

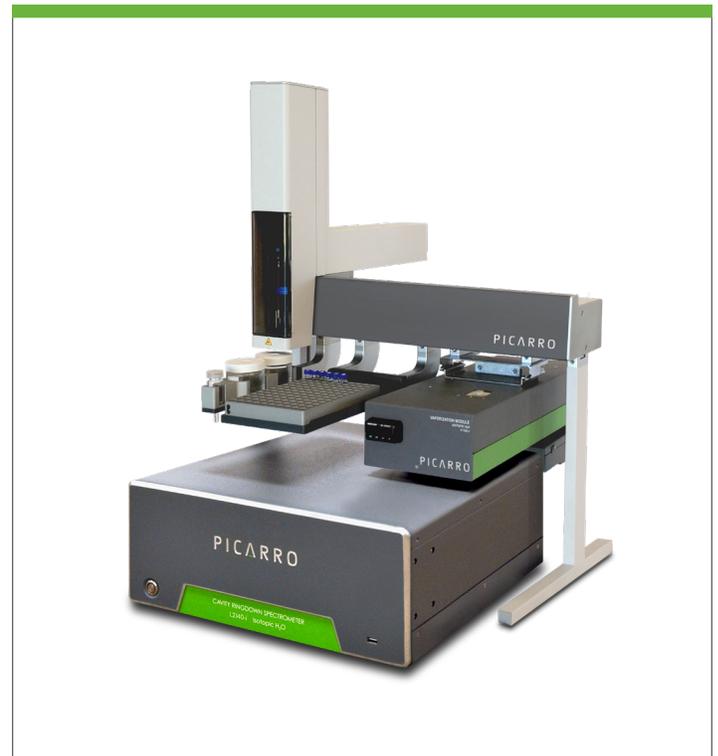
## 摘要

Picarro 的 WS-CRDS 水同位素分析仪具有极高的稳定性和线性，因此能够通过在每个样品集中同时测量几个标样来实现简单的数据校准。从而大大减少了校准频率和仪器用于测量标样的时间。

## 摘要和相关性：

由于 Picarro 分析仪具有极高的线性，因此只需在预期的同位素值范围内使用三个校准标样来校准每个同位素比值（两个点用于确定校准曲线，第三个中间点用于验证）。每个校准标样的具体数值并不特别重要，只要它们跨越了分析仪通常涵盖的代表性数值范围即可。（虽然没有必要使用三个以上的标样，但使用更多标样可以进一步约束线性校准系数。）

最好测量三个及以上的标样，涵盖全部未知样品的  $\delta$  值，以便构建一条校准曲线，校准曲线的回归系数可用于校准未知样品的数据。例如，假设十个未知样品的编号为 1-10，三个标样的编号为 S1、S2 和 S3，建议如下排列自动进样器托盘中的样品：



S1	S2	1	2	3	4	5	S3	6	7	8	9	10	S1	S2
----	----	---	---	---	---	---	----	---	---	---	---	----	----	----

对照分析仪记录的测量值绘制上述所用标样的真值。应分别绘制两张图，一张是  $\delta^{18}\text{O}$  图，一张是  $\delta\text{D}$  图。通过每张图拟合一条直线，得到方程  $y = m \cdot x + b$ ，其中  $m$  表示斜率， $b$  表示截距。

具体到每张图，方程为：

$$\delta^{18}\text{O}_{\text{校准值}} = m_{\delta^{18}\text{O}} \cdot \delta^{18}\text{O}_{\text{测量值}} + b_{\delta^{18}\text{O}}$$

以及

$$\delta\text{D}_{\text{校准值}} = m_{\delta\text{D}} \cdot \delta\text{D}_{\text{测量值}} + b_{\delta\text{D}}$$

使用上述方程中的斜率和截距，根据测量值计算出校准后的同位素比值。

分析仪获得的标样测量值			
	S1	S2	S3
$\delta^{18}\text{O}$	-0.35	-17.00	-26.46
$\delta\text{D}$	0.35	-122.93	-205.28

已知标样值			
	S1	S2	S3
$\delta^{18}\text{O}$	-0.72	-16.72	-26.07
$\delta\text{D}$	-2.67	-124.39	-205.08

回归系数	
$\delta^{18}\text{O}$ 斜率	0.9697
$\delta^{18}\text{O}$ 截距	-0.3436
$\delta\text{D}$ 斜率	0.9845
$\delta\text{D}$ 截距	-3.1168

标样 S2 和 S3 之间以及 S3 和 S1 之间的样品数量可能会有所不同，这取决于具体测量的样品和用户期望的准确度，以及每个样品测量的进样次数，标样之间相隔的样品越少，测量准确度越高。例如，Picarro 液态水同位素分析仪在特定的温度范围内和 24 小时内无需校准即可和确保漂移规格（即相对于所测标样的准确度）。这意味着，在 24 小时的样品测试过程中，如果不测量标样， $\delta$  测量结果的绝对值从运行开始到结束可能有所变化，变化量与该规格一致。然而，通过交错测量样品和标样，可以根据附近测量的标样进行适当校准来限制  $\delta$  值一样，这种调整是在测试运行完成后进行的。

为了校准水汽同位素测量结果，定期测量液态标样，并以上述方式缩放水汽同位素数据。并非一定要对分析仪进行重新校准，而是建议在样品运行期间测量标样并相应地缩放数据。之所以通过在样品中穿插标样而非重新校准分析仪的方式来缩放数据，是因为在样品运行之前重新校准只能确保短期内样品测量的准确度。换句话说，如果不同时运行标样和样品，而是依靠一次性的分析仪重新校准，用户无法最大限度地整个样品运行过程中的所有测量结果限制在已知标样范围内。

