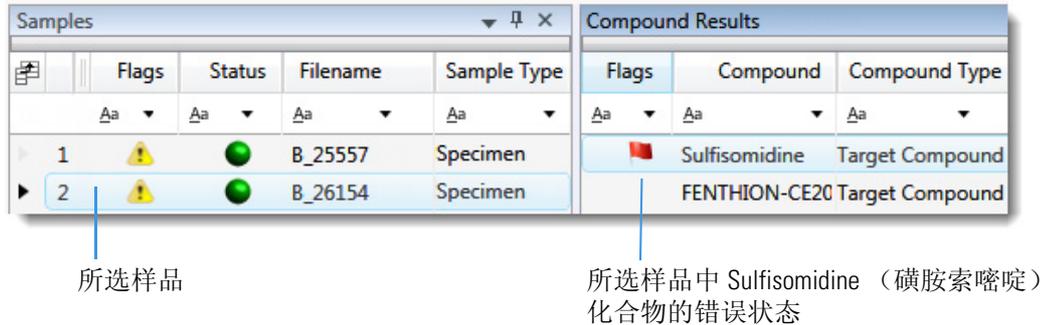
若样品中的任意化合物不符合方法标准, 则 Samples (样品) 窗格上的 Flags (标记) 列显示一个警告标记。

点击警告标记的图标, , 显示详细信息。弹出框中的信息显示出了错的化合物以及确切的错误状态。

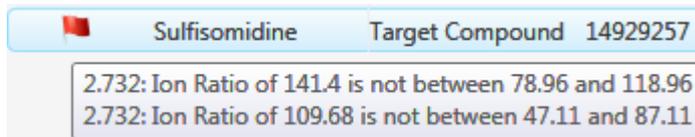


## Compound Results (化合物结果) 窗格上的标记

若所选样品中的任意化合物不符合方法标准, 则 Compound Results (化合物结果) 窗格上的 Flags (标记) 列显示一个警告标记。



将光标停留在标记图标的上方, , 显示所选样品中该化合物的详细信息。



Compound Results (化合物结果) 窗格上的标记会在以下条件下显示:

-  不符合所有值 (或通过任意值激活) 的化合物以红色标记显示在方法中设置。参阅第 178 页上的“编辑 QAQC (质保质控) 页面”。
-  超出指定离子比率范围的化合物以红色标记显示。参阅离子比率未通过标记。
-  低于方法中指定 LOQ (定量限) 和 LOD (检测限) 的化合物, 或介于 LOD (检测限) 和 LOQ (定量限) 之间的化合物以橙色标记显示。有关这些限制值的描述, 参阅第 179 页上的“Limits (限制)”。
-  高于方法中指定的 LOR (报告限) 值的“已发现”化合物以绿色标记显示。有关 LOR (报告限) 界限值的说明, 参阅第 179 页上的“Limits (限制)”。
-  等于或低于方法中指定的 LOR (报告限) 值的化合物以黄色标记显示。
-  对无法在 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 样品类型中找到的化合物以黄色标记显示。

Compound Results (化合物结果) 窗格不标记那些无法在 Specimen (定量样品) 样品类型中找到的化合物。

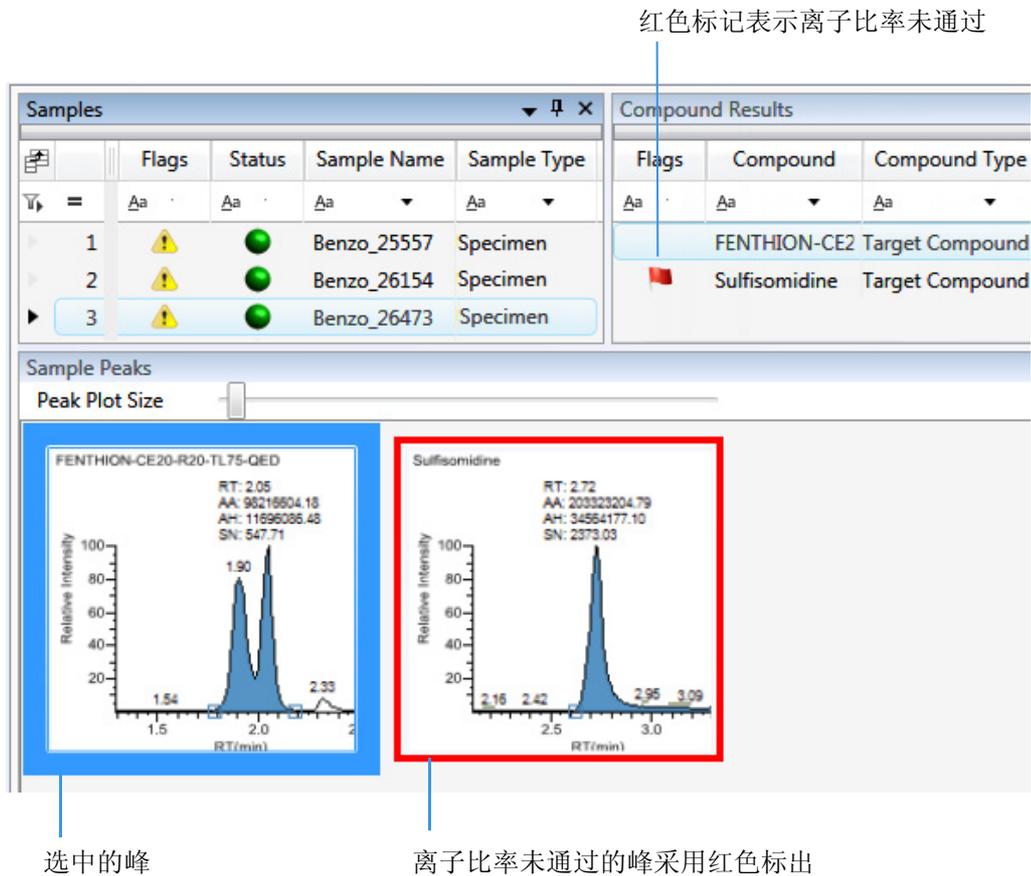
- 无错误或未选择报告选项的化合物不进行标记。

**注释** 化合物为内标物时, 这些标记标准不适用于 Negative (阴性对照) 样品类型。

### Sample Peaks (样品峰) 窗格上的错误指示

在 Sample Peaks (样品峰) 窗格上, 采用相关错误标记的颜色显示峰图。在以下示例中, FENTHION (倍硫磷) 峰图以蓝色高亮显示, 这表示 FENTHION (倍硫磷) 是已选化合物, Sulfisomidine (磺胺索嘧啶) 峰图采用红色标出, 这表示所选样品中的 Sulfisomidine (磺胺索嘧啶) 化合物超出了指定的离子比率范围。

图 109. 离子比率未通过标记



## 查看 Sample View (样品视图) 窗格

Sample View (样品视图) 视图采用多个窗格显示数据: Sample Results (样品结果)、Compound Results (化合物结果)、Sample Peaks (样品峰) 和 Compound Details (化合物详细信息)。可以显示、隐藏或去除任意这些窗格。

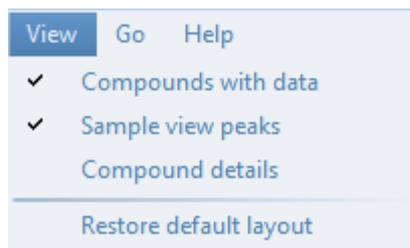
### ❖ 如果显示或隐藏 Sample View (样品视图) 窗格

从 View (视图) 菜单的以下选项中选择:

- **Compounds with Data (含数据的化合物):** 显示或隐藏 Compound Results (化合物结果) 窗格。
- **Sample View Peaks (样品视图峰):** 显示或隐藏 Sample Peaks (样品峰) 窗格。
- **Compound Details (化合物详细信息):** 显示或隐藏 Compound Details (化合物详细信息) 窗格。

**注释** Sample View (样品视图) 视图要求含 Sample Results (样品结果) 窗格。用户不能隐藏 Sample Results (样品结果) 窗格。

已显示的窗格均以复选标记来表示。



## Data Review (数据查看) 窗格的显示特性

以下程序适用于所有 Data Review (数据查看) 显示。

- 若要固定窗格
- 若要使窗格悬浮或固定
- 若要将窗格从固定窗格更改为选项卡式窗格
- 若要还原默认布局

### ❖ 若要固定窗格

1. 抓住窗格的标题栏，开始拖动窗格。

应用程序显示固定箭头。



2. 将窗格拖在其中一个箭头上。

将光标悬浮在固定箭头上，应用程序将会显示一块蓝色的区域以表示箭头将放置窗格的位置。

3. 将窗格放在其中一个箭头上。

### ❖ 若要使窗格悬浮或固定

执行下列操作之一：

- 若要将一个固定窗格设置成悬浮，右击窗格的标题栏并选择 **Floating (悬浮)**。

将窗格设置成悬浮状态时，用户无法使用固定箭头将其固定或将其设置成选项卡式窗格。

- 若要将一个悬浮窗格设置成固定状态，右击窗格的标题栏并选择 **Dockable (固定)**。

❖ 若要将窗格从固定窗格更改为选项卡式窗格

1. 抓住窗格的标题栏，开始拖动窗格。

应用程序显示固定箭头。



2. 将光标悬浮在固定箭头的中心位置以显示一个蓝色区域来表示选项卡窗格的位置。
3. 将窗格放在固定箭头的中心位置。

**注释** 若要将一个悬浮窗格更改为选项卡式窗格，用户必须首先将该窗格更改为固定窗格，然后再将其更改为选项卡式窗格。

❖ 若要还原默认布局

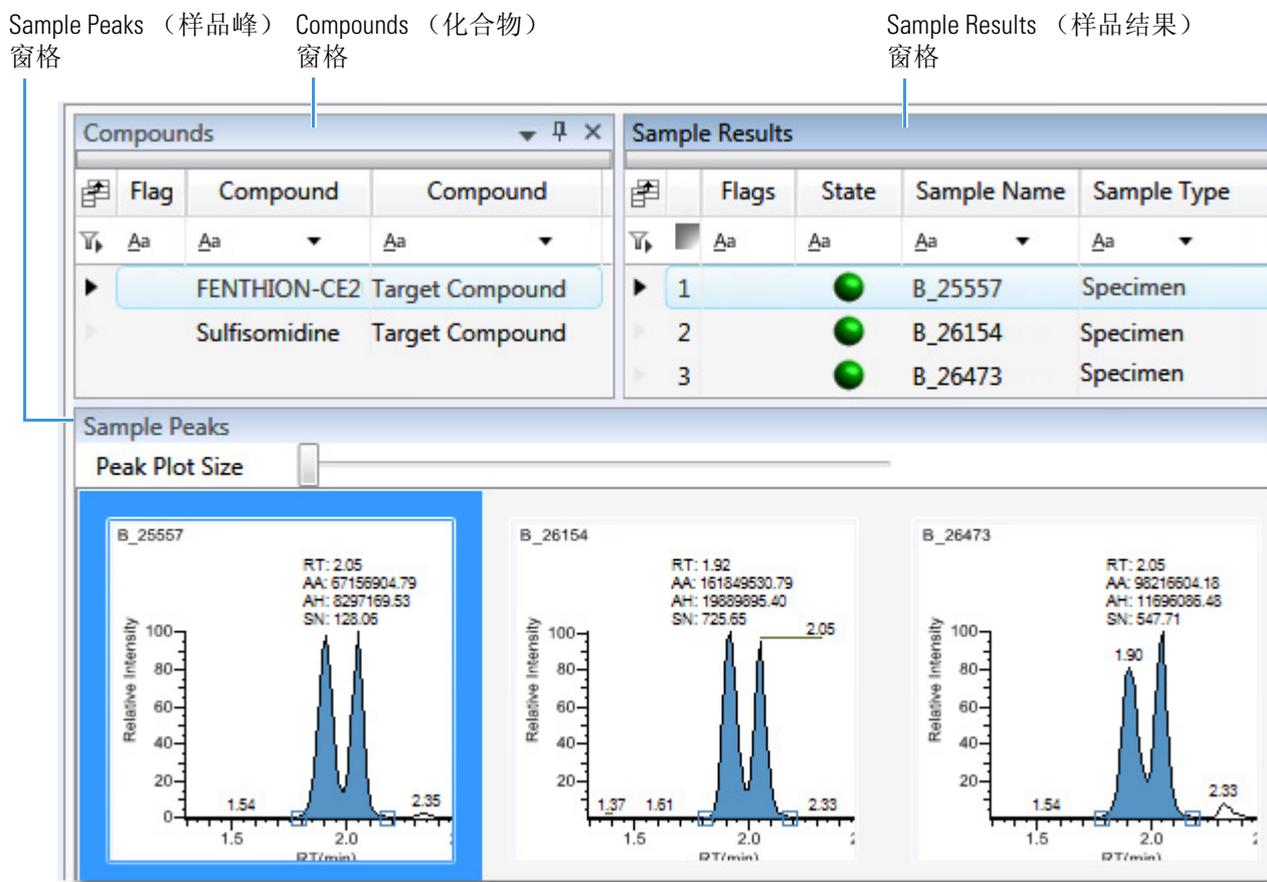
选择 **View (视图) > Restore Default Layout (恢复默认布局)**。

Sample View (样品视图)、Compound View (化合物视图) 和 Qualitative View (定性视图) 均有显示哪些窗格、在哪里显示的默认值。

## Compound View (化合物视图)

Compound View (化合物视图) 采用三个不同的窗格来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峰图。

以下是默认的窗格及其位置:



当从 **Compounds (化合物)** 窗格中选中的一个样品时, **Sample Results (样品结果)** 窗格标记出所选化合物有错误的所有样品。 **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。

Compound View (化合物视图) 包含以下特性:

- **Compounds (化合物)** 窗格
- **Sample Results (样品结果)** 窗格
- **Sample Peaks (样品峰)** 窗格
- 警告标记

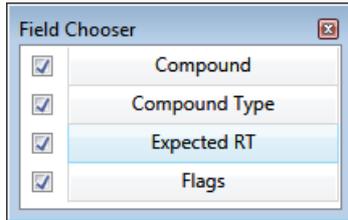
## Compounds (化合物) 窗格

使用 Compound View (化合物视图) 上的 Compounds (化合物) 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。

### ❖ 若要隐藏或显示 Compounds (化合物) 窗格上的列

1. 点击结果表左上角处的 Field Chooser (域选择器) 图标, 。

Field Chooser (域选择器) 显示 Compounds (化合物) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框, 或者清除想要隐藏的每列的复选框。  
该应用程序立即在 Compounds (化合物) 窗格上显示或隐藏该列。
3. 当修改完列显示以后, 点击 , 关闭 Field Chooser (域选择器)。

图 110. Compounds (化合物) 窗格

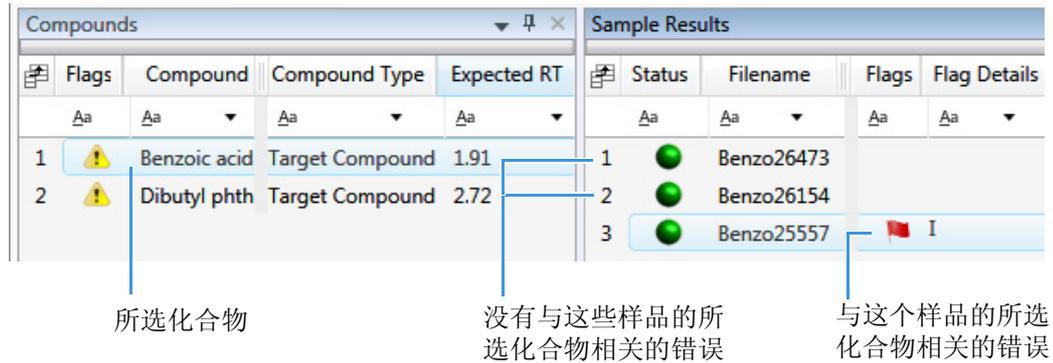


表 84. Compounds (化合物) 窗格列

列	描述
Flags (标记)	当任意样品中的化合物出现错误的时候显示警告标记。
Compound (化合物)	库中定义的化合物名称。若方法模板中没有选择库, 则化合物名称定义为 <i>peak@RT</i> 。
Compound Type (化合物类型)	指定的化合物类型: Target Compound (目标化合物) 或 Internal Standard (内标化合物)。
Expected RT (预期保留时间)	化合物的预期保留时间。

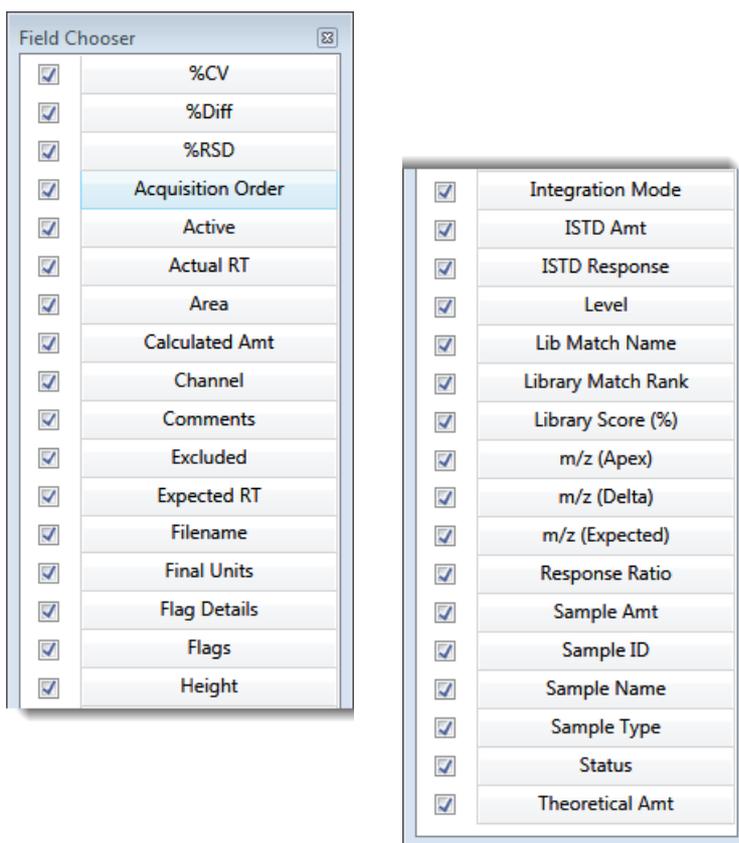
## Sample Results (样品结果) 窗格

在 Compound View (化合物视图) 的 Sample Results (样品结果) 窗格上, 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。参阅 [Sample Results \(样品结果\) 窗格](#)。

### ❖ 若要隐藏或显示 Sample Results (样品结果) 窗格上的列

1. 点击结果表左上角处的 **Field Chooser (域选择器)** 图标, 。

Field Chooser (域选择器) 显示 Sample Results (样品结果) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框, 或者清除想要隐藏的每列的复选框。  
该应用程序立即在 Sample Results (样品结果) 窗格上显示或隐藏该列。
3. 当修改完列显示以后, 点击 , 关闭 Field Chooser (域选择器)。

图 111. Sample Results (样品结果) 窗格

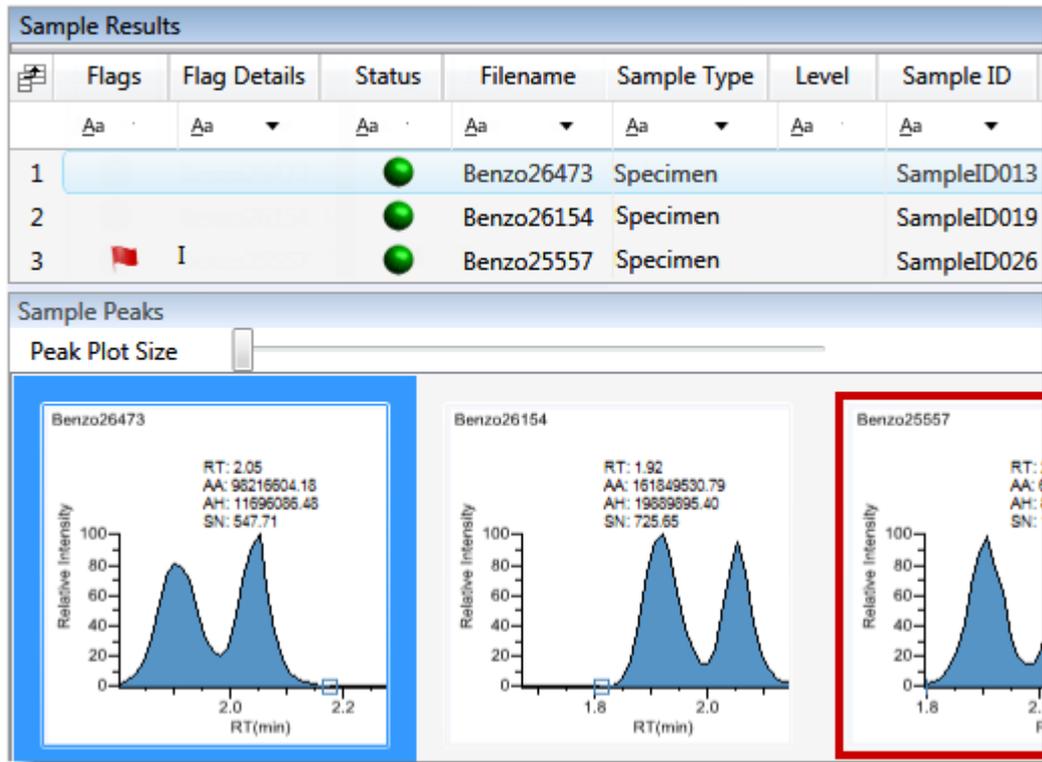
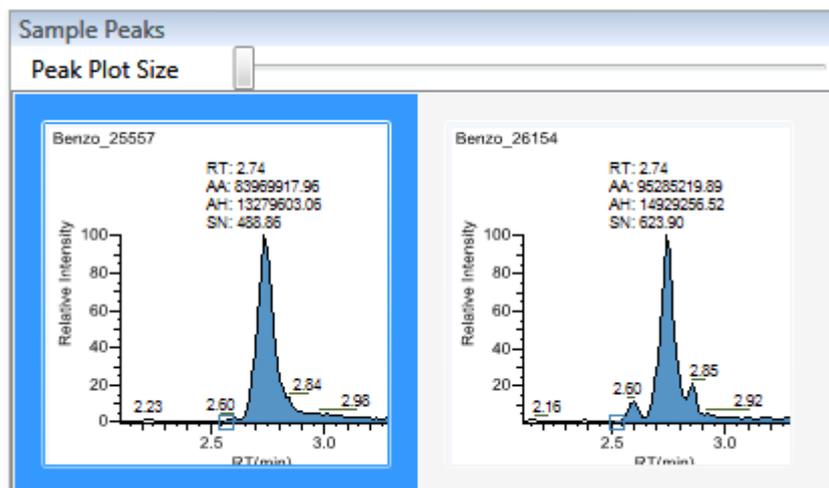


表 85. Sample Results (样品结果) 窗格列

列	描述
Acquisition Order (采集顺序)	按顺序编号样品。
Flags (标记)	仅当样品内的化合物出错时显示警告标记。
Flag Details (标记详细信息)	表示错误类型： <ul style="list-style-type: none"> <li>• I: 确认离子共洗脱未通过或离子比率未通过</li> <li>• A: 量错误</li> <li>• B: 基质空白错误</li> <li>• H: 未发现峰</li> </ul>
Status (状态)	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 样品未采集。</li> <li>● 样品已采集但未处理。</li> <li>● 样品已采集并处理。</li> <li>● 样品正在采集中。</li> </ul>
Filename (文件名)	用户定义的用以识别样品的名称。
Sample Type (样品类型)	指定 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)、QC (质控标样)、Solvent (溶剂)、Calibrator (校正标样)、Hydrolysis (水解)、Unextracted (未提取) 或 Negative (阴性对照)。
Sample Results (样品结果) 窗格列中的其余部分与 Sample View (样品视图) 和 Compound View (化合物视图) 中的显示相同。参阅第 461 页上的“通用列参数”。	

## Sample Peaks (样品峰) 窗格

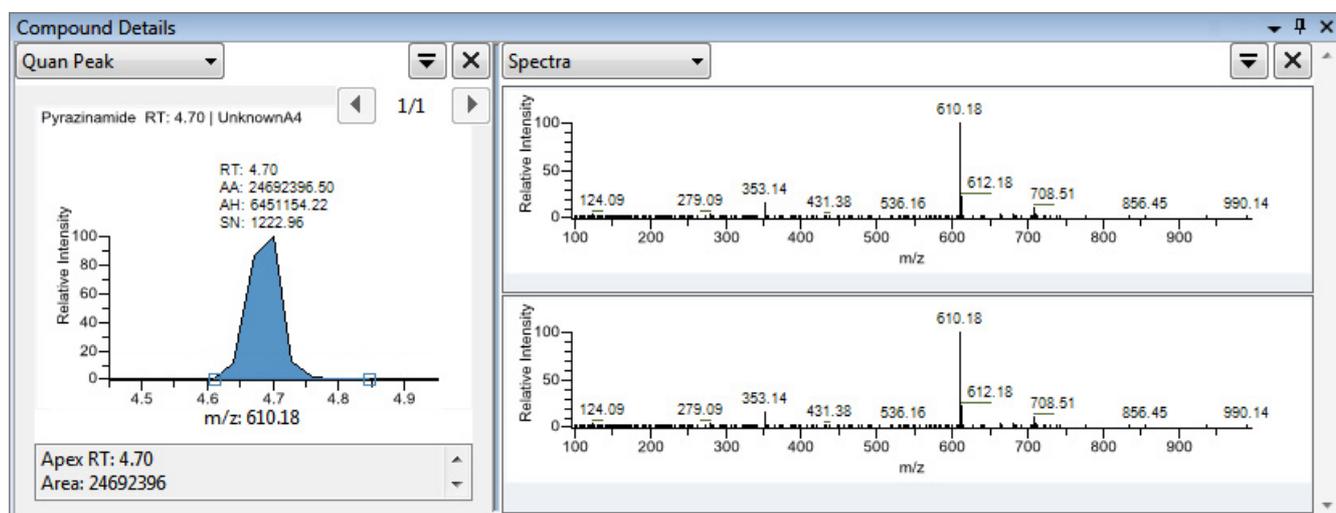
Compound View (化合物视图) 上的 Sample Peaks (样品峰) 窗格显示批次中每个样品已选化合物的色谱图、保留时间、峰面积、峰高和信噪比。该应用程序高亮显示 Sample Results (样品结果) 窗格中目前所选样品的化合物色谱图。



### ❖ 若要显示某个化合物的详细信息

1. 双击 Sample Peaks (样品峰) 窗格内的色谱图。

Compound Details (化合物详细信息) 对话框打开。



Compound Details (化合物详细信息) 对话框显示有关化合物的定量峰、校正曲线、确认离子、内标化合物、参考峰、离子重叠和质谱图的相关信息。

有关 Compound Details (化合物详细信息) 对话框上可用信息的详细描述, 参阅第 467 页上的“Compound Details (化合物详细信息)”。

## 警告标记

在 Compound View (化合物视图) 上, 该应用程序可以在 Compounds (化合物) 窗格和 Sample Results (样品结果) 窗格上显示警告标记。

本部分包含以下主题:

- Compounds (化合物) 窗格上的标记
- Sample Results (样品结果) 窗格上的标记
- Sample Peaks (样品峰) 窗格上的错误指示

### Compounds (化合物) 窗格上的标记

若任意样品中的化合物不符合方法标准, 则 Compounds (化合物) 窗格上的 Flags (标记) 列显示一个警告标记。

Compounds			Sample Results				
Flags	Compound	Expected RT	A	Flags	Flag Details	Status	Filename
⚠	FENTHION-CE20-R20	2.08	1	🟢		🟢	B_25557
⚠	Sulfisomidine	1.92	2	🔴	I	🟢	B_26154
			3	🟠	H	🟢	B_26473

已选中的 Sulfisomidine (磺胺索嘧啉) 化合物

每个样品中 Sulfisomidine (磺胺索嘧啉) 化合物的标记

点击警告标记的图标, , 显示详细信息。弹出框中的信息显示样品中出错化合物的位置以及确切的错误状态。

Compounds		
Flags	Compound	
⚠	FENTHION-CE20-R20-TL75-QED	
⚠		<p>Benzo_25557</p> <p>1.909: Apex retention time differential of 0.137 &gt; coelution 0.025</p>

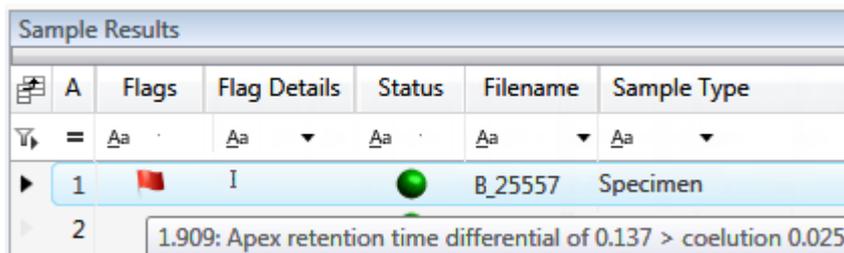
样品名称

错误状态

## Sample Results (样品结果) 窗格上的标记

若样品中的所选化合物不符合方法标准, 则 Sample Results (样品结果) 窗格上的 Flags (标记) 列显示一个标记。

将光标停留在标记图标的上方, , 显示样品中所选化合物的详细信息。



A	Flags	Flag Details	Status	Filename	Sample Type
1		I		B_25557	Specimen
2	1.909: Apex retention time differential of 0.137 > coelution 0.025				

Sample Results (样品结果) 窗格上的标记会在以下条件下显示:

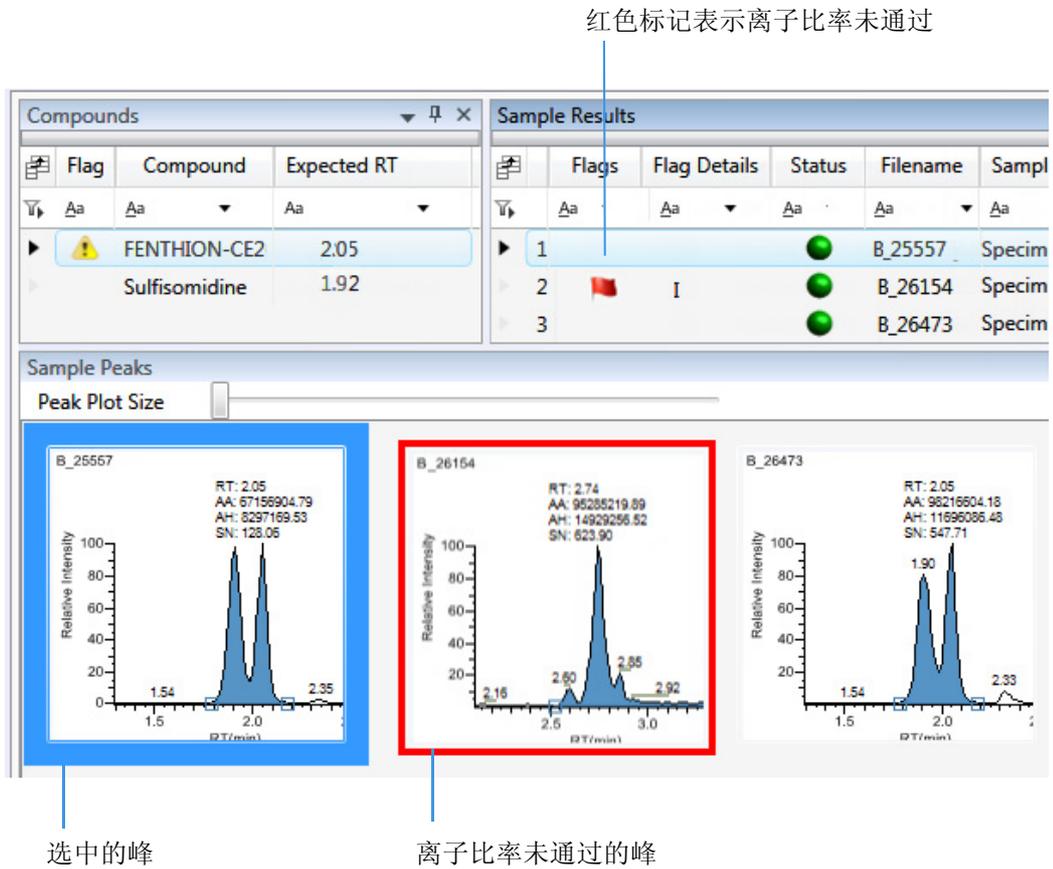
标记	描述
	高于方法中指定 LOR (报告限) 值的化合物以绿色标记表示。
	不符合方法中设置的所有值 (或通过任意值激活) 的化合物以红色标记表示。参阅第 178 页上的“编辑 QAQC (质保质控) 页面”。
	超出指定离子比率范围的化合物以红色标记表示。参阅离子比率未通过标记。
	对无法在 Calibrator (校正标样) 或 QC (质控标样) 样品类型中找到的化合物以橙色标记显示。  低于方法中指定的 LOQ (定量限) 或 LOD (检测限), 或者介于 LOD (检测限) 和 LOQ (定量限) 值之间的为“未找到”的化合物。Sample Results (样品结果) 窗格不标记那些无法在 Specimen (定量样品) 样品类型中找到的化合物。
	无错误或未选择报告选项的化合物不进行标记。

**注释** 化合物为内标物时, 这些标记标准不适用于 Negative (阴性对照) 样品类型。

### Sample Peaks (样品峰) 窗格上的错误指示

在 Sample Peaks (样品峰) 窗格上, 采用相关错误标记的颜色显示峰图。在以下示例中, 峰图以蓝色高亮显示, 这表示 Benzo\_25557 是已选化合物, 红色标出的表示所选样品中的 FENTHION (倍硫磷) 化合物超出了指定的离子比率范围。

图 112. 离子比率未通过标记



### 查看 Compound View (化合物视图) 窗格

Compound View (化合物视图) 视图采用多个窗格显示数据: Compounds (化合物)、Sample Results (样品结果)、Sample Peaks (样品峰) 和 Compound Details (化合物详细信息)。可以显示、隐藏或删除任意这些窗格。

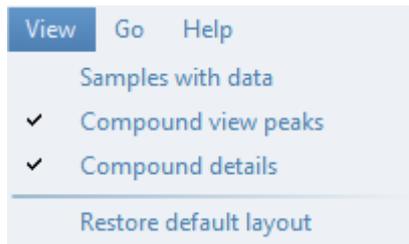
#### ❖ 若要显示或隐藏 Compound View (化合物视图) 窗格

从 View (视图) 菜单的以下选项中选择:

- **Samples with Data (含数据的样品)**: 显示或隐藏 Sample Results (样品结果) 窗格。
- **Compound View Peaks (化合物视图峰)**: 显示或隐藏 Sample Peaks (样品峰) 窗格。
- **Compound Details (化合物详细信息)**: 显示或隐藏 Compound Details (化合物详细信息) 窗格。

**注释** Compound View (化合物视图) 视图要求含 Compounds (化合物) 窗格。用户不能隐藏 Compounds (化合物) 窗格。

已显示的窗格均以复选标记来表示。

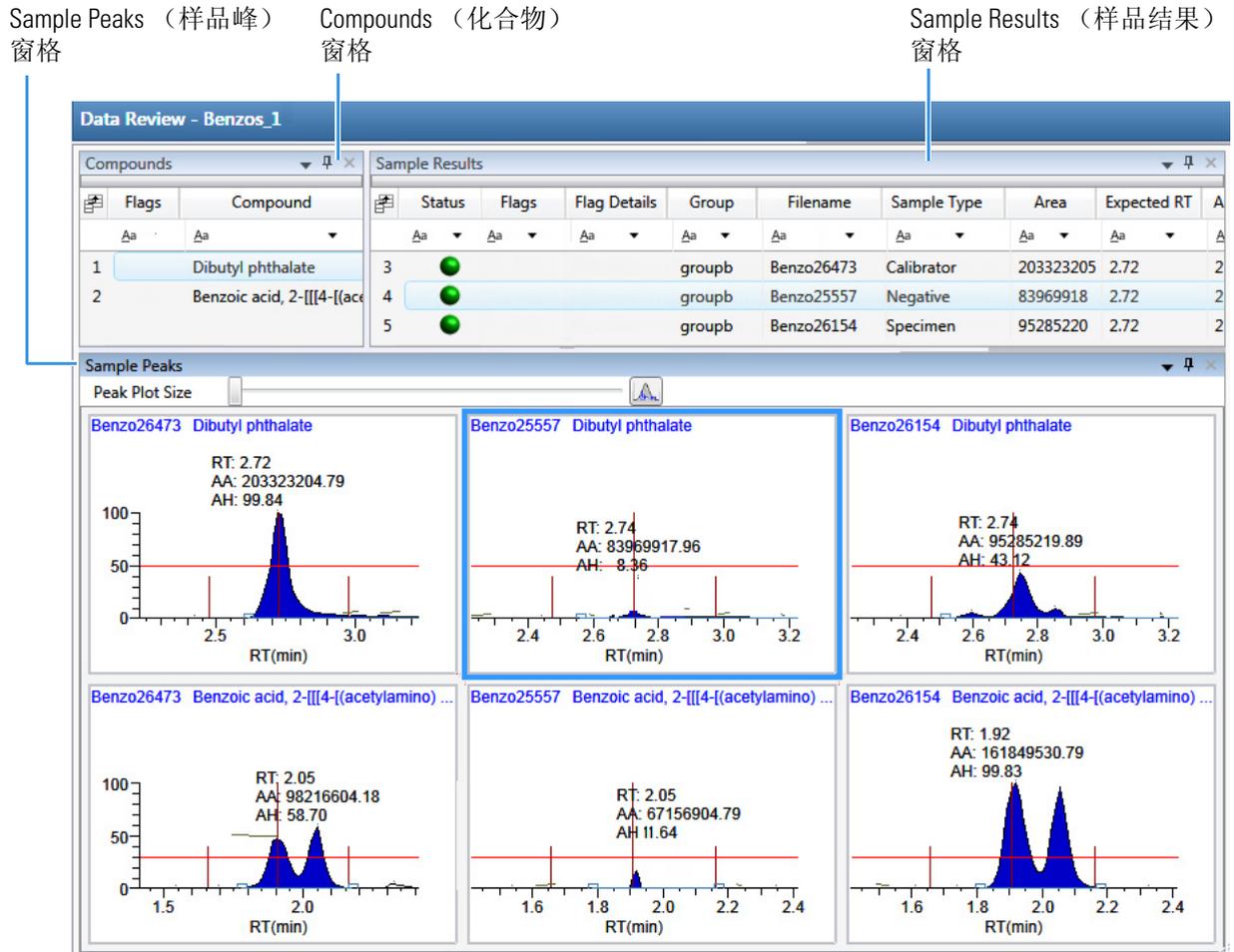


有关创建固定、悬浮或选项卡式窗格的步骤, 参阅第 426 页上的“Data Review (数据查看) 窗格的显示特性”。

## Comparative View (对比视图)

Comparative View (对比视图) 采用三个窗格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、样品中找到的所有化合物的峰图以及水平阈值线。

以下是默认的窗格及其位置：



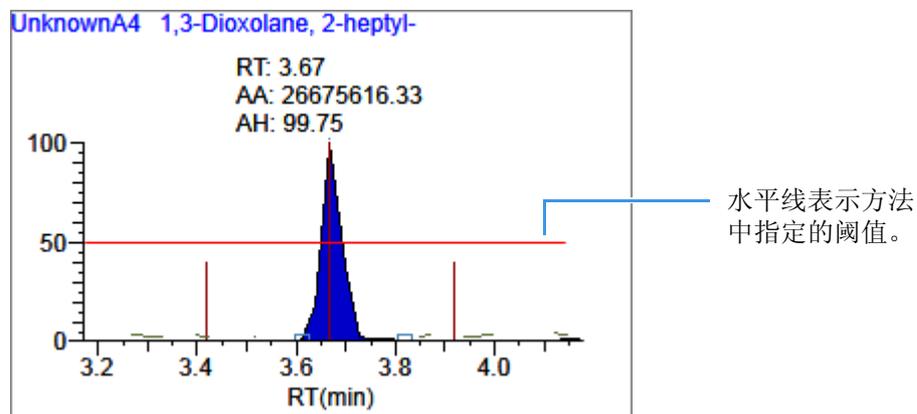
Comparative View (对比视图) 中的窗格和附加 Group (组) 列的 Compound View (化合物视图) 中的窗格一样。该列识别出某个样品所属的组，如 Batch View (批次视图) 中指定的一样。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用定量方法的 Data Review (数据查看)

以下因素共同决定了显示在 Comparative View (对比视图) 样品峰图上的阈值线:

- 用户在方法中指定的阈值方法和量
- 在 Sample (样品) 页面上创建的组
- 用户在 Threshold Samples (阈值样品) 页面上选择的阈值样品



本部分包含以下主题:

- 配置 Sample Peaks (样品峰) 显示设置
- 手动积分峰

有关指定用于创建阈值线方法的相关信息, 参阅第 185 页上的“Threshold (阈值)”。

有关创建组的信息, 参阅第 365 页上的“Groups (组)”。

有关指定阈值样品的信息, 参阅第 401 页上的“Threshold Samples (阈值样品) 页面”。

## 配置 Sample Peaks (样品峰) 显示设置

Comparative View (对比视图) 上的 Sample Peaks (样品峰) 窗格为每个化合物显示一行, 为每个样品显示一列。当用户选择的任意样品属于一个组时, Sample Peaks (样品峰) 窗格显示该组中的所有样品。

有关创建组的信息, 参阅第 365 页上的 “Groups (组)”。

### ❖ 若要更改 Sample Peaks (样品峰) 窗格显示

1. 从 View (视图) 菜单中选择 **Chromatogram Pane Settings (色谱图窗格设置)**。

Chromatogram Plot Settings (色谱图设置) 对话框打开。参阅第 442 页上的 “Chromatogram Plot Settings (色谱图设置) 对话框”。

2. 若要更改行数或列数以适应 Sample Peaks (样品峰) 窗格, 在 Number of Rows (行数) 或 Number of Columns (列数) 框中输入新值。

这些值不会更改 Sample Peaks (样品峰) 窗格中可用的行数 (化合物) 和列数 (样品)。这些值决定用户要在视图中一次显示的行数和列数。默认值是三行和三列。

在以下示例中, Number of Rows (行数) 和 Number of Columns (列数) 均设为 1 (行数等于 1, 列数等于 1), Number of Rows 和 Number of Columns 均设为 4 (行数等于 4, 列数等于 4)。

图 113. 行数等于 1, 列数等于 1

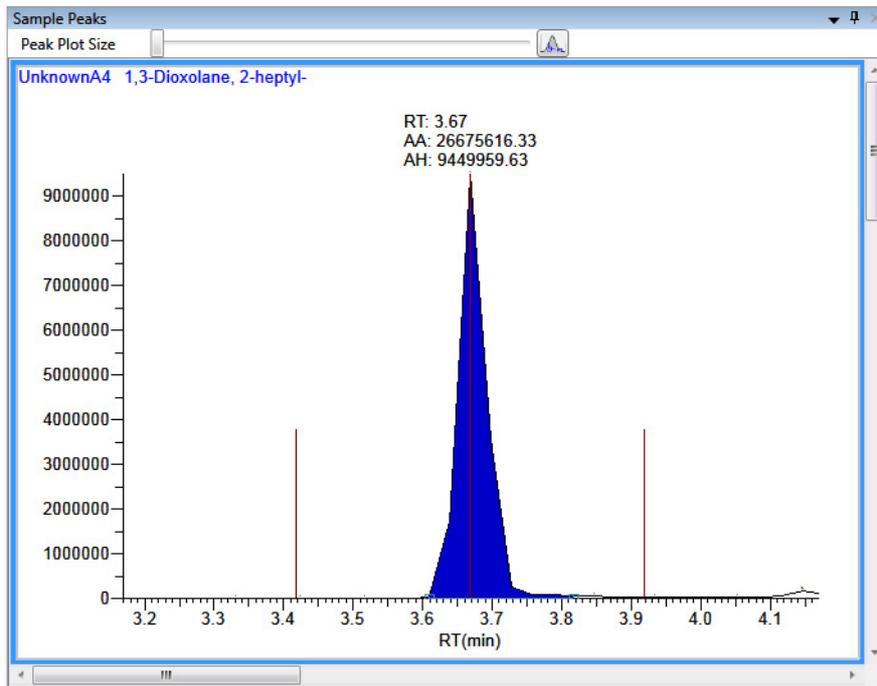
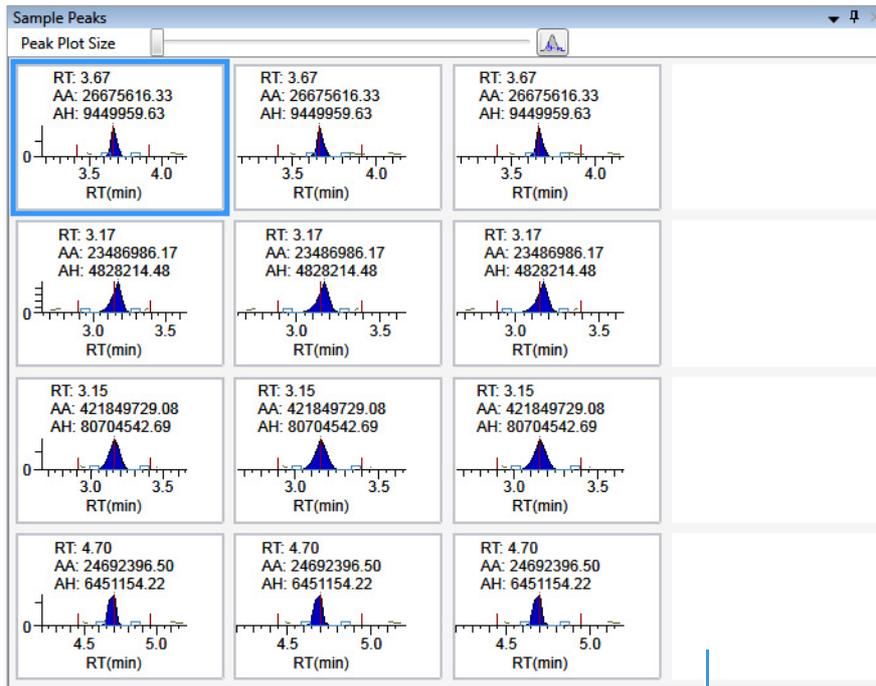


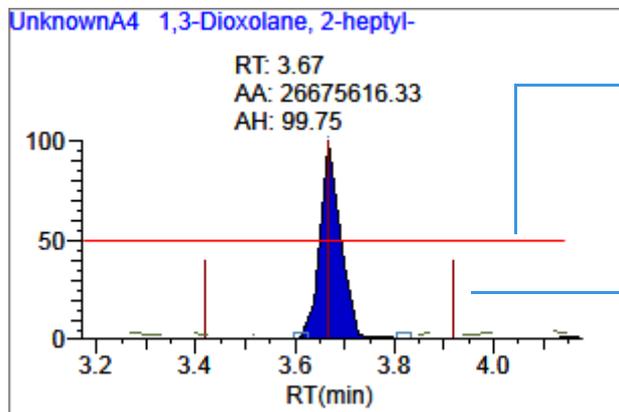
图 114. 行数等于 4, 列数等于 4



因为只有三个样品, 该列为空白。

3. 若要更改  $y$ -轴标尺的显示类型, 选择以下其一:

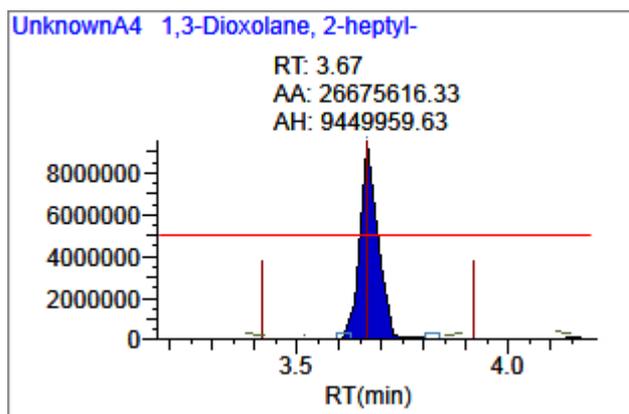
- **Relative (相对)**:  $y$ -轴的显示尺寸为 0 到 100。



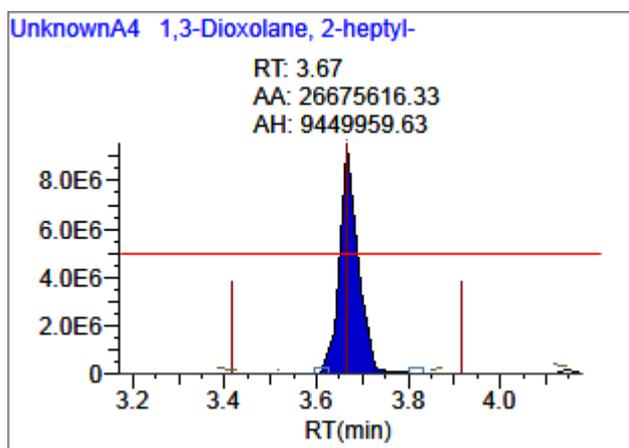
水平线表示方法中指定的阈值。

垂直线表示方法中指定的预期保留时间和窗口。

- **Absolute (绝对)**:  $y$ -轴的显示标尺为 0 至组中最高峰的实际值。



- **Label in Scientific Notation (采用科学计数法标注)**:  $y$ -轴标尺以科学计数法显示。



**注释** Sample Peaks (样品峰) 窗格仅显示每行第一个色谱图上的  $y$  轴。标尺的界限值由组中的最大强度峰决定。

4. 指定要在样品峰图上显示哪些标签。

有关所有可用峰图标签的示例, 参阅 [Peak Plot Labels \(峰图标注\)](#)。

## Chromatogram Plot Settings (色谱图设置) 对话框

通过 Chromatogram Plot Settings (色谱图设置) 对话框更改 Sample Peaks (样品峰) 窗格的显示。

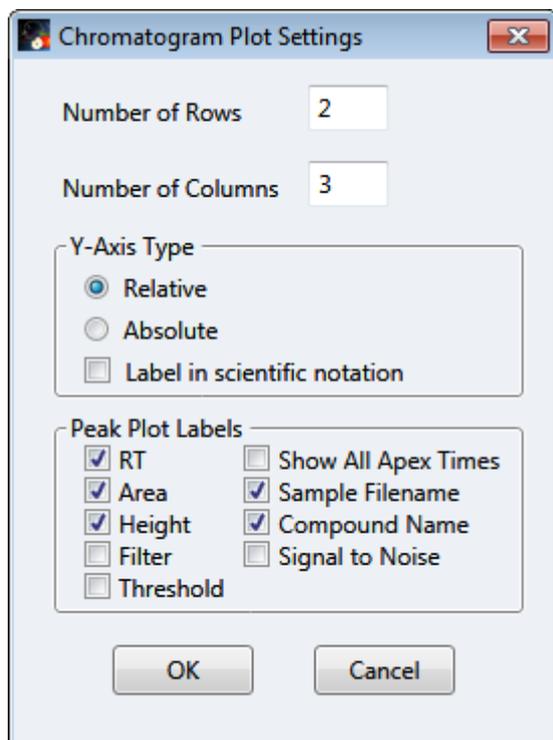


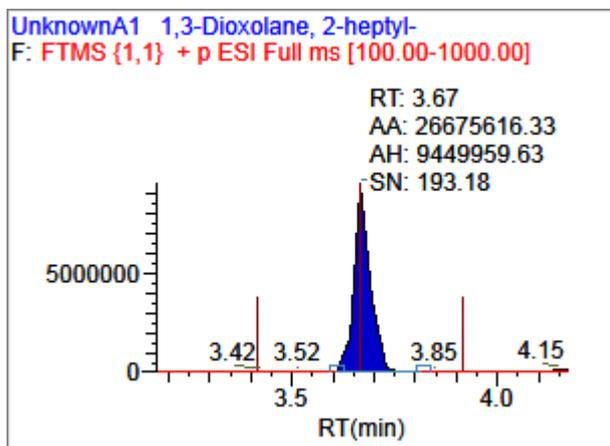
表 86. Chromatogram Plot Settings (色谱图设置) 对话框 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
Number of Rows (行数)	指定在 Sample Peaks (样品峰) 窗格上显示的行数。当 Number of Rows (行数) 等于 1 时, 该应用程序调整所有色谱图的高度以达到 Sample Peaks (样品峰) 窗格的 Y 轴尺寸。  默认: 3
Number of Columns (列数)	指定在 Sample Peaks (样品峰) 窗格上显示的列数。当 Number of Columns (列数) 等于 1 时, 该应用程序调整所有色谱图的高度以达到 Sample Peaks (样品峰) 窗格的 X 轴尺寸。  默认: 3

表 86. Chromatogram Plot Settings (色谱图设置) 对话框 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Y-Axis Type (Y-轴类型)	将 y-轴标尺显示为 Relative (相对, 与最大强度峰相比)、Absolute (绝对) 或以科学计数法表示。
Peak Plot Labels (峰图标注)	<p>显示或隐藏以下峰标注:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• RT (保留时间)</li> <li>• Area (峰面积)</li> <li>• Height (峰高)</li> <li>• Filter (过滤器)</li> <li>• Threshold (阈值)</li> <li>• Show All Apex Times (显示所有峰尖时间)</li> <li>• Sample Filename (样品文件名)</li> <li>• Compound Name (化合物名称)</li> <li>• Signal to Noise (信噪比)</li> </ul>

带所有峰标签显示的示例:

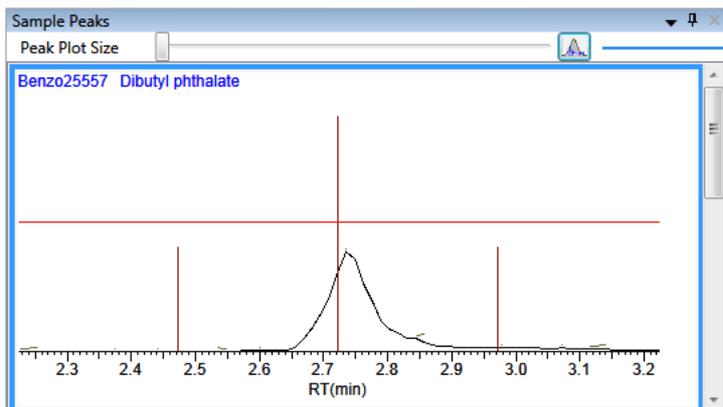


## 手动积分峰

使用手动积分功能来手动添加峰。仅当应用程序无法识别某个峰时，可以在色谱图中手动添加峰。

### ❖ 若要手动积分峰

1. 在 Sample Peaks (样品峰) 图中，点击 **Manual Integration (手动积分)** 图标。



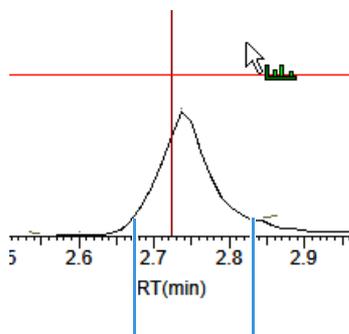
光标变成如下显示：



2. 若要对峰进行积分，执行以下操作：
  - a. 拖住光标选定新峰起始和结束时的基线点。

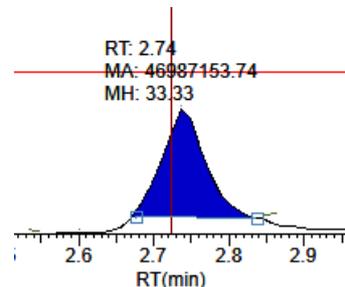
**注释** 必须在  $x$ -轴和  $y$ -轴的内部拖拽光标。

- b. 点击峰图的外部以刷新显示。



点击第一个基线点，然后拖拽至第二个基线点。

点击峰图的外部以刷新视图。



应用程序对该峰进行识别并在标签中显示手动积分结果。

3. 若要放大某一区域，执行以下操作：

- a. 在  $x$ -轴下方或者  $y$ -轴的左侧拖动光标。

峰图放大至所描述的 X 或 Y 轴的尺寸，以适应整个窗格。应用程序将行中的所有化合物放大至同样的尺寸。

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

## 6 使用 Analysis（分析）模式

使用定量方法的 Data Review（数据查看）

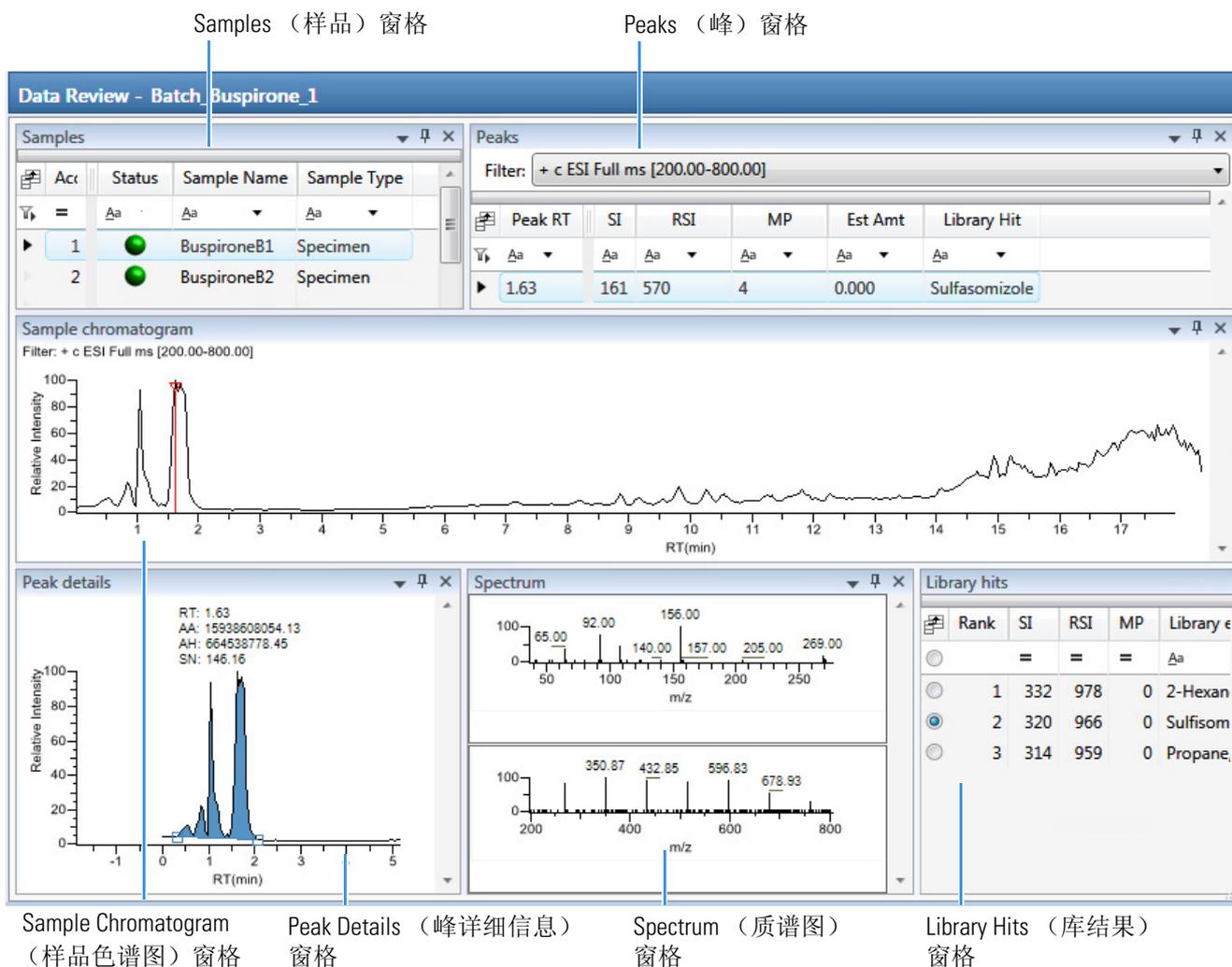
### Qualitative View（定性视图）

Qualitative View（定性视图）采用不同的窗格显示所选样品的定性信息。参阅[显示 Qualitative View（定性视图）窗格](#)。

若应用程序未检测到所选样品中的任何峰，用户可以手动添加峰。

若要在 Qualitative View（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 Batch View（批次视图）中选择这个样品的 Qual Processing（定性处理）参数。参阅[第 370 页上的“Batch View（批次视图）样品列表”](#)。

以下是默认的窗格及其位置：



Qualitative View（定性视图）在以下窗格中显示数据：

- [Samples（样品）窗格](#)
- [Peaks（峰）窗格](#)
- [Sample Chromatogram（样品色谱图）窗格](#)
- [Peak Details（峰详细信息）窗格](#)
- [Spectrum（质谱图）窗格（库和数据）](#)
- [Library Hits（库结果）窗格](#)

## 显示 Qualitative View (定性视图) 窗格

Qualitative View (定性视图) 视图采用多个窗格显示数据: Samples (样品)、Peaks (峰)、Sample Chromatogram (样品色谱图)、Peak Details (峰详细信息)、Spectrum (质谱图) 和 Library Hits (库结果)。可以显示、隐藏或删除任意这些窗格。

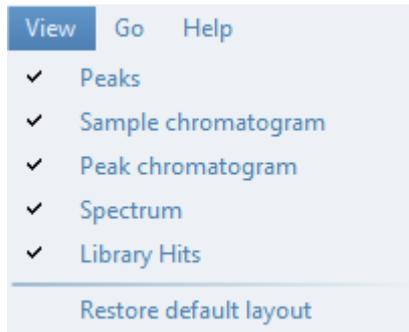
### ❖ 若要显示或隐藏 Qualitative View (定性视图) 窗格

从 View (视图) 菜单上, 选择显示或隐藏以下内容:

- Peaks (峰)
- Sample Chromatogram (样品色谱图)
- Peak Chromatogram (峰色谱图): 显示或隐藏 Peak Details (峰详细信息) 窗格。
- Spectrum (质谱图)
- Library Hits (库结果)

**注释** Qualitative View (定性视图) 视图要求含 Samples (样品) 窗格。用户不能隐藏 Samples (样品) 窗格。

已显示的窗格均以复选标记来表示。



有关创建固定、悬浮或选项卡式窗格的步骤, 参阅第 426 页上的“Data Review (数据查看) 窗格的显示特性”。

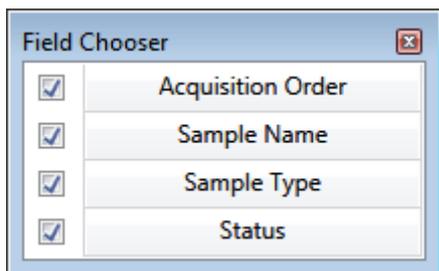
## Samples (样品) 窗格

使用 Qualitative View (定性视图) 上的 Samples (样品) 窗格选择一个特定样品。相关的 Peaks (峰) 窗格显示所选样品中找到的所有峰。

### ❖ 若要隐藏或显示 Samples (样品) 窗格上的列

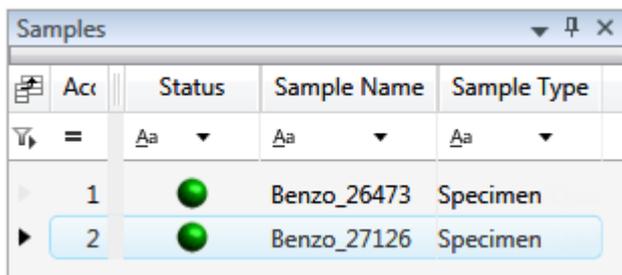
1. 点击结果表左上角处的 Field Chooser (域选择器) 图标, 。

Field Chooser (域选择器) 显示 Samples (样品) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框, 或者清除想要隐藏的每列的复选框。  
该应用程序立即在 Samples (样品) 窗格上显示或隐藏该列。
3. 当修改完列显示以后, 点击 , 关闭 Field Chooser (域选择器)。

图 115. Samples (样品) 窗格



Acc	Status	Sample Name	Sample Type
1		Benzo_26473	Specimen
2		Benzo_27126	Specimen

表 87. Samples (样品) 窗格列 (第 1 页, 共 2 页)

列	描述
Acquisition Order (采集顺序)	按顺序编号样品。
Flags (标记)	仅当样品内的化合物出错时显示警告标记。参阅第 422 页上的“警告标记”。
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。  样品正在采集中。

表 87. Samples (样品) 窗格列 (第 2 页, 共 2 页)

列	描述
Sample Name (样品名称)	用户定义的用以识别样品的名称。
Sample Type (样品类型)	指定 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)、QC (质控标样)、Solvent (溶剂)、Calibrator (校正标样)、Hydrolysis (水解)、Unextracted (未提取) 或 Negative (阴性对照)。

## Peaks (峰) 窗格

同时使用 Qualitative View (定性视图) 上的 Peaks (峰) 窗格和 Samples (样品) 窗格显示唯一的样品和峰组合的图形值。有关 Peaks (峰) 窗格上参数的详细说明, 参阅第 452 页上的“Peaks (峰) 窗格”。

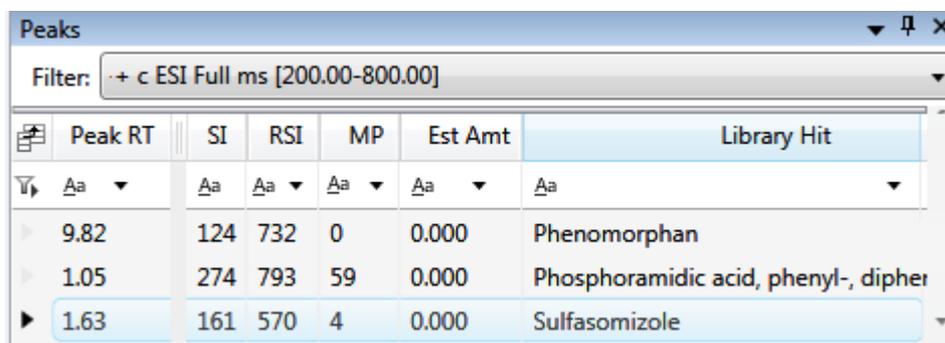
### ❖ 若要显示特定化合物的峰

1. 在 Samples (样品) 窗格上, 选中一个样品。

Peaks (峰) 窗格上显示所选样品中已识别峰的保留时间, 每个峰的最佳匹配方法的值以及与库的匹配结果。

该方法指定了采用哪种技术对峰进行识别: 在指定保留时间范围内的峰、以最大峰的峰高或峰面积的最小百分比的形式、或者以最接近的内标峰的最小百分比的形式。可以在 Method Template Editor (方法模板编辑器) 中更改用于识别峰的方法。参阅第 235 页上的“创建方法模板”。

2. 在 Peaks (峰) 窗格中, 选择样品中的某个峰。

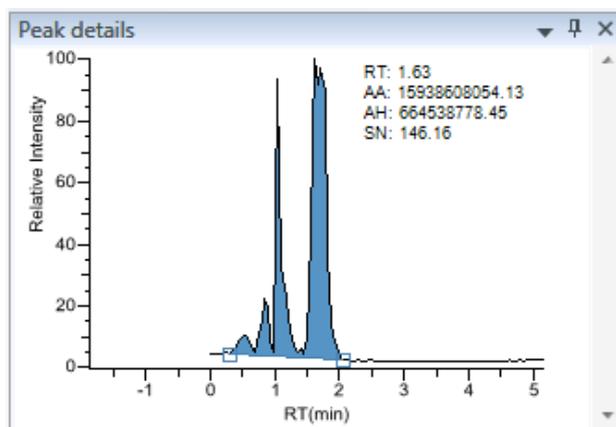


Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Library Hit
9.82	124	732	0	0.000	Phenomorphane
1.05	274	793	59	0.000	Phosphoramidic acid, phenyl-, dipher
1.63	161	570	4	0.000	Sulfasomizole

TraceFinder 应用程序在 Peak Details (峰详细信息) 窗格上显示已选峰, 在 Spectrum (质谱图) 窗格上显示 Qual Data (定性数据) 和 Qual Library (定性库) 部分, 在 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格上定位已选峰。

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

图 116. Peak Details (峰详细信息) 窗格



**注释** 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。

图 117. Spectrum (质谱图) 窗格

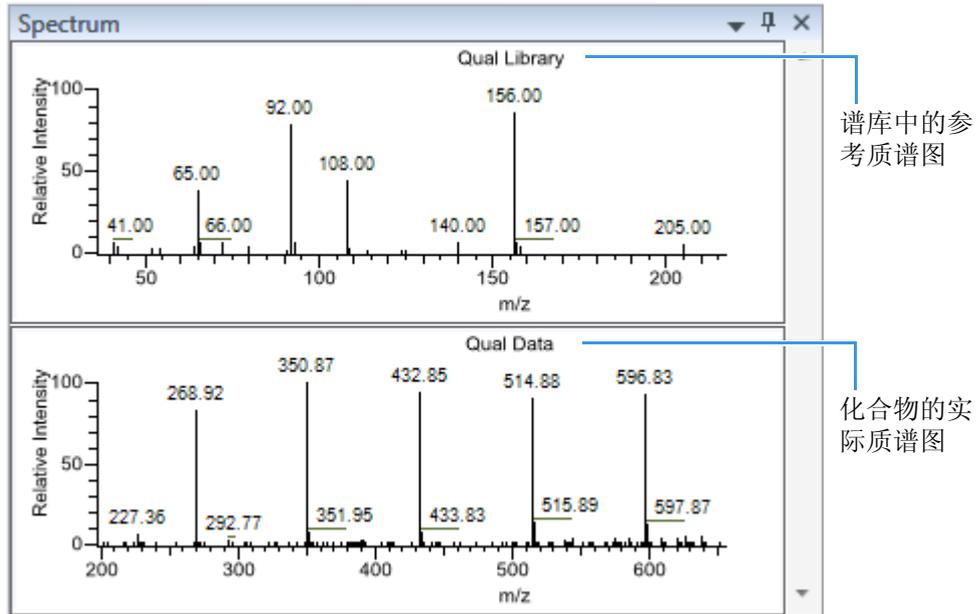
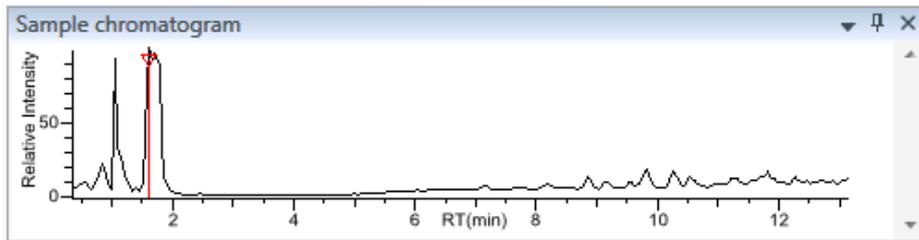


图 118. Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格上的已选峰



#### ❖ 若要移除峰

1. 单击 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格上的一个峰。
2. 右击 Peak Details (峰详细信息) 窗格, 然后从快捷菜单中选择 **Remove Qual Peak (移除定性峰)**。

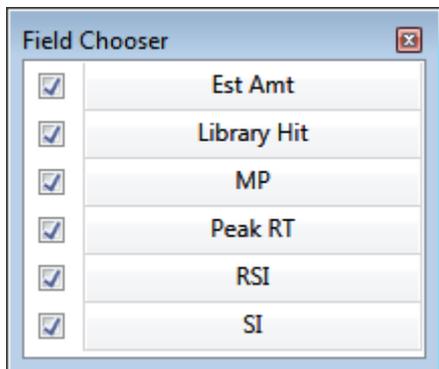
TraceFinder 应用程序从所有 Qualitative View (定性视图) 窗格中移除所选峰。

**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 454 页上的“Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格”。

❖ 若要隐藏或显示 Peaks (峰) 窗格上的列

1. 点击结果表左上角处的 Field Chooser (域选择器) 图标, 。

Field Chooser (域选择器) 显示 Peaks (峰) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框, 或者清除想要隐藏的每列的复选框。  
该应用程序立即在 Peaks (峰) 窗格上显示或隐藏该列。
3. 当修改完列显示以后, 点击 , 关闭 Field Chooser (域选择器)。

**Peaks (峰) 窗格**

使用 Peaks (峰) 窗格上的功能显示每个样品和峰组合的图形值。

图 119. Peaks (峰) 窗格

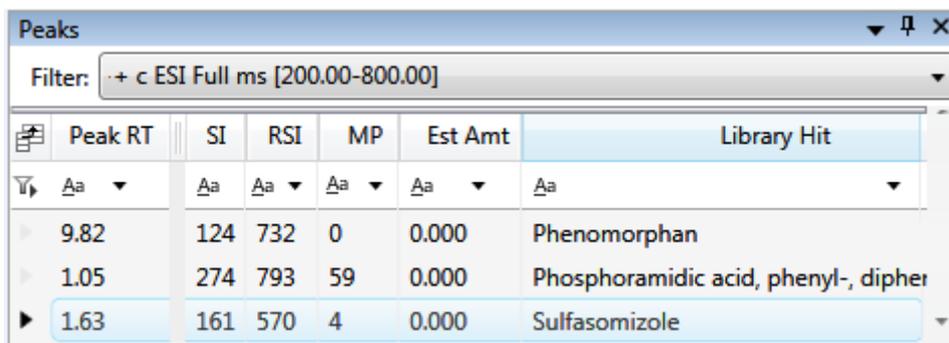


表 88. Peaks (峰) 窗格参数 (第 1 页, 共 2 页)

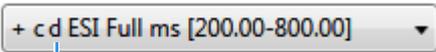
参数	描述
Filter (过滤器)	用于识别峰的过滤器。在原始数据文件或主方法中指定。 当原始数据文件为数据依赖时, 过滤器以“d”指示。  数据依赖过滤器
Peak RT (峰保留时间)	峰保留时间。进样后某个化合物洗脱的时间。该时间为该化合物保留在色谱柱中的总时间。
SI (检索索引)	用于检索 NIST 库的检索索引方法。

表 88. Peaks (峰) 窗格参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
RSI (逆向检索索引)	(逆向检索索引) 用于检索 NIST 库的方法。逆向检索方法将库条目与未知化合物进行对比 (正向检索将未知化合物的质谱图与库条目的质谱图进行对比)。
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。

## Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格

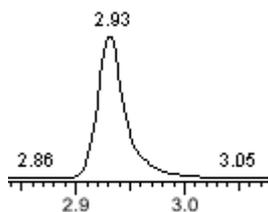
Qualitative View (定性视图) 上的 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格显示所选样品中的所有峰。Peaks (峰) 窗格上选中的峰以红色标记显示。参阅第 455 页上的“Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格”。

### ❖ 若要放大峰

1. 在 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格上, 拖动光标在峰周围画一个长方形。画线的区域会扩大以填满视图。
2. 若要恢复默认视图, 右击 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格, 然后从快捷菜单中选择 **Reset Scaling (重置缩放比例)**。

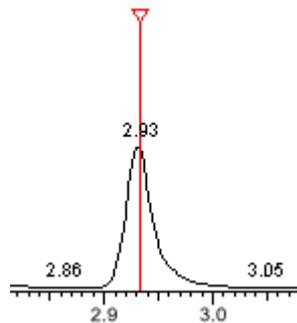
### ❖ 若要手动添加峰

1. 放大以利于识别希望添加到结果组中的峰。



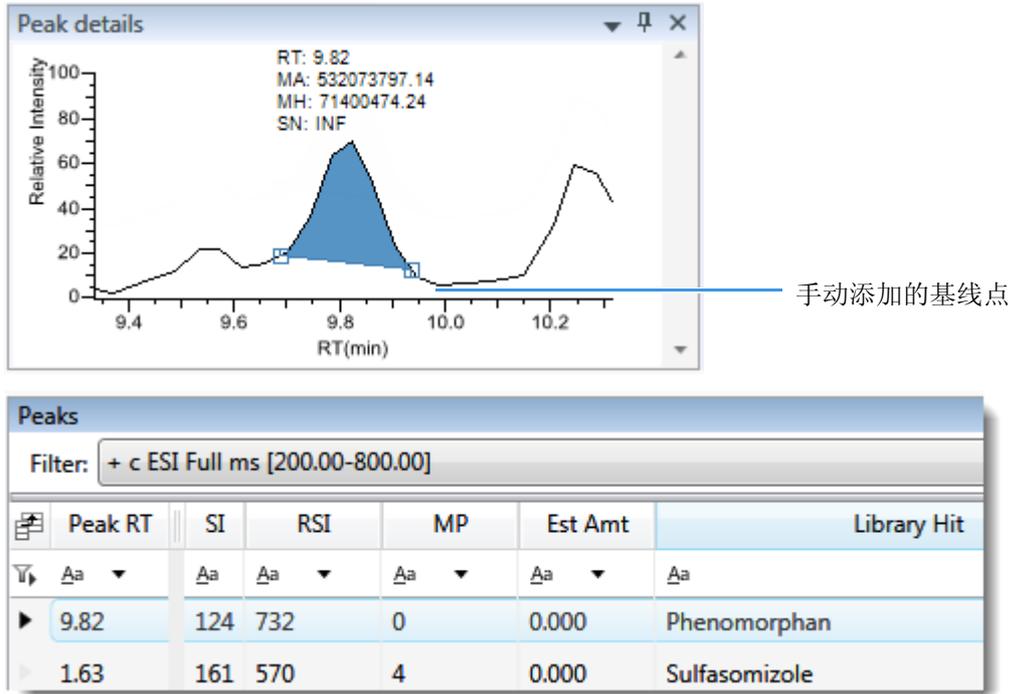
2. 右键单击 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格, 然后从快捷菜单中选择 **Add Qual Peak (添加定性峰)**。
3. 点击以标示峰的左右基线点。

TraceFinder 应用程序在 Sample Chromatogram (样品色谱图) 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 Peaks (峰) 窗格和 Peak Details (峰详细信息) 窗格中的峰值。参阅包含手动添加峰的 Peak Details (峰详细信息) 窗格。

图 120. 包含手动添加峰的 Peak Details (峰详细信息) 窗格



### Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格

使用 Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格上的功能显示所选样品中的峰。

图 121. Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格

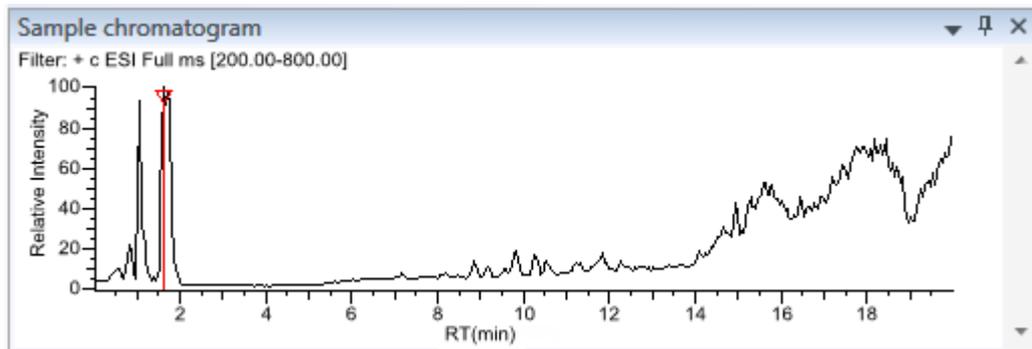


表 89. Sample Chromatogram (样品色谱图) 窗格快捷菜单

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。仅当未检测到任何峰的时候可用。
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。

## Peak Details (峰详细信息) 窗格

Qualitative View (定性视图) 上的 Peak Details (峰详细信息) 窗格显示已选峰。有关快捷菜单上命令的描述, 参阅第 457 页上的“Peak Details (峰详细信息) 窗格”。

按照以下步骤进行操作:

- 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

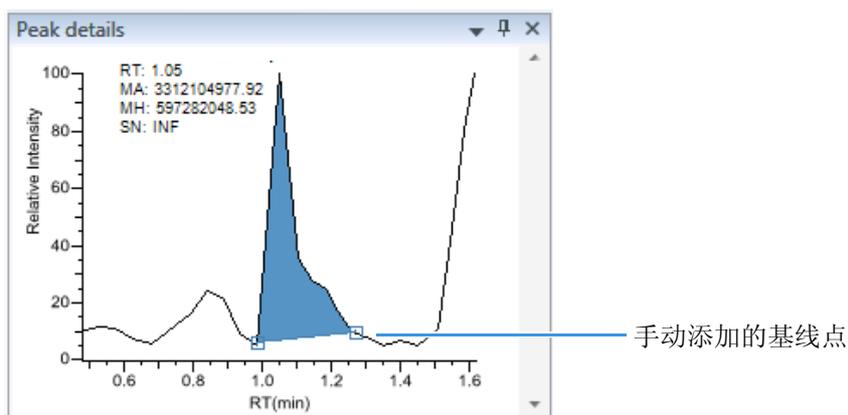
### ❖ 若要放大峰

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

### ❖ 若要手动添加峰

1. 在 Peak Details (峰详细信息) 窗格中右击任意位置, 然后从快捷菜单中选择 **Add Qual Peak (添加定性峰)**。  
如果峰已被检测到, 则 Add Qual Peak (添加定性峰) 命令未激活。
2. 点击以标示峰的左右基线点。

TraceFinder 应用程序将峰分隔符标签置于这些位置, 并自动更新结果中的峰值 (峰面积、峰高等)。



### ❖ 若要移除峰

右击 Peak Details (峰详细信息) 窗格, 然后从快捷菜单中选择 **Remove Qual Peak (移除定性峰)**。

TraceFinder 应用程序移除 Peak Details (峰详细信息) 窗格中显示的峰。该峰的所有数据都从 Qualitative View (定性视图) 窗格中移除。

❖ 若要在方法积分和手动积分模式之间切换

右击 Peak Details (峰详细信息) 窗格, 然后从快捷菜单中选择 **Method Integration (方法积分)** 或 **Manual Integration (手动积分)**。

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, 若手动数据可用, 当在方法和手动模式之间转换时, Peak Details (峰详细信息) 图和结果将随之更新。

随着在两种模式之间进行切换, 每个窗格都反映出更改。这些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 Peak Details (峰详细信息) 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 (RT)、峰高 (AH)、峰面积 (AA) 或信噪比 (SN) 的标签。



3. 若要删除标签, 再次选择标签类型将其清除。

**Peak Details (峰详细信息) 窗格**

使用 Peak Details (峰详细信息) 窗格上的功能显示已选峰。

图 122. Peak Details (峰详细信息) 窗格

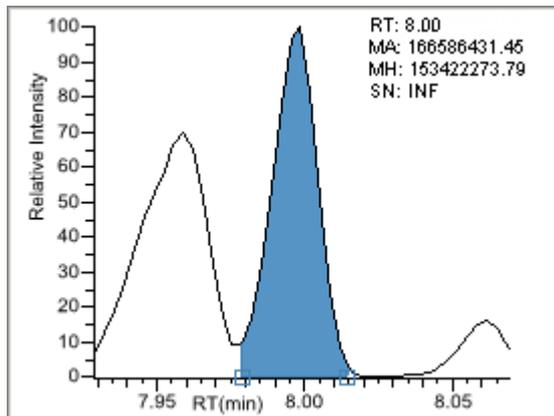


表 90. Peak Details (峰详细信息) 窗格快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。
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。

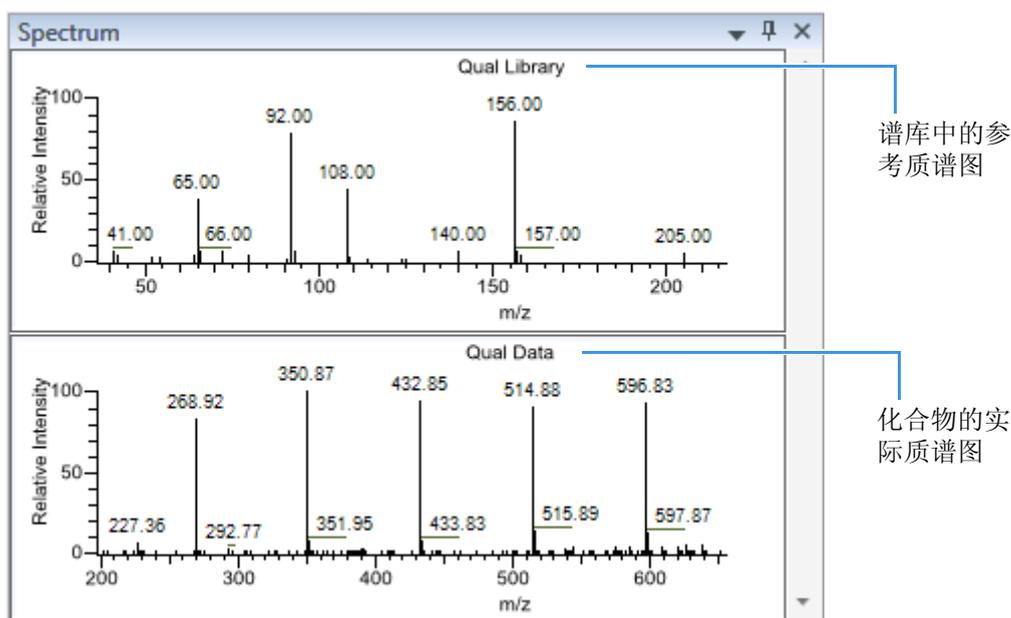
表 90. Peak Details (峰详细信息) 窗格快捷菜单命令

命令	描述
Peak Labels (峰标签)	显示或隐藏峰标签 (Label Area [标注峰面积]、Label Retention Time [标注保留时间]、Label Height [标注峰高] 或 Label Signal to Noise [标注信噪比])。
Remove Qual Peak (移除定性峰)	仅对手动添加的峰适用。移除 Peak Details (峰详细信息) 窗格上显示的峰。

## Spectrum (质谱图) 窗格 (库和数据)

Qualitative View (定性视图) 上的 Spectrum (质谱图) 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。

图 123. Spectrum (质谱图) 窗格



### ❖ 若要放大峰

1. 在质谱图上拖动光标, 或者在峰周围画一个长方形。  
画线的区域会扩大以填满视图。
2. 若要恢复默认视图, 可右键单击色谱图, 然后从快捷菜单中选择 **Reset Scaling (重置缩放比例)**。

## Library Hits (库结果) 窗格

Qualitative View (定性视图) 上的 Library Hits (库结果) 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。有关 Library Hits (库结果) 窗格参数的详细说明, 参阅 [Library Hits \(库结果\) 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”来标记:

Peak:	Retention Time	Area	Height	Inj Estimate	In-sample Est	Flag
Naphthalene	7.95	13829174	10605061	0.000	0.000	P

P 标记

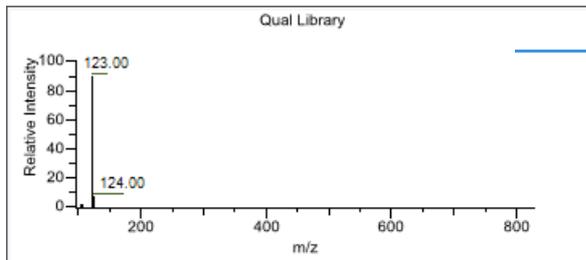
### ❖ 若要更改所选峰的库条目

在 Library Hits (库结果) 窗格上, 选中希望用于识别所选峰的库条目的复选框。

- 在 Spectrum (质谱图) 窗格上, 参考质谱图变为显示所选库条目的质谱图。
- 在 Peaks (峰) 窗格中, SI (检索索引)、RSI (逆向检索索引)、MP (匹配概率) 和 Compound (化合物) 值更新为所选库条目的相关值。

Rank	SI	RSI	MP	Library entry	
<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-(ethenyloxy)-

Library Hits (库结果) 窗格上的已选库条目



Hexanone (吡嗪酰胺) 的参考质谱图

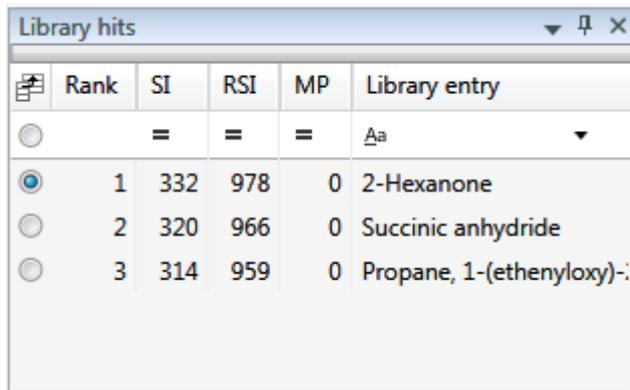
Peak RT	SI	RSI	MP	Est Amt	Library Hit
0.00	332	978	0	0.000	2-Hexanone
4.46	145	860	0	0.000	Methane, bis(2-chloroethoxy)-

Hexanone (吡嗪酰胺) 的峰列表

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用定量方法的 Data Review (数据查看)

图 124. Library Hits (库结果) 窗格



<input type="checkbox"/>	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-(ethenyloxy)-

表 91. Library Hits (库结果) 窗格参数

参数	描述
<Check box column> ( < 复选框列 > )	表示所选峰的已选库条目。
Rank (排序)	表示所选峰和库条目之间最佳匹配项的次序。
SI (检索索引)	(检索索引) 用于检索 NIST 库的方法。
RSI (逆向检索索引)	(逆向检索索引) 用于检索 NIST 库的方法。逆向检索方法将库条目与未知化合物进行对比 (正向检索将未知化合物的质谱图与库条目的质谱图进行对比)。
MP (匹配概率)	匹配概率。
Library Entry (库条目)	与已识别峰相匹配的库化合物。

## 所有 Data Review (数据查看) 页面通用的功能

以下功能通用于所有定量批次 Data Review (数据查看) 页面。

- 通用列参数
- 状态指示器
- 停用和排除化合物
- [Compound Details \(化合物详细信息\)](#)
- 导出化合物

### 通用列参数

**表 92.** Compound Results (化合物结果) 和 Sample Results (样品结果) 表的通用参数 (第 1 页, 共 3 页)

列	描述
Height (峰高)	峰顶点与峰基线之间的距离, 垂直于纵坐标进行测量。当 Response Ratio (响应比率) 被指定为 Height (峰高) 时, 该列用星号表示 (*Height)。
Area (峰面积)	从峰的起始位置到结束位置对峰强度进行积分得到的峰面积。当 Response Ratio (响应比率) 被指定为 Area (峰面积) 时, 该列用星号表示 (*Area)。
Expected RT (预期保留时间)	化合物的预期保留时间。
Actual RT (实际保留时间)	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。
Calculated Amt (计算量)	样品中的化合物量, 该值通过校正曲线和响应比率测得。
Theoretical Amt (理论量)	样品中化合物预期的理论量。
Sample Amt (样品量)	乘以换算系数所得的进样体积。例如, 如果某个物质的浓度为 1000 ng/mL, 对于质谱仪来说浓度太高, 用户可以将其稀释 1000 倍。当进样体积为 1 时, 换算系数为 1000, 则样品量为 1000。
<i>m/z</i> (Expected) (质荷比, 预期)	<p>化合物数据库中的质荷比。假设电荷为 1。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 若已找到加合物, 该应用程序显示该化合物的中性质量数值 (由中性分子式计算得来) ± 该化合物中找到的最大强度加合离子的质量数。</li> <li>• 若未找到加合物, 该应用程序显示化合物的中性质量数值 ± 化合物数据库中输入的首个加合物的质量数。</li> </ul> <p>有关为化合物数据库指定加合物的详细信息, 参阅第 56 页上的“指定 Adducts (加合物)”。</p> <p>有关将加合物添加至化合物的详细信息, 参阅第 260 页上的“编辑数据库中的化合物”</p> <p><b>注释</b> 若加合物为增加, 则加合物质量数为正数。若加合物为丢失, 则加合物质量数为负数。在增加或扣除加合物质量数之后得到的质量数永远是正数。</p>

表 92. Compound Results (化合物结果) 和 Sample Results (样品结果) 表的通用参数 (第 2 页, 共 3 页)

列	描述
<i>m/z</i> (Apex) (质荷比, 峰尖)	<p>在质谱图中找到的峰质荷比。假设电荷为 1。</p> <p>当应用程序成功对峰进行积分时, 该列显示化合物的带电 <i>m/z</i> 值, 也就是峰尖扫描中的最高强度值。</p> <p>当应用程序未能成功对峰进行积分时, 该列显示为 N/F。</p>
<i>m/z</i> (Delta) (质荷比, 差值)	<p><i>m/z</i> (Expected) (质荷比, 预期) 和 <i>m/z</i> (Apex) (质荷比, 峰尖) 之间的差值。假设电荷为 1。</p> <p>当 <i>m/z</i> (Apex) (质荷比, 峰尖) 列显示化合物的 <i>m/z</i> 值时, 该列显示与峰尖扫描中最高强度相对应的 <i>m/z</i> 差值。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>当主方法中指定的质量数容许偏差单位为 ppm 时, 那么  <math display="block">m/z \text{ (差值)} = 1\,000\,000 \times ([m/z \text{ (峰尖)} - m/z \text{ (预期)}] \times m/z \text{ (预期)})</math> </li> <li>当主方法中指定的质量数容许偏差单位为 mmu 时, 那么  <math display="block">m/z \text{ (差值)} = 1000 \times (m/z \text{ (峰尖)} - m/z \text{ (预期)})</math> </li> </ul>
Response Ratio (响应比率)	Response (响应) 值与 IS Response (内标响应) 值之间的比率。如果在处理方法中 Response (响应) 被指定为 Area (峰面积), Response 和 IS Response (内标响应) 的单位为计数 - 秒。如果在处理方法中 Response (响应) 被指定为 Height (峰高), 则 Response (响应) 和 IS Response (内标响应) 的单位为计数。
ISTD Amt (内标量)	内标物的量。
ISTD Response (内标响应)	内标的响应。
Integration Mode (积分模式)	方法中指定的积分模式。参阅第 469 页上的“Quan Peak (定量峰)”。
Active (激活)	<p>显示或隐藏一个特定样品中的化合物。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>当一个化合物标记为未激活状态时, 该应用程序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。</li> <li>当一个校正标样被标记为未激活状态时, 应用程序不再采用数据文件的校正点进行校正, 并且会将该校正点从 Compound Details (化合物详细信息) 窗格上显示的校正曲线中删除。该校正点不再是结果的一部分。</li> </ul> <p>在 Sample View (样品视图) 中, Active (激活) 参数在 Compound Results (化合物结果) 窗格中。</p> <p>在 Compound View (化合物视图) 中, Active (激活) 参数在 Sample Results (样品结果) 窗格中。</p>
Excluded (排除)	在 Compound Details (化合物详细信息) 窗格的校正曲线上打开或关闭一个化合物。
%Diff (偏差百分比)	计算值减去预期值, 除以预期值, 然后乘以 100。

**表 92.** Compound Results (化合物结果) 和 Sample Results (样品结果) 表的通用参数 (第 3 页, 共 3 页)

列	描述
%RSD (相对标准偏差百分比)	<p>同一水平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。该计算是基于计算量进行的。</p> <p><b>注释</b> 该 RSD (相对标准偏差) 值与方法中采用 Average RF (平均响应因子) 曲线类型的 RSD (相对标准偏差) 值不同。参阅第 166 页上的“<a href="#">Calibration (校正) 页面</a>”。</p> <p>当为同一个 QC (质控标样) 或 Calibrator (校正标样) 样品采集多次进样时, 该应用程序在 Data Review (数据查看) 和 Compound Calibration Report (化合物校正报告) 中使用 %RSD (相对标准偏差百分比) 值。</p>
%CV (变异系数百分比)	<p>变异系数。同一水平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。该计算是基于峰面积进行的。</p>
Channel (通道)	<p>指定样品运行的通道。若样品未采集, 则该值的状态为 Pending (待定)。仅当在 Configuration (配置) 控制台上激活多通道时, Channel (通道) 列才可用。参阅第 65 页上的“<a href="#">Multiplexing (多通道)</a>”。</p>
Final Units (最终单位)	<p>指定计算量。 默认: 1</p>
Comment (注释)	<p>用户自定义的样品注释。</p>

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

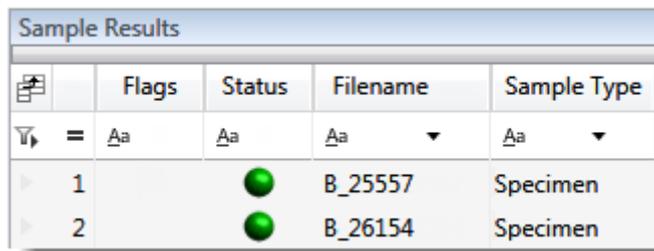
使用定量方法的 Data Review (数据查看)

### 状态指示器

每个样品的状态指示器用于表示该样品是未采集、采集中、已采集还是已处理。

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

图 125. Sample Results (样品结果)



	Flags	Status	Filename	Sample Type
1		●	B_25557	Specimen
2		●	B_26154	Specimen

状态指示器

## 停用和排除化合物

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

Data Review - Batch_benzos								
Compounds		Sample Results						
☰	Compound	Compound Type	☰	Sample Name	Sample Type	Active	Excluded	
▼	Aa	Aa	▼	=	Aa	Aa	Aa	Aa
▶	FENTHION-CE20	Target Compound	▶	1 Benzo_25557	Calibrator	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
▶	Sulfisomidine	Target Compound	▶	2 Benzo_26154	Specimen	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
			▶	3 Benzo_26473	Specimen	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

按照以下步骤进行操作：

- 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 Samples (样品) 窗格上选择一个样品。  
所选样品中的所有化合物均显示在 Compounds (化合物) 窗格中。非活动化合物将呈灰色显示。
  2. 在 Compounds (化合物) 窗格中，选择希望更改激活 / 未激活状态的化合物。
    - 当一个化合物标记为未激活状态时，该应用程序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名称。
    - 当一个校正标样标记为未激活状态时，应用程序不再采用数据文件的校正点进行校正，并且会将该校正点从 Qualification (定性) 窗格上显示的校正曲线中删除。该校正点不再是结果的一部分。
  3. 在 Samples (样品) 窗格上，选择或清除 **Active (激活)** 复选框。  
使用表格底部的水平滚动条滚动至 Active (激活) 列。

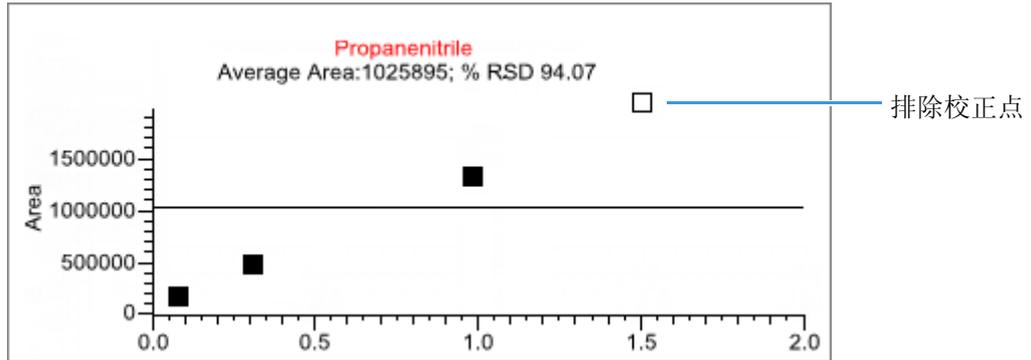
❖ 若要排除校正点

在样品列表中, 选中样品的 **Excluded (排除)** 复选框。

**注释** 仅校正样品含有可用的 Excluded (排除) 复选框。

使用表格底部的水平滚动条滚动至 Excluded (排除) 列。

当某个值不再用于校正时, 在校正曲线的图形视图内, 该应用程序将这个值显示为空白框。



## Compound Details (化合物详细信息)

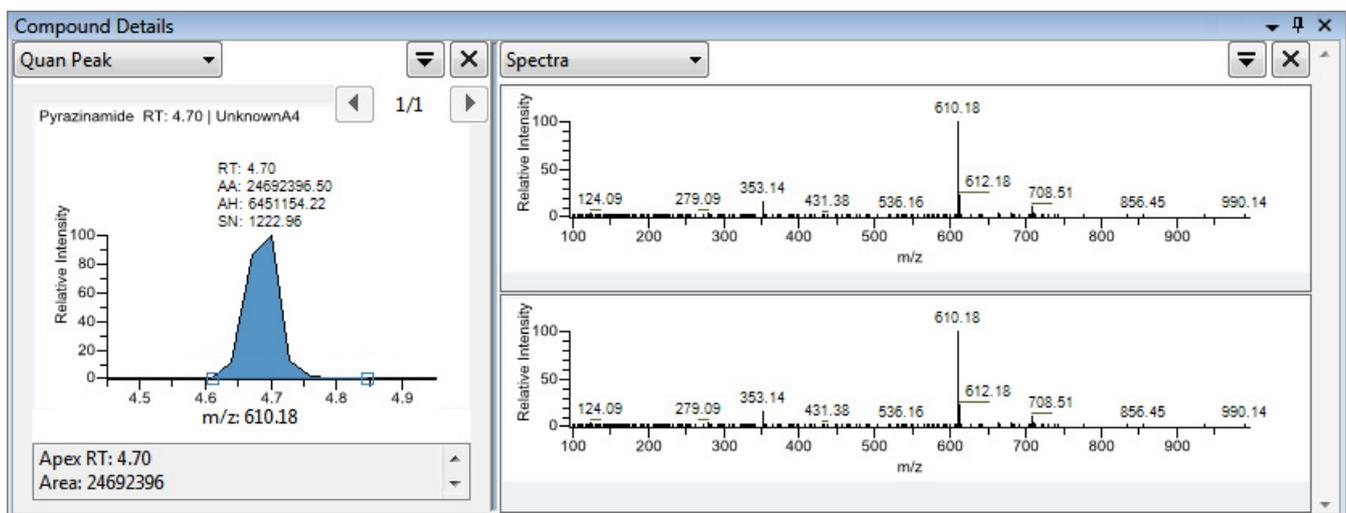
使用 Compounds Details (化合物详细信息) 窗格显示以下任意数据类型:

- Quan Peak (定量峰)
- Confirming Ions (确认离子)
- Calibration Curve (校正曲线)
- Ion Overlay (离子重叠)
- ISTD (内标化合物)
- Reference Peak (参考峰)
- Spectra (质谱图)

### ❖ 若要打开 Compound Details (化合物详细信息) 对话框

1. 双击 Sample Peaks (样品峰) 窗格内的色谱图。

Compound Details (化合物详细信息) 窗格打开。



默认情况下, 第一个窗格显示所选化合物的定量峰。

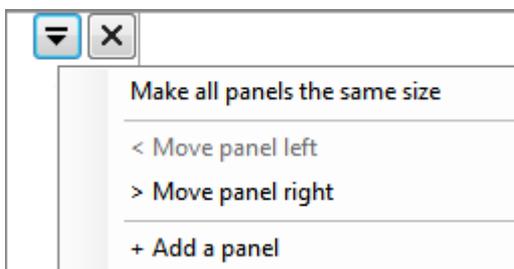
2. 在第二个窗格中, 选择要显示的其他数据类型。

根据以下程序修改在任一窗格中的峰数据显示:

- 若要修改峰窗格
- 若要放大峰

### ❖ 若要修改峰窗格

在任一峰窗格上，点击  查看命令列表。



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。

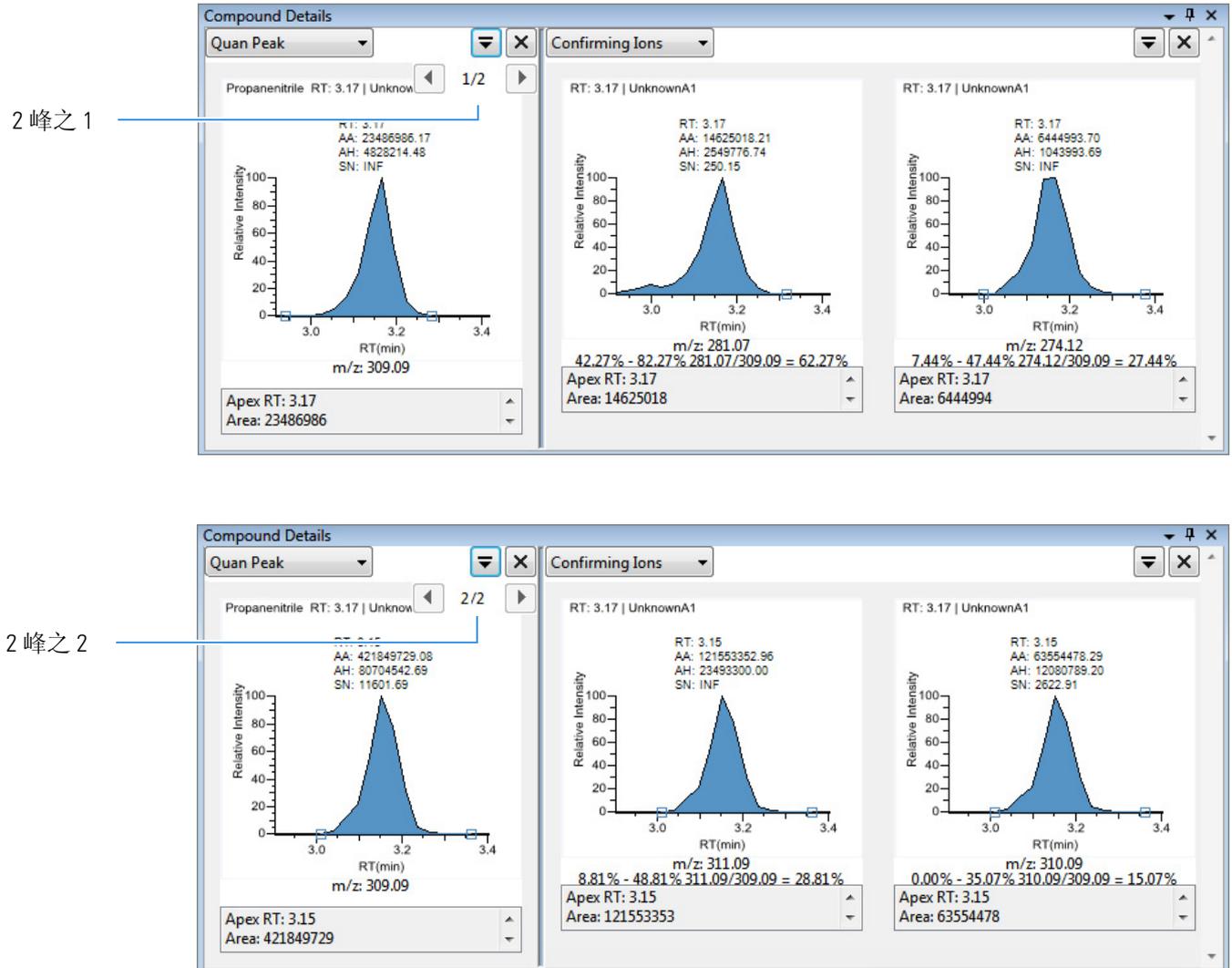
### ❖ 若要放大峰

1. 在任一视图中，拖动光标在峰或质谱图周围画一个长方形。  
画线的区域会扩大以填满视图。
2. 若要恢复默认视图，可右键单击色谱图，然后从快捷菜单中选择 **Reset Scaling (重置缩放比例)**。

## Quan Peak (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定量峰。Quan Peak (定量峰) 窗格使用唯一的快捷菜单。参阅第 473 页上的“Quan Peak (定量峰) 窗格快捷菜单命令”。

图 126. 具有多个定量峰的 Quan Peak (定量峰) 窗格



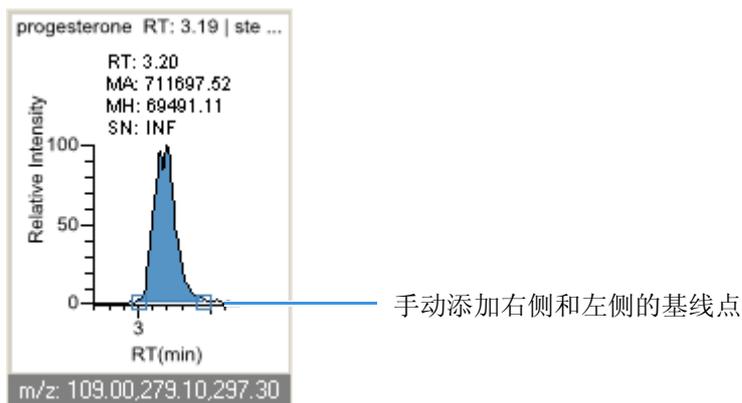
根据以下程序修改定量离子峰数据或确认离子峰数据：

- 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)**。
2. 单击欲识别峰左侧的基线点。
3. 拖动至右侧基线点，放开鼠标。

应用程序将峰分隔符标签置于这些位置上，并自动更新结果中的峰值（峰面积、峰高等）。



### ❖ 若要移除手动创建的峰

右击窗格，然后从快捷菜单中选择 **Cancel Add Peak (取消添加峰)**。

应用程序取消 Add Peak (添加峰) 的操作。若已经完成添加峰的操作，选中该峰，然后从快捷菜单中选择 **Remove Quan Peak (移除定量峰)**。

### ❖ 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中其中一个的上面。

当标签可选时，光标将变成十字准线光标。可以放大基线，以方便选择标签。



2. 将峰分隔符标签拖曳至其他位置，结果组中的峰值（峰面积、峰高等）将自动更新。

这些数据所生成的报告可识别手动修改。

用户可以保存两种峰值设置（方法积分和手动积分设置），每种设置的化合物保存在各自的文件中。这些设置可能导致已保存值有所不同。应用程序根据处理方法参数计算这些方法值。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，若手动数据可用，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进行切换，每个窗格都反映出更改。这些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。  
选中列表中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。

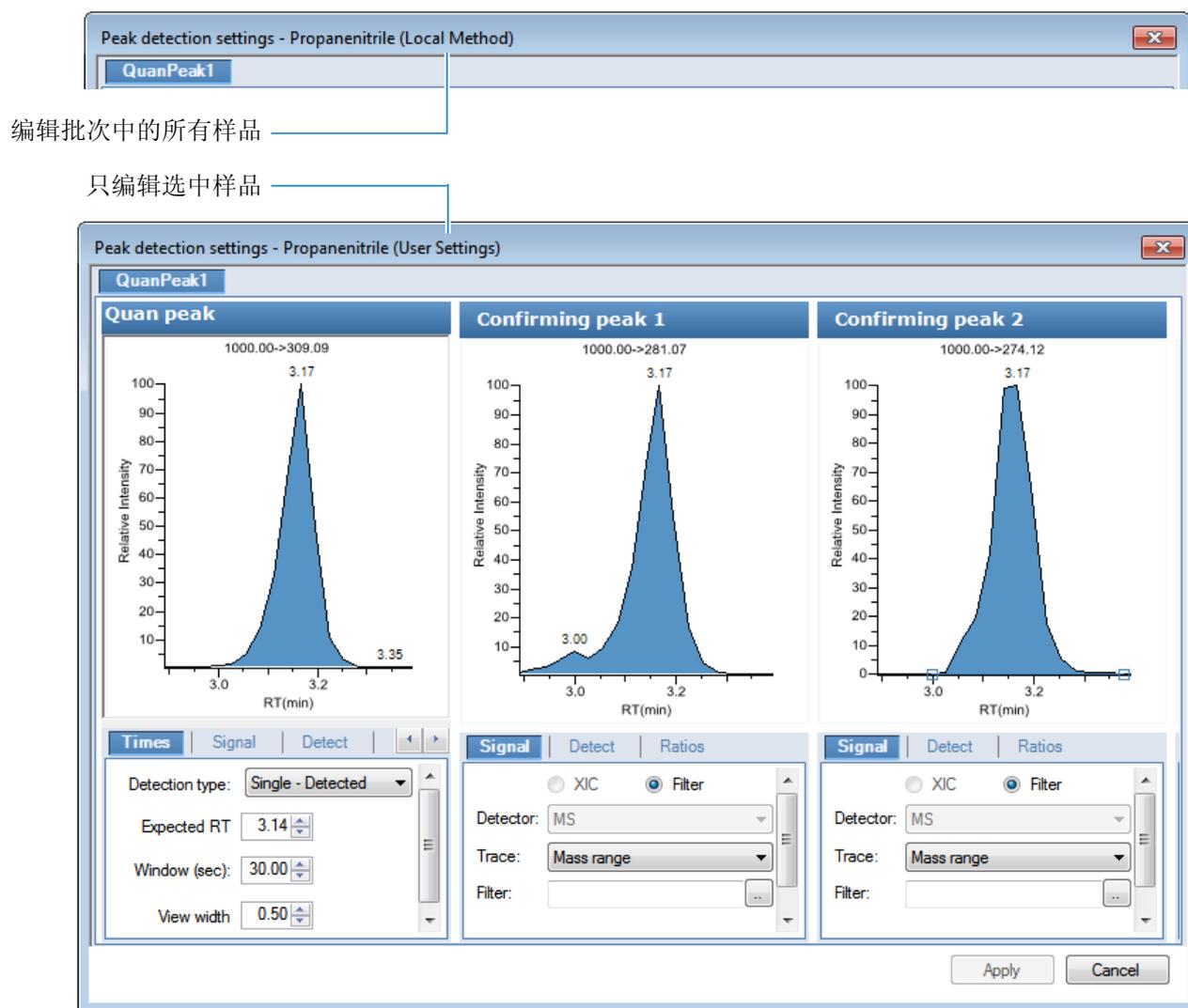
**提示** 并非所有峰显示的标签总能及时更新。若要更新所有标签，先选择一个不同的化合物，然后再次选择更改过标签的化合物。

#### ❖ 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 应用程序保存对批次进行的修改，不再只将本地方法检测设置应用到这个样品的化合物。

Peak Detection Settings (峰检测设置) 对话框打开，在此可以调整方法中指定的检测设置。该对话框的标题栏列出了选中的化合物，并提示是否只修改选中样品或本地方法。

图 127. Peak Detection Settings (峰检测设置) 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 117 页上的“Detection (检测)”。

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，这个更新会修改校正曲线，而校正曲线影响所有计算量。
- 当编辑本地方法时，应用程序修改该批次所有样品的选中化合物。

**注释** 在 Confirming Ions (确认离子) 窗格中，Peak Detection Settings (峰检测设置) 命令也可用。

表 93. Quan Peak (定量峰) 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)	<p><b>Use Local Method Peak Detection Settings (使用本地方法峰检测设置):</b> 将本地方法积分设置应用到选中化合物。</p> <p>若要编辑这些峰检测设置, 使用 Peak Detection Settings (峰检测设置) &gt; Edit Local Method Peak Detection Settings (编辑本地方法峰检测设置) 命令。</p> <p><b>Use User Peak Detection Settings (使用用户定义的峰检测设置):</b> 将用户自定义的方法积分设置应用到选中化合物。</p> <p>若要编辑这些用户自定义的设置, 使用 Peak Detection Settings (峰检测设置) &gt; Edit User Defined Peak Detection Settings (编辑用户定义峰检测设置) 命令。</p>
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)	选择欲查看的确认离子。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

Propanenitrile			
Quan ion m/z:			309.09
Integration mode:			Method
Left RT:	2.94	Area:	23486986
Apex RT:	3.17	Height:	4828214
Right RT:	3.28	Noise:	0.00
Data file:	UnknownA3		
Filter:	FTMS {1,2} + p ESI Full ms2		
Detector:	MS		
Trace:	Mass range		

表 93. Quan Peak (定量峰) 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, 重置为原始比例。
Peak Detection Settings (峰检测设置)	<p><b>Edit User Defined Peak Detection Settings (编辑用户定义峰检测设置)</b>: 打开 Peak Detection Settings (峰检测设置) 对话框, 在此可以修改该样品的已选化合物。</p> <p><b>Edit Local Method Peak Detection Settings (编辑本地方法峰检测设置)</b>: 打开 Peak Detection Settings (峰检测设置) 对话框, 在此可以修改该批次所有样品的已选化合物。</p> <p>在应用任一更新之后, 应用程序不会保留手动积分设置。</p>

### Confirming Ions (确认离子)

Confirming Ions (确认离子) 窗格显示选定化合物的所有定性 / 确认离子的谱图, 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超出了窗口范围。

Confirming Ions (确认离子) 窗格使用唯一的快捷菜单。参阅 [Confirming Ions \(确认离子\) 窗格快捷菜单命令](#)。

**注释** 对于采用模拟检测类型的化合物, 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)”。

图 128. 具有多个确认离子的定量峰

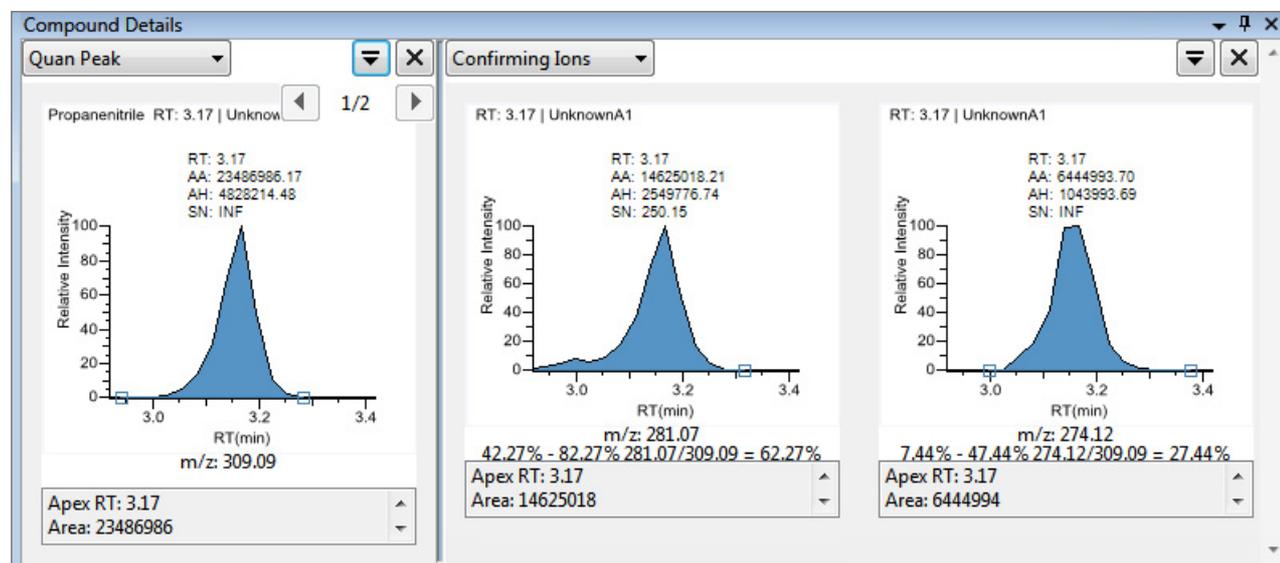
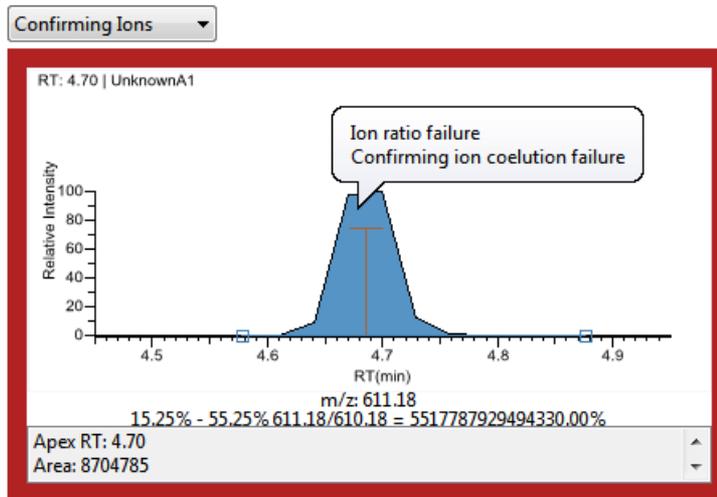


图 129. 确认离子共流出未通过



❖ 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中其中一个的上面。  
当标签可选时，光标将变成十字准线光标。可以放大基线，以方便选择标签。
2. 将峰分隔符标签拖曳至其他位置，结果组中的峰值（峰面积、峰高等）将自动更新。  
这些数据所生成的报告可识别手动修改。

用户可以保存两种峰值设置（方法积分和手动积分设置），每种设置的化合物保存在各自的文件中。这些设置可能导致已保存值的设置会有所不同。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 94. Confirming Ions (确认离子) 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/Remove/Cancel Quan Peak (添加 / 移除 / 取消定量峰)	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): Manual (手动)	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。

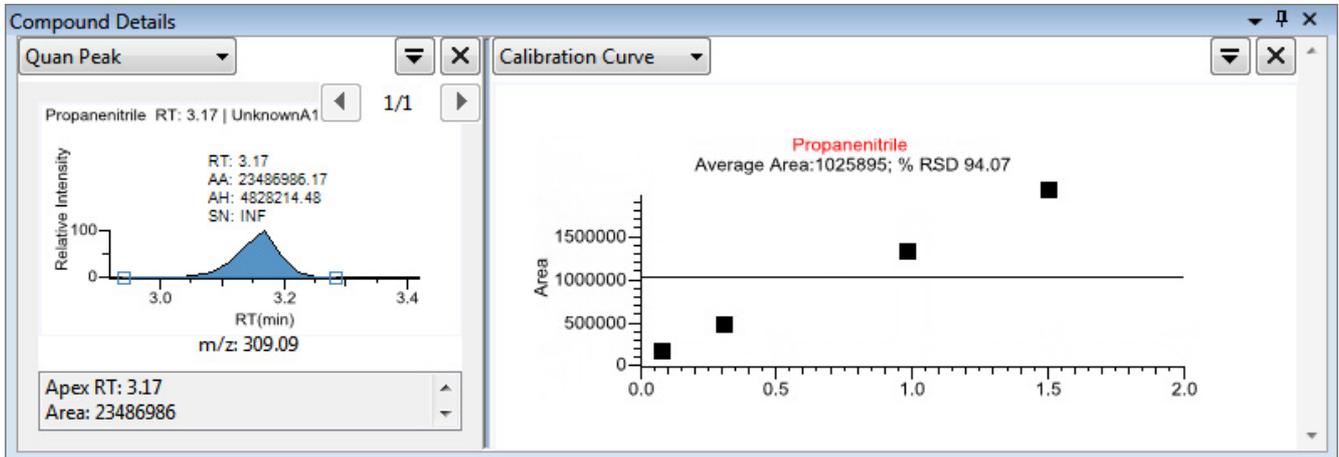
表 94. Confirming Ions (确认离子) 窗格快捷菜单命令 (第 2 页, 共 2 页)

命令	描述
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 [ 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)	打开所选化合物的 Peak Detection Settings (峰检测设置) 对话框。

## Calibration Curve (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 (校正曲线) 窗格使用唯一的快捷菜单。参阅 [Calibration Curve \(校正曲线\) 窗格快捷菜单命令](#)。

图 130. 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 (排除)** 复选框。

使用表格底部的水平滚动条滚动至 **Excluded (排除)** 列。

当某个值不再用于校正时, 它在校正曲线的图形视图内显示为空白框。

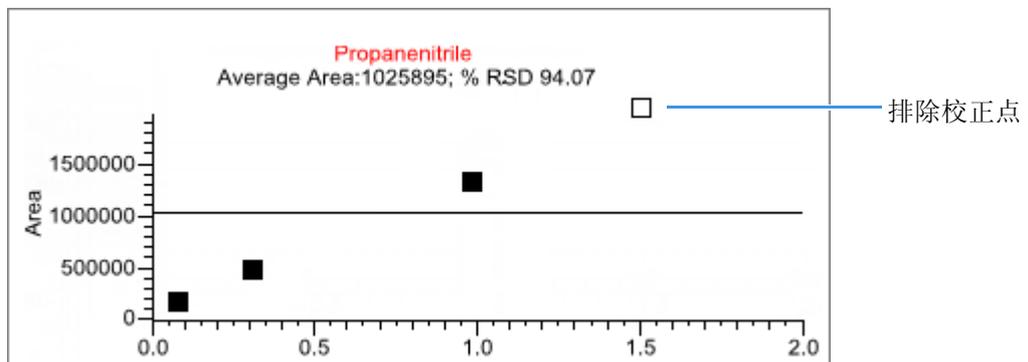


表 95. Calibration Curve (校正曲线) 窗格快捷菜单命令

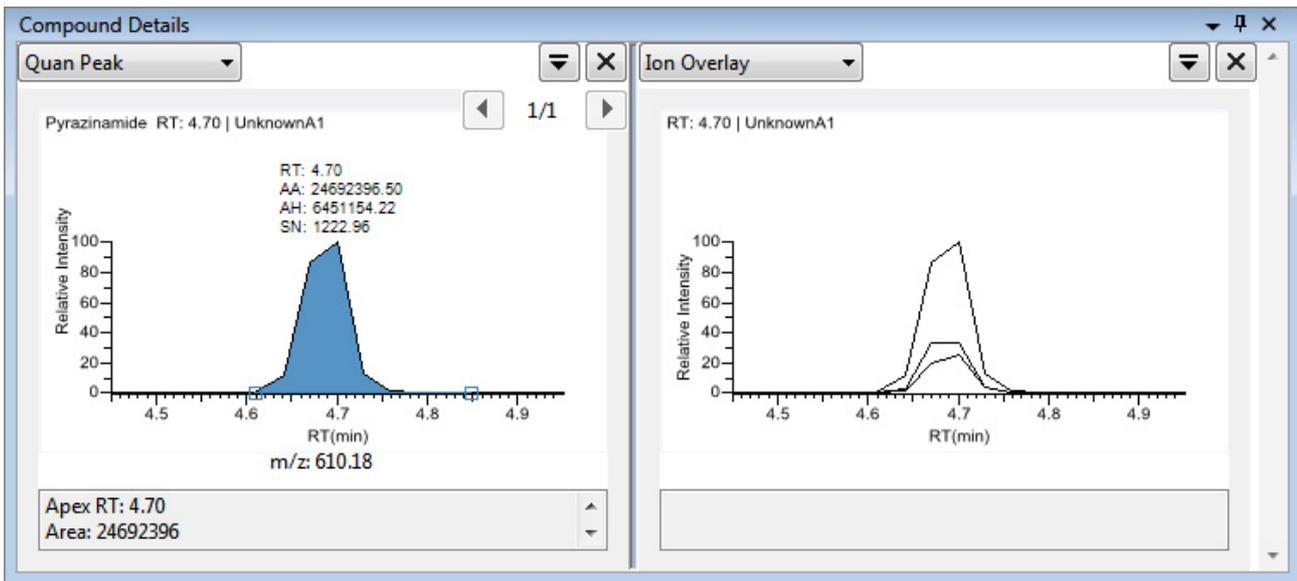
命令	描述
Standard Type (标样类型)	将标样类型设置为 External (外标化合物) 或 Internal (内标化合物)。
Calibration Curve Type (校正曲线类型)	设置以下其中一种校正曲线类型: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Linear (线性): 除此之外允许进行所有设置: 当将 Origin (原点) 设置为 Include (包括) 时, 所有的 Weighting (加权) 值将变灰, Weighting 设置为 Equal (相等)。</li> <li>• Quadratic (二次方): 除此之外允许进行所有设置: 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)。</li> <li>• Average RF (平均响应因子): 允许不选择 Weighting (加权) 或 Origin (原点)。所有 Weighting (加权) 和 Origin (原点) 值都变灰。Weighting (加权) 设置为 Equal (相等), Origin (原点) 设置为 Ignore (忽略)。</li> </ul>
Response Via (响应方式)	将响应设置为 Area (峰面积) 或 Height (峰高)。
Weighting (加权)	将权重设置为 Equal (相等)、1/X、1/X <sup>2</sup> 、1/Y 或 1/Y <sup>2</sup> 。
Origin (原点)	将原点设置为 Ignore (忽略)、Force (强制) 或 Include (包括)。
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)	返回校正曲线窗格的原始比例。

## Ion Overlay (离子重叠)

Ion Overlay (离子重叠) 页面代表已选化合物整个离子组 (定量和定性 / 确认离子) 的重叠。使用此窗格以图示的形式查看峰尖匹配和共流出峰情况。

**注释** 对于采用模拟检测类型的化合物, 应用程序在 Ion Overlay (离子重叠) 窗格中显示 “No Data (没有数据)”。

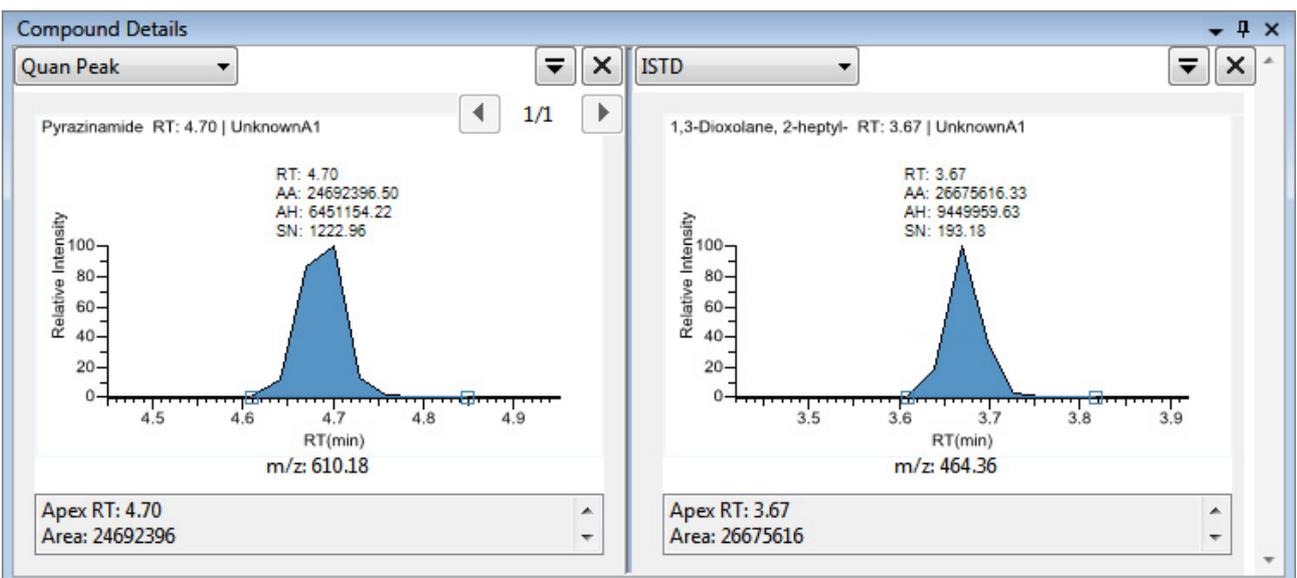
图 131. 具有确认离子重叠的定量峰



## ISTD (内标化合物)

ISTD (内标化合物) 窗格显示方法中为化合物指定的内标。参阅第 164 页上的 “若要指定化合物的内标物类型”。

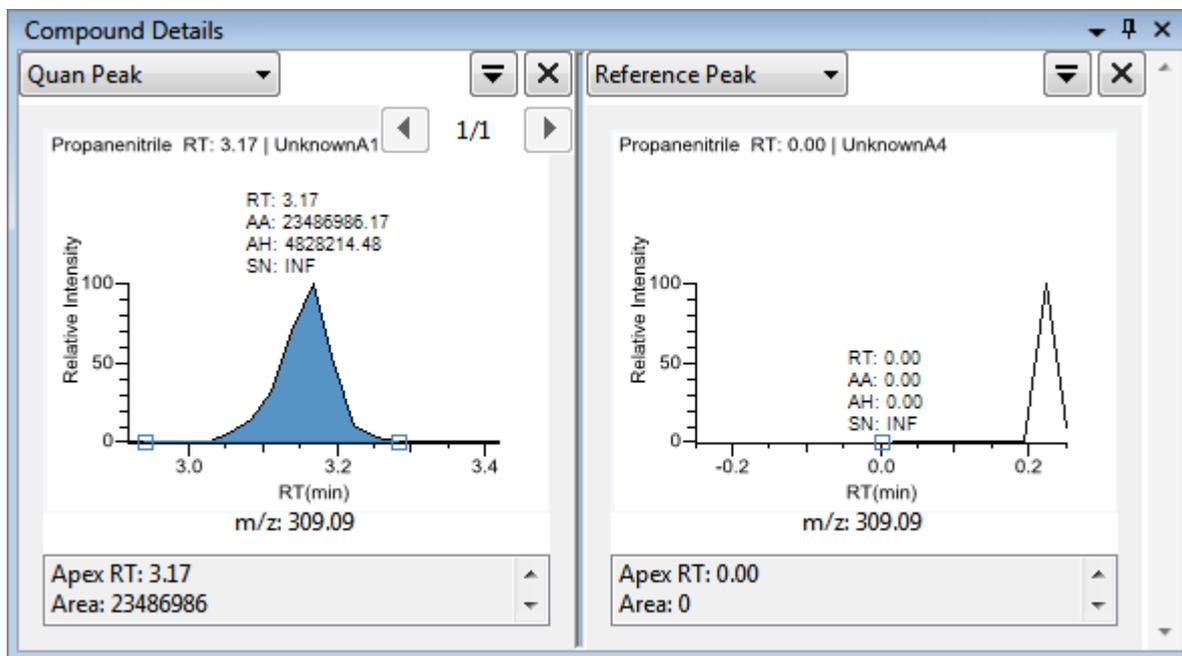
图 132. 具有内标的定量峰



## Reference Peak (参考峰)

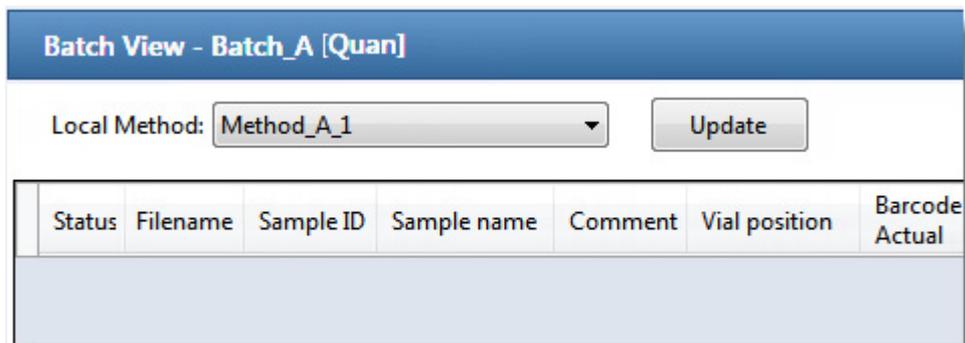
Reference Peak (参考峰) 窗格显示方法中指定的参考峰。

图 133. 具有参考峰的定量峰



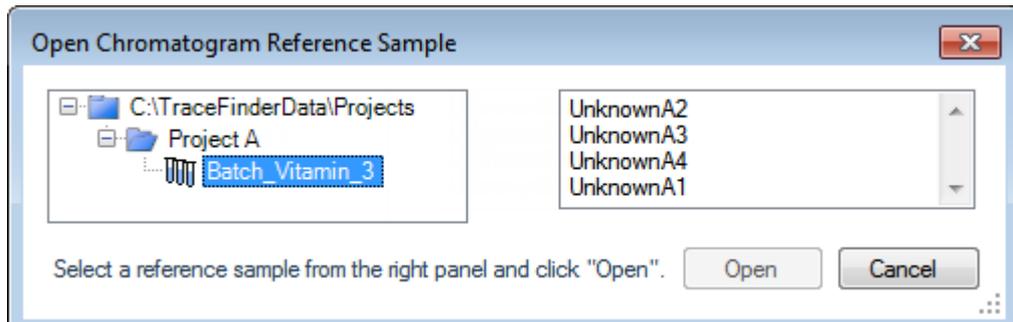
### ❖ 若要指定色谱图参考峰

1. 在 Batch View (批次视图) 中, 点击 **Reference Sample (参考样品)**。  
一个空白的参考样品表打开。



2. 点击 **Add Reference Sample (添加参考样品)** 图标, , 或右击并从快捷菜单中选择 **Add Reference Sample (添加参考样品)**。

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



**注释** 如果正在创建一个新方法，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. 从已处理样品列表中选择一个样品。

TraceFinder 应用程序显示所选批次中所有已处理的样品。若要使用某个样品作为参考样品，该样品必须采用当前主方法进行处理。

7. 点击 **Open（打开）**。

在 Method Development（方法开发）模式的 Method View（方法视图）上，该已选样品显示为色谱参考样品。

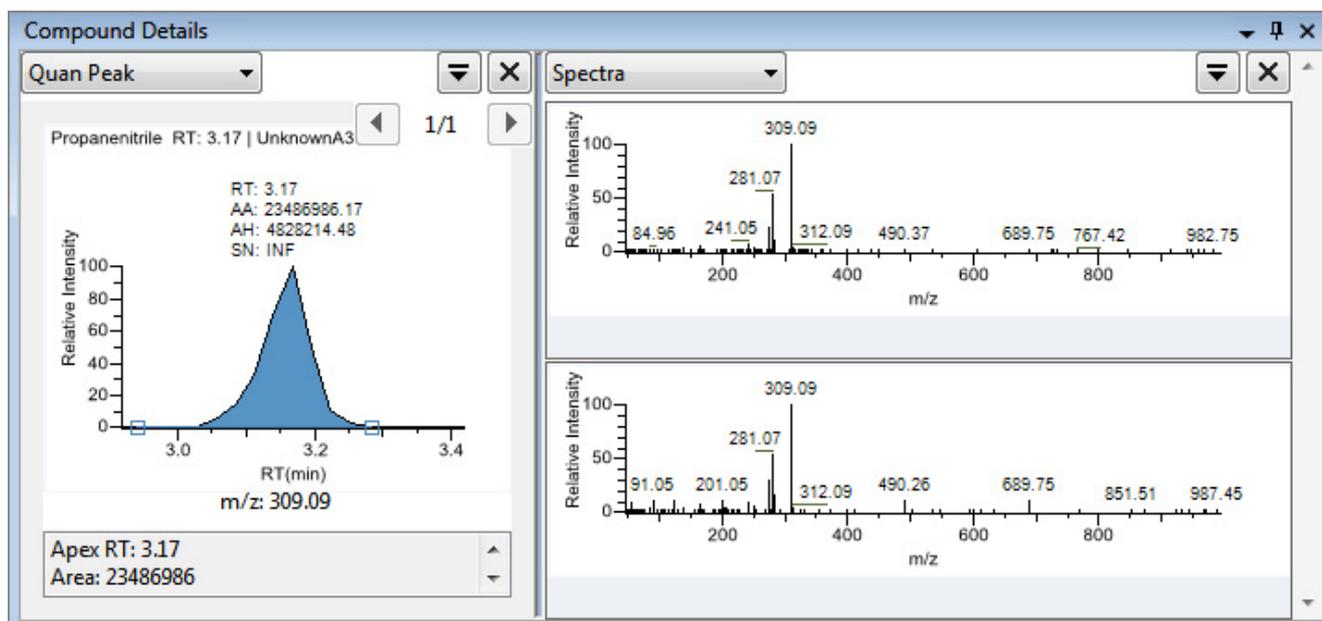
**提示** 若要将参考样品从主方法中清除，在 Set Chromatogram Reference Samples（设置色谱图参考样品）窗格中选中 **None（无）**。

## Spectra (质谱图)

Spectra (质谱图) 窗格显示在数据和方法参考中找到的质谱图对比。

**注释** 对于采用模拟检测类型的化合物，应用程序在 Spectra (质谱图) 窗格中显示“Not Available (不可用)”。

图 134. 具有数据和参考质谱的定量峰



## 导出化合物

用户可以将化合物数据导出至 Excel 电子数据表、CSV 文件、化合物数据库或新定量方法中。在 Sample View (样品视图)、Compound View (化合物视图) 和 Comparative View (对比视图) 上的 File (文件) 菜单上, 这些导出功能可用。

按照以下步骤进行操作:

- 若要导出化合物至 Excel 电子数据表
- 若要将化合物导出至 CSV 文件

### ❖ 若要导出化合物至 Excel 电子数据表

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data To (导出数据至) > CSV or Excel (CSV 或 Excel)**。

Data Review Export (数据查看导出) 对话框打开。

2. 点击 **Browse (浏览)**, 在 Export Data to Excel (导出数据至 Excel) 对话框中找到用户想要保存文件的文件夹。
3. 为 XLSX 文件输入文件名, 然后点击 **Save (保存)**。
4. 在 File Format (文件格式) 区域, 在 Data Review Export (数据查看导出) 对话框中, 选择 **Excel** 选项。
5. 在 Sheet Layout (表格布局) 区域, 为数据表从以下文件格式中选择一种格式。
  - **Multiple Worksheets (多个工作表)**: 每个 Excel 工作表写一个样品。
  - **Single Worksheet (单个工作表)**: 将所有样品写入一个 Excel 工作表中。
6. 在 Data to Export (导出数据) 区域, 选择以下其中一种数据设置进行导出。
  - **Export Visible Columns Only (仅导出可见列)**: 仅将已显示列中的数据写入指定的工作表格式中。
  - **Export All Batch Data (导出所有批次数据)**: 将所有样品所有列 (无论显示或隐藏) 中的数据写入指定的工作表格式中。
7. 点击 **Export (导出)**。

应用程序将指定的化合物数据保存至 Excel 电子数据表中, 并打开用户想要保存该文件的文件夹。应用程序为 *Batch.xlsx* 文件命名。

### ❖ 若要将化合物导出至 CSV 文件

1. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data To (导出数据至) > CSV or Excel (CSV 或 Excel)**。

Data Review Export (数据查看导出) 对话框打开。

2. 点击 **Browse (浏览)**, 在 Export Data to Excel (导出数据至 Excel) 对话框中找到用户想要保存文件的文件夹。
3. 为该 CSV 文件输入文件名, 然后点击 **Save (保存)**。
4. 在 File Format (文件格式) 区域, 在 Data Review Export (数据查看导出) 对话框中, 选择 **CSV** 选项。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用定量方法的 Data Review (数据查看)

5. 在 Sheet Layout (表格布局) 区域, 为数据表从以下文件格式中选择一种格式。
  - **Multiple Files (多个文件)**: 每个 CSV 文件写一个样品。
  - **Single File (单个文件)**: 将所有样品写入一个 CSV 文件中。
6. 在 Data to Export (导出数据) 区域, 选择以下其中一种数据设置进行导出。
  - **Export Visible Columns Only (仅导出可见列)**: 仅将已显示列中的数据写入指定的工作表格式中。
  - **Export All Batch Data (导出所有批次数据)**: 将批次中所有样品的数据写入指定工作表格式中。
7. 点击 **Export (导出)**。

应用程序将指定的化合物数据保存至 CSV 电子数据表中。

当用户选择创建多个文件时, 应用程序打开用户保存文件的文件夹。应用程序为每个 *Batch\_Compound.csv* 文件命名。

当用户选择创建一个文件时, Excel 应用程序打开, 显示所有样品的已导出数据。应用程序为 *Batch.csv* 文件命名。

## 使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

Data Review (数据查看) 视图显示了由目标筛选主方法生成的数据。在生成报告之前, 使用 Data Review (数据查看) 来验证化合物的数据。

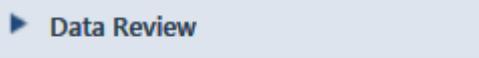
### ❖ 若要打开 Data Review (数据查看) 视图

1. 点击导航窗格上的 **Analysis (分析)**。

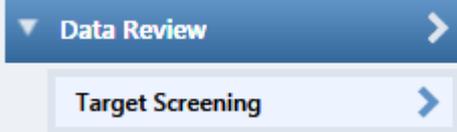
A blue rectangular button with the word "Analysis" in white text.

Analysis (分析) 导航窗格打开。

2. 单击 **Data Review (数据查看)**。

A light blue rectangular button with a right-pointing arrow and the text "Data Review" in dark blue.

Data Review (数据查看) 导航窗口打开。

Two stacked navigation buttons. The top one is dark blue with a left-pointing arrow, "Data Review", and a right-pointing arrow. The bottom one is light blue with "Target Screening" and a right-pointing arrow.

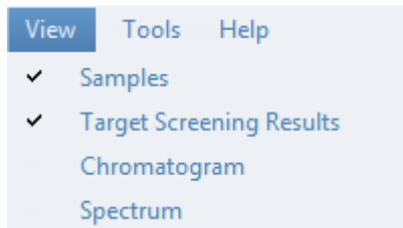
在目标筛选视图中, 该窗格显示当前批次中的所有样品列表、方法中所有化合物的结果、以及当前所选样品中找到的所有化合物的质谱图和色谱图。

### ❖ 若要显示或隐藏 Target Screening (目标筛选) 页面上的窗格

从 View (视图) 菜单上, 选择显示或隐藏以下内容:

- **Samples (样品)**
- **Target Screening Results (目标筛选结果):** 显示或隐藏 Compounds (化合物) 窗格。
- **Chromatogram (色谱图)**
- **Spectrum (质谱图)**

已显示的窗格均以复选标记来表示。

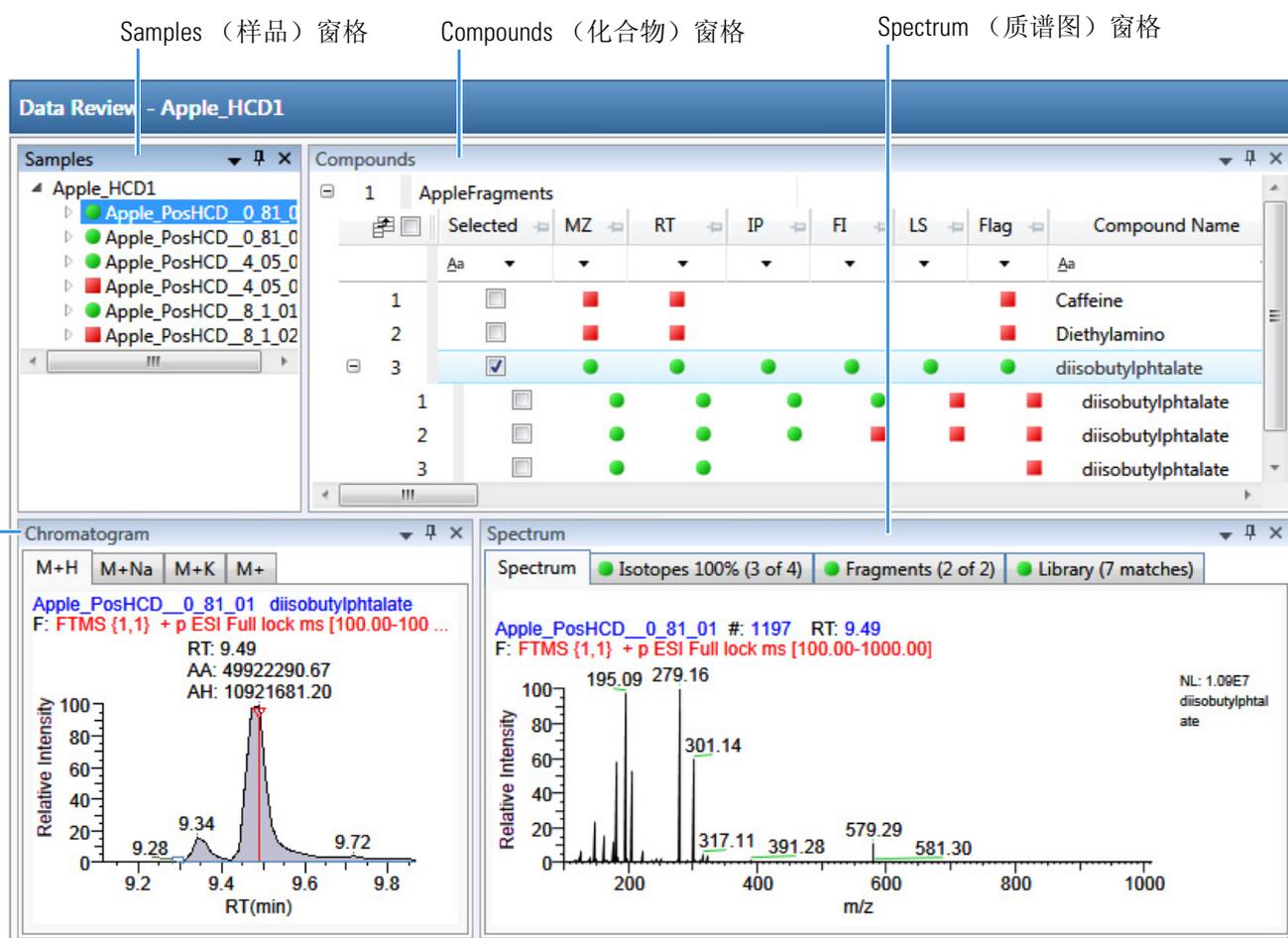
A screenshot of a software menu. The "View" menu is open, showing a list of items: "Samples" (checked), "Target Screening Results" (checked), "Chromatogram", and "Spectrum". The "Tools" and "Help" menus are also visible at the top.

## 6 使用 Analysis（分析）模式

使用 Target Screening Methods（目标筛选方法）的 Data Review（数据查看）

图 135. Target Screening（目标筛选）窗格

Chromatogram（色谱图）窗格



当在 Samples（样品）窗格上选中一个样品时，相关的 Compounds（化合物）窗格标记出所选样品中有错误的所有化合物。相关的 Chromatogram（色谱图）窗格显示所选样品中所有化合物的色谱图、保留时间、峰面积、峰高和信噪比。Spectrum（质谱图）窗格高亮显示 Compounds（化合物）窗格中所选的化合物。可以显示、隐藏或去除任意这些窗格。

有关创建固定、悬浮或选项卡式窗格的步骤，参阅第 426 页上的“Data Review（数据查看）窗格的显示特性”。

目标筛选视图包含以下特性：

- Samples（样品）窗格
- Compounds（化合物）窗格
- Chromatogram（色谱图）窗格
- Spectrum（质谱图）窗格

## Samples (样品) 窗格

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

Samples (样品) 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，显示绿色圆圈。
- ▲ 当样品 / 化合物 / 峰组合已被识别但未完全确认时，显示黄色三角。
- 当样品 / 化合物 / 峰组合未识别时，显示红色方块。

图 136. Samples (样品) 窗格

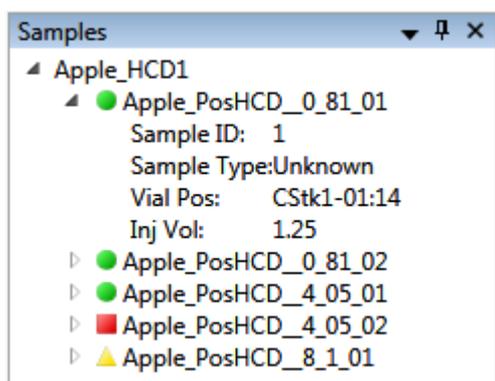


表 96. Samples (样品) 窗格快捷菜单命令

命令	描述
Sort by Alphabetical (按字母顺序排序)	将样品按照样品名的字母顺序进行排列。
Sort by Import Order (按导入顺序排序)	按样品处理的顺序进行排列。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### Compounds (化合物) 窗格

Compounds (化合物) 窗格显示所选样品中的所有找到的峰, 并对所有错误化合物进行标记。化合物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。参阅第 495 页上的“Compounds (化合物) 窗格列”。

#### 测量值或计算值的颜色编码

Compounds (化合物) 窗格使用带颜色的文本进行以下标识:

- 绿色 — 表示评分以及确认的测量值通过了方法中指定的标准。
- 红色 — 表示测量值或计算值未通过方法中指定的标准。

Measured Area	Library Score (%)
3.1312E04	12
1.9131E05	10
6.7147E04	10
1.4341E05	11

#### 显示多个加合物

当 TraceFinder 应用程序在一个样品的同一保留时间找到多个加合物时, Compounds (化合物) 窗格在表格的不同行中显示加合物。

	<input checked="" type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	diisobutylphthalate	diisobutylphthalate@RT 9.49	C16H22O4	M+H
3	<input checked="" type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	diisobutylphthalate	diisobutylphthalate@RT 9.49	C16H22O4	M+H
1	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	■	■	diisobutylphthalate	diisobutylphthalate@RT 9.49	C16H22O4	M+Na
2	<input type="checkbox"/>	●	●	●	■	■	■	diisobutylphthalate	diisobutylphthalate@RT 9.49	C16H22O4	M+K
3	<input type="checkbox"/>	●	●					diisobutylphthalate	diisobutylphthalate@RT 9.49	C16H22O4	M+

#### 导出化合物

使用 File (文件) 菜单上的功能将数据导出至 Excel 电子数据表、CSV 文件、化合物数据库或新定量方法中。

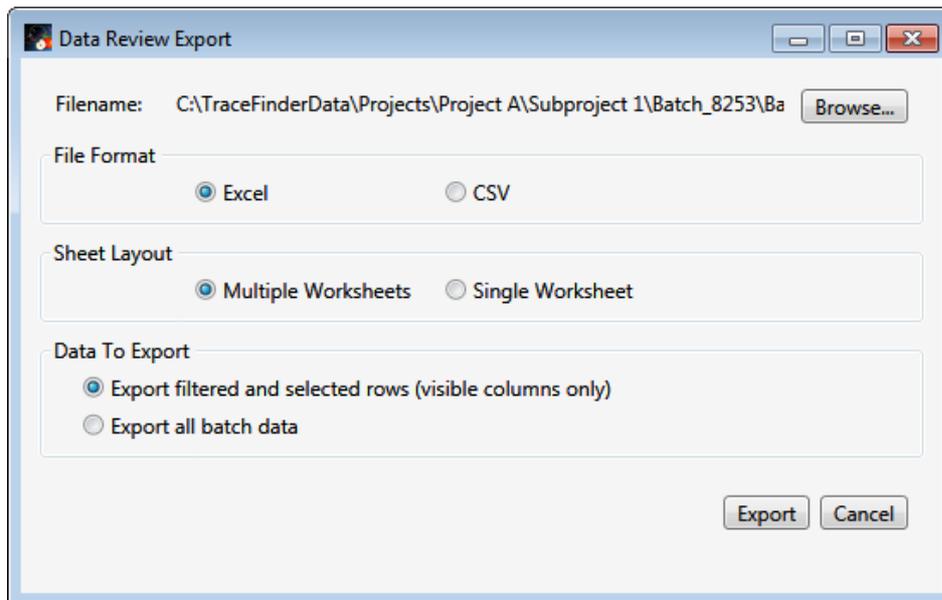
按照以下步骤进行操作:

- 若要导出化合物至 Excel 电子数据表
- 若要将化合物导出至 CSV 文件
- 若要将化合物导出至化合物数据库
- 若要采用已选化合物创建新定量方法
- 若要创建新定量方法和更新化合物数据库

### ❖ 若要导出化合物至 Excel 电子数据表

1. 对于用户想要导出至 Excel 电子数据表的每个化合物，在 Selected (已选中) 列中选中其复选框。
2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data To (导出数据至) > CSV or Excel (CSV 或 Excel)**。

Data Review Export (数据查看导出) 对话框打开。



3. 点击 **Browse (浏览)**，在 Export Data to Excel (导出数据至 Excel) 对话框中找到用户想要保存文件的文件夹。
4. 为 XLSX 文件输入文件名，然后点击 **Save (保存)**。
5. 在 File Format (文件格式) 区域，选择 **Excel** 选项。
6. 在 Sheet Layout (表格布局) 区域，为数据表从以下文件格式中选择一种格式。
  - **Multiple Worksheets (多个工作表)**：每个 Excel 工作表写一个样品。
  - **Single Worksheet (单个工作表)**：将所有样品写入一个 Excel 工作表中。
7. 在 Data to Export (导出数据) 区域，选择以下其中一种数据设置进行导出。
  - **Export Filtered and Selected Rows (Visible Columns Only) (导出过滤行和已选行，仅可见)**：将所选样品已显示列中的数据写入指定的工作表格式中。
  - **Export All Batch Data (导出所有批次数据)**：将所有样品所有列 (无论显示或隐藏) 中的数据写入指定的工作表格式中。
8. 点击 **Export (导出)**。

应用程序将指定的化合物数据保存至 Excel 电子数据表中，并打开用户想要保存该文件的文件夹。

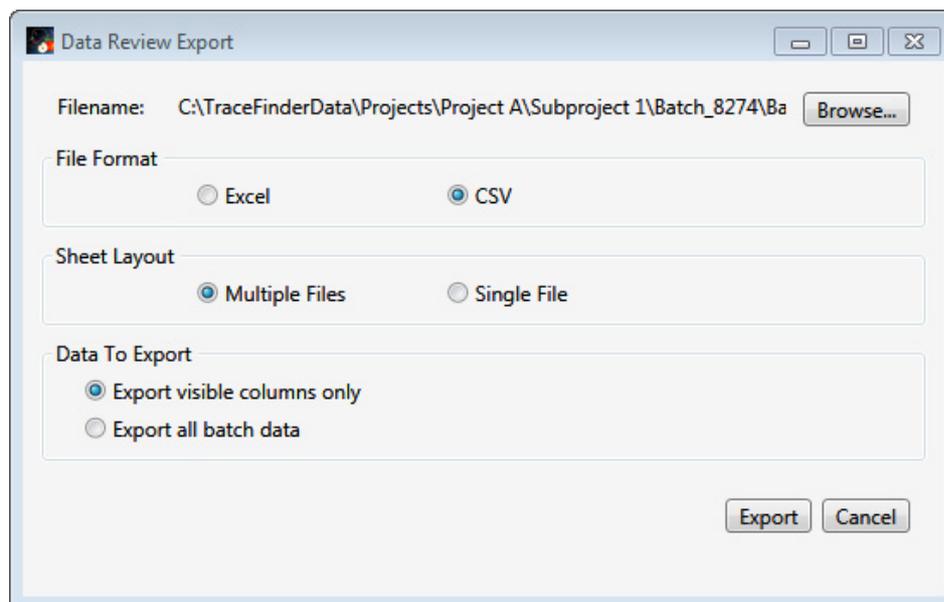
## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### ❖ 若要将化合物导出至 CSV 文件

1. 对于用户想要导出至 CSV 文件的每个化合物，在 Selected (已选中) 列中选中其复选框。
2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data To (导出数据至) > CSV or Excel (CSV 或 Excel)**。

Data Review Export (数据查看导出) 对话框打开。



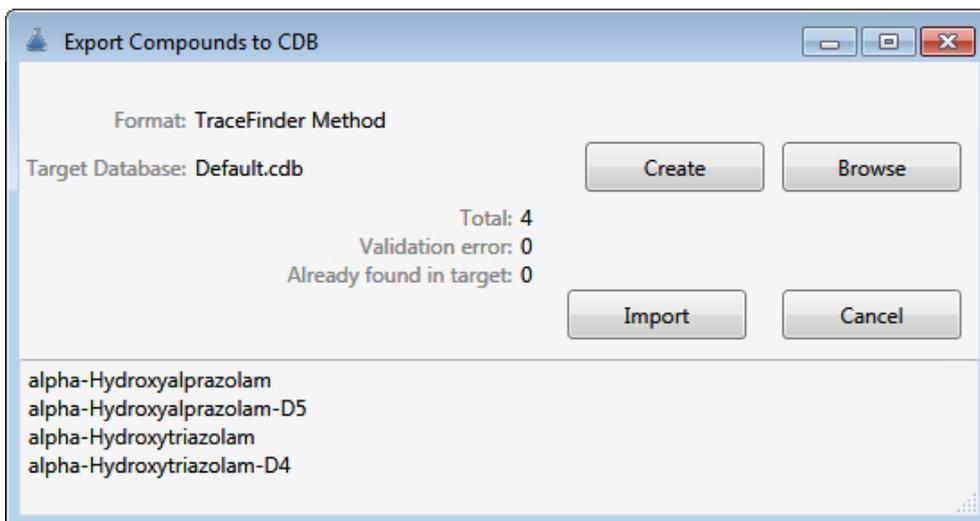
3. 点击 **Browse (浏览)**，在 Export Data to Excel (导出数据至 Excel) 对话框中找到用户想要保存文件的文件夹。
4. 为该 CSV 文件输入文件名，然后点击 **Save (保存)**。
5. 在 File Format (文件格式) 区域，选择 **CSV** 选项。
6. 在 Sheet Layout (表格布局) 区域，为数据表从以下文件格式中选择一种格式。
  - **Multiple Files (多个文件)**：每个 CSV 文件写一个样品。
  - **Single File (单个文件)**：将所有样品写入一个 CSV 文件中。
7. 在 Data to Export (导出数据) 区域，选择以下其中一种数据设置进行导出。
  - **Export Filtered and Selected Data Only (仅导出过滤数据和已选数据)**：仅将已选化合物的数据写入指定的工作表格式中。
  - **Export All Batch Data (导出所有批次数据)**：将批次中所有样品的数据写入指定工作表格式中。
8. 点击 **Export (导出)**。

应用程序将指定的化合物数据保存至 CSV 电子数据表中，并打开用户想要保存该文件的文件夹。

### ❖ 若要将化合物导出至化合物数据库

1. 对于用户想要导出至化合物数据库的每个化合物，在 Selected (已选中) 列中选中其复选框，包括用户想要导出的加合物。
2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data To (导出数据至) > Compound Database (化合物数据库)**。

Export Compounds to CDB (导出化合物至化合物数据库) 对话框打开。



3. 执行下列操作之一：
  - 接受默认的目标数据库。
  - 点击 **Create (创建)** 并输入新化合物数据库的名称。
  - 点击 **Browse (浏览)** 并从化合物数据库列表中选择。
4. 点击 **Import (导入)**。
  - 当用户将化合物导出至一个已含这些化合物的数据库时，应用程序将更新数据库中的保留时间。
  - 当用户将化合物添加至一个不含这些化合物的数据库时，应用程序将所有化合物数据添加至数据库中。

当用户仅导出化合物的一个加合物时，应用程序使用该已选择的加合物作为已更新化合物数据库或新化合物数据库中的峰。当用户导出多个加合物时，应用程序按强度顺序使用加合物。

应用程序使用已更新化合物数据库或新化合物数据库中化合物的测量保留时间。

应用程序使用已更新化合物数据库或新化合物数据库中化合物的预期  $m/z$  值。

应用程序导出所有已发现的碎片至已更新化合物数据库或新化合物数据库。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### ❖ 若要采用已选化合物创建新定量方法

1. 对于用户想要导出至新定量方法的每个化合物，在 Selected (已选中) 列中选中其复选框，包括用户想要导出的加合物。
2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data To (导出数据至) > New Quantitation Method (新定量方法)**。

新定量方法的 General (常规) 页面打开。

Method View - Unnamed\*

Calibration file last used:

Lab name: Default Laboratory

Assay type: Assay name

Injection volume: 1.00

Mass Precision: 2

Ion range calc method: Manual

Instrument method: [dropdown] [Error icon]

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]

Include Data Dependent Filters

Edit Update

3. 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。
4. 从主菜单上选择 **File (文件) > Save (保存)**。
5. 在 Save Master Method (保存主方法) 对话框中，输入方法的名称并点击 **OK (确定)**。
6. 点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Compounds (化合物)**，并观察到该应用程序已将从筛选方法中选中的化合物导至新定量方法中。

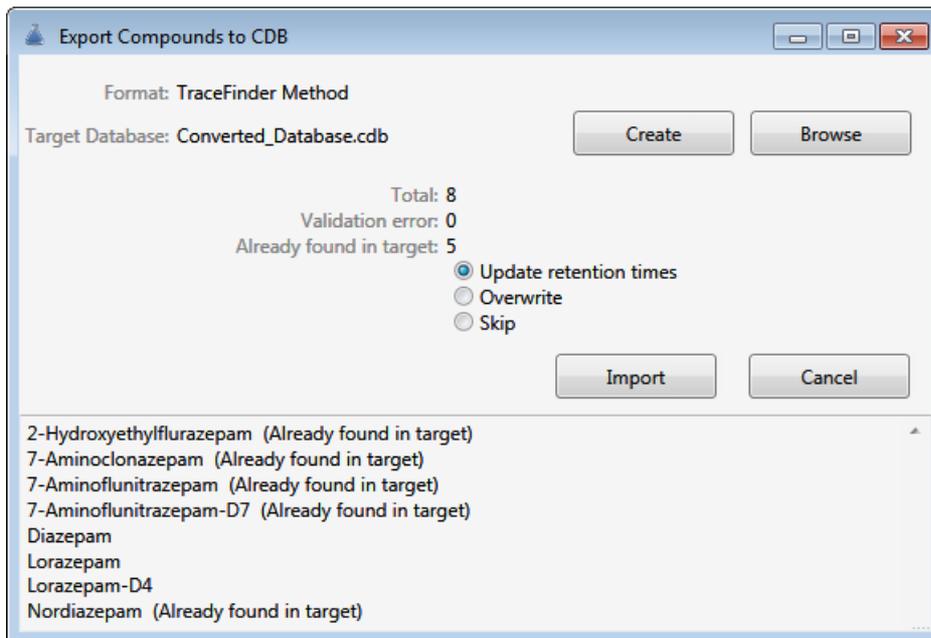
应用程序使用已选化合物的数据如下：

- 按强度顺序导出定量峰。
- 导出新方法中化合物的测量保留时间。
- 导出新方法中化合物的预期  $m/z$ 。
- 导出所有已发现的碎片至新方法。
- 为定量峰和确认离子添加过滤器。

❖ 若要创建新定量方法和更新化合物数据库

1. 对于用户想要导出的每个化合物，在 Selected (已选中) 列中选中其复选框，包括用户想要导出的加合物。
2. 从主菜单上选择 **File (文件) > Export Data (导出数据) > Update Compound Database and Create New Quantitation Method (更新化合物数据库并创建新定量方法)**。

Import Compounds to CDB (导入化合物至化合物数据库) 对话框打开。



该对话框列出了在筛选批次中选中的所有化合物。

3. 执行下列操作之一：

- 接受默认的目标数据库。
- 点击 **Create (创建)** 并输入新目标数据库的名称。
- 点击 **Browse (浏览)** 并从化合物数据库列表中选择。

该化合物列表指出了哪些化合物已经存在于目标化合物数据库中，哪些化合物没有。

4. 当任一化合物已经存在于目标数据库中时，选择以下其中一种选项：

- **Update Retention Times (更新保留时间)**：仅更新目标数据库中重复化合物的保留时间。
- **Overwrite (覆盖)**：覆盖目标数据库中重复化合物的所有化合物数据。
- **Skip (跳过)**：不要将重复化合物的任何数据写入目标数据库。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### 5. 点击 **Import (导入)**。

新定量方法的 General (常规) 页面打开。

Method View - Unnamed\*

Calibration file last used:

Lab name: Default Laboratory

Assay type: Assay name

Injection volume: 1.00

Mass Precision: 2

Ion range calc method: Manual

Instrument method: [dropdown]  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

Include Data Dependent Filters

6. 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。
7. 从主菜单上选择 **File (文件) > Save (保存)**。
8. 在 Save Master Method (保存主方法) 对话框中, 输入方法的名称并点击 **OK (确定)**。
9. 点击 Method View (方法视图) 导航窗格上的 **Compounds (化合物)**, 观察到新方法采用指定的化合物数据库, 并且应用程序已将筛选方法中选中的化合物 (采用指定的选项) 导出至新定量方法中。

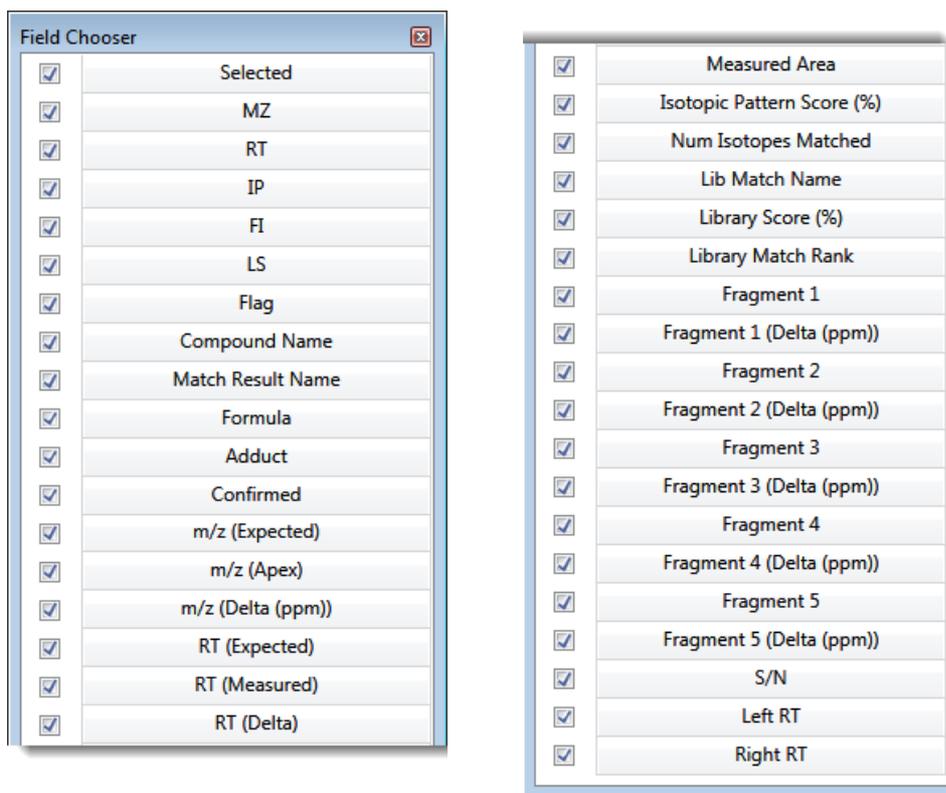
## Compounds (化合物) 窗格列

Compounds (化合物) 窗格上的该列数据显示了所有与已选样品中每个化合物相关的参数值。参阅 [Compounds \(化合物\) 窗格参数](#)。

### ❖ 若要隐藏或显示 Compounds (化合物) 窗格上的列

1. 点击结果表左上角处的 **Field Chooser (域选择器)** 图标, 。

Field Chooser (域选择器) 显示 Compounds (化合物) 窗格上的所有可用数据列。



2. 选中想要显示的每列的复选框, 或者清除想要隐藏的每列的复选框。  
该应用程序立即在 Compounds (化合物) 窗格上显示或隐藏该列。
3. 当修改完列显示以后, 点击 , 关闭 Field Chooser (域选择器)。

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### Compounds (化合物) 窗格参数

Compounds (化合物) 窗格显示所有与已选样品中每个化合物相关的参数值。

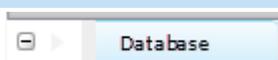
图 137. Compounds (化合物) 窗格

	Selected	MZ	RT	IP	FI	LS	Flag	Compound Name	Match Result Name	Formula
1	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 0.19	C17H14ClFN2O2
2	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 1.42	C17H14ClFN2O2
3	<input type="checkbox"/>	●	■	●		■	▲	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 1.71	C17H14ClFN2O2
4	<input type="checkbox"/>	●	■	●		■	▲	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 1.96	C17H14ClFN2O2
5	<input type="checkbox"/>	●	●	●	●	●	●	2-Hydroxyethylflurazepam	2-Hydroxyethylflurazepam@RT 2.35	C17H14ClFN2O2

表 97. Compounds (化合物) 窗格参数 (第 1 页, 共 6 页)

#### 列

#### 描述

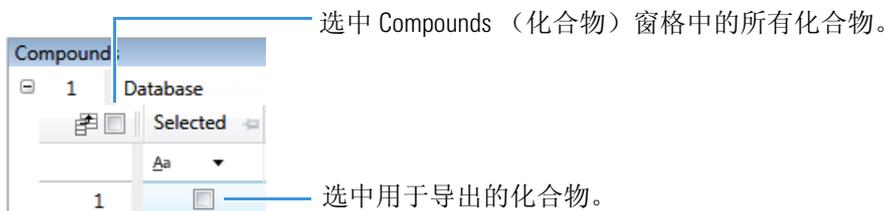


显示当前的化合物数据库。当用户有多个筛选数据库时, 应用程序单独列出每个数据库的结果。



#### Selected (已选中)

识别用于导出的各个化合物。若要选择导出所有化合物, 选中第一列的复选框。



#### MZ (质荷比)

质荷比标记。应用程序显示以下其中一种标识:

- 绿色圆圈 (通过), 当  $m/z$  测量值在指定阈值范围内时。
- 红色圆圈 (未通过), 当  $m/z$  测量值不在指定阈值范围内时。
- 空白, 当质荷比不可用时。

若要显示预期值、测量值和  $m/z$  差值, 将光标停留在标识的上方。

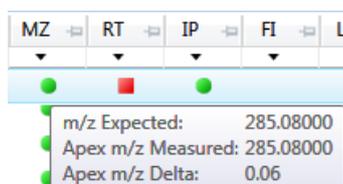
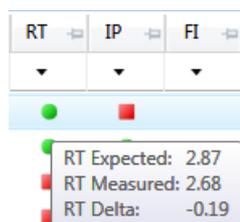


表 97. Compounds (化合物) 窗格参数 (第 2 页, 共 6 页)

列	描述
RT (保留时间)	<p>Retention Time (保留时间) 标记。应用程序显示以下其中一种标识:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>绿色圆圈 (通过), 当测量保留时间值在化合物数据库中指定的 RT Window (保留时间窗口) 值范围内时。</li> <li>红色圆圈 (未通过), 当测量保留时间值不在化合物数据库中指定的 RT Window (保留时间窗口) 值范围内时。因而, 它导致 <math>m/z</math> 值显示未通过标记, 因为该应用程序无法识别符合保留时间的 <math>m/z</math> 值。</li> <li>空白, 当保留时间值不可用时。当保留时间被选为“确认”及未检测到 <math>m/z</math> 时, 不存在任何标记。</li> </ul>

或者, 用户可以在方法中设置一个不同的保留时间窗口。参阅第 219 页上的“指定识别和确认设置”。

若要显示预期值、测量值和保留时间差值, 将光标停留在标识的上方。



IP (同位素分布)	<p>Isotopic Pattern (同位素分布) 标记。应用程序显示以下其中一种标识:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>绿色圆圈 (通过), 当分数百分比高于指定的匹配阈值百分比时。</li> <li>红色圆圈 (未通过), 当分数百分比低于指定的匹配阈值百分比时。</li> <li>空白, 当未对参数进行计时时。</li> </ul>
------------	---

若要显示匹配同位素的分数, 将光标停留在标识的上方。

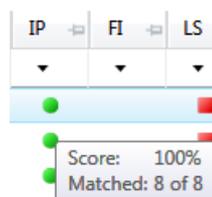


表 97. Compounds (化合物) 窗格参数 (第 3 页, 共 6 页)

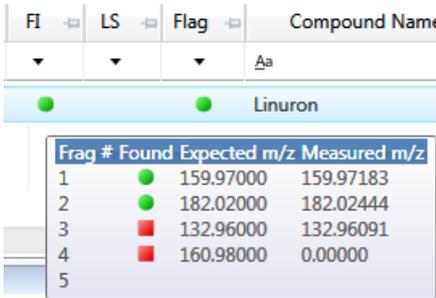
列	描述
FI (碎片离子)	<p>Fragment Ions (碎片离子) 标记。应用程序显示以下其中一种标识:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>绿色圆圈 (通过), 当任一碎片的 <math>m/z</math> 测量值在方法中指定的质量数容许偏差范围内时。在 Spectrum (质谱图) 窗格的 Isotopes (同位素) 页面上, All Isotopes (所有同位素) 和 Multi-Isotopes (多同位素) 的标记均为绿色。</li> <li>红色圆圈 (未通过), 当碎片的 <math>m/z</math> 测量值均不在方法中指定的质量数容许偏差范围内时。在 Spectrum (质谱图) 窗格的 Isotopes (同位素) 页面上, All Isotopes (所有同位素) 和 Multi-Isotopes (多同位素) 的标记均为红色。</li> <li>空白, 当未检测到任何碎片时。</li> </ul> <p>若要显示碎片列表及其通过 / 未通过状态, 将光标停留在标识的上方。</p> 
LS (库检索)	<p>Library Search (库检索) 标记。应用程序显示以下其中一种标记:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>绿色圆圈, 当库检索成功进行时。</li> <li>红色圆圈, 当库检索不成功时。</li> </ul>
Flag (标记)	<p>表示识别和确认标准的状态。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>绿色圆圈, 当样品 / 化合物 / 峰组合已被识别且完全确认时。</li> <li>黄色三角, 当样品 / 化合物 / 峰组合已被识别但未完全确认时。</li> <li>红色方块, 当样品 / 化合物 / 峰组合未识别时。</li> </ul>
Compound Name (化合物名称)	与化合物数据库匹配的化合物名称。
Match Result Name (匹配结果名称)	与化合物数据库和保留时间匹配的化合物名称。
Formula (分子式)	化合物数据库中指定的峰的分子式。
Adduct (加合物)	化合物保留时间的最大强度加合物。
Confirmed (已确认)	方法中指定的总数中已确认标准的数量。

表 97. Compounds (化合物) 窗格参数 (第 4 页, 共 6 页)

列	描述
<i>m/z</i> (Expected) (质荷比, 预期)	<p>化合物数据库中的质荷比。假设电荷为 1。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>若已找到加合物, 该应用程序显示该化合物的中性质量数值 (由中性分子式计算得来) ± 该化合物中找到的最大强度加合离子的质量数。</li> <li>若未找到加合物, 该应用程序显示化合物的中性质量数值 ± 化合物数据库中输入的首个加合物的质量数。</li> </ul> <p>有关为化合物数据库指定加合物的详细信息, 参阅第 56 页上的“指定 Adducts (加合物)”。</p> <p>有关将加合物添加至化合物的详细信息, 参阅第 260 页上的“编辑数据库中的化合物”</p> <p><b>注释</b> 若加合物为增加, 则加合物质量数为正数。若加合物为丢失, 则加合物质量数为负数。在增加或扣除加合物质量数之后得到的质量数永远是正数。</p>
<i>m/z</i> (Apex) (质荷比, 峰尖)	<p>在峰质谱图中找到的质荷比。假设电荷为 1。</p> <p>当应用程序成功对峰进行积分时, 该列显示化合物的带电 <i>m/z</i> 值, 也就是峰尖扫描中的最高强度值。</p> <p>当应用程序未能成功对峰进行积分时, 该列显示为 N/F。</p>
<i>m/z</i> (Delta) (质荷比, 差值)	<p><i>m/z</i> (Expected) (质荷比, 预期) 和 <i>m/z</i> (Apex) (质荷比, 峰尖) 之间的差值。假设电荷为 1。</p> <p>当 <i>m/z</i> (Apex) (质荷比, 峰尖) 列显示化合物的 <i>m/z</i> 值时, 该列显示与峰尖扫描中最高强度相对应的 <i>m/z</i> 差值。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>当主方法中指定的质量数容许偏差单位为 ppm 时, 那么 <math>m/z</math> (差值) = 1 000 000 × ([<i>m/z</i> (峰尖) - <i>m/z</i> (预期)] × <i>m/z</i> (预期))。</li> <li>当主方法中指定的质量数容许偏差单位为 mmu 时, 那么 <math>m/z</math> (差值) = 1000 × (<i>m/z</i> (峰尖) - <i>m/z</i> (预期))。</li> </ul>
RT (Expected) (保留时间, 预期)	化合物数据库中指定的峰的保留时间。
RT (Measured) (保留时间, 测量)	已找到的峰尖保留时间。
RT (Delta) (保留时间, 差值)	峰的预期保留时间和测量保留时间之间的差值。
Measured Area (测量峰面积)	色谱图窗格上的 AA 值。
Isotopic Pattern Score(%) (同位素分布分数, %)	同位素总数与匹配同位素数目之间的百分比。

表 97. Compounds (化合物) 窗格参数 (第 5 页, 共 6 页)

列	描述
Num Isotopes Matched (匹配同位素数)	<p>与计算分数所使用的同位素总数相关的预期计算同位素质谱中的同位素匹配数, 以 <math>x</math> of <math>y</math> (<math>y</math> 分之 <math>x</math>) 的形式表示, 其中</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><math>x</math> = 用于 Isotopic Pattern Score (同位素分布分数) 计算的匹配元素组成的同位素数。</li> <li><math>y</math> = 在 Isotopic Pattern Score (同位素分布分数) 计算时考虑的同位素总数。这是预期高于质谱图噪声的同位素峰数。</li> </ul>
Lib Match Name (库匹配名称)	<p>库检索中最佳匹配化合物的名称。当应用程序在库中找到匹配时, 该列显示与库匹配的具有最高分数的条目。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>当应用程序未执行库检索时, 该列以黑色文本的形式显示 “N/A”。</li> <li>当应用程序未执行 MS/MS 扫描时, 该列以红色文本的形式显示 “N/A”。</li> </ul>
Library Score (%) (库分数, %)	<p>库匹配的分数。当应用程序在库中找到匹配时, 该列显示与 Lib Match Name (库匹配名称) 参数相关的最高分数。</p> <p>当应用程序既执行库检索又执行 MS/MS 扫描, 且库条目和分子式均与目标化合物相匹配时:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>当库分数高于或等于分数阈值时, 该标准通过。该列以绿色文本的形式显示其值。</li> <li>当库分数低于分数阈值时, 该标准未通过。该列以红色文本的形式显示其值。</li> </ul> <p>当应用程序未执行库检索时, 该列以黑色文本的形式显示 “N/A”。</p> <p>当应用程序未执行 MS/MS 扫描时, 该列以红色文本的形式显示 “N/A”。</p> <p>范围: 1 至 100%</p>
Library Match Rank (库匹配排名)	<p>显示库匹配的排序。当应用程序在库中找到匹配项目时, 该列显示库条目相关的排序, 以 “<math>x</math> of <math>y</math> (<math>y</math> 分之 <math>x</math>) ” 的形式表示, 其中</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><math>x</math> = 最高分数库匹配的排名。</li> <li><math>y</math> = 包含分数最高匹配的特定加合物匹配列表中的库匹配条目总数。</li> </ul> <p>当应用程序既执行库检索又执行 MS/MS 扫描, 且库条目和分子式均与目标化合物相匹配时:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>当库分数高于或等于分数阈值时, 该标准通过。该列以绿色文本的形式显示其值。</li> <li>当库分数低于分数阈值时, 该标准未通过。该列以红色文本的形式显示其值。</li> </ul> <p>当应用程序未执行库检索时, 该列以黑色文本的形式显示 “N/A”。</p> <p>当应用程序未执行 MS/MS 扫描时, 该列以红色文本的形式显示 “N/A”。</p>

表 97. Compounds (化合物) 窗格参数 (第 6 页, 共 6 页)

列	描述										
Fragment <i>n</i> (碎片 <i>n</i> )	<p>显示碎片离子的 <i>m/z</i> 测量值。应用程序单独为每个已找到的碎片显示一列。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>对于通过方法中的过滤器并在化合物数据库找到的每个碎片, Compounds (化合物) 表格以绿色文本的形式显示 <i>m/z</i> 值。</li> <li>对于未能通过方法中的过滤器, 但在化合物数据库找到的每个碎片, Compounds (化合物) 表格以红色文本的形式显示 <i>m/z</i> 值。</li> <li>对于未在化合物数据库中发现的每个碎片, Compounds (化合物) 表格显示为 N/S (未指定)。</li> </ul> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; margin: 10px 0;"> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Fragment 1</td> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">▼</td> </tr> <tr> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">Aa</td> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">▼</td> </tr> <tr> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">N/S</td> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">——— 未在化合物数据库发现的碎片</td> </tr> <tr> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">187.06</td> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">——— 已发现但不符合方法参数的碎片</td> </tr> <tr> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">159.97</td> <td style="border: 1px solid black; padding: 2px;">——— 已发现并符合方法参数的碎片</td> </tr> </table> </div> <p><b>注释</b> 化合物中最多可含五个碎片, Compounds (化合物) 表格最多可含五个 Fragment (碎片) 列。当一个化合物中的碎片少于五个时, 所有剩余的 Fragment (碎片) 列显示为 N/S。</p>	Fragment 1	▼	Aa	▼	N/S	——— 未在化合物数据库发现的碎片	187.06	——— 已发现但不符合方法参数的碎片	159.97	——— 已发现并符合方法参数的碎片
Fragment 1	▼										
Aa	▼										
N/S	——— 未在化合物数据库发现的碎片										
187.06	——— 已发现但不符合方法参数的碎片										
159.97	——— 已发现并符合方法参数的碎片										
Fragment <i>n</i> (Delta (ppm/mmu)) (碎片 <i>n</i> , 差值 [ppm/mmu])	<p>化合物数据库中碎片离子的 <i>m/z</i> 预期值与碎片离子的 <i>m/z</i> 测量值之间的差值。</p> <p>应用程序单独为每个已识别的碎片显示一个差值列。</p>										
S/N (信噪比)	为已找到峰计算的信噪比。										
Left RT (左侧保留时间)	积分峰左侧前沿的时间点。										
Right RT (右侧保留时间)	积分峰右侧后沿的时间点。										

## Chromatogram (色谱图) 窗格

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

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。如果某个加合物没有信号, 其显示在指定保留时间和色谱图窗口内的预期  $m/z$  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。

对于每个加合物, Spectrum (质谱图) 窗格显示其质谱图、同位素、碎片和库匹配。参阅第 503 页上的“Spectrum (质谱图) 窗格”。

图 138. Chromatogram (色谱图) 窗格

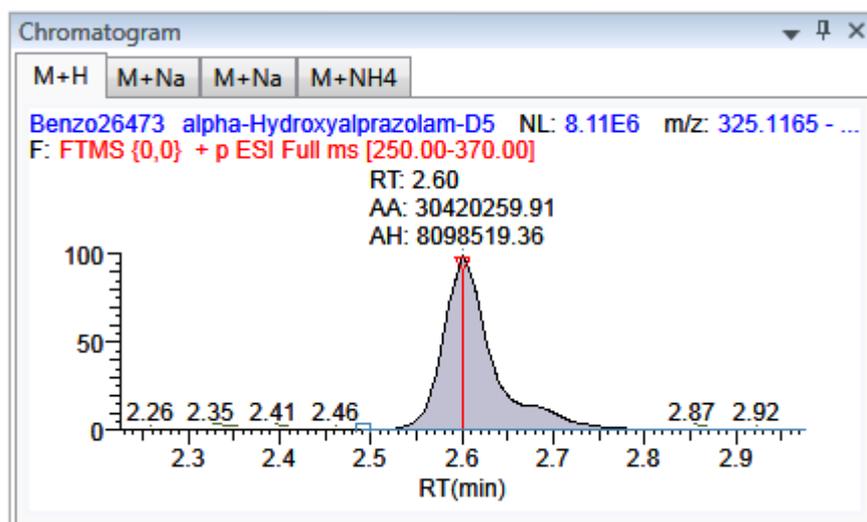


表 98. Chromatogram (色谱图) 窗格快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。

## Spectrum (质谱图) 窗格

利用 Spectrum (质谱图) 窗格显示 Chromatogram (色谱图) 窗格内所选加合物的质谱图、同位素、碎片和库检索信息。Spectrum (质谱图) 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。参阅第 220 页上的“若要指定识别和确认设置”。

Spectrum (质谱图) 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)：

- Spectrum (质谱图)
- Isotopes (同位素)
- Fragments (碎片)
- Library (库)

## Spectrum (质谱图)

应用程序在 Spectrum (质谱图) 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, 应用程序将查看宽度调整为扫描范围。

图 139. Spectrum (质谱图) 页面

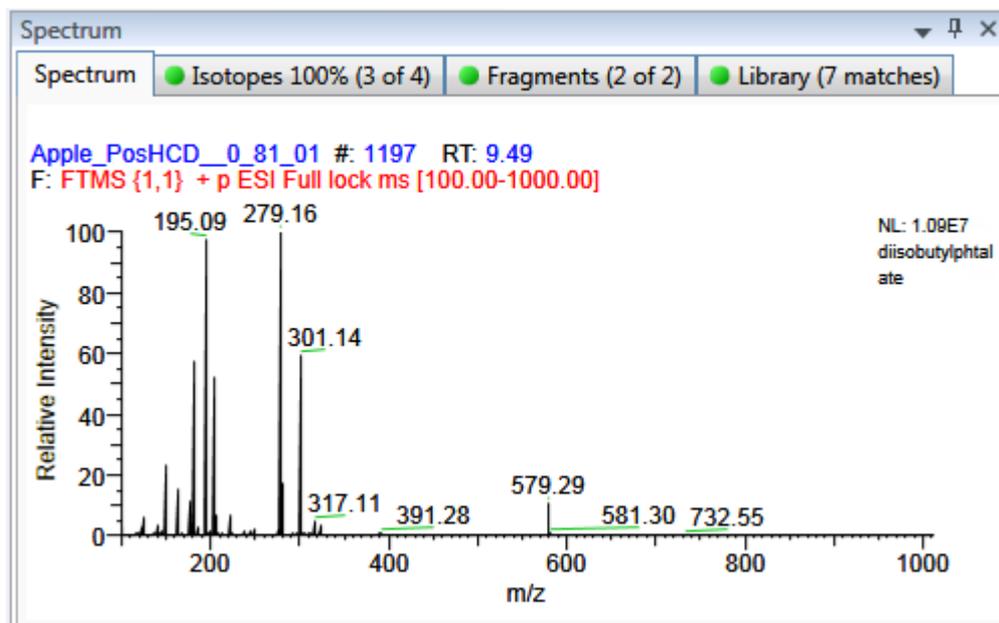


表 99. Spectrum (质谱图) 页面快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。

## Isotopes (同位素)

根据筛选方法中指定的阈值和偏差参数，Isotopes (同位素) 页面显示化合物所有加合物的同位素分布结果。

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匹配阈值百分比。

- 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，则该同位素峰已找到。

若要指定阈值和偏差参数，参阅第 220 页上的“若要指定识别和确认设置”。

Isotopes (同位素) 页面以以下三种方式中的一种来显示同位素离子：

- All Isotopes (所有同位素)
- Multi-Isotopes (多同位素)
- 单个同位素

所有同位素页面采用快捷菜单来指定如何显示数据。参阅第 508 页上的“Isotopes (同位素) 页面快捷菜单命令”。

### All Isotopes (所有同位素)

All Isotopes (所有同位素) 视图显示化合物中已发现的所有同位素的组合。应用程序根据强度最大的同位素调整窗口的尺寸。强度最大的同位素通常为第一个同位素，除非用户所用的为卤代化合物。应用程序以红色实线显示测量峰；应用程序以蓝色虚线表示预期峰。

应用程序为 All Isotopes (所有同位素) 视图显示以下标题：

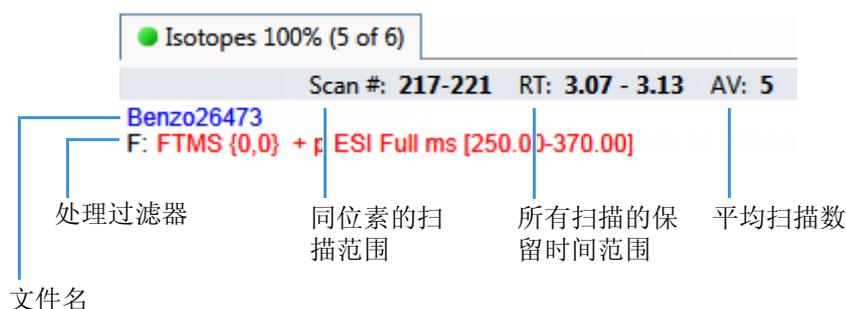


图 140. 含所有同位素堆积质谱图的 Isotopes (同位素) 页面

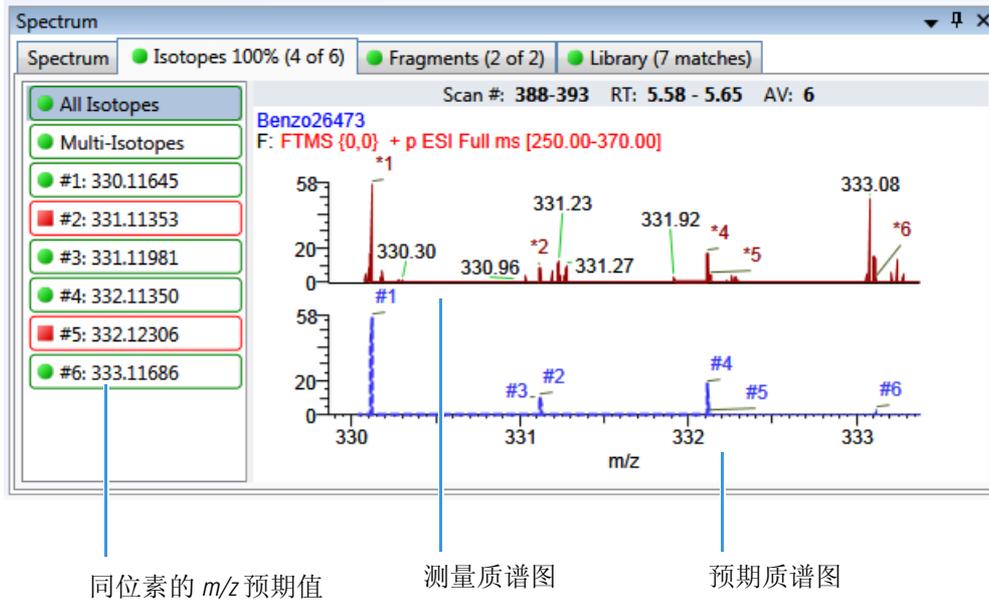
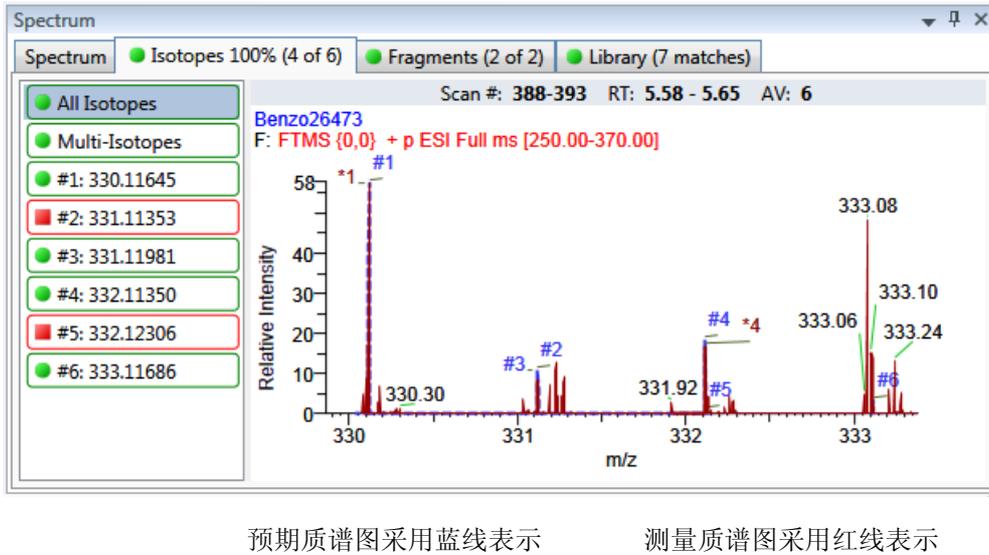


图 141. 含所有同位素重叠质谱图的 Isotopes (同位素) 页面



## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### Multi-Isotopes (多同位素)

Multi-Isotopes (多同位素) 视图单独为每个同位素显示一个图。用户可以分别堆积或重叠每个同位素的谱图。

应用程序为 Multi-Isotopes (多同位素) 视图显示以下标题:

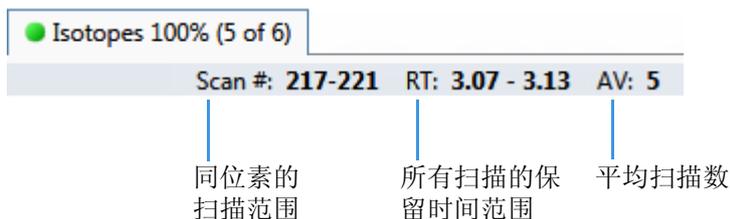
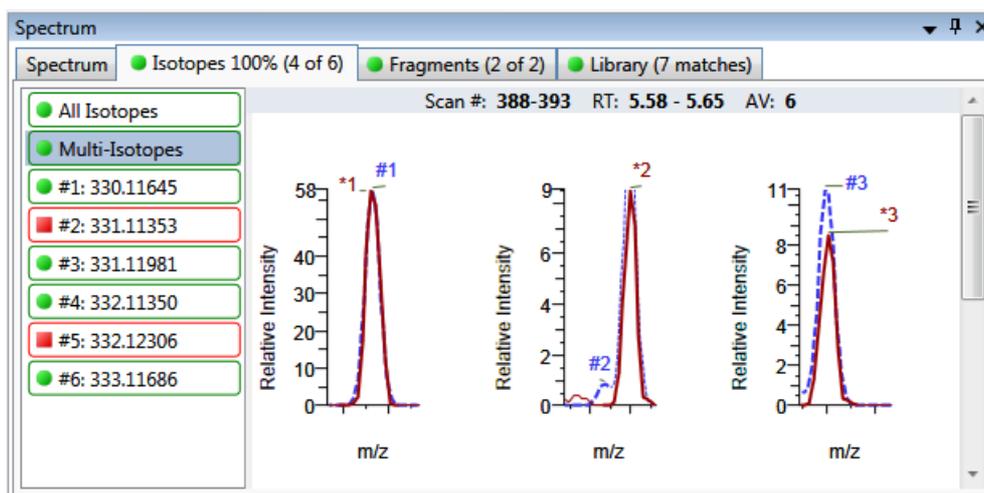


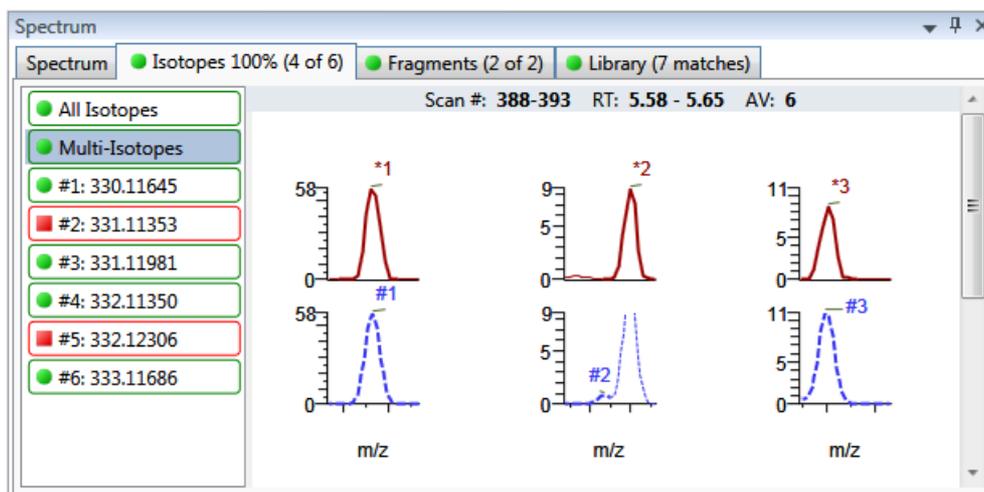
图 142. 含多个同位素重叠质谱图的 Isotopes (同位素) 页面



预期质谱图采用蓝线表示

测量质谱图采用红线表示

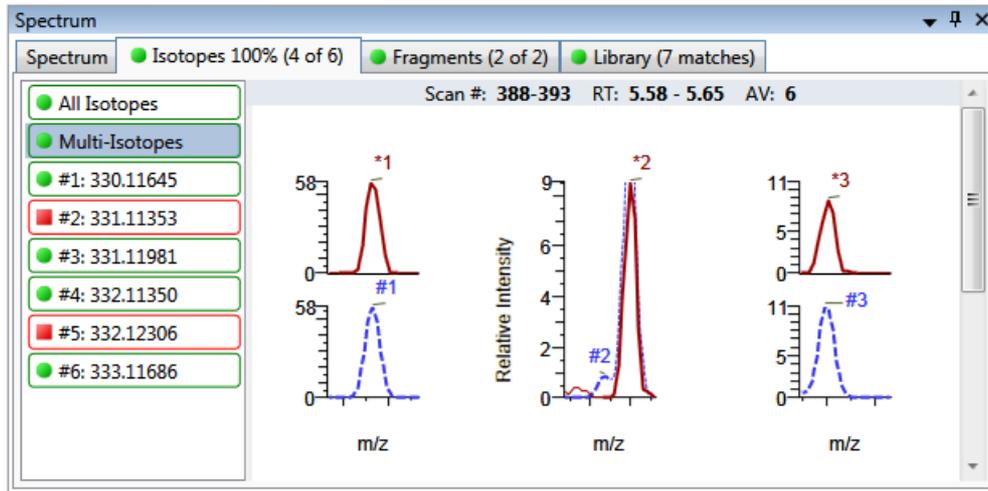
图 143. 含多个同位素堆积质谱图的 Isotopes (同位素) 页面



预期质谱图采用蓝线表示

测量质谱图采用红线表示

图 144. 含多元同位素堆积质谱图和重叠质谱图的 Isotopes (同位素) 页面



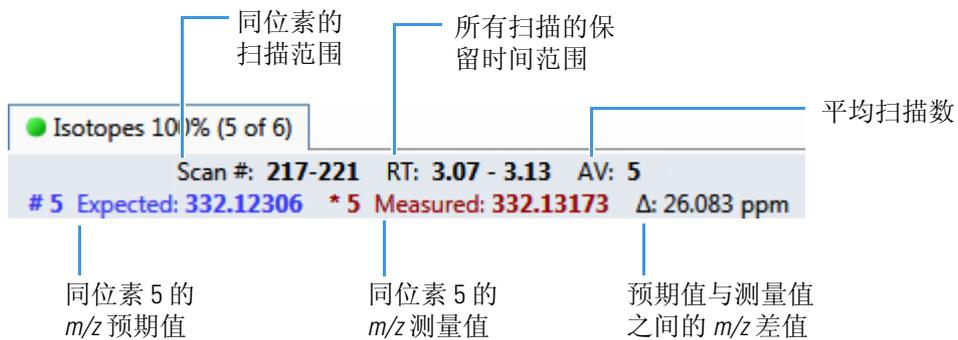
预期质谱图采用蓝线表示

测量质谱图采用红线表示

### 单个同位素

单个同位素视图显示了一个同位素的预期峰和测量峰。

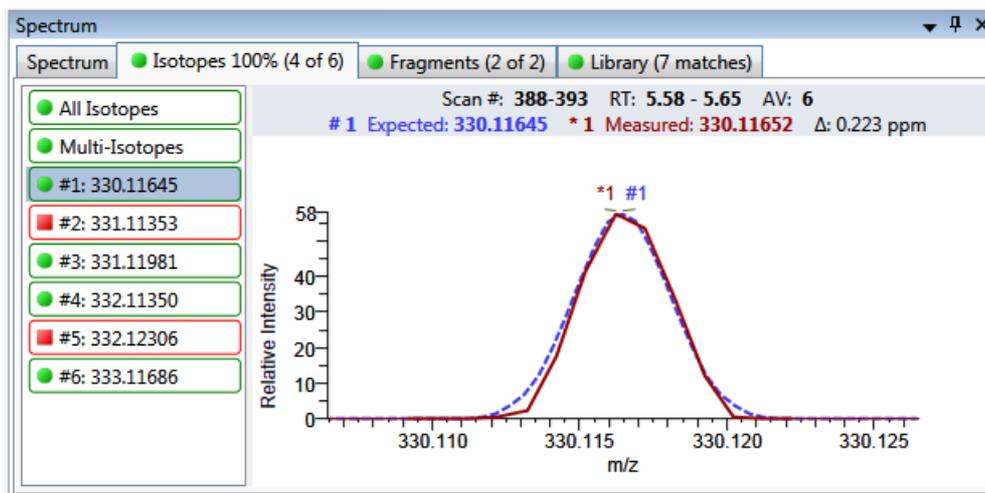
应用程序为单个同位素视图显示以下标题：



## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

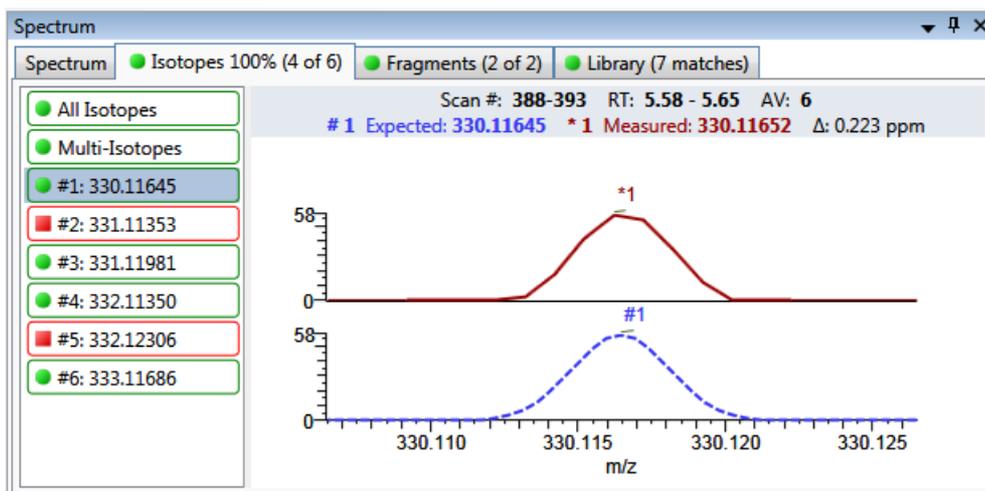
图 145. 含单个同位素重叠质谱图的 Isotopes (同位素) 页面



预期质谱图采用蓝线表示

测量质谱图采用红线表示

图 146. 含单个同位素堆积质谱图的 Isotopes (同位素) 页面



预期质谱图采用蓝线表示

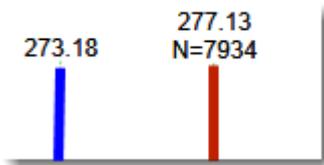
测量质谱图采用红线表示

表 100. Isotopes (同位素) 页面快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。
Display Overlay Spectra (显示重叠质谱图)	重叠两个质谱图显示, 或者堆积模拟质谱图和峰尖质谱图。
Display Stack Spectra (显示堆积质谱图)	

表 100. Isotopes (同位素) 页面快捷菜单命令

命令	描述
Show/Hide Noise Label (显示 / 隐藏噪声标签)	为每个峰添加噪声标签。预期同位素峰 (以蓝线显示) 不显示噪声标签。
Show/Hide Resolution Label (显示 / 隐藏分辨率标签)	为每个峰添加分辨率标签。预期同位素峰 (以蓝线显示) 不显示分辨率标签。



## Fragments (碎片)

Fragments (碎片) 页面显示在筛选方法中指定的碎片最大数量。参阅第 220 页上的“若要指定识别和确认设置”。

若筛选库中不存在该化合物的碎片, 用户可以将碎片添加至筛选库。参阅第 267 页上的“若要将碎片添加至目标峰”。

Fragments (碎片) 页面以以下两种方式中的一种来显示碎片:

- All Fragments (所有碎片)
- 单个碎片

### All Fragments (所有碎片)

All Fragments (所有碎片) 视图显示化合物中已发现的所有碎片的组合。应用程序以红色实线显示测量峰; 应用程序以蓝色虚线表示预期峰。

应用程序为 All Fragments (所有碎片) 视图显示以下标题:

● Fragments (2 of 4)

Minimum # of fragments needed: 1

blank #: 2184 RT: 6.09

F: FTMS + p ESI d Full ms2 249.02@hcd35.00 [50.00-275.00]

处理过滤器

文件名

方法中指定的碎片的最少数

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

图 147. 含所有碎片重叠质谱图的 Fragments (碎片) 页面

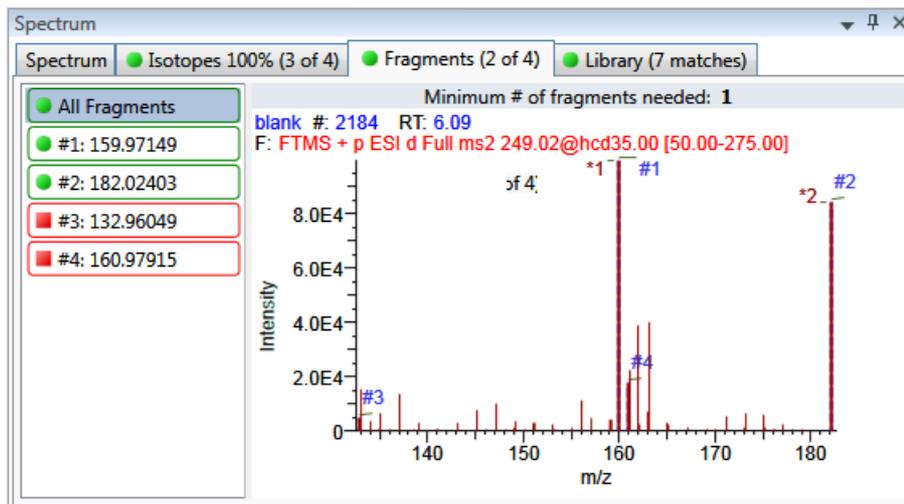
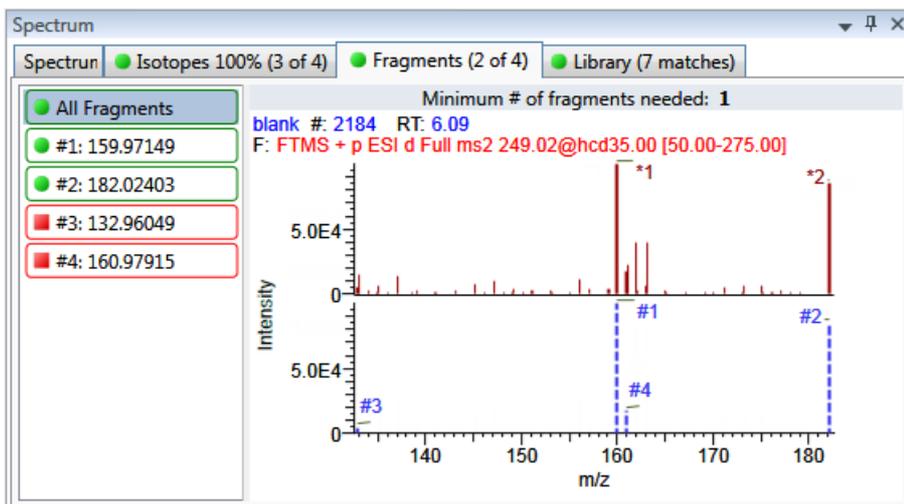


图 148. 含所有碎片堆积质谱图的 Fragments (碎片) 页面



### 单个碎片

单个碎片视图显示了一个碎片的预期峰和测量峰。

应用程序为单个碎片视图显示以下标题：

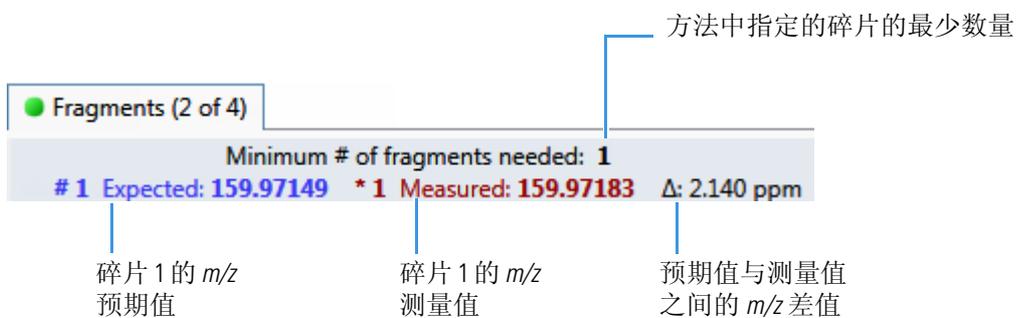
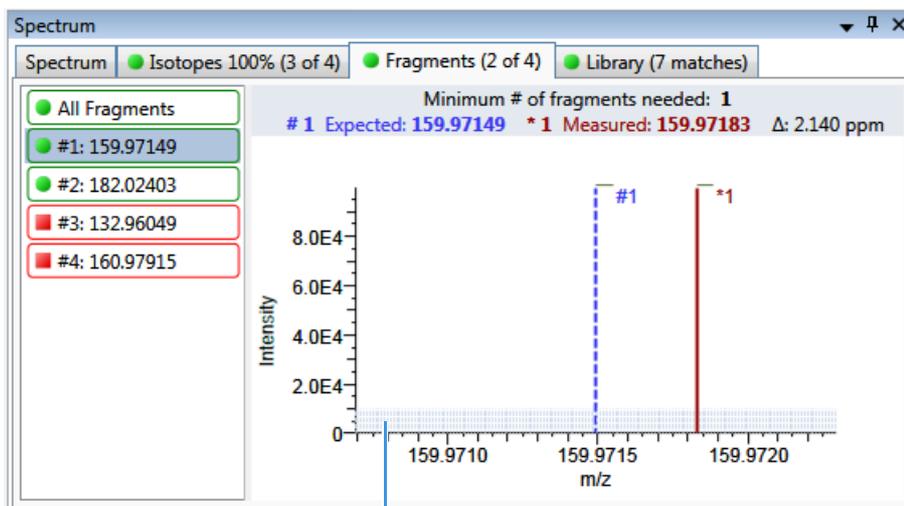


图 149. 带单个碎片重叠质谱图的 Fragments (碎片) 页面



方法中指定的强度阈值

图 150. 含单个碎片堆积质谱图的 Fragments (碎片) 页面

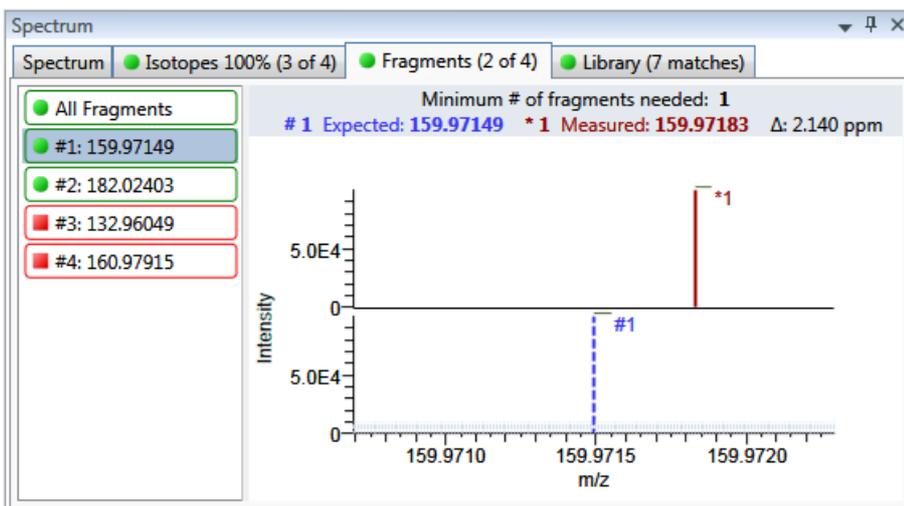


表 101. Fragments (碎片) 页面快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。
Display Overlay Spectra (显示重叠质谱图)	重叠两个质谱图显示, 或者堆积模拟质谱图和峰尖质谱图。
Display Stack Spectra (显示堆积质谱图)	

## 6 使用 Analysis (分析) 模式

使用 Target Screening Methods (目标筛选方法) 的 Data Review (数据查看)

### Library (库)

Library (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。参阅第 220 页上的“若要指定识别和确认设置”。

应用程序调整匹配的库质谱图和实验质谱图中的最高峰至显示为 100% 强度, 并将匹配的库条目名称得到的中性丢失 (NL) 值显示在图表右侧。

应用程序为单个加合物显示以下标题:



图 151. 含堆积质谱图的 Library (库) 页面

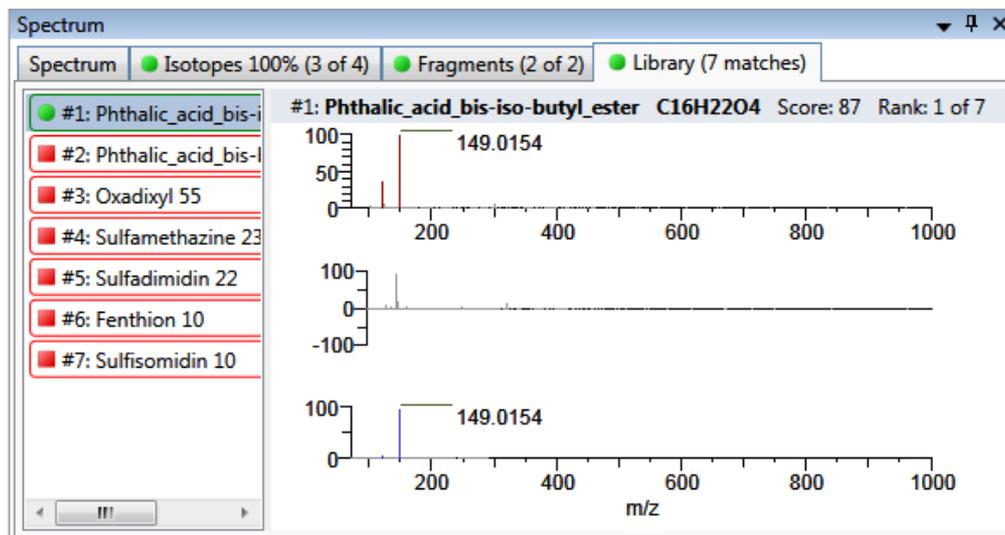


图 152. 含重叠质谱图的 Library (库) 页面

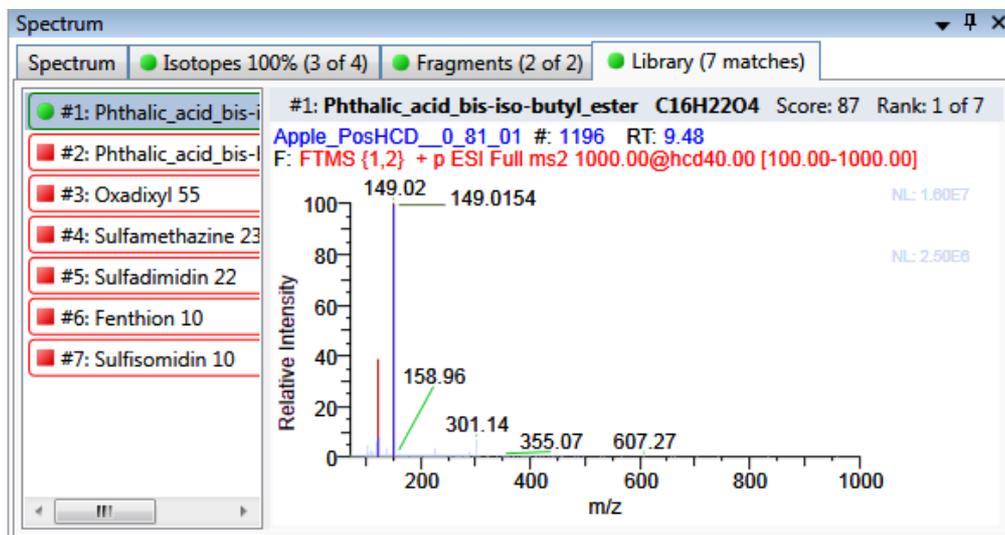


表 102. Library (库) 页面快捷菜单命令

命令	描述
Reset Scaling (重置缩放比例)	缩放操作完成后, 重置为原始比例。
Copy to Clipboard (复制到剪贴板)	将图片显示复制至剪贴板。
Display Overlay Spectra (显示重叠质谱图)	重叠两个质谱图显示, 或者堆积模拟质谱图和峰尖质谱图。
Display Stack Spectra (显示堆积质谱图)	

## 使用 Report View（报告视图）

利用 Report View（报告视图）为 Analysis（分析）模式的当前所选批次显示或生成报告。参阅 [Analysis（分析）模式中的 Report View（报告视图）](#)。必须在查看或生成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（报告视图）

1. 从任意模式的导航窗格中，点击 **Analysis（分析）**。
2. 在 Analysis（分析）导航窗格中点击 **Report View（报告视图）**。



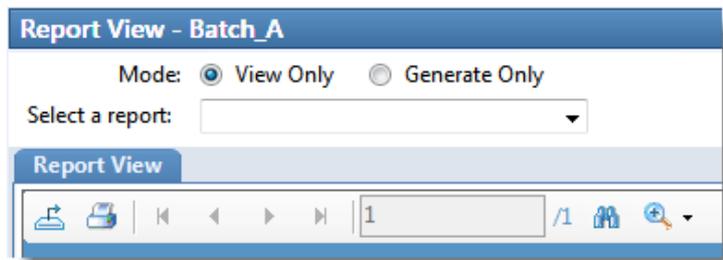
当前选定批次的 Report View（报告视图）打开。

### ❖ 若要刷新 Report View（报告视图）

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



图 153. Analysis（分析）模式中的 Report View（报告视图）



- **View Only（仅查看）**：显示批次、样品或化合物的已选报告类型的 PDF 或 Excel 电子数据表预览。参阅 [“查看报告”](#)。
  - 对于定量批次，所有 Standard（标准）报告类型的预览报告总是可用的。
  - 对于目标筛选批次，所有 Standard（标准）和 Target Screening（目标筛选）报告类型的预览报告总是可用的。
  - 用户必须在 Custom（自定义）和 ToxID 报告类型可用时，生成这些报告。
- Report View（报告视图）页面显示以下其中一种报告输出格式：
  - 保存为 PDF 文件的 Standard（标准）报告
  - XLSM 格式的 Custom（自定义）报告
  - 保存为 PDF 文件的 ToxID 报告
  - 保存为 PDF 文件的 Target Screening（目标筛选）报告（仅对目标筛选批次可用）
- **Generate Only（仅生成）**：为所选样品水平或批次水平报告创建所有指定的报告输出格式。参阅 [第 519 页上的“生成报告”](#)。

本部分包含以下主题：

- [查看报告](#)
- [生成报告](#)
- [使用报告](#)
- [使用 Active View \(活动视图\)](#)

## 查看报告

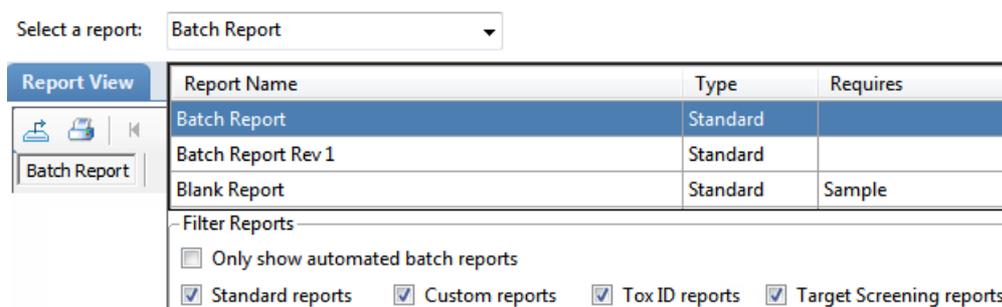
利用 View Only (仅查看) 功能查看所有已配置的标准或目标筛选报告和任意已生成的自定义或 ToxID 报告。在用户生成一个报告之后，应用程序在 View Only (仅查看) 报告列表中显示该报告。

按照以下步骤进行操作：

- [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 (仅查看)** 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 (配置) 控制台上的 Displayed Reports (已显示报告) 选项。若要更改视图中可用的已配置报告，参阅第 37 页上的“[指定 Reports \(报告\)](#)”。

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 (报告视图) 时都保持该排序顺序。若要帮助组织报告，用户可以过滤该列表。

3. 若要限制显示在报告列表中的报告类型，在 Filter Reports (过滤报告) 区域中选择报告过滤器选项的任意组合。

**表 103.** 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)	仅显示在 Batch View (批次视图) 的 Automated Batch Reports (自动批次报告) 区域指定输出格式的报告类型。参阅第 375 页上的“ <a href="#">Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格</a> ”。
Standard Reports (标准报告)	显示 Standard (标准) 报告类型。

表 103. Filter Reports (过滤报告) 选项

选项	结果
Custom Reports (自定义报告)	显示生成的 Custom (自定义) 报告类型。在报告生成之前, 无法查看 Custom (自定义) 报告。
ToxID Reports (ToxID 报告)	显示生成的 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 (目标筛选) 报告类型。

**注释** 当更改 Local Method (本地方法) 视图中的方法、Data Review (数据查看) 视图中的峰或 Batch View (批次视图) 视图中的样品时, 必须重新生成自定义报告或 ToxID 报告以应用这些更改。

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 (报告视图) 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, 必须选择其中一个样品文件。

Select a report:  Sample file:

遵照步骤第 517 页上的“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, 必须选择其中一个化合物。

Select a report:  Compound:

遵照步骤第 517 页上的“若要选择化合物”进行操作。

- 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, 必须同时选中样品和化合物。

Select a report:  Sample file:  Compound:

遵照步骤第 517 页上的“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, 显示批次中的所有已处理样品。

**注释** 未处理样品未列出。样品列表中有一条信息报告了批次中未处理样品的数量。

Filter Samples - [1 unprocessed sample(s) found but not displayed in list.]

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

例如, 若选择 Quality Control Report (质控标样报告), 则样品列表仅显示 QC (质控标样) 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 (报告视图) 时都保持该排序顺序。

3. 双击样品名称。

Sample File (样品文件) 列表关闭。Report View (报告视图) 页面显示样品水平报告。

## ❖ 若要选择化合物

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

RT	Compound Name
	All Compounds
3.14	Propanenitrile
3.15	Pyrazinamide

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 (报告视图) 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 (样品文件) 列表, 显示批次中的所有样品。

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA1	1	Specimen
UnknownA2	1	Specimen

Filter Samples

Only show samples relevant to the selected report.

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

例如, 若选择 Quality Control Report (质控标样报告), 则样品列表仅显示 QC (质控标样) 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 (报告视图) 中保存该排序顺序。

3. 双击样品名称。

Sample File (样品文件) 列表关闭。

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

RT	Compound Name
	All Compounds
3.14	Propanenitrile
3.15	Pyrazinamide

5. 双击单个化合物或 **All Compounds (所有化合物)**。

Compound (化合物) 列表关闭。

Report View (报告视图) 页面显示所选样品和化合物的化合物水平报告。

## 生成报告

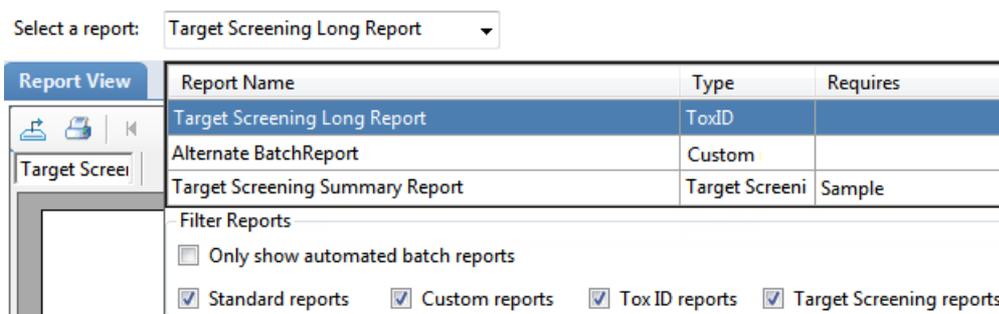
利用 Generate Only (仅生成) 特性创建样品水平报告。无法使用 View Only (仅查看) 特性在报告生成之前查看自定义、ToxID 或目标筛选报告。当更改 Local Method (本地方法) 视图中的方法或 Data Review (数据查看) 视图中的峰时, 必须重新生成自定义报告、ToxID 或目标筛选报告以查看这些更改的效果。

按照以下步骤进行操作:

- 若要选择报告
- 若要选择样品

### ❖ 若要选择报告

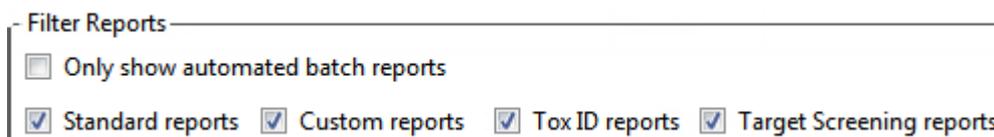
1. 选中 **Generate Only (仅生成)** 选项。
2. 打开 Select a Report (选择报告) 列表显示可用的报告。



应用程序在列表中仅显示已配置的样品水平报告类型。无法通过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 37 页上的“指定 Reports (报告)”。

若报告数量多, 可以过滤该列表。

3. 若要限制欲显示在报告列表中的报告类型, 在 Filter Reports (过滤报告) 区域中选择报告过滤复选框的任意组合。



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 (批次视图) 的 Automated Batch Reports (自动批次报告) 区域指定格式的样品水平报告。参阅第 375 页上的“Automated Batch Reports (自动批次报告) 窗格”。
Standard Reports (标准报告)	显示样品水平 Standard (标准) 报告类型。
Custom Reports (自定义报告)	显示样品水平 Custom (自定义) 报告类型。

选项	结果
ToxID Reports (ToxID 报告)	显示样品水平 ToxID 报告类型。
Target Screening Reports (目标筛选报告)	显示样品水平 Target Screening (目标筛选) 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 (报告视图) 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。

Select a report:  Sample file:

❖ 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。

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

Filter Samples

Only show samples relevant to the selected report.

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

例如, 若选择 Quality Control Report (质控标样报告), 则样品列表仅显示 QC (质控标样) 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 (报告视图) 中保存该排序顺序。

3. 选中希望包括在报告中的每个样品的复选框。
4. 点击 **Generate (生成)**。

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

**Report Selection Confirmation** ✕

You have selected the following report for generation: Target Screening Long Report

Sample Name	Sample ID	Sample Type
UnknownA1	1	Specimen

What action would you like to perform?

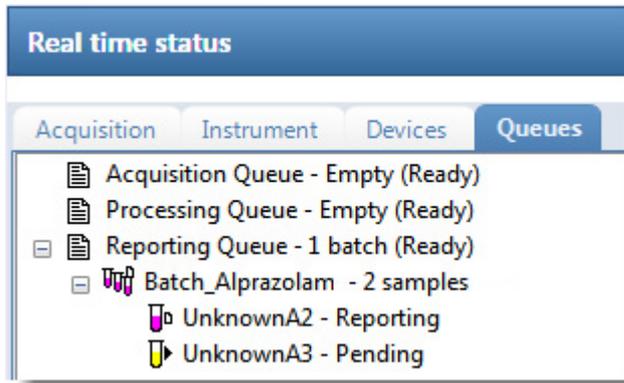
Print to default printer   
  Generate PDF   
  Generate XLSM   
  Generate XML

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 (批次视图) 或 Acquisition (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。

7. 若要查看生成的报告, 按照第 515 页上的“查看报告”的说明进行操作。

**注释** 当更改 Local Method (本地方法) 视图中的方法、Data Review (数据查看) 视图中的峰或 Batch View (批次视图) 中的样品时, 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 (报告视图) 页面上的图标来查看、打印或导出报告。



- 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 ToxID 报告创建硬拷贝打印件或 PDF 文件。
- 可以为每份目标筛选报告创建硬拷贝打印件、PDF 文件或 XML 文件。

按照以下步骤进行操作：

- 若要打印报告
- 若要导出标准报告
- 若要检索文本
- 若要放大报告文本

### ❖ 若要打印报告

1. 从 Select a Report (选择报告) 列表中选择要打印的报告。
2. (可选) 从 Sample File (样品文件) 列表选择一个样品。

应用程序在 Report View (报告视图) 页面上显示报告。

Mode:  View Only  Generate Only

Select a report: Batch Report

Report View

Batch Report

File Name	Date/Time	Sample ID	Sample Name	Level	Sample Type	Vial Pos
UnknownA1	10/2/2009 1:34:05 AM	1		N/A	Unknown	CStk1-01:7
UnknownA2	10/2/2009 1:34:05 AM	1		N/A	Unknown	CStk1-01:7
UnknownA3	10/2/2009 1:34:05 AM	1		N/A	Unknown	CStk1-01:7

Batch Report

Lab Name: Default Laboratory  
Instrument: Thermo Scientific Instrument  
User:  
Batch: Batch\_test

Method: Batch\_test\_Method\_test  
Method\_test  
Cali File: Batch\_test.cak

3. 单击 **Print Report (打印报告)** 图标, 。

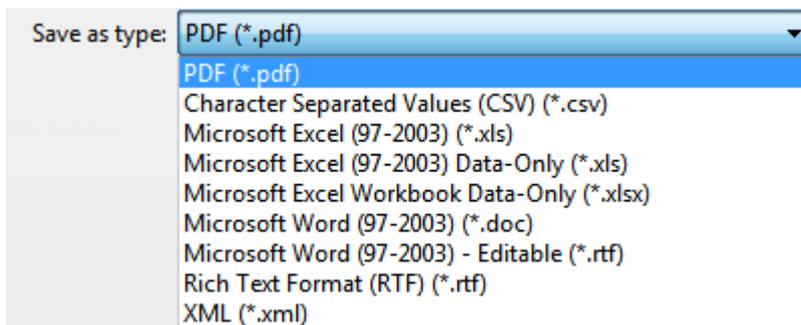
默认打印机的 Print (打印) 对话框打开。

4. 遵循打印机的一般程序打印。

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 (选择报告) 列表中选择要打印的报告。
2. (可选) 从 Sample File (样品文件) 列表选择一个样品。  
应用程序在 Report View (报告视图) 页面上显示报告。
3. 单击 **Export Report (导出报告)** 图标, 。  
Export Report (导出报告) 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) 列表选择一个文件类型:

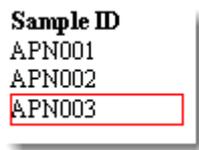


7. 单击 **Save (保存)**。

TraceFinder 应用程序将文件另存为指定文件类型并将报告文件写入指定文件夹。

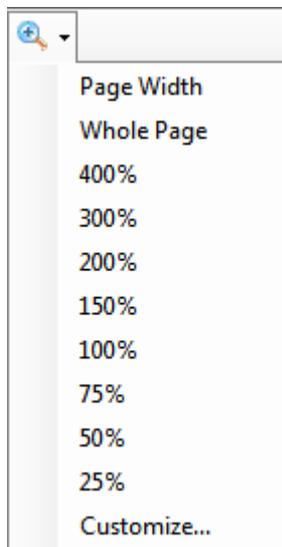
#### ❖ 若要检索文本

1. 从 Select a Report (选择报告) 列表选择一个报告。
2. (可选) 从 Sample File (样品文件) 列表选择一个样品。  
应用程序在 Report View (报告视图) 页面上显示报告。
3. 点击 **Find Text (查找文本)** 图标, 。  
Find Text (查找文本) 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 (选择报告) 列表选择一个报告。
2. (可选) 从 Sample File (样品文件) 列表选择一个样品。  
应用程序在 Report View (报告视图) 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 (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 (活动视图) 中的数据标注有标记信息。这些标记以批次数据与主方法中定义的标准之间的比较为基础。

### ❖ 若要显示 Active View (活动视图) 页面

点击 **Active View (活动视图)** 选项卡。

Active View (活动视图) 页面显示每个样品的定量数据和 QAQC (质保质控) 错误标记。有关所有活动视图参数的详细说明, 参阅 [“Active View \(活动视图\) 页面”](#)。

### ❖ 若要显示报告

1. 从 Select a Report (选择报告) 列表中选择报告类型。

仅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。



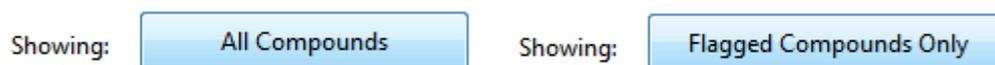
Mode:  View Only  Generate Only

Select a report:  Sample file:

每个使用 Active View (活动视图) 值的标准报告, 显示所有报告通用的值和为报告指定的值。参阅第 532 页上的 [“Active View \(活动视图\) 报告内容”](#)。

### ❖ 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 (质保质控) 测试的化合物。



Showing:  Showing:

图 154. Active View (活动视图) 页面

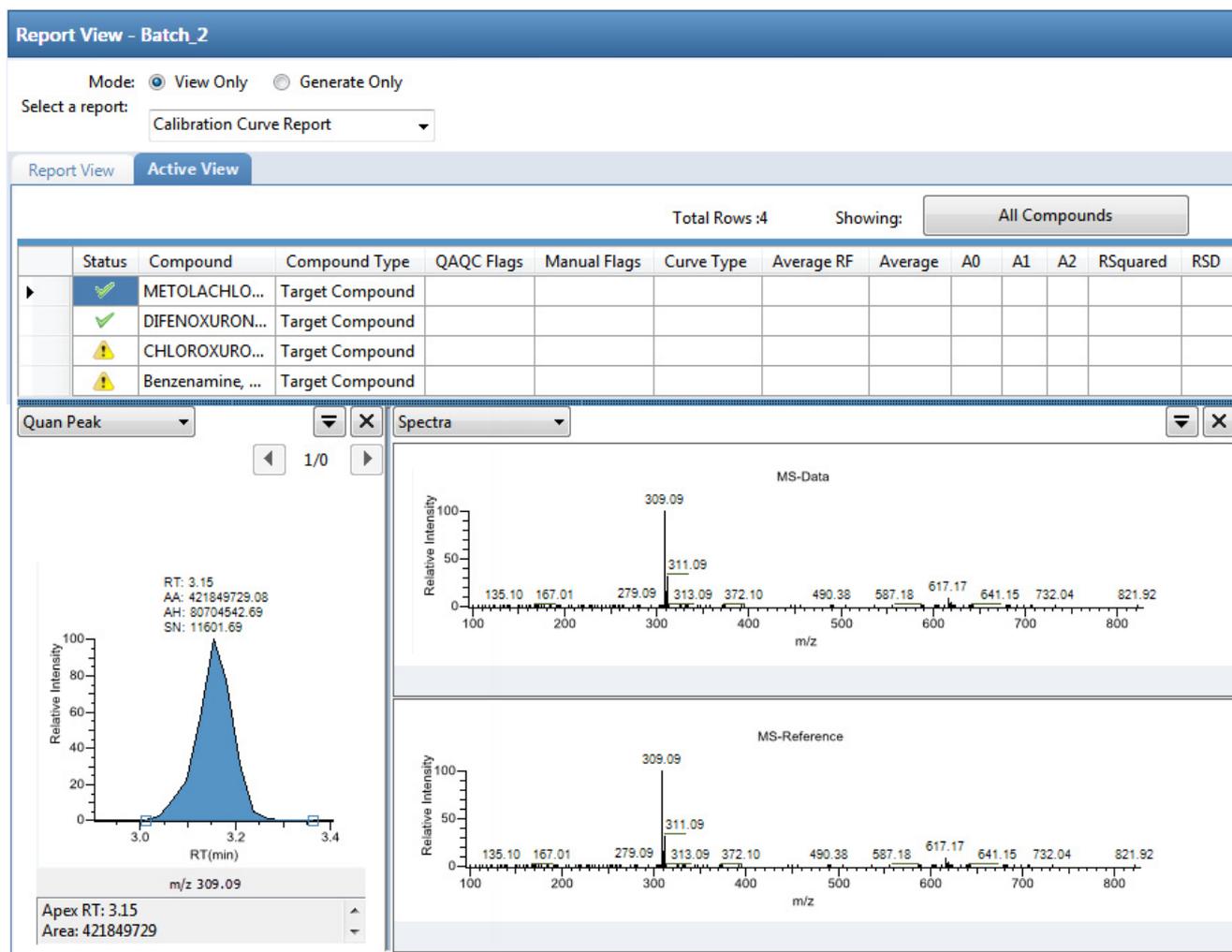


表 104. Active View (活动视图) 页面参数 (第 1 页, 共 5 页)

参数	描述
View Only (仅查看)	使支持当前视图报告的 Active View (活动视图) 窗格可用。
Generate Only (仅生成)	将窗格切换到 Report View (报告视图), 使 Active View (活动视图) 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。

表 104. Active View (活动视图) 页面参数 (第 2 页, 共 5 页)

参数	描述
列标题	许多列标题专门针对个别报告。参阅第 532 页上的“Active View (活动视图) 报告内容”。
Status (状态)	代表已报告化合物的状态。 <ul style="list-style-type: none"> <li>黄色警告标志代表以下一种情况： <ul style="list-style-type: none"> <li>化合物为手动积分。</li> <li>任意确认峰为手动积分。</li> <li>化合物具有定量标记。</li> <li>化合物未通过 QAQC (质保质控)。</li> </ul> </li> <li>绿色复选标记代表不存在以上这些情况。</li> </ul> <p>当化合物为内标物时, 仅在内标物报告上显示警告标记。</p>
Compound Name (化合物名称)	为化合物指定的由字母组成的名称。
Compound Type (化合物类型)	Target Compound (目标化合物) 或 Internal Standard (内标化合物)。
QAQC Flags (质保质控标记)	代表样品的 QAQC (质保质控) 检查未通过。 Manual Integration (手动积分) 报告不使用 QAQC (质保质控) 列。
Quan Flags (定量标记)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Limit Of Detection (LOD) (检测限, LOD)</li> <li>Limit Of Quantitation (LOQ) (定量限, LOQ)</li> <li>Limit of Reporting (LOR) (报告限, LOR)</li> <li>将介于检测限和定量限之间的值标记为 J</li> <li>Upper Limit of Linearity (ULOL) (线性上限, ULOL)</li> <li>Est 表示半定量化合物的预估化合物类型</li> </ul> <p>定量标记不适用于这些样品类型: Calibrator (校正标样)、QC (质控标样) 或 Solvent (溶剂)。</p> <p>Manual Integration (手动积分) 报告不使用 Quan Flag (定量标记) 列。</p>
Manual Flags (手动标记)	代表手动积分的峰。 <p><b>M:</b> 代表手动积分的定量峰。 <b>m:</b> 代表手动积分的确认峰。</p>
<b>根据所选报告的不同, Active View (活动视图) 页面包含以下任一或所有参数:</b>	
Quan Peak <i>m/z</i> (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。

表 104. Active View (活动视图) 页面参数 (第 3 页, 共 5 页)

参数	描述
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)	进样浓度。
Confirming <i>n</i> Mass (确认峰 <i>n</i> 质量数)	确认峰的质量数。
Confirming <i>n</i> Response (确认峰 <i>n</i> 响应)	确认峰的响应值。
Confirming <i>n</i> Manual Flag (确认峰 <i>n</i> 手 动标记)	代表手动积分的确认峰。
Confirming <i>n</i> Ion Ratio Flag (确认峰 <i>n</i> 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 <i>n</i> Ion Ratio (确认峰 <i>n</i> 离 子比率)	确认离子响应与定量离子响应的实际比率。
Confirming <i>n</i> Range (确认峰 <i>n</i> 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质荷比。
Response (响应)	化合物的所有 Quan Peak Response (定量峰响应) 值的总和。
Injection Concentration (进样浓度)	样品进样的计算量, 不采用换算系数。
Injection Units (进样单位)	在 Method Development (方法开发) 模式的 Calibration (校正) 页面指定的进样单位。参阅第 164 页上的“Calibration (校正)”。
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 (方法开发) 模式的 Calibration (校正) 页面指定的样品单位。参阅第 164 页上的“Calibration (校正)”。
QIon (定量离子)	定量峰的质量数范围。当为主方法的信号参数选择模拟检测器时, 应用程序将该值显示为 Analog (模拟), 报告中含有质谱图, 质谱图显示为 Not Available (不可用)。参阅第 133 页上的“Signal (信号)”。

**表 104.** Active View (活动视图) 页面参数 (第 4 页, 共 5 页)

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。该时间为化合物保留在色谱柱中的总时间。
<b>Manual Integration (手动积分) 报告</b>	
<i>m/z</i> (质荷比)	定量峰的质荷比。
Method RT (方法保留时间)	方法积分峰的峰尖保留时间。
Method Peak Height (方法峰高)	方法积分峰的峰高。
Method Peak Area (方法峰面积)	方法积分峰的峰面积。
Manual RT (手动保留时间)	手动积分峰的峰尖保留时间。
Manual Peak Height (手动峰高)	手动积分峰的峰高。
Manual Peak Area (手动峰面积)	手动积分峰的峰面积。
<b>Internal Standard (内标化合物) 报告</b>	
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 (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最小响应。 参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
Maximum Response (最大响应)	在 Method Development (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最大响应。 参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
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 (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最小保留时间。 参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
Max RT (最大保留时间)	在 Method Development (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最大保留时间。 参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
Sample RT (样品保留时间)	样品中找到的保留时间。
<b>图表数据</b>	
Quan Peak (定量峰)	显示已选样品和化合物定量峰的图示。

表 104. Active View (活动视图) 页面参数 (第 5 页, 共 5 页)

参数	描述
ISTD (内标化合物)	显示为方法中化合物指定的内标化合物的图示
Calibration Curve (校正曲线)	显示已选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。 对于半定量化合物, 已显示曲线为一条已链接的校正曲线且以蓝 - 绿色背景表示。
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。
Reference Peak (参考峰)	显示方法中指定参考峰的图谱。
Ion Overlay (离子重叠)	显示已选化合物整个离子组 (定量和定性 / 确认离子) 的重叠图。使用此窗格以图示的形式查看峰尖匹配和共流出峰情况。
Library Match (库匹配)	显示匹配的库质谱图 (蓝色) 和实验质谱图 (黑色) 的图示。

## Active View (活动视图) 报告内容

每个使用 Active View (活动视图) 的标准报告显示所有报告通用的值。参阅第 532 页上的“通用 Active View (活动视图) 报告列”。

除了通用值以外，以下报告显示其他当前视图特性：

- Blank Report Active View (空白报告活动视图) 列
- Calibration Report Active View (校正报告活动视图) 列
- High Density Sample (高密度样品报告) 报告 (Report 1 [报告 1] 和 Report 1 Long [长报告 1]) Active View (活动视图) 列
- High Density Sample (高密度样品) 报告 (Report 2 [报告 2] 和 Report 2 Long [长报告 2]) Active View (活动视图) 列
- High Density Sample (高密度样品) 报告 (Report 3 [报告 3] 和 Report 3 Long [长报告 3]) Active View (活动视图) 列
- Internal Standard Summary Report Active View (内标总结报告活动视图) 列
- Ion Ratio Failure Report Active View (离子比率未通过报告活动视图) 列
- Manual Integration Report Active View (手动积分报告活动视图) 列
- Quality Control Report Active View (质控报告活动视图) 列
- Quantitation Report Active View (定量报告活动视图) 列
- Solvent Blank Report Active View (溶剂空白报告活动视图) 列

表 105. 通用 Active View (活动视图) 报告列

列	描述
Status (状态)	代表已报告化合物的状态。 <ul style="list-style-type: none"><li>• 黄色警告标志代表以下其中一种情况：<ul style="list-style-type: none"><li>– 化合物为手动积分。</li><li>– 任意确认峰为手动积分。</li><li>– 化合物具有定量标记。</li><li>– 化合物未通过 QAQC (质保质控)。</li></ul></li><li>• 绿色复选标记代表不存在以上这些情况。</li></ul> 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)	为化合物指定的由字母组成的名称。
Compound Type (化合物类型)	Target Compound (目标化合物) 或 Internal Standard (内标化合物)。
QAQC Flags (质保质控标记)	代表样品的 QAQC (质保质控) 检查未通过。 Method Validation (方法验证) 和 MDL (方法检测限) 报告不使用 QAQC (质保质控) 列。

表 105. 通用 Active View (活动视图) 报告列

列	描述
Quan Flags (定量标记)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Limit Of Detection (LOD) (检测限, LOD)</li> <li>• Limit Of Quantitation (LOQ) (定量限, LOQ)</li> <li>• Limit of Reporting (LOR) (报告限, LOR)</li> <li>• 将介于检测限和定量限之间的值标记为 J</li> <li>• Upper Limit of Linearity (ULOL) (线性上限, ULOL)</li> <li>• Est 表示半定量化合物的预估化合物类型 (仅针对 Blank [空白]、Quantitation [定量] 和 High Density [高密度] 报告)</li> </ul> <p>定量标记不适用于这些样品类型: Calibrator (校正标样)、QC (质控标样) 或 Solvent (溶剂)。</p> <p>Calibration (校正) 报告不使用 Quan Flags (定量标记) 列。 Calibration Curve (校正曲线) 报告不使用 Quan Flags (定量标记) 列。</p>
Manual Flags (手动标记)	<p>代表手动积分的峰。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>M</b> 代表手动积分的定量峰。</li> <li>• <b>m</b> 代表手动积分的确认峰。</li> </ul>

表 106. Blank Report Active View (空白报告活动视图) 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 (定量峰响应) 值的总和。
Inj Conc (进样浓度)	样品进样的计算量, 不采用换算系数。
Inj Units (进样单位)	在 Method Development (方法开发) 模式的 Calibration (校正) 页面指定的进样单位。 参阅第 164 页上的“Calibration (校正)”。
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 (方法开发) 模式的 Calibration (校正) 页面指定的样品单位。 参阅第 164 页上的“Calibration (校正)”。

表 107. Calibration Report Active View (校正报告活动视图) 列

列	描述
Curve Type (曲线类型)	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 (平均响应因子), 则适用。
Average Response (平均响应)	经过所有校正点的内标化合物的平均响应。仅应用于 Internal Standard (内标化合物) 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。仅应用于线性和二次方曲线。
A2	X <sup>2</sup> 值。仅应用于二次方曲线。
R <sup>2</sup>	用于可接受校正 (当处于线性或二次方模式中) 的最小相关系数 (r <sup>2</sup> )。
RSD (相对标准偏差)	相对标准偏差。仅应用于内标和经平均 RF (响应因子) 曲线校正的目标物。
Level (水平)	该列指定了水平名称; 该字段值指定了用于校正的数据点。该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 (响应因子), 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占据一列。若某个批次采用扩展校正, 则可能比当前批次中校正标样的列更多。

**注释** Calibration Report (校正报告) 不报告半定量化合物。

表 108. High Density Sample (高密度样品报告) 报告 (Report 1 [报告 1] 和 Report 1 Long [长报告 1]) Active View (活动视图) 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 (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。
T Amount (理论量)	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Conc (浓度)	计算 (进样) 量。

**表 109.** High Density Sample (高密度样品) 报告 (Report 2 [ 报告 2] 和 Report 2 Long [ 长报告 2]) Active View (活动视图) 列

列	描述
<i>m/z</i> (质荷比)	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。
T Amount (理论量)	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Conc (浓度)	计算 (进样) 量。
Confirming 1 Mass (确认峰 1 质量数)	确认峰的质量数。
Confirming 1 Response (确认峰 1 响应)	确认峰的响应值。
Confirming 1 Manual Flag (确认峰 1 手动标记)	代表手动积分确认峰。
Confirming 1 Ion Ratio Flag (确认峰 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 (确认峰 1 离子比率)	确认离子响应与定量离子响应的实际比率。
Confirming 1 Range (确认峰 1 范围)	确认离子的可接受范围。

**表 110.** High Density Sample (高密度样品) 报告 (Report 3 [ 报告 3] 和 Report 3 Long [ 长报告 3]) Active View (活动视图) 列 (第 1 页, 共 2 页)

列	描述
<i>m/z</i> (质荷比)	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。
T Amount (理论量)	化合物的理论值。不适用时报告为 N/A。
Conc (浓度)	计算 (进样) 量。
Confirming 1 Mass (确认峰 1 质量数)	确认峰的质量数。
Confirming 1 Response (确认峰 1 响应)	确认峰的响应值。
Confirming 1 Manual Flag (确认峰 1 手动标记)	代表手动积分确认峰。

**表 110.** High Density Sample (高密度样品) 报告 (Report 3 [ 报告 3] 和 Report 3 Long [ 长报告 3]) Active View (活动视图) 列 (第 2 页, 共 2 页)

列	描述
Confirming 1 Ion Ratio Flag (确认峰 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 (确认峰 1 离子比率)	确认离子响应与定量离子响应的实际比率。
Confirming 1 Range (确认峰 1 范围)	确认离子的可接受范围。
Confirming 2 Mass (确认峰 2 质量数)	确认峰的质量数。
Confirming 2 Response (确认峰 2 响应)	确认峰的响应值。
Confirming 2 Manual Flag (确认峰 2 手动标记)	代表手动积分确认峰。
Confirming 2 Ion Ratio Flag (确认峰 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。
Confirming 2 Ion Ratio (确认峰 2 离子比率)	确认离子响应与定量离子响应的实际比率。
Confirming 2 Range (确认峰 2 范围)	确认离子的可接受范围。

**表 111.** Internal Standard Summary Report Active View (内标总结报告活动视图) 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 (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最小响应。参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
Maximum Response (最大响应)	在 Method Development (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最大响应。参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
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 (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最小保留时间。参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
Max RT (最大保留时间)	在 Method Development (方法开发) 模式的 ISTD (内标化合物) 页面上指定的最大保留时间。参阅第 183 页上的“ISTD (内标化合物)”。
Sample RT (样品保留时间)	样品中找到的保留时间。

表 112. Ion Ratio Failure Report Active View (离子比率未通过报告活动视图) 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)	确认离子响应与定量离子响应的比率。
Range (范围)	可接受范围。

表 113. Manual Integration Report Active View (手动积分报告活动视图) 列

列	描述
<i>m/z</i> (质荷比)	定量峰的质荷比。
Method RT (方法保留时间)	方法积分峰的峰尖保留时间。
Method Peak Height (方法峰高)	方法积分峰的峰高。
Method Peak Area (方法峰面积)	方法积分峰的峰面积。
Manual RT (手动保留时间)	手动积分峰的峰尖保留时间。
Manual Peak Height (手动峰高)	手动积分峰的峰高。
Manual Peak Area (手动峰面积)	手动积分峰的峰面积。

表 114. Quality Control Report Active View (质控报告活动视图) 列

列	描述
Curve Type (曲线类型)	L - Linear (线性) A - Average RF (平均响应因子) Q - Quadratic (二次方)
Daily RF (日响应因子)	Average RF (平均响应因子) 曲线类型的响应因子值。对于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响应因子。当曲线类型为 Average RF (平均响应因子) 时显示。对于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 (质控标样) 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 (质控标样) 页面找到的最大 QC 响应因子。

表 114. Quality Control Report Active View (质控报告活动视图) 列

列	描述
QC Amount (质控量)	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 115. Quantitation Report Active View (定量报告活动视图) 列

列	描述
RT (保留时间)	峰的保留时间。进样后某个化合物洗脱的时间。该时间为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。  当为主方法的信号参数选择模拟检测器时, 应用程序将该值显示为 Analog (模拟), 报告中含有质谱图, 质谱图显示为 Not Available (不可用)。参阅第 133 页上的“Signal (信号)”。
Response (响应)	化合物的所有定量峰响应值的总和。
Injected Concentration (进样浓度)	样品进样的计算量, 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一个样品外, 当前视图或报告视图中的报告与处理结束时创建的 (PDF、XML 或打印的) 报告值有所不同。若要避免这一差异, 执行下列操作之一: <ul style="list-style-type: none"> <li>对于标准 Quantitation Report (定量报告) 或 Quantitation Report - 2 (定量报告 -2), 仅观察批次中最后一个样品的当前视图和报告视图。</li> <li>对于自定义 Quantitation Report (定量报告), 使报告成为批次 - 水平报告。</li> </ul>
Injected Units (进样单位)	在 Method Development (方法开发) 模式的 Calibration (校正) 页面指定的进样单位。参阅第 164 页上的“Calibration (校正)”。
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 (进样浓度) 中的描述。
Sample Units (样品单位)	在 Method Development (方法开发) 模式的 Calibration (校正) 页面指定的样品单位。参阅第 164 页上的“Calibration (校正)”。

表 116. Solvent Blank Report Active View (溶剂空白报告活动视图) 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。  当为主方法的信号参数选择模拟检测器时, 应用程序将该值显示为 Analog (模拟), 以及将质谱图报告为 Not Available (不可用)。参阅第 133 页上的“Signal (信号)”。
Response (响应)	化合物的所有 Quan Peak Response (定量峰响应) 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（本地方法）视图

本地方法是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，然后采用已编辑主方法覆盖本地副本。

在 Local Method（本地方法）视图中，可编辑本地方法参数。本地方法是与批次关联的主方法的副本。将本地方法命名为 *Batch\_MasterMethod*。

### ❖ 若要打开 Local Method（本地方法）视图

1. 点击导航窗格上的 **Analysis（分析）**。
2. 在 Analysis（分析）导航窗格中，点击 **Local Method（本地方法）**。



当前所选批次的 Local Method（本地方法）视图打开。

可以编辑本地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 79 页上的“使用主方法”。

3. 将任意本地更改输入至方法中。
4. 本地方法编辑完成以后，选择 **File（文件） > Save（保存）**。
5. 若要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（批次视图）并提交批次。

### ❖ 若要以 Batch View（批次视图）中的主方法覆盖本地方法

在 Batch View（批次视图）中，点击 **Update（更新）**。



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本地方法，或以已更新的主方法覆盖本地方法。

图 155. 一个定量方法的 Local Method (本地方法) 视图

Analysis ▾

Local Method View - Batch\_1\_Method\_Benzos

Master method: Method\_Benzos

Lab name: Default Laboratory 1

Assay type: Assay name

Injection volume: 1000.00

Mass Precision: 2

Ion range calc method: Manual

Instrument method: Instrument1

Qualitative peak processing template: Default

Background subtraction range option: None

Number of scans to subtract: 1

Steppoff value: 0

Mass Tolerance: 500.0

MMU  PPM

Buttons: Edit, Update, Apply

图 156. 一个筛选方法的 Local Method (本地方法) 视图

Analysis ▾

Local Method View - Batch\_1\_Screening\_Method

Master method: Screening\_Method

Lab name: Default Laboratory

Assay type: Assay name

Injection volume: 1.00

Mass Precision: 2

Instrument method: Instrument1

Mass Tolerance: 500.0

MMU  PPM

Library Search Type: NIST

Show not found compounds

Buttons: Edit, Update, Apply

## 使用 Batch Template Editor (批次模板编辑器)

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 548 页上的“Batch Template Editor (批次模板编辑器)”。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), 用户可以指定一个提供批次基本结构的批次模板。

若要采用批次模板创建批次, 从应用程序菜单中选择 **File (文件) > New (新建) > Batch Using Wizard (使用批次向导)**。参阅第 402 页上的“利用 Batch Wizard (批次向导) 创建批次”。

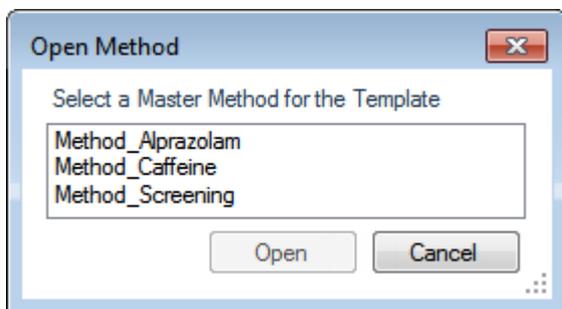
按照以下步骤进行操作:

- 若要创建新批次模板
- 若要打开批次模板
- 若要指定模板中的方法信息
- 若要将样品添加到批次
- 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
- 若要指定自动样品
- 若要指定活动化合物
- 若要指定报告选项

### ❖ 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, 可在此选择要用于批次模板的主方法。



2. 选择主方法然后单击 **Open (打开)**。

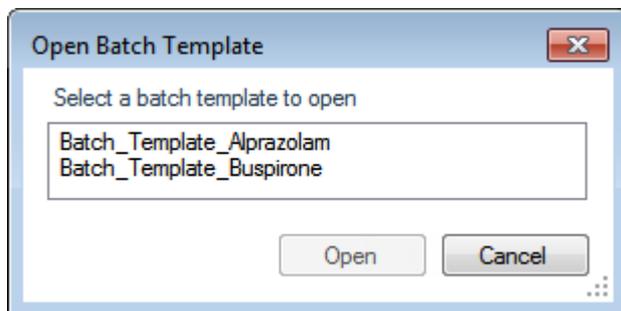
Batch Template Editor (批次模板编辑器) 打开。有关所有参数的详细说明, 参阅第 548 页上的“Batch Template Editor (批次模板编辑器)”。

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 (文件) > New (新建) > Batch Template (批次模板)**。

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 (打开)**。

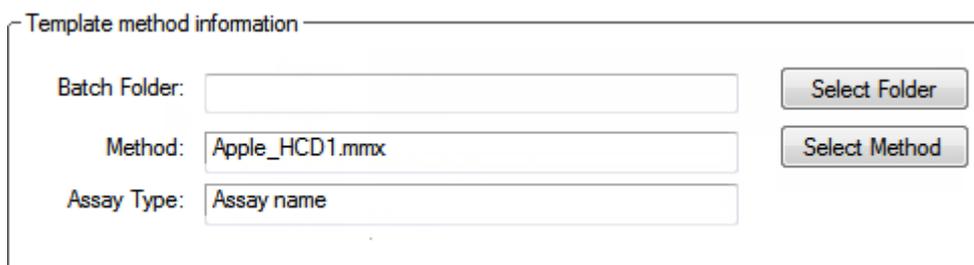
Batch Template Editor (批次模板编辑器) 以所选模板的设置打开。若要查看编辑器和参数的详细说明, 参阅第 548 页上的“[Batch Template Editor \(批次模板编辑器\)](#)”。

### ❖ 若要指定模板中的方法信息

1. 点击 **Select Folder (选择文件夹)**。

Select or Create Batch Folder (选择或创建批次文件夹) 对话框打开。参阅第 550 页上的“[Select or Create Batch Folder \(选择或创建批次文件夹\)](#)”。

2. 展开 TraceFinderData\Projects 文件夹, 选择一个想要在其中创建批次模板的批次文件夹。
3. 点击 **OK (确定)**。
4. 若要更改当前方法, 点击 **Select Method (选择方法)** 然后从方法列表中选择一个方法。



5. (可选) 在 Assay Type (实验类型) 框中输入实验名称。

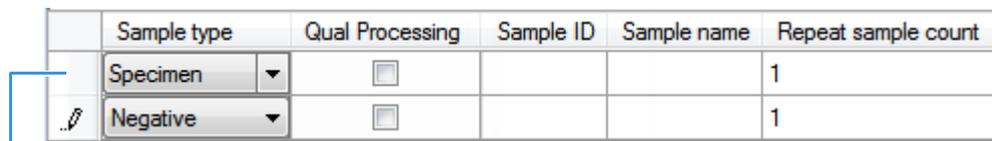
### ❖ 若要将样品添加到批次

右击然后从快捷菜单中选择 **Add Sample (添加样品)**, 或者点击 Add Sample (添加样品) 图标, .

应用程序将新的 Specimen (定量样品) 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 Specimen (定量样品) 样品的样品。
2. 右击并从快捷菜单中选择 **Insert Sample (插入样品)**。  
应用程序会将新 Specimen (定量样品) 样品插入到所选样品上方。



	Sample type	Qual Processing	Sample ID	Sample name	Repeat sample count
	Specimen	<input type="checkbox"/>			1
	Negative	<input type="checkbox"/>			1

插入的样品

### ❖ 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)**。  
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 (移除所选样品)**, 或点击 **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

Specimen (定量样品)	QC (质控标样)	Hydrolysis (水解)
Solvent (溶剂)	Calibrator (校正标样)	
Unextracted (未提取)	Negative (阴性对照)	

2. 对于每个 QC (质控标样) 或 Calibrator (校正标样) 样品, 单击 Level (水平) 单元格并从列表选择一个水平。

校正水平和 QC 水平已在主方法中指定。如果 Level (水平) 列表中无任何选项, 执行下列步骤:

- a. 关闭 Batch Template Editor (批次模板编辑器)。
- b. 返回 Method Development (方法开发) 模式。
- c. 打开主方法。
- d. 点击 **Compounds (化合物)** 选项卡。
- e. 点击 **Calibration Levels (校正水平)** 选项卡。
- f. 添加水平。

- g. 保存方法。
- h. 返回至 Analysis (分析) 模式, 然后再次开始采集。

必须先关闭原始批次模板且不保存它, 才能启动新的模板。有关详细说明, 参阅第 101 页上的“编辑定量主方法”。

3. (可选) 输入样品识别号、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。

当使用该模板创建一个批次时, 该批次包含这一数量的指定类型的样品。在批次中可以改变单独样品的任意列值。

#### ❖ 若要指定自动样品

1. 点击 **Auto Samples (自动样品)** 选项卡。
2. 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, .

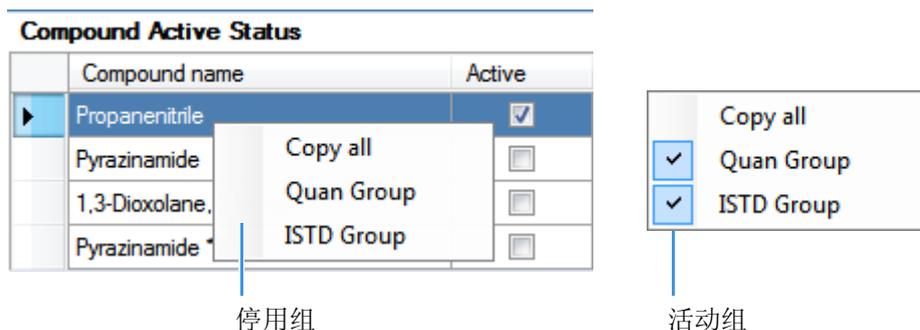
应用程序将 Solvent (溶剂) 样品添加至样品列表中。

用户可以从该列表或任何样品列表中添加、插入或删除样品。参阅第 360 页上的“Samples (样品) 页面”。

3. 若要将样品类型更改为 Negative (阴性对照), 点击 Sample Type (样品类型) 列, 并从列表中选择 Negative (阴性对照)。
4. 在样品的 Injection Volume (进样体积) 列, 输入进样量。  
允许的最小进样体积为 0.1  $\mu\text{L}$ ; 允许的最大进样体积为 5000  $\mu\text{L}$ 。
5. 在 Number of Injections (进样次数) 列, 输入指定的 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品瓶的可用进样次数。  
自动样品进样发生以后, 用户可以返回至该页面查看每个样品瓶的 Injections Used (已使用的进样) 次数。
6. 在 Vial Position (样品瓶位置) 列中, 输入 Solvent (溶剂) 或 Negative (阴性对照) 样品的样品瓶位置。

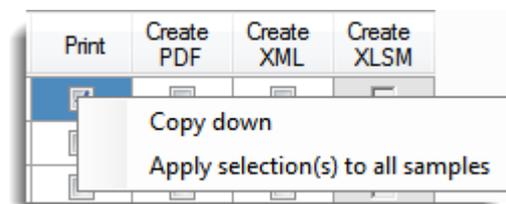
### ❖ 若要指定活动化合物

1. 在样品表格中，点击样品行中的任意位置，选择希望指定活动化合物的样品。  
化合物选项专门针对某个样品。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 (化合物活动状态) 区域，选中希望在所选样品中识别的每个化合物的 Active (激活) 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。



### ❖ 若要指定报告选项

1. 若要为每个报告类型指定要创建的报告输出类型，在适合的列中选中复选框。  
默认情况下会清除所有报告输出类型。
2. 若要为所选报告下方的所有报告复制输出类型，点击单元格将其选中，然后右键单击并从快捷菜单选择 **Copy Down (向下复制)**。



位于列中所选单元格以下的所有复选框将复制所选单元中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。

- 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 (将选择应用于所有样品)**。

以下是一个示例：

从首个样品复制所选报告输出格式

The screenshot shows the 'Samples' table with three rows: Solvent, Negative, and Specimen. Below it is the 'Automated Batch Reports' table with three rows: Batch Report, Blank Report, and High Density Sample Report 1. A context menu is open over the 'Print' checkbox of the first report, showing options like 'Copy down' and 'Apply selection(s) to all samples'.

Samples						
	Sample type	Level	Sample ID	Sample name	Comment	Repeat sample count
▶	Solvent					1
	Negative					1
	Specimen					1

Automated Batch Reports						
Sample Level			Batch Level			
	Report Name	Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM
▶ 1	Batch Report	Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
2	Blank Report	Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3	High Density Sample Report 1	Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

将所选报告输出格式复制到批次中的所有样品中

The screenshot shows the 'Samples' table with three rows: Solvent, Negative, and Specimen. Below it is the 'Automated Batch Reports' table with three rows: Batch Report, Blank Report, and High Density Sample Report 1. The 'Print' checkbox of the first report is checked, and the 'Apply selection(s) to all samples' option has been applied to all reports.

Samples						
	Sample type	Level	Sample ID	Sample name	Comment	Repeat sample count
	Solvent					1
▶	Negative					1
	Specimen					1

Automated Batch Reports						
Sample Level			Batch Level			
	Report Name	Type	Print	Create PDF	Create XML	Create XLSM
1	Batch Report	Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
2	Blank Report	Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3	High Density Sample Report 1	Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

## Batch Template Editor (批次模板编辑器)

采用 Batch Template Editor (批次模板编辑器) 功能创建包含批次基本设置的批次模板。仅当激活 Configuration (配置) 控制台上的 Intelligent Sequencing (智能排序) 时, Auto Samples (自动样品) 页面才可用。参阅第 65 页上的“Intelligent Sequencing (智能排序)”。

图 157. Batch Template Editor (批次模板编辑器)

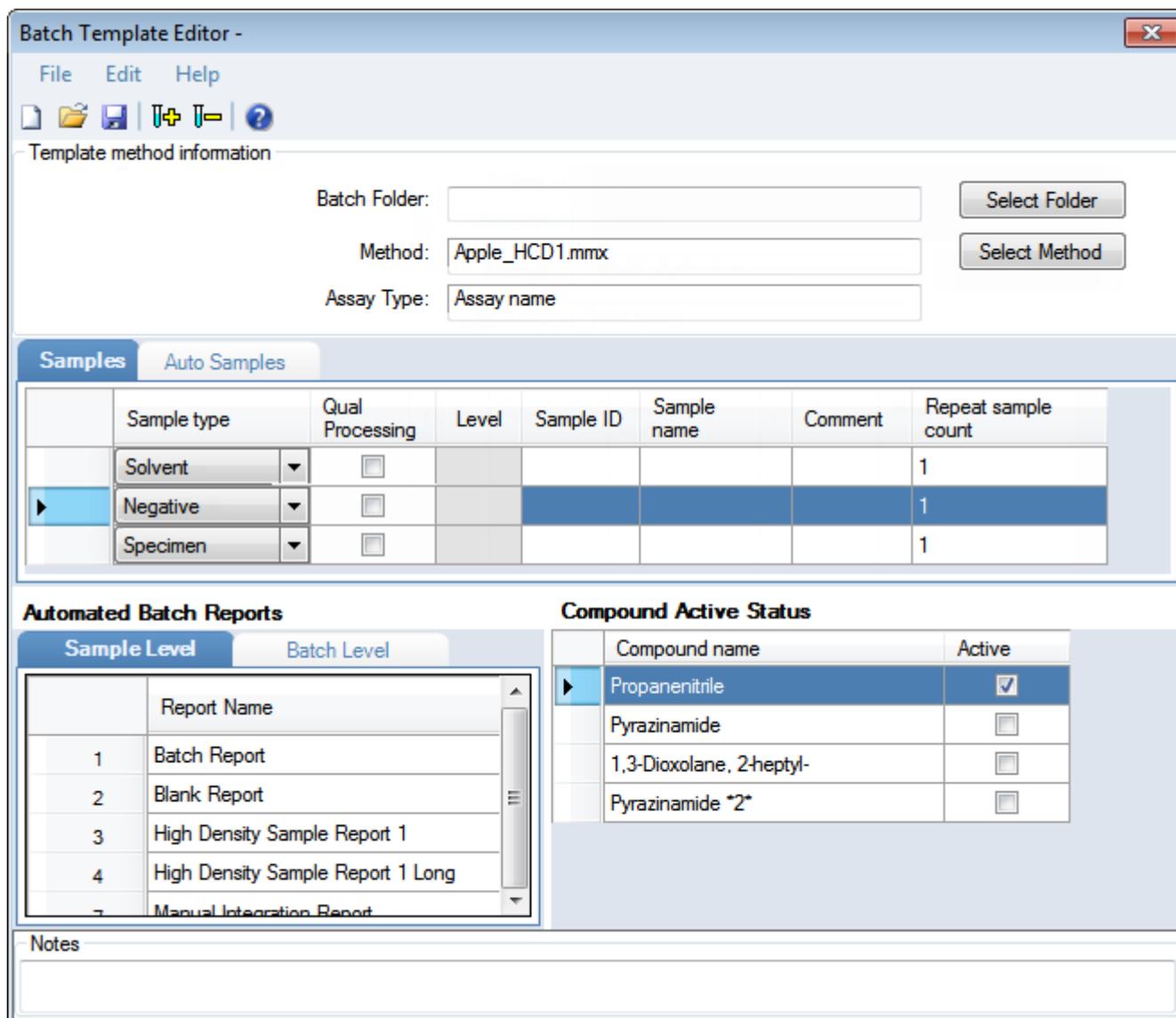


表 117. Batch Template Editor (批次模板编辑器) 参数 (第 1 页, 共 2 页)

参数	描述
<b>Template Method Information (模板方法信息)</b>	
Batch Folder (批次文件夹)	批次的项目文件夹。
Select Folder (选择文件夹)	打开 Select or Create Batch (选择或创建批次) 文件夹。参阅第 550 页上的“Select or Create Batch Folder (选择或创建批次文件夹)”。
Method (方法)	批次使用的主方法。Select Method (选择方法) 按钮打开 Open Method (打开方法) 对话框, 在此可以为批次模板选择不同的主方法。

表 117. Batch Template Editor (批次模板编辑器) 参数 (第 2 页, 共 2 页)

参数	描述
Assay Type (实验类型)	输入方法的目标分析类型名称。实验类型将方法与化合物分析或特定种类化合物的分析联系起来 (例如, PAH 分析类型可能用于多环芳香烃的分析)。应用程序在批次模板中使用该实验类型。用户也可以选择方法与批次模板进行适当组合。
<b>列值</b>	
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 (定量样品)、QC (质控标样)、Solvent (溶剂)、Calibrator (校正标样)、Hydrolysis (水解)、Unextracted (未提取) 或 Negative (阴性对照)。
Level (水平)	为校正样品或质控样品指定的水平。
Sample ID (样品识别号)	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)	用户自定义的样品注释。
Repeat Sample Count (重复样品计数)	为该样品类型创建的样品数。
<b>Sample Level / Batch Level (样品水平 / 批次水平)</b>	
Report Name (报告名称)	报告的名称。
Type (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 Excel 宏启用工作簿 (.xlsm) 格式。 仅对自定义报告可用。
<b>Compound Active Status (化合物活动状态)</b>	
Compound Name (化合物名称)	方法中所有化合物的列表。
Active (激活)	在所选样品中识别的化合物。

## Select or Create Batch Folder (选择或创建批次文件夹)

使用 Select or Create Batch Folder (选择或创建批次文件夹) 对话框上的功能显示项目文件夹, 或者创建、删除或重命名文件夹。

图 158. Select or Create Batch Folder (选择或创建批次文件夹)

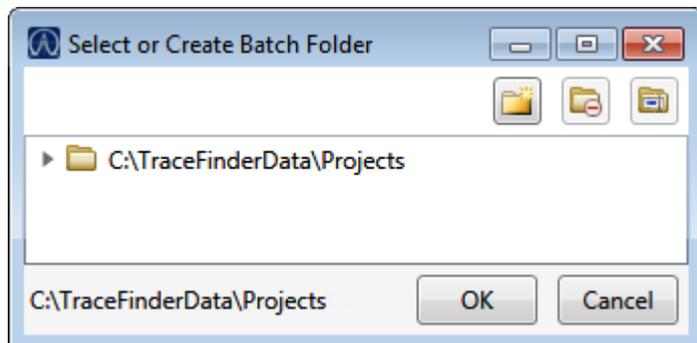


表 118. Select or Create Batch Folder (选择或创建批次文件夹) 对话框参数

参数	描述
<b>图标</b>	
 Create New Folder (创建新文件夹)	补充下列操作之一: <ul style="list-style-type: none"> <li>• 选中一个驱动器后, 为驱动器添加一个新项目水平文件夹。</li> <li>• 当项目文件夹选中后, 为已选项目添加一个子项目水平文件夹。</li> <li>• 当子项目文件夹选中后, 为子项目添加一个次级文件夹。</li> </ul>
 Delete Folder (删除文件夹)	立即移除已选文件夹。没有确认是否删除所选文件夹的任何提示。  用户无法删除含次级项目或批次文件夹的文件夹; 用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。
 Rename Folder (重命名文件夹)	重命名所选文件夹。  用户无法重命名含次级项目或批次文件夹的文件夹; 用户必须首先删除次级项目或批次文件夹。
<b>快捷菜单命令</b>	
Create Folder (创建文件夹)	相当于 Create New Folder (创建新文件夹) 图标。
Delete Folder (删除文件夹)	相当于 Delete Folder (删除文件夹) 图标。
Rename Folder (重命名文件夹)	相当于 Rename Folder (重命名文件夹) 图标。
Expand Child Nodes (展开子节点)	展开 Project (项目) 树下面的所有项目和子项目文件夹。
Collapse Child Nodes (折叠子节点)	折叠 Project (项目) 树下面的所有项目和子项目文件夹。

# 报告

本附录包含标准、自定义、ToxID 和目标筛选报告的相关信息。

## 目录

- [指定报告](#)
- [报告标记](#)
- [样品标准报告](#)

报告引擎能够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 应用程序可以生成标准报告、自定义报告和专门用于目标筛选和 ToxID 筛选的报告。

## 指定报告

具有使用 Reports（报告）权限的用户可以配置一系列用于 Method Development（方法开发）或 Acquisition（采集）模式的报告。

有关在 Configuration（配置）控制面板上配置报告的详细信息，参阅第 37 页上的“[指定 Reports（报告）](#)”。

有关在 Method Development（方法开发）模式下创建方法时指定报告的详细信息，参阅第 194 页上的“[编辑 Reports（报告）页面](#)”。

有关在 Acquisition（采集）模式下查看报告的详细信息，参阅第 327 页上的“[选择和检查报告](#)”。

该部分列出了以下报告类型中的所有可用报告：

- 第 552 页上的“[Standard Reports（标准报告）](#)”
- 第 553 页上的“[Custom Reports（自定义报告）](#)”
- 第 553 页上的“[Target Screening Reports（目标筛选报告）](#)”
- 第 553 页上的“[ToxID Reports（ToxID 报告）](#)”

## Standard Reports (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、XML (.xml) 或 XLSM (.xlsm) 输出格式的文件。除了报告类型，可指定出现在报告顶端的报告标题。默认的报告标题是报告名称。

TraceFinder 应用程序可以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)
- Batch Report Rev 1 (批次报告版本 1)
- 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)
- Intelligent Sequencing Report (智能排序报告)
- 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 (质控报告)
- 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举例，参阅第 555 页上的“样品标准报告”。

## Custom Reports (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。默认 ITAdmin (IT 管理员) 或默认 LabDirector (实验室主任) 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 (质控标样报告)
- 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)

## Target Screening Reports (目标筛选报告)

TraceFinder 应用程序可以生成下列类型的目标筛选报告：

- Target Screening High Density Sample Report (目标筛选高密度样品报告)
- Target Screening Summary Report (目标筛选总结报告)

## ToxID Reports (ToxID 报告)

仅当已安装 ToxID 软件并激活 ToxID 特性时，ToxID 报告才可用。有关启用 ToxID 特性的详细步骤，参阅第 60 页上的“[ToxID](#)”。TraceFinder 应用程序能够生成下列类型的 ToxID 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)

## 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 119.** 定量标记

标记	定义
b	观察到的化合物在 Martix 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值。
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 / 定性离子与定量离子的比率在目标比率范围之外，或者定量离子与确认 / 定性离子之间的保留时间差值大于可接受限值。
C	观察到化合物的浓度高于指定残留限。
?	观察到化合物的浓度指定的线性限。
D	观察到化合物的浓度低于指定检测限。
Q	观察到化合物的浓度低于指定定量限。
POS	观察到化合物的浓度高于指定的截止值。

**表 120.** 校正标记

标记	定义
D	该化合物的校正超出指定的最大相对标准偏差（%RSD）。
F	该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算超出指定的最大百分比偏差（Max %D）。
X	通过手动选择，将该化合物的校正点排除在整体校正之外。
X（ISNF）	由于未找到关联的内标物，该化合物的校正点被排除在整体校正之外。

未通过的标记采用星号（\*）、带阴影行或 *Fail*（未通过）字样来标识。

对于手动积分结果，其报告值使用大写的 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 （批次报告）
- Batch Report Rev 1 （批次报告版本 1）
- Calibration Report （校正报告）
- 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）
- Quality Control Report （质控报告）
- Quantitation Report （定量报告）
- Quantitation Report - 2 （定量报告 -2）
- Solvent Blank Report （溶剂空白报告）

**提示** 若要查看横向格式的报告，可从 Adobe Acrobat™ 视图菜单中选择 **View（视图） > Rotate View（横向视图） > Clockwise（顺时针）**。

# Batch Report (批次报告)

Page 1

Batch Report

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQ000637  
User: TQ000637\RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Cell File: 011HPLR1.calk

File Name	Sample ID	Sample Name	Level	Sample Type	Vial Pos	Inj Vol	Conv Factor	Comment
LLOD_HP031711	1	LLOD_HP031711	N/A	Matrix Blank	5	5.000	1.0	
L1XLOQ_HP031711	2	L1XLOQ_HP031711	1XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711	3	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L4XLOQ_HP031711	4	L4XLOQ_HP031711	4XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L6XLOQ_HP031711	5	L6XLOQ_HP031711	6XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L10XLOQ_HP031711	6	L10XLOQ_HP031711	10XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L16XLOQ_HP031711	7	L16XLOQ_HP031711	16XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
L32XLOQ_HP031711	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	Cal Std	5	5.000	1.0	
MeOH_01	9	MeOH	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0041RB	10	11_0041RB	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0040MB	11	11_0040MB	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0037LCMS	12	11_0037LCMS	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_01	13	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0001	14	11_0001	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0002	15	11_0002	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0003	16	11_0003	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0004	17	11_0004	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0005	18	11_0005	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0006	19	11_0006	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0007	20	11_0007	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0008	21	11_0008	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0009	22	11_0009	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0010	23	11_0010	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0011	24	11_0011	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_02	25	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0012	26	11_0012	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0013	27	11_0013	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0014	28	11_0014	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0015	29	11_0015	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0016	30	11_0016	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0017	31	11_0017	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0018	32	11_0018	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0019	33	11_0019	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0020	34	11_0020	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0021	35	11_0021	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
L2XLOQ_HP031711_03	36	L2XLOQ_HP031711	2XLOQ	Chk Std	5	5.000	1.0	
11_0022	37	11_0022	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	
11_0023	38	11_0023	N/A	Unknown	5	5.000	1.0	

# Batch Report Rev 1 (批次报告版本 1)

Page 1 of 2

## Batch Report

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
Call File: PDP\_040511  
011HPLR1.call

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQ00637  
User: TQ00637RPC  
Batch: 011HPLR1

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 (校正报告)

## Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Page 1 of 7

### Calibration Summary

Compound	Manually Integrated	Curve Type	A0	A1	A2	R <sup>2</sup>	% RSD	Flag
			y-Intercept	Slope		R <sup>2</sup>		
			Mean RF					
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		
Imazail		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<sup>2</sup>; A=Amount; X=Excluded; X(ISNF)=Excluded because ISTD wasn't found.

Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Compound	Curve Type	Calibration Data Points						
		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
Fonicamid	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	9703825	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<sup>2</sup>; A=Amount; X=Excluded; X(ISTD)=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  
**Call File:** PDP\_040511  
**Call 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<sup>2</sup>; A=Amount; X=Excluded; X(ISNF)=Excluded because ISTD wasn't found.

Manually Integrated

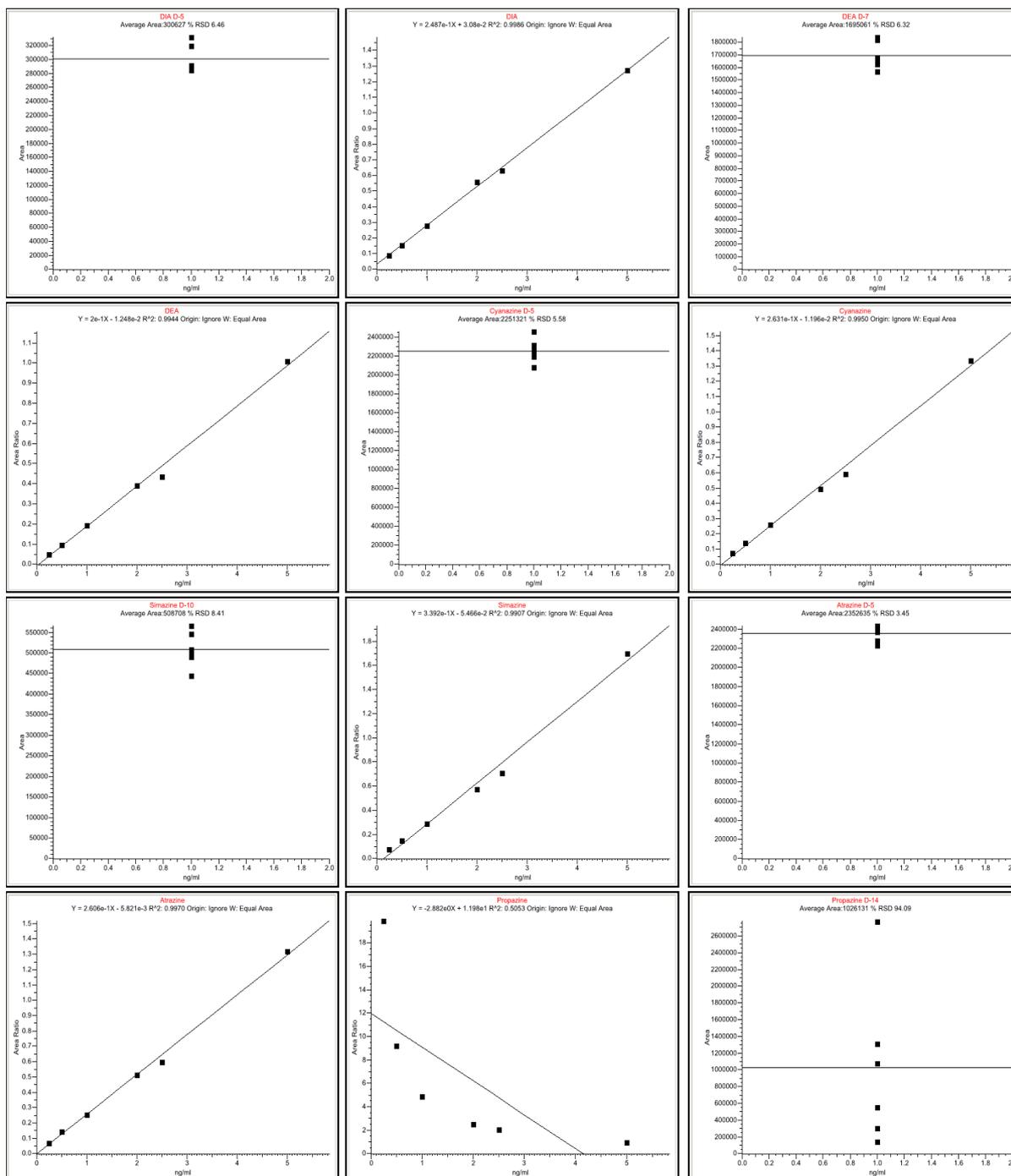
# Calibration Density Report (校正密度报告)

## Calibration Density 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

Page 1 of 1

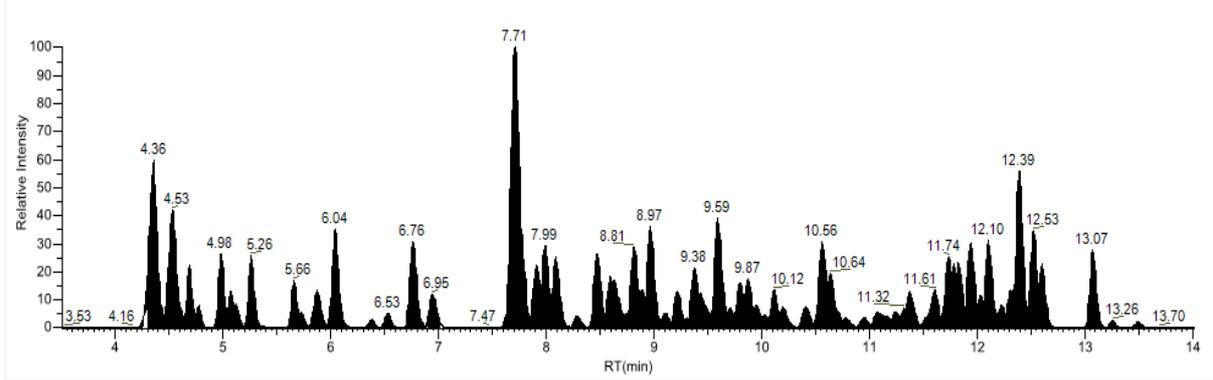


# Chromatogram Report (色谱图报告)

## Chromatogram 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	



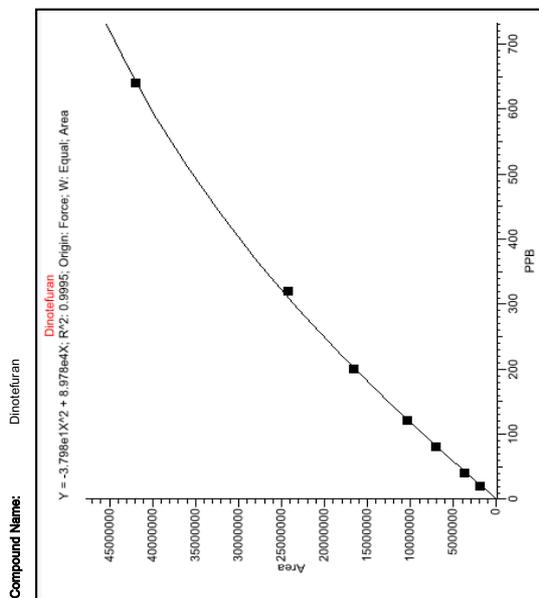
# Compound Calibration Report (化合物校正报告)

Page 1 of 2

## Compound Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQ000637  
User: TQ000637/RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.callx



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	10430615			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			75883.767	311.59	PPB	N/A	N/A
32XLOQ	640.00	41994638			65616.934	642.34	PPB	N/A	N/A

Quadratic

Pass

Manually Integrated:

Calibration Flags: D = RSD, F = Response factor, R = R Squared, A = Amount

**Compound Calibration Report**

**Lab Name:** Thermo Lab  
**Instrument:** TQ000637  
**User:** TQ000637RPC  
**Batch:** 01HPLR1  
**Method:** 01HPLR1\_PDP\_040511  
**Cell File:** 01HPLR1.calk

Val 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

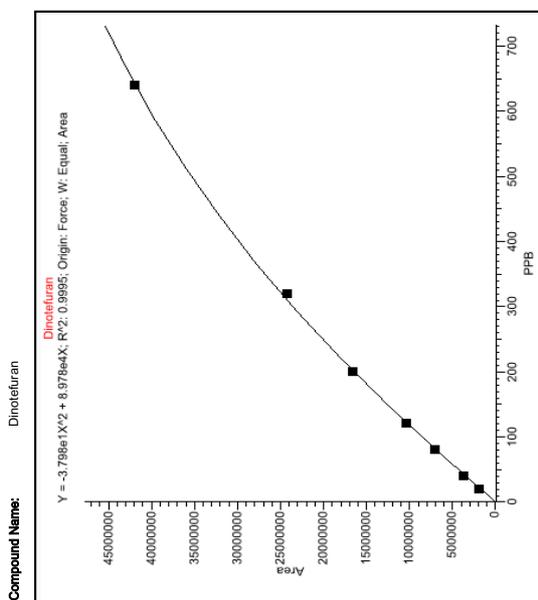
# Compound Calibration Report - Alternate (化合物校正报告 - 备用)

Page 1 of 2

## Compound Calibration Report - Alternate

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQ00637  
User: TQ00637/RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calk



Level	File Name	Std Amount	IS 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	41994638			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:** TOU00637  
**User:** TOU00637RPC  
**Batch:** 01HPLR1  
**Method:** 01HPLR1\_PDP\_040511  
**Cell File:** PDP\_040511  
**Call File:** 01HPLR1.calk

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 (确认报告)

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637\RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Page 1 of 1

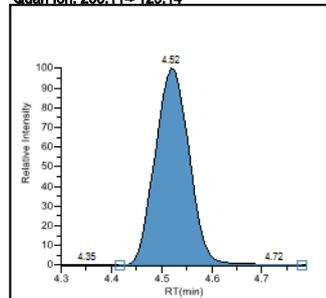
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

## Dinotefuran

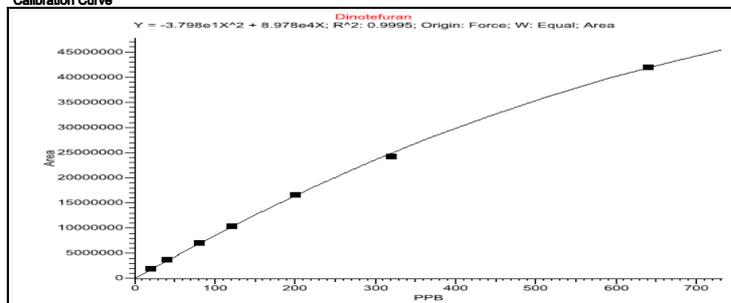
	Injected	Sample
Conc:	642.34 PPB	642.34 PPB

Retention Time:	4.52
Area:	41994838
Height:	8893885

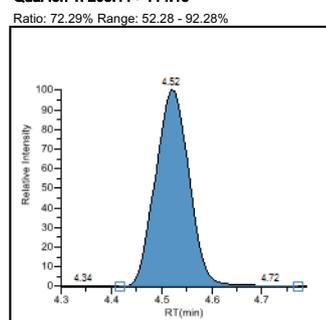
## Quan Ion: 203.11->129.14



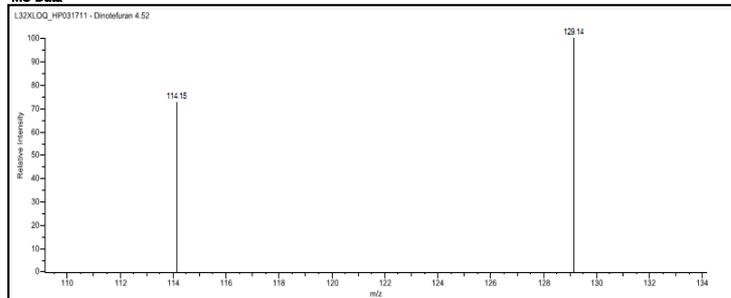
## Calibration Curve



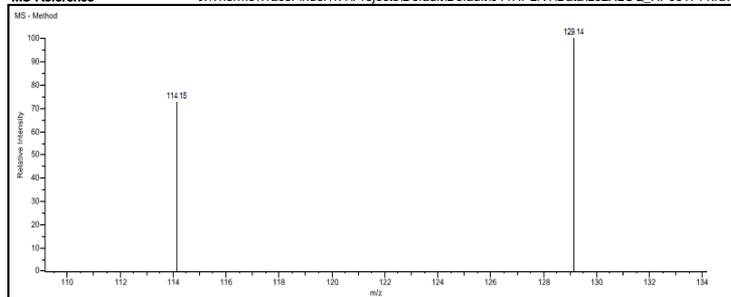
## Qual Ion 1: 203.11->114.15



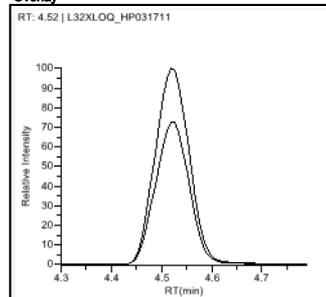
## MS-Data



## MS-Reference



## 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 (确认报告 2)

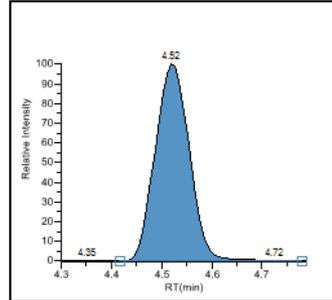
Confirmation Report 2

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	

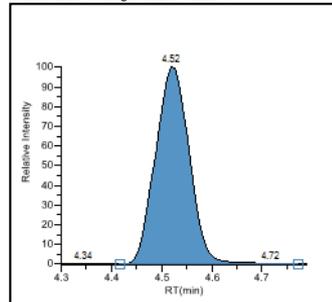
Compound Name: Dinotefuran  
 Injected Conc: 642.34 PPB  
 Sample Conc: 642.34 PPB  
 Retention Time: 4.52  
 Area (Quan): 41994838  
 Height (Quan): 8893885  
 Qual Ratio 1: Pass  
 Qual Ratio 2: Pass

Quan Ion: 203.11->129.14

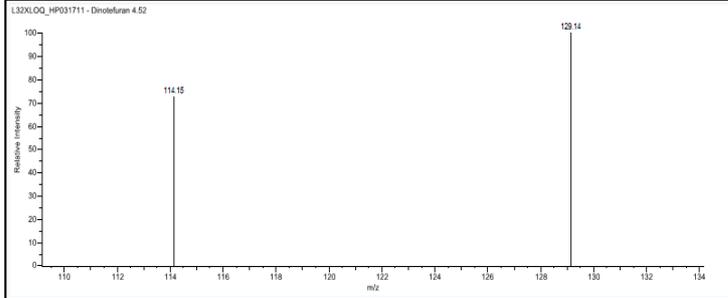


Qual Ion 1: 203.11->114.15

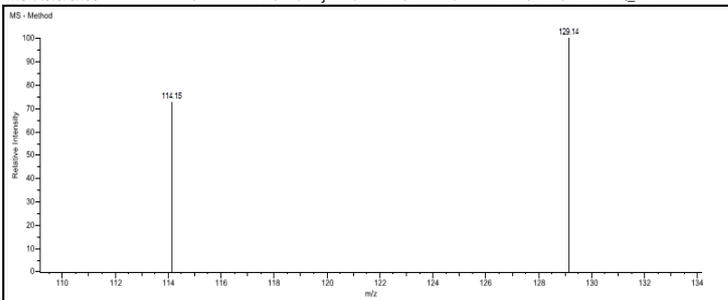
Ratio: 72.29% Range: 52.28 - 92.28%



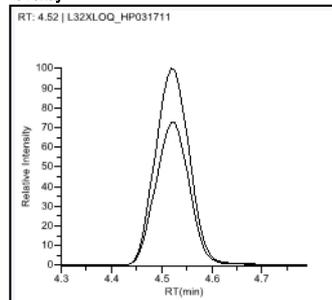
MS-Data



MS-Reference nermo\TraceFinder\1.1\Projects\Default\Default\011HPLR1\Data\L32XLOQ\_HP031711.raw



Overlay



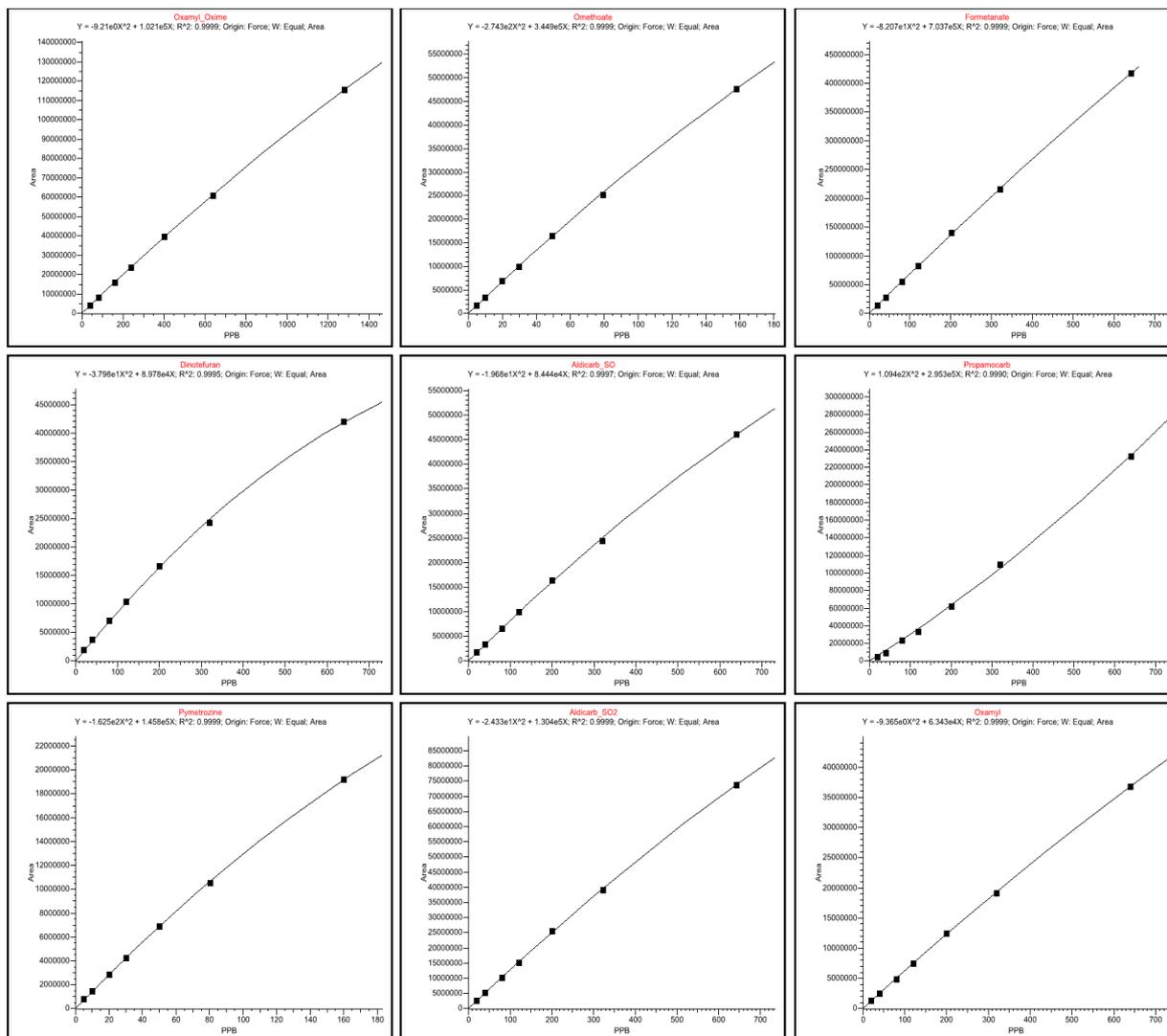
# High Density Calibration Report (高密度校正报告)

## High Density Calibration Report

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/PC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Page 1 of 14



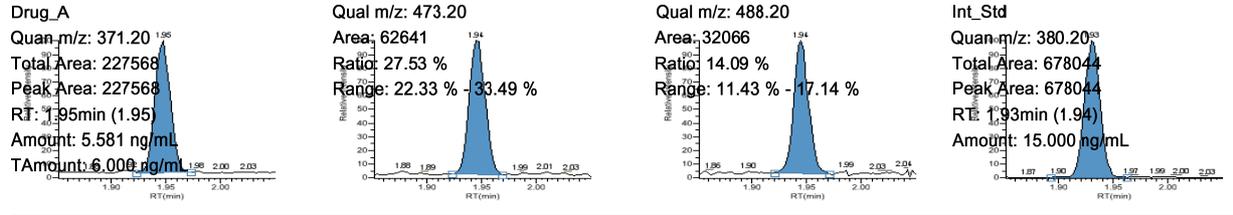
# High Density Internal Standard Report (高密度内标报告)

High Density Internal Standard 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	



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 (高密度内标长报告)

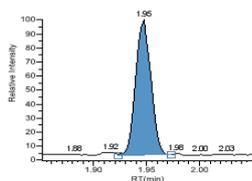
High Density Internal Standard Report Long

Lab name: Thermo Fisher Laboratory  
Instrument: Thermo Scientific Instrument  
User: AMER\jamie.humphries  
Batch: Drug\_A

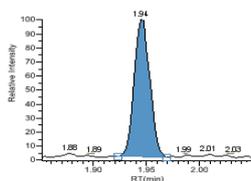
Method: Drug\_A\_Drug\_A  
Drug\_A  
Cali File: Drug\_A.calx

Page 1 of 1

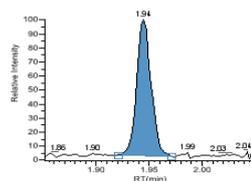
Vial Pos	Sample ID	Filename	Level	Sample Name	File Date	Comment
2	cal 1 = 6 ng/mL	cal_1	level 1		4/17/2008 5:05:47 PM	



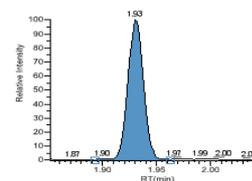
Drug\_A  
Quan m/z: 371.20  
Total Area: 227568  
Peak Area: 227568  
RT: 1.95min (1.95)  
Amount: 5.581 ng/mL  
TAmount: 6.000 ng/mL



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 (高密度样品报告 1)

## High Density Sample Report 1

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Page 1 of 5

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																									
<table border="1"> <tr> <td> <b>Oxamyl_Oxime</b>                      Quan m/z: 72.10                      TotalArea: 115624994                      Peak Area: 115624994                      RT: 4.32min (4.31)                      TAmount: 1280.00 PPB                      Amount: 1280.93 PPB                 </td> <td> <b>Omethoate</b>                      Quan m/z: 183.04                      TotalArea: 47692071                      Peak Area: 47692071                      RT: 4.34min (4.34)                      TAmount: 158.00 PPB                      Amount: 158.19 PPB                 </td> <td> <b>Formetanate</b>                      Quan m/z: 165.10                      TotalArea: 418192129                      Peak Area: 418192129                      RT: 4.36min (4.35)                      TAmount: 642.00 PPB                      Amount: 642.46 PPB                 </td> <td> <b>Dinotefuran</b>                      Quan m/z: 129.14                      TotalArea: 41994838                      Peak Area: 41994838                      RT: 4.52min (4.51)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 640.34 PPB                 </td> </tr> <tr> <td> <b>Aldicarb_SO</b>                      Quan m/z: 132.05                      TotalArea: 46055255                      Peak Area: 46055255                      RT: 4.52min (4.52)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 641.29 PPB                 </td> <td> <b>Propamocarb</b>                      Quan m/z: 102.00                      TotalArea: 233040768                      Peak Area: 233040768                      RT: 4.53min (4.53)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 638.19 PPB                 </td> <td> <b>Pymetrozine</b>                      Quan m/z: 105.10                      TotalArea: 19185279                      Peak Area: 19185279                      RT: 4.57min (4.56)                      TAmount: 160.00 PPB                      Amount: 160.15 PPB                 </td> <td> <b>Aldicarb_SO2</b>                      Quan m/z: 148.04                      TotalArea: 73839209                      Peak Area: 73839209                      RT: 4.69min (4.68)                      TAmount: 643.00 PPB                      Amount: 643.38 PPB                 </td> </tr> <tr> <td> <b>Oxamyl</b>                      Quan m/z: 90.00                      TotalArea: 36777897                      Peak Area: 36777897                      RT: 4.78min (4.77)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 640.38 PPB                 </td> <td> <b>Methomyl</b>                      Quan m/z: 88.10                      TotalArea: 71931672                      Peak Area: 71931672                      RT: 4.98min (4.98)                      TAmount: 1280.00 PPB                      Amount: 1281.62 PPB                 </td> <td> <b>Fonicamid</b>                      Quan m/z: 203.00                      TotalArea: 10725410                      Peak Area: 10725410                      RT: 5.04min (5.03)                      TAmount: 1920.00 PPB                      Amount: 1920.54 PPB                 </td> <td> <b>ODMS</b>                      Quan m/z: 169.00                      TotalArea: 46047319                      Peak Area: 46047319                      RT: 5.07min (5.07)                      TAmount: 320.00 PPB                      Amount: 320.14 PPB                 </td> </tr> <tr> <td> <b>5-OH_TBZ</b>                      Quan m/z: 147.10                      TotalArea: 41244357                      Peak Area: 41244357                      RT: 5.12min (5.11)                      TAmount: 320.00 PPB                      Amount: 320.15 PPB                 </td> <td> <b>Thiamethoxam</b>                      Quan m/z: 181.10                      TotalArea: 12666340                      Peak Area: 12666340                      RT: 5.13min (5.12)                      TAmount: 160.00 PPB                      Amount: 160.12 PPB                 </td> <td> <b>Monocrotophos</b>                      Quan m/z: 193.00                      TotalArea: 81911360                      Peak Area: 81911360                      RT: 5.26min (5.26)                      TAmount: 320.00 PPB                      Amount: 320.27 PPB                 </td> <td> <b>Imidacloprid</b>                      Quan m/z: 209.06                      TotalArea: 53957135                      Peak Area: 53957135                      RT: 5.66min (5.65)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 640.52 PPB                 </td> </tr> <tr> <td> <b>Clothianidin</b>                      Quan m/z: 169.10                      TotalArea: 20034742                      Peak Area: 20034742                      RT: 5.73min (5.71)                      TAmount: 320.00 PPB                      Amount: 320.31 PPB                 </td> <td> <b>Thiabendazole</b>                      Quan m/z: 131.10                      TotalArea: 70334577                      Peak Area: 70334577                      RT: 5.88min (5.86)                      TAmount: 320.00 PPB                      Amount: 320.35 PPB                 </td> <td> <b>3-OH_Carbofuran</b>                      Quan m/z: 163.08                      TotalArea: 148721201                      Peak Area: 148721201                      RT: 6.04min (6.03)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 640.60 PPB                 </td> <td> <b>Acetamprid</b>                      Quan m/z: 126.10                      TotalArea: 20289765                      Peak Area: 20289765                      RT: 6.06min (6.07)                      TAmount: 160.00 PPB                      Amount: 160.15 PPB                 </td> </tr> <tr> <td> <b>Cymoxanil</b>                      Quan m/z: 128.14                      TotalArea: 11376041                      Peak Area: 11376041                      RT: 6.38min (6.37)                      TAmount: 641.00 PPB                      Amount: 641.64 PPB                 </td> <td> <b>Thiacloprid</b>                      Quan m/z: 126.10                      TotalArea: 27954176                      Peak Area: 27954176                      RT: 6.53min (6.51)                      TAmount: 160.00 PPB                      Amount: 160.25 PPB                 </td> <td> <b>Methidathion_OA</b>                      Quan m/z: 145.00                      TotalArea: 139292777                      Peak Area: 139292777                      RT: 6.76min (6.75)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 640.35 PPB                 </td> <td> <b>Aldicarb</b>                      Quan m/z: 116.05                      TotalArea: 55021609                      Peak Area: 55021609                      RT: 6.96min (6.93)                      TAmount: 640.00 PPB                      Amount: 640.68 PPB                 </td> </tr> </table>							<b>Oxamyl_Oxime</b> Quan m/z: 72.10 TotalArea: 115624994 Peak Area: 115624994 RT: 4.32min (4.31) TAmount: 1280.00 PPB Amount: 1280.93 PPB	<b>Omethoate</b> Quan m/z: 183.04 TotalArea: 47692071 Peak Area: 47692071 RT: 4.34min (4.34) TAmount: 158.00 PPB Amount: 158.19 PPB	<b>Formetanate</b> Quan m/z: 165.10 TotalArea: 418192129 Peak Area: 418192129 RT: 4.36min (4.35) TAmount: 642.00 PPB Amount: 642.46 PPB	<b>Dinotefuran</b> Quan m/z: 129.14 TotalArea: 41994838 Peak Area: 41994838 RT: 4.52min (4.51) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.34 PPB	<b>Aldicarb_SO</b> Quan m/z: 132.05 TotalArea: 46055255 Peak Area: 46055255 RT: 4.52min (4.52) TAmount: 640.00 PPB Amount: 641.29 PPB	<b>Propamocarb</b> Quan m/z: 102.00 TotalArea: 233040768 Peak Area: 233040768 RT: 4.53min (4.53) TAmount: 640.00 PPB Amount: 638.19 PPB	<b>Pymetrozine</b> Quan m/z: 105.10 TotalArea: 19185279 Peak Area: 19185279 RT: 4.57min (4.56) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.15 PPB	<b>Aldicarb_SO2</b> Quan m/z: 148.04 TotalArea: 73839209 Peak Area: 73839209 RT: 4.69min (4.68) TAmount: 643.00 PPB Amount: 643.38 PPB	<b>Oxamyl</b> Quan m/z: 90.00 TotalArea: 36777897 Peak Area: 36777897 RT: 4.78min (4.77) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.38 PPB	<b>Methomyl</b> Quan m/z: 88.10 TotalArea: 71931672 Peak Area: 71931672 RT: 4.98min (4.98) TAmount: 1280.00 PPB Amount: 1281.62 PPB	<b>Fonicamid</b> Quan m/z: 203.00 TotalArea: 10725410 Peak Area: 10725410 RT: 5.04min (5.03) TAmount: 1920.00 PPB Amount: 1920.54 PPB	<b>ODMS</b> Quan m/z: 169.00 TotalArea: 46047319 Peak Area: 46047319 RT: 5.07min (5.07) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.14 PPB	<b>5-OH_TBZ</b> Quan m/z: 147.10 TotalArea: 41244357 Peak Area: 41244357 RT: 5.12min (5.11) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.15 PPB	<b>Thiamethoxam</b> Quan m/z: 181.10 TotalArea: 12666340 Peak Area: 12666340 RT: 5.13min (5.12) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.12 PPB	<b>Monocrotophos</b> Quan m/z: 193.00 TotalArea: 81911360 Peak Area: 81911360 RT: 5.26min (5.26) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.27 PPB	<b>Imidacloprid</b> Quan m/z: 209.06 TotalArea: 53957135 Peak Area: 53957135 RT: 5.66min (5.65) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.52 PPB	<b>Clothianidin</b> Quan m/z: 169.10 TotalArea: 20034742 Peak Area: 20034742 RT: 5.73min (5.71) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.31 PPB	<b>Thiabendazole</b> Quan m/z: 131.10 TotalArea: 70334577 Peak Area: 70334577 RT: 5.88min (5.86) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.35 PPB	<b>3-OH_Carbofuran</b> Quan m/z: 163.08 TotalArea: 148721201 Peak Area: 148721201 RT: 6.04min (6.03) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.60 PPB	<b>Acetamprid</b> Quan m/z: 126.10 TotalArea: 20289765 Peak Area: 20289765 RT: 6.06min (6.07) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.15 PPB	<b>Cymoxanil</b> Quan m/z: 128.14 TotalArea: 11376041 Peak Area: 11376041 RT: 6.38min (6.37) TAmount: 641.00 PPB Amount: 641.64 PPB	<b>Thiacloprid</b> Quan m/z: 126.10 TotalArea: 27954176 Peak Area: 27954176 RT: 6.53min (6.51) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.25 PPB	<b>Methidathion_OA</b> Quan m/z: 145.00 TotalArea: 139292777 Peak Area: 139292777 RT: 6.76min (6.75) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.35 PPB	<b>Aldicarb</b> Quan m/z: 116.05 TotalArea: 55021609 Peak Area: 55021609 RT: 6.96min (6.93) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.68 PPB
<b>Oxamyl_Oxime</b> Quan m/z: 72.10 TotalArea: 115624994 Peak Area: 115624994 RT: 4.32min (4.31) TAmount: 1280.00 PPB Amount: 1280.93 PPB	<b>Omethoate</b> Quan m/z: 183.04 TotalArea: 47692071 Peak Area: 47692071 RT: 4.34min (4.34) TAmount: 158.00 PPB Amount: 158.19 PPB	<b>Formetanate</b> Quan m/z: 165.10 TotalArea: 418192129 Peak Area: 418192129 RT: 4.36min (4.35) TAmount: 642.00 PPB Amount: 642.46 PPB	<b>Dinotefuran</b> Quan m/z: 129.14 TotalArea: 41994838 Peak Area: 41994838 RT: 4.52min (4.51) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.34 PPB																											
<b>Aldicarb_SO</b> Quan m/z: 132.05 TotalArea: 46055255 Peak Area: 46055255 RT: 4.52min (4.52) TAmount: 640.00 PPB Amount: 641.29 PPB	<b>Propamocarb</b> Quan m/z: 102.00 TotalArea: 233040768 Peak Area: 233040768 RT: 4.53min (4.53) TAmount: 640.00 PPB Amount: 638.19 PPB	<b>Pymetrozine</b> Quan m/z: 105.10 TotalArea: 19185279 Peak Area: 19185279 RT: 4.57min (4.56) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.15 PPB	<b>Aldicarb_SO2</b> Quan m/z: 148.04 TotalArea: 73839209 Peak Area: 73839209 RT: 4.69min (4.68) TAmount: 643.00 PPB Amount: 643.38 PPB																											
<b>Oxamyl</b> Quan m/z: 90.00 TotalArea: 36777897 Peak Area: 36777897 RT: 4.78min (4.77) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.38 PPB	<b>Methomyl</b> Quan m/z: 88.10 TotalArea: 71931672 Peak Area: 71931672 RT: 4.98min (4.98) TAmount: 1280.00 PPB Amount: 1281.62 PPB	<b>Fonicamid</b> Quan m/z: 203.00 TotalArea: 10725410 Peak Area: 10725410 RT: 5.04min (5.03) TAmount: 1920.00 PPB Amount: 1920.54 PPB	<b>ODMS</b> Quan m/z: 169.00 TotalArea: 46047319 Peak Area: 46047319 RT: 5.07min (5.07) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.14 PPB																											
<b>5-OH_TBZ</b> Quan m/z: 147.10 TotalArea: 41244357 Peak Area: 41244357 RT: 5.12min (5.11) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.15 PPB	<b>Thiamethoxam</b> Quan m/z: 181.10 TotalArea: 12666340 Peak Area: 12666340 RT: 5.13min (5.12) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.12 PPB	<b>Monocrotophos</b> Quan m/z: 193.00 TotalArea: 81911360 Peak Area: 81911360 RT: 5.26min (5.26) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.27 PPB	<b>Imidacloprid</b> Quan m/z: 209.06 TotalArea: 53957135 Peak Area: 53957135 RT: 5.66min (5.65) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.52 PPB																											
<b>Clothianidin</b> Quan m/z: 169.10 TotalArea: 20034742 Peak Area: 20034742 RT: 5.73min (5.71) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.31 PPB	<b>Thiabendazole</b> Quan m/z: 131.10 TotalArea: 70334577 Peak Area: 70334577 RT: 5.88min (5.86) TAmount: 320.00 PPB Amount: 320.35 PPB	<b>3-OH_Carbofuran</b> Quan m/z: 163.08 TotalArea: 148721201 Peak Area: 148721201 RT: 6.04min (6.03) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.60 PPB	<b>Acetamprid</b> Quan m/z: 126.10 TotalArea: 20289765 Peak Area: 20289765 RT: 6.06min (6.07) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.15 PPB																											
<b>Cymoxanil</b> Quan m/z: 128.14 TotalArea: 11376041 Peak Area: 11376041 RT: 6.38min (6.37) TAmount: 641.00 PPB Amount: 641.64 PPB	<b>Thiacloprid</b> Quan m/z: 126.10 TotalArea: 27954176 Peak Area: 27954176 RT: 6.53min (6.51) TAmount: 160.00 PPB Amount: 160.25 PPB	<b>Methidathion_OA</b> Quan m/z: 145.00 TotalArea: 139292777 Peak Area: 139292777 RT: 6.76min (6.75) TAmount: 640.00 PPB Amount: 640.35 PPB	<b>Aldicarb</b> Quan m/z: 116.05 TotalArea: 55021609 Peak Area: 55021609 RT: 6.96min (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 (高密度样品长报告 1)

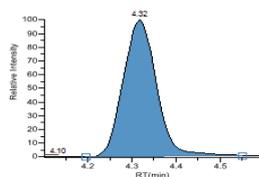
## High Density Sample Report 1 Long

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/RPC  
Batch: 011HPLR1

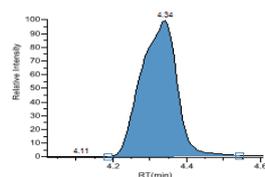
Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Page 1 of 10

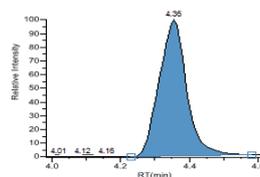
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	



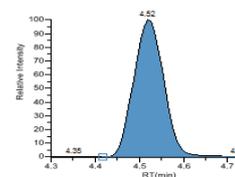
**Oxamyloxime**  
Quan m/z: 72.10  
TotalArea: 115624994  
Peak Area: 115624994  
RT: 4.32min (4.31)  
TAmount: 1280.00 PPB  
Amount: 1280.93 PPB



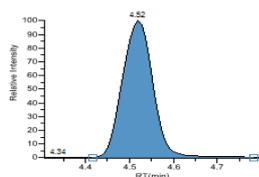
**Omethoate**  
Quan m/z: 183.04  
TotalArea: 47692071  
Peak Area: 47692071  
RT: 4.34min (4.34)  
TAmount: 158.00 PPB  
Amount: 158.19 PPB



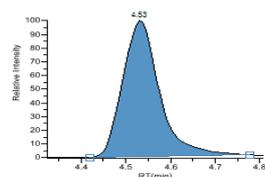
**Formetanate**  
Quan m/z: 165.10  
TotalArea: 418192129  
Peak Area: 418192129  
RT: 4.36min (4.35)  
TAmount: 642.00 PPB  
Amount: 642.46 PPB



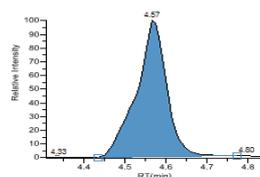
**Dinotefuran**  
Quan m/z: 129.14  
TotalArea: 41994838  
Peak Area: 41994838  
RT: 4.52min (4.51)  
TAmount: 640.00 PPB  
Amount: 642.34 PPB



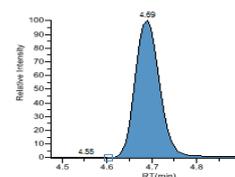
**Aldicarb\_SO**  
Quan m/z: 132.05  
TotalArea: 46055255  
Peak Area: 46055255  
RT: 4.52min (4.52)  
TAmount: 640.00 PPB  
Amount: 641.29 PPB



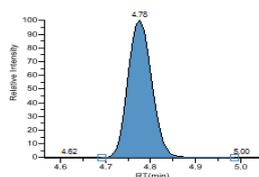
**Propamocarb**  
Quan m/z: 102.00  
TotalArea: 233040768  
Peak Area: 233040768  
RT: 4.53min (4.53)  
TAmount: 640.00 PPB  
Amount: 638.19 PPB



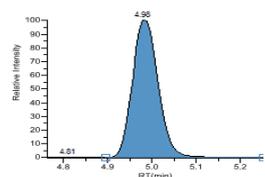
**Pymetrozine**  
Quan m/z: 105.10  
TotalArea: 19185279  
Peak Area: 19185279  
RT: 4.57min (4.56)  
TAmount: 160.00 PPB  
Amount: 160.15 PPB



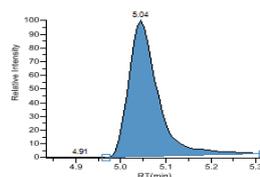
**Aldicarb\_SO2**  
Quan m/z: 148.04  
TotalArea: 73839209  
Peak Area: 73839209  
RT: 4.69min (4.68)  
TAmount: 643.00 PPB  
Amount: 643.38 PPB



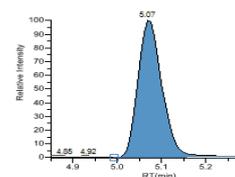
**Oxamyl**  
Quan m/z: 90.00  
TotalArea: 36777897  
Peak Area: 36777897  
RT: 4.78min (4.77)  
TAmount: 640.00 PPB  
Amount: 640.38 PPB



**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 (高密度样品报告 2)

High Density Sample Report 2

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

Page 1 of 10

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	

<p><b>Oxamyl_Oxime</b> Quan m/z: 72.10 Total Area: 115624994 Peak Area: 115624994 RT: 4.32min (4.31) Amount: 1280.93 PPB TAmount: 1280.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 90.06 Area: 8374691 Range: 0.00 % - 27.25 %</p>	<p><b>Omethoate</b> Quan m/z: 183.04 Total Area: 47692071 Peak Area: 47692071 RT: 4.33min (4.34) Amount: 158.19 PPB TAmount: 158.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 125.03 Area: 35413809 Ratio: 74.26 % Range: 53.49 % - 93.49 %</p>	<p><b>Formetanate</b> Quan m/z: 185.10 Total Area: 418192129 Peak Area: 418192129 RT: 4.36min (4.35) Amount: 642.46 PPB TAmount: 642.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 120.00 Area: 33553959 Ratio: 8.02 % Range: 0.00 % - 28.09 %</p>	<p><b>Dinotefuran</b> Quan m/z: 129.14 Total Area: 41994838 Peak Area: 41994838 RT: 4.52min (4.51) Amount: 642.34 PPB TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 114.15 Area: 30368995 Ratio: 72.29 % Range: 52.28 % - 92.28 %</p>
<p><b>Aldicarb_SO</b> Quan m/z: 132.05 Total Area: 4605255 Peak Area: 4605255 RT: 4.52min (4.52) Amount: 641.29 PPB TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 89.10 Area: 30100441 Range: 48.87 % - 88.87 %</p>	<p><b>Propamocarb</b> Quan m/z: 102.00 Total Area: 233040768 Peak Area: 233040768 RT: 4.53min (4.53) Amount: 638.19 PPB TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 144.00 Area: 97076996 Ratio: 41.66 % Range: 19.38 % - 59.38 %</p>	<p><b>Pymetrozine</b> Quan m/z: 105.10 Total Area: 19185279 Peak Area: 19185279 RT: 4.57min (4.56) Amount: 160.15 PPB TAmount: 160.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 78.11 Area: 2406306 Ratio: 12.54 % Range: 0.00 % - 32.18 %</p>	<p><b>Aldicarb_SO2</b> Quan m/z: 148.04 Total Area: 73839209 Peak Area: 73839209 RT: 4.69min (4.68) Amount: 643.38 PPB TAmount: 643.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 86.00 Area: 43918555 Ratio: 59.48 % Range: 40.81 % - 80.81 %</p>
<p><b>Oxamyl</b> Quan m/z: 90.00 Total Area: 36777897 Peak Area: 36777897 RT: 4.78min (4.77) Amount: 640.38 PPB TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 219.70 Area: 3371404 Range: 0.00 % - 31.32 %</p>	<p><b>Methomyl</b> Quan m/z: 88.10 Total Area: 71931672 Peak Area: 71931672 RT: 4.98min (4.98) Amount: 1281.62 PPB TAmount: 1280.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 108.03 Area: 73876485 Ratio: 102.70 % Range: 85.41 % - 125.41 %</p>	<p><b>Fionlcamid</b> Quan m/z: 203.00 Total Area: 10725410 Peak Area: 10725410 RT: 5.04min (5.03) Amount: 1920.54 PPB TAmount: 1920.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 98.00 Area: 6546720 Ratio: 61.72 % Range: 32.77 % - 72.77 %</p>	<p><b>ODMS</b> Quan m/z: 169.00 Total Area: 46047319 Peak Area: 46047319 RT: 5.07min (5.07) Amount: 320.14 PPB TAmount: 320.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 108.95 Area: 21960912 Ratio: 47.69 % Range: 29.22 % - 69.22 %</p>

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

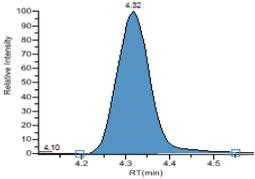
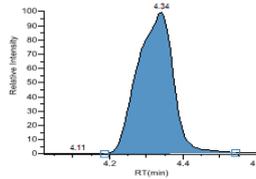
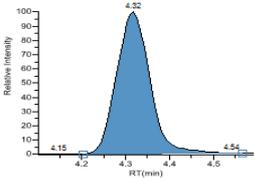
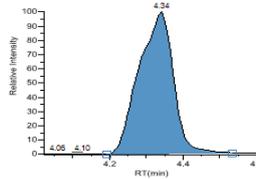
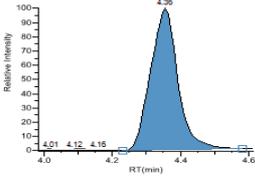
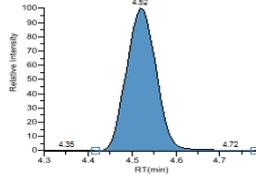
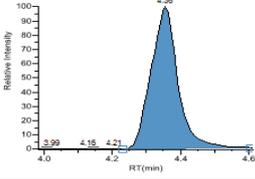
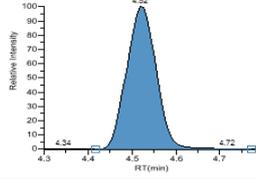
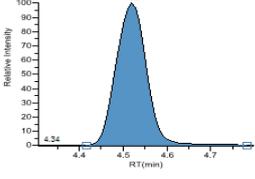
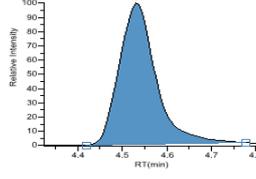
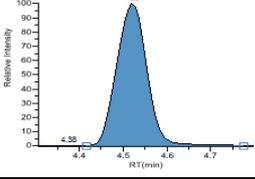
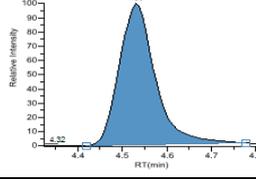
# High Density Sample Report 2 Long (高密度样品长报告 2)

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

Page 1 of 20

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	
		<p><b>Oxamyloxime</b> Quan m/z: 72.10 TotalArea: 115624994 Peak Area: 115624994 RT: 4.32min (4.31) Amount: 1280.93 PPB TAmount: 1280.00 PPB</p>				<p><b>Omethoate</b> Quan m/z: 183.04 TotalArea: 47692071 Peak Area: 47692071 RT: 4.34min (4.34) Amount: 158.19 PPB TAmount: 158.00 PPB</p>
		<p>Area: 8374691 Ratio: 7.24 % Range: 0.00 % - 27.25 %</p>				<p>Qual m/z: 125.03 Area: 35413809 Ratio: 74.26 % Range: 53.49 % - 93.49 %</p>
		<p><b>Formetanate</b> Quan m/z: 165.10 TotalArea: 418192129 Peak Area: 418192129 RT: 4.36min (4.35) Amount: 642.46 PPB TAmount: 642.00 PPB</p>				<p><b>Dinotefuran</b> Quan m/z: 129.14 TotalArea: 41994838 Peak Area: 41994838 RT: 4.52min (4.51) Amount: 642.34 PPB TAmount: 640.00 PPB</p>
		<p>Area: 33553959 Ratio: 8.02 % Range: 0.00 % - 28.09 %</p>				<p>Qual m/z: 114.15 Area: 30358995 Ratio: 72.29 % Range: 52.28 % - 92.28 %</p>
		<p><b>Aldicarb_SO</b> Quan m/z: 132.05 TotalArea: 46055255 Peak Area: 46055255 RT: 4.52min (4.52) Amount: 641.29 PPB TAmount: 640.00 PPB</p>				<p><b>Propamocarb</b> Quan m/z: 102.00 TotalArea: 233040768 Peak Area: 233040768 RT: 4.53min (4.53) Amount: 638.19 PPB TAmount: 640.00 PPB</p>
		<p>Area: 30100441 Ratio: 65.36 % Range: 48.87 % - 88.87 %</p>				<p>Qual m/z: 144.00 Area: 97076996 Ratio: 41.66 % Range: 19.38 % - 59.38 %</p>

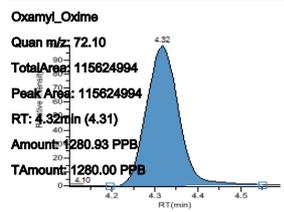
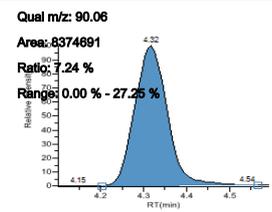
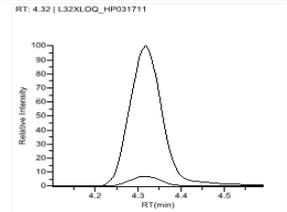
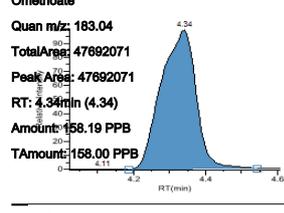
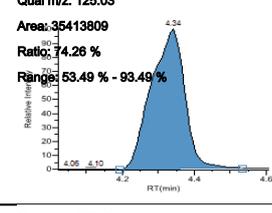
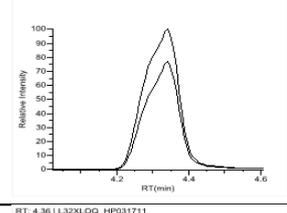
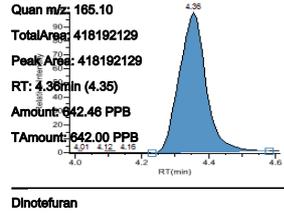
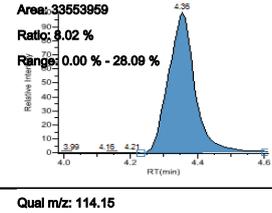
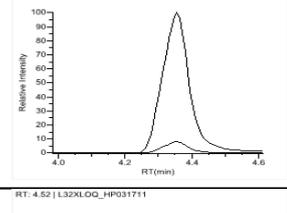
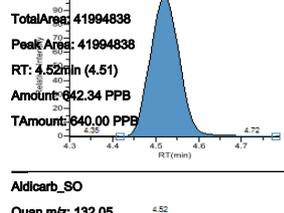
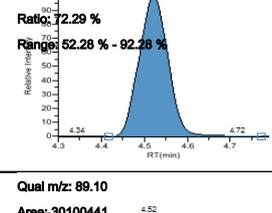
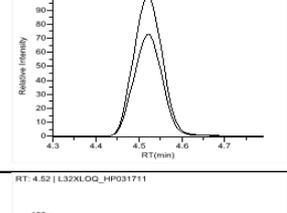
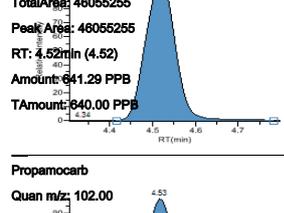
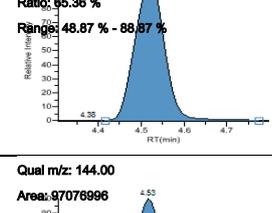
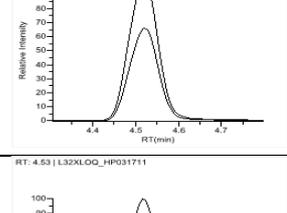
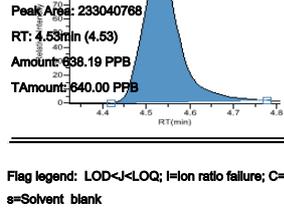
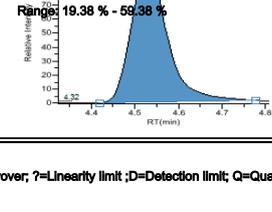
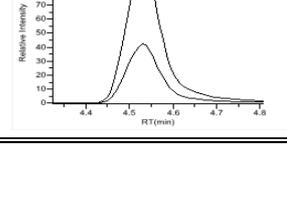
Flag legend: LOD<J<LOQ; I=Ion ratio failure; C=Carryover; ?=Linearity limit ;D=Detection limit; Q=Quan limit; POS=Rpt limit; b=Blank; s=Solvent blank

# High Density Sample Report 3 (高密度样品报告 3)

High Density Sample Report 3

Page 1 of 20

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	
<p><b>Oxamy_Oxime</b>                      Quan m/z: 72.10                      Total Area: 115624994                      Peak Area: 115624994                      RT: 4.32min (4.31)                      Amount: 1280.93 PPB                      TAmount: 1280.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 90.06                      Area: 6374691                      Ratio: 7.24 %                      Range: 0.00 % - 27.25 %</p>   						
<p><b>Omethoate</b>                      Quan m/z: 163.04                      Total Area: 47692071                      Peak Area: 47692071                      RT: 4.34min (4.34)                      Amount: 158.19 PPB                      TAmount: 158.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 125.03                      Area: 35413809                      Ratio: 74.26 %                      Range: 53.49 % - 93.49 %</p>   						
<p><b>Formotenate</b>                      Quan m/z: 165.10                      Total Area: 418192129                      Peak Area: 418192129                      RT: 4.36min (4.35)                      Amount: 642.46 PPB                      TAmount: 642.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 120.00                      Area: 33553959                      Ratio: 8.02 %                      Range: 0.00 % - 28.09 %</p>   						
<p><b>Dinotefuran</b>                      Quan m/z: 129.14                      Total Area: 41994838                      Peak Area: 41994838                      RT: 4.52min (4.51)                      Amount: 642.34 PPB                      TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 114.15                      Area: 30358995                      Ratio: 72.29 %                      Range: 52.28 % - 92.28 %</p>   						
<p><b>Aldicarb_SO</b>                      Quan m/z: 132.05                      Total Area: 46055255                      Peak Area: 46055255                      RT: 4.52min (4.52)                      Amount: 641.29 PPB                      TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 89.10                      Area: 30100441                      Ratio: 65.36 %                      Range: 48.87 % - 88.87 %</p>   						
<p><b>Propamocarb</b>                      Quan m/z: 102.00                      Total Area: 233040768                      Peak Area: 233040768                      RT: 4.53min (4.53)                      Amount: 638.19 PPB                      TAmount: 640.00 PPB</p> <p>Qual m/z: 144.00                      Area: 97076996                      Ratio: 41.66 %                      Range: 19.38 % - 59.38 %</p>   						

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

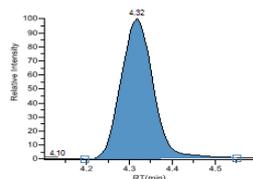
# High Density Sample Report 3 Long (高密度样品长报告 3)

## High Density Sample Report 3 Long

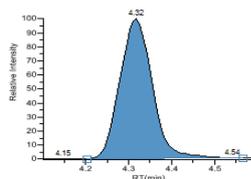
Page 1 of 40

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/RPC  
Batch: 011HPLR1  
Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

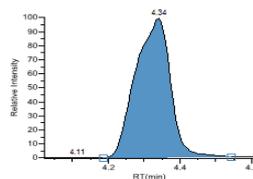
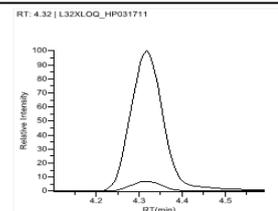
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	



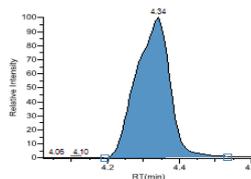
Oxamyloxime  
Quan m/z: 72.10  
TotalArea: 115624994  
Peak Area: 115624994  
RT: 4.32min (4.31)  
Amount: 1280.93 PPB  
TAmount: 1280.00 PPB



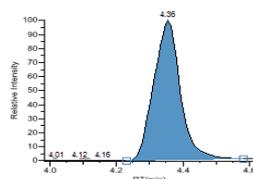
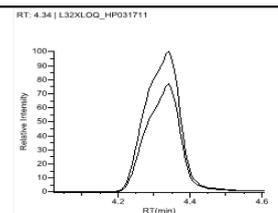
Qual m/z: 90.06  
Area: 8374691  
Ratio: 7.24 %  
Range: 0.00 % - 27.25 %



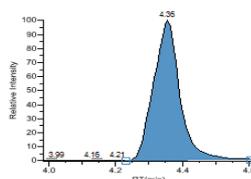
Omethoate  
Quan m/z: 183.04  
TotalArea: 47692071  
Peak Area: 47692071  
RT: 4.34min (4.34)  
Amount: 158.19 PPB  
TAmount: 158.00 PPB



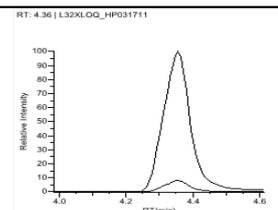
Qual m/z: 125.03  
Area: 35413809  
Ratio: 74.26 %  
Range: 53.49 % - 93.49 %



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 (内标总结报告)

### 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



# Manual Integration Report (手动积分报告)

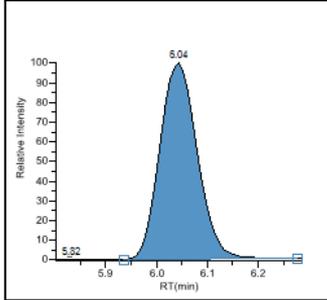
## Manual Integration Report

Page 1 of 2

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQU00637  
User: TQU00637/RPC  
Batch: 011HPLR1  
Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.calx

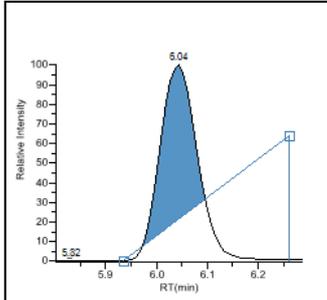
Vial Pos	Sample ID	File Name	Level	Sample Name	File Date	Comment
5	8	L32XLOQ_HP031711	32XLOQ	L32XLOQ_HP031711	3/17/2011 8:06:03 PM	

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 (方法报告)

### Method Report

Method name: Drug\_A\_Drug\_A Page number: Page 1 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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

#### 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 Page number: Page 2 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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

#### 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 Page number: Page 3 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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

#### 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 Page number: Page 4 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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

#### 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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

Report options:

Quant 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 :

ToxLab Forms settings

Quant 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

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

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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

QAQC Calibration:

Compound	Max RSD (%)	Min RF	R <sup>2</sup> 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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

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: 20x3, Ext: EPA536 Triazines, Ext: Anabolic Steroids, Ext: Melamine and Cyanuric Acid

QAQC Hydrolysis:

CompoundName	EvaluationMethod	LowerLimit	UpperLimit
Drug_A	Range	15.000	23.000

# Method Validation Report (方法验证报告)

## 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

Page 2 of 3

**Lab name:** Thermo Fisher Laboratory  
**Instrument:** Thermo Scientific Instrument  
**User:** AMER/jamie.humphries  
**Batch:** Preview2

**Method:** Preview2\_EPA536-Triazines  
EPAS36-Triazines  
**Cal 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:** AMERjamie.humphries  
**Batch:** Preview2

**Method:** Preview2\_EPA536-Triazines  
EPA536-Triazines  
**Cali File:** Preview2.calx

<u>Pos</u>	<u>Sample ID</u>	<u>Filename</u>	<u>Level</u>	<u>Sample Name</u>	<u>File Date</u>	<u>Comment</u>
Tray1:10	SampleID003	500ppt-003	N/A	D003	6/26/2007 10:18:49 PM	New Dilutions 6/26/2007 H

Manually integrated

<<< = Failure

# MSMSD Report (基质加标 / 基质加标重复报告)

MSMSD Report

Page 1 of 1

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 (质控报告)

Quality Control Report

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 (定量报告)

Page 1 of 6

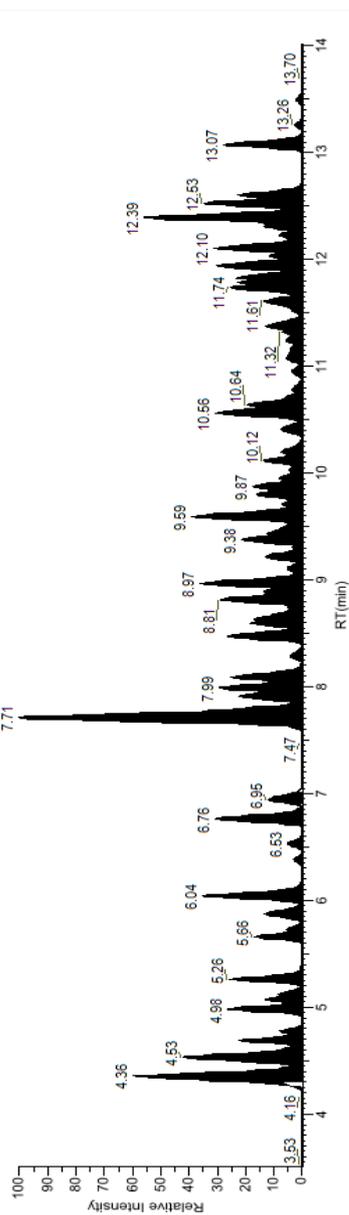
## Quantitation Report

Lab Name: Thermo Lab  
Instrument: TQ000637  
User: TQ000637RPC  
Batch: 011HPLR1

Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
PDP\_040511  
Call File: 011HPLR1.ca1

Yield_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	

C:\Thermo\TraceFinder1\_1\Projects\Default\Default\011HPLR1\Data\L32XLOQ\_HP031711.raw



Surrogates	RT	Q1on	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	
<b>Target Compounds</b>					<b>Average RF/ Response Ratio</b>	<b>Injected Conc</b>	<b>Units</b>	<b>Calculated Conc</b>	<b>Units</b>	<b>Flags</b>
Oxamyl_Oxime	4.32	72.10	115624984	Quadratic	0.00	1280.93	PPB	1280.93	PPB	
Onehoate	4.34	183.04	47692071	Quadratic	0.00	158.19	PPB	158.19	PPB	
Fomefenate	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=L-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 (定量报告 -2)

## Quantitation Report - 2

MS Integ Params: PDP\_040511  
 Quant Method: 011HPLR1\_PDP\_040511  
 Title: Assay  
 Last Update: 6/2/2011 9:47:56 AM  
 Data Acq Method: PDP\_010411  
 Operator: TQ000637/RPC  
 Instr: TQ000637  
 Response Via: 011HPLR1.calx

Quant Time: 4/19/2011 3:39:05 PM  
 Data File: L32XLOQ\_HP031711  
 Acq On: 3/17/2011 8:06:03 PM  
 Sample: L32XLOQ\_HP031711  
 Comment:  
 Vial: 5  
 Multipl: 1.000  
 Quant Results File: C:\ThermoTrace\Finder\1.1\Projects\Default\011HPLR1\Dat\L32XL  
 OQ\_HP031711.txt

Surrogates	Compound Name	RT	Qlon	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		
	<b>Target Compounds</b>										
Compound Name	RT	Qlon	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 Fymetrozine	4.57	105.10	19185279	160.15	PPB	0.01					
8 Aldicarb_SO2	4.69	148.04	73639209	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 Thiaferidazole	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				

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_J	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_J	9.74	178.02	4002074	22.38	PPB	0.02	I
	63. Promecarb	9.80	109.02	72069251	320.27	PPB	0.01	
	64. Fluclofenil	9.81	262.00	59962817	160.05	PPB	0.01	
	65. Flupicolide	9.83	173.00	29652715	160.16	PPB	0.01	
	66. Methoxyfenozide	9.87	149.00	68163623	319.95	PPB	0.01	
	67. Dimethomorph_JI	9.88	301.10	24249261	227.43	PPB	0.00	
	68. Clethodim_J	9.94	164.09	30569146	512.02	PPB	0.02	
	69. Triadimelon	9.95	197.00	34892978	640.89	PPB	0.01	
	70. Imiprothrin_J	10.02	151.10	9384265	66.41	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_JI	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. Diflufenazuron	10.62	158.02	27571198	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	

# Solvent Blank Report (溶剂空白报告)

Solvent Blank Report

**Lab Name:** Thermo Lab  
**Instrument:** TQU00637  
**User:** TQU00637/RPC  
**Batch:** 011HPLR1  
**Method:** 011HPLR1\_PDP\_040511  
**Call File:** 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	Qlon	Response	Method	Upper Limit
Propoxur_(S)	7.69	111.10	1553885	None	

Target Compounds	RT	Qlon	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	
Fonicamid	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

## 同位素分布详细信息

对于目标筛选，TraceFinder 应用程序根据处理方法中的设置计算同位素分布分数。该应用程序在 Data Review（数据查看）视图中显示其分数。本附录描述了同位素分布的概念，并以示例的方式提供了计算同位素分布分数的详细信息。

### 目录

- 准确质量数质谱图中的同位素分布
- 同位素分布分数计算

## 准确质量数质谱图中的同位素分布

若要确定目标筛选的元素组成，TraceFinder 应用程序采用同位素分布匹配算法，该算法考虑同位素准确质量数和强度比率。应用程序使用单个准确质量数（通常为所测得同位素分布的单同位素质量数）计算质量数容许窗口内所有可能的元素组成。用户可以过滤该可能元素组成列表，然后使用天然同位素元素分布缩小结果的范围。

### 天然同位素分布

以下表格列出了最常见元素的天然同位素分布。

**表 121.** 天然同位素分布（第 1 页，共 2 页）

元素	同位素	同位素次序	准确质量数	质量数差值	丰度 (%)
氢	<sup>1</sup> H	A0	1.0078		99.9985
	<sup>2</sup> H	A1	2.014102	+1.006302	0.015
碳	<sup>12</sup> C	A0	12.0		98.890
	<sup>13</sup> C	A1	13.003355	+1.003355	1.110
氮	<sup>14</sup> N	A0	14.003074		99.634
	<sup>15</sup> N	A1	15.00109	+0.998016	0.366
氧	<sup>16</sup> O	A0	15.994915		99.762
	<sup>17</sup> O	A1	16.999132	+1.004217	0.038
	<sup>18</sup> O	A2	17.999161	+2.004246	0.200
氟	<sup>19</sup> F	A0	18.99840		100
磷	<sup>31</sup> P	A0	30.971459		100

表 121. 天然同位素分布 (第 2 页, 共 2 页)

元素	同位素	同位素次序	准确质量数	质量数差值	丰度 (%)
硫	<sup>32</sup> S	A0	31.972071		95.020
	<sup>33</sup> S	A1	32.971459	+0.999388	0.750
	<sup>34</sup> S	A2	33.967867	+1.995796	4.210
	<sup>36</sup> S	A4	35.967081	+3.995010	0.020

其中

- A0 代表单同位素峰, 具有最大丰度, 通常为最低质量数的同位素。  
例如: <sup>1</sup>H、<sup>12</sup>C、<sup>14</sup>N、<sup>16</sup>O、<sup>19</sup>F、<sup>31</sup>P 和 <sup>32</sup>S
- A1 代表在统计学上分子中一个原子被质量数约增加 1 amu 的另一个原子所取代的同位素。  
例如: <sup>2</sup>H、<sup>13</sup>C、<sup>15</sup>N、<sup>17</sup>O 和 <sup>33</sup>S
- A2 代表同位素:  
在统计学上分子中的两个原子分别被质量数约增加 1 amu 的其他两个原子所取代。  
– 或 –  
一个原子被质量数约增加 2 amu 的其他原子取代。  
例如: <sup>18</sup>O 和 <sup>34</sup>S
- A3 代表同位素:  
在统计学上分子中的三个原子被质量数约增加 1 amu 的其他三个原子所取代。  
– 或 –  
一个原子被质量数约增加 1 amu 的另一个原子取代, 一个原子被质量数约增加 2 amu 的另一个原子取代。  
– 或 –  
一个原子被质量数约增加 3 amu 的其他原子取代。
- A4 代表同位素:  
在统计学上分子中的四个原子被质量数约增加 1 amu 的其他四个原子所取代。  
– 或 –  
两个原子被质量数约增加 1 amu 的另两个原子取代, 一个原子被质量数约增加 2 amu 的另一个原子取代。  
– 或 –  
一个原子被质量数约增加 2 amu 的另一个原子取代, 同时还有一个原子被质量数约增加 2 amu 的另一个原子取代。  
– 或 –

一个原子被质量数约增加 1 amu 的另一个原子取代，同时还有一个原子被质量数约增加 3 amu 的另一个原子取代。

– 或 –

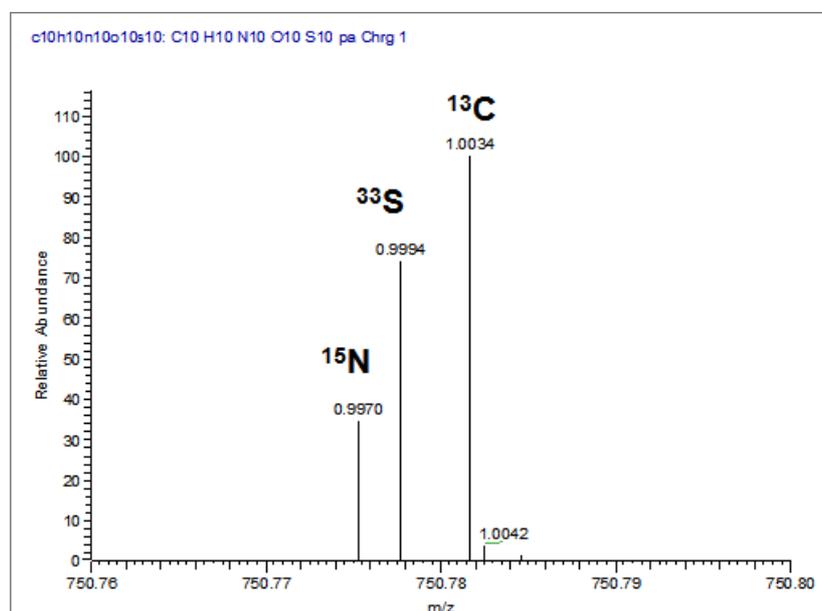
一个原子被质量数约增加 4 amu 的其他原子取代。

例如： $^{36}\text{S}$

- 质量数差值是 A0 同位素和相同元素的其他同位素（A1、A2、A3、A4 等）之间的质量数差值。
- 丰度是每个同位素在自然状态下通常所占的百分比。

在以下图中， $x$  轴显示  $^{13}\text{C}$ 、 $^{15}\text{N}$  和  $^{33}\text{S}$  的同位素 A1 相对单同位素峰（A0）的质量数差值。 $y$  轴显示强度的相对丰度。

图 159. A1 相对 A0 的质量数差值和丰度

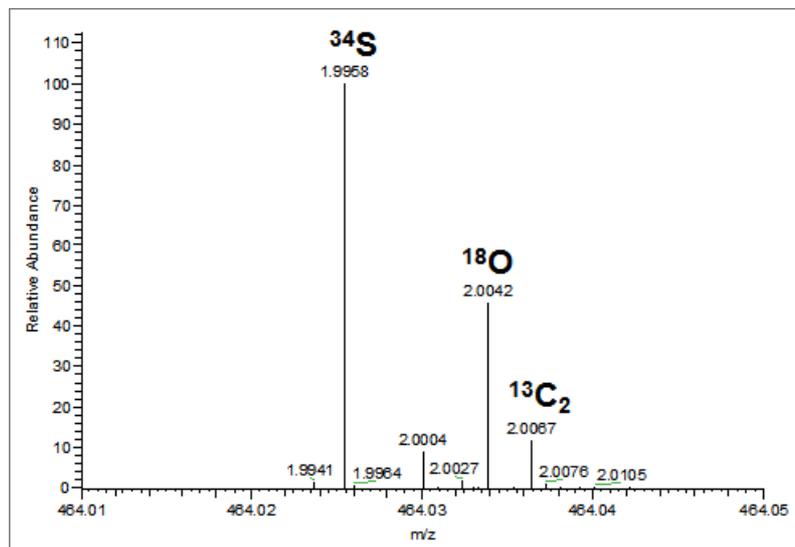


## B 同位素分布详细信息

准确质量数质谱图中的同位素分布

在以下图中， $x$ 轴显示 $^{18}\text{O}$ 、 $^{34}\text{S}$ 和 $^{13}\text{C}_2$ 的同位素A2相对单同位素峰（A0）的质量数差值。 $y$ 轴显示强度的相对丰度。

图 160. A2 相对 A0 的质量数差值和丰度



**注释** 对于特定同位素质谱图，质量数差值总是与每个特定元素的 A0 同位素和其他同位素（A1、A2 等）之间的差值一致，而强度随分子组成（也就是分子中每个元素的数目）变化。

## 同位素分布分数计算

TraceFinder 应用程序遵循第 593 页上的“准确质量数质谱图中的同位素分布”中描述的相关同位素分布逻辑，但次序不同，且限制数量和分数，以优化自动处理。TraceFinder 应用程序为特定的目标化合物确定可能的元素组成之后，计算由每个候选元素组成的预期同位素分布和同位素分布分数，以表示预期和测得同位素分布之间的匹配度。

以下示例描述了同位素分布分数的数据，并为特定数据组提供计算分数的详细信息。

### 数据组示例

对于本例，使用在 ...\TraceFinderData 文件夹中安装的“Pesticides Screening Example（农药筛选示例）”数据组。在 Data Review（数据查看）视图中，选择 **Apple\_PosHCD\_40\_5\_01** 样品和 **Metribuzin（赛克嗪）** 目标化合物。

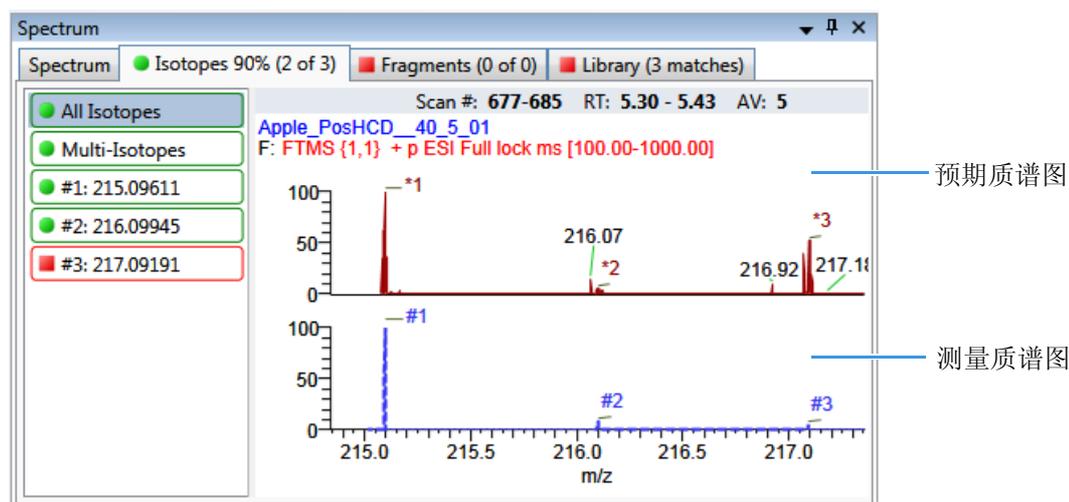
对于该化合物，注意在 Data Review（数据查看）的 Compounds（化合物）窗格中，Isotopic Pattern Score（同位素分布分数）列中显示为 90%，Num Isotopes Matched（匹配同位素数）列中显示“2 of 3（3 个同位素中已匹配 2 个）”。化合物的分子式为 C<sub>8</sub>H<sub>14</sub>N<sub>4</sub>O<sub>5</sub>，且其加合物为 H，因此模型化同位素分布为 C<sub>8</sub>H<sub>15</sub>N<sub>4</sub>O<sub>5</sub>。

图 161. Metribuzin（赛克嗪）的同位素数据

Compounds	Selected	Compound Name	Formula	Isotopic Pattern Score (%)	Num Isotopes Matched
640	<input type="checkbox"/>	Metribuzin	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>5</sub>	90	2 of 3

在 Spectrum（质谱图）窗格中，点击 Isotopes（同位素）选项卡，放大并查看预期同位素分布质谱图，该谱图与采集测得的质谱图进行对比。得到的同位素分布分数应该与目标化合物的预期同位素分布和测量分布之间差异的直观检查相关。

图 162. 同位素分布质谱图（叠图）



对于本例，用于处理数据的处理方法包含以下目标筛选的同位素分布设置：

- Fit threshold（匹配阈值）= 90%
- Allowed Mass Deviation（允许质量数偏差）= 5 ppm
- Allowed Intensity Deviation（允许强度偏差）= 10%
- Use Internal Mass Calibration（使用内标质量数校正）= 清除

**Metribuzin（赛克嗪）**化合物的数据如下：

测量值	预期值
A0 $m/z$ = 215.09602	A0 $m/z$ = 215.09611
A0 噪声 = 1482	–
A0 强度 = 4.75E4	A0 强度 = 8.55E5

由于测量和预期质谱图具有不同的强度，质谱图噪声阈值必须成比例应用至预期质谱图中，以判断测量数据中预期有哪些峰。

噪声阈值（预期值）=  $A0 \text{ 噪声（测量值）} \times A0 \text{ 强度（预期值）} \div A0 \text{ 强度（测量值）}$

遵循以上公式，预期噪声阈值为  $1482 \times 8.55E5 \div 4.75E4 = 2.6676E4$ 。

测量质谱图中的预期离子是那些强度高于预期噪声阈值的离子。以下表格列出了预期质谱图中的离子。Above Threshold（高于阈值）列中的“✓”代表预期离子。

**表 122.** 预期质谱图中的离子

同位素次序	$m/z$ （预期值）	强度（预期值）	高于阈值	存在于测量质谱图中
A0	215.09611	8.55E5	✓	Yes（是）
A1	216.09945	7.50E4	✓	Yes（是）
A2	217.09191	3.86E4	✓	Yes（是）
A3	218.09521	3.39E3		No（否）

## 计算质量数和强度偏差

预期离子数为 3，它们为表格[预期质谱图中的离子](#)的 Above Threshold（高于阈值）列中带“✓”的离子。这些离子是集中用于计算分数的离子。数字“3”显示的是 Data Review（数据查看）的 Compounds（化合物）窗格上 Num Isotopes Matched（匹配同位素数）列中的  $y$  值。它代表了基于质谱图中 Fourier 变换（FT）噪声的预期同位素分布峰数目。

在本例中，可以预期在测量质谱图中看到三个最强预期峰。这些峰的质量数为（按强度从高到低排序）：215.09611、216.09945 和 217.09191。当测量质谱图强度更大或噪声水平更低时，用户会在测量质谱图中找到更多高于该噪声阈值和预期数目的峰，从而包含其他的同位素峰。

以下表格显示了每个预期离子的质量数偏差（ $m/z$  差值）数据。

**表 123.** 预期离子的质量数偏差数据

同位素次序	$m/z$ （预期值）	$m/z$ （测量值）	$m/z$ 差值（ppm）
A0	215.09611	215.09602	-0.42
A1	216.09945	216.09879	-3.05
A2	217.09191	217.09712	24

其中

$$m/z \text{ 差值 (ppm)} = 1\,000\,000 \times ([m/z \text{ (测量值)} - m/z \text{ (预期值)}] \div m/z \text{ (预期值)})$$

例如：

$$1\,000\,000 \times ([216.09879 - 216.09945] \div 216.09945) = -3.05 \text{ ppm}$$

**提示** 用户可以查看 Spectrum（质谱图）窗格 Isotopes（同位素）页面上的预期值、测量值和  $m/z$  差值。MS（质谱仪）页面（参阅第 597 页上的“[同位素分布质谱图（叠图）](#)”）显示轮廓图测量的  $m/z$  值，而 Isotopes（同位素）页面显示棒状图测量的  $m/z$  值，这两者可能不一样。

若希望获得更高精确度，可以在导出数据文件中查看 A0  $m/z$  值的更多小数位数。

若  $m/z$  差值的绝对值小于 5 ppm（在处理方法中设置的 Allowed Mass Deviation [允许质量数偏差]），TraceFinder 应用程序确定找到该离子，即测量质谱图中存在该离子。对于本数据组示例，应用程序仅找到 A0 和 A1 离子，因此 Data Review（数据查看）的 Compounds（化合物）窗格上 Num Isotopes Matched（匹配同位素数）列中的  $x$  值显示为“2”。应用程序没有找到 A2 预期离子，因为其  $m/z$  差值为 24 ppm，远远高于 5 ppm。

**注释** 可以从放大的同位素分布质谱图（参阅第 597 页上的“[同位素分布质谱图（叠图）](#)”）中看到，在测量质谱图中具有与前两个预期离子密切相关的测量峰，但没有与 217.09191 预期离子密切相关的测量峰。

以下表格列出每个预期离子的强度偏差（强度差值）数据，相对于 A0 离子的预期强度 8.55E5 及测量强度 4.75E4 而言。

**表 124.** 预期离子的强度偏差数据

同位素次序	m/z（预期值）	强度（预期值）	相对强度（预期值，%）	强度（测量值）	相对强度（测量值，%）	强度差值
A0	215.09611	8.55E5	100	4.75E4	100	0
A1	216.09945	7.50E4	8.77	8.75E3	18.42	9.65
A2	217.09191	3.86E4	4.51	3.47E4	73.05	68.54

其中

- 相对强度（预期值和测量值）值来源于同位素分布质谱图（参阅第 597 页上的“同位素分布质谱图（叠图）”）。每个值为某个同位素强度相对于 A0 离子强度的百分比。

例如： $7.50E4 \div 8.55E5 = 8.77\%$

- 强度差值 = [ 相对强度（测量值） - 相对强度（预期值） ]

例如： $18.42 - 8.77 = 9.65$

在本例中，A0 和 A1 离子的 m/z 差值的绝对值（参阅第 599 页上的“预期离子的质量数偏差数据”）均小于 Allowed Mass Deviation [ 允许质量数偏差 ] 5 ppm；因此，该应用程序认为测量质谱图中存在这两个离子。A1 同位素离子的强度差值与 Allowed Intensity Deviation（允许强度偏差）10% 接近，A2 同位素离子的强度差值高得多（参阅第 600 页上的“预期离子的强度偏差数据”）。

TraceFinder 应用程序结合预期和测量质谱图之间的质量数和强度偏差，确定同位素分布分数值。在这种情况下，应用程序将同位素分布分数值从 100% 降低到 90%，以反映出 A1 和 A2 同位素强度的临界状态，同时还表示未找到 A2 同位素。

## 计算同位素分布分数

若要为同位素分布的匹配度计分，TraceFinder 应用程序计算每个预期离子的匹配度，然后通过对其预期强度进行加权来整合各个匹配分数。

对于每个预期离子峰，该应用程序测量预期分布和测量分布之间  $m/z$  和强度差值。然后该程序将这些偏差值（归一化偏差值）归一化为处理方法中设置的最大允许质量数和强度偏差值。应用程序通过矢量加法计算归一化差值的总和（参阅第 601 页上的“强度 (I) 和质量数 (M) 偏差的矢量和”）。

图 163. 测量和预期分布

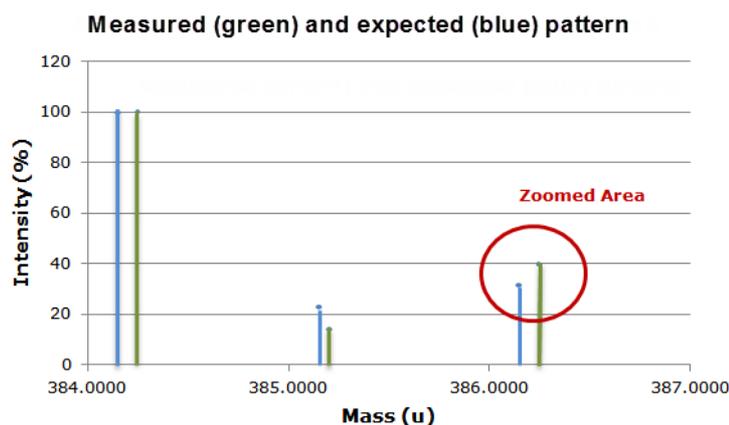
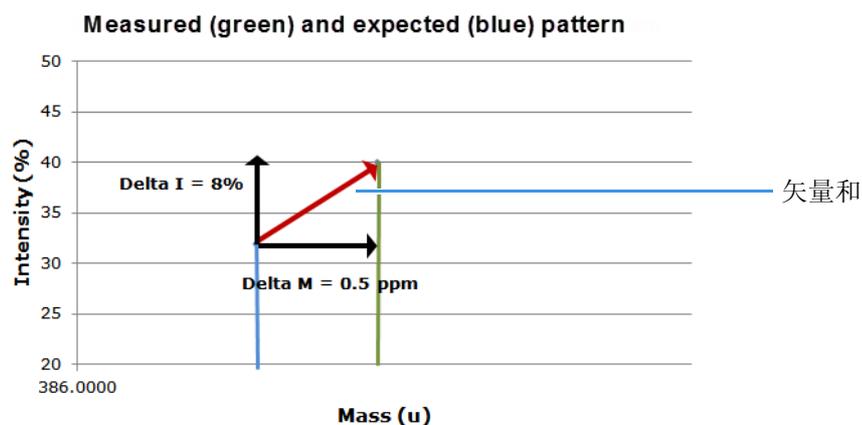


图 164. 强度 (I) 和质量数 (M) 偏差的矢量和



本示例以强度偏差开始。处理方法中设置的 Allowed Intensity Deviation（允许强度偏差）值为 10%，因此该值为归一化值。如第 600 页上的“预期离子的强度偏差数据”中所示，A1 同位素的强度差值接近 10%，最终其归一化强度偏差接近 1.0。

## 归一化强度偏差

以下表格列出了每个预期离子的归一化强度偏差数据。

**表 125.** 预期离子的归一化强度偏差数据

同位素次序	$m/z$ (预期值)	强度差值	允许强度偏差 (%)	归一化强度偏差
A0	215.09611	0	10	$0 \div 10 = 0.0$
A1	216.09945	9.65	10	$9.65 \div 10 = 0.965$
A2	217.09191	68.54	10	$68.54 \div 10 = 6.854$

接下来为质量数偏差。对于质量数偏差，可以在处理方法中控制两个设置：

- 第一个设置为 Allowed Mass Deviation（允许质量数偏差），与 Allowed Intensity Deviation（允许强度偏差）作为强度限制值一样，也是一个限制值。
- 第二个设置为 Use Internal Mass Calibration（使用内标质量数校正）复选框。若在方法中未选中该复选框，应用程序将处于预期  $m/z$  的 2 ppm 范围内的任意质量数值视为完美匹配（无偏差）。若选中该复选框，应用程序仅将处于预期  $m/z$  的 1 ppm 范围内的任意质量数值视为完美匹配。

在本例中，在处理方法中设置的 Allowed Mass Deviation（允许质量数偏差）值为 5 ppm，Use Internal Mass Calibration（使用内标质量数校正）复选框被清除。质量数归一化比强度归一化更复杂，因为与预期  $m/z$  相差的质量数值  $< 2$  ppm（Use Internal Mass Calibration [使用内标质量数校正] 设置）被视为与理论值无偏差；而对于与预期  $m/z$  相差 2 ppm 至 5 ppm 之间的值（Allowed Mass Deviation [允许质量数偏差] 值），归一化偏差为从 0 至 1 不等。

计算出的归一化质量数偏差值如下所示：

- 若 ( $m/z$  差值) 的绝对值  $< 2$  ppm，则为 0  
此处 2 ppm 为 Use Internal Mass Calibration（使用内标质量数校正）设置的值。
- 该归一化偏差值为  $[(m/z \text{ 差值}) \text{ 的绝对值} - 2 \text{ ppm}] \div (5 \text{ ppm} - 2 \text{ ppm})$   
若 ( $m/z$  差值) 的绝对值  $\geq 2$  ppm  
此处 2 ppm 为 Use Internal Mass Calibration（使用内标质量数校正）设置的值，5 ppm 为 Allowed Mass Deviation（允许质量数偏差）值。

在本例中，A0 离子质量数偏差的绝对值小于 2 ppm；因此其归一化质量数偏差为 0。

## 归一化质量数偏差

以下表格列出了每个预期离子的归一化质量数偏差数据。

**表 126.** 每个预期离子的归一化质量数偏差

同位素次序	$m/z$ (预期值)	$m/z$ (测量值)	$m/z$ 差值 (ppm)	内标校正 (ppm)	允许质量数偏差 (ppm)	归一化质量数偏差
A0	215.09611	306.10356	-0.42	2	5	0
A1	216.09945	307.10691	-3.05	2	5	0.35
A2	217.09191	308.11324	24	2	5	7.33

例如：[ (24 - 2) ] ÷ (5 - 2) = 7.33

若要计算组合偏差，应用程序使用 Pythagorean 原理计算归一化偏差的矢量和。矢量和计算如下：

矢量和 = [ (归一化强度偏差)<sup>2</sup> + (归一化质量数偏差)<sup>2</sup> ] 的平方根。

而若矢量和 > 1，则将其设为 1。

### 计算所得矢量和

以下表格列出了每个预期离子的矢量和数据。

**表 127.** 计算所得矢量和

同位素次序	m/z (预期值)	归一化强度偏差	归一化质量数偏差	矢量和
A0	215.09611	0	0	0
A1	216.09945	0.965	0.35	1
A2	217.09191	6.854	7.33	1

若要计算最终得分，必须对矢量和的值进行加权，然后用百分比表示结果。每个离子对最终同位素分布分数的加权贡献值与其强度成正比。

### 加权因子计算

以下表格列出了三个预期离子中每个离子的加权因子。

**表 128.** 加权因子计算

同位素次序	m/z (预期值)	强度 (预期值)	最终分数的加权因子
A0	215.09611	8.55E5	0.8827
A1	216.09945	7.50E4	0.0774
A2	217.09191	3.86E4	0.0399
		总和 = 9.686E5	总和 = 1.000

每个离子的加权因子 = 每个离子的强度 ÷ 所有预期离子的强度总和

例如：8.55E5 ÷ 9.686E5 = 0.8827

若测量质谱图中不包含所有预期离子，则该应用程序对每个丢失离子的加权偏差应用一个罚值（1、2 或 4），进一步降低了最终同位素分布分数。这个罚值取决于测量质谱图中所预期的离子信号的强度。对于未找到的 A2 离子，该应用程序设置其罚值为 1，使其在表 127 中矢量和值 1 被替换为表 129 中的罚值 1。在本例中，其为相同值，对于其他一些例子，罚值可能与矢量和不同。

## 计算所得同位素分布分数

以下表格列出了利用加权因子计算出的同位素分布分数。

表 129. 计算所得同位素分布分数

同位素次序	$m/z$ (预期值)	偏差 (矢量和或罚值)	加权因子	加权偏差
A0	215.09611	0 (矢量和)	0.8827	0
A1	216.09945	1 (矢量和)	0.0774	0.0774
A2	217.09191	1 (罚值)	0.0399	0.0399
				总和 = 0.12

其中

- 单个离子的加权偏差 = 偏差  $\times$  加权因子

例如:  $1 \times 0.0774 = 0.0774$

- 同位素分布分数 =  $100\% \times (1.0 - \text{所有加权偏差值总和})$

在本例中, 计算所得同位素分布分数为  $100\% \times (1.0 - 0.12)$ , 也就是 88%, 与应用程序中显示的分数 90% 接近。

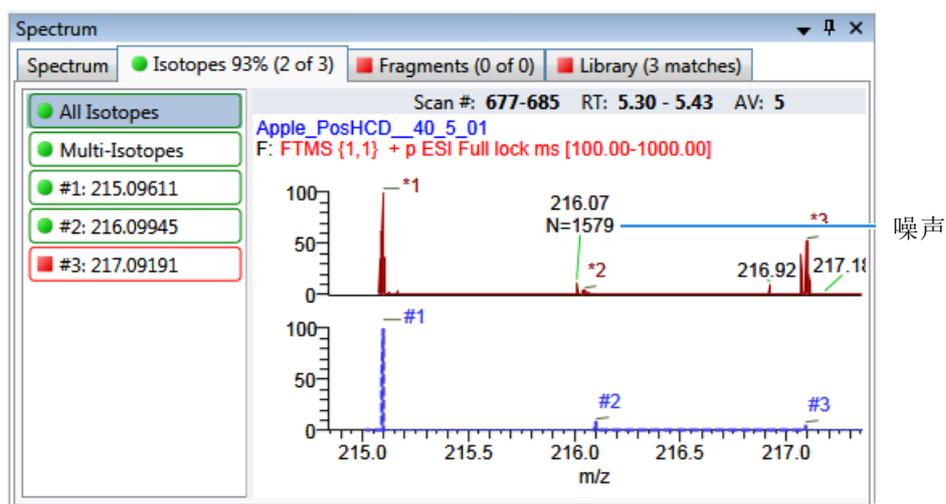
**注释** 使用这些计算以接近显示在应用程序中的分数。因为某些内部计算的详细信息不在此处列出, 或由于小数四舍五入后存在差异, 计算所得分数可能与应用程序中的分数不完全匹配。

在某些情况下, 存在精确匹配的同位素, 因为较重的同位素对质谱图中观察到的同位素分布具有贡献。例如, 由碳的一种重同位素和氮的一种重同位素的贡献分别得到同位素 206.0941 和 206.1006, 共同组成了分裂的 A1 同位素峰。当应用程序执行同位素分布分数计算时, 该情况显示为一个主同位素峰一侧有一个较小的峰, 该峰的  $m/z$  值包含在计算结果中。

## 查找噪声值

### ❖ 若要查找与质谱峰相关的噪声值

1. 在 Spectrum（质谱图）窗格的 Isotopes（同位素）页面上，若要查看叠放在测量质谱图上方的预期质谱图，在质谱图区域右击，然后从快捷菜单中选择 **Display Stack Spectra**（显示堆叠质谱图）。
2. 放大目标峰。  
本例中，在第 597 页上的“同位素分布质谱图（叠图）”中查看化合物 **Metribuzin**（赛克嗪）。
3. 若要在测量质谱图中查看峰的平均噪声值（N），在质谱图绘图区域右击，然后从快捷菜单中选择 **Show Noise Label**（显示噪声标签）。



在本例中，峰的平均噪声值为 1579。



## 使用 Copy Down（向下复制） 和 Fill Down（向下填充）

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（向下填充）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（向下复制）命令输入 Sample Type（样品类型）、Vial Position（样品瓶位置）、Injection Volume（进样体积）、Conv Factor（换算系数）、Level（水平）、Comment（注释）以及其他列。

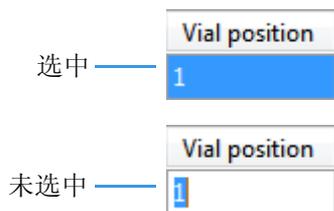
按照以下步骤进行操作：

- 若要自动复制列值
- 若要自动输入连续的列值
- 若要为特定范围的样品使用 Copy Down（向下复制）或 Fill Down（向下填充）

### ❖ 若要自动复制列值

1. 选择一个单元格，将其列值复制至其下方所有单元格。

观察已选中和未选中单元格之间的区别。

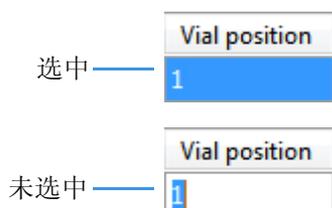


2. 右击并从快捷菜单中选择 **Copy Down（向下复制）**。

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. 输入向下填充序列中第一行的值。  
该行不一定是第一个样品行。可以从序列中的任意行开始向下填充。
2. 选择含有向下填充序列起始值的单元格。  
观察已选中与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 (向下填充)**。  
该应用程序以选定行中的值为起始值，向下连续输入列值，直到列中的最后一行为止。  
可以重复使用 Fill Down (向下填充) 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

如果对已配置自动进样器的 Vial Position (样品瓶位置) 列使用 Fill Down (向下填充) 命令，TraceFinder 应用程序会知道自动进样器配置的样品瓶位置的编号，并对所有样品瓶位置进行相应编号。

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

## ❖ 若要为特定范围的样品使用 Copy Down (向下复制) 或 Fill Down (向下填充)

1. 若要选择特定范围的样品值，执行以下其中一种操作：

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. 右击并从快捷菜单中选择相应的命令。

就以首行中的值为起始列值，复制列值或按序填充，一直到最后一个选中行。

Filename	Sample ID	Sample name
Sample1		
Sample101		
Sample102		
Sample103		
Sample104		
Sample105		
Sample106		
Sample107		
Sample108		
Sample109		
Sample110		
Sample111		
Sample112		
Sample113		

Filename	Sample ID	Sample name
Sample1	Sample1	
Sample2	Sample2	
Sample3	Sample3	
Sample4	Sample4	
Sample104		
Sample105		
Sample106		
Sample107		
Sample108		
Sample109		
Sample110		
Sample111		
Sample112		
Sample113		



## 索引

## 符号与字母

.cdb, 已定义 2

.csv, 已定义 2

.meth, 已定义 2

.pmd, 已定义 2

.raw, 已定义 2

.xml, 已定义 2

# Background Scans (背景扫描数) 参数

Detect (检测) 页面 144

Genesis 峰检测 49

% Test (测试百分比) 参数 171

%CV (变异系数百分比) 参数 463

%Diff (偏差百分比) 参数 462

%RSD (相对标准偏差百分比) 参数 463

## A

Acquire a New Raw Data File (采集新的原始数据文件)  
参数 90

Acquisition (采集) 命令 30

Active View (活动视图) 页面 526

Active (激活) 参数

Data Review (数据查看) 样品列表 462

Identification (识别) 页面 116

Actual RT (实际保留时间) 参数 461

Add Compound from Compound Database (从化合物数据库中添加化合物) 命令 113

Add Compound (添加化合物) 命令 261

Add Group (添加组) 命令 189

Add Sample (添加样品) 命令

Acquisition (采集) 模式 323

Batch View (批次视图) 样品列表 373

Batch Wizard (批次向导) 410

Add This Mass as New Confirming Ion (添加该质量数为新确认离子) 命令 159

Add This Mass to Existing Quan Mass Ranges (将质量数添加到已有定量质量数范围) 命令 159

Adduct 1-*n* (加合物 1-*n*) 参数 207

Adduct (加合物) 参数, Compound Database (化合物数据库), 目标峰 273

Allowed Intensity Deviation (允许强度偏差) 参数 230

Allowed Mass Deviation (允许质量数偏差) 参数 230

Amount (量) 参数 166

Amplifier (放大器) 参数 228

Analysis (分析) 命令 30

Application Configuration (配置) 命令 33

Area Noise Factor (峰面积噪声因子) 参数

Detect (检测) 页面 146

ICIS 峰检测 50

Area Scan Window (峰面积扫描窗口) 参数

Detect (检测) 页面 147

ICIS 峰检测 51

Area Tail Extension (峰面积尾扩展) 参数

Detect (检测) 页面 147

ICIS 峰检测 51

Area Threshold (峰面积阈值), 事件类型 54

Area (峰面积) 参数 461

Assay Type (实验类型) 参数

Batch Wizard (批次向导) 404

Method View (方法视图) 110, 213

Associate a Raw Data File (关联原始数据文件) 对话框 93

Available Methods (可用方法) 参数 404

Available Templates (可用模板) 参数 404

Avalon Event List (Avalon 事件列表) 对话框 53

Avalon 检测算法 44

Auto TSRM Update (自动更新 TSRM) 参数 336

Autocalc Initial Events (自动计算初始事件) 参数, Avalon 148

Automatically Create the Master Method (自动创建主方法) 参数 89

安装 NIST 和 QED 库 13

## B

Background Subtraction Range Option (背景扣除范围选项) 参数 110

Barcode Actual (实际条形码) 参数 326, 372

Barcode Expected (预期条形码) 参数 372

Baseline Window (基线窗口) 参数

Detect (检测) 页面 146

ICIS 峰检测 50

Batch Level (批次水平) 参数  
 报告配置 37  
 方法开发 196

Batch Selection (批次选择) 视图 306

Batch View (批次视图) 359

Best Match Method (最佳匹配方法) 参数 242

Browse In Raw File (浏览原始文件) 命令 373

Bunch Factor (分组因子), 事件类型 54

报告  
 Acquisition (采集) 模式 327  
 Analysis (分析) 模式 514  
 标记定义 554  
 查看 PDF 的横向图 555  
 列出 5  
 样品 PDF 555

报告格式, 指定 194

背景扣除选项 107

标准报告, 已列出 5

步骤  
 Acquisition (采集) 模式  
 保存待运行批次 332  
 查看导出文件 335  
 创建批次模板 312–313  
 从队列批次中移除待定样品 350  
 从队列移除单个批次 348  
 从队列中移除待定批次 351  
 从样品列表中移除样品 318  
 更新 TSRM 数据 330  
 将报告导出至指定文件夹 328  
 将样品导入至样品列表 316  
 将样品添加至列表中 314  
 进入实时显示 339  
 开始采集 332  
 为样品指定特定通道 319  
 选择参考样品 320  
 选择一个待采集的批次 310  
 选择以前已采集的批次 311  
 移除队列中的所有待定批次 348  
 移除队列中的所有批次 348  
 预览标准报告 327  
 运行新批次 306, 308  
 在样品列表中插入样品 315  
 暂停队列中的所有批次 347  
 指定启动或关闭方法 330  
 指定设备状态 331  
 指定校正批次 331  
 重新进样来自 318

Analysis (分析) 模式  
 打开 Batch View (批次视图) 359  
 滚动样品列表 361  
 进入 Analysis (分析) 模式 356

采集模式  
 从队列移除批次 350

## C

cal1-cal $n$  (校正水平 1-校正水平  $n$ ) 参数 169

Calculate Concentration As (浓度计算为) 参数 201

Calculated Amt (计算量) 参数 461

Calculation Based On (计算基于) 参数 206

Calculation Type (计算类型) 参数 372

Calibration Curve Type (校正曲线类型) 命令 478

Calibration Levels (校正水平) 页面, Method View (方法视图) 168

Calibration Method (校正方法) 参数 242

Calibration (校正) 参数 336

Calibration (校正) 页面  
 Compounds (化合物) 页面 164  
 QAQC (质保质控) 页面 180

Calibrator (校正标样) 样品类型, 已定义 354

Carryover Limit (残留限) 参数 179

CAS No (CAS 登记号) 参数, Identification (识别) 页面 116

CAS (化学文摘社) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271

Category (类别) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271

Channel (通道) 参数  
 Batch View (批次视图) 372  
 Data Review (数据查看) 463

Charge State (电荷态) 参数, Compound Database (化合物数据库)  
 目标峰 273

Chromatogram View Width (色谱图视图宽度) 参数 228

Collision Energy (碰撞能量) 参数, Compound Database (化合物数据库)  
 目标峰 274  
 确认峰 275

Comment (注释) 参数  
 Batch View (批次视图) 372  
 Data Review (数据查看) 463

Company Logos (公司徽标) 参数 206

Company Name (公司名称) 参数 205

Compound Type (化合物类型) 参数  
 Calibration (校正) 166  
 Identification (识别) 页面 116

Compound (化合物) 参数  
 Calibration (校正) 页面 180  
 Compound Database (化合物数据库) 271  
 QC Levels (质控水平) 页面 171

Compounds (化合物) 页面, Method View (方法视图) 112

Confirming Ion List (确认离子列表) 命令 473

Confirming  $n$  Ion Ratio Flag (确认峰  $n$  离子比率标记) 参数 529

Confirming  $n$  Ion Ratio (确认峰  $n$  离子比率) 参数 529

Confirming  $n$  Manual Flag (确认峰  $n$  手动标记) 参数 529

- Confirming *n* Mass (确认峰 *n* 质量数) 参数 529
- Confirming *n* Range (确认峰 *n* 范围) 参数 529
- Confirming *n* Response (确认峰 *n* 响应) 参数 529
- Constrain Peak Width (限定峰宽) 参数
- Genesis
    - Detect (检测) 页面 143
    - 峰检测 48
  - ICIS
    - Detect (检测) 页面 146
    - ICIS 峰检测 50
- Conversion Factor (换算系数) 参数 372
- Copy Down (向下复制) 命令 607
- Copy With Headers (带标题复制) 命令
- Acquisition (采集) 模式 324
  - Batch View (批次视图) 样品列表 326, 374
- Create Blank Quantitation Method (创建空白定量方法) 参数 93
- Create New (创建新文件) 命令 414
- Create PDF (创建 PDF) 参数
- Batch Template Editor (批次模板编辑器) 549
  - Method (方法) 视图 195, 216
- Create XLSM (创建 XLSM) 参数
- Batch Template Editor (批次模板编辑器) 549
  - Method View (方法视图) 196
- Create XML (创建 XML) 参数
- Batch Template Editor (批次模板编辑器) 549
  - Method View (方法视图) 195, 216
- CV Test (%) (变异系数测试, %) 参数
- Calibration (校正) 页面 180
  - Chk Std (质控标样) 页面 181
  - ISTD (内标化合物) 页面 183
- Curve Type (曲线类型) 参数
- Calibration (校正) 页面 166
  - Method Template Editor (方法模板编辑器) 242
- Cutoff (截止值) 参数 179
- 参考质谱图 458
- 参数
- # Background Scans (背景扫描数)
    - Detect (检测) 页面 144
    - Genesis 峰检测 49
  - % Test (测试百分比) 171
  - %CV (变异系数百分比) 463
  - %Diff (偏差百分比) 462
  - %RSD (相对标准偏差百分比) 463
  - Acquire a New Raw Data File (采集新的原始数据文件) 90
  - Active (激活)
    - Data Review (数据查看) 样品列表 462
    - Identification (识别) 页面 116
  - Actual RT (实际保留时间) 461
  - Adduct 1-*n* (加合物 1-*n*) 207
  - Adduct (加合物), Compound Database (化合物数据库), 目标峰 273
  - Allowed Intensity Deviation (允许强度偏差) 230
  - Allowed Mass Deviation (允许质量数偏差) 230
  - Amount (量) 166
  - Amplifier (放大器) 228
  - Area Noise Factor (峰面积噪声因子)
    - Detect (检测) 页面 146
    - ICIS 峰检测 50
  - Area Scan Window (峰面积扫描窗口)
    - Detect (检测) 页面 147
    - ICIS 峰检测 51
  - Area Tail Extension (峰面积尾扩展)
    - Detect (检测) 页面 147
    - ICIS 峰检测 51
  - Area (峰面积) 461
  - Assay Type (实验类型)
    - Batch Wizard (批次向导) 404
    - Method View (方法视图) 110, 213
  - Available Methods (可用方法) 404
  - Available Templates (可用模板) 404
  - Auto TSRM Update (自动更新 TSRM) 336
  - Autocalc Initial Events (自动计算初始事件), Avalon 148
  - Automatically Create the Master Method (自动创建主方法) 89
  - Background Subtraction Range Option (背景扣除范围选项) 110
  - Barcode Actual (实际条形码) 326, 372
  - Barcode Expected (预期条形码) 372
  - Baseline Window (基线窗口)
    - Detect (检测) 页面 146
    - ICIS 峰检测 50
  - Batch Level (批次水平)
    - 报告配置 37
    - 方法开发 196
  - Best Match Method (最佳匹配方法) 242
  - cal1-cal*n* (校正水平 1- 校正水平 *n*) 169
  - Calculate Concentration As (浓度计算为) 201
  - Calculated Amt (计算量) 461
  - Calculation Based On (计算基于) 206
  - Calculation Type (计算类型) 372
  - Calibration Method (校正方法) 242
  - Calibration (校正) 336
  - Carryover Limit (残留限) 179
  - CAS No (CAS 登记号), Identification (识别) 页面 116
  - CAS (化学文摘社), Compound Database (化合物数据库) 271
  - Category (类别), Compound Database (化合物数据库) 271
  - Channel (通道)
    - Batch View (批次视图) 372
    - Data Review (数据查看) 463
  - Charge State (电荷态), Compound Database (化合物数据库)
    - 目标峰 273
  - Chromatogram View Width (色谱图视图宽度) 228
  - Collision Energy (碰撞能量), Compound Database (化合物数据库)
    - 目标峰 274
    - 确认峰 275

- Comment (注释)
  - Batch View (批次视图) 372
  - Data Review (数据查看) 463
- Company Logo (公司徽标) 206
- Company Name (公司名称) 205
- Compound Type (化合物类型)
  - Calibration (校正) 166
  - Identification (识别) 页面 116
- Compound (化合物)
  - Calibration (校正) 页面 180
  - Compound Database (化合物数据库) 271
  - QC Levels (质控水平) 页面 171
- Confirming *n* Ion Ratio Flag (确认峰 *n* 离子比率标记) 529
- Confirming *n* Ion Ratio (确认峰 *n* 离子比率) 529
- Confirming *n* Manual Flag (确认峰 *n* 手动标记) 529
- Confirming *n* Mass (确认峰 *n* 质量数) 529
- Confirming *n* Range (确认峰 *n* 范围) 529
- Confirming *n* Response (确认峰 *n* 响应) 529
- Constrain Peak Width (限定峰宽)
  - Genesis
    - Detect (检测) 页面 143
    - 峰检测 48
  - ICIS
    - Detect (检测) 页面 146
    - ICIS 峰检测 50
- Conversion Factor (换算系数) 372
- Create Blank Quantitation Method (创建空白定量方法) 93
- Create PDF (创建 PDF)
  - Batch Template Editor (批次模板编辑器) 549
  - Method (方法) 视图 195, 216
- Create XLSM (创建 XLSM)
  - Batch Template Editor (批次模板编辑器) 549
  - Method View (方法视图) 196
- Create XML (创建 XML)
  - Batch Template Editor (批次模板编辑器) 549
  - Method View (方法视图) 195, 216
- CV Test (%) (变异系数测试, %)
  - Calibration (校正) 页面 180
  - Chk Std (质控标样) 页面 181
  - ISTD (内标化合物) 页面 183
- Curve Type (曲线类型)
  - Calibration (校正) 页面 166
  - Method Template Editor (方法模板编辑器) 242
- Cutoff (截止值) 179
- Decimal Places to Be Reported (需报告的小数位) 200
- Detection Algorithm (检测算法)
  - Avalon 52
  - Genesis 47
  - ICIS 50
- Detection Method (检测方法)
  - Avalon
    - Detect (检测) 页面 148
    - 峰检测 52
- Genesis
  - Detect (检测) 页面 142
  - 峰检测 47
- ICIS
  - Detect (检测) 页面 146
  - 峰检测 50
- Detection Type (检测器类型), Times (时间) 页面 131
- Detector (检测器) 140
- Device Name (设备名称)
  - Acquisition (采集) 模式 334
  - Batch View (批次视图) 393
- Dilution Factor (稀释因子) 372
- Display Compounds Above Set Limit (显示超出设置限制的化合物) 200
- Display Quan Flags and Legend (显示定量标记和说明) 200
- Enable Peak Threshold (启用峰阈值) 242
- Enable Tune Time Tracking (启用调谐时间跟踪) 201
- Enable Valley Detection (启用峰谷检测)
  - 方法开发 143
  - Genesis 峰检测 48
- Enable (启用), Ratios (比率) 页面 163
- End RT (结束保留时间), Time (时间) 页面 131
- Energy Ramp (能量递变), Compound Database (化合物数据库) 274
- Estimation Method (评估方法) 167
- Event (事件) 53
- Exact Mass Window (准确质量数窗口) 206
- Example (示例), Reports (报告) 页面 195
- Exclude Matching Quan Peaks (排除匹配定量峰) 243
- Excluded (排除) 462
- Exclusion Window (排除窗口) 243
- Expected RT (预期保留时间) 461
- Expected RT (预期保留时间), Times (时间) 页面 131
- Expected Width (预期宽度)
  - 方法开发 143
  - Genesis 峰检测 48
- Experiment (实验), Compound Database (化合物数据库) 271
- Extracted Mass (提取质量数), Compound Database (化合物数据库)
  - Fragments (碎片) 276
  - 目标峰 273
  - 确认峰 275
- Filename (文件名), Batch View (批次视图) 326, 371
- Filter (过滤器) 139
- Filter (过滤器), Detection (检测) 140
- Final Units (最终单位)
  - Batch View (批次视图) 372
  - Data Review (数据查看) 463
- Fit Threshold (匹配阈值) 229

- Flag Values Above Carryover (标记高于残留限的值) 201
- Flag Values Above LOR (标记高于报告限的值) 200
- Flag Values Above ULOL (标记高于线性上限的值) 201
- Flag Values Below LOD (标记低于检测限的值) 200
- Flag Values Below LOQ (标记低于定量限的值) 200
- Flag Values Between LOD and LOQ (标记介于检测限和定量限之间的值) 201
- Flags (标记)
  - Compound Results (化合物结果) 窗格 420
  - Compounds (化合物) 窗格 429
  - Sample Results (样品结果) 窗格 431
  - Samples (样品) 窗格 418, 448
- Formula (分子式), Compound Database (化合物数据库) 271
- Fragment Ions (碎片离子) 229
- Generate Only (仅生成) 527
- Height (峰高) 461
- Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 228
- Include Compound Peak Spectrum as Reference Spectrum (包括化合物峰质谱图作为参考质谱图) 242
- Include Confirming Ions (包括确认离子) 242
- Include Data Dependent Filters (包含数据依赖过滤器) 111
- Injection Amount (进样量) 90
- Injection Concentration (进样浓度) 529
- Injection Units (进样单位) 529
- Injection Volume (进样体积)
  - Batch View (批次视图) 371
  - 方法开发 110, 213
- Instrument Method (仪器方法)
  - Batch View (批次视图) 372
  - General (常规) 页面 110, 213
  - Method Forge (方法向导) 90
- Integration Mode (积分模式) 462
- Intensity Threshold (强度阈值) 229
- Ion Coelution (离子共洗脱)
  - 常见峰检测 46
  - Ratios (比率) 页面 163
- Ion Range Calc Method (离子范围计算方法) 110
- Ion Ratio Window (离子比率窗口) 206
- Ionization (离子化), Compound Database (化合物数据库) 271
- Isotopic Pattern (同位素分布) 229
- ISTD Amt (内标量) 462
- ISTD Matching (内标匹配) 243
- ISTD Resp (内标响应) 462
- ISTD (内标化合物) 166
- Lab Name (实验室名称) 110, 213
- Laboratory Name (实验室名称) 205
- Lens (透镜), Compound Database (化合物数据库), 目标峰 274
- Level (水平)
  - Batch View (批次视图) 371
  - QC Levels (质控水平) 页面 171
- Library Search Type (库检索类型) 214
- Library Search (库检索) 230
- Limit Library Hits (限制谱库匹配数) 242
- Limit the Retention Time Range (限制保留时间范围) 242
- Linked Compound (关联化合物) 167
- LOD (检测限) 179
- Login (登录) 11
- LOQ (定量限) 179
- m/z* (Apex) (质荷比, 峰尖) 462, 499
- m/z* (Delta) (质荷比, 差值) 462, 499
- m/z* (Expected) (质荷比, 预期) 461, 499
- m/z* Window (质荷比窗口) 206
- Manual Flags (手动标记) 528
- Manual Injection (手动进样) 90
- Mass Precision (质量数精度) 110, 213
- Mass Tolerance (质量数容许偏差) 111, 214
- Mass (质量数), Compound Database (化合物数据库)
  - 目标峰 272
  - 确认峰 275
- Max Amt Diff (%) (最大偏差) 180
- Max Conc (最大浓度) 182
- Max Recovery (%) (最大回收率, %), ISTD (内标化合物) 页面 183
- Max RF Diff (%) (响应因子的最大偏差, %) 181
- Max RSD (%) (最大相对标准偏差)
  - Calibration (校正) 页面 180
- Max RT (+min) (最大保留时间, + 分钟), ISTD (内标化合物) 页面 183
- Measurement Unit (测量单位) 206
- Method (方法)
  - Matrix Blank (基质空白) 页面 182
  - Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184
- Min Peak Height (S/N) (最小峰高, 信噪比)
  - Genesis 143
  - ICIS 146
- Min Peak Width (最小峰宽)
  - Detect (检测) 页面 146
  - ICIS 峰检测 51
- Min RF (最小响应因子) 181
- Min RT (-min) (最小保留时间, - 分钟) 183
- Min. # of Fragments (最少碎片数) 229
- Modify Calibrations or Active Compounds by Group (通过组修改校正或活动化合物) 412
- MS Order (质谱级数), Compound Database (化合物数据库)
  - 目标峰 273
  - 确认峰 276
- MS2 Search Library (MS2 检索库) 206
- MS3 Search Library (MS3 检索库) 206
- Multiplet Resolution (多重分辨率)
  - Detect (检测) 页面 147
- Multiplet Resolution (多重分离度)
  - ICIS 峰检测 51
- Multiplexing Channels (多通道) 323
- Name the Master Method (命名主方法) 89

- Neutral Mass (中性质量数), Compound Database (化合物数据库) 271
- No Specified Retention Time (无指定保留时间) 207
- Noise Method (噪声方法)  
Detect (检测) 页面 146  
ICIS 峰检测 51
- Number Of Confirming Ions (确认离子数) 242
- Number of Scans to Subtract (扣除扫描数) 110
- Only Select Top Peaks (仅选择最高峰) 242
- Origin (原点)  
Calibration (校正) 166  
Method Template Editor (方法模板编辑器) 243
- Password, 登录界面 11
- Path (路径) 90
- Peak Height (%) (峰高, %)  
Genesis  
Detect (检测) 页面 143  
峰检测 48  
ICIS  
方法开发 146  
峰检测 50
- Peak Noise Factor (峰噪声因子)  
方法开发 146  
ICIS 峰检测 50
- Peak S/N Cutoff (峰信噪比截止值)  
Detect (检测) 页面 143  
Genesis 峰检测 48
- Percentage (百分比) 182
- Polarity (极性), Compound Database (化合物数据库) 273
- Post-run System State (运行后系统状态) 334, 393
- Precursor Mass (母离子质量数), Compound Database (化合物数据库) 272
- Precursor (母离子), Compound Database (化合物数据库) 275
- Priority Sequence (优先序列) 334, 393
- Processing Configuration File (处理配置文件) 205
- Product Mass (子离子质量数), Compound Database (化合物数据库)  
目标峰 272  
确认峰 275
- Product Mass (子离子质量数), 确认峰 275
- QAQC Flags (质保质控标记) 528
- QC1-QC<sub>n</sub> (质控 1- 质控 n) 171
- QIon (定量离子) 529
- Qualitative Peak Processing Template (定性峰处理模板) 110
- Quan Flags (定量标记) 528
- Quan Mass (定量质量数) 529
- Quan Peak *m/z* (定量峰质荷比) 528
- Quan Peak Response (定量峰响应) 528
- Quan Peak RT (定量峰保留时间) 529
- Quick Mode (快速模式) 404
- R<sup>2</sup> Threshold (相关系数阈值) 180
- Ranges (范围), 化合物检测 140
- Raw Filename (原始文件名) 90
- Reference Compound (参考化合物), Identification (识别) 页面 116
- Report All Compounds Listed in Configuration File (报告配置文件中列出的所有化合物) 207
- Report Concentration (报告浓度) 200
- Report Name (报告名称) 195, 216
- Report Noise As (将噪声报告为)  
Detect (检测) 页面 144  
Genesis 峰检测 49
- Report Semi-Quantitative Result (报告半定量结果) 206
- Report Title (报告名称) 195, 216
- Report Type (报告类型) 195, 216
- Response Ratio (响应比率) 462
- Response Threshold (响应阈值), Compound Database (化合物数据库) 271
- Response Via (响应方式)  
Calibration (校正) 166  
Method Template Editor (方法模板编辑器) 243
- Response (响应) 529
- Retention Time (保留时间) 529
- RMS (均方根)  
Detect (检测) 页面 147  
ICIS 峰检测 51
- RT Window (保留时间窗口) 206
- RT (保留时间)  
Calibration Levels (校正水平) 169  
Calibration (校正) 166  
Calibration (校正) 页面 180  
Chk Std (质控标样) 页面 181  
Compound Database (化合物数据库) 274  
Hydrolysis (水解) 页面 187  
Identification (识别) 页面 116  
ISTD (内标化合物) 页面 183  
Limits (限制) 页面 179  
Matrix Blank (基质空白) 页面 182  
QC Levels (质控水平) 页面 171  
Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184
- S/N Threshold (信噪比阈值) 228  
方法开发 143  
Genesis 峰检测 47
- Sample Amt (样品量) 461
- Sample Comment (样品注释) 90
- Sample Concentration (样品浓度) 529
- Sample File (样品文件) 527
- Sample ID (样品识别号), Batch View (批次视图) 326, 371
- Sample Name (样品名称)  
Batch View (批次视图) 326, 371  
Data Review (数据查看) 431
- Sample Type (样品类型)  
Batch View (批次视图) 371  
Data Review (数据查看) 418, 431, 449
- Sample Weight (样品质量) 372
- Sample Units (样品单位) 529
- Sample Volume (样品体积) 372
- Score Threshold (分数阈值) 230

- Screening Method (筛选方法) 205
- Select a Report (选择报告) 527
- Sensitivity (灵敏度)
- Avalon 148
  - Genesis 142
  - ICIS 146
  - Method Template Editor (方法模板编辑器) 242
- Separate Ion Overlay Display (分离离子重叠显示) 200
- 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) 163
- Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Method (对方法中所有确认峰应用离子比率) 163
- Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound (对化合物所有峰应用峰窗口设置) 132
- Set Peak Windows Settings to All Peaks in Method (对方法中所有峰应用峰窗口设置) 132
- Shade Row When Sample is Outside of Evaluation Criteria (样品超评估标准时对该行加阴影) 200
- Show All Compounds (显示所有化合物) 214
- Show Chromatogram on Quantitation Report (定量报告显示色谱图) 200
- Show Quan Peaks Only (仅显示定量峰) 175
- Showing (显示), Active View (活动视图) 527
- Smoothing (平滑)
- Avalon
    - Detect (检测) 页面 148
    - 峰检测 52
  - Genesis
    - Detect (检测) 页面 143
    - 峰检测 47
  - ICIS
    - Detect (检测) 页面 146
    - 峰检测 50
- Specify Default Ion Ratio Ranges (指定默认离子比率范围) 242
- Standard Type (标样类型) 166
- Start Device (启动设备) 334, 393
- Start RT (起始保留时间), Times (时间) 页面 131
- Start When Ready (准备就绪时启动) 334, 393
- Starting Vial Number (起始样品瓶编号) 404
- Status (状态)
- Active View (活动视图) 528
  - Batch View (批次视图) 326, 371
- Stepoff Value (放弃值) 110
- System Shutdown Method (系统关闭方法) 336
- System Startup Method (系统启动方法) 336
- System Status (系统状态) 336
- Tailing Factor (拖尾因子)
- Genesis
    - 方法开发 143
    - 峰检测 48
  - ICIS
    - 方法开发 146
    - 峰检测 50
- Target Ratio (目标比率) 163
- Template Layout (模板布局) 404
- Theoretical Amount (理论量) 529
- Theoretical Amt (理论量) 461
- Threshold Override (优先阈值) 228
- Threshold/Lower Limit (阈值/下限) 187
- Time Range Peak (时间范围峰), Compound Database (化合物数据库) 274
- Time (时间) 53
- Time/Event/Value (时间/事件/值), Avalon 峰检测 52
- Total Batch Rows (总批次行) 404
- Total Response (总响应) 528
- Total Rows (总行数) 527
- Trace (谱图), Detection (检测) 140
- Tune File Lifetime (调谐文件使用寿命) 201
- Valley Rise (%) (峰谷上升, %)
- Detect (检测) 页面 144
  - Genesis 峰检测 48
- Valley S/N (峰谷信噪比)
- 方法开发 144
  - Genesis 峰检测 48
- Value (值) 53
- Weighting (加权)
- Calibration (校正) 166
  - Method Template Editor (方法模板编辑器) 243
- Vial Position (样品瓶位置)
- Batch View (批次视图) 326, 371
  - Method Forge (方法向导) 90
- View Only (仅查看) 527
- View Width (视图宽度)
- 峰检测 46
  - Times (时间) 页面 132
- Window Override (优先窗口) 229
- Window Type (窗口类型)
- 峰检测 46
  - Ratios (比率) 页面 163
- Window (窗口)
- Compound Database (化合物数据库), 目标峰 274
  - 离子比率 46
  - Ratios (比率) 页面 163
  - retention time (保留时间) 46
  - Times (时间) 页面 131
- ULOL (线性上限) 179
- Units (单位) 166
- Upper Limit (上限)
- Hydrolysis (水解) 页面 187
  - Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184
- Use Alternate Calibration Report Format (使用备用校正报告格式) 200
- Use an Existing Raw Data File (使用现有的原始数据文件) 89
- Use as RT Reference (用作保留时间参考), Identification (识别) 页面 116
- Use Average Scan (使用平均扫描) 206
- Use Autosampler (采用自动进样器) 90
- Use Data Dependent Scans (使用数据依赖扫描) 243

- Use Full MS Scan to Confirm (使用质谱全扫描进行确认) 206
- Use Genesis Algorithm for Qual Processing (采用 Genesis 算法进行定性处理) 243
- Use Internal Mass Calibration (使用内标质量数校正) 230
- Use Matrix Blank (使用基质空白) 228
- Use Method Forge (使用方法向导) 81, 85, 91
- Use Reverse Library Searching Only (仅使用逆向库检索) 230
- Use RT Limits (使用保留时间限值) 228
- Use Scan at Peak Apex (使用峰顶处扫描) 206
- Use Source CID Scans (使用源 CID 扫描) 228
- Use These Libraries (使用这些库) 242
- XIC (提取离子色谱图) 139
- 程序
  - Analysis (分析) 模式
    - 编辑批次 - 水平输出格式 375
    - 编辑批次中的样品 389
    - 编辑样品 - 水平输出格式 375
    - 创建新的批次 379
    - 从定性峰窗格中移除一个峰 456
    - 从峰列表中移除一个峰 451
    - 从样品列表中移除样品 381
    - 打开 Data Review (数据查看) 视图 415, 485
    - 打开 Local Method (本地方法) 视图 540
    - 打开 Report View (报告视图) 514
    - 打开已保存的批次 388
    - 打开最近的批次 389
    - 打印报告 523
    - 导出报告 524
    - 放大报告文本 525
    - 放大峰
      - 定量峰 468
      - 定性峰 456
      - 色谱图导航 454
      - 质谱图窗格 458
    - 更改所选峰的库条目 459
    - 更改已检测峰的显示信息
      - 定量峰
        - Data Review (数据查看) 471
        - 方法开发 118
        - 定性峰 457
    - 将样品添加到列表中 380
    - 排除校正点 466
    - 启用或停用化合物 465
    - 手动积分定量峰 470
    - 手动积分确认离子峰 475
    - 手动排除校正点 477
    - 手动添加峰
      - 定量峰 470
      - 定性峰窗格 456
      - 色谱图窗格 454
    - 搜索文本 525
    - 提交批次中的所有样品 390
    - 显示特定化合物的峰, 定性视图 450
    - 修改峰窗格显示 468
    - 修改峰检测设置 471
    - 选择报告
      - 查看报告 515
      - 生成报告 519
    - 选择化合物 517
    - 选择样品
      - 查看报告 517
      - 生成报告 521
    - 移除手动创建的峰 470
    - 在方法积分和手动积分模式之间切换
      - 定量模式 471
      - 定性模式 457
    - 在样品列表中插入样品 380
    - 在样品列表中复制一个样品 381
    - 重新进样 381
    - 重新进样先前采集批次中的样品 390
    - 自定义列显示, Batch View (批次视图) 383
  - Configuration (配置) 控制台
    - 打开 Defaults (默认值) 视图 42
    - 导入化合物 253
    - 将定量峰添加至化合物 263
    - 移除化合物 262
    - 指定常用检测参数 44
    - 指定默认实验室名称和仪器名称 42
    - 指定默认质量数精度和强度范围 43
  - Method Development (方法开发) 模式 168
    - 保存方法模板 240
    - 保存新方法 128
    - 采集批次 296
    - 采集选定的样品 296
    - 创建新多通道仪器方法 288
    - 创建一个空白方法 93
    - 创建一个目标筛选方法 99
    - 创建一个新的仪器方法 286
    - 创建组 188
    - 从化合物数据库中选择化合物 97
    - 从样品列表中移除所选样品 295
    - 打开 Compound Database (化合物数据库) 编辑器 248
    - 打开 Development Batch (开发批次) 视图 291
    - 打开 Instrument View (仪器视图) 285
    - 打开 Qual Browser (定性浏览器) 297
    - 打开化合物数据库 249
    - 打开已保存的主方法 102, 208
    - 打开仪器方法 289
    - 导入 Xcalibur 方法 91
    - 导入仪器方法 290
    - 导入主方法 244
    - 调整列的大小或重新组织列 294
    - 放大色谱图或质谱图显示 158
    - 访问 Method Development (方法开发) 模式 75
    - 复制样品 293
    - 跟踪调谐文件的使用 198
    - 更改定量峰所用的定量质量数 154
    - 更改化合物参考质谱图 122
    - 更新确认离子比率 154
    - 过滤显示的化合物 115, 118

计算和报告半定量结果 203  
 将定量峰添加到现有的化合物 157  
 将化合物添加至数据库中 261  
 将离子信号叠加得到累积信号 156  
 将确认离子峰设置为额外的定量峰 126  
 将确认离子添加到现有化合物中 158  
 将样品插入到开发批次中 293  
 将样品添加到开发批次中 292  
 将质量数列表数据导出至 XML 文件 245  
 将质量数添加到已有定量质量数范围中 123  
 利用确认离子峰替换定量峰 126  
 设置自动背景扣除选项 107  
 手动选择化合物以创建新方法 85  
 输入列值 294  
 替换定量质量数 123  
 替换确认离子峰 128  
 添加定量峰 124  
 添加化合物到方法 119  
 添加质量数为新化合物 125  
 添加质量数为新确认离子峰 128  
 为方法输入注释 108, 240  
 为开发批次数据指定位置 292  
 校正化合物 238  
 以新名称另存数据库 249–250  
 识别峰 237  
 指定 Exactive 参数 204  
 指定 QC 水平和浓度 170  
 指定百分比形式的最大浓度 182  
 指定标准报告类型和输出格式 195, 215  
 指定定量标记选项 197  
 指定定量限 196  
 指定定性峰处理 239  
 指定峰标准 236  
 指定化合物的内标物 164–165  
 指定离子比率标准 162  
 指定离子比率计算方法 204  
 指定默认参数 202  
 指定色谱图参考样品 400–401  
 指定用户界面选项 197  
 指定用于检测和积分的离子范围 133  
 指定用于主方法的常规信息 105  
 指定质量数容许偏差 108  
 指定准确质量数窗口 204  
 自动选择化合物创建新方法 81  
 使用入门  
 安装 NIST 库 13  
 安装 QED 库 13  
 登录 TraceFinder 应用程序 9  
 监测仪器状态 31  
 启动 TraceFinder 应用程序 9  
 显示仪器错误日志 31  
 选择模式 30

## D

Data Review (数据查看) 视图 415, 485

Decimal Places to be Reported (需报告的小数位) 参数 200  
 Delete Compound from Method (从方法中删除化合物) 命令 187  
 Detection Algorithm (检测算法) 参数  
   Avalon 52  
   Genesis 47  
   ICIS 50  
 Detection Method (检测方法) 参数  
   Avalon  
     Detect (检测) 页面 148  
     峰检测 52  
   Genesis  
     Detect (检测) 页面 142  
     峰检测 47  
   ICIS  
     Detect (检测) 页面 146  
     峰检测 50  
 Detection Type (检测器类型) 参数, Times (时间) 页面 131  
 Detection (检测) 页面, Method View (方法视图) 117  
 Detector (检测器) 参数, Signal (信号) 页面 140  
 Development Batch (开发批次) 视图 291  
 Device Name (设备名称) 参数  
   Acquisition (采集) 模式 334  
   Batch View (批次视图) 393  
 Dilution Factor (稀释因子) 参数 372  
 Disable Cluster Off (禁用峰组关闭), 事件类型 55  
 Disable Cluster On (禁用峰组打开), 事件类型 55  
 Display Compounds Above Set Limit (显示超出设置限的化合物) 参数 200  
 Display Quan Flags and Legend (显示定量标记和说明) 参数 200  
 Display Retention Time Column (显示保留时间列) 命令 187  
 单离子监测 278  
 定量报告设置, 指定 196  
 逗号分隔值, 已定义 2  
 对话框  
   Add Library (添加库) 14  
   Associate a Raw Data File (关联原始数据文件) 93  
   Avalon Event List (Avalon 事件列表) 53  
   Import an Xcalibur Method (导入 Xcalibur 方法) 91  
   New Compound Database (新化合物数据库) 249  
   Open Chromatograph Reference Sample (打开色谱图参考样品) 320, 400, 481  
   Select Compounds from Database (从数据库选择化合物) 113  
   Select Compounds to Add (选择要添加的化合物) 97  
   Thermo Library Manager (Thermo 库管理器) 14  
   Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 106, 210

Thermo Xcalibur Roadmap (Thermo Xcalibur 导航图) 13

## E

Enable Peak Threshold (启用峰阈值) 参数 242  
 Enable Tune Time Tracking (启用调谐时间跟踪) 参数 201  
 Enable Valley Detection (启用峰谷检测) 参数  
   方法开发 143  
   Genesis 峰检测 48  
 Enable (启用) 参数, Ratios (比率) 页面 163  
 End RT (结束保留时间) 参数, Times (时间) 页面 131  
 End Threshold (结束阈值), 事件类型 54  
 Energy Ramp (能量递变) 参数, Compound Database (化合物数据库) 274  
 Estimation Method (评估方法) 参数 167  
 Event (事件) 参数 53  
 Event (事件) 类型 54  
 Exact Mass Window (准确质量数窗口) 参数 206  
 Example (示例) 参数, Reports (报告) 页面 195  
 Exclude Matching Quan Peaks (排除匹配定量峰) 参数 243  
 Excluded (排除) 参数 462  
 Exclusion Window (排除窗口) 参数 243  
 Expected RT (预期保留时间) 参数 461  
 Expected RT (预期保留时间) 参数, Times (时间) 页面 131  
 Expected Width (预期宽度) 参数  
   方法开发 143  
   Genesis 峰检测 48  
 Experiment (实验) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271  
 Export Mass List (导出质量数列表) 命令 245  
 Export to CSV File (导出至 CSV 文件) 命令  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 326, 374  
 Extend Calibrations (扩展校正) 命令 414  
 Extracted Mass (提取质量数) 参数, Compound Database (化合物数据库)  
   目标峰 273  
   确认峰 275  
   碎片 276

## F

Filename (文件名) 参数, Batch View (批次视图) 326, 371  
 Fill down (向下填充) 命令 607  
 Filter (过滤器) 参数  
   Detection (检测) 140  
   Signal (信号) 页面 139  
 Final Units (最终单位) 参数  
   Batch View (批次视图) 372

Data Review (数据查看) 463  
 Finish (完成) 视图 330  
 Fit Threshold (匹配阈值) 参数 229  
 Flag Values Above Carryover (标记高于残留限的值) 参数 201  
 Flag Values Above LOR (标记高于报告限的值) 参数 200  
 Flag Values Above ULOL (标记高于线性上限的值) 参数 201  
 Flag Values Below LOD (标记低于检测限的值) 参数 200  
 Flag Values Below LOQ (标记低于定量限的值) 参数 200  
 Flag Values Between LOD and LOQ (标记介于检测限和定量限之间的值) 参数 201  
 Flags (标记) 参数  
   Compound Results (化合物结果) 窗格 420  
   Compounds (化合物) 窗格 429  
   Sample Results (样品结果) 窗格 431  
   Samples (样品) 窗格 418, 448  
 Force Cluster Off (强制关闭峰组), 事件类型 55  
 Force Cluster On (强制打开峰组), 事件类型 55  
 Formula (分子式) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271  
 Fragment Ions (碎片离子) 参数 229  
 方法  
   本地 540  
   导入 Xcalibur 91  
   更新 TSQ 方法 330  
   Method Template Editor (方法模板编辑器) 241  
   仪器 285  
   主 79  
 分数, 同位素分布 593

## G

General (常规) 页面  
 Background Subtraction Range Option (背景扣除范围选项) 110  
   编辑 105  
 Include Data Dependent Filters (包含数据依赖过滤器) 参数 111  
 Injection Volume (进样体积) 参数  
   Batch View (批次视图) 371  
   方法开发 110, 213  
 Instrument Method (仪器方法) 参数 110, 213  
 Ion Range Calc Method (离子范围计算方法) 参数 110  
 Library Search Type (库检索类型) 参数 214  
 Mass Precision (质量数精度) 参数 110, 213  
 Mass Tolerance (质量数容许偏差) 参数 111, 214  
 Method View (方法视图) 105  
 Number of Scans to Subtract (扣除扫描数) 参数 110  
 Qualitative Peak Processing Template (定性峰处理模板) 参数 110  
 Show All Compounds (显示所有化合物) 参数 214

Stepoff Value (放弃值) 参数 110  
 Generate Only (仅生成) 参数 527  
 Genesis 检测算法 44  
 Groups (组) 页面, Method View (方法视图) 188  
 工作流程  
   采集模式 304  
   一般 4

## H

Height (峰高) 参数 461  
 Hydrolysis (水解) 样品类型, 已定义 354  
 Hydrolysis (水解) 页面, Master Method View (主方法视图) 187  
 化合物, 导入到化合物数据库 253  
 化合物类型  
   定量  
     Detection (检测) 页面 118  
     Identification (识别) 页面 115  
   目标  
     Detection (检测) 页面 118  
     Identification (识别) 页面 115  
   内标化合物  
     Detection (检测) 页面 118  
     Identification (识别) 页面 115

## J

ICIS 检测算法 44  
 Identification (识别) 页面, Method View (方法视图) 115  
 Ignore if Not Defined (未指定时忽略) 参数 228  
 Import an Xcalibur Method (导入 Xcalibur 方法) 对话框 91  
 Import Compounds (导入化合物) 命令 253  
 Import Published Method (导入已发布方法) 命令 244  
 Import Samples (导入样品) 命令 324, 373  
 Include Compound Peak Spectrum as Reference Spectrum (包括化合物峰质谱图作为参考质谱图) 参数 242  
 Include Confirming Ions (包括确认离子) 参数 242  
 Include Data Dependent Filters (包含数据依赖过滤器) 参数 111  
 Injection Amount (进样量) 参数 90  
 Injection Concentration (进样浓度) 参数 529  
 Injection Units (进样单位) 参数 529  
 Injection Volume (进样体积) 参数  
   Batch View (批次视图) 371  
   方法开发 110, 213  
 Insert Copy Sample (插入复制样品) 命令  
   Acquisition (采集) 模式 323  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
   Batch Wizard (批次向导) 410  
 Insert Sample (插入样品) 命令  
   Acquisition (采集) 模式 323  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373

Batch Wizard (批次向导) 410  
 Instrument Method (仪器方法) 参数  
   Batch View (批次视图) 372  
   General (常规) 页面 110, 213  
   Method Forge (方法向导) 90  
 Instrument View (仪器视图) 285  
 Integration Mode (积分模式) 参数 462  
 Intensity Threshold (强度阈值) 参数 229  
 Ion Coelution (离子共洗脱) 参数  
   常见峰检测 46  
   Ratios (比率) 页面 163  
 Ion Range Calc Method (离子范围计算方法) 参数 110  
 Ion Ratio Window (离子比率窗口) 参数 206  
 Ionization (离子化) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271  
 Isotopic Pattern (同位素分布) 参数 229  
 ISTD Amt (内标量) 参数 462  
 ISTD Matching (内标匹配) 参数 243  
 ISTD Resp (内标响应) 参数 462  
 ISTD (内标化合物) 参数 166  
 ISTD (内标化合物) 页面, Method View (方法视图) 183  
 加权因子 603  
 警告标记 422, 433

## L

Lab Name (实验室名称) 参数 110, 213  
 Laboratory Name (实验室名称) 参数 205  
 Lens (透镜) 参数, Compound Database (化合物数据库), 目标峰 274  
 Level (水平) 参数  
   Batch View (批次视图) 371  
   QC Levels (质控水平) 页面 171  
 Library Search Type (库检索类型) 参数 214  
 Library Search (库检索) 参数 230  
 Limit Library Hits (限制谱库匹配数) 参数 242  
 Limit the Retention Time Range (限制保留时间范围) 参数 242  
 Limits (限制) 页面, Method View (方法视图) 179  
 Linked Compound (关联化合物) 参数 167  
 Local Method (本地方法) 视图 540  
 LOD (检测限) 参数 179  
 Log Off 命令 33  
 Login 参数 11  
 LOQ (定量限) 参数 179

## M

*m/z* (Apex) (质荷比, 峰尖) 参数 462, 499  
*m/z* (Delta) (质荷比, 差值) 参数 462, 499  
*m/z* (Expected) (质荷比, 预期) 参数 461, 499  
*m/z* Window (质荷比窗口) 参数 206  
 Manual Flags (手动标记) 参数 528

- Manual Injection (手动进样) 参数 90
- Manual Integration Settings (手动积分设置) 命令 473
- Map Raw Files to Samples (选择样品的原始文件) 命令 373
- Mass Precision (质量数精度) 参数 110, 213
- Mass Tolerance (质量数容许偏差) 参数 111, 214
- Mass (质量数) 参数, Compound Database (化合物数据库)  
 目标峰 272  
 确认峰 275
- Master Method View (主方法视图)  
 Hydrolysis (水解) 页面 187  
 Negative (阴性对照) 页面 182
- Max Amt Diff (%) (最大偏差) 参数 180
- Max Conc (最大浓度) 参数 182
- Max Recovery (%) (最大回收率, %) 参数, ISTD (内标化合物) 页面 183
- Max RF Diff (%) (响应因子的最大偏差, %) 参数 181
- Max RSD (%) (最大相对标准偏差) 参数  
 Calibration (校正) 页面 180
- Max RT (+min) (最大保留时间, + 分钟) 参数, ISTD (内标化合物) 页面 183
- Measurement Unit (测量单位) 参数 206
- Method 参数  
 Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184
- Method Integration Settings (方法积分设置) 命令 473
- Method Template Editor (方法模板编辑器) 241
- Method View (方法视图)  
 Calibration Levels (校正水平) 页面 168  
 Calibration (校正) 页面  
 Compounds (化合物) 页面 164  
 QAQC (质保质控) 页面 180  
 Compounds (化合物) 页面 112  
 Detection (检测) 页面 117  
 General (常规) 页面 105  
 Groups (组) 页面 188  
 Identification (识别) 页面 115  
 ISTD (内标化合物) 页面 183  
 Limits (限制) 页面 179  
 QAQC (质保质控) 页面 178  
 QC Levels (质控水平) 页面 170  
 Ratios (比率) 页面 162  
 Real Time Viewer (实时查看器) 页面 175  
 Reports (报告) 页面 194  
 Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184  
 Spectrum (质谱图) 页面 154  
 Suitability (适用性) 页面 150
- Method (基质空白) 参数  
 Matrix Blank (基质空白) 页面 182
- Methods (方法) 命令 30
- Min Peak Height (S/N) (最小峰高, 信噪比) 参数  
 Genesis 143  
 ICIS 146
- Min Peak Width (最小峰宽) 参数  
 Detect (检测) 页面 146
- ICIS 峰检测 51
- Min RF (最小响应因子) 参数 181
- Min RT (-min) (最小保留时间, - 分钟) 参数 183
- Min. # of Fragments (最少碎片数) 参数 229
- Modify Calibrations or Active Compounds by Group (通过组修改校正或活动化合物) 参数 412
- Modify Columns (修改列) 命令, Batch View (批次视图) 样品列表 321, 362, 368
- Move Sample Down (下移样品) 命令 410
- Move Sample Up (上移样品) 命令 410
- MS Order (质谱级数) 参数, Compound Database (化合物数据库)  
 目标峰 273  
 确认峰 276
- MS2 Search Library (MS2 检索库) 参数 206
- MS3 Search Library (MS3 检索库) 参数 206
- Multiplet Resolution (多重分辨率) 参数  
 Detect (检测) 页面 147
- Multiplet Resolution (多重分离度) 参数  
 ICIS 峰检测 51
- Multiplexing Channels (多通道) 参数 323
- 密码, 管理员 9
- 命令  
 Acquisition (采集) 30  
 Add Compound from Compound Database (从化合物数据库中添加化合物) 113  
 Add Compound (添加化合物) 261  
 Add Group (添加组) 189  
 Add Sample (添加样品)  
 Acquisition (采集) 模式 323  
 Batch View (批次视图) 样品列表 373  
 Batch Wizard (批次向导) 410  
 Add This Mass as New Confirming Ion (添加该质量数为新确认离子) 159  
 Add This Mass to Existing Quan Mass Ranges (将质量数添加到已有定量质量数范围) 159  
 Analysis (分析) 30  
 Application Configuration (应用程序配置) 33  
 Apply to All Peaks in Compound (应用至化合物中的所有峰)  
 Avalon 149  
 Genesis 144  
 ICIS 147  
 Apply to All Peaks in Method (应用至方法中的所有峰)  
 Avalon 149  
 Genesis 144  
 ICIS 147  
 Apply to All Peaks with Like Sensitivity Settings (应用至方法中具有相似灵敏度设置的所有峰)  
 Avalon 149  
 Genesis 144  
 ICIS 147  
 Browse In Raw File (浏览原始文件) 373  
 Calibration Curve Type (校正曲线类型) 478  
 Confirming Ion List (确认离子列表) 473

Copy Down (向下复制) 607  
 Copy With Headers (带标题复制)  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 326, 374  
 Create New (创建新文件) 414  
 Delete Compound from Method (从方法中删除化合物) 187  
 Display Retention Time Column (显示保留时间列) 187  
 Export Mass List (导出质量数列表) 245  
 Export to CSV File (导出至 CSV 文件)  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 326, 374  
 Extend Calibrations (扩展校正) 414  
 Fill Down (向下填充) 607  
 Import Compounds (导入化合物) 253  
 Import Published Method (导入已发布方法) 244  
 Import Samples (导入样品) 324, 373  
 Insert Copy Sample (插入复制样品)  
   Acquisition (采集) 模式 323  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
   Batch Wizard (批次向导) 410  
 Insert Sample (插入样品)  
   Acquisition (采集) 模式 323  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
   Batch Wizard (批次向导) 410  
 Log Off 33  
 Manual Integration Settings (手动积分设置) 473  
 Map Raw Files to Samples (选择样品的原始文件) 373  
 Method Integration Settings (方法积分设置) 473  
 Methods (方法) 30  
 Modify Columns (修改列), Batch View (批次视图) 样品列表 321, 362, 368  
 Move Sample Down (下移样品) 410  
 Move Sample Up (上移样品) 410  
 New Compound Database (新化合物数据库), 创建新数据库 249  
 Open Compound Database (打开化合物数据库) 249  
 Pause Queue (暂停队列) 349  
 Peak Detection Settings (峰检测设置) 474  
 Peak Labels (峰标签) 473  
 Reactivate All (重新激活所有批次) 349  
 Real Time Status 33  
 Reinject Selected Samples (重新进样所选样品)  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
 Remove Pending Batch (移除待定批次) 351  
 Remove Pending Batches (移除待定批次) 349  
 Remove Pending Samples (移除待定样品) 351  
 Remove Selected Samples (移除所选样品)  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
   Batch Wizard (批次向导) 410  
 Save Compound Database As (化合物数据库另存为) 250  
 Send RT to Method (将保留时间发送到方法) 473

Set This Mass as a New Quan Peak (设置该质量数为新定量峰) 159  
 Set This Mass as Quan Mass (设置该质量数为定量质量数) 159  
 Show Peak Info (显示峰信息) 473  
 Stop Active Batch (停止活动批次) 349  
 Stop All Batches (停止所有批次) 349  
 Stop Batch (停止批次) 351  
 Turn Device Off (关闭设备) 331  
 Turn Device On (开启设备) 331  
 Turn Device Standby (使设备待机) 331  
 Update Confirming Ion Ratios with This Spectrum (利用该质谱图更新确认离子比率) 159  
 模板  
   方法 235  
   批次 312-313  
 模式, 选择 30  
 目标筛选报告, 已列出 6

## N

Name the Master Method (命名主方法) 参数 89  
 Negative Peaks (负峰), 事件类型 54  
 Negative (阴性对照) 样品类型, 已定义 354  
 Negative (阴性对照) 页面, Master Method View (主方法视图) 182  
 New Compound Database (新化合物数据库) 命令, 创建新数据库 249  
 Neutral Mass (中性质量数) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271  
 NIST 库, 安装 13  
 No Specified Retention Time (无指定保留时间) 参数 207  
 Noise Method (噪声方法) 参数  
   Detect (检测) 页面 146  
   ICIS 峰检测 51  
 Number of Confirming Ions (确认离子数) 242  
 Number of Scans to Subtract (扣除扫描数) 参数 110

## O

Only Select Top Peaks (仅选择最高峰) 参数 242  
 Open Chromatograph Reference Sample (打开色谱图参考样品) 对话框 320, 400, 481  
 Open Compound Database (打开化合物数据库) 命令 249  
 Origin (原点) 参数  
   Calibration (校正) 166  
   Method Template Editor (方法模板编辑器) 243

## P

Password 参数, 登录界面 11  
 Path (路径) 参数 90  
 Pause Queue (暂停队列) 命令 349  
 Peak Detection Settings (峰检测设置) 命令 474

Peak Height (%) (峰高, %) 参数  
 Genesis  
   Detect (检测) 页面 143  
   峰检测 48  
 ICIS  
   方法开发 146  
   峰检测 50  
 Peak Labels (峰标签) 命令 473  
 Peak Noise Factor (峰噪声因子) 参数  
   方法开发 146  
   ICIS 峰检测 50  
 Peak S/N Cutoff (峰信噪比截止值) 参数  
   Detect (检测) 页面 143  
   Genesis 峰检测 48  
 Percentage (百分比) 参数 182  
 Polarity (极性) 参数, Compound Database (化合物数据库) 273  
 Post-run System State (运行后系统状态) 参数 334, 393  
 P-P Threshold (峰对峰阈值), 事件类型 54  
 Precursor Mass (母离子质量数) 参数, Compound Database (化合物数据库) 272  
 Precursor (母离子) 参数, Compound Database (化合物数据库) 275  
 Priority Sequence (优先序列) 参数 334, 393  
 Processing Configuration File (处理配置文件) 参数 205  
 Product Mass (子离子质量数) 参数, Compound Database (化合物数据库)  
   目标峰 272  
   确认峰 275  
 Product Mass (子离子质量数) 参数, 确认峰 275  
 批次  
   Acquisition (采集) 模式 302  
   Analysis (分析) 模式 359  
   Calibration (校正) 331  
   开发批次 291

## Q

QAQC Flags (质保质控标记) 参数 528  
 QAQC (质保质控) 页面, Method View (方法视图) 178  
 QC Levels (质控水平) 页面, Method View (方法视图) 170  
 QC1-QC<sub>n</sub> (质控 1- 质控 n) 参数 171  
 QED 库, 安装 13  
 QIon (定量离子) 参数 529  
 Qualitative Peak Processing Template (定性峰处理模板) 参数 110  
 Quan Flags (定量标记) 参数 528  
 Quan Mass (定量质量数) 参数 529  
 Quan Peak *m/z* (定量峰质荷比) 参数 528  
 Quan Peak Response (定量峰响应) 参数 528  
 Quan Peak RT (定量峰保留时间) 参数 529  
 Quick Mode (快速模式) 参数 404  
 强度比率 593

## R

R<sup>2</sup> Threshold (相关系数阈值) 参数 180  
 Ranges (范围) 参数, 化合物检测 140  
 Ratios (比率) 页面, Method View (方法视图) 162  
 Raw Filename (原始文件名) 参数 90  
 Reactivate All (重新激活所有批次) 命令 349  
 Real Time Status 命令 33  
 Real Time Viewer (实时查看器) 页面, Method View (方法视图) 175  
 Reference Compound (参考化合物) 参数, Identification (识别) 页面 116  
 Reinject Selected Samples (重新进样所选样品) 命令  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
 Remove Pending Batch (移除待定批次) 命令 351  
 Remove Pending Batches (移除待定批次) 命令 349  
 Remove Pending Samples (移除待定样品) 命令 351  
 Remove Selected Samples (移除所选样品) 命令  
   Acquisition (采集) 模式 324  
   Batch View (批次视图) 样品列表 373  
   Batch Wizard (批次向导) 410  
 Report All Compounds Listed in Configuration File (报告配置文件中列出的所有化合物) 参数 207  
 Report Concentration (报告浓度) 参数 200  
 Report Name (报告名称) 参数 195, 216  
 Report Noise As (将噪声报告为) 参数  
   Detect (检测) 页面 144  
   Genesis 峰检测 49  
 Report Selection (报告选择) 视图 327  
 Report Semi-Quantitative Result (报告半定量结果) 参数 206  
 Report Title (报告名称) 参数 195, 216  
 Report Type (报告类型) 参数 195, 216  
 Report View (报告视图) 514  
 Reports (报告) 页面, Method View (方法视图) 194  
 Response Ratio (响应比率) 参数 462  
 Response Threshold (响应阈值) 参数, Compound Database (化合物数据库) 271  
 Response Via (响应方式) 参数  
   Calibration (校正) 166  
   Method Template Editor (方法模板编辑器) 243  
 Response (响应) 参数 529  
 Retention Time (保留时间) 参数 529  
 RMS (均方根) 参数  
   Detect (检测) 页面 147  
   ICIS 峰检测 51  
 RT Window (保留时间窗口) 参数 206  
 RT (保留时间) 参数  
   Calibration Levels (校正水平) 169  
   Calibration (校正) 166  
   Calibration (校正) 页面 180  
   Chk Std (质控标样) 页面 181  
   Compound Database (化合物数据库), 目标峰 274  
   Hydrolysis (水解) 页面 187

Identification (识别) 页面 116  
 ISTD (内标化合物) 页面 183  
 Limits (限制) 页面 179  
 Matrix Blank (基质空白) 页面 182  
 QC Levels (质控水平) 页面 171  
 Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184

## S

- S/N Threshold (信噪比阈值) 参数 228  
 方法开发 143  
 Genesis 峰检测 47
- Sample Amt (样品量) 参数 461
- Sample Comment (样品注释) 参数 90
- Sample Concentration (样品浓度) 参数 529
- Sample Definition (样品定义) 视图 314
- Sample File (样品文件) 参数 527
- Sample ID (样品识别号) 参数, Batch View (批次视图) 326, 371
- Sample Name (样品名称) 参数  
 Batch View (批次视图) 326, 371  
 Data Review (数据查看) 431
- Sample Type (样品类型) 参数  
 Batch View (批次视图) 371  
 Data Review (数据查看) 418, 431, 449
- Sample Weight (样品质量) 参数 372
- Sample Units (样品单位) 参数 529
- Sample Volume (样品体积) 参数 372
- Save Compound Database As (化合物数据库另存为) 命令 250
- Score Threshold (分数阈值) 参数 230
- Screening Method (筛选方法) 参数 205
- Select a Report (选择报告) 参数 527
- Select Compounds from Database (从数据库选择化合物) 对话框 113
- Select Compounds to Add (选择要添加的化合物) 对话框 97
- Send RT to Method (将保留时间发送到方法) 命令 473
- Sensitivity (灵敏度) 参数  
 Avalon 148  
 Genesis 142  
 ICIS 146  
 Method Template Editor (方法模板编辑器) 242
- Separate Ion Overlay Display (分离离子重叠显示) 参数 200
- 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) 参数 163
- Set Ion Ratio to All Confirming Peaks in Method (对方法中所有确认峰应用离子比率) 参数 163
- Set Peak Windows Settings to All Peaks in Compound (对化合物所有峰应用峰窗口设置) 参数 132
- Set Peak Windows Settings to All Peaks in Method (对方法中所有峰应用峰窗口设置) 参数 132
- Set This Mass as a New Quan Peak (设置该质量数为新定量峰) 命令 159
- Set This Mass as Quan Mass (设置该质量数为定量质量数) 命令 159
- Shade Row when Sample is Outside of Evaluation Criteria (样品超评估标准时对该行加阴影) 参数 200
- Show All Compounds (显示所有化合物) 参数 214
- Show Chromatogram on Quantitation Report (定量报告显示色谱图) 参数 200
- Show Peak Info (显示峰信息) 命令 473
- Show Quan Peaks Only (仅显示定量峰) 参数 175
- Showing (显示) 参数, Active View (活动视图) 527
- Shoulders On (肩峰打开), 事件类型 55
- Smoothing (平滑) 参数  
 Avalon  
 Detect (检测) 页面 148  
 峰检测 52  
 Genesis  
 Detect (检测) 页面 143  
 峰检测 47  
 ICIS  
 Detect (检测) 页面 146  
 峰检测 50
- Solvent Blank (溶剂空白) 页面, Method View (方法视图) 184
- Solvent (溶剂) 样品类型, 已定义 354
- Specify Default Ion Ratio Ranges (指定默认离子比率范围) 参数 242
- Specimen (定量样品) 样品类型, 已定义 354
- Spectrum (质谱图) 页面, Method View (方法视图) 154
- SRM 实验类型 277
- Standard Type (标样类型) 参数 166
- Start Device (启动设备) 参数 334, 393
- Start RT (起始保留时间) 参数, Times (时间) 页面 131
- Start Threshold (起始阈值), 事件类型 54-55
- Start When Ready (准备就绪时启动) 参数 334, 393
- Starting Vial Number (起始样品瓶编号) 参数 404
- status color codes (状态颜色代码)、Sample Definition (样品定义) 视图 323
- Status (状态) 参数  
 Active View (活动视图) 528  
 Batch View (批次视图) 326, 371
- Stepoff Value (放弃值) 参数 110
- Stop Active Batch (停止活动批次) 命令 349
- Stop All Batches (停止所有批次) 命令 349
- Stop Batch (停止批次) 命令 351
- Suitability (适用性) 页面, Method View (方法视图) 150
- System Shutdown Method (系统关闭方法) 参数 336
- System Startup Method (系统启动方法) 参数 336
- System Status (系统状态) 参数 336
- 矢量加法 601, 603
- 视图  
 Batch Selection (批次选择) 306

Batch (批次) 359  
 Data Review (数据查看) 415, 485  
 Development Batch (开发批次) 291  
 Finish (完成) 330  
 Local Method (本地方法) 540  
 Report Selection (报告选择) 327  
 Report View (报告视图) 514  
 Sample Definition (样品定义) 314  
 仪器 285

## T

Tailing Factor (拖尾因子) 参数  
 Genesis  
   方法开发 143  
   峰检测 48  
 ICIS  
   方法开发 146  
   峰检测 50  
 Tangent Skim (切线撇去), 事件类型 54  
 Target Ratio (目标比率) 参数 163  
 Target Screening Export Settings (目标筛选导出设置), 指定 202  
 Template Layout (模板布局) 参数 404  
 Tension (接近张力), 事件类型 54  
 Theoretical Amount (理论量) 参数 529  
 Theoretical Amt (理论量) 参数 461  
 Thermo Xcalibur Instrument Setup (Thermo Xcalibur 仪器设置) 对话框 106, 210  
 Threshold Override (优先阈值) 参数 228  
 Threshold/Lower Limit (阈值/下限) 参数 187  
 Time Range Peak (时间范围峰) 参数, Compound Database (化合物数据库) 274  
 Time (时间) 参数 53  
 Time/Event/Value (时间/事件/值) 参数, Avalon 峰检测 52  
 Total Batch Rows (总批次行) 参数 404  
 Total Response (总响应) 参数 528  
 Total Rows (总行数) 参数 527  
 Trace (谱图) 参数, Detection (检测) 140  
 Tune File Lifetime (调谐文件使用寿命) 参数 201  
 Turn Device Off (关闭设备) 命令 331  
 Turn Device On (开启设备) 命令 331  
 Turn Device Standby (使设备待机) 命令 331  
 特性总结 3  
 提取离子色谱图 279  
 同位素分布 593  
 同位素分布, 分数计算 597  
 同位素准确质量数 593

## W

Valley Rise (%) (峰谷上升, %) 参数  
 Detect (检测) 页面 144  
 Genesis 峰检测 48

Valley S/N (峰谷信噪比) 参数  
   方法开发 144  
   Genesis 峰检测 48  
 Value (值) 参数 53  
 Weighting (加权) 参数  
   Calibration (校正) 166  
   Method Template Editor (方法模板编辑器) 243  
 Vial Position (样品瓶位置) 参数  
   Batch View (批次视图) 326, 371  
   Method Forge (方法向导) 90  
 View Only (仅查看) 参数 527  
 View Width (视图宽度) 参数  
   峰检测 46  
   Times (时间) 页面 132  
 Window Override (优先窗口) 参数 229  
 Window Type (窗口类型) 参数  
   峰检测 46  
   Ratios (比率) 页面 163  
 Window (窗口) 参数  
   Compound Database (化合物数据库), 目标峰 274  
   离子比率 46  
   Ratios (比率) 页面 163  
   Retention Time (保留时间) 46  
   Times (时间) 页面 131  
 ULOL (线性上限) 参数 179  
 Unextracted (未提取) 样品类型, 已定义 354  
 Units (单位) 参数 166  
 Update Confirming Ion Ratios with This Spectrum (利用该质谱图更新确认离子比率) 命令 159  
 Upper Limit (上限) 参数  
   Hydrolysis (水解) 页面 187  
   Solvent Blank (溶剂空白) 页面 184  
 Use Alternate Calibration Report Format (使用备用校正报告格式) 参数 200  
 Use an Existing Raw Data File (使用现有的原始数据文件) 参数 89  
 Use as RT Reference (用作保留时间参考) 参数, Identification (识别) 页面 116  
 Use Average Scan (使用平均扫描) 参数 206  
 Use Autosampler (采用自动进样器) 参数 90  
 Use Data Dependent Scans (使用数据依赖扫描) 参数 243  
 Use Full MS Scan to Confirm (使用质谱全扫描进行确认) 参数 206  
 Use Genesis Algorithm for Qual Processing (采用 Genesis 算法进行定性处理) 参数 243  
 Use Internal Mass Calibration (使用内标质量数校正) 参数 230  
 Use Matrix Blank (使用基质空白) 参数 228  
 Use Method Forge (使用方法向导) 参数 81, 85, 91  
 Use Reverse Library Searching Only (仅使用逆向库检索) 参数 230  
 Use RT Limits (使用保留时间限值) 参数 228  
 Use Scan at Peak Apex (使用峰顶处扫描) 参数 206  
 Use Source CID Scans (使用源 CID 扫描) 参数 228

Use These Libraries (使用这些库) 参数 242  
文件类型, 支持的 2

## X

XIC (提取离子色谱图) 参数, Signal (信号) 页面 139  
许可证, 类型 ix  
选择反应监测 277

## Y

颜色代码、Sample Definition (样品定义) 视图 323  
样品类型, 已定义 354  
仪器状态指示器 332  
用户安全, 激活 60

## Z

噪声值 605  
支持的文件类型, 已定义 2  
质控标样 (QC) 样品类型, 已定义 354  
质谱图噪声阈值 598  
自定义报告, 已列出 6  
自动背景扣除选项 107

