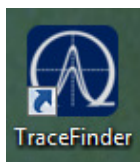
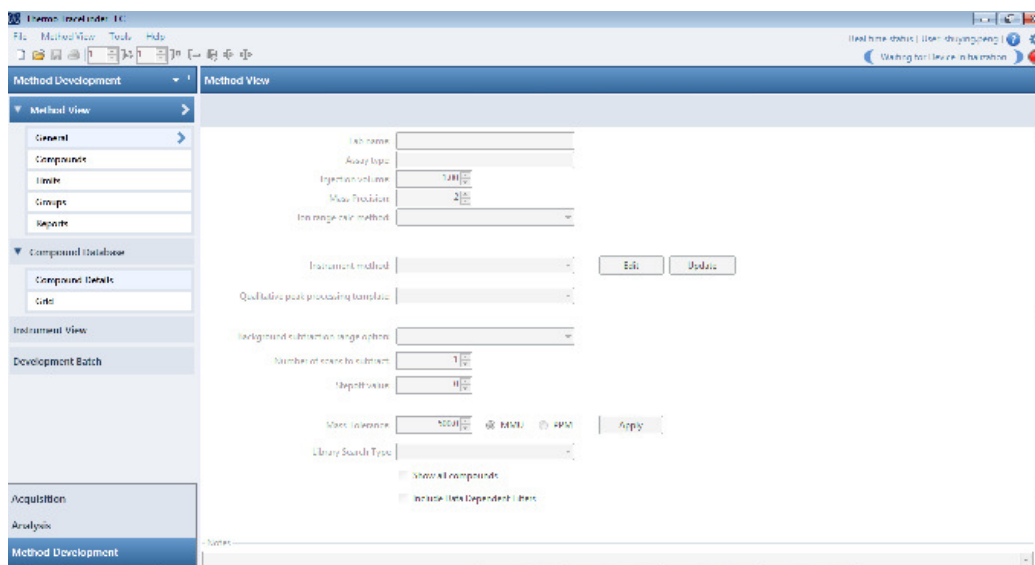


TraceFinder 定量数据处理流程



点击桌面上的

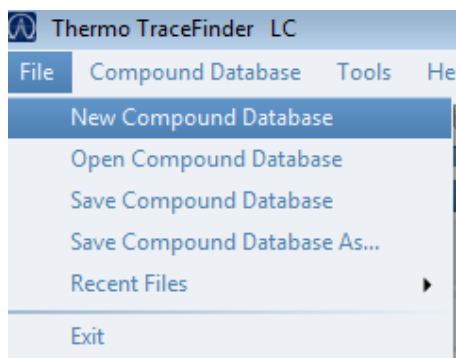
图标，进入 TraceFinder 软件的主界面



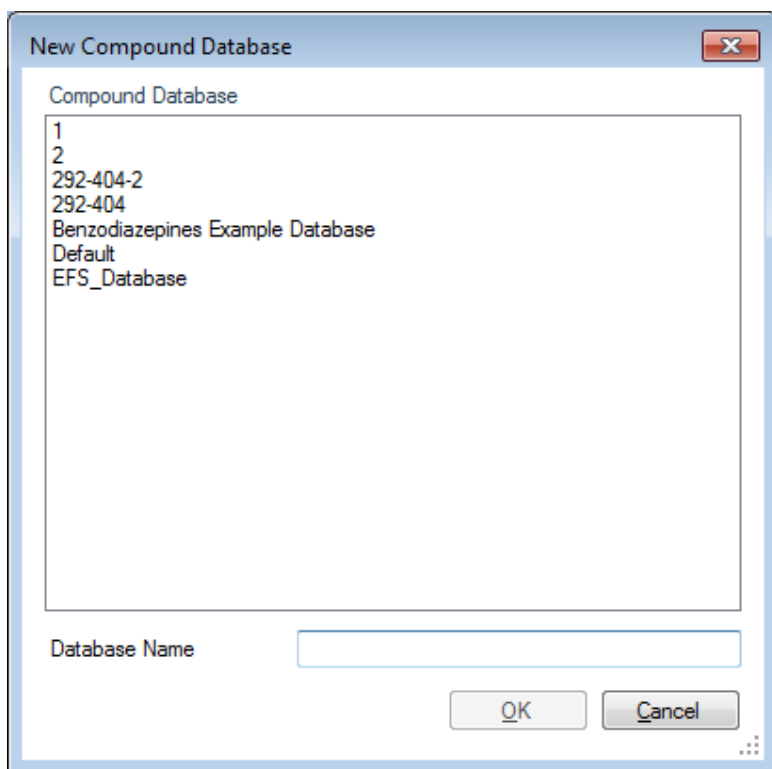
点击左下方的“Method Development”，进入方法编辑页面。

点击左侧“Compound Database”

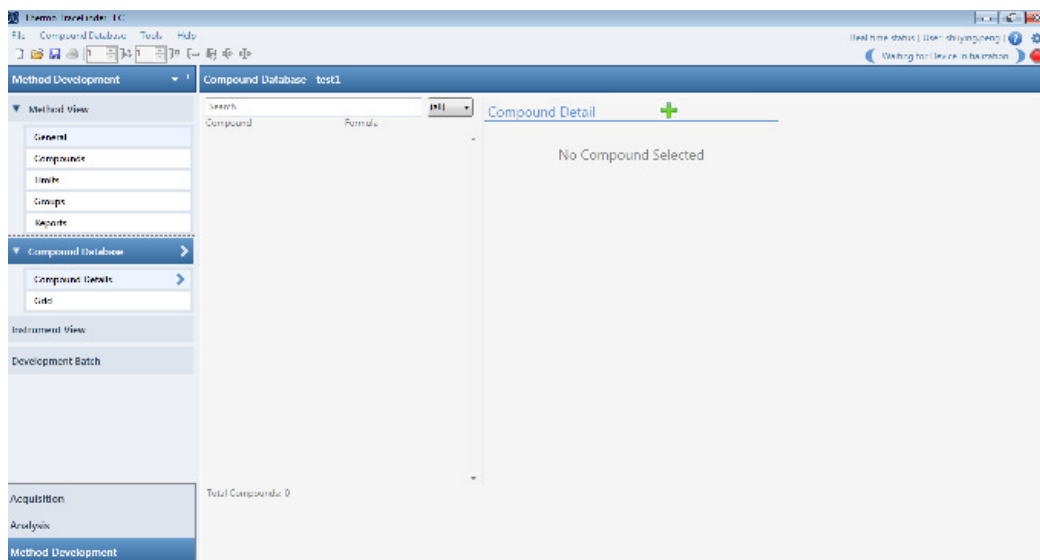
选择菜单“File”选项中的“New Compound Database”（见下图）或点击 ：



出现如下对话框：



在“Database Name”中键入化合物库的名称“test1”，点击 OK，出现空白数据库页面：



点击  添加化合物信息（红色框的信息栏为必填项）：

Compound Detail

Compound: Fluometuron

Experiment: SRM

Category:

CAS:

Formula:

Ionization: None

Neutral Mass: 0

Target Peaks

Peak 1

Precursor Mass: 233

Product Mass: 72

Polarity: Positive

Adduct: None

Charge State: 1

Time range peak: ☐

Window (sec): 30.00

RT (min): 0.00

Collision Energy: 0.00

Lens: 0.0

Energy Ramp: 0.00

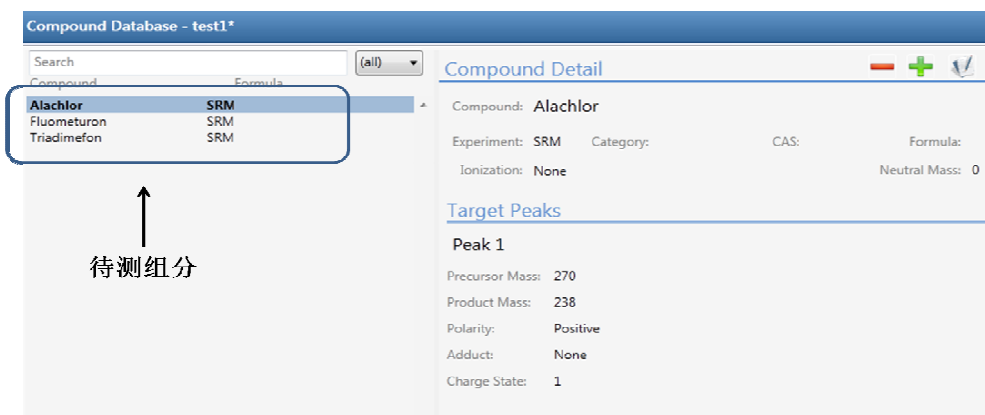
Confirming Peaks (Quan Only)

Precursor	Product Mass	Collision Energy:

在“Compound”中键入化合物名称“Fluometuron”，在“Precursor Mass”中键入母离子的质荷比“233”，“Product Mass”中键入定量离子的质荷比“72”（注：若有多个定量离子，点击“Target Peaks”右方的  添加其他定量离子的信息。若对检测中对定性离子有要求，点击“Confirming Peaks (Quan Only)”右方的  添加定性离子的信息。）

点击  完成编辑。

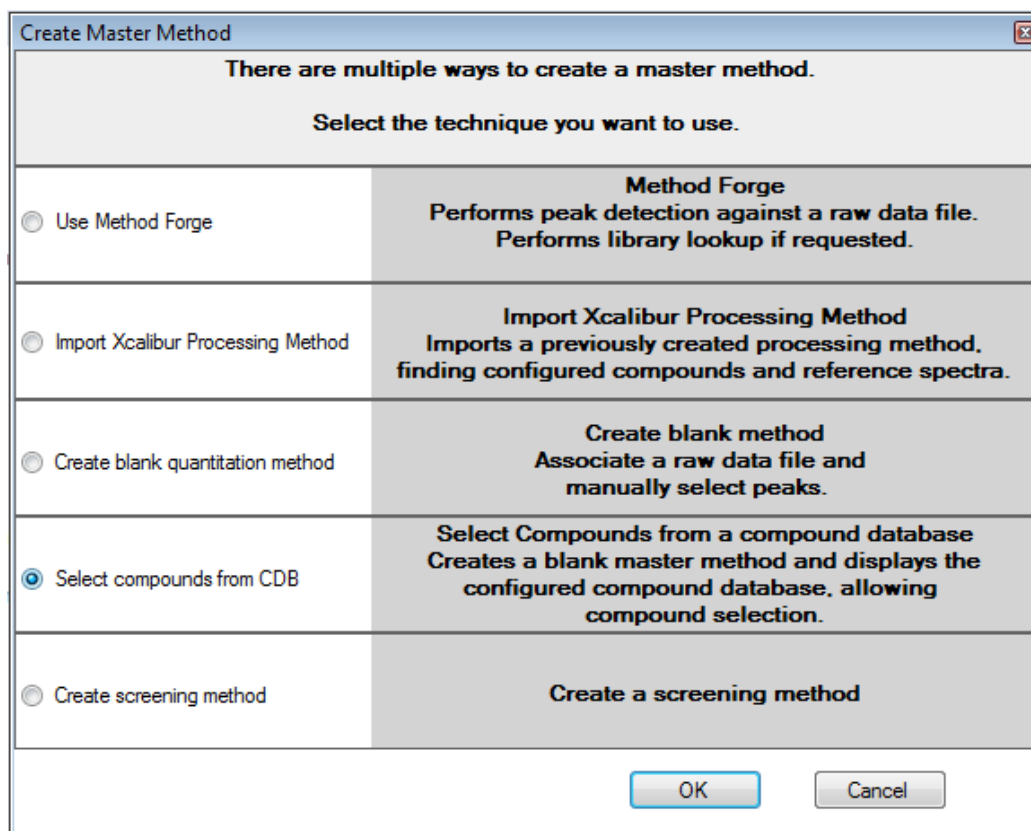
按照上述步骤继续添加其他待测组分（若定量方法为内标法，内标也当作一个组分同样添加进数据库），直至所有待测组分均添加进数据库，见下图：



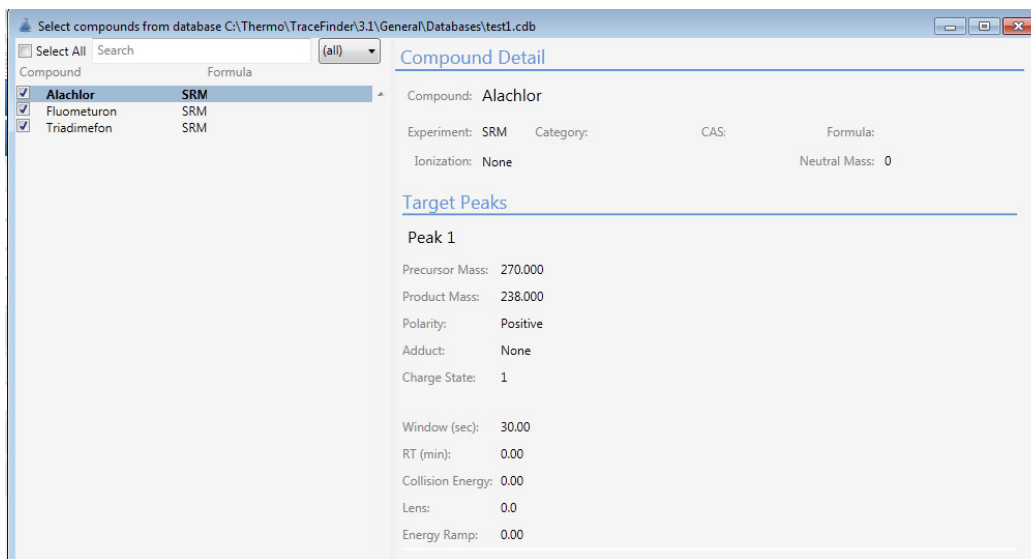
点击 , 将编辑的待测组分信息存入数据库 “test1”。

点击 “Method View”, 进入方法编辑页面

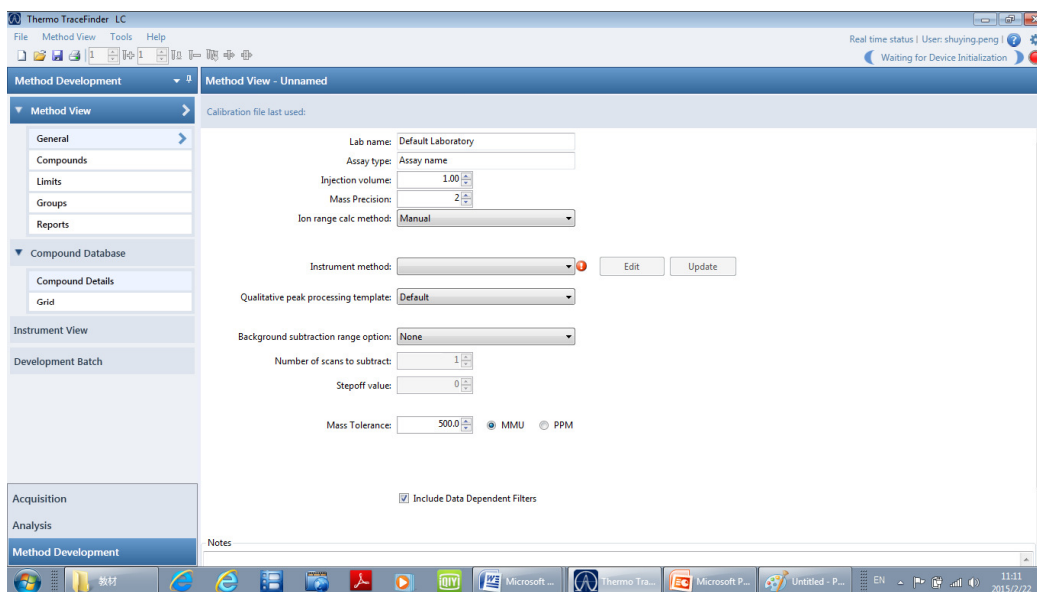
点击 , 出现如下对话框:



选择 “Select compounds from CDB”, 点击 “OK”, 出现如下对话框:

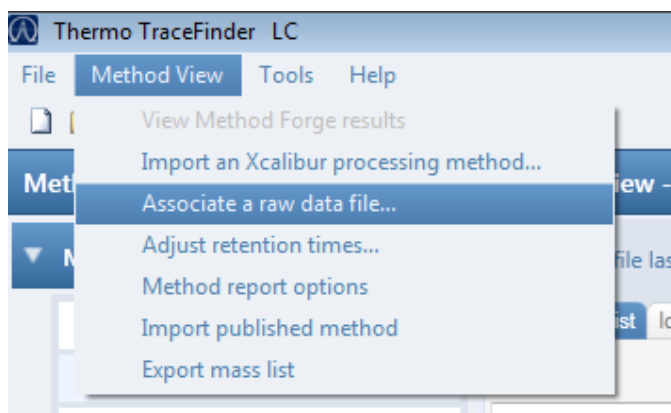


在页面左侧勾选待测组分，点击页面下方的 **Add Selected Compounds to Method**，将待测组分添加至定量方法，出现方法编辑的 General 页面：

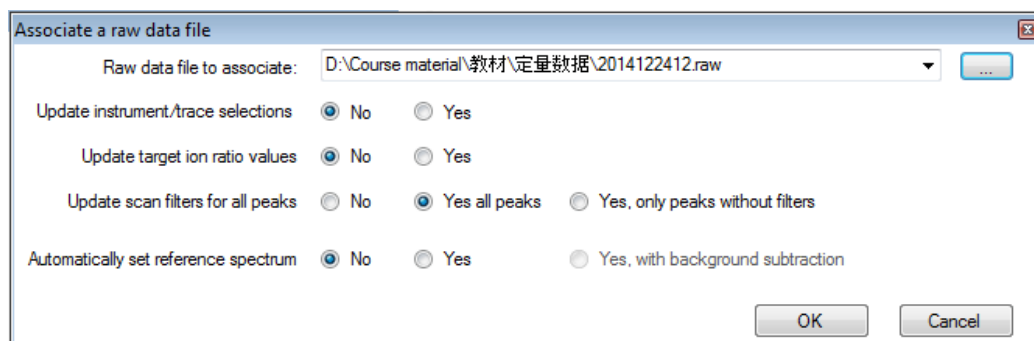


“在“Instrument Method”中下拉任意选择一个仪器方法，“Mass Tolerance”中设置容忍的质荷比偏差，其他选项可根据需求选填。

点击“Method View”，选择“Associate a raw data file”，关联一个数据文件，见下图：

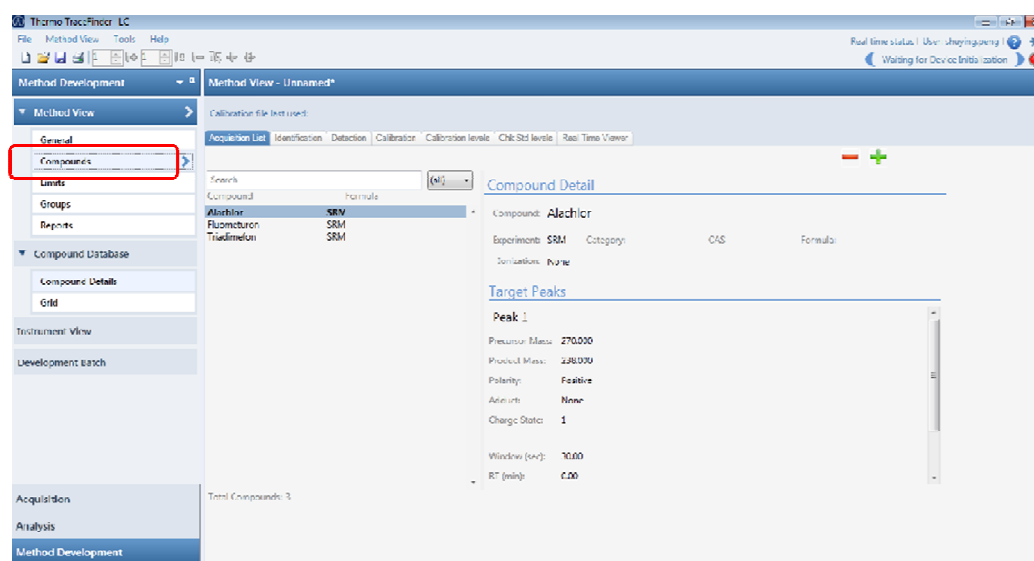


跳出如下对话框：



在“Raw data file to associate”中选择数据文件，点击 OK

点击“Compound”，填写待测组分的其他信息，见下图：



在“Acquisition List”中，待测物的信息已经添加。

在“Identification”中，填写相应信息，见下图：

Acquisition List	Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	Chk Std levels	Real Time Viewer		
	RT	Compound	Compound type	Active	CAS No	LIMS ID	Use as RT Reference	Reference compound
▶ 1	0.00	Alachlor	Target Compound	☒	NA		☐	
2	0.00	Fluometuron	Target Compound	☒	NA		☐	
3	0.00	Triadimefon	Target Compound	☒	NA		☐	

RT: 组分的保留时间，该选项为只读，不在此处修改

Compound: 化合物的名称，已通过数据库信息加入，可不更改

Compound type: 下拉选择该组分为待测物还是内标（内标只对内标法适用，若定量方法为外标法，此处保留默认选项“Target Compound”）

在“Detection”中，设置每个组分的参数（若有定性离子，按照以下设置定量离子的方法设置参数）：

Times 选项：

Detection type: 选择 Single-Detected

Expected RT: 键入组分的保留时间

Window(sec): 可容忍的时间偏差窗口

View Width: 色谱图可视时间宽度

Signal 选项：

选择“Filter”

Detector: 选择 MS

Trace: 选择 Mass range

Filter: 下拉选择对应组分的 Scan Event

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

Detect 选项：设置各积分参数，让色谱峰积分合理

Sensitivity: 下拉选择积分方式(默认为 ICIS)

Detection method: Nearest RT

Smoothing: 键入平滑点数

Baseline Window: 基线宽度

Area Noise Factor: 面积噪音

Peak Noise Factor: 峰噪音

Min Peak Height(S/N): 键入最小峰高

根据积分峰型选择更改其他参数

将每个待测组分的 Detection 选项全部填写完后，编辑“Calibration”选项

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	Units	ISTD	Amount	Linked compound													
1	8.25	Fluometuron	Target Compound	External	Area	Linear	Ignore	Equal	ppb																
2	11.14	Triadimefon	Target Compound	External	Area	Linear	Ignore	Equal	ppb																
3	12.56	Alachlor	Target Compound	External	Area	Linear	Ignore	Equal	ppb																

Standard type: 下拉选择定量法，External（外标法），Internal（内标法）

Response via: Area（面积）

Curve Type: Linear（线性回归）

Origin: 选择忽略原点（Ignore），强制过原点（Force），包含原点（Include）

Weighting: Equal（权重）

Units: 键入单位

ISTD: 若为内标法，选择内标物

Amount: 若为内标法，中键入内标物加入的量

编辑“Calibration Level”选项

设置标准曲线的几个浓度点：在页面下方的在“Level”中添加每个浓度点的标示（可用任意数字或字母），见下图：

Manage Calibration levels	
	Level
1	L1
2	L2
▶ 3	L3
4	L4
5	L5
* 6	

在页面上方的列表中键入各待测组分的每个浓度，见下图：

Acquisition List	Identification	Detection	Calibration	Calibration levels	Chk Std levels	Real Time Viewer	
	RT	Compound	L1	L2	L3	L4	L5
1	8.25	Fluometuron	10.000	20.000	50.000	80.000	100.000
2	11.14	Triadimefon	10.000	20.000	50.000	80.000	100.000
▶ 3	12.56	Alachlor	10.000	20.000	50.000	80.000	100.000

各待测组分的信息添加完毕后，点击 ，跳出如下对话框：

Save Master Method as

Method	Type	Date Changed	Size (MB)	Domain
1	Screening	02-20-2014 03:54PM	0.03	General
2	Quan	03-20-2014 11:56AM	0.06	General
20140819	Quan	08-19-2014 03:18PM	0.07	General
20141022	Quan	10-22-2014 07:55PM	0.07	General
20141029	Quan	10-29-2014 08:21PM	0.07	General
20141103	Quan	11-03-2014 07:48PM	0.07	General
292	Quan	05-13-2014 01:30PM	0.07	General
3	Screening	07-01-2014 05:39PM	0.03	General
404	Quan	07-01-2014 06:03PM	0.07	General
5	Screening	10-22-2014 07:41PM	0.03	General

New Method

Save

Overwrite

Cancel

C:\TraceFinderData\Methods\20141103

点击“Save”，保存定量数据处理方法“Test1”

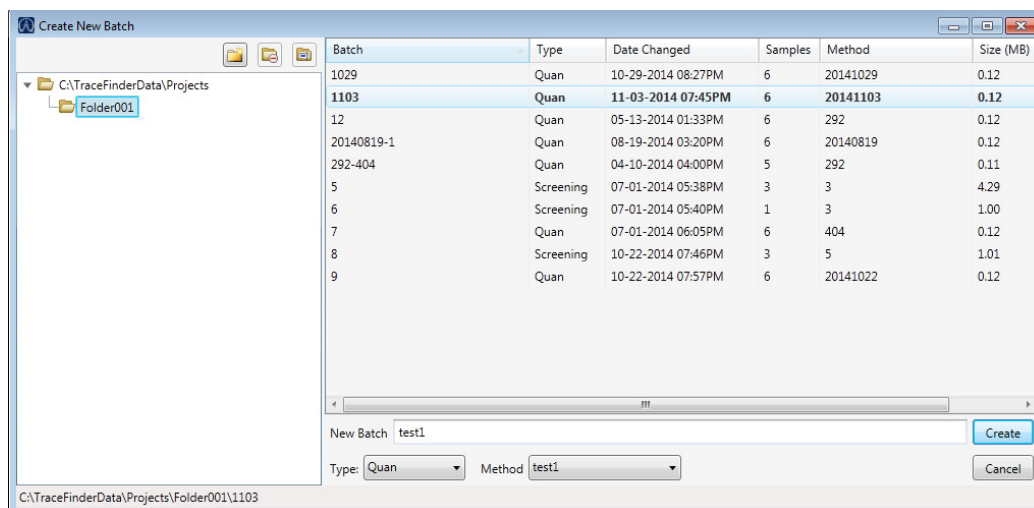
点击页面左下方的“Analysis”，添加待处理的数据文件，见下图：

Acquisition

Analysis

Method Development

点击 ，新建一个批添加数据文件，出现如下对话框：



New Batch: 键入该批的名称

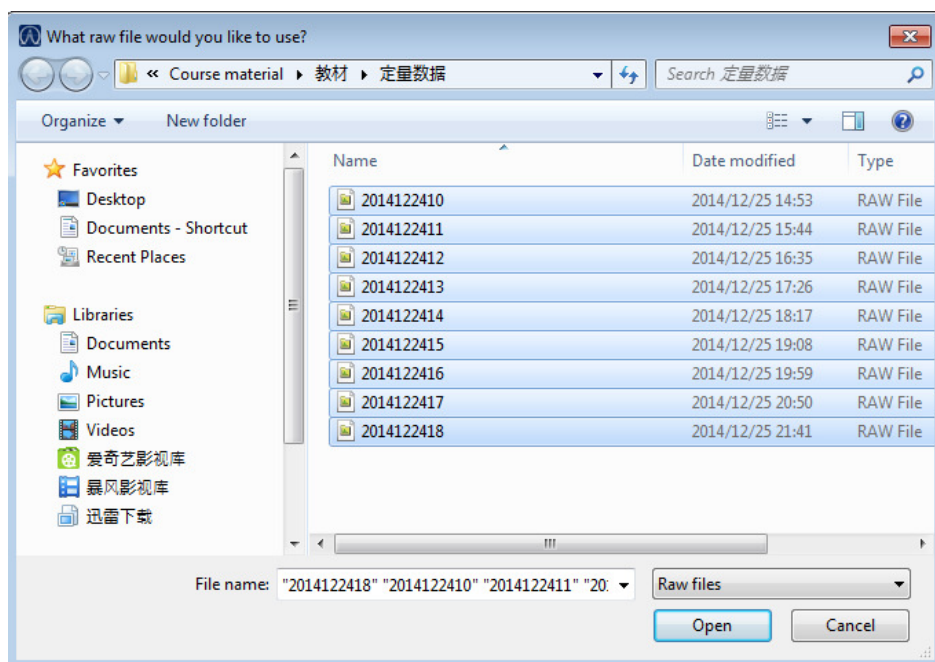
Type: Quan （定量）

Method: 下拉选择之前建立定量数据处理方法“Test1”

点击“Create”

	Status	Filename	Sample type	Groups	Qual Processing	Level
▶ 1		Unknown1	Unknown		☐	

双击上图“Filename”选项的 Unknown1，跳出如下对话框：



选中要处理的数据文件，点击“Open”，将要处理的数据文件添加进该批：

	Status	Filename	Sample type	Level	Sample name	Comment
1		2014122410	Cal Std	L1	mix-10ppb	
2		2014122411	Cal Std	L2	mix-20ppb	
3		2014122412	Cal Std	L3	mix-50ppb	
4		2014122413	Cal Std	L4	mix-80ppb	
5		2014122414	Cal Std	L5	mix-100ppb	
6		2014122415	Unknown		ck	
7		2014122416	Unknown		1-1	
8		2014122417	Unknown		1-2	
9		2014122418	Unknown		1-3	

Sample type: 下拉选择该数据为标准品（Cal Std），基质空白（Matrix Blank），质控点（QC Std），溶剂（Solvent），未知样品（Unknown），

Level: 选择每个标准品对应的 Level

点击 ，存储这批数据

点击 ，提交批数据，跳出对话框：

Submit Options

User name: shuying.peng

Samples: 1-9

☐ Acquire data

☒ Process data - ☒ with Peak detection

☐ Create reports

Priority

☐ Priority Sequence

☒ Next Available Batch

☐ Next Available Sample

Start device: <-- No Start Device Selected -->

Show Details...

OK

Cancel

勾选 Process data 和 with Peak detection，点击 OK，待 Status 的状态灯全部变绿，该批数据处理完毕。

点击左侧页面的 ，右侧页面可显示定量数据处理结果。

