

LIMS for Lasers 2015

Система управления лабораторной информацией при определении стабильных изотопов водорода и кислорода в пробах воды методом лазерной спектроскопии

Руководство пользователя

***Версия v 2.1.1
LIMS for Lasers v10.092
20 декабря 2016***

Предисловие

Определение стабильных изотопов водорода и кислорода (значений $\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$) в пробах природной воды при помощи лазерных спектрометров – это экономичный эффективный аналитический метод гидрологических и экологических исследований во всем мире для анализа относительно чистых проб воды.^[1] Измерение значений δ с помощью лазерных спектрометров обычно дает достаточно точные результаты, но если образцы содержат примеси в виде летучих органических молекул, или если данные требуются для юридических целей, результаты должны быть проверены с помощью масс-спектрометрии (isotope-ratio mass spectrometry или IRMS).^[2]

Лазерные спектрометры для изотопов жидких проб воды от Los Gatos Research и Picarro Inc.¹ просты в эксплуатации; однако, включение их в рутинные лабораторные операции представляется не таким простым из-за необходимости обширной обработки CSV данных оператором. Некоторые пользователи разработали комплексные таблицы обработки данных; тем не менее, такие таблицы представляют собой серьезную проблему для проведения долгосрочного контроля качества или лабораторного аудита. Ни один из производителей не предоставляет программное обеспечение по обработке данных, которое может решить все эти задачи.

7 важных шагов по обработке данных

Существует 7 ключевых этапов обработки данных для получения точных и воспроизводимых результатов изотопного состава воды, полученных с помощью лазерных спектрометров, чего в целом трудно достичь, используя электронные таблицы:

- Исключить недостоверные пробы или инъекции, возникшие из-за измененных концентраций H_2O по причине неэффективной работы шприца или прокладки;
- Определить зависимость значения δ от концентрации водяного пара H_2O в анализаторе и внести корректировки, если в этом есть необходимость;
- Игнорировать первые 3-4 инъекции каждой пробы, чтобы уменьшить эффект «памяти» между соседними пробами (between-sample memory);
- Определить и применить алгоритм коррекции переноса остаточной памяти;
- Исправить линейную или нелинейную нарастающую ошибку измерения прибора (инструментальный дрейф);
- Нормализация всех данных по шкалам VSMOW/SLAP;
- Отслеживать контроль качества каждого анализа и в течение длительного времени

¹ В настоящее время лазерные приборы OA-ICOS продаются Los Gatos Research Inc. (www.lgrinc.com), а лазерные приборы CRDS продаются Picarro Inc. (www.picarro.com). Любое использование торговых марок, названий фирм или продуктов в данном руководстве используется только в описательных целях и не означает одобрения со стороны Международного агентства по атомной энергии или Правительства США.

Laboratory Information Management System (LIMS) for Lasers 2015 – это система управления лабораторной информацией, которая автоматизирует вышеперечисленные 7 шагов и полностью устраняет необходимость в электронных таблицах. *LIMS for Lasers 2015* использует систематические шаблоны для анализа образцов и измерений на основе принципов идентичной обработки (Identical Treatment). Шаблоны содержат несколько вариантов стандартов для количественной оценки эффекта «памяти» между пробами и нарастающей инструментальной ошибки измерения, для корректировки количества водяного пара H₂O в анализаторе и для нормализации результатов по шкале VSMOW–SLAP. Стандарты контроля позволяют вести долгосрочный контроль качества лабораторных показателей.

LIMS for Lasers 2015, кроме того, управляет всеми данными заказчиков и проектов для лазерных приборов. Мониторинг характеристик лазера осуществляется с помощью контрольных стандартов, диаграмм зависимостей $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ и графиков временных рядов. Функции автоматической обработки повышают точность и воспроизводимость результатов, а также помогают уменьшить количество ошибок пользователя.

В этом документе описывается, как пользователи могут использовать *LIMS for Lasers 2015* для приборов Los Gatos Research и Picarro в своих повседневных лабораторных операциях. Чтобы облегчить использование *LIMS for Lasers 2015*, этот документ содержит ссылки на последние версии программного обеспечения. В данном документе термины «reference» и «standard» взаимозаменяемы.

Краткое описание преимуществ использования *LIMS for Lasers 2015* можно найти в данной публикации:[\[3\]](#)

Coplen, T. B., & Wassenaar, L.I. (2015). LIMS for Lasers 2015 for achieving long-term accuracy and precision of $\delta^2\text{H}$, $\delta^{17}\text{O}$, and $\delta^{18}\text{O}$ of waters using laser absorption spectrometry. Rapid Communications in Mass Spectrometry 29(22): 2122–2130. <http://dx.doi.org/10.1002/rcm.7372>

Авторами руководства по эксплуатации *LIMS for Lasers 2015* являются Леонард И. Вассенаар и Тайлер Б. Коплен. В широкомасштабных испытаниях *LIMS for Lasers 2015* на ежедневной основе принимали участие: Стефан Терцер, Седрик Дуэнс и Лилиана Пельтенштейн из МАГАТЭ. Отзывы и комментарии от Еши Шрешта, Лорен Брандес и Хайпин Ци из Геологической службы США помогли улучшить *LIMS for Lasers 2015* и руководство пользователя.

Содержание

1 Введение в LIMS for Lasers 2015	1
1.1 Что такое LIMS for Lasers 2015?	2
2 Обзор LIMS for Lasers 2015	4
2.1 Обзор LIMS for Lasers 2015	5
2.2 Контрольный список действий для стандартного запуска анализа проб	6
3 Требования к компьютеру (ПК) и программному обеспечению (ПО)	3
3.1 Требования к компьютеру (ПК) и программному обеспечению (ПО)	4
4 Начало работы с LIMS for Lasers 2015	6
4.1 Установка LIMS for Lasers 2015 – новая лаборатория	7
4.2 Переход с LIMS for Lasers 2012	11
4.3 Настройки LIMS for Lasers 2015 в лаборатории версия 9	11
4.4 База данных для быстрого запуска	12
4.5 Проверка версии LIMS for Lasers	13
4.6 Настройка параметров лаборатории	14
4.7 Расположение базы данных LIMS for Lasers 2015	15
5 Добавление новых лазерных приборов	17
5.1 Добавление лазерных приборов Los Gatos Research DLT-100 Series	18
5.2 Добавление лазерных инструментов Los Gatos Research серии IWA-35EP или TIWA-45EP	19
5.3 Добавление лазерных приборов Picarro	22
6 Заказчики, проекты и пробы	24
6.1 Добавление и редактирование заказчиков	25
6.2 Добавление проектов и проб	26
6.3 Создание нового проекта вручную	32
6.4 Создание проекта $\delta^{17}\text{O}$	35
6.5 Импорт нового проекта с помощью Excel	38
6.6 Настройка форм подачи данных в Excel	41
6.7 Советы по успешному использованию шаблонов Excel	44
6.8 Распечатка этикеток для проб и флаконов	46
6.9 Обзор незавершенных проектов	48
7 Стандартные образцы для изотопного анализа	50
7.1 Первичные и лабораторные стандарты изотопов	51
7.2 Добавление и изменение стандартов и контрольных стандартов	52
7.3 Присвоение лабораторным стандартам значения δ	56
7.4 Отслеживание стандартов с течением времени	59
8 Шаблоны анализа проб	60
8.1 Анализ проб в LIMS for Lasers 2015	61
8.2 Важность шаблонов анализа	62

8.3 Шаблоны систематического анализа.....	68
8.4 Создание шаблона анализа 30 проб для Los Gatos Research.....	75
8.5 Создание шаблона анализа 20 проб для Picarro.....	80
8.6 Распечатка многостраничного макета размещения проб.....	85
8.7 Добавление проб в шаблон анализа.....	86
8.8 Добавление проб в очередь анализа Picarro.....	87
8.9 Добавление проб в очередь анализа Los Gatos Research	88
8.10 Параметры добавления проб	90
8.11 Удаление проб из очереди.....	93
8.12 Повторные пробы в LIMS for Lasers 2015.....	95
8.13 Номер следующей пробы.....	96
9 Запуск проб на лазере Picarro	98
9.1 Создание списка проб для прибора Picarro.....	99
9.2 Импорт изотопных данных из Picarro	107
10 Запуск проб на лазере Los Gatos Research	113
10.1 Создание списка проб для Los Gatos Research	114
10.2 Импорт изотопных данных из Los Gatos Research.....	126
11 Импорт данных – параметры и ошибки.....	133
11.1 Объяснение параметров импорта данных.....	134
11.2 Сообщения об ошибках импорта данных.....	137
12 Нормализация, оценка и сохранение результатов	139
12.1 Нормализация данных по шкалам VSMOW и SLAP.....	140
12.2 Нормализация данных без «граничной» (bracketed) нормализации.....	145
12.3 Оценка анализов в ходе работы.....	147
12.4 Печать или экспорт проб в ходе работы	153
12.5 Сохранение окончательных результатов в проектах.....	154
12.6 Добавление сохраненных результатов обратно в текущие.....	156
12.7 Функция отслеживания контроля качества «Track My Lab QA/QC»	157
12.8 Запрос и изменение результатов и информации по пробе	160
13 Отчет о результатах изотопных исследований.....	165
13.1 Отчет о результатах $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{2}\text{H}$ и $\delta^{17}\text{O}$ для заказчика.....	166
13.2 Объединение результатов из нескольких проектов.....	171
13.3 Создание счета-фактуры по проекту.....	172
13.4 Экспорт в файл ASCII с текстом отчета.....	173
14 Источники и калибровка местных лабораторных стандартов	174
14.1 Источники первичных эталонов изотопов воды	175
14.2 Источники стандартных образцов для повседневного использования.....	176
14.3 Шаблоны анализа для калибровки местных стандартных образцов	177
14.4 Процедура создания шаблона калибровки.....	180
15 Спектральное загрязнение, часто задаваемые вопросы, файлы журналов	185

15.1 Накопление солей и спектральное загрязнение.....	186
15.2 Часто задаваемые вопросы (FAQ)	187
16 Утилита LIMS Data Viewer.....	190
16.1 LIMS Data Viewer.....	191
16.2 Требования к компьютеру (ПК) и программному обеспечению (ПО).....	192
16.3 Установка.....	192
Использованные источники	196
Примечания об изменениях в руководстве пользователя	198
Приложение 1. Шаблон для автоматического пробоотборника Picarro G2000	199
Приложение 2. Базы данных и рабочие листы для проектирования шаблонов	203
Приложение 3. Корректировка вариаций значений δ с изменением относительной концентрации водяного пара в анализаторе.....	205

1 Введение в LIMS for Lasers 2015

1.1 Что такое LIMS for Lasers 2015?

LIMS for Lasers 2015 – это система управления лабораторной информацией (Laboratory Information Management System, сокращенно – LIMS) для внеосевого лазерного прибора (OA-ICOS – off-axis integrated cavity output) Los Gatos Research и лазерных абсорбционных спектрометров с кольцевым резонатором (CRDS) Picarro, используемых для определения соотношения $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ (и, опционально, $\delta^{17}\text{O}$) в пробах жидкой воды в гидрологических и экологических исследованиях. *LIMS for Lasers 2015* предоставляет удобную среду в операционной системе Windows для управления заказчиками, проектами, пробами и инструментальными данными. *LIMS for Lasers 2015* также можно использовать на Apple Mac с помощью программ Boot Camp или Windows Virtual PC.

Характеристики

- Полная система отчетности по заказчикам, проектам и образцам
- Лазерный анализ проб и стандартные лабораторные калибровочные шаблоны
- График предварительной проверки работоспособности шприца
- Цветовая кодировка обнаруженных аномальных отклонений и автоматическая пометка ошибок
- Поправки значений δ на вариации относительных концентраций водяного пара в анализаторе
- Автоматическая коррекция эффекта «памяти» между соседними пробами
- Автоматическая коррекция нарастающей инструментальной ошибки измерения (инструментального дрейфа)
- Автоматическая нормализация данных по шкалам VSMOW-SLAP
- Отслеживание контроля качества для аудита инструментов и оценки лаборатории
- Шаблоны Excel для подачи проб от заказчиков

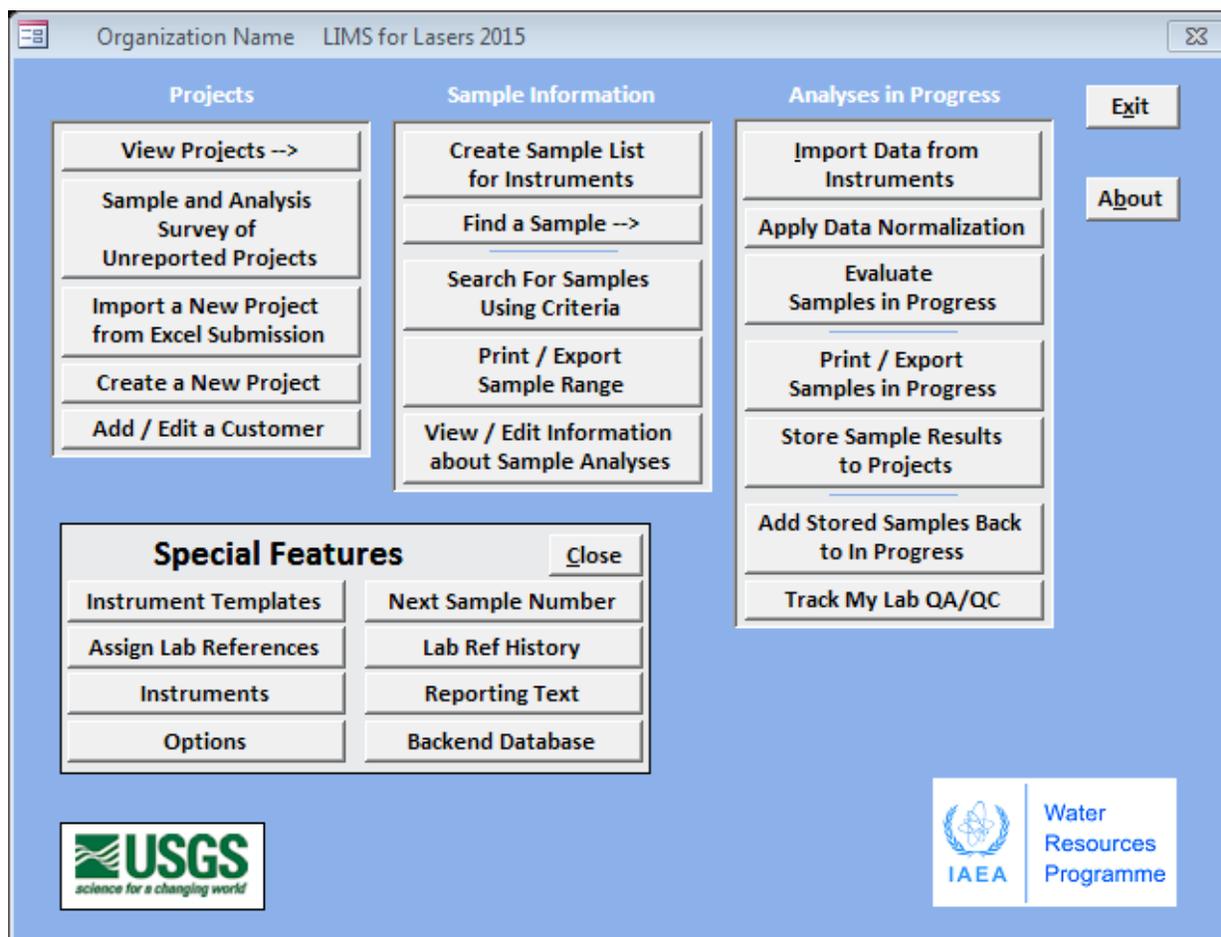
Преимущества

- Повышение производительности за счет исключения сложных электронных таблиц
- Повышение долгосрочной эффективности за счет стандартизованных подходов
- Снижение количества лабораторных ошибок при управлении заказчиками и данными
- Полностью совместима с *LIMS for Light Stable Isotopes* (LIMS для легких стабильных изотопов) v.9x для IRMS

LIMS for Lasers 2015 построена на 32-битном коде MS Access, используемом в *LIMS for Light Stable Isotopes*^[4], и может быть использована одновременно с основной базой данных v.9. *LIMS for Light Stable Isotopes* – это готовое проверенное программное обеспечение, разработанное и поддерживаемое Т.Б. Копленом в Геологической службе США (USGS) в Рестоне, Вирджиния, США. *LIMS for Lasers 2015* является результатом совместной работы Лаборатории изотопной гидрологии МАГАТЭ и Рестонской лаборатории стабильных изотопов (RSIL) Геологической службы США (USGS), и предоставляется пользователям бесплатно.

2 Обзор LIMS for Lasers 2015

2.1 Обзор LIMS for Lasers 2015



Интерфейс пользователя в LIMS for Lasers 2015.

Проекты	Информация о пробах	Текущие анализы
<ul style="list-style-type: none"> Показать проекты, распечатать отчеты, экспорт данных в Excel Проверить очередь проб Импортировать данные проектов из форм Excel Создать новый проект Добавить новых заказчиков 	<ul style="list-style-type: none"> Создать список проб, который может быть экспортирован в Los Gatos Research или Picarro instruments Найти, просмотреть, печатать и редактировать отдельные пробы заказчиков 	<ul style="list-style-type: none"> Импорт файлов полученных данных из приборов Los Gatos Research или Picarro Автоматическое определение и применение коррекции эффекта «памяти» между пробами и нарастающей инструментальной ошибки измерения Нормализация результатов по шкале VSMOW-SLAP Оценка результатов и отслеживание лабораторных показателей (обеспечения /контроля качества) Сохранить окончательные принятые результаты для отчета
Специальные функции		
<ul style="list-style-type: none"> Добавить/изменить лазерные инструменты Добавить/изменить лабораторные стандартные образцы Резервное копирование и настройка базы данных 		

- Проектирование шаблонов анализа

2.2 Контрольный список действий для стандартного запуска анализа проб

После установки *LIMS for Lasers 2015*, для запуска стандартной процедуры изотопного анализа проб воды, необходимо произвести ряд действий, список которых приведен ниже:

A. Колонка «Проекты»

1. Убедитесь, что заказчик добавлен в *LIMS for Lasers 2015* ([Раздел 6.1](#)).
2. Создайте новый проект для заказчика, либо при помощи ввода информации о пробе вручную, либо посредством импорта информации из файла Excel ([Разделы 6.3, 6.4](#)).
3. Добавьте пробы из Проекта Заказчика в очередь шаблонов лазерного анализа ([Разделы 8.8, 8.9](#)).

B. Колонка «Информация о пробе»

4. Создайте автоматический список проб для лазерного прибора и скопируйте его на USB-накопитель ([Разделы 9.1, 10.1](#)).

C. В лаборатории

5. Пипеткой наберите исследуемые пробы воды и лабораторные стандартные образцы в помеченные этикетками флаконы объемом 2 мл.
6. Расположите флаконы с пробами и с лабораторными стандартными образцами в соответствующих лотках и положениях ([Раздел 8.3](#)).

D. На лазерном приборе (инструменте)

7. Скопируйте файл со списком проб в лазерный прибор с USB-накопителя ([Разделы 9, 10](#)).
8. Проанализируйте пробы из списка проб на лазерном приборе Los Gatos Research или Picarro.
9. Скопируйте готовый автоматически созданный файл с полученными данными на USB-накопитель.

Е. Колонка «Текущие анализы»

10. Импорт Данных с прибора – используйте стандартные или пользовательские поправки ([Раздел 11](#)).
11. Примените нормализацию данных ([Раздел 12.1](#)).
12. Проведите оценку текущих анализов ([Раздел 12.3](#)).
13. Сохраните окончательные принятые результаты Проектов ([Раздел 12.5](#)).
14. Отследите QA/QC My Lab, чтобы оценить общую производительность ([Раздел 12.7](#)).

Ф. Колонка «Проекты»

15. Просмотрите Проекты – Отчет о результатах для заказчика ([Раздел 13.1](#)).

3 Требования к компьютеру (ПК) и программному обеспечению (ПО)

3.1 Требования к компьютеру (ПК) и программному обеспечению (ПО)

Требования

- ПК с операционной системой Windows с USB или LAN соединением с лазерным прибором. *LIMS for Lasers 2015* может быть использована на ПК Apple с использованием Windows Boot Camp или виртуального ПК с Windows.
- Microsoft Access 2007/2010/2013/2016 (только 32-разрядная) для Windows 7/8.1/10 (32/64-разрядная).
- Интерфейс *LIMS for Lasers 2015* (v.10.092 или более поздняя версия).
- Новая или существующая внутренняя база данных LIMS для текущих пользователей LIMS.
- Новое или существующее место для папки LIMS для внутренней базы данных (сеть или ПК).
- Образец электронной таблицы Excel для отправки заказчику или альтернативный образец книги Excel (доступен только на веб-сайте Геологической службы США (USGS)).

Программное обеспечение LIMS for Lasers 2015 состоит из 3 компонентов:

- Интерфейс пользователя *LIMS for Lasers 2015* (v10.092), или более поздняя версия;
- Внутренняя база данных *LIMS for Lasers 2015*;
- Образец шаблона Excel для отправки заказчику.

Последние версии программного обеспечения можно бесплатно загрузить с веб-сайтов IAEA или USGS:

http://www-naweb.iaea.org/napc/ih/IHS_resources_sampling.html#lims

<http://isotopes.usgs.gov/research/topics/lims.html>

По желанию (опционально)

- Сетевое подключение к лазерному прибору(ам);
- Резервный диск (сетевое или внешнее хранилище).

Настройки безопасности

LIMS for Lasers 2015 требует включения макросов. Для изменения этих настроек вам могут потребоваться права администратора. Включите MS Access для запуска всех макросов в | Центр управления безопасностью | Настройки центра управления безопасностью | Настройки макроса | *Включить все макросы*.

Настройка надежных расположений

LIMS for Lasers требует надежных расположений в Microsoft Access. Например, предположим, что C: \ LIMS – это расположение базы данных. Нам нужно будет добавить этот каталог в Надежные расположения в MS Access:

Access 2010/13: вкладка "Файл" | Опции | Центр доверия | Настройки центра управления безопасностью | Надежные расположения | Добавить новое место | Путь: C: \ LIMS, флажок: Подпапки являются надежными, нажмите «ОК»

Access 2007: кнопка Office | Параметры доступа | Центр доверия | Настройки центра управления безопасностью | Надежные местоположения | Добавить новое место | Путь: C: \ LIMS, флажок: Подпапки являются надежными, нажмите «ОК».

Примечание: Некоторые настройки безопасности на вашем компьютере могут не разрешать использование рабочего стола Windows в качестве надежного расположения.

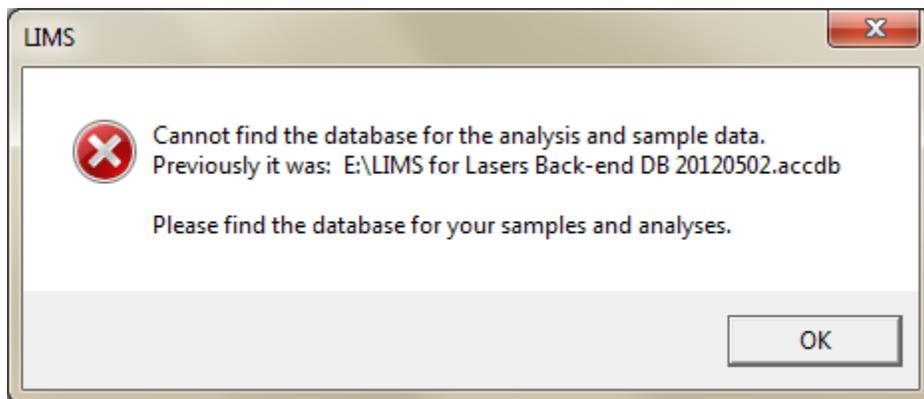
4 Начало работы с LIMS for Lasers 2015

4.1 Установка LIMS for Lasers 2015 – новая лаборатория

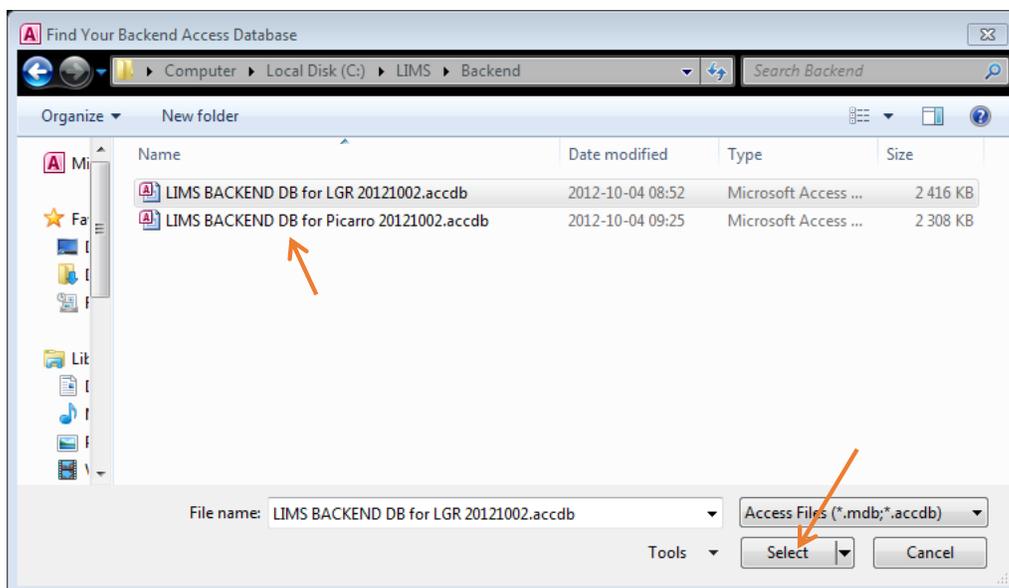
1. Создайте папку *LIMS for Lasers 2015* на любом жестком диске на ПК для пользовательского интерфейса, базы данных и резервных копий (например, C: \ LIMS). Папка LIMS должна находиться на выделенном для этого компьютере или на надежном (и желательно быстром) подключенном сетевом диске.
 - a. C:\LIMS\Backend (База данных)
 - b. C:\LIMS\Frontend (Внешний интерфейс)
 - c. C:\LIMS\Backup (Резервное копирование)
2. Убедитесь, что установлена программа Microsoft Access 2007/10/13/16 (только 32-разрядная). Убедитесь, что в MS Access есть папка C:\LIMS и вложенные папки, добавленные в качестве надежных расположений (см. [Раздел 3.1](#)).
3. Загрузите и извлеките *неоткрытую* версию последней версии внешнего интерфейса *LIMS for Lasers 2015* (например, LIMS for Lasers 2015 10.092.zip) в C:\LIMS\Frontend.
4. Загрузите и извлеките *неоткрытую* базу данных (backend) для конкретных приборов для новой лаборатории (например, LIMS Backend for Picarro.zip) в C:\LIMS\Backend.
5. Переименуйте базу данных LIMS с названием, которое описывает вашу лабораторию, например «My Laboratory LIMS Backend.accdb».
6. Сохраните резервные копии исходных неоткрытых ZIP-файлов.
7. В папке Frontend откройте файл «LIMS for Lasers 2015 10.092.accdb» или более позднюю версию. Вы также можете создать ярлык Windows для этого файла на рабочем столе для облегчения доступа.
8. Если вы столкнулись с таким (см. ниже) предупреждением системы безопасности, значит «Надежные расположения» не были настроены должным образом – см. [Раздел 3.1](#):



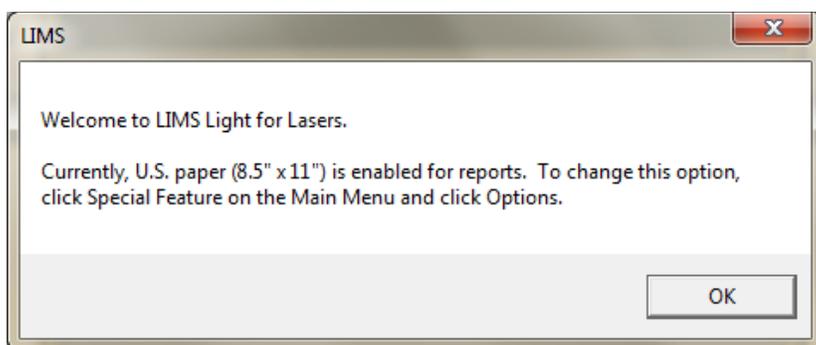
9. Нажмите “Open” (предупреждение не появится, если надежные расположения установлены правильно).
10. *LIMS for Lasers 2015* спросит, где находится база данных “Backend”.



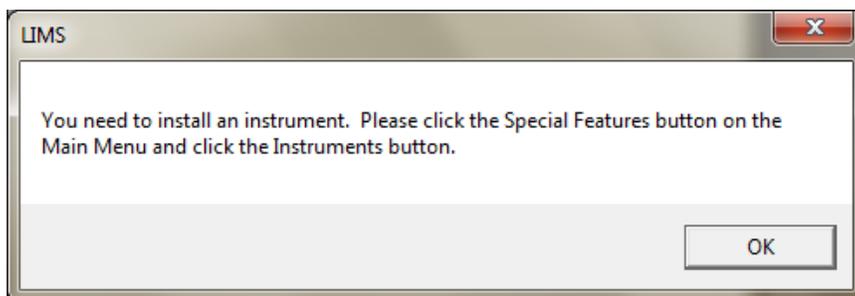
11. Нажмите “OK”, и используйте диалоговое окно файла для перехода к C:\LIMS\Backend и “Select” новый Picarro или Los Gatos Research, или недавно переименованный файл базы данных (backend), который вы скопировали ранее на этапах 4 или 5.



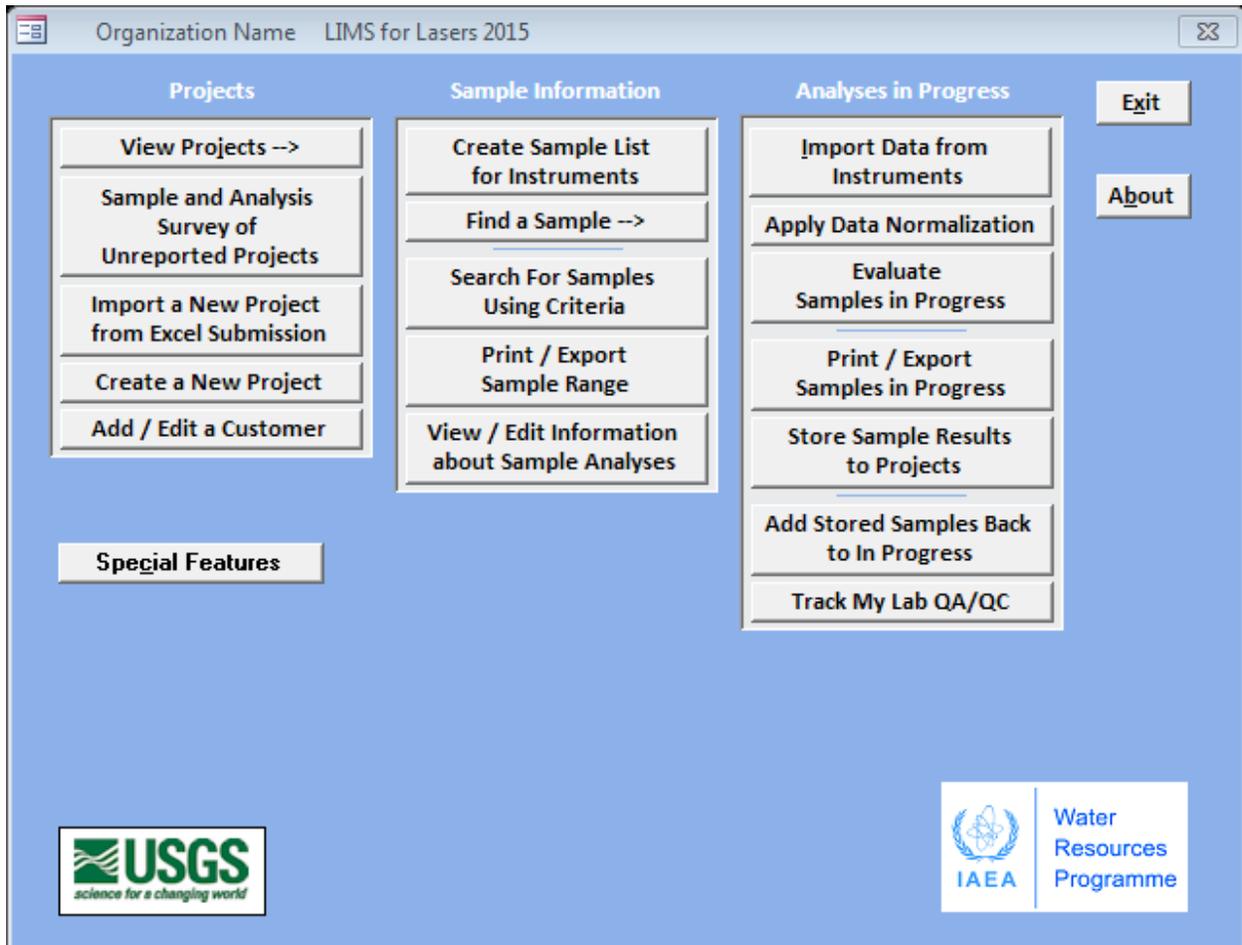
12. Затем появится сообщение-приветствие, нажмите «ОК» (появится предупреждение безопасности, если надежные расположения не были настроены), нажмите “Select”:



13. Может появиться напоминание о необходимости установки лазерного прибора в вашу лабораторную базу данных. Нажмите «ОК». Появится еще одно напоминание о настройке ежедневного резервного копирования. Нажмите «ОК» еще раз.



14. Теперь *LIMS for Lasers 2015* успешно установлена. Так должен выглядеть ваш экран при запуске:



LIMS for Lasers 2015 Main Page.

Регистрация для получения поддержки

Рекомендуется зарегистрировать *LIMS for Lasers 2015* по электронной почте tbcoplen@usgs.gov. Регистрация гарантирует, что вы будете в курсе важных обновлений. Также всегда приветствуются предложения пользователей по улучшению *LIMS for Lasers 2015*, сообщения об ошибках и предлагаемые улучшения в руководстве пользователя.

Примечание: для пользователей из Европы и других стран в региональных настройках Windows в панели управления компьютера может быть установлена точка или запятая в качестве десятичного разделителя. *LIMS for Lasers 2015* будет работать правильно при любом выборе. В данном документе при отображении чисел использована точка в качестве десятичного разделителя.

4.2 Переход с LIMS for Lasers 2012

Для Лабораторий, использующих исходную версию *LIMS for Lasers* (например, <v.10.69) с 2012 г., выполните ту же процедуру для новой лаборатории (см. Выше), но используйте существующий файл базы данных внутренней базы *LIMS for Lasers*. Потребуется перезапуск *LIMS for Lasers 2015*. Существующая внутренняя база данных остается неизменной.

4.3 Настройки LIMS for Lasers 2015 в лаборатории версия 9

Для лабораторий, использующих *LIMS for Light Stable Isotopes v.9x* (для легких стабильных изотопов), выполните ту же процедуру для новой лаборатории (см. выше), но используйте существующий внутренний каталог LIMS v.9x. Предупреждения игнорируйте. На шаге 11 выберите существующую внутреннюю базу данных LIMS (v.9x). Потребуется перезапуск *LIMS for Lasers 2015*.

Примечание: при использовании базы данных v.9x пользователю будет видна только среда «W» (например, водные $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$) и лазерные приборы. Это сделано для того, чтобы никакие масс-спектрометры изотопного соотношения (IRMS) или любые другие изотопные среды (например, C-> карбонаты, S-> сера и т. д.) не были видны, *даже если они все еще присутствуют в базе данных*. Значения $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ проб воды, проанализированных с помощью IRMS, также будут показаны в *LIMS for Lasers 2015*, и их можно оценить с помощью любых значений δ , полученных на лазерном приборе. Внутренняя база данных находится в безопасности, а все настройки версии v.9x сохранены. Вы можете легко переключаться между *LIMS for Light Stable Isotopes* и *LIMS for Lasers 2015*. Персонал лаборатории, использующий только лазерные приборы, например, может предпочесть использовать только *LIMS for Lasers 2015* с учетом её новых функций.

Примечание: когда новые проекты по анализу изотопов воды добавляются с использованием v.9x, при запуске система *LIMS for Lasers 2015* будет предупреждать пользователя о том, что проект был создан с использованием *LIMS for Light Stable Isotopes v.9x*. Это уведомление носит исключительно информационный характер.

4.4 База данных для быстрого запуска

В последующих главах руководства мы описываем, как использовать *LIMS for Lasers 2015*, добавлять новые лазерные инструменты, проектировать и создавать новые шаблоны анализа, измерять и нормализовать данные и сообщать результаты. Рекомендуем изучить данное руководство для того, чтобы полностью разобраться в программном обеспечении.

Чтобы новые пользователи могли быстро начать работу, мы предоставили отдельные «готовые» базы данных для *LIMS for Lasers 2015* и шаблоны анализа изотопов в воде для лазерных приборов Los Gatos Research и Picarro. Базы данных можно скачать (см. [Раздел 3.1](#)), и они включают:

- Программное обеспечение прибора Picarro имеет идентификационный код «P» (по умолчанию).
- Программное обеспечение прибора Los Gatos Research имеет идентификационный код «L» (по умолчанию).
- Используется шаблон из 10, 20 или 30 проб с лабораторными стандартами USGS.
- Присвоение значений для местных лабораторных стандартов измерения и контроля осуществляются пользователем, и *должны редактироваться пользователем* – они изначально установлены на нулевые значения, или используются лабораторные эталоны изотопных вод USGS.

Для пользователей Los Gatos Research:

1. Загрузите базу данных *LIMS for Lasers 2015* для Los Gatos Research по ссылке, указанной выше.
2. Просмотрите [Разделы 4–8](#), чтобы настроить *LIMS for Lasers 2015*, а также отредактировать или добавить свои местные стандарты измерения и создать шаблоны анализа.
3. Затем перейдите к [Разделу 8.9](#), чтобы приступить к измерению проб.

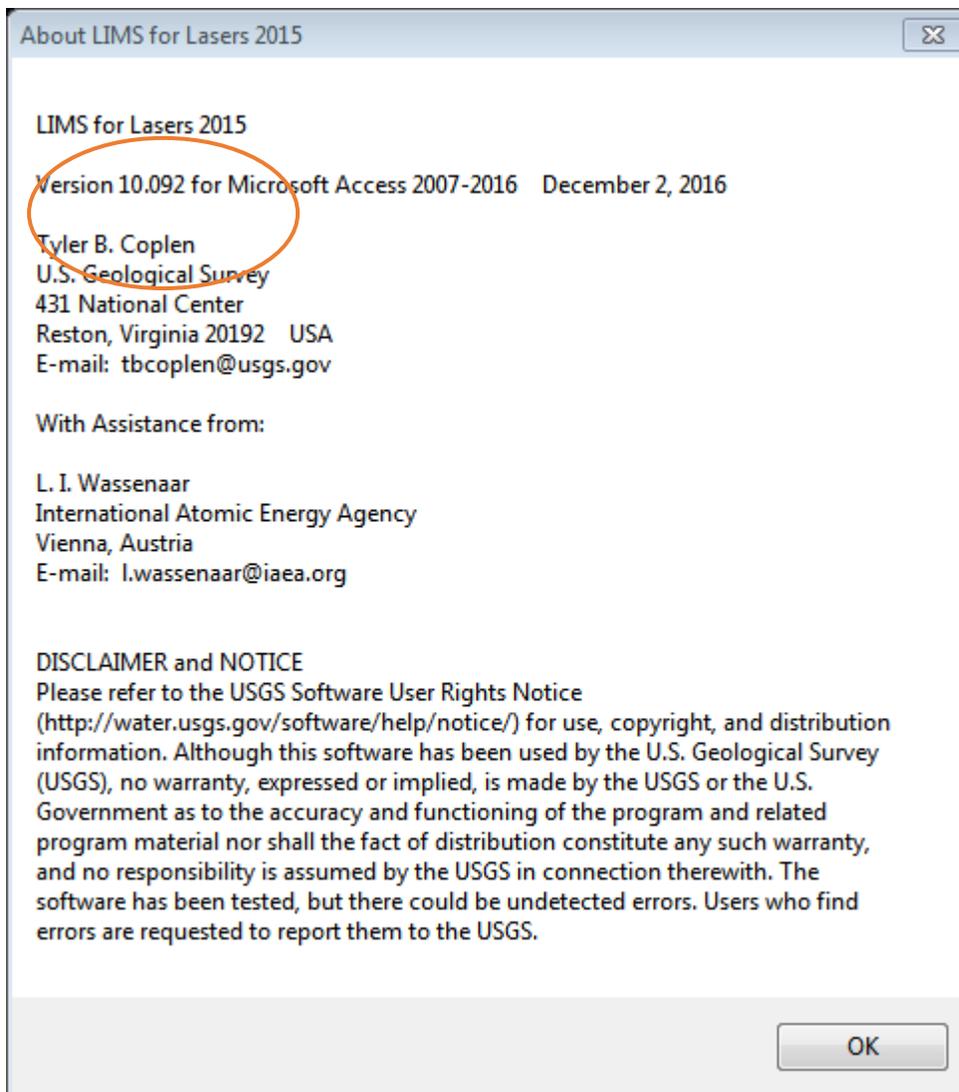
Для пользователей Picarro:

1. Загрузите базу данных *LIMS for Lasers 2015* для Picarro по ссылке, указанной выше.
2. Просмотрите [Разделы 4–8](#), чтобы настроить *LIMS for Lasers 2015*, а также отредактировать или добавить свои местные стандарты измерения и создать шаблоны анализа.
3. Затем перейдите к [Разделу 8.8](#), чтобы приступить к анализу проб.

4.5 Проверка версии LIMS for Lasers

Программное обеспечение *LIMS for Lasers* постоянно обновляется, опираясь на отзывы пользователей. Обновления размещаются по указанным выше ссылкам. Чтобы определить, какую версию *LIMS for Lasers* вы используете, нажмите меню “About” на главной странице (см. ниже).

Чтобы обновить *LIMS for Lasers*, загрузите новый zip-файл и извлеките пользовательский интерфейс. Выполните шаг 3, а затем шаг 7 из [Раздела 4.1](#). Если вы ранее создали на рабочем столе Windows ярлык для папки внешнего интерфейса, обязательно обновите ярлык до более новой версии.



4.6 Настройка параметров лаборатории

Перед добавлением лазерного инструмента(ов) в *LIMS for Lasers 2015* вам следует внести изменения в информацию о вашей собственной лаборатории (местоположение, название лаборатории, размер бумаги, принтеры и т. д.). Эти настройки создают новый файл в каталоге LIMS с именем «LM9PREFS.ACCDB», в котором хранятся данные вашей лаборатории. В зависимости от настроек компьютера расширение файла .ACCDB может не отображаться.

Файл «Preferences» должен находиться в том же каталоге, что и интерфейсный файл LIMS. Если файл LM9PREFS был удален по ошибке, ваши настройки будут потеряны, и LIMS вернется к значениям по умолчанию, если у вас установлен обновленный интерфейс *LIMS for Lasers 2015*. Однако, если вы переместите интерфейсный файл в новую папку и забудете переместить LM9PREFS.ACCDB, *LIMS for Lasers 2015* создаст другой файл настроек с вашими пользовательскими лабораторными настройками.



Для защиты от ошибочного ввода и удаления, все редактируемые формы в *LIMS for Lasers 2015* требуют, чтобы пользователь нажал кнопку (“Edit”) в верхней части экрана, прежде чем можно будет внести изменения. Сначала это может мешать Вам – помните, что это сделано для вашей защиты! Запомните «Нажать Edit» – и это станет привычным действием.

На Главной Странице – нажмите “Special Features”/«Options». Нажмите “Edit” (теперь элемент управления изменится на “Save”).

- Введите название вашей организации; выберите страну и размер бумаги для принтера.
- Выбор «Любой установленный принтер» (“Any Installed Printer”) вызовет диалоговое окно «Принтер Windows» вместо немедленной печати на принтер по умолчанию.
- Максимальное использование LIMS обеспечивает отображение полной страницы ввода на вашем дисплее. Функции выставления счетов не являются обязательными – включите или отключите по желанию.
- Идентификатор пробы и сокращенная информация о проекте добавляют больше деталей к распечаткам списков проб, поскольку различные лаборатории предпочитают разный уровень детализации в своих отчетах.

Настраиваемые пользователем параметры, расположенные справа, полностью описываются в [Разделе 6.5](#). Возможность создания счета-фактуры описывается в [Разделе 13.3](#).

Когда закончите, нажмите “Save”, затем нажмите «Close», и снова – «Close», чтобы вернуться на Главную Страницу.

4.7 Расположение базы данных LIMS for Lasers 2015

Мы рекомендуем убедиться, в том, что расположения вашей базы данных *LIMS for Lasers 2015* и хранилища резервных копий правильно настроены, и что резервное копирование выполняется регулярно.

1. Нажмите на “Special Features”.
2. Нажмите на “Backend Database” – откроется следующий экран:

BackEnd and FrontEnd Databases

As a Microsoft Access database is used, it expands. To remove the unused space and reduce file size, users can set LIMS to compact automatically the frontend LIMS database. This process is similar to defragmenting a disk drive.

Users may compact the backend LIMS database as follows.

1. Close LIMS and make a backup of the backend LIMS database in case of problems.
2. In Office 2007 - 2013, open the backend database.
3. Click the Office button.
4. Select Manage, Compact and Repair database.

Back-end LIMS database

Back-end Database Location:



Compact LIMS back-end database once (next time LIMS closes)

Country/Location Codes

Version of Country/Location Codes in Backend DB

Monday To Sunday Backups of Back-end LIMS database

Enable creation of as many as 7 backups (Monday, Tuesday, Wednesday, Thursday, Friday, Saturday, and Sunday)

Location of Monday to Sunday Backups of Back-end Database:

Front-end LIMS database

Front-end Database Location and Name:

Always compact LIMS front-end database when closing LIMS

3. В разделе “Backend Database location” будет установлено местоположение, указанное выше. Если нет, нажмите “Connect to a Different Backend Database” и перейдите в папку необходимой базы данных LIMS.
4. Указав параметр сжатия, вы получите напоминание, когда база данных будет увеличиваться в объеме, чтобы время от времени сжимать ее.
5. Включите (или отключите) резервное копирование и укажите местоположение. LIMS использует 7-дневный цикл резервного копирования (например, по понедельникам), что дает вам 1 неделю резервной защиты.

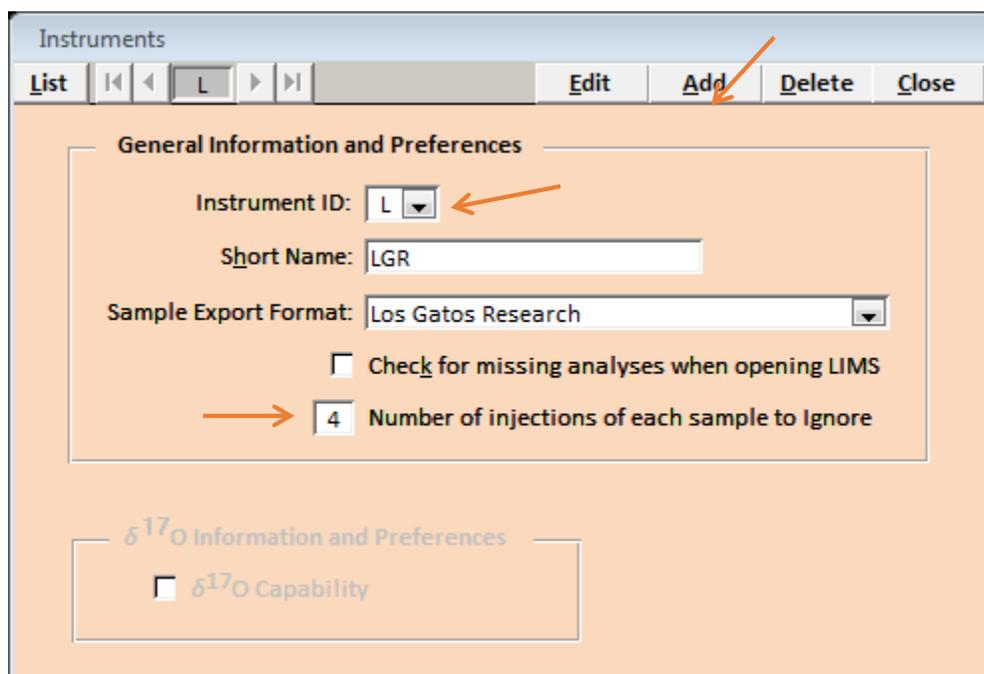
Примечание: резервные копии создаются только после закрытия *LIMS for Lasers 2015* и не являются самостоятельными или автоматическими резервными копиями. Пользователям настоятельно рекомендуется использовать другие обычные формы автоматического или удаленного резервного копирования (сеть, DVD, USB-накопитель, облако и т. п.).

5 Добавление новых лазерных приборов

5.1 Добавление лазерных приборов Los Gatos Research DLT-100 Series

Чтобы просмотреть, установить или удалить изотопные лазерные приборы серии DLT-100/24D компании Los Gatos Research 2007–2013 в *LIMS for Lasers 2015*:

1. Нажмите “Special Features”.
2. Нажмите “Instruments” для просмотра.
3. На экране ниже нажмите “Add”.



Пример: приборы для измерения изотопов воды Los Gatos Research серии DLT-100 старого поколения.

4. Выберите или введите “L” в поле кода инструмента Instrument ID
5. Введите короткое описательное название прибора Los Gatos Research.
6. В выпадающем списке “Sample Export Format” выберите «Los Gatos Research».

Чтобы удалить прибор Los Gatos Research, нажмите на “Delete”.

Если изотопные анализы для прибора уже были импортированы в *LIMS for Lasers 2015*, прибор нельзя удалить.

5.2 Добавление лазерных инструментов Los Gatos Research серии IWA-35EP или TIWA-45EP

Чтобы просмотреть, установить или удалить новые (с 2014 г. по настоящее время) приборы Los Gatos Research IWA-35EP или TIWA 45-EP в *LIMS for Lasers 2015*:

1. Откройте *LIMS for Lasers 2015*
2. Нажмите “Special Features”.
3. Нажмите “Instruments” для просмотра.
4. Нажмите “Add”. Затем отредактируйте, как указано ниже.

The screenshot shows the 'Instruments' dialog box with the following fields and options:

- Instrument ID:** L
- Short Name:** TIWA 45EP
- Sample Export Format:** Los Gatos Research 2014
- Check for missing analyses when opening LIMS
- Number of injections of each sample to Ignore: 4
- δ¹⁷O Information and Preferences**
 - δ¹⁷O Capability

Пример: Более новые приборы для определения изотопов в воде Los Gatos Research TIWA45 EP.

5. Выберите или введите “L” в поле кода инструмента (примечание: эту букву можно изменить на приборе, и она должна совпадать с кодом в выходном файле прибора).
6. Введите короткое описательное название прибора Los Gatos Research.
7. В выпадающем списке “Sample Export Format” выберите “Los Gatos Research 2014”.
8. При желании, если прибор поддерживает $\delta^{17}\text{O}$, установите этот флажок.
9. Нажмите “Save”, затем нажмите “List” – здесь должен появиться новый инструмент Los Gatos Research.

Чтобы удалить прибор Los Gatos Research, нажмите на “Delete”.

Если изотопные анализы для прибора LGR уже были импортированы в *LIMS for Lasers 2015*, прибор нельзя удалить.

Количество инъекций (вводов пробы)

Для получения наилучших результатов на приборах Los Gatos Research мы рекомендуем в общей сложности 9 инъекций на пробу и рекомендуем игнорировать первые 4 инъекции (как установлено в конфигурации прибора). Обоснование игнорирования инъекций и других опций см. в описании шаблонов ([Раздел 8.2](#)).

Число игнорируемых инъекций зависит от прибора и должно быть меньше общего числа инъекций пробы, как определено в шаблоне анализа (“Analysis Template”).

Код прибора

Код идентификатора (ID) прибора «L» является предустановленным по умолчанию для всех новых приборов Los Gatos Research. Для лабораторий, имеющих два или более приборов Los Gatos Research, идентификационный код должен быть уникальным для каждого прибора (L, M, N...).

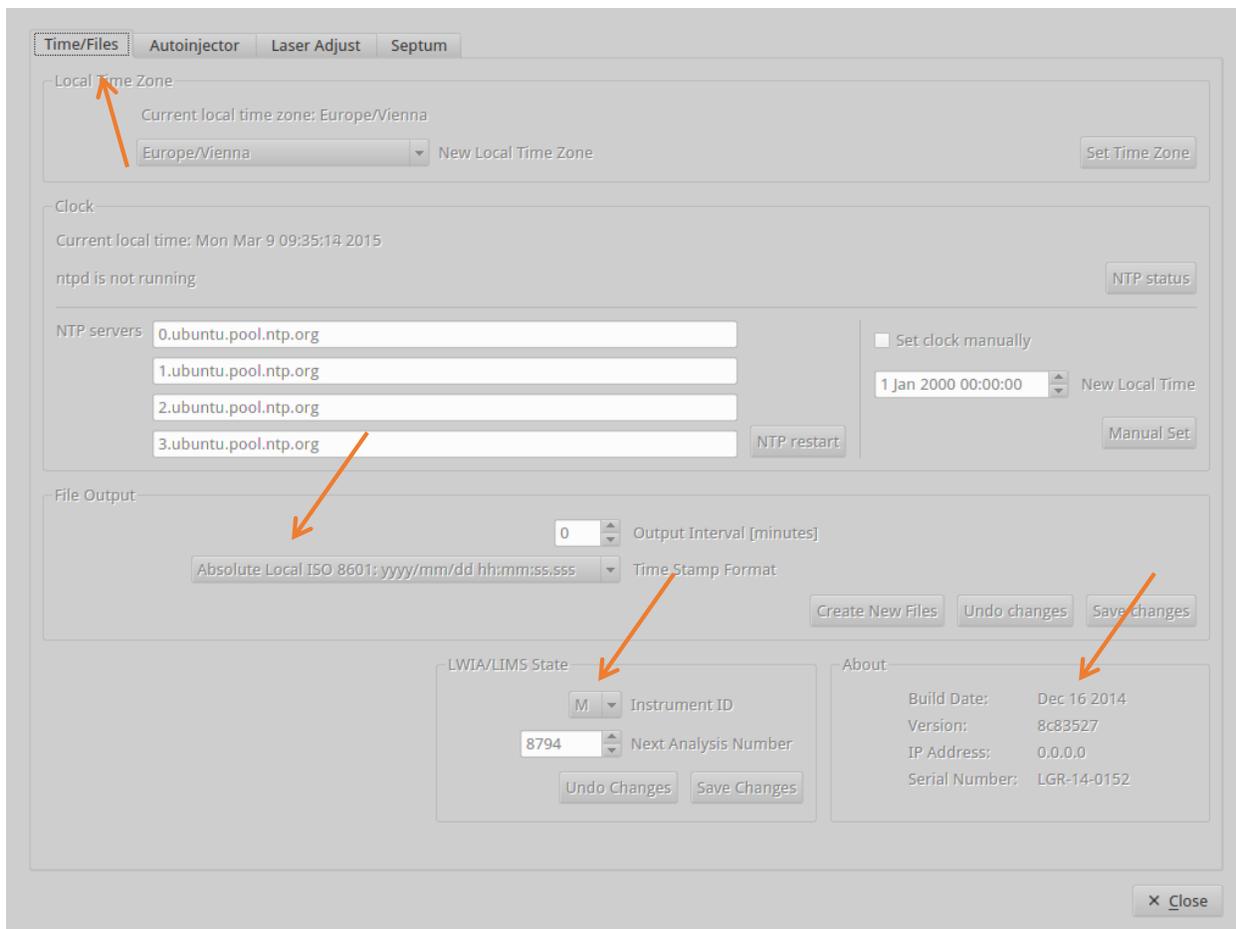
- На старых приборах DLT-10/24D (программное обеспечение LGR первого поколения) для изменения кода прибора требуется доступ к оболочке LINUX на приборе Los Gatos Research и незначительное редактирование файла INI прибора. Свяжитесь с Los Gatos Research для получения инструкций о том, как изменить идентификатор кода прибора по умолчанию на старых инструментах.
- На новых приборах LIWA/TIWA-35/45EP (новое программное обеспечение, с 2014 г. по настоящее время) код прибора можно легко изменить на панели настроек прибора (см. Руководство пользователя Los Gatos Research LWIA /TIWA и рисунок на следующей странице).

Кнопка LIMS на вашем приборе Los Gatos неактивна?

- Некоторые ранние приборы LIWA/TIWA-35/45EP поставлялись без возможности LIMS. На главном экране вы можете не видеть кнопки или видеть неактивную кнопку LIMS.
- Чтобы исправить это, требуется обновление прошивки от Los Gatos Research, которое может быть установлено пользователем примерно за 10–15 минут. Требуемая установка прошивки должна быть проверена на приборе на вкладке «Setup» -> «Time/Files». В правом нижнем углу проверьте дату сборки программного обеспечения (см. рисунок ниже). Должно быть так:
 - Build Aug 6, 2015 или позже – для двух-изотопных ($\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$) приборов;
 - Build Dec 16, 2014 или позже для трех-изотопных ($\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$, $\delta^{17}\text{O}$) приборов.

Требуемый формат даты для выводов LIMS

- Требуемый формат даты для LIMS – “Absolute Local ISO 8601”. Проверьте вкладки «Setup» -> «Time/Files», чтобы изменить настройки. (см. рисунок ниже)



Изменение Кода ID прибора Los Gatos Research и формата даты на вкладке «Time/Files».

Внимание: если у вас несколько лазерных приборов, убедитесь, что у них разные буквы ID прибора. *LIMS for Lasers 2015* отслеживает данные выборки от каждого прибора через код ID прибора.

Внимание: если вы осуществляете возврат прибора для ремонта, а компания Los Gatos Research заменяет жесткий диск, убедитесь, что Los Gatos Research возвращает букву кода и номер анализа на значения, указанные на приборе на момент его возврата для ремонта.

5.3 Добавление лазерных приборов Picarro

Чтобы просмотреть, установить или удалить изотопные лазерные приборы Picarro (11xx-2xxx поколений) в *LIMS for Lasers 2015*:

1. Откройте *LIMS for Lasers 2015*
2. Нажмите “Special Features”.
3. Нажмите “Instruments” для просмотра.
4. На экране ниже нажмите “Add”.

The screenshot shows the 'Instruments' configuration window. The title bar contains 'Instruments' and buttons for 'P', 'Save', and 'Cancel'. The main area is divided into two sections. The first section, 'General Information and Preferences', contains the following fields: 'Instrument ID' (dropdown menu with 'P' selected), 'Short Name' (text box with 'Picarro 2140i'), 'Sample Export Format' (dropdown menu with 'Picarro' selected), an unchecked checkbox for 'Check for missing analyses when opening LIMS', and a numeric field set to '4' for 'Number of injections of each sample to ignore'. The second section, 'δ¹⁷O Information and Preferences', contains a checked checkbox for 'δ¹⁷O Capability'. Orange arrows point to the 'P' in the Instrument ID field, the 'Picarro' in the Sample Export Format dropdown, and the checked 'δ¹⁷O Capability' checkbox.

5. Введите “P” в поле кода инструмента.
6. Введите короткое описательное название прибора Picarro.
7. Из выпадающего списка “Sample import format” выберите Picarro. Если прибор Picarro – 2140i или более поздней модели с возможностью анализа δ¹⁷O, установите флажок δ¹⁷O.
8. Нажмите “Save”, затем нажмите “List” – новый прибор Picarro должен появиться здесь.

Для получения наилучших результатов на приборах Picarro, мы рекомендуем в общей сложности 8 инъекций на пробу и рекомендуем игнорировать первые 4 инъекции (показано выше). Обоснование игнорирования инъекций и других опций см. в описании шаблонов ([Раздел 8.2](#)).

Чтобы удалить прибор Picarro, нажмите “Delete”.

Если изотопные анализы для прибора Picarro уже были импортированы в *LIMS for Lasers 2015*, прибор нельзя удалить.

Количество инъекций (вводов пробы)

Количество игнорируемых инъекций зависит от прибора. Общее количество инъекций для каждого флакона с пробой воды на приборах Picarro устанавливается на портативном устройстве PAL (например, серия 11xx) или в программном обеспечении конфигуратора автоматического пробоотборника G2000 (например, серия 21xx).

Код прибора

Идентификационный код «Р» закодирован в программном обеспечении Picarro Coordinator INI. Для лабораторий, имеющих два или более приборов Picarro, этот код должен быть уникальным для каждого прибора (например, P, Q, T). Для этого потребуется вручную отредактировать правильный файл(ы) Coordinator.ini с помощью NotePad ++ и просто указать в поле “Instrument ID” новую выбранную букву.

Примечание: для каждого метода существует несколько INI-файлов координатора (например, высокая точность, высокая пропускная способность, ^{17}O в N_2 и т. д.). Поэтому вам может потребоваться изменить код прибора в нескольких файлах INI при использовании нескольких режимов. Это не сложная задача; обратитесь в службу поддержки Picarro для получения подробных инструкций по изменению кода ID прибора по умолчанию для вашей конкретной конфигурации прибора.

Внимание: если у вас несколько лазерных приборов, убедитесь, что у них разные буквы ID прибора. *LIMS for Lasers 2015* отслеживает данные выборки от каждого прибора через ID код прибора.

Внимание: если вы осуществляете возврат прибора в Picarro для ремонта, а они заменяют жесткий диск, убедитесь, что Picarro установил букву кода и номер анализа на те значения, которые были на инструменте, когда вы вернули его для ремонта.

6 Заказчики, проекты и пробы

6.1 Добавление и редактирование заказчиков

Прежде чем пробы изотопов воды можно будет анализировать и составлять отчеты с помощью *LIMS for Lasers 2015*, они должны быть связаны с заказчиком (“Customer”) и его проектом (“Project”). Заказчик обычно является лицом, ответственным за отправку проб, и которому будут сообщаться результаты содержания стабильных изотопов. Заказчиком может быть лабораторный и технический персонал. *LIMS for Lasers 2015* отслеживает всех заказчиков лаборатории и связанную с ними информацию.

Список заказчиков может быть предварительно заполнен заказчиками, или же заказчики могут быть добавлены позже в отдельном порядке. Всегда проверяйте наличие заказчика, прежде чем пытаться создавать новые проекты. Обращайте внимание на правильное наименование и избегайте дублирования одного и того же имени заказчика (например, Билл Смит, Уильям Смит).

Чтобы добавить нового заказчика (“Customer”):

1. На Главной странице LIMS в колонке «Projects» нажмите “Add/Edit a Customer”.
2. Нажмите “Add”.
3. Введите Фамилию, Имя и, по желанию, другую контактную информацию.
4. Нажмите “Save”, затем нажмите “List”, чтобы просмотреть ваш текущий список заказчиков.

Чтобы удалить заказчика, нажмите “Delete”.

Customers

List Edit Add Delete Close

4

General Information

Customer Number: 4 Last Edit: 2013-05-23 11:48:26

Last Name: Wassenaar

First Name: Leonard

Middle Name:

Institution: International Atomic Energy Agency

Address Line 1: Isotope Hydrology Section

Address Line 2: Wagramerstrasse

City: Vienna

Country: AT --> Austria

State/Province: 009 --> , Wien (Vienna)

Postal Code:

Phone:

Email: L.Wassenaar@iaea.org

Fax:

Минимальная необходимая информация – это фамилия и имя Заказчика; все остальные поля необязательны. Информация о заказчике может быть обновлена позже, выбрав имя заказчика в меню “List” и нажав “Edit”. Запись “Reference” и “Test” в поле заказчика представляют собой предварительно заданные записи, которые можно использовать для текущих лабораторных тестов или как калибровочные образцы или стандарты.

Примечание: заказчика нельзя удалить, если в его проекте уже сохранены изотопные данные.

6.2 Добавление проектов и проб

Проект определяется как один набор проб воды, представленных одним заказчиком для анализа $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}/\delta^{17}\text{O}$ для определенной цели и/или из определенного места (например, название проекта, местоположение).

LIMS for Lasers 2015 поставляется с предварительно заполненными проектами для международных первичных эталонов (например, VSMOW2, SLAP2) и для ваших собственных лабораторных эталонов. Также включен тестовый проект, который обычно

используется для контрольных образцов или заранее известных образцов. Эти проекты не следует удалять. В рамках этих специальных проектов можно добавлять и редактировать ваши лабораторные стандарты измерения и анализы воды.

Новые проекты заказчиков создаются одним из двух способов:

- Ввод данных о заказчике и всей выборочной информации вручную
- Автоматический импорт образцов заказчика с использованием шаблона отправки в Excel

Второй вариант может быть более предпочтительным, поскольку он содержит информацию, предоставленную заказчиком, и обычно сопровождает пробы воды, поступающие в лабораторию. Импорт информации о проекте из шаблона Excel предпочтительнее, поскольку он гарантирует отсутствие типографских ошибок сотрудниками лаборатории (см. Шаблоны отправки в Excel).

Submission	LastName	Range	Purpose	Location	Reported
1/1/1995	Reference	W-4	Reference Gas Proxy for Lasers - Do not delete		9/1/2012
9/27/2012	Test	W-1 to W-2	Test or Dummy Samples		9/27/2012
9/27/2012	Reference	W-3	Wash and Conditioning Sample		9/27/2012
9/27/2012	Reference	W-5 to W-30	International References		9/27/2012
9/27/2012	Reference	W-31 to W-69	Lab References		9/27/2012

Сводная страница проектов.

Поиск проектов

Поскольку проекты накапливаются в базе данных с течением времени, *LIMS for Lasers 2015* содержит мощные возможности поиска для быстрого поиска проектов заказчиков и данных. Можно искать проекты, используя комбинацию критериев полной и частичной информации:

- Имя заказчика;
- Цель: содержит указанный текст, например Leakage;
- До и/или после какой-либо даты;
- Завершенные или незавершенные проекты;
- Местоположение проекта; содержит указанный текст местоположения, например Техас.

Сортировка проектов

Быструю сортировку проектов можно выполнить, щелкнув нужный заголовок, например «Submission Date», «Lastname», «ID Range», «Purpose Location» или дата отправки или отчета.

Отчетность и экспорт проектов

Поиск, экспорт и объединение нескольких проектов в один отчет или комбинированный файл Excel выполняется на странице обзора проекта. Сводные списки всех, найденных или отсортированных, лабораторных проектов можно распечатать или сохранить в файлах Excel. Данная функция обеспечивает быстрый способ поиска, сбора и обобщения информации о производительности лаборатории, например, для годовых отчетов (например, сколько проб и проектов завершила лаборатория в 2015 году).

Find Project

Select Project Criteria

Name: Purpose contains:

After (date): Location contains:

Before (date): Projects Ready To Report

Search

List of Selected Projects

Save Print

Remove a project from the window below by pressing the Delete key on the keyboard (does not remove the project from LIMS)

Submission	LastName	Range	Purpose	Location	Reported
1/1/1995	Reference	W-4	Reference Gas Proxy for Lasers - Do not delete		9/1/2012
9/27/2012	Test	W-1 to W-2	Test or Dummy Samples		9/27/2012
9/27/2012	Reference	W-3	Wash and Conditioning Sample		9/27/2012
9/27/2012	Reference	W-5 to W-30	International References		9/27/2012
9/27/2012	Reference	W-31 to W-69	Lab References		9/27/2012

Информация о проекте

Чтобы открыть проект, выберите и дважды нажмите выделенный проект на странице «View Projects». В нижней части панели просмотра отображается сводка обязательной и дополнительной информации о проекте, в том числе:

- «Submission» – дата, когда пробы прибыли или были зарегистрированы (обязательно).
- “Customer” – имя заказчика (обязательно).
- «Purpose» – описательное поле с возможностью поиска (необязательно).
- «Location» – описательное поле с возможностью поиска (необязательно).
- «Range» (номера W-XX автоматически присваиваются LIMS).
- “Project comments” – поле для комментариев или другой соответствующей информации о проекте (необязательно).
- Общее количество проб, а также тип и количество проб, которые необходимо заполнить.
- Дата, когда окончательные результаты были сообщены заказчику.

The screenshot displays the 'Projects' interface. At the top, there is a navigation bar with 'List All Projects', a page number '30', and a 'Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project' button. Below this are several action buttons: 'Show Samples' (with a red arrow pointing to it), 'Export Results', 'Delta Plot', 'Invoice', 'Print Labels', 'Print Report', 'Find Project By Invoice No', and 'Print Small Labels'. The main content area is titled 'General Information' and includes the following fields:

- Submission:** 6/6/2006
- Delta Values:** $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$
- Date Results Reported:** 2/1/2012
- Customer:** Reference
- Range:** W-31 to W-69
- Purpose:** IAEA Lab Standards & Controls
- Location:** Vienna
- Project Comments:** (empty text area)

At the bottom, there is a summary of sample counts:

- Number of samples with missing delta values: 22 of 39 samples
- Number of Missing $\delta^2\text{H}$ Samples: 21
- Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 22

В верхней части панели проекта (серые кнопки) отображаются несколько элементов действий, которые применяются к открытому проекту. Это включает:

- Редактирование и просмотр информации об отдельных пробах в Show Project Samples.
- Добавление проб в шаблон прибора (голубым цветом).
- Создание/Отображение сопутствующего проекта для $\delta^{17}\text{O}$ (необязательно).
- Печать этикеток для образцов или флаконов для анализа.
- Печать копии отчета по проекту для заказчика.
- Построение графика зависимости $\delta^2\text{H}$ от $\delta^{18}\text{O}$ (график дельты).
- Экспорт результатов в электронную таблицу Excel.
- Функции выставления счетов (необязательно).
- Удаление проекта – нажмите кнопку “Delete” – это действие можно выполнить только в том случае, если в *LIMS for Lasers 2015* не было импортировано анализов.

Указанная выше информация может быть отредактирована при нажатии кнопки “Edit “ в верхней части окна.

Пробы и анализы

При нажатии на кнопку “Show Samples” открывается дополнительная информация о каждой пробе в проекте. Перемещение по пробам осуществляется с помощью кнопок со стрелками, кнопки “List All Samples”, расположенных в верхнем левом углу окна, или колеса прокрутки мыши.

Samples

List All Samples 31 Reference, 6/6/2006 Edit Analyses Print Project Close

Our Lab ID: W-31

$\delta^2\text{H}$

Comment:

Delta Value: -61.40 ‰

$\delta^{18}\text{O}$

Comment:

Delta Value: -8.640 ‰

Decimal Degrees

Lat: Long:

Accuracy:

Meters

Elevation:

Top:

Bottom:

Sample ID: W-31 Control

Aquifer:

River/Lake:

Conductivity:

Temperature:

pH:

Alkalinity:

Other Info: IHL Lab Std 6

Collection Date:

End Collection Date:

Country: AT --> Austria

State/Province: 009 --> , Wien (Vienna)

На странице «Samples» обобщена информация о пробе, которая включает:

- Идентификатор пробы Our Lab ID (W-номер, присвоенный LIMS).
- Результаты анализа проб по $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}/\delta^{17}\text{O}$, если они оценены и сохранены.
- Различные дополнительные сведения о конкретной пробе, предоставляемые заказчиком.

При нажатии на кнопку “Analyses” открывается новое окно, в котором представлена более подробная информация о каждом изотопном анализе одной пробы, включая дату анализа, используемый прибор, метод и т. д. Данное окно открывается только в том случае, если анализы пробы были завершены.

Analysis

List | << | < | > | >> | Edit | Close

Sample Information

Our Lab ID: W-31

Sample ID: W-31 Control

Submitter: Reference,

Submission Date: 6/6/2006

Delta Values: $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$

$\delta^2\text{H}$

Instrument: A -> Isoprime DI

Analysis: 27 Injection #: 1

DateTime: 5/1/2015 7:40:27 AM

Vial Position:

Amount:

Amount Unit:

Penultimate $\delta^2\text{H}$: -49.23 Ignore

Instrument Error: 0 -> No Error

Hourly Corr: -1.01

Exp. Coef: 1.009995

Add. Corr: -10.80

Final $\delta^2\text{H}$: -61.53

Linearity Adjustment

Method:

Date:

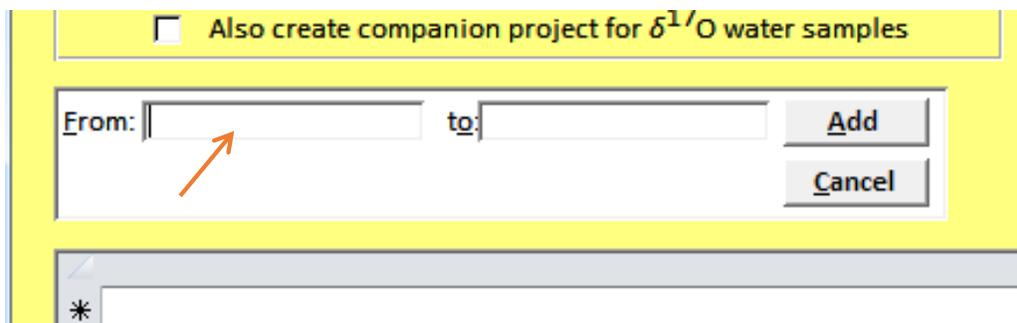
Previous Penultimate Delta:

6.3 Создание нового проекта вручную

Создание проекта по определению $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$ вручную и типографский ввод информации о пробах проиллюстрированы на примере. Джон Смит (ранее добавленный заказчик) представил 10 проб воды из предполагаемого участка водоносного горизонта в Техасе для проекта по водным ресурсам. Бутылки с пробами, поступающие в лабораторию, были помечены от «1» до «10».

1. На главной странице нажмите “Create a New Project”.
2. Нажмите “Submission Date” – используйте значок календаря, чтобы выбрать дату подачи данных, или нажмите «Today» (сегодня).
3. Выберите «Смит, Джон» в меню «Заказчик» (Customer).
4. Введите “Water Resource Project” в поле «Purpose» или «Title».
5. В поле «Location» введите “Proposed Aquifer Field Site”.
6. Выберите “US” в раскрывающемся меню страны.
7. В списке «Sample ID» введите названия проб (от 1 до 10), записывая по одной пробе в строке.
8. Если требуется определение $\delta^{17}\text{O}$, поставьте соответствующую отметку для сопутствующего проекта.
9. По завершении нажмите “Save” вверху справа.
10. Появится диалоговое окно, подтверждающее, что вы хотите создать новый проект, содержащий 10 новых проб воды с присвоенным LIMS идентификатором в диапазоне от W-1001 до W1010. Нажмите “Yes”.
11. Новый проект завершен и теперь отображается на вкладке “View Projects”.

При нажатии кнопки “Add Range” открывается новое поле “From:” и “To:” в белом поле под областью «Required Information»:



Формат полей “From:” and “To:” требует, чтобы обе записи имели один и тот же нечисловой код, если он есть. Чтобы создать сопутствующий проект по $\delta^{17}\text{O}$, установите флажок в соответствующем месте.

Правильный формат ввода диапазона

Пример: От: IAEA 001 До: IAEA 200
Автоматически добавляет 200 последовательно пронумерованных проб

Пример: От: IAEA 4.011 До: IAEA 4.210
Автоматически добавляет 200 последовательно пронумерованных проб

Пример: От: IAEA200 До: IAEA1
Автоматически добавляет 200 последовательно пронумерованных проб, в обратном порядке

Неправильный формат ввода диапазона (приводит к ошибке диапазона)

Пример: От: Test1 До: Testsample200 (нечисловой код отличается)

Важное примечание о проектах и новых пробах

После того, как проект был создан, в дальнейшем нельзя добавлять новые пробы в проект. Убедитесь, что у вас есть все пробы перед созданием проекта, в противном случае создайте несколько проектов с течением времени (несколько проектов заказчика легко объединяются для экспорта в один файл – см. [Раздел 13.2](#)).

6.4 Создание проекта $\delta^{17}\text{O}$

Некоторые приборы для измерения изотопов воды можно приобрести с возможностью измерения $\delta^{17}\text{O}$. К таким приборам сейчас относятся модели Los Gatos Research TIWA 45-EP и Picarro L2140i.

Если у вашего лазера есть возможность измерения $\delta^{17}\text{O}$, ее можно включить в *LIMS for Lasers 2015* как описано в [Разделе 5.2](#) для прибора Los Gatos Research и в [Разделе 5.3](#) для прибора Picarro. Чтобы избежать путаницы между двух-изотопными ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$) и трех-изотопными ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$) лазерными приборами или проектами, необходимо создать сопутствующий проект (Complimentary Project) для $\delta^{17}\text{O}$.

Внимание: для достижения величины ошибки “<30–50 per meg”, необходимой для интерпретации данных по $\delta^{17}\text{O}$ и ^{17}O -превышению (^{17}O -excess), требуются специальные шаблоны. Достижение такого высокого уровня точности требует гораздо большего количества инъекций, чем обычные анализы $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$. Таким образом, измерение $\delta^{17}\text{O}$ считается особой аналитической деятельностью, и поэтому оно рассматривается отдельно в *LIMS for Lasers 2015*.

Сначала создайте проект определения изотопов $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ в воде, как описано в Разделах [6.3](#) выше и [6.5](#) ниже.

1. Откройте проект $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$, который также требует анализов на $\delta^{17}\text{O}$.
2. В верхней части окна проекта $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ нажмите “Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project”.

Projects

List All Projects | 506 | Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project | Edit | Delete | Close

Show Samples | Add Samples to Instrument Template | **Export Results** | Delta Plot | Invoice | Print Labels

Print Report | Find Project By Invoice No | Unpaid Invoices | Print Small Labels

Last Changed: 6/23/2014

General Information

Submission: 6/6/2006 | Date Results Reported: 6/23/2014

Delta Values: $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ | $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Companion $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project: 6/6/2006 Reference, W-31 to W-69 Project No: 30

Customer: Reference

Range: W-8389 to W-8427

Purpose: Lab references for 17O

Location: Vienna

Project Comments:

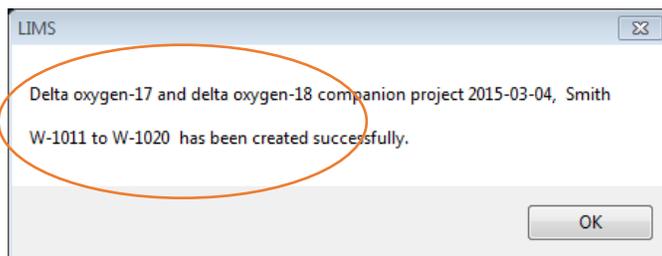
Number of samples with missing delta values: 34 of 39 samples

Number of Missing $\delta^{17}\text{O}$ Samples: 34

Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 23

3. Появится подтверждающее сообщение; нажмите «ОК». Примечание: для проекта $\delta^{17}\text{O}$ создан новый W-диапазон.

Примечание: рекомендуется, чтобы проект $\delta^{17}\text{O}$, если требуется, создавался одновременно с проектами $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$. Таким образом, лабораторные идентификационные номера Our Lab ID будут идти последовательно для упрощения идентификации проб и проектов.



Submission: 3/4/2015		Smith, John		W-1001 to W-1010		3/4/2015
Purpose:		Johns Test Waters for LAS				
Location:		El Paso aquifer				
Sample ID:	Collection Date	Our Lab ID	$\delta^2\text{H}_{\text{VSMOW}}$, in ‰		$\delta^{18}\text{O}_{\text{VSMOW}}$, in ‰	
			Value	Comment	Value	Comment
Sample1		W-1001				
Sample2		W-1002				
Sample3		W-1003				
Sample4		W-1004				
Sample5		W-1005				
Sample6		W-1006				
Sample7		W-1007				
Sample8		W-1008				
Sample9		W-1009				
Sample10		W-1010				

Пример проекта $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$, распечатанного со страницы Проекта в LIMS (готовых проб нет).

Submission: 3/4/2015		Smith, John		W-1011 to W-1020		3/4/2015
Purpose:		Johns Test Waters for LAS				
Location:		El Paso aquifer				
Sample ID:	Collection Date	Our Lab ID	$\delta^{17/16}\text{O}_{\text{VSMOW}}$, in ‰		$\delta^{18}\text{O}_{\text{VSMOW}}$, in ‰	
			Value	Comment	Value	Comment
Sample1		W-1011				
Sample2		W-1012				
Sample3		W-1013				
Sample4		W-1014				
Sample5		W-1015				
Sample6		W-1016				
Sample7		W-1017				
Sample8		W-1018				
Sample9		W-1019				
Sample10		W-1020				

Пример сопутствующего проекта по $\delta^{17}\text{O}$ со страницы проекта в LIMS (готовых проб нет).

Отслеживание сопутствующих проектов $\delta^{17}\text{O}$ осуществляется с главной страницы каждого проекта. Например, для ранее созданного проекта на панели «Project» отображается диапазон лабораторных идентификаторов (Our Lab ID range) сопутствующего проекта. Значения $\delta^{18}\text{O}$ автоматически обновляются из проекта $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$.

Projects

List All Projects | 506 | Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project | Edit | Delete | Close

Show Samples | Export Results | Delta Plot | Invoice | Print Labels

Add Samples to Instrument Template | Print Report | Find Project By Invoice No | Print Small Labels

Unpaid Invoices

Last Changed: 6/23/2014

General Information

Submission: 6/6/2006

Delta Values
 $\delta^{2}\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$
 $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Date Results Reported: 6/23/2014

Companion $\delta^{2}\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project: 6/6/2006 Reference, W-31 to W-69 Project No: 30

Customer: Reference

Range: W-8389 to W-8427

Purpose: Lab references for ^{17}O

Location: Vienna

Project Comments:

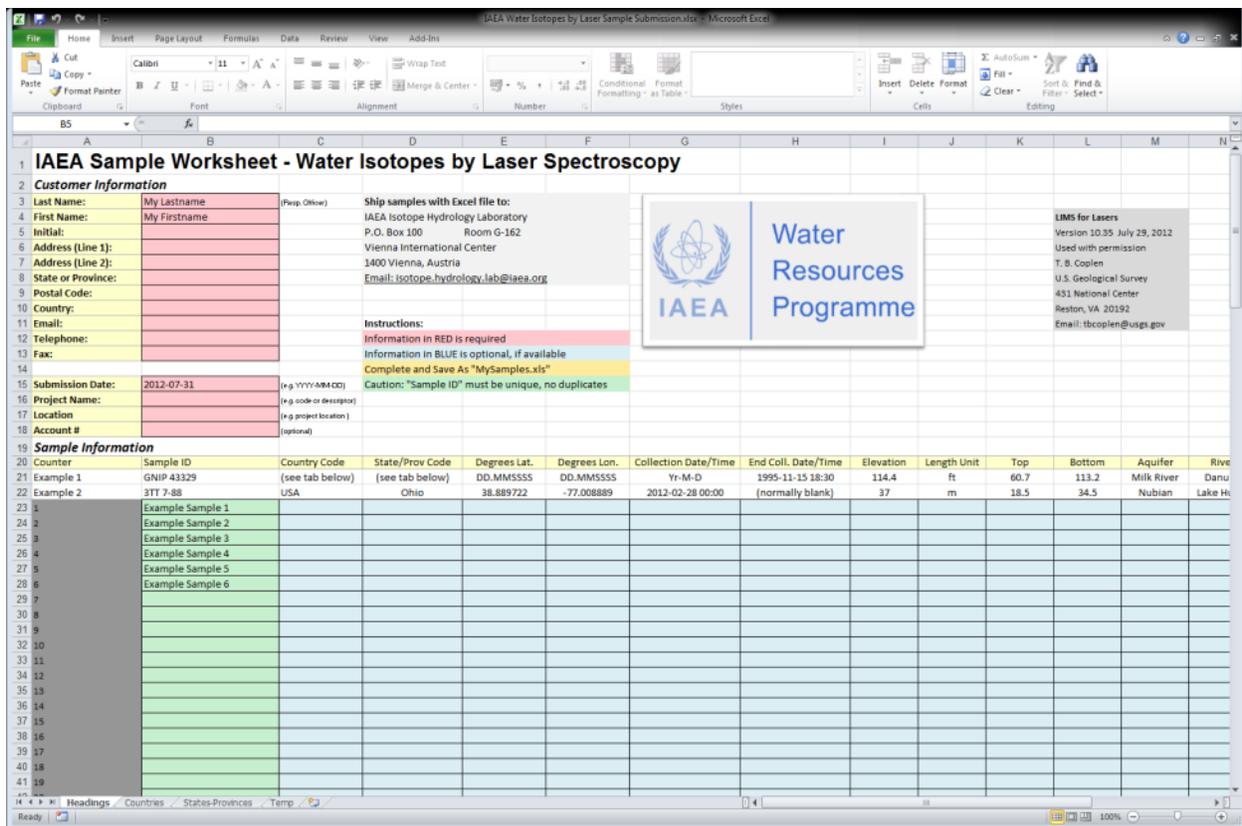
Number of samples with missing delta values: 34 of 39 samples

Number of Missing $\delta^{17}\text{O}$ Samples: 34

Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 23

6.5 Импорт нового проекта с помощью Excel

Удобный способ создать новый проект – импортировать файл Excel, содержащий информацию, предоставленную заказчиком. Когда заказчики заполняют и предоставляют имена и информацию о пробах, а также отправляют файл Excel (по электронной почте или на компакт-диске) вместе с пробами воды, это экономит время и предотвращает ошибки идентификации проб. Редактируемые пользователем шаблоны для отправки проб доступны на веб-сайтах IAEA и USGS ([Раздел 3.1](#)). Последний файл отправки проб воды в формате Excel показан здесь в качестве примера:



Альтернативный образец отправки (показан ниже) доступен здесь: <http://isotopes.usgs.gov/research/topics/lims.html>.

Оба шаблона включают условное форматирование для идентификации проб с повторяющимися названиями (см. две выделенные розовым ячейки в электронной таблице ниже). Шаблоны Excel, разработанные IAEA и USGS, можно легко изменить в соответствии с потребностями вашей лаборатории.

LIMS for Lasers Alternative Sample Submission Example.xlsx													
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
My Laboratory Analysis Request Form												The following to be retained because this software was provide at no cost by the U.S. Geological Survey and the IAEA	
Customer Information												LIMS for Lasers Version 10.51 Oct. 29, 2012 T. B. Coplen U.S. Geological Survey 431 National Center Reston, VA 20192 Email: tbcoplen@usgs.gov	
First Name: John		Instructions:											
Last Name: Smith		Information in BLUE is optional, if available											
Submission Date: 10/6/2012		Caution: "Sample ID" must be unique, no duplicates											
* INFORMATION IS REQUIRED		Ship samples and Excel file to:											
Address (Line 1):		Organization Name											
Address (Line 2):		Attn: Name of sample receiver (if applicable)											
Address (Line 3):		Laboratory address											
City:		Laboratory address											
State or Province:		Laboratory address											
Postal Code:		Laboratory address											
Country:		Laboratory address											
Email:		Phone											
Project Title: My project title		Email address											
General Location: My location		Optional Project Comment:											
Account number:													
Isotope Ratios Req: 18O and 2H													
Sample Information													
Counter	Sample ID	Country Code	State/Prov Code	Degrees Lat.	Degrees Lon.	Collection Date/Time	End Coll. Date/Time	Elevation	Length Unit	Top	Bottom	Aquifer	River/Lake
Example 1	GNIP 43329	(see tab below)	(see tab below)	DD.MMSSSS	DD.MMSSSS	m/d/yy h:ss	11/15/1995 18:30	114.4	ft	60.7	113.2	Milk River	Danube
Example 2	3TT 7-88	USA	Ohio	38.889722	-77.008889	2/28/2012 0:00	(normally blank)	37	m	18.5	34.5	Nubian	Lake Huron
Example Sample 1		USA	39	38.889722	-77.008889	2/28/12 14:02		37	m	18.5	34.5	Nubian	Lake Huron
Example Sample 2		USA	39	38.889722	-77.008889	2/28/12 0:00		37	m	18.5	34.5	Nubian	Lake Huron
Example Sample 3		USA	39	38.889722	-77.008889	2/28/12 0:00		37	m	18.5	34.5	Nubian	Lake Huron
Example Sample 4		USA	Ohio	38.889722	-77.008889	2/28/12 0:00		37	m	18.5	34.5	Nubian	Lake Huron
Example Sample 5		USA	Ohio	38.889722	-77.008889	2/28/12 0:00		37	m	18.5	34.5	Nubian	Lake Huron
Example Sample 6		Costa Rica	Cartago										
Example Sample 6													

Для того, чтобы создать новый проект с использованием шаблона Excel, необходимо:

1. На главной странице LIMS нажмите "Import a New Project from Excel Submission" под заголовком «Projects».
2. В диалоговом окне Windows со списком файлов найдите и дважды нажмите файл шаблона Excel подачи проб, который нужно импортировать.
3. В диалоговом окне подтверждения будет указано, сколько проб в файле и какой диапазон новых лабораторных идентификационных номеров «W» будет присвоен пробам. Нажмите «ОК».
4. Появится диалоговое окно с вопросом, хотите ли вы также создать сопутствующий проект ¹⁷O (Да/Нет (Y/N) при необходимости).
5. Новый проект появится в разделе "View Projects".

Напоминание: перед импортом убедитесь, что было добавлено имя заказчика, и при этом его имя и фамилия *точно совпадают* с указанными в файле Excel (см. [Раздел 6.1](#)).

6.6 Настройка форм подачи данных в Excel

Полезным способом импорта новых проектов является предоставление заказчикам подготовленных шаблонов Excel для подачи проб на анализ.

Редактируемые «незащищенные» шаблоны Excel для подачи проб для *LIMS for Lasers* доступны по ссылкам в [Разделе 3.1](#). Данные файлы Excel можно редактировать и изменять так, чтобы ваша лаборатория получила именно ту информацию, которая необходима.

Любые настройки полей данных, сделанные в предоставленных шаблонах Excel, также потребуют редактирования дополнительной информации о пробах в *LIMS for Lasers 2015*. Это связано с тем, что имена полей в шаблоне Excel должны иметь соответствующие имена полей в *LIMS for Lasers 2015*.

На главной странице нажмите “Special Features” и нажмите кнопку “Options”. На правой панели находится список определяемых пользователем подписей, которые можно изменить и использовать в файле Excel.

The screenshot shows the 'Options' dialog box with two main sections. The left section, 'General Preferences', contains fields for 'Organization name' (Organization Name), 'Default country' (US --> United States of America), 'Paper Size for Reports' (radio buttons for US letter and A4, with A4 selected), 'Print Destination' (radio buttons for Default Printer and Any Installed Printer, with Any Installed Printer selected), and several checkboxes: 'Use meters as default for distances instead of feet' (checked), 'Maximize LIMS Main Menu form' (unchecked), 'Include Sample ID and abbreviated project information on printout of List of Samples to be analyzed' (checked), and 'Display Invoices' (checked). The right section, 'Names for Samples Form and for Excel', is titled 'File to Import New Projects' and contains a list of fields for defining sample names: 'Sample ID' (Sample ID), 'User Def Caption 2' (Aquifer), 'User Def Caption 3' (River/Lake), 'User Def Caption 4' (Conductivity), 'User Def Caption 5' (Temperature), 'User Def Caption 6' (pH), 'Caption 7' (Alkalinity), 'Other Info' (Other Info), 'Top' (Top), and 'Bottom' (Bottom). An orange circle highlights the 'User Def Caption 2' through 'Caption 7' fields.

Чтобы изменить любое из названий полей (например, «Aquifer», «Conductivity», «pH» и т.д.) в соответствии с вашими предпочтениями, нажмите “Edit” и измените поля. Например, “Aquifer” (водоносный горизонт) можно изменить на “Site Name” (название места отбора).

Обратите внимание, что не все названия полей обязательны. *LIMS for Lasers 2015* требует только идентификатор пробы в этом настраиваемом списке. Если вам не нужен, например,

заголовок 7 (Alkalinity), удалите “Alkalinity” из текстового поля “Заголовок 7” и удалите столбец “Alkalinity” из шаблона Excel. После внесения всех необходимых изменений нажмите “Save” и “Close”. LIMS будет ожидать совпадения заголовков с заголовками в импортируемом настроенном файле Excel.

Изменения заголовков в шаблоне подачи Excel

Откройте “незащищенный” шаблон подачи Excel и найдите соответствующие имена необязательных полей, которые нужно изменить. В этом примере заголовок «Aquifer» (можно заменить на “Site Name”):

LIMS for Lasers
Version 10.05 Feb 22, 2012
Used with permission
T. B. Coplen
U.S. Geological Survey
431 National Center
Reston, VA 20192
Email: tbcoplen@usgs.gov

IAEA Water Resources Programme

es Lon.	Collection Date/Time	End Coll. Date/Time	Elevation	Length Unit	Top	Bottom	Aquifer
MSSSS	Yr-M-D	1995-11-15 18:30	114.4	ft	60.7	113.2	Milk River
8889	2012-02-28 00:00	(normally blank)	37	m	18.5	34.5	Nubian

Важно: убедитесь, что заголовки в таблице точно соответствуют заголовкам в полях опций *LIMS for Lasers 2015*, иначе импорт не удастся. Для необязательных полей, оставленных пустыми в *LIMS for Lasers 2015*, удалите соответствующий столбец из электронной таблицы для подачи.

Предупреждение! Настоятельно не рекомендуется многократно изменять имена заголовков полей LIMS. Четко продумайте, какая информация требуется вашей лаборатории, и придерживайтесь ее.

Примечание: приведенный выше знак разрешения *LIMS for Lasers 2015* должен быть сохранен на таблицах импорта в юридических целях, поскольку это программное обеспечение предоставляется Геологической службой США и МАГАТЭ бесплатно, и таблицы нельзя импортировать.

Защита шаблона подачи проб

Как показывает опыт, шаблоны подачи проб Excel неизбежно изменяются заказчиками (например, заказчики могут попытаться удалить или добавить столбцы, вставить неправильные форматы ячеек, вставить данные в новую таблицу и т. д.). Все это может вызвать сбой импорта в *LIMS for Lasers 2015*.

По этой причине окончательный файл подачи должен быть «защищен», чтобы заказчики могли заполнять только те поля, которые требуются лаборатории. Хотя защита ячеек Excel не является полностью надежной, ваша лаборатория должна предоставить подробные инструкции по использованию шаблонов.

Чтобы защитить ваш шаблон Excel для подачи лабораторных проб:

1. В Excel 2007/10 нажмите вкладку “Review” Tab.
2. Нажмите “Protect Sheet” – введите новый пароль (и запишите его).
3. Сохраните файл, распространите среди заказчиков.
4. Теперь заказчики могут добавлять свою информацию в поля данных, требуемые LIMS. Все остальные поля заблокированы для редактирования, если не отключен пароль.

6.7 Советы по успешному использованию шаблонов Excel

Основываясь на нашем опыте работы с сотнями заказчиков, приводим несколько советов по успешному использованию форм отправки проб в Excel:

В лаборатории

- Загрузите один из предоставленных незащищенных шаблонов Excel, чтобы добавить/отредактировать необходимые данные (контактную информацию, адрес, добавить логотип вашей лаборатории и т. д.).
- Убедитесь, что измененные необязательные поля в Excel точно совпадают с теми, что указаны в ваших опциях “Options” LIMS.
- Защитите свой распространяемый шаблон отправки Excel паролем.
- Протестируйте новый файл импорта Excel с фиктивными данными, чтобы убедиться, что импорт работает правильно.
- **Никогда** не объединяйте пробы разных заказчиков в один проект – это в дальнейшем может создавать путаницу.

Для ваших заказчиков

- Отправляйте заказчикам защищенные формы Excel по электронной почте или размещайте их на своем веб-сайте.
- Рекомендуйте заказчикам сохранить копию исходного шаблона Excel для будущих проб.
- Заказчики должны заполнить свою информацию и “Save As”, используя описательное имя файла.
- Форма подачи проб Excel должна сопровождать пробы воды (на CD/USB-накопителе или по электронной почте).
- Полезна распечатанная копия заявки в формате Excel вместе с пробами воды.
- *Минимальная необходимая информация:* фамилия, имя, дата подачи и ID проб.

Instructions:			
Information in RED is required			
Information in BLUE is recommended, if available			
Complete and Save As "MySamples.xls"			
Caution: "Sample ID" must be unique, no duplicates			
State/Prov Code	Degrees Lat.	Degrees Lon.	Collection Date/Ti
(see tab below)	DD.MMSSSS	DD.MMSSSS	Yr-M-D
Ohio	38.889722	-77.008889	2012-02-28 00:00

Примечание для пользователей LIMS v.9: *LIMS for Lasers 2015* не требует каких-либо кодов среды – образцы автоматически присваиваются коду среды 1 Media Code 1 ($\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ в воде) и коду среды 1017 Media Code 1017 (для $\delta^{17}\text{O}$).

6.8 Распечатка этикеток для проб и флаконов

Печать этикеток для больших бутылок с пробами

LIMS for Lasers 2015 может печатать большие этикетки (Avery или аналогичные), которые могут быть прикреплены к бутылкам для проб воды. Это позволит персоналу лаборатории организовать и легко найти пробы воды.

1. В проекте заказчика нажмите «Print Labels», а затем “Yes”.
2. Количество напечатанных этикеток по умолчанию - 1 (выберите 2 или более в случае разделения пробы).
3. Убедитесь, что в принтер вставлен 30 или 21 лист для лазерных принтеров с большими этикетками правильного размера (соответственно, Avery 5260 Letter или Avery L7160 A4, или эквивалентные). Размер листа этикетки должен соответствовать размеру бумаги, установленному в параметрах LIMS (Letter / A4). Нажмите “Print”.
4. Прикрепите большие этикетки для проб к нужным бутылкам с пробами заказчика.

Печать маленьких этикеток для флаконов для лазерных приборов

LIMS for Lasers 2015 также может печатать маленькие этикетки, которые прикрепляются к флаконам объемом 2 мл, используемым в автоматическом пробоотборнике лазерного прибора.

1. В окне «Project» нажмите «Print Small Labels» и нажмите “Yes”.
2. По умолчанию количество этикеток на одну пробу равно 1 (выберите 2 для анализа с двумя флаконами).
3. Убедитесь, что в принтер выставлен параметр 80 или 84 малых этикетки на лист (соответственно, Avery 5267 для формата Letter или Avery L7656 для A4 или эквивалент). Нажмите “Print”.
4. Прикрепите этикетку к соответствующему флакону с пробой (в качестве альтернативы, номера W можно просто написать на боковой поверхности флаконов с помощью перманентного маркера).

Совет: на небольших флаконах для лазерных анализов проще писать ID пробы с помощью перманентного маркера.

Projects

List All Projects | 30 | Create Companion 5170 & 5180 Project | Edit | Delete | Close

Show Samples | Export Results | Delta Plot | Invoice | Print Labels

Add Samples to Instrument Template | Print Report | Find Project By Invoice No | Print Small Labels

Unpaid Invoices

Last Changed: 11/20/2014

General Information

Submission: 6/6/2006

Delta Values: δ^{2H} and δ^{18O} δ^{17O} and δ^{18O}

Companion δ^{17O} and δ^{18O} Project

Date Results Reported: 2/1/2012

6/6/2006 Reference, W-8389 to W-8427 Project No: 506

Customer: Reference

Range: W-31 to W-69

Purpose: IAEA Lab Standards & Controls

Location: Vienna

Project Comments:

Number of samples with missing delta values: 22 of 39 samples

Number of Missing δ^{2H} Samples: 21

Number of Missing δ^{18O} Samples: 22

W-1001 Sample 1	W-1002 Sample 2	W-1003 Sample 3	W-1004 Sample 4
W-1005 Sample 5	W-1006 Sample 6	W-1007 Sample 7	W-1008 Sample 8
W-1009 Sample 9	W-1010 Sample 10		

Пример распечатки листов с маленькими этикетками Avery.



Пример: флакон объемом 2 мл для лазерного прибора с небольшой этикеткой Avery.

6.9 Обзор незавершенных проектов

Для лабораторий, которые анализируют пробы с помощью нескольких приборов (например, лазеров, масс-спектрометров), легко потерять информацию о неполных анализах, о том, на каких приборах были проанализированы пробы или сколько раз образцы были воспроизведены.

LIMS for Lasers 2015 позволяет аналитику быстро идентифицировать аномальные образцы и определять, нужны ли репликации (повторные анализы). На главной странице нажмите “Sample and Analysis Survey of Unreported Projects”. В открывшемся окне (см. ниже) отображается список незавершенных проектов (например, не проанализированных, частично завершенных или не сохраненных). Средняя и нижняя панели показывают список проб в проекте, как часто каждая проба была проанализирована (например, если в лаборатории есть политика двойного анализа) и на каких приборах пробы были проанализированы.

В приведенном ниже примере мы видим, что проба W-12509 была проанализирована 5 раз (самая нижняя панель) на трех разных приборах (код L, N, D). На средней правой панели мы видим, что из 18 проб в проекте 15 проб были проанализированы 3 раза, а 3 пробы – 5 раз.

Sample and Analysis Survey of Unreported Projects Close

Select Project

Submission	Last name	Purpose	Our Lab ID Range	# Samples
2015-01-22	Terzer	GNIP_Ascension_3224	W-12506 to W-12523	18
2015-02-03	Terzer	IHL/Snow_2015/02_3235	W-12776 to W-12812	37
2015-02-17	Terzer	GNIR_CentAfrRep_3245	W-13021 to W-13053	33
2015-02-19	Terzer	GNIP_Braz_UNESP_3246	W-13054 to W-13063	10
2015-02-27	Terzer	GNIP_Norway_3248	W-13124 to W-13135	12
2015-03-02	Terzer	GNIP_Honduras_3249	W-13184 to W-13209	26
2015-03-03	Terzer	IHL/Isovip_2015/03_3251	W-13244 to W-13252	9
2015-03-03	Terzer	IHL/Snow_2015/03_3250	W-13210 to W-13243	34

Samples in this project (Select a Sample to View its Analyses)

OurLabID	str_FieldID	# Analyses
W-12506	Ascension Is._201404	3
W-12507	Ascension Is._201405	3
W-12508	Ascension Is._201406	3
W-12509	Ascension Is._201407	5
W-12510	Ascension Is._201408	5
W-12511	Ascension Is._201409	5
W-12512	Ascension Is._201410	3
W-12513	Ascension Is._201411	3
W-12514	Ascension Is._201412	3
W-12515	Traveller's Hill 201404	3

# of runs	for # of samples
5	3
3	15

Record: 1 of 2 No Filter

Analyses of W-12509:

OurLabID	Analysis	Instrument	Completed
W-12509	D-16930	DeltaPlus	2015-02-18
W-12509	D-16978	DeltaPlus	2015-02-19
W-12509	L-17831	LGR-V2	2015-01-26
W-12509	N-17687	LGR-V3	2015-01-23
W-12509	N-17739	LGR-V3	2015-01-27

Record: 1 of 5 No Filter Search

Пример экрана обзора незавершенных проектов

7 Стандартные образцы для изотопного анализа

7.1 Первичные и лабораторные стандарты ИЗОТОПОВ

LIMS for Lasers 2015 поставляется с заранее оформленными проектами для международных первичных эталонов и эталонов для повседневного использования в лабораторных измерениях, которые используются для нормализации аналитических результатов проб природных вод.

Первичные стандартные образцы (VSMOW/2, SLAP/2)

Чтобы просмотреть таблицу установленных значений международных эталонов:

1. На главной странице LIMS откройте “Special Features”
2. Нажмите “Assign Lab References”
3. Нажмите “List” (вверху слева), чтобы увидеть значения δ международных стандартных образцов.

Пример: SLAP2 имеет лабораторный ID “W-9” и значение $\delta^2\text{H}$ –427.5 ‰.

Обратите внимание, что *LIMS for Lasers 2015* следует рекомендациям *Système International d’Unités*, SI (известной на русском языке как Международная система единиц). При использовании % или ‰ число и символ разделяются пробелом (см. раздел 5.3.7 8-й брошюры SI).^[5] Таким образом, заданное значение $\delta^2\text{H}$ SLAP2 составляет –427.5 ‰.

Обратите внимание, что международные эталоны находятся в проекте “International References”, а имя заказчика по умолчанию – “Reference”. Для текущих и будущих международных первичных эталонных вод имеется 25 зарезервированных позиций (от W-5 до W-30).

Примечание: значение $\delta^{17}\text{O}$ в настоящее время не привязаны ни к каким первичным эталонам, поскольку это нерешенная научная проблема. Добавление $\delta^{17}\text{O}$ потребует от пользователя создания сопутствующего проекта для своего проекта первичных стандартов (см. [Раздел 6.4](#)).

Open Selected Project		Remove a project from the window below by pressing the	
Submission	LastName	Range	Purpose
1995-01-01	Test	W-1 to W-2	Water test samples
1995-01-01	Reference	W-3	Empty capsule for TC/EA
1995-01-01	Reference	W-4	CF Ref Inj sample
2006-06-06	Reference	W-5 to W-30	International references
2006-06-06	Reference	W-31 to W-69	Lab references
2012-07-05	Smith	W-1001 to W-1010	Water Resource Project - Houston
2012-07-05	Smith	W-1011 to W-1199

7.2 Добавление и изменение стандартов и контрольных стандартов

Лабораторные стандарты повседневного использования (или внутренние лабораторные стандарты) используются для нормализации измеренных значений δ проб по шкалам VSMOW-SLAP для итоговой отчетности.^[6] Каждая лаборатория несет ответственность за получение и поддержание соответствующих лабораторных стандартов измерений, а также за обеспечение их регулярной калибровки по международным шкалам измерений VSMOW / 2-SLAP / 2 (см. приложения для источников и шаблонов для стандартов повседневного использования).

LIMS for Lasers 2015 поставляется с более, чем 35 зарезервированными позициями для новых лабораторных эталонов, доступных пользователю в проекте под названием “Lab References”, заказчиком которого является “Reference”. Лабораторные стандарты имеют предварительно присвоенные лабораторные ID номера LIMS в диапазоне от W-31 до W-69 (см. предыдущий рисунок). Ваша лаборатория может редактировать или добавлять в этот проект новые лабораторные стандарты.

Имейте ввиду, что версия *LIMS for Lasers 2015* по умолчанию не имеет значений δ , назначенных для позиций лабораторных стандартов в таблице эталонов. Чтобы присвоить известные значения δ , необходимо отредактировать названия лабораторных стандартов, а затем добавить их значения δ в таблицу эталонов *LIMS for Lasers 2015*.

Например, мы можем отредактировать новый лабораторный стандарт с высоким и низким значением δ и добавить контрольный стандарт в таблицу эталонов. Они имеют следующие известные значения δ (относительно VSMOW):

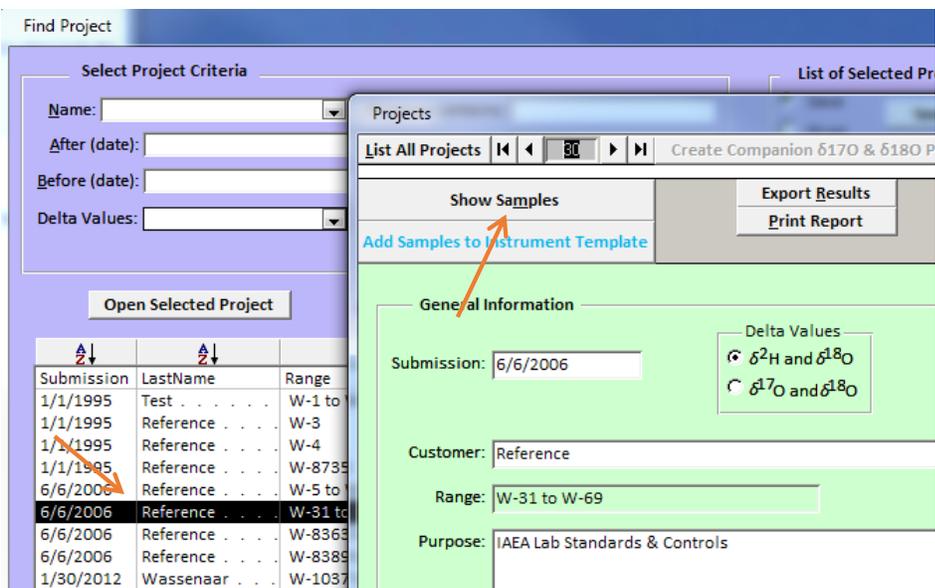
Высокий стандарт	$\delta^{18}\text{O} = -0.07 \text{ ‰}$	$\delta^2\text{H} = -4.1 \text{ ‰}$	$\delta^{17}\text{O} = -0.2$
Низкий стандарт	$\delta^{18}\text{O} = -24.76 \text{ ‰}$	$\delta^2\text{H} = -189.2 \text{ ‰}$	$\delta^{17}\text{O} = -14.2$
Контроль	$\delta^{18}\text{O} = -999 \text{ ‰}$	$\delta^2\text{H} = \text{not assigned}$	

Примечание. Контрольному стандарту присвоено значение $\delta^{18}\text{O} -999 \text{ ‰}$, которое действует как отметка, обозначающая, что значение $\delta^{18}\text{O}$ этого стандарта равно нулю. Ему не следует присваивать какое-либо значение $\delta^2\text{H}$. Поскольку контрольный стандарт равен нулю, *LIMS for Lasers 2015* не будет использовать его ни при какой нормализации, когда он включен в автозапуски анализа, хотя пользователь сможет видеть результаты. Значение δ контрольного стандарта не важно, хотя предпочтительны контрольные стандарты со значениями $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ между высокими и низкими стандартами измерения. Контрольный стандарт(ы) применяются с целью обеспечения контроля/качества (QA/QC) во времени.

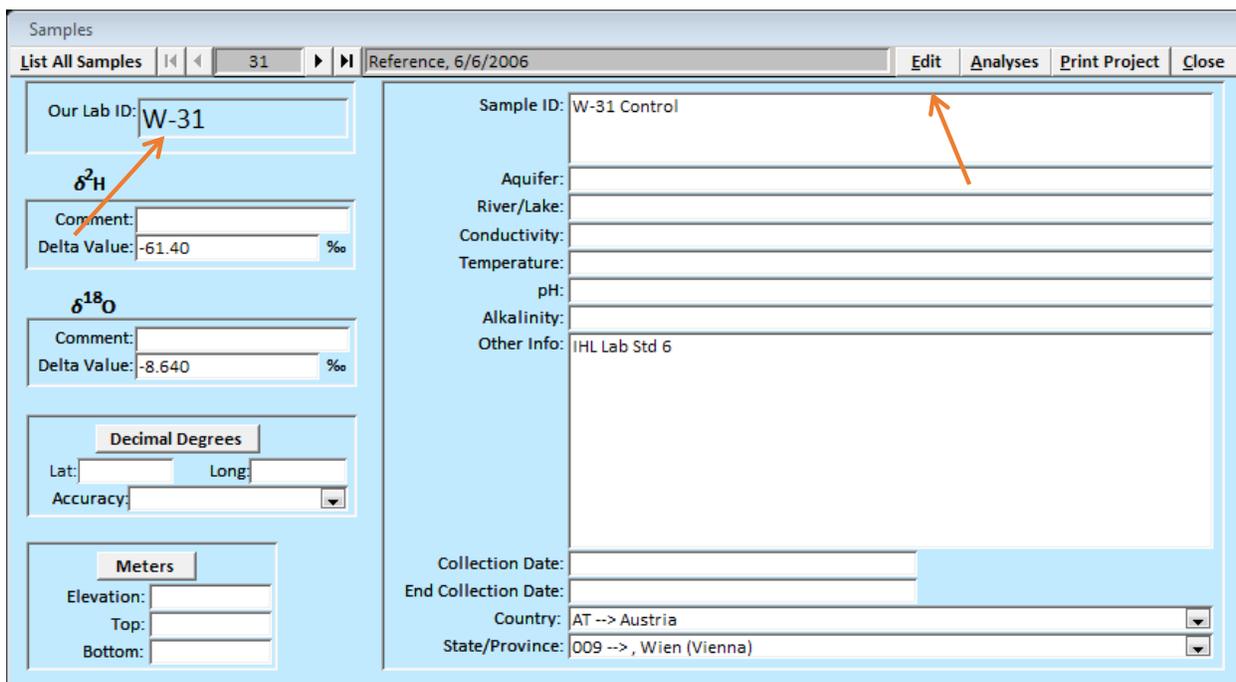
Во-первых, в этом примере нам нужно отредактировать и переименовать три «предварительно назначенных позиции» для лабораторных стандартов и контрольного стандарта на их фактические имена или ID проб, как указано выше.

Здесь мы назначаем название “High Standard” для W-31, «Low Standard» для W-32 и “Control” для W-33.

1. На главной странице LIMS нажмите “View Projects”.
2. Дважды нажмите проект под названием «Lab References».
3. Нажмите “Show Project Samples”.
4. Откроется первая проба в Проекте; в данном случае это W-31.
5. Нажмите кнопку “Edit”.
6. Теперь выделено поле «Sample ID» - удалите и замените “My laboratory ref 1” на “High Standard”, но оставьте все остальные записи без изменений (не вводите значения δ !).
7. Нажмите “Save”.
8. Нажмите еще раз на кнопке «List All Samples» и выберите W-32 из выпадающего меню.
9. Нажмите “Edit”, удалите и замените “My laboratory ref 2” на «Low Standard».
10. Нажмите «Сохранить» (“Save”).
11. Нажмите еще раз на кнопке «List All Samples» и выберите W-33 из выпадающего меню.
12. Нажмите “Edit”, удалите и замените “My laboratory ref 3” на “Control”.
13. Нажмите “Save”. Переименование этих трех проб завершено.
14. Нажмите “Close”, чтобы вернуться на главную страницу LIMS.



Проект "References" с лабораторными ID от W-31 до W-69 для лабораторных стандартов IAEA.



Информация о вводе для образца W-31 должна быть отредактирована в "My Laboratory Standard 1".

Примечание: чтобы создать проект для значений $\delta^{17}\text{O}$ для лабораторных стандартов, вы должны сначала создать сопутствующий проект лабораторного стандарта (см. [Раздел 6.4](#)).

Числа W в проекте лабораторного стандарта по $\delta^{17}\text{O}$ будут отличаться от значений в проекте по $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$. См. пример:

			
Submission	LastName	Range	Purpose
1995-01-01	Reference	W-4	Reference Gas Proxy for Lasers - Do not delete
2012-09-27	Test	W-1 to W-2	Test or Dummy Samples
2012-09-27	Reference	W-3	Wash and Conditioning Sample
2012-09-27	Reference	W-5 to W-30	International References
2012-09-27	Reference	W-31 to W-69	Lab References
2012-09-27	Reference	W-70 to W-108	Lab References for ^{17}O
2015-03-04	Smith	W-1001 to W-1010	Johns Test Waters for LAS

7.3 Присвоение лабораторным стандартам значения δ

Необходимо присвоить лабораторным стандартам известные значения δ и добавить специальную отметку LIMS для обозначения контрольного эталона. В настоящее время нет никакой ошибки, относящейся к лабораторным стандартам.

1. На главной странице LIMS откройте “Special Features”
2. Нажмите “Assign Lab References”

Добавление лабораторных стандартов высоких значений $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{17}\text{O}$

3. Чтобы добавить значение лабораторного стандарта $\delta^{18}\text{O}$, нажмите “Add a New Lab Reference”.

4. Нажмите выпадающее меню под “Isotope Delta”, выберите “ $\delta^{18}\text{O}$ ”.
5. В поле “Our Lab ID” введите W “31”. В поле “Sample ID” должна появиться запись “High Standard”.
6. В поле “Final Delta”, введите ее присвоенное значение, здесь -0.07 ‰ для $\delta^{18}\text{O}$ как описано на следующей странице.
7. Нажмите “Save”.

Reference Samples

W-31 Save Cancel

The Table of Reference Samples contains samples that serve as isotopic reference materials in LIMS. The 'true' delta value is assigned in the Final Delta textbox

Isotope Delta: $\delta^{18}\text{O}$

Reference Information

Our Lab ID: W 31

Sample ID: High Standard

Final Delta: -0.07 ‰

Companion $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Sample:

8. Затем добавьте известное или присвоенное значение $\delta^2\text{H}$; нажмите “Add a New Lab Reference”.
9. Нажмите выпадающее меню под “Isotope Delta” и выберите “ $\delta^2\text{H}$ ”.
10. В поле “Our Lab ID” введите W “31”. В поле “Sample ID” должна появиться запись “High Standard”.
11. В поле “Final Delta”, введите его присвоенное значение, здесь -4.1 ‰ для $\delta^2\text{H}$ как указано выше.
12. Нажмите “Save”.
13. Чтобы добавить значение лабораторного стандарта $\delta^{17}\text{O}$, нажмите “Add a New Lab Reference”.
14. Нажмите выпадающее меню под “Isotope Delta” и выберите “ $\delta^{17}\text{O}$ ”.
15. В поле “Our Lab ID” введите W “70”. В поле “Sample ID” должна появиться запись “High Standard”.
16. В поле “Final Delta”, введите его присвоенное значение, здесь -0.2 ‰ для $\delta^{17}\text{O}$, как указано выше.

Добавление лабораторных стандартов низких значений $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{17}\text{O}$

17. Чтобы добавить стандарт низких значений, повторите описанные выше шаги №3 - 12, но укажите W-32 “Low Standard” со значениями для $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$ ($\delta^{18}\text{O} = -24.76 \text{ ‰}$, $\delta^2\text{H} = -189.2 \text{ ‰}$, $\delta^{17}\text{O} = -14.2 \text{ ‰}$ (W-71), как показано выше).

Добавление контрольного стандарта

18. Повторите шаги № 3-7, указывая W-33 “Control”
19. Введите значение $\delta^{18}\text{O} -999 \text{ ‰}$ (**помните:** не добавляйте никакие значения $\delta^2\text{H}$ или $\delta^{17}\text{O}$ в контрольные стандарты)

20. Нажмите “Save”
21. Нажмите “Close”

Чтобы просмотреть недавно отредактированный список ваших первичных и лабораторных стандартов и назначенных им значений δ , в разделе «Special Features» нажмите “Assign Lab References”, а затем нажмите кнопку “List” в верхнем левом углу.

На приведенном ниже рисунке показаны международные стандарты измерения, недавно добавленные лабораторные стандарты и контрольный стандарт, отсортированные по элементам и соответствующим нашим лабораторным ID (Our Lab ID) «W».

Если вам необходимо изменить присвоенные значения δ первичных или лабораторных стандартов, выделите конкретный стандарт и δ изотопа, которые нужно изменить, в списке и нажмите “Edit”. Затем введите новое значение δ в поле Final Delta и нажмите “Save”.

Lab ID	Name	Isotope	Delta
W-5	VSMOW	δ2H	0
W-6	GISP	δ2H	-189.7
W-7	SLAP	δ2H	-428
W-8	VSMOW2	δ2H	0
W-9	SLAP2	δ2H	-427.5
W-31	High Standard	δ2H	-4.1
W-32	Low Standard	δ2H	-189.2
W-70	High Standard	δ17O	-0.2
W-71	Low Standard	δ17O	-14.2
W-5	VSMOW	δ18O	0
W-6	GISP	δ18O	-24.78
W-7	SLAP	δ18O	-55.5
W-8	VSMOW2	δ18O	0
W-9	SLAP2	δ18O	-55.5
W-31	High Standard	δ18O	-0.07
W-32	Low Standard	δ18O	-24.76
W-33	Control	δ18O	-999

Пример недавно добавленных стандартов измерения для ежедневного использования и контроля



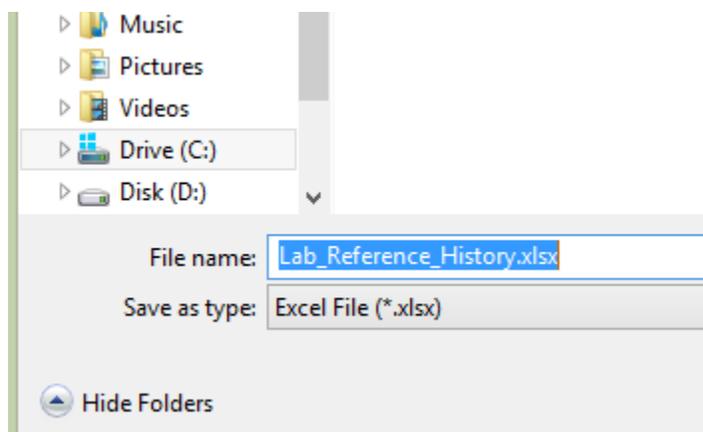
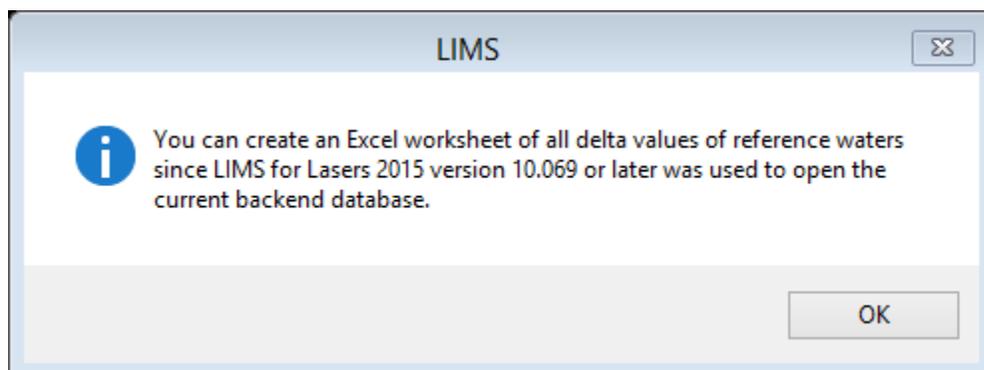
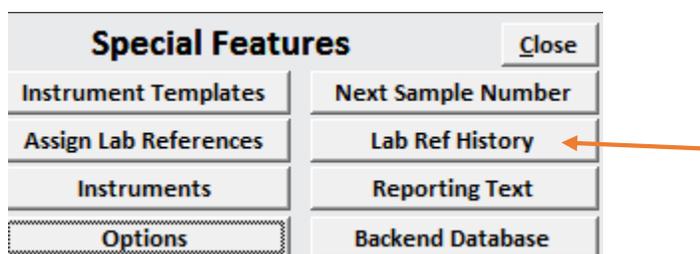
ВАЖНОЕ ПРИМЕЧАНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНО НАЗНАЧЕННЫХ СТАНДАРТНЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Недавно отредактированные лабораторные стандартные значения δ влияют *только на будущие результаты, которые еще не были нормализованы или сохранены*. Ранее нормализованные сохраненные результаты *не* изменяются задним числом; они сохраняют параметры нормализации и присвоенные значения δ , которые использовались во время обработки данных. Все предыдущие нормализации данных защищены.

7.4 Отслеживание стандартов с течением времени

Запись любых изменений, внесенных в первичные и лабораторные стандартные значения δ , регистрируется в *LIMS for Lasers 2015* для целей долгосрочного лабораторного отслеживания.

1. Нажмите “Special Features”
2. Нажмите кнопку “Lab Ref History”
3. Создается и сохраняется файл Excel с полной историей эталонных значений δ , присвоенных калибровочным и первичным стандартам.



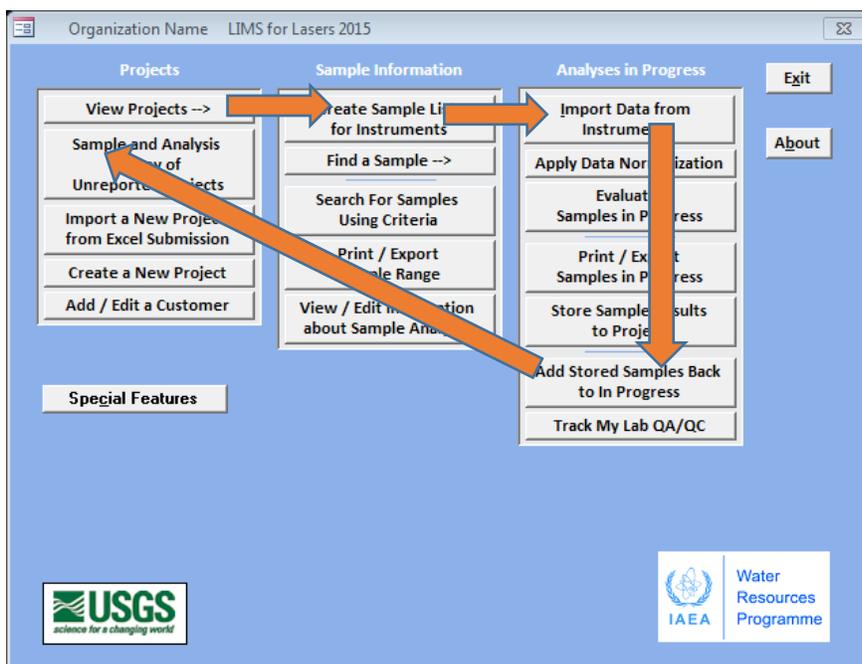
8 Шаблоны анализа проб

8.1 Анализ проб в LIMS for Lasers 2015

Поскольку мы уже умеем добавлять заказчиков, их проекты и пробы в *LIMS for Lasers 2015*, мы можем подготовить и проанализировать пробы воды на лазерном приборе с помощью шаблонов анализа прибора (также называемых списками проб, очередями или файлами последовательностей).

Анализ проб в *LIMS for Lasers 2015* представляет собой 9-шаговую процедуру:

1. Добавьте пробы в *Шаблон анализа* (или очередь).
2. Создайте и распечатайте список действий для подготовки проб (например, наполнить флаконы для проб) и передачи последовательности в программу сбора и контроля данных Los Gatos Research или Picarro через USB-накопитель.
3. Измерьте неизвестные образцы как минимум дважды (в Los Gatos Research или Picarro) и импортируйте изотопные данные в *LIMS for Lasers 2015*.
4. При необходимости скорректируйте зависимость количества H₂O.
5. Исправьте импортированные результаты с учетом «памяти» между пробами и/или нарастающей инструментальной ошибки измерения.
6. Нормализуйте пробы по шкалам VSMOW-SLAP с помощью стандартов.
7. Оцените и примите окончательные результаты, отслеживая показатели контрольного стандарта.
8. Проверьте и сохраните принятые средние окончательные результаты двух или более повторений проб.
9. Сообщите заказчику окончательные средние результаты на бумажном носителе или в файле Excel.



Стандартный рабочий процесс в *LIMS for Lasers 2015*.

8.2 Важность шаблонов анализа

LIMS for Lasers 2015 снабжен шаблонами анализа проб, предназначенными для получения результатов высокого качества, проверки проблемных анализов, связанных с концентрацией водяного пара в анализаторе, корректировки зависимости δ от концентраций H_2O , корректировки памяти между пробами, проверки и корректировки нарастающей инструментальной ошибки измерения и нормализации результатов неизвестных проб по шкале VSMOW-SLAP с использованием калиброванных лабораторных стандартов. Контрольный стандарт осуществляет мониторинг результатов в долгосрочной работе лазера с целью обеспечения/контроля качества (QA/QC). Пользователи могут создавать свои собственные шаблоны.

Хорошо известно, что шаблоны систематического анализа, основанные на принципах идентичной обработки (Identical Treatment principles)[\[1\]](#), дают наилучшие результаты. Кроме того, систематические шаблоны позволяют аналитику легко выявлять проблемы, когда наблюдаются изменения в обычном ходе анализов.

В *LIMS for Lasers 2015*, мы рекомендуем шаблон 8/9-инъекций-игнорировать-4 в качестве отправной точки для всех лазерных приборов для определения $\delta^{18}O$ и δ^2H . Пользователи могут экспериментировать с шаблонами, чтобы оптимизировать производительность для своих собственных потребностей, или они могут улучшить пропускную способность проб, экспериментируя с меньшим количеством инъекций и игнорируя инъекции (например, 6-инъекций-игнорировать-3). Шаблоны анализа полностью настраиваются в соответствии с предпочтениями пользователя.

Рекомендации в этом руководстве намеренно консервативны, чтобы обеспечить наилучшие результаты для определения $\delta^{18}O$ и δ^2H для всех поколений лазерных приборов. Инструментальные шаблоны для $\delta^{17}O$ значительно сложнее, чем стандартные шаблоны и анализы для $\delta^{18}O$ и δ^2H , и для них требуется несколько флаконов с 30–50 или более инъекциями.

Почему необходимы шаблоны систематического анализа

Существует две аппаратные особенности, которые ограничивают величину (длину) шаблона автозапуска лазера:

- Неисправность прокладки (септы) инъекционного порта. Септа будет протекать или отказывать после 300–800 инъекций, в зависимости от марки и качества (стандартная или высокая производительность).
- Неисправность шприца. Микролитровые шприцы могут выйти из строя в интервале от 12 до 2000 (или более) инъекций. Как правило, пробы воды с высоким

содержанием растворенных твердых веществ (TDS) приводят к более быстрому выходу шприца из строя из-за накопления солей в цилиндре шприца.

Таким образом, количество автозапусков лазера должно составлять не более 300–800 инъекций, после чего требуется замена прокладки (септы). Шприц следует проверить на предмет неисправности или заклинивания. Деграция шприца обычно проявляется в уменьшении или изменении концентрации водяного пара H_2O в анализаторе лазерных приборов, в отличие от начальных характеристик.

На качество лазерного изотопного анализа влияют три инструментальных фактора:

- Эффект «памяти» между пробами – это остаточное загрязнение от молекул воды предыдущей пробы, все еще находящихся в анализаторе лазера и/или линиях передачи между соседними пробами. Большая разница между δ проб будет иметь большее влияние на результат измерений.
- Зависимость значений δ от концентрации водяного пара H_2O в анализаторе. Изменяющаяся концентрация водяного пара H_2O , например, из-за неисправных шприцев или негерметичных прокладок, приводит к высокой изотопной дисперсии на большинстве лазерных приборов.
- Нарастающая инструментальная ошибка измерения (инструментальный дрейф). Лазерные инструменты раннего поколения или новые, недостаточно прогретые, демонстрируют линейную нарастающую инструментальную ошибку измерения в процессе автозапуска.^[8]

В то время как физические ограничения прокладок и шприцев требуют регулярного технического обслуживания прибора, как описано в руководствах пользователя от каждого поставщика, *LIMS for Lasers 2015* помогает в выявлении и исправлении этих неполадок, как описано ниже.

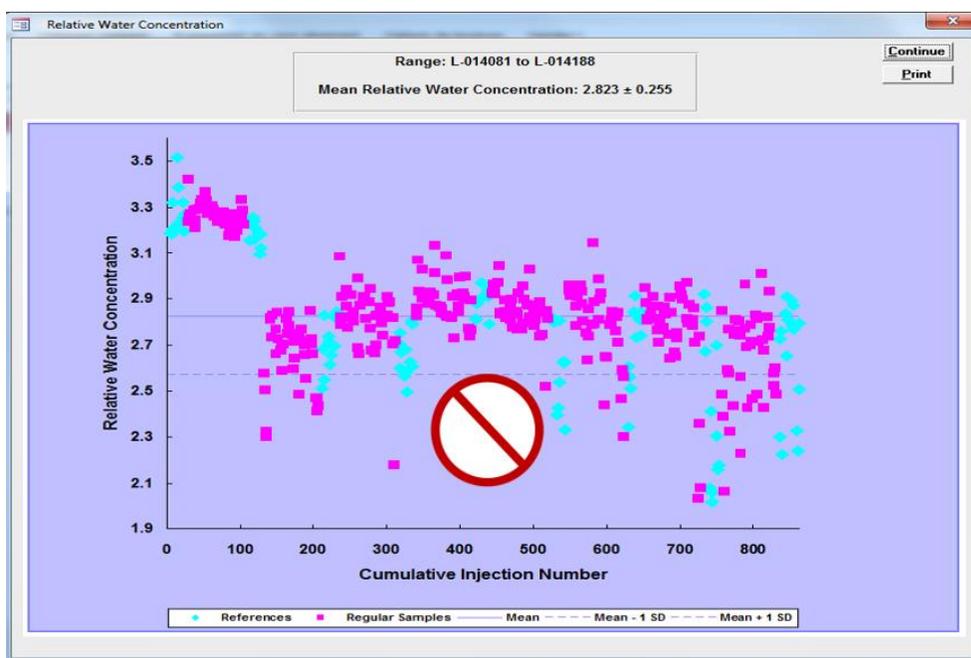
Инструменты для проверки на низкую производительность, ошибки прибора и высокую дисперсию.

Частые отказы шприцев или прокладок обычно приводят к низкой или сильно изменяющейся концентрации водяного пара H_2O в анализаторе лазера или ошибкам давления, сообщаемым программным обеспечением прибора. Лазерные приборы часто показывают сильную реакцию значений δ на количество водяного пара в полости; поэтому точные и стабильные инъекции воды имеют решающее значение. В то время как аппаратный сбой, такой как застрявший или сломанный шприц, является очевидным, менее очевидными являются относительно неудачные инъекции или слегка изменяющиеся концентрации водяного пара H_2O в анализаторе, когда флаконы

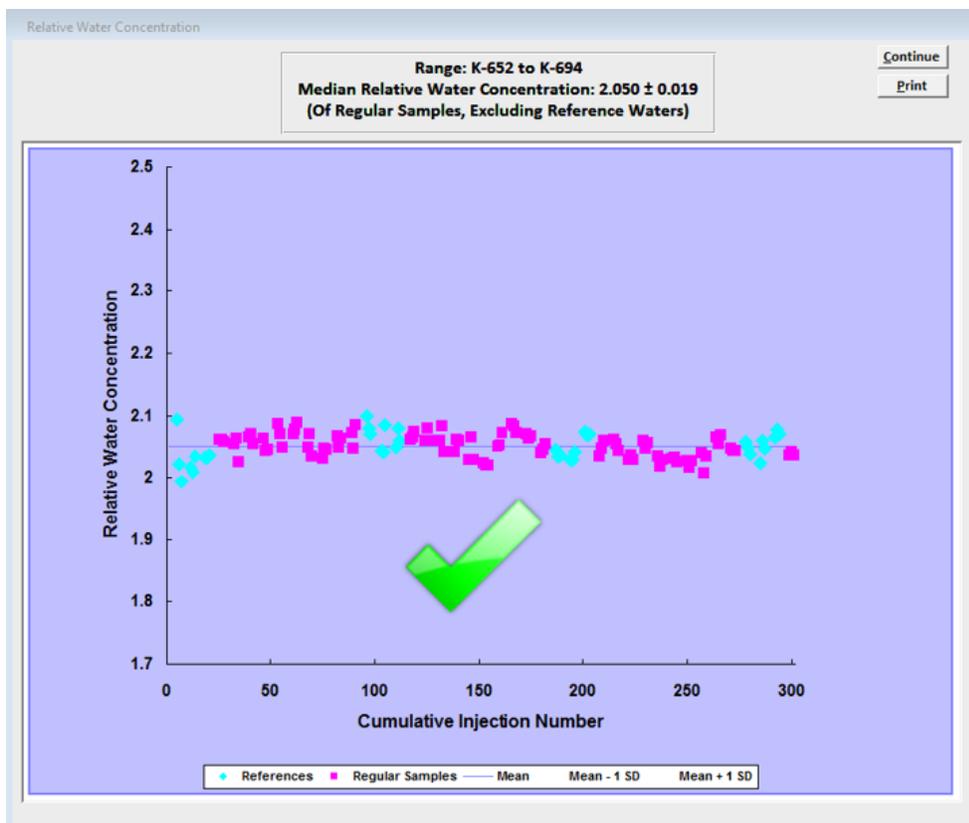
недостаточно заполнены или переполнены, или шприц почти не работает. Обнаружить неудачные инъекции в строках, разделенных запятыми (CSV) в Excel, очень сложно.

Чтобы проверить, нет ли неудачных инъекций, импортированные файлы данных предварительно проверяются *LIMS for Lasers 2015*, чтобы графически показать, были ли концентрации водяного пара H_2O в анализаторе постоянными на протяжении всего цикла. После импорта данных, аналитику предоставляется графическая зависимость концентрации водяного пара H_2O в анализаторе и количества инъекций. На графике показаны отдельные пробы и стандартные инъекции относительно 85% средней концентрации водяного пара H_2O в анализаторе. Результаты, выходящие за этот предел, помечаются, и отображаются их идентификаторы проб (sample ID); показывается предупреждение о том, что цикл может быть нарушен из-за отказа шприца. Это дает аналитику возможность просмотреть и проверить оборудование прибора или повторно проанализировать пробы прежде, чем будут импортированы ошибочные результаты.

Ниже приведены примеры скрининга исходных данных *LIMS for Laser 2015*, которые демонстрируют плохую работу шприца и/или утечку через прокладки, а также хорошую работу шприца:



Плохая работа шприца: из-за большой капли H_2O по причине протекания септы появилось большое отклонение H_2O . Синие символы - лабораторные стандарты; красные символы - пробы.



Хорошая работа шприца. Символы распределены, как показано выше.

Чтобы еще больше облегчить проверку данных перед импортом и обработкой, после графика зависимости концентрации водяного пара H_2O от инъекции представлена сводная таблица измеренных данных δ . В этой таблице, показанной ниже, несколько функций помогают дополнительно просмотреть и устранить неверные данные :

- Первые 4 инъекции автоматически игнорируются (IG); как указал пользователь.
- Инъекции, приводящие к инструментальным ошибкам, обозначены фиолетовым цветом, они автоматически игнорируются. Ошибка, возникшая из-за лазерного прибора, показана справа.
- Пробы с концентрацией H_2O выше 85 % от среднего значения обозначаются желтым, они не игнорируются автоматически, если не находятся в пределах первых 4 инъекций.
- Результаты измерения δ для любого флакона, имеющего средние стандартные отклонения более ± 0.2 и ± 1.5 ‰ для $\delta^{18}O$ и δ^2H , соответственно, для каждого флакона обозначены оранжевым цветом.
- Лабораторные стандарты обозначены голубым цветом для облегчения распознавания. Пробы обозначены белым цветом.

Import Criteria for Instrument K (Picarro 2140i)

Ignore relative water concentrations and delta values as appropriate. Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Continue
Cancel

Analysis	Inj	OurLabID	Vial Position	Rel H2O Conc	IG Conc	$\delta^2\text{H}$	IG $\delta^2\text{H}$	$\delta^{18}\text{O}$	IG $\delta^{18}\text{O}$
652	1	W-39	1-01	2.50	✓	-5.44	✓	0.039	✓
652	2	W-39	1-01	2.68	✓	15.90	✓	2.749	✓
652	3	W-39	1-01	2.08	✓	18.91	✓	3.072	✓
652	4	W-39	1-01	2.05	✓	20.64	✓	3.203	✓
652	5	W-39	1-01	2.09	☐	21.44	☐	3.294	☐
652	6	W-39	1-01	2.02	☐	22.05	☐	3.349	☐
652	7	W-39	1-01	1.99	✓	22.38	✓	3.355	✓
652			Means	2.06 ± 0.05	☐	21.75 ± 0.43	☐	3.322 ± 0.039	☐
653	1	W-34	1-02	2.03	✓	-180.86	✓	-24.358	✓
653	2	W-34	1-02	2.00	✓	-190.94	✓	-25.104	✓
653	3	W-34	1-02	2.00	✓	-193.59	✓	-25.309	✓
653	4	W-34	1-02	2.00	✓	-194.87	✓	-25.422	✓
653	5	W-34	1-02	2.02	☐	-195.28	☐	-25.499	☐
653	6	W-34	1-02	2.01	☐	-195.78	☐	-25.517	☐
653	7	W-34	1-02	2.03	☐	-195.90	☐	-25.523	☐
653			Means	2.02 ± 0.01	☐	-195.65 ± 0.33	☐	-25.513 ± 0.012	☐
654	1	W-34	1-03	2.05	✓	-196.11	✓	-25.569	✓
654	2	W-34	1-03	2.06	✓	-196.28	✓	-25.585	✓
654	3	W-34	1-03	2.05	✓	-196.63	✓	-25.520	✓
654	4	W-34	1-03	2.05	✓	-196.86	✓	-25.512	✓
654	5	W-34	1-03	2.03	☐	-196.83	☐	-25.543	☐
654	6	W-34	1-03	2.03	☐	-196.98	☐	-25.564	☐
654	7	W-34	1-03	2.30	✓	-220.00	✓	-25.554	✓
654			Means	2.12 ± 0.16	☐	-204.60 ± 13.33	☐	-25.554 ± 0.011	☐
655	1	W-17833	1-04	2.04	✓	-84.52	✓	-12.562	✓
655	2	W-17833	1-04	2.07	✓	-88.46	✓	-12.152	✓
655	3	W-17833	1-04	2.06	✓	-85.85	✓	-11.950	✓
655	4	W-17833	1-04	2.06	✓	-84.80	✓	-11.829	✓
655	5	W-17833	1-04	2.06	☐	-84.33	☐	-11.724	☐
655	6	W-17833	1-04	2.06	☐	-84.02	☐	-11.671	☐
655	7	W-17833	1-04	2.06	☐	-83.77	☐	-11.665	☐

Bad Injections

Analysis	Inj	Error
652	7	Bad Injection

$\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Ref for Additive Normalization: W-39

Reference for Scale Expansion: W-34

В этом примере аналитик должен проигнорировать 7-ую инъекцию анализа 654, прежде чем продолжить. Инструменты скрининга полезны для визуального обнаружения и удаления случайных ошибочных данных.

Примечание: Неэффективный запуск с множеством ошибок или цветowych отметок не может быть здесь надежно исправлен и никогда не должен быть импортирован. Вместо этого необходимо повторить анализ с помощью правильно работающего лазерного прибора.

Эффект «памяти» между пробами

Эффект «памяти» между пробами в *LIMS for Lasers 2015* количественно оценивается с использованием двух локальных пар стандартов, которые сильно различаются по своим значениям δ (по крайней мере, на 40 ‰ и 5 для $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ соответственно) и последовательно разнесены несколько раз на протяжении автозапуска. За образцом с существенно отличающимся значением δ следуют два последовательных флакона со вторым стандартом, чтобы рассчитать память между пробами. Поправки памяти для

стандартных наборов в автозапуске усредняются и применяются ко всем пробам в автозапуске. LIMS рассчитывает память между пробами, используя «не игнорируемые» инъекции пробы и стандартов.

Преимущество этого подхода заключается в том, что поправки на память вычисляются с использованием среднего значения повторяющихся группировок двух стандартов с сильно отличающимися значениями δ на протяжении всего автозапуска, а не непоследовательно среди пар различных проб, имеющих большие или небольшие различия в значениях δ . Кроме того, не имеет значения, сколько инъекций игнорируется, поскольку коррекция эффекта «памяти» между пробами определяется количественно и следует принципам идентичной обработки. Поправка на определенную среднюю память между пробами применяется ко *всем* анализируемым пробам независимо от их измеренных значений δ . В соответствии с передовой практикой мы рекомендуем игнорировать первые 3–4 ввода, что должно привести к уменьшению эффекта «памяти» (обычно <1–2%). См. [Раздел 11](#) для более подробной информации о расчетах.

Поправка на изменение δ в зависимости от концентрации водяного пара в анализаторе

Исследования показали, что зависимость величины δ каждого вида изотополога часто сильно коррелирует с концентрацией водяного пара в анализаторе лазера. Эта концентрационная зависимость дает возможность улучшить изотопные результаты за счет преднамеренной корректировки количества вводимой H_2O с использованием целевого лабораторного стандарта (например, с использованием триплетов 800, 1000 и 1200 мкл), помещенного в начале каждого цикла. Это позволит *LIMS for Lasers 2015* определять алгоритмы коррекции концентрации водяного пара H_2O для каждого значения δ .

Алгоритм регулировки концентрации водяного пара H_2O , если он является надежным, может применяться ко всем впрыскиваемым пробам для нормализации измеренных значений δ к постоянному количеству вводимой воды. В зависимости от прибора корректировка концентрации может привести к заметному улучшению результатов определения изотопов для одного или нескольких изотопологов и может помочь сгладить, например, эффекты различных инъекционных характеристик шприца.

Примечание: см. [Приложение 3](#) о том, как установить дополнительные корректировки для δ с относительной концентрацией водяного пара. Хотя опцию регулирования концентрации водяного пара H_2O нельзя использовать на предыдущих приборах Los Gatos Research, алгоритм регулировки концентрации водяного пара H_2O *LIMS for Lasers 2015* может использоваться на этих приборах и может существенно улучшить результаты.

Нарастающая инструментальная ошибка измерения

Нарастающая со временем инструментальная ошибка измерения в *LIMS for Lasers 2015* количественно оценивается с помощью регрессии по методу наименьших квадратов времени анализа по сравнению с одним или несколькими стандартами измерения, которые используются во время автозапуска. Поправка на нарастающую инструментальную ошибку измерения (указывается в ‰/час) определяется и применяется ко всем пробам. Однако нарастающая инструментальная ошибка измерения редко бывает линейной в течение длительных автозапусков (> 2–3 часов), а также может быть несогласованной у лабораторных стандартов в автозапуске (один стандарт показывает нарастание ошибки в положительную сторону, другой – в отрицательную). Следовательно, данная регрессия часто дает низкую статистическую достоверность (например, низкие значения R^2).

Тем не менее, *LIMS for Lasers 2015* дает пользователям возможность проверять единичную нарастающую инструментальную ошибку измерения с помощью одного или нескольких лабораторных стандартов. Одним из критериев необходимости применения линейной коррекции нарастающей инструментальной ошибки измерения является строго линейное смещение (например, $R^2 > 0.6$) и возникновение его в одном направлении (например, все смещение положительное) для двух или более стандартов. Только тогда можно с уверенностью применить линейную коррекцию нарастающей инструментальной ошибки измерения. Несмотря на то, что коррекция нарастающей инструментальной ошибки измерения прибора является необязательной, использование «граничной» нормализации данных (bracketed data normalization), применяемой по умолчанию, обычно дает лучшие результаты.

8.3 Шаблоны систематического анализа

В следующих разделах показаны примеры шаблонов анализа для приборов Los Gatos Research и Picarro, используемых в *LIMS for Lasers 2015*. Эти шаблоны были разработаны с целью обеспечения надежности и были протестированы для получения наилучших возможных результатов для всех поколений лазерных приборов. Кроме того, они были оптимизированы для получения точных определений эффекта «памяти» между пробами, при необходимости для количественной оценки нарастающей инструментальной ошибки измерения и для применения «граничной» (bracketed) нормализации данных стандартов и проб.

Примеры шаблонов анализа *LIMS for Lasers 2015* проиллюстрированы в виде таблицы и схемы последовательности анализа флаконов для приборов Los Gatos Research и Picarro, за которыми следуют отдельные разделы по настройке и использованию шаблонов анализа для каждого прибора.

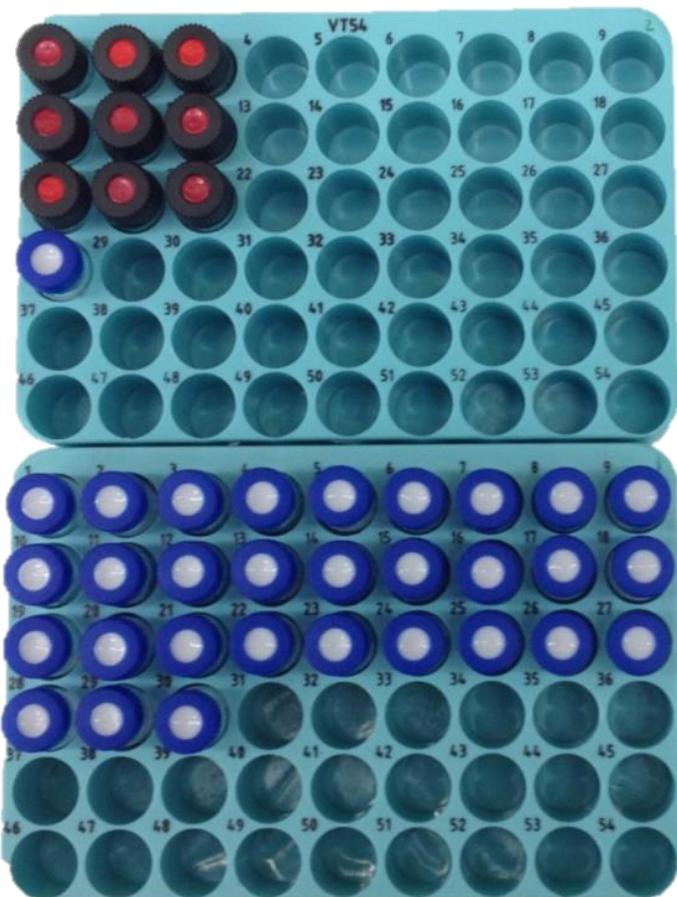
Обращаем внимание, что пользователи могут создавать свои собственные шаблоны анализа, и приведенные примеры служат подсказкой для начала. Несколько шаблонов Excel с 10, 20 и 30 пробами для исследований Picarro или Los Gatos можно найти в приложениях и на веб-сайте, также они включены в загрузки баз данных для новых приборов.

Таблица 1. Пример 30-пробного Шаблона Анализа для приборов Los Gatos Research. Неизвестные пробы располагаются последовательно в позициях 1–30 лотка 1 (передний лоток) автоматического пробоотборника Combi-PAL. Лабораторные стандарты, контрольные стандарты и условные образцы располагаются в лотке 3 (задний лоток), каждый в отдельном ряду. Рекомендуемая процедура анализа – 9 инъекций на пробу, игнорируя первые 4. Шаблон содержит 61 строку по 9 инъекций в каждой, всего 549 отдельных инъекций. Порядок выполнения – это последовательность, в которой анализируются пробы. Количество инъекций контролируется в программном обеспечении прибора Los Gatos.

Проба	Позиция флакона	Порядок запуска	Функция в <i>LIMS for Lasers 2015</i>
Деионизированная вода	3-28	1	Кондиционирование прибора
Деионизированная вода	3-28	2	Кондиционирование прибора
Стандарт высокого знач. δ	3-10	3	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-1	4	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-2	5	Граничная (Bracketed) нормализация
Проба 1	1-1	6	Неизвестная проба
Проба 2	1-2	7	Неизвестная проба
Проба 3	1-3	8	Неизвестная проба
Проба 4	1-4	9	Неизвестная проба
Проба 5	1-5	10	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	3-19	11	QA/QC
Стандарт низкого знач. δ	3-3	12	Эффект памяти между пробами
Стандарт высокого знач. δ	3-11	13	Эффект памяти между пробами
Стандарт высокого знач. δ	3-12	14	Граничная (Bracketed) нормализация
Проба 6	1-6	15	Неизвестная проба
Проба 7	1-7	16	Неизвестная проба
Проба 8	1-8	17	Неизвестная проба
Проба 9	1-9	18	Неизвестная проба
Проба 10	1-10	19	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	3-20	20	QA/QC
Стандарт высокого знач. δ	3-10	21	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-1	22	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-2	23	Граничная (Bracketed) нормализация
Проба 11	1-11	24	Неизвестная проба
Проба 12	1-12	25	Неизвестная проба
Проба 13	1-13	26	Неизвестная проба
Проба 14	1-14	27	Неизвестная проба
Проба 15	1-15	28	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	3-21	29	QA/QC

Стандарт низкого знач. δ	3-3	30	Эффект памяти между пробами
Стандарт высокого знач. δ	3-11	31	Эффект памяти между пробами
Стандарт высокого знач. δ	3-12	32	Граничная (Bracketed) нормализация
Проба 16	1-16	33	Неизвестная проба
Проба 17	1-17	34	Неизвестная проба
Проба 18	1-18	35	Неизвестная проба
Проба 19	1-19	36	Неизвестная проба
Проба 20	1-20	37	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	3-19	38	QA/QC
Стандарт высокого знач. δ	3-10	39	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-1	40	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-2	41	Граничная (Bracketed) нормализация
Проба 21	1-21	42	Неизвестная проба
Проба 22	1-22	43	Неизвестная проба
Проба 23	1-23	44	Неизвестная проба
Проба 24	1-24	45	Неизвестная проба
Проба 25	1-25	46	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	3-20	47	QA/QC
Стандарт низкого знач. δ	3-3	48	Эффект памяти между пробами
Стандарт высокого знач. δ	3-11	49	Эффект памяти между пробами
Стандарт высокого знач. δ	3-12	50	Граничная (Bracketed) нормализация
Проба 26	1-26	51	Неизвестная проба
Проба 27	1-27	52	Неизвестная проба
Проба 28	1-28	53	Неизвестная проба
Проба 29	1-29	54	Неизвестная проба
Проба 30	1-30	55	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	3-21	56	QA/QC
Стандарт высокого знач. δ	3-10	57	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-1	58	Эффект памяти между пробами
Стандарт низкого знач. δ	3-2	59	Граничная (Bracketed) нормализация
Деионизированная вода	3-28	60	Промывка DI Wash
Деионизированная вода	3-28	61	Промывка DI Wash

Расположение флаконов для шаблона анализа по умолчанию на Los Gatos Research Analysis



Лоток 3, ряд 1– Стандартный образец низкого значения $\delta \times 3$

Лоток 3, ряд 2– Стандартный образец высокого значения $\delta \times 3$

Лоток 3, Ряд 3– Контрольный стандарт $\delta \times 3$

Лоток 3, Ряд 4 – раствор DI for wash для промывки

Лоток 1– Неизвестные пробы размещены последовательно в позиции от 1 до 30

См. Таблицу 1 для описания.

Расположение проб на переднем и заднем лотке Los Gatos Research Combi-PAL

Примечание: В данном шаблоне анализа Los Gatos Research флаконы каждого стандарта для измерения и контроля содержат от ~ 1 до 1.5 мл воды. Трехкратное дублирование стандартов сделано намеренно, чтобы не полагаться на один флакон и обеспечить наилучшее возможное обеспечение/контроль качества (QA/QC). Объем ежедневной лабораторной стандартизованной воды, используемой на одну пробу для анализа, составляет от 3 до 4 мл, и был разработан так, чтобы соответствовать ежедневным стандартным ампулам, доступным для пользователей от USGS и IAEA (см. [Приложение 1](#)).

Таблица 2. Пример шаблона анализа 20 проб для приборов Picarro (СТС Pal).

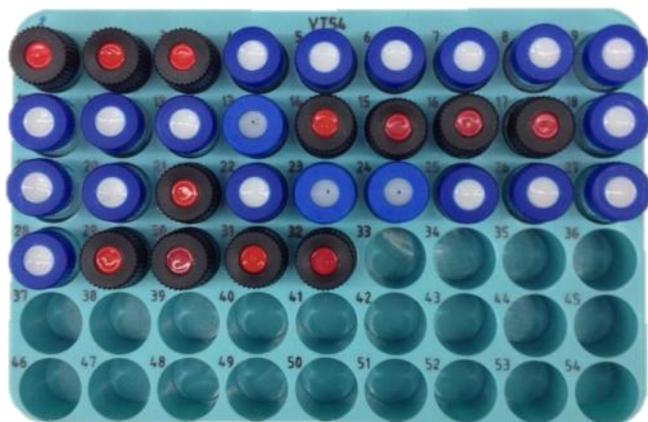
Пробы, местные стандарты измерения и контрольные стандарты располагаются последовательно в позициях 1–32 лотка 1. Рекомендуемая процедура – 9 инъекций на пробу без учета первых 4 инъекций. Этот шаблон содержит 32 ряда по 9 инъекций в каждой = 288 отдельных инъекций. Время анализа с помощью Picarro L2130i составляет ~32 часа. List# – это порядок, в котором анализируются пробы. Настоятельно рекомендуется предварительно кондиционировать приборы Picarro с 1-2 пробами деионизированной воды непосредственно до и после автозапуска (с использованием программного обеспечения Coordinator). Объем инъекции контролируется автоматическим пробоотборником СТС или G2000.

Проба	Позиция флакона	List#	Функция
Стандарт высокого знач. δ	1-01	1	Память/Нормализация
Стандарт низкого знач. δ	1-02	2	Память/Нормализация
Стандарт низкого знач. δ	1-03	3	Нормализация
Проба 1	1-04	4	Неизвестная проба
Проба 2	1-05	5	Неизвестная проба
Проба 3	1-06	6	Неизвестная проба
Проба 4	1-07	7	Неизвестная проба
Проба 5	1-08	8	Неизвестная проба
Проба 6	1-09	9	Неизвестная проба
Проба 7	1-10	10	Неизвестная проба
Проба 8	1-11	11	Неизвестная проба
Проба 9	1-12	12	Неизвестная проба
Проба 10	1-13	13	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	1-14	14	QA/QC
Стандарт высокого знач. δ	1-15	15	Память/Нормализация
Стандарт низкого знач. δ	1-16	16	Память/Нормализация
Стандарт низкого знач. δ	1-17	17	Нормализация
Проба 11	1-18	18	Неизвестная проба
Проба 12	1-19	19	Неизвестная проба
Проба 13	1-20	20	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	1-21	21	QA/QC
Проба 14	1-22	22	Неизвестная проба
Проба 15	1-23	23	Неизвестная проба
Проба 16	1-24	24	Неизвестная проба
Проба 17	1-25	25	Неизвестная проба
Проба 18	1-26	26	Неизвестная проба
Проба 19	1-27	27	Неизвестная проба
Проба 20	1-28	28	Неизвестная проба
Контрольный стандарт	1-29	29	QA/QC

Стандарт высокого знач. δ	1-30	30	Память/Нормализация
Стандарт низкого знач. δ	1-31	31	Память/Нормализация
Стандарт низкого знач. δ	1-32	32	Нормализация

Пример расположения флаконов для шаблона анализа в Picarro

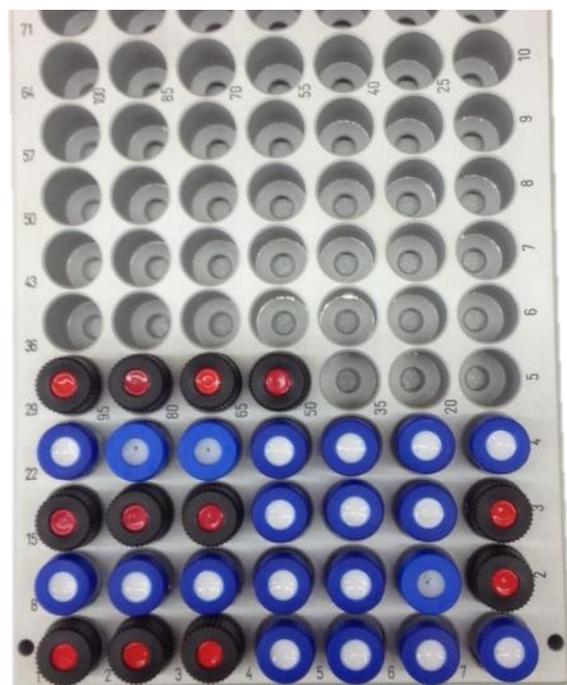
Пример шаблона анализа и расположения флаконов для 20 проб показано для



автоматического
пробоотборника Picarro Combi-
PAL.

Флаконы с синими крышками – это неизвестные пробы. Флаконы с красными крышечками – лабораторные стандарты и контрольные стандарты, соответствующие схеме, показанной в Таблице 2.

Выше: Передний лоток жидкостного автоматического пробоотборника Picarro Combi-PAL



Пример шаблона анализа и расположения флаконов на 20 проб для автоматического пробоотборника Picarro G-2000.

Флаконы с синими крышками - пробы. Флаконы с красными крышечками – лабораторные стандарты и контрольные стандарты, соответствующие схеме, показанной в Таблице 2.

(См. [Приложение 1](#) для альтернативного расположения)

Выше: Лоток жидкостного автоматического пробоотборника Picarro G-2000 Series

8.4 Создание шаблона анализа 30 проб для Los Gatos Research

1. На главной странице LIMS откройте “Special Features”
2. Нажмите “Instrument Templates”
3. Нажмите “Create a New Template”

The screenshot shows the 'Design Templates' window. At the top, there are navigation buttons: 'List Instrument Templates', 'LGR v2 - SMOW2 SLAP2', 'Create a New Template', 'Delete', 'Edit', and 'Close'. Below these are buttons for 'Edit Vial & Tray Positions', 'Export Vial & Tray Positions', and 'Import Vial & Tray Positions'. The main area is divided into sections: 'General Information' with fields for Name (LGR v2 - SMOW2 SLAP2), Description (54 samples), and Instrument (L--> LGR-V2); 'Sample Information' with fields for Sample for Unfilled Positions (W-3) and Number of injections (9); and 'Printing' with radio buttons for 'Print sample list' (selected) and 'Print sample list and multi-sheet template'. The 'Last Edit' timestamp is 4/7/2015 10:44:01 AM.

4. В поле названия «Name», введите соответствующее описание (например, Los Gatos Research 30 Проб).
5. В поле описания «Description» – добавьте необходимую дополнительную информацию (например, какие стандарты используются).
6. В поле инструмента «Instrument», выберите “L” или соответствующую букву для лазера Los Gatos Research.
7. Пробы для незанятых позиций (“Sample for Unfilled Positions”) по умолчанию устанавливается W-1 (фиктивная проба). Эта фиктивная проба используется, например, когда только 20 проб добавляются в 30-пробный шаблон. Это поле не может быть пустым.
8. Количество инъекций на пробу (Number of injections per sample) оставить равным 9.
9. Нажмите “Save”.
10. После сохранения поле “Name” нельзя редактировать; редактировать можно только описание и другие поля. Шаблон можно удалить и создать заново в случае ошибки.

Design Templates

LGR v2 - SMOW2 SLAP2

Save Cancel

Edit Vial & Tray Positions Duplicate this Template

Export Vial & Tray Positions

Import Vial & Tray Positions

General Information

Name: LGR v2 - SMOW2 SLAP2

Description: 54 samples

Instrument: L --> LGR-V2

Last Edit: 4/7/2015 10:44:01 AM

Sample Information

Sample for Unfilled Positions: W-3

Number of injections: 9

Printing

Print sample list

Print sample list and multi-sheet template

Создание шаблона анализа проб для Los Gatos на страницах «Template».

Последовательность анализа для стандартов измерения, контрольных стандартов и проб, заказчика можно настроить, нажав кнопку “Edit Vial and Tray Positions”. Появится шаблон страницы для 12 проб. Для заполнения нажмите «Edit» (заполненный пример ниже отражает строки 1–12 в таблице 1):

LGR 30

List | Page: 1 | Edit | Add Page | Delete Page | Close

Vial Pos: 3-28 Run Order: 1 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-3	Vial Pos: 3-28 Run Order: 2 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-3	Vial Pos: 3-10 Run Order: 3 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-31
Vial Pos: 3-1 Run Order: 4 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-32	Vial Pos: 3-2 Run Order: 5 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-32	Vial Pos: 1-1 Run Order: 6 Amt: 1200 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref
Vial Pos: 1-2 Run Order: 7 Amt: 1200 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-3 Run Order: 8 Amt: 1200 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-4 Run Order: 9 Amt: 1200 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref
Vial Pos: 1-5 Run Order: 10 Amt: 1200 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 3-19 Run Order: 11 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-33	Vial Pos: 3-3 Run Order: 12 Amt: 1200 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-32

Vial Pos = положение флакона с пробой в лотке автоматического пробоотборника.

Например, 1-1 означает Лоток 1, Позиция 1, а 3-7 означает Лоток 3, Позиция 7.

Run Order = Нумерованный порядок, в котором анализируются пробы, например 1,2,3... 30. (уникальный)

Amt = объем инъекции H₂O в нл (например, от 400 до 1200 нл для LGR). Это поле доступно только для систем IWA-35d / TIWA-45EP, но не для серии DLT-100. Если это поле оставлено пустым, объем инъекции регулируется с помощью панели настройки прибора.

Sample = выберите эту кнопку, чтобы обозначить неизвестный образец.

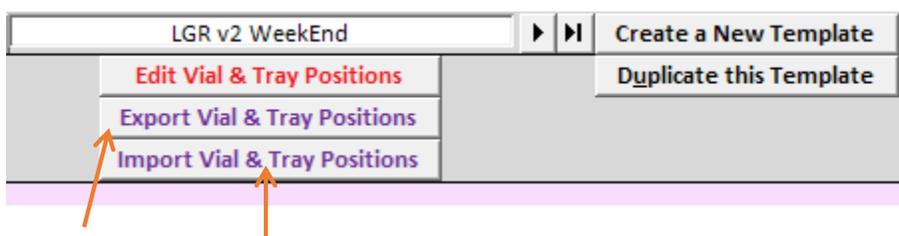
Fixed Ref = используйте выпадающий список, чтобы выбрать лабораторный стандарт, контрольный стандарт или образец для промывки.

Add Page /Delete Page = добавить больше страниц для увеличения длины шаблона. Всегда удаляйте страницы, начиная с последней страницы.

Использование Excel для разработки и импорта или экспорта шаблонов

Более удобно создавать шаблоны анализа в Excel, а затем импортировать их в *LIMS for Lasers 2015*. Функции автозаполнения, копирования и вставки в Excel упрощают и ускоряют проектирование и импорт нового шаблона анализа в *LIMS for Lasers 2015*.

«Export Vial and Tray Positions»: экспортировать выбранный шаблон анализа в файл Excel.
«Import Vial and Tray Positions»: импортировать шаблон анализа Excel в *LIMS for Lasers 2015*. Шаблон будет видимым, и его можно будет редактировать в обычном режиме редактирования страницы, как показано выше.



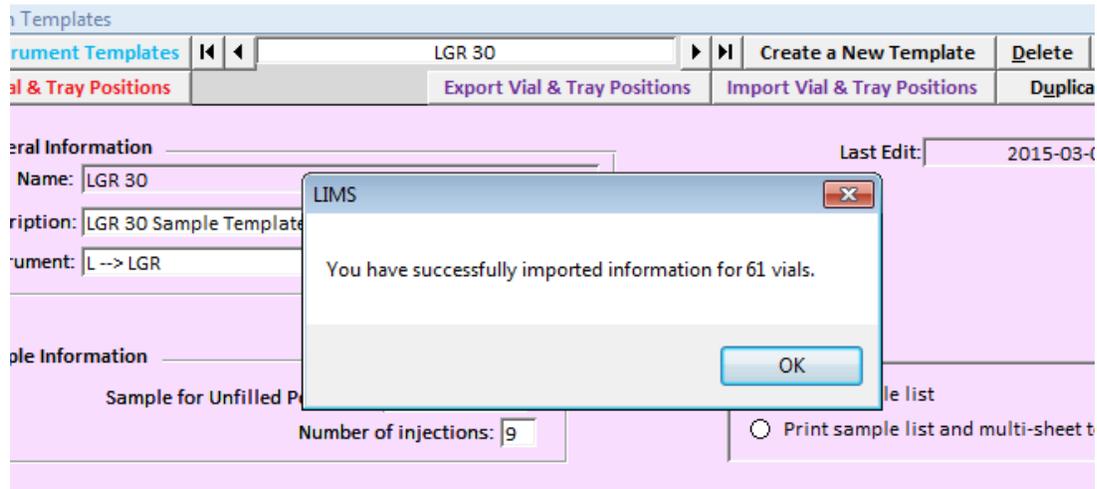
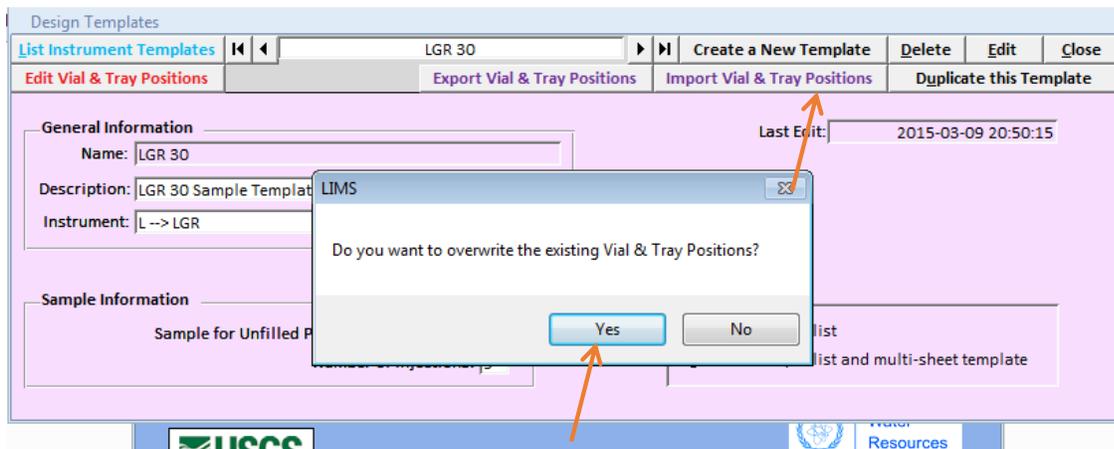
Графическое изображение страницы шаблона, показанное на предыдущей странице, представлено ниже в Excel. Для импорта заголовки электронной таблицы должны быть точно такими, как показано.

	A	B	C	D	E	F	G
	LIMS_List_No	Tray_Position	Ref_OurLabID	Page	Page_Position	Amount	
1	1	3-28	W-3	1	1	1200	
2	2	3-28	W-3	1	2	1200	
3	3	3-10	W-31	1	3	1200	
4	4	3-1	W-32	1	4	1200	
5	5	3-2	W-32	1	5	1200	
6	6	1-1		1	6	1200	
7	7	1-2		1	7	1200	
8	8	1-3		1	8	1200	
9	9	1-4		1	9	1200	
10	10	1-5		1	10	1200	
11	11	3-19	W-33	1	11	1200	
12	12	3-3	W-32	1	12	1200	
13							

Импорт шаблона из Excel

1. Чтобы импортировать шаблон из Excel, нажмите кнопку “Import Vial and Tray Positions”
2. Выберите файл Excel с шаблоном

3. Нажмите “Yes” (если были допущены ошибки, отобразится описательная ошибка).
4. Если предыдущий шаблон уже был создан, подтвердите, что он будет перезаписан.



Совет: одна из полезных функций страницы «Design Template» – кнопка “Duplicate”. Предположим, что вам нужны шаблоны анализа Los Gatos Research с 60, 30 и 10 пробами. Начните с создания самого большого (60 позиций) шаблона, продублируйте его, а затем отредактируйте, удалив страницы, чтобы получить меньший образец шаблона. Однако, по умолчанию для шаблона Los Gatos Research от вас потребуется воссоздание страниц стандартов и контрольных образцов, которые следуют за неизвестными пробами. Один раз созданные хорошо работающие аналитические шаблоны нужно редко менять.

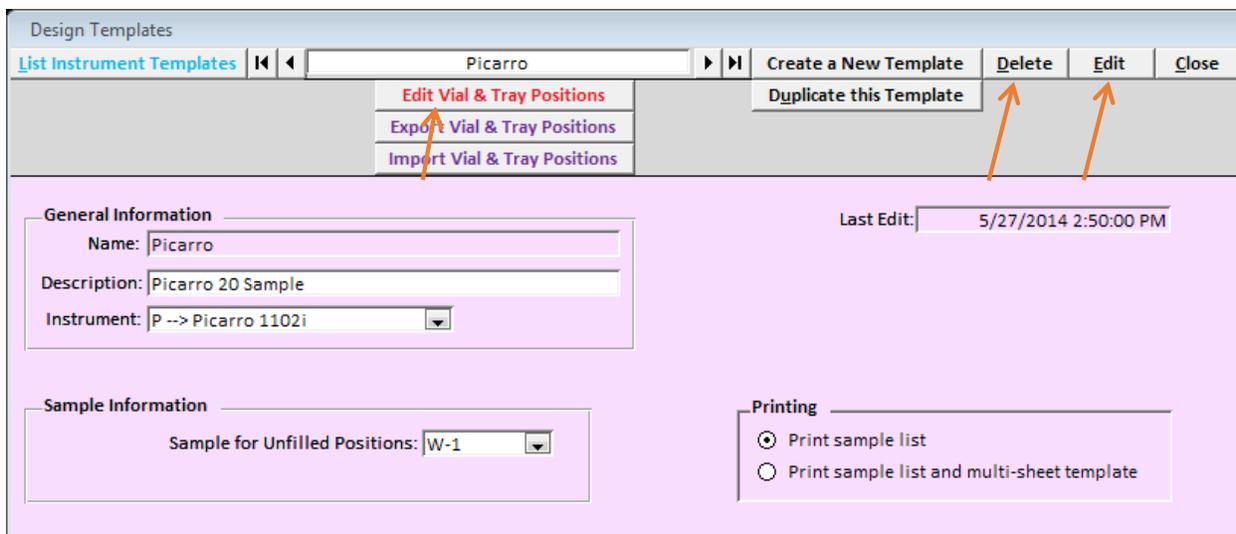
Внимание! Вы можете ошибочно перезаписать существующий шаблон анализа. Обязательно сначала продублируйте и переименуйте существующий редактируемый шаблон, *прежде чем* вносить в него изменения и сохранять их.

8.5 Создание шаблона анализа 20 проб для Picarro

1. На главной странице LIMS откройте “Special Features”
2. Нажмите на “Analysis Templates”
3. Нажмите “Create a New Template”

The screenshot shows the 'Design Templates' interface in LIMS. At the top, there is a navigation bar with 'List Instrument Templates' and a search field containing 'Picarro'. To the right of the search field are buttons for 'Create a New Template', 'Delete', 'Edit', and 'Close'. Below the search bar are three buttons: 'Edit Vial & Tray Positions' (highlighted in red), 'Export Vial & Tray Positions', and 'Import Vial & Tray Positions'. An orange arrow points to the 'Duplicate this Template' button. The main content area is divided into sections: 'General Information' with fields for Name (Picarro), Description (Picarro 20 Sample), and Instrument (P --> Picarro 1102i); 'Sample Information' with a field for Sample for Unfilled Positions (W-1); and 'Printing' with two radio button options: 'Print sample list' (selected) and 'Print sample list and multi-sheet template'. The 'Last Edit' timestamp is 5/27/2014 2:50:00 PM.

4. В поле названия «Name», введите соответствующее наименование (напр., Picarro 20 проб)
5. В поле описание «Description» – добавьте необходимую дополнительную информацию
6. В поле инструмента «Instrument», выберите “P” для Picarro
7. В поле “Sample for Unfilled Positions” (Пробы для незанятых позиций) по умолчанию устанавливается W-1 (фиктивная проба), которая используется, например, когда только 10 проб добавляются в 20-пробный шаблон. Данное поле не может быть пустым.



8. Нажмите “Save”.
9. После сохранения поле “Name” нельзя редактировать; редактировать можно только описание и другие поля. Шаблон можно удалить или отредактировать в случае ошибки, как показано ниже.

Редактирование шаблонов анализа Picarro с использованием Страниц

Последовательность анализа для стандартов измерения, контрольных стандартов и проб заказчиков можно настроить, нажав “Edit Vial and Tray Positions”. Появится пустая страница для 12 проб. Нажмите «Edit» для заполнения (заполненный ниже пример отражает строки 1–12 в таблице 2):

Vial Pos = положение флакона с пробой в лотке автоматического пробоотборника.

Например, 1-1 означает Лоток 1, Позиция 1, а 3-7 означает Лоток 3, Позиция 7.

Run Order = Нумерованный порядок, в котором анализируются пробы, напр. 1,2,3.... 30.

Sample = Выберите эту кнопку, чтобы обозначить неизвестный образец.

Fixed Ref = используйте выпадающий список, чтобы выбрать лабораторный стандарт, контрольный стандарт или образец для промывки.

Add Page /Delete Page = добавить больше страниц для увеличения длины шаблона.

Всегда удаляйте страницы, начиная с последней страницы.

Picarro 20 Sample

List Page: 1 Edit Add Page Delete Page Close

Vial Pos: 1-01 Run Order: 1 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-31	Vial Pos: 1-02 Run Order: 2 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-32	Vial Pos: 1-03 Run Order: 3 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-32
Vial Pos: 1-04 Run Order: 4 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-05 Run Order: 5 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-06 Run Order: 6 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref
Vial Pos: 1-07 Run Order: 7 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-08 Run Order: 8 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-09 Run Order: 9 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref
Vial Pos: 1-10 Run Order: 10 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-11 Run Order: 11 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref	Vial Pos: 1-12 Run Order: 12 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref

Использование Excel для разработки и импорта или экспорта шаблонов

Более удобным путем можно создавать шаблоны анализа в Excel, а затем импортировать их в *LIMS for Lasers 2015*. Функции автозаполнения, копирования и вставки в Excel упрощают и ускоряют проектирование и импорт нового шаблона анализа в *LIMS for Lasers 2015*.



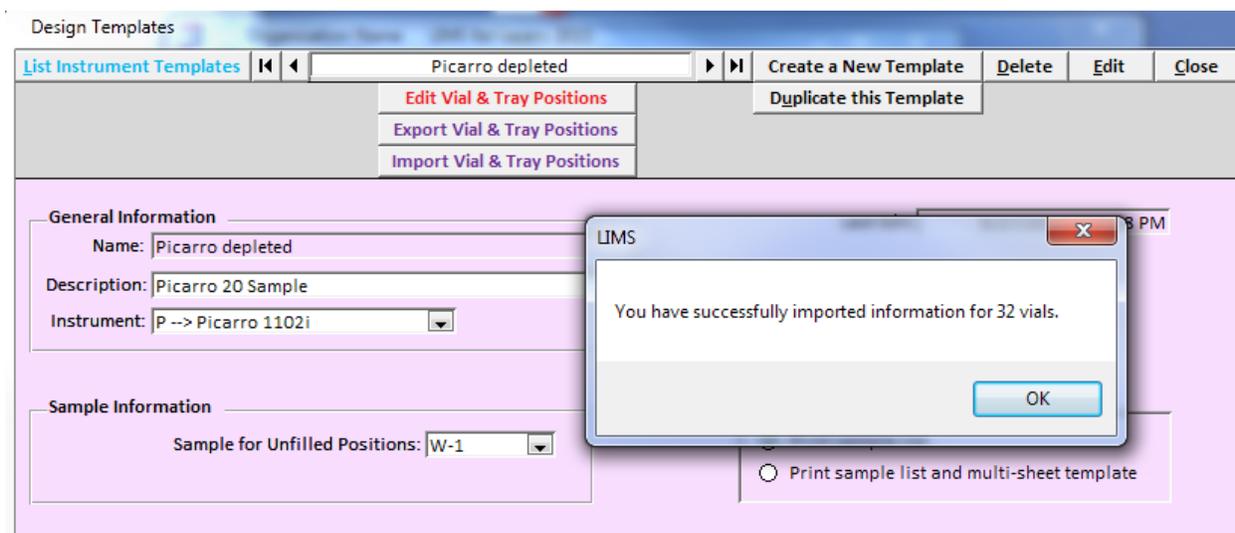
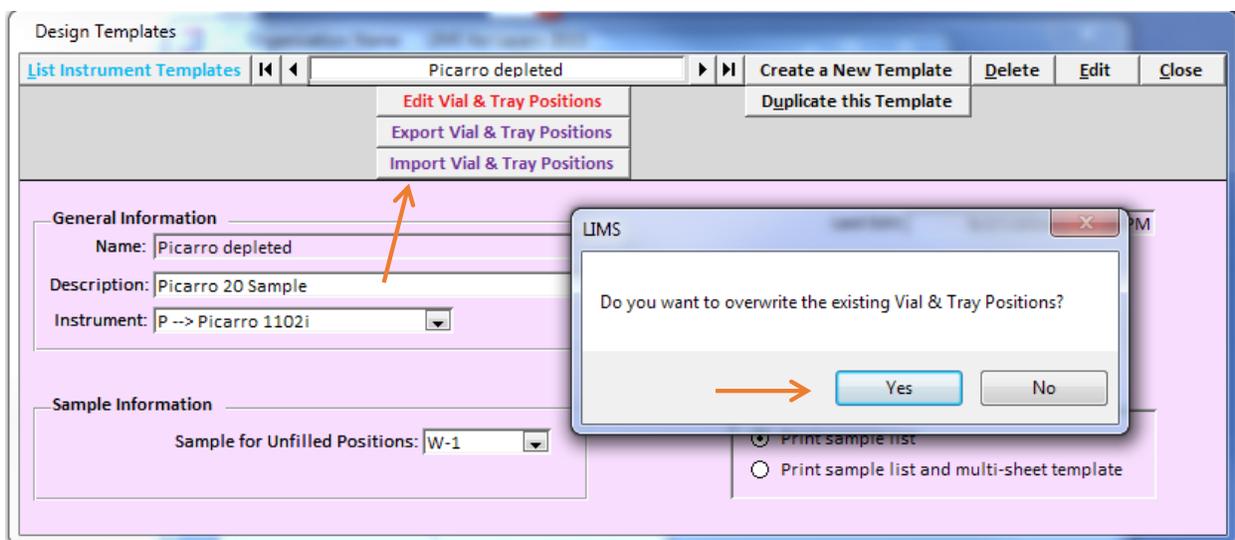
Графическое изображение страницы шаблона, показанное на предыдущей странице, представлено ниже в Excel. Для импорта заголовки электронной таблицы должны быть точно такими, как показано.

A1					
fx LIMS_List_No					
	A	B	C	D	E
1	LIMS_List_No	Tray_Position	Ref_OurLabID	Page	Page_Position
2	1	1-01	W-31	1	1
3	2	1-02	W-32	1	2
4	3	1-03	W-32	1	3
5	4	1-04		1	4
6	5	1-05		1	5
7	6	1-06		1	6
8	7	1-07		1	7
9	8	1-08		1	8
10	9	1-09		1	9
11	10	1-10		1	10
12	11	1-11		1	11
13	12	1-12		1	12
14					

«Export Vial and Tray Positions»: экспортировать выбранный шаблон анализа в файл Excel.
 «Import Vial and Tray Positions»: импортировать шаблон анализа Excel в *LIMS for Lasers 2015*. Шаблон будет видимым, и его можно будет редактировать в обычном режиме редактирования страницы, как показано выше.

Импорт шаблона из Excel

1. Чтобы импортировать шаблон из Excel, нажмите кнопку “Import Vial and Tray Positions”
2. Выберите файл Excel с шаблоном
3. Нажмите “Yes” (если были допущены ошибки, отобразится описание).
4. Если предыдущий шаблон уже был создан, подтвердите, что он будет перезаписан.



Совет: одна из полезных функций страницы «Design Template» – кнопка “Duplicate”. Предположим, что вам нужны шаблоны анализа Picarro с 60, 30 и 10 пробами. Начните с создания самого большого (60 позиций) шаблона, продублируйте его, а затем отредактируйте, удалив страницы, чтобы получить меньший образец шаблона. Однако, по умолчанию для шаблона Picarro от вас потребуются воссоздание страниц стандартов и контрольных образцов, которые следуют за неизвестными пробами. Один раз созданные хорошо работающие аналитические шаблоны нужно редко менять.

Внимание! Вы можете ошибочно перезаписать существующий шаблон анализа. Обязательно сначала продублируйте и переименуйте существующий редактируемый шаблон, *прежде чем* вносить в него изменения и сохранять их.

8.6 Распечатка многостраничного макета размещения проб

Размещение бутылок с пробами воды и флаконов в соответствии с шаблоном лазерного анализа может быть облегчено за счет распечатки шаблона из нескольких листов. Такая опция позволяет распечатать макет последовательности размещения проб, соответствующий шаблону анализа, и помогает персоналу систематизировать пробы и флаконы на лабораторном столе, как правило, за день до анализа проб. Таким образом, второй сотрудник может подтвердить, что каждая проба была помещена в правильное место на распечатке многолистного шаблона, что повысит качество работы лаборатории.

Design Templates

List Instrument Templates | Picarro depleted | Create a New Template | Delete | Edit | Close

Edit Vial & Tray Positions | Duplicate this Template

Export Vial & Tray Positions

Import Vial & Tray Positions

General Information

Name: Picarro depleted | Last Edit: 5/27/2014 2:35:28 PM

Description: Picarro 20 Sample

Instrument: P --> Picarro 1102i

Sample Information

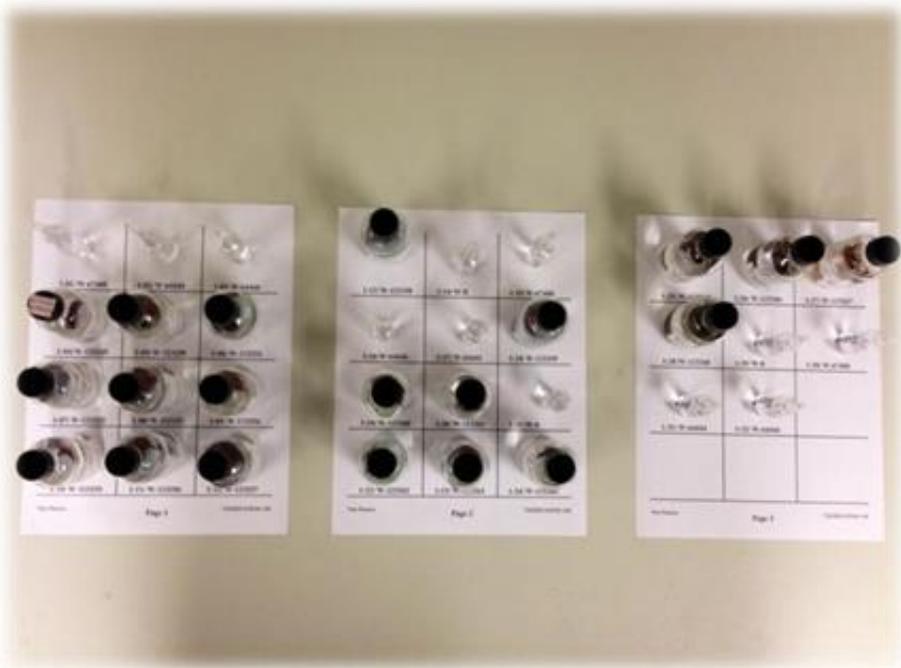
Sample for Unfilled Positions: W-1

Printing

Print sample list

Print sample list and multi-sheet template

Включение этого параметра приводит к отображению стандартной одностраничной ведомости проб с дополнительными многолистными шаблонами размещения проб на нескольких листах, как показано ниже. Схема из 20 проб на фотографии ниже иллюстрирует шаблон с соответствующими пробами и стандартами, которые необходимо разлить во флаконы для лазерного анализа.



Распечатанный многостраничный шаблон LIMS для расположения проб.

8.7 Добавление проб в шаблон анализа

Если вы хотите добавить пробы в шаблон анализа, заказчик, проекты и пробы должны уже быть созданы в *LIMS for Lasers 2015* (см. [Раздел 6.1](#)).

Чтобы это проиллюстрировать, мы проанализируем проект, содержащий пробы воды от Джона Смита (см. [Раздел 6](#)). Смит представил 10 проб воды для анализа на приборах Picarro и Los Gatos Research. Значения $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$ проб соответствуют диапазону номеров Our Lab ID от W-1001 до W-1010 (см. ниже).

Find Project

Select Project Criteria

Name: Purpose contains:

After (date): Location contains:

Before (date): Projects Ready To Report

List of Selected Projects

Save

Print

Remove a project from the window below by pressing the Delete key on the keyboard

Submission	LastName	Range	Purpose
1/1/1995	Reference	W-4	Reference Gas Proxy for Lasers - Do not delete
9/27/2012	Test	W-1 to W-2	Test or Dummy Samples
9/27/2012	Reference	W-3	Wash and Conditioning Sample
9/27/2012	Reference	W-5 to W-30	Primary International References
9/27/2012	Reference	W-31 to W-69	Daily Use Lab Standards
8/24/2015	Smith	W-1001 to W-1010	Water Resources Project

8.8 Добавление проб в очередь анализа Picarro

1. Откройте “Water Resource Project” Смита со страницы проектов двойным щелчком.
2. Нажмите “Add Samples to Instrument Template”.

Projects

List All Projects | 72 | Edit | Delete | Close

Show Samples | Export Results | Delta Plot | Invoice | Print Labels

Add Samples to Instrument Template | Print Report | Find Project By Invoice No | Print Small Labels

Unpaid Invoices

General Information | Last Changed: 8/24/2015

Submission: 8/24/2015 | Date Results Reported:

Customer: Smith, John

Range: W-1000 to W-1010

Purpose: Water Resources Project

Location:

Project Comments:

Number of samples with missing delta values: 11 of 11 samples

Number of Missing $\delta^2\text{H}$ Samples: 11

Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 11

Add Samples To Be Analyzed 8/24/2015 Smith 10 samples

Samples can be added to the Table of Samples to be Analyzed.
Select the Template and select 'Add At' the Front of the queue or the End of the queue.

[Add Samples to Selected Template](#)

General Information

Template: ▾

From:

To:

Number of non-consecutive sample repeats:
For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have W-7, W-8, and W-9 on one template AND W-7, W-8, and W-9 on the next template

Number of consecutive sample repeats:
For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have samples W-7, W-7, W-8, W-8, W-9, and W-9 all on one template

Add At

Front of the queue

End of the queue (default position)

3. В выпадающем списке “Template” выберите “Picarro 20 Sample”, а затем нажмите кнопку “Add Samples to Selected Template” в правом верхнем углу.
4. Теперь 20 проб добавлены в очередь анализа Picarro.

8.9 Добавление проб в очередь анализа Los Gatos Research

1. Откройте “Water Resource Project” Смита на странице проектов двойным щелчком.
2. Нажмите “Add Samples to Instrument Template” сверху слева.

Projects

List All Projects | 72 | Edit | Delete | Close

Show Samples | Export Results | Delta Plot | Invoice | Print Labels

Add Samples to Instrument Template | Print Report | Find Project By Invoice No | Print Small Labels

Unpaid Invoices

Last Changed: 8/24/2015

General Information

Submission: 8/24/2015

Date Results Reported: []

Customer: Smith, John

Range: W-1000 to W-1010

Purpose: Water Resources Project

Location: []

Project Comments: []

Number of samples with missing delta values: 11 of 11 samples

Number of Missing $\delta^{2}\text{H}$ Samples: 11

Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 11

3. В выпадающем списке “Template” выберите “Los Gatos Research 30 Samples...”, затем нажмите кнопку “Add Samples to Selected Template” в правом верхнем углу.
4. Теперь 30 проб добавлены в шаблон анализа Los Gatos Research.

Add Samples To Be Analyzed 8/24/2015 Smith 10 samples

Samples can be added to the Table of Samples to be Analyzed. Select the Template and select 'Add At' the Front of the queue or the End of the queue.

[Add Samples to Selected Template](#)

General Information

Template: Los Gatos 20 Sample -- Los Gatos 20 Sample

From: 1000

To: 1010

Number of non-consecutive sample repeats: 2
 For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have W-7, W-8, and W-9 on one template AND W-7, W-8, and W-9 on the next template

Number of consecutive sample repeats: 1
 For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have samples W-7, W-7, W-8, W-8, W-9, and W-9 all on one template

Add At

Front of the queue

End of the queue (default position)

Помните: шаблоны анализа LIMS уникальны для каждого отдельного прибора.

8.10 Параметры добавления проб

На страницах “Add Samples to be Analysed” выше есть несколько полезных функций, которые следует учесть, прежде чем нажимать кнопку “Add” для добавления проб в очередь:

Поле “From” и поле “To”

Поля выбора “From” и “To” подтверждают диапазон идентификаторов лаборатории (Lab ID) для проб, которые будут добавлены в очередь. По умолчанию все пробы в проекте заказчика предлагается добавить в очередь проб Джона Смита от W-1001 до W-1010.

Однако, если необходимо выбрать только первые пять проб, взятых г-ном Смитом, можно ввести «1005» в поле “To”.

Если необходимо проанализировать только последние пять проб проекта, то можно ввести "From" -1006 и "To" - 1010.

Количество непоследовательных повторов (настройка по умолчанию = 2)

Количество непоследовательных повторов обычно установлено на «2». Это означает, что лаборатория дважды проанализирует пробы г-на Смита, используя 2 разных флакона для этого шаблона анализа, и предпочтительно в разные дни. Например, для небольшого проекта из 3 (1,2,3):

Настройка = 1	Очередность проб: 1,2,3
Настройка = 2	Очередность проб: 1,2,3,1,2,3
Настройка = 4	Очередность проб: 1,2,3,1,2,3,1,2,3,1,2,3

Количество последовательных повторов (настройка по умолчанию = 1)

Изменение этого значения на более высокое означает, что каждая проба помещается в очередь «группой», так, для небольшого проекта с 3 образцами (1,2,3):

Настройка = 1	Очередность проб: 1,2,3
Настройка = 2	Очередность проб: 1,1,2,2,3,3
Настройка = 4	Очередность проб: 1,1,1,1,2,2,2,2,3,3,3,3,4,4,4,4

При использовании обоих параметров, устанавливая «Последовательный» и «Непоследовательный анализ» значения «2» приводит к такому виду:

Очередность проб: 1,1,2,2,3,3,1,1,2,2,3,3

Add Samples To Be Analyzed 8/24/2015 Smith 10 samples

Samples can be added to the Table of Samples to be Analyzed. Select the Template and select 'Add At' the Front of the queue or the End of the queue.

[Add Samples to Selected Template](#)

Delete

Close

General Information

Template: Los Gatos 20 Sample -- Los Gatos 20 Sample

From: 1000

To: 1010

Number of non-consecutive sample repeats: 2

For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have W-7, W-8, and W-9 on one template AND W-7, W-8, and W-9 on the next template

Number of consecutive sample repeats: 1

For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have samples W-7, W-7, W-8, W-8, W-9, and W-9 all on one template

Add At

Front of the queue

End of the queue (default position)

Поле "Add At" (Настройка по умолчанию = end of queue (конец очереди))

Возможность добавлять пробы в начало очереди позволяет быстро отслеживать пробы с высоким приоритетом перед теми, которые уже находятся в очереди.

Например, если часть проб из очереди уже проанализированы, и поступило 5 срочных проб, можно добавить 5 проб из этого срочного проекта в начало очереди ("Front of the Queue").

Если в очереди на анализ нет непроанализированных проб, выбор любого из этих вариантов приводит к одному и тому же результату.

8.11 Удаление проб из очереди

Пробы, добавленные в очередь шаблона анализа, будут продолжать накапливаться по мере добавления до тех пор, пока все пробы не будут измерены и их индикатор выполнения (“run flag”) не будет иметь значение ноль, или они не будут полностью удалены из очереди.

Есть два способа удалить пробы из текущей очереди шаблона анализа. Например, это действие может потребоваться, если вы по ошибке добавили пробы не в тот шаблон прибора или просто хотите удалить отмененные пробы.

Удаление проб из очереди на странице проекта

Если вы добавили пробы из всего проекта в очередь шаблона анализа, они могут быть удалены так же, как были добавлены. На панели «Project» нажмите “Add Samples to Instrument Template”. Откроется следующее окно – теперь нажмите “Delete”, чтобы удалить все пробы проекта из очереди шаблонов, или поочередно удалите выбранные пробы, используя поля “From” и “To”.

Add Samples To Be Analyzed 8/24/2015 Smith 10 samples

Samples can be added to the Table of Samples to be Analyzed. Select the Template and select 'Add At' the Front of the queue or the End of the queue.

[Add Samples to Selected Template](#)

General Information

Template: Los Gatos 20 Sample -- Los Gatos 20 Sample

From: 1000

To: 1010

Number of non-consecutive sample repeats: 2
 For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have W-7, W-8, and W-9 on one template AND W-7, W-8, and W-9 on the next template

Number of consecutive sample repeats: 1
 For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have samples W-7, W-7, W-8, W-8, W-9, and W-9 all on one template

Add At

Front of the queue

End of the queue (default position)

Удаление проб Смита из очереди анализа Picarro в рамках проекта одним щелчком мыши.

Удаление и редактирование добавленных в очередь проб в шаблоне вручную

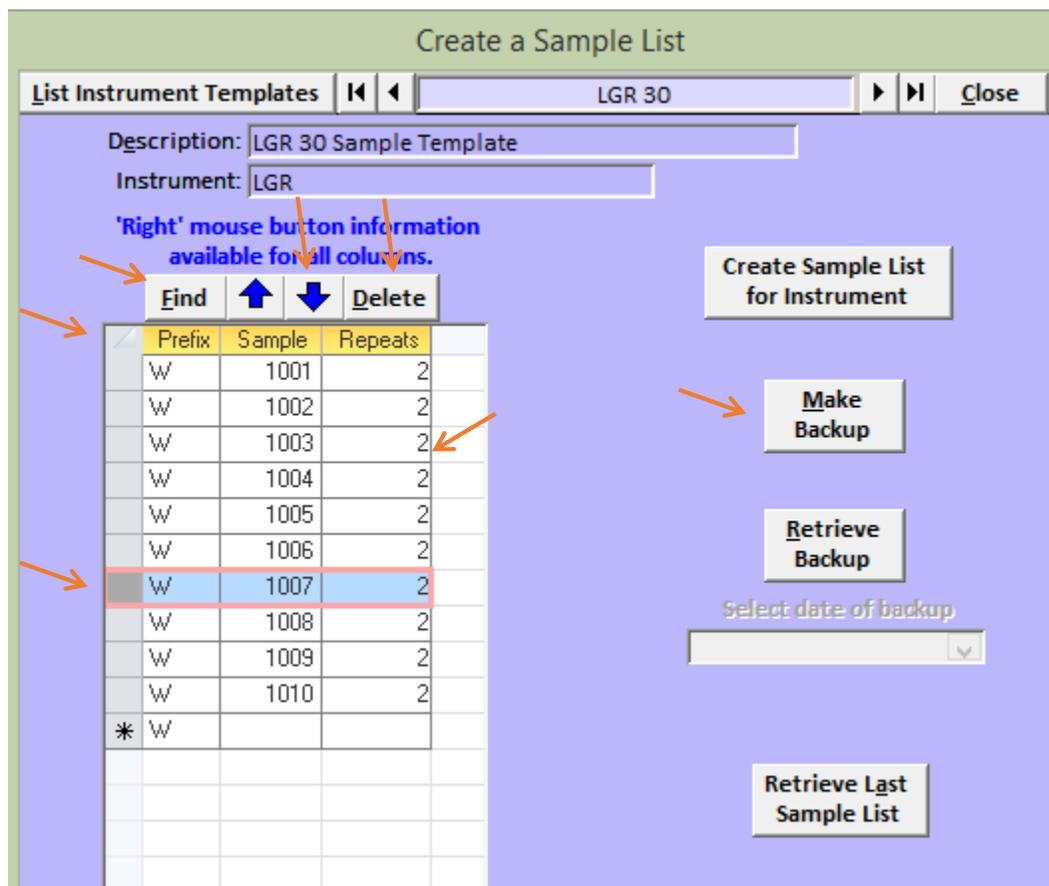
Второй способ редактирования очереди шаблона анализа - вручную:

1. На главной странице нажмите "Create Sample List for Instruments".
2. Из "List Instrument Templates" выберите ту очередь шаблона прибора, которую вы хотите отредактировать.

Вам доступен набор опций ручного редактирования:

- Используйте кнопку "Find", чтобы найти конкретную пробу в очереди (полезно для длинных очередей).
- Перемещайте пробы вверх или вниз в порядке приоритета, выделяя и двигая их с помощью клавиш со стрелками синего цвета.
- Удалите пробу или группу проб, выделив ячейки пробы и нажав "Delete".
- Вручную отредактируйте количество повторов для одной или нескольких проб (установите флажок от 0 до > 1).

- Полностью очистите всю очередь, нажав верхний левый маркер, чтобы выделить все (как в Excel), а затем нажав клавишу “Delete” на клавиатуре.
- Сделайте резервную копию очереди и восстановите ее (мера предосторожности в случае ошибок редактирования).
- Загрузите список последних использованных проб (полезно для повторных запусков), не переходя к этапам добавления проб со страницы проекта «Project».



LIMS for Lasers 2015 Manual Sample Queue Editing.

8.12 Повторные пробы в LIMS for Lasers 2015

Политика *LIMS for Lasers 2015* по умолчанию заключается в том, что все пробы измеряются дважды, предпочтительно в разные дни. Предпочтительным является выполнение двух или более повторных анализов каждой пробы (в разных флаконах). Данная опция может быть изменена вручную (см. [Раздел 12.5](#)).

Проведение двух или более анализов одной и той же пробы помогает выявлять ошибки размещения флаконов, позволяет оператору проверять соответствие между двумя или более анализами одной и той же пробы, помогает идентифицировать проблемные образцы (например, неудачные повторы), и позволяет сравнивать эффективность повторения проб с контрольными стандартами в одном анализе. Такой подход дает реалистичные показатели общей производительности лазера.

Примечание. Некоторые предполагают, что для получения достаточной точности $\delta^{17}\text{O}$ необходимо по крайней мере 50 или более повторов в нескольких флаконах по сравнению с обычными анализами $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$.

8.13 Номер следующей пробы

Кнопка “Next Sample Number” находится в разделе “Special Features”. Данная опция позволяет указать следующий идентификационный лабораторный номер (Our Lab ID), присвоенный вновь импортированным пробам.

Хотя данная опция редко требуется (например, для исправления ошибок), она полезна для добавления лабораторных эталонов и удержания их в пределах определенного диапазона «W». Как правило, предпочтительнее и легче запоминать эталоны с низкими последовательными числами W.

Например, по умолчанию пробы заказчиков *LIMS for Lasers 2015* начинаются с W-1001. Последней зарезервированной позицией по умолчанию для наших лабораторных стандартов является W-69. Это означает, что идентификационные номера Our Lab ID от W-70 до W-997 по-прежнему доступны для присвоения новым стандартам измерений.

При нажатии на кнопку “Next Sample Number” отображается следующий номер W, который будет присвоен входящим пробам заказчиков – здесь ниже W-1011 - это следующий номер Our Lab ID.

Next Our Lab ID

List | << | < | W | > | >> | Edit | Close

The Our Lab ID consists of a letter prefix (W) and the integer sample number. The 'Next Sample' below is the next integer that LIMS will assign when logging in samples.

You may edit the Next Sample value, but be careful to avoid entering any value that already exists in the database because you may corrupt the database.

Our Lab ID

Prefix: W

Description: Water

Next Sample: 1011

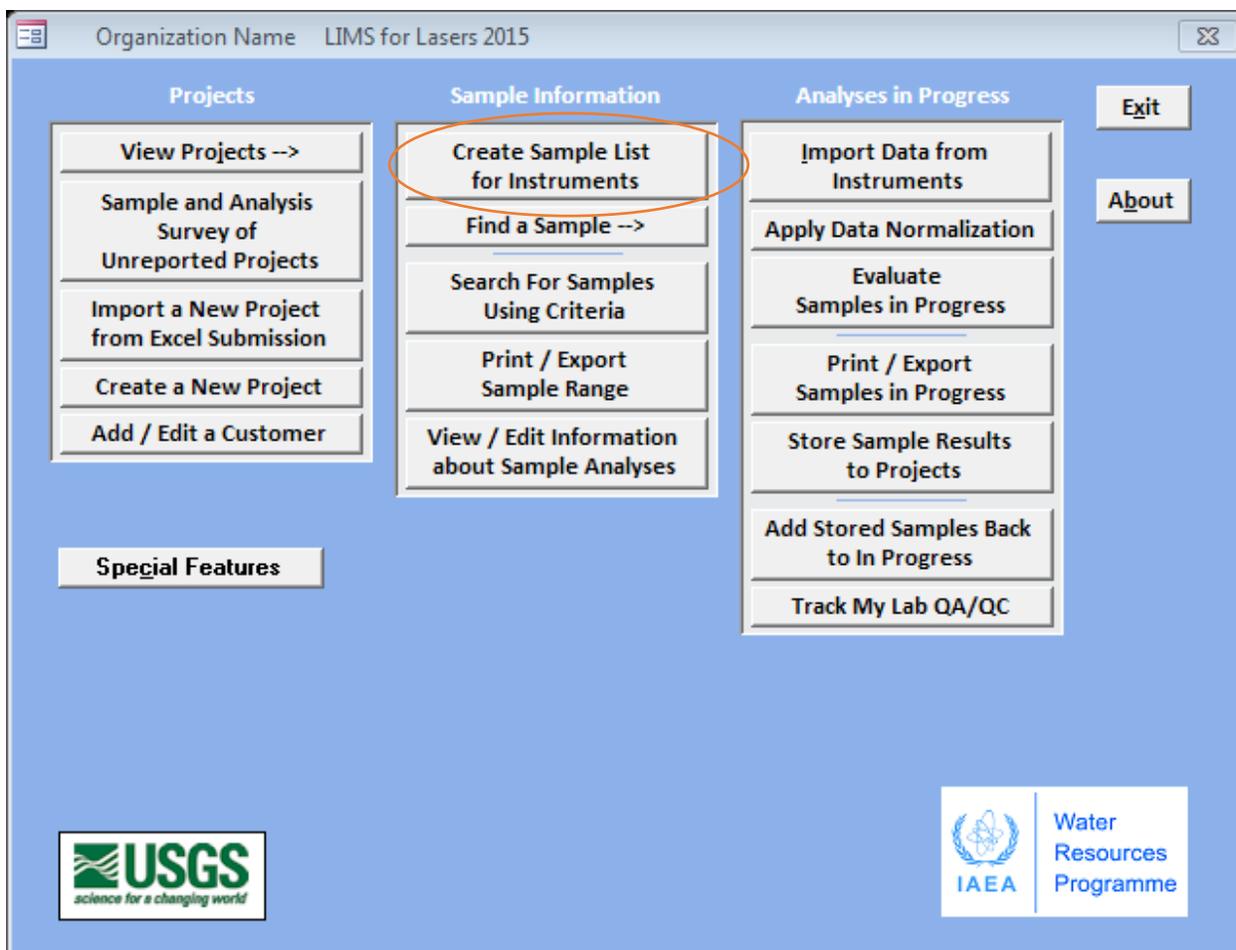
Предположим, вы хотите добавить 10 новых лабораторных стандартов, но при этом они должны последовательно соответствовать текущим лабораторным стандартам (например, оканчивающимся на W-69). Сначала обратите внимание на последнее показанное число W (в примере это W-1011 – последний из проб Смита) и запишите его. Нажмите “Edit”, измените “Next Sample” на 70 и нажмите “Save”. Затем импортируйте 10 новых эталонов в новый проект, как описано в [Разделе 6](#). Им будут присвоены идентификационные номера Our Lab ID от W-70 до W-79.

Внимание!: По завершении вернитесь к опции «Next Sample Number», нажмите “Edit” и измените номер на тот, что был изначально найден (в примере – W-1011). Данное действие гарантирует, что вы не перекроете какие-либо ранее созданные номера W.

9 Запуск проб на лазере Picarro

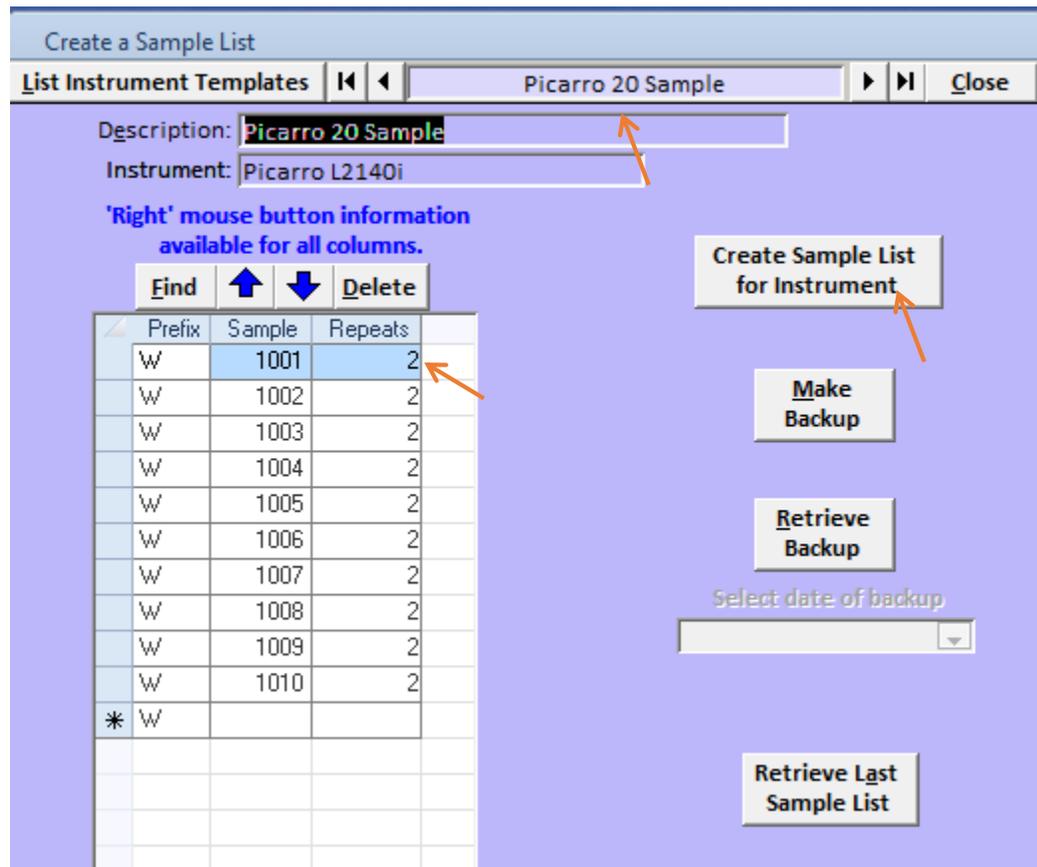
9.1 Создание списка проб для прибора Picarro

LIMS for Lasers 2015 создает списки проб (иначе называемые файлами последовательностей или списками запусков) для приборов Picarro. Списки проб передаются через USB-накопитель или по сети в лазерный прибор Picarro для анализа. Данное действие выполняется с помощью кнопки “Create Sample List for Instruments” в столбце «Sample Information» на главной странице LIMS.



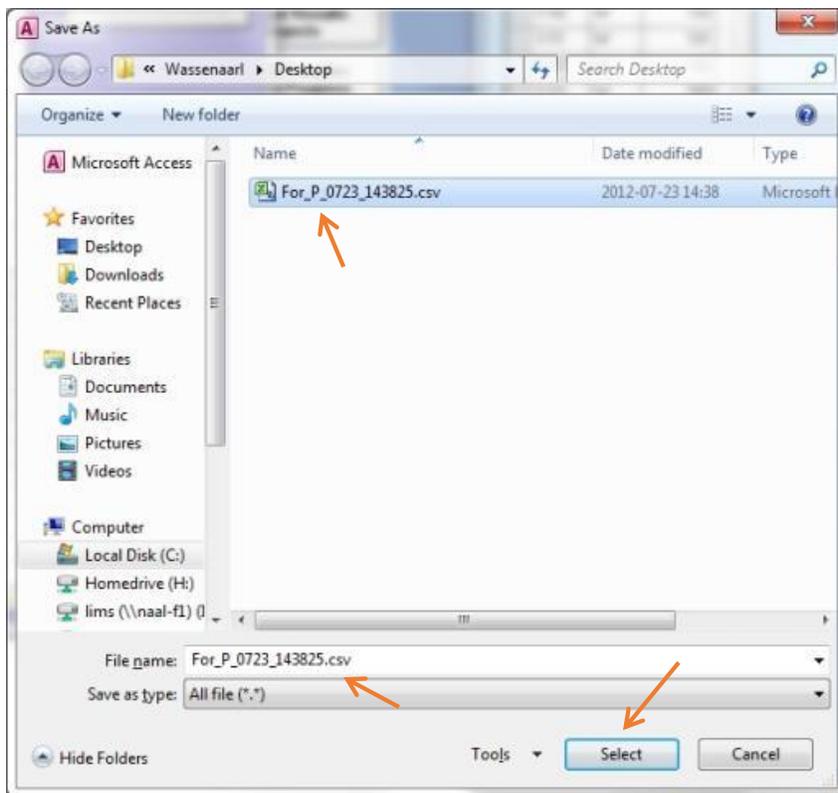
Например, мы создаем список проб Смита для прибора Picarro.

1. Убедитесь, что пробы Смита добавлены в очередь Picarro (см. [Раздел 8.8](#)).
2. На главной странице LIMS нажмите “Create Sample List for Instruments”.
3. Выберите “List Instrument Templates” и нажмите “Picarro 20 Sample” откроется очередь проб.
4. Нажмите “Create Sample List for Instrument”; диалоговое окно подтверждает, что 10 проб Смита должны быть добавлены в текущую очередь (дважды). Нажмите «ОК».



5. Откроется последовательность анализа, содержащая местные стандарты измерения и контрольные стандарты, указанные в шаблоне, и пробы Смита (рисунок выше).
6. Нажмите "Save and Print Instrument Sample List".

(Picarro) и даты. Такой подход к наименованию файлов помогает отслеживать пробы списков Picarro по мере их накопления. В качестве альтернативы файлу запуска можно присвоить более содержательное название, например, Smith Samples.csv.



Откроется диалоговое окно принтера с вопросом, где распечатать список пробных запусков (например, принтер Windows по умолчанию). Распечатывается односторонний обзор последовательности размещения списка проб.

9. После печати очередь снова открывается, и мы видим, что количество «повторов» образца уменьшилось с 2 до 0 (справа). Это означает, что все образцы были проанализированы.
10. Распечатанный список проб для анализа (следующая страница) показывает положения флаконов и идентификаторы Our Lab ID для стандартов измерения, контрольных стандартов и проб.
11. Наполните 32 флакона для проб и стандартов, примерно по 1.5 мл каждый, в соответствии с рекомендациями Picarro. Прикрепите (или напишите) число «W» на маленьких этикетках к каждому флакону. Загрузите в лоток

Description: Picarro 20 Sample
 Instrument: Picarro L2140i

'Right' mouse button information available for all columns.

Find	↑	↓	Delete
Prefix	Sample	Repeats	
W	1001	0	
W	1002	0	
W	1003	0	
W	1004	0	
W	1005	0	
W	1006	0	
W	1007	0	
W	1008	0	
W	1009	0	
W	1010	0	
*	W		

автоматического пробоотборника флаконы с пробами и стандартами измерения в соответствии с распечатанным списком проб.

Picarro 20 Sample Samples To Be Analyzed							
Vial Pos	Our Lab ID	Sample ID	Project	Notes	Vial Pos	Our Lab ID	Sample ID
1-01	W-31	High Standard	Refere 20120927	_____			
1-02	W-32	Low Standard	Refere 20120927	_____			
1-03	W-32	Low Standard	Refere 20120927	_____			
1-04	W-1001	Sample1	Smith 20150304	_____			
1-05	W-1002	Sample2	Smith 20150304	_____			
1-06	W-1003	Sample3	Smith 20150304	_____			
1-07	W-1004	Sample4	Smith 20150304	_____			
1-08	W-1005	Sample5	Smith 20150304	_____			
1-09	W-1006	Sample6	Smith 20150304	_____			
1-10	W-1007	Sample7	Smith 20150304	_____			
1-11	W-1008	Sample8	Smith 20150304	_____			
1-12	W-1009	Sample9	Smith 20150304	_____			
1-13	W-1010	Sample10	Smith 20150304	_____			
1-14	W-33	Control	Refere 20120927	_____			
1-15	W-31	High Standard	Refere 20120927	_____			
1-16	W-32	Low Standard	Refere 20120927	_____			
1-17	W-32	Low Standard	Refere 20120927	_____			
1-18	W-1001	Sample1	Smith 20150304	_____			
1-19	W-1002	Sample2	Smith 20150304	_____			
1-20	W-1003	Sample3	Smith 20150304	_____			
1-21	W-33	Control	Refere 20120927	_____			
1-22	W-1004	Sample4	Smith 20150304	_____			
1-23	W-1005	Sample5	Smith 20150304	_____			
1-24	W-1006	Sample6	Smith 20150304	_____			
1-25	W-1007	Sample7	Smith 20150304	_____			
1-26	W-1008	Sample8	Smith 20150304	_____			
1-27	W-1009	Sample9	Smith 20150304	_____			
1-28	W-1010	Sample10	Smith 20150304	_____			
1-29	W-33	Control	Refere 20120927	_____			
1-30	W-31	High Standard	Refere 20120927	_____			
1-31	W-32	Low Standard	Refere 20120927	_____			
1-32	W-32	Low Standard	Refere 20120927	_____			

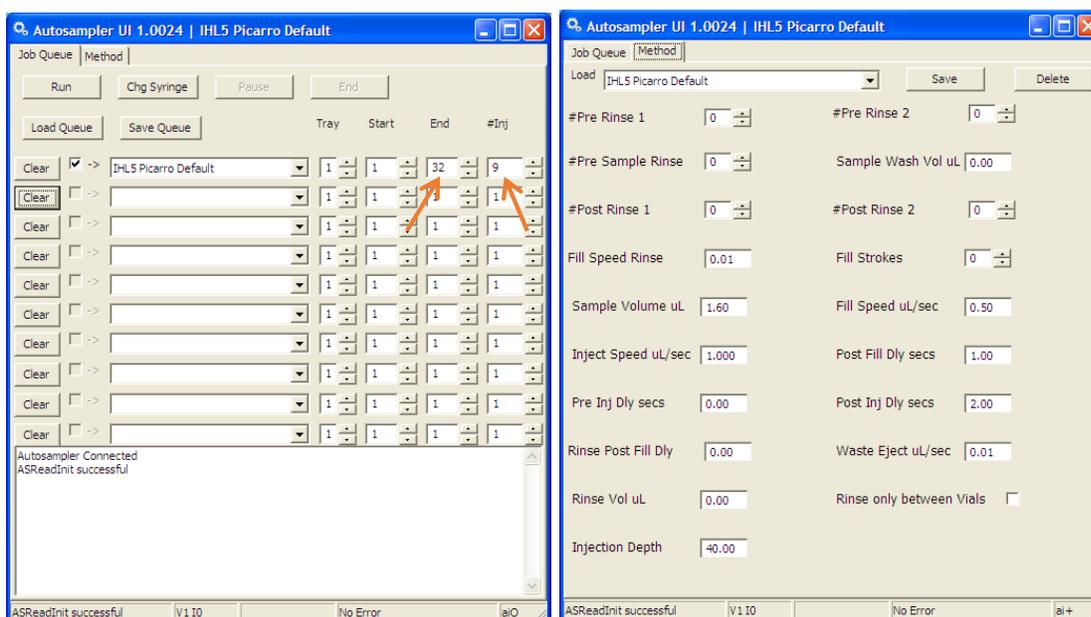
Образец листа шаблона анализа.

- В автоматическом пробоотборнике Picarro эталоны измерения и флаконы с пробами настроены на анализ с использованием схемы, описанной и представленной выше в таблице 2. Дважды проверьте распечатанный список запуска проб LIMS, чтобы

убедиться, что все флаконы расположены в правильных местах, расположение которых будет зависеть от того, какая модель жидкостного автоматического пробоотборника используется.

На рисунке ниже (слева) показан экран автоматического пробоотборника Picarro G-2000 для шаблона анализа из 20 проб (20 проб заказчика плюс стандарты, всего 32 пробы). Каждая проба настроена на измерение 9 раз в соответствии с рекомендациями, начиная с лотка 1, положения 1. На более раннем блоке управления Combi PAL (здесь не показан) такая же настройка анализа выполняется с помощью портативного блока PAL.

Примечание. В списке отсутствуют образцы кондиционирования до анализа или пробы для промывки после анализа. Причина в том, что *выходной файл данных Picarro CSV должен содержать только данные наших проб в LIMS*, а не какие-либо данные предварительного кондиционирования или промывки. (см. [Приложение 1](#))



Внимание: имейте в виду, что анализ проб с помощью программного обеспечения для сбора данных Picarro Coordinator не зависит от *LIMS for Lasers 2015*. Между прибором и файлом с пробами нет скоординированной связи. Поэтому убедитесь, что количество и расположение анализов на автоматическом пробоотборнике Picarro или Combi PAL *точно соответствуют ожиданиям шаблона анализа LIMS*.

В конце, убедитесь, что новый выходной файл Picarro Coordinator создан непосредственно перед началом автозапуска, чтобы избежать импорта данных из предыдущих автозапусков или кондиционирующих проб.

На второй панели (вверху справа) показаны параметры ввода пробы Picarro 2130i по умолчанию. Здесь инъекция объемом 1.6 мкл обеспечивает достижение инструментальной цели объемной доли H₂O в 20 000 ppm. Показанные параметры пользовательского интерфейса пробоотборника находятся на контроллере Combi PAL. Подробные сведения о настройке пробоотборника см. в Руководстве пользователя прибора Picarro.

На всех приборах Picarro сбор данных о пробах, интеграция и обработка измеренных значений δ выполняется с помощью программного обеспечения для сбора и контроля данных Coordinator. На скриншоте ниже мы видим первые 5 инъекций автозапуска. Выходные данные автозапуска будут сохранены в файл, который был создан при запуске программного обеспечения Picarro Coordinator (например, HIDS2018_Isowater_201207024_133527.csv).

Список проб LIMS для приборов Picarro, созданный в [Разделе 9.1](#), может быть загружен в Coordinator, когда в окне «Координатора» отображается одна или несколько строк результатов анализа. Список проб *LIMS for Lasers 2015* можно загрузить с USB-накопителя или через сетевое соединение.

Добавление списка проб LIMS в Picarro Coordinator

1. Запустите автозапуск анализа Picarro и дождитесь, пока один или несколько результатов содержания изотопов в пробе появятся в окне Coordinator (и до завершения автозапуска), что может занять несколько минут после первого ввода пробы.
2. Затем в Picarro Coordinator нажмите кнопку “Load Sample Descriptions”.
3. Найдите созданный LIMS список проб, обозначенный здесь «For_Q_0713_103740.csv» (здесь вторым кодом прибора Picarro было «Q» вместо «P» по умолчанию).
4. Информация из файла LIMS теперь заполнит поля “Identifier 1” и “Identifier 2”, и она будет соответствовать анализируемым пробам и стандартам.
5. Дождитесь завершения автозапуска анализа (30+ часов для шаблона по умолчанию). (30+ hours for the default template).

New output file

Load Sample Descriptions

Run Sample Number: 2

Filename: H1D62018_2eoMater_20120724_193827.csv

Line	Analysis	Time Code	Port	Inj...	d(18_16)M...	d(D_H)Mean	H2O_Mean	Identifier 1	Identifier 2
Q-1089		2012/07/24 15:38:19	1-01	1	-8.931	-63.998	20255	W-36 / 208 / 808 /	STD11
Q-1089		2012/07/24 15:47:13	1-01	2	-9.009	-63.490	20279	W-36 / 208 / 808 /	STD11
Q-1089		2012/07/24 15:56:09	1-01	3	-9.007	-63.292	20349	W-36 / 208 / 808 /	STD11
Q-1089		2012/07/24 16:05:05	1-01	4	-8.999	-63.142	20378	W-36 / 208 / 808 /	STD11
Q-1089		2012/07/24 16:14:00	1-01	5	-8.995	-63.128	20287	W-36 / 208 / 808 /	STD11

Sample description file

Look in: Picarro LIMS Sample Lists

- For_P_0607.csv
- For_Q_0713_103740.csv

File name: For_Q_0713_103740.csv

Files of type: Comma separated value file (*.csv)

Alarms

- System Alarm
- IPV Connectivity
- H2O_High
- H2O_Low

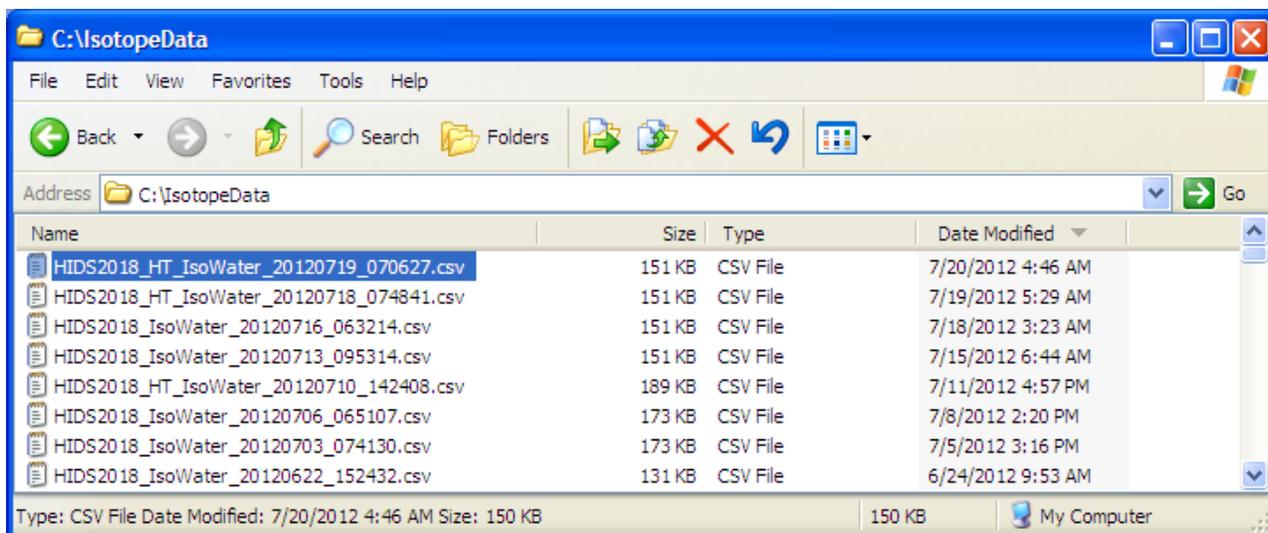
H2O (ppm)

231.3

9.2 Импорт изотопных данных из Picarro

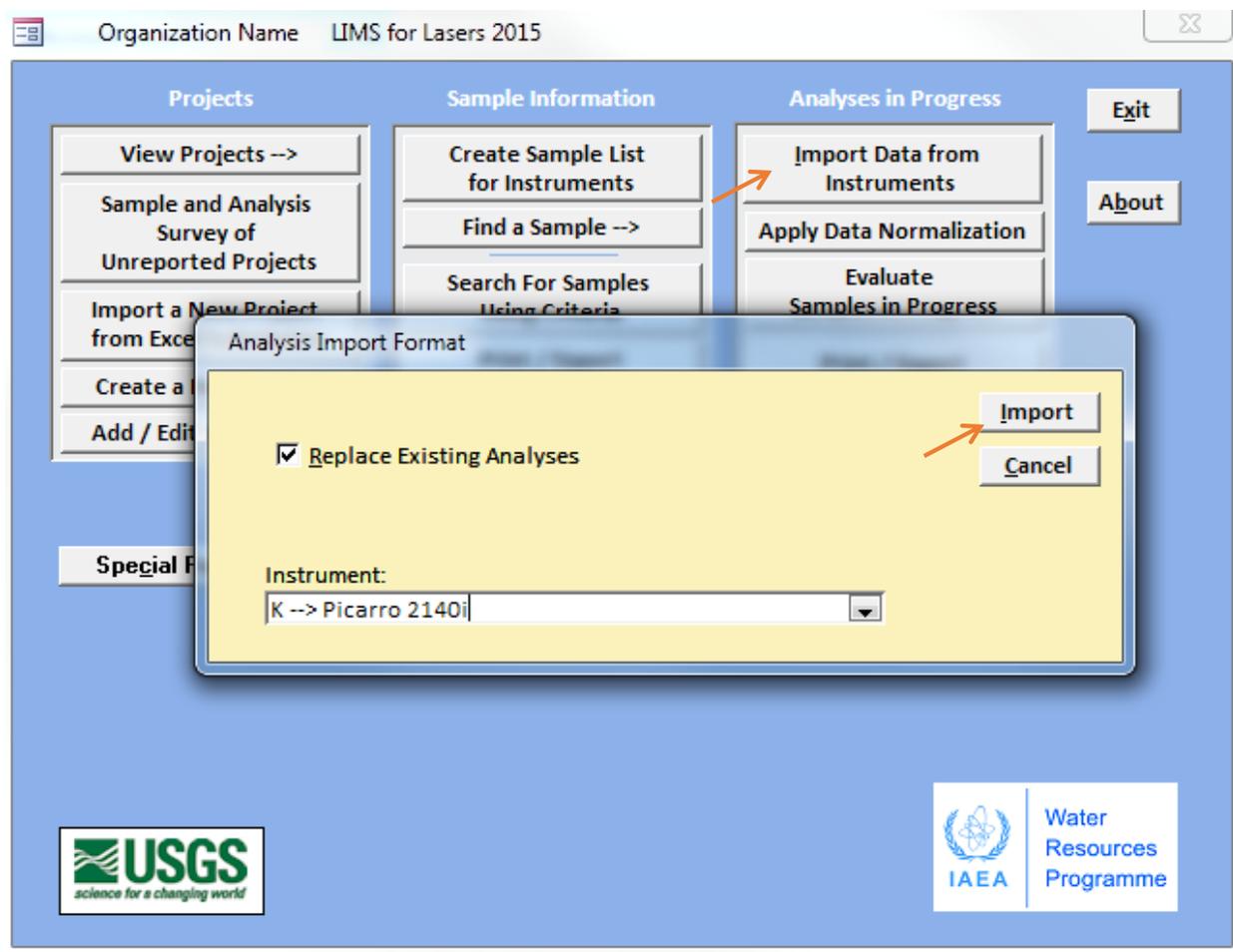
После завершения анализа водных изотопов на Picarro, загруженного с идентификационными полями LIMS, результаты измерения изотопов можно импортировать в *LIMS for Lasers 2015* для проверки, нормализации, обработки и оценки данных, а также формирования окончательного отчета для заказчика.

Файл CSV завершеного автозапуска находится на приборе Picarro, обычно в месте на диске, которое называется C:\IsotopeData. Имя выходного файла будет таким же, как имя, присвоенное в программном обеспечении Coordinator в начале анализа. Некоторые примеры файлов автозапуска Picarro CSV показаны ниже.

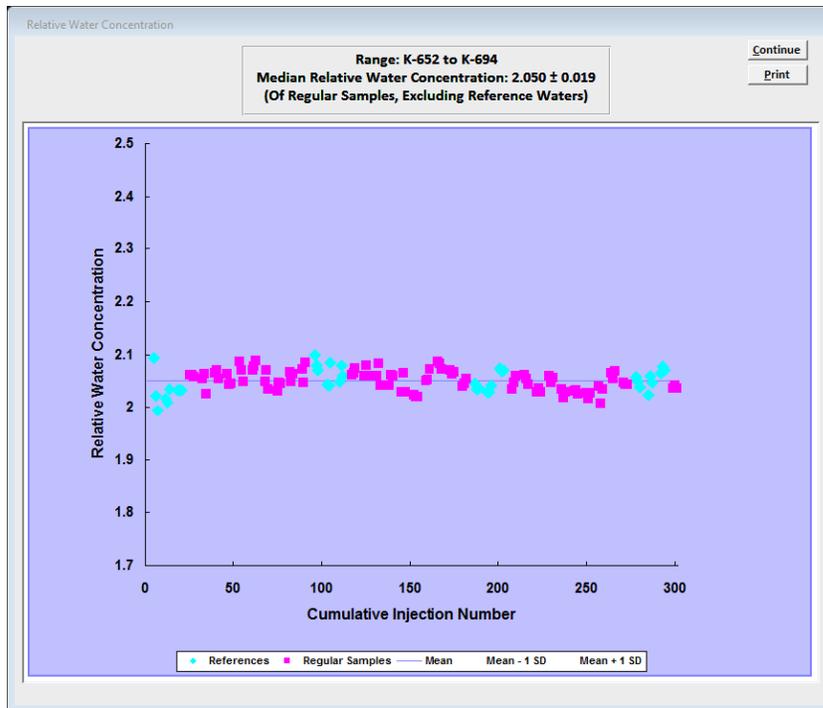


1. Скопируйте правильный файл данных автозапуска Picarro CSV на USB-накопитель или в сетевое расположение, доступное LIMS.
2. На главной странице LIMS нажмите "Import Data from Instruments", выберите прибор Picarro из выпадающего меню, а затем нажмите "Import". Выберите соответствующий файл вывода данных с USB-накопителя или из сетевой папки. Выберите соответствующий файл вывода данных с USB-накопителя или из сетевой папки.

Примечание: при установке отметки "Replace Existing Analyses" предыдущий импорт этого же файла данных будет перезаписан при условии, что данные не были нормализованы или сохранены. Данная опция полезна, если вы хотите импортировать одни и те же данные несколько раз и изучить влияние различных опций импорта, описанных в [Разделе 11.1](#), или исправить ошибку. Данный параметр установлен по умолчанию.



3. Появится экран, показывающий количество инъекций в ходе анализа. Если количество инъекций сильно различается, вероятно, неисправен шприц или септа (прокладка). Этот предварительный просмотр имеет решающее значение для обеспечения постоянной инъекции воды на протяжении всего автозапуска. *LIMS for Lasers 2015* делит измеренную концентрацию Picarro на 10 000, чтобы определить относительную концентрацию водяного пара H₂O в анализаторе.



4. Если не появляются предупреждения об импорте ([Раздел 11](#)), появится следующий экран:

Import Criteria for Instrument K (Picarro 2140i)

A Picarro import has been identified. Isotopic data can be imported using either:

1. An Import With Normalization Over Sub-ranges of Analyses (sometimes called Bracketed Normalization). LIMS will first perform an additive normalization on sub-ranges of analyses for either or both isotopes selected. LIMS commonly uses the reference water most enriched in deuterium and oxygen-18. This is equivalent to adjusting 'b' in the equation:

$$y = mx + b$$
 Next LIMS will normalize the scale expansion, which is the 'm' coefficient by using a second reference water, which commonly is Antarctic water or a low delta value reference water. A result of this normalization is that after importing analyses and opening the 'Normalization Equation Coefficients' form, the 'Final Delta' values of these reference waters will be identical to the values found in the Table of References in LIMS.
2. A Standard Import With Choices. Linearity correction and (or) between-sample memory correction can be applied to data before they are imported into analysis tables of LIMS.
3. A Standard Import. Data are imported as is, that is, without linearity correction or between-sample memory correction.

In many laboratories hydrogen and oxygen isotopic data are imported with the Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization) because their baselines commonly drift randomly for unexplained reasons.

Carry-over is a known problem of many of the syringes used for transferring the small amounts of water analyzed by this laser-based system. LIMS is able to compute the average between-sample memory from analyses of the same sample loaded into two sequentially analyzed vials.

δ²H Data

Import Type

- Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)
- Standard Import With Choice of Corrections
- Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

- Correct For Change in δ with Rel H₂O Conc
- Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

- Correct For Between-Sample Memory
- Do Not Correct For Between-Sample Memory

δ¹⁸O Data

Import Type

- Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)
- Standard Import With Choice of Corrections
- Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

- Correct For Change in δ with Rel H₂O Conc
- Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

- Correct For Between-Sample Memory
- Do Not Correct For Between-Sample Memory

Continue
Cancel

5. На этом экране импорта примите параметры по умолчанию и нажмите “Continue”. Различные доступные параметры импорта описаны в [Разделе 11.1](#), а обсуждение поправок на вариации значений δ с вариациями относительных концентраций воды приведено в [Приложении 3](#). Примите пока значения по умолчанию.
6. Сводка автозапуска с цветовыми обозначениями со всеми измеренными значениями $\delta^{2}\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ и относительной концентрацией H_2O отображается в столбцах с номером анализа, номером инъекции, идентификатором лаборатории Our Lab ID, положением флакона, относительной концентрацией H_2O и значениями δ (со столбцом игнорирования). Отображается сводная статистика (используя не игнорируемые инъекции) для каждой пробы. Обратите внимание, что первые 4 ввода на пробу игнорируются, как указано в настройках прибора для этого конкретного прибора. (Примечание: флажки игнорирования Coordinator не учитываются в *LIMS for Lasers 2015*).

Перед тем, как нажать “Continue”, используйте полосу прокрутки для поиска аномальных отклонений в «Rel H_2O Conc» (2.03 – это сокращенное значение, обозначающее объемную долю H_2O , равную 20 300 ppm в приборе Picarro) и любых аномальных значений значения δ . Отмеченные цветом аномальные значения можно игнорировать, нажав поле игнорирования рядом с каждым элементом. При выборе «IG Conc» автоматически проверяются поля игнорирования соответствующих данных $\delta^{2}\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$.

Если все данные в порядке, нажмите “Continue”.

Import Criteria for Instrument K (Picarro 2140i)

Ignore relative water concentrations and delta values as appropriate. Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Continue
Cancel

Analysis	Inj	OurLabID	Via Position	Rel H2O Conc	IG Conc	$\delta^2\text{H}$	IG $\delta^2\text{H}$	$\delta^{18}\text{O}$	IG $\delta^{18}\text{O}$
652	1	W-39	1-01	2.50	<input checked="" type="checkbox"/>	-5.44	<input checked="" type="checkbox"/>	0.039	<input checked="" type="checkbox"/>
652	2	W-39	1-01	2.08	<input checked="" type="checkbox"/>	15.90	<input checked="" type="checkbox"/>	2.749	<input checked="" type="checkbox"/>
652	3	W-39	1-01	2.08	<input checked="" type="checkbox"/>	18.91	<input checked="" type="checkbox"/>	3.072	<input checked="" type="checkbox"/>
652	4	W-39	1-01	2.05	<input checked="" type="checkbox"/>	20.64	<input checked="" type="checkbox"/>	3.203	<input checked="" type="checkbox"/>
652	5	W-39	1-01	2.09	<input type="checkbox"/>	21.44	<input type="checkbox"/>	3.294	<input type="checkbox"/>
652	6	W-39	1-01	2.02	<input type="checkbox"/>	22.05	<input type="checkbox"/>	3.349	<input type="checkbox"/>
652	7	W-39	1-01	1.99	<input type="checkbox"/>	22.38	<input type="checkbox"/>	3.355	<input type="checkbox"/>
652			Means	2.03 ± 0.05	<input checked="" type="checkbox"/>	21.96 ± 0.48	<input type="checkbox"/>	3.333 ± 0.034	<input type="checkbox"/>
653	1	W-34	1-02	2.03	<input checked="" type="checkbox"/>	-180.86	<input checked="" type="checkbox"/>	-24.358	<input checked="" type="checkbox"/>
653	2	W-34	1-02	2.00	<input checked="" type="checkbox"/>	-190.94	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.104	<input checked="" type="checkbox"/>
653	3	W-34	1-02	2.00	<input checked="" type="checkbox"/>	-193.59	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.309	<input checked="" type="checkbox"/>
653	4	W-34	1-02	2.00	<input checked="" type="checkbox"/>	-194.87	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.422	<input checked="" type="checkbox"/>
653	5	W-34	1-02	2.02	<input type="checkbox"/>	-195.28	<input type="checkbox"/>	-25.499	<input type="checkbox"/>
653	6	W-34	1-02	2.01	<input type="checkbox"/>	-195.78	<input type="checkbox"/>	-25.517	<input type="checkbox"/>
653	7	W-34	1-02	2.03	<input type="checkbox"/>	-195.90	<input type="checkbox"/>	-25.523	<input type="checkbox"/>
653			Means	2.02 ± 0.01	<input checked="" type="checkbox"/>	-195.65 ± 0.33	<input type="checkbox"/>	-25.513 ± 0.012	<input type="checkbox"/>
654	1	W-34	1-03	2.05	<input checked="" type="checkbox"/>	-196.11	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.569	<input checked="" type="checkbox"/>
654	2	W-34	1-03	2.06	<input checked="" type="checkbox"/>	-196.28	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.585	<input checked="" type="checkbox"/>
654	3	W-34	1-03	2.05	<input checked="" type="checkbox"/>	-196.63	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.520	<input checked="" type="checkbox"/>
654	4	W-34	1-03	2.05	<input checked="" type="checkbox"/>	-196.86	<input checked="" type="checkbox"/>	-25.512	<input checked="" type="checkbox"/>
654	5	W-34	1-03	2.03	<input type="checkbox"/>	-196.83	<input type="checkbox"/>	-25.543	<input type="checkbox"/>
654	6	W-34	1-03	2.03	<input type="checkbox"/>	-196.98	<input type="checkbox"/>	-25.564	<input type="checkbox"/>
654	7	W-34	1-03	2.03	<input type="checkbox"/>	-196.85	<input type="checkbox"/>	-25.554	<input type="checkbox"/>
654			Means	2.03 ± 0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	-196.89 ± 0.08	<input type="checkbox"/>	-25.554 ± 0.011	<input type="checkbox"/>
655	1	W-17833	1-04	2.04	<input checked="" type="checkbox"/>	-94.52	<input checked="" type="checkbox"/>	-12.562	<input checked="" type="checkbox"/>
655	2	W-17833	1-04	2.07	<input checked="" type="checkbox"/>	-88.46	<input checked="" type="checkbox"/>	-12.152	<input checked="" type="checkbox"/>
655	3	W-17833	1-04	2.06	<input checked="" type="checkbox"/>	-85.85	<input checked="" type="checkbox"/>	-11.950	<input checked="" type="checkbox"/>
655	4	W-17833	1-04	2.06	<input checked="" type="checkbox"/>	-84.80	<input checked="" type="checkbox"/>	-11.829	<input checked="" type="checkbox"/>
655	5	W-17833	1-04	2.06	<input type="checkbox"/>	-84.33	<input type="checkbox"/>	-11.724	<input type="checkbox"/>
655	6	W-17833	1-04	2.06	<input type="checkbox"/>	-84.02	<input type="checkbox"/>	-11.671	<input type="checkbox"/>
655	7	W-17833	1-04	2.06	<input type="checkbox"/>	-83.77	<input type="checkbox"/>	-11.665	<input type="checkbox"/>

$\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Ref for Additive Normalization: W-39

Reference for Scale Expansion: W-34

7. Теперь подсчитывается и усредняется эффект «памяти» между пробами за весь автозапуск. Она должна быть менее 1–2%. Нажмите «OK», чтобы продолжить.

LIMS

Between-sample delta hydrogen-2 memory: 0.50 %

This value is based on the following data.

Analyses	OurLabID	Memory
342-343	W-34	0.54 %
356-357	W-36	0.51 %
370-371	W-34	0.53 %
384-385	W-36	0.42 %

Between-sample delta oxygen-18 memory: 0.30 %

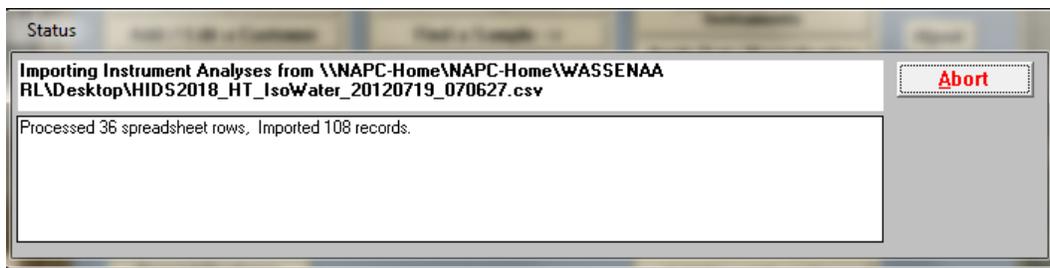
This value is based on the following data.

Analyses	OurLabID	Memory
342-343	W-34	0.51 %
356-357	W-36	0.31 %
370-371	W-34	0.22 %
384-385	W-36	0.16 %

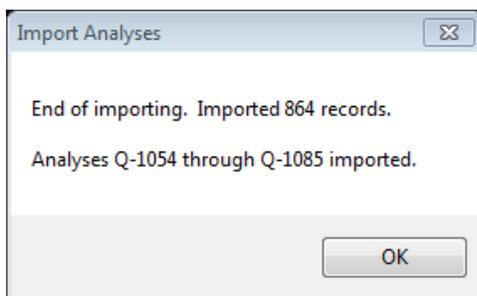
Do you wish to continue?

OK Cancel

8. Данные проб с поправкой на нарастающую инструментальную ошибку измерения и память импортируются в LIMS.



9. В конце импорта *LIMS for Lasers 2015* проверяет, что данные были импортированы. Нажмите "OK".



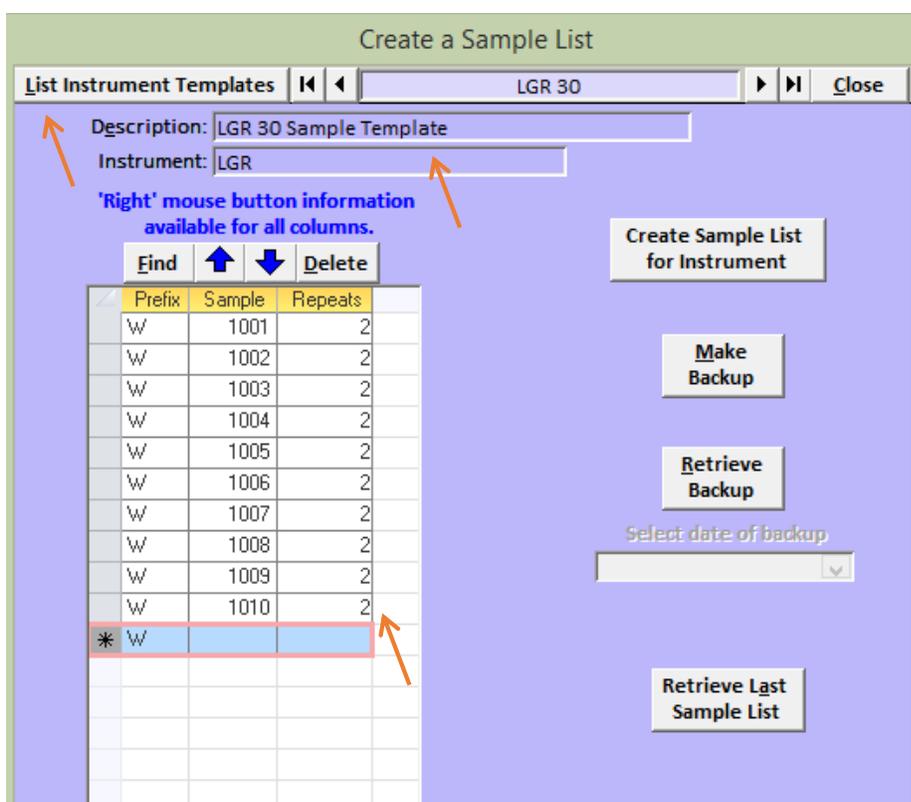
10. Нормализация, оценка и сохранение окончательных результатов описываются в [Разделе 12](#).

10 Запуск проб на лазере Los Gatos Research

10.1 Создание списка проб для Los Gatos Research

Для примера, мы создадим список анализа проб для лазерного прибора Los Gatos Research.

1. Убедитесь, что пробы добавлены в очередь Los Gatos Research (см. [Раздел 8.9](#)).
2. На главной странице LIMS нажмите “Create Sample List for Instruments”.
3. Выберите “List Instrument Templates” и нажмите “LGR 30 Samples”, откроется очередь проб:



4. В приведенной выше очереди Los Gatos Research 10 проб Смита (от W-1001 до W-1010) помещены в очередь для двойного анализа на шаблоне из 30 образцов. Это оставляет 10 дополнительных позиций, которые будут автоматически заполнены повторами W-1 (фиктивные), которые можно удалить (см. ниже).
5. Нажмите “Create Sample List for Instrument”; диалоговое окно подтверждает, что 10 проб Смита должны быть добавлены в текущую очередь (дважды). Нажмите «ОК».

LGR 30

'Right' mouse button information available for all columns.

Vial Pos	Prefix	Sample
3-11	W	31
3-12	W	31
1-6	W	1006
1-7	W	1007
1-8	W	1008
1-9	W	1009
1-10	W	1010
3-20	W	33
3-10	W	31
3-1	W	32
3-2	W	32
1-11	W	1001
1-12	W	1002
1-13	W	1003
1-14	W	1004
1-15	W	1005
3-21	W	33
3-3	W	32
3-11	W	31
3-12	W	31
1-16	W	1006
1-17	W	1007
1-18	W	1008
1-19	W	1009
1-20	W	1010
3-19	W	33
3-10	W	31
3-1	W	32
3-2	W	32
1-21	W	1
1-22	W	1
1-23	W	1
1-24	W	1
1-25	W	1
3-20	W	33
3-3	W	32
3-11	W	31
3-12	W	31
1-26	W	1
1-27	W	1
1-28	W	1
1-29	W	1

Save and Print Instrument Sample List

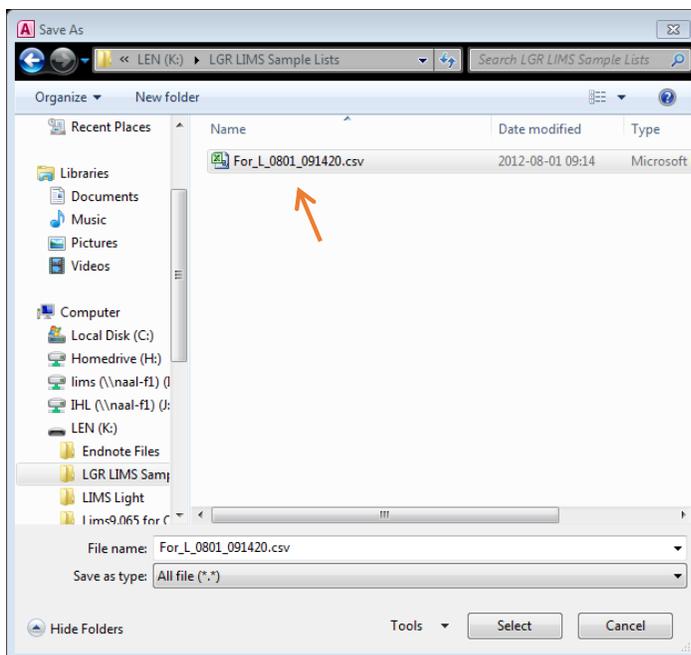
Cancel

Record: 1 of 61

- Откроется последовательность анализа, содержащая промывочные образцы, местные стандарты измерения, контрольные стандарты и пробы Смита (на рисунке справа). Обратите внимание, что пробы в строках 1-21 и далее не нужны, поскольку они

являются фиктивными заполнителями позиций. Их можно выделить и удалить (нажмите клавишу «delete»).

7. Нажмите “Save and Print”.
8. Откроется диалоговое окно Windows с вопросом, где сохранить файл списка проб/последовательностей для Los Gatos Research. Это CSV-файл, который будет передан в прибор Los Gatos Research, и его следует сохранить на USB-накопитель. Вставьте USB-накопитель в ПК.
9. Нажмите “Select”, чтобы сохранить файл на USB-накопителе. Обратите внимание, что сохраненный файл имеет формат CSV, а имя файла представляет собой комбинацию кода инструмента “For L” (Los Gatos Research) и даты. Такой подход к наименованию файлов помогает отслеживать пробы списков Los Gatos Research по мере их накопления с течением времени.



10. Откроется диалоговое окно принтера с вопросом, где распечатать список пробных запусков (например, принтер Windows по умолчанию). Распечатывается одностраничный обзор последовательности размещения списка проб.
11. После печати очередь снова открывается, и мы видим, что количество «повторов» образца уменьшилось с 2 до 0 (справа). Это означает, что все образцы были проанализированы дважды, хотя и в рамках одного автозапуска. Их можно удалить из очереди.
12. Распечатанный список проб для анализа (следующая страница) показывает положения флаконов и идентификаторы лаборатории Our Lab ID для стандартов измерения, контрольных стандартов и проб.
13. Наполните 68 флаконов, примерно по 1.5 мл каждый. Прикрепите (или напишите) номер «W» на маленьких этикетках к каждому флакону. Загрузите в лоток

автоматического пробоотборника флаконы с пробами и стандартами измерения в соответствии с распечатанным списком проб.

3/10/2015 9:00:31 PM

LGR 30 Samples To Be Analyzed

Vial Pos	Our Lab ID	Sample ID	Project	Notes	Vial Pos	Our Lab ID	Sample ID	Project	Notes
3-28	W-3	DIW Wash	Refere 2012092	_____	3-1	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____
3-28	W-3	DIW Wash	Refere 2012092	_____	3-2	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____
3-10	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					
3-1	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____					
3-2	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____					
1-1	W-1001	Sample1	Smith 20150304	_____					
1-2	W-1002	Sample2	Smith 20150304	_____					
1-3	W-1003	Sample3	Smith 20150304	_____					
1-4	W-1004	Sample4	Smith 20150304	_____					
1-5	W-1005	Sample5	Smith 20150304	_____					
3-19	W-33	Control	Refere 2012092	_____					
3-3	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____					
3-11	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					
3-12	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					
1-6	W-1006	Sample6	Smith 20150304	_____					
1-7	W-1007	Sample7	Smith 20150304	_____					
1-8	W-1008	Sample8	Smith 20150304	_____					
1-9	W-1009	Sample9	Smith 20150304	_____					
1-10	W-1010	Sample10	Smith 20150304	_____					
3-20	W-33	Control	Refere 2012092	_____					
3-10	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					
3-1	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____					
3-2	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____					
1-11	W-1001	Sample1	Smith 20150304	_____					
1-12	W-1002	Sample2	Smith 20150304	_____					
1-13	W-1003	Sample3	Smith 20150304	_____					
1-14	W-1004	Sample4	Smith 20150304	_____					
1-15	W-1005	Sample5	Smith 20150304	_____					
3-21	W-33	Control	Refere 2012092	_____					
3-3	W-32	Low Standard	Refere 2012092	_____					
3-11	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					
3-12	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					
1-16	W-1006	Sample6	Smith 20150304	_____					
1-17	W-1007	Sample7	Smith 20150304	_____					
1-18	W-1008	Sample8	Smith 20150304	_____					
1-19	W-1009	Sample9	Smith 20150304	_____					
1-20	W-1010	Sample10	Smith 20150304	_____					
3-19	W-33	Control	Refere 2012092	_____					
3-10	W-31	High Standard	Refere 2012092	_____					

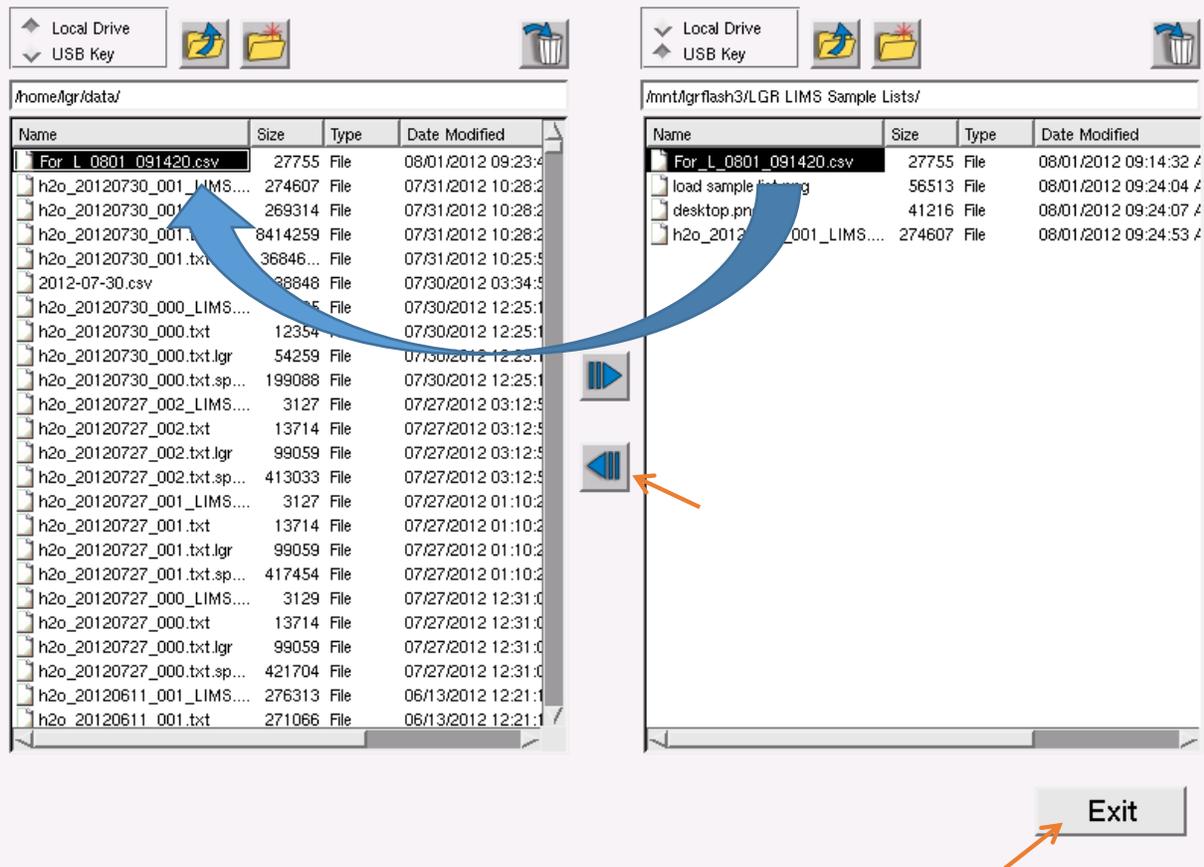
Схема запуска LGR для лазерного анализатора.

14. В автоматическом пробоотборнике Los Gatos Research лабораторный стандарт и флаконы с пробами устанавливаются с использованием схемы анализа, показанной в таблице 1. Сравните напечатанный список запуска LIMS, чтобы убедиться, что все флаконы находятся в правильных положениях в лотках.

Создание списка проб на приборе Los Gatos Research серии DLT-100/24D (2007–2013)

Созданный LIMS список проб, сохраненный на USB-накопителе, загружается непосредственно в прибор Los Gatos Research DLT-100 (2007–2013 гг.), и он связывает данные проб с соответствующей информацией LIMS. Прибор должен быть готов к работе в соответствии согласно инструкциям производителя для пользователя:

1. Вставьте USB-накопитель, содержащий файл списка проб Los Gatos Research, в USB-порт лазерного прибора.
2. На приборе Los Gatos Research нажмите кнопку “File Transfer”, расположенную в нижней части главного экрана.
3. На панели управления файлами выделите список проб LIMS «For_L_xxxx.csv» и скопируйте его с USB-накопителя в папку данных LGR, используя кнопку передачи файлов, расположенную между двумя панелями.
4. Когда передача файлов будет завершена, нажмите кнопку “Exit”.



- Список запуска проб LIMS теперь может быть загружена в список проб Los Gatos Research, чтобы начать изотопный анализ.
- В середине окна "Configure" в Los Gatos Research нажмите кнопку "LIMS Import".

- Нажмите вкладку прибора “Run”, а затем нажмите “Go”. Никаких дополнительных действий или редактирования конфигурации не требуется. Подождите, пока анализатор Los Gatos Research успешно завершит процедуру анализа проб (более 20 часов).

#	Sample Name	Sample S/N	Tray - Pos	H2O_N_cm3	Raw delta D	Raw delta 180	Flag
12	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
13	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
14	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
15	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
16	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
17	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
18	W-3 / / 208/808/	DIW Wash	3-28	-	-	-	-
19	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
20	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
21	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
22	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
23	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
24	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
25	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
26	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
27	W-31 / / 208/808/	My Lab Standard 1	3-10	-	-	-	-
28	W-32 / / 208/808/	My Lab Standard 2	3-1	-	-	-	-
29	W-32 / / 208/808/	My Lab Standard 2	3-1	-	-	-	-
30	W-32 / / 208/808/	My Lab Standard 2	3-1	-	-	-	-
31	W-32 / / 208/808/	My Lab Standard 2	3-1	-	-	-	-
32	W-32 / / 208/808/	My Lab Standard 2	3-1	-	-	-	-

Testing Sample: 920 - W-36 / / 208/808/ - STD11 Tray 03 - Index 10 Run Complete.

h2o_20120730_001.txt 9:32:40
30.49 °C 8.557 us

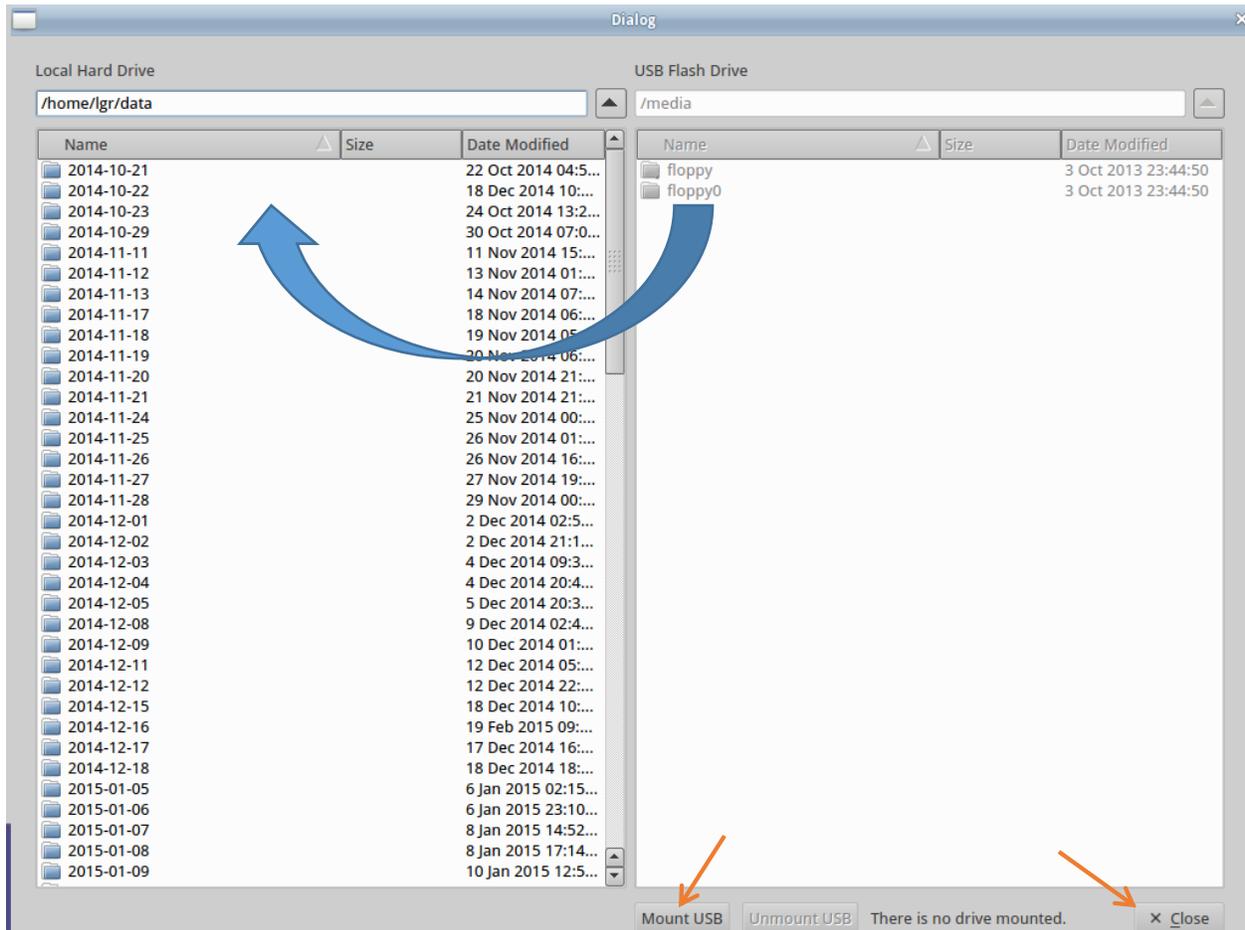
Configure Run Spectrum File Transfer Setup Exit

Создание списка проб на приборе Los Gatos Research IWA-35/TIWA-45EP (2014-настоящее время)

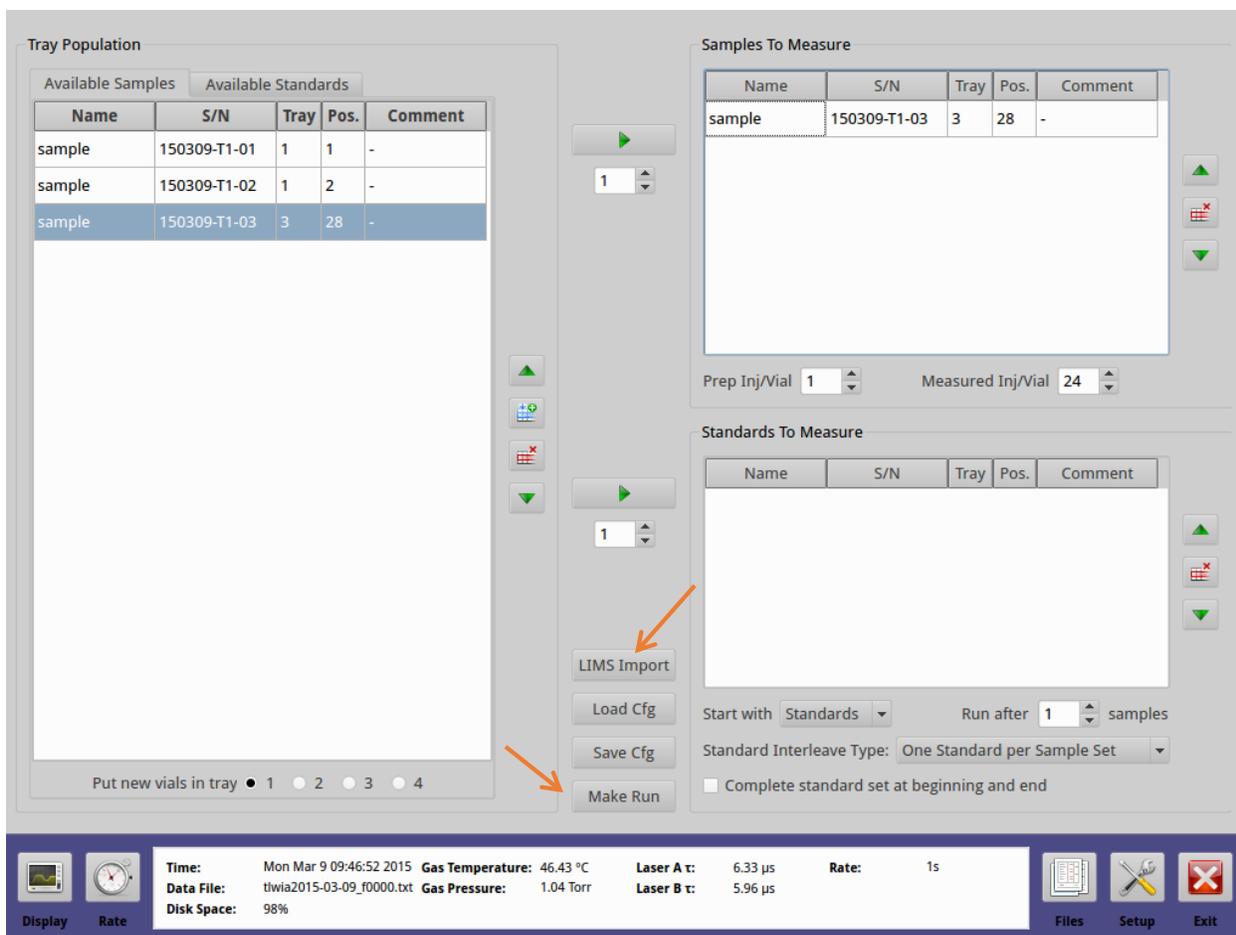
Созданный LIMS список проб, сохраненный на USB-накопителе, загружается непосредственно в прибор Los Gatos Research IWA-35EP или TIWA-45EP, и он связывает данные проб с соответствующей информацией LIMS. Прибор должен быть готов к работе в соответствии согласно инструкциям производителя:

- Вставьте USB-накопитель, содержащий файл списка проб Los Gatos Research, в USB-порт лазерного прибора IWA-35EP или TIWA-45EP.
- На приборе Los Gatos Research нажмите кнопку “Files”, расположенную в нижней части главного экрана справа. Смонтируйте диск USB-накопителя.
- На панели управления файлами выделите список проб LIMS «For_L_xxxx.csv» и скопируйте его с USB -накопителя в папку данных LGR, используя кнопку передачи файлов, расположенную между двумя панелями.

4. Когда передача файлов будет завершена, нажмите кнопку “Done”.



5. Список запуска проб LIMS теперь может быть загружена в Список проб Los Gatos Research, чтобы начать изотопный анализ.
6. В центральной нижней части вкладки “Display” в Los Gatos Research нажмите кнопку “LIMS Import”.



7. Выберите и дважды нажмите, чтобы открыть файл CSV со списком образцов LIMS («For_L_xxxx.csv»), который был скопирован в прибор.
8. Чтобы проанализировать пробы, нажмите на вкладке “Display” – загруженный список проб должен быть виден.

Примечание: Не нажимайте “Make Run” после загрузки файла LIMS (список проб исчезнет). Сразу переходите на вкладку Display.

 Если кнопка “LIMS Import” неактивна на экране, показанном выше, вам потребуется обновление прошивки прибора от Los Gatos Research (подробности см. в [Разделе 5.2](#))

	Name	S/N	Tray	Pos	Comment	Flag	H2O_N/cm3	Raw delta D	Raw delta 18O	Raw delta 17O
1	sample	150309-T1-03	3	28	-					
2	sample	150309-T1-03	3	28	-					
3	sample	150309-T1-03	3	28	-					
4	sample	150309-T1-03	3	28	-					
5	sample	150309-T1-03	3	28	-					
6	sample	150309-T1-03	3	28	-					
7	sample	150309-T1-03	3	28	-					
8	sample	150309-T1-03	3	28	-					
9	sample	150309-T1-03	3	28	-					
10	sample	150309-T1-03	3	28	-					
11	sample	150309-T1-03	3	28	-					
12	sample	150309-T1-03	3	28	-					
13	sample	150309-T1-03	3	28	-					
14	sample	150309-T1-03	3	28	-					
15	sample	150309-T1-03	3	28	-					
16	sample	150309-T1-03	3	28	-					

One Injection Progress:

Total Run Progress: Run Completed

Time: Mon Mar 9 09:47:35 2015 Gas Temperature: 46.43 °C Laser A t: 6.33 µs Rate: 1s
 Data File: twia2015-03-09_f0000.txt Gas Pressure: 1.05 Torr Laser B t: 5.97 µs
 Disk Space: 98%

Display Rate Files Setup Exit

9. Нажмите кнопку “Start”. Никаких дополнительных действий или редактирования конфигурации не требуется. Подождите, пока анализатор Los Gatos Research успешно завершит процедуру анализа проб (показано ниже).

	Name	S/N	Tray	Pos	Comment	Flag	H2O_N/cm3	Raw delta D	Raw delta 18O	Raw delta 17O
1	sample	150309-T1-03	3	28	-	prep	-	-	-	-
2	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.50905e+16	-81.4207	-14.6143	-3.72764
3	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.5586e+16	-82.1273	-14.5752	-3.7269
4	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.55696e+16	-82.7869	-14.4387	-3.70437
5	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.55599e+16	-82.9567	-14.2414	-3.84733
6	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.55837e+16	-82.6894	-14.2821	-3.6805
7	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.63462e+16	-82.7589	-14.2876	-3.63817
8	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.55409e+16	-81.8798	-14.2772	-3.59096
9	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.56005e+16	-82.8306	-14.1617	-3.68226
10	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.56278e+16	-82.7425	-14.16	-3.63895
11	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.56843e+16	-82.1521	-14.2705	-3.66623
12	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.55863e+16	-83.1107	-14.1783	-3.54623
13	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.55691e+16	-82.9007	-14.007	-3.69015
14	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.56582e+16	-81.6843	-14.0536	-3.59916
15	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.56123e+16	-83.0918	-14.063	-3.65172
16	sample	150309-T1-03	3	28	-	norm	3.56168e+16	-81.6291	-13.9674	-3.66031

One Injection Progress: Measuring Spectra

Total Run Progress: Processing Injection 20 of 25

Time: Mon Mar 9 09:32:11 2015 Gas Temperature: 46.43 °C Laser A t: 6.33 µs Rate: 1s
 Data File: twia2015-03-09_f0000.txt Gas Pressure: 0.92 Torr Laser B t: 5.96 µs
 Disk Space: 98%

Display Rate Files Setup Exit

10.2 Импорт изотопных данных из Los Gatos Research

После завершения автозапуска Los Gatos Research данные по изотопам водорода и кислорода импортируются в *LIMS for Lasers 2015* для нормализации, обработки, оценки и составления отчетов.

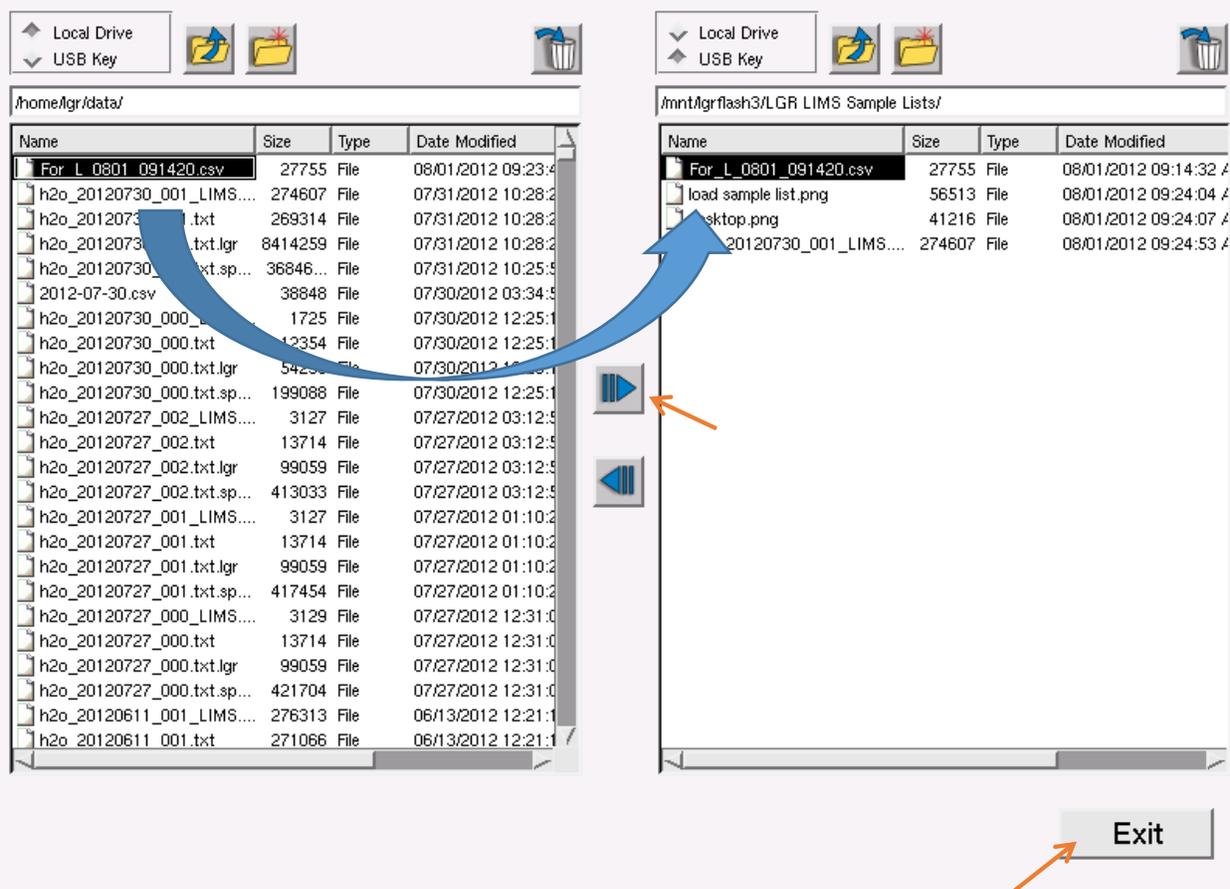
Файл завершённого анализа находится в каталоге данных Los Gatos Research и должен быть передан на ПК LIMS для импорта данных (через USB-накопитель или через сетевое соединение). Выходным файлам данных Los Gatos Research присваиваются названия «h2o_date_000_LIMS.csv», при этом “date” в названии файла совпадает с именем файла импортированного списка проб.

Приборы Los Gatos Research DLT-100 (2007–2013)

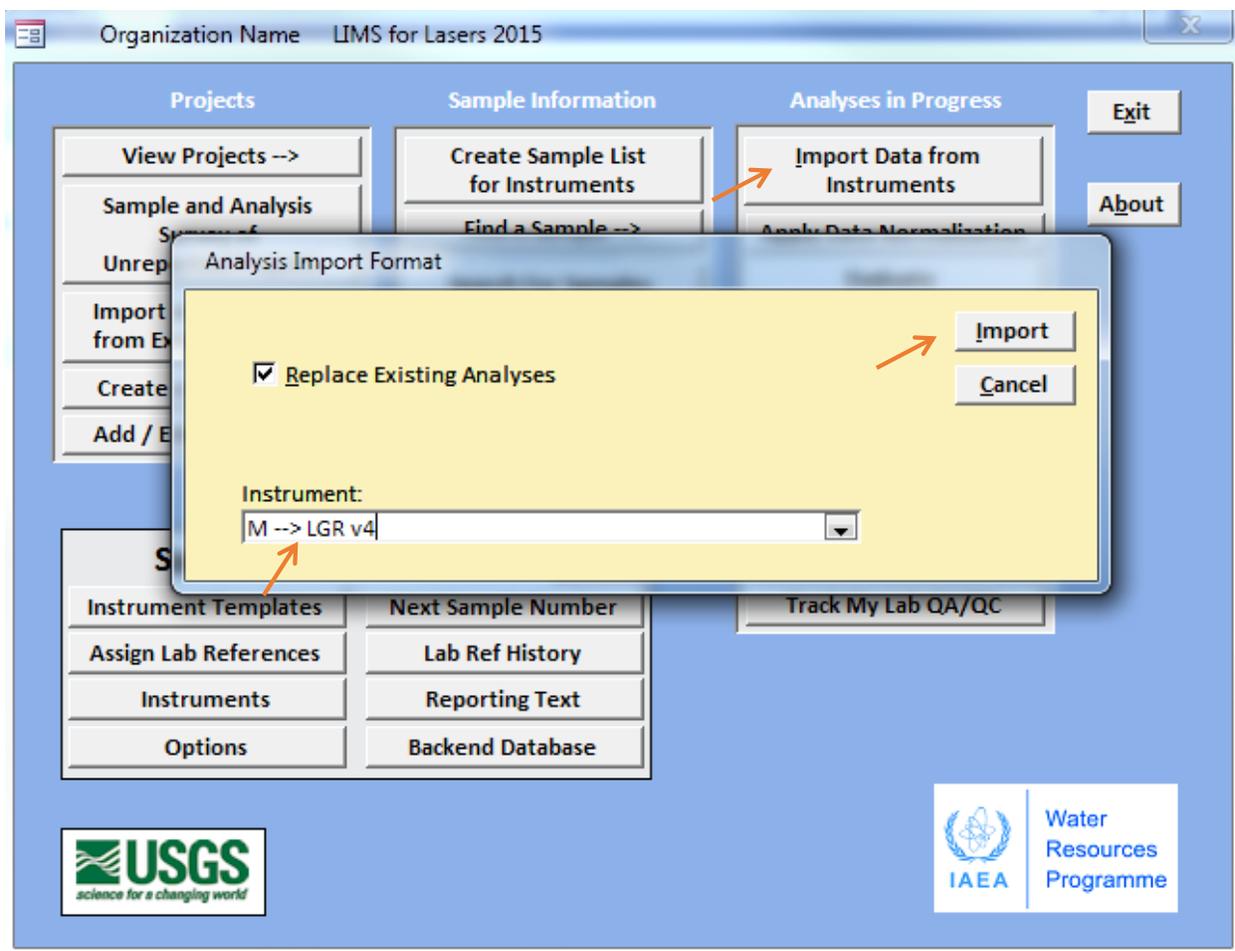
1. Вставьте USB-накопитель в USB-порт прибора Los Gatos Research.
2. На приборе, нажмите кнопку “File Transfer”, расположенную между панелями.
3. На левой панели управления файлами выделите соответствующий выходной файл LIMS с именем «h2o_date_000_LIMS» и скопируйте его на USB-накопитель, используя кнопку передачи файлов между двумя панелями.
4. Когда копирование файла будет завершено, нажмите кнопку “Exit”. Извлеките USB-накопитель и вставьте его в USB-порт компьютера LIMS.
5. На главной странице LIMS нажмите “Import Data from Instruments”. Выберите соответствующий прибор Los Gatos Research из выпадающего меню и затем нажмите “Import”. Выберите соответствующий файл с USB-накопителя.

Приборы Los Gatos Research IWA-35EP or TIWA-45EP (2014-present)

1. Вставьте USB-накопитель в USB-порт прибора Los Gatos Research. Смонтируйте диск.
2. Нажмите кнопку “Files”, расположенную справа внизу.
3. На левой панели управления файлами выделите соответствующий выходной файл LIMS с именем, например, “(t)lwia2015-03-10_lims0001.csv.zip” и скопируйте его на USB-накопитель, используя кнопку передачи файлов между двумя панелями.
4. Когда копирование файла будет завершено, нажмите кнопку “Close”. Извлеките USB-накопитель и вставьте его в USB-порт компьютера LIMS. Извлеките выходной файл анализа ZIP на свой компьютер.
5. На главной странице LIMS нажмите “Import Data from Instruments”. Выберите соответствующий прибор Los Gatos Research из выпадающего меню и затем нажмите “Import”. Выберите соответствующий файл вывода данных с USB-накопителя.

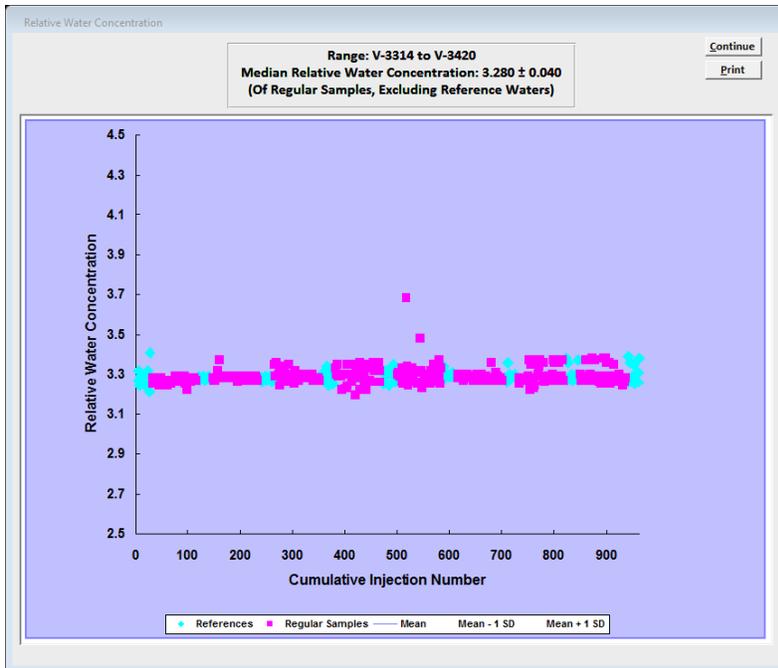


Пример передачи файла с прибора Los Gatos DLT-100.



Примечание: Поле “Replace Existing Analyses” перезаписывает любой предыдущий импорт файла данных *при условии, что данные не были нормализованы или сохранены*. Это полезно, чтобы изучить влияние различных параметров импорта или исправить ошибку. Параметр установлен по умолчанию.

6. Если никаких предупреждений об импорте не появляется (см. [Раздел 11](#)), появится следующий экран со сводной информацией об инъекциях H₂O (обратите внимание на автоматический масштаб графика). Данный предварительный просмотр имеет решающее значение для обеспечения постоянства инъекции воды на протяжении всего автозапуска. *LIMS for Lasers 2015* делит измеренную концентрацию Los Gatos Research на 1×10^{16} , чтобы определить относительную концентрацию водяного пара H₂O. Если инъекции H₂O окажутся нормальными (в допустимых пределах и стабильными), нажмите “Continue”.



Import Criteria for Instrument M (LGR v4)

A Los Gatos Research import has been identified. Isotopic data can be imported using either:

1. An Import With Normalization Over Sub-ranges of Analyses (sometimes called Bracketed Normalization). LIMS will first perform an additive normalization on sub-ranges of analyses for either or both isotopes selected. LIMS commonly uses the reference water most enriched in deuterium and oxygen-18. This is equivalent to adjusting 'b' in the equation:

$$y = mx + b$$
 Next LIMS will normalize the scale expansion, which is the 'm' coefficient by using a second reference water, which commonly is Antarctic water or a low delta value reference water. A result of this normalization is that after importing analyses and opening the 'Normalization Equation Coefficients' form, the 'Final Delta' values of these reference waters will be identical to the values found in the Table of References in LIMS.
2. A Standard Import With Choices. Linearity correction and (or) between-sample memory correction can be applied to data before they are imported into analysis tables of LIMS.
3. A Standard Import. Data are imported as is, that is, without linearity correction or between-sample memory correction.

In many laboratories hydrogen and oxygen isotopic data are imported with the Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization) because their baselines commonly drift randomly for unexplained reasons.

Carry-over is a known problem of many of the syringes used for transferring the small amounts of water analyzed by this laser-based system. LIMS is able to compute the average between-sample memory from analyses of the same sample loaded into two sequentially analyzed vials.

δ²H Data

Import Type

Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)

Standard Import With Choice of Corrections

Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

Correct For Change in δ with Rel H₂O Conc

Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

Correct For Between-Sample Memory

Do Not Correct For Between-Sample Memory

δ¹⁸O Data

Import Type

Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)

Standard Import With Choice of Corrections

Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

Correct For Change in δ with Rel H₂O Conc

Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

Correct For Between-Sample Memory

Do Not Correct For Between-Sample Memory

There are 15 samples in the import file without companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 samples. The first few are:

W-3
 W-33
 W-34
 W-35
 W-998

To import delta oxygen-17 analyses you will need to create companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 samples for these samples.

Click 'View Project' on the Main Menu. Select the project with the specified sample(s).

Click the 'Create Companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 Project' button.

- На экране критериев импорта примите параметры по умолчанию и нажмите “Continue”. Различные доступные параметры импорта описаны в [Разделе 11.1](#), а обсуждение поправок на вариации значений δ с вариациями относительных концентраций воды приведено в [Приложении 3](#). Примите пока значения по умолчанию. В примере выше, поскольку сопутствующие пробы $\delta^{17}\text{O}$ не создавались, они обозначены на панели отдельным цветом.
- Сводка всех измеренных данных $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$ и относительных концентраций водяного пара H_2O в анализаторе отображается в столбцах с номером анализа, номером инъекции (Pk), идентификатором лаборатории Our Lab ID, положением флакона и данными анализа. Также отображается статистика (основанная на не игнорируемых инъекциях) для каждой пробы. *LIMS for Lasers 2015* игнорировала первые 4 ввода каждой пробы, как указано в «LIMS Instrument settings» для этого прибора.

Import Criteria for Instrument V (LGR V4)

Ignore relative water concentrations and delta values as appropriate. Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Analysis	Inj	OurLabID	Vial Position	Rel H2O Conc	IG Conc	$\delta^2\text{H}$	IG $\delta^2\text{H}$	$\delta^{18}\text{O}$	IG $\delta^{18}\text{O}$
3328	2	W-39	3_11		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3328	3	W-39	3_11		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3328	4	W-39	3_11		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3328	5	W-39	3_11	3.29	<input type="checkbox"/>	7.11	<input type="checkbox"/>	13.719	<input type="checkbox"/>
3328	6	W-39	3_11	3.27	<input type="checkbox"/>	5.47	<input type="checkbox"/>	13.524	<input type="checkbox"/>
3328	7	W-39	3_11	3.27	<input type="checkbox"/>	6.90	<input type="checkbox"/>	13.642	<input type="checkbox"/>
3328	8	W-39	3_11	3.28	<input type="checkbox"/>	9.18	<input type="checkbox"/>	13.916	<input type="checkbox"/>
3328	9	W-39	3_11	3.28	<input type="checkbox"/>	8.03	<input type="checkbox"/>	13.646	<input type="checkbox"/>
3328			Means	3.28 ± 0.01	<input checked="" type="checkbox"/>	7.34 ± 1.38	<input type="checkbox"/>	13.689 ± 0.145	<input type="checkbox"/>
3329	1	W-39	3_12		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3329	2	W-39	3_12		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3329	3	W-39	3_12		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3329	4	W-39	3_12		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3329	5	W-39	3_12	3.29	<input type="checkbox"/>	9.77	<input type="checkbox"/>	13.971	<input type="checkbox"/>
3329	6	W-39	3_12	3.28	<input type="checkbox"/>	8.63	<input type="checkbox"/>	13.723	<input type="checkbox"/>
3329	7	W-39	3_12	3.28	<input type="checkbox"/>	8.66	<input type="checkbox"/>	13.706	<input type="checkbox"/>
3329	8	W-39	3_12	3.28	<input type="checkbox"/>	8.75	<input type="checkbox"/>	13.855	<input type="checkbox"/>
3329	9	W-39	3_12	3.28	<input type="checkbox"/>	8.88	<input type="checkbox"/>	13.803	<input type="checkbox"/>
3329			Means	3.28 ± 0.00	<input checked="" type="checkbox"/>	8.94 ± 0.48	<input type="checkbox"/>	13.812 ± 0.108	<input type="checkbox"/>
3330	1	W-18103	1_9		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3330	2	W-18103	1_9		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3330	3	W-18103	1_9		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3330	4	W-18103	1_9		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3330	5	W-18103	1_9	3.28	<input type="checkbox"/>	-90.15	<input type="checkbox"/>	-1.464	<input type="checkbox"/>
3330	6	W-18103	1_9	3.28	<input type="checkbox"/>	-90.50	<input type="checkbox"/>	-1.505	<input type="checkbox"/>
3330	7	W-18103	1_9	3.27	<input type="checkbox"/>	-92.13	<input type="checkbox"/>	-1.728	<input type="checkbox"/>
3330	8	W-18103	1_9	3.27	<input type="checkbox"/>	-88.16	<input type="checkbox"/>	-1.188	<input type="checkbox"/>
3330	9	W-18103	1_9	3.28	<input type="checkbox"/>	-90.45	<input type="checkbox"/>	-1.493	<input type="checkbox"/>
3330			Means	3.28 ± 0.01	<input checked="" type="checkbox"/>	-90.28 ± 1.42	<input type="checkbox"/>	-1.476 ± 0.192	<input type="checkbox"/>
3331	1	W-18104	1_10		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
3331	2	W-18104	1_10		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>

Continue
Cancel

Bad Injections

Analysis	Inj	Error
3324	6	H2O Density issue
3347	7	H2O Density issue
3353	5	Pressure issue
3353	6	H2O Density issue
3357	8	Pressure issue
3358	7	Pressure issue
3360	7	Pressure issue
3361	5	H2O Density issue
3361	6	Pressure issue
3366	6	H2O Density issue

$\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Ref for Additive Normalization: W-39

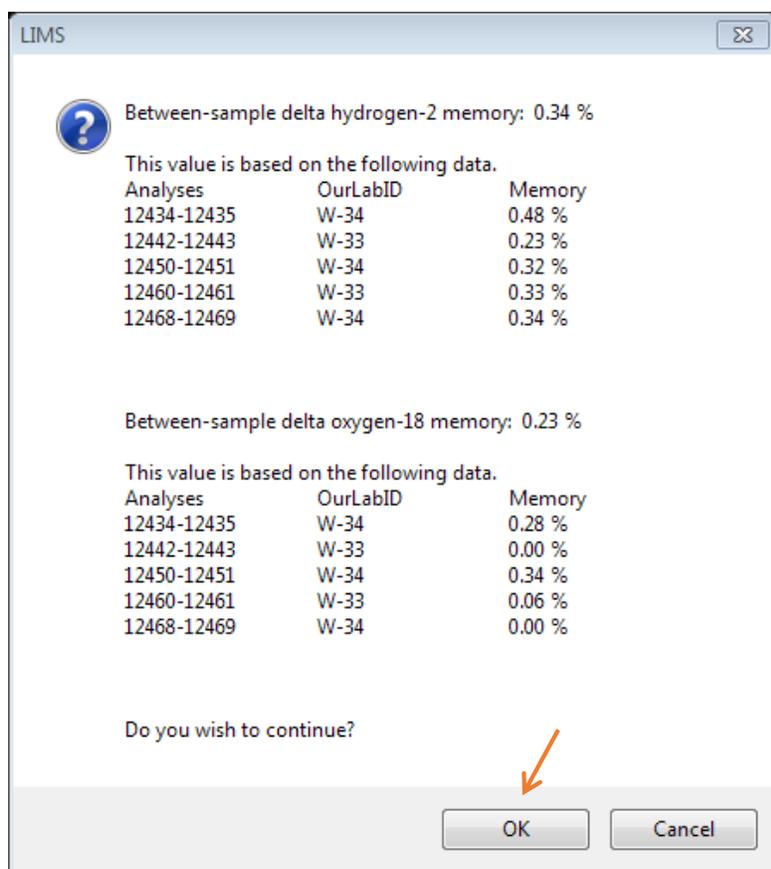
Reference for Scale Expansion: W-34

- Перед тем, как нажать “Continue”, используйте полосу прокрутки для поиска аномальных отклонений в «Rel H₂O Conc» (2,38 это сокращенное значение, обозначающее 2.38×10^{16} молекул H₂O, по данным прибора Los Gatos Research) и любых

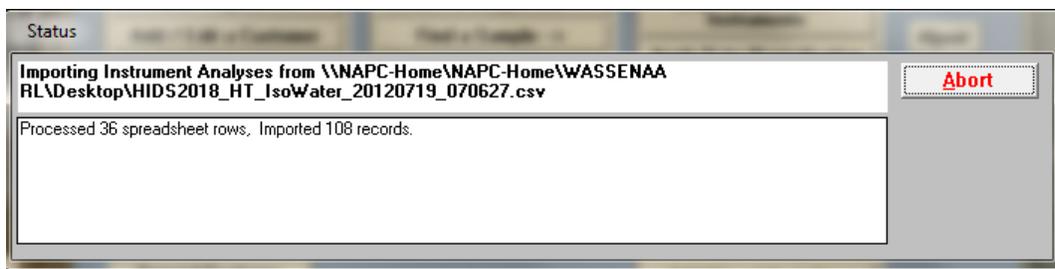
аномальных значений значения δ . Аномальные значения можно игнорировать, щелкнув поле игнорирования рядом с каждым элементом. При выборе «IG Conc» автоматически проверяются поля игнорирования соответствующих данных $\delta^{2}\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^{17}\text{O}$. Также отметьте любые инъекции с инструментальными ошибками в поле справа.

Если все данные в порядке, нажмите “Continue”.

10. Подсчитывается и усредняется эффект «памяти» в анализах соседних проб. Она должна быть менее 1–2%. Нажмите «OK», чтобы продолжить.



11. Данные проб с поправкой на нарастающую инструментальную ошибку измерения и память Los Gatos Research импортируются в LIMS для финальной обработки.



12. В конце импорта *LIMS for Lasers 2015* проверяет, произошел ли импорт данных. Нажмите “OK”.
13. Нормализация, оценка и сохранение окончательных результатов описываются в [Разделе 12](#).

11 Импорт данных – параметры и ошибки

11.1 Объяснение параметров импорта данных

В *LIMS for Lasers 2015* доступно несколько опций импорта, которые подробно описаны ниже. Пользователь может выбрать различные варианты импорта данных для данных по $\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^{17}\text{O}$ (если они есть).

Import Criteria for Instrument M (LGR v4)

A Los Gatos Research import has been identified. Isotopic data can be imported using either:

1. An Import With Normalization Over Sub-ranges of Analyses (sometimes called Bracketed Normalization). LIMS will first perform an additive normalization on sub-ranges of analyses for either or both isotopes selected. LIMS commonly uses the reference water most enriched in deuterium and oxygen-18. This is equivalent to adjusting 'b' in the equation:
$$y = mx + b$$

Next LIMS will normalize the scale expansion, which is the 'm' coefficient by using a second reference water, which commonly is Antarctic water or a low delta value reference water. A result of this normalization is that after importing analyses and opening the 'Normalization Equation Coefficients' form, the 'Final Delta' values of these reference waters will be identical to the values found in the Table of References in LIMS.
2. A Standard Import With Choices. Linearity correction and (or) between-sample memory correction can be applied to data before they are imported into analysis tables of LIMS.
3. A Standard Import. Data are imported as is, that is, without linearity correction or between-sample memory correction.

In many laboratories hydrogen and oxygen isotopic data are imported with the Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization) because their baselines commonly drift randomly for unexplained reasons.

Carry-over is a known problem of many of the syringes used for transferring the small amounts of water analyzed by this laser-based system. LIMS is able to compute the average between-sample memory from analyses of the same sample loaded into two sequentially analyzed vials.

Continue
Cancel

$\delta^2\text{H}$ Data

Import Type

- Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)
- Standard Import With Choice of Corrections
- Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

- Correct For Change in δ with Rel H2O Conc
- Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

- Correct For Between-Sample Memory
- Do Not Correct For Between-Sample Memory

$\delta^{18}\text{O}$ Data

Import Type

- Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)
- Standard Import With Choice of Corrections
- Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

- Correct For Change in δ with Rel H2O Conc
- Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

- Correct For Between-Sample Memory
- Do Not Correct For Between-Sample Memory

There are 15 samples in the import file without companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 samples. The first few are:
W-3
W-33
W-34
W-35
W-998

To import delta oxygen-17 analyses you will need to create companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 samples for these samples.

Click 'View Project' on the Main Menu. Select the project with the specified sample(s).

Click the 'Create Companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 Project' button.

Тип импорта изотопных данных (по умолчанию = Импорт с нормализацией по поддиапазнам)

Стандартный импорт

Изотопные данные из файла CSV лазера импортируются без каких-либо поправок. Во время импорта данных не применяются поправки на нарастающую инструментальную ошибку измерения или память, а другие параметры неактивны. После импорта может применяться линейная коррекция нарастающей инструментальной ошибки измерения, когда данные измерений нормализованы по шкале VSMOW-SLAP.

Стандартный импорт с возможностью выбора исправлений

Эта опция использует *все* данные автозапуска, которые не игнорируются, с возможностью выбора коррекции линейной нарастающей инструментальной ошибки измерения и эффекта «памяти» между пробами. Такая опция использует все данные для нормализации, которые не игнорируются, и все результаты измерений обрабатываются как единый пакет. Не применяется «граничная» нормализация (bracketed normalization), которая часто используется для коррекции нелинейной нарастающей инструментальной ошибки измерения, которая могла произойти во время автозапуска.

Импорт с нормализацией по поддиапазнам – «граничная» нормализация (bracketed normalization) по умолчанию

Данная опция также известна как «граничная» нормализация (bracketed normalization) и является рекомендуемым вариантом импорта по умолчанию в *LIMS for Lasers*. В этом варианте используется особый макет шаблона анализа по умолчанию и расположение стандартов для нормализации данных проб между группами стандартов. Уравнения нормализации применяются к граничным сегментам автозапуска, показанным в Таблицах 1 и 2, и поэтому данный вариант импорта также корректирует нелинейную нарастающую инструментальную ошибку измерения.

Поправки к δ при изменениях относительной концентрации водяного пара в анализаторе

Зависимость значений δ прибора от относительных концентраций H_2O существенна для большинства лазерных приборов. Как правило, изменения количества H_2O в полости лазера возникают из-за недостаточной производительности шприца, утечек, или при намеренных изменениях пользователем. Зависимость δ от количества H_2O может быть скорректирована с помощью линейных или нелинейных методов аппроксимации. В [Приложении 3](#) показано, как применение алгоритма поправки на концентрацию может существенно повысить точность и сходимости результатов δ для всех изотопных частиц.

Корректировка эффекта «памяти» между пробами (по умолчанию =корректировка памяти)

Эта опция использует предустановленный по умолчанию макет шаблона *LIMS for Lasers 2015* для определения корректировки эффекта «памяти» между пробами в течение всего автозапуска с помощью группировок эталонов, распределенных по запуску (от низкого к высокому, от высокого к низкому и т. д.). Как отмечалось выше, мы рекомендуем изначально использовать 9 инъекций проб и игнорировать первые 4, чтобы минимизировать эффект «памяти» между пробами.

Эффект «памяти» между пробами вычисляется путем сравнения средних значений не игнорируемых значений δ первого стандарта (высокое значение δ) со средними значениями двух последовательных инъекций второго (низкое значение δ) стандарта, или наоборот (от высокого к низкому, от низкого к высокому). Для автозапуска, содержащего распределенные группы высокого/низкого стандарта, за которыми следуют два идентичных низкого/высокого стандарта (например, HighStd, LowStd1, LowStd2), эффект

«памяти» между пробами определяется с использованием среднего значения всех не игнорируемых стандартов измерения следующим образом:

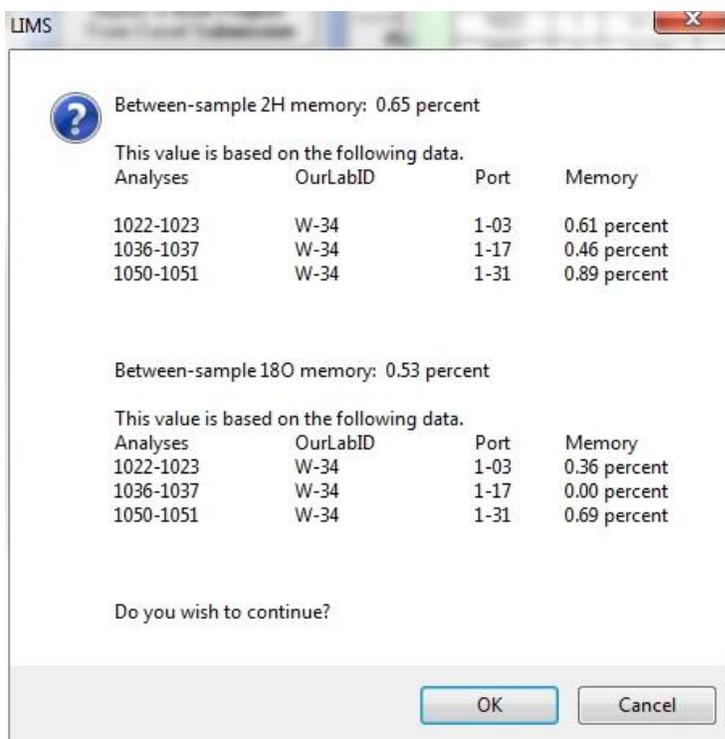
$$\text{«память» между пробами (\%)} = (\text{avg LowStd1} - (\text{avg Low Std2})) / \text{avg (HighStd} - (\text{avg Low Std2}))$$

Пример «памяти» для $\delta^2\text{H}$: $0.68\% = (-401.57\text{‰} - (-404.03\text{‰})) / (-41.89\text{‰} - (-404.03\text{‰}))$

Коррекция эффекта «памяти» между пробами усредняется с использованием всех соответствующих контрольных групп в автозапуске, а затем применяется ко всем пробам и эталонам:

Скорректированная проба $\delta^2\text{H} = 1.0068 * (\text{Среднее по выборке} - \text{Среднее по предыдущей выборке}) + \text{Среднее по предыдущей выборке}$

Окончательный скорректированный результат $\delta = \text{Среднее значение выборки} - (\text{Среднее скорректированное значение} - \text{Среднее значение выборки})$



Коррекция нарастающей инструментальной ошибки измерения со временем

Данная опция позволяет пользователю корректировать данные прибора из запуска, демонстрирующего сильную линейную нарастающую инструментальную ошибку

измерения (с использованием лабораторных стандартов) со временем. Такая необходимость возникает редко, о чем обычно свидетельствует высокая ошибка углового коэффициента (наклона) регрессии стандартного значения δ в зависимости от времени. Можно оценить эту опцию, но обычно выдается следующее сообщение:

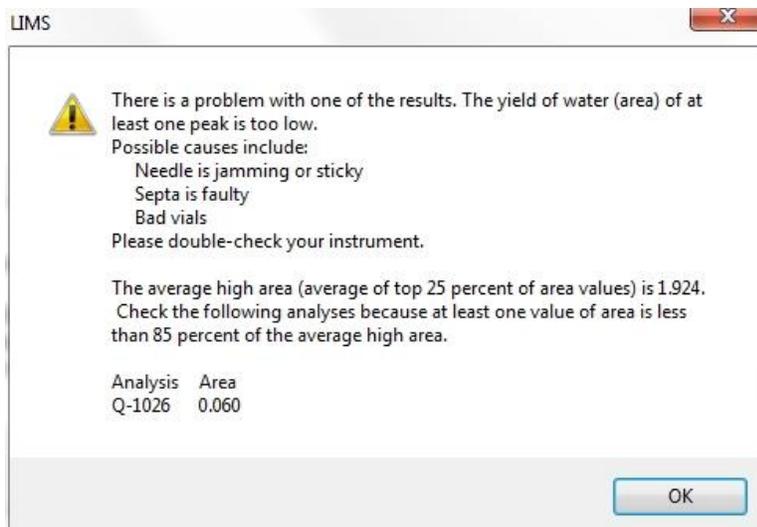


Примечание: Коррекция линейной нарастающей инструментальной ошибки измерения с учетом времени доступна только в том случае, если выбран параметр «Standard Import». Значение коррекции нарастающей ошибки со временем также отображается на странице нормализации данных в столбце, обозначенном «Hourly Corr» (см. [Раздел 12.2](#)).

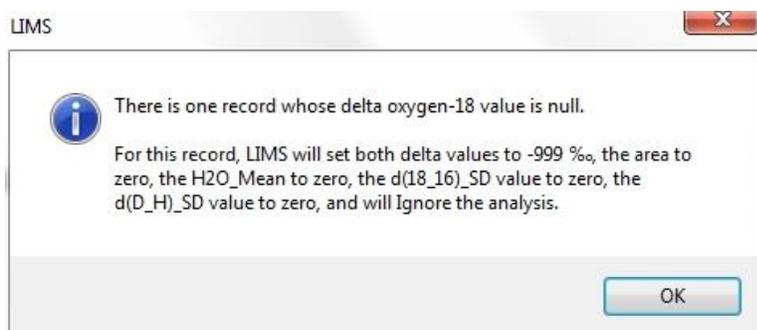
11.2 Сообщения об ошибках импорта данных

Две наиболее распространенные ошибки при импорте происходят из-за неудачного анализа, например, с низкой или сильно изменяющейся концентрацией водяного пара H_2O в анализаторе в результате неисправности шприца или прокладки, или из-за нулевых данных из отмененных анализов или какой-либо другой неисправности прибора.

LIMS for Lasers 2015 предупредит пользователя об ошибочном состоянии проб и анализа при импорте данных. Данная функция предварительной проверки помогает гарантировать, что пользователи не импортируют неверные данные. Предупреждения об этом не появятся, если данные автозапуска пройдут предварительное тестирование.



Пример: этот флакон с пробой был либо недостаточно, либо чрезмерно наполнен, что привело к низкой концентрации водяного пара H_2O в лазерном анализаторе с последующим неудачным изотопным анализом. *LIMS for Lasers 2015* предупреждает пользователя, какая проба была проблематичной.



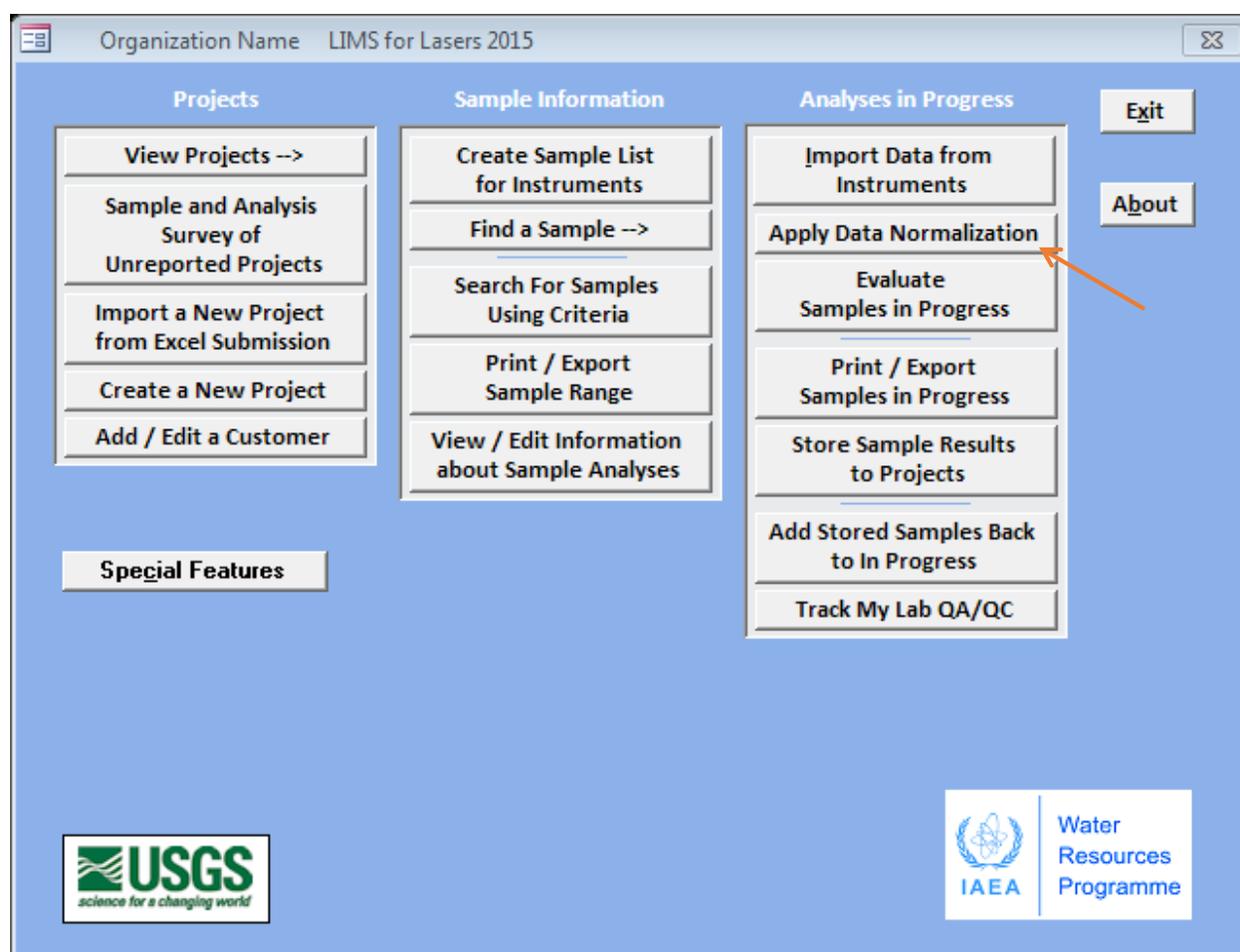
Пример: иногда неисправности прибора могут приводить к выдаче нулевых или пустых изотопных данных для одной или нескольких инъекций. *LIMS for Lasers 2015* отображает нулевые значения, чтобы исключить их из нормализации проб.

12 Нормализация, оценка и сохранение результатов

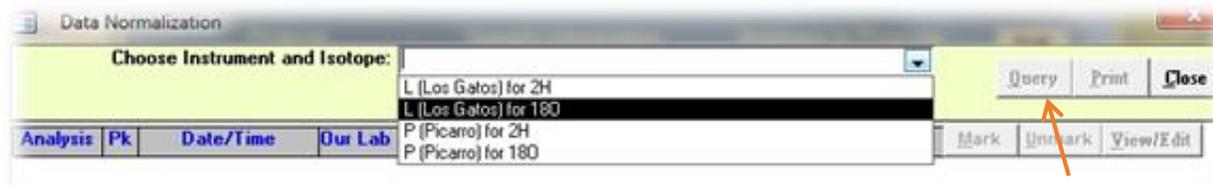
12.1 Нормализация данных по шкалам VSMOW и SLAP

В данном разделе мы опишем процедуру маркировки, нормализации и оценки данных. Поскольку к приборам Los Gatos Research и Picarro применяется идентичная процедура, и она повторяется для измерений $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$, процесс будет показан один раз на примере одного изотопа.

1. После успешного импорта файлов данных из лазерного прибора ([Разделы 9](#) и [10](#)) на главной странице *LIMS for Lasers 2015* нажмите кнопку “Apply Data Normalization”.



2. В раскрывающемся меню в верхней части окна выберите соответствующий прибор и конкретный вид изотопа для обработки. Помните: данная процедура выполняется дважды – один раз для ^2H и один раз для ^{18}O (и, возможно, третий раз для ^{17}O). Выберите один прибор и вид изотопа и нажмите “Query”.



В открывшемся окне (приведено ниже) будут показаны последние 500 анализов для выбранного лазерного прибора. Список анализов отсортирован по дате; по умолчанию отображаются самые свежие пробы. Более старые данные можно просмотреть, уменьшив количество анализов в полях «from» и «to», а затем повторно запросив базу данных.

Отображаемые поля данных:

Analysis – код прибора и его порядковый номер (L, P и т.д.), предоставленные лазерным прибором.

Inj – номер инъекции пробы. Здесь каждая конкретная проба состоит из девяти инъекций. Имеется два экземпляра каждого номера пика: один обозначен как ^2H , а другой – как ^{18}O .

Date/time – Дата и время анализа прибора

Our Lab ID – Название пробы в LIMS. Знак плюс (+) рядом с идентификатором лаборатории Our Lab ID обозначает вид изотопа, выбранный на шаге 2 для нормализации (здесь ^2H на Picarro).

Vial Pos – положение каждой пробы в лотке автоматического пробоотборника.

Важность немедленной маркировки и нормализации импортируемых данных

Поскольку данные по двум/трем изотопам одновременно импортируются в файлы CSV, *LIMS for Lasers 2015* не может отличить один автозапуск от другого. Аналитик должен вручную указать *LIMS для Lasers 2015*, какие данные соответствуют каждому автозапуску для каждого изотопа. Процедура известна как «Marking (Маркировка)», при которой аналитик определяет начало и конец каждого автозапуска (например, диапазон анализов), который необходимо нормализовать для каждого изотопа, как показано в примере ниже.

Советы:

- Рекомендуется импортировать, маркировать и нормализовать каждый автозапуск для всех изотопов сразу после его завершения. Не накапливайте файлы лазерных данных и не импортируйте их позже в случайном порядке.
- Отмеченный конец каждого автозапуска определяет начало следующего автозапуска импортированных данных при импорте в хронологическом порядке (например, по последовательному номеру анализа).
- Если вы импортируете данные и забудете промаркировать и нормализовать их, следующий набор данных будет добавлен к нему и будет отображаться как один большой автозапуск (добавление автозапусков настоятельно не рекомендуется!)

- Если вы хотите повторно импортировать автозапуск для альтернативной обработки, вы должны сначала снять маркировку с тех данных, которые были ранее промаркированы и нормализованы, а затем повторно импортировать. *LIMS for Lasers 2015* предупредит вас, если вы попытаетесь повторно импортировать данные поверх ранее промаркированных и нормализованных данных.

Data Normalization										
Choose Instrument and Isotope Delta: M (LGR v4) for $\delta^2\text{H}$										
'Right' mouse button information available for columns with blue column headings.										
Analyses from: 11970 to: 12470										
Analysis	Inj	Date/Time	Our Lab ID	Vial Pos	Correction Coefs.	Range	Mark	Unmark	View/Edit	
M-12468	8	2015/08/26 23:04:32	W-34 +	3_10	1.00000,,					
M-12468	8	2015/08/26 23:04:32	W-34	3_10	1.00000,,					
M-12468	9	2015/08/26 23:06:18	W-34 +	3_10	1.00000,,					
M-12468	9	2015/08/26 23:06:18	W-34	3_10	1.00000,,					
M-12469	1	2015/08/26 23:07:33	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	1	2015/08/26 23:07:33	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	2	2015/08/26 23:08:48	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	2	2015/08/26 23:08:48	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	3	2015/08/26 23:10:03	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	3	2015/08/26 23:10:03	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	4	2015/08/26 23:11:18	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	4	2015/08/26 23:11:18	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	5	2015/08/26 23:13:03	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	5	2015/08/26 23:13:03	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	6	2015/08/26 23:14:48	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	6	2015/08/26 23:14:48	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	7	2015/08/26 23:16:33	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	7	2015/08/26 23:16:33	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	8	2015/08/26 23:18:19	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	8	2015/08/26 23:18:19	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12469	9	2015/08/26 23:20:04	W-34 +	3_11	1.00000,,					
M-12469	9	2015/08/26 23:20:04	W-34	3_11	1.00000,,					
M-12470	1	2015/08/26 23:21:20	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	1	2015/08/26 23:21:20	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	2	2015/08/26 23:22:34	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	2	2015/08/26 23:22:34	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	3	2015/08/26 23:23:50	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	3	2015/08/26 23:23:50	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	4	2015/08/26 23:25:04	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	4	2015/08/26 23:25:04	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	5	2015/08/26 23:26:50	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	5	2015/08/26 23:26:50	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	6	2015/08/26 23:28:36	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	6	2015/08/26 23:28:36	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	7	2015/08/26 23:30:22	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	7	2015/08/26 23:30:22	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	8	2015/08/26 23:32:08	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	8	2015/08/26 23:32:08	W-3	3_37	1.00000,,					
M-12470	9	2015/08/26 23:33:53	W-3 +	3_37	1.00000,,					
M-12470	9	2015/08/26 23:33:53	W-3	3_37	1.00000,,					

Выберите последнюю строку +, чтобы отметить диапазон проб.

3. Чтобы нормализовать импортированные данные лазера, **дважды нажмите на последнем номере** анализа со знаком «+» рядом с ним. Такая опция отметит для нормализации все данные Н (или О), накопленные с момента последнего импорта и нормализации данных. Поскольку по умолчанию в *LIMS для Lasers 2015* используется

метод «граничной» нормализации (bracketed normalization), LIMS уже предварительно обработала и нормализовала все изотопные данные, и появляется сообщение “Fully normalized Instrument (Picarro or Los Gatos Research) analyses have been identified” (Были определены полностью нормализованные анализы прибора (Picarro или Los Gatos Research)). Нажмите «ОК». Затем нажмите кнопку “Apply Normalization”, чтобы принять нормализацию LIMS.

4. Готово! Повторите этот процесс, начиная с шага 2, для второго или третьего видов изотопов (например, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$). LIMS использовала граничные (bracketed) стандарты измерений (с поправкой на эффект «памяти» и нарастающую инструментальную ошибку измерений) для нормализации изотопных данных пробы Н и О по шкалам VSMOW и SLAP. Затем мы можем оценить результаты, как описано в [Разделе 12.3](#).

Date Time	Our Lab ID	Analysis	Pk	Port	Area Vs	Penult	Hourly Corr	Expans Coef	Add Corr	Final	IG
2012-07-18 10:26:54	W-34										
	W-34										
	W-34										
	W-34										

OurLabID	Port	Analysis	Average	Std Dev
W-34	1-02	Q-1023	-24.76	0.05
W-34	1-03	Q-1024	-24.76	0.04
W-34	1-16	Q-1037	-24.76	0.13
W-34	1-17	Q-1038	-24.76	0.37
W-34	1-30	Q-1051	-24.76	0.03
W-34	1-31	Q-1052	-24.76	0.04
W-34	1-02	Q-1055	-24.76	0.35
W-34	1-03	Q-1056	-24.76	0.11
W-34	1-16	Q-1069	-24.76	0.60



Чтобы избежать путаницы, всегда помечайте и нормализуйте результаты измерений $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^{2}\text{H}$ каждого автозапуска *перед* импортом данных из следующего запуска. Такая процедура позволяет избежать объединения наборов данных из разных запусков. Также убедитесь, что часы на вашем лазерном приборе показывают правильную дату и время.

LIMS for Lasers 2015 назначает новый номер инъекции во время импорта для всех анализов $\delta^{17}\text{O}$. Новое количество инъекций равно сумме количества инъекций $\delta^{2}\text{H}$ и числа 70. При нормализации результатов $\delta^{17}\text{O}$ пользователь увидит, что для результатов определения $\delta^{17}\text{O}$ показаны номера инъекций от 71 и выше.

Data Normalization									
Choose Instrument and Isotope Delta: M (LGR v4) for $\delta^{17}\text{O}$									
'Right' mouse button information available for columns with blue column headings.									
Analyses from: 11970 to: 12470									
Analysis	Inj	Date/Time	Our Lab ID	Vial Pos	Correction Coefs.	Range	Mark	Unmark	View/Edit
M-12469	8	2015/08/26 23:18:19	W-34	3_11	1.00000,,				
M-12469	8	2015/08/26 23:18:19	W-34	3_11	1.00000,,				
M-12469	9	2015/08/26 23:20:04	W-34	3_11	1.00000,,				
M-12469	9	2015/08/26 23:20:04	W-34	3_11	1.00000,,				
M-12469	71	2015/08/26 23:07:33	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	72	2015/08/26 23:08:48	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	73	2015/08/26 23:10:03	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	74	2015/08/26 23:11:18	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	75	2015/08/26 23:13:03	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	76	2015/08/26 23:14:48	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	77	2015/08/26 23:16:33	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	78	2015/08/26 23:18:19	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12469	79	2015/08/26 23:20:04	W-100 +	3_11	1.00000,0.00,,				
M-12470	1	2015/08/26 23:21:20	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	1	2015/08/26 23:21:20	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	2	2015/08/26 23:22:34	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	2	2015/08/26 23:22:34	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	3	2015/08/26 23:23:50	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	3	2015/08/26 23:23:50	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	4	2015/08/26 23:25:04	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	4	2015/08/26 23:25:04	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	5	2015/08/26 23:26:50	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	5	2015/08/26 23:26:50	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	6	2015/08/26 23:28:36	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	6	2015/08/26 23:28:36	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	7	2015/08/26 23:30:22	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	7	2015/08/26 23:30:22	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	8	2015/08/26 23:32:08	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	8	2015/08/26 23:32:08	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	9	2015/08/26 23:33:53	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	9	2015/08/26 23:33:53	W-3	3_37	1.00000,,				
M-12470	71	2015/08/26 23:21:20	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	72	2015/08/26 23:22:34	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	73	2015/08/26 23:23:50	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	74	2015/08/26 23:25:04	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	75	2015/08/26 23:26:50	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	76	2015/08/26 23:28:36	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	77	2015/08/26 23:30:22	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	78	2015/08/26 23:32:08	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,				
M-12470	79	2015/08/26 23:33:53	W-96 +	3_37	1.00000,0.00,,	1.000 - 12470.079; 1.00000*pd+0.0			

Маркированный диапазон проб с примененной нормализацией.

12.2 Нормализация данных без «граничной» (bracketed) нормализации

Если вы импортировали изотопные данные с помощью необязательного “Standard Import” или “Standard Import with Choice of Corrections”, автозапуск обрабатывается как единый пакет, и другие параметры нормализации, такие как коррекция линейной нарастающей инструментальной ошибки измерений, могут применяться после выполнения этапов 1–3 в [Разделе 12.1](#).

1. Нажмите “Normalize with All References”. Расчетное значение R-squared должно быть > 0.9. Если R-squared значительно меньше 0.9, это свидетельствует о нежелательной изотопной вариации в стандартах. Проверьте наличие аномальных отклонений.
2. Нажмите на “Apply Normalization”. К данным применяются предложенный коэффициент расширения и аддитивные поправочные коэффициенты, полученные из эталонов в автозапуске. По желанию проверьте нарастающую инструментальную ошибку измерений, отметив “Use Linear Drift Correction”.
3. Готово! Повторите процесс для второго изотопа (например, $\delta^{18}\text{O}$). Затем оцените свои результаты ([Раздел 12.3](#)).

Примечание: *LIMS for Lasers 2015* обнаруживает 4 игнорируемых инъекции, установленных в параметрах прибора. Проверьте аномальные значения и при необходимости игнорируйте. На нижней панели отображается сводка результатов эталонов, использованных при нормализации – обратите внимание, что недостоверные эталоны также можно игнорировать.

Normalization Equation Coefficients

Correction Factor List: K (Picarro 2140i) for δ2H Range: K-1.000 to K-470.007 Ignore Some Deltas Ignore All Deltas Print Close

Show

- One Reference
- All References
- All Analyses

Drift Correction with Time

Use Linear Drift Correction with Time

-0.018 % / hr

Normalization

Normalize with This Reference: [] 'True' Value: []

Normalize with All References

R-Squared: 0.999989

Force Exp Coef to 1.00000

Multiple Injections/Analysis

Mean Intermediate

Delta: []

Std Dev: []

Normalization Equation Coefficients

Proposed Accepted

Exp Coef: 0.98207 1.000000

Add Coef: 3.47

Apply Normalization -->

'Right' mouse button info available for Our Lab ID Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Date Time	Our Lab ID	Analysis	Inj	Vial Pos	Rel H2O Conc	Instr Error	Penult δ2H	Hourly Corr	Expans Coef	Add Corr	Final δ2H	IG
2015/08/27 14:31:12	W-998	K-456	3	1-03	1.747		-84.28	-0.03	0.98207	3.47	-79.33	✓
2015/08/27 14:39:59	W-998	K-456	4	1-03	1.776		-84.18	-0.03	0.98207	3.47	-79.24	✓
2015/08/27 14:48:47	W-998	K-456	5	1-03	1.734		-84.37	-0.04	0.98207	3.47	-79.43	⌘
2015/08/27 14:57:34	W-998	K-456	6	1-03	1.717		-84.52	-0.04	0.98207	3.47	-79.58	⌘
2015/08/27 15:06:22	W-998	K-456	7	1-03	1.235		-85.06	-0.04	0.98207	3.47	-80.11	⌘
2015/08/27 15:15:09	W-33	K-457	1	1-04	1.973		-152.43	-0.05	0.98207	3.47	-146.27	✓
2015/08/27 15:23:57	W-33	K-457	2	1-04	1.987		-155.22	-0.05	0.98207	3.47	-149.02	✓
2015/08/27 15:32:45	W-33	K-457	3	1-04	1.99		-156.01	-0.05	0.98207	3.47	-149.80	✓
2015/08/27 15:41:33	W-33	K-457	4	1-04	1.984		-156.21	-0.05	0.98207	3.47	-149.99	✓
2015/08/27 15:50:21	W-33	K-457	5	1-04	2.009		-156.42	-0.06	0.98207	3.47	-150.21	⌘
2015/08/27 15:59:09	W-33	K-457	6	1-04	2.007		-156.51	-0.06	0.98207	3.47	-150.29	⌘
2015/08/27 16:07:58	W-33	K-457	7	1-04	1.955		-156.69	-0.06	0.98207	3.47	-150.48	⌘
2015/08/27 16:16:45	W-34	K-458	1	1-05	2.046		-14.12	-0.06	0.98207	3.47	-10.46	✓
2015/08/27 16:25:33	W-34	K-458	2	1-05	2.034		-8.35	-0.07	0.98207	3.47	-4.80	✓
2015/08/27 16:34:22	W-34	K-458	3	1-05	2.034		-7.26	-0.07	0.98207	3.47	-3.74	✓

Record: 1 of 119 No Filter Search

Multiple Injections Analysis Summary

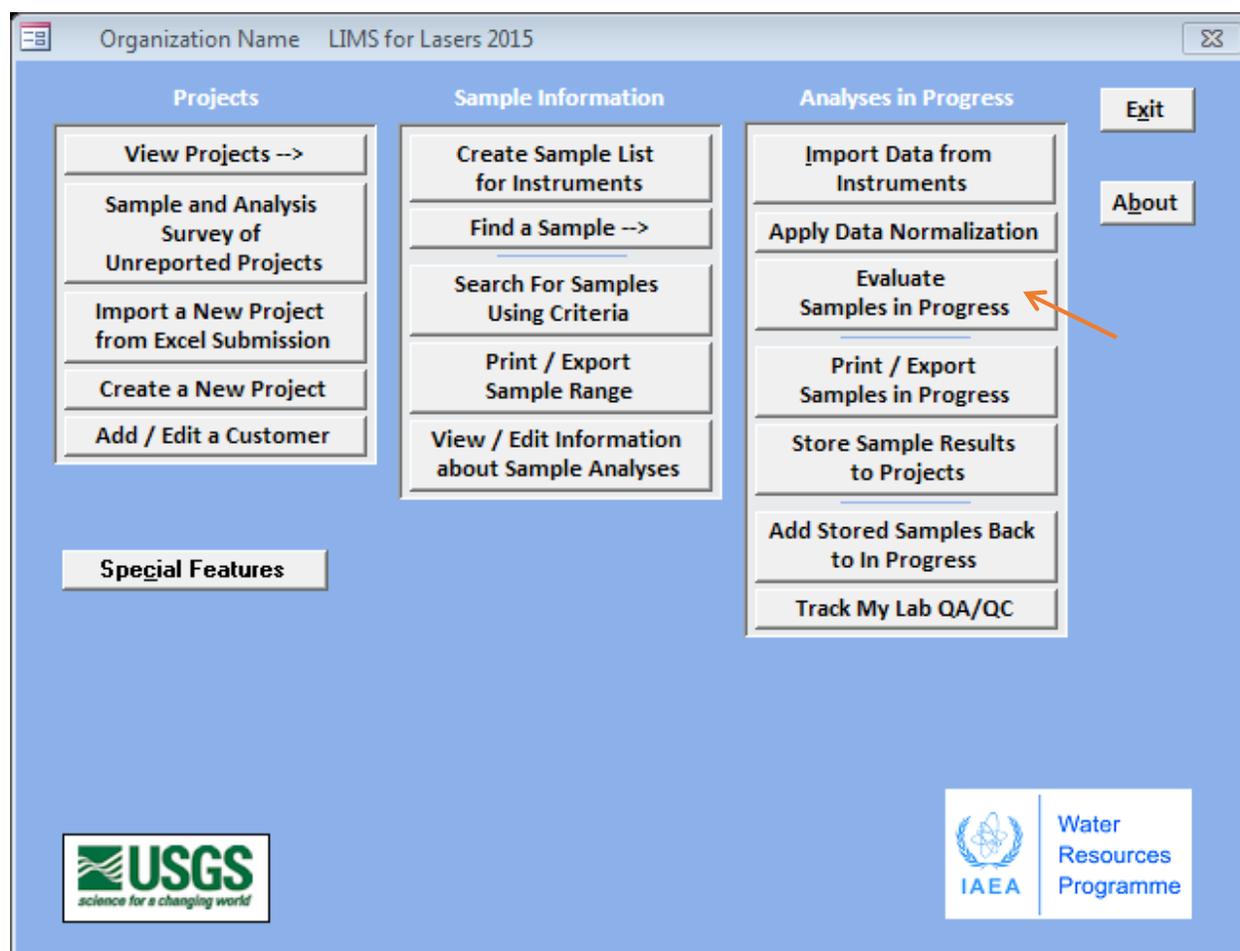
OurLabID	Vial Pos	Analysis	Average	Std Dev
W-33	1-04	K-457	-150.32	0.14
W-33	1-16	K-469	-149.96	0.27
W-33	1-17	K-470	-150.32	0.07
W-34	1-05	K-458	-2.34	0.19
W-34	1-06	K-459	-1.62	0.04
W-34	1-15	K-468	-2.04	0.11

12.3 Оценка анализов в ходе работы

После того, как пробы были измерены и нормализованы по шкалам VSMOW-SLAP, они остаются текущими (“in progress”), пока не будут оценены аналитиком и сохранены. Аналитик должен оценить все результаты, прежде чем сохранять их и передавать заказчику.

Оценка данных *LIMS for Lasers 2015* состоит из двух частей: (1) проверка повторяемости всех нормализованных проб, которые были измерены дважды или более; и (2) проверка эффективности контрольных стандартов, включенных в каждый запуск, и во времени (см. [Раздел 12.7](#)).

1. На главной странице *LIMS for Lasers 2015*, нажмите “Evaluate Samples in Progress”.



Evaluate Analyses in Progress

List [Navigation icons] Query Retrieve Delete Print Close

Isotope Delta:

Our Lab ID Range

Prefix

C -> Carbonate
 G -> General
 J -> Julian
 N -> Nitrogen
 R -> Reference
 S -> Sulfur
 W -> Water

From: To:

Sample Information

Our Lab ID:

Submitter:

Subm Date:

Sample ID:

Results

Mean Final δ2H:

Mean 1: Std Dev 1:

Mean 2: Std Dev 2:

'Right' mouse button info available for Instr Error

Date	Analysis	Inj	Vial Position	Rel H2O Conc	Instr Error	Penult δ2H	Hourly Corr	Expans Coef	Add Corr	Final δ2H	IG

Record: [Navigation icons] No Filter Search

- Выберите вид изотопа в поле Isotope Delta (например, $\delta^2\text{H}$), значение которого вы хотите оценить, в выпадающем меню, расположенном в верхнем левом углу (не забудьте повторить процедуру для $\delta^{18}\text{O}$).
- Доступный код в *LIMS for Lasers 2015* - «W» для воды (другие коды не активированы).
- Введите диапазон «W» нормализованных проб или контрольных стандартов, которые вы хотите оценить. В приведенном ниже примере диапазон от W-1802 до W-1821 соответствует последнему запуску данных.
- Затем нажмите на «Query».
- Откроется новое окно, показывающее сводку всех результатов для каждой запрошенной пробы в диапазоне «W».

Our Lab ID Range

Prefix

C -> Carbonate
 G -> General
 J -> Julian
 N -> Nitrogen
 R -> Reference
 S -> Sulfur
 W -> Water

Our Lab ID: **W-1804**

Submitter: Leonard Wassenaar

Subm Date: 2012-07-13

Sample ID: OH-13-03

Results

Mean Final Delta: -2.4 ‰ relative to VSMOW

Mean 1: -2.4 Std Dev 1: 0.1

Mean 2: Std Dev 2:

Multiple Peaks/Analysis Summary

Analysis	Mean	Std Dev
Q-959	-2.36	0.07
Q-993	-2.48	0.09

Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Date	Analysis	Pk	Vial Position	Area Vs	Penult Delta	Hourly Corr	Expans Coef	Add Corr	Final Delta	IG
2012-07-13	Q-959	1	1-07	2.01	-2.50		1.00000	0.0	-2.50	☑
2012-07-13	Q-959	2	1-07	2	-2.42		1.00000	0.0	-2.42	☑
2012-07-13	Q-959	3	1-07	1.99	-2.39		1.00000	0.0	-2.39	☑
2012-07-13	Q-959	4	1-07	2	-2.41		1.00000	0.0	-2.41	☐
2012-07-13	Q-959	5	1-07	2	-2.29		1.00000	0.0	-2.29	☐
2012-07-13	Q-959	6	1-07	2	-2.46		1.00000	0.0	-2.46	☐
2012-07-13	Q-959	7	1-07	2	-2.38		1.00000	0.0	-2.38	☐
2012-07-13	Q-959	8	1-07	2.02	-2.27		1.00000	0.0	-2.27	☐
2012-07-13	Q-959	9	1-07	1.99	-2.34		1.00000	0.0	-2.34	☐
2012-07-16	Q-993	1	1-07	2.01	-2.77		1.00000	0.0	-2.77	☑
2012-07-16	Q-993	2	1-07	2.01	-2.81		1.00000	0.0	-2.81	☑
2012-07-16	Q-993	3	1-07	2	-2.74		1.00000	0.0	-2.74	☑
2012-07-16	Q-993	4	1-07	2.01	-2.60		1.00000	0.0	-2.60	☑
2012-07-16	Q-993	5	1-07	2.02	-2.60		1.00000	0.0	-2.60	☐
2012-07-16	Q-993	6	1-07	2.01	-2.54		1.00000	0.0	-2.54	☐
2012-07-16	Q-993	7	1-07	2.02	-2.43		1.00000	0.0	-2.43	☐
2012-07-16	Q-993	8	1-07	2.02	-2.46		1.00000	0.0	-2.46	☐
2012-07-16	Q-993	9	1-07	2	-2.37		1.00000	0.0	-2.37	☐

Record: 1 of 18

7. Нажав кнопку “List” (вверху слева) или используя кнопки навигации (клавиши со стрелками), можно просмотреть отдельные пробы для изучения результатов измерения. В приведенном выше примере проба с идентификатором Our Lab ID W-1804 была выбрана для $\delta^{2}\text{H}$. Также можно перемещаться по пробам с помощью колеса прокрутки мышки.

В этом окне отображается информация о пробе (ID, заказчик, дата анализа) и сводка нормализованных результатов (среднее и стандартное отклонение). Здесь мы отмечаем, что проба W-1804 была проанализирована дважды под номерами анализа Q-959 и Q-993 в окне Multiple Peak Summary. Средние нормированные значения (VSMOW) для каждого набора инъекций суммированы, и оба средних значения для этой пробы ($\delta^{2}\text{H}$, равное -2.36‰ и -2.48‰) хорошо согласуются, что указывает на то, что мы можем принять окончательный результат.

В нижней таблице показано, что W-1804 был измерен 13 и 16 июля 2012 г. Мы видим нормализованные данные и игнорируемые инъекции. Также показаны используемые положения флаконов, расширение шкалы и добавочные поправки (если применимо).

Используя стрелки навигации или колесо прокрутки мыши, отметьте все пробы, которые необходимо оценить. Убедитесь, что вы проверяете все пробы в каждом запуске, например, если были включены пробы из нескольких проектов (различные группы чисел W).

Если имеется значительное расхождение между значениями $\delta^2\text{H}$ или $\delta^{18}\text{O}$ в повторях одной и той же пробы, эту пробу следует измерить в третий раз. Если два из трех результатов совпадают, можно сделать вывод, что третье «аномальное значение» могло быть неудачным анализом (или перепутанным флаконом).

Определение, какое расхождение считать существенным – это вопрос профессионального суждения. Данное суждение принимает во внимание точность и сходимость результатов, которую может реально достичь используемый прибор.

В качестве первого предположения (и это зависит от прибора) повторы $\delta^2\text{H}$, которые повторяются в пределах 1.5‰ друг от друга, обычно считаются приемлемыми для гидрологических исследований. Для $\delta^{18}\text{O}$ повторы, которые находятся в пределах 0.2 ‰ друг от друга, обычно считаются приемлемыми. Данная оценка, однако, остается решением каждой лаборатории и представляет собой уровень, на котором лаборатория устанавливает свои собственные стандарты эффективности (см. также «Отслеживание обеспечения качества/контроля (QA/QC) лаборатории» в [Разделе 12.7](#) для получения долгосрочных показателей эффективности).

Важно! Если проба анализировалась 2–3 раза и имеется явное аномальное значение, в разделе «Evaluate Analyses in Progress» это аномальное значение должно быть вручную «проигнорировано». В нижнем окне установите флажки IG (игнорировать) для пробы с аномальным значением (например, для всех экземпляров с одинаковым номером анализа). Или нажмите правой кнопкой мыши, чтобы игнорировать все инъекции анализа одним кликом. Анализ исчезнет из окна Multiple Peak Summary, и эти неудачные результаты не будут использоваться при вычислении среднего отчетного итогового результата для этой пробы.

Внимание: если вы оставите неудачные результаты, они будут включены в итоговое отчетное среднее значение!

Нажав кнопку "Retrieve", пользователь может добавить пробу в очередь «Samples in Progress» для выбранного изотопа. Чтобы добавить сразу несколько, обратитесь к [Разделу 12.6](#).

Нажав кнопку "Delete", пользователь может удалить пробу из очереди «Samples in Progress» для выбранного изотопа. Это полезно для удаления из очереди фиктивных или тестовых проб, результаты которых больше не нужны. Обратите внимание, что результаты анализа не удаляются из базы данных *LIMS for Lasers 2015*. Их можно добавить обратно в очередь «Samples in Progress», используя кнопку "Retrieve" или форму "Add Stored Results Back to In Progress», описанные в [Разделе 12.6](#).

Кнопка «Print» распечатывает аналитические результаты выбранных проб. Расширенные возможности печати смотрите в [Разделе 12.4](#).

Поскольку *LIMS for Lasers 2015* во время импорта для всех анализов $\delta^{17}\text{O}$ назначает новые номера инъекций, которые равны 70 плюс номер инъекции каждого эквивалентного анализа $\delta^2\text{H}$, при оценке результатов $\delta^{17}\text{O}$ пользователи будут видеть, что для результатов $\delta^{17}\text{O}$ показаны номера инъекций от 71 и выше.

Evaluate Analyses in Progress

List [Navigation icons] Query Retrieve Delete Print Close

Isotope Delta
δ17O

Our Lab ID Range

Prefix

- C -> Carbonate
- G -> General
- J -> Julian
- N -> Nitrogen
- R -> Reference
- S -> Sulfur
- W -> Water

From: 1011 To: 1020

Sample Information

Our Lab ID: W-1011

Submitter: Test

Subm Date: 8/26/2015

Sample ID: 1

Results

Mean Final Delta: -106.97 ‰ relative to VSMOW

Mean 1: -106.97 Std Dev 1: 0.45

Mean 2: Std Dev 2:

Multiple Injections/Analysis Summary

Analysis	Mean	Std Dev
M-12436	-107.29	1.00
M-12454	-106.66	1.32

'Right' mouse button info available for Instr Error

Date	Analysis	Inj	Vial Position	Rel H2O Conc	Instr Error	Penult δ17O	Hourly Corr	Expans Coef	Add Corr	Final δ17O	IG
8/26/2015	M-12436	71	1_1					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	72	1_1					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	73	1_1					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	74	1_1					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	75	1_1	4.258		-106.51		1.00000	0.00	-106.51	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	76	1_1	4.296		-106.58		1.00000	0.00	-106.58	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	77	1_1	4.277		-108.07		1.00000	0.00	-108.07	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	78	1_1	4.275		-108.65		1.00000	0.00	-108.65	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12436	79	1_1	4.274		-106.64		1.00000	0.00	-106.64	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	71	1_11					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	72	1_11					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	73	1_11					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	74	1_11					1.00000	0.00		<input checked="" type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	75	1_11	4.295		-107.93		1.00000	0.00	-107.93	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	76	1_11	4.249		-106.36		1.00000	0.00	-106.36	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	77	1_11	4.259		-104.54		1.00000	0.00	-104.54	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	78	1_11	4.278		-107.50		1.00000	0.00	-107.50	<input type="checkbox"/>
8/26/2015	M-12454	79	1_11	4.274		-106.94		1.00000	0.00	-106.94	<input type="checkbox"/>

Ignore multiple injections with 'right' mouse button

Record: 14 of 18 No Filter Search

12.4 Печать или экспорт проб в ходе работы

Некоторые аналитики предпочитают дополнительно оценивать результаты в автономном режиме с помощью Excel или распечатывать подробные сводки для отдельных образцов перед их сохранением. Это можно сделать с помощью кнопки “Print/Export Samples in Progress” на главной странице LIMS, которая открывает форму ниже.

Print or Save Analyses in Progress

To print delta values of samples in the Table of Samples in Progress, select the range of samples by entering the Our Lab IDs, which consists of a letter prefix and the integer sample numbers, and select the isotope.

The print Samples in Progress query can be constrained by clicking the Advanced toggle button to allow the user to select a range of analyses from a single instrument.

Isotope Delta
δ²H

Our Lab ID

Prefix

- C -> Carbonates
- G -> General
- J -> Julian
- N -> Nitrogen
- R -> Reference
- S -> Sulfur
- W -> Water

From: 1002 **to:** 1010

Save As Excel File

Print Amounts and H₂O Concentrations

Save Only Analyses From a Single Instrument

Export with references

Instrument

Analyses from: to:

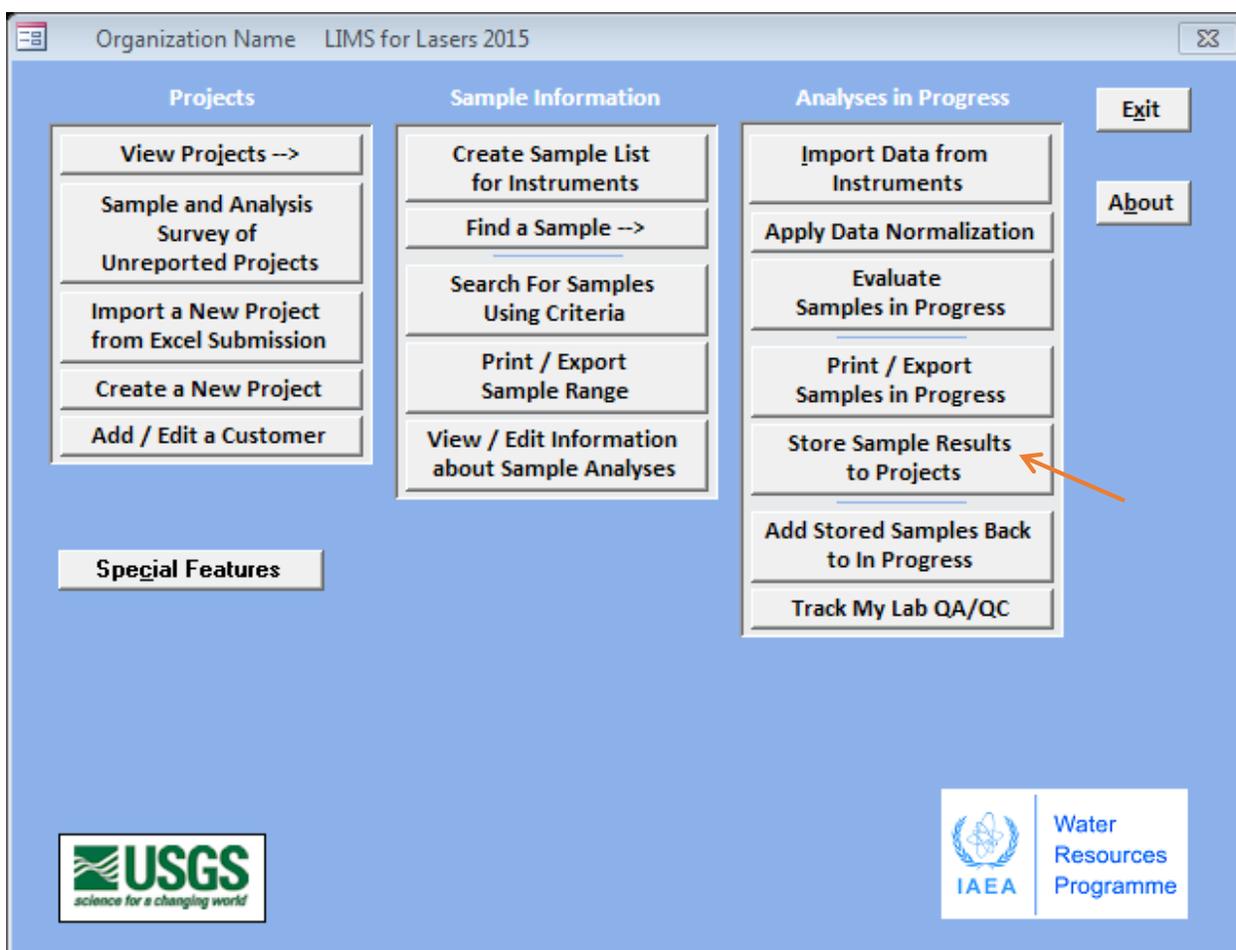
Save **Close**

В приведенном выше примере все анализы δ²H от W-1804 до W-1821 можно распечатать или “Save” (сохранить) в электронной таблице для анализа. По желанию, можно выбрать анализы только из одного прибора, или включить эталонные данные, которые сопровождали пробы, или (и) включить относительные концентрации водяного пара, зарегистрированные в анализаторе лазера. Некоторые заказчики желают получить значения соотношения изотопов эталонных вод, проанализированные с их пробами, в файле Excel. Такая опция предоставляется при установке флажка “Export with references”.

12.5 Сохранение окончательных результатов в проектах

Действие сохранения (“storing”) окончательных результатов в проекте означает, что аналитик нормализовал все пробы и стандарты, которые были измерены, и убедился, что их результаты приемлемы в рамках критериев их оценки.

Последним шагом является сохранение (“Store”) окончательных результатов проб в проекте заказчика для итоговой отчетности.



1. Нажмите кнопку “Store Sample Results to Projects”.
2. В открывающемся окне выберите вид изотопа ($\delta^{2}\text{H}$ или $\delta^{18}\text{O}$), а затем введите диапазон Our Lab ID range (W-номера) проб, которые необходимо сохранить.

Store Final Results to Projects

Storing Samples in Progress saves the delta value of a sample for the selected isotope to the Table of Samples. Select a range of samples to store by entering the Our Lab IDs, which consists of a letter prefix ('W') and the integer sample numbers, and select the isotope.

Isotope Delta

Preferences

Store Single Analysis

Store δ18O values of δ17O and δ18O companion samples

Our Lab ID

Prefix

C -> Carbonates

G -> General

J -> Julian

N -> Nitrogen

R -> Reference

S -> Sulfur

W -> Water

From: **to:**

3. В приведенном выше примере окончательные результаты $\delta^{18}\text{O}$ для проб с W-1802 по W-1821 выбраны для «Сохранения» для отчета. Чтобы сохранить одну пробу, введите ее номер W в поле «From», но оставьте поле «To» пустым.
4. Нажмите “Store”, и *LIMS for Lasers 2015* покажет сохраняемые пробы, а сообщение укажет на завершение. **Примечание:** если какая-либо проба обрабатывается на двух или более лазерных приборах, LIMS предложит сохранить результаты или со всех, или только с выбранных лазеров.

Status

Storing Samples in Progress

Storing sample W-1804

5. Повторите процесс для $\delta^2\text{H}$, используя раскрывающееся меню. Затем закройте страницу Store Samples.
6. Все пробы для изотопного анализа водорода и кислорода для выбранного диапазона теперь хранятся в Проектах для итоговой отчетности ([Раздел 13](#)).

Важно: по умолчанию, *LIMS for Lasers 2015* не сохраняет окончательные данные, если пробы не были проанализированы дважды или более. Чтобы отключить эту функцию, установите флажок “Store Single Analysis”. Отмена этой функции обычно не рекомендуется, но может использоваться в целях тестирования или в случае, если объема пробы воды недостаточно для повторного анализа.

12.6 Добавление сохраненных результатов обратно в текущие

Могут быть случаи, когда сохраненные результаты проб необходимо снова вернуть в состояние текущих (“In Progress”). Это может случиться по нескольким причинам:

- Ошибочное хранение отдельно проанализированных проб;
- Были использованы неправильные флаконы, и некоторые данные необходимо игнорировать;
- Была проведена повторная оценка поправочных коэффициентов, и сохраненные значения должны отражать эти повторные оценки.

Добавление проб обратно в текущие (“In Progress”) позволяет аналитику повторно обрабатывать данные, исправлять или игнорировать ошибки, или удалять ошибочные данные из проекта заказчика. Примечание: если проба уже была сохранена и повторно анализируется, *LIMS for Lasers 2015* автоматически загружает эту пробу обратно в текущие “In Progress”.

Чтобы вручную добавить сохраненные результаты обратно в «In Progress»:

1. На главной странице нажмите “Add Stored Samples Back to In Progress”.
2. Выберите вид изотопа ($\delta^2\text{H}$ или $\delta^{18}\text{O}$), а затем введите номера Our Lab ID в поля «From» и «To»; при необходимости повторите для второго изотопа.
3. Нажмите “Add” - пробы находятся в стадии обработки до их повторного сохранения.

Add Stored Samples Back to In Progress

Once samples have been stored, they are removed from the Table of Samples in Progress and one cannot edit them unless they are added to the Table of Samples in Progress again. To add samples to the Table of Samples In Progress, select a range of samples by entering the Our Lab IDs, which consists of a letter prefix and the integer sample numbers, and select the isotope.

Isotope Delta

Preferences
 Set any previously stored values in Table of Samples to null

Our Lab ID

Prefix

- C -> Carbonates
- G -> General
- J -> Julian
- N -> Nitrogen
- R -> Reference
- S -> Sulfur
- W -> Water

From: **to:**

Примечание: если вы по ошибке сохраните (“Store”) данные, в проекте останутся неверные данные, которые были сохранены. Если вы хотите полностью удалить неверные данные, установите флажок “Set previously stored values in the Table of Samples to null”, затем нажмите “Add”. Это удалит все сохраненные результаты для выбранных номеров «W».

12.7 Функция отслеживания контроля качества «Track My Lab QA/QC»

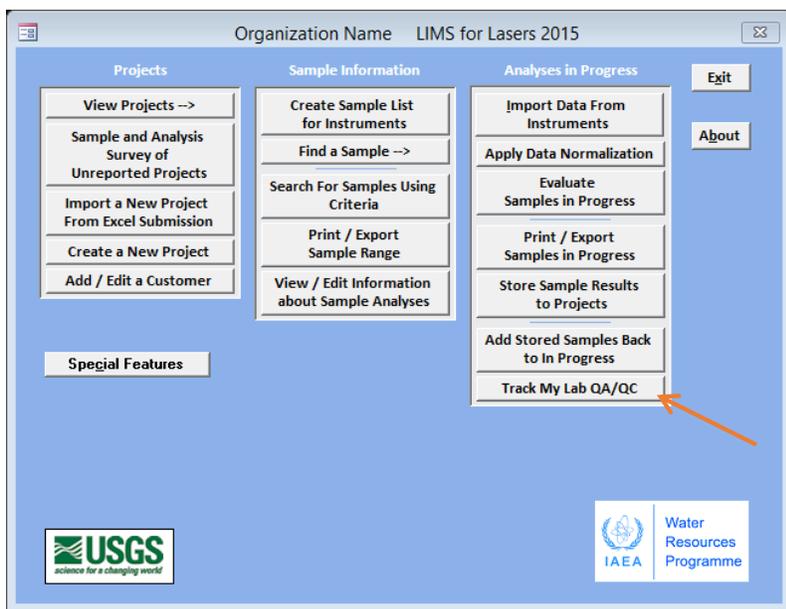
Ключевой частью оценки данных является изучение результатов стандартных образцов при каждом автозапуске и подтверждение их соответствия известным значениям или результатам этих контрольных стандартов с течением времени (обычно перед сохранением окончательных результатов). Данная оценка контроля качества (QA/QC) осуществляется посредством систематического использования и мониторинга лабораторных контрольных стандартов, как показано в установленных шаблонах анализа *LIMS for Lasers*.

После каждого запуска *LIMS for Lasers 2015* позволяет оценить контрольный стандарт. Со временем эта оценка предоставляет аналитику реалистичные показатели долгосрочной

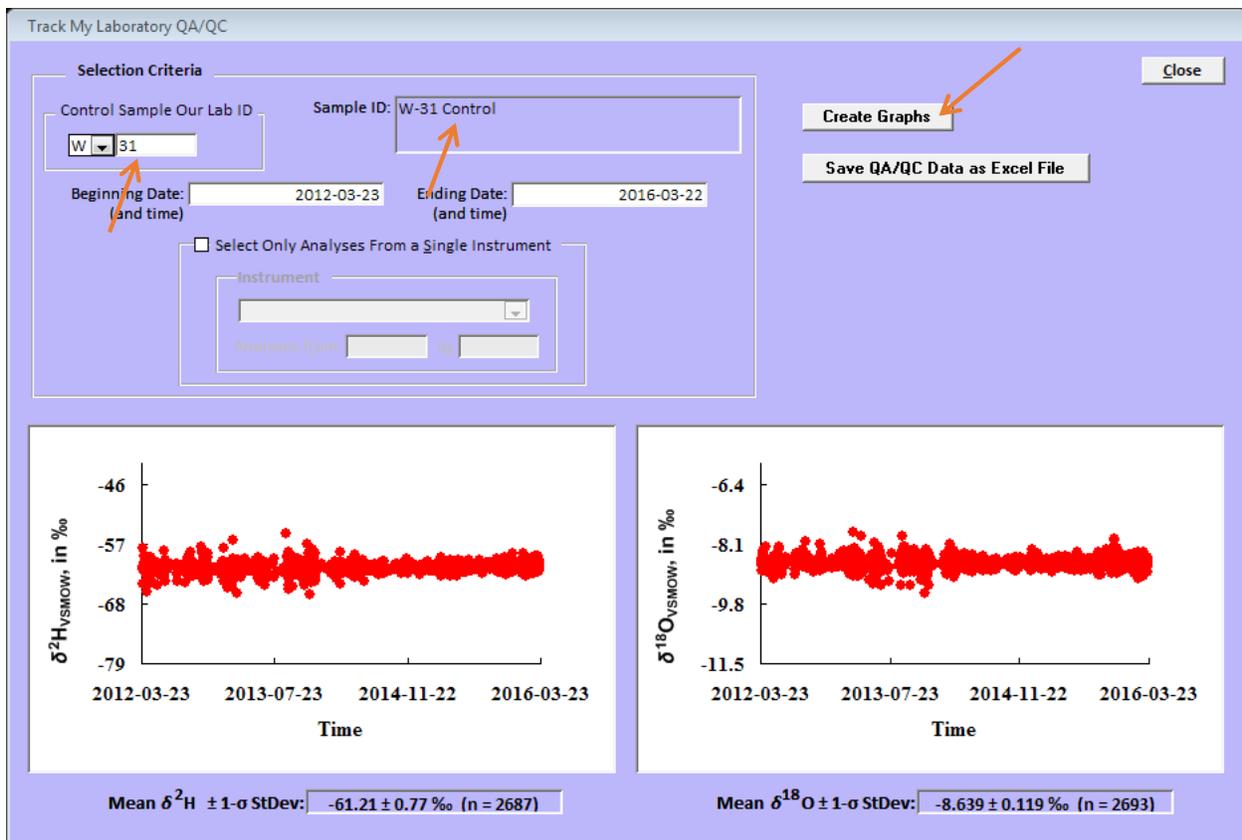
инструментальной точности и позволяет быстро обнаруживать неожиданные изменения в результатах анализа контрольного образца.

Постепенные или резкие изменения значений δ контрольного стандарта могут быть результатом неправильного хранения контрольной пробы воды или лабораторных стандартов (например, случайное испарение) или человеческой ошибки в лаборатории (например, перепутанные флаконы).

1. На главной странице LIMS нажмите “Track My Lab QA/QC”.



2. Введите номер Our Lab ID контрольного стандарта (W-31 в примере ниже).
3. Нажмите любое поле, чтобы принять все анализы или определить диапазон дат анализа.
4. При желании, выберите конкретный прибор, если контрольный стандарт измеряется на нескольких приборах (например, на нескольких лазерах).
5. Нажмите “Create Graph”. *LIMS for Lasers 2015* отобразит графическую сводку и статистику для лабораторного контрольного стандарта для выбранных критериев поиска.
6. Изучите график или экспортируйте эти данные, чтобы изолировать аномальные значения и определить причину (например, перепутанные флаконы).
7. При желании, данные о контрольном стандарте можно экспортировать в Excel для автономного анализа или использовать для ежегодной отчетности о работе лаборатории и аудитах.



LIMS for Lasers 2015 контролирует работу лаборатории с помощью контрольных стандартов.

12.8 Запрос и изменение результатов и информации по пробе

В столбце “Sample Information” на главной странице *LIMS for Lasers 2015* есть дополнительные функции запросов, которые позволяют аналитику быстро находить информацию об отдельных пробах или группах проб и анализах.

Поиск пробы

Нажмите “Find a Sample” и введите номер “W” в поле Our Lab ID; нажмите “Find”. LIMS открывает страницу, содержащую информацию конкретно об этой пробе, независимо от того, была она завершена или нет.

Find a Sample

Find a sample in LIMS by entering the Our Lab ID, which consists of a letter prefix and the integer sample number.

Find

Cancel

Our Lab ID

Prefix

- C -> Carbonates
- G -> General
- J -> Julian
- N -> Nitrogen
- R -> Reference
- S -> Sulfur
- W -> Water

Sample: 2345

Samples

List All Samples | 2435 | Araguas-Araguas, 2012-09-06 | Edit | Analyses | Print Project | Close

Our Lab ID:

$\delta^2\text{H}$

Comment:

Delta Value: ‰

$\delta^{18}\text{O}$

Comment:

Delta Value: ‰

Decimal Degrees

Lat: Long:

Accuracy:

Meters

Elevation:

Top:

Bottom:

Sample ID:

Aquifer:

River/Lake:

Conductivity:

Temperature:

pH:

Alkalinity:

Other Info:

Collection Date:

End Collection Date:

Country:

State/Province:

Результат команды поиска пробы «Find a Sample»

Поиск пробы или группы проб по критерию

Нажмите “Find a Sample using Criteria”. Здесь есть варианты поиска одной или всех проб во всех проектах, которые соответствуют определенным критериям поиска, с использованием подстановочных знаков текстовых полей или логических критериев на основе значений δ или дат.

Например, можно быстро найти все данные или пробы из определенного региона или водоносного горизонта, независимо от заказчика, при условии, что искомая информация была предоставлена вместе с проектом. Результаты поиска можно сохранить в Excel.

Find a Sample or a Group of Samples

Find a sample or samples in LIMS using search criteria.

You can use pattern matching (wildcards).

You can find all samples in a range with "Use These Criteria".
For example, you can find a sample collection date between a range of two dates.

Some Wildcards in Microsoft Access

Characters	Matches in string
?	Any single character
*	Zero or more characters
#	Any single digit (0-9)

Close

Save as Excel File

Sample Selection Criteria

Search Field (Required): 18O Search

Search For Exact Entry:

Search With Wildcards:

Values greater than or equal to:

Use These Criteria: Values less than or equal to: -2

Samples:

OurLabID	Sample ID	Search Field	Collection Date	Delta 2H	Delta 18O	Submission	Last Name
W-1862	Katunguru - Spring	-2.74	2012-02-16	-9.3	-2.74	2012-05-21	Kassa
W-1864	Kasota	-2.77	2012-02-16	-10.7	-2.77	2012-05-21	Kassa
W-1866	Nyamigota	-2.6	2012-02-16	-9.2	-2.6	2012-05-21	Kassa
W-1867	Mkungo	-3.35	2012-02-16	-14.2	-3.35	2012-05-21	Kassa
W-1868	Chato Msikitini	-2.92	2012-02-16	-14	-2.92	2012-05-21	Kassa
W-1869	Kagoma - Spring	-3.7	2012-02-17	-15.3	-3.7	2012-05-21	Kassa
W-1870	Rugaze	-3.01	2012-02-17	-11.7	-3.01	2012-05-21	Kassa
W-1871	Kagera Burifani	-2.62	2012-02-17	-11.4	-2.62	2012-05-21	Kassa
W-1873	Kagera hosp	-3.52	2012-02-17	-15.3	-3.52	2012-05-21	Kassa
W-1874	Daraja 8 - Wetland	-3.23	2012-02-18	-14.1	-3.23		
W-1875	Bwongera	-3.03	2012-02-18	-13	-3.03		
W-1876	Katemwa	-3.49	2012-02-18	-15.8	-3.49		
W-1877	Ibondo - stream	-2.32	2012-02-18	-12.5	-2.32		
W-1880	IND-KA-02	-7.14	2012-07-13	-51.3	-7.14		
W-1883	Permafrost ICE	-23.86	2011-12-31	-179.4	-23.86		
W-1929	BUG/12/2011-gwd	-2.7	2011-12-21	-8	-2.7		
W-1931	1160301 201201	-10.58	2012-01-15	-71	-10.58		
W-1932	1160301 201202	-10.08	2012-02-15	-69.4	-10.08		
W-1933	1160301 201203	-7.35	2012-03-15	-49	-7.35		
W-1934	1160301 201204	-11.99	2012-04-15	-82.8	-11.99		

LIMS 9371 records found. OK

Пример поиска для всех проб во всех проектах с содержанием ^{18}O менее или равно -2 %.

Печать диапазона проб

Чтобы распечатать информацию и данные из ряда проб, нажмите “Print Sample Range” и введите диапазон чисел «W», нажмите “Print”. Также информацию можно сохранить в файле Excel.

Print a range of samples from the Table of Samples by entering the Our Lab IDs, which consist of the letter prefix W and the integer sample numbers of the range.

Our Lab ID Range

Prefix

- C -> Carbonates
- G -> General
- J -> Julian
- N -> Nitrogen
- R -> Reference
- S -> Sulfur
- W -> Water

From: to:

Save as Excel File

Print

Close

Sample ranges Created: 2012-09-14 09:12:11

Lab ID	Name	Submission	Country	State/Province	Latitude	Longitude	Alkalinity	Elevation	Sample ID	Aquifer	River/Lake	Conductivity	Temperature	pH	Beg/End Collection Date
W-112	Smith	2012-07-18	AU -> Austria	000 -> , Unknown					Location 4-4						
W-113	Smith	2012-07-18	AU -> Austria	000 -> , Unknown					Location 4-5						

Other Info:

Пример распечатки диапазона проб на одном листе.

Просмотр / изменение информации об анализах проб

Подробную информацию и расширенные возможности прямого редактирования анализов (включая одиночные лазерные инъекции) можно найти, запросив конкретную пробу в разделе “View / Edit Information about Sample Analyses”. Всю информацию о пробе и ее результаты по изотопам можно редактировать и сохранять вручную.

В этом примере мы можем видеть 1-ю инъекцию анализа №435 для $\delta^2\text{H}$ на приборе Picarro с кодом ID «К», и это соответствует анализу пробы W-15874. Мы также видим, что это значение было проигнорировано, поскольку это была первая из семи инъекций.

Все поля, показанные выше, можно редактировать вручную, нажав кнопку “Edit”, изменив данные и сохранив обновленную информацию. Как уже отмечалось, эти параметры редактирования здесь можно использовать для редактирования и изменения отдельных анализов. Можно добавить новый анализ, новый пик (инъекцию) или новую процедуру.

Важно: Расширенные функции редактирования предназначены для облегчения исправления ошибочных анализов, когда аналитик исправлял данные в автономном режиме. Однако, лучше повторить запуск неудачных результатов, чем редактировать вручную. Проще говоря, при нормальной работе ручное редактирование результатов анализа проб не рекомендуется.

13 Отчет о результатах изотопных исследований

13.1 Отчет о результатах $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{17}\text{O}$ для заказчика

Создание отчетов о сохраненных окончательных значениях $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$ для заказчика осуществляется со страницы проектов «Projects». *LIMS for Lasers 2015* сообщает среднее значение всех повторов проб, которые были оценены, приняты и сохранены аналитиком. Есть несколько вариантов окончательной отчетности. Заказчики могут получить печатную копию или, что более типично, результаты в виде электронной таблицы Excel.

1. На главной странице LIMS нажмите “View Projects”, затем дважды нажмите завершённый проект, по которому нужно создать отчет. В этом примере двойной щелчок по завершённому проекту дает следующий экран:

The screenshot displays the 'Projects' interface in LIMS. At the top, there is a navigation bar with 'List All Projects', a search field containing '837', and a 'Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project' button. Below this are buttons for 'Show Samples', 'Export Results', 'Delta Plot', 'Invoice', and 'Print Labels'. A yellow banner across the top of the main content area reads 'Project Ready to Report' with 'Last Changed: 8/24/2015'. The 'General Information' section includes: 'Submission: 4/7/2015', 'Delta Values' (radio buttons for $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ and $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$), 'Date Results Reported:', 'Customer: Terzer, Stefan', 'Range: W-14438 to W-14519', 'Purpose: GNIP_Denmark_3271', and 'Location: 7 stations'. At the bottom, it shows 'Number of samples with missing delta values: 0 of 82 samples', 'Number of Missing $\delta^2\text{H}$ Samples: 0', and 'Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 0'. Red arrows point to the 'Project Ready to Report' banner and the 'Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples' field.

2. Поскольку все пробы были дважды измерены, оценены, приняты и сохранены аналитиком, статус проекта выделен желтым цветом как готовый к отчету - “Project

Ready to Report”. Нижняя панель окна показывает, что 0 из 23 образцов остались вне измерений $\delta^{18}\text{O}$ или $\delta^2\text{H}$.

- Прежде чем сообщать окончательные результаты, последний шаг - изучить результаты с помощью функции “Delta Plot”. Нажатие на кнопку «Delta Plot» дает график зависимости $\delta^2\text{H}$ от $\delta^{18}\text{O}$ для проб проекта. Имейте в виду, что оси данных будут масштабироваться в соответствии с данными проекта. Этот график обеспечивает быстрое средство визуализации корреляции между δ двух изотопов, возникающей из взаимосвязи «глобальной линии метеорных вод» (GMWL). Аномальные значения, выпадающие из GMWL, могут быть подозрительными, или же могут быть нормальными. Нелинейные зависимости на этом графике могут возникать в результате добавления изотопных индикаторов, искажающих корреляцию, естественного испарения, анализа проб со свалок (значения $\delta^2\text{H}$ могут отображаться значительно выше GMWL), из-за спектральных помех, которые лазерный прибор не смог учесть (что дает существенно неверное значение δ по сравнению с измеренным IRMS)^[2], или когда изотопные вариации в пробах проекта незначительны или отсутствуют (артефакты масштабирования оси).

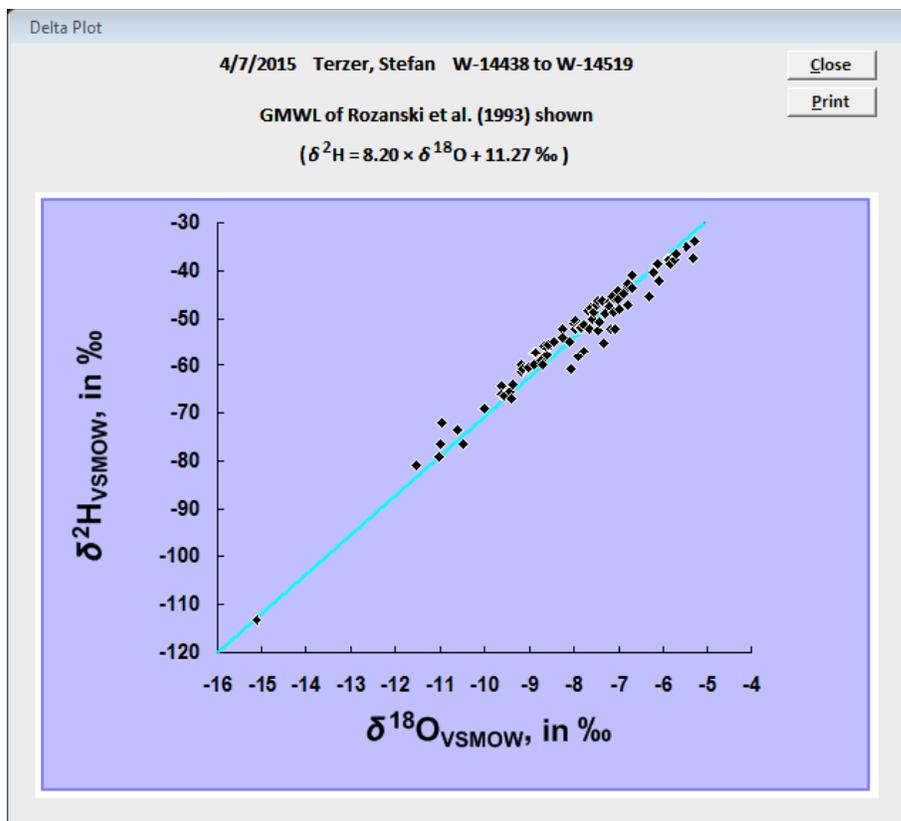
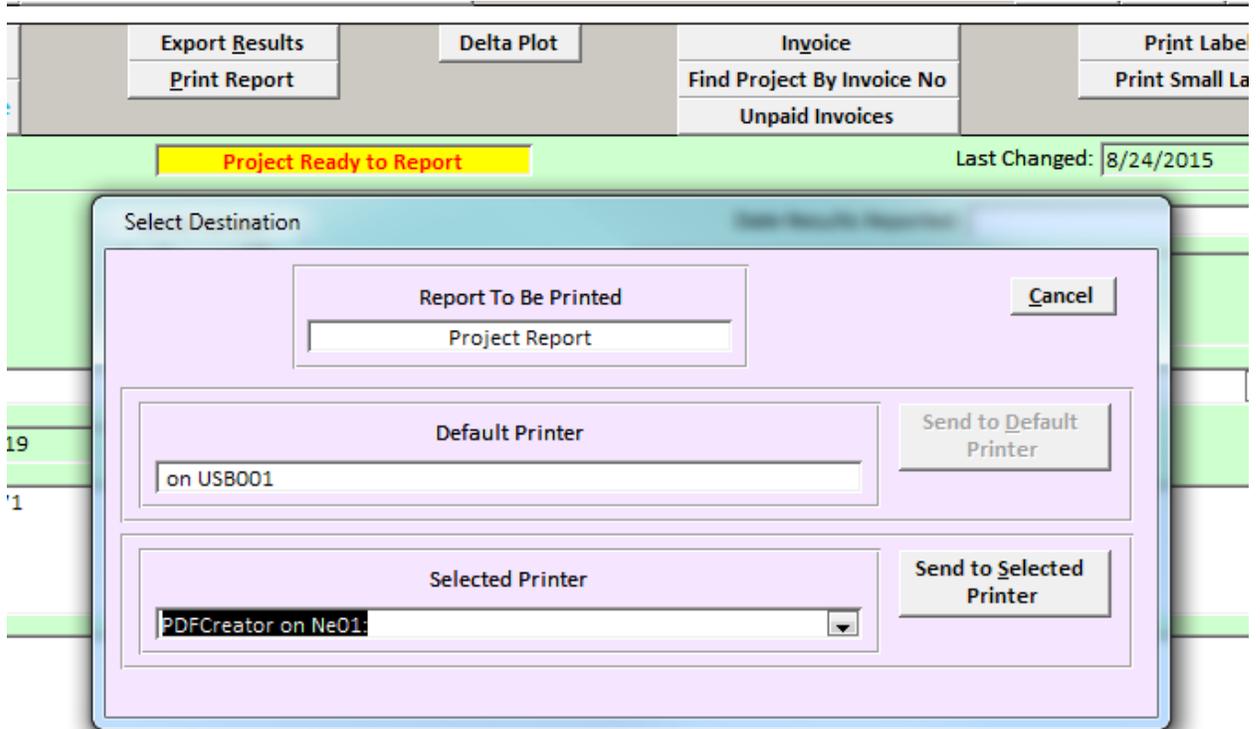


График результатов зависимости $\delta^{18}\text{O}$ от $\delta^2\text{H}$ в LIMS for Lasers 2015.

Чтобы распечатать бумажную копию отчета о проекте заказчика, нажмите “Print Report”. Отчет будет распечатан на принтере по умолчанию, на дополнительно выбранном принтере или в формате PDF, если установлена программа создания PDF.



Пример отчета для заказчика из LIMS for Lasers 2015

Submission: 2/2/2015		Terzer, Stefan		W-12720 to W-12742		3/8/2015	
Purpose: GNIP_Benin_3231		Location: Bohicon, Kandi, Natitingou					
Sample ID:	Collection Date	Our Lab ID	$\delta^2\text{H}_{\text{VSMOW}}$, in ‰		$\delta^{18}\text{O}_{\text{VSMOW}}$, in ‰		
			Value	Comment	Value	Comment	
Kandi 201404	4/15/2014	W-12720	1.6		-1.19		
Kandi 201405	5/15/2014	W-12721	-20.0		-4.36		
Kandi 201406	6/15/2014	W-12722	-3.7		-2.05		
Kandi 201407	7/15/2014	W-12723	-8.1		-2.58		
Kandi 201408	8/15/2014	W-12724	-24.9		-4.58		
Kandi 201409	9/15/2014	W-12725	-37.0		-6.43		
Kandi 201410	10/15/2014	W-12726	-23.6		-4.35		
Bohicon 201403	3/15/2014	W-12727	-2.3		-1.41		
Bohicon 201404	4/15/2014	W-12728	-8.6		-2.96		
Bohicon 201405	5/15/2014	W-12729	-44.5		-7.43		
Bohicon 201406	6/15/2014	W-12730	-32.3		-5.88		
Bohicon 201407	7/15/2014	W-12731	-23.1		-4.37		
Bohicon 201408	8/15/2014	W-12732	-20.6		-4.36		
Bohicon 201409	9/15/2014	W-12733	-31.0		-5.01		
Bohicon 201410	10/15/2014	W-12734	-34.1		-5.81		
Bohicon 201411	11/15/2014	W-12735	-13.0		-3.08		
Natitingou 201403	3/15/2014	W-12736	9.6		0.28		
Natitingou 201404	4/15/2014	W-12737	-6.2		-2.43		
Natitingou 201405	5/15/2014	W-12738	-17.9		-3.56		
Natitingou 201406	6/15/2014	W-12739	-17.0		-3.58		
Natitingou 201407	7/15/2014	W-12740	-6.8		-2.43		
Natitingou 201408	8/15/2014	W-12741	-6.7		-2.47		
Natitingou 201409	9/15/2014	W-12742	-27.5		-4.73		

- Чтобы экспортировать результаты проекта в файл Excel, нажмите "Export Results". LIMS спрашивает, где вы хотите сохранить файл Excel, и по умолчанию дает ему имя по номеру первого появляющегося Our Lab ID в проекте (например, W-12720.XLS, как выше). Этот файл можно отправить заказчику по электронной почте.
- LIMS автоматически заполнит поле "Date Reported" в проекте заказчика.

Projects

List All Projects | 837 | Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project | Edit | Delete | Close

Show Samples | Export Results | Delta Plot | Invoice | Print Labels

Add Samples to Instrument Template | Print Report | Find Project By Invoice No | Print Small Labels

Unpaid Invoices

Last Changed: 8/24/2015

General Information

Submission: 4/7/2015

Delta Values

- $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$
- $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Companion $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project:

Date Results Reported: 8/24/2015

Customer: Terzer, Stefan

Range: W-14438 to W-14519

Purpose: GNIP_Denmark_3271

Location: 7 stations

Project Comments:

Number of samples with missing delta values: 0 of 82 samples

Number of Missing $\delta^2\text{H}$ Samples: 0

Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 0

13.2 Объединение результатов из нескольких проектов

Иногда у заказчика может быть несколько проектов или он может запрашивать результаты в одном файле Excel, а не в нескольких таблицах или печатных отчетах.

По мере того, как *LIMS for Lasers 2015* накапливает проекты заказчиков, используйте функцию поиска, описанную в [Разделе 6.2](#), для поиска проекта или проектов заказчика. После отображения результатов поиска нажмите любую из следующих опций:

Print Reports of All # Selected Projects – распечатывает бумажные копии всех проектов, отображаемых в окне результатов поиска.

Create Excel Files of Data of Selected Projects (# Files) – создает отдельные файлы Excel для всех проектов, появившихся в окне поиска.

Combine Data of Selected Projects and Save as a Single Excel File – объединяет последовательные данные проектов из окна результатов поиска в один файл Excel, имя файла Excel по умолчанию - наименьшее число W (например, W-1001.xls).

Submission	LastName	Range	Purpose	Location	Reported
1995-01-01	Test	W-1 to W-2	Water test samples		
1995-01-01	Reference	W-3	Empty capsule for TC/EA		
1995-01-01	Reference	W-4	CF Ref Inj sample		
2006-06-06	Reference	W-5 to W-30	International references		
2006-06-06	Reference	W-31 to W-69	Lab references		
2012-07-18	Smith	W-94 to W-113	John's Test Waters for LAS	El Paso, Texas	

Примечание: Чтобы удалить проект из результатов поиска, выделите его и нажмите клавишу удаления. Удаляется только результат поиска, а не сам Проект.

13.3 Создание счета-фактуры по проекту

Некоторым лабораториям может потребоваться *LIMS for Lasers 2015* для формирования счета-фактуры для заказчика. Предполагая, что пользователь установил флажок “Display Invoices” в форме «Options» (см. [Раздел 4.6](#)), можно выполнить следующие шаги.

1. На панели “View Project” откройте проект, по которому нужно выставить счет.
2. На странице проекта нажмите кнопку “Invoice”.
3. Нажмите “Edit”. В результате этого действия автоматически заполняется ранее предоставленная информация о заказчике в *LIMS for Lasers 2015*.
4. Заполните поля «Sold By» и «Sold To». Введите стоимость пробы.
5. Распечатайте счет-фактуру.

Invoice Information	
Sold By	Invoice Number: 72
Addr1: Institution Name	Invoice Date: 2015-03-05
Addr2: Address1	Account Number or Purchase Order: 123454
Addr3: Address2	Billing Code:
Addr4: Address3	Type of Samples: δ2H and δ18O
Addr5:	Number of Samples in Project: 10
Addr6:	Number of Samples Billed: 10
	Price per Sample: €20.00
	Surcharge Amount:
	Surcharge Comment:
	Total: €200.00

Sold To	
Populate Sold To fields with this entry	
Addr1: University of Texas	
Addr2:	
Addr3:	
Addr4: Austin	
Addr5: United States of America	
Addr6:	

Поиск счетов по номеру и просроченной оплате находится на главной странице проекта:

Invoice	Export Results
Find Project By Invoice No	
Unpaid Invoices	
Last Changed: 2015-03-05	

Примечание: Формат валюты в этой форме устанавливается из Панели управления Windows -> Региональные настройки на вашем ПК.

13.4 Экспорт в файл ASCII с текстом отчета

На странице «Project» при нажатии на “Export Results” отображается возможность экспорта в текст ASCII. Хотя немногие заказчики предпочитают ASCII файлу Excel, он предоставляет дополнительную возможность – включение часто запрашиваемого дополнительного текстового анализа и лабораторной информации.

Эта дополнительная информация может относиться к используемым методам или статистическим данным лаборатории.

1. На главной странице LIMS нажмите “Special Features”
2. Откройте “Reporting Text”.
3. Нажмите “Add”.
4. Введите описание – эта информация появится в виде заголовка в данных проекта, экспортированных в формате ASCII.

The reporting text that precedes analytical results for various types of samples can be edited here. This text appears in an ascii text file by clicking the Results button on the Projects form.

General Information

Code: Medium 1, water Last Edit: 9/19/2012 11:31:27 AM

Description: Reporting of Stable Hydrogen and Oxygen Isotope Ratios
Oxygen and hydrogen isotopic results are reported in per mil relative to VSMOW (Vienna Standard Mean Ocean Water) and normalized (Coplen, 1994) on scales such that the oxygen and hydrogen isotopic values of SLAP (Standard Light Antarctic Precipitation) are -55.5 per mil and -428 per mil, respectively. Oxygen isotopic results of a sample Z can be expressed relative to VPDB (Vienna Peedee belemnite) using the equation:

Delta O-18 of Z relative to VPDB =
(0.97001 times delta O-18 of Z relative to VSMOW) - 29.99

The 2-sigma uncertainties of oxygen and hydrogen isotopic results are 0.2 per mil and 2 per mil, respectively, unless otherwise indicated. This means that if the same sample were resubmitted for isotopic analysis, the newly measured value would lie within the uncertainty bounds 95 percent of the time.

References
Coplen, T. B., 1994. Reporting of Stable Hydrogen, Carbon, and

Пример текста отчета для экспорта данных ASCII.

14 Источники и калибровка местных лабораторных стандартов

14.1 Источники первичных эталонов изотопов ВОДЫ

VSMOW2 и SLAP2 – доступные в настоящее время первичные эталоны для анализа водных изотопов. Они доступны в МАГАТЭ по следующей веб-ссылке:

http://nucleus.iaea.org/rpst/ReferenceProducts/ReferenceMaterials/Stable_Isotopes/2H18O-water-samples/index.htm

Information Sheet on the new International Measurement Standards VSMOW2 and SLAP2

VSMOW2 Vienna Standard Mean Ocean Water 2
SLAP2 Standard Light Antarctic Precipitation 2

The two reference materials VSMOW2 and SLAP2 were produced to replace the exhausted reference materials VSMOW and SLAP. Their isotopic compositions for both $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ were adjusted to be as close as possible to the predecessor materials. The reference values were assessed from data measured by three laboratories in a calibration exercise measuring the $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ data of VSMOW2 and SLAP2 in direct reference to those of VSMOW and SLAP (Table 1). The stated combined standard uncertainties are evaluated from the measurement uncertainties in the laboratories for the involved materials and the assessment of isotopic homogeneity of the prepared ampoules of VSMOW2 and SLAP2.

Table 1: $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ reference values for the two international measurement standards VSMOW2 and SLAP2 and their associated combined standard uncertainties.

IAEA name	Material	Reference value $10^3 \delta^2\text{H}_{\text{VSMOW/SLAP}}$	Combined standard uncertainty $10^3 \delta^2\text{H}_{\text{VSMOW/SLAP}}$	Reference value $10^3 \delta^{18}\text{O}_{\text{VSMOW/SLAP}}$	Combined standard uncertainty $10^3 \delta^{18}\text{O}_{\text{VSMOW/SLAP}}$
VSMOW2	Water	0.0	0.3	0.00	0.02
SLAP2	Water	-427.5	0.3	-55.50	0.02

In order to calibrate and normalize any measurement to the VSMOW–SLAP scale (especially for the calibration of internal laboratory water standards), one uses the formula below (Gonfiantini, 1978). In that formula the measured values for the new international measurement standards VSMOW2 and SLAP2 have to be entered instead of those of VSMOW and SLAP, as well as the corresponding new calibrated δ_{SLAP2} value for SLAP2 from Table 1:

$$\delta = ((R_{\text{sample}} / R_{\text{VSMOW2}}) - 1) \cdot \delta_{\text{SLAP2}} / ((R_{\text{SLAP2}} - R_{\text{VSMOW2}}) / R_{\text{VSMOW2}})$$

By using this procedure all data are still reported on the VSMOW/SLAP scale, despite the use of VSMOW2 and SLAP2 for their calibration. Of course the standard uncertainties of VSMOW2 and SLAP2 isotopic values should be included as uncertainty component in any combined uncertainty statement of measurements performed.

It is recommended to clearly state in any publication, that the calibration was performed using VSMOW2 and SLAP2.

IAEA Isotope Hydrology Laboratory, 20 June 2007

InfoSheet-VSMOW2-SLAP2.doc

14.2 Источники стандартных образцов для повседневного использования

Геологическая служба США (U.S. Geological Survey)

Пользователи могут приобрести контейнеры с 144 стеклянными ампулами, каждая из которых содержит 5 мл калиброванных вторичных эталонов для повседневного использования. Рекомендуется ежедневно открывать ампулы с двумя существенно разными значениями δ и использовать их для нормализации данных, а третье промежуточное значение δ воды может использоваться в качестве контрольного стандарта. Неиспользованную воду из ампулы следует выбросить. Использование этих рабочих эталонных вод помогает лаборатории достичь высоких уровней контроля качества QA/QC.

- Контейнеры с 144 стеклянными ампулами, каждая из которых содержит 5 мл калиброванной воды с различными изотопными составами.
- VSMOW – это первичный эталон для измерения изотопов воды. VSMOW (25 мл в пяти автоклавированных стеклянных ампулах по 5 мл):
[Http://isotopes.usgs.gov/lab/referencematerials/VSMOW.pdf](http://isotopes.usgs.gov/lab/referencematerials/VSMOW.pdf)
- Все они доступны в USGS по следующей веб-ссылке:
<http://isotopes.usgs.gov/lab/referencematerials.html>

USGS45	Case of 144 ampoules having 4 mL of Biscayne Aquifer Drinking Water per ampoule	576 mL	\$835	$\delta^2\text{H} = -10.3 \text{ ‰}$ $\delta^{18}\text{O} = -2.238 \text{ ‰}$	USGS45
USGS45	Case of 144 ampoules having 5 mL of Biscayne Aquifer Drinking Water per ampoule	720 mL	\$874	$\delta^2\text{H} = -10.3 \text{ ‰}$ $\delta^{18}\text{O} = -2.238 \text{ ‰}$	USGS45
USGS46	Case of 144 ampoules having 4 mL of Ice Core Water per ampoule	576 mL	\$835	$\delta^2\text{H} = -235.8 \text{ ‰}$ $\delta^{18}\text{O} = -29.80 \text{ ‰}$	USGS46
USGS46	Case of 144 ampoules having 5 mL of Ice Core Water per ampoule	720 mL	\$874	$\delta^2\text{H} = -235.8 \text{ ‰}$ $\delta^{18}\text{O} = -29.80 \text{ ‰}$	USGS46
USGS47	Case of 144 ampoules having 5 mL of Lake Louise Drinking Water per ampoule	720 mL	\$874	$\delta^2\text{H} = -150.2 \text{ ‰}$ $\delta^{18}\text{O} = -19.80 \text{ ‰}$	USGS47
USGS48	Case of 144 ampoules having 5 mL of Puerto Rico Precipitation per ampoule	720 mL	\$874	$\delta^2\text{H} = -2.0 \text{ ‰}$ $\delta^{18}\text{O} = -2.224 \text{ ‰}$	USGS48

Международное агентство по атомной энергии (МАГАТЭ) – Секция водных ресурсов

МАГАТЭ (IAEA) предоставляет государствам-членам стандарты для повседневного использования в рамках своих программ технического сотрудничества (ТС). Пожалуйста, обратитесь на веб-сайт МАГАТЭ или к сотруднику ТС.

14.3 Шаблоны анализа для калибровки местных стандартных образцов

LIMS for Lasers 2015 поставляется с 20 шаблонами анализа проб для калибровки лабораторных эталонов $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$ для повседневного использования (или собственных). В этих шаблонах анализа используются первичные эталонные стандарты VSMOW и SLAP (или VSMOW2 и SLAP2), измеренные вместе с достаточным количеством копий предлагаемых местных лабораторных стандартов. Новые шаблоны, использующие первичные эталоны, также можно создавать с помощью мастеров шаблонов анализа *LIMS for Lasers 2015* ([Разделы 8.4](#) и [8.5](#)).

Каждый лабораторный стандартный образец $\delta^{18}\text{O}$ и $\delta^2\text{H}$, предлагаемый для ежедневного использования, должен быть измерен 10 или более раз относительно эталонных изотопных стандартов, чтобы получить достаточно данных для определения ошибки измерения. Рекомендуется, чтобы другие лаборатории измеряли предлагаемые вами лабораторные стандарты для внешней проверки до присвоения им назначенных значений δ в таблице эталонов *LIMS for Lasers 2015*.

Таблица 3. Шаблон для калибровки лабораторных эталонов с использованием прибора Los Gatos Research

В данном шаблоне 20 лабораторных эталонов расположены последовательно в лотке 1. Как показано, по 10 каждого из двух предложенных лабораторных эталонов расположены последовательно. Первичные эталонные стандарты VSMOW и SLAP (или VSMOW2 и SLAP2) и образцы промывки располагаются в лотке 3 (задний лоток), каждый в отдельном ряду. Рекомендуемая процедура - 9 инъекций на образец без учета первых 4 инъекций. List # - это порядок, в котором анализируются образцы.

Образец	Позиция флакона	List #	Функция LIMS for Lasers 2015
Деионизированная вода	3-19	1	Кондиционирование прибора
Деионизированная вода	3-19	2	Кондиционирование прибора
VSMOW / VSMOW2	3-10	3	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	3-1	4	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	3-2	5	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-1	6	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-2	7	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-3	8	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-4	9	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-5	10	Образец
SLAP / SLAP2	3-1	11	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	3-11	12	Эффект «памяти» между пробами

VSMOW / VSMOW2	3-10	13	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-6	14	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-7	15	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-8	16	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-9	17	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-10	18	Образец
VSMOW / VSMOW2	3-11	19	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	3-2	20	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	3-1	21	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-11	22	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-12	23	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-13	24	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-14	25	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-15	26	Образец
SLAP / SLAP2	3-2	27	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	3-10	28	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	3-11	29	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-16	30	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-17	31	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-18	32	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-19	33	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-20	34	Образец
VSMOW / VSMOW2	3-10	35	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	3-1	36	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	3-2	37	Нормализация VSMOW-SLAP
Деионизированная вода	3-19	38	Завершающая промывка

Таблица 4. Шаблон для калибровки лабораторных стандартов на приборе Picarro.

В этом шаблоне 20 лабораторных стандартов расположены последовательно с VSMOW-SLAP (или VSMOW2-SLAP2) в автоматическом пробоотборнике. Десять каждого из двух предложенных лабораторных стандартов расположены между контрольными группами. Рекомендуемая процедура анализа - 9 инъекций на образец без учета первых 4 инъекций. List # - это порядок, в котором образцы анализируются.

Образец	Позиция флакона	List #	Функция LIMS for Lasers 2015
VSMOW / VSMOW2	1-01	1	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	1-02	2	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	1-03	3	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-04	4	Образец

Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-05	5	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-06	6	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-07	7	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-08	8	Образец
SLAP / SLAP2	1-09	9	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	1-10	10	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	1-11	11	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-12	12	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-13	13	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-14	14	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-15	15	Образец
Лаб. стандарт с высок. знач. δ	1-16	16	Образец
VSMOW / VSMOW2	1-17	17	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	1-18	18	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	1-19	19	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-20	20	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-21	21	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-22	22	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-23	23	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-24	24	Образец
SLAP / SLAP2	1-25	25	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	1-26	26	Эффект «памяти» между пробами
VSMOW / VSMOW2	1-27	27	Нормализация VSMOW-SLAP
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-28	28	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-29	29	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-30	30	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-31	31	Образец
Лаб. стандарт с низк. знач. δ	1-32	32	Образец
VSMOW / VSMOW2	1-33	33	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	1-34	34	Эффект «памяти» между пробами
SLAP / SLAP2	1-35	35	Нормализация VSMOW-SLAP

14.4 Процедура создания шаблона калибровки

Напомним из [Раздела 7.1](#), что *LIMS for Lasers 2015* предоставляется вместе с проектом под названием «Lab references», содержащим позиции для новых местных лабораторных стандартов измерения, которые варьируются от Our Lab ID W-31 до W-69.

В этом примере двум новым местным лабораторным стандартам, которые должны быть откалиброваны по VSMOW2-SLAP2, были присвоены значения Our Lab W-40 и W-41 (см. [Раздел 7.2](#) для редактирования и переименования существующих позиций для лабораторных стандартов).

Для прибора Los Gatos Research:

1. На главной странице LIMS нажмите “View Projects”
2. Откройте Проект с названием “Lab References”
3. Нажмите на “Template List – Add or Remove Samples”

The screenshot shows a window titled "Add Samples To Be Analyzed" with a subtitle "2006-06-06 Reference". The main text says: "Samples can be added to the Table of Samples to be Analyzed. Select the Template and select 'Add At' the Front of the queue or the End of the queue." There are three buttons: "Add", "Delete", and "Close".

General Information

Template: Lab Std Cal VSMOW2-SLAP2 -- Calibrate Lab Stds Using VSMOW2/SLAP2

From: 40

To: 41

Number of non-consecutive sample repeats: 1
For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have W-7, W-8, and W-9 on one template AND W-7, W-8, and W-9 on the next template

Number of consecutive sample repeats: 10
For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have samples W-7, W-7, W-8, W-8, W-9, and W-9 all on one template

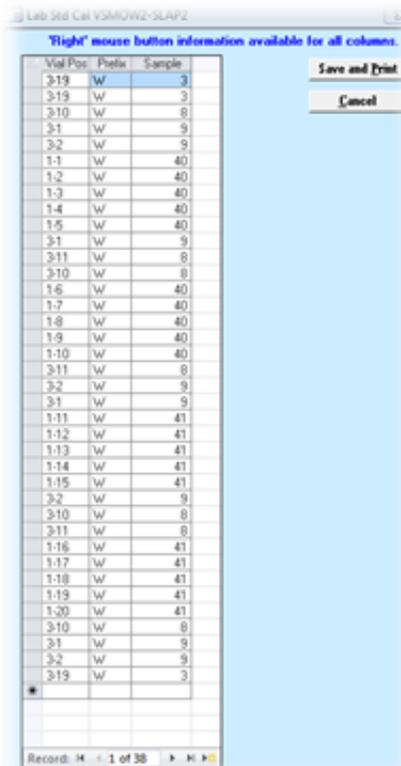
Add At

Front of the queue

End of the queue (default position)

4. Мы откалибруем местные лабораторные стандарты W-40 и W-41, используя первичные эталонные воды VSMOW2 и SLAP2. В раскрывающемся меню шаблона

- (см. Выше) выберите «VSMOW2/SLAP2 Analysis Template» (или VSMOW-SLAP, если используются эти первичные справочные материалы).
5. В полях «From» и «To» введите 40 и 41 соответственно.
 6. Установите количество непоследовательных повторов на 1 (каждый будет проанализирован один раз).
 7. Установите количество последовательных повторов равным 10 (каждый образец будет анализироваться 10 раз подряд, как показано в таблице 3).
 8. Нажмите “Add”, затем “Close”.
 9. На главной странице *LIMS for Lasers 2015* нажмите “Create Sample List for Instruments”.
 10. Из выпадающего меню выберите «VSMOW2/SLAP2 Analysis Template».
 11. В открывшемся окне (ниже), мы видим, что W-40 и W-41 теперь поставлены в очередь на анализ по 10 раз каждый по очереди.
 12. Нажмите “Create the Sample List” и сохраните его в приборе Los Gatos Research (см. [Раздел 10](#)).
 13. Измерьте предложенные лабораторные стандарты как неизвестные с помощью прибора Los Gatos Research ([Раздел 10](#)). Их значения δ должны быть установлены на -999 ‰ , если они есть в «Table of References» ([Раздел 7.3](#)). Нормализуйте, оцените и сохраните результаты, как подробно описано в [Разделе 12](#).
 14. После завершения и после того, как вы убедитесь, что ваши местные эталоны в достаточной мере охарактеризованы, вы можете указать их значения δ в таблице эталонов «Table of References» ([Раздел 7.3](#)).
 15. Создайте новые шаблоны анализа для образцов на основе ваших новых местных лабораторных эталонов ([Раздел 8](#)).



Предлагаемые лабораторные эталоны должны быть проанализированы относительно VSMOW2 (W-8) и SLAP2 (W-9) с использованием прибора Los Gatos Research. Последовательность измерений справа соответствует шаблону анализа в таблице 3. W-3 - образец промывки или кондиционирования.

Для приборов Picarro:

1. На главной странице LIMS нажмите “View Projects”
2. Откройте Проект с названием “Lab References”
3. Нажмите на “Template List – Add or Remove Samples”

Add Samples To Be Analyzed 2006-06-06 Reference

Samples can be added to the Table of Samples to be Analyzed.
Select the Template and select 'Add At' the Front of the queue or the End of the queue.

General Information

Template: Lab Std Cal VSMOW2-SLAP2 -- Calibrate Lab Stds Using VSMOW2/SLAP2

From: 40

To: 41

Number of non-consecutive sample repeats: 1
For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have W-7, W-8, and W-9 on one template AND W-7, W-8, and W-9 on the next template

Number of consecutive sample repeats: 10
For example, for an entry of 2, for 3 samples named W-7, W-8, and W-9, one would have samples W-7, W-7, W-8, W-8, W-9, and W-9 all on one template

Add At

Front of the queue

End of the queue (default position)

4. Мы откалибруем местные лабораторные стандарты W-40 и W-41, используя первичные эталонные воды VSMOW2 и SLAP2. В раскрывающемся меню шаблона выберите «Lab Std Cal VSMOW2-SLAP2 analysis template».
5. В полях «From» и «To» введите 40 и 41 соответственно.
6. Установите количество непоследовательных повторов на 1 (каждый будет проанализирован один раз).
7. Установите количество последовательных повторов равным 10 (каждый образец будет анализироваться 10 раз подряд, как показано в таблице 4).
8. Нажмите “Add”, затем “Close”.
9. На главной странице *LIMS for Lasers 2015* нажмите “Create Sample List for Instruments”.
10. Из выпадающего меню выберите «VSMOW2/SLAP2 Analysis Template».
11. В открывшемся окне, мы видим что W-40 и W-41 теперь поставлены в очередь на анализ по 10 раз каждый по очереди.
12. Нажмите “Create the Sample List” и сохраните его в приборе Picarro (см. [Раздел 9](#))

13. Проанализируйте предложенные лабораторные стандарты как неизвестные с помощью прибора Picarro ([Раздел 9](#)). Их значения δ должны быть установлены на -999 ‰, если они есть в таблице эталонов «Table of References» ([Раздел 7.3](#)). Нормализуйте, оцените и сохраните результаты, как подробно описано в [Разделе 12](#).
14. После завершения и после того, как вы убедитесь, что ваши местные эталоны в достаточной мере охарактеризованы, вы можете указать их значения δ в «Table of References» ([Раздел 7.3](#)).
15. Создайте новые шаблоны анализа для образцов на основе ваших новых местных лабораторных эталонов ([Раздел 8](#)).

The left screenshot shows the 'Create a Sample List' dialog. The description is 'Calibrate Lab Standards Using VSMOW2/SLAP2' and the instrument is 'Picarro'. It features a table with columns 'Prefix', 'Sample', and 'Repeats'. The data in the table is as follows:

Prefix	Sample	Repeats
W	40	1
W	41	1
*		

The right screenshot shows the 'Lab Std Cal VSMOW2/SLAP2' window. It displays a table with columns 'Vial Pos', 'Prefix', and 'Sample'. The data in the table is as follows:

Vial Pos	Prefix	Sample
1-1	W	8
1-2	W	9
1-3	W	9
1-4	W	40
1-5	W	40
1-6	W	40
1-7	W	40
1-8	W	40
1-9	W	9
1-10	W	8
1-11	W	8
1-12	W	40
1-13	W	40
1-14	W	40
1-15	W	40
1-16	W	40
1-17	W	8
1-18	W	9
1-19	W	9
1-20	W	41
1-21	W	41
1-22	W	41
1-23	W	41
1-24	W	41
1-25	W	9
1-26	W	8
1-27	W	8
1-28	W	41
1-29	W	41
1-30	W	41
1-31	W	41
1-32	W	41
1-33	W	8
1-34	W	9
1-35	W	9
*		

Предлагаемые лабораторные эталоны для анализа на соответствие VSMOW2 (W-8) и SLAP2 (W-9) на Picarro. Последовательность измерений справа соответствует шаблону анализа в таблице 4.

15 Спектральное загрязнение, часто задаваемые вопросы, файлы журналов

15.1 Накопление солей и спектральное загрязнение

Пробы жидкой воды из естественной среды (например, поверхностные воды, подземные воды, озера) обычно содержат растворенные вещества в ионной форме (например, растворенные неорганические вещества, Ca, Mg, Cl, HCO₃ и т. д.), или могут содержать растворенные органические вещества (РОВ), летучие органические соединения (ЛОС), например углеводороды. Концентрации таких растворенных компонентов широко варьируют по своей природе: от почти чистой воды в ледниках или атмосферных осадках (уровни мкг/л) до очень соленых водоемов (уровни г/л) или загрязненных нефтью грунтовых вод, содержащих сложную смесь полу-летучих и летучих органических соединений. Другие пробы воды для испытаний могут быть взяты из экстрактов воды из растений (высокое содержание РОВ/ЛОС) или воды из пор почвы (высокое содержание РОВ или растворенных неорганических веществ) и могут содержать неизвестные ЛОС.

Есть две основные области введения проб воды, в которых растворенные компоненты проб воды могут вызвать проблемы для лазерной спектроскопии:

- *Скопление неорганической и органической соли в блоке инжектора.* Помимо обычного заклинивания шприца, накопление соли – известная проблема, которая обсуждается во всех руководствах пользователя. Решение – периодическая промывка и очистка внутренней поверхности модуля инжектора нагретой воды, или по мере необходимости. Накопление солей может вызвать закупорку линии передачи H₂O (проявляющееся в пониженной или переменной концентрации водяного пара H₂O в анализаторе), или, поскольку некоторые дегидратированные соли обладают сильным сродством к воде, изотопное фракционирование может происходить за счет динамической сорбции вводимой пробы воды с увеличением накопления соли в менее нагретых частях инжектора или линии передачи пробы.
- *Спектральное загрязнение за счет попадания летучих органических соединений в анализатор лазера.* Нарушение изотопных молекулярных спектров пробы H₂O может происходить из-за попадания мешающих газовых молекул в пробы, которые поглощают или искажают спектры изотопологов H₂O. Некоторые летучие органические вещества (ЛОС), вызывающие спектральные проблемы – это спирты и углеводороды, такие как метан или этан [12,139]. Специалисты наблюдали спектральное загрязнение смешанными ЛОС из водных экстрактов растений и листьев или фильтратом со свалок [14,15]. Важно отметить, что невозможно *заранее* предсказать величину негативного воздействия, которое летучие или растворенные органические соединения могут оказать на лазерный изотопный анализ H₂O без явных исследований и знания свойств молекулярного поглощения загрязнителя. [2]

В настоящее время Los Gatos Research и Picarro предоставляют пользователям автономное программное обеспечение для оценки и в некоторых случаях возможность исправить спектральное загрязнение путем разработки спектральных библиотек в их программном обеспечении *Spectral Contamination Identifier Software™* или *ChemCorrect™* соответственно (см. сайт соответствующего производителя для более детальной информации). Результаты скрининга этого программного обеспечения в основном представлены в виде отметки или таблицы контроля качества QA/QC, чтобы оценить и проинформировать пользователей, в порядке ли пробы, и, возможно, определить, какие могут быть загрязнители-примеси. Ни одна из этих программ спектральной оценки в настоящее время не встроена в операционное программное обеспечение лазерного прибора, используемое для создания выходных файлов *LIMS for Lasers 2015*, поэтому от лазерного аналитика требуются дополнительные усилия по автономному скринингу.

Проще говоря, пользователи лазерных приборов должны внимательно следить за неорганическими и органическими характеристиками неизвестных проб воды, которые они анализируют, чтобы получить правильные результаты. Как правило, воды с низким общим содержанием растворенных органических и неорганических веществ не представляют особой опасности для лазерных анализов. Однако, когда анализируются сомнительные пробы (с высоким содержанием растворенных веществ, соленые), целесообразно чаще проверять и очищать инжектор или предварительно проверять результаты запуска с помощью автономного спектрального программного обеспечения перед импортом выходных файлов анализа данных в *LIMS for Lasers 2015*. Пробы, идентифицированные программным обеспечением для спектрального скрининга как «скомпрометированные», могут быть безопасно проигнорированы после их первого импорта в *LIMS for Lasers 2015*. Другой вариант действий заключается в измерении или повторном анализе подозрительных проб с помощью традиционных методов IRMS, если они доступны. В ситуациях, когда результаты должны быть особенно точными, например, в криминалистике, пробы воды следует проверять с помощью масс-спектрометрии (IRMS). [\[2\]](#)

15.2 Часто задаваемые вопросы (FAQ)

В. Почему *LIMS for Lasers 2015* медленно реагирует на наши подключенные к сети ПК?

О. Когда база данных *LIMS for Lasers 2015* находится на сетевом диске, низкая пропускная способность сети может вызвать задержку производительности. Одно из решений – разместить базу данных на быстром сетевом диске, желательно на гигабитной скорости или на более высокопроизводительном компьютере.

Другая причина – это одновременная работа в *LIMS for Lasers 2015* нескольких пользователей. Реляционные базы данных, такие как MS Access блокируют поля, открываемые другим пользователем в это же время, и не доступны, пока пользователь не завершит редактирование. Еще один вариант замедления часто происходит, когда другой пользователь случайно оставил открытым экран поиска или редактирования (например, заблокированные таблицы). Чтобы избежать этого, обязательно закрывайте *LIMS for Lasers 2015* по окончании использования.

В. Почему вы рекомендуете измерять каждую пробу дважды? Это кажется ненужным.

О. Наш подход по умолчанию, когда каждая проба запускается дважды, позволяет оценить воспроизводимость каждой пробы, а не только контрольного стандарта и стандартов измерения. В качестве альтернативы пользователи могут выбрать повторять ни одной, 1 из 10 или 1 из 5 проб, или добавить дополнительные контрольные стандарты. Данное решение принято для оценки производительности и анализа, и его легко изменить, как описано в [Разделе 8](#).

В. Почему рекомендуется 9 инъекций? В нашем руководстве по лазерному прибору рекомендуется делать 6 инъекций, игнорировать 3.

О. Как отмечалось в [Разделе 8](#), 8–9 инъекций на пробу – это рекомендация для обеспечения наилучших результатов от всех поколений лазерных приборов. Новейшие лазерные приборы действительно могут требовать меньше инъекций и/или игнорируемых результатов. Существенно ли различаются результаты, можно проверить, сравнив рекомендации *LIMS for Lasers 2015* по умолчанию с рекомендациями того же запуска, но с меньшим количеством инъекций и меньшим количеством игнорируемых инъекций. При меньшем количестве инъекций точность может снизиться, а процент эффекта «памяти» может стать выше. В конечном итоге каждая лаборатория должна установить свои приемлемые критерии выполнения анализа.

В. Я решил сократить потребление лабораторных стандартов, используя только 1 флакон вместо рекомендуемых трех флаконов на стандарт в обычном шаблоне прибора LGR. Теперь *LIMS for Lasers 2015* не вычисляет эффект «памяти» между пробами. Что случилось?

О. Это нормально. В приборах LGR и Picarro предполагается, что «последовательные пробы» с одинаковым положением флакона имеют один и тот же номер анализа. Поэтому вы должны чередовать позиции флаконов для двух или более последовательно идентичных лабораторных стандартов, чтобы они обрабатывались как разные пробы. В противном случае эффект «памяти» между пробами нельзя определить в *LIMS for Lasers 2015*.

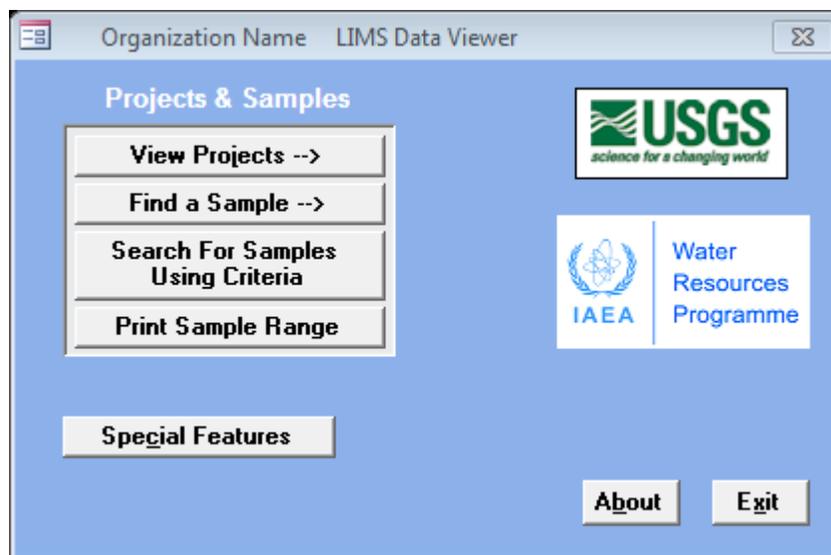
Q. Я «застрял». К кому я могу обратиться за помощью по *LIMS for Lasers 2015*?

А. Если вы тщательно выполнили процедуры, описанные в этом руководстве, и по-прежнему испытываете затруднения, свяжитесь с авторами (ТВС или LIW) по электронной почте (tbcoplen@usgs.gov или l.wassenaar@iaea.org). Мы можем попросить вас заархивировать и отправить вашу внутреннюю базу данных по электронной почте (конфиденциально), чтобы мы могли помочь в устранении вашей проблемы.

16 Утилита LIMS Data Viewer

16.1 LIMS Data Viewer

LIMS Data Viewer (v.11.02 или более поздняя) – это дополнительная утилита, которую можно использовать в доверенных группах, отделах или лабораторных группах. Эта утилита позволяет подключенным к сети сотрудникам лаборатории (например, коллегам, менеджерам) получать доступ к базе данных лаборатории (*LIMS for Lasers* v.10 или *LIMS for Light Stable Isotopes* v.9) со своих рабочих компьютеров, но без возможности редактирования или изменения информации в базе данных.



Данная упрощенная утилита используется *только для чтения* и предназначена для удобства. Ее могут использовать доверенные сотрудники лаборатории для:

- Просмотра и извлечения текущих лабораторных заданий и проектов заказчиков.
- Просмотра проектов и статусов анализа.
- Загрузки или экспорта данных проекта в Excel или распечатки отчета.
- Снижения необходимости связи с лабораторией по электронной почте или телефону относительно статуса пробы или проекта.

Примечание: Утилита предназначена для использования в надежных условиях, поскольку средство просмотра предоставляет доступ пользователю ко всем проектам в базе данных LIMS. Полный доступ к просмотру может не подходить для всех условий или проектов, которые считаются конфиденциальными.

16.2 Требования к компьютеру (ПК) и программному обеспечению (ПО)

Требования:

- Компьютер под управлением Windows XP или более поздней версии
- Установленный Microsoft Office 2007, 2010, 2013 или 2016 Pro (с Access) для Windows
- Сетевой доступ к базе данных LIMS изотопной лаборатории

ПО:

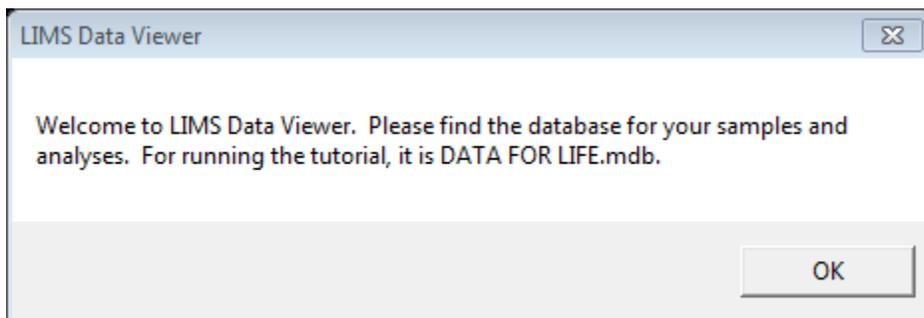
- *LIMS Data Viewer v11.02*, или более поздней версии.

LIMS Data Viewer может быть загружен бесплатно с веб-сайтов IAEA или USGS:

http://www-naweb.iaea.org/napc/ih/IHS_resources_sampling.html#lims
<http://isotopes.usgs.gov/research/topics/lims.html>

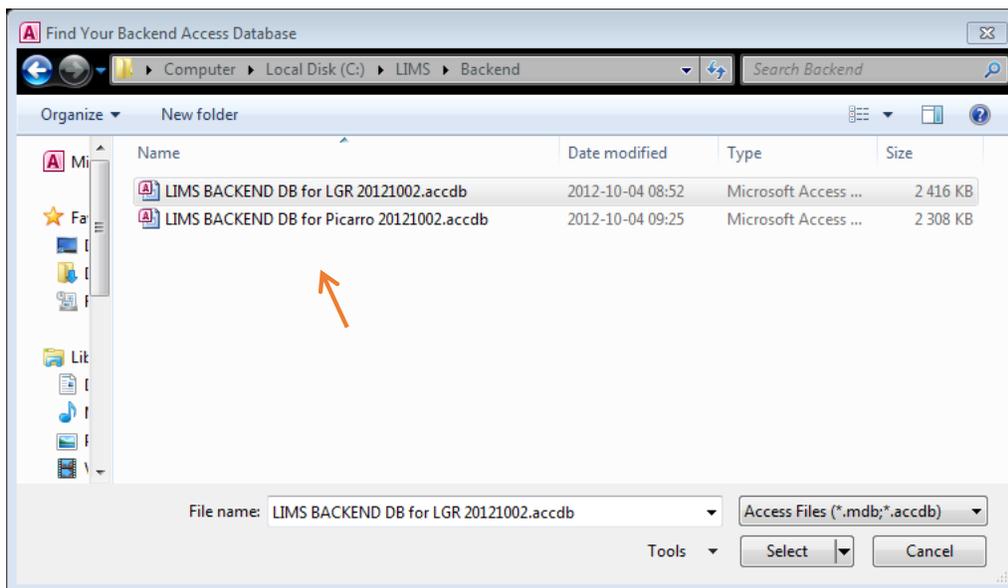
16.3 Установка

1. Загрузите и извлеките на свой рабочий стол (или в папку). Убедитесь, что установлен Microsoft Office 2007 или Office 2010–16 (32-разрядная версия) с Microsoft Access. Убедитесь, что в Access местоположение файла *LIMS Data Viewer* добавлено в качестве надежного хранилища (см. [Раздел 3.1](#)).
2. Двойным щелчком мыши откройте файл “LIMS Data Viewer.accdb”.
3. Появится следующее сообщение с запросом местоположения базы данных LIMS лаборатории:

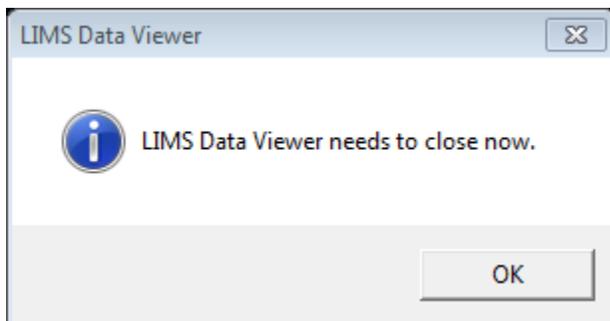


4. Нажмите «ОК» и используйте диалоговое окно с файлом, чтобы перейти к расположению внутренней базы данных, как указано менеджером или администратором вашей изотопной лаборатории. Это может быть сетевое расположение или подключенный сетевой диск. В качестве примера ниже C:\LIMS\Backend, «Выбрать» базу данных.

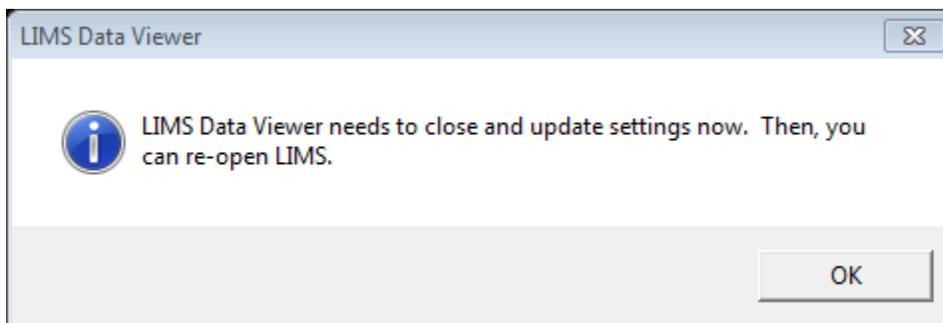
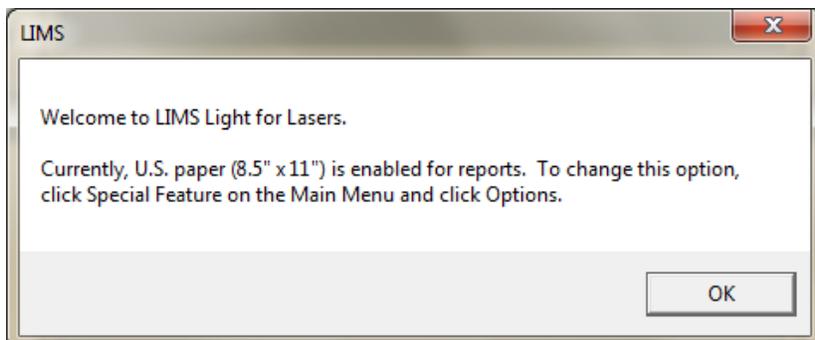
Примечание для руководителей лабораторий: целесообразно предоставить заказчику доступ к синхронизированной копии лабораторной базы данных LIMS на другом сетевом диске, а не использовать исходный файл базы данных.



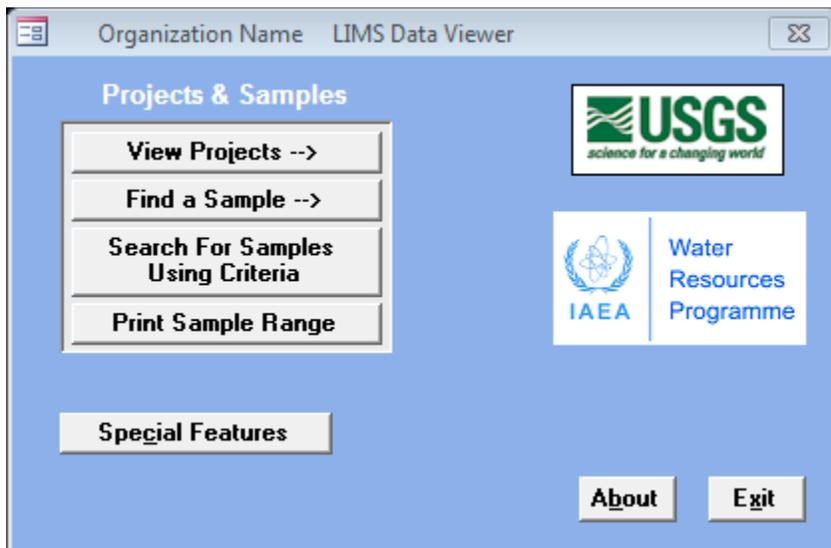
5. Затем необходимо закрыть *LIMS Data Viewer*. Нажмите «ОК» (может появиться предупреждение системы безопасности, если надежные расположения не были настроены):



6. Дважды нажмите, чтобы повторно открыть файл «LIMS Data Viewer.accdb». Нажмите «OK» для перехода к следующим 2 диалоговым окнам и повторно откройте «LIMS Data Viewer.accdb» в последний раз.



7. *LIMS Data Viewer* теперь успешно установлен. Так должен выглядеть экран при запуске:



LIMS Data Viewer – Главная страница.

Для использования данной утилиты, проекты, поиск пробы, поиск, печать и специальные функции полностью описаны в Разделах руководства пользователя *LIMS for Lasers*, с ограничением, что поля нельзя редактировать или изменять. Кроме того, в *LIMS Data Viewer* видны не все меню, а некоторые из них недоступны.

View Projects – просмотр, печать или экспорт данных. Просмотрите соответствующие секции [Раздела 13](#).

Find a Sample – просмотрите соответствующие секции [Раздела 12.8](#)

Search for Samples Using Criteria – просмотрите [Раздел 12.8](#)

Print Sample Range – просмотрите [Раздел 12.8](#)

Special Features – установите параметры принтера по умолчанию и измените расположение базы данных – см. [Раздел 4](#).

Использованные источники

- [1] L. I. Wassenaar, T. B. Coplen, P. K. Aggarwal. Approaches for achieving long-term accuracy and precision of $\delta^{18}\text{O}$ and $\delta^2\text{H}$ for waters analyzed using laser absorption spectrometers. *Environmental Science and Technology* **2014**, 48, 1123.
- [2] T. B. Coplen, L. I. Wassenaar, H. Qi. Laser absorption spectrometry for $\delta^{18}\text{O}$ and $\delta^2\text{H}$ measurements in environmental studies: Part I, Experiences and comparisons with dual-inlet isotope-ratio mass spectrometry, extended abstract, Laser Specs for Field Hydrology and Biogeochemistry: Lessons Learned and Future Prospects, 2014. A Virtual Workshop exploring the potential and pitfalls of a revolutionary technology, Organized by CUAHSI (Consortium of Universities for the Advancement of Hydrologic Sciences, Inc.) and the U.S. Geological Survey. https://profile.usgs.gov/myscience/upload_folder/ci2015Feb1315555128050Coplen%20et%20al%20LaserSpecs%20vs%20IRMS.pdf
- [3] T. B. Coplen, L. I. Wassenaar. LIMS for Lasers 2015 for achieving long-term accuracy and precision of $\delta^2\text{H}$, $\delta^{17}\text{O}$, and $\delta^{18}\text{O}$ of waters using laser absorption spectrometry. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2015**, 29, 2122. <http://dx.doi.org/10.1002/rcm.7372>
- [4] T. Coplen, B. A Guide for the Laboratory Information Management System (LIMS) for Light Stable Isotopes—Versions 7 and 8. **2000**, U. S. Geological Survey Open-File Report 00-345, 110.
- [5] BIPM. The International system of Units (SI), 8th edition brochure (in English), **2006**, 88 p, http://www.bipm.org/utis/common/pdf/si_brochure_8_en.pdf
- [6] T. B. Coplen. Guidelines and recommended terms for expression of stable-isotope-ratio and gas-ratio measurement results. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2011**, 25, 2538. <http://dx.doi.org/10.1002/rcm.5129>
- [7] R. A. Werner, W. A. Brand. Referencing strategies and techniques in stable isotope ratio analysis. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2001**, 15, 501.
- [8] G. Lis, L. I. Wassenaar, M. J. Hendry. High-precision laser spectroscopy D/H and $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ measurements of microliter natural water samples. *Analytical Chemistry* **2008**, 80, 287.
- [9] D. Penna, B. Stenni, M. Šanda, S. Wrede, T. A. Bogaard, A. Gobbi, M. Borga, B. M. C. Fischer, M. Bonazza, Z. Chárová. On the reproducibility and repeatability of laser absorption spectroscopy measurements for $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ isotopic analysis. *Hydrology and Earth System Sciences* **2010**, 14, 1551.
- [10] M. Gröning. Improved water $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ calibration and calculation of measurement uncertainty using a simple software tool. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2011**, 25, 2711.
- [11] D. Penna, B. Stenni, M. Šanda, S. Wrede, T. A. Bogaard, M. Micheline, B. M. C. Fischer, A. Gobbi, N. Mantese, G. Zuecco, M. Borga, M. Bonazza, M. Sobotková, B. Čejková, L. I. Wassenaar. Technical Note: Evaluation of between-sample memory effects in the analysis

- of $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ of water samples measured by laser spectrometers. *Hydrology and Earth System Sciences* **2012**, *16*, 3925.
- [12] W. A. Brand, H. Geilmann, E. R. Crosson, C. W. Rella. Cavity ring-down spectroscopy versus high-temperature conversion isotope ratio mass spectrometry; a case study on $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ of pure water samples and alcohol/water mixtures. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2009**, *23*, 1879.
- [13] M. J. Hendry, B. Richman, L. I. Wassenaar. Correcting for methane interferences on $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ measurements in pore water using $\text{H}_2\text{O}_{\text{liquid}}-\text{H}_2\text{O}_{\text{vapor}}$ equilibration laser spectroscopy. *Analytical Chemistry* **2011**, *83*, 5789.
- [14] M. Schmidt, K. Maseyk, C. Lett, P. Biron, P. Richard, T. Bariac, U. Seibt. Reducing and correcting for contamination of ecosystem water stable isotopes measured by isotope ratio infrared spectroscopy. *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2012**, *26*, 141.
- [15] A. G. West, G. R. Goldsmith, I. Matimati, T. E. Dawson. Spectral analysis software improves confidence in plant and soil water stable isotope analyses performed by isotope ratio infrared spectroscopy (IRIS). *Rapid Communications in Mass Spectrometry* **2011**, *25*, 2268.

Примечания об изменениях в руководстве пользователя

12 ноября, 2012 в v 1.1

- Добавлен новый [Раздел 15.1](#) о мерах предосторожности в отношении спектрального загрязнения и соответствующие ссылки на литературу.
- Добавлена минимальная разница О/Н в промилле, требуемая для соседних стандартных флаконов, чтобы правильно рассчитать корректировки эффекта «памяти» между пробами в LIMS for Lasers (в [Разделе 8.2](#)).
- В FAQ добавлен вопрос об эффекте «памяти» между пробами LGR при использовании одного эталонного флакона для каждого лабораторного стандарта.
- Реорганизован [Раздел 15](#).

13 декабря, 2012 в v 1.2

- Добавлен [Раздел 16](#) о LIMS Data Viewer.

3 января, 2013 в v 1.3

- Незначительные правки и меры предосторожности добавлены на стр. 63 и 68 по дублированию и редактированию шаблонов.

28 июня, 2013 в v 1.4

- Незначительные опечатки, обновления рисунков и добавление руководства в [Приложении 1](#) для оптимизации шаблонов для автоматического пробоотборника серии G2000 для лазерных спектрографов Picarro серии 20xx.

23 сентября, 2013 в v 1.5

- Незначительные исправления опечаток.
- Добавлен сброс сохраненных данных для обновления нулевых значений в [Раздел 12.6](#).
- Добавлено [Приложение 2](#).

10 сентября, 2015 в v 2.0

- Полностью переработано для руководства пользователя LIMS for Lasers 2015.

21 марта, 2016 в v 2.1

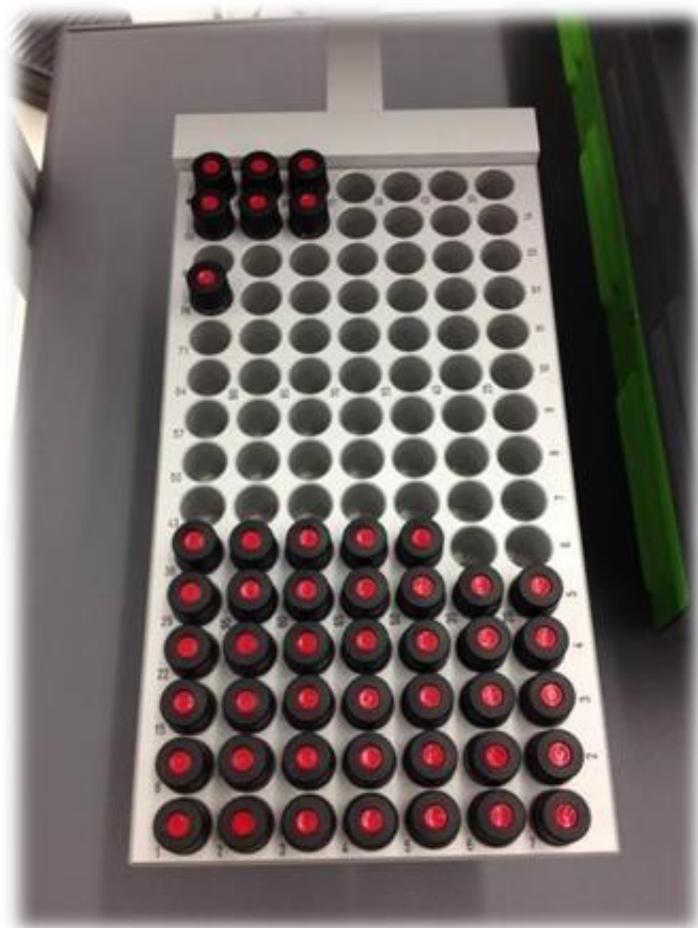
- Пересмотрено введение, небольшие изменения в тексте и рисунках.
- Добавление новых инструментов проверки импорта.
- Добавлено объяснение «граничной» нормализации (bracketed normalization).

20 декабря, 2016 в v 2.1.1

- Незначительные правки, отображающие v 10.092.

Приложение 1. Шаблон для автоматического пробоотборника Picarro G2000

Внедрение автоматического пробоотборника жидкости G2000 на приборах Picarro в 2012 году добавило программного управления и большей гибкости, чем устройство CTC PAL. На рисунках ниже показана схема лотка для проб, где неизвестные пробы последовательно помещаются в переднюю часть лотка, а стандарты измерения и контрольный стандарт (или промывочный раствор) расположены в задней части лотка. Такая компоновка более удобна, чем необходимость перемежать флаконы с лабораторными стандартами между анализируемыми пробами, и облегчает коррекцию эффекта «памяти» между пробами и нарастающей инструментальной ошибки измерений в *LIMS for Lasers 2015*.



Макет на 40 проб (расположение в лотке)

Стандарты Выс., Низ, Низ. (99,100, 101)

Стандарты Низ., Выс., Выс. (92, 93, 94)

Контрольный стандарт
(опционально, или флакон для промывки в конце цикл) (78)

Пробы в позициях (1 до ...40)

Конфигурация программного обеспечения пробоотборника G-2000, соответствующая схеме из 40 проб, показанной на рисунке выше, приведена ниже, здесь показаны 7 вводов на пробу.

Основным программным ограничением является ограничение последовательности из 10 строк, и каждая из этих строк должна содержать последовательно взятые флаконы. Таким образом, триплеты лабораторных стандартов Hi/Low (Высокий/Низкий) должны быть определены в отдельные строки (см. Таблицу A1).

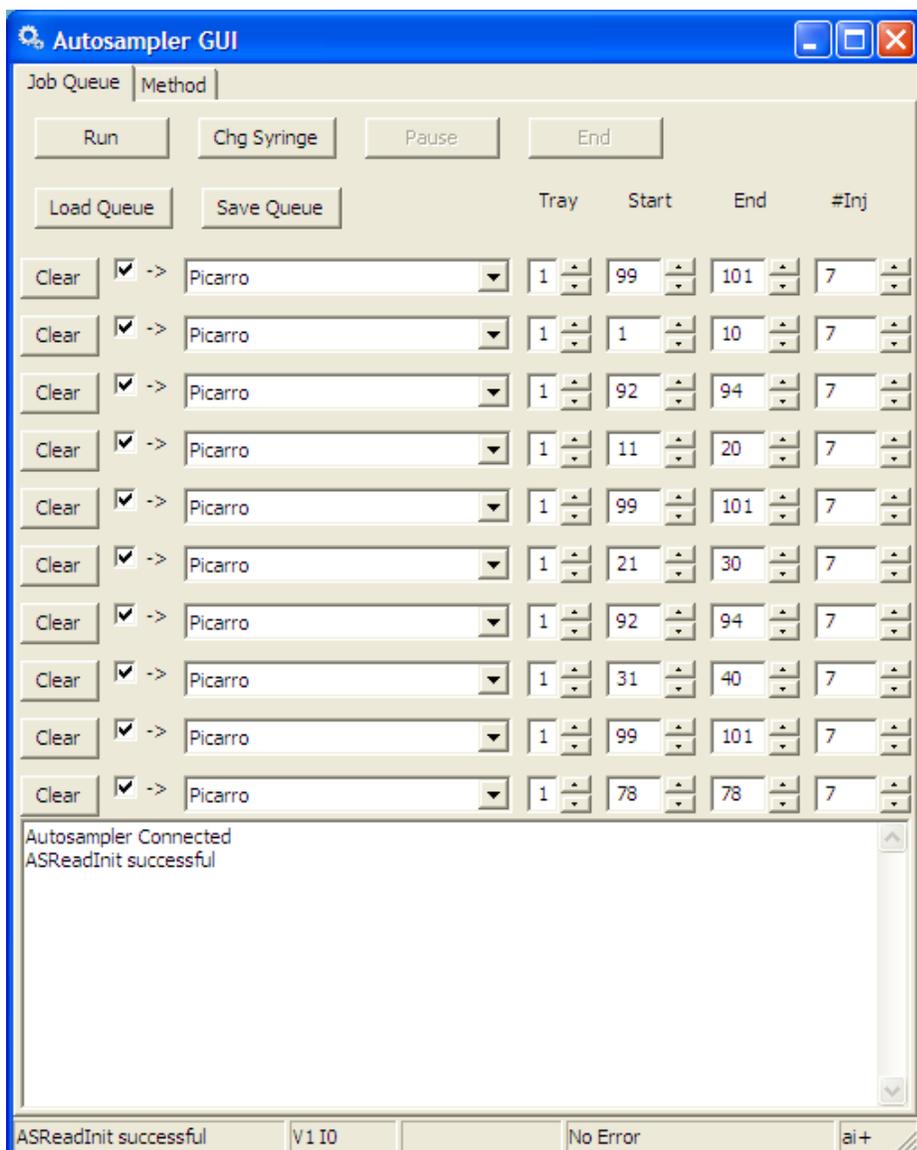


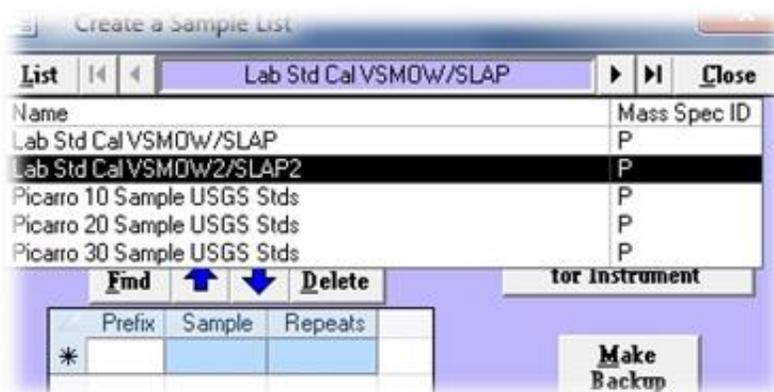
Таблица А1. Рекомендуемый макет шаблона *LIMS for Lasers 2015* для списка из 40 проб для автоматических пробоотборников Picarro G-2000 показан ниже (см. [Раздел 8](#) о построении шаблона). Общее время работы этого шаблона составляет примерно 38 часов.

Проба	Позиция флакона	List #	Функция LIMS for Lasers 2015
Выс. стандарт	1-99	1	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-100	2	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-101	3	Нормализация VSMOW-SLAP
Проба 1	1-01	4	Проба
Проба 2	1-02	5	Проба
Проба 3	1-03	6	Проба
Проба 4	1-04	7	Проба
Проба 5	1-05	8	Проба
Проба 6	1-06	9	Проба
Проба 7	1-07	10	Проба
Проба 8	1-08	11	Проба
Проба 9	1-09	12	Проба
Проба 10	1-10	13	Проба
Низ. стандарт	1-92	14	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-93	15	Эффект «памяти» между пробами
Выс. стандарт	1-94	16	Нормализация VSMOW-SLAP
Проба 11	1-11	17	Проба
Проба 12	1-12	18	Проба
Проба 13	1-13	19	Проба
Проба 14	1-14	20	Проба
Проба 15	1-15	21	Проба
Проба 16	1-16	22	Проба
Проба 17	1-17	23	Проба
Проба 18	1-18	24	Проба
Проба 19	1-19	25	Проба
Проба 20	1-20	26	Проба
Контрольный стандарт	1-78	27	Контрольный стандарт
Выс. стандарт	1-99	28	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-100	29	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-101	30	Нормализация VSMOW-SLAP
Проба 21	1-21	31	Проба
Проба 22	1-22	32	Проба
Проба 23	1-23	33	Проба
Проба 24	1-24	34	Проба e
Проба 25	1-25	35	Проба
Проба 26	1-26	36	Проба

Проба 27	1-27	37	Проба
Проба 28	1-28	38	Проба
Проба 29	1-29	39	Проба
Проба 30	1-30	40	Проба
Низ. стандарт	1-92	41	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-93	42	Эффект «памяти» между пробами
Выс. стандарт	1-94	43	Нормализация VSMOW-SLAP
Проба 31	1-31	44	Проба
Проба 32	1-32	45	Проба
Проба 33	1-33	46	Проба
Проба 34	1-34	47	Проба
Проба 35	1-35	48	Проба
Проба 36	1-36	49	Проба
Проба 37	1-37	50	Проба
Проба 38	1-38	51	Проба
Проба 39	1-39	52	Проба
Проба 40	1-40	53	Проба
Выс. стандарт	1-99	54	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-100	55	Эффект «памяти» между пробами
Низ. стандарт	1-101	56	Нормализация VSMOW-SLAP

Приложение 2. Базы данных и рабочие листы для проектирования шаблонов

Базы данных для быстрого запуска содержат удобные готовые шаблоны с 10, 20 и 30 пробами для лазерных приборов Picarro и Los Gatos Research. Эти новые файлы базы данных можно загрузить с веб-сайтов IAEA и USGS, как описано в [Разделе 3.1](#).



Шаблоны были предварительно заполнены для использования USGS 46 и USGS 48 в качестве повседневных калибровочных стандартов высоких и низких значений (стандарты USGS относятся к эталонным образцам с W-31 по W-34, плюс W-35 является контрольным стандартом). Готовые шаблоны легко «дублируются» (см. [Разделы 8.4](#) и [8.5](#)), а стандарты USGS впоследствии редактируются для замены на внутренние высокие и низкие калибровочные стандарты для повседневного использования.

List	W-5	Delta 2H	0	Edit	Add	Delete	Close
W-5	VSMOW	Delta 2H	0				
W-6	GISP	Delta 2H	-189.7				c reference materials
W-7	SLAP	Delta 2H	-428				
W-8	VSMOW2	Delta 2H	0				
W-9	SLAP2	Delta 2H	-427.5				
W-31	USGS 45	Delta 2H	-10.3				
W-32	USGS 46 LOW STD	Delta 2H	-235.8				
W-33	USGS 47	Delta 2H	-150.2				
W-34	USGS 48 HIGH STD	Delta 2H	-2				
W-5	VSMOW	Delta 180	0				
W-6	GISP	Delta 180	-24.78				
W-7	SLAP	Delta 180	-55.5				
W-8	VSMOW2	Delta 180	0				
W-9	SLAP2	Delta 180	-55.5				
W-31	USGS 45	Delta 180	-2.238				
W-32	USGS 46 LOW STD	Delta 180	-29.8				
W-33	USGS 47	Delta 180	-19.8				
W-34	USGS 48 HIGH STD	Delta 180	-2.224				
W-35	Control Standard	Delta 180	-999				

Чтобы облегчить разработку нового шаблона, предоставляются рабочие листы шаблонов Excel для Los Gatos и Picarro, которые помогают визуально управлять реализацией. Эти электронные таблицы используются для удобства при редактировании номеров флаконов и позиций лотков при ручном создании шаблона (например, рисунок на странице 62).

Ниже показан шаблон рабочего листа Los Gatos на 10 проб.

A	B	C	D	E
1	LIMS for Lasers Template Name			
2	LGR 10 Sample			
3	Sample	LIMS List #	Tray Position / Port	LIMS Function
4	Dummy (W-3)	1	3-28	DI Wash
5	High Std	2	3-10	Normalization + Drift + Memory
6	Low Std	3	3-1	Normalization + Drift + Memory
7	Low Std	4	3-2	Normalization + Drift + Memory
8	Sample 1	5	1-1	
9	Sample 2	6	1-2	
10	Sample 3	7	1-3	
11	Sample 4	8	1-4	
12	Sample 5	9	1-5	
13	Low Std	10	3-3	Normalization + Drift + Memory
14	High Std	11	3-11	Normalization + Drift + Memory
15	High Std	12	3-12	Normalization + Drift + Memory
16	Sample 6	13	1-6	
17	Sample 7	14	1-7	
18	Sample 8	15	1-8	
19	Sample 9	16	1-9	
20	Sample 10	17	1-10	
21	Control	18	3-19	Control Standard
22	High Std	19	3-10	Normalization + Drift + Memory
23	Low Std	20	3-1	Normalization + Drift + Memory
24	Low Std	21	3-2	Normalization + Drift + Memory
25	Dummy (W-3)	22	3-28	DI Wash
26				
27	Front Tray 1			
28	Samples	Positions 1-1 to 1-10		
29				
30	Rear Tray 3			
31	Low Std	Positions 3-1 to 3-3		
32	High Std	Positions 3-10 to 3-12		
33	Control	Position 3-19		
34	DI Wash	Position 3-28		
35				

Приложение 3. Корректировка вариаций значений δ с изменением относительной концентрации водяного пара в анализаторе

Хорошо известно, что значения δ одного или нескольких видов изотопологов H_2O могут реагировать положительно или отрицательно (а также линейно или нелинейно) на очень небольшие изменения относительного количества воды, испаренной в анализаторе лазера. Изменения количества введенной H_2O (и соответствующие отклонения в результатах δ) в течение запуска могут быть большими или небольшими, в зависимости от качества и состояния шприца. Значительные колебания H_2O и случайные концентрации обычно возникают из-за некачественных шприцев или негерметичных прокладок.

При преднамеренной манипуляции алгоритм коррекции зависимости δ от относительной концентрации водяного пара H_2O дает возможность улучшить результаты путем нормализации к количеству впрыскиваемого H_2O с использованием стандартов контроля количества (например, с использованием триплетов 800, 1000 и 1200 мкл), размещенных в начале или во время запуска. Такая реализация позволяет *LIMS for Lasers 2015* автоматически определять и применять алгоритм коррекции концентрации H_2O для каждого изотопа.

Цель коррекции зависимости от концентрации в LIMS for Lasers 2015 состоит в том, чтобы помочь устранить эффекты изменяющейся производительности шприца для δ всех изотопов. Она не предполагается для замены хорошо работающего шприца. Неисправные шприцы всегда следует заменять!

Корректировка относительного значения H_2O в *LIMS for Lasers 2015* определяется путем корреляции измеренных необработанных значений δ для измененного контрольного стандарта (или любого другого стандарта) с его измеренными концентрациями водяного пара H_2O в анализаторе, а затем с применением наиболее подходящей регрессионной модели (например, линейной, квадратичной, логарифмической, экспоненциальной). Если регрессионная модель устойчива (например, R -squared > 0.6), уравнение можно применить ко всем пробам для нормализации их измеренных значений δ до постоянного количества водяного пара. Корректировки зависимости от концентрации часто приводят к заметному улучшению результатов δ для одного или нескольких изотопологов, особенно если характеристики шприца изменяются или если прибор очень чувствителен к количеству водяного пара H_2O .

При использовании предоставленных по умолчанию баз данных исследований Picarro или Los Gatos предварительно установленным стандартом контроля количества для поправок

на концентрацию H_2O является W-998. Если требуется стандарт контроля количества $\delta^{17}O$, необходимо создать сопутствующий проект $\delta^{17}O$ (обычно W-999). В случае, если стандарт контроля концентрации H_2O не был создан, его можно добавить, как описано в [Разделе 6](#).

Соответствующий стандарт контроля количества также должен быть добавлен в таблицу эталонов «Reference Samples», как описано в [Разделе 7.2](#). Примечание: присвоенное значение для этого стандарта контроля количества установлено на -999 ‰ для δ всех изотопов.

List	W-5			
W-5	VSMOW	δ^2H	0	
W-6	GISP	δ^2H	-189.7	
W-7	SLAP	δ^2H	-428	
W-8	VSMOW2	δ^2H	0	
W-9	SLAP2	δ^2H	-427.5	
W-31	High Standard	δ^2H	-10.3	
W-32	USGS 46 LOW STD	δ^2H	-235.8	
W-33	USGS 47	δ^2H	-150.2	
W-34	USGS 48 HIGH STD	δ^2H	-2	
W-998	DI for Amount Evaluation	δ^2H	-999	
W-5	VSMOW	$\delta^{18}O$	0	
W-6	GISP	$\delta^{18}O$	-24.78	
W-7	SLAP	$\delta^{18}O$	-55.5	
W-8	VSMOW2	$\delta^{18}O$	0	
W-9	SLAP2	$\delta^{18}O$	-55.5	
W-31	High Standard	$\delta^{18}O$	-2.238	
W-32	USGS 46 LOW STD	$\delta^{18}O$	-29.8	

Настройка контроля количества на приборе Los Gatos Research Laser

(Примечание: только для приборов IWA-35EP или TIWA 45-EP)

1. Создайте или отредактируйте шаблон анализа в Excel или на страницах шаблонов.
2. В начале или в середине шаблона добавьте 3 или более флаконов с образцом контроля количества воды, в каждом из которых разное количество воды. В приведенном ниже примере рабочий объем целевой инъекции с использованием шприца SGE 5 мкл составляло 400 нл (для шприцев Hamilton оно будет 900–1200 нл). Стандарт контроля количества W-998 был намеренно установлен с приращением 350-, 400- и 450 нл, либо на странице в программе, либо с помощью шаблона Excel. В приведенном ниже примере стандарт контроля количества был помещен в середине цикла на лоток 3 в положения 3-28 и 3-29 (порядок следования 24 (не показан), 25, 26).
3. Минимальное количество стандартов контроля количества, необходимых для возможности коррекции концентрации, составляет два (для линейной аппроксимации), а максимальное количество не ограничено (для линейного, квадратичного, логарифмического и т.д.), но обычно 3 или 4 флакона достаточно перекрывают ожидаемый диапазон H_2O .
4. Как правило, плохая работа шприца приводит к снижению концентрации водяного пара H_2O в анализаторе лазера, поэтому объемы стандартов контроля количества

должны как слегка превышать нормальное целевое количество H₂O, так и иметь несколько более низкие концентрации H₂O.

Примечание: убедитесь, что диапазон объемов инъекций находится в пределах рабочего диапазона прибора!

The screenshot displays the 'Linearity Test v4' software interface. At the top, there is a navigation bar with buttons for 'List', navigation arrows, 'Page: 3', 'Edit', 'Add Page', 'Delete Page', and 'Close'. Below this is a grid of 12 vial configuration panels, arranged in 4 rows and 3 columns. Each panel contains the following information:

- Vial Pos:** A text field with a value (e.g., 3-29, 3-28, 3-10, 3-2, 3-1, 1-13, 1-14, 1-15, 1-16, 3-19, 3-1, 3-10).
- Run Order:** A text field with a value (e.g., 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36).
- Amt:** A text field with a value (e.g., 450, 350, 400, 400, 400, 400, 400, 400, 400, 400, 400, 400).
- Sample/Fixed Ref:** Radio buttons for 'Sample' and 'Fixed Ref'. The 'Fixed Ref' option is selected in all panels. A dropdown menu is present next to the 'Fixed Ref' label, containing values like 'W-998', 'W-33', and 'W-34'. Two red arrows point to the 'Fixed Ref' dropdowns in the top-left and top-middle panels.

Примеры шаблонов (выше и ниже) для новых инструментов Los Gatos, показывающих два стандарта контроля количества.

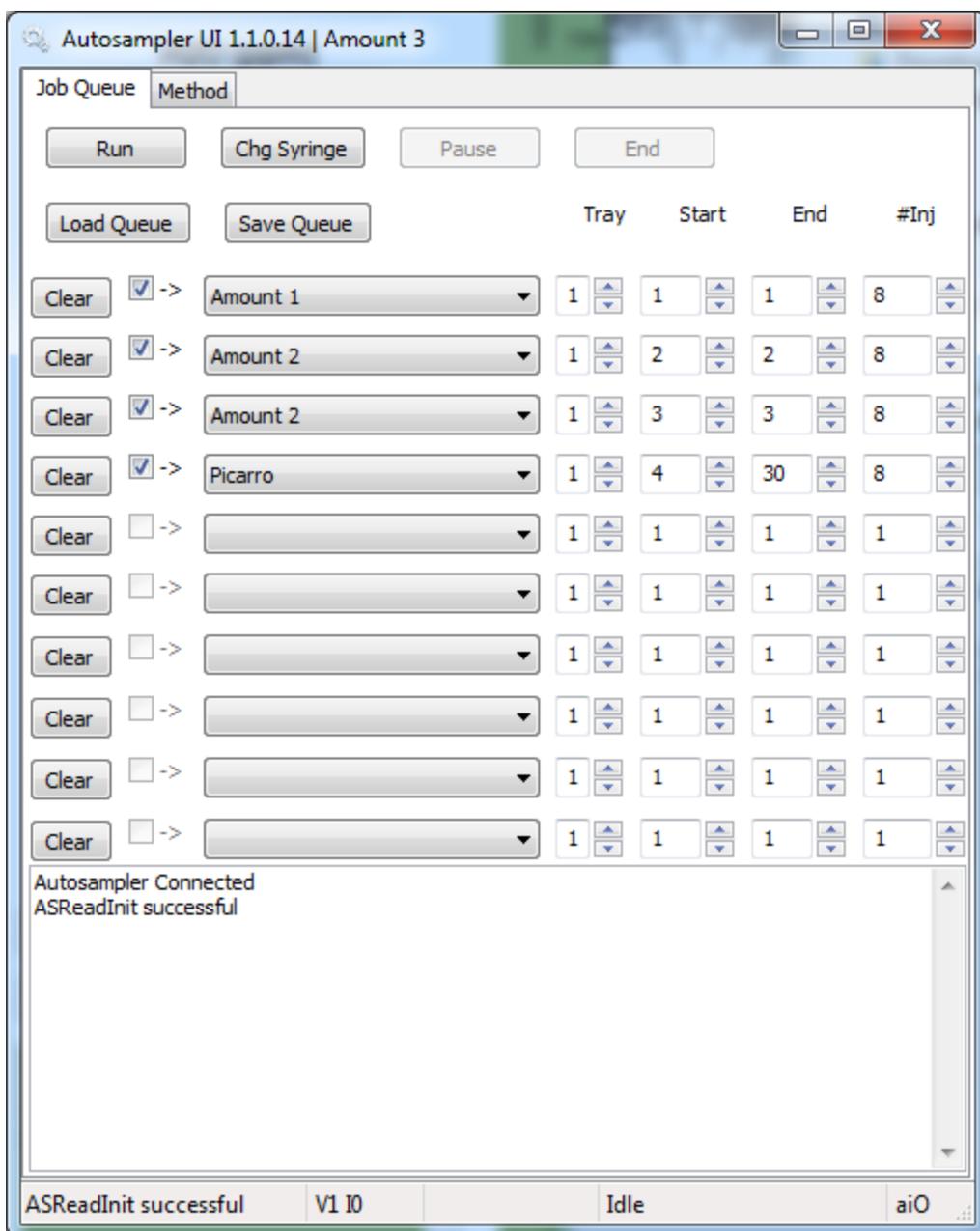
Clipboard		Font		Alignment	
A2		fx 1			
A	B	C	D	E	F
LIMS List No	Tray Position	Ref OurLabID	Page	Page Position	Amount
22	1-11		2	10	400
23	1-12		2	11	400
24	3-28	W-998	2	12	400
25	3-29	W-998	3	1	450
26	3-28	W-998	3	2	350
27	3-10	W-34	3	3	400
28	3-2	W-33	3	4	400
29	3-1	W-33	3	5	400
30	1-13		3	6	400
31	1-14		3	7	400
32	1-15		3	8	400

Настройка контроля количества на приборах Picarro

Для всех инструментов Picarro контроль количества впрыскиваемой H₂O достигается путем создания отдельных Методик на панели автоматического пробоотборника PAL-CTC или G2000. Каждый метод для целевого объема должен быть добавлен в очередь заданий (Job Queue) пробоотборника.

Например, очередь заданий может включать следующие 4 методики в одной последовательности запуска, где 1.6 мкл – это целевое количество H₂O для всех проб (например, методика Picarro):

- | | |
|--|---------------------------|
| 1. Станд. кол-ва 1.2 мкл (Методика Amount 1) | Задание 1 (Проба 1 до 1) |
| 2. Станд. кол-ва 1.6 мкл (Методика Amount 2) | Задание 2 (Проба 2 до 2) |
| 3. Станд. кол-ва 1.8 мкл (Методика Amount 3) | Задание 3 (Проба 3 до 3) |
| 4. Низ. станд. 1.6 мкл (Методика Picarro) | Задание 4 (Пробы 4 до 20) |
| 5. Выс. станд. 1.6 мкл (Методика Picarro) | |
| 6. Выс. станд. 1.6 мкл (Методика Picarro) | |
| 7. Проба 1.6 мкл (Методика Picarro) | |
| 8. Проба 1.6 мкл (Методика Picarro) | |
| 9. ... и так далее... | |



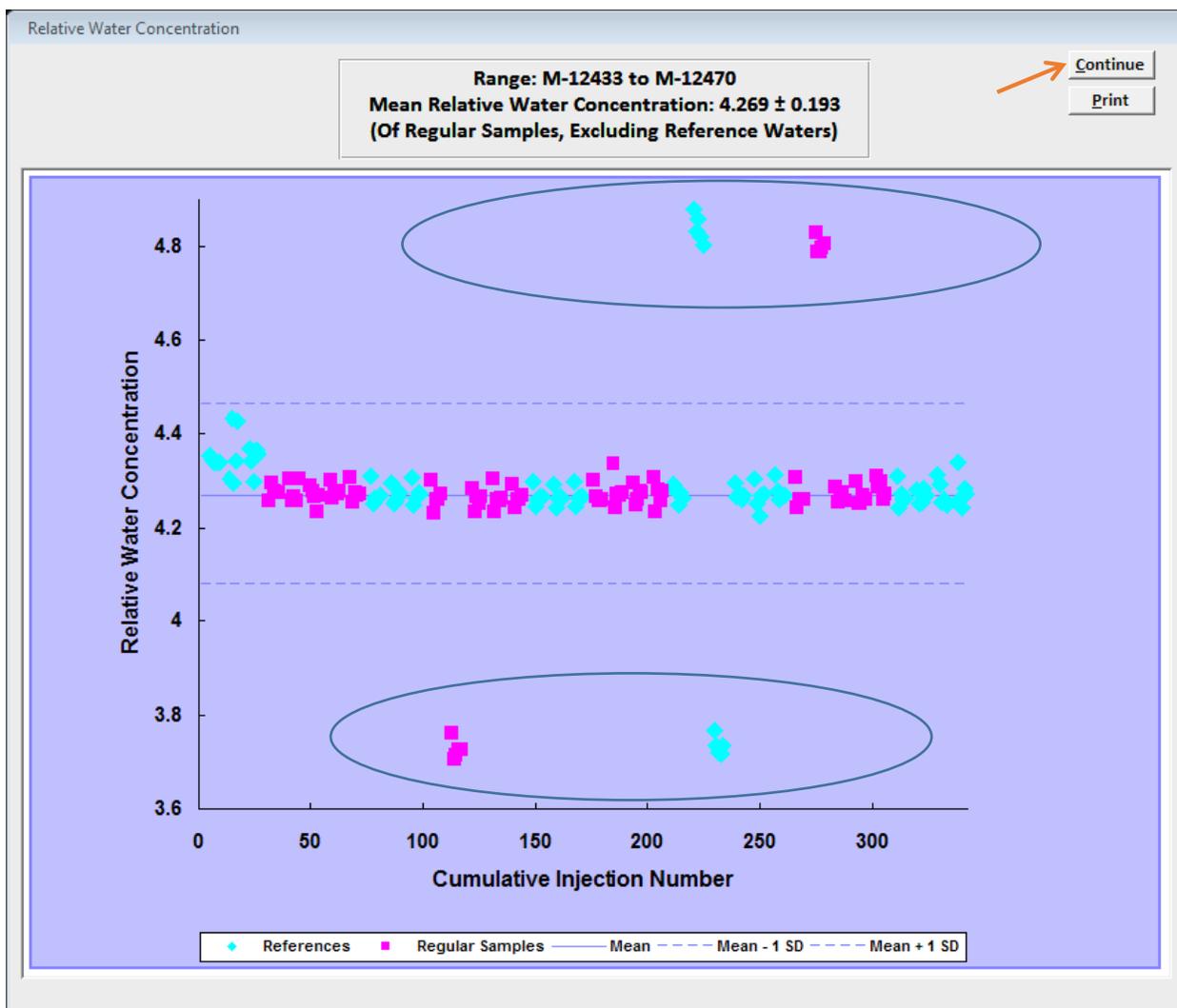
Пример очереди заданий (Job Queue) Picarro G2000 с добавлением трех образцов (например, W-998) в начало запуска. Каждая методика изменяет только объем инъекции.

При импорте данных из Picarro с добавленными флаконами со стандартами контроля количества следуйте той же процедуре, что и для Los Gatos Research, как показано в шагах 3–5 выше.

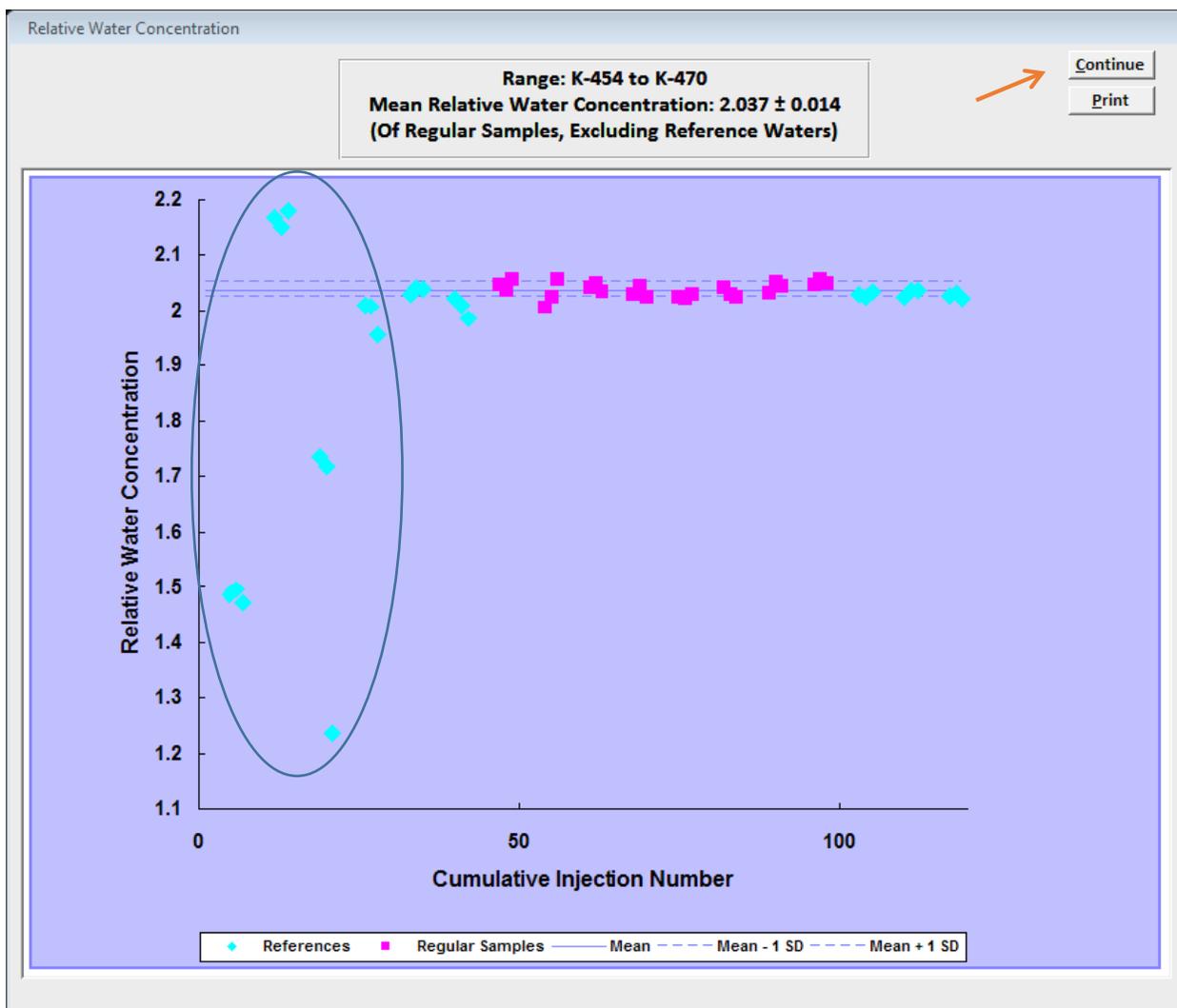
Корректировка изменений δ с изменением концентраций водяного H_2O пара в анализаторе

Экран импорта данных ниже графически показывает обзор производительности инъекций с заметными отличиями от нормальной ситуации. Здесь стандарт контроля количества с его концентрациями водяного пара H_2O выделен голубым цветом, а неизвестные пробы выделены розовым цветом в соответствии с порядковым номером инъекции. Отклик инъекций H_2O (для прибора Los Gatos Research) составлял примерно от 3.7 до 4.8×10^{16} молекул H_2O с рабочей целевой концентрацией 4.3×10^{16} молекул H_2O , как указано выше. Относительные количества водяного пара в анализаторе лазера, показанные на оси Y, будут другими для прибора Picarro.

Обычно для корректировки относительной концентрации H_2O используется только стандарт контроля количества (например, W-998, голубого цвета). В этом примере двумя неизвестными пробами (розового цвета) также манипулировали для увеличения и уменьшения количества инъекции с целью проверки того, насколько хорошо выполнена коррекция.



Пример стандартов контроля количества и проб переменного объема на приборе Los Gatos Research.



Пример, показывающий контрольные образцы количества, размещенные в начале запуска Picarro, в диапазоне от объемной доли H₂O приблизительно от 12 000 до 22 000 ppm.

Нажмите «Continue»...

На следующем экране импорта отображаются опции типов импорта для всех измеренных δ изотопов ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$). Если $\delta^{17}\text{O}$ было измерено, оно будет отображаться на правой панели. Стандартные параметры импорта ранее описаны в [Разделе 11](#).

Чтобы включить корректировку концентрации H₂O (по умолчанию отключено), установите флажок “Correct for Change in δ with Rel H₂O Conc” для каждого вида изотопа:

Import Criteria for Instrument M (LGR v4)

A Los Gatos Research import has been identified. Isotopic data can be imported using either:

1. An Import With Normalization Over Sub-ranges of Analyses (sometimes called Bracketed Normalization). LIMS will first perform an additive normalization on sub-ranges of analyses for either or both isotopes selected. LIMS commonly uses the reference water most enriched in deuterium and oxygen-18. This is equivalent to adjusting 'b' in the equation:

$$y = mx + b$$

Next LIMS will normalize the scale expansion, which is the 'm' coefficient by using a second reference water, which commonly is Antarctic water or a low delta value reference water. A result of this normalization is that after importing analyses and opening the 'Normalization Equation Coefficients' form, the 'Final Delta' values of these reference waters will be identical to the values found in the Table of References in LIMS.

2. A Standard Import With Choices. Linearity correction and (or) between-sample memory correction can be applied to data before they are imported into analysis tables of LIMS.

3. A Standard Import. Data are imported as is, that is, without linearity correction or between-sample memory correction.

In many laboratories hydrogen and oxygen isotopic data are imported with the Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization) because their baselines commonly drift randomly for unexplained reasons.

Carry-over is a known problem of many of the syringes used for transferring the small amounts of water analyzed by this laser-based system. LIMS is able to compute the average between-sample memory from analyses of the same sample loaded into two sequentially analyzed vials.

Continue
Cancel

δ²H Data

Import Type

Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)

Standard Import With Choice of Corrections

Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

Correct For Change in δ with Rel H2O Conc

Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

Correct For Between-Sample Memory

Do Not Correct For Between-Sample Memory

δ¹⁸O Data

Import Type

Import With Normalization Over Sub-ranges (Bracketed Normalization)

Standard Import With Choice of Corrections

Standard Import (Import Data As Shown)

Adjustment for Variation in Delta with Variation in Relative Water Concentration

Correct For Change in δ with Rel H2O Conc

Do Not Correct

Between-Sample Memory Correction

Correct For Between-Sample Memory

Do Not Correct For Between-Sample Memory

There are 15 samples in the import file without companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 samples. The first few are:

W-3
W-33
W-34
W-35
W-998

To import delta oxygen-17 analyses you will need to create companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 samples for these samples.

Click 'View Project' on the Main Menu. Select the project with the specified sample(s).

Click the 'Create Companion delta oxygen-17 and delta oxygen-18 Project' button.

Нажмите «Continue»...

Затем отображаются выбираемые пользователем параметры модели для зависимости значения δ от количества H₂O, последовательно для δ каждого изотопа.

На панели ниже обязательно выберите целевой стандарт контроля количества в поле «Our Lab ID». В этом случае нашим стандартом контроля количества был W-998.

Adjustment for Variation in Delta Value with Variation in Relative Water Concentration

This form enables users to adjust delta values for variation in relative H₂O amount in case there is a significant variation in delta value with instrument relative H₂O amount. Select OurLabID, and Ignore analyses of this OurLabID as desired. Select regression type, and trendline and R-squared value will be shown.

OurLabID: **W-998**

Regression:

- Linear
- Quadratic
- Logarithmic
- Power

Trendline (%):
 $\delta^2\text{H} = 0.087 \times (\text{Rel Water Conc}) - 16.77$

R-squared: **0.01**

'Right' mouse button info available for Our Lab ID and instrument error

Date Time	Our Lab ID	Analysis	Inj	Vial Pos	Rel H ₂ O Conc	Amt	Instrument Error	Penultimate Delta	Adjusted Delta	IG
2015/08/26 20:13:22	W-998	M-12456	5	3_28	4.292	400		-16.75	-16.75	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:15:07	W-998	M-12456	6	3_28	4.279	400		-16.82	-16.82	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:16:53	W-998	M-12456	7	3_28	4.248	400		-15.73	-15.73	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:18:39	W-998	M-12456	8	3_28	4.274	400		-16.30	-16.30	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:20:25	W-998	M-12456	9	3_28	4.263	400		-16.78	-16.78	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:27:16	W-998	M-12457	5	3_29	4.879	450		-16.25	-16.31	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:29:03	W-998	M-12457	6	3_29	4.834	450		-16.24	-16.29	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:30:50	W-998	M-12457	7	3_29	4.858	450		-16.95	-17.00	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:32:37	W-998	M-12457	8	3_29	4.820	450		-16.40	-16.45	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:34:24	W-998	M-12457	9	3_29	4.804	450		-15.68	-15.73	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:41:02	W-998	M-12458	5	3_28	3.766	350		-16.47	-16.43	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:42:47	W-998	M-12458	6	3_28	3.734	350		-16.54	-16.50	<input type="checkbox"/>

Record: 1 of 15 No Filter Search

Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Выше мы не видим значительных эффектов зависимости от количества H₂O для $\delta^2\text{H}$. Значения R-squared низкие для всех методов аппроксимации, таких как квадратичная, логарифмическая или степенная.

Как показывает практика, если для данной аппроксимации значение R-squared $< \sim 0.6$, не нужно применять корректировку. Это решение должен принять аналитик. Обратите внимание, что аномальные значения (например, 1 инъекцию, искажающую отличную аппроксимацию) можно игнорировать, установив соответствующие флажки IG на нижней панели.

В случае с $\delta^2\text{H}$, приведенным выше, поскольку все аппроксимации были неудачными, мы не желаем, чтобы применялась корректировка количества H₂O. Для того, чтобы отклонить все аппроксимации, нажмите "Cancel Evaluation" для $\delta^2\text{H}$.

Затем *LIMS for Lasers 2015* перейдет к отображению результатов аппроксимации коррекции величины $\delta^{18}\text{O}$ (а затем, если применимо, $\delta^{17}\text{O}$).

Adjustment for Variation in Delta Value with Variation in Relative Water Concentration

This form enables users to adjust delta values for variation in relative H2O amount in case there is a significant variation in delta value with instrument relative H2O amount. Select OurLabID, and Ignore analyses of this OurLabID as desired. Select regression type, and trendline and R-squared value will be shown.

OurLabID: **W-998**

Regression:

- Linear
- Quadratic
- Logarithmic
- Power

Trendline (%):
 $\delta^{18}O_{VSMOW} = -0.38745 \times (\text{Rel Water Conc})^2 + 2.710 \times (\text{Rel Water Conc}) - 10.46$

R-squared: **0.96**

'Right' mouse button info available for Our Lab ID and instrument error

Import Adjusted Delta Values

Cancel Evaluation

Date Time	Our Lab ID	Analysis	Inj	Vial Pos	Rel H2O Conc	Amt	Instrument Error	Penultimate Delta	Adjusted Delta	IG
2015/08/26 20:13:22	W-998	M-12456	5	3_28	4.292	400		-5.98	-5.97	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:15:07	W-998	M-12456	6	3_28	4.279	400		-6.04	-6.03	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:16:53	W-998	M-12456	7	3_28	4.248	400		-5.86	-5.88	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:18:39	W-998	M-12456	8	3_28	4.274	400		-5.93	-5.93	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:20:25	W-998	M-12456	9	3_28	4.263	400		-5.93	-5.93	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:27:16	W-998	M-12457	5	3_29	4.879	450		-6.39	-5.88	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:29:03	W-998	M-12457	6	3_29	4.834	450		-6.37	-5.91	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:30:50	W-998	M-12457	7	3_29	4.858	450		-6.55	-6.07	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:32:37	W-998	M-12457	8	3_29	4.820	450		-6.38	-5.93	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:34:24	W-998	M-12457	9	3_29	4.804	450		-6.39	-5.96	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:41:02	W-998	M-12458	5	3_28	3.766	350		-5.73	-5.93	<input type="checkbox"/>
2015/08/26 20:42:47	W-998	M-12458	6	3_28	3.734	350		-5.85	-6.06	<input type="checkbox"/>

Record: 1 of 15 No Filter Search

Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Для $\delta^{18}O$ в приведенном выше примере мы видим очень сильную зависимость значения δ от концентрации воды в анализаторе лазера. Опять же, выбрав соответствующий стандарт контроля количества W-998, мы можем подобрать варианты, чтобы получить наилучшую модель коррекции концентрации H_2O .

- Линейная регрессия: $R^2 = 0.92$
- **Квадратичная регрессия: $R^2 = 0.96$** (лучше всего подходит, показано выше)
- Логарифмическая регрессия: $R^2 = 0.91$
- Степенная регрессия: $R^2 = 0.91$

При выборе наилучшего соответствия аппроксимации, квадратичной регрессии, предлагаемое уравнение отображается в поле «Trendline» вместе с соответствующим значением R-squared (0.96). Также на нижней панели показаны сравнительные нескорректированные предпоследние значения $\delta^{18}O$ флаконов с 350 нл (−5.7 ‰) и с 450 нл (−6.4 ‰) по сравнению с теми же пробами, но теперь скорректированные на нормализованное количество H_2O (−5.9 ‰) на основе выбранной пользователем аппроксимации.

Чтобы принять предложенную модель квадратичной коррекции для $\delta^{18}\text{O}$, нажмите «Import Adjusted Delta Values». Данное действие импортирует скорректированные измеренные значения δ для дальнейшей обработки.

На следующем экране отображается сводка данных для $\delta^2\text{H}$ и $\delta^{18}\text{O}$. Имейте в виду, что эти результаты показывают измеренные значения δ , нормализованные к постоянному количеству H_2O (но только для $\delta^{18}\text{O}$ в этом случае); никакие другие поправки, такие как эффект «памяти» между пробами или линейная нарастающая инструментальная ошибка измерений, еще не были определены или применены.

Тем не менее, чтобы проиллюстрировать эффективность корректировки количества, рассмотрим следующие результаты:

Import Criteria for Instrument M (LGR v4)

Ignore relative water concentrations and delta values as appropriate. Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

Analysis	Inj	OurLabID	Vial Position	Rel H2O Conc	IG Conc	$\delta^2\text{H}$	IG $\delta^2\text{H}$	$\delta^{18}\text{O}$	IG $\delta^{18}\text{O}$
12456	1	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12456	2	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12456	3	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12456	4	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12456	5	W-998	3_28	4.29	<input type="checkbox"/>	-16.75	<input type="checkbox"/>	-5.97	<input type="checkbox"/>
12456	6	W-998	3_28	4.28	<input type="checkbox"/>	-16.82	<input type="checkbox"/>	-6.03	<input type="checkbox"/>
12456	7	W-998	3_28	4.25	<input type="checkbox"/>	-15.73	<input type="checkbox"/>	-5.88	<input type="checkbox"/>
12456	8	W-998	3_28	4.27	<input type="checkbox"/>	-16.30	<input type="checkbox"/>	-5.93	<input type="checkbox"/>
12456	9	W-998	3_28	4.26	<input type="checkbox"/>	-16.78	<input type="checkbox"/>	-5.93	<input type="checkbox"/>
12456			Means	4.27 ± 0.02	<input type="checkbox"/>	-16.48 ± 0.47	<input type="checkbox"/>	-5.95 ± 0.06	<input type="checkbox"/>
12457	1	W-998	3_29		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12457	2	W-998	3_29		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12457	3	W-998	3_29		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12457	4	W-998	3_29		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12457	5	W-998	3_29	4.88	<input type="checkbox"/>	-16.25	<input type="checkbox"/>	-5.88	<input type="checkbox"/>
12457	6	W-998	3_29	4.83	<input type="checkbox"/>	-16.24	<input type="checkbox"/>	-5.91	<input type="checkbox"/>
12457	7	W-998	3_29	4.86	<input type="checkbox"/>	-16.95	<input type="checkbox"/>	-6.07	<input type="checkbox"/>
12457	8	W-998	3_29	4.82	<input type="checkbox"/>	-16.40	<input type="checkbox"/>	-5.93	<input type="checkbox"/>
12457	9	W-998	3_29	4.80	<input type="checkbox"/>	-15.68	<input type="checkbox"/>	-5.96	<input type="checkbox"/>
12457			Means	4.84 ± 0.03	<input type="checkbox"/>	-16.30 ± 0.45	<input type="checkbox"/>	-5.95 ± 0.07	<input type="checkbox"/>
12458	1	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12458	2	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12458	3	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12458	4	W-998	3_28		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>
12458	5	W-998	3_28	3.77	<input type="checkbox"/>	-16.47	<input type="checkbox"/>	-5.93	<input type="checkbox"/>
12458	6	W-998	3_28	3.73	<input type="checkbox"/>	-16.54	<input type="checkbox"/>	-6.06	<input type="checkbox"/>
12458	7	W-998	3_28	3.72	<input type="checkbox"/>	-16.41	<input type="checkbox"/>	-5.91	<input type="checkbox"/>
12458	8	W-998	3_28	3.72	<input type="checkbox"/>	-16.48	<input type="checkbox"/>	-5.89	<input type="checkbox"/>
12458	9	W-998	3_28	3.74	<input type="checkbox"/>	-16.19	<input type="checkbox"/>	-5.96	<input type="checkbox"/>
12458			Means	3.74 ± 0.02	<input type="checkbox"/>	-16.42 ± 0.14	<input type="checkbox"/>	-5.95 ± 0.07	<input type="checkbox"/>
12459	1	W-34	3_10		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>		<input checked="" type="checkbox"/>

$\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$

Ref for Additive Normalization: W-34

Reference for Scale Expansion: W-33

Несмотря на широкий диапазон используемых объемов инъекций, приводящий к диапазону относительных концентраций воды 3.7–4.8, недавно нормализованные результаты измерений H_2O для W-998 дали то же значение δ , равное -5.95‰ , тогда как значения, оставшиеся нескорректированными для концентрации H_2O , отличались более чем на 0.5‰ , что недопустимо.

Нажмите «Continue»...

С этого момента могут применяться все стандартные корректировки *LIMS for Lasers 2015* эффекта «памяти» между пробами и процедуры нормализации данных (см. [Раздел 11](#)).

Внимание: при изменении объема инъекции H₂O при импорте будут появляться предупреждения о несоответствии концентрации водяного пара в анализаторе (например, LIMS не может отличить неисправный шприц от преднамеренно измененных инъекций), а в сводной таблице импорта будут отображаться отметки высокой вариации. В этом случае предупреждения можно игнорировать.