

LIMS para Láseres 2015

***Sistema de gestión de información de laboratorio
para isótopos estables de hidrógeno y oxígeno en
muestras de agua por espectrometría láser***

Manual de usuario

Revisión v 2.1.1

LIMS para Láseres v10.092

20 de diciembre de 2016

Prólogo

La medición de isótopos estables de hidrógeno y oxígeno ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$) en muestras de agua ambiental por espectrometría láser es un método analítico preciso y recomendable para estudios hidrológicos y ambientales en todo el mundo, especialmente en el caso de análisis de muestras de agua relativamente limpia. La determinación de valores δ mediante instrumentos de espectrometría láser suele proporcionar resultados precisos, pero cuando las muestras contienen moléculas orgánicas volátiles que interfieren, o cuando los datos isotópicos son necesarios para fines legales, los resultados deben ser verificados mediante análisis realizado en espectrómetros de masas de relación isotópica (IRMS por sus siglas en inglés).

Los espectrómetros láser para la determinación de isótopos de agua líquida de Los Gatos Research* y Picarro Inc.* son fáciles de operar; pero la incorporación de estos instrumentos a las operaciones rutinarias de laboratorio no es una tarea fácil, debido al intenso y extenso procesamiento de datos en formato CSV que necesita realizar el operador. Algunos usuarios desarrollaron hojas de cálculo para el procesamiento de datos complejos; sin embargo, las hojas de cálculo presentan un serio desafío para defender el procedimiento usado ante auditorías de Aseguramiento de la Calidad (QA) y Control de Calidad (QC) a largo plazo. Ninguno de los fabricantes citados ofrece un paquete software de procesamiento de datos que pueda satisfacer todas estas necesidades de procesamiento de datos.

7 pasos críticos durante el procesamiento de datos

Existen siete pasos clave para el procesamiento de datos necesarios para obtener datos isotópicos exactos y precisos a largo plazo usando espectrómetros láser, los cuales son muy difíciles de llevar a cabo usando únicamente hojas de cálculo:

- Eliminar las muestras o inyecciones "malas" basadas en las concentraciones de H_2O inyectadas debidas a un bajo rendimiento de la jeringa o de los septos.
- Determinar el grado de dependencia de la cantidad de H_2O y aplicar las correcciones necesarias, según sea necesario.
- Ignorar las primeras 3-4 inyecciones de cada muestra para reducir el efecto de memoria entre muestras.
- Determinar y aplicar un algoritmo de corrección del efecto de memoria residual.
- Corregir la deriva lineal o no lineal del instrumento.
- Normalización de todos los datos a la escala isotópica VSMOW/SLAP.
- Seguimiento de los procedimientos de QA/QC para cada análisis y a largo plazo.

El Sistema de Gestión de Información de Laboratorio (LIMS) para Láseres 2015 automatiza estos 7 pasos y elimina totalmente la necesidad de utilizar hojas de cálculo. LIMS para Láseres 2015 utiliza plantillas similares para el análisis de muestras y patrones, siguiendo el principio de Tratamiento Idéntico de ambos tipos de muestras. Las plantillas contienen múltiples lugares para los patrones

internos, de forma que se pueda cuantificar el efecto de memoria y la deriva instrumental, de forma que se pueda corregir por la cantidad de H₂O inyectada y se puedan normalizar los resultados en la escala isotópica VSMOW-SLAP. Las normas de control introducidas permiten realizar el QA/QC a largo plazo, así como evaluar el desempeño del laboratorio.

LIMS para Láseres 2015 además gestiona todos los datos de clientes y proyectos para espectrómetros láser. La evaluación del funcionamiento del equipo láser se realiza a partir de patrones de control mediante diagramas de relación entre $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$, y de diagramas de series temporales. Las funciones de procesamiento automatizado mejoran la exactitud y precisión de todo el proceso, y ayudan claramente a reducir errores y equivocaciones por parte del usuario.

Este documento describe la manera en la que los usuarios pueden utilizar *LIMS para Láseres 2015* para instrumentos de Los Gatos Research y de Picarro en sus operaciones diarias de laboratorio. Para facilitar el uso de *LIMS para Láseres 2015*, este documento contiene enlaces a la última versión de este paquete de software. En este documento, los términos material de referencia y patrón se utilizan indistintamente.

En la siguiente publicación se encuentra un resumen de los beneficios que conlleva para un laboratorio el uso de *LIMS para Láseres 2015*:^[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>

El Manual de Usuario LIMS para Láseres 2015 fue escrito por Leonard I. Wassenaar y Tyler B. Coplen. Stefan Terzer, Cedric Douence y Liliana Poeltenstein, en el OIEA, participaron en las pruebas diarias del *LIMS para Láseres 2015*. Los comentarios adicionales por parte de Yesha Shreshta, Lauren Brandes y Haiping Qi del Servicio Geológico de EEUU (USGS) ayudaron a mejorar *LIMS para Láseres 2015* y el manual del usuario. La versión en castellano ha sido traducida por Lucía Ortega Ormaechea y Luis Araguas-Araguas, de la sección de hidrología isotópica del OIEA.

*En el momento de redactar este manual, Los Gatos Research Inc. vende el equipo láser de tipo OA-ICOS (www.lgrinc.com), mientras que Picarro Inc. Ofrece el equipo láser de tipo CRDS (www.picarro.com). Cualquier uso de nombres comerciales, de firmas o de productos en este manual es sólo con fines descriptivos y no implica aprobación por parte del el Organismo Internacional de Energía Atómica o del Gobierno de los Estados Unidos.

Contenido

| | |
|--|----|
| <i>Prólogo</i> | 2 |
| Contenido | 5 |
| 1 Introducción a LIMS para Láseres 2015 | 8 |
| 1.1 ¿Qué es LIMS para Láseres 2015? | 9 |
| 2 LIMS para Láseres 2015 en un vistazo | 10 |
| 2.1 LIMS para Láseres 2015 en un vistazo | 11 |
| 2.2 Lista de verificación rutinaria para muestras | 12 |
| 3 Requisitos de equipo y software | 13 |
| 3.1 Requisitos de equipo y software | 14 |
| 4 Comenzando con LIMS para Láseres 2015 | 16 |
| 4.1 Configuración LIMS para Láseres 2015 - Nuevo Laboratorio | 17 |
| 4.2 Actualización de LIMS para Láseres 2012 | 21 |
| 4.3 Configurar LIMS para Láseres 2015 v.9 en un laboratorio | 21 |
| 4.4 Inicio rápido la base de datos (backend) | 22 |
| 4.5 Verificación de la versión LIMS para Láseres | 23 |
| 4.6 Personalizar la configuración de laboratorio | 24 |
| 4.7 Localización de la base datos de LIMS para Láseres 2015 | 26 |
| 5 Añadir nuevos instrumentos láser | 27 |
| 5.1 Agregar láser Los Gatos Research de la serie DLT-100 | 28 |
| 5.2 Añadir equipos láser Los Gatos Research de las series AIT-35EP o TIWA-45EP | 29 |
| 5.3 Agregar equipos de Picarro | 32 |
| 6 Clientes, proyectos y muestras | 34 |
| 6.1 Añadir y editar clientes | 35 |
| 6.2 Agregar proyectos y muestras | 37 |
| 6.3 <i>Como crear manualmente un nuevo proyecto</i> | 42 |
| 6.4 Crear un proyecto para $\delta^{17}\text{O}$ | 45 |
| 6.5 Importar un nuevo proyecto utilizando Excel | 48 |
| 6.6 Personalizar formularios de Excel | 50 |
| 6.7 Sugerencias para importar plantillas de Excel | 53 |
| 6.8 Impresión de etiquetas para muestras y viales | 54 |
| | 5 |

| | |
|--|-----|
| 6.9 Búsqueda de proyectos con datos no procesados | 56 |
| 7 Patrones de medición isotópica | 57 |
| 7.1 Patrones isotópicos primarios y de laboratorio | 58 |
| 7.2 Agregar y editar patrones y patrones de control | 60 |
| 7.3 Asignar valores δ a los patrones de laboratorio | 63 |
| 7.4 Seguimiento temporal de los patrones de laboratorio | 66 |
| 8 Plantillas de análisis de muestras | 67 |
| 8.1 Análisis de LIMS para Láseres de 2015 | 68 |
| 8.2. La importancia de plantillas de análisis | 69 |
| 8.3 Plantillas de análisis sistemático | 75 |
| 8.4 Crear una plantilla para 30 muestras en un instrumento de Los Gatos Research | 80 |
| 8.5 Crear una plantilla de análisis de 20 muestras para un instrumento Picarro | 84 |
| 8.6 Imprimir hojas múltiples de muestras | 88 |
| 8.7 Añadir muestras a las plantillas de análisis | 89 |
| 8.8 Añadir muestras a una cola de análisis en un instrumento Picarro | 90 |
| 8.9 Agregar muestras a la cola de análisis del equipo Los Gatos Research | 92 |
| 8.10 Opciones para añadir muestras | 94 |
| 8.11 Eliminación de muestras en una cola | 96 |
| 8.12 Repetición de muestras en LIMS para Láseres 2015 | 98 |
| 8.13 El número siguiente de muestra | 98 |
| 9 Analizar muestras en un láser Picarro | 100 |
| 9.1 Crear una lista de muestra para un instrumento Picarro | 101 |
| 9.2 Importación de datos isotópicos del equipo Picarro | 107 |
| 10 Analizar muestras en un Láser de Los Gatos Research | 112 |
| 10.1 Crear una lista de muestras en un instrumento de Los Gatos Research | 113 |
| 10.2 Importar datos isotópicos del láser Los Gatos Research | 123 |
| 11 Importación de datos - opciones y errores | 129 |
| 11.1 Opciones de importación de datos | 130 |
| 11.2 Mensajes de error de importación de datos | 133 |
| 12 Normalizar, evaluar y guardar resultados | 134 |
| 12.1 Normalizar datos en las escala VSMOW y SLAP | 135 |
| 12.2 Normalizar datos (sin utilizar la normalización en bloques) | 140 |

| | | |
|------|---|-----|
| 12.3 | Evaluar análisis en modo “In progress” | 142 |
| 12.4 | Imprimir o exportar muestras en modo “In Progress” | 147 |
| 12.5 | Almacenar los resultados finales de los proyectos | 148 |
| 12.6 | Agregar resultados almacenados de vuelta a “In Progress” | 150 |
| 12.7 | Evaluación QA/QC de mi laboratorio | 151 |
| 12.8 | Consultar y editar información y resultados de muestras | 153 |
| 13 | Informe de resultados isotópicos | 157 |
| 13.1 | Informe de resultados al cliente | 158 |
| 13.2 | Combinar los resultados de varios proyectos | 163 |
| 13.3 | Facturación de un proyecto | 164 |
| 13.4 | Exportación a un fichero ASCII con el texto de presentación de informes | 165 |
| 14 | Fuentes y calibración de patrones de laboratorio locales | 166 |
| 14.1 | Fuentes primarias de referencia isotópica de agua | 167 |
| 14.2 | Fuentes de patrones de medición para uso diario | 168 |
| 14.3 | Plantillas de análisis para la calibración de patrones de medición Local | 169 |
| 14.4 | Procedimientos de calibración | 172 |
| 15 | Contaminación espectral, preguntas frecuentes, archivos de registro | 176 |
| 15.1 | Acumulación de sal y contaminación espectral | 177 |
| 15.2 | Preguntas frecuentes | 179 |
| 16 | Visor de datos de LIMS | 181 |
| 16.1 | Visor de datos de LIMS | 182 |
| 16.2 | Ordenadores y requisitos de Software | 183 |
| 16.3 | Instalación | 183 |
| | REFERENCIAS | 186 |
| | Notas de cambios en el manual de usuario | 188 |
| | Apéndice 1. Plantillas para muestreadores automáticos series G2000 Picarro | 189 |
| | Apéndice 2. Bases de datos y diseño de plantillas | 193 |
| | Apéndice 3. Corrección de las variaciones en los valores δ con concentraciones de agua variables | 195 |

1 Introducción a LIMS para Láseres 2015

1.1 ¿Qué es LIMS para Láseres 2015?

LIMS para Láseres 2015 es un Sistema de Gestión de Información de Laboratorio (LIMS en sus siglas en inglés) para el espectrómetro láser Los Gatos Research de tipo “fuga en cavidad integrada asimétrica” (en sus siglas en inglés OA-ICOS, off-axis integrated cavity output) y el espectrómetro láser Picarro de absorción tipo CRDS (cavity ring-down spectrometer) utilizados para los análisis de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$ (y, opcionalmente, $\delta^{17}\text{O}$) en muestras de agua líquidas en el marco de estudios hidrológicos y ambientales. *LIMS para Láseres 2015* proporciona un entorno de trabajo cómodo en Windows para gestionar clientes, proyectos, muestras y datos instrumentales. *LIMS para Láseres 2015* también se puede utilizar en un Apple Mac usando Boot Camp o un PC virtual de Windows.

Características

- Sistema completo de gestión de clientes, proyectos y muestras.
- Análisis de muestras láser y plantillas de calibración de patrones internos de laboratorio.
- Pre-procesamiento mediante un gráfico del rendimiento de la jeringa.
- Detección de valores atípicos codificados por color y aviso de error automatizado.
- Correcciones de variación en los valores δ en relación a la concentración de agua.
- Correcciones automáticas de memoria entre muestras.
- Corrección de deriva instrumental automatizada.
- Normalización automatizada de datos a la escala VSMOW-SLAP.
- Seguimiento de QA/QC del laboratorio para el instrumento y la evaluación del desempeño del laboratorio.
- Plantillas de presentación de muestra de cliente en Excel.

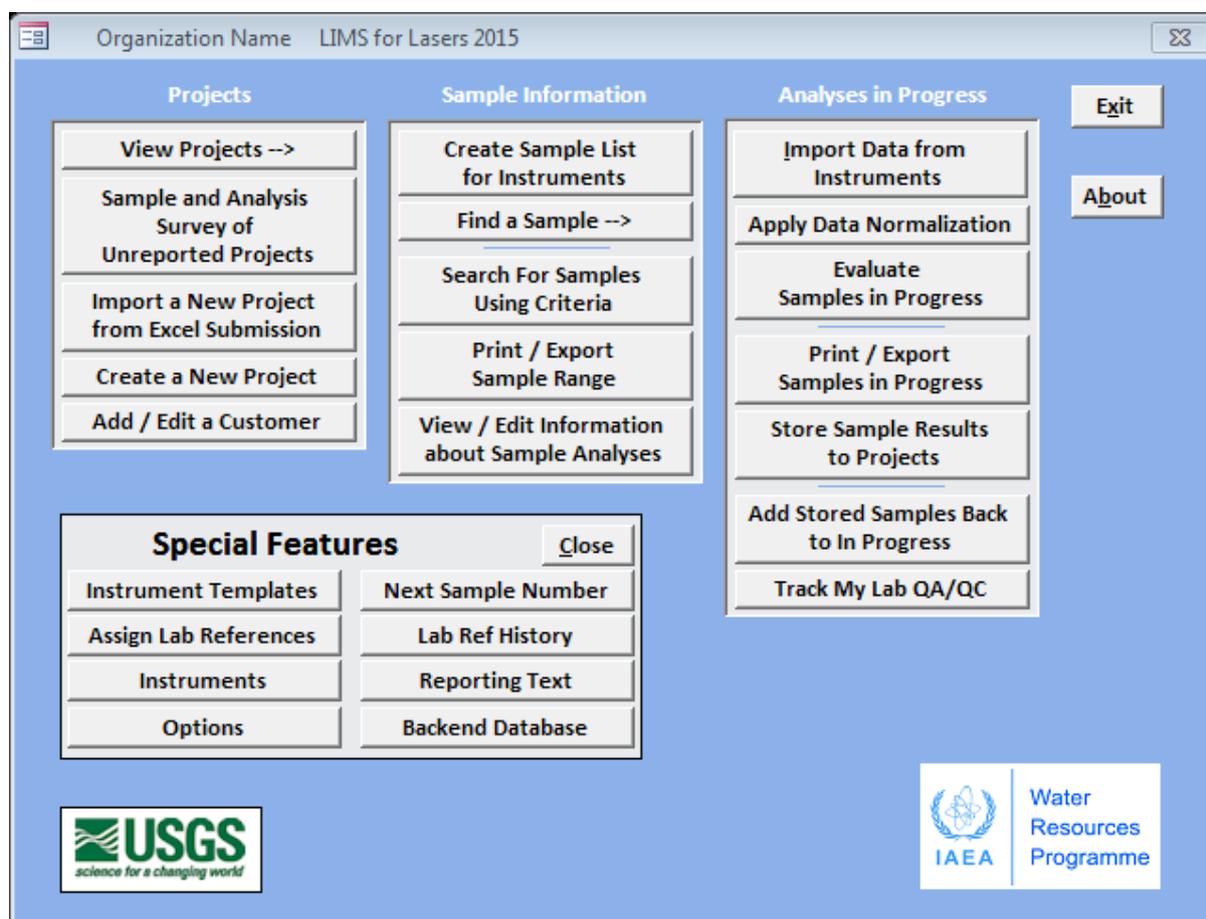
Beneficios

- Mayor productividad mediante la eliminación de hojas de cálculo complejas
- Mejora del rendimiento a largo plazo a través de enfoques estandarizados
- Reducción de error de laboratorio en la gestión de clientes y datos
- Totalmente compatible con *LIMS de isótopos estables ligeros v. 9x* para IRMS

LIMS para Láseres 2015 se construye sobre el código de 32 bits MS Access de *LIMS Isótopos estables ligeros* ^[4], y se puede usar simultáneamente con una base de datos backend v.9 previamente creada. *LIMS de isótopos estables ligeros* es una aplicación de software desarrollada y mantenida por T.B. Coplen en el Servicio Geológico de los Estados Unidos (USGS) en Reston, Virginia, EE.UU. *LIMS para Láseres 2015* es el resultado de un esfuerzo de colaboración entre el Laboratorio de Hidrología Isotópica del OIEA (IHL) y el Laboratorio de Isótopos Estables de Reston (RSIL) del Servicio Geológico de los Estados Unidos (USGS), y se proporciona sin costo para los usuarios.

2 LIMS para Láseres 2015 en un vistazo

2.1 LIMS para Láseres 2015 en un vistazo



La interfaz de usuario de *LIMS para Láseres 2015*.

Proyectos

- Ver proyectos, imprimir informes y exportar datos a Excel.
- Inspeccionar la cola de muestras.
- Importar datos de proyectos desde formularios Excel.
- Crear nuevos proyectos.
- Añadir nuevos clientes.

Características especiales

- Añadir/editar instrumentos láser.
- Añadir/editar normas de laboratorio.
- Copia de seguridad y personalizar la base de datos.
- Plantillas de análisis de diseño.

Información de muestra

- Crear listas de muestras que se pueden importar en instrumentos Los Gatos Research o Picarro.
- Buscar, ver, imprimir y editar muestras específicas de clientes.

Análisis en curso

- Archivos de salida de datos de importación de instrumentos de Los Gatos Research o Picarro.
- Determinar y aplicar automáticamente correcciones de memoria y correcciones de deriva.
- Normalizar los resultados a la escala VSMOW-SLAP.
- Evaluar los resultados y realizar un seguimiento del QA/QC del laboratorio.
- Almacenar los resultados aceptados como finales para los informes.

2.2 Lista de verificación rutinaria para muestras

Una vez que *LIMS para Láseres 2015* está instalado, la siguiente lista de control de procedimiento proporciona una visión rápida para realizar análisis isotópicos de forma rutinaria de muestras de agua:

A. Columna de proyectos

1. Garantizar que el cliente ya existe en LIMS para Láseres 2015 (Capítulo 6.1).
2. Crear un nuevo proyecto para dicho cliente, ya sea introduciendo manualmente la información de la muestra o importando un archivo de Excel (Capítulo 6.3, 6.4).
3. Agregar las muestras de dicho proyecto a la plantilla de cola de análisis para el equipo láser (Capítulo 8.8, 8.9).

B. Ejemplo de columna de información

4. Crear una lista de arranque automática de muestras para el instrumento láser y copiar la misma en una memoria USB (Capítulo 9.1, 10.1).

C. En el laboratorio

5. Pipetear las muestras de agua y los patrones de laboratorio a viales etiquetados de 2 mL.
6. Organizar las muestras y los patrones de laboratorio en las bandejas y en las posiciones correctas (Capítulo 8.3).

D. En el instrumento láser

7. Copiar el archivo con la lista de muestras en el instrumento láser desde una memoria USB (Capítulo 9, 10).
8. Analizar las muestras de dicha la lista de muestras en el equipo láser Los Gatos Research o Picarro.
9. Copiar el archivo de salida de datos de ejecución automática completado en una memoria USB.

E. Columna de análisis en curso

10. Importación de los datos desde el instrumento - por defecto de manera automatizada o a través de correcciones personalizadas (Capítulo 11).
11. Aplicar la normalización de datos (Capítulo 12.1).
12. Evaluar los análisis en curso (Capítulo 12.3).
13. Almacenar los datos aceptados como finales al proyecto (Capítulo 12.5).
14. Seguimiento del QA/QC del laboratorio para evaluar el rendimiento general (Capítulo 12.7).

F. Columna de Proyectos

15. Ver Proyectos - Informe de los resultados a los clientes (Capítulo 13.1).

3 Requisitos de equipo y software

3.1 Requisitos de equipo y software

Necesario

- PC con Windows con conexión USB o LAN a un instrumento láser. *LIMS para Láseres 2015* se puede utilizar en un ordenador Apple usando Boot Camp de Windows o PC virtual de Windows.
- Microsoft Access 2007/2010/2013 / 2016 (solo 32 bits) para Windows 7/8 0.1 / 10 (32/64-bit).
- *Interfaz de LIMS para Láseres 2015* (v. 10.092 o posterior).
- Una base de datos nuevos o existentes de dentro de la aplicación LIMS para usuarios actuales.
- Una ubicación nueva o existente carpeta LIMS para la base de datos de la aplicación (de red o PC).
- Una plantilla para envío de muestras – puede ser una hoja de cálculo Excel o una alternativa (ejemplo disponible desde la página web del USGS).

El software LIMS para Láseres 2015 se compone de 3 elementos:

- Interfaz *LIMS para Láseres 2015* (v 10.092).
- La base de datos de la aplicación *LIMS para Láseres 2015*.
- Una plantilla Excel para la gestión de muestras de clientes.

El software más reciente se puede descargar gratuitamente desde las páginas web del OIEA o del USGS:

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

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

Opcional

- Una conexión de red con el (los) instrumento(s) láser.
- Un disco de copia de seguridad (red o ubicación de almacenamiento externo).

Configuraciones de seguridad

LIMS para Láseres 2015 requiere activar el uso de macros. Es posible que necesite tener derechos de administrador del equipo para cambiar esta configuración. Para habilitar la ejecución de macros en MS Access acceda a |Centro de confianza| Configuración del Centro de confianza| Configuración de macros |*Habilitar todas las macros*.

Configuración de ubicaciones de confianza

LIMS para Láseres requiere ubicaciones de confianza en Microsoft Access. Por ejemplo,

suponga que C: \ LIMS es la ubicación de la base de datos. Necesitaremos agregar este directorio a las ubicaciones de confianza en MS Access:

Acceso 2010/13: Pestaña Archivo | Opciones | Centro de confianza | Configuración del Centro de confianza | Ubicaciones de confianza | Añadir nueva ubicación | Ruta de acceso: C: \ LIMS, casilla de verificación: Las subcarpetas son de confianza, haga clic en "Aceptar"

Access 2007: Botón de Office | Opciones de acceso | Centro de confianza | Configuración del Centro de confianza | Ubicaciones de confianza | Añadir nueva ubicación | Ruta: C: \ LIMS, casilla de verificación: Las subcarpetas son de confianza, haga clic en "Aceptar".

Nota: Ciertas políticas de tecnología de la información (IT en sus siglas en inglés) no permiten el uso del Escritorio de Windows como una ubicación de confianza.

4 Comenzando con LIMS para Láseres 2015

4.1 Configuración LIMS para Láseres 2015 - Nuevo Laboratorio

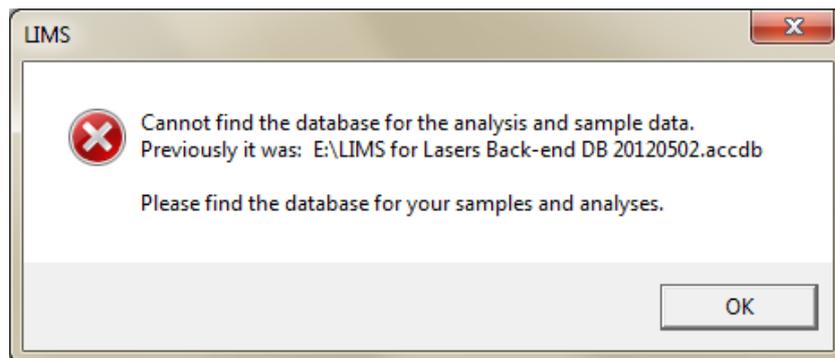
1. Crear una carpeta para *LIMS para Láseres 2015* en cualquier unidad de disco duro de su PC para la interfaz de usuario, la base de datos en Access y las copias de seguridad (por ejemplo, C:\LIMS). La carpeta LIMS debe estar ubicada en un ordenador específicamente dedicado a LIMS o en una unidad de red fiable (y preferiblemente rápida):
 - a. C:\LIMS\Backend
 - b. C:\LIMS\Frontend
 - c. C:\LIMS\Copias de seguridad
2. Asegúrese que Microsoft Access 2007/10/13/16 (32 bits) está instalado. Asegúrese que MS Access tenga acceso a C:\LIMS y a las subcarpetas agregadas como ubicaciones de confianza (consulte el capítulo anterior).
3. Descargar y extraer una versión *no utilizada previamente* de la última interfaz de *LIMS para Láseres 2015* (por ejemplo LIMS para Láseres 2015 10.092.zip) en C:\LIMS\Frontend.
4. Descargar y extraer una copia de la aplicación *no utilizada previamente* para el instrumento específico del nuevo laboratorio (por ejemplo aplicación LIMS (backend) para Picarro.zip) en C:\LIMS\Backend.
5. Considere cambiar el nombre de la base de datos principal (backend) LIMS a un nombre más descriptivo de su laboratorio, por ejemplo “Mi Laboratorio LIMS backend.accdb”.
6. Guarde copias de seguridad de los archivos ZIP sin abrir los originales para su custodia.

En la carpeta Frontend, abra el archivo de *LIMS para Láseres 2015* 10.092 accdb, o una versión posterior. También puede crear un acceso directo de Windows a este archivo en su escritorio para facilitar el acceso.

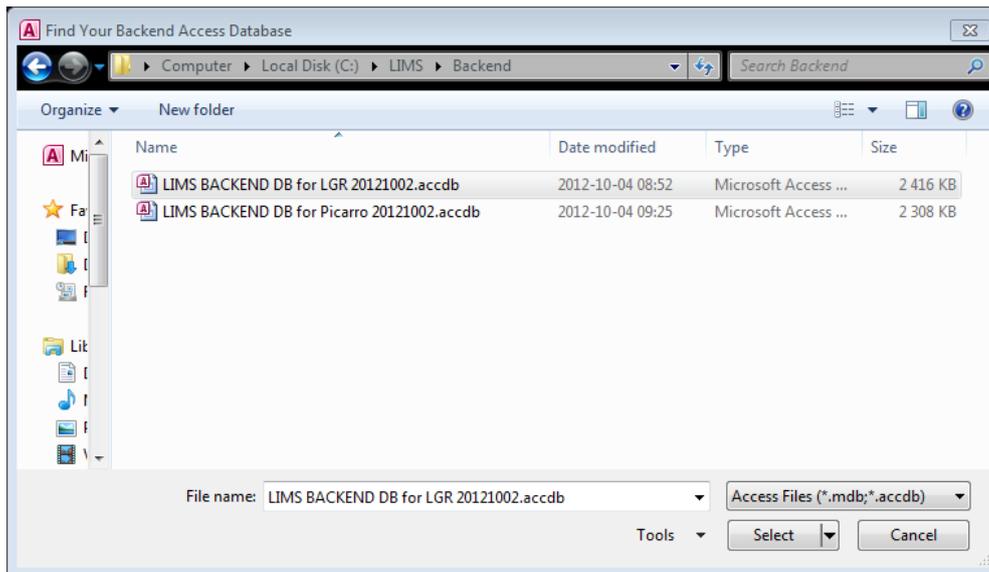
8. Si se encuentra con la advertencia de seguridad a continuación, “Ubicaciones de confianza” no se han configurado correctamente - vea la sección anterior:



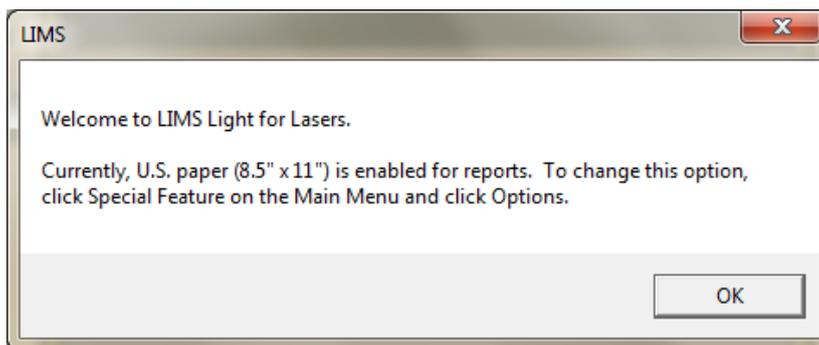
9. Haga clic en "Abrir" (la advertencia no aparecerá si las ubicaciones de confianza se establecen correctamente).
10. LIMS para Láseres de 2015 le pedirá la ubicación de la base de datos "Backend".



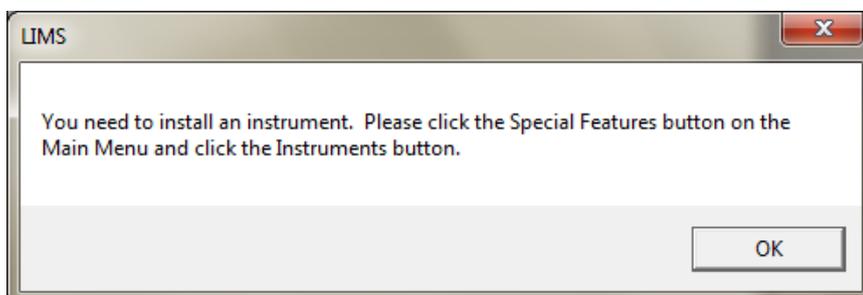
11. Haga clic en "Aceptar" y utilice el cuadro de diálogo de archivo para navegar a C:\LIMS\ backend y "Seleccionar" Picarro o Los Gatos Research o el archivo de la base de datos recientemente renombrado y copiado anteriormente en el paso 4 o 5.



12. A continuación, aparecerá un mensaje de bienvenida, haga clic en Aceptar (aparecerá una advertencia de seguridad si las ubicaciones de confianza no han sido correctamente configuradas), haga clic en "Seleccionar":

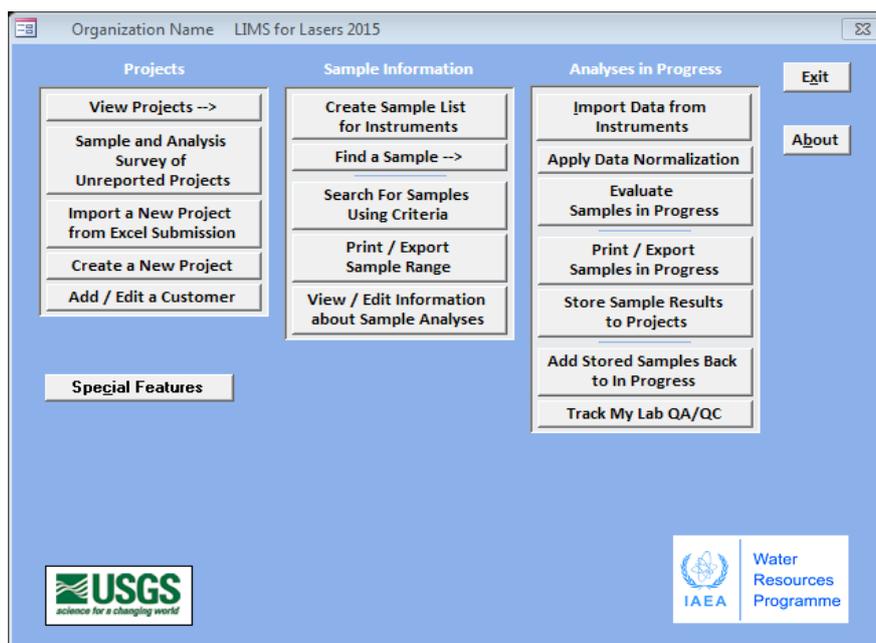


13. Puede aparecer una nota-recordatorio, que indica que debe instalarse un instrumento láser en la base de datos del laboratorio. Haga clic en "Aceptar". Puede también aparecer otro recordatorio sobre la creación de copias de seguridad diarias. En tal caso, haga clic en "Aceptar" otra vez.



13. Si *LIMS para Láseres de 2015* se ha instalado correctamente, esta debe ser la pantalla al iniciar la aplicación:

14.



LIMS para Láseres 2015 portada.

Registro de apoyo

Es una buena idea registrar *LIMS para Láseres 2015* por correo electrónico tbcoplen@USGS.gov. El registro le garantiza que estará informado acerca de actualizaciones importantes. Del mismo modo, se agradece recibir sugerencias por parte de los usuarios para mejorar *LIMS para Láseres 2015*, informe de errores y sugerencias de mejoras en el manual del usuario.

Nota: Para Europa y para otros usuarios, la configuración Regional de Windows en el ordenador del Panel de Control puede tener un punto o una coma como separador decimal. *LIMS para Láseres 2015* funcionará correctamente con cualquier opción; las figuras en este manual fueron creadas con un punto como separador decimal.

4.2 Actualización de LIMS para Láseres 2012

Aquellos laboratorios que utilizan *LIMS para Láseres* original (por ejemplo, < v.10.69) de 2012, *deberán* seguir el mismo procedimiento para un nuevo laboratorio (arriba), pero utilizando el archivo de base de datos existente de *LIMS para Láseres*. Deberá reiniciar el sistema *LIMS para Láseres 2015*. La base de datos principal existente permanece invariable.

4.3 Configurar LIMS para Láseres 2015 v.9 en un laboratorio

Para los laboratorios que usan *LIMS para v.9x de isótopos estables ligeros*, siga el mismo procedimiento para un nuevo laboratorio (indicado previamente), pero utilice el directorio de servidor existente de LIMS v.9x. Algunas advertencias en los párrafos previos no son relevantes. En el paso 11, seleccione la base de datos principal (backend) LIMS (v.9x) existente. Deberá reiniciar el sistema *LIMS para Láseres 2015*.

Nota: Cuando se utiliza una base de datos v.9x (backend), sólo la "W" (ej.: agua (water) $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$) y los instrumentos Láseres serán visibles para el usuario. Esto es intencional: los espectrómetros de masas de isótopos estables (IRMS) o cualquier otro equipo de medición de isótopos (ej. C -> carbonatos, S > azufre, etc.) no serán visibles, *aunque están todavía presentes en la base de datos principal (backend)*. Los resultados de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$ de las muestras de agua analizadas por IRMS también aparecerán en *LIMS para Láseres 2015*, y pueden ser evaluados con los valores δ de un instrumento de láser. No existe riesgo para la base de datos principal (backend), y todas las preferencias de v.9x se conservan. Es posible cambiar de un modo a otro entre *LIMS para isótopos estables ligeros* y *LIMS para Láseres 2015*. El personal de laboratorio que utiliza solamente instrumentos de láser, por ejemplo, puede preferir utilizar sólo *LIMS para Láseres 2015* por sus nuevas características.

Nota: Cuando se agregan nuevos proyectos de isótopos de agua usando v.9x, se alertará al usuario en el arranque de *LIMS para Láseres 2015* que un proyecto ha sido creado con *LIMS para v.9x de isótopos estables ligeros*. Este aviso sólo es informativo.

4.4 Inicio rápido la base de datos (backend)

En los capítulos siguientes de este manual, se describe cómo utilizar *LIMS para Láseres 2015*, cómo añadir nuevos instrumentos Láseres, como diseñar y crear nuevas plantillas de análisis, cómo medir y normalizar los datos y cómo presentar los resultados. La información de este manual debe ser estudiada para entender completamente el software.

Para conseguir que los nuevos usuarios utilicen rápidamente el software, se proporciona de manera separada una base de datos backend ya preparado de *LIMS para Láseres 2015* y plantillas de análisis para los Láseres Los Gatos Research y para Picarro. Estas bases de datos backend son descargables (ver capítulo 3.1) y se sobreentiende que:

- El software del Picarro tiene como identificación el prefijo "P" (por defecto).
- El software de Los Gatos Research tiene como prefijo de identificación "L" (por defecto).
- Utiliza plantillas de 10, 20 o 30-muestras de acuerdo a las normas del laboratorio del USGS.
- Los valores isotópicos de los patrones internos de laboratorio y de control son proporcionados en los archivos y *deben ser editados por el usuario* – inicialmente éstos patrones contienen valores nulos, o bien con los valores de aguas de referencia del USGS.

Para los usuarios de Los Gatos Research:

1. Descargar la base de datos de backend de Los Gatos Research para *LIMS para Láseres 2015* desde el enlace proporcionado arriba.
2. Ver los capítulos 4 – 8 para personalizar el backend de *LIMS para Láseres 2015*, y editar o añadir sus patrones internos y crear las plantillas de análisis.
3. Vaya a capítulo 8.9 para comenzar a medir muestras.

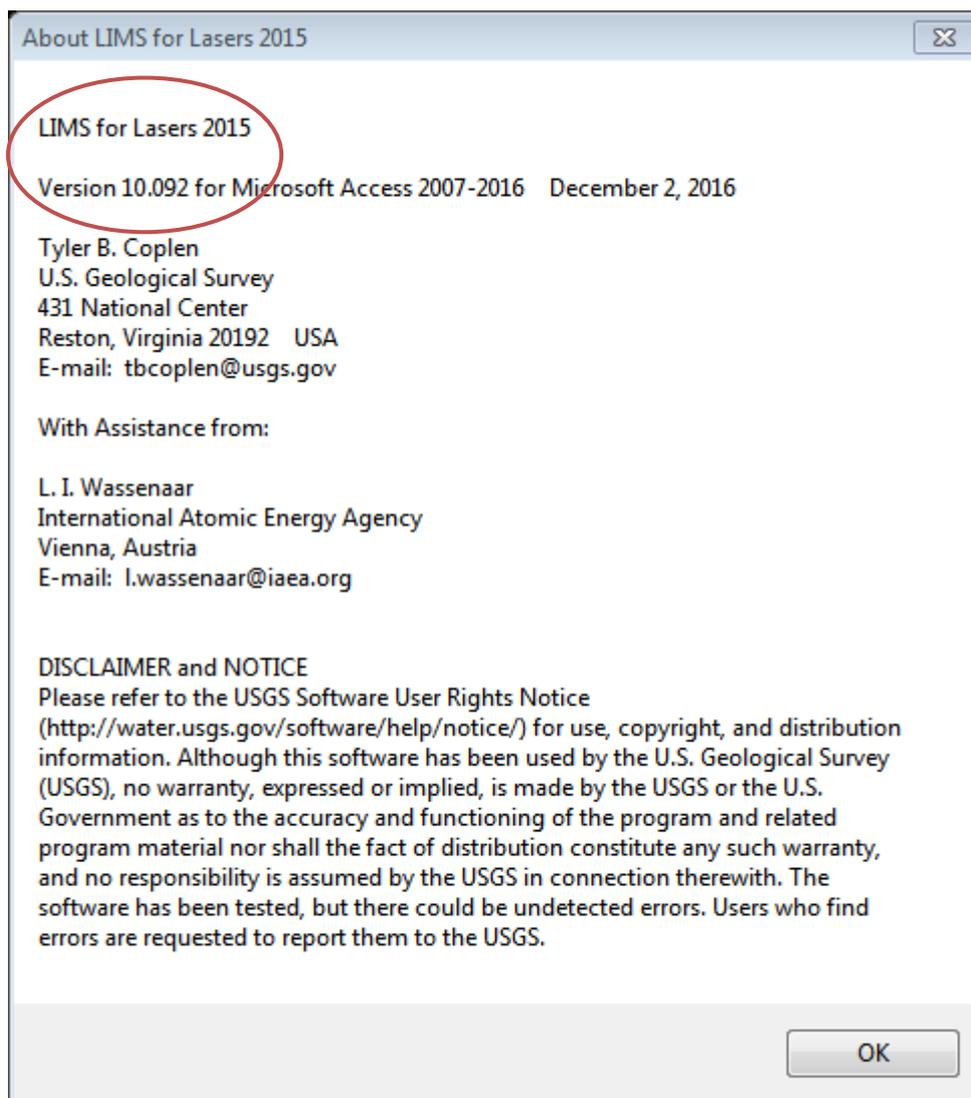
Para los usuarios de Picarro:

1. Descargar la base de datos backend de Picarro para *LIMS para Láseres 2015* desde el enlace proporcionado arriba.
2. Ver los capítulos 4 – 8 para personalizar la base de datos backend de *LIMS para Láseres 2015*, y editar o añadir sus patrones internos y crear las plantillas de análisis.
4. Vaya a capítulo 8.8 para comenzar a medir muestras.

4.5 Verificación de la versión LIMS para Láseres

El software de *LIMS para Láseres* se actualiza continuamente siguiendo los comentarios de los usuarios. Las actualizaciones se publican en los enlaces de las webs mencionadas. Para determinar qué versión de *LIMS para Láseres* tiene, haga clic en el menú "Acerca de" en la Página principal (véase abajo).

Para actualizar el *LIMS para Láseres*, descargar el nuevo archivo zip y extraer a la interfaz de usuario. Siga los pasos 3 y 7 de la sección 4.1. Si ha creado en escritorio un "acceso directo" a la carpeta de la interfaz, asegúrese de actualizar el acceso directo a la versión más reciente.



4.6 Personalizar la configuración de laboratorio

Antes de añadir un instrumento láser al software *LIMS para Láseres 2015*, debe realizar sus propias personalizaciones de laboratorio (ubicación, nombre del laboratorio, tamaño de papel, impresoras, etcétera). Estas personalizaciones crean un nuevo archivo en el directorio LIMS denominado "LM9PREFS.ACCDB", que contiene los datos de su laboratorio. Dependiendo de la configuración del equipo, la extensión de archivo ACCDB puede no ser visible.

El archivo de "Preferencias" debe residir en el mismo directorio que el archivo de la interfaz de usuario (**frontend**) de LIMS. Si por error se elimina el archivo LM9PREFS, se perderán las personalizaciones y LIMS volverá a los valores predeterminados si se instala una actualización de la interfaz de usuario para *LIMS para Láseres 2015*. Sin embargo, si mueve la interfaz de usuario en una carpeta nueva y se olvida de mover el archivo LM9PREFS.ACCDB, *LIMS para Láseres 2015* creará otro archivo de preferencias con la configuración personalizada de laboratorio.

Para protegerse contra el borrado y entradas erróneas, todos los formatos editables en *LIMS para Láseres 2015* requieren que el usuario haga clic en el botón **"Editar"** en la parte superior de la pantalla antes de hacer ediciones. Esto puede ser confuso al principio, pero recuerde que esta función ¡es para su protección! Piense en **"Haga clic en Editar"** - y se convertirá en un hábito rutinario.

En la página principal: haga clic en "Características especiales" / Opciones ("Special Features" / Options). Haga clic en "Editar" (Edit) - el control ahora cambia a "Guardar"(Save).

- Introduzca el nombre de su organización; Seleccione su país y el tamaño del papel de impresión.
- Elegir "Cualquier impresora instalada" (Any Installed Printer) se abrirá un cuadro de diálogo de Impresora de Windows, en lugar de ir directamente a la impresión en la impresora de Windows predeterminada.
- Maximizar la interfaz de LIMS a página completa.
- La opción de crear facturas a clientes es opcional, puede activarse o desactivarse cuando lo desee.
- La identificación (ID) de cada muestra y la información abreviada sobre el proyecto aparece con más detalles al imprimir el listado de muestras; esto es opcional dependiendo del laboratorio.

La personalización de las opciones por el usuario se presenta en el capítulo 6.5. La capacidad de facturación se muestra en el capítulo 13.3. Cuando termine, haga clic en "Guardar" (Save), cerrar (Close) y cerrar otra vez para volver a la página principal.

Options Edit Close

General Preferences

Organization name:

Default country: ▼
Used in forms

Paper Size for Reports

US letter

A4

Print Destination

Default Printer

Any Installed Printer

Use meters as default for distances instead of feet

Maximize LIMS Main Menu form

Include Sample ID and abbreviated project information on printout of List of Samples to be analyzed

Display Invoices

Names for Samples Form and for Excel

File to Import New Projects

Sample ID:

User Def Caption 2:

User Def Caption 3:

User Def Caption 4:

User Def Caption 5:

User Def Caption 6:

Caption 7:

Other Info:

Top:

Bottom:

4.7 Localización de la base datos de LIMS para Láseres 2015

Es una buena idea para garantizar el respaldo de su base de datos (**backend**) de *LIMS para Láseres 2015* que la ubicación de las copias de seguridad sea configurada permanentemente, y que se genere con frecuencia una copia de seguridad.

1. Haga clic en "Características especiales" (Special Features).
2. Haga clic en "Base de datos" (Backend Database) –donde aparece la siguiente pantalla:

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. Close

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:
C:\DUMP\LIMS BACKEND DB FOR LGR 20121002.ACCDB

Connect to a Different Back-end Database

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

Country/Location Codes

Version of Country/Location Codes in Backend DB
2012

Update Country/Location Codes

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:
Q:\LIMS Archive\

Change Location

Front-end LIMS database

Front-end Database Location and Name:
C:\Dump\LIMS_for_Lasers 10_071b.accdb

Always compact LIMS front-end database when closing LIMS

3. La ubicación de la base de datos principal (Backend Database location) revelará la ubicación asignada anteriormente. Si no, haga clic en "Conectar a un servidor diferente de base de datos" (connect to a Different Backend Database) y desplácese hasta la carpeta de base de datos de destino donde se encuentra el backend de LIMS.
4. La opción "compactar la base de datos principal de LIMS" (connect to a Different Backend Database) será recordada cuando sea necesario.
5. Activar (o desactivar) las copias de seguridad (Backups) y especifique su ubicación. LIMS utiliza un ciclo de copia de seguridad de 7 días (por ejemplo, una copia hecha un lunes es reemplazada el siguiente lunes). Esta opción proporciona 1 semana de protección.

Nota: Las copias de seguridad sólo se realizan cuando se cierra el LIMS para Láseres 2015. No se realizan copias de seguridad de manera automática. Se recomienda utilizar otras formas regulares para automatizar el proceso de generar copias de seguridad adicionales (red, DVD, memoria USB, la nube, etcétera).

5 Añadir nuevos instrumentos láser

5.1 Agregar láser Los Gatos Research de la serie DLT-100

Para ver, instalar o desinstalar Láseres Los Gatos Research series DLT-100/24D del 2007 – 2013 en *LIMS para Láseres 2015*:

1. Haga clic en "Características especiales" (Special Features).
2. Haga clic en "Instrumentos" (Instruments) para ver.

En la pantalla siguiente, haga clic en "Agregar".

The screenshot shows the 'Instruments' window in the LIMS software. The window title is 'Instruments'. The toolbar includes buttons for 'List', navigation arrows, 'L', 'Add', 'Delete', and 'Close'. The 'Add' button is highlighted with a red arrow. The main area contains a form titled 'General Information and Preferences'. The form has the following fields and options:

- Instrument ID:** A dropdown menu with 'L' selected. A red arrow points to this field.
- Short Name:** A text input field containing 'LGR'.
- Sample Export Format:** A dropdown menu with 'Los Gatos Research' selected.
- Check for missing analyses when opening LIMS
- $\delta^{17}\text{O}$ Capability
- Number of injections of each sample to Ignore:** A numeric input field containing '4'. A red arrow points to this field.

Ejemplo: Instrumento de la generación anterior de Los Gatos Research serie DLT-100.

3. Seleccione o escriba "L" en el cuadro "Instrument ID".
4. Introduzca un nombre descriptivo corto para el instrumento de Los Gatos Research.
5. En la lista de selección "Formato de exportación de muestra" (Sample Export Format), elija "Los Gatos Research".

Para quitar un instrumento de Los Gatos Research, haga clic en "Eliminar" (Delete).

Si los análisis isotópicos del instrumento ya se han importado en *LIMS para Láseres 2015*, el instrumento no se puede eliminar.

5.2 Añadir equipos láser Los Gatos Research de las series AIT-35EP o TIWA-45EP

Para ver, instalar o desinstalar nuevos Láseres (2014-presente) de Los Gatos Research series AIT-35EP o TIWA 45-EP en *LIMS para Láseres 2015*:

1. Abrir *LIMS para Láseres 2015*.
2. Haga clic en "Características especiales" (Special features).
3. Haga clic en "Instrumentos" (Instruments).
4. Haga clic en "agregar" (Add). A continuación, editar como se describe a continuación.
- 5.

The screenshot shows the 'Instruments' configuration window. The 'General Information and Preferences' section contains 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
- 4 Number of injections of each sample to Ignore

The 'δ¹⁷O Information and Preferences' section contains the following option:

- δ¹⁷O Capability

Ejemplo: Series más recientes de Los Gatos Research TIWA 45 EP.

6. Seleccione o escriba "L" en el cuadro (Nota: esta letra puede ser cambiada en el instrumento y debe coincidir con el prefijo en el archivo de salida del instrumento).
7. Introduzca un nombre descriptivo corto para el instrumento de Los Gatos Research.
8. En la lista de selección "Muestra de exportación formato" (Sample Export Format), elija "Los Gatos Research 2014".
9. Opcionalmente, si el instrumento mide δ¹⁷O, seleccione la casilla δ¹⁷O Capability.
10. Haga clic en "Guardar" (Save), luego haga clic en "Lista" (List)- el nuevo instrumento de Los Gatos Research debe aparecer aquí.

Para quitar un instrumento de Los Gatos Research, haga clic en "Eliminar" (Delete).

Si los análisis isotópicos del instrumento ya se han importado en *LIMS para Láseres 2015*, el instrumento no se puede eliminar.

Número de inyecciones

Para obtener mejores resultados en los instrumentos de Los Gatos Research recomendamos un total de 9 inyecciones por muestra y se recomienda ignorar las primeras 4 inyecciones (como se establece en la configuración del equipo). Ver justificación en capítulo 8.2.

El número de inyecciones ignoradas es *específico por instrumento* y debe ser menor que el número total de inyecciones de muestra, como se define en la "plantilla de análisis" (Analysis Template).

Prefijo de número de instrumento

El instrumento ID prefijo "L" está preestablecido por defecto en los nuevos instrumentos de Los Gatos Research. Para laboratorios con dos o más instrumentos de Los Gatos Research, el código de identificación debe ser único para cada instrumento (L, M, N...).

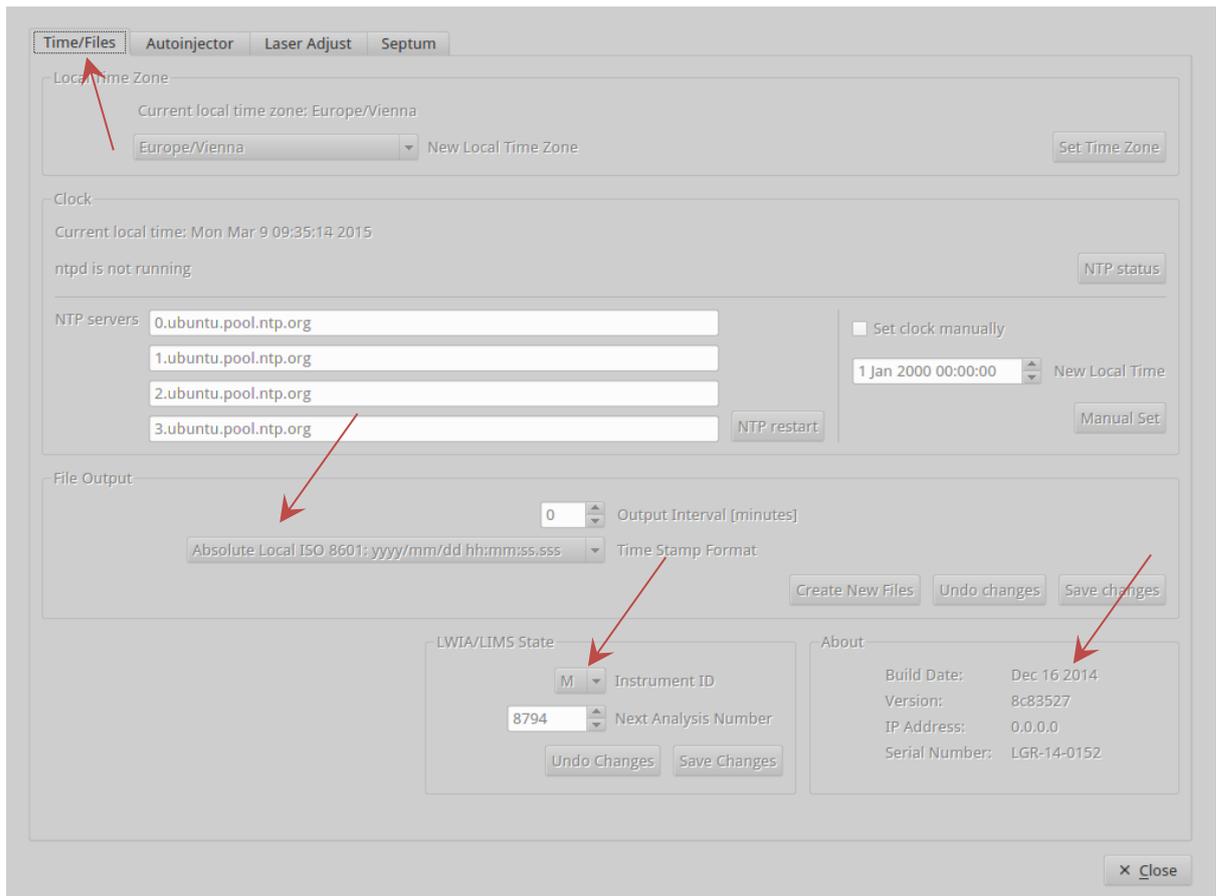
- En instrumentos más antiguos de DLT-100/24D (software LGR de primera generación), cambiar el prefijo de instrumento requiere acceso al soporte de LINUX en el instrumento de Los Gatos Research y una edición de menor importancia en un archivo INI del instrumento. Póngase en contacto con Los Gatos Research para obtener instrucciones sobre cómo cambiar el prefijo ID del instrumento predeterminado en instrumentos más antiguos.
- En modelos más recientes LIWA/TIWA-35/45EP (nuevo software, 2014-presente), el prefijo de instrumento se puede cambiar fácilmente en el panel de configuración del instrumento (véase el manual de usuario de Los Gatos Research LWIA/TIWA y la imagen en la página siguiente).

¿El botón de LIMS esta gris en el instrumento de Los Gatos Research?

- Algunos modelos LIWA/TIWA-35/45EP no tienen la opción de LIMS implementada. No se puede ver ningún botón o el botón de LIMS estará de color gris en la pantalla principal.
- Para corregir esto, es necesario realizar una actualización de firmware en Los Gatos Research, que puede ser instalado por el usuario en unos 10 – 15 minutos. La versión de firmware requerida debe ser marcada en el instrumento, bajo la configuración -> pestaña de archivos. En el apartado inferior derecho comprobar la fecha de software (ver figura en la siguiente página). Las posibilidades son:
 - Construido (Build) el 06 de agosto de 2015 o en fecha posterior, para instrumentos de análisis duales de isótopos de la molécula del agua.
 - Construido (Build) el 16 de diciembre de 2014 o en fecha posterior, para instrumentos de análisis de tres isótopos de la molécula del agua.

El formato de fecha requerido para la salida de LIMS

- El formato de fecha requerida para LIMS es "Absolute Local ISO 8601". Para comprobar ir a Configuración -> pestaña de archivos y si es necesario cambiar al ajuste correcto (ver figura en página siguiente).



Cambiar el prefijo ID del instrumento Los Gatos Research y el formato de la fecha en la pestaña de archivos (Time/File).

PRECAUCIÓN: Si tiene múltiples instrumentos láser, **jasegúrese de que no tienen la misma letra ID de instrumento!** *LIMS para Láseres 2015* rastrea los datos de muestra de cada instrumento vía el prefijo ID del instrumento.

PRECAUCIÓN: Si envía su instrumento a reparar y Los Gatos Research reemplaza el disco duro, compruebe que la empresa restablece el prefijo designado y los valores de análisis en el instrumento en el momento de devolución.

5.3 Agregar equipos de Picarro

Para ver, instalar o quitar un láser Picarro (generaciones 11xx a 2xxx) en *LIMS para Láseres 2015*:

1. Abra *LIMS para Láseres 2015*.
2. Haga clic en "Características especiales" (Special Features).
3. Haga clic en «Instrumentos» (Instruments) para ver.

En la pantalla siguiente, haga clic en "Agregar" (Add).

The screenshot shows the 'Instruments' dialog box. 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: 'Instrument ID' (dropdown menu with 'P' selected), 'Short Name' (text field with 'Picarro 2140i'), 'Sample Export Format' (dropdown menu with 'Picarro' selected), an unchecked checkbox for 'Check for missing analyses when opening LIMS', and a spin box for 'Number of injections of each sample to Ignore' set to '4'. The second section, 'δ¹⁷O Information and Preferences', contains a checked checkbox for 'δ¹⁷O Capability'. Red arrows point to the 'Instrument ID' dropdown, the 'Sample Export Format' dropdown, and the 'δ¹⁷O Capability' checkbox.

4. Enter "P" en el cuadro Instrument ID.
5. Introduzca un nombre descriptivo corto para el instrumento Picarro.
6. En el "Formato de análisis de importación"(Sample Export Format) en el menú desplegable, seleccione Picarro. Si el instrumento Picarro es un 2140i o posterior con capacidad para medir δO¹⁷, seleccione la casilla δ¹⁷O Capability.
7. Haga clic en "Guardar" (Save), luego haga clic en "Lista" (List) - el nuevo instrumento Picarro debe aparecer aquí.

Para obtener los mejores resultados en Picarro, se recomienda un total de 8 inyecciones por muestra e ignorar las primeras 4 inyecciones (Number of injections of each sample to Ignore). Ver justificación en capítulo 8.2.

Para quitar un instrumento Picarro, haga clic en "Eliminar".

Si el análisis de un instrumento Picarro ya se han importado en *LIMS para Láseres 2015*, el instrumento no se puede eliminar.

Número de inyecciones

El número de inyecciones ignoradas es *específico por instrumento*. El número total de inyecciones para cada muestra de agua en Picarro puede ser configurado en el dispositivo portátil PAL (PAL handheld device) (p. ej. 11xx serie) o en el Software de configuración del muestreador automático de G2000 (G2000 Autosampler Configurator Software) (por ejemplo, serie 21xx).

Prefijo de número de instrumento

El prefijo "P" de identificación está codificado en el software del Picarro Coordinador INI. Para los laboratorios que tengan dos o más instrumentos Picarro este código debe ser único para cada instrumento (P, Q, T). Para ello será necesario editar manualmente los archivos de Coordinator.ini utilizando un NotePad ++ y simplemente cambiando en el encabezado de "Prefijo de instrumento" (Instrument prefix) la letra elegida.

Nota: Hay varios archivos INI por cada método (por ejemplo, alta precisión, alto rendimiento, ¹⁷O en el N₂, etcétera). Por lo tanto, se requiere cambiar el prefijo de instrumento en varios archivos INI si utiliza varios modos. No es una tarea difícil; por favor comuníquese con la empresa Picarro para obtener instrucciones detalladas sobre cómo cambiar el ID de prefijo de instrumento por defecto en la configuración de su instrumento.

PRECAUCIÓN: ¡Si tiene múltiples instrumentos láser, asegúrese de que no tienen la misma letra de identificación del instrumento! *LIMS para Láseres 2015* rastrea los datos de muestra de cada instrumento vía el prefijo ID del instrumento.

PRECAUCIÓN: Si envía su instrumento a reparar y Picarro reemplaza el disco duro, compruebe que la empresa restablece el prefijo designado y los valores de análisis del instrumento en el momento de devolución.

6 Clientes, proyectos y muestras

6.1 Añadir y editar clientes

Antes de que las muestras de agua pueden ser analizadas y registradas utilizando *LIMS para Láseres 2015*, dichas muestras deben estar asociadas a un "Cliente" y a su "Proyecto". Un cliente suele ser el responsable del entregar una plantilla con las muestras a analizar y la persona a quien deben entregarse los resultados obtenidos de los análisis. Un cliente puede ser un laboratorio y un técnico de laboratorio. *LIMS para Láseres 2015* da seguimiento a todos los clientes del laboratorio y la información asociada con sus datos.

Una *lista de clientes* puede ser completada previamente por varios clientes, o bien los clientes pueden agregarse individualmente con el paso del tiempo. Asegúrese siempre de que existe un cliente antes de intentar crear un proyecto nuevo. Se debe prestar atención a la ortografía y evitar la duplicación del mismo nombre del cliente (por ejemplo, Bill Smith, William Smith).

Para agregar a un nuevo cliente:

1. En la Página principal de LIMS, haga clic en "Agregar/editar un cliente" (Add/Edit a Customer) en la columna de proyectos.
2. Haga clic en "Agregar" (Add).
3. Ingresar apellido, nombre y otra información de contacto y dirección opcional.
4. Haga clic en "Guardar" (Save) y luego en "Lista" (List) para ver la lista actual de clientes.
5. Para eliminar un cliente, haga clic en "Borrar" (Delete).



The screenshot shows a web application window titled "Customers". At the top, there is a navigation bar with buttons for "List", "Edit", "Add", "Delete", and "Close". The "Add" button is highlighted with a red arrow. Below the navigation bar is a form titled "General Information" with the following fields:

| | | | |
|------------------|------------------------------------|------------|---------------------|
| 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: | | | |

La *información mínima* requerida para añadir un cliente es *Apellido* y *nombre*; todos los demás campos son opcionales. La información del cliente puede ser actualizada más adelante seleccionando

el nombre del cliente en el menú "Lista" (list) y haciendo clic en "Editar" (Edit). Los clientes "Referencia" (Reference) y "Prueba" (Test) son entradas pre-establecidas y pueden usarse para ejecutar las pruebas de laboratorio o muestras de calibración o patrones.

Nota: No se puede borrar un cliente si su proyecto ya ha almacenado datos isotópicos.

6.2 Agregar proyectos y muestras

Un proyecto se define como un conjunto de muestras presentado por un cliente para el análisis de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}/\delta^{17}\text{O}$ para un fin determinado o desde una ubicación específica (Nombre del proyecto, Ubicación, etc.).

LIMS para Láseres 2015 tiene pre-instalados proyectos para la medida de “Materiales de Referencia” o “Patrones Primarios” (VSMOW2, SLAP2) y para los propios patrones internos de cada laboratorio. Se incluye asimismo un proyecto de prueba (test) – suele emplearse para muestras no reales o bien para muestras ya conocidas. Estos proyectos no se deben eliminar. Tanto los patrones internos de laboratorio como muestras de aguas para pruebas de medición en el laboratorio se pueden agregar y editar dentro de estos proyectos.

Los nuevos proyectos de cada cliente se crean de dos maneras:

- Añadiendo manualmente un cliente y toda la información de las muestras.
- Importando automáticamente las muestras del cliente utilizando una plantilla de Excel.

La segunda opción puede ser la preferida, ya que contiene la información suministrada por el cliente y por lo general acompaña al envío de las muestras de agua al laboratorio. Importar dicha información desde una plantilla de Excel es la opción preferida en LIMS ya que asegura que no haya errores tipográficos por parte del personal del laboratorio (ver plantillas de 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 |

La página resumen de proyectos.

Búsqueda de proyectos

Como los proyectos se acumulan en la base de datos con el tiempo, *LIMS para Láseres 2015* incluye funciones de búsqueda para localizar rápidamente datos y proyectos de clientes. Se pueden buscar proyectos utilizando una combinación de criterios de información (completa o parcial):

- Nombre del cliente
- Propósito: contiene el texto especificado
- Antes o después de unas fechas especificadas
- Proyectos terminados o sin terminar
- Ubicación del proyecto; contiene el texto de la ubicación especificada, e.j. Texas

Clasificación de proyectos

Se puede hacer una clasificación rápida de proyectos haciendo clic en el encabezado deseado, como por ejemplo Fecha de entrada, Apellidos del cliente, Código de Identificación, Ubicación, Fecha de entrega de resultados, etc.

Presentación de informes y exportación de proyectos

Buscar, exportar y combinar múltiples proyectos en un solo informe o archivo de Excel único o combinado se realiza en la página de resumen del proyecto. En el listado resumen (Summary list), aquellos resultados buscados se pueden organizar, imprimir y guardar en archivos Excel. Esta característica proporciona una forma rápida de buscar, adquirir, y resumir la información de la productividad del laboratorio para informes anuales (por ejemplo, cuántos proyectos y muestras el laboratorio realizó en el año 2015).

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 |

Información del proyecto

Un proyecto se abre al ser seleccionado y haciendo doble clic en el nombre del mismo. La parte inferior del panel muestra un resumen de la información obligatoria y opcional sobre el proyecto, incluyendo:

- La fecha de presentación de cuando las muestras llegaron o fueron registradas (Obligatorio).
- El nombre del cliente (Obligatorio).
- Propósito - un campo descriptivo (opcional).
- Ubicación - un campo descriptivo (opcional).
- Rango (números W-XX se asignan automáticamente por LIMS).
- Campo de comentario para otras informaciones relevantes del proyecto (opcional).
- Número total de muestras y tipo y número de muestras pendientes.
- La fecha en la que se entregaron los resultados finales al cliente.

The screenshot displays the 'Projects' interface in a web browser. At the top, there is a navigation bar with 'List All Projects', a page number '30', and a title 'Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project'. Below this is a toolbar with buttons for 'Show Samples', 'Export Results', 'Delta Plot', 'Invoice', and 'Print Labels'. A red arrow points to the 'Show Samples' button. Below the toolbar is a section for 'General Information' with a 'Last Changed' date of 11/20/2014. The form contains several fields: 'Submission' (6/6/2006), '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' (2/1/2012), 'Customer' (Reference), 'Range' (W-31 to W-69), 'Purpose' (IAEA Lab Standards & Controls), 'Location' (Vienna), and 'Project Comments'. At the bottom, there are summary statistics: 'Number of samples with missing delta values: 22 of 39 samples', 'Number of Missing $\delta^2\text{H}$ Samples: 21', and 'Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 22'.

En la parte superior del panel de proyectos (botones grises) se muestran varios elementos de acción que son relevantes para el proyecto seleccionado. Estos elementos incluyen:

- Editar y visualizar datos de la muestra individual en Mostrar muestras de proyecto (Show Project samples).
- Añadir muestras en una plantilla del instrumento (en azul) ([Add Samples to Instrument Template](#)).

- Crear/mostrar el proyecto complementario para $\delta^{17}\text{O}$ (companion project) (opcional).
- Imprimir etiquetas de muestra o viales para el láser.
- Imprimir una copia del informe de proyecto para el cliente.
- Hacer un gráfico bivalente de $\delta^2\text{H}$ vs $\delta^{18}\text{O}$ con los resultados (gráfico XY utilizando unidades delta para expresar la composición isotópica).
- Exportar los resultados a una hoja de cálculo de Excel.
- Características para facturas a clientes (opcional).
- Eliminar un proyecto, haga clic en "Eliminar" (Delete). Esta acción sólo puede realizarse si los análisis no fueron importados en *LIMS para Láseres 2015*.

La información anterior se puede editar haciendo clic en "Editar" (Edit) en la parte superior de la ventana.

Muestras y análisis

Haga clic en el botón "Mostrar muestras" (Show samples) para ver información sobre cada muestra del proyecto. La navegación a través de muestras se realiza mediante el uso de las flechas, el botón de "Lista todas las muestras" (List All Samples) en la parte superior izquierda de la ventana, o con la rueda del ratón.

En dicha página se resume la información sobre cada muestra, que incluye:

- El ID de nuestro laboratorio asignado a la muestra (un W-número asignado por LIMS).
- Los resultados de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}/\delta^{17}\text{O}$ de las muestras, si han sido evaluados y almacenados.
- Información variada incluida de manera opcional sobre cada muestra específica.

Haga clic en el botón de "Análisis" (Analysis) para abrir una nueva ventana que proporciona información más detallada acerca de cada análisis isotópico de dicha muestra, incluyendo fecha de

análisis, el instrumento, método, etcétera. Esta ventana sólo se abrirá si se han completado los análisis de las muestras.

Analysis

List [Navigation icons] 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 Como crear manualmente un nuevo proyecto

La creación manual de un proyecto para análisis de $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ y entrada manual de las muestras se ilustra mediante el siguiente ejemplo.

John Smith (un cliente previamente añadido) ha presentado 10 muestras de agua de un acuífero en Texas para un proyecto de evaluación de recursos hídricos. Las botellas de cada muestra se etiquetaron en el laboratorio con los números "1" al "10".

1. En la página principal, haga clic en "Crear un nuevo proyecto" (Create a New Project).
2. Haga clic en "Fecha de entrega" (Submission Date); utilice el icono de calendario para seleccionar una fecha o haga clic en "Hoy" (Today).
3. Elige "Smith, John" en el menú de clientes.
4. En el campo de propósito del proyecto (Project Purpose or Title field) introduzca "proyecto de recursos hídricos"
5. Para ubicación (Location) – introduzca "Acuífero en Texas".
6. Elija el país "US" del menú.
7. En la lista de ID de muestras, introduzca los nombres de la muestra (1 a 10), utilizando una muestra por cada línea.
8. Si se requiere $\delta^{17}\text{O}$, marque la casilla apropiada para el proyecto complementario.
9. Cuando termine, haga clic en "Guardar" (Save - arriba a la derecha).
10. Un cuadro de diálogo confirmará que desea crear un nuevo proyecto que contiene 10 muestras de agua nuevas y LIMS asignará un ID desde W-1001 hasta W1010. Haga clic en sí.
11. El nuevo proyecto se ha completado y ahora es visible en la ficha "Ver proyectos" (View Projects).

Also create companion project for $\delta^{17}\text{O}$ water samples

From: to:

Add

Cancel

*

El formato de los campos “From” y “To” requiere que ambas entradas tengan el mismo prefijo no-numérico, si es que existe. Para crear un proyecto complementario $\delta^{17}\text{O}$, active la casilla aquí (Also create companion Project $\delta^{17}\text{O}$ water samples).

Corrección del formato de entrada por rangos

Ejemplo: From: IAEA 001 To: IAEA 200

Automáticamente añade 200 muestras de muestras numeradas consecutivamente

Ejemplo: From: IAEA 4.011 To: IAEA 4.210

Automáticamente añade 200 muestras numeradas consecutivamente

Ejemplo: From: IAEA 200 To: IAEA1

Automáticamente añade 200 muestras numeradas consecutivamente, en orden decreciente

Formato de entrada de rango incorrecto (da errores de rango)

Ejemplo: From: Test1 To: Testsample200 (los prefijo no numéricos son diferentes)

Nota importante sobre los proyectos y muestras nuevas

Una vez que se ha creado un proyecto, no se pueden agregar más tarde nuevas muestras en el mismo proyecto. Asegúrese de tener todas las muestras a mano antes de crear un proyecto, o de lo contrario, deberá crear varios proyectos (estos proyectos múltiples se pueden combinar para la exportación de archivo único – ver sección 13.2).

6.4 Crear un proyecto para $\delta^{17}\text{O}$

Algunos instrumentos láser para mediciones de isótopos de la molécula del agua tienen la opción de medir también $\delta^{17}\text{O}$. Estos instrumentos son el modelo TIWA 45-EP de Los Gatos Research y el L2140i de Picarro.

Si el láser tiene la capacidad de medir $\delta^{17}\text{O}$, esta opción se puede activar en *LIMS para Láseres 2015* como se describe en el capítulo 5.2 para el instrumento Los Gatos Research y en el capítulo 5.3 para el instrumento láser Picarro. Para evitar cualquier confusión entre un proyecto de análisis de isótopos de dos o tres isótopos, se debe crear un proyecto complementario para $\delta^{17}\text{O}$.

PRECAUCIÓN: Es necesario usar plantillas especializadas para lograr una incertidumbre analítica del orden de 30 a 50 per meg para valores de exceso de ^{17}O . Lograr este alto nivel de precisión requiere muchas más inyecciones que en el caso de los análisis rutinarios de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$. Por tanto, el análisis de $\delta^{17}\text{O}$ se considera una actividad analítica diferente, y es tratada como un proceso separado en *LIMS para Láseres 2015*.

En primer lugar, hay que crear un proyecto para el análisis de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$, como se describe en secciones 6.3 y 6.5.

1. Abrir el proyecto $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$, que también requiere análisis de $\delta^{17}\text{O}$.
2. En la parte superior de la ventana del proyecto $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$, haga clic en “Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project”.

Projects

List All Projects | 506 | 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: 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:

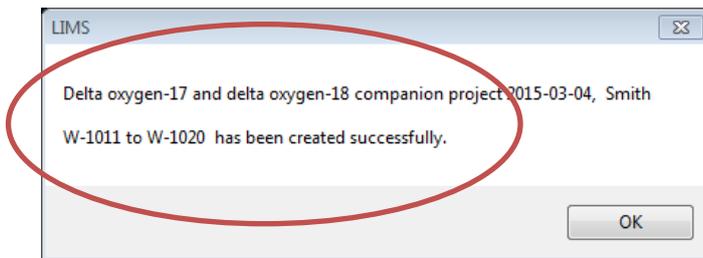
Number of samples with missing delta values: 34 of 39 samples

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

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

3. Aparecerá un mensaje de confirmación; haga clic en "Aceptar". Nota: Se creará un nuevo rango W para el proyecto de $\delta^{17}\text{O}$.

Nota: Se recomienda crear un proyecto para $\delta^{17}\text{O}$, si es necesario, al mismo tiempo que el proyecto $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$. De esta manera, los números de identificación del laboratorio serán consecutivos lo que puede facilitar la identificación de muestras y proyectos.



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 | | | | |

Ejemplo de un proyecto $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$, impreso desde la página del proyecto LIMS (muestras incompletas).

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 | | | | |

Ejemplo de un proyecto complementario de $\delta^{17}\text{O}$, impreso desde la página de LIMS (muestras incompletas).

El seguimiento de un proyecto complementario de $\delta^{17}\text{O}$ se realiza desde la página principal de cada proyecto. Por ejemplo, para el proyecto creado anteriormente, el panel del proyecto muestra el rango de identificadores (IDs) de nuestro laboratorio y la identificación del proyecto complementario. Los valores de $\delta^{18}\text{O}$ se actualizan automáticamente desde el proyecto $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$.

The screenshot shows the 'Projects' interface with a navigation bar at the top containing 'List All Projects', '506', and 'Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project'. Below the navigation bar are buttons for 'Show Samples', '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 fields for 'Submission' (6/6/2006), 'Date Results Reported' (6/23/2014), 'Customer' (Reference), 'Range' (W-8389 to W-8427), 'Purpose' (Lab references for 17O), and 'Location' (Vienna). A red circle highlights the 'Companion $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project' field, which contains the text '6/6/2006 Reference, W-31 to W-69 Project No: 30'. At the bottom, there are summary statistics: 'Number of samples with missing delta values: 34 of 39 samples', 'Number of Missing $\delta^{17}\text{O}$ Samples: 34', and 'Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 23'.

6.5 Importar un nuevo proyecto utilizando Excel

Una manera recomendable de crear un proyecto nuevo es importar un archivo de Excel que contenga la información proporcionada por el cliente. El hecho que el cliente complete el formulario y proporcione los nombres de las muestras y los datos a través de un archivo de Excel (que puede enviarse por correo electrónico o CD), junto con las muestras de agua, ahorra tiempo y elimina los errores de transcripción. Las plantillas con el listado de muestras pueden ser editadas por el usuario y están disponibles en las páginas web del USGS y del OIEA (capítulo 3.1). El archivo Excel más reciente del OIEA para elaborar el listado de muestras se presenta a continuación como ejemplo:

| 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 |
|------------------|------------|--------------|-----------------|--------------|--------------|----------------------|---------------------|-----------|-------------|------|--------|------------|--------|
| Example 1 | GNIP 43329 | | (see tab below) | DD.MMS555 | DD.MMS555 | Yr-M-D | 1995-11-15 18:30 | 114.4 | ft | 60.7 | 113.2 | Milk River | Danu |
| Example 2 | 3TT 7-88 | USA | Ohio | 38.889722 | -77.008889 | 2012-02-28 00:00 | (normally blank) | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian | Lake H |
| Example Sample 1 | | | | | | | | | | | | | |
| Example Sample 2 | | | | | | | | | | | | | |
| Example Sample 3 | | | | | | | | | | | | | |
| Example Sample 4 | | | | | | | | | | | | | |
| Example Sample 5 | | | | | | | | | | | | | |
| Example Sample 6 | | | | | | | | | | | | | |

Un ejemplo alternativo (véase más adelante) está disponible en:

<http://Isotopes.USGS.gov/Research/topics/LIMS.html>.

Ambos archivos incorporan formato condicional para identificar muestras con nombres duplicados (ver las dos celdas de color rosado en la hoja de cálculo). Tanto la plantilla Excel del OIEA como la del USGS se pueden modificar fácilmente para adecuarse a las necesidades de su laboratorio.

| 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 | | | | | | | | | | | | | |
| 1 | First Name* | John | Instructions: | | | | | | | | | | | | |
| 2 | Last Name* | Smith | Information in BLUE is optional, if available | | | | | | | | | | | | |
| 3 | Submission Date* | 10/6/2012 | Caution: "Sample ID" must be unique, no duplicates | | | | | | | | | | | | |
| 4 | * INFORMATION IS REQUIRED | | Ship samples and Excel file to: | | | | | | | | | | | | |
| 5 | Address (Line 1) | | Organization Name | | | | | | | | | | | | |
| 6 | Address (Line 2) | | Attn: Name of sample receiver (if applicable) | | | | | | | | | | | | |
| 7 | Address (Line 3) | | Laboratory address | | | | | | | | | | | | |
| 8 | City | | Laboratory address | | | | | | | | | | | | |
| 9 | State or Province | | Laboratory address | | | | | | | | | | | | |
| 10 | Postal Code | | Laboratory address | | | | | | | | | | | | |
| 11 | Country | | Phone | | | | | | | | | | | | |
| 12 | Email | | Email address | | | | | | | | | | | | |
| 13 | Project Title | My project title | Optional Project Comment | | | | | | | | | | | | |
| 14 | General Location | My location | | | | | | | | | | | | | |
| 15 | Account number | | | | | | | | | | | | | | |
| 16 | Isotope Ratios Req | 18O and 2H | | | | | | | | | | | | | |
| Sample Information | | | | | | | | | | | | | | | |
| 17 | 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 | |
| 18 | Example 1 | GNIP 43329 | (see tab below) | (see tab below) | DD.MMSSSS | DD.MMSSSS | m/d/yy hss | 11/15/1995 18:30 | 114.4 | ft | 60.7 | 113.2 | Milk River | Danube | |
| 19 | 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 |
| 20 | Example Sample 1 | USA | 39 | 38.889722 | -77.008889 | 2/28/12 14:02 | | | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian | Lake Huron | |
| 21 | Example Sample 2 | USA | 39 | 38.889722 | -77.008889 | 2/28/12 0:00 | | | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian | Lake Huron | |
| 22 | Example Sample 3 | USA | 39 | 38.889722 | -77.008889 | 2/28/12 0:00 | | | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian | Lake Huron | |
| 23 | Example Sample 4 | USA | Ohio | 38.889722 | -77.008889 | 2/28/12 0:00 | | | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian | Lake Huron | |
| 24 | Example Sample 5 | USA | Ohio | 38.889722 | -77.008889 | 2/28/12 0:00 | | | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian | Lake Huron | |
| 25 | Example Sample 6 | Costa Rica | Cartago | | | | | | | | | | | | |
| 26 | Example Sample 6 | | | | | | | | | | | | | | |
| 27 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 28 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 29 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 30 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 31 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 32 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 33 | | | | | | | | | | | | | | | |
| 34 | | | | | | | | | | | | | | | |

Importar y crear un nuevo proyecto utilizando una plantilla de Excel

1. En la Página principal LIMS, haga clic en "Importar un nuevo proyecto de Excel" (Import a New Project from Excel Submission) en los títulos de proyectos.
2. En el cuadro de diálogo, busque y haga doble clic en el nombre del archivo de entrega de Excel a importar.
3. Un cuadro de diálogo de confirmación le indicará cuántas muestras y el rango "W-número" para asignar a las muestras. Haga clic en "Aceptar".
4. Otro cuadro de diálogo le preguntará si también desea crear un proyecto de $\delta^{17}\text{O}$ complementario (acepte o decline según sea necesario).
5. El nuevo proyecto aparecerá bajo "Ver proyectos" (View projects).

Recordatorio: Antes de importar los datos, asegúrese que el cliente añadió su nombre, y que el primer y último nombre *coincidan exactamente con* los del archivo de Excel (ver capítulo 6.1).

6.6 Personalizar formularios de Excel

Una forma útil para importar nuevos proyectos en LIMS es mediante la utilización de plantillas de listado de muestras de Excel, personalizadas para cada cliente.

Las plantillas editables de *LIMS para Láseres de Excel* «no protegidas» están disponibles en los enlaces web indicados en el capítulo 3.1. Estos archivos de Excel pueden ser editados y modificados para la introducción de su propia información de laboratorio y la elaboración de gráficos.

Cualquier cambio en los campos de datos de la planilla de Excel proporcionada requerirá también realizar cambios en los campos de información adicional en *LIMS para Láseres*. Esto es debido a que los nombres de campo en la plantilla de Excel deben tener un nombre de campo correspondiente en *LIMS para Láseres 2015*.

En la Página principal, haga clic en "Características especiales" (Special Features) y haga clic en el botón "Opciones" (Options). En el panel derecho hay una lista de encabezamientos que pueden ser modificados por el usuario y utilizados en el archivo de Excel.

Para cambiar cualquier de los nombres de campo (por ejemplo, acuífero, conductividad, pH, etc.) a sus propias preferencias, haga clic en "Editar" (Edit) y cambie los campos. Por ejemplo, "Acuífero" podría cambiarse por "Nombre del sitio".

No todos los nombres de campo son necesarios. *LIMS para Láseres 2015* requiere sólo el ID de la muestra en esta lista. Si no necesita el título (caption) 7 (por ejemplo, alcalinidad), elimine la alcalinidad de la caja de texto Caption 7 y elimine la columna de la alcalinidad de la plantilla de Excel. Una vez que se hayan completado todas las ediciones, haga clic en "Guardar" (save) y "Cerrar" (close). LIMS requiere que los encabezados coincidan en el Excel personalizado.

Cambio de encabezamientos en la plantilla de listado de muestras de Excel

Abra la plantilla de Excel «no protegida» y localice los nombres de campos opcionales correspondientes que desee cambiar. En este ejemplo, el encabezado de "Acuífero" puede sustituirse por "Nombre del sitio":



| Lat Lon. | Collection Date/Time | End Coll. Date/Time | Elevation | Length Unit | Top | Bottom | Aquifer |
|----------|----------------------|---------------------|-----------|-------------|------|--------|------------|
| IMSSSS | Yr-M-D | 1995-11-15 18:30 | 114.4 | ft | 60.7 | 113.2 | Milk River |
| 08889 | 2012-02-28 00:00 | (normally blank) | 37 | m | 18.5 | 34.5 | Nubian |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

Importante: Asegúrese que los encabezamientos de la hoja de cálculo corresponden *exactamente* con los de los campos de opciones de *LIMS para Láseres 2015*, o de lo contrario la importación de datos fallará. En cuanto a los campos opcionales que estén en blanco en *LIMS para Láseres 2015*, solo debe eliminar la columna correspondiente de la hoja de presentación.

¡Atención! No se recomienda el cambio de forma habitual de los encabezamientos. Se recomienda hacer una planilla de listado de muestras con toda la información necesaria y no cambiarla.

Nota: El logo de *LIMS para Láseres 2015* que se muestra en la figura anterior debe conservarse en las hojas de cálculo por motivos legales debido a que este software es proporcionado por el Servicio Geológico de Estados Unidos y el OIEA sin costo alguno. Las hojas de cálculo sin esta insignia no se pueden importar.

Proteger la plantilla de listado de muestras

La experiencia ha demostrado que plantillas de listado de muestras de Excel son a menudo modificadas por los clientes (por ejemplo, los clientes pueden intentar de eliminar o Agregar

columnas, pegar formatos de celdas incorrecta, pegar en una nueva hoja de cálculo, etc.), que puede causar fallos a la hora de importar en *LIMS para Láseres 2015*.

Por esta razón, la hoja de presentación final que se proporciona debe ser "protegida" para permitir que los clientes completen únicamente los campos requeridos por el laboratorio. La protección de celdas de Excel no es infalible, por lo que el laboratorio debe proporcionar instrucciones explícitas para su uso.

Para ayudar a proteger la hoja de cálculo Excel de listado de muestras al laboratorio:

1. En Excel 2007/10, haga clic en la pestaña "Revisar" (Review).
2. Haga clic en "Proteger hoja" (Protect sheet). Debe introducir una nueva contraseña (y grabarla).
3. Guardar el archivo, distribuir a los clientes.
4. Los clientes pueden agregar su información a los campos de datos de las muestras requeridos por LIMS. Todos los demás campos se bloquean para evitar su edición, a menos que la contraseña está deshabilitada.

6.7 Sugerencias para importar plantillas de Excel

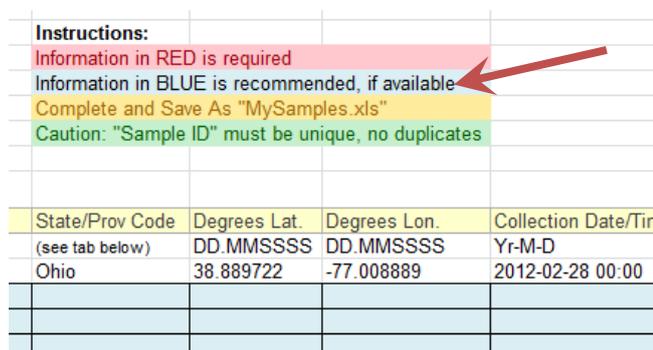
Basándonos en nuestra experiencia con cientos de clientes, a continuación se indican algunos consejos para el uso de las planillas de listado de muestras de Excel no cause errores:

En el laboratorio

- Descargue una de las plantilla de Excel sin protección para añadir/editar sus datos (información de contacto, dirección, agregar su insignia de laboratorio, etcétera).
- Asegure que campos opcionales cambiados en Excel coinciden *exactamente* con los de las opciones incluidas en su LIMS.
- Proteja la planilla de Excel con una contraseña antes de distribuirla.
- Pruebe el nuevo archivo de importación de Excel con datos ficticios para garantizar que la importación funciona correctamente.
- **Nunca** combine muestras de diversos clientes en un solo proyecto, esto creará confusión.

Para sus clientes

- Envíe las planillas de Excel protegidas por correo electrónico a sus clientes, o súbalas en su sitio Web.
- Recomendamos que los clientes mantengan una copia de seguridad de la plantilla de Excel original para futuras muestras.
- Los clientes deben completar sus datos y utilizar "Guardar como", añadiendo un nombre de archivo descriptivo.
- La plantilla de listado de muestras de Excel debe acompañar a las muestras de agua enviadas al laboratorio (en CD/memoria USB o por correo electrónico).
- Es útil incluir una copia impresa de la planilla Excel junto con las muestras de agua.
- La *información mínima* requerida es: Apellido, nombre, fecha de entrega e ID de muestra.



| State/Prov Code | Degrees Lat. | Degrees Lon. | Collection Date/Tin |
|-----------------|--------------|--------------|---------------------|
| (see tab below) | DD.MMSSSS | DD.MMSSSS | Yr-M-D |
| Ohio | 38.889722 | -77.008889 | 2012-02-28 00:00 |
| | | | |
| | | | |

Nota para usuarios de LIMS v.9: *LIMS para Láseres 2015* no requiere información de los códigos de tipo de muestra – las muestras se asignan automáticamente a los códigos 1 ($\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$) y 1017 para ($\delta^{17}\text{O}$).

6.8 Impresión de etiquetas para muestras y viales

Impresión de etiquetas grandes para botellas de tamaño grande

LIMS para Láseres de 2015 puede imprimir etiquetas grandes (Avery o equivalente) que pueden pegarse a botellas que contengan las muestras de agua. Esto permitirá que el personal de laboratorio pueda organizar y localizar fácilmente las muestras de agua.

1. En un proyecto de cliente, haga clic en "Imprimir etiquetas" y haga clic en "Sí".
2. El número predeterminado de etiquetas a imprimir es 1 (seleccionar 2 o más en caso de extraer muestras para otros análisis de dicha botella).
3. Asegúrese de que la impresora tiene el tamaño correcto de etiquetas insertadas - 30 o 21 etiquetas grandes por hoja (Avery 5260 tamaño carta o Avery L7160 tamaño A4 o equivalente). El tamaño de la hoja de la etiqueta debe coincidir con el tamaño de papel en opciones de LIMS (carta (Letter)/ A4). Haga clic en "Imprimir" (Print).
4. Pegue las etiquetas a las botellas de muestras de agua del cliente correcto.

Imprimir etiquetas pequeñas para viales para el láser

LIMS para Láseres 2015 también puede imprimir etiquetas pequeñas para colocarse en los viales de 2 mL de muestra utilizados en el automuestreador del instrumento láser.

1. En la ventana proyecto, haga clic en "Imprimir etiquetas pequeñas" (Print Small Labels) y haga clic en "Sí".
2. El número predeterminado de etiquetas a imprimir por muestra es 1 (seleccionar 2 para preparar viales para dos ensayos).
3. Asegúrese de que la impresora tiene hojas de 80 o 84 etiquetas pequeñas por hoja (Avery 5267 para tamaño carta o Avery L7656 para tamaño A4 o equivalente). Haga clic en "Imprimir" (Print).
4. Pegue la etiqueta de la muestra al vial correspondiente (otra alternativa es escribir directamente números W en los viales con un marcador permanente).

Consejo: Puede ser más fácil escribir el ID de cada muestra en los viales con un marcador permanente.

Projects

List All Projects | 30 | 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: 11/20/2014

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: 2/1/2012

Companion $\delta^{17}\text{O}$ and $\delta^{18}\text{O}$ Project: 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 $\delta^2\text{H}$ Samples: 21

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

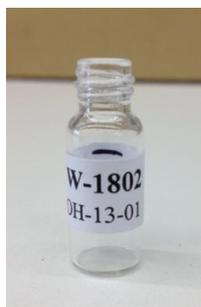
W-1009

Sample 9

W-1010

Sample 10

Ejemplo de impresión de hoja para etiquetas pequeñas Avery.



Ejemplo: Etiqueta pequeña para ampolla/vial de 2 mL utilizada en los equipos láser.

6.9 Búsqueda de proyectos con datos no procesados

Para aquellos laboratorios que analizan muestras con varios instrumentos (por ejemplo, equipos láser y espectrómetros de masas), es fácil perder detalles sobre los análisis incompletos o pendientes, en qué instrumentos se midieron ciertas muestras, o cuantas veces se repitieron los análisis de algunas muestras.

LIMS para Láseres 2015 permite al analista identificar muestras pendientes y determinar si son necesarias repeticiones de forma rápida. En la Página principal de LIMS, haga clic en "Muestra y análisis de proyectos no procesados" ("Sample and Analysis Survey of Unreported Projects"). En la ventana que se abre (véase abajo), se muestra una lista de proyectos incompletos (por ejemplo, muestras no analizadas, proyecto completado de forma parcial o resultados finales no guardados). Los paneles intermedios e inferiores presentan una lista de las muestras en cada proyecto, el número de análisis realizado en cada muestra (por ejemplo, si el laboratorio tiene una política de analizar dos veces), y en qué instrumentos se han analizado las muestras.

En el ejemplo siguiente, vemos que muestra W-12509 fue medida 5 veces (panel inferior) en tres instrumentos diferentes (ID prefijos L, N, D). Vemos además en el panel de centro-derecha que de las 18 muestras en el proyecto, se analizaron 15 muestras 3 veces y 3 muestras se analizaron 5 veces.

The screenshot displays the 'Sample and Analysis Survey of Unreported Projects' window. It is divided into three main sections:

- Select Project:** A table listing various projects with columns for Submission, Last name, Purpose, Our Lab ID Range, and # Samples. Project W-12506 is highlighted.
- Samples in this project (Select a Sample to View its Analyses):** A table listing individual samples with columns for OurLabID, str_FieldID, and # Analyses. Sample W-12509 is highlighted.
- Analyses of W-12509:** A detailed table showing analysis runs for sample W-12509, including columns for OurLabID, Analysis, Instrument, and Completed date.

Summary statistics from the 'Samples in this project' panel:

| # of runs | for # of samples |
|-----------|------------------|
| 5 | 3 |
| 3 | 15 |

Summary statistics from the 'Analyses of W-12509' panel:

| 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 |

Captura de pantalla del panel de rastreo de muestras no informadas

7 Patrones de medición isotópica

7.1 Patrones isotópicos primarios y de laboratorio

LIMS para Láseres 2015 se proporciona con Proyectos previamente definidos para los patrones primarios internacionales y para patrones internos de laboratorio para uso diario, que se utilizan para normalizar los resultados analíticos de las muestras de agua.

Materiales de referencia internacionales (VSMOW/2, SLAP/2)

Para acceder a la tabla con los valores isotópicos asignados a los patrones de medición internacionales (materiales de referencia):

1. En la Página principal de LIMS abrir "Características Especiales" (Special Features).
2. Haga clic en "Asignar referencias de laboratorio" (Assign Lab References).
3. Haga clic en "Lista" (List - parte superior izquierda) para ver los valores δ de los materiales de internacionales.

Reference Samples

List ◀ ◁ W-9 ▶ ▷ Add a New Lab Reference Edit Delete Close

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
δ²H

Reference Information

Our Lab ID: W-9 Sample ID: SLAP2

Final Delta: -427.5 ‰ Companion δ¹⁷O and δ¹⁸O Sample:

Ejemplo: SLAP2 tiene un identificador de laboratorio "W-9" y asignado un valor de $\delta^2\text{H}$ de -427.5 ‰ .

Tenga en cuenta que LIMS para Láseres 2015 sigue las recomendaciones del Système International d'Unités, SI (conocido en inglés como el Sistema Internacional de Unidades). Cuando se utiliza % ó ‰, debe existir un espacio entre el número y el símbolo ‰ (véase sección 5.3.7 del folleto SI 8)^[5]. Por lo tanto, el valor asignado de $\delta^2\text{H}$ al material de referencia SLAP2 es -427.5 ‰ .

Tenga en cuenta que los materiales de referencia internacionales se encuentran bajo el proyecto "Referencias Internacionales" ("International References") y el nombre del cliente por defecto es "Referencia". Existen 25 ubicaciones para las muestras de aguas actuales y futuros que se utilizan como materiales de referencia (W-5 a W-30).

Nota: En la actualidad no existe un material de referencia internacional con valores de $\delta^{17}\text{O}$ asignado, lo que constituye un problema aún a ser resuelto. Añadir $\delta^{17}\text{O}$ a LIMS requiere que el usuario cree un proyecto complementario para el proyecto de materiales de referencia internacionales primarios (véase capítulo 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 Agregar y editar patrones y patrones de control

Los patrones de laboratorio de uso diario (o patrones de laboratorio internos) se utilizan para normalizar los valores δ de las muestras de las muestras de aguas medidas en la escala VSMOW/2-SLAP/2^[6]. La responsabilidad recae en cada laboratorio para obtener y mantener los patrones de medición de laboratorio adecuadas y para asegurar que son rutinariamente calibrados respecto a la escala de medición internacional VSMOW/2-SLAP/2 (ver anexos de fuentes y plantillas para patrones de uso diario).

LIMS para Láseres 2015 se proporciona con más de 35 ubicaciones de posiciones para patrones internos de laboratorio bajo el proyecto "Patrones de Laboratorio" ("Lab References"), cuyo cliente es «Referencia» (Reference). Los patrones de laboratorio tienen asignado previamente los números de identificación de laboratorio LIMS comprendidos entre W-31 y W-69 (ver figura anterior). Su laboratorio puede editar o añadir patrones de laboratorio a este proyecto.

Tenga en cuenta que la versión predeterminada de *LIMS para Láseres 2015* no tiene asignado por defecto ningún valor δ al patrón de laboratorio en la tabla de patrones (Table of References). Para asignar valores δ conocidos, se deben editar los nombres de los patrones de laboratorio y luego agregar sus correspondientes valores δ a la tabla de patrones de *LIMS para Láseres 2015*.

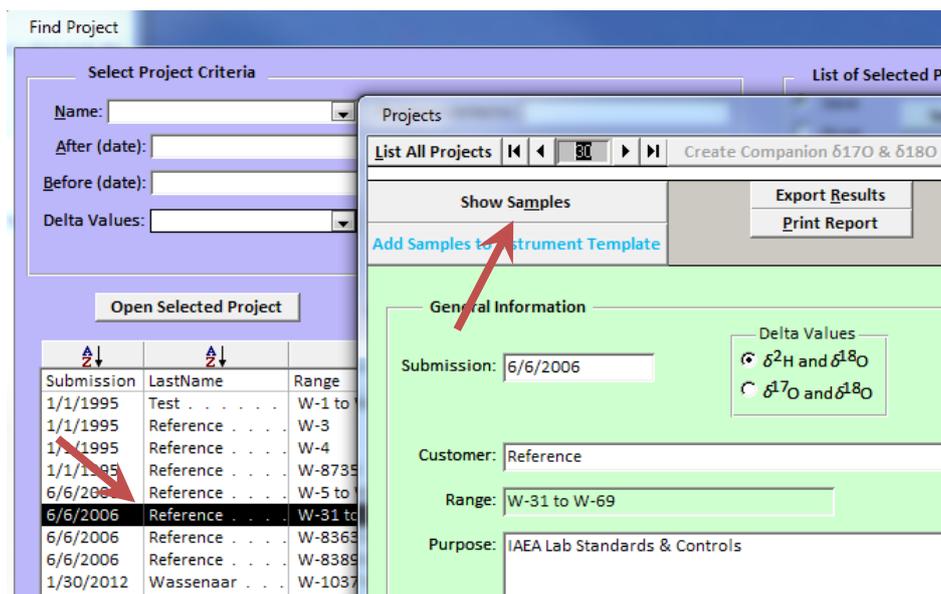
Por ejemplo, podemos editar un patrón de laboratorio con nuevos valores δ enriquecidos (high) y empobrecidos (low), y agregar un patrón de control en la tabla de referencia. Estos patrones tienen las siguientes valores δ conocidos (en relación a VSMOW):

| | | | |
|--------------------|--|---|-------------------------------|
| Patrón enriquecido | $\delta^{18}\text{O} = -0.07\text{‰}$ | $\delta^2\text{H} = -4.1\text{‰}$ | $\delta^{17}\text{O} = -0.2$ |
| Patrón empobrecido | $\delta^{18}\text{O} = -24.76\text{‰}$ | $\delta^2\text{H} = -189.2\text{‰}$ | $\delta^{17}\text{O} = -14.2$ |
| Control | $\delta^{18}\text{O} = \text{‰} -999$ | $\delta^2\text{H} = \text{no asignado}$ | |

Nota: Al patrón de control se le asigna un valor $\delta^{18}\text{O}$ de -999‰ , que actúa como una señal para indicar que el $\delta^{18}\text{O}$ de este patrón es nulo. No debe ser asignado ningún valor para $\delta^2\text{H}$. Debido a que el valor del patrón de control es nulo, *LIMS para Láseres 2015* no utilizará ninguna normalización cuando se incluya en una medición, aunque el usuario sea capaz de controlar los resultados. El valor δ del patrón de control no importa, aunque se recomienda que los patrones de control tengan valores de $\delta^2\text{H}$ y de $\delta^{18}\text{O}$ comprendidos entre los de los patrones enriquecidos (high) y empobrecidos (low). El propósito de un patrón de control es un seguimiento rutinario de QA/QC del laboratorio a lo largo del tiempo.

En primer lugar, en este ejemplo, necesitamos editar y cambiar el nombre de tres patrones de laboratorio "pre-asignados" con posición y el patrón de control con sus nombres reales o ID de muestra, como se describe arriba. Aquí asignamos el nombre "Patrón enriquecido" (high) W-31, "Patrón empobrecido" (low) a W-32 y "Control" a W-33.

1. En la página principal de LIMS, haga clic en "Ver proyectos" ("View Projects").
2. Haga doble clic en el proyecto denominado "Patrones de laboratorio" (Lab References).
3. Clic en "Mostrar muestras de proyecto" (Show Project Samples).
4. Abra la primera muestra en el proyecto, en este caso, pasa a ser W-31.
5. Haga clic en el botón "Editar" (Edit).
6. Ahora se resalta el campo de la identificación de la muestra – eliminar y reemplazar "My laboratory ref 1" con "Patrón enriquecido" (High standard), pero dejar otras entradas (no introducir los valores δ !).
7. Haga clic en "Guardar" (save).
8. Haga clic otra vez en la "lista de todas las muestras" (List All Samples) y elegir W-32 del menú desplegable.
9. Haga clic en "Editar" (Edit), borrar y volver a colocar "My laboratory ref 2" con "Patrón empobrecido" (low).
10. Haga clic en "Guardar" (Save).
11. Haga clic otra vez en la "Lista de todas las muestras" (List All Samples) y elegir W-33 del menú desplegable.
12. Haga clic en "Editar"(Edit), borrar y volver a colocar "My laboratory ref 3" con "Control".
13. Haga clic en "Guardar" (save). Se produce el cambio de nombre de estas tres muestras.
14. Haga clic en "Cerrar" (close) para volver a la Página principal de LIMS.



Proyecto "Referencias" con IDs de laboratorio de W-31 a W-69 para los patrones de laboratorio interno del OIEA.

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)

Información de entrada para la muestra W-31 para ser editado a "Mi patrón de laboratorio 1".

Nota: Para crear un proyecto de valores $\delta^{17}\text{O}$ para los patrones de medición de laboratorio, usted debe crear en primer lugar un proyecto complementario de patrones de laboratorio (véase el capítulo 6.4). Los números de W para los patrones de laboratorio para $\delta^{17}\text{O}$ difieren de los de $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$. Ver ejemplo en la siguiente figura:

| 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 |

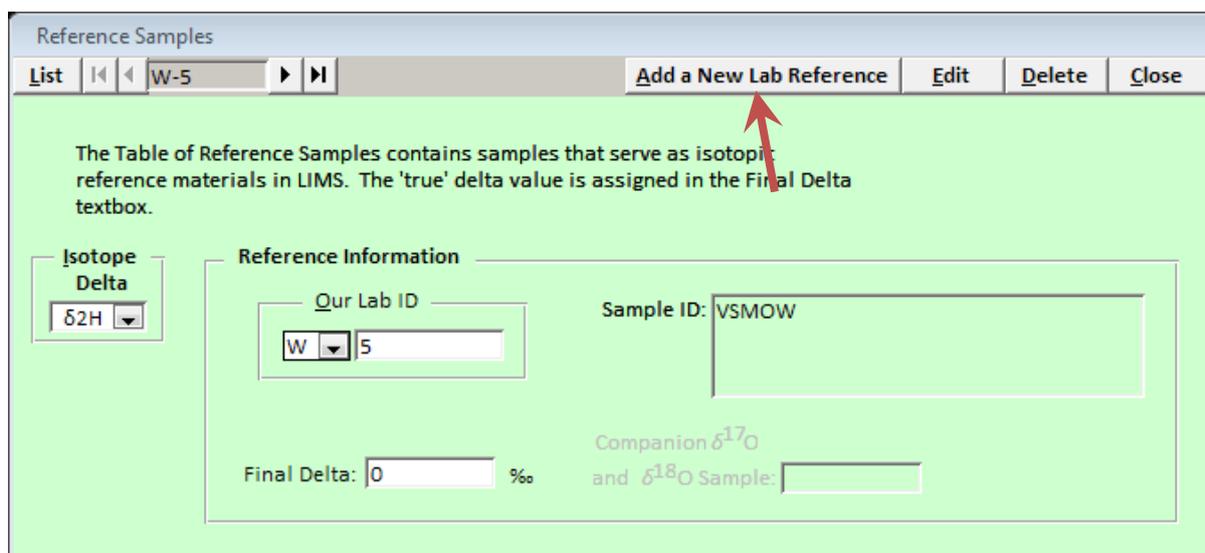
7.3 Asignar valores δ a los patrones de laboratorio

Se deben asignar valores conocidos δ a los patrones de laboratorio y agregar una señal especial en LIMS para identificar el patrón de control. Actualmente, no existe ninguna incertidumbre asignable a los patrones de laboratorio.

1. En la página principal de LIMS, abrir "características especiales" "Special Features".
2. Haga clic en "Asignar referencias de laboratorio" ("Assign Lab References").

Añadir valores $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{17}\text{O}$ al patrón de laboratorio enriquecido (high)

3. Para agregar los valores $\delta^{18}\text{O}$ al patrón de laboratorio enriquecido, haga clic en "Agregar un nuevo patrón de laboratorio" ("Add a New Lab Reference").



4. Haga clic en el menú "Isotope Delta", elija " $\delta^{18}\text{O}$ ".
5. En campo "Nuestro laboratorio ID" ("Our Lab ID") introduzca W-31. "High Standard" (Patrón enriquecido) debe aparecer en el campo "Sample ID".
6. En el campo "Final Delta", escriba su valor asignado, aquí -0.07‰ para $\delta^{18}\text{O}$ como se indica en apartado 7.2.
7. Haga clic en "Guardar" (Save).

8. A continuación, agregue el valor $\delta^2\text{H}$ conocido o asignado; Haga clic en "Agregar un nuevo patrón de laboratorio" ("Add a New Lab Reference").
9. Haga clic en el menú "Isotope Delta" y seleccione " $\delta^2\text{H}$ ".
10. En campo "Our Lab ID", escriba W-31. Aparecerá "High standard" en el campo "Sample ID".
11. En el campo "Final Delta", escriba el valor asignado, aquí -4.1‰ para $\delta^2\text{H}$, como se indica en el apartado 7.2.
12. Haga clic en "Guardar" (Save).
13. Para añadir el valor $\delta^{17}\text{O}$, haga clic en "Agregar un nuevo patrón de laboratorio" ("Add a New Lab Reference").
14. Haga clic en el menú "Isotope Delta" y seleccione " $\delta^{17}\text{O}$ ".
15. En el campo "Our Lab ID", escriba W-70. Aparecerá "High-standard" en el campo "Sample ID".
16. En el campo de "Final Delta", escriba el valor asignado, aquí -0.2‰ para $\delta^{17}\text{O}$ como se indica en el apartado 7.2.

Añadir valores $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{17}\text{O}$ al patrón de laboratorio empobrecido (low)

17. Para agregar un patrón empobrecido, repita los pasos 3 a 12; en su lugar use W-32 "low standard" con los valores de $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ ($\delta^{18}\text{O} = -24.76\text{‰}$, $\delta^2\text{H} = -189.2\text{‰}$, $\delta^{17}\text{O} = -14.2\text{‰}$ (W-71) como se muestra arriba).

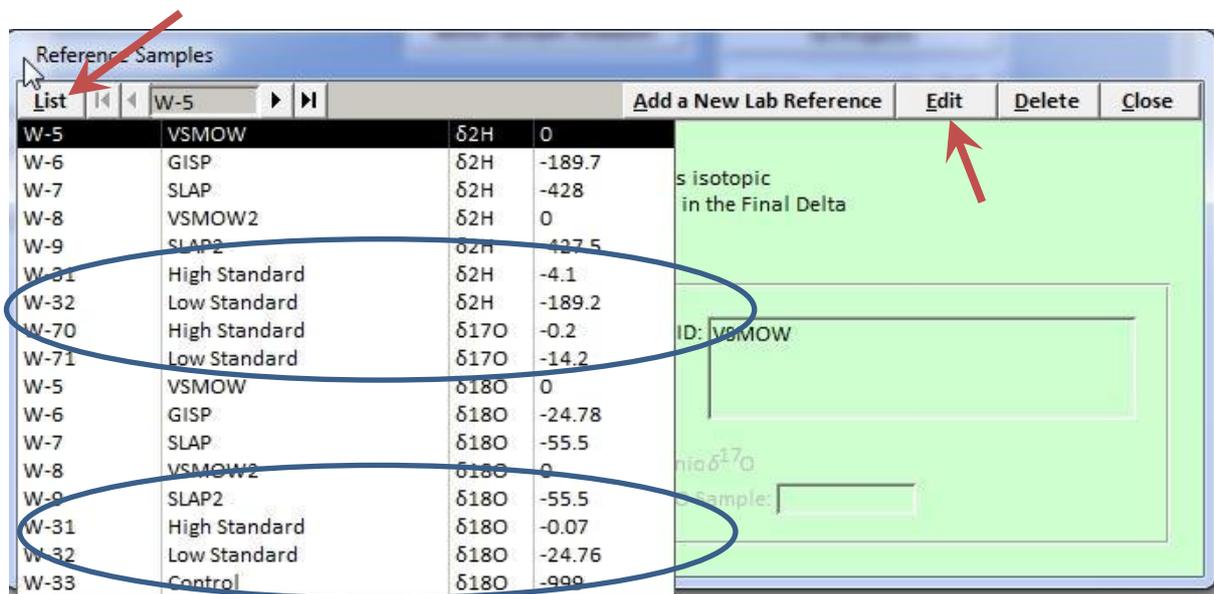
Para agregar un patrón de control

18. Repita los pasos 3 a 7, utilizando en su lugar muestra W-33 "Control"
19. Introducir un valor de ^{18}O de -999‰ (**recordar:** no agregue ningún valor de $\delta^{17}\text{O}$ ó $\delta^2\text{H}$ al patrón de control)
20. Haga clic en "Guardar" (save).
21. Haga clic en "Cerrar" (close).

Para revisar la lista recién editada de sus patrones primarios internacionales (materiales de referencia) y patrones de laboratorio y sus valores δ asignados, vaya a "Características Especiales" "Special Features", haga clic en "Asignar patrones de laboratorio" (Assign Lab References) y haga clic en el botón "Lista" (List) en la parte superior izquierda.

La siguiente figura muestra los patrones internacionales, los patrones de laboratorio recién agregados y el patrón de control, ordenada por el elemento y sus correspondientes números de identificación de laboratorio "W".

Si necesita cambiar el valor δ asignado a los patrones primarios o a los patrones internos de laboratorio, seleccione el patrón específico y el valor δ específico a cambiar en la lista y haga clic en "Editar" (Edit). A continuación, escriba el nuevo valor δ en el campo Delta Final y haga clic en "Guardar" (Save).



Ejemplo de los nuevos patrones de medición de uso diario y un control.

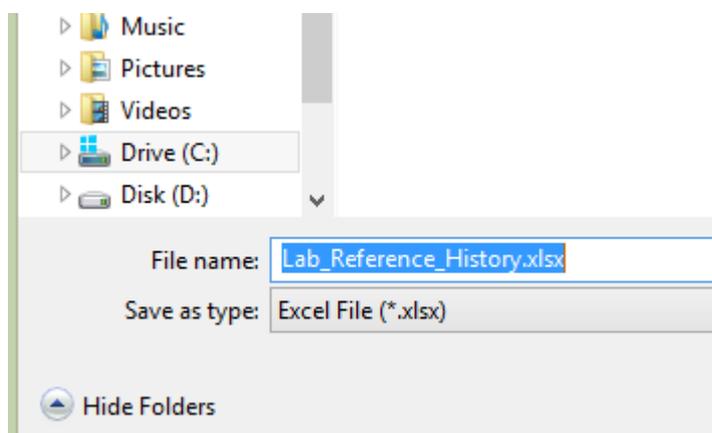
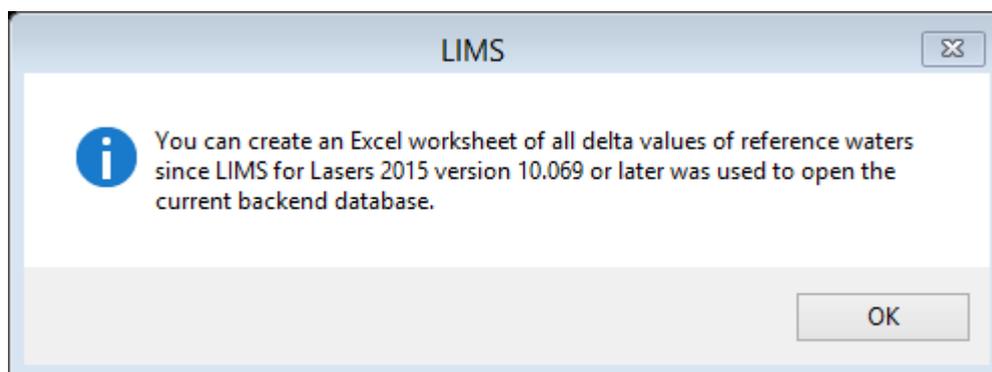
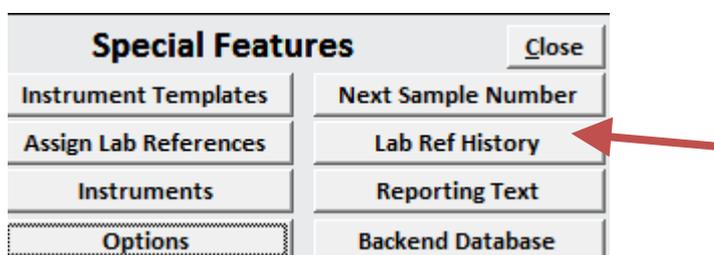
Nota importante acerca de los valores δ de los patrones de laboratorio asignados

Los valores δ de los patrones de laboratorio recientemente modificados afectan *sólo* a los *resultados futuros que aún no se han normalizado o almacenado*. Aquellos resultados almacenados y normalizados previamente *no* cambiarán retroactivamente; la normalización se conserva con los parámetros δ asignados que se utilizaron en el momento de procesamiento de datos. Todos los datos normalizados previamente están protegidos.

7.4 Seguimiento temporal de los patrones de laboratorio

Existe un registro de que permite seguir cualquier cambio en los valores de los patrones primarios internacionales y de los internos del laboratorio en *LIMS para Láseres 2015* para el seguimiento del desempeño del laboratorio a largo plazo.

1. Haga clic en "Características especiales" ("Special Features").
2. Haga clic en "Historia de Patrones de Laboratorio" ("Lab Ref History").
3. Se crea y guarda un archivo Excel con la historia completa de los valores δ de referencia asignados a calibración y patrones internacionales.



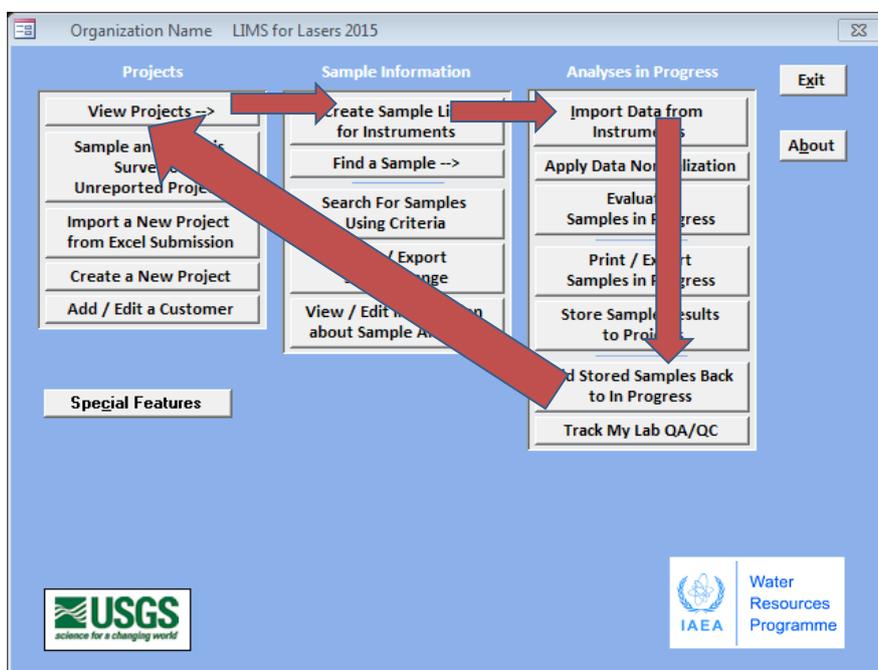
8 Plantillas de análisis de muestras

8.1 Análisis de LIMS para Láseres de 2015

Ya que hemos aprendido a añadir los clientes, sus proyectos y muestras en *LIMS para Láseres 2015*, ahora podemos preparar y analizar muestras de agua en un instrumento de láser mediante el uso de plantillas de análisis del instrumento (también conocido como lista de muestras, colas o ejecución de archivos en secuencia).

Analizar muestras en *LIMS para Láseres 2015* consiste en un procedimiento de 9 pasos:

1. Añadir las muestras a la *Plantilla de análisis (Analysis Template)* del instrumento (o cola).
2. Crear e imprimir una lista para la preparación de muestras (por ejemplo para realizar el llenado de viales con muestras), transferir la secuencia de adquisición de datos al LGR o Picarro, y controlar el software, a través de memoria USB.
3. Medir muestras desconocidas al menos dos veces (en un LGR o un Picarro) e importar los datos isotópicos en *LIMS para Láseres 2015*.
4. Opcionalmente corregir el volumen de H₂O.
5. Corregir el efecto memoria de los resultados importados o el desvío del instrumento.
6. Normalizar las muestras a la escala VSMOW-SLAP, utilizando los patrones.
7. Evaluar y aceptar los resultados finales, rastreando el rendimiento del patrón de control.
8. Comprobar y guardar el valor medio final de los resultados aceptados, utilizando dos o más réplicas.
9. Generar un Informe de los resultados finales para el cliente en un archivo de Excel o en copia impresa.



Flujo de trabajo rutinario en LIMS para Láseres 2015.

8.2. La importancia de plantillas de análisis

LIMS para Láseres 2015 cuenta con plantillas de análisis de muestras diseñadas para obtener resultados de alta calidad. El sistema permite evaluar análisis problemáticos basados en el volumen de agua inyectada de la muestra, corrige valores δ en función del volumen de H₂O inyectada, corrige efectos de memoria entre muestras, comprueba y corrige las derivaciones instrumentales y permite normalizar los resultados de las muestras desconocidas en la escala VSMOW-SLAP, utilizando para ello los patrones de laboratorio calibrados previamente. El patrón de control monitorea los resultados del rendimiento del equipo láser a largo del tiempo para fines de QA/QC. Los usuarios pueden además crear sus propias plantillas personalizadas.

Las plantillas de análisis utilizadas se fundamentaron sobre principios de tratamiento idéntico ^[7], los cuales son conocidos por dar los mejores resultados. Además, las plantillas sistemáticas facilitan al analista identificar problemas cuando se observan cambios en los análisis de rutina.

En *LIMS para Láseres 2015*, recomendamos una plantilla con 8/9-inyecciones por muestra e ignorar las 4 primeras inyecciones, como punto de partida para todos los instrumentos de láser que se utilicen para análisis de $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$. Los usuarios pueden modificar las plantillas para optimizar el rendimiento de acuerdo a sus propias necesidades, o pueden mejorar el rendimiento del equipo experimentando con menos inyecciones y menor número de inyecciones descartadas (p.e. 6 inyecciones e ignorar 3). Las plantillas de análisis son completamente personalizables de acuerdo con las preferencias del usuario.

Las recomendaciones en este manual son conservadoras de forma intencionada para ofrecer los mejores resultados posibles de $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ para todas las generaciones de instrumentos láser. Las plantillas de instrumento para $\delta^{17}\text{O}$ son considerablemente más complejas que los de rutina para $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$, y requieren varios viales con 30, 50 o más inyecciones.

¿Por qué necesitamos plantillas de análisis sistemáticas?

Hay dos características de hardware que limitan la longitud de una plantilla de análisis del equipo láser:

- Fallo en el sistema de inyección. La membrana o septum (septa) tendrá pérdidas o fugas o dejara de funcionar después de 300 a 800 inyecciones, dependiendo de la marca y la calidad de la membrana (si son de tipo standard o de alto rendimiento).
- Fallo de la jeringa. Las jeringas de pequeño volumen (μL) pueden fallar entre una docena o más de 2000 inyecciones. Generalmente, los altos contenidos de sólidos disueltos (TDS) en las muestras de agua suelen ocasionar los problemas más frecuentes de rotura de la jeringa por la acumulación de sal en la misma.

Como resultado, los series de medidas del equipo láser no deben ser de más de 300 – 800 inyecciones, tras lo cual se debe cambiar la membrana o septum. La jeringa debe comprobarse por indicios de avería o atasco. La degradación de la jeringa generalmente se manifiesta por la disminución o variabilidad del volumen inyectado de H₂O.

Hay tres factores instrumentales que afectan la calidad de los análisis isotópicos con un láser:

- Efecto de memoria entre muestras – se trata de contaminación residual de las moléculas de agua con la muestra previa en los tubos o en las cavidades del equipo láser, o por transferencia entre muestras adyacentes. A mayores diferencias de valores δ entre las muestras, mayor será el impacto de este efecto.
- Dependencia de los valores δ del volumen de H₂O inyectada. La variabilidad de cantidades de H₂O inyectadas, por ejemplo en el caso de jeringas de bajo rendimiento o membranas agujereadas, puede ocasionar grandes variaciones isotópicas en la mayoría de instrumentos láser.
- Deriva instrumental. Los instrumentos láser de primera generación o los instrumentos nuevos insuficientemente calentados, exhiben deriva lineal a lo largo de una serie de medidas ^[8].

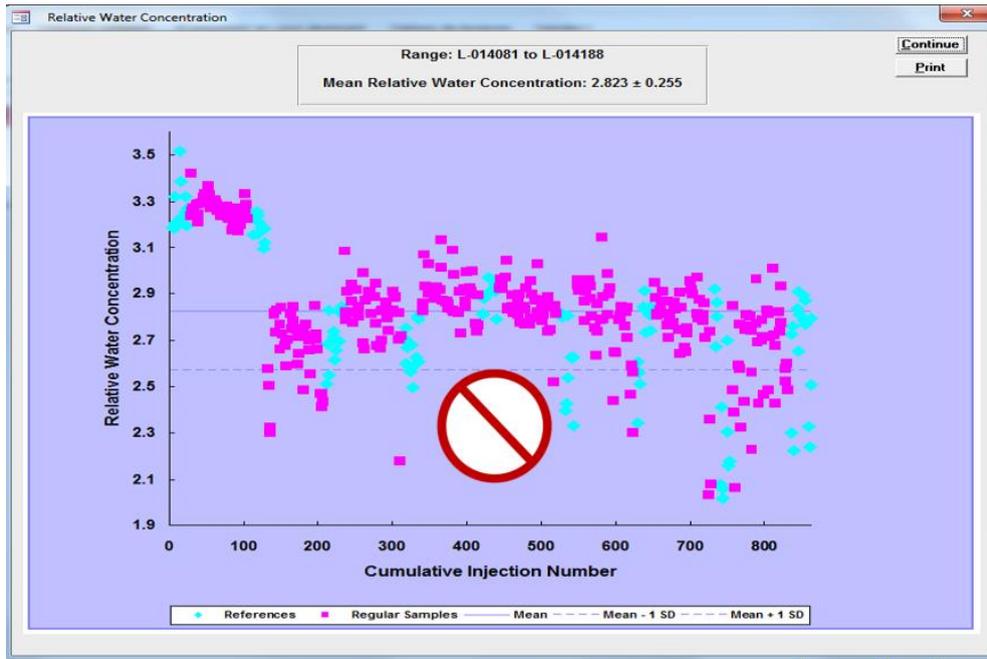
Las limitaciones físicas de las membranas y de las jeringas exigen mantenimiento de forma rutinaria del instrumento, tal y como se describe en los manuales de usuario de cada proveedor. *LIMS para Láseres 2015* ayuda a identificar y corregir estos problemas, como se describe a continuación.

Herramientas de detección de bajo rendimiento, de errores de instrumento y de alta variabilidad

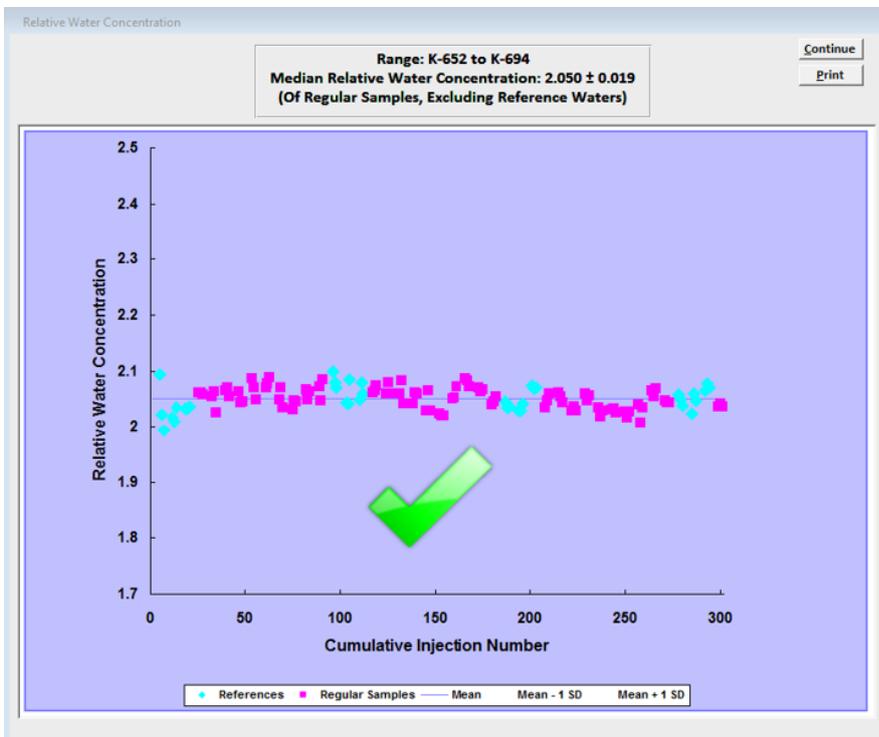
Los fallos frecuentes en jeringas o septas generalmente producen contenidos de H₂O bajos o muy variables en la cavidad del láser o también errores de la presión que indica el software del instrumento. Los instrumentos láser a menudo exhiben una respuesta lineal a los valores δ del volumen de vapor de agua en la cavidad; por lo tanto, la inyección de agua debe ser precisa y muy uniforme. Mientras que la identificación de una jeringa atascada o rota puede ser obvia, menos evidente son las inyecciones algo ligeramente deficientes, con rendimientos variables, especialmente cuando los frascos están insuficientemente o demasiado llenos, o la jeringa tiene un rendimiento bajo. Es muy difícil localizar inyecciones de baja calidad buscando valores separados por comas (CSV) en un archivo Excel.

Para identificar las inyecciones de baja calidad, los datos de los archivos importados previamente son evaluados por el *LIMS para Láseres 2015* para mostrar gráficamente si los rendimientos de H₂O han sido constantes a lo largo de la medición. Una gráfica mostrando el rendimiento del agua según el número de la inyección aparece tras la importación de datos. La gráfica muestra inyecciones individuales y el rendimiento estándar de las inyecciones en relación con el 85% de la media del volumen de H₂O. Los resultados que caen fuera de este límite se marcan en la pantalla y se muestra la ID de muestra; se avisa que la medición puede ser dudosa por un fallo de la jeringa. Esto le da al analista una oportunidad para revisar y verificar el hardware del instrumento o analizar de nuevo las muestras antes de que resultados erróneos sean importados.

A continuación se presentan ejemplos de datos iniciales de *LIMS para Láseres 2015* que ilustran rendimientos bajos debido a un funcionamiento inadecuado de la jeringa o fugas en el septa y en comparación un rendimiento adecuado de una jeringa:



Funcionamiento inadecuado de una jeringa: Una fuga de H₂O grande de un septa es seguida de una varianza alta en la concentración de H₂O (en la gráfica Relative Water Concentration). Los símbolos azules son los patrones de laboratorio; los símbolos rojos son muestras.



Funcionamiento adecuado de una jeringa. Los símbolos azules son los patrones de laboratorio; los símbolos rojos son muestras.

Con el fin de ayudar en la visualización de los datos antes de ser importados y procesados, el programa genera una tabla resumen de medidas de datos δ después de los gráficos de volumen de agua (Relative Water Concentration) con respecto al número de inyecciones (Cumulative Injection Number). En esta tabla, que se muestra a continuación, presenta varias características que ayudan a identificar y eliminar datos erróneos:

- Las primeras 4 inyecciones son automáticamente ignoradas (IG); o como lo haya especificado el usuario.
- Aquellas inyecciones que hayan producido errores instrumentales, aparecen en color púrpura, y son automáticamente ignoradas. El tipo de error del instrumento láser se especifica a la derecha.
- Muestras con concentración de H₂O con más del 85% de la media aparecen en color amarillo, pero no se omiten automáticamente al menos que se encuentren dentro de las primeras 4 inyecciones.
- Los resultados δ medidos para cualquier muestra con una desviación estándar media más allá de ± 0.2 para $\delta^{18}\text{O}$ y ± 1.5 ‰ para $\delta^2\text{H}$ aparecen en color naranja.
- Los patrones de laboratorio aparecen en color azul para ser fácilmente reconocidos. Las muestras aparecen en color blanco.

Import Criteria for Instrument K (Picarro 2140)

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 $\delta^{18}\text{O}$ |
|----------|-----|----------|---------------|--------------|---------|--------------------|-----------------------|-----------------------|--------------------------|
| 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 | ☑ | -94.52 | ☑ | -12.562 | ☑ |
| 655 | 2 | W-17833 | 1-04 | 2.07 | ☑ | -88.85 | ☑ | -12.152 | ☑ |
| 655 | 3 | W-17833 | 1-04 | 2.06 | ☑ | -87.85 | ☑ | -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

En el ejemplo, la inyección 7ª del análisis 654 debe ser ignorada por el analista antes de continuar. Las herramientas de detección son útiles para localizar visualmente y eliminar datos incorrectos ocasionales.

Nota: Una medición con un rendimiento pobre y con muchos errores o banderas de color no es confiable y nunca debe ser arreglada en esta tabla ni importada, en cambio se debe volver a analizar con un instrumento láser que funcione correctamente.

Efecto memoria entre muestras

El efecto memoria entre muestras se cuantifica en *LIMS para Láseres 2015* usando dos pares de patrones locales que difieren considerablemente en sus valores δ (al menos 40 ‰ y 5 ‰ para $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$, respectivamente) y son separadas secuencialmente varias veces a lo largo de una medición automática. Una medición de un patrón con un valor δ sustancialmente diferente es seguida por dos mediciones en viales sucesivos del segundo patrón para calcular el efecto memoria entre las muestras. Las correcciones del efecto memoria entre patrones de una medición automática son calculadas en un promedio, y este promedio se aplica a todas las muestras en la medición automática. LIMS calcula el efecto memoria entre muestras usando inyecciones "no ignoradas" de las muestras y los patrones.

La ventaja de este enfoque es que las correcciones se calculan utilizando el promedio de repetición de las agrupaciones de dos patrones con un valor δ suficientemente dispar a lo largo de toda una medición automática y no sistemáticamente entre pares de diferentes muestras con pequeñas o grandes diferencias en los valores δ . Además, no importa cuántas inyecciones son ignoradas porque la corrección del efecto memoria entre muestras se cuantifica y sigue los principios de tratamiento idéntico. La corrección media del efecto memoria se aplica a *todas* las muestras analizadas independientemente de los valores δ medidos. Siguiendo un criterio de buenas prácticas, recomendamos ignorar las primeras 3 – 4 inyecciones, lo que de por sí reduce el efecto memoria entre muestras (generalmente < 1 – 2%). Ver capítulo 11 para más detalles sobre los cálculos.

Ajuste para la variación en δ con la concentración de agua

La dependencia δ del valor de cada especie isotópica está, a menudo, fuertemente correlacionada con la concentración de vapor de agua en la cavidad del láser. Esta dependencia con la concentración ofrece una oportunidad para mejorar los resultados isotópicos ajustando deliberadamente las cantidades de H_2O en cada inyección usando un patrón de laboratorio específico (utilizando por ejemplo 800, 1000 y 1200 μL) colocado al principio de cada serie. Esto permitirá que *LIMS para Láseres 2015* determine con algoritmos de corrección de concentración de H_2O para cada valor δ .

Un algoritmo de ajuste de concentración de H_2O , siempre y cuando sea robusto, se puede aplicar a todas las inyecciones de muestra para normalizar los valores de δ medidos con respecto a una cantidad de agua constante por inyección. Dependiendo del instrumento, un ajuste de concentración puede resultar en una mejora marcada en los resultados isotópicos de uno o más isótopos y puede ayudar a suavizar, por ejemplo, los efectos de rendimiento variables en cada inyección.

Nota: Véase en Apéndice 3 sobre cómo configurar los ajustes opcionales para obtener valores δ en función de la concentración relativa de agua. Aunque esta opción no puede utilizarse en las primeras versiones de instrumentos de Los Gatos Research para cambiar las cantidades de H_2O por inyección,

el algoritmo de ajuste concentración de H₂O de *LIMS para Láseres 2015* se puede utilizar y puede mejorar sustancialmente los resultados.

Desviaciones instrumentales

La desviación instrumental temporal se cuantifica en *LIMS para Láseres 2015* mediante una regresión de mínimos cuadrados entre el tiempo y una o varias mediciones de los patrones que se realizan a lo largo de una medición automática. La corrección de la desviación (reportada en ‰ por hora) se determina y se aplica a todas las muestras. Sin embargo, la desviación instrumental de un láser no suele ser lineal durante mediciones automáticas largas (> 2 – 3 horas), y puede ser inconsistente entre patrones de laboratorio dentro de una medición automática (un patrón se puede desplazar positivamente, el otro, negativamente). Por lo tanto, esta regresión a menudo da resultados estadísticos pobres (por ejemplo, valores bajos de R^2).

Aun así, *LIMS para Láseres 2015* proporciona a los usuarios la opción para verificar la desviación lineal instrumental utilizando uno o más patrones de laboratorio. Para comprobar con confianza si se desea aplicar una corrección de esta desviación, debe tener un coeficiente de correlación significativo (por ejemplo, $R^2 > 0.6$) y ocurrir en la misma dirección (por ejemplo, toda la desviación es positiva) para dos o más patrones de medición. Sólo entonces se puede aplicar la corrección de desviación con confianza. Mientras que la corrección de desviación del instrumento es opcional, el uso de esta normalización (dada por defecto) generalmente da mejores resultados.

8.3 Plantillas de análisis sistemático

Las siguientes secciones muestran ejemplos de plantillas para análisis, tanto para los equipos Los Gatos Research como Picarro, utilizados en *LIMS para Láseres 2015*. Estas plantillas fueron diseñadas para ser robustas y fueron probadas para producir los mejores resultados posibles para todas las generaciones de instrumentos láser. Además, fueron optimizadas para obtener determinaciones precisas de efecto de memoria entre muestras, y opcionalmente cuantificar la desviación instrumental, y normalizar patrones y datos de las muestras.

Las plantillas tienen formato de tabla y un diseño para la secuencia de los viales específico para cada equipo, seguido de secciones individuales para configurar y utilizar plantillas de análisis para cada instrumento.

Evidentemente, los usuarios pueden diseñar sus propias plantillas de análisis, y los ejemplos que se presentan a continuación sirven como una sugerencia para empezar. En el apéndice hay varios ejemplos de plantillas de Excel para 10, 20, o 30 muestras tanto para los equipos Picarro como para Los Gatos Research. Además estos ejemplos están también disponibles en la página web de la OIEA o del USGS, de donde se puede descargar la base de datos para LIMS.

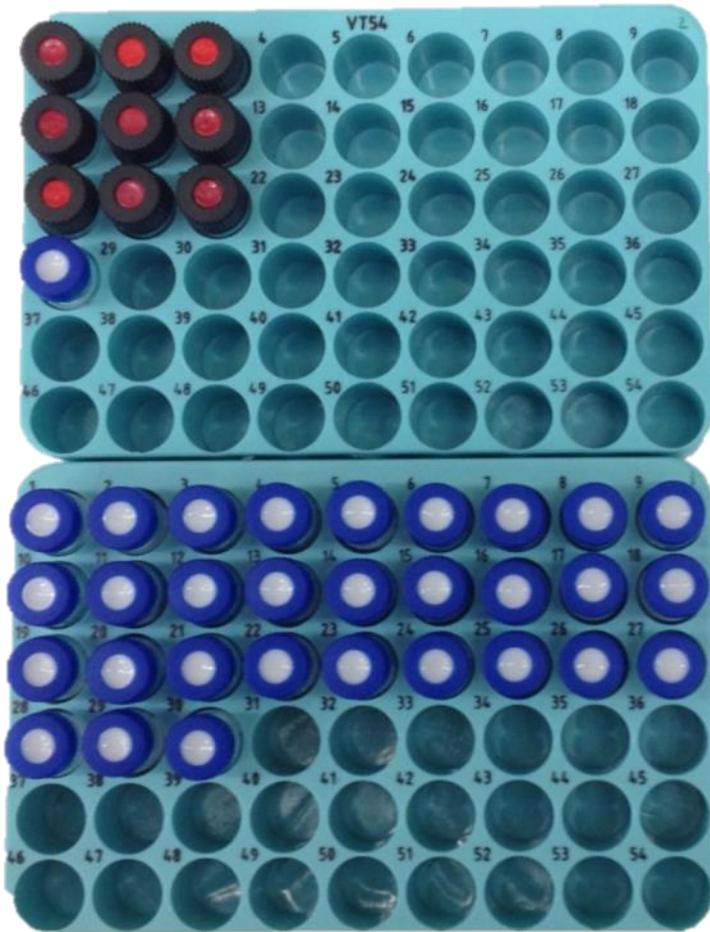
Tabla 1. Ejemplo de plantilla de análisis de 30 muestras para equipos Los Gatos Research (LGR).

Las muestras desconocidas se organizan secuencialmente en las posiciones 1 a 30 en la bandeja 1 (bandeja delantera) del inyector automático Combi-PAL. Los patrones de laboratorio, control y acondicionamiento de muestras están dispuestos en la bandeja 3 (bandeja trasera), cada uno en su propia fila. El procedimiento de análisis recomendado es de 9 inyecciones, omitiendo las primeras 4 inyecciones. Esta plantilla contiene 61 filas de 9 inyecciones cada una, con un total 549 inyecciones individuales. La columna "Orden de ejecución" se refiere a la secuencia en la cual que se analizan las muestras. El volumen de agua por inyección se controla con el software del instrumento de LGR.

| Muestra | Posición del vial | Orden de ejecución | Función |
|-----------------------------|-------------------|--------------------|------------------------------|
| Agua desionizada | 3-28 | 1 | Acondicionado de instrumento |
| Agua desionizada | 3-28 | 2 | Acondicionado de instrumento |
| Patrón δ enriquecido | 3-10 | 3 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-1 | 4 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-2 | 5 | Normalización |
| Muestra 1 | 1-1 | 6 | Muestra desconocida |
| Muestra 2 | 1-2 | 7 | Muestra desconocida |
| Muestra 3 | 1-3 | 8 | Muestra desconocida |
| Muestra 4 | 1-4 | 9 | Muestra desconocida |
| Muestra 5 | 1-5 | 10 | Muestra desconocida |
| Patrón de control | 3-19 | 11 | QA/QC |
| Patrón δ empobrecido | 3-3 | 12 | Efecto memoria |
| Patrón δ enriquecido | 3-11 | 13 | Efecto memoria |
| Patrón δ enriquecido | 3-12 | 14 | Normalización |
| Muestra 6 | 1-6 | 15 | Muestra desconocida |
| Muestra 7 | 1-7 | 16 | Muestra desconocida |

| | | | |
|-----------------------------|------|----|---------------------|
| Muestra 8 | 1-8 | 17 | Muestra desconocida |
| Muestra 9 | 1-9 | 18 | Muestra desconocida |
| Muestra 10 | 1-10 | 19 | Muestra desconocida |
| Patrón de control | 3-20 | 20 | QA/QC |
| Patrón δ enriquecido | 3-10 | 21 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-1 | 22 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-2 | 23 | Normalización |
| Muestra 11 | 1-11 | 24 | Muestra desconocida |
| Muestra 12 | 1-12 | 25 | Muestra desconocida |
| Muestra 13 | 1-13 | 26 | Muestra desconocida |
| Muestra 14 | 1-14 | 27 | Muestra desconocida |
| Muestra 15 | 1-15 | 28 | Muestra desconocida |
| Patrón de control | 3-21 | 29 | QA/QC |
| Patrón δ empobrecido | 3-3 | 30 | Efecto memoria |
| Patrón δ enriquecido | 3-11 | 31 | Efecto memoria |
| Patrón δ enriquecido | 3-12 | 32 | Normalización |
| Muestra 16 | 1-16 | 33 | Muestra desconocida |
| Muestra 17 | 1-17 | 34 | Muestra desconocida |
| Muestra 18 | 1-18 | 35 | Muestra desconocida |
| Muestra 19 | 1-19 | 36 | Muestra desconocida |
| Muestra de 20 | 1-20 | 37 | Muestra desconocida |
| Patrón de control | 3-19 | 38 | QA/QC |
| Patrón δ enriquecido | 3-10 | 39 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-1 | 40 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-2 | 41 | Normalización |
| Muestra 21 | 1-21 | 42 | Muestra desconocida |
| Muestra 22 | 1-22 | 43 | Muestra desconocida |
| Muestra 23 | 1-23 | 44 | Muestra desconocida |
| Muestra 24 | 1-24 | 45 | Muestra desconocida |
| Muestra 25 | 1-25 | 46 | Muestra desconocida |
| Patrón de control | 3-20 | 47 | QA/QC |
| Patrón δ empobrecido | 3-3 | 48 | Efecto memoria |
| Patrón δ enriquecido | 3-11 | 49 | Efecto memoria |
| Patrón δ enriquecido | 3-12 | 50 | Normalización |
| Muestra 26 | 1-26 | 51 | Muestra desconocida |
| Muestra 27 | 1-27 | 52 | Muestra desconocida |
| Muestra 28 | 1-28 | 53 | Muestra desconocida |
| Muestra 29 | 1-29 | 54 | Muestra desconocida |
| Muestra 30 | 1-30 | 55 | Muestra desconocida |
| Patrón de control | 3-21 | 56 | QA/QC |
| Patrón δ enriquecido | 3-10 | 57 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-1 | 58 | Efecto memoria |
| Patrón δ empobrecido | 3-2 | 59 | Normalización |
| Agua desionizada | 3-28 | 60 | Lavado de DI |
| Agua desionizada | 3-28 | 61 | Lavado de DI |

Diseño para la plantilla de análisis para el equipo láser de Los Gatos Research



Bandeja 3, Fila 1 – Patrón empobrecido × 3

Bandeja 3, Fila 2 – Patrón enriquecido × 3

Bandeja 3, Fila 3 – Patrón de control × 3

Bandeja 3, Fila 4 – Agua desionizada de lavado

Bandeja 1 – Secuencia de muestras desconocidas colocadas desde posición 1 a la 30

Vea la tabla 1 para las descripciones

Diseño de orden de las bandejas delantera (1) y trasera (3) para el muestreador automático de Los Gatos Research.

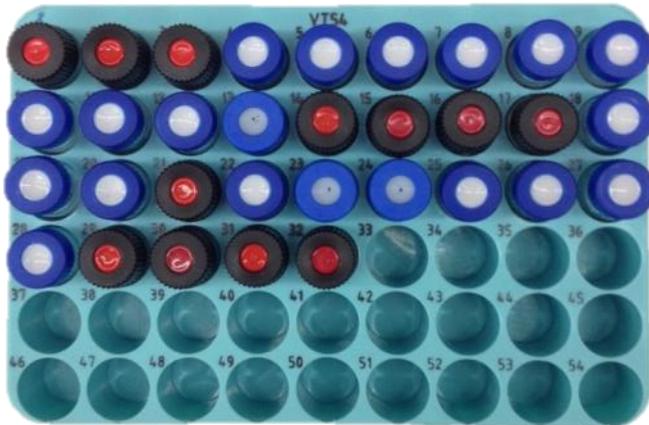
Nota: En esta plantilla de análisis, los frascos para cada medición y para los patrones de control contienen de 1 a 1.5 mL de agua. La redundancia por triplicado de los patrones es intencional para evitar depender de un solo frasco y asegurar el proceso QA/QC. El volumen de los patrones de laboratorio que se consume diariamente por plantilla de análisis es de 3 a 4 mL y fue diseñado para corresponder a las ampollas de patrones diarios disponibles del USGS y del OIEA (ver Apéndice 1).

Tabla 2. Ejemplo de plantilla de análisis para 20 muestras para equipos Picarro (CTC PaI).

Las muestras, los patrones de laboratorio y de control están dispuestos secuencialmente en las posiciones 1 – 32 en la bandeja 1. El procedimiento recomendado es 9 inyecciones, omitiendo las primeras 4 inyecciones. Esta plantilla contiene 32 filas de 9 inyecciones = 288 inyecciones individuales. El tiempo de análisis usando el Picarro L2130i es de aproximadamente 32 horas. La columna “Orden de ejecución” es la secuencia en la que se analizan las muestras. Se recomienda encarecidamente que los equipos Picarro estén condicionados previamente con 1 – 2 muestras de agua desionizada inmediatamente antes y después de la ejecución automática (mediante el software de coordinador). El volumen de agua por inyección es controlada por el inyector automático CTC o G2000.

| Muestra | Posición del vial | Orden de ejecución | Funcion |
|-----------------------------|-------------------|--------------------|-----------------------|
| Patrón δ enriquecido | 1-01 | 1 | Memoria/normalización |
| Patrón δ empobrecido | 1-02 | 2 | Memoria/normalización |
| Patrón δ empobrecido | 1-03 | 3 | Normalización |
| Muestra 1 | 1-04 | 4 | Muestra desconocida |
| Muestra 2 | 1-05 | 5 | Muestra desconocida |
| Muestra 3 | 1-06 | 6 | Muestra desconocida |
| Muestra 4 | 1-07 | 7 | Muestra desconocida |
| Muestra 5 | 1-08 | 8 | Muestra desconocida |
| Muestra 6 | 1-09 | 9 | Muestra desconocida |
| Muestra 7 | 1-10 | 10 | Muestra desconocida |
| Muestra 8 | 1-11 | 11 | Muestra desconocida |
| Muestra 9 | 1-12 | 12 | Muestra desconocida |
| Muestra 10 | 1-13 | 13 | Muestra desconocida |
| Control patrón | 1-14 | 14 | QA/QC |
| Patrón δ enriquecido | 1-15 | 15 | Memoria/normalización |
| Patrón δ empobrecido | 1-16 | 16 | Memoria/normalización |
| Patrón δ empobrecido | 1-17 | 17 | Normalización |
| Muestra 11 | 1-18 | 18 | Muestra desconocida |
| Muestra 12 | 1-19 | 19 | Muestra desconocida |
| Muestra 13 | 1-20 | 20 | Muestra desconocida |
| Control Patrón | 1-21 | 21 | QA/QC |
| Muestra 14 | 1-22 | 22 | Muestra desconocida |
| Muestra 15 | 1-23 | 23 | Muestra desconocida |
| Muestra 16 | 1-24 | 24 | Muestra desconocida |
| Muestra 17 | 1-25 | 25 | Muestra desconocida |
| Muestra 18 | 1-26 | 26 | Muestra desconocida |
| Muestra 19 | 1-27 | 27 | Muestra desconocida |
| Muestra de 20 | 1-28 | 28 | Muestra desconocida |
| Control Patrón | 1-29 | 29 | QA/QC |
| Patrón δ enriquecido | 1-30 | 30 | Memoria/normalización |
| Patrón δ empobrecido | 1-31 | 31 | Memoria/normalización |
| Patrón δ empobrecido | 1-32 | 32 | Normalización |

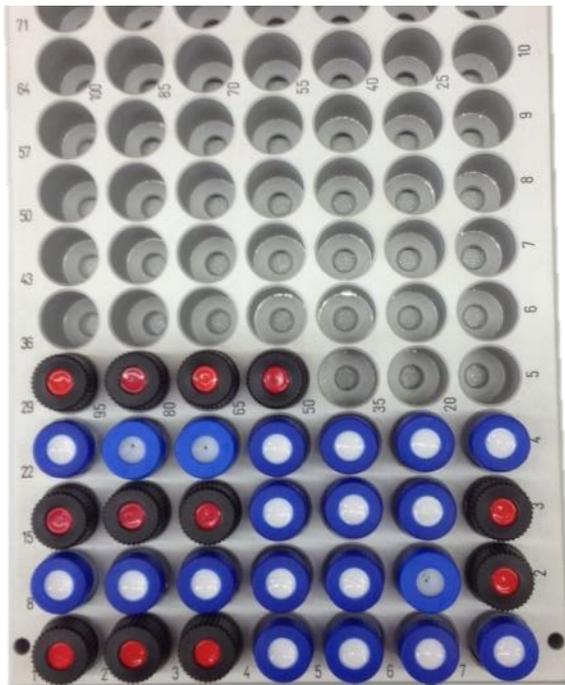
Ejemplo de diseño de plantilla de viales para análisis en un Picarro



Ejemplo de plantilla para análisis de 20 muestras y su disposición en la bandeja del muestreador automático Combi-PAL de Picarro.

Los frascos con tapones azules son muestras desconocidas. Los frascos con tapones rojos son patrones de laboratorio y de control, correspondientes a la distribución que se muestra en la tabla 2.

Bandeja delantera del muestreador automático Combi-PAL de Picarro.



Ejemplo de plantilla para análisis de 20 muestras y, su disposición en el Combi-PAL muestreador automático de Picarro G-2000.

Los frascos con tapones azules son muestras desconocidas. Los frascos con tapones rojos son patrones de laboratorio y de control, correspondiente a la distribución que se muestra en la tabla 2.

(Ver Apéndice 1 para un diseño alternativo)

Bandeja delantera del muestreador automático Combi-PAL de Picarro serie G-2000.

8.4 Crear una plantilla para 30 muestras en un instrumento de Los Gatos Research

1. En la página principal de LIMS, abrir "características especiales" ("Special Features").
2. Haga clic en "Plantillas de instrumento" ("Instrument Templates").
3. Haga clic en "Crear una nueva plantilla" ("Create a New Template").

Design Templates

List Instrument Templates | LGR v2 - SMOW2 SLAP2 | Create a New Template | Delete | Edit | Close

Edit Vial & Tray Positions | Duplicate this Template

Export Vial & Tray Positions

Import Vial & Tray Positions

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

General Information

Name: LGR v2 - SMOW2 SLAP2

Description: 54 samples

Instrument: L-->LGR-V2

Sample Information

Sample for Unfilled Positions: W-3

Number of injections: 9

Printing

Print sample list

Print sample list and multi-sheet template

4. En "Name", introduzca una descripción relevante (por ejemplo, Los Gatos Research 30 muestras).
5. En "Description", añadir detalles adicionales pertinentes (por ejemplo, los patrones que utilizan).
6. En "Instrument", puede elegir "L" o la letra apropiada para el láser de Los Gatos Research.
7. La muestra para posiciones sin utilizar - "Sample for Unfilled Positions" - es por defecto W-1 (un ejemplo ficticio). Este se utiliza, por ejemplo, cuando sólo 20 muestras se agregan a una plantilla de 30 posiciones. Este campo no puede dejarse en blanco.
8. Número de inyecciones ("Number of injections per sample"), deje a 9.
9. Haga clic en "Guardar" ("Save").
10. Una vez guardado, no se puede editar el campo "Name"; se pueden editar únicamente la descripción y otros campos. La plantilla puede ser eliminada y recreada en el caso de error.

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

Description: 54 samples

Instrument: L -> LGR-V2

Sample Information

Sample for Unfilled Positions: W-3

Number of injections: 9

Printing

Print sample list

Print sample list and multi-sheet template

Creación de una plantilla para análisis de muestras con la opción Design Templates.

La secuencia de análisis de patrones de medición, de control y las muestras del cliente se puede configurar haciendo clic en el botón "Edit Vial and Tray Positions". Aparecerá una plantilla de 12 muestras por página. Haga clic en Editar ("Edit") para completar (ejemplo terminado a continuación refleja líneas 1 – 12 en la tabla 1):

LGR 30

List Page: 1 Edit Add Page Delete Page Close

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

Vial Pos: posición del vial de una muestra en la bandeja de los automuestreadores. Por ejemplo, 1-1 significa bandeja 1 - posición 1, que indica de 3-7 bandeja 3 - posición 7.

Run order: El orden en el que se analizan las muestras, por ejemplo, 1, 2, 3... 30. (única)

Amt: Volumen de H₂O de la inyección en nL (p. ej. 400 hasta 1200 nL para LGR). *Importe: Este campo sólo está disponible para sistemas AIT-35d/TIWA-45EP, serie de DLT-100 no.* Si este campo se deja en blanco, el volumen de inyección es controlado mediante el panel de configuración instrumento.

Sample: Elige este botón para denotar una muestra desconocida.

Fixed Ref: Utilice el menú para seleccionar un laboratorio patrón, patrón o lavado muestra de control.

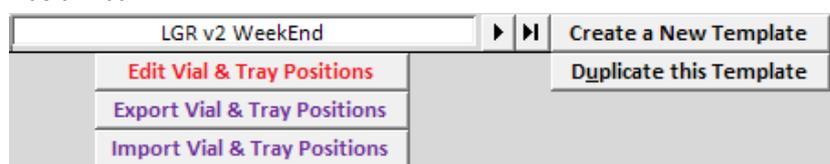
Add Page /Delete Page: añadir más páginas para aumentar la longitud de la plantilla. Siempre eliminar páginas a partir de la última página.

Diseño, importación o exportación de plantillas usando Excel

Es más conveniente diseñar plantillas de análisis en Excel y luego importarlas en *LIMS para Láseres 2015*. Las funciones de relleno automático y copiar-pegar de Excel facilitan el rápido diseño e importación una nueva plantilla de análisis en *LIMS para Láseres 2015*.

Exportar posiciones de los viales y bandeja: exportar la plantilla de análisis seleccionada a un archivo de Excel.

Importar posiciones de los viales y bandeja: importa la plantilla de análisis de Excel en *LIMS para Láseres 2015*. La plantilla será visible, y puede ser editada usando el modo de edición que se muestra más arriba.

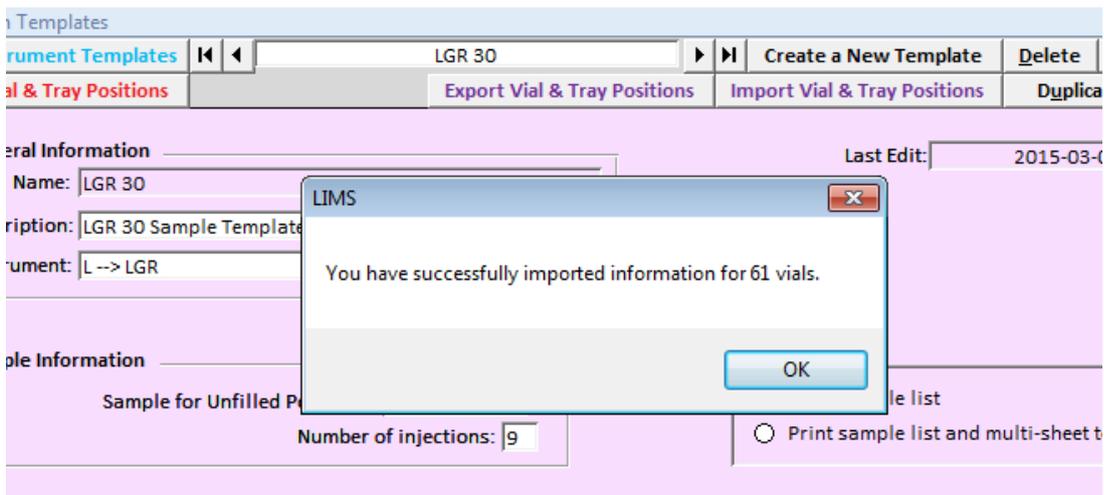
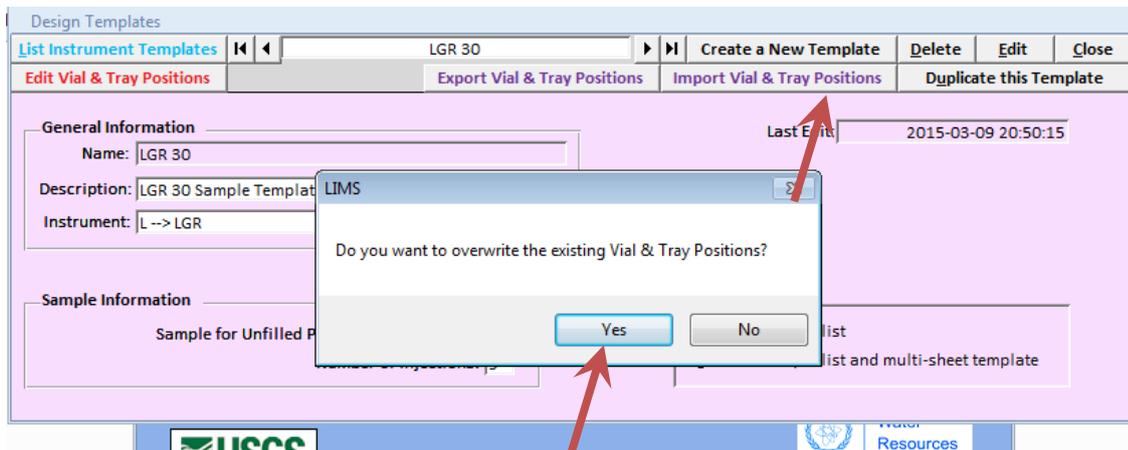


La página de plantillas que se muestra en la página anterior se muestra a continuación utilizando Excel. Los encabezados de la hoja de cálculo deben ser exactamente como se muestra para fines de importación.

| | 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 | | | | | | | |

Plantilla de importación desde Excel

1. Para importar una plantilla de Excel, haga clic en botón de "Import Vial and Tray Positions".
2. Seleccione el archivo de Excel
3. Haga clic en "Sí" (si se cometieron errores, un error descriptivo se mostrará)
4. Si ya se ha hecho una plantilla anterior, confirmar que se sobrescribe sobre ella.



Sugerencia: Una función útil de la página de la plantilla de diseño es el botón "Duplicar". Por ejemplo, supongamos que desea plantillas de análisis para 60, 30 y 10 muestras. Empezar por construir la plantilla LGR con mayor número de muestras (60-posiciones), duplicar y editar páginas para obtener una plantilla de muestra más pequeña. Para la plantilla LGR por defecto, sin embargo, esto también requerirá recrear las páginas de patrones y los controles que siguen las muestras desconocidas. Afortunadamente, rara vez necesitará cambiar una buena plantilla, una vez creada.

¡Atención! Es fácil sobrescribir erróneamente una plantilla de análisis existente. Asegúrese de primero duplicar y renombrar la plantilla *antes de* hacer y guardar los cambios en ella.

8.5 Crear una plantilla de análisis de 20 muestras para un instrumento Picarro

1. En la página principal de LIMS, abrir "características especiales" ("Special Features").
2. Haga clic en "Plantillas de instrumento" ("Instrument Templates").
3. Haga clic en "Crear una nueva plantilla" ("Create a New Template").

Design Templates

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

Edit Vial & Tray Positions
Export Vial & Tray Positions
Import Vial & Tray Positions

Duplicate this Template

General Information

Name: Picarro
Description: Picarro 20 Sample
Instrument: P--> Picarro 1102i

Last Edit: 5/27/2014 2:50:00 PM

Sample Information

Sample for Unfilled Positions: W-1

Printing

Print sample list
 Print sample list and multi-sheet template

4. En "Name", introduzca una descripción relevante (por ejemplo, Picarro 20 muestras).
5. En "Description", añadir detalles adicionales pertinentes (por ejemplo, los patrones que utilizan).
6. En "Instrument", puede elegir "P" o la letra apropiada para el láser Picarro.
7. La muestra para posiciones sin utilizar - "Sample for Unfilled Positions" - es por defecto W-1 (un ejemplo ficticio). Este se utiliza, por ejemplo, cuando sólo 10 muestras se agregan a una plantilla de 20 posiciones. Este campo no puede dejarse en blanco.
8. Número de inyecciones ("Number of injections per sample"), se deja en 9.
9. Haga clic en "Guardar" ("Save").
10. Una vez guardado, no se puede editar el campo "Name"; se pueden editar sólo la descripción y otros campos. La plantilla puede ser eliminada y recreada en el caso de error.

Design Templates

List Instrument Templates | Picarro | 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

Description: Picarro 20 Sample

Instrument: P--> Picarro 1102i

Last Edit: 5/27/2014 2:50:00 PM

Sample Information

Sample for Unfilled Positions: W-1

Printing

Print sample list

Print sample list and multi-sheet template

Editar plantillas de análisis de muestra para un equipo Picarro utilizando páginas

La secuencia de análisis de patrones de medición, de control y de las muestras del cliente se puede configurar haciendo clic en el botón "Editar posiciones de Vial y bandeja" (Edit Vial & Tray positions). Aparecerá una página en blanco para 12 muestras. Haga clic en Editar para completar (ejemplo terminado a continuación como se refleja en las líneas 1 – 12 de la tabla 2):

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 |

Vial Pos: Posición del vial de una muestra en la bandeja de los automuestradores. Por ejemplo, 1-1 significa bandeja 1 posición 1, o 3-7 indica bandeja 3 posición 7.

Run Order: Orden en el que las muestras son analizadas (1, 2, 3,... 30)

Sample: Elija este botón para colocar una muestra desconocida.

Fixed Ref: Utilice el menú desplegable para seleccionar el patrón de laboratorio, control o agua DI para lavar.

Add /Delete Page: añadir más páginas para aumentar la longitud de la plantilla. Siempre eliminar páginas a partir de la última página.

Usando Excel para diseño e importar o exportar plantillas de análisis

En algunos casos, puede ser más conveniente diseñar plantillas de análisis en Excel e importarlas en *LIMS para Láseres 2015*. Las funciones de relleno automático y copiar-pegar de Excel facilitan el rápido diseño y luego importación una nueva plantilla de análisis en *LIMS para Láseres 2015*.



La página de plantillas que se presenta en la página anterior se muestra a continuación en formato Excel. Los encabezados de la hoja de cálculo deben ser exactamente como se muestra a continuación para fines de importación.

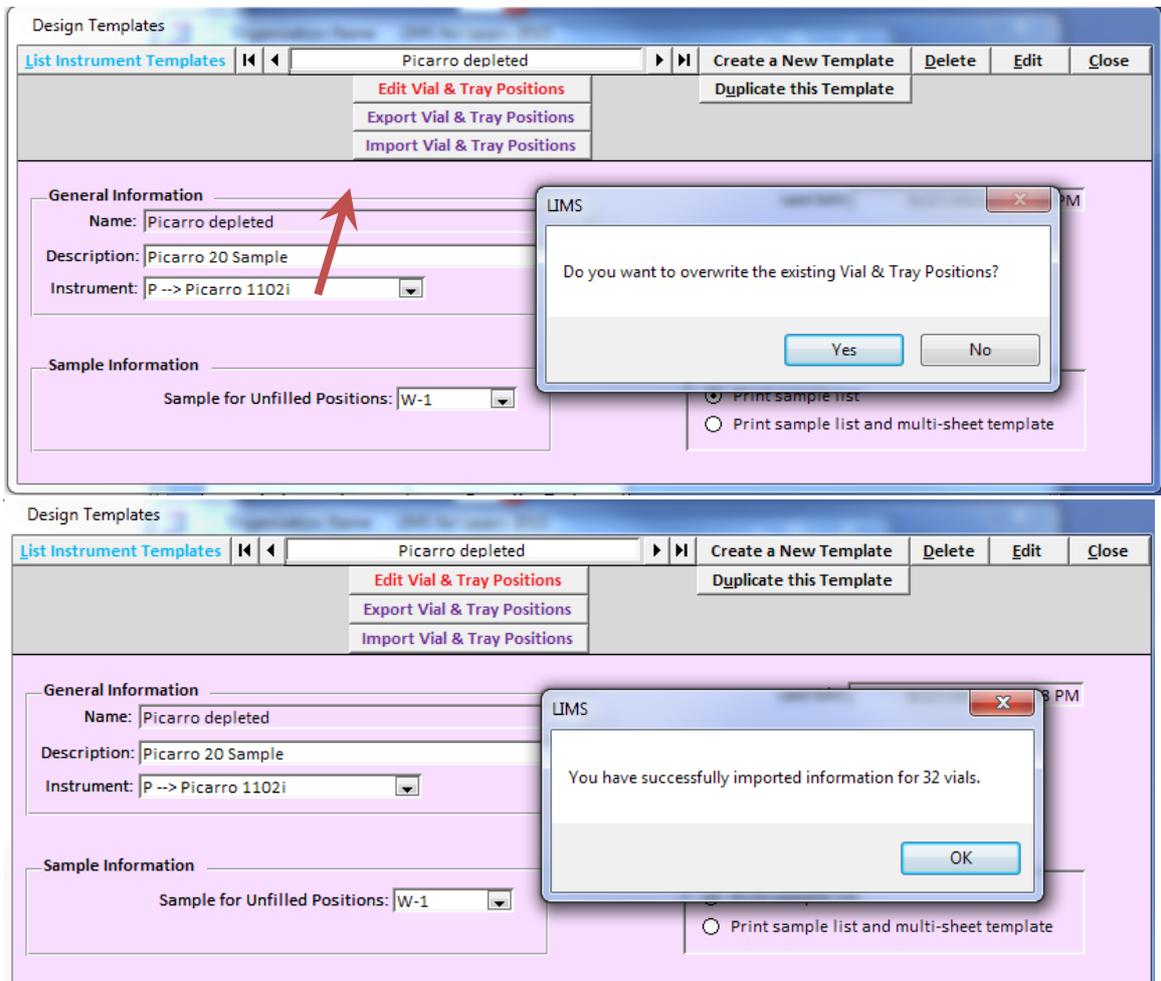
| | A | B | C | D | E |
|----|--------------|---------------|--------------|------|---------------|
| 1 | LIMS List No | Tray_Position | Ref_OurLabID | Page | Page_Position |
| 2 | 1 | 1-01 | W-31 | 1 | 1 |
| 3 | 2 | 1-02 | W-32 | 1 | 2 |
| 4 | 3 | 1-03 | W-32 | 1 | 3 |
| 5 | 4 | 1-04 | | 1 | 4 |
| 6 | 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 | | | | | |

Exportar posiciones de los viales y bandeja: permite exportar la plantilla de análisis seleccionada a un archivo de Excel.

Importar posiciones de los viales y bandeja: permite importar la plantilla de análisis de Excel en *LIMS para Láseres 2015*. La plantilla será visible, y puede ser editada usando la página normal se muestra del modo de edición.

Plantilla de importación desde Excel

1. Para importar una plantilla de Excel, haga clic en botón de "Import Vial and Tray Positions".
2. Seleccione el archivo de Excel
3. Haga clic en "Sí" (si se cometieron errores, se indicara el tipo de error).
4. Si ya se ha hecho una plantilla anterior, confirmar que se sobrescribe sobre la anterior.



Sugerencia: Una función útil de la página de la plantilla de diseño es el botón "Duplicar". Por ejemplo, supongamos que desea plantillas de análisis para 60, 30 y 10 muestras. Empezar por construir la plantilla con mayor número de muestras (60-posiciones), duplicar y editar páginas para obtener una plantilla de muestra más pequeña. Para la plantilla por defecto, sin embargo, esto también requerirá recrear las páginas de patrones y los controles que siguen a las muestras desconocidas. Afortunadamente, rara vez se necesita cambiar una buena plantilla, una vez creada.

¡Atención! Es fácil sobrescribir erróneamente una plantilla de análisis existente. Asegúrese de primero duplicar y renombrar la plantilla *antes de* hacer y guardar los cambios en ella.

8.6 Imprimir hojas múltiples de muestras

La organización práctica de las botellas de agua con las muestras y los viales en relación con la plantilla del equipo láser se puede facilitar utilizando una copia impresa en varias hojas de la plantilla. Esta opción permite imprimir una copia de la disposición de la secuencia correspondiente a la plantilla de análisis, y ayuda al personal de laboratorio a organizar las muestras y frascos, por lo general el día antes de que las muestras sean analizadas. De esta manera, una segunda persona puede confirmar que la muestra correcta se ha puesto en la ubicación correcta de la plantilla, mejorando la calidad del laboratorio.

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

Description: Picarro 20 Sample

Instrument: P--> Picarro 1102i

Last Edit: 5/27/2014 2:35:28 PM

Sample Information

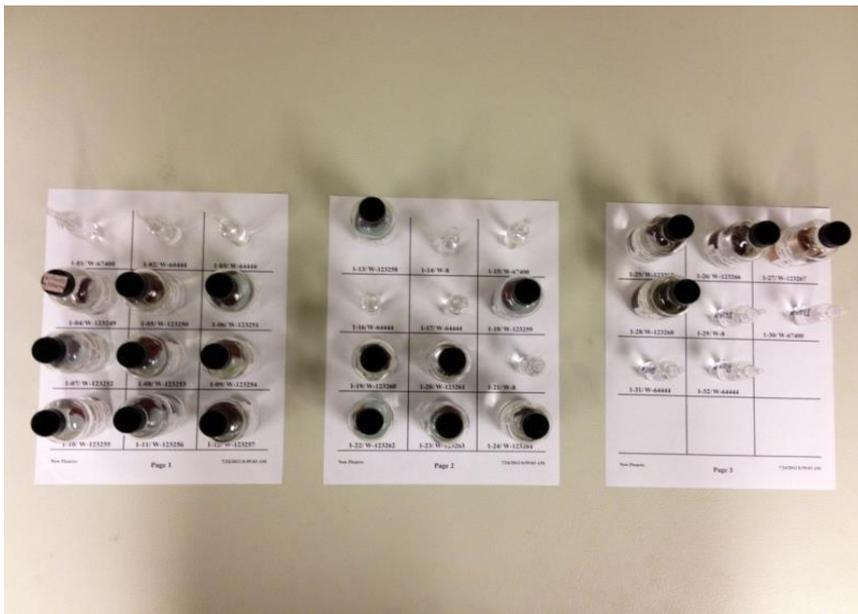
Sample for Unfilled Positions: W-1

Printing

Print sample list

Print sample list and multi-sheet template

Habilitar esta opción permite generar una página resumen como se ilustra a continuación. En la foto inferior, se muestra la disposición de 20 muestras correspondientes a una planilla con patrones y muestras para ser dispensadas en viales.



LIMS imprime varias hojas de plantilla para la organización de muestras y patrones.

8.7 Añadir muestras a las plantillas de análisis

Para agregar las muestras a una plantilla de análisis, un cliente y las muestras de su proyecto deben existir ya en *LIMS para Láseres 2015* (véase el capítulo 6.1).

Con fines ilustrativos, se analizarán las muestras de un proyecto que contenga muestras de agua de John Smith (ver capítulo 6). Smith suministró 10 muestras de agua para analizar en un Picarro y un instrumento de Los Gatos Research. Los valores $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ de las muestras abarcan los ID de laboratorio W-1001 a W-1010 (abajo).

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 Añadir muestras a una cola de análisis en un instrumento Picarro

1. Abre el proyecto de Smith bajo "Water Resource Project" en la página del proyecto haciendo doble clic.
2. Haga clic en "Agregar muestras a plantilla de instrumento" ("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

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

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: ▼

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. En el menú "Template", seleccione "Picarro 20 muestras" y luego haga clic en el botón "Añadir muestras a la plantilla seleccionada" ("Add Samples to Selected Template") en la parte superior derecha.
4. Las muestras se agregan ahora a la cola de análisis de 20 muestras Picarro.

8.9 Agregar muestras a la cola de análisis del equipo Los Gatos Research

1. Abrir "Water Resource Project" desde la página del proyecto haciendo doble clic en el mismo.
2. Haga clic en "Añadir muestras a plantilla de instrumento" ("Add Samples to Instrument Template") en la parte superior izquierda.

The screenshot shows the 'Projects' application window. At the top, there is a navigation bar with buttons for 'List All Projects', 'Edit', 'Delete', and 'Close'. Below this is a secondary navigation bar with buttons for 'Show Samples', 'Export Results', 'Delta Plot', 'Invoice', and 'Print Labels'. A red arrow points to the 'Add Samples to Instrument Template' button, which is highlighted in blue. Below the navigation bars is the 'General Information' section, which contains several input fields: 'Submission' (8/24/2015), 'Date Results Reported' (empty), 'Customer' (Smith, John), 'Range' (W-1000 to W-1010), 'Purpose' (Water Resources Project), 'Location' (empty), and 'Project Comments' (empty). At the bottom of the section, there are three summary statistics: 'Number of samples with missing delta values: 11 of 11 samples', 'Number of Missing $\delta^{2}\text{H}$ Samples: 11', and 'Number of Missing $\delta^{18}\text{O}$ Samples: 11'.

3. En el menú desplegable de "Template", seleccione "Los Gatos Research de 30 muestras..." y luego haga clic en el botón "Añadir muestras a la plantilla seleccionada" ("Add Samples to Selected Template") en la parte superior derecha.
4. Las muestras se agregan ahora a la plantilla de análisis de Los Gatos Research de 30 muestras.

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)

Recuerde: Las Plantillas de análisis LIMS son únicas para cada instrumento.

8.10 Opciones para añadir muestras

Hay varias características útiles en las páginas de "Añadir muestras para ser analizadas" ("Add Samples to be Analysed") a considerar antes de hacer clic en "Agregar" (Add) muestras a la cola:

Opciones "Desde" y "A"

Las opciones "Desde (From) y a (To)" confirman el rango de identificación de las muestras en laboratorio que se añade a la cola. De forma predeterminada, todas las muestras en el proyecto de un cliente se proponen para ser añadidas a la cola – muestras de John Smith de W-1001 a W-1010.

Sin embargo, si uno desea seleccionar sólo las primeras cinco muestras del Sr. Smith, uno podría introducir "1005" en el cuadro "A" (To).

Si uno quisiera medir solamente las últimas cinco muestras de su proyecto, uno podría introducir de 1006 a 1010.

Repetición de número no-consecutivos (por defecto = 2)

El número de repeticiones no consecutivas es normalmente "2". Esto significa que el laboratorio analizará muestras *dos veces usando 2 viales diferentes en esa plantilla de análisis del Sr. Smith* y preferiblemente en días diferentes. Por ejemplo, para un pequeño proyecto (1, 2, 3) de 3 muestras:

| | |
|---------------|---|
| Secuencia = 1 | Cola de muestra: 1, 2, 3 |
| Secuencia = 2 | Cola de muestra: 1, 2, 3, 1, 2, 3 |
| Secuencia = 4 | Cola de muestra: 1, 2, 3, 1, 2, 3, 1, 2, 3, 1, 2, 3 |

Número de repeticiones consecutivas (por defecto = 1)

Esto cambia a un valor más alto significa que cada muestra se pone en cola en "grupos", para un pequeño proyecto (1, 2, 3) de 3 muestras:

| | |
|---------------|---|
| Secuencia = 1 | Cola de muestra: 1, 2, 3 |
| Secuencia = 2 | Cola de muestra: 1, 1, 2, 2, 3, 3 |
| Secuencia = 4 | Cola de muestra: 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4 |

Con ambas opciones, utilizando repeticiones consecutivas y no-consecutivas, el resultado para la Secuencia "2" es:

Cola de muestras: 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](#)

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) 

"Añadir a" (Por defecto = final de la cola)

La opción de añadir muestras a la parte delantera de una cola permite dar seguimiento rápido a las muestras de alta prioridad, por delante de las que ya se encuentran en la cola.

Por ejemplo, si llegan al laboratorio 5 muestras urgentes, se podría agregar las 5 muestras de ese proyecto urgente a la parte "delantera de la cola".

Si no hay muestras en la cola de análisis, cualquier opción elegida produce el mismo resultado.

8.11 Eliminación de muestras en una cola

Las muestras añadidas a una cola de análisis se seguirán acumulando a medida que se agregan hasta que todas las muestras hayan sido medidas y su "indicativo" (run flag) se establece en cero, o se eliminan en conjunto de la cola.

Hay dos maneras de eliminar las muestras de una cola de análisis en marcha. Esta acción puede requerirse, por ejemplo, si uno ha añadido erróneamente muestras a la plantilla de instrumento equivocado o simplemente desea eliminar las muestras.

Eliminación de muestras de la cola de la página del proyecto

Si se añaden muestras de todo un proyecto a una cola de análisis, se eliminan de la misma manera que se agregaron. En el panel Proyecto, haga clic en "Añadir muestras a plantilla de instrumento" (Add Samples to Instrument Template). Se abre la siguiente ventana, y ahora en su lugar, haga clic en "Borrar" para eliminar todas las muestras del proyecto en cola o alternativamente elimine muestras seleccionadas utilizando la función "Desde" y "A".

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)

Eliminación en un solo clic las muestras de Smith de la cola de análisis de un Picarro dentro del Proyecto.

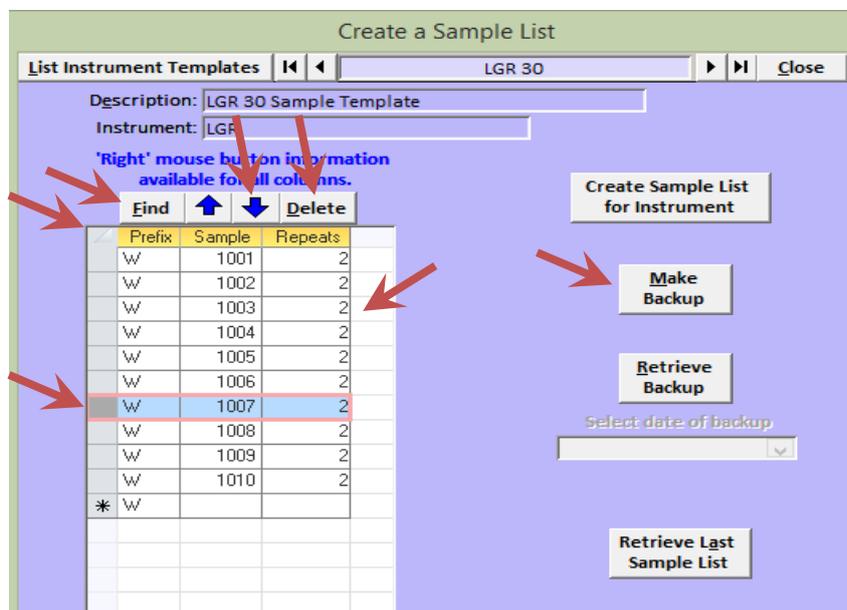
Extracción manual y la edición de muestras de cola en una plantilla

Una segunda manera de editar una cola de plantilla de análisis es hacerlo manualmente:

1. En la Página principal, haga clic en "Crear muestra lista de instrumentos" ("Create Sample List for Instruments").
2. En "plantillas de lista de instrumento" ("List Instrument Templates"), seleccione la cola de la plantilla de instrumento que desea modificar.

Hay un número de opciones para su edición manual:

- Utilice el botón "Buscar" para localizar una muestra específica de la cola (útil para largas colas).
- Mover muestras arriba o abajo para cambiar la prioridad de secuencia, para ello resaltar y mover con las teclas que contiene flechas azules.
- Eliminar una muestra o grupo de muestras, resaltarlas y hacer clic en "Eliminar".
- Editar manualmente el número de repeticiones de una o más muestras (establecido de 0 a > 1).
- Borrar la cola completamente haga clic a la izquierda para seleccionar todo (como en Excel) y haga clic en la tecla "Suprimir" del teclado.
- Hacer una copia de seguridad de una cola y recuperarla (precaución en caso de errores de edición).
- Carga la última lista de muestra (útil para repetir mediciones sin tener que repetir los pasos de agregar otra vez muestras de la página del proyecto).



LIMS para Láseres 2015 Manual de edición de cola de análisis.

8.12 Repetición de muestras en LIMS para Láseres 2015

La opción predeterminada de repetición en *LIMS para Láseres 2015* es que todas las muestras se miden dos veces, preferentemente en días diferentes. Es una buena política de laboratorio realizar dos o más repeticiones de análisis de cada muestra (en frascos diferentes). Esta política puede ser eliminada manualmente (ver capítulo 12.5).

El beneficio de tener dos o más análisis de la misma muestra conlleva aplicar buenas prácticas de laboratorio, ayuda a detectar errores de colocación de los viales, permite al operador comprobar la concordancia entre dos o más análisis de la misma muestra, ayuda a identificar las muestras problemáticas (por ejemplo, repeticiones pobres) y permite comparar el rendimiento de repeticiones de la muestra con los patrones de control. Este enfoque da resultados realistas del funcionamiento del láser.

Nota: Para obtener suficiente precisión en la medición de $\delta^{17}\text{O}$, se sugieren por lo menos realizar 50 o más repeticiones con varios viales, en comparación con $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$.

8.13 El número siguiente de muestra

El botón de "número siguiente de muestra" ("Next Sample Number") se encuentra en la sección de "Características especiales" ("Special Features"). Esta utilidad le permite especificar que el siguiente número asignado nuestro de laboratorio a las muestras importadas recientemente.

Si bien esta opción rara vez se necesita (por ejemplo, para corregir errores), es útil para añadir patrones de medición de laboratorio y mantenerlos restringidos dentro de un rango específico "W". Generalmente, es preferible y más fácil de recordar patrones de medición con un número secuencial de W bajo.

Por ejemplo, por defecto en *LIMS para Láseres 2015* las muestras de cliente comienzan a partir de W-1001. El último marcador predeterminado para nuestros patrones de laboratorio es W-69. Esto significa que los ID de W-70 a W-997 todavía están libremente disponibles para asignar a los nuevos patrones de medición.

Clic en el botón de "número siguiente de muestra" ("Next Sample Number") revela el siguiente número de W que se asignará a las muestras del cliente entrante - aquí W-1011 es el ID siguiente.

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:

Description:

Next Sample:

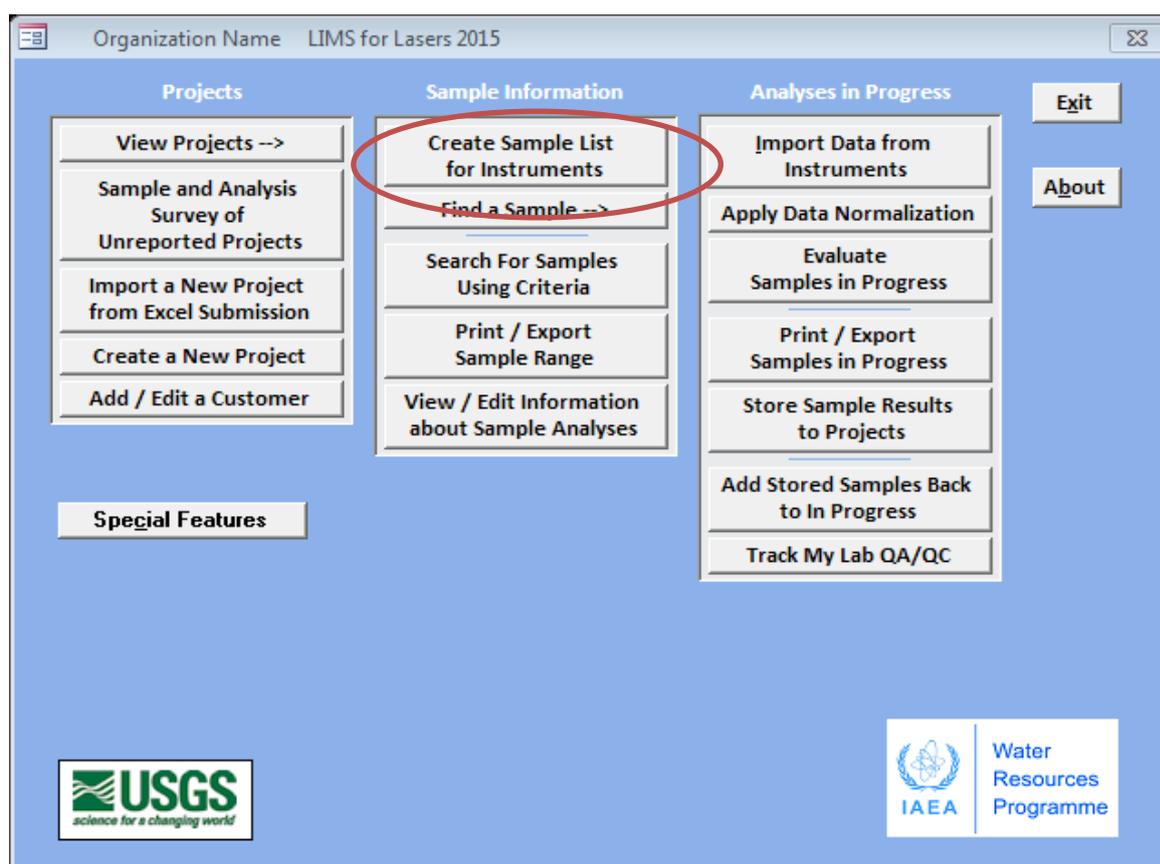
Supongamos que queremos añadir 10 patrones nuevos de laboratorio, pero que sigan secuencialmente los patrones de laboratorio (por ejemplo, terminando en W-69). En primer lugar, tenga en cuenta el último número de W se muestra (aquí es W-1011, la última de las muestras de Smith) y anótelos. Haga clic en "Editar", cambiar "numero siguiente de muestra" a 70 y haga clic en "Guardar". A continuación, importar los 10 patrones nuevos de medición en un nuevo proyecto como se describe en el capítulo 6. Dará los nuevos ID W-70 a W-79.

¡Atención!: Cuando termine, vaya a la opción del número siguiente de muestra, haga clic en "Editar" y cambie el número a lo que originalmente fue encontrado (aquí W-1011). Esto asegura que se solapen con cualquier número W preexistente.

9 Analizar muestras en un láser Picarro

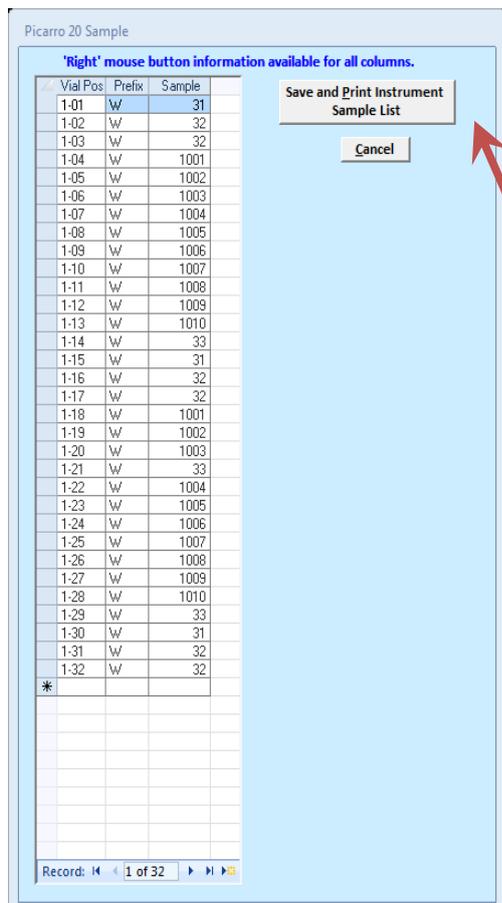
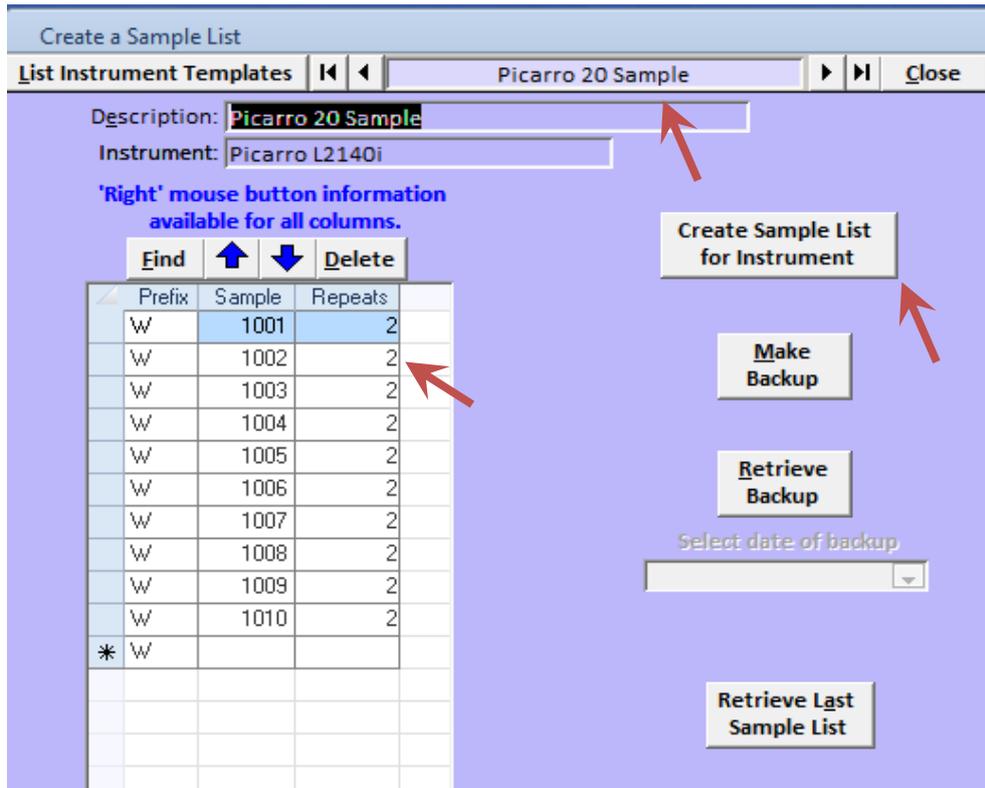
9.1 Crear una lista de muestra para un instrumento Picarro

LIMS para Láseres 2015 crea listas de muestras (llamados archivos de secuencia o listas de ejecución) para instrumentos Picarro. Estas listas se transfieren al instrumento mediante una memoria USB o a través de una ubicación en red. Esta acción se realiza desde el botón "Crear lista de muestras para instrumentos" ("Create Sample List for Instruments") en la segunda columna de información de muestra en la página principal de LIMS.



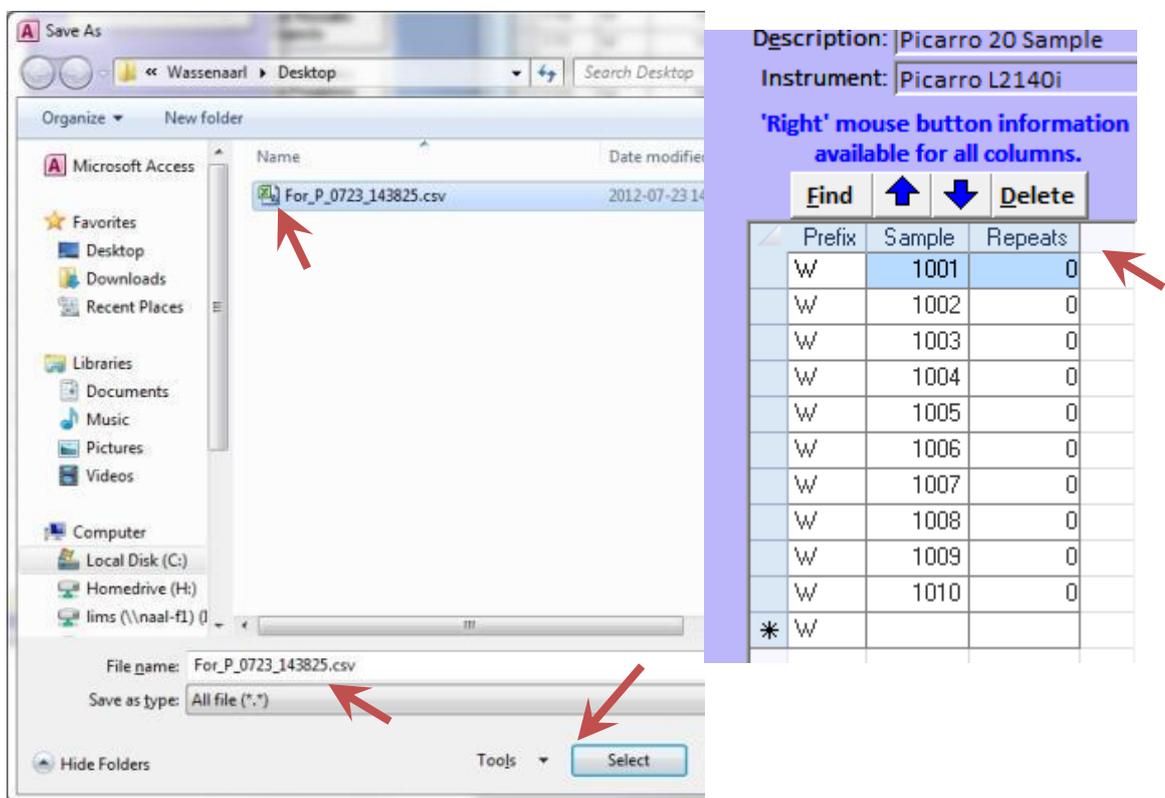
Por ejemplo, creamos una lista de las muestras del Sr. Smith para un instrumento Picarro.

1. Comprobar que las muestras del Sr. Smith se agregaron la cola de análisis del láser Picarro (ver capítulo 8.8).
2. En la Página principal LIMS, haga clic en "Crear lista de muestra para instrumentos" ("Create Sample List for Instruments").
3. Seleccione "lista de muestras para instrumento" ("List Instrument Templates") y haga clic en "Picarro 20 muestras", la cola de muestras se abrirá.
4. Haga clic en "Crear lista de muestras para instrumento" ("Create Sample List for Instrument"), un cuadro de diálogo confirma que las 10 muestras del Sr. Smith deben ser agregadas a la cola actual (dos veces). Haga clic en "Aceptar".



En la cola de arriba, el proyecto del Sr. Smith (W-1001 a W-1010) está configurado para ser analizado dos veces (# de repeticiones = 2).

5. La secuencia de análisis, que contiene los patrones de medición local y de control asignados en la plantilla y las muestras del Sr. Smith, se abre (figura anterior).
6. Haga clic en "Guardar e imprimir la lista de muestras para instrumento" ("Save and Print Instrument Sample List").
7. Se abre una ventana de diálogo preguntando donde guardar el archivo con la lista de muestra/secuencia. Este es el archivo CSV que se transferirá al instrumento Picarro, y debe guardarse en una memoria USB o a una ubicación en red desde donde el software coordinador de la adquisición de datos Picarro pueda cargar el archivo.
8. Haga clic en "seleccionar" para guardar el archivo en la ubicación deseada (por ejemplo, memoria USB para la transferencia al instrumento). Nota: el archivo guardado está en formato CSV, y el nombre del archivo tiene el prefijo de instrumento "For P" (Picarro) y la fecha. Esta nomenclatura ayuda a mantener un registro de las listas de muestras de Picarro que se acumulan con el tiempo. Alternativamente, puede cambiar el nombre del archivo de ejecución a algo más descriptivo, como Smith Samples.csv.



Una ventana se abre preguntando dónde imprimir la lista de muestras a ejecutar (por ejemplo, la impresora predeterminada de Windows). Se imprime un resumen de una página con la secuencia de la lista de muestras.

9. Después de la impresión, la ventana con la cola de muestras se vuelve a abrir y en la columna "repeats" el número disminuye de 2 a 0 (derecha). Esto indica que todas las muestras han sido analizadas.
10. La lista impresa de las muestras a ser analizadas (página siguiente) muestra la posición del

frasco y nuestro ID de laboratorio de los patrones de medición y de control, y de las muestras desconocidas.

11. Rellene los 32 viales con las muestras desconocidas y patrones con $\approx 1,5$ mL de muestra, según las directrices del Picarro. Pegue (o escriba) el número "W" a cada vial. Cargue la bandeja del muestreador automático con los viales de muestras desconocidas y patrones según la lista de muestras impresa.

Picarro 20 Sample Samples To Be Analyzed

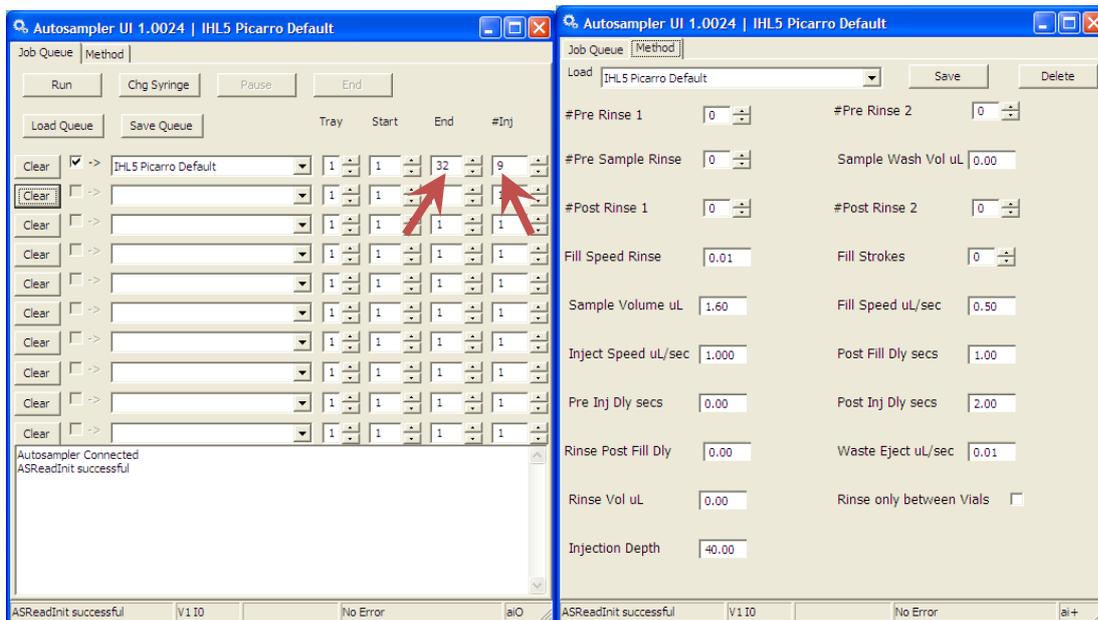
| Vial Pos | Our Lab ID | Sample ID | Project | Notes | Vial Pos | Our Lab ID | Sample ID |
|----------|------------|---------------|-----------------|-------|----------|------------|-----------|
| 1-01 | W-31 | High Standard | Refere 20120927 | _____ | | | |
| 1-02 | W-32 | Low Standard | Refere 20120927 | _____ | | | |
| 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 | _____ | | | |

Ejemplo de una lista con una plantilla de análisis

12. En el muestreador automático de Picarro, los patrones y muestras desconocidas se analizaran en el orden configurado con la plantilla descrita y presentada arriba. Compruebe la lista de muestras impresa de LIMS para asegurarse de que todos los viales se ubican en las posiciones correctas, que dependerán del modelo de muestreador automático que está siendo utilizado.

En la figura siguiente (izquierda), se muestra una pantalla del muestreador automático del Picarro G-2000 para la plantilla de análisis de 20 muestras (20 muestras y patrones dan un total de 32 muestras). Cada muestra se ha configurado para ser medida 9 veces, según las recomendaciones, a partir de la bandeja 1, posición 1. En la unidad de control Combi PAL más antigua (no mostrada), la misma configuración de análisis se realiza utilizando la unidad manual PAL.

Nota: Ni las muestras de acondicionado previo al análisis ni las de análisis posterior de lavado se enumeran. La razón es que *el archivo de salida de datos CSV Picarro debe contener sólo los datos de las muestras* y ni los datos de acondicionamiento previo o lavado aparecen en el archivo de salida. (Véase el apéndice 1).



PRECAUCIÓN: Debe ser consciente de que el análisis de las muestras mediante el software de datos Picarro es independiente de *LIMS para Láseres 2015*. No hay ninguna conexión coordinada entre el instrumento y el archivo mostrado en el ejemplo. Por lo tanto, asegúrese de que el número y la ubicación de análisis en el muestreador automático o Combi PAL de Picarro *coinciden exactamente con lo que espera la plantilla de análisis de LIMS*.

Por último, asegúrese de crear un archivo nuevo de salida Picarro inmediatamente antes de iniciar la ejecución automática (autorun) para evitar la importación de datos de series previas o muestras de acondicionamiento.

El segundo panel (arriba, derecha) muestra el valor predeterminado de parámetros de inyección de muestra del Picarro 2130i. Aquí una inyección de 1.6 µL alcanza el objetivo instrumental de una fracción de volumen de H₂O de 20.000 ppm. Los parámetros del muestreador automático mostrados se encuentran en el controlador Combi PAL. Consulte los manuales de usuario de instrumentos Picarro para los detalles de la instalación de muestreadores automáticos.

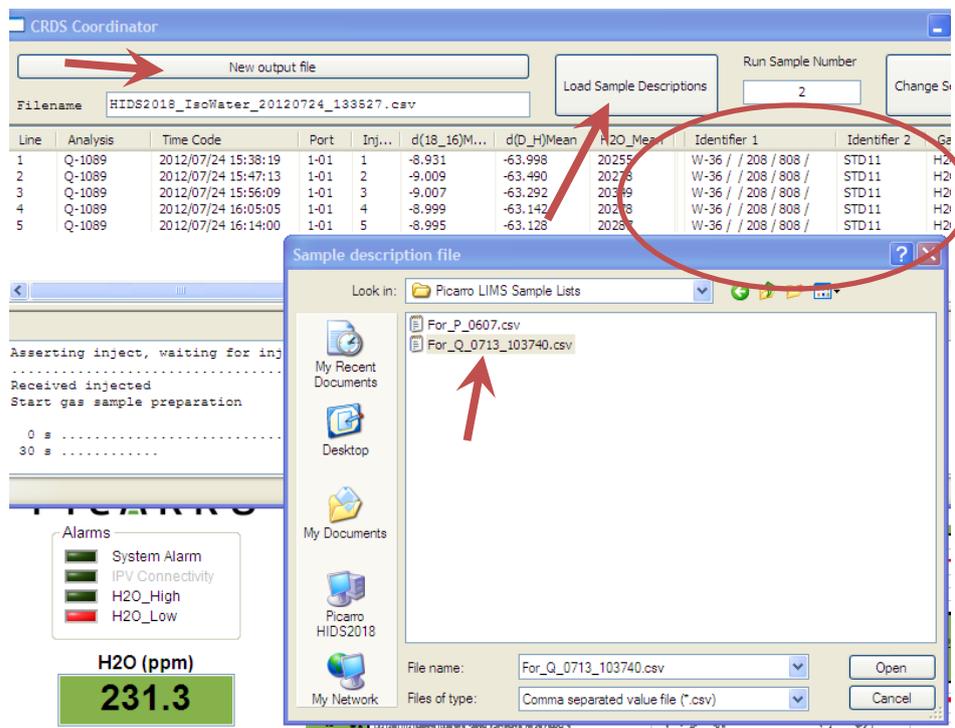
En todos los instrumentos Picarro, la recopilación de datos de muestras, integración y procesamiento

de valores δ medidos se realiza mediante el software coordinador de adquisición de datos de Picarro y su software de control. En la pantalla de abajo, vemos las primeras 5 inyecciones de un archivo de ejecución automática (autorun). Los datos de salida de ejecución automática (autorun) se guardarán en el archivo que se creó cuando se inició el software coordinador del Picarro (por ejemplo, HIDS2018_Isowater_201207024_133527.csv).

La lista de muestras de LIMS para instrumentos Picarro, creado en el capítulo 9.1, se puede cargar en el software coordinador de LIMS cuando aparecen una o más líneas de resultados de análisis en la ventana del software coordinador. La lista de muestras de *LIMS para Láseres 2015* se puede cargar desde una memoria USB o a través de una conexión de red.

Agregar la lista de muestras de LIMS al software coordinador de Picarro

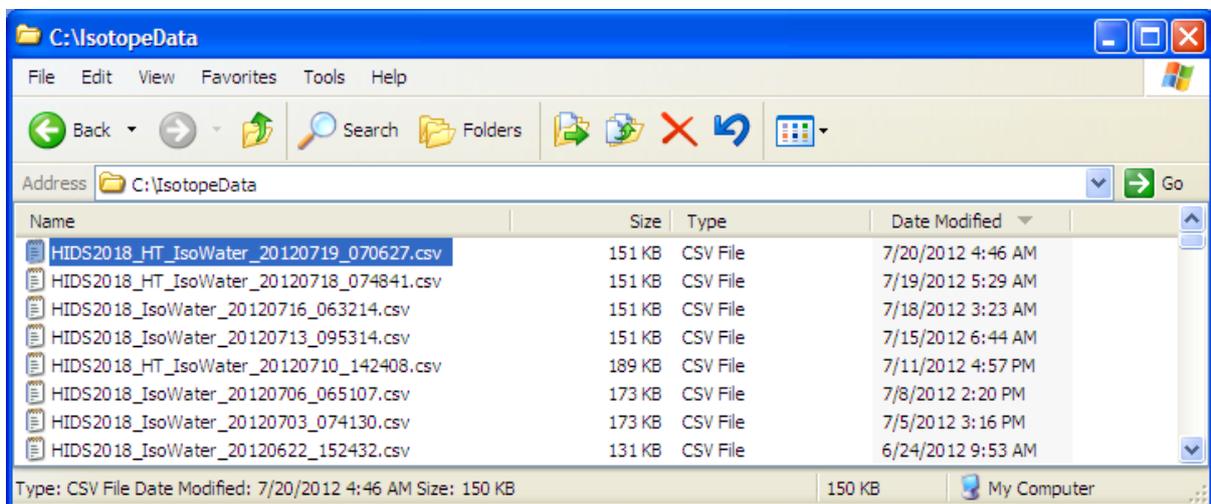
1. Iniciar la ejecución automática (autorun) de análisis del equipo Picarro y esperar que los resultados isotópicos de la muestra aparezcan en la ventana del coordinador (y antes de que termine la ejecución automática); esto puede tardar unos minutos después de la primera inyección de la muestra.
2. Después, en el coordinador del Picarro, haga clic en botón de "Carga descripción de muestras" ("Load Sample Descriptions").
3. Localizar la lista de muestras generada por LIMS, aquí denotada como "For_Q_0713_103740.csv" (el prefijo de un segundo instrumento Picarro era "Q" en lugar de la predeterminada "P").
4. La información ahora rellenará los campos "Identificador 1" y "identificador 2" desde el archivo LIMS, que corresponde con las muestras y patrones a analizar.
5. Permita terminar la ejecución automática hasta el final (30 horas por defecto).



9.2 Importación de datos isotópicos del equipo Picarro

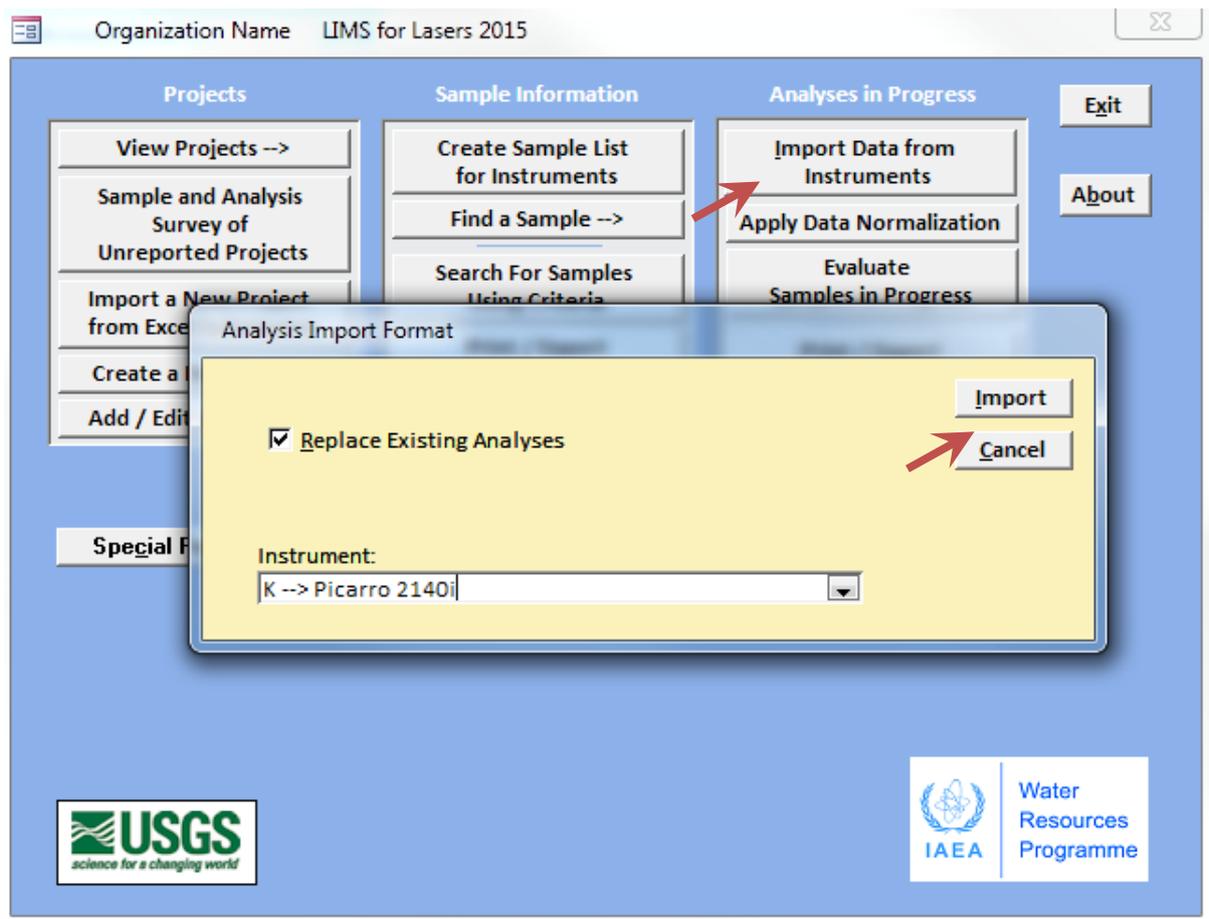
Una vez realizados los análisis isotópicos en el instrumento Picarro utilizando los ID de LIMS, los resultados pueden ser importados en *LIMS para Láseres 2015* para su cribado, análisis y normalización de datos, procesamiento y evaluación, y generación del informe final para el cliente.

El archivo completo CSV se encuentra en el instrumento Picarro, generalmente en la ubicación de disco llamado C:\IsotopeData. El nombre del archivo de salida será el mismo asignado en el software del coordinador al inicio de ejecución de análisis. A continuación se muestran algunos ejemplos de archivos CSV de Picarro.

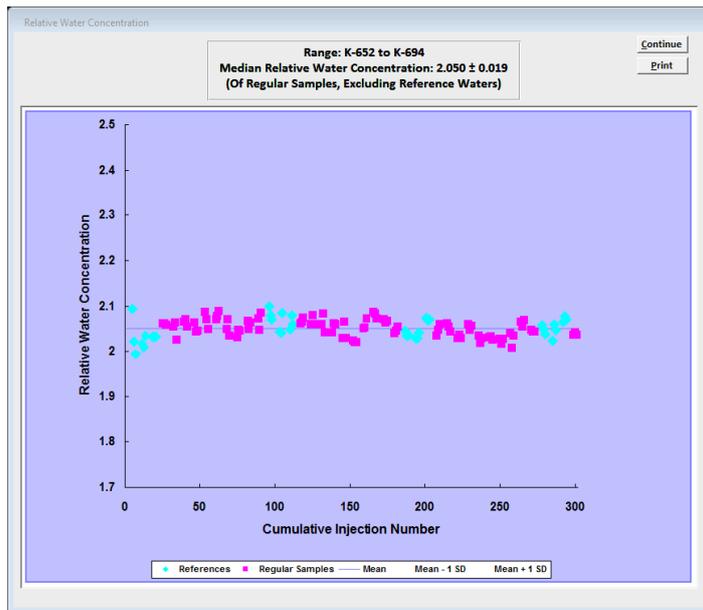


1. Copiar el archivo de datos CSV correcto desde el instrumento Picarro a una memoria USB o a una ubicación de red accesible desde LIMS.
2. En la página principal de LIMS, haga clic en "Importar datos de instrumentos" ("Import Data from Instruments"), elegir el instrumento Picarro desde el menú desplegable y luego haga clic en "Importar" ("Import"). Elegir el archivo de salida cvs pertinente en la memoria USB o la ubicación de red donde fueron guardados.

Nota: Si marca la casilla "Reemplazar los análisis existentes" ("Replace Existing Analyses"), estos se sobre-escriben a las importaciones anteriores de este mismo tipo de archivo *siempre que los datos no hayan sido normalizados o almacenados*. Esto es útil si desea importar los mismos datos varias veces y examinar los efectos de importación utilizando las diferentes opciones que se describe en el capítulo 11.1 o si desea corregir un error. Esta opción está activada por defecto.



3. Una pantalla aparece mostrando las cantidades inyectadas a lo largo de la ejecución de los análisis. Si las cantidades inyectadas varían ampliamente, entonces es probable que la jeringa o septos estén defectuosos. Esta vista preliminar es fundamental para asegurar que las inyecciones de agua son de un volumen constante a lo largo de la ejecución automática. *LIMS para Láseres 2015* divide la concentración medida por el Picarro por 10.000 para determinar la concentración relativa de H₂O.



4. Si no aparece ninguna advertencia de importación (capítulo 11), aparece la siguiente pantalla:

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. En esta pantalla de importación, acepte las opciones predeterminadas y haga clic en "Continuar" ("Continue"). Las diversas opciones de importación disponibles se describen en el capítulo 11.1, y la discusión sobre la corrección de las variaciones en los valores δ con variaciones en las concentraciones relativas de agua aparece en el Apéndice 3. Acepte los valores predeterminados por ahora.

6. Un resumen por colores con las mediciones realizadas mostrando los valores de $\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$ y la

concentración relativa de H₂O aparecerá con columnas detallando el número de análisis, el número de inyección, el ID de laboratorio, la posición relativa de los viales, la concentración de H₂O, y los valores δ (con columnas para ignorar/omitir). Se presenta un resumen estadístico para cada muestra (utilizando las inyecciones no omitidas/ignoradas). Tenga en cuenta que las primeras 4 inyecciones se ignoran, como se indica en las opciones de este instrumento específico. (Nota: Las omisiones del software coordinador de Picarro son ignoradas en *LIMS para Láseres de 2015*).

Antes de hacer clic en "Continuar" ("Continue"), utilice la barra de desplazamiento para buscar los datos δ atípicos (outliers) en "Rel H₂O Conc" (2.03 es un número acertado para representar una concentración H₂O de 20.300 ppm en el instrumento Picarro). Los datos atípicos (outliers) resaltados en color pueden omitirse haciendo clic en la casilla de ignorar al lado de cada uno. Activando la casilla "IG Conc" automáticamente se activan las casillas IG $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$ para omitir tanto los datos correspondientes a $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$.

Si aparecen todos los datos OK, haga clic en "Continuar".

Import Criteria for Instrument K (Picarro 2140i)

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

| Analysis | Inj | OurLabID | Rel H ₂ O 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 | 2.50 | <input checked="" type="checkbox"/> | -5.44 | <input checked="" type="checkbox"/> | 0.039 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 652 | 2 | W-39 | 2.08 | <input checked="" type="checkbox"/> | 15.90 | <input checked="" type="checkbox"/> | 2.749 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 652 | 3 | W-39 | 2.08 | <input checked="" type="checkbox"/> | 18.91 | <input checked="" type="checkbox"/> | 3.072 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 652 | 4 | W-39 | 2.05 | <input checked="" type="checkbox"/> | 20.64 | <input checked="" type="checkbox"/> | 3.203 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 652 | 5 | W-39 | 2.09 | <input type="checkbox"/> | 21.44 | <input type="checkbox"/> | 3.294 | <input type="checkbox"/> |
| 652 | 6 | W-39 | 2.02 | <input type="checkbox"/> | 22.05 | <input type="checkbox"/> | 3.349 | <input type="checkbox"/> |
| 652 | 7 | W-39 | 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 | 2.03 | <input checked="" type="checkbox"/> | -180.86 | <input checked="" type="checkbox"/> | -24.358 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 653 | 2 | W-34 | 2.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | -190.94 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.104 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 653 | 3 | W-34 | 2.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | -193.59 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.309 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 653 | 4 | W-34 | 2.00 | <input checked="" type="checkbox"/> | -194.87 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.422 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 653 | 5 | W-34 | 2.02 | <input type="checkbox"/> | -195.28 | <input type="checkbox"/> | -25.499 | <input type="checkbox"/> |
| 653 | 6 | W-34 | 2.01 | <input type="checkbox"/> | -195.78 | <input type="checkbox"/> | -25.517 | <input type="checkbox"/> |
| 653 | 7 | W-34 | 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 | 2.05 | <input checked="" type="checkbox"/> | -196.11 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.569 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 654 | 2 | W-34 | 2.06 | <input checked="" type="checkbox"/> | -196.28 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.585 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 654 | 3 | W-34 | 2.05 | <input checked="" type="checkbox"/> | -196.63 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.520 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 654 | 4 | W-34 | 2.05 | <input checked="" type="checkbox"/> | -196.86 | <input checked="" type="checkbox"/> | -25.512 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 654 | 5 | W-34 | 2.03 | <input type="checkbox"/> | -196.83 | <input type="checkbox"/> | -25.543 | <input type="checkbox"/> |
| 654 | 6 | W-34 | 2.03 | <input type="checkbox"/> | -196.98 | <input type="checkbox"/> | -25.564 | <input type="checkbox"/> |
| 654 | 7 | W-34 | 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 | 2.04 | <input checked="" type="checkbox"/> | -94.52 | <input checked="" type="checkbox"/> | -12.562 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 655 | 2 | W-17833 | 2.07 | <input checked="" type="checkbox"/> | -88.46 | <input checked="" type="checkbox"/> | -12.152 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 655 | 3 | W-17833 | 2.06 | <input checked="" type="checkbox"/> | -85.85 | <input checked="" type="checkbox"/> | -11.950 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 655 | 4 | W-17833 | 2.06 | <input checked="" type="checkbox"/> | -84.80 | <input checked="" type="checkbox"/> | -11.829 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 655 | 5 | W-17833 | 2.06 | <input type="checkbox"/> | -84.33 | <input type="checkbox"/> | -11.724 | <input type="checkbox"/> |
| 655 | 6 | W-17833 | 2.06 | <input type="checkbox"/> | -84.02 | <input type="checkbox"/> | -11.671 | <input type="checkbox"/> |
| 655 | 7 | W-17833 | 2.06 | <input type="checkbox"/> | -83.77 | <input type="checkbox"/> | -11.665 | <input type="checkbox"/> |

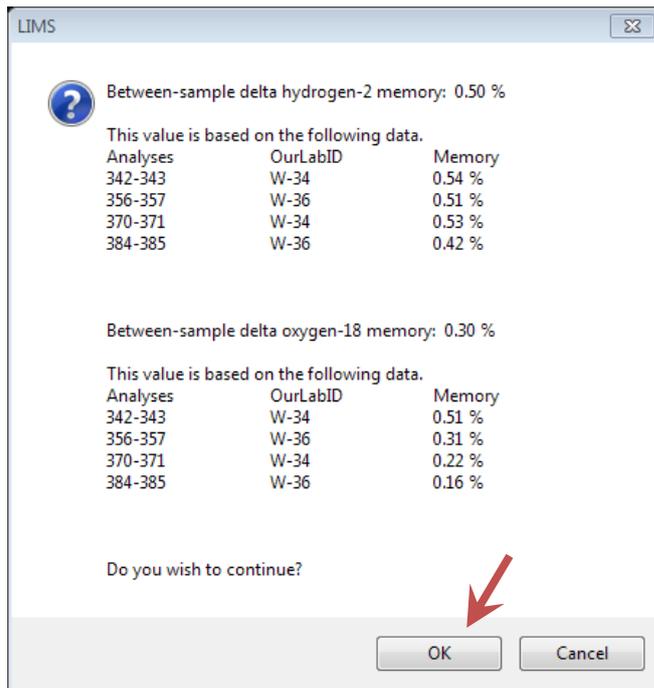
Buttons: Continue, Cancel

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

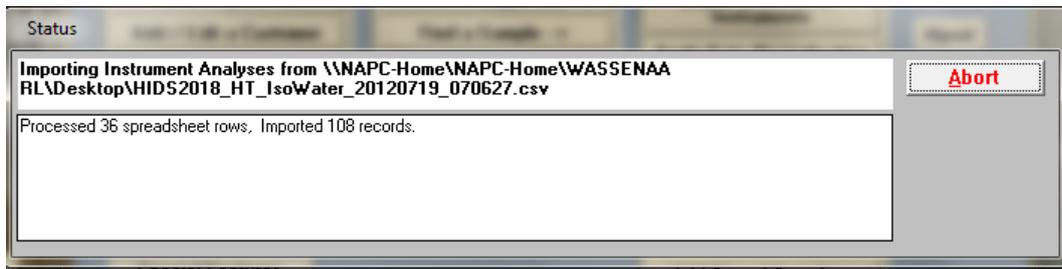
Ref for Additive Normalization: W-39

Reference for Scale Expansion: W-34

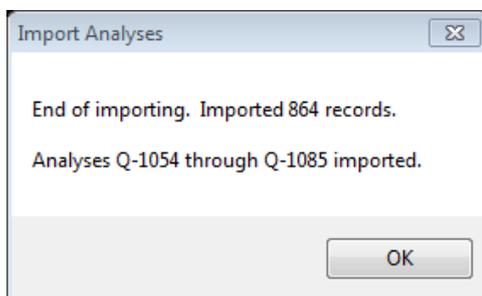
- En este paso se cuantifican y promedian los cálculos del efecto memoria entre muestras para todas las mediciones. Estas deben ser menos del 1 o 2 por ciento. Haga clic en "Aceptar" para continuar.



- En este paso la desviación de la muestra y los datos corregidos por el efecto memoria son importados en LIMS.



- Al final de la importación *LIMS para Láseres 2015* verifica que los datos ha sido efectivamente importados. Haga clic en "Aceptar".



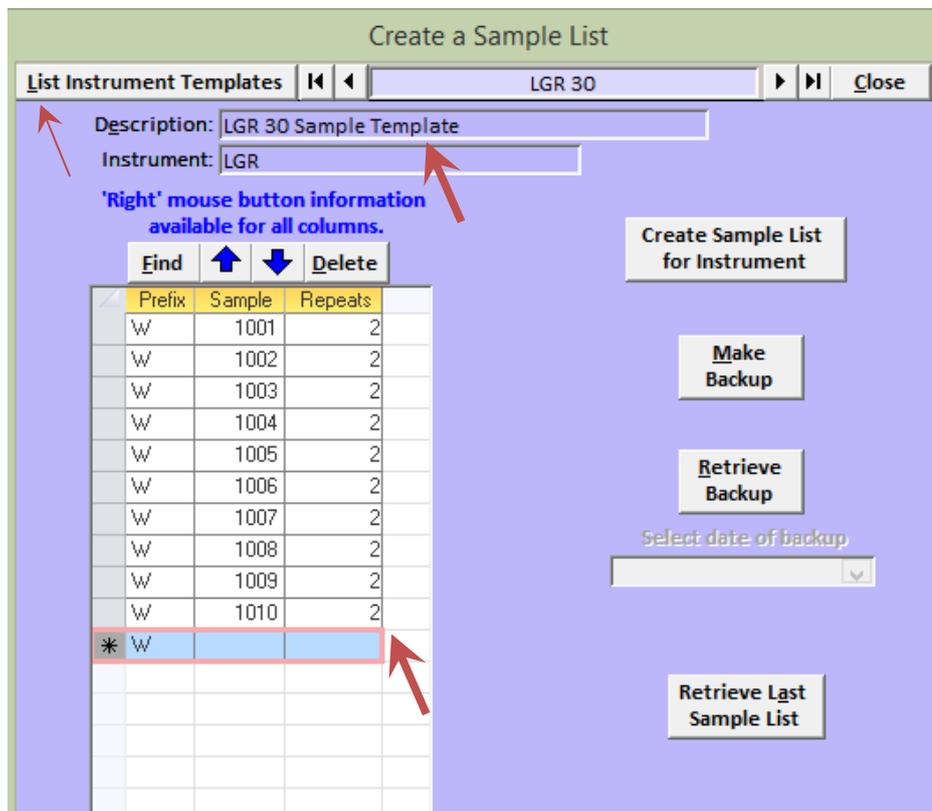
- La normalización, evaluación y almacenamiento de los resultados finales se presenta en el capítulo 12.

10 Analizar muestras en un Láser de Los Gatos Research

10.1 Crear una lista de muestras en un instrumento de Los Gatos Research

Como ejemplo, creamos una lista de muestras para un instrumento láser de Los Gatos Research.

1. Asegúrese de que las muestras se agregan a la cola del láser (ver capítulo 8.9).
2. En la Página principal LIMS, haga clic en "Crear lista de muestras para instrumentos" ("Create Sample List for Instruments").
3. Elija "Lista" (List) y haga clic en "LGR 30 samples" y la cola de muestras se abrirá:



4. En la cola de muestras del instrumento que se muestra arriba, las 10 muestras del Sr. Smith (W-1001 a W-1010) están en cola para ser analizados dos veces en una plantilla de 30 muestras. Esto deja 10 posiciones extras, que serán automáticamente llenadas con repeticiones W-1 (dummy), que pueden ser eliminadas (véase abajo).
5. Haga clic en "Crear lista de muestras para instrumento" ("Create Sample List for Instrument"), un cuadro de diálogo confirma que las 10 muestras están en cola (2 repeticiones). Haga clic en "Aceptar".

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 |

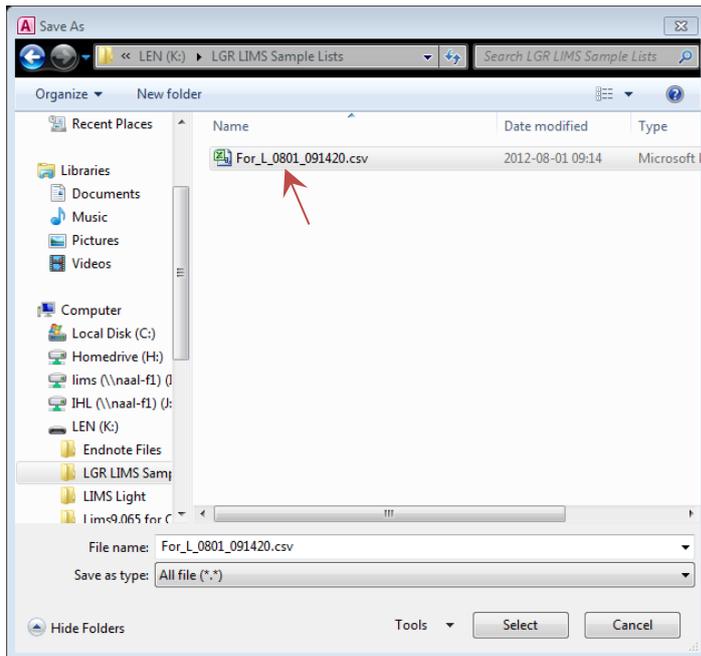
Record: 1 of 61

Save and Print Instrument Sample List

Cancel

6. La secuencia de análisis contiene las muestras de lavado (DI wash), patrones de laboratorio y de control, así como las muestras desconocidas del Sr. Smith, como se presenta en la figura anterior. Tenga en cuenta que las muestras de las líneas 1-21 en adelante no son necesarias puesto que han sido automáticamente llenadas con repeticiones W-1 (dummy). Estas muestras se pueden señalar y eliminar (dándole a la tecla de **eliminar** en su teclado).
7. Haga clic en "Guardar e imprimir" (Save and print).

8. Se abre un cuadro de diálogo preguntando dónde guardar el archivo csv para el instrumento Los Gatos Research. Este archivo cvs debe ser transferido al instrumento láser, y debe guardarse en una memoria USB. Inserte una unidad memoria USB en su PC.
9. Haga clic en "seleccionar" ("Select") para guardar el archivo en la memoria USB. El nombre de archivo CSV es una cadena con el prefijo de instrumento "For L" (Los Gatos Research) y la fecha actual. Esta nomenclatura para los archivos ayuda al laboratorio dar seguimiento a las listas de muestras que se acumulan en Los Gatos Research.



10. Se abrirá un cuadro de diálogo para imprimir, preguntando dónde imprimir la lista de muestras (por ejemplo, impresora predeterminada). Se imprimirá una hoja resumen con la secuencia de análisis.
11. Después de la impresión, la cola se vuelve a abrir y observamos que las repeticiones por muestra disminuyen de 2 a 0. Estas muestras están ahora marcadas con un "0" puesto que se han analizado dos veces, dentro de una misma ejecución. Ya pueden ser eliminadas de la cola.
12. En la página siguiente se muestra un ejemplo de lista de muestras impresa donde se especifica la posición del vial y el ID de nuestro laboratorio para los patrones de laboratorio, los de control y las muestras desconocidas.
13. Llenar los 68 viales, cada uno con 1,5 mL de muestra o patrón. Pegue las etiquetas pequeñas (o escriba) el número W identificador en cada vial. Cargue las muestras y patrones en las bandejas del muestreador automático.

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 | _____ | | | | | |

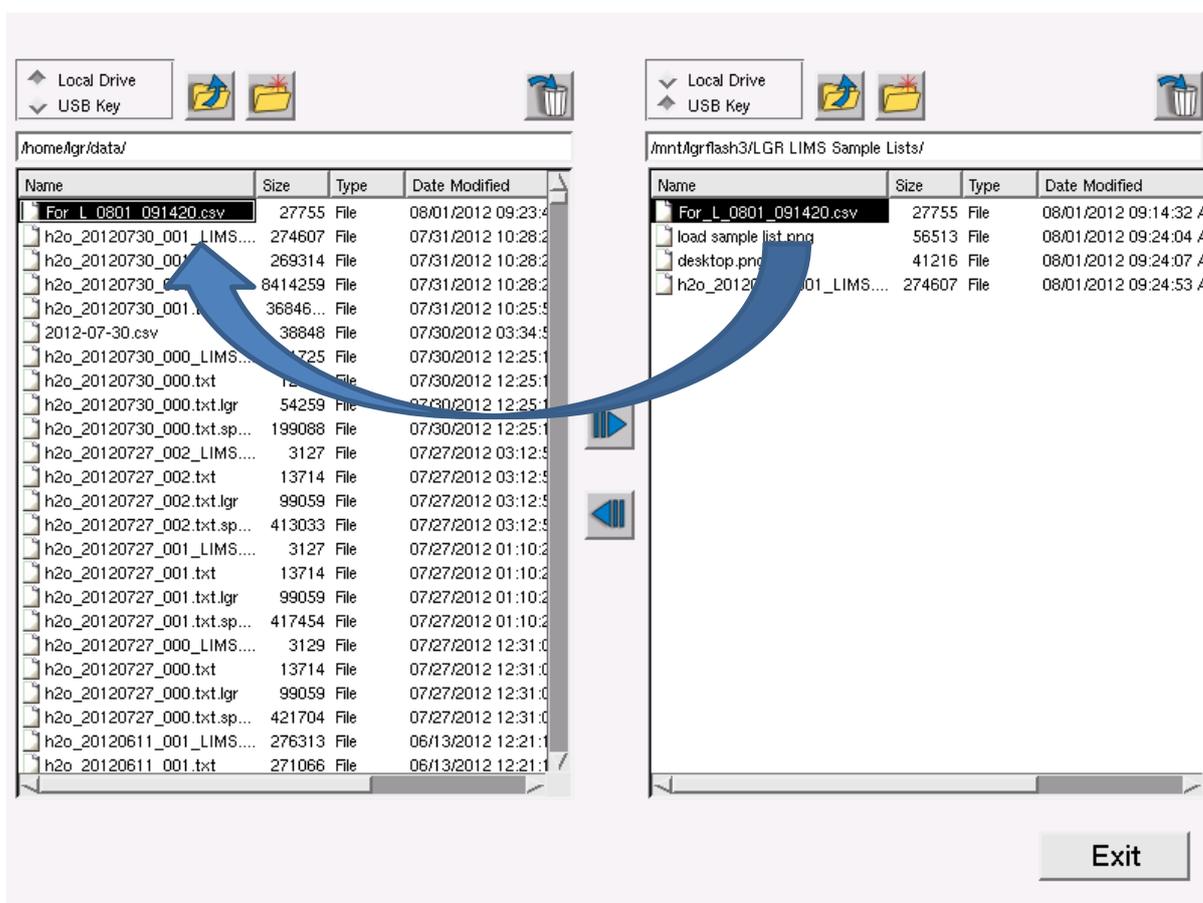
Lista de ejecución para el analizador láser LGR.

14. En el muestreador automático de Los Gatos Research, el patrón de laboratorio y viales con las muestras se configuran usando la configuración que se muestra en la tabla 1. Compruebe que todos los viales están en la posición correcta comparándolo con la lista impresa de LIMS.

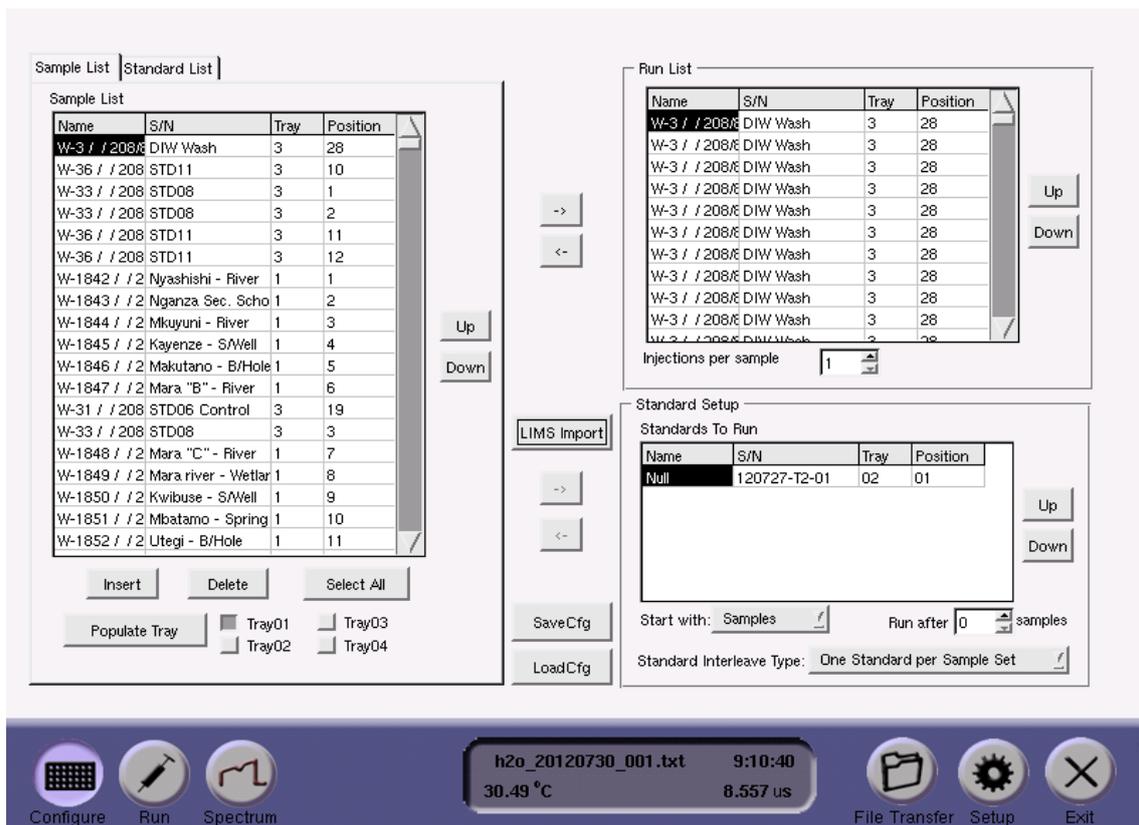
Como analizar la lista de muestras en el láser Los Gatos Research DLT-100/24D serie (2007-2013)

La lista de muestras generadas por LIMS guardada en la memoria USB se carga directamente en el instrumento de Los Gatos Research DLT-100 (2007–2013), y la información de las muestras se enlaza con la información correspondiente de LIMS. El instrumento debe estar preparado para ejecutar según las instrucciones del fabricante:

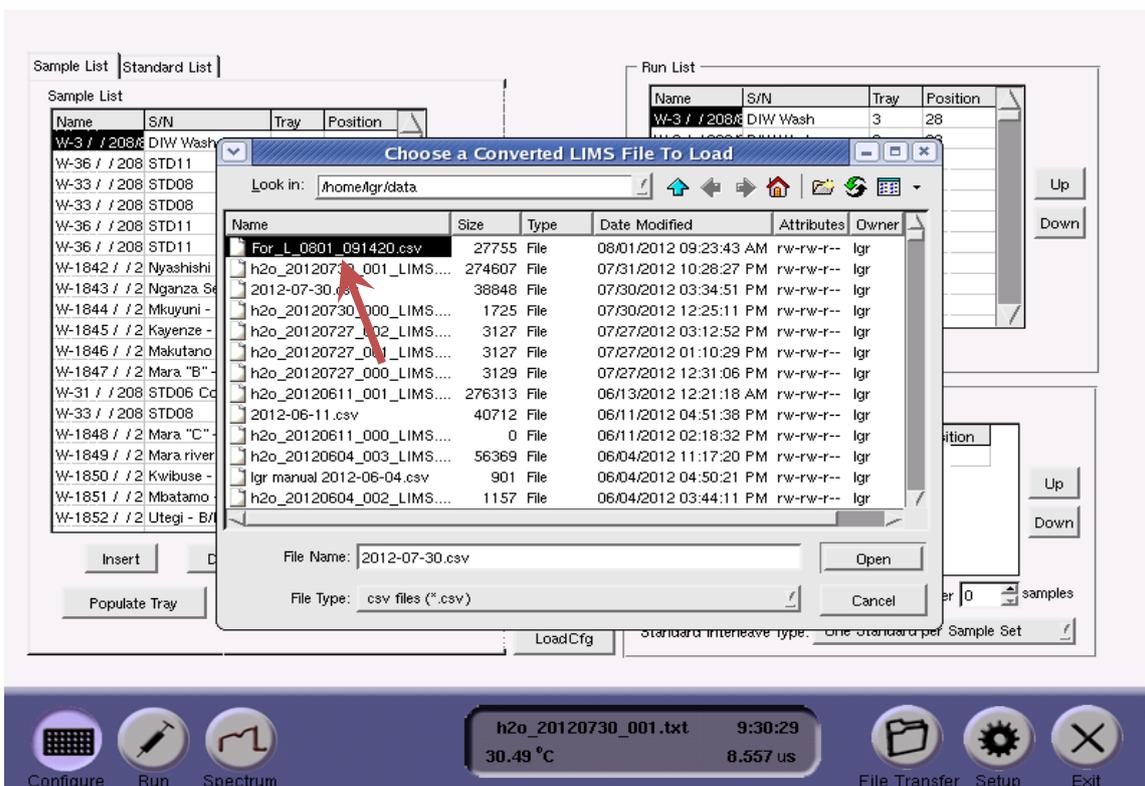
1. Colocar la memoria USB con el archivo de lista de muestras en el puerto USB del instrumento láser.
2. En el instrumento de Los Gatos Research, haga clic en el botón "File Transfer" situado en la parte inferior de la pantalla principal.
3. En el panel de administración de archivo, resalte la lista de muestra creada en LIMS. "For_L_xxxx.csv" y realice una copia del archivo desde la memoria USB a la carpeta de datos LGR utilizando el botón de la transferencia de archivos situado entre los dos pantallas.
4. Cuando se complete la transferencia de archivos, haga clic en el botón "Exit".



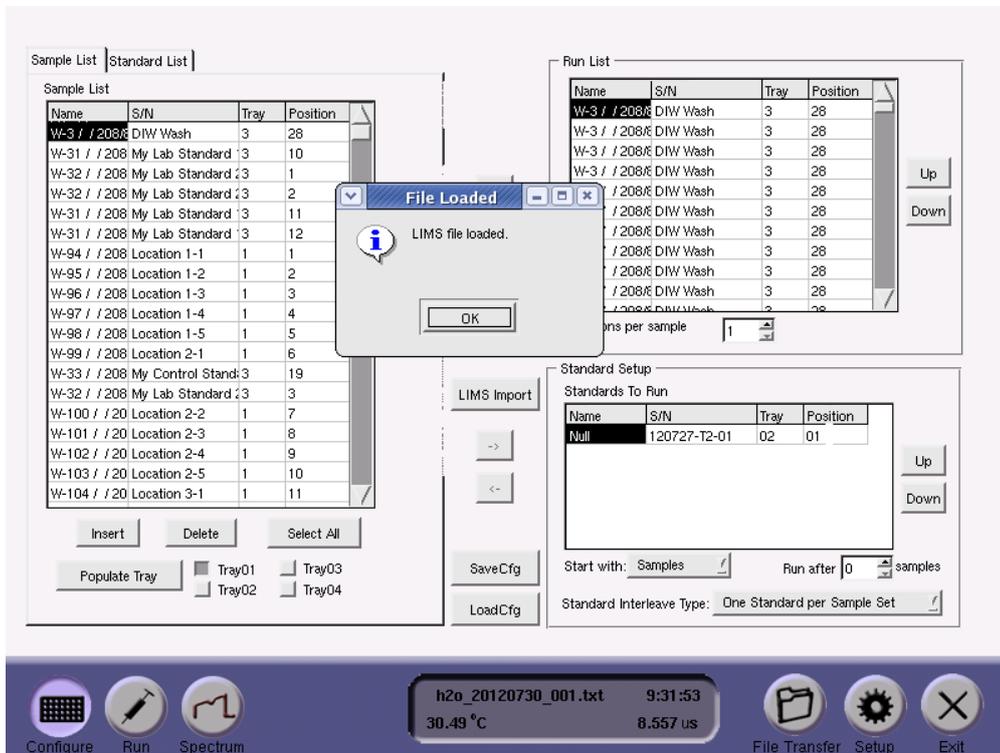
5. La lista de muestras se puede cargar en el láser para comenzar a analizar las muestras.
6. En la pantalla de "Configuración" de Los Gatos Research, haga clic en el botón "Importar LIMS" ("LIMS import").



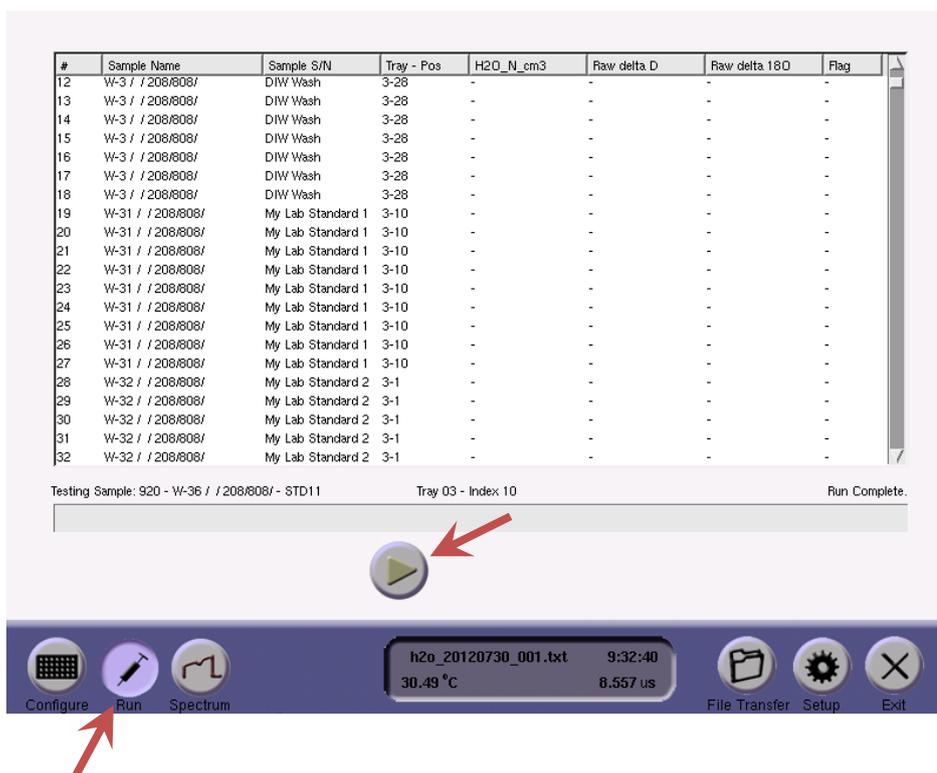
7. Seleccione y haga doble clic para abrir la lista de muestras creada en LIMS en el archivo CSV ("For_L_xxxx.csv"), copiada previamente en el instrumento.



- Aparece una ventana confirmando que la lista de muestras de LIMS se ha "cargado", y en este momento la lista de muestras en el panel de la izquierda debe coincidir con la lista de muestras de LIMS.



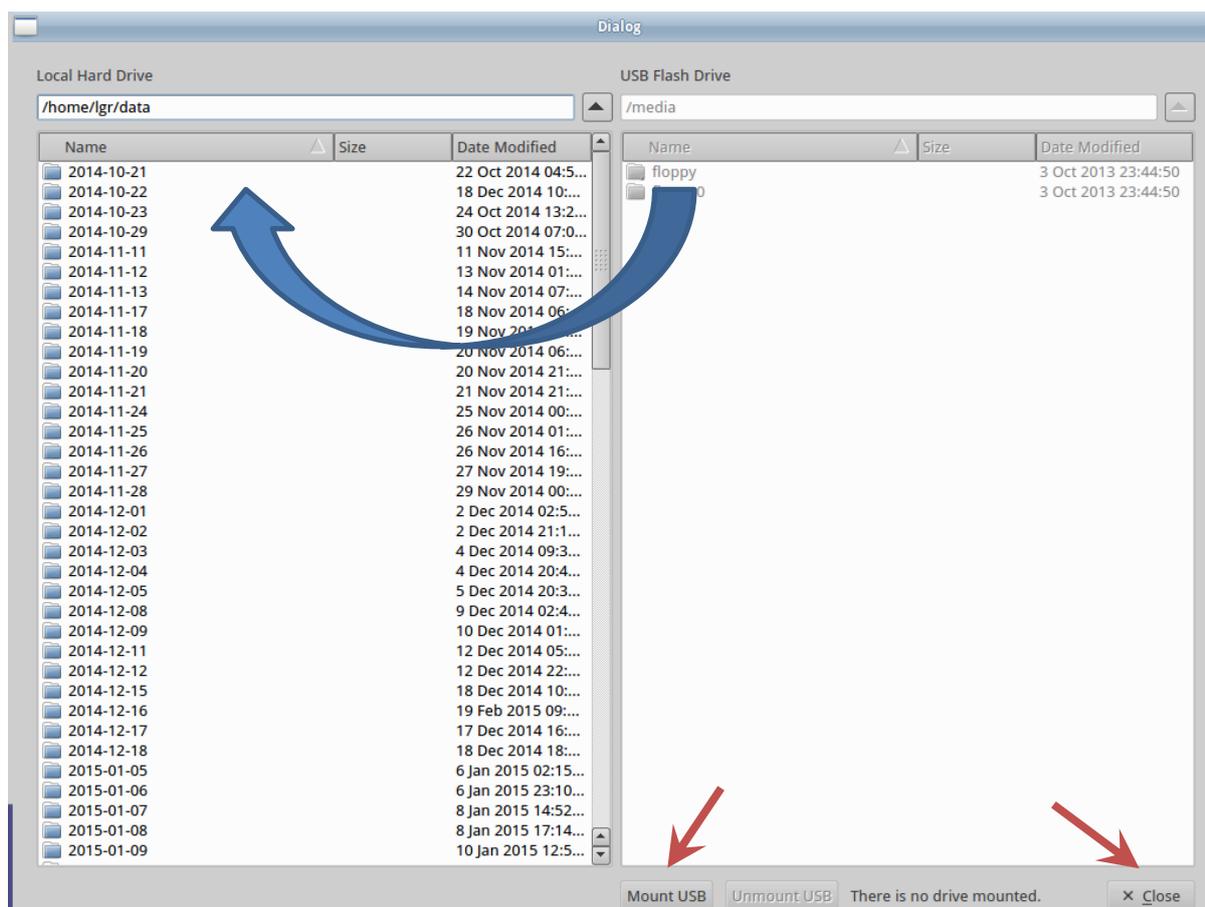
- Haga clic en "Run" en el instrumento y en la flecha "Go". No es necesaria ninguna otra acción o edición de la configuración. Permita que el analizador de Los Gatos Research complete con éxito las mediciones de las muestras (20 horas).



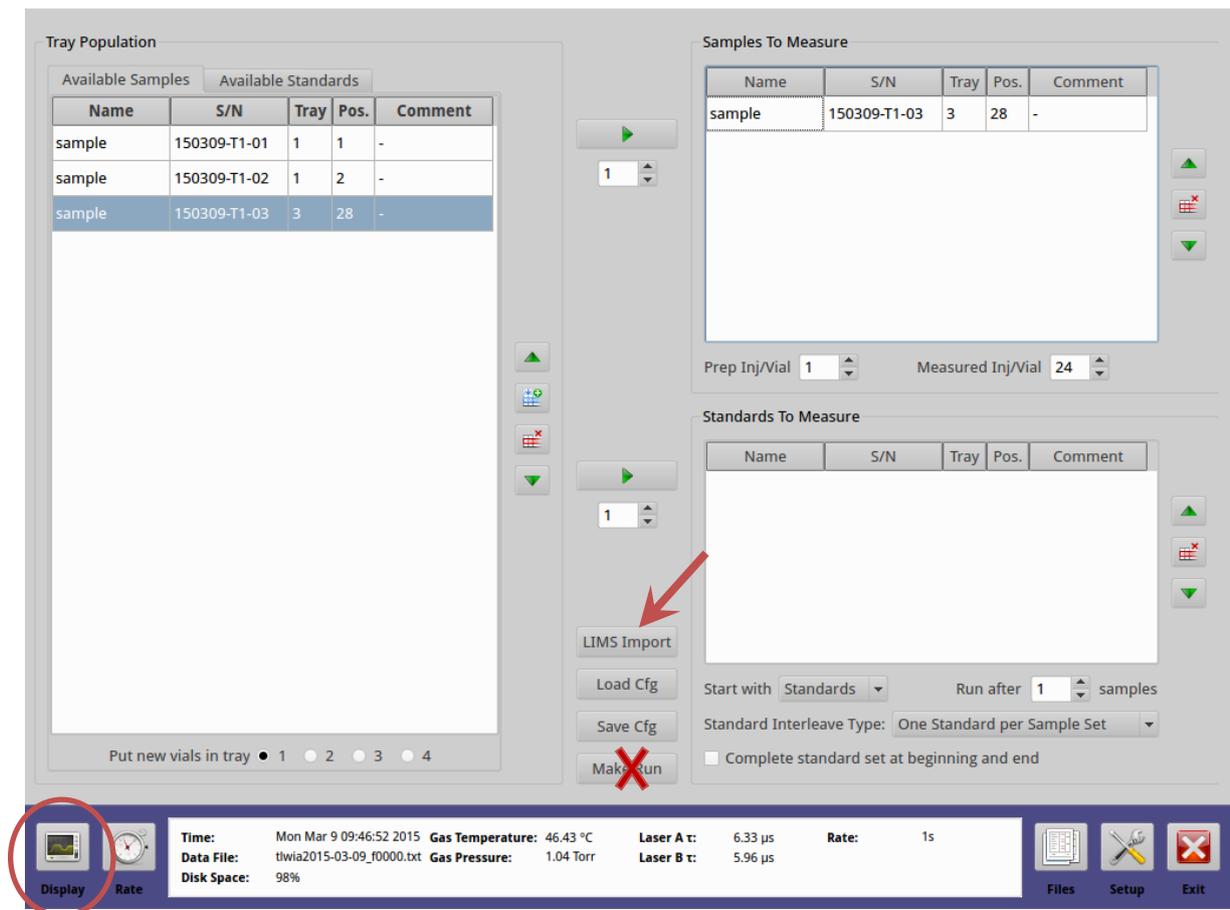
Como analizar una lista de muestra en un instrumento de AIT-35/TIWA-45EP de investigación de Los Gatos (2014-presente)

La lista de muestras generada por LIMS y guardada en la memoria USB se carga directamente en el instrumento de Los Gatos Research AIT-35EP o TIWA-45EP y, los datos de las muestra se enlazan con la información correspondiente de LIMS. El instrumento debe estar listo para funcionar según las instrucciones del fabricante:

1. Colocar la memoria USB que contiene el archivo de lista de muestra de investigación de Los Gatos en el puerto USB del instrumento láser AIT-35EP o TIWA-45EP.
2. En el instrumento de Los Gatos Research, haga clic en el botón "Archivos" en la parte inferior derecha de la pantalla principal. Monte la memoria USB.
3. En el panel de administración de archivos, arrastre la lista de muestras de LIMS. "For_L_xxxx.csv" y copie desde la memoria USB a la carpeta de datos LGR utilizando el botón de transferencia de archivo situado entre las dos ventanas.
4. Cuando se haya completado la transferencia de archivos, haga clic en el botón "Done".



5. La lista de análisis de muestras de LIMS se puede cargar ahora en el listado de muestras a analizar del instrumento para iniciar el análisis isotópico.
6. Haga clic en el botón "LIMS Import", situado en el centro inferior de la pestaña "Display".



7. Seleccione y haga doble clic para abrir el archivo CSV con la lista de muestras de LIMS ("For_L_xxxx.csv") que fue copiado en el instrumento.
8. Para analizar las muestras, haga clic en botón "Display", situado en la parte inferior izquierda de la pantalla.

Nota: No hacer clic en el botón "Make Run" después de cargar un archivo LIMS (ya que la lista de muestras desaparecerá). Ir inmediatamente a la pantalla "Display".

ⓘ Si el botón "LIMS Import" no está disponible (sombreado en gris) necesitará realizar una actualización de firmware del instrumento de Los Gatos Research (ver detalles en el capítulo 5.2)

| | Name | S/N | Tray | Pos | Comment | Flag | H2O_N/cm3 | Raw delta D | Raw delta 180 | Raw delta 170 |
|----|--------|--------------|------|-----|---------|------|-----------|-------------|---------------|---------------|
| 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

Start Next Pause Stop

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. Haga clic en el botón "Start" para iniciar la medición. No es necesario realizar ninguna otra acción o edición de configuración. Permita que el instrumento LGR complete con éxito la ejecución automática (autorun) de las muestra (véase abajo).

| | Name | S/N | Tray | Pos | Comment | Flag | H2O_N/cm3 | Raw delta D | Raw delta 180 | Raw delta 170 |
|----|--------|--------------|------|-----|---------|------|-------------|-------------|---------------|---------------|
| 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

Start Next Pause Stop

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 Importar datos isotópicos del láser Los Gatos Research

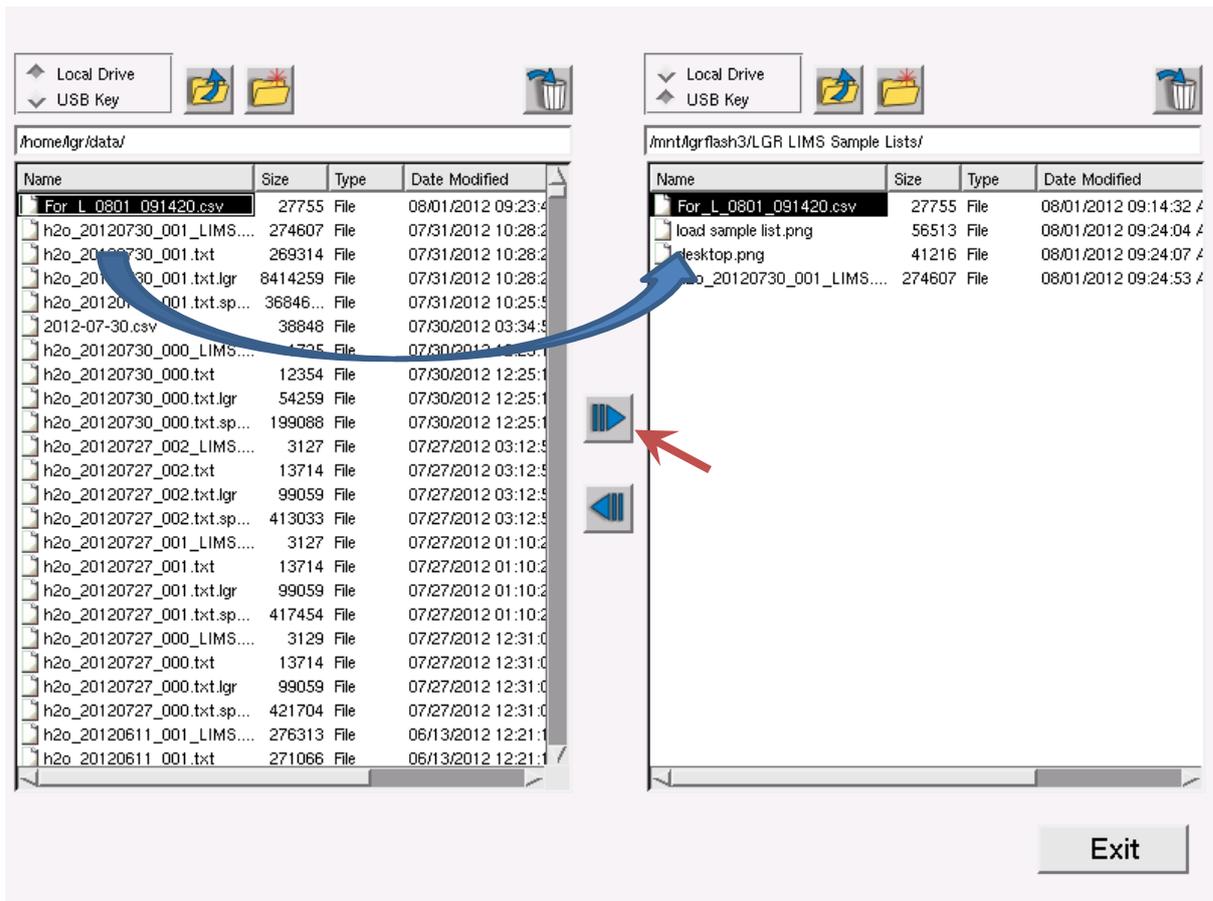
Una vez finalizada la ejecución automática (autorun) de equipo Los Gatos Research, los datos de isótopos de hidrógeno y oxígeno se importan en *LIMS para Láseres 2015* para realizar la normalización, procesamiento, evaluación y presentación de los resultados. El archivo de la ejecución automática (autorun) completo se encuentra en el directorio de datos del instrumento Los Gatos Research y debe ser transferido al PC donde se encuentra instalado LIMS para realizar la importación de datos (mediante una memoria USB o una conexión en red). El nombre del archivo de salida tiene el formato "h2o_date_000_LIMS.csv". La "fecha" en el nombre de este archivo es la misma que la del nombre del archivo importado al instrumento conteniendo el listado de muestras a analizar.

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

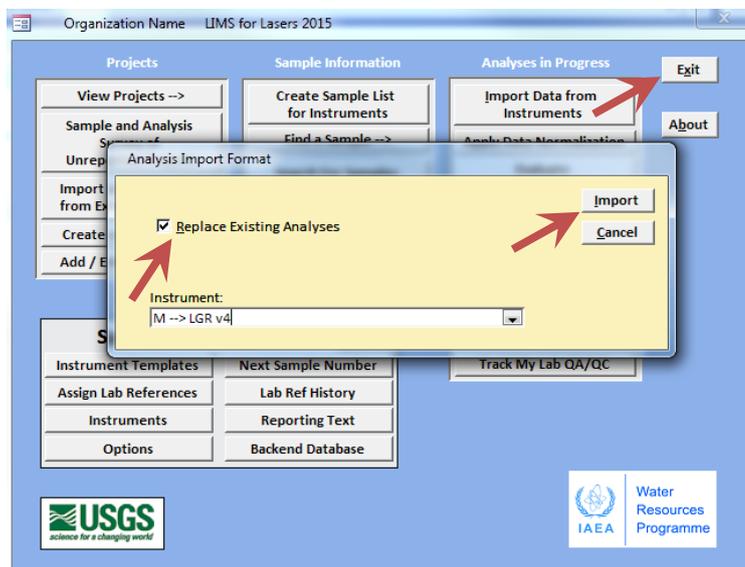
1. Colocar una memoria USB en el puerto USB del instrumento de Los Gatos Research.
2. En el instrumento, pulse el botón "File Transfer" situado entre los paneles.
3. En el panel de administración de archivos situados a la izquierda, resalte el archivo de salida LIMS apropiado, llamado "h2o_date_000_LIMS", y cópielo en la memoria USB pulsando el botón de la transferencia de archivos entre las dos ventanas (flecha azul superior en la figura más abajo).
4. Cuando la copia de archivos haya terminado, haga clic en el botón "Exit". Retire la memoria USB y colóquela en el puerto USB del equipo donde esté instalado LIMS.
5. En la página principal de LIMS, haga clic en "Importar datos de instrumentos" ("Import Data from Instruments"). Elegir el instrumento adecuado de Los Gatos Research desde el menú desplegable y haga clic en "Importar" (Import). Seleccione el archivo de salida de datos apropiado desde la memoria USB.

Los Gatos investigación AIT-35EP o instrumentos de TIWA-45EP (2014-presente)

1. Colocar una memoria USB en el puerto USB del instrumento de Los Gatos Research
2. En el instrumento, haga clic en el botón "Files" situado en la parte inferior derecha.
3. En el panel de administración de archivo a la izquierda, resalte el archivo de salida LIMS apropiado, llamado, por ejemplo, "(t) lwia2015-03-10_lims0001.csv.zip" y copiar en la memoria USB con el botón de la transferencia de archivos entre las dos ventanas (flecha azul superior en la figura más abajo).
4. Cuando la copia de archivos haya terminado, haga clic en el botón "Cerrar". Retire la memoria USB y colóquela en el puerto USB del equipo donde esté instalado LIMS. Descomprimir el archivo ZIP en el ordenador.
5. En la página principal de LIMS, haga clic en "Importar datos de instrumentos" ("Import Data from Instruments"). Elegir el instrumento adecuado de Los Gatos Research desde el menú desplegable y haga clic en "Importar" (Import). Seleccione el archivo de salida de datos apropiado desde la memoria USB.

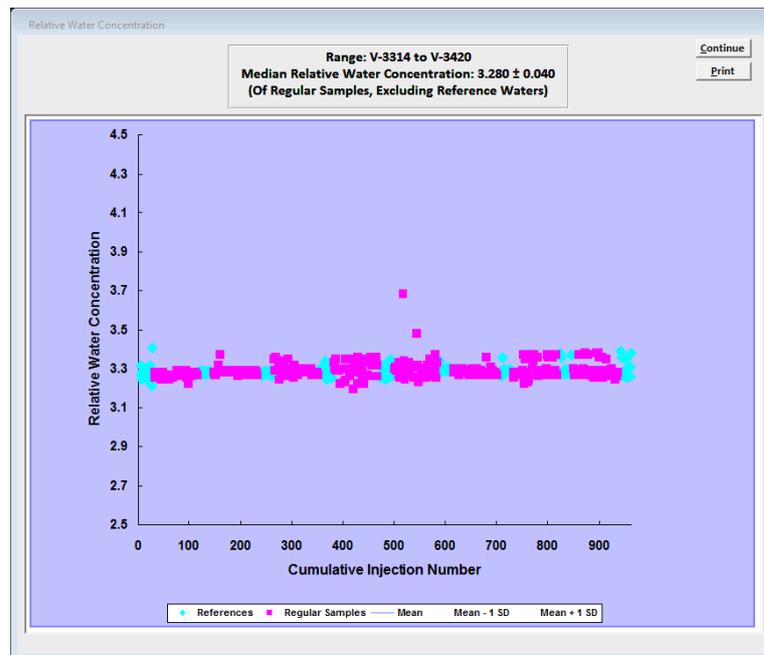


Transferencia de archivos de salida para el instrumento de Los Gatos Research series DLT-100.



Nota: El cuadro "Reemplazar los análisis existentes" sobreescribe cualquier importación anterior de archivos con datos *siempre que estos datos no hayan sido normalizados o almacenados*. Esto es útil para examinar el impacto de las diferentes opciones de importación o si se desea corregir un error. Esta configuración esta activada de manera predeterminada.

6. Si no aparecen advertencias de importación (véase capítulo 11), aparecerá la siguiente pantalla que resume las inyecciones de H₂O realizadas durante la medición (Nota: la escala de la gráfica cambia automáticamente). Esta vista previa es fundamental para asegurar que las inyecciones de agua son constantes a lo largo de la ejecución automática. *LIMS para Láseres 2015* divide la concentración de H₂O medida con instrumentos de Los Gatos Research por 1×10^{16} para determinar la concentración relativa de H₂O. Si las inyecciones de H₂O parecen normales (dentro de la tolerancia y estable), haga clic en "Continuar".



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.

7. En la pantalla de criterios para la importación de datos, acepte las opciones predeterminadas y haga clic en "Continuar". Las opciones de importación disponibles se describen detalladamente en el capítulo 11, y una discusión de la corrección de las variaciones en los valores de δ con variaciones en las concentraciones relativas de agua aparece en el Apéndice 3. Aceptar la configuración predeterminada por ahora. En el ejemplo de más arriba, el panel verde (en la parte inferior derecha de la pantalla) muestra un mensaje que señala la ausencia de proyecto acompañante para $\delta^{17}\text{O}$, por lo que no hay resultados para este isótopo.
8. Aparece un resumen de todas las medidas de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$ y de los rendimientos relativos de H_2O con los siguientes encabezados por columnas: Número de análisis (Analysis), número de inyección (Inj), nuestro ID de laboratorio (OurLabID), posición de frasco (Vial Position), concentración real de agua (Rel H₂O conc), opción para ignorar concentraciones de agua (IG conc), datos de deuterio ($\delta^2\text{H}$), opción para ignorar datos de deuterio (IG $\delta^2\text{H}$), datos de oxígeno-18 ($\delta^{18}\text{O}$), opción para ignorar datos de oxígeno-18 (IG $\delta^{18}\text{O}$). También se muestran las estadísticas (basadas en inyecciones no ignoradas) para cada muestra. *LIMS para Láseres 2015* ignora las primeras 4 inyecciones por muestra, tal como se especifica en la configuración del instrumento de LIMS para este instrumento.

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 checked="" type="checkbox"/> | 7.11 | <input checked="" type="checkbox"/> | 13.719 | <input checked="" 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 checked="" type="checkbox"/> | 13.689 ± 0.145 | <input checked="" 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 checked="" type="checkbox"/> | 13.812 ± 0.108 | <input checked="" 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 checked="" type="checkbox"/> | -1.476 ± 0.192 | <input checked="" 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 $\delta^{18}\text{O}$

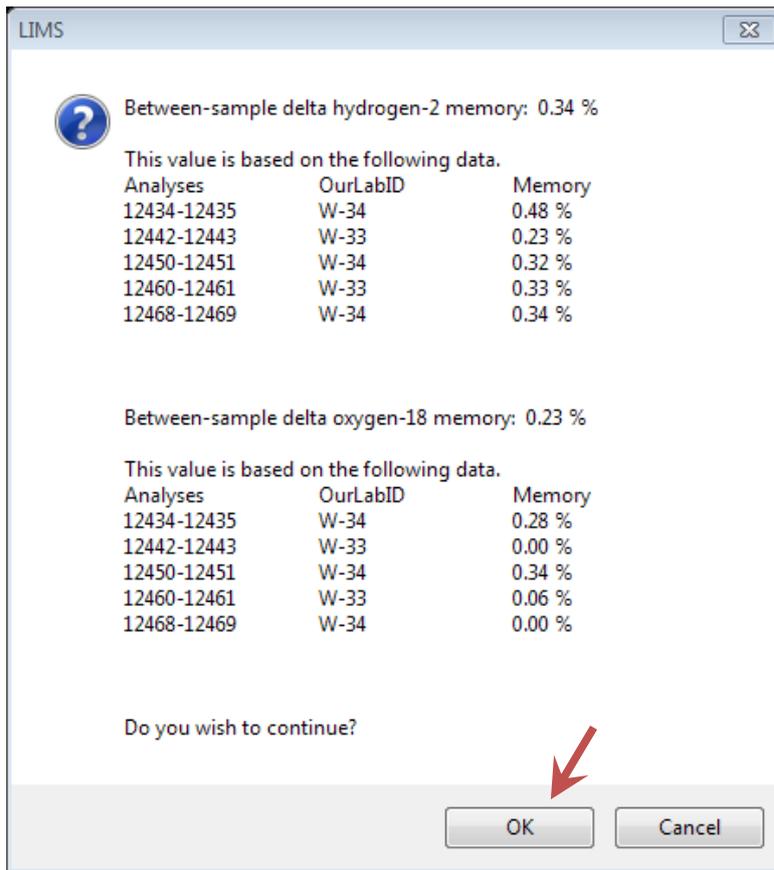
Ref for Additive Normalization: W-39

Reference for Scale Expansion: W-34

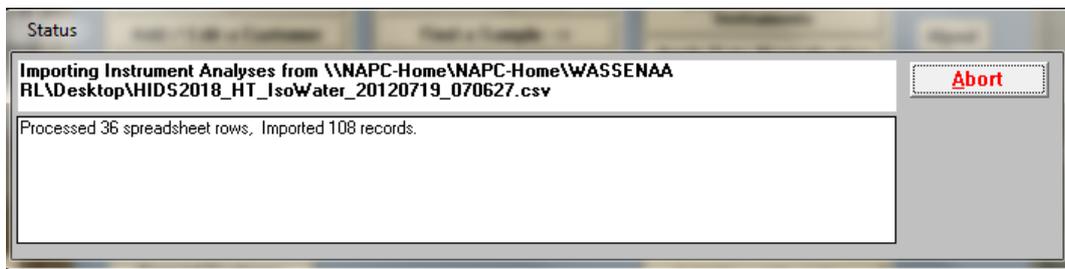
9. Antes de hacer clic en "Continue", utilice la barra de desplazamiento para buscar rápidamente para valores extremos en "Rel H2O Conc" (2.38 es un número reducido que representa 2.38×10^{16} moléculas de H_2O según el instrumento de Los Gatos Research) y cualquier δ -valor atípico (outlier). Estos valores atípicos (outliers) pueden omitirse haciendo clic en la casilla de "Ignore" (columna IG conc). Comprobar esta columna "IG Conc" también verifica automáticamente las casillas para omitir correspondientes a los datos de $\delta^2\text{H}$ y $\delta^{18}\text{O}$. Tenga en cuenta que cualquier inyección con errores instrumentales aparece en el cuadro de la derecha en color rosa.

Si todos los datos parecen estar bien, haga clic en "Continuar".

10. El efecto de memoria entre muestras se cuantifica y se calcula un valor promedio. Este efecto memoria debe ser menos del 1 a 2 por ciento. Haga clic en "Aceptar" para continuar.



11. En este paso, los datos de la deriva instrumental y la corrección del efecto memoria en el instrumento de Los Gatos Research se importan en LIMS para su procesamiento final.



12. Al final de la importación, *LIMS* verifica que los datos se ha importado correctamente. Haga clic en "Aceptar".

13. La normalización, evaluación y almacenamiento de datos se describe en el capítulo 12.

11 Importación de datos - opciones y errores

11.1 Opciones de importación de datos

Hay varias opciones de importación disponibles en *LIMS para Láseres de 2015*. Estas opciones se describen en detalle a continuación. El usuario puede seleccionar diferentes opciones para la importación de datos de $\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^{17}\text{O}$ (si existe).

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.

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

Continue

Cancel

Tipo de importación isotópica (por defecto = importación con la normalización por bloques)

Importación estándar

Los datos isotópicos del archivo CSV de láser son simplemente importados como están, sin aplicar correcciones. No hay correcciones de deriva instrumental o efecto memoria, y las otras opciones están sombreadas en gris. Después de la importación, puede aplicarse una corrección de la deriva instrumental lineal cuando los datos de las mediciones se normalizan a la escala de VSMOW-SLAP.

Importación estándar con opción de correcciones

Esta opción utiliza *todos* los datos de la ejecución automática (autorun) que no hayan sido omitidos, con opción de aplicar correcciones para la deriva instrumental y el efecto memoria. Esta opción utiliza todos los datos para la normalización que no hayan sido ignorados, y todos los resultados de

medición son tratados como un único lote. No se aplica ninguna normalización por bloques, paso que se utiliza a menudo para corregir por deriva instrumental no lineal que se haya producido durante la ejecución automática (autorun).

Importación con normalización por bloques – Utilizada por defecto

Esta es la opción de importación recomendada por defecto en *LIMS para Láseres 2015*. Esta opción utiliza el diseño especial de la plantilla de análisis predeterminada y la disposición de los patrones para normalizar los datos de las muestras entre los grupos de los patrones de medición. Las ecuaciones de normalización se aplican a los segmentos entre bloques de la ejecución automática (autorun) que se muestra en las tablas 1 y 2, y por lo tanto esta opción de importación también corrige la deriva instrumental no lineal.

Ajustes para variación en la concentración relativa de agua

La dependencia de los valores δ con las concentraciones relativas de H₂O son importantes para la mayoría de los instrumentos láser. Por lo general, las variaciones de la cantidad de H₂O en la cavidad láser surgen a partir de un bajo rendimiento de la jeringa o por la existencia de fugas, o pueden ser deliberadamente manipuladas por el usuario. La dependencia de los valores δ con la cantidad de H₂O se puede corregir mediante el uso de métodos de ajuste lineal o no lineal. En el Apéndice 3 se muestra cómo la implementación de un algoritmo de corrección de concentración puede mejorar sustancialmente la precisión y exactitud de los resultados δ para todas las especies isotópicas.

Corrección del efecto memoria entre muestras (por defecto = corrección para el efecto memoria)

Esta opción hace uso del diseño de plantilla por defecto de *LIMS para Láseres 2015* para determinar la corrección del efecto memoria entre las muestras a lo largo de la ejecución automática mediante el uso de agrupaciones de patrones de medición distribuidos en la ejecución automática (de bajo a alto, de alto a bajo, etcétera). Como se señaló anteriormente, se recomienda utilizar inicialmente 9 inyecciones de cada muestra, y haciendo caso omiso de las primeras 4 inyecciones para minimizar el efecto memoria entre las muestras.

El efecto memoria entre muestras se calcula mediante la comparación de los promedios de los valores δ no ignorados de primer patrón (δ -enriquecido) y los valores promedio de las secuenciales de un segundo patrón (δ -empobrecido) o viceversa (alto a bajo, bajo a alto). Para un archivo de la ejecución automática (autorun) que contenga grupos distribuidos de un patrón enriquecido o empobrecido seguido de dos patrones idénticos empobrecidos/enriquecidos (δ -enriquecido (HighStd), δ -empobrecido 1 (LowStd1), δ -empobrecido 2 (LowStd2)), el efecto memoria entre las muestras se determina utilizando la media de todos los patrones de medición no ignorados de la siguiente manera:

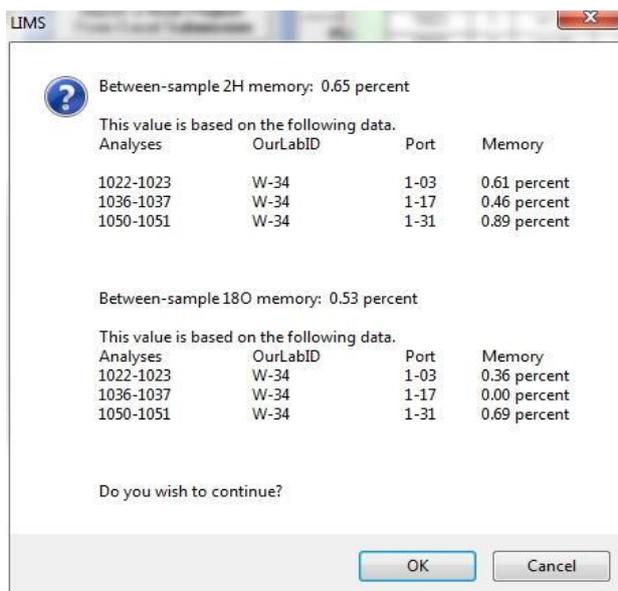
$$\text{Efecto memoria (\%)} = (\text{avg LowStd1} - (\text{avg lowStd2})) / \text{avg (HighStd} - (\text{avg lowStd2}))$$

$$\text{Ejemplo efecto memoria } \delta^2\text{H: } 0,68\% = (-401.57 \text{‰} - (-404.03 \text{‰})) / (-41.89 \text{‰} - (-404.03 \text{‰}))$$

La corrección del efecto memoria entre muestras es un promedio con todos los grupos de referencia en la ejecución automática (autorun) y se aplica a todas las muestras y patrones medidos:

$$\text{Valor de } \delta^2\text{H ajustado} = 1.0068 * (\text{Valor medio de muestra} - \text{Valor medio de la muestra previa}) + \text{Valor medio de muestra previa}$$

$$\text{Resultado final } \delta \text{ corregido} = \text{Valor medio de la muestra} - (\text{Valor medio ajustado} - \text{Valor medio de la muestra})$$



Corrección de la derivación temporal del equipo

Esta opción permite a un usuario corregir datos de una ejecución automática (autorun) que presenta una fuerte deriva lineal (utilizando patrones de laboratorio) en función del tiempo. Esto es produce muy raramente, y típicamente se identifica por un error muy alto de la pendiente de la línea de regresión del valor delta frente al tiempo. Uno puede evaluar esta opción, pero generalmente se obtiene el siguiente mensaje:

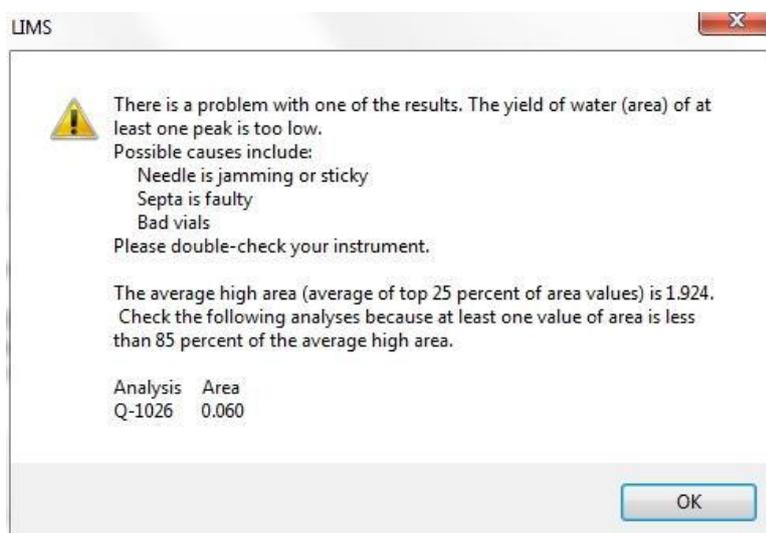


Nota: La corrección de la deriva lineal con el tiempo sólo está disponible si se selecciona la opción de importación estándar. El valor de la corrección de la deriva instrumental con el tiempo también es visible en la página de normalización de datos en la columna "Hourly Corr" (véase apartado 12.2).

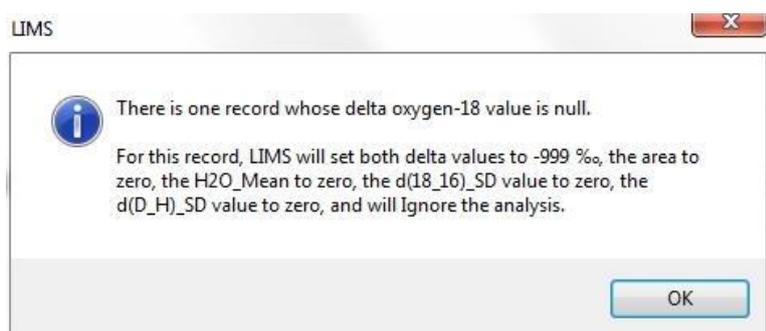
11.2 Mensajes de error de importación de datos

Los dos errores más comunes de importación derivan de análisis pobres, tales como aquellos con rendimientos bajos o muy variables de H₂O como resultado de fallos de la jeringa o septas, o de datos nulos de análisis erróneos, o de algunos otros fallos instrumentales.

LIMS para Láseres 2015 avisa al usuario sobre una muestra defectuosa y las condiciones de análisis cuando se importan los datos. Esta función de preselección ayuda a garantizar que los usuarios no importen datos no aceptables. Estas advertencias no aparecerán si los datos de ejecución automática pasan las pruebas preliminares de detección de errores.



Ejemplo: un frasco contenía escasa o demasiada cantidad de muestra, resultando en un rendimiento de H₂O bajo, y por consiguiente dando valores análisis isotópicos erróneos. *LIMS para Láseres 2015* advierte al usuario que muestras han sido problemáticas.



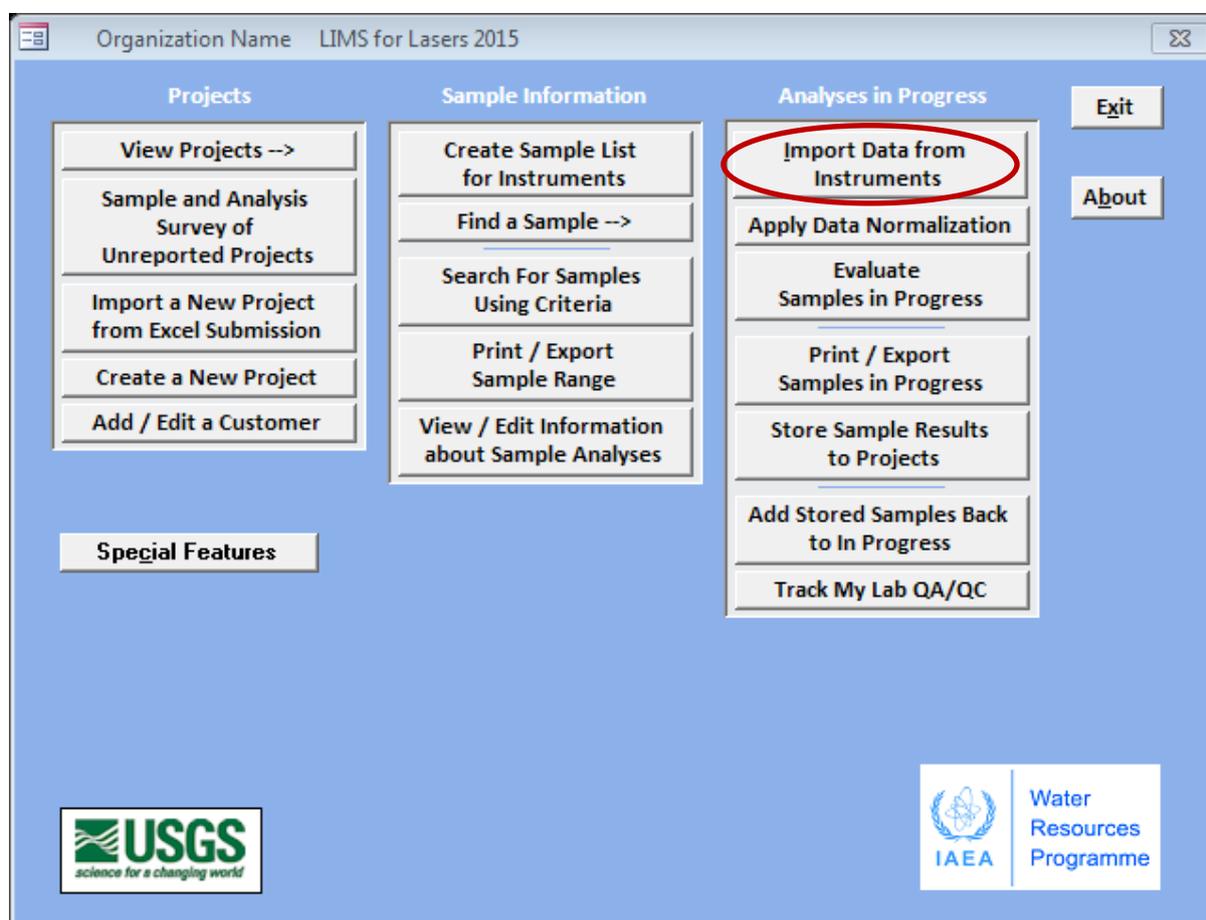
Ejemplo: En otros casos y de forma ocasional, ocurren fallos instrumentales de forma que aparecen datos isotópicos nulos o en blanco para una o más inyecciones. *LIMS para Láseres 2015* escanea para valores nulos para excluirlos durante el proceso de normalización de la muestra.

12 Normalizar, evaluar y guardar resultados

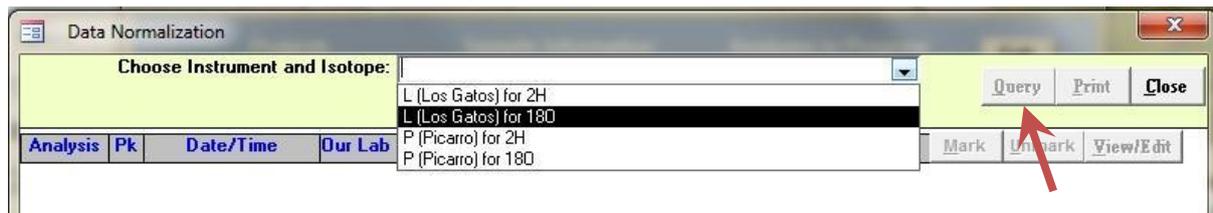
12.1 Normalizar datos en las escala VSMOW y SLAP

En este capítulo ilustramos el selección, marcado, normalización y evaluación de datos. Dado que el mismo procedimiento se aplica a los instrumentos de Los Gatos Research y Picarro, y además se repite para las medidas de $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$, el proceso se mostrará una vez con un único isótopo como ejemplo.

1. Una vez que los archivos de datos se han importado satisfactoriamente (capítulos 9 y 10), los datos se debe normalizar utilizando el botón "Apply Data Normalization" situado en la página principal de *LIMS para Láseres 2015*.



2. Desde el menú desplegable en la parte superior de la ventana, elija el instrumento adecuado y el isótopo específico a ser procesados. Recuerde: este procedimiento se realiza dos veces - una vez para ^2H y otra para ^{18}O (y, opcionalmente, una tercera vez para ^{17}O). Tras elegir un instrumento y un isótopo y haga clic en "Query".



En la ventana que se abre (ver imagen más abajo), se mostrarán los últimos 500 análisis en el instrumento seleccionado. La lista de análisis está ordenada según la fecha; por defecto se muestran los análisis más recientes. Los datos más antiguos pueden verse reduciendo el número de análisis utilizando los campos "From and to" y luego volviendo a consultar la base de datos con el botón de búsqueda Query.

Los campos de datos que se muestran son:

- **Analysis** – El prefijo de instrumento y su contador (L, P, etc.), conforme a lo dispuesto en el instrumento laser.
- **INJ** – Este es el número de inyección por muestra. Aquí cada muestra individual se compone de nueve inyecciones. Existen dos casos para cada número de inyección – uno es etiquetado ^2H y el otro ^{18}O .
- **Date/time** – La fecha y hora que registra el instrumento.
- **Our Lab ID** – Nombre de la muestra en LIMS. El signo más (+) al lado de nuestro ID de laboratorio denota el isótopo seleccionado en el paso 2 para ser normalizado (en este caso se refiere el isótopo ^2H en un Picarro).
- **Vial Pos** – La posición de la muestra en la bandeja del muestreador automático.

Importancia del marcado y la normalización de datos inmediatamente

Debido a que los datos de dos o tres isótopos son importados al mismo tiempo en el archivo CSV, *LIMS para Láseres de 2015* no puede distinguir una ejecución de análisis de otro. El analista debe indicar manualmente a *LIMS para Láseres 2015* que datos corresponden a cada ejecución de análisis, específico para cada isótopo. El procedimiento se conoce como "Marcado", por el que el analista define explícitamente el inicio y final de cada ejecución automática (autorun) a ser normalizado para cada isótopo, como se muestra en el ejemplo siguiente.

Consejos:

- Es una buena práctica para importar, marcar y normalizar cada ejecución automática (autorun) para todos los isótopos tan pronto como se terminan de analizar en el equipo; esto evita la acumulación de archivos de datos en el equipo láser o importar datos más adelante al azar.
- El extremo final marcado de cada ejecución automática (autorun) define el comienzo del siguiente autorun para ser importado cuando se importan en orden cronológico (por ejemplo, el número consecutivo de análisis).
- Si importa datos y olvida los pasos de marcar y normalizar, el siguiente conjunto de datos se anexa al anterior y aparecerá como una ejecución automática (autorun) de gran tamaño por lo

que esta opción está fuertemente desaconsejada.

- Si desea volver a importar un archivo de ejecución automática (autorun) para realizar un procesamiento alternativo, primero debe desmarcar aquellos datos que fueron previamente marcados y normalizados, y luego volver a importar. *LIMS para Láseres 2015* le avisará si intenta volver a importar datos previamente marcados y normalizados.

| 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,, | | | | |

Seleccione el último análisis con el signo + para marcar la ejecución automática (autorun) deseado.

3. Para normalizar los datos importados del láser, haga doble clic en la última aparición de un análisis con un signo "+" al lado de su correspondiente número (ej. W-3 +). Esto se denomina "marcar" para realizar la normalización de todos los datos de deuterio (u oxígeno-18) acumulados desde la última normalización de datos importados. Debido a que el método de normalización predeterminado utilizado en *LIMS para Láseres de 2015* es "la normalización en bloques", LIMS ya ha procesado todos los datos isotópicos y tras una normalización completa aparecerá un mensaje "Fully normalized Instrument (Picarro or Los Gatos Research) analyses have been identified". Haga clic en "Aceptar". A continuación, haga clic en botón de "Apply

| Data Normalization | | | | | | | | | |
|---|-----|---------------------|------------|----------|-------------------|-----------------------------------|------|--------|-----------|
| Choose Instrument and Isotope Delta: M (LGR v4) for $\delta^{17}O$ | | | | | | | | | |
| '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 | | | |

Rango de muestras marcadas con la normalización aplicada.

12.2 Normalizar datos (sin utilizar la normalización en bloques)

Si ha importado los datos isotópicos utilizando la opción "Standard Import" o "Standard Import with Choice of Corrections", los datos de ejecución automática (autorun) se tratan como un solo lote y las otras opciones de normalización, como corrección por deriva instrumental lineal, pueden aplicarse después, siguiendo los pasos 1 – 3 en capítulo 12.1.

1. Haga clic en "Normalize with All References". Los valores calculados de R^2 deben ser $> 0,9$. Si son significativamente inferiores a 0.9, este hecho sugiere una variabilidad isotópica inesperada en los patrones. Es necesario comprobar la presencia de valores atípicos (outliers).
2. Haga clic en "Apply Normalization". El coeficiente de para la normalización propuesto por LIMS y los factores de corrección derivados de los patrones de medición en la ejecución automática (autorun) se aplican a los datos. Opcionalmente, busque el efecto de deriva instrumental marcando "Use Linear Drift Correction".
3. ¡Ya casi ha terminado! Repita el proceso para el segundo isótopo (ej. $\delta^{18}\text{O}$). Luego, evalúe sus resultados (capítulo 12.3).

Nota: *LIMS para Láseres 2015* revela 4 inyecciones ignoradas tal como se establece en las opciones de instrumento. Busque valores atípicos (outliers) e ignore aquellos que considere necesario. El panel inferior muestra un resumen de los resultados de medición utilizado varios patrones para la normalización – Nota: las mediciones malas de los patrones también se pueden ignorar.

Normalization Equation Coefficients

Correction Factor List: K (Picarro 2140i) for 52H 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 Corr: 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 52H | Hourly Corr | Expans Coef | Add Corr | Final 52H | 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: 14 < 1 of 119 > No Filter Search

Multiple Injections Analysis Summary

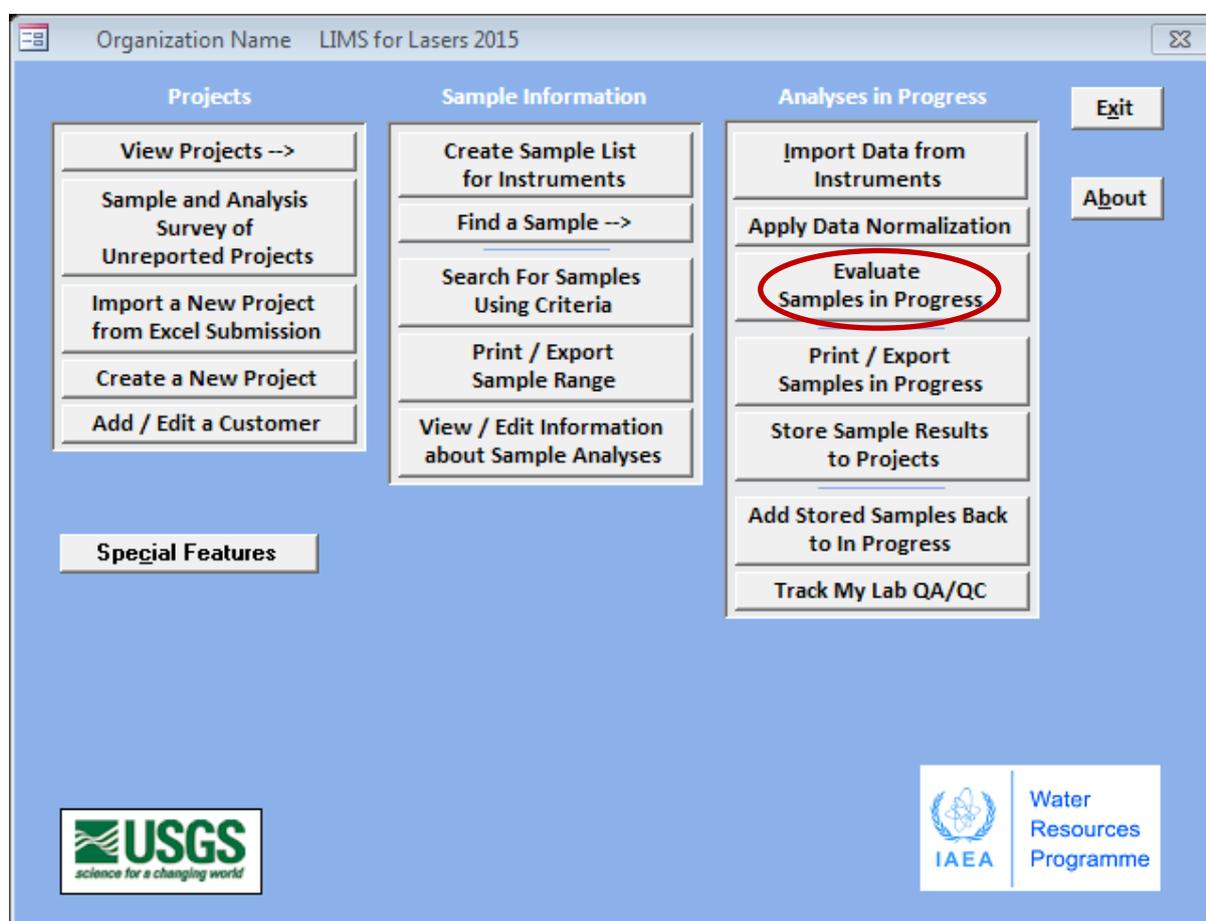
| OurLabID | Vial Pos | Analysis | Average | Std Dev |
|----------|----------|----------|---------|---------|
| W-33 | 1-04 | K-457 | -150.32 | 0.14 |
| W-33 | 1-16 | K-469 | -149.96 | 0.27 |
| W-33 | 1-17 | K-470 | -150.32 | 0.07 |
| W-34 | 1-05 | K-458 | -2.34 | 0.19 |
| W-34 | 1-06 | K-459 | -1.62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

12.3 Evaluar análisis en modo “In progress”

Una vez que las muestras han sido medidas y normalizadas a la escala de VSMOW-SLAP, permanecen en “modo pendiente” “In progress” en LIMS hasta que los resultados son evaluados por el analista y almacenados. El analista debe evaluar todos los resultados antes de almacenarlos e informar al cliente.

La evaluación de datos *LIMS para Láseres 2015* consta de dos partes: (1) comprobar las repeticiones de todas las muestras normalizadas que se midieron dos veces o más y (2) comprobar el funcionamiento de los patrones de control incluidos en cada ejecución automática, y a lo largo del tiempo (ver capítulo 12.7).

1. En la página principal de *LIMS para Láseres 2015*, haga clic en "Evaluate Samples in Progress".



Evaluate Analyses in Progress

List [Navigation icons] Query Retrieve Delete Print Close

Isotope Delta: $\delta^2\text{H}$

Our Lab ID Range

Prefix

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

From: 1001 To: 1010

Sample Information

Our Lab ID:
 Submitter:
 Subm Date:
 Sample ID:

Results

Mean Final $\delta^2\text{H}$:
 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 $\delta^2\text{H}$ | Hourly Corr | Expans Coef | Add Corr | Final $\delta^2\text{H}$ | IG |
|------|----------|-----|---------------|--------------|-------------|---------------------------|-------------|-------------|----------|--------------------------|----|
| | | | | | | | | | | | |

Record: [Navigation icons] No Filter Search

- Elegir el isótopo— por ejemplo $\delta^2\text{H}$ - que desea evaluar desde el menú desplegable situado en la parte superior izquierda (recordar repetir el mismo procedimiento para el $\delta^{18}\text{O}$).
- El prefijo disponible en *LIMS para Láseres 2015* es "W" para el agua (no se activan los otros prefijos).
- Ingrese el rango de muestras «W» normalizadas o los patrones de control que desee evaluar. En el ejemplo siguiente, W-1802 a W-1821 correspondieron a los últimos datos ejecutados.
- A continuación, haga clic en "Query" para su búsqueda.
- Se abrirá una ventana con un resumen de todos los resultados para cada muestra en el rango "W" consultado.

Our Lab ID Range

Prefix

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

from: 1802 to: 1821

Sample Information

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 No Filter Search

3. Haciendo clic en el botón de "List" (arriba a la izquierda) o utilizando los botones de navegación (flechas), es posible ver las muestras individuales para examinar los resultados de cada medición. En el ejemplo anterior, la muestra con nuestro ID de laboratorio W-1804 fue seleccionada para $\delta^2\text{H}$. Es también posible navegar a través de muestras mediante el uso de la rueda de desplazamiento del ratón.

Esta ventana muestra la información de la muestra (ID, cliente, fecha de análisis) y un resumen de los resultados normalizados (Valor medio y Dev Std). Aquí, observamos la muestra w-1804 se analizó dos veces con números de análisis Q-959 y Q-993 en la ventana de resumen de inyecciones múltiples ("Multiple peaks/Analysis summary"). Los valores normalizados medios (VSMOW) para cada conjunto de inyecciones se presenta en esta ventana, y se observa que ambas mediciones para este ejemplo son coherentes ($\delta^2\text{H}$ de -2.36% y -2.48%), por lo que se puede aceptar el resultado final.

En la tabla inferior se muestra la muestra W-1804 se midió el 13 de julio y el 16 de julio de 2012. Se ve que los datos normalizados y las inyecciones que han sido ignoradas. También se muestran las posiciones de frasco utilizadas, y la escala y factores de corrección utilizados (si corresponde).

Usando las flechas de navegación o la rueda de desplazamiento del ratón, compruebe todas las muestras que deben evaluarse. Asegúrese de que compruebe todas las muestras dentro de cada ejecución automática, por ejemplo, si se incluyeron muestras de varios proyectos (agrupaciones de diferentes números W).

Si hay un desacuerdo significativo entre los valores de las repeticiones de $\delta^2\text{H}$ o $\delta^{18}\text{O}$ valores de la misma muestra, esa muestra debe medirse una tercera vez. Si dos de los tres resultados están bien, se puede concluir que el tercer "outlier" pudo haber sido un mal análisis (o un frasco equivocado).

Juzgar lo que es una discrepancia significativa es una cuestión de juicio profesional. Esa decisión debe tener en cuenta la exactitud y la precisión que el instrumento utilizado puede razonablemente alcanzar.

Como primera sugerencia (y esto es específico del instrumento), las repeticiones de $\delta^2\text{H}$ que estén dentro de un rango de 1.5 ‰ entre sí generalmente se consideran aceptables para estudios hidrológicos. Para el $\delta^{18}\text{O}$, si están dentro de 0.2 ‰ entre sí generalmente se consideran aceptables. Esta evaluación, sin embargo, sigue siendo decisión de cada laboratorio, y es el laboratorio quien establece sus propias normas de funcionamiento (véase también trazado de mi laboratorio QA/QC en el capítulo 12.7 para la obtención de métricas de rendimiento a largo plazo).

¡Importante! Si una muestra ha sido medida 2-3 veces y hay un claro valor anómalo (outlier), en la opción "Evaluate Analyses in Progress" estos datos deben ser manualmente "ignorados". En la ventana inferior, marque la opción IG (ignorar) para las muestras de valores atípicos (por ejemplo, todas las instancias que el mismo número de análisis). Alternativamente haga clic en el botón derecho para ignorar todas las inyecciones de un análisis con un solo clic. El análisis desaparecerá de la ventana de Resumen de inyecciones múltiples, y estos resultados de mala calidad no se utilizarán para el cálculo de la media que se genera como resultado final de esa muestra.

PRECAUCIÓN: ¡Si no ignora malos resultados, estos valores se utilizan para calcular el valor medio reportado final!

Haciendo clic en el botón "Retrieve", el usuario puede agregar una muestra a la cola de muestras en progreso para el isótopo seleccionado. Para agregar más de una muestra a la vez, consulte la sección 12.6.

Haciendo clic en el botón "Delete", el usuario puede eliminar una muestra de las muestras en cola "In progress" para el isótopo seleccionado. Esto es útil para eliminar muestras de tipo test o pruebas de la cola cuyos resultados ya no son necesarios. Tenga en cuenta que los análisis no se eliminan de la base de datos de LIMS. Se puede añadir/recuperar a las muestras en cola usando el botón "Retrieve" o "Add Stored Results Back to In Progress" como se ve en la sección 12.6.

El botón "Print" imprimirá los resultados analíticos de las muestras seleccionadas. Las opciones de impresión extra se presentan en la sección siguiente (sección 12.4).

Como *LIMS para Láseres 2015* asigna un nuevo número de inyección durante la importación de todos los análisis de $\delta^{17}\text{O}$ (número de inyección del último análisis de $\delta^2\text{H} + 70$), al evaluar los resultados de $\delta^{17}\text{O}$ los usuarios observarán que los números de inyección desde el 71 hacia adelante incluyen resultados de $\delta^{17}\text{O}$.

Evaluate Analyses in Progress

List | Query | Retrieve | Delete | Print | Close

Isotope Delta: $\delta^{17}\text{O}$

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 $\delta^{17}\text{O}$ | Hourly Corr | Expans Coef | Add Corr | Final $\delta^{17}\text{O}$ | 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"/> |

Record: 1 of 18 | No Filter | Search

Ignore multiple injections with 'right' mouse button

12.4 Imprimir o exportar muestras en modo "In Progress"

Algunos analistas prefieren evaluar resultados offline usando Excel o imprimir resúmenes detallados para muestras individuales antes de que se almacenen. Esto se facilita con el botón de "Print/Export Samples in Progress" en la página principal de LIMS, que abre el siguiente formulario.

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

Preferences

- Save As Excel File
- Print Amounts and H₂O Concentrations

Save Only Analyses From a Single Instrument

Instrument

Analyses from: to:

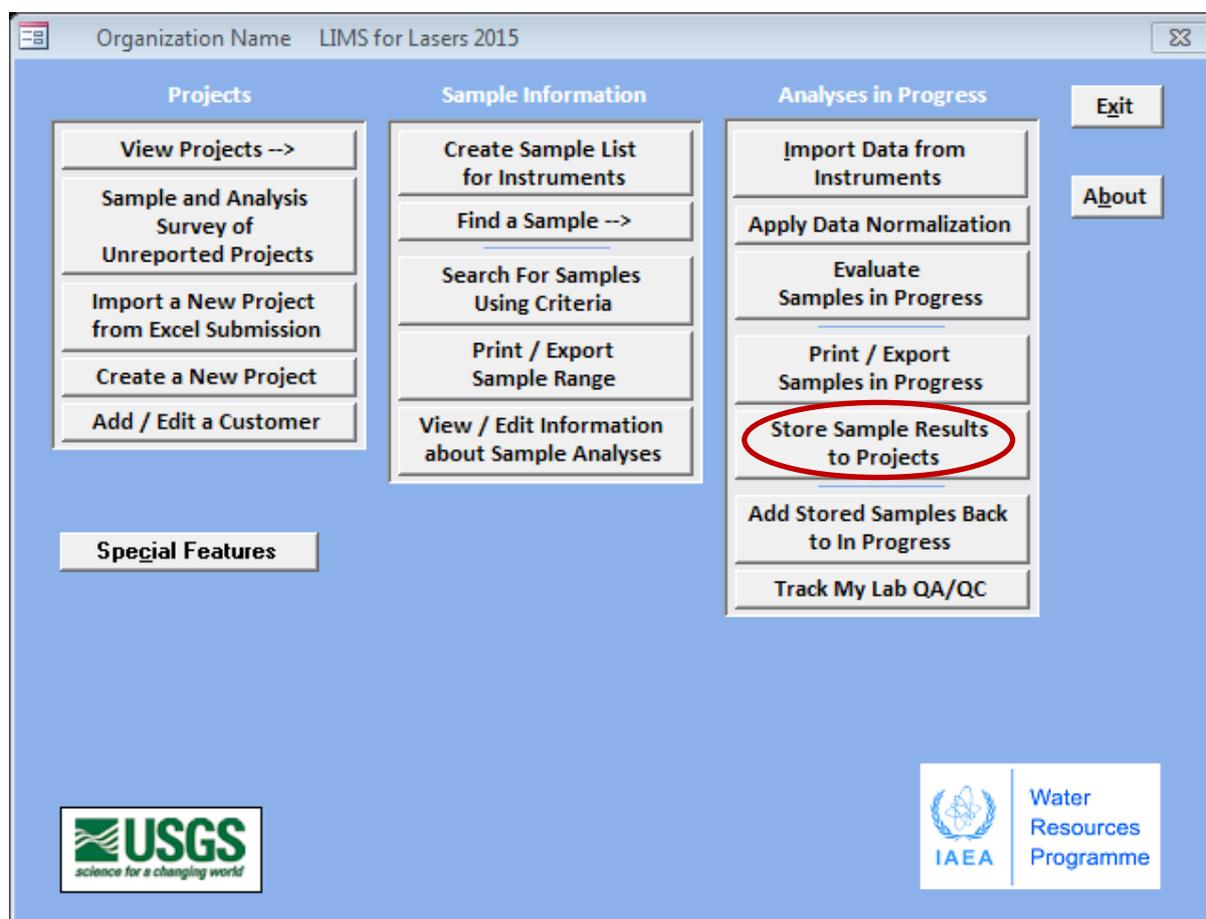
Export with references

En el ejemplo anterior, todos los análisis de $\delta^2\text{H}$ desde W-1804 a W-1821 se pueden imprimir o "Guardar" en una hoja de cálculo para ser analizados. Opcionalmente, es posible seleccionar los análisis de sólo un instrumento, o incluir los datos de los patrones que acompañan a las muestras, y/o incluir las concentraciones relativas de agua medidas en la cavidad del láser. Algunos clientes desean recibir los valores de los isótopos de los patrones analizados con sus muestras en un archivo de Excel. Esto es posible al marcar la casilla "Export with references"

12.5 Almacenar los resultados finales de los proyectos

La acción de "Almacenar" los resultados finales ("Store Sample Results to Project") de un proyecto significa que el analista ha procedido a la normalización de todas las muestras y de las muestras de control medidas y por tanto los resultados son aceptables dentro de sus criterios de evaluación.

El último paso es "Almacenar" los resultados finales de las muestras en el proyecto del cliente con el propósito de producir los informes/reportes finales.



1. Haga clic en el botón " Store Sample Results to Projects".
2. En la ventana que se abre, elija el isótopo ($\delta^2\text{H}$ o $\delta^{18}\text{O}$) y luego introduzca el rango de IDs (números W) de las muestras a ser almacenadas.

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

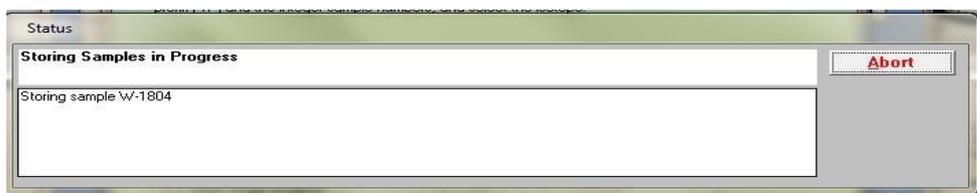
R -> Reference

S -> Sulfur

W -> Water

From: **to:**

- En el ejemplo de arriba, se seleccionaron los resultados finales de $\delta^{18}\text{O}$ para muestras de W-1802 a W-1821 para ser "Guardados" para ser enviado al cliente. Para almacenar una sola muestra, escriba su número de W en el cuadro "FROM", pero deje el cuadro "TO" vacío.
- Haga clic en "Store" y *LIMS para Láseres 2015* inicia el almacenamiento, y un mensaje indica su terminación. **Nota:** Si cualquier muestra se ejecuta en dos o más instrumentos de láser, LIMS ofrecerá la opción para almacenar los resultados de todos los instrumentos, o bien de los equipos láseres seleccionados.



- Repetir el proceso para $\delta^2\text{H}$ utilizando el menú desplegable. A continuación, cierre la página de "Store Samples page".
- Todas las muestras para el análisis isotópico de hidrógeno y oxígeno para el rango de muestras seleccionado se almacenan en "Projects for final reporting" (capítulo 13).

Importante: Por defecto, *LIMS para Láseres 2015* no almacena datos finales a menos que las muestras se hayan analizado dos o más veces. Para anular esta función, marque la casilla "Store Single Analysis" – sólo entonces se almacenarán muestras analizadas sólo una vez. No se recomienda reemplazar esta función, pero puede ser usada para propósitos de prueba, o en caso de que no hubiera suficiente cantidad de muestra para un análisis por duplicado.

12.6 Agregar resultados almacenados de vuelta a "In Progress"

Puede haber ocasiones cuando resultados de las muestras almacenadas deben colocarse otra vez en el estado "In Progress". Esto podría deberse a varias razones:

- Se han almacenado muestras analizadas por separado erróneamente.
- Se utilizaron viales incorrectos y hay que ignorar algunos de los datos.
- Se reevaluaron factores de corrección y los valores de isotópicos almacenados necesitan reflejar estas reevaluaciones.

Añadir muestras a "In Progress" permite al analista volver a procesar los datos, corregir o ignorar los errores o eliminar datos defectuosos de un proyecto. Nota: Si una muestra se vuelve a analizar y ya fue almacenada, *LIMS para Láseres 2015* asigna automáticamente la muestra al estado "In progress".

Agregar manualmente resultados almacenados a "In Progress":

1. En la página principal de LIMS, haga clic en "Add Stored Samples Back to In Progress"
2. Elija el isótopo ($\delta^2\text{H}$ o $\delta^{18}\text{O}$) y luego introduzca los números de ID del laboratorio en el campo FROM y TO; repita para el segundo isótopo, si es necesario.
3. Haga clic en "Add" – las muestras está ahora "In Progress" hasta que se vuelvan a almacenar.

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
δ²H

Our Lab ID

Prefix

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

From: 1001 to: 1010

Preferences

Set any previously stored values in Table of Samples to null

Add **Close**

Nota: Si por error "Almacena" datos, el proyecto conservará los datos incorrectos que se almacenaron. Si desea eliminar datos incorrectos, marque la casilla "Set previously stored values in the Table of Samples to null" y haga clic en "Add". Esto eliminará cualquier resultado almacenado para los números "W" seleccionados.

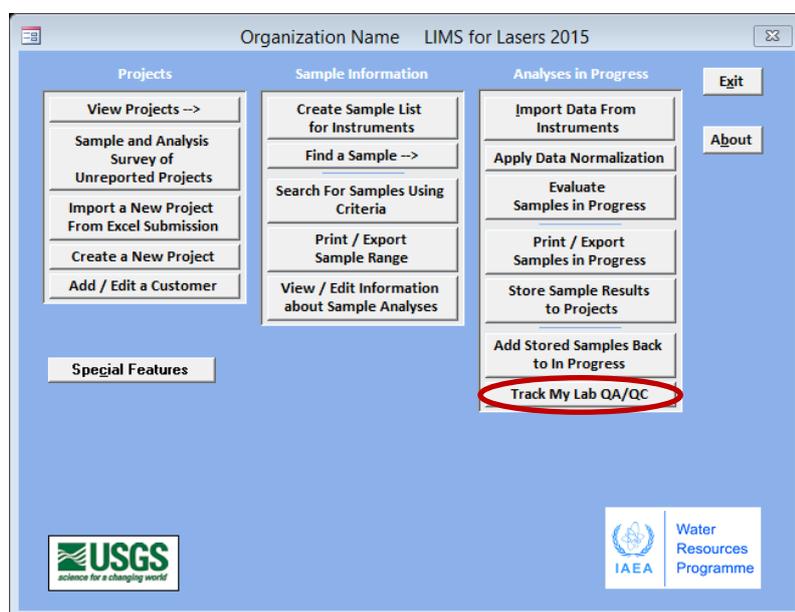
12.7 Evaluación QA/QC de mi laboratorio

Una parte clave de la evaluación de los datos es examinar los resultados de los controles en cada ejecución automática (autorun), y confirmar que los resultados son coherentes con los valores conocidos o con los resultados de los patrones de control (esto se realiza generalmente antes de guardar el resultado final). Esta evaluación de QA/QC se realiza a través de la utilización sistemática y el seguimiento de los patrones de control del laboratorio, como está predeterminado en las plantillas de análisis de *LIMS para Láseres de 2015*.

Después de cada ejecución automática, *LIMS para Láseres 2015* permite la evaluación de los patrones de control. Con el tiempo, esta evaluación proporciona al analista métricas realistas de precisión instrumental a largo plazo y permite detectar rápidamente cambios inesperados en los resultados de control.

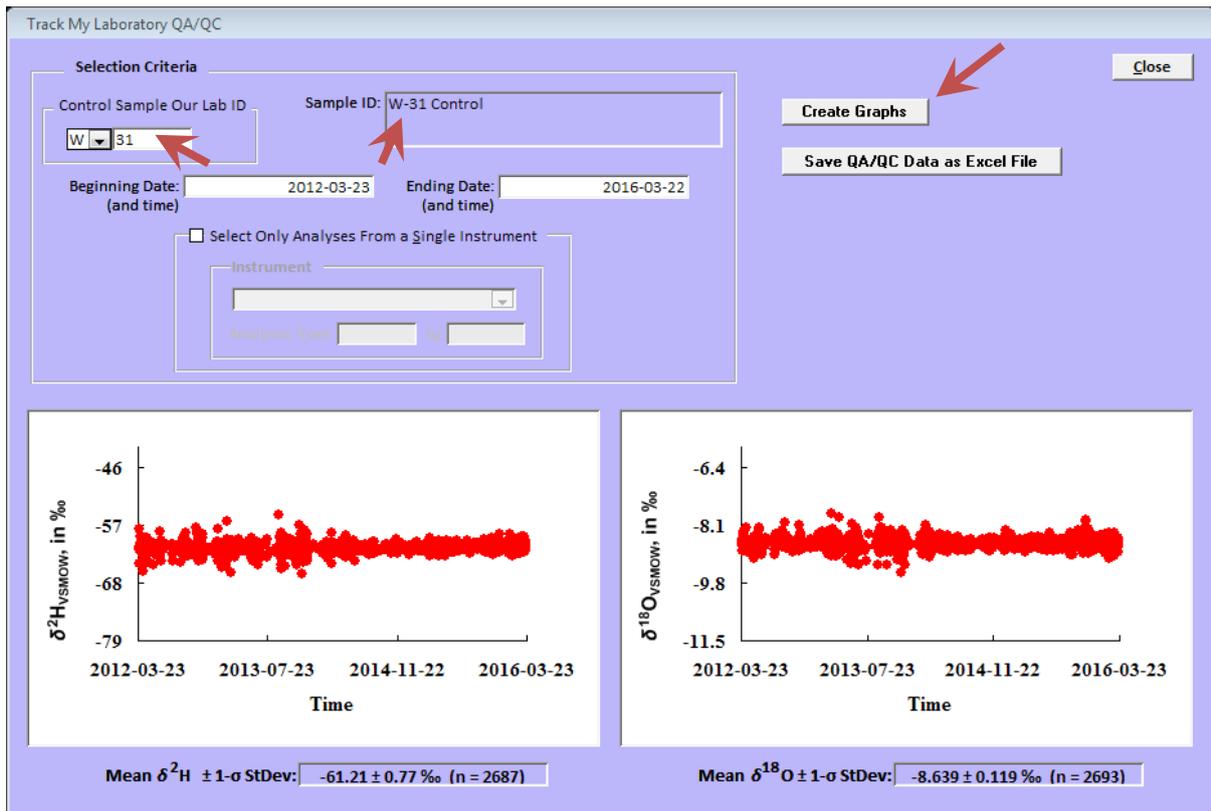
Cambios graduales o bruscos en los valores δ de un patrón estándar pueden ser debidos a un almacenamiento inadecuado del patrón de laboratorio (por ejemplo evaporación) o a un error humano en el laboratorio (por ejemplo, posición errónea de un vial en la bandeja del muestreador automático).

1. En la página principal de LIMS, haga clic en "Track My Lab QA/QC".



2. Introduzca el número ID del patrón de control de nuestro laboratorio (W-31 en el ejemplo siguiente).
3. Haga clic en cualquier campo para aceptar todos los análisis o para definir un rango de fechas de análisis.
4. Opcionalmente, seleccione un instrumento específico si el patrón de control se midió en varios instrumentos (por ejemplo, múltiples láseres).

5. Haga clic en "Create Graph". *LIMS para Láseres 2015* muestra un resumen gráfico y las estadísticas para el patrón de control de laboratorio para los criterios de búsqueda seleccionados.
6. Examinar el gráfico, o exportar estos datos para aislar datos atípicos (outliers) y determinar su causa (por ejemplo posición errónea de un vial en la bandeja del muestreador automático).
7. De forma opcional, los datos del patrón de control puede ser exportados a Excel para realizar un análisis fuera de línea o para ser utilizados para generar informes anuales de los resultados del laboratorio y auditorías.



LIMS para Láseres 2015 supervisa el funcionamiento del laboratorio mediante el uso de patrones de control.

12.8 Consultar y editar información y resultados de muestras

En la columna "Sample Information" de la página principal de *LIMS para Láseres 2015* hay información adicional para consultar las características que permiten al analista encontrar rápidamente información sobre una muestra o un grupo de muestras y análisis.

Encontrar una muestra

Haga clic en "Find a Sample" e introduzca el número ID de nuestro laboratorio "W"; Haga clic en "Find". LIMS devuelve la página que contiene información específica de la muestra, y si se finalizó su análisis o no.

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: W-2435

$\delta^2\text{H}$

Comment:

Delta Value: -47.81 ‰

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

Comment:

Delta Value: -7.66 ‰

Decimal Degrees

Lat: Long:

Accuracy:

Meters

Elevation:

Top:

Bottom:

Sample ID: 201202

Aquifer:

River/Lake:

Conductivity:

Temperature:

pH:

Alkalinity:

Other Info:

Collection Date: 2012-02-15

End Collection Date:

Country:

State/Province:

Resultados de búsqueda de una muestra

Encontrar una muestra o un grupo de muestras utilizando criterios de búsqueda

Haga click en "Find a Sample using Criteria". Existen varias opciones para buscar una o todas las muestras en todos los proyectos que cumplan con ciertos criterios de búsqueda usando caracteres comodín de campo de texto basados en valores δ o fechas.

Por ejemplo, uno puede encontrar rápidamente todos los datos o muestras de una región específica, acuífero o formación sin importar el cliente, si la información buscada estaba guardada en el proyecto. Estos resultados de búsqueda se pueden guardar en Excel.

Find a Sample or a Group of Samples

Find a sample or samples in LIMS using search criteria. Close

You can use pattern matching (wildcards). Some Wildcards in Microsoft Access

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.

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

Save as Excel File

Sample Selection Criteria

Search Field (Required):

Search For Exact Entry:

Search With Wildcards:

Values greater than or equal to:

Use These Criteria: Values less than or equal to:

Samples:

| OurLabID | Sample ID | Search Field | Collection Date | Delta 2H | Delta 180 | 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.

Ejemplo de búsqueda para todas las muestras en todos los proyectos con valores de $\delta^{18}O$ inferiores o iguales a -2 ‰.

Imprimir un rango de muestra

Para imprimir la información y los datos de una lista amplia de muestras, haga clic en "Print Sample Range" y entrar en el rango de números "W", haga clic en "Print". Alternativamente, la información también puede guardarse en un archivo de Excel.

Print Sample Range

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

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

| | | |
|---|--|--|
| Lab ID: <input type="text" value="W-112"/> | Country: <input type="text" value="AU -> Austria"/> | Sample ID: <input type="text" value="Location 4-4"/> |
| Name: <input type="text" value="Smith"/> | State/Province: <input type="text" value="000 -> , Unknown"/> | Aquifer: <input type="text"/> |
| Submission: <input type="text" value="2012-07-18"/> | Latitude: <input type="text"/> | River/Lake: <input type="text"/> |
| Delta 2H: <input type="text" value="-34.2"/> | Longitude: <input type="text"/> | Conductivity: <input type="text"/> |
| Comment: <input type="text"/> | Urc: <input type="text"/> | Temperature: <input type="text"/> |
| Delta 18O: <input type="text" value="-5.72"/> | Alkalinity: <input type="text"/> | pH: <input type="text"/> |
| Comment: <input type="text"/> | Elevation: <input type="text"/> | Beg/End Collection Date: <input type="text"/> |
| Other Info: <input type="text"/> | Top: <input type="text"/> | Bottom: <input type="text"/> |

| | | |
|---|--|--|
| Lab ID: <input type="text" value="W-113"/> | Country: <input type="text" value="AU -> Austria"/> | Sample ID: <input type="text" value="Location 4-5"/> |
| Name: <input type="text" value="Smith"/> | State/Province: <input type="text" value="000 -> , Unknown"/> | Aquifer: <input type="text"/> |
| Submission: <input type="text" value="2012-07-18"/> | Latitude: <input type="text"/> | River/Lake: <input type="text"/> |
| Delta 2H: <input type="text" value="-27.8"/> | Longitude: <input type="text"/> | Conductivity: <input type="text"/> |
| Comment: <input type="text"/> | Urc: <input type="text"/> | Temperature: <input type="text"/> |
| Delta 18O: <input type="text" value="-4.63"/> | Alkalinity: <input type="text"/> | pH: <input type="text"/> |
| Comment: <input type="text"/> | Elevation: <input type="text"/> | Beg/End Collection Date: <input type="text"/> |
| Other Info: <input type="text"/> | Top: <input type="text"/> | Bottom: <input type="text"/> |

Ejemplo de una impresión de una página dentro de un rango de muestras seleccionado.

Ver / editar información sobre análisis de las muestras

Se puede consultar información detallada y una opción avanzada para editar directamente un análisis (incluyendo las inyecciones de láser) utilizando "View / Edit Information about Sample Analyses". Todos los datos de la muestra y sus resultados isotópicos pueden ser editados y guardados manualmente.

En el ejemplo, podemos ver que la primera inyección del análisis #435 es para $\delta^2\text{H}$ en un instrumento Picarro con prefijo ID "K" y corresponde al análisis de la muestra W-15874. También vemos que fue ignorada, siendo la primera de 7 inyecciones.

Add or Edit Analyses

List Edit New Analysis New Inj New Procedure Delete Close

Range of Instrument Analyses for List

Last 1000 analyses
 Last 10000 analyses

Instrument: K --> Picarro 2140i

Our Lab ID

Prefix

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

Sample: 15874

Analysis Information

Analysis #: 435 Inj #: 1 # of Injs: 7

Vial Position: 1-32

Date/Time: 8/22/2015 12:07:11 AM

Amount: 100

Amount Unit:

Analytical Results

Isotope Delta: $\delta^2\text{H}$

Value: -67.32 Ignore:

Instrument Error:

Hourly Corr:

Exp. Coef: 1.00000

Add. Corr: 0.00

Final Value: -67.32

Linearity Adjustment

Method:

Date:

Previous Penultimate Delta:

Sample Information

Submitter: Terzer, Stefan

Submission Date: 6/4/2015

Sample ID: LJ-1 6.6.2014

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

Todos los campos indicados pueden editarse manualmente haciendo clic en el botón "Editar", cambiando los datos y la información actualizada. Como se señaló, estas opciones de edición pueden utilizarse para editar y cambiar análisis individuales. Es posible agregar un nuevo análisis, una nueva inyección o un nuevo procedimiento.

Importante: Las características de edición avanzadas están diseñadas para facilitar la corrección de fallos analíticos, donde el analista ha corregido los datos fuera de línea. Sin embargo, en el caso de un archivo de ejecución automática (autorun) con malos resultados, es mejor repetirlo que editarlo manualmente. *En resumen, la edición manual de resultados no se recomienda de manera rutinaria.*

13 Informe de resultados isotópicos

13.1 Informe de resultados al cliente

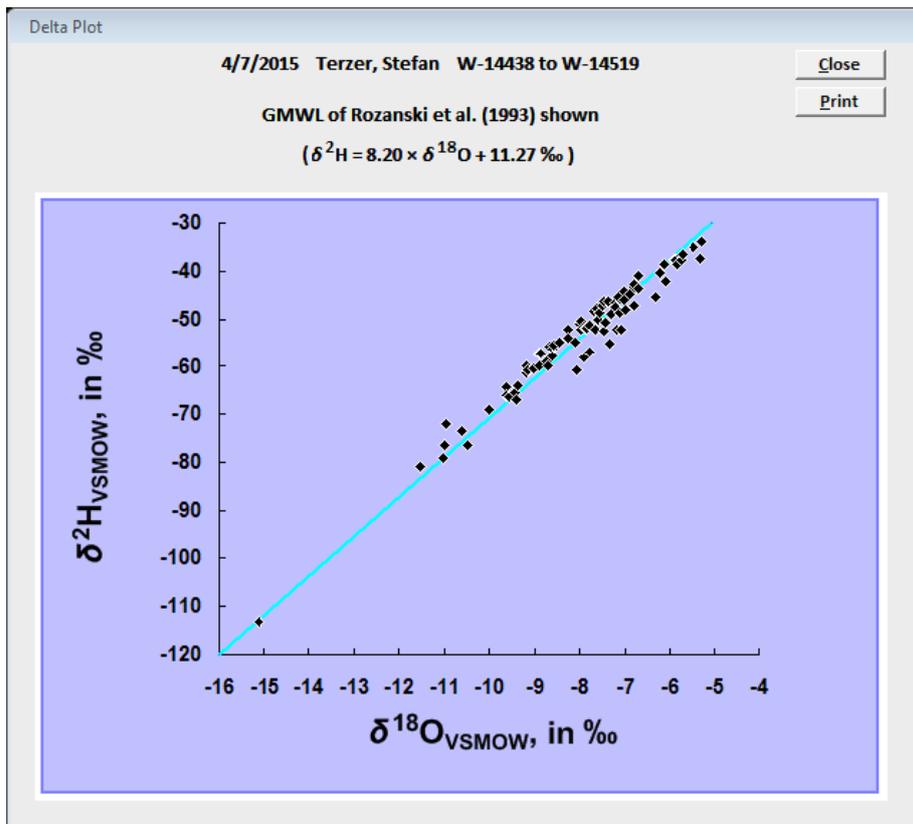
La generación de informes de resultados finales de $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ al cliente se realiza desde la página de proyectos ("Projects Page"). LIMS para Láseres 2015 informa el valor medio de todas las repeticiones realizadas de una muestra que han sido evaluadas, aceptadas y almacenadas por el analista. Hay una serie de opciones para la presentación de informes finales. Los clientes pueden recibir una copia impresa o, más típicamente, los resultados en una hoja de cálculo de Excel.

1. En la Página principal de LIMS, haga clic en "View Projects", luego haga doble clic en el proyecto completado y listo para ser entregado al cliente. En este ejemplo, el doble clic a un proyecto mostró la siguiente pantalla:

The screenshot displays the 'Projects' interface. At the top, there is a navigation bar with 'List All Projects', a page number '837', and a 'Create Companion $\delta^{17}\text{O}$ & $\delta^{18}\text{O}$ Project' button. Below this are several action buttons: 'Show Samples', 'Export Results', 'Delta Plot', 'Invoice', 'Print Labels', 'Add Samples to Instrument Template', 'Print Report', 'Find Project By Invoice No', and 'Print Small Labels'. A yellow banner at 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', 'Location: 7 stations', and 'Project Comments:'. 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 '0' in the missing samples count.

2. Ya que todas las muestras se midieron dos veces, se evaluaron, aceptaron y se almacenaron por el analista, el estado del proyecto se muestra resaltado en amarillo como proyecto listo para ser reportado "Project Ready to Report". El panel inferior de la ventana muestra que 0 de 23 muestras están pendientes para ser analizadas ($\delta^{18}\text{O}$ o $\delta^2\text{H}$).
3. Antes de comunicar los resultados finales, un último paso es examinar los resultados utilizando la función "Delta Plot". Clic en el botón "Delta Plot" produce una gráfica de $\delta^2\text{H}$ versus $\delta^{18}\text{O}$ para las muestras del proyecto. Tenga en cuenta que los ejes de datos se ajustarán automáticamente según los datos del proyecto. Este diagrama proporciona una forma rápida

de visualizar la correlación entre los dos isótopos comparados con la "Recta Mundial de las Aguas Meteoricas" (GMWL, sus siglas en ingles). Los datos atípicos (outliers), aquellos que se encuentran lejos de la GMWL, pueden ser erróneos o pueden estar bien. Las relaciones no-lineales en esta gráfica pueden ser el resultado de agregar trazadores isotópicos que han distorsionando la correlación, por evaporación natural, muestras de vertederos/rellenos sanitarios (los valores $\delta^2\text{H}$ pueden situarse sustancialmente por encima de la GMWL), por interferencias espectrales que el instrumento láser ha fallado a tener en cuenta (da un valor delta sustancialmente incorrecto en comparación con el que midió por IRMS),^[2] o cuando hay poca o ninguna variación isotópica de las muestras del proyecto (comprobar la escala de los ejes).



Gráfica de resultados $\delta^{18}\text{O}$ versus $\delta^2\text{H}$ proporcionada por LIMS para Láseres 2015.

Para imprimir la copia de un informe de un proyecto de cliente haga clic en "Print Report". El informe se imprimirá en la impresora predeterminada, en una impresora opcional, o en un archivo PDF si se instala un Creador de archivos PDF.

| | | | |
|----------------|------------|----------------------------|----------------|
| Export Results | Delta Plot | Invoice | Print Label |
| Print Report | | Find Project By Invoice No | Print Small La |
| | | Unpaid Invoices | |

Project Ready to Report

Last Changed: 8/24/2015

19
1

Select Destination

Report To Be Printed
Project Report

Cancel

Default Printer
on USB001

Send to Default Printer

Selected Printer
PDFCreator on Ne01

Send to Selected Printer

Ejemplo de informe para un cliente de LIMS para Láseres 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 | |

- Para exportar los resultados de un proyecto a un archivo de Excel, haga clic en "Export Results". LIMS pregunta dónde quiere guardar el archivo de Excel y le da el nombre por defecto con el ID del laboratorio para el proyecto (por ejemplo, W-12720. XLS para el ejemplo anterior). Este archivo puede ser enviado por correo electrónico al cliente.
- LIMS automáticamente rellenará el campo " Date Reported" en el campo del proyecto del cliente.

| 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 Unpaid Invoices | Print Small Labels |
| General Information | | | | Last Changed: 8/24/2015 |
| Submission: 4/7/2015 | Delta Values <input checked="" type="radio"/> $\delta^2\text{H}$ and $\delta^{18}\text{O}$ <input type="radio"/> $\delta^{17}\text{O}$ 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 Combinar los resultados de varios proyectos

En ocasiones, un cliente puede tener varios proyectos y puede solicitar resultados en un archivo de Excel conjunto en lugar de múltiples hojas de cálculo o informes impresos.

Una vez que *LIMS para Láseres 2015* acumula los proyectos de un cliente, utilice la función de búsqueda como se describe en el capítulo 6.2 para buscarlos. Tras obtener los resultados de la búsqueda, haga clic en cualquiera de las siguientes opciones:

Imprimir informes de todos los proyectos seleccionados (“Print Reports of All # Selected Projects”) – esto imprime copias de todos los proyectos que aparecen en la ventana de resultados de búsqueda.

Crear archivos de Excel con los datos de los proyectos seleccionados (“Create Excel Files of Data of Selected Projects (# Files)”) – Esto crea archivos de Excel individuales para todos los proyectos resultantes en la ventana de búsqueda.

Combinar los datos de los proyectos seleccionados y guardar como un archivo de Excel único (Combine Data of Selected Projects and Save as a Single Excel File) – combina los datos secuenciales de los proyectos en la ventana de resultados de búsqueda en un solo archivo de Excel, el nombre predeterminado de Excel es el número W (por ejemplo, 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 | | |
| 2005-06-05 | Reference | W-5 to W-30 | International references | | |
| 2005-06-05 | 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 | |

Nota: Para eliminar un proyecto de un resultado de búsqueda, resáltelo y bórralo. Se elimina sólo la búsqueda, no el proyecto.

13.3 Facturación de un proyecto

Algunos laboratorios pueden querer que *LIMS para Láseres 2015* genere una factura al cliente. Suponiendo que el usuario haya marcado la casilla de "Display Invoices" en opciones (véase el capítulo 4.6), uno puede realizar los siguientes pasos.

1. En el panel "View Project", abra el proyecto del cliente a facturar.
2. En la página del proyecto, haga clic en el botón de "Invoice".
3. Haga clic en "Edit". Esto rellena automáticamente la información del cliente anteriormente suministrada en *LIMS para Láseres 2015*.
4. Complete los campos "Sold By" y "Sold To". Introduzca el precio por análisis.
5. Imprima la factura.

Invoice Generation

Print Save Cancel

Invoice Information

Sold By

Addr1: Institution Name
Addr2: Address1
Addr3: Address2
Addr4: Address3
Addr5:
Addr6:

Invoice Number: 72
Invoice Date: 2015-03-05

Account Number or Purchase Order: 123454
Billing Code:

Type of Samples: δ2H and δ18O
Number of Samples in Project: 10
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:

Las búsquedas de facturas por número y pago pendiente se realizan desde la página principal del proyecto:

Invoice Export Results

Find Project By Invoice No

Unpaid Invoices

Last Changed: 2015-03-05

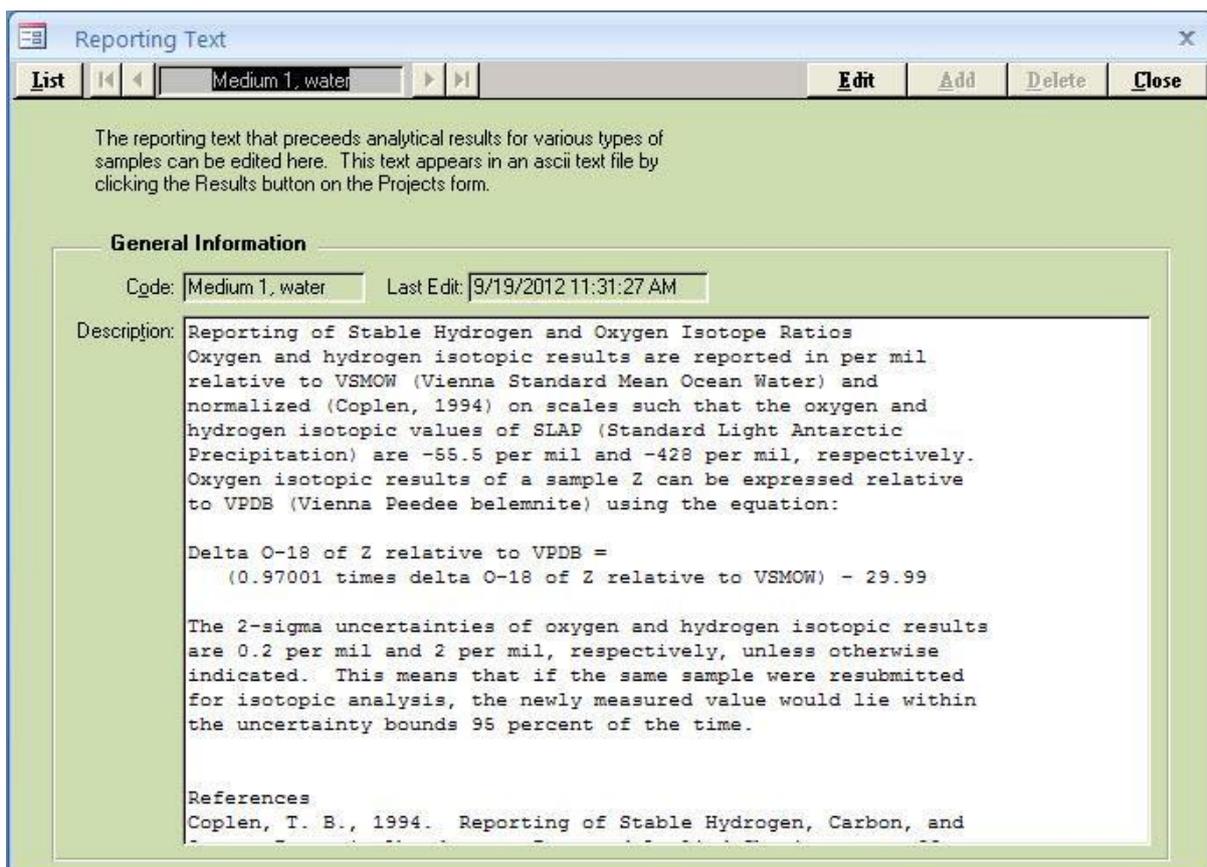
Nota: El formato de moneda en este formulario se obtiene desde el Panel de Control de Windows -> Configuración Regional de tu PC.

13.4 Exportación a un fichero ASCII con el texto de presentación de informes

En la página del proyecto, haciendo clic en "Customer invoice" se muestra la opción de exportar a texto ASCII. Aunque pocos clientes prefieren ASCII a un archivo de Excel, este tipo de archivo permite una opción adicional – la inserción de información de tipo texto adicional, con frecuencia solicitada sobre los análisis y el laboratorio.

Esta información adicional puede ser acerca de los métodos utilizados o las estadísticas del laboratorio.

1. En la página principal de LIMS, haga clic en "Special Features".
2. Abra "Reporting Text".
3. Haga clic en "Add".
4. Introduzca información descriptiva: esta información aparecerá como un encabezado en el ASCII.



Ejemplo de un texto de presentación de informes de datos de ASCII.

14 Fuentes y calibración de patrones de laboratorio locales

14.1 Fuentes primarias de referencia isotópica de agua

VSMOW2 y SLAP2 son los patrones primarios de referencia de medición disponibles en la actualidad para los isótopos de agua. Están disponibles en el OIEA en el siguiente enlace:

[http://Nucleus.IAEA.org/RPST/ReferenceProducts/ReferenceMaterials/Stable Isotopes/2H18O-Water-samples/index.htm](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 Fuentes de patrones de medición para uso diario

Servicio Geológico de Estados Unidos

Los usuarios pueden comprar cajas de 144 ampollas de vidrio de 5 mL con los patrones de medición de uso diario. La recomendación es que las ampollas con dos valores δ sustancialmente diferentes se deben abrir diariamente para la normalización de datos y una tercera ampolla con un valor δ intermedio para ser utilizado como patrón de control. El agua sobrante de las ampollas debe ser desechada. El uso de estas aguas de referencia ayuda al laboratorio a tener altos niveles de QA/QC.

- Las cajas contienen 144 ampollas de vidrio de 5 mL con agua de diferentes composiciones isotópicas.
- VSMOW es un patrón de medición primario de isótopos del agua. VSMOW (25 mL, en 5 ampollas de 5 mL de vidrio esterilizado; ver <http://isotopes.usgs.gov/lab/referencematerials/VSMOW.pdf>).
- Todos los patrones del USGS están disponibles en el siguiente enlace web: (ver <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 |

Organismo Internacional de Energía Atómica – Sección de Hidrología Isotópica

El OIEA ofrece patrones de uso diario para los laboratorios de los Estados Miembros a través de sus programas de Cooperación Técnica (CT). Por favor consulte la página web del OIEA o con el personal del Dpto. de CT.

14.3 Plantillas de análisis para la calibración de patrones de medición Local

LIMS para Láseres 2015 tiene plantillas de análisis de 20 muestras para la calibración de los patrones internos de laboratorio de uso diario para $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$. Estas plantillas de análisis utilizan los patrones de VSMOW y SLAP (o VSMOW2 y SLAP2), así como suficientes réplicas junto con los patrones de laboratorio interno. Se pueden crear plantillas nuevas usando patrones de referencia primarios mediante el asistente de creación de plantillas de análisis (capítulos 8.4 y 8.5).

Cada patrón de laboratorio para uso diario propuesto para $\delta^{18}\text{O}$ y $\delta^2\text{H}$ debe medirse 10 veces, o más, frente los patrones de referencia isotópica primarios con el fin de proporcionar los suficientes datos para determinar la incertidumbre de dicha medición. Es una buena práctica enviar sus patrones a un laboratorio externo para verificar los valores δ antes de asignar los valores δ en la tabla de referencias de *LIMS para Láseres 2015*.

Tabla 3. Plantilla para la calibración de patrones de laboratorio usando LGR

En esta plantilla, 20 patrones de laboratorio se organizan secuencialmente en la bandeja 1. Como se muestra en la tabla, 10 de cada uno de los dos patrones de medición de laboratorio internos (Lab Std High δ / Lab Std Low δ) propuestos están dispuestos secuencialmente. Los patrones de referencia primarios VSMOW-SLAP (o VSMOW2-SLAP2) y las muestras de lavado (Deionized Water) están dispuestas en la bandeja 3 (bandeja trasera) en su propia fila. El procedimiento recomendado es de 9 inyecciones, ignorando las primeras 4 inyecciones. El # de lista muestra el orden en el que las muestras son analizadas.

| Muestra | Pos del vial | # de Lista | Función |
|-----------------------|--------------|------------|----------------------------------|
| Deionized Water | 3-19 | 1 | Acondicionamiento de instrumento |
| Deionized Water | 3-19 | 2 | Acondicionamiento de instrumento |
| VSMOW/VSMOW2 | 3-10 | 3 | Efecto memoria |
| SLAP/SLAP2 | 3-1 | 4 | Efecto memoria |
| SLAP/SLAP2 | 3-2 | 5 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Lab Std High δ | 1-1 | 6 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-2 | 7 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-3 | 8 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-4 | 9 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-5 | 10 | Muestra |
| SLAP/SLAP2 | 3-1 | 11 | Efecto memoria |
| VSMOW/VSMOW2 | 3-11 | 12 | Efecto memoria |
| VSMOW/VSMOW2 | 3-10 | 13 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Lab Std High δ | 1-6 | 14 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-7 | 15 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-8 | 16 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-9 | 17 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-10 | 18 | Muestra |

| | | | |
|----------------------|------|----|--------------------------|
| VSMOW/VSMOW2 | 3-11 | 19 | Efecto memoria |
| SLAP/SLAP2 | 3-2 | 20 | Efecto memoria |
| SLAP/SLAP2 | 3-1 | 21 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Lab Std Low δ | 1-11 | 22 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-12 | 23 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-13 | 24 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-14 | 25 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-15 | 26 | Muestra |
| SLAP/SLAP2 | 3-2 | 27 | Efecto memoria |
| VSMOW/VSMOW2 | 3-10 | 28 | Efecto memoria |
| VSMOW/VSMOW2 | 3-11 | 29 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Lab Std Low δ | 1-16 | 30 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-17 | 31 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-18 | 32 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-19 | 33 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-20 | 34 | Muestra |
| VSMOW/VSMOW2 | 3-10 | 35 | Efecto memoria |
| SLAP/SLAP2 | 3-1 | 36 | Efecto memoria |
| SLAP/SLAP2 | 3-2 | 37 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Deionized Water | 3-19 | 38 | Lavado final |

Tabla 4. Plantilla para para la calibración de patrones de laboratorio usando un instrumento Picarro.

En esta plantilla, 20 patrones de laboratorio se organizan secuencialmente en el inyector automático. Como se muestra en la tabla, 10 de cada uno de los dos patrones de medición de laboratorio internos (Lab Std High δ / Lab Std Low δ) propuestos están dispuestos secuencialmente. El procedimiento de análisis recomendado es 9 inyecciones, ignorando las primeras 4 inyecciones. El # de lista muestra el orden en el que las muestras son analizadas.

| Sample | Pos del vial | # de Lista | Función |
|-----------------------|--------------|------------|-----------------------------|
| VSMOW/VSMOW2 | 1-01 | 1 | Efecto Memoria |
| SLAP/SLAP2 | 1-02 | 2 | Efecto Memoria |
| SLAP/SLAP2 | 1-03 | 3 | Normalización de VSMOW-SLAP |
| Lab Std High δ | 1-04 | 4 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-05 | 5 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-06 | 6 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-07 | 7 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-08 | 8 | Muestra |
| SLAP / SLAP2 | 1-09 | 9 | Efecto Memoria |
| VSMOW / VSMOW2 | 1-10 | 10 | Efecto Memoria |
| VSMOW / VSMOW2 | 1-11 | 11 | Normalización de VSMOW-SLAP |
| Lab Std High δ | 1-12 | 12 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-13 | 13 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-14 | 14 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-15 | 15 | Muestra |
| Lab Std High δ | 1-16 | 16 | Muestra |
| VSMOW / VSMOW2 | 1-17 | 17 | Efecto Memoria |
| SLAP / SLAP2 | 1-18 | 18 | Efecto Memoria |
| SLAP / SLAP2 | 1-19 | 19 | Normalización de VSMOW-SLAP |
| Lab Std Low δ | 1-20 | 20 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-21 | 21 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-22 | 22 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-23 | 23 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-24 | 24 | Muestra |
| SLAP / SLAP2 | 1-25 | 25 | Efecto Memoria |
| VSMOW / VSMOW2 | 1-26 | 26 | Efecto Memoria |
| VSMOW / VSMOW2 | 1-27 | 27 | Normalización de VSMOW-SLAP |
| Lab Std Low δ | 1-28 | 28 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-29 | 29 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-30 | 30 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-31 | 31 | Muestra |
| Lab Std Low δ | 1-32 | 32 | Muestra |
| VSMOW / VSMOW2 | 1-33 | 33 | Efecto Memoria |
| SLAP / SLAP2 | 1-34 | 34 | Efecto Memoria |
| SLAP/SLAP2 | 1-35 | 35 | Normalización de VSMOW-SLAP |

14.4 Procedimientos de calibración

Recuerde del capítulo 7.1 que *LIMS para Láseres 2015* cuenta con un proyecto llamado "Patrones de laboratorio" (Lab references), que contiene marcadores de posición para los nuevos patrones de medición de laboratorio local que van desde W-31 a W-69.

En este ejemplo, a las dos nuevos patrones de laboratorio, a ser calibrados frente VSMOW2-SLAP2, se les asignaron los ID de laboratorio W-40 y W-41 (véase capítulo 7.2 para editar y cambiar el nombre los marcadores de posición para patrones de laboratorio).

Para los instrumentos de Los Gatos Research:

1. En la página principal de LIMS, haga clic en "View Projects".
2. Abra el proyecto denominado "Lab References".
3. Haga clic en "Template list – Add or Remove Samples".

The screenshot shows a window titled "Add Samples To Be Analyzed" with a subtitle "2006-06-06 Reference". It contains instructions: "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 "Add", "Delete", and "Close" buttons. The "General Information" section includes a "Template" dropdown menu with the selected value "Lab Std Cal VSMOW2-SLAP2 -- Calibrate Lab Stds Using VSMOW2/SLAP2". Below it are "From:" (40) and "To:" (41) input fields. There are also "Number of non-consecutive sample repeats:" (1) and "Number of consecutive sample repeats:" (10) input fields. The "Add At" section has two radio buttons: "Front of the queue" (unselected) and "End of the queue (default position)" (selected). Red arrows in the original image point to the template dropdown, the From and To fields, and the repeat count fields.

4. Los patrones de laboratorio W-40 y W-41 se calibrarán frente a los patrones de referencia primarios VSMOW2 y SLAP2. Elija la plantilla de análisis "Lab Std Cal VSMOW2-SLAP2 – Calibrate Lab Stds Using VSMOW2/SLAP2" desde el menú desplegable "Template", como se muestra en la imagen superior.
5. En el campo "FROM" y "TO", escriba 40 y 41, respectivamente.
6. Establezca el número de repeticiones no consecutivas (cada una se analizan una vez) a 1.
7. Establezca el número de repeticiones consecutivas a 10 (cada muestra se analizan 10 veces en

Para los instrumentos del Picarro:

1. En la página principal de LIMS, haga clic en "View projects".
2. Abra el proyecto denominado "Lab References".
3. Haga clic en "Template List – Add or Remove Samples".

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. Los patrones de laboratorio W-40 y W-41 se calibrarán frente a los patrones de referencia primarios VSMOW2 y SLAP2. Elija la plantilla de análisis "Lab Std Cal VSMOW2-SLAP2 – Calibrate Lab Stds Using VSMOW2/SLAP2" desde el menú desplegable "Template", como se muestra en la imagen superior.
5. En el campo "FROM" y "TO", introduzca 40 y 41, respectivamente.
6. Establezca el número de repeticiones no consecutivas (cada una se analizan una vez) a 1.
7. Establezca el número de repeticiones consecutivas a 10 (cada uno mide 10 veces en la tabla 4).
8. Haga clic en "Add", luego "Close".
9. En la página principal de *LIMS para Láseres 2015*, haga clic en "Create Sample List for Instruments".
10. En el menú desplegable, elija la plantilla de análisis VSMOW2 SLAP2.
11. En la ventana que se abre, aparecen W-40 y W-41 en cola para ser analizados 10 veces cada uno.
12. Cree la lista de muestras y guárdela en el Picarro (ver capítulo 9).
13. Meda las muestras y los patrones primarios en el instrumento Picarro (capítulo 9). Los valores δ deben establecerse en -999 ‰ si existen en la tabla de referencia (capítulo 7.3). Normalice, evalúe y guarde los resultados finales, como se describe en el capítulo 12.

15 Contaminación espectral, preguntas frecuentes, archivos de registro

15.1 Acumulación de sal y contaminación espectral

Las muestras de agua en la naturaleza (por ejemplo ríos, lagos, agua subterránea) generalmente contienen especies iónicas disueltas (STD, Ca, Mg, Cl⁻, HCO₃⁻, etc.), o pueden haber disuelto materia orgánica o compuestos orgánicos volátiles (por ejemplo hidrocarburos, MOD, COV). Las concentraciones de estos constituyentes disueltos varían ampliamente en la naturaleza, desde casi agua pura en glaciares o precipitación (niveles en µg/L), hasta salmueras hipersalinas (niveles en g/L), o aguas subterráneas contaminadas con petróleo que contienen una mezcla compleja de compuestos semi- y volátiles orgánicos. Otras muestras de agua pueden ser extractos de agua de plantas (alta MOD/COV), o de agua intersticial del suelo (alta MOD o STD) y pueden contener COVs desconocidos.

Hay dos puntos principales de introducción de muestra de agua donde los componentes disueltos de las muestras de agua pueden causar problemas para la espectrometría láser:

- *Acumulación de sales inorgánicas y orgánicas en la unidad del inyector.* Aparte del atasco habitual de la jeringa, la acumulación de sal es un problema conocido en todos los manuales de usuario. El remedio consiste en realizar lavados periódicos y limpieza de la interfaz del módulo inyector de agua caliente, o como sea necesario. La acumulación de sales puede causar el bloqueo de la línea de transferencia de H₂O (que se manifiesta por la caída o variabilidad de los rendimientos de H₂O), o ya que algunas sales deshidratadas tienen una fuerte afinidad por el agua, estas pueden causar el fraccionamiento isotópico a través de la acumulación de sal en la unidad del inyector o en la línea de transferencia de la muestra.
- *Contaminación espectral a través de la incorporación de compuestos orgánicos volátiles en la cavidad del láser.* El espectro isotópico de muestra de H₂O puede verse comprometido debido a la contaminación por moléculas gaseosas que absorben o distorsionan los espectros de moléculas isotópicas de H₂O. Algunos de los compuestos orgánicos volátiles (COV) que causan problemas espectrales incluyen alcoholes e hidrocarburos como el metano o el etano ^[12,139]. También se ha observado que se produce contaminación espectral por mezclas de VOCs con extractos de agua de plantas y hojas o vertidos de lixiviados ^[14,15]. No puede ser predicho *a priori* la magnitud del impacto negativo que el COD o COV puede tener en el análisis isotópico con equipos láser de H₂O sin tener un conocimiento explícito de las propiedades de absorción molecular del contaminante. ^[2]

En la actualidad, Los Gatos Research y Picarro proporcionan a los usuarios con un software para evaluar y, en algunos casos, intentar corregir contaminación espectral utilizando un software de identificación de contaminación espectral llamado *Spectral Contamination Identifier Software™* o *ChemCorrect™* software (véase el sitio Web de fabricante correspondiente para obtener más información). Los archivos de salida de estos softwares son principalmente para evaluar e informar a

los usuarios si las muestras son aceptables o no y posiblemente identificar cuáles podrían ser los contaminantes que interfieren. Ninguno de estos programas de evaluación espectral están incorporados al láser ni al software utilizado para generar archivos de salida *LIMS para Láseres 2015*, por ello el analista debe utilizar estas herramientas fuera de LIMS.

En resumen, los usuarios de instrumentos láser deben estar atentos a la presencia de compuestos orgánicos e inorgánicos desconocidos en las muestras de agua que se desean analizar para obtener resultados correctos. Generalmente, las muestras de agua con STD o COD presentan pocos problemas para los equipos láser. Sin embargo, si se analizan muestras con altos COD, VOC, y/o salados, es prudente comprobar y limpiar los inyectores más con frecuencia, o preseleccionar los resultados a través del software espectral fuera de línea *antes de* importar los archivos de resultados a *LIMS para Láseres 2015*. Las muestras identificadas por el software de detección espectral como "comprometidas" pueden ser ignoradas con seguridad después de importarlas en *LIMS para Láseres 2015*. Otras acciones incluyen medir o repetir muestras sospechosas por técnicas convencionales de IRMS, si está disponible. En situaciones donde los resultados deben ser precisos, como en aplicaciones en ciencias forenses, las muestras de agua deben comprobarse siempre por espectrometría de masas (IRMS).^[2]

15.2 Preguntas frecuentes

P - ¿Por qué la respuesta de *LIMS para Láseres 2015* es lenta en nuestros PCs en red?

A. Cuando la base de datos de *LIMS para 2015 láser* reside en una unidad de red, un ancho de banda de red lento puede causar una respuesta retardada. Una solución consiste en colocar la base de datos en una unidad de red rápida, preferiblemente con una velocidad del orden de Gigabites o incluso mejor.

Otra razón puede ser la concurrencia de usuarios en *LIMS para Láseres 2015*. Las bases de datos como MS Access bloquean los campos abiertos por los usuarios y no se pueden acceder hasta que el usuario haya completado la edición. Otra ocurrencia común se produce cuando otro usuario deja abierta una pantalla de búsqueda o de edición sin darse cuenta (por ejemplo tablas bloqueadas). Para evitar esto, asegúrese de cerrar siempre *LIMS para Láseres 2015* cuando termine de usarlo.

P - ¿Por qué se recomienda medir cada muestra dos veces? Esto parece innecesario.

A. Nuestro enfoque predeterminado de ejecutar dos veces cada muestra es un enfoque conservador que permite evaluar la reproducibilidad de cada muestra, no sólo utilizando los patrones de control y medición. Alternativamente, los usuarios pueden elegir repetir ninguno, 1 de cada 10 o 1 de cada 5 muestras, o añadir más controles.

P - ¿Por qué se recomiendan realizar 9 inyecciones? En nuestro manual de láser se recomiendan 6 inyecciones, e ignorar 3.

A. Como se señaló en el capítulo 8.8 – realizar 9 inyecciones es una recomendación conservadora para asegurar que los mejores resultados se obtienen de *todas* las generaciones de instrumentos láser. Los instrumentos más recientes de láser pueden requerir menos inyecciones o ignorar menos inyecciones. Si los resultados difieren significativamente, puede comprobarse comparando las recomendaciones de *LIMS para Láseres 2015* por defecto con los de la misma prueba pero utilizando menos inyecciones y menos inyecciones ignoradas. Usando menos inyecciones, verá que la precisión empeora y que el efecto memoria aumenta. En última instancia, cada laboratorio tiene que establecer cuáles serán sus criterios de rendimiento aceptable.

P. He decidido reducir el consumo de patrones de laboratorio usando sólo 1 frasco en lugar de los 3 frascos recomendados por patrón de la plantilla por defecto de los instrumentos LGR. *LIMS para Láseres 2015* no calcula el efecto memoria entre muestras. ¿Qué ha pasado?

A. Esto es normal. Los instrumentos LGR y Picarro asumen que cualquier "muestra consecutiva" con la misma posición de vial tiene el mismo número de análisis. Por lo tanto, las posiciones de los viales para dos o más patrones de laboratorio idénticos deben alternarse para que puedan ser tratados como muestras diferentes. De lo contrario no puede determinarse el efecto memoria en *LIMS para Láseres 2015*.

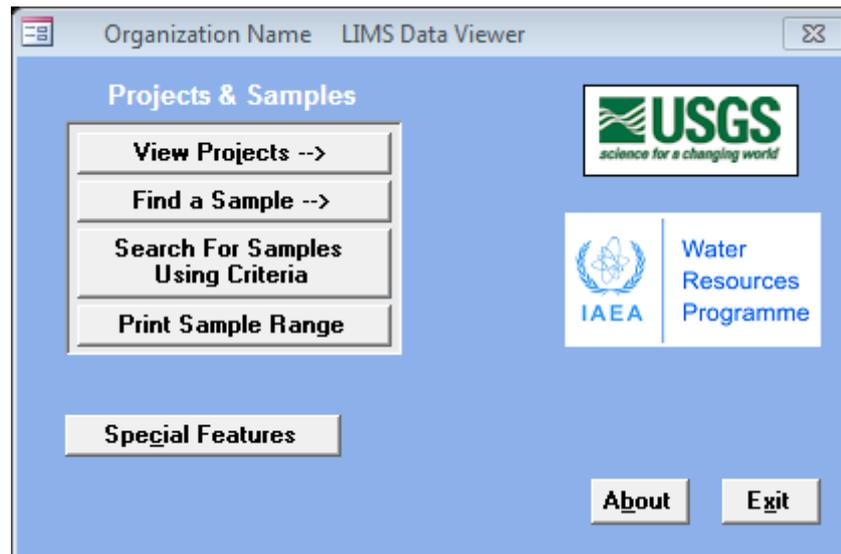
P. Estoy atascado. ¿A quién puedo contactar para pedir ayuda con *LIMS para Láseres 2015*?

A. Si usted ha seguido cuidadosamente los procedimientos descritos en este manual y sigue teniendo problemas, póngase en contacto con los autores (TBC o LIW) por correo electrónico (tbcoplen@usgs.gov o l.wassenaar@iaea.org). Posiblemente le solicitemos que nos envíe su base de datos como un archivo comprimido (en confianza) para que podamos ayudarle a solucionar su problema.

16 Visor de datos de LIMS

16.1 Visor de datos de LIMS

El visor de datos de LIMS (v. 11.02 o posterior) es una utilidad opcional que puede ser utilizada en equipos de confianza, configuración departamental o en la configuración de un grupo de laboratorio. Esta utilidad permite a los clientes conectados a la red del laboratorio (por ejemplo compañeros, sus colegas, directivos) acceder a la base de datos del laboratorio (LIMS para Láseres v.10 o LIMS for Light Stable Isotopes v.9) desde sus propios escritorios, pero sin ninguna capacidad para editar o alterar información en la base de datos.



Esta visualización de *sólo lectura* es una conveniencia y puede ser utilizada por clientes de laboratorio confiables para:

- Ver y extraer los proyectos actuales de carga de trabajo y clientes del laboratorio.
- Ver sus proyectos y el estado de análisis.
- Descargar o exportar datos del proyecto a un Excel o imprimir un informe.
- Reducir su necesidad de enviar por correo electrónico o llamar al laboratorio sobre el estado de una muestra o un proyecto.

Nota: Esta utilidad es para ser usada en entornos de confianza ya que da acceso a todos los proyectos en la base de datos de LIMS. Un completo acceso de visualización puede no ser apropiado en todos los entornos o donde los proyectos se consideran confidenciales.

16.2 Ordenadores y requisitos de Software

Obligatorio:

- Equipo que ejecute Windows XP o posterior.
- Microsoft Office 2007, 2010, 2013 o 2016 Pro (con acceso) para Windows instalado.
- Acceso a la red a la base de datos de LIMS.

Software:

- El *visor de datos del LIMS v11.02*, o posterior.

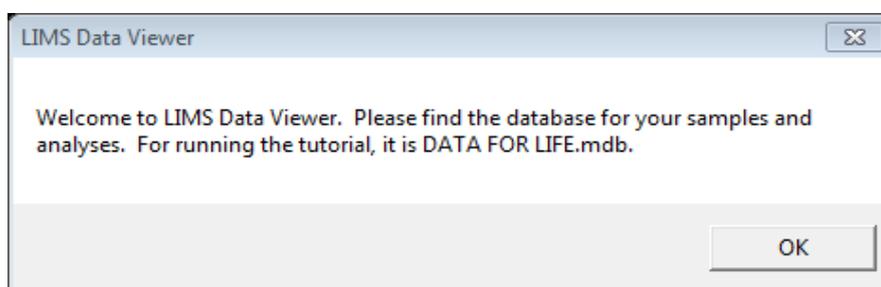
El *Visor de datos del LIMS* puede descargarse sin costo alguno de los sitios Web del USGS u OIEA:

http://www-naweb.iaea.org/NAPC/IH/IHS_resources_sampling.html#LIMS

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

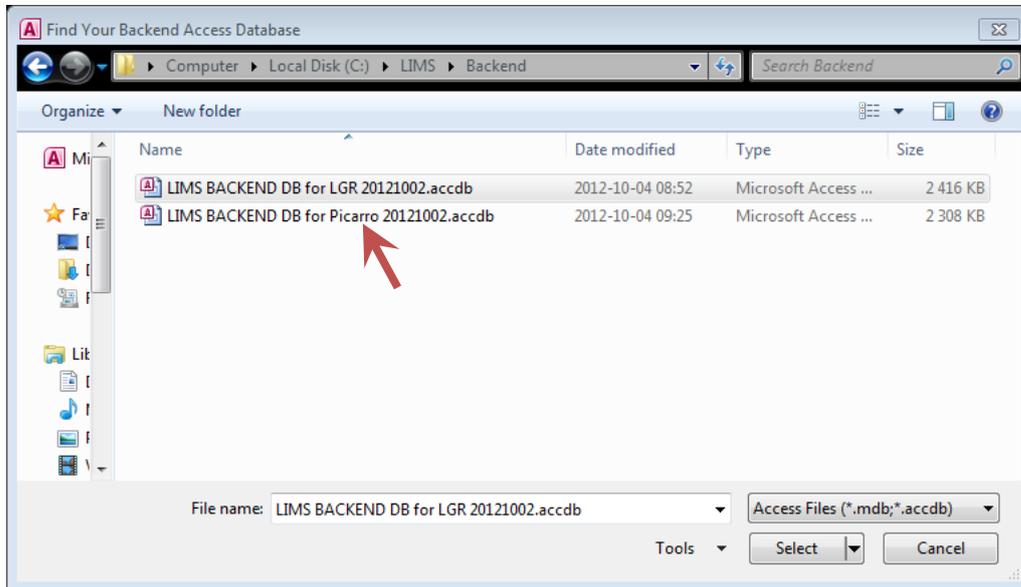
16.3 Instalación

1. Descargar y descomprimir el *Visor de datos de LIMS* para tu escritorio (o carpeta). Asegurar que Microsoft Office 2007 o Office 2010 – 16 (32-bit) con Microsoft Access está instalado. Garantizar acceso a la ubicación del archivo visor añadido como una ubicación de confianza (véase el capítulo 3.1).
2. Haga doble clic para abrir el archivo "LIMS Data Viewer.accdb".
3. Aparecerá el siguiente mensaje solicitando la ubicación de la base de datos de LIMS:

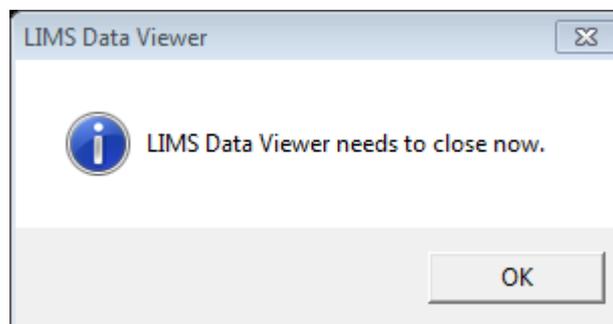


4. Haga clic en "Aceptar" y utilice el diálogo para navegar a la ubicación donde se encuentre la base de datos de LIMS, *conforme a lo dispuesto por el director del laboratorio de isótopos o administrador*. Esto puede ser una ubicación de red o una unidad de red asignada. Como un ejemplo a continuación, C:\LIMS\backend.

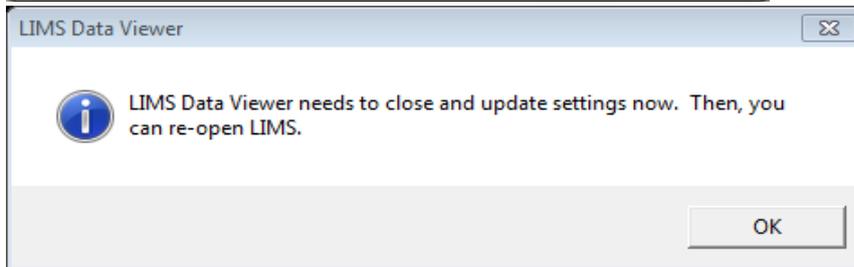
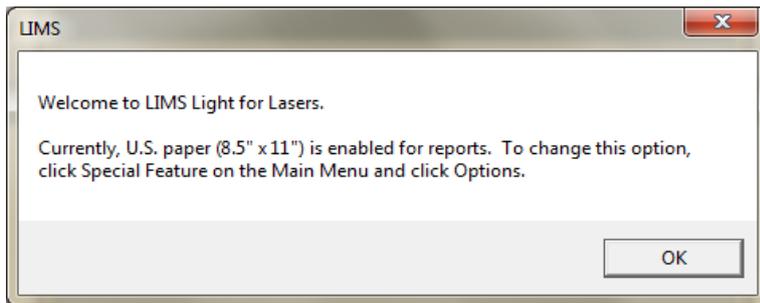
Nota a los encargados del laboratorio: Puede ser prudente proporcionar acceso a clientes a una copia sincronizada de la base de datos de laboratorio LIMS en una unidad de red diferente, en lugar de utilizar el archivo de base de datos original.



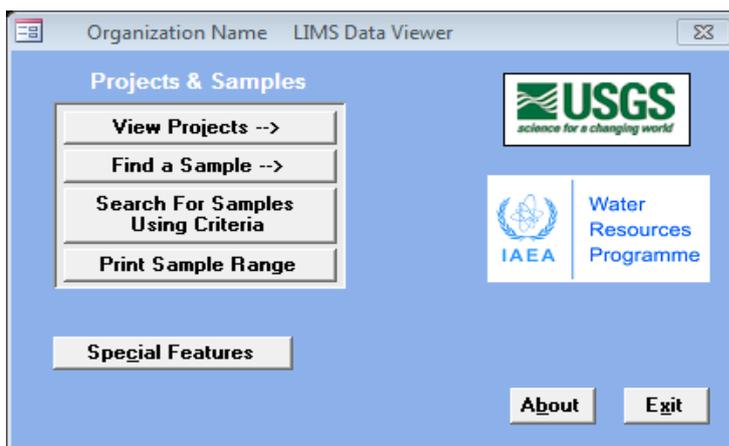
5. A continuación, el *Visor de datos del LIMS* debe cerrarse. Haga clic en "Aceptar" (puede aparecer una advertencia de seguridad si fue instalado en una localización noconfiable):



6. Haga doble clic para volver a abrir el archivo "LIMS Data Viewer.accdb". Haga clic en "Aceptar" a los dos cuadros de diálogo siguientes y volver a abrir "LIMS Data Viewer.accdb" una última vez.



7. El *Visor de datos del LIMS* ahora se ha instalado correctamente. Esta debe ser la pantalla al iniciar LIMS:



Página principal del Visor de datos LIMS.

El Visor permite utilizar la aplicación LIMS, acceder a los proyectos, encontrar una muestra, buscar, imprimir y ver las características especiales que se describen completamente en los capítulos del manual del usuario *LIMS para Láseres*, con la restricción de que ningún campo puede ser editado o modificado. No todos los menús serán visibles, y algunos son inaccesibles desde el *Visor de datos del LIMS*.

- **Ver proyectos** – Para ver, imprimir o exportar datos. Revise las secciones correspondientes del capítulo 13.
- **Encontrar una muestra** – Revisar las secciones correspondientes del capítulo 12.8.
- **Búsqueda de muestras utilizando criterios adicionales de búsqueda** - Revisar capítulo 12.8.
- **Impresión de un rango de muestras** – Revisar el capítulo 12.8.
- **Características especiales** - Establecer valores predeterminados de la impresora y cambiar la ubicación de la base de datos– revisar capítulo 4.

REFERENCIAS

- [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. Michelini, 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 spectroscopes. *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.

Notas de cambios en el manual de usuario

12 de noviembre de 2012 v 1.1

- Nueva sección 15.3 añadida. Precauciones sobre la contaminación espectral y citas de la literatura correspondiente.
- Añadida la diferencia mínima en O/H (‰) necesaria para viales con patrones adyacentes con el fin de obtener las correcciones del efecto memoria en LIMS para Láseres (Capítulo 8.2).
- Pregunta añadida en la sección de preguntas frecuentes sobre el efecto memoria cuando solo se utiliza un vial de patrón en un instrumento LGR.
- Se reorganizó el capítulo 15.

13 de diciembre de 2012 v 1.2

- Añadido el capítulo 16 sobre el visor de datos para LIMS.

03 de enero de 2013 a v 1.3

- Ediciones menores y precauciones añadidas en la página 63 y 68 en la duplicación y edición de plantillas.

28 de junio de 2013 a v 1.4

- Errores tipográficos de menor importancia, actualizaciones de figuras y guía para optimizar las plantillas para la serie G2000 del Picarro en el apéndice 1.

23 de septiembre de 2013 a v 1.5

- Actualizaciones de errores menores.
- Añadido datos almacenados para actualizar los valores “null” en la sección 12.6.
- Añadido el Anexo 2.

10 de septiembre de 2015 para v 2.0

- Revisión completa del manual de usuario de LIMS para láseres 2015.

21 de marzo de 2016 a v 2.1

- Revisión de la introducción, actualizaciones menores a algunas figuras y texto.
- Además de la importación nuevas herramientas de detección.
- Añadida una explicación sobre la normalización por bloques.

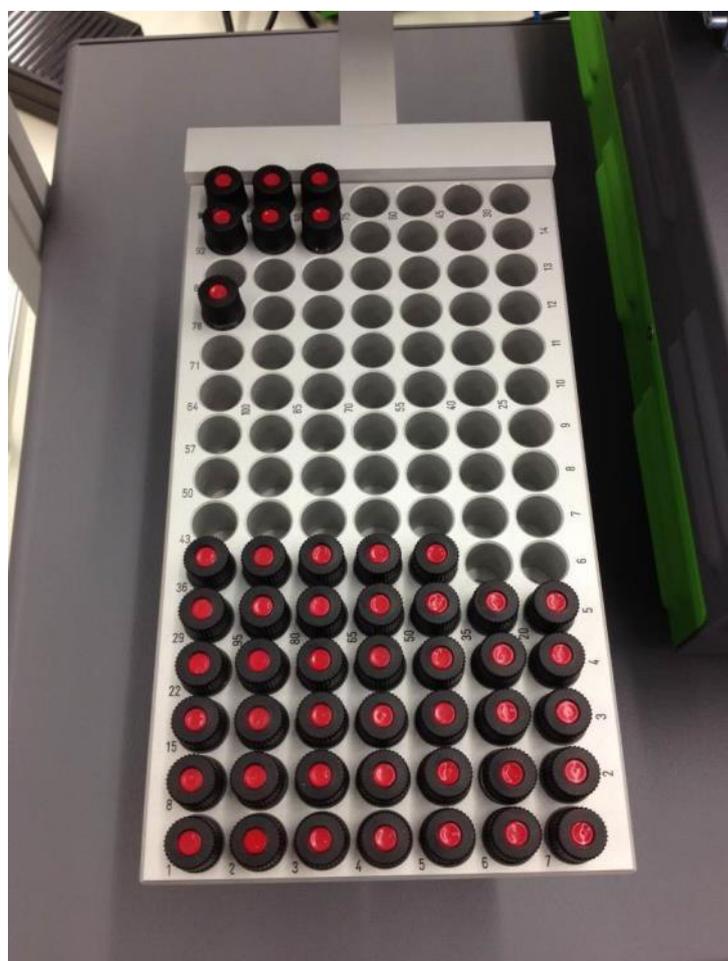
20 de diciembre de 2016 a v 2.1.1

- Ediciones menores para la versión 10.092.

Apéndice 1. Plantillas para muestreadores automáticos series G2000 Picarro

La introducción de los muestreadores automáticos G2000 en los instrumentos Picarro en 2012 añadió un software de control y más flexibilidad que la unidad CTC PAL. Los ejemplos que siguen muestran un diseño de bandeja donde las muestras desconocidas se colocan secuencialmente en la parte delantera de la bandeja, y los patrones de medición y control (o de lavado) se encuentran en la parte posterior de la misma. Este esquema es más conveniente que tener que entremezclar frascos de patrones de laboratorio entre las muestras, y facilita la corrección del efecto memoria y deriva instrumental en *LIMS para Láseres de 2015*.

Muestra 40 diseño (posición de la bandeja)



Patrones Hi, Low, Low (99.100, 101)
Patrones Low, Hi, Hi (92, 93, 94)

Patrón de control (opcional, o al
final del con el vial de lavado) (78)

Posición de las muestras en (1 a... 40)

La configuración del software del muestreador automático G-2000 correspondiente a la disposición de 40 muestras mostrado en la figura anterior se presenta a continuación, mostrando aquí 7 inyecciones como ejemplo.

La principal restricción del software es la limitación de secuencia a 10 líneas, y cada una de estas líneas debe contener frascos secuenciales de muestras. Es por ello que los tripletes con los patrones Hi/Low deben definirse en líneas individuales (ver tabla A1).

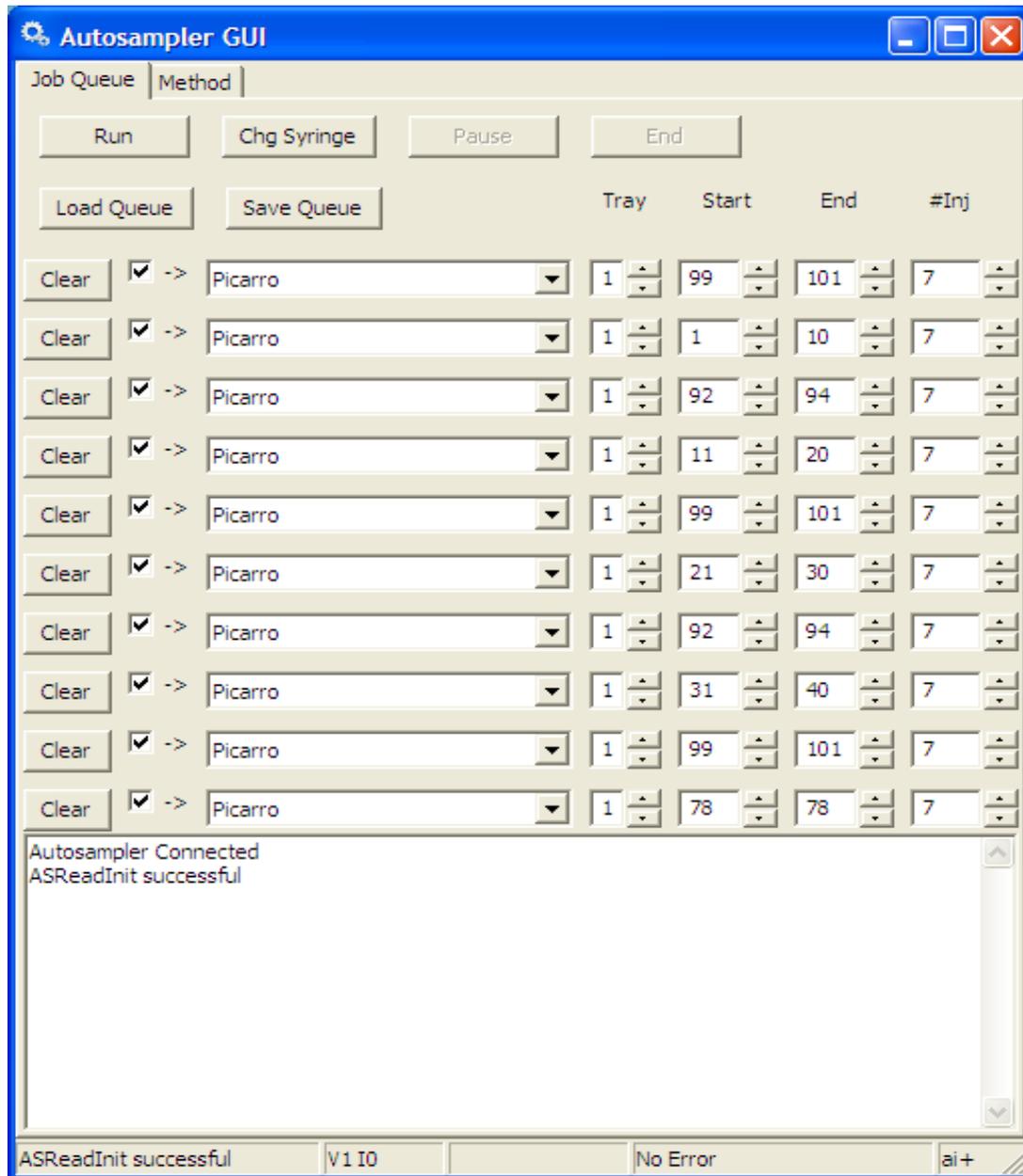


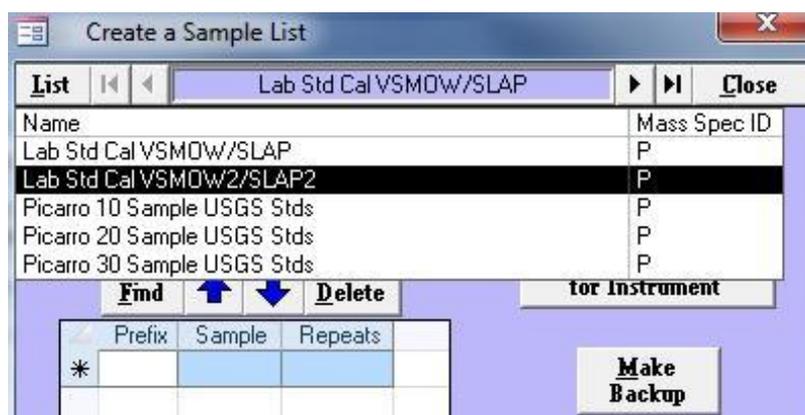
Tabla A1. El diseño de la plantilla recomendada de *LIMS para Láseres 2015* para 40 muestras en el muestreador automático G-2000 de Picarro se muestra a continuación (ver capítulos anteriores sobre la construcción de la plantilla). El tiempo total de ejecución para esta plantilla es de aproximadamente 38 horas.

| Muestra | Pos del vial | #de Lista | Función |
|------------------|---------------------|------------------|--------------------------|
| Hi Std | 1-99 | 1 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-100 | 2 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-101 | 3 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Sample 1 | 1-01 | 4 | Muestra |
| Sample 2 | 1-02 | 5 | Muestra |
| Sample 3 | 1-03 | 6 | Muestra |
| Sample 4 | 1-04 | 7 | Muestra |
| Sample 5 | 1-05 | 8 | Muestra |
| Sample 6 | 1-06 | 9 | Muestra |
| Sample 7 | 1-07 | 10 | Muestra |
| Sample 8 | 1-08 | 11 | Muestra |
| Sample 9 | 1-09 | 12 | Muestra |
| Sample 10 | 1-10 | 13 | Muestra |
| Low Std | 1-92 | 14 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-93 | 15 | Efecto memoria |
| Hi Std | 1-94 | 16 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Sample 11 | 1-11 | 17 | Muestra |
| Sample 12 | 1-12 | 18 | Muestra |
| Sample 13 | 1-13 | 19 | Muestra |
| Sample 14 | 1-14 | 20 | Muestra |
| Sample 15 | 1-15 | 21 | Muestra |
| Sample 16 | 1-16 | 22 | Muestra |
| Sample 17 | 1-17 | 23 | Muestra |
| Sample 18 | 1-18 | 24 | Muestra |
| Sample 19 | 1-19 | 25 | Muestra |
| Sample 20 | 1-20 | 26 | Muestra |
| Control Standard | 1-78 | 27 | Patrón de control |
| Hi Std | 1-99 | 28 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-100 | 29 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-101 | 30 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Sample 21 | 1-21 | 31 | Muestra |
| Sample 22 | 1-22 | 32 | Muestra |
| Sample 23 | 1-23 | 33 | Muestra |
| Sample 24 | 1-24 | 34 | Muestra |
| Sample 25 | 1-25 | 35 | Muestra |
| Sample 26 | 1-26 | 36 | Muestra |
| Sample 27 | 1-27 | 37 | Muestra |
| Sample 28 | 1-28 | 38 | Muestra |
| Sample 29 | 1-29 | 39 | Muestra |

| | | | |
|-----------|-------|----|--------------------------|
| Sample 30 | 1-30 | 40 | Muestra |
| Low Std | 1-92 | 41 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-93 | 42 | Efecto memoria |
| Hi Std | 1-94 | 43 | Normalización VSMOW-SLAP |
| Sample 31 | 1-31 | 44 | Muestra |
| Sample 32 | 1-32 | 45 | Muestra |
| Sample 33 | 1-33 | 46 | Muestra |
| Sample 34 | 1-34 | 47 | Muestra |
| Sample 35 | 1-35 | 48 | Muestra |
| Sample 36 | 1-36 | 49 | Muestra |
| Sample 37 | 1-37 | 50 | Muestra |
| Sample 38 | 1-38 | 51 | Muestra |
| Sample 39 | 1-39 | 52 | Muestra |
| Sample 40 | 1-40 | 53 | Muestra |
| Hi Std | 1-99 | 54 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-100 | 55 | Efecto memoria |
| Low Std | 1-101 | 56 | Normalización VSMOW-SLAP |

Apéndice 2. Bases de datos y diseño de plantillas

Las bases de datos proporcionadas con el paquete LIMS proporcionan plantillas convenientes para 10, 20 y 30-muestras para los instrumentos láseres Picarro y Los Gatos Research. Estas bases de datos pueden descargarse desde las páginas web del USGS y OIEA, como se describe en el capítulo 3.1.



Estas plantillas se rellenaron previamente con los patrones de calibración enriquecidos y empobrecidos (High y Low) de uso diario USGS46 y USGS48 (asignándoles los números W-31 al W-34, más el W-35 como patrón de control). Estas plantillas prefabricadas se pueden "duplicar" fácilmente (véanse los capítulos 8.4 y 8.5) y se puede substituir los patrones de calibración del USGS por los patrones enriquecidos y empobrecidos de uso diario por el laboratorio.

| List | W-5 | 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 | | |

Para facilitar un nuevo diseño de la plantilla, se proporcionan las hojas de trabajo para Los Gatos Research y Picarro con el fin de guiar visualmente en el proceso. Estas hojas de cálculo se usan en la edición de las plantillas de la posición de los viales y de las bandejas (por ejemplo, véase la figura en la pág. 62). A continuación se muestra una hoja de cálculo para una plantilla para 10 muestras a analizar en un instrumento laser de Los Gatos Research.

| 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 | Postitions 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 | | | | |

Apéndice 3. Corrección de las variaciones en los valores δ con concentraciones de agua variables

Los valores δ de una o más especies isotópicas presentes en el H₂O pueden responder positiva o negativamente (lineal o no lineal) a cambios muy pequeños en la cantidad de agua que se vaporiza en la cavidad del láser. Las variaciones de la cantidad de H₂O inyectada (y la correspondiente variación en los resultados δ) en el transcurso de una ejecución automática (autorun) pueden ser grandes o pequeñas, dependiendo de la calidad y estado de la jeringa. Las variaciones de la concentración por lo general provienen de jeringuillas en mal estado o de septas previamente agujereadas.

Cuando se manipula deliberadamente la concentración relativa de H₂O, el algoritmo de corrección de dependencia δ permite mejorar los resultados mediante la normalización de la cantidad de la inyección de H₂O usando los patrones de control de cantidad (por ejemplo, utilizando los tripletes 800, 1000 y 1200 μ L colocados al comienzo o en la mitad de una ejecución automática - autorun). Esta opción permite a *LIMS para Láseres 2015* determinar automáticamente y aplicar un algoritmo de corrección de concentración de H₂O para cada valor δ de cada isótopo.

El propósito de la corrección de dependencia de concentración es ayudar a corregir los efectos de la variación del rendimiento de inyección para todos los valores deltas para cada isótopo. Sin embargo, no debe utilizarse como un sustituto de una buena jeringa. ¡Siempre deben reemplazarse las jeringas en mal estado!

El ajuste del valor relativo de H₂O- δ en *LIMS para Láseres 2015* se determina correlacionando el valor δ bruto del volumen variado de un patrón de control frente a las concentraciones de H₂O medidas, y luego se le aplica un modelo de regresión de ajuste óptimo (por ejemplo, lineal, cuadrática, log, exponencial, etc.). Si el modelo de regresión es robusto (por ejemplo, $R^2 > 0,6$), la ecuación puede aplicarse a todas las muestras para normalizar los valores δ medidos a una cantidad constante de vapor de agua. Las correcciones de dependencia de concentración resultan a menudo en una mejora de los resultados δ para uno o más isótopos, particularmente si el rendimiento de la jeringa es variable o si el instrumento es muy sensible a la cantidad de H₂O.

Cuando se utilizan las bases de datos proporcionadas para los instrumentos Picarro o Los Gatos Research, el volumen del patrón de control asignado para las correcciones de concentración de H₂O es W-998. Si se requiere un patrón de control de cantidad para $\delta^{17}\text{O}$, se debe crear un proyecto acompañante para $\delta^{17}\text{O}$ (normalmente W-999). En el caso donde no se ha creado ningún patrón de control de la cantidad de H₂O, se puede agregar como se describe en el capítulo 6.

El patrón apropiado de control de cantidad también debe agregarse a la tabla de referencia, como se describe en el capítulo 7.2. Nota: El valor asignado para este patrón de control se establece en -999 ‰ para los valores delta de todos los isótopos.

| List | W-5 | | | Add a New Lab Reference | Edit | Delete | Close |
|-------|--------------------------|-------------------|--------|--|------|--------|-------|
| W-5 | VSMOW | δ ² H | 0 | <div style="background-color: #e0ffe0; padding: 5px;"> <p>is isotopic in the Final Delta</p> <p>ID: VSMOW</p> <p>on δ¹⁷O</p> <p>O Sample: <input type="text"/></p> </div> | | | |
| W-6 | GISP | δ ² H | -189.7 | | | | |
| W-7 | SLAP | δ ² H | -428 | | | | |
| W-8 | VSMOW2 | δ ² H | 0 | | | | |
| W-9 | SLAP2 | δ ² H | -427.5 | | | | |
| W-31 | High Standard | δ ² H | -10.3 | | | | |
| W-32 | USGS 46 LOW STD | δ ² H | -235.8 | | | | |
| W-33 | USGS 47 | δ ² H | -150.2 | | | | |
| W-34 | USGS 48 HIGH STD | δ ² H | -2 | | | | |
| W-998 | DI for Amount Evaluation | δ ² H | -999 | | | | |
| W-5 | VSMOW | δ ¹⁸ O | 0 | | | | |
| W-6 | GISP | δ ¹⁸ O | -24.78 | | | | |
| W-7 | SLAP | δ ¹⁸ O | -55.5 | | | | |
| W-8 | VSMOW2 | δ ¹⁸ O | 0 | | | | |
| W-9 | SLAP2 | δ ¹⁸ O | -55.5 | | | | |
| W-31 | High Standard | δ ¹⁸ O | -2.238 | | | | |
| W-32 | USGS 46 LOW STD | δ ¹⁸ O | -29.8 | | | | |

Como establecer los controles de cantidad en un instrumento láser de Los Gatos Research

(Nota: solo para los instrumentos IWA-35EP o TIWA 45-EP)

1. Crear o editar una plantilla de análisis en Excel.
2. Agregar 3 o más controles de cantidad de agua con cantidades de agua diferentes al principio o a la mitad de la plantilla. En el ejemplo siguiente, la cantidad de inyección utilizando una jeringa SGE de 5 µL era 400 nL (para jeringas Hamilton el volumen será 900-1200 nL). El patrón de control de cantidad W-998 fue intencionalmente establecido en incrementos de 350, 400 y 450-nL, en el modo de página o mediante el uso de una plantilla de Excel. En el ejemplo siguiente, el control de la cantidad patrón se puso medio plazo en bandeja 3 posiciones 3-28 y 3-29 (secuencia orden 24 (no mostrado), 25, 26).
3. El número mínimo de patrones del control de cantidad necesarios para la opción de corrección de concentración es de dos (ajuste lineal) y el número máximo es ilimitado (para lineal, cuadrática, logarítmica, etc.), pero generalmente basta con 3 o 4 frascos.

En general, los rendimientos pobres de las inyecciones resultan de volúmenes de agua insuficientes en la cavidad láser, por lo que los volúmenes de los patrones de control de la cantidad de H₂O deben ser justo por encima de la cantidad normal de H₂O, e incluir varios volúmenes menores de H₂O.

Nota: ¡Asegúrese que los volúmenes de inyección variables estén dentro del rango operacional del instrumento!

Linearity Test v4

List Page: 3 Edit Add Page Delete Page Close

| | | |
|--|--|---|
| Vial Pos: 3-29 Run Order: 25 Amt: 450 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-998 | Vial Pos: 3-28 Run Order: 26 Amt: 350 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-998 | Vial Pos: 3-10 Run Order: 27 Amt: 400 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-34 |
| Vial Pos: 3-2 Run Order: 28 Amt: 400 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-33 | Vial Pos: 3-1 Run Order: 29 Amt: 400 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-33 | Vial Pos: 1-13 Run Order: 30 Amt: 400 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref |
| Vial Pos: 1-14 Run Order: 31 Amt: 400 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref | Vial Pos: 1-15 Run Order: 32 Amt: 400 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref | Vial Pos: 1-16 Run Order: 33 Amt: 400 <input checked="" type="radio"/> Sample <input type="radio"/> Fixed Ref |
| Vial Pos: 3-19 Run Order: 34 Amt: 400 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-35 | Vial Pos: 3-1 Run Order: 35 Amt: 400 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-33 | Vial Pos: 3-10 Run Order: 36 Amt: 400 <input type="radio"/> Sample <input checked="" type="radio"/> Fixed Ref W-34 |

Clipboard Font Alignment

A2 fx 1

| | A | B | C | D | E | F |
|---|--------------|---------------|--------------|------|---------------|--------|
| | LIMS List No | Tray Position | Ref OurLabID | Page | Page Position | Amount |
| 3 | 22 | 1-11 | | 2 | 10 | 400 |
| 4 | 23 | 1-12 | | 2 | 11 | 400 |
| 5 | 24 | 3-28 | W-998 | 2 | 12 | 400 |
| 5 | 25 | 3-29 | W-998 | 3 | 1 | 450 |
| 7 | 26 | 3-28 | W-998 | 3 | 2 | 350 |
| 8 | 27 | 3-10 | W-34 | 3 | 3 | 400 |
| 9 | 28 | 3-2 | W-33 | 3 | 4 | 400 |
| 0 | 29 | 3-1 | W-33 | 3 | 5 | 400 |
| 1 | 30 | 1-13 | | 3 | 6 | 400 |
| 2 | 31 | 1-14 | | 3 | 7 | 400 |
| 3 | 32 | 1-15 | | 3 | 8 | 400 |

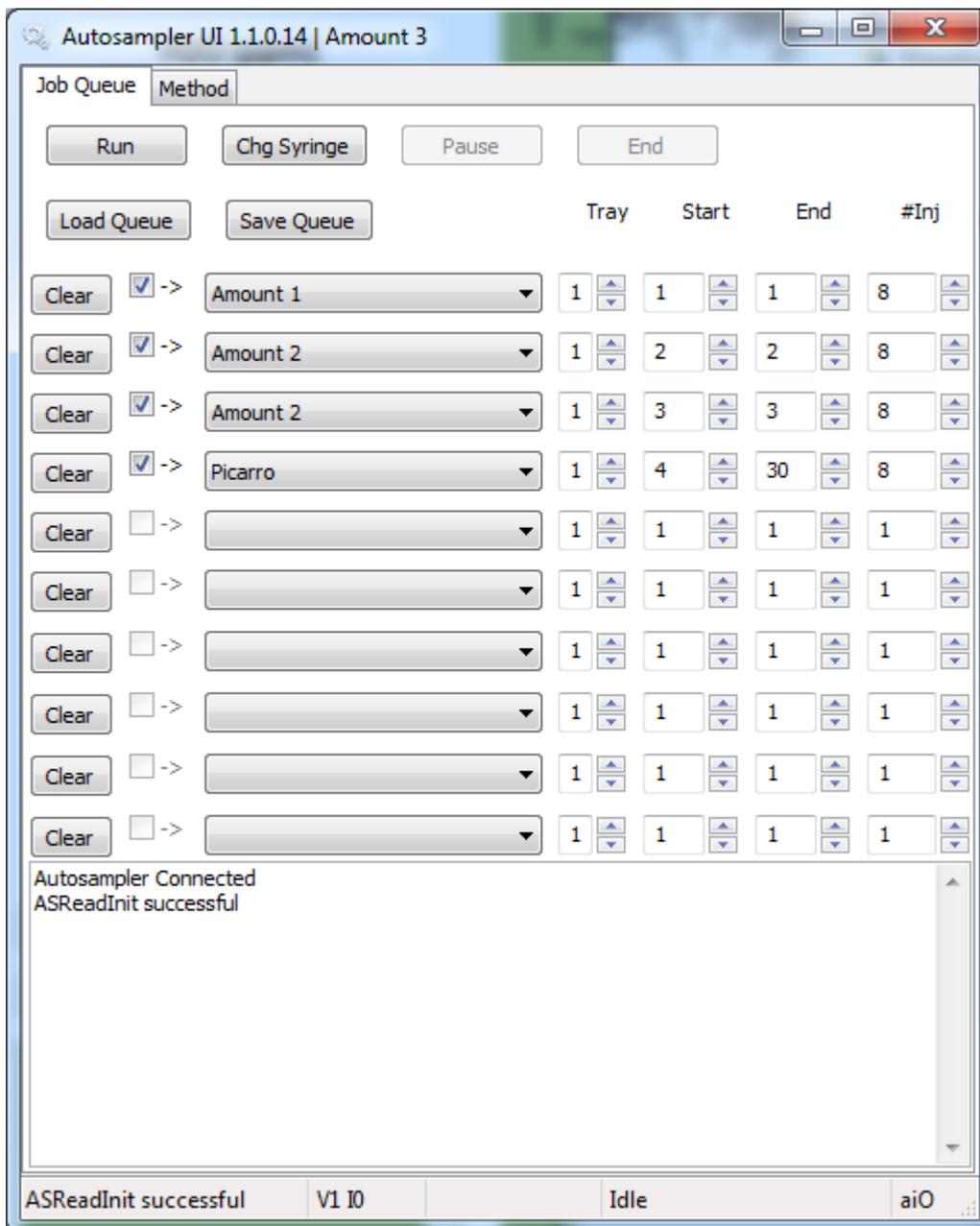
Ejemplos de plantillas para los instrumentos nuevos de Los Gatos Research, mostrando dos patrones de control de la cantidad inyectada.

Como establecer los controles de cantidad en un instrumento Picarro

Para todos los instrumentos Picarro el control de la cantidad de H₂O de la inyección se logra mediante la creación de distintos métodos en el panel de control del muestreador automático G2000 o en el PAL-CTC. Cada método para un volumen determinado debe agregarse a la cola de trabajo de los muestreadores automáticos.

Por ejemplo, una cola de trabajo podría comprender los siguientes 4 métodos en una sola secuencia de ejecución, donde 1.6 µL es el objetivo volumen de H₂O para todas las muestras (por ejemplo, método Picarro):

| | |
|--|--------------------------------|
| 1. 1.2 µL de patrón (cantidad 1 método) | Trabajo 1 (muestra 1 a 1) |
| 2. 1.6 µL de patrón (método de cantidad 2) | Trabajo 2 (muestra de 2 a 2) |
| 3. 1.8 µL cantidad patrón (método de cantidad 3) | Trabajo 3 (muestra 3 a 3) |
| 4. 1.6 µL patrón empobrecido (Low) (método Picarro) | Trabajo 4 (muestras de 4 a 20) |
| 5. 1.6 µL patrón enriquecido (High) (método Picarro) | ... |
| 6. 1.6 µL patrón enriquecido (High) (método Picarro) | |
| 7. 1.6 µL de muestra (método Picarro) | |
| 8. 1.6 µL de muestra (método Picarro) | |
| 9. ... y así sucesivamente... | |



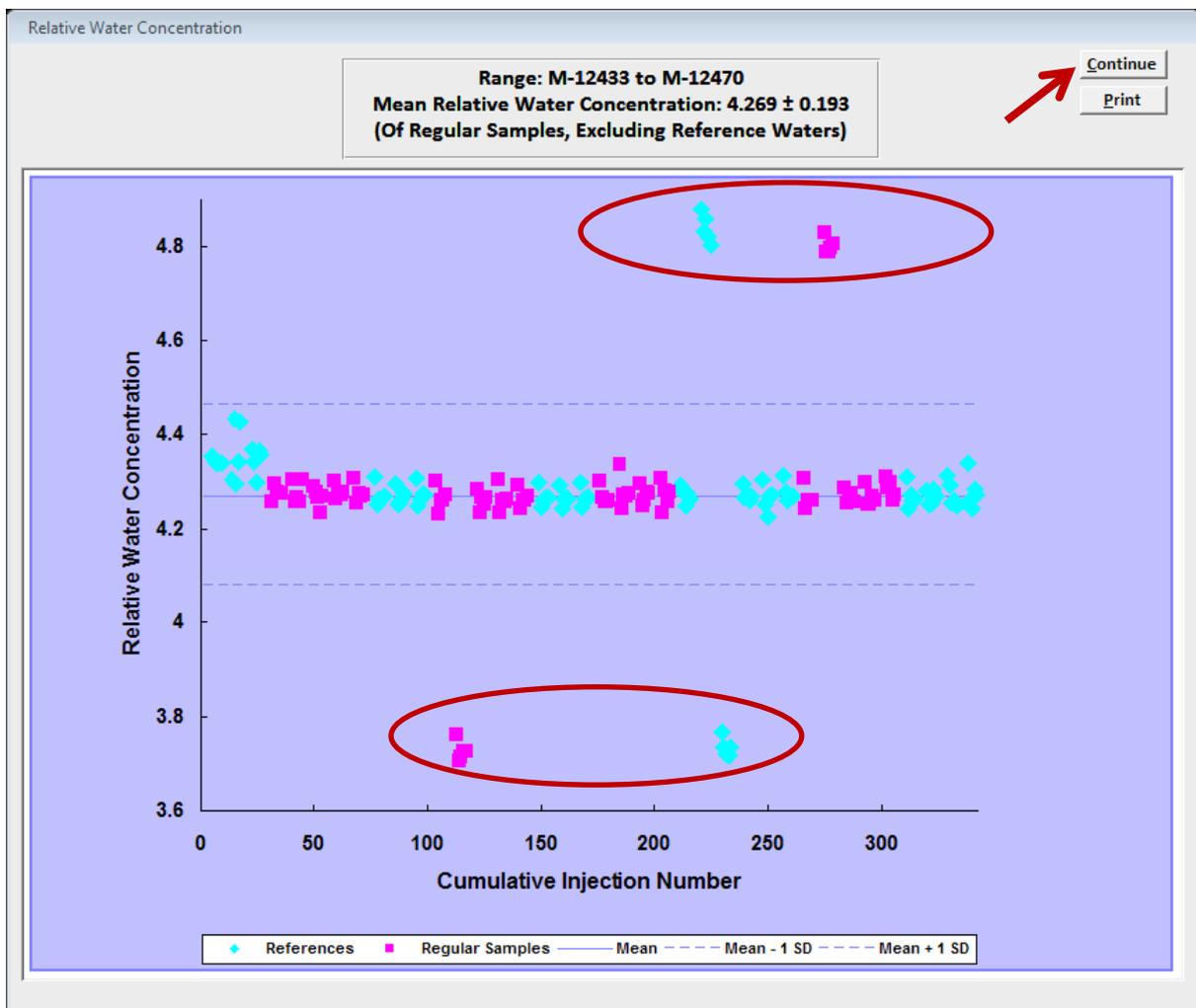
Ejemplo para el instrumento Picarro G2000 para añadir tres muestras de lineales de cantidad (por ejemplo, W-998) hasta el inicio de la ejecución automática. Cada método cambia sólo la cantidad de agua inyectada.

Quando importe datos desde un equipo Picarro con frascos de patrón de control de cantidad, siga el mismo procedimiento que el indicado para el instrumento de Los Gatos Research como se muestra en los pasos 3 a 5 más arriba.

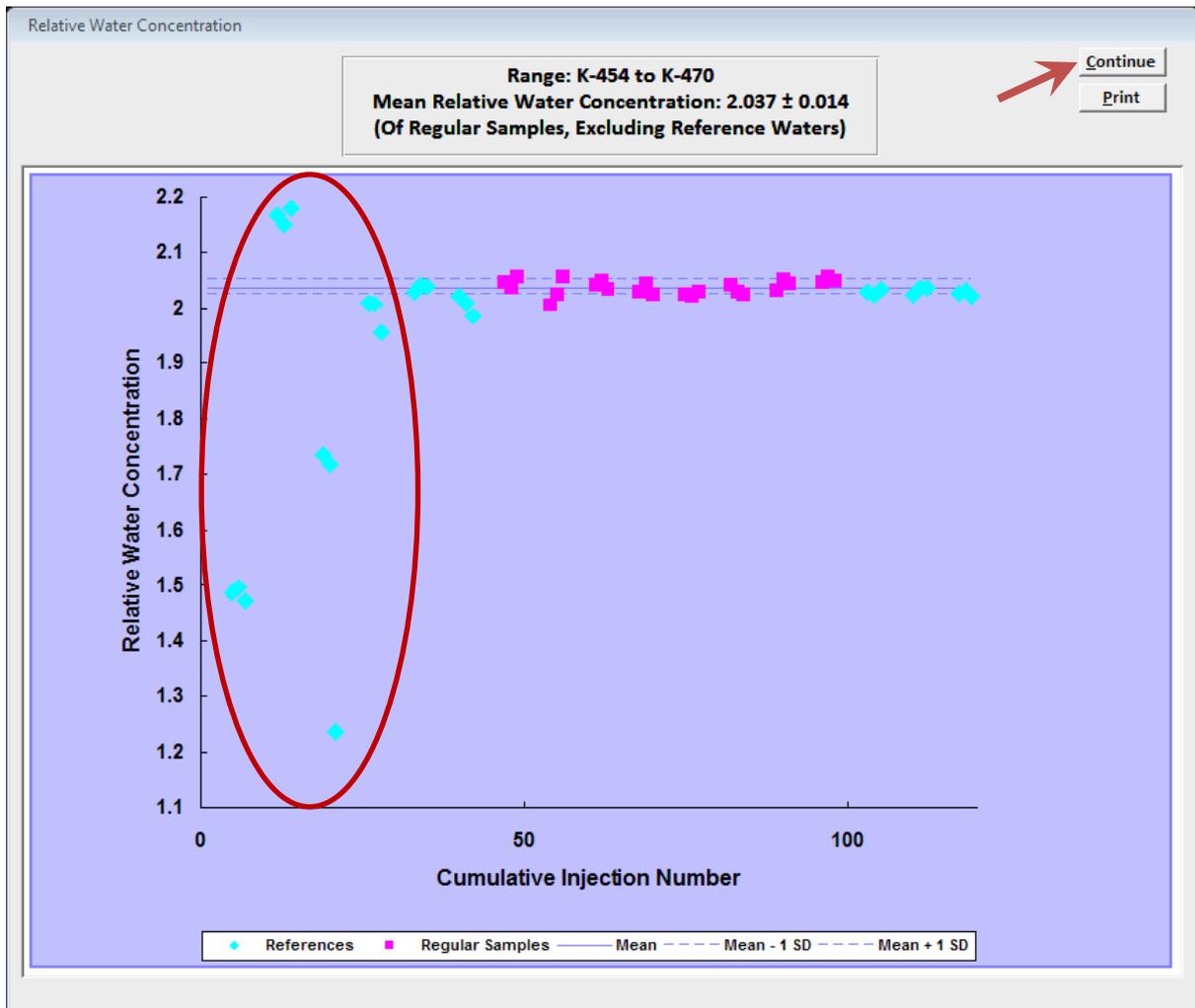
Ajustes para las variaciones en los valores Delta con la concentración de H₂O

La pantalla de datos de importación más abajo revela gráficamente el resumen de rendimiento de inyección, con notables diferencias en comparación con una situación normal. En este caso el patrón del control de cantidad fue manipulado en cuanto a las concentraciones de H₂O en azul mientras que las muestras desconocidas están en color magenta, según el número de secuencia de inyección. La respuesta de inyección de H₂O (de un instrumento LGR) fue manipulada aproximadamente desde 3.7 a 4.8×10^{16} moléculas de H₂O, con una concentración habitual de $4,3 \times 10^{16}$ moléculas de H₂O. Las cantidades relativas de agua en la cavidad del láser que se muestra en el eje Y serán diferentes para un instrumento Picarro.

Normalmente, sólo el patrón del control de cantidad (por ejemplo W-998, en azul) se usa para las correcciones de concentración relativa de H₂O. En el ejemplo, dos muestras desconocidas (magenta) también fueron manipuladas con un volumen de inyección mayor y menor, como se denota en la gráfica.



Ejemplo de control de cantidad y volumen variable de muestras en un instrumento de Los Gatos Research (LGR).



Ejemplo de controles de cantidad al principio de una ejecución automática (autorun) en un instrumento Picarro, que van desde una fracción de volumen de H₂O entre aproximadamente 12.000 y 22.000 ppm.

Haga clic en continuar...

En la siguiente pantalla de importación se muestran las opciones para los tipos de importación para los valores delta de todos los isótopos medidos ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O}$). Si $\delta^{17}\text{O}$ se midió, se mostrará en el panel de la derecha. Las opciones de importación se han descrito en el capítulo 11.

Para habilitar el ajuste para la concentración de H₂O (OFF por defecto), marque la opción "Correct for Change in δ with Rel H₂O Conc" para cada isótopo:

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.

Haga clic en continuar...

A continuación se muestran las opciones de modelos disponibles para la dependencia del valor delta en cantidades de H₂O, secuencialmente para los valores delta de cada isótopo.

En el panel de abajo, asegúrese de seleccionar el patrón de cantidad específica de control de nuestro laboratorio. En este caso, nuestro control de la cantidad patrón era 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

Buttons: 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 | | -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

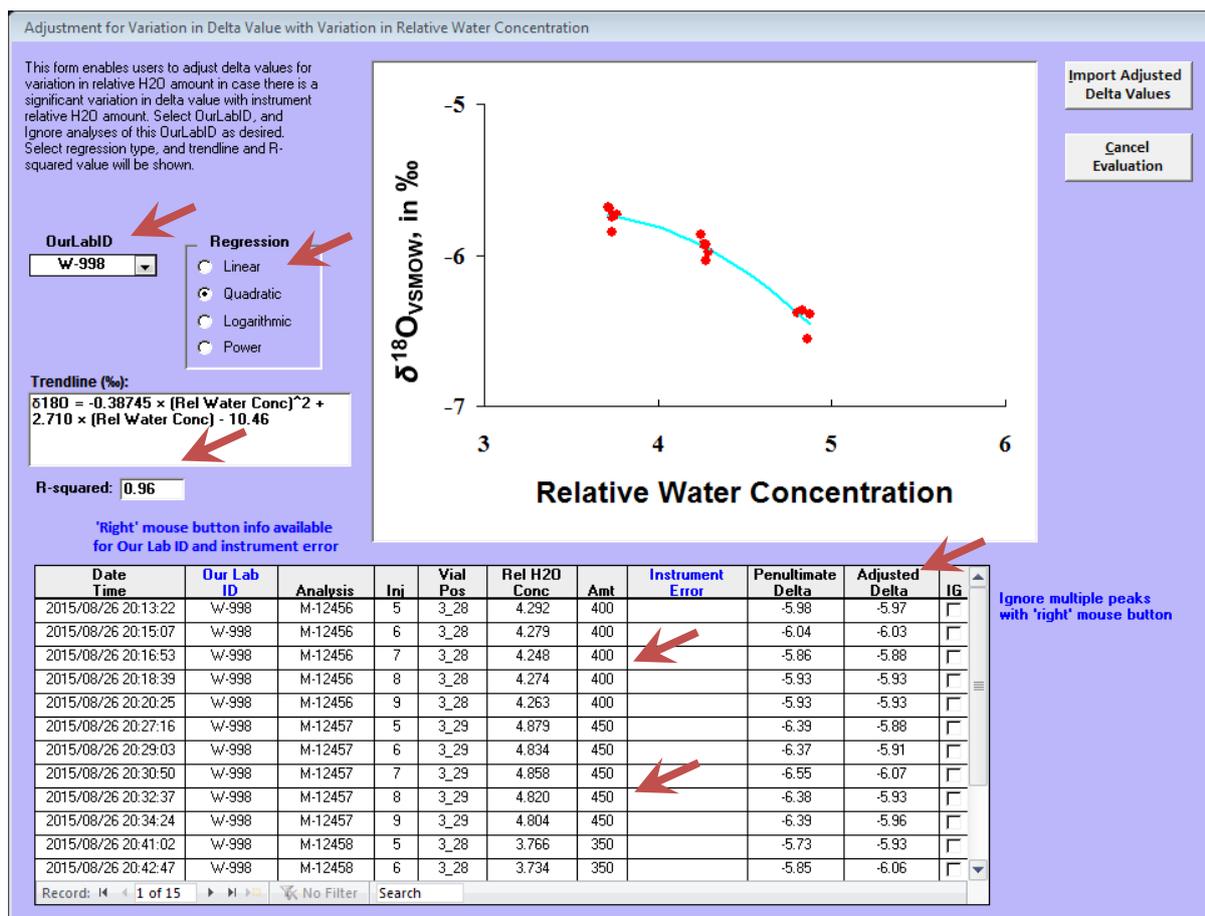
Ignore multiple peaks with 'right' mouse button

En el ejemplo de arriba se señala que no hay una dependencia significativa con la cantidad de H₂O para $\delta^2\text{H}$. Los valores R^2 obtenidos para todos los casos, como cuadrática o logarítmica, son pobres.

Como regla general, si el valor R^2 es < 0.6 , no se aplica una corrección. Esta decisión debe ser realizada por el analista. Tenga en cuenta que pueden omitirse aquí los valores atípicos (outliers) (ej. una mala inyección que afecta a un ajuste excelente) marcando las casillas correspondientes IG en la parte inferior.

En el caso mostrado arriba para $\delta^2\text{H}$, ya que todos los ajustes fueron pobres, no se quiere realizar ninguna corrección. Para rechazar todos los ajustes, haga clic en "Cancel Evaluation" para $\delta^2\text{H}$.

A continuación, *LIMS para Láseres 2015* procederá a mostrar el ajuste de corrección para la cantidad de H₂O para los resultados de $\delta^{18}\text{O}$ (y luego $\delta^{17}\text{O}$, si necesario).



En el caso de $\delta^{18}O$, en el ejemplo anterior, vemos una dependencia muy fuerte de los valores δ con la cantidad de agua inyectada en la cavidad del láser. Nuevamente seleccione el patrón apropiado de cantidad W-998 para examinar las opciones del modelo de ajuste para corregir la concentración de H₂O.

- Regresión lineal: $R^2 = 0,92$
- **Regresión cuadrática: $R^2 = 0.96$** (mejor ajuste, se muestra arriba)
- Regresión logarítmica: $R^2 = 0,91$
- Regresión de la energía: $R^2 = 0,91$

Seleccionar el mejor ajuste, en este caso una regresión cuadrática. La ecuación propuesta se muestra en el cuadro de la línea de tendencia, junto con el valor R^2 (0,96). También se muestra en la parte inferior el penúltimo valor $\delta^{18}O$ comparativo de la inyección 350 nL (-5.7 ‰) versus 450 nL (-6.4 ‰), frente a las mismas muestras, pero ahora ajustado a la cantidad de H₂O normalizada (-5.9 ‰) basándose en el ajuste seleccionado por el usuario.

Para aceptar el modelo propuesto corrección cuadrática para $\delta^{18}O$ haga clic en "Import Adjusted Delta Values". Esta acción ahora importará los valores delta ya ajustados para su posterior procesamiento.

La siguiente pantalla muestra un resumen de la ejecución de los datos para δ^2H y $\delta^{18}O$. Tenga en cuenta que estos resultados muestran valores delta normalizados con una cantidad constante de H₂O (pero sólo en el caso de $\delta^{18}O$); pero no se han aplicado aún otras correcciones, como el efecto memoria o la deriva instrumental lineal.

Sin embargo, para ilustrar la eficacia de la corrección de cantidad, considere los siguientes resultados:

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 | δ2H | IG δ2H | δ18O | IG δ18O |
|----------|-----|----------|---------------|--------------|-------------------------------------|---------------|-------------------------------------|--------------|-------------------------------------|
| 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 checked="" type="checkbox"/> | -16.48 ± 0.47 | <input type="checkbox"/> | -5.95 ± 0.06 | <input checked="" 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 checked="" type="checkbox"/> | -16.30 ± 0.45 | <input type="checkbox"/> | -5.95 ± 0.07 | <input checked="" 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 checked="" type="checkbox"/> | -16.42 ± 0.14 | <input type="checkbox"/> | -5.95 ± 0.07 | <input checked="" type="checkbox"/> |
| 12459 | 1 | W-34 | 3_10 | | <input checked="" type="checkbox"/> | | <input checked="" type="checkbox"/> | | <input checked="" type="checkbox"/> |

δ²H and δ¹⁸O

Ref for Additive Normalization: W-34

Reference for Scale Expansion: W-33

A pesar del amplio rango de volúmenes de inyección utilizados, el resultando en un rango comprendido entre 3.7 y 4.8, en términos de concentraciones de agua, los nuevos resultados, tras la normalización de la cantidad de H₂O para W-998, devuelven el mismo valor δ de -5.95 %, mientras que los valores a la izquierda sin corregir para la cantidad de H₂O difiere por más de 0,5 %.

Haga clic en continuar...

De aquí en adelante, se aplica la normalización para el efecto memoria y deriva instrumental, como se ha explicado en el capítulo 11.

PRECAUCIÓN: Las diferentes cantidades de H₂O por inyección generarán mensajes de advertencia durante la importación sobre volúmenes inconsistentes de agua (ej. LIMS no puede distinguir una mala jeringa de inyecciones intencionalmente variadas) y se mostrarán advertencias de alta variabilidad en la tabla resumen de importación. Estas advertencias pueden ser ignoradas.