



文献 CSTR:

32001.14.11-6035.csd.2025.0089.zh



文献 DOI:

10.11922/11-6035.csd.2025.0089.zh

数据 DOI:

10.12262/lscd.geochemistry.2333

文献分类: 地球科学

收稿日期: 2025-05-12

录用日期: 2025-07-20

发表日期: 2025-11-24

\* 论文通信作者

曹蕴宁: caoyunning@ieccas.cn

## 黄土高原叶蜡正构烷烃氢同位素数据集

曹蕴宁<sup>1\*</sup>, 刘卫国<sup>1</sup>, 王欢业<sup>1</sup>, 王政<sup>1</sup>, 刘虎<sup>1</sup>, 刘金召<sup>1</sup>, 朱梦姝<sup>1</sup>

1. 中国科学院地球环境研究所, 黄土科学全国重点实验室, 西安 710061

**摘要:** 黄土高原是世界上最大的黄土沉积区, 生态系统脆弱, 对气候变化响应敏感, 是全球变化研究的热点地区之一。植物叶蜡氢同位素被广泛应用于全球古环境和古气候重建研究, 在示踪黄土高原气候和水文变化方面具有重要作用。本数据集从已发表的经同行评议的专业期刊文章的数据列表中收集了黄土高原地区现代植物、表层土壤、黄土-古土壤序列以及野外科学观测研究站控水培养植物等几种类型样品的叶蜡正构烷烃氢同位素测试数据。叶蜡氢同位素数据一般通过提取植物或沉积物中正构烷烃化合物, 经气相色谱仪-高温裂解装置-同位素质谱仪联机测试获得。本数据集涵盖 2000–2019 年采集的黄土高原地区 90 个点位 249 个现代植物样品、69 个点位 70 个表土样品、西峰黄土-古土壤序列 80 万年以来 486 个样品和洛川黄土-古土壤序列 25 万年以来 71 个样品, 以及皋兰农田生态系统野外科学观测研究站控水实验样地 36 个植物样品的叶蜡正构烷烃氢同位素数据。以期为黄土高原以及中国西北地区叶蜡氢同位素现代过程研究和全球变化研究提供有价值的实测数据。

**关键词:** 黄土高原; 植物叶蜡; 正构烷烃; 氢同位素

### 数据库(集)基本信息简介

| 数据库(集)名称          |                         |            |          |              |
|-------------------|-------------------------|------------|----------|--------------|
| 黄土高原叶蜡正构烷烃氢同位素数据集 |                         |            |          |              |
| 数据作者              | $\delta D_{wax}$ 数据样品类型 | 数据发表时间 (年) | 数据作者     | 所属单位         |
|                   | 现代植物                    | 2005       | 刘卫国      | 中国科学院地球环境研究所 |
|                   |                         | 2006       | 刘卫国      |              |
|                   |                         | 2008       | 刘卫国      |              |
|                   |                         | 2019       | 刘卫国, 王欢业 |              |
|                   |                         | 2016       | 刘金召      |              |
|                   |                         | 2019       | 刘金召      |              |
|                   |                         | 2023       | 刘虎       |              |
|                   | 黄土-古土壤                  | 2005       | 刘卫国      |              |
|                   |                         | 2018       | 王政, 刘卫国  |              |
|                   |                         | 2021       | 王政, 刘卫国  |              |
|                   |                         | 2024       | 王政       |              |
|                   | 表层土壤                    | 2019       | 刘卫国, 王欢业 |              |
|                   |                         | 2018       | 王政       |              |

|          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 数据通信作者   | 曹蕴宁 (caoyunning@ieecas.cn)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 数据时间范围   | 现代植物样品2000–2013年采集；控水培养植物样品2019年采集；表层土壤样品2012年和2013年采集；黄土–古土壤序列样品2001–2015年采集，为最长80万年以来的黄土–古土壤沉积序列                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 地理区域     | 黄土高原地区，地理范围为41°24.000′–34°12.000′N，113°02.000′–101°59.000′E                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| 数据量      | 132.05 KB                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 数据格式     | *.xlsx                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| 数据服务系统网址 | <a href="https://doi.org/10.12262/lscd.Geochemistry.2333">https://doi.org/10.12262/lscd.Geochemistry.2333</a><br><a href="https://www.scidb.cn/doi/10.12262/lscd.Geochemistry.2333">https://www.scidb.cn/doi/10.12262/lscd.Geochemistry.2333</a>                                                                                                                                                             |
| 基金项目     | 国家自然科学基金（41873008）；国家重点研发计划（2013CB955900）。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 数据库（集）组成 | 数据集共包括4个Excel数据文件，其中：（1） $\delta D$ -Plants.xlsx是黄土高原现代植物叶蜡正构烷烃氢同位素数据，包含2000–2013年90个点位249个 $\delta D$ 测试数据；（2） $\delta D$ -Soils.xlsx是黄土高原表层土壤叶蜡正构烷烃氢同位素数据，包含2012和2013年69个点位70个 $\delta D$ 测试数据；（3） $\delta D$ -Loesses.xlsx是黄土高原黄土–古土壤序列正构烷烃氢同位素数据，包含西峰80万年以来486个 $\delta D$ 测试数据，以及洛川25万年以来71个 $\delta D$ 测试数据；（4） $\delta D$ -plants-RM.xlsx是黄土高原皋兰农田生态系统野外科学观测研究站2019年控水实验样地培养的36个植物样品 $\delta D$ 测试数据。 |

## 引言

植物叶蜡（Leaf Wax）是覆盖在植物叶片表面的蜡质层，由一系列化合物组成。长链正构烷烃和脂肪酸是植物叶蜡的主要成分之一，它们在地质体中广泛存在且能够长时间保存<sup>[1-3]</sup>，是进行古环境研究的重要生物标志物。叶蜡氢同位素主要是指叶蜡正构烷烃或脂肪酸中氢同位素（D/H）的组成，通常以 $\delta D_{wax}$ （‰，相对于 VSMOW 标准）表示。由于植物吸收环境水用于叶蜡合成，因此叶蜡氢同位素能够敏感地响应水文条件的变化。随着近几十年特定化合物氢同位素分析技术的发展和进步<sup>[4-7]</sup>，植物叶蜡氢同位素在古气候和古环境重建方面的应用日益广泛<sup>[8-18]</sup>。

黄土高原是世界上最大的黄土沉积区，对气候变化响应敏感，是研究晚第三纪以来全球植被生态演化及气候变化的良好场所。黄土高原的黄土沉积被视为重建东亚大陆气候环境演化的重要载体<sup>[19-21]</sup>。水文条件对黄土高原这一生态脆弱区具有重要的意义，研究黄土高原水文条件变化历史对于理解区域水资源变化规律和机制具有重要意义，因此寻找黄土高原地区有效的水文气候变化的示踪方法是一个急需解决的关键问题。

2005 年，刘卫国等首次将黄土叶蜡氢同位素应用于黄土高原古环境重建研究中，在全球最早研究黄土叶蜡氢同位素记录与季风降水关系，认为叶蜡分子分布和同位素指标有望成为黄土高原古环境定量重建的有效代用指标<sup>[13]</sup>。通过对黄土高原地区现代植物叶蜡的研究，刘卫国等最早提出在全球尺度上，降水 $\delta D$  值是控制植物叶蜡氢同位素组成的一级主导因素<sup>[22]</sup>。植物类型，如光合作用途径（C<sub>3</sub>，C<sub>4</sub>）、木本/草本或单子叶/双子叶等也会影响叶蜡 $\delta D$  的组成<sup>[22-24]</sup>。因此，基于植物叶蜡正构烷烃 $\delta D$  值重建古气候，将沉积物 $\delta D_{wax}$  作为定量指标重建干旱–半干旱地区季风降水必须充分考虑这种“植物类型效应”<sup>[24-26]</sup>。干旱程度、温度和季风强度也会通过影响降水和土壤水 $\delta D$  值作用于叶蜡 $\delta D$  记录<sup>[23]</sup>。对黄土高原沿降水梯度 $\delta D_{wax}$  的研究发现，其变化并非源于“降雨量效应”，而是降水

与蒸发蒸腾共同作用下水分有效性变化的结果<sup>[25]</sup>。最近对黄土高原现代植物的控水实验研究表明,不稳定的陆生植物叶蜡氢同位素表观分馏系数主要是由于大气降水通过土壤水和叶片水被植物利用的过程中,由于蒸发蒸腾作用强度不同,植物叶蜡合成所利用水的 $\delta D$ 值不断变化造成的。这一效应在应用叶蜡 $\delta D$ 值示踪环境变化时也需予以考虑<sup>[27]</sup>。此外,研究发现植物根系也会产生一定量的正构烷烃和不同的 $\delta D$ 值,这可能会对沉积物中正构烷烃组成及其 $\delta D$ 值产生影响,因此在古环境重建时可能需考虑根系正构烷烃对沉积物 $\delta D_{wax}$ 值的干扰<sup>[28]</sup>。

以上对于现代植物叶蜡氢同位素影响机制的认识进一步促进了叶蜡氢同位素在古气候重建中的应用,例如在黄土高原地区已有研究包括:1)基于黄土高原中部半干旱区和柴达木盆地极端干旱区的实地数据,重建了季风气候变化和区域古降水 $\delta D$ 序列<sup>[13,15]</sup>。2)基于黄土高原中部两个黄土剖面的 $\delta D_{wax}$ 序列,重建了亚洲夏季风边缘区过去25万年的古水文气候变化<sup>[16]</sup>。3)通过叶蜡氢同位素-石笋氧同位素记录的关系将石笋的铀系年代传递到黄土沉积,建立了新的黄土叶蜡氢同位素年代学,系统地开展了过去80万年黄土沉积序列的叶蜡氢同位素年代框架研究<sup>[17]</sup>。4)通过研究黄土高原中部末次冰消期中的百年分辨率黄土叶蜡氢同位素的变化特征,证实东亚季风是该地区轨道尺度夏季降水的主要控制系统<sup>[18]</sup>。

目前,在黄土高原地区,已开展系列叶蜡氢同位素研究,但尚无系统的叶蜡氢同位素数据集。本研究从已发表的经同行评议的专业期刊文章的数据列表中收集了2000–2019年采集的黄土高原现代植物、表层土壤、黄土-古土壤序列以及野外科学观测研究站控水培养植物等四种类型样品的叶蜡正构烷烃氢同位素测试数据。本数据集涵盖了黄土高原地区90个点位(不同经纬度为不同点位)的249个现代植物样品叶蜡正构烷烃氢同位素数据,69个点位70个表层土壤叶蜡正构烷烃氢同位素数据,西峰80万年以来486个黄土-古土壤叶蜡正构烷烃氢同位素数据和洛川25万年以来71个黄土-古土壤叶蜡正构烷烃氢同位素数据,以及皋兰野外科学观测研究站控水实验样地36个现代植物样品叶蜡正构烷烃氢同位素数据。本数据集的优势在于系统地汇总了黄土高原地区现代和过去80万年以来不同类型样品的叶蜡正构烷烃氢同位素测试数据,数据采样点位分布均匀,样品时间跨度长,有助于为黄土高原以及中国西北地区叶蜡氢同位素现代过程研究和过去水文环境变化示踪研究提供系统的有价值的实测数据集。

## 1 数据采集和处理方法

### 1.1 数据采样点位描述

本数据集涉及的采样地为黄土高原地区,地理区域范围为 $41^{\circ}24.000'-34^{\circ}12.000'N$ , $113^{\circ}02.000'-101^{\circ}59.000'E$ 。数据集基本信息包括样品类型、数据来源、数据作者、采样点位名称、样品数量、样品年龄、采样时间、氢同位素数据分析单位等,详见表1。其中现代植物样品采样点位90个,表层土壤样品采样点位69个,黄土-古土壤序列采样点位7个,以及野外观测研究站1个。本数据集涉及的采样点位分布详见图1。

表 1 黄土高原叶蜡正构烷烃氢同位素数据集基本信息

Table 1 Basic information of the  $\delta D_{wax}$  dataset on the Loess Plateau

| 序号 | $\delta D_{wax}$ 数据样品<br>类型 | $\delta D_{wax}$ 数据来<br>源 | 数据作者     | 采样站点名称                                                                                                                | 样品数量 (件) | 年龄(ka) | 采样时间        | $\delta D_{wax}$ 数据<br>分析单位 |
|----|-----------------------------|---------------------------|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|--------|-------------|-----------------------------|
| 1  | 现代植物                        | 参考文献 <sup>[13]</sup>      | 刘卫国      | 黄土高原                                                                                                                  | 8        | 现代     | 2002 年 9 月  | 布朗大学                        |
| 2  | 现代植物                        | 参考文献 <sup>[22]</sup>      | 刘卫国      | 蔚县,洛川,芮城                                                                                                              | 20       | 现代     | 2000–2008 年 | 中国科学院兰州地质<br>所              |
| 3  | 现代植物                        | 参考文献 <sup>[23]</sup>      | 刘卫国      | 延安,鄂托克旗,白水,黄龙,<br>会宁,吉兰泰,兰州,洛川,蓝<br>田,内蒙古,彭阳,盐池,宜君,<br>银川                                                             | 34       | 现代     | 2000–2006 年 | 中国科学院兰州地质<br>所              |
| 4  | 现代植物                        | 参考文献 <sup>[25]</sup>      | 刘卫国, 王欢业 | 泾川,隆德,甘草店,永登,古<br>浪,永昌,景泰,沙坡头,中卫,<br>贺兰,石嘴山,乌海,磴口,临<br>河,五原,白云鄂博,固阳,包<br>头,东胜,鄂尔多斯,榆林,横<br>山,靖边,安塞,延安,甘泉,洛<br>川,宜君,蓝田 | 74       | 现代     | 2012 年 9 月  | 中国科学院地球环境<br>研究所            |
| 5  | 现代植物                        | 参考文献 <sup>[24]</sup>      | 刘金召      | 蓝田, 西安, 合水                                                                                                            | 88       | 现代     | 2012 年 9 月  | 中国科学院地球环境<br>研究所            |
| 6  | 现代植物                        | 参考文献 <sup>[28]</sup>      | 刘金召      | 合水                                                                                                                    | 25       | 现代     | 2013 年 9 月  | 中国科学院地球环境<br>研究所            |

| 序号 | $\delta D_{wax}$ 数据样品类型 | $\delta D_{wax}$ 数据来源   | 数据作者    | 采样站点名称                                                                                        | 样品数量（件） | 年龄(ka)                      | 采样时间        | $\delta D_{wax}$ 数据分析单位 |
|----|-------------------------|-------------------------|---------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|---------|-----------------------------|-------------|-------------------------|
| 7  | 现代植物-控水实验               | 参考文献 <sup>[27]</sup>    | 刘虎      | 皋兰野外观测研究站                                                                                     | 36      | 现代                          | 2019 年      | 中国科学院地球环境研究所            |
| 8  | 表层土壤                    | 参考文献 <sup>[25]</sup>    | 刘卫国，王欢业 | 泾川,隆德,甘草店,永登,古浪,永昌,景泰,沙坡头,中卫,贺兰,石嘴山,乌海,磴口,临河,五原,白云鄂博,固阳,包头,东胜,鄂尔多斯,榆林,横山,靖边,安塞,延安,甘泉,洛川,宜君,蓝田 | 61      | 现代                          | 2012 年 9 月  | 中国科学院地球环境研究所            |
| 9  | 表层土壤                    | 参考文献 <sup>[15]</sup>    | 王政      | 西峰                                                                                            | 9       | 现代                          | 2013 年      | 中国科学院地球环境研究所            |
| 10 | 黄土-古土壤                  | 参考文献 <sup>[13]</sup>    | 刘卫国     | 西峰                                                                                            | 39      | 128.40~1.20                 | 2001 年      | 布朗大学                    |
| 11 | 黄土-古土壤                  | 参考文献 <sup>[15]</sup>    | 王政      | 西峰                                                                                            | 9       | 未确定                         | 2013 年      | 中国科学院地球环境研究所            |
| 12 | 黄土-古土壤                  | 参考文献 <sup>[17-18]</sup> | 王政      | 西峰                                                                                            | 438     | 850.00~0.00                 | 2013~2015 年 | 中国科学院地球环境研究所            |
| 13 | 黄土-古土壤                  | 参考文献 <sup>[16,18]</sup> | 王政      | 洛川                                                                                            | 71      | 22.76~4.25;<br>236.60~25.29 | 2013~2015 年 | 中国科学院地球环境研究所            |

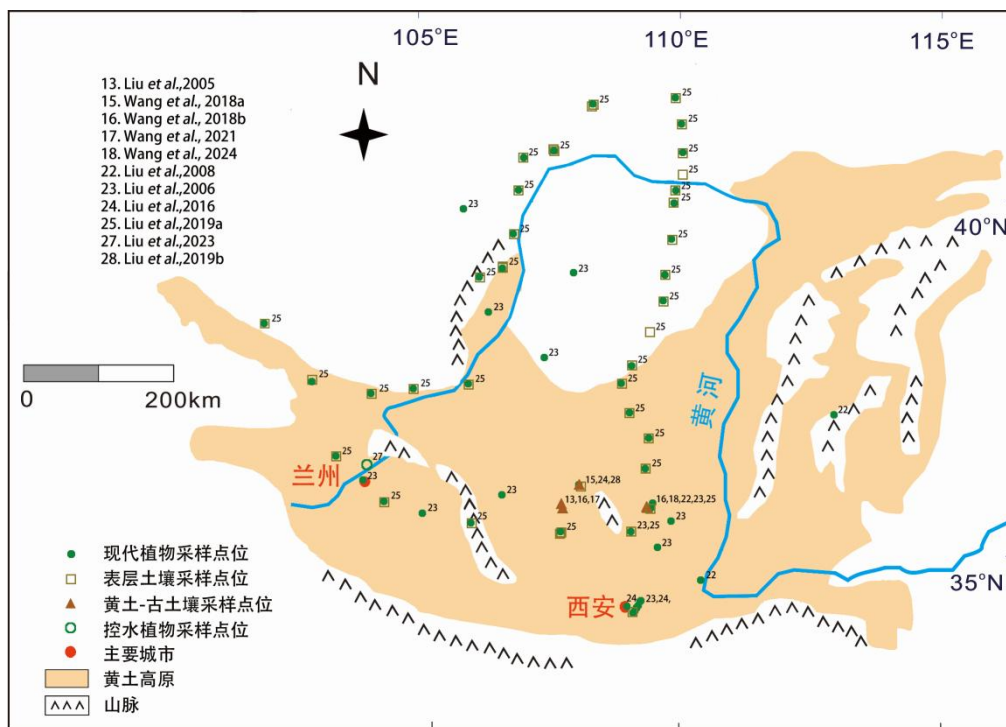


图1 黄土高原叶蜡正构烷烃氢同位素数据集采样点位分布图 (修改自 Liu et al, 2019<sup>[25]</sup>)

Figure 1 Distribution of sampling sites for the  $\delta D_{wax}$  dataset on the Loess Plateau

## 1.2 文献中的样品采集方法

植物采样点位严格限定在未受灌溉和农耕影响的自然环境中, 以确保植物同位素组成能真实反映自然水分和气候条件。乔木和灌木类植物采集叶片样本, 注意保持叶片的完整性, 草本植物则采集整株样本。采样点所选植物均为研究区广布优势种。采集的植物样品在野外风干或用 Parafilm® 袋子密封, 用 4℃ 干冰保存后转运至实验室<sup>[22,24-25]</sup>。

土壤采样点位同样选择未受灌溉和农耕影响的自然环境, 每个站点随机采集间距数米至数百米的 3 份样品合并为一个样品 (约 0–5 厘米深度)。采集的样品用 Parafilm® 袋子密封<sup>[15,25]</sup>。

黄土–古土壤序列样品主要采自西峰和洛川的黄土剖面。具体包括: 1) 西峰城东北 16 公里的蔡家咀, 黄土–古土壤序列连续沉积 13 万年, 14 米, 土壤样品按 5–30 厘米间隔采集<sup>[13]</sup>。2) 西峰一处滑坡堰塞湖沉积剖面 (36°10.000'N, 108°70.000'E), 以 0.5 米为间隔采集了 5 米深度范围内的 9 份土壤样品。该堰塞坝体由百余年前的自然滑坡形成, 但由于缺乏准确的年代标定手段, 样品的具体年龄尚难以确定<sup>[15]</sup>。3) 洛川剖面 (LCJ3, S<sub>2</sub> 层上部; 35°44.570'N, 109°25.997'E) 和西峰剖面 (XFJ3, S<sub>2</sub>–L<sub>2</sub> 层; 35°39.973'N, 107°39.018'E), 原始样品以 2 厘米间隔采集, 每 25 厘米连续取 3 份等量样品混合, 形成 30g 混合样<sup>[16]</sup>。4) 此外, 对西峰剖面 (35°42.000'N, 107°38.000'E), 在前期 L8 地层低分辨率叶蜡氢同位素记录 (10–20 厘米间隔) 基础上, 对上部 2 米序列进行 2 厘米高分辨率采样。对洛川剖面 (35°45.000'N, 109°26.000'E), 采样分辨率较低, 以 20 厘米间隔采样<sup>[18]</sup>。

## 1.3 文献中的样品室内分析流程

### 1.3.1 样品前处理

植物样品自然风干或在 40℃ 下烘干, 干燥后剪碎<sup>[13,22-25]</sup>。土壤和黄土–古土壤样品 50℃ 烘干或

冷冻干燥，土壤和黄土-古土壤样品轻轻研磨至 100 目，研磨过程中挑出土壤中肉眼可见的植物根及残体等<sup>[13,15]</sup>。

### 1.3.2 样品抽提

土壤样品：取约 15–30 g，采用二氯甲烷:甲醇（9:1, v/v）混合溶剂<sup>[25]</sup>或二氯甲烷溶剂<sup>[13]</sup>，在加速溶剂萃取仪（ASE）中萃取 3–4 次（每次 10 分钟）<sup>[25]</sup>。

植物样品：取约 0.5–3g，采用二氯甲烷:甲醇（9:1, v/v）混合溶剂<sup>[25]</sup>或二氯甲烷溶剂<sup>[13]</sup>，通过超声萃取 3×30 分钟<sup>[25]</sup>或 15 分钟<sup>[13]</sup>。

总脂类提取物经氮气吹干后，通过硅胶柱层析分离，分别以正己烷和甲醇为洗脱剂，获得叶蜡正构烷烃组分和其他组分。

### 1.3.3 正构烷烃定量分析

样品进行正构烷烃氢同位素测定前，需先进行定量分析。定量分析采用 Agilent 6890 或 7890B 气相色谱仪（GC），配置 HP-1ms 色谱柱（60 m×0.25 μm×0.32 mm）和氢火焰离子化检测器（FID）。分析条件如下：

进样模式：分流模式（分流比 4:1）；进样口温度：310℃；载气（He）流速：1.2 mL/min<sup>[25]</sup>。

程序升温：初始 40℃保持 1 分钟，以 10℃/min 升至 150℃，再以 6℃/min 升至 310℃或 315℃并保持 20 分钟<sup>[13,15,25]</sup>。

通过比对实验室自备正构烷烃外标混合物（例如含已知浓度的 C<sub>21</sub>、C<sub>25</sub>、C<sub>27</sub>、C<sub>29</sub>、C<sub>31</sub> 和 C<sub>33</sub>）进行定量<sup>[25]</sup>。

### 1.3.4 正构烷烃δD 测定

经过定量分析的正构烷烃，将目标峰用甲苯溶剂定容到浓度约 300 ng/uL，使用 GC/TC/Delta V 联用同位素质谱仪（IRMS, Thermo Finnigan）测定正构烷烃δD 值，分析条件如下：

进样模式：不分流模式；载气（He）流速：1.0–1.1 mL/min<sup>[13,25]</sup>；升温程序：与定量分析相同<sup>[25]</sup>。

裂解温度：1430℃–1445℃（将烷烃转化为 H<sub>2</sub> 气体）<sup>[13,23,25]</sup>。

参考气测试显示质谱仪稳定性优于 0.4‰。

实验室标准：每 4 次进样测定一次自备正构烷烃混合标样（δD 值：C<sub>21</sub>：–219‰，C<sub>25</sub>：–128‰，C<sub>27</sub>：–180‰，C<sub>29</sub>：–243‰，C<sub>31</sub>：–146‰，C<sub>33</sub>：–195‰），单组分标准偏差<3‰<sup>[25]</sup>。

## 2 数据样本描述

本数据集由 4 个数据文件组成，分别存放现代植物、表层土壤、黄土-古土壤及控水实验现代植物样品的采样站点信息和样品数据信息。现代植物叶蜡正构烷烃氢同位素数据集文件包括采样地名称、植物种属、光合作用类型、植物叶蜡正构烷烃氢同位素等数据项，表 2 为现代植物δD<sub>wax</sub> 的样例数据。表层土壤叶蜡正构烷烃氢同位素数据集文件包括采样地名称、经纬度、叶蜡正构烷烃氢同位素等数据项，表 3 为表层土壤δD<sub>wax</sub> 的样例数据。黄土-古土壤序列叶蜡正构烷烃氢同位素数据集文件包括采样地名称、经纬度、年龄、黄土-古土壤叶蜡正构烷烃氢同位素等数据项，表 4 为黄土-古土壤δD<sub>wax</sub> 的样例数据。控水培养植物叶蜡正构烷烃氢同位素数据集文件包括植物种属、采样时间、

灌溉水 $\delta D$ 、年均降水 $\delta D$ 、土壤水 $\delta D$ 、叶片水 $\delta D$  及 $\delta D_{wax}$  等数据项, 表 5 为样例数据。

表 2 现代植物叶蜡正构烷烃氢同位素数据示例<sup>[23]</sup>

Table 2 Examples of  $\delta D_{wax}$  data for modern plant samples

| 采样站点名称 | 种                         | 科              | 纲             | 生活型 | 光合作用类型         | $\delta D_{wax} (C_{29})$ (‰) |
|--------|---------------------------|----------------|---------------|-----|----------------|-------------------------------|
| 延安     | <i>Artemisia scoparia</i> | Chenopodiaceae | Dictyledoneae | 灌木  | C <sub>3</sub> | -142                          |
| 兰州     | <i>Salsola collina</i>    | Chenopodiaceae | Dictyledoneae | 灌木  | C <sub>4</sub> | -130                          |

表 3 表层土壤叶蜡正构烷烃氢同位素数据示例<sup>[25]</sup>

Table 3 Examples of  $\delta D_{wax}$  data for soil samples

| 采样站点名称 | 纬度(N)      | 经度(E)       | $\delta D_{wax} (C_{29})$ (‰) |
|--------|------------|-------------|-------------------------------|
| 榆林     | 38°56.122' | 109°44.569" | -162                          |
| 蓝田     | 34°14.456' | 109°07.461' | -175                          |

表 4 黄土-古土壤序列叶蜡正构烷烃氢同位素数据示例<sup>[18]</sup>

Table 4 Examples of  $\delta D_{wax}$  data for loess-paleosol sequence samples

| 采样站点名称 | 纬度(N)      | 经度(E)       | 年龄 (ka) | $\delta D_{wax} (C_{29})$ (‰) |
|--------|------------|-------------|---------|-------------------------------|
| 西峰     | 35°42.000' | 107°38.000' | 1.16    | -179                          |
| 洛川     | 35°45.000' | 109°26.000' | 4.25    | -221                          |

表 5 皋兰站控水培养植物样品叶蜡正构烷烃氢同位素数据示例<sup>[27]</sup>

Table 5 Example of  $\delta D_{wax}$  data from plants of field rainfall manipulation experiments at Gaolan Station

| 植物种                          | 植物类型     | 采样时间       | $\delta D$ -灌溉水 (‰) | $\delta D$ -年均降水(‰) | $\delta D$ -土壤水 (‰) | $\delta D$ -叶片水 (‰) | $\delta D_{wax}-(C_{29})$ (‰) |
|------------------------------|----------|------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|-------------------------------|
| <i>Agropyron cristatum</i>   | Monocots | 2019 年 7 月 | -56.2               | -57.2               | -39.8               | -4.0                | -202                          |
| <i>Glycyrrhiza uralensis</i> | Dicots   | 2019 年 7 月 | -56.2               | -57.2               | -39.8               | 17.2                | -134                          |

### 3 数据质量控制和评估

本数据集来源于三个分析单位所完成的规范化、专业化的有机化合物单体氢同位素测定数据。在撰写文本过程中, 本着忠实原文的原则, 从已发表的经同行评议的专业期刊文章数据列表中获得本数据集的数据。

以分析单位中国科学院地球环境研究所为例, 数据质量控制和评估具体包括:

$H_3^+$ 因子, 消除  $H_3^+$ 对  $m/z=3$  信号的干扰, 确保 D/H 比值的准确性: 每日通过  $H_2$  参考气测定, 日间变化应 $<0.1$  ppm/nA。

钢瓶氢气参考气 $\delta D$ 标定：采用双路进样 MAT 252 稳定同位素质谱仪（Thermo Scientific），以国际标准 VSMOW ( $\delta D=0\text{‰}$ ) 和 GISP ( $\delta D=-189.5 \pm 1.2\text{‰}$ ) 为参考，标定所用钢瓶参考气的 $\delta D$ 值。

实验室工作标样 $\delta D$ 标定：使用的仪器为 Trace GC Ultra-GC/TC-Delta V 稳定同位素质谱仪。将购自印第安纳大学，有给定值的  $C_{25}$ 、 $C_{29}$  及  $C_{32}$  正构烷烃固体单标分别溶于甲苯中，每个化合物浓度约为  $300 \text{ ng/uL}$ ，作为仪器校准标准样品。将购自美国 Fluka 公司的  $C_{21}$ 、 $C_{25}$ 、 $C_{27}$ 、 $C_{29}$ 、 $C_{31}$  和  $C_{33}$  正构烷烃固体单标分别溶于甲苯中，每个化合物的浓度约为  $300 \text{ ng/uL}$ ，作为实验室工作标样。当 GC/TC/IRMS 系统达到稳定状态后，用标定过的钢瓶参考气多次重复测试印第安纳标样  $C_{25}$  ( $\delta D=-215.8\text{‰}$ )， $C_{29}$  ( $\delta D=-242.6\text{‰}$ ) 和  $C_{32}$  ( $\delta D=-212.4\text{‰}$ )，其值稳定且均与给定值在 $\pm 3\text{‰}$ 误差范围内后，再多次重复测定实验室工作标样求得其 $\delta D$ 平均值： $C_{21}$ ： $-219\text{‰}$ ， $C_{25}$ ： $-128\text{‰}$ ， $C_{27}$ ： $-180\text{‰}$ ， $C_{29}$ ： $-243\text{‰}$ ， $C_{31}$ ： $-146\text{‰}$ ， $C_{33}$ ： $-195\text{‰}$ ，单组分标准偏差 $<3\text{‰}$ ，以此作为实验室工作标样的标定值。

仪器状态监测：每 4 次进样测定一次实验室工作标样，每 8 次进样随机测定一次已知样品的重复样，工作标样和样品均仅报告离子流强度在  $4000\text{--}6000 \text{ mV}$  范围内的 $\delta D_{\text{wax}}$ 测定值。所有结果的 $\delta D$ 值均相对 VSMOW 标准表示，重复样标准偏差 $<3\text{‰}$ 。

## 4 数据价值

本数据集包括黄土高原地区广布优势种现代植物、表层土壤、80 万年以来黄土-古土壤以及控水实验样地培养现代植物四种类型样品的叶蜡正构烷烃氢同位素测定数据。本工作将从空间和时间尺度为黄土高原以及中国西北地区叶蜡氢同位素研究和全球变化研究提供有价值的氢同位素地球化学基础。

## 作者分工职责

曹蕴宁（1978—），女，陕西西安人，硕士，高级实验师，研究方向为稳定同位素质谱分析技术。主要承担工作：数据收集与处理，论文撰写。

刘卫国（1958—），男，陕西西安人，博士，研究员，研究方向为同位素地球化学。主要承担工作：部分样品采集、数据分析，数据管理与质量控制，论文修改。

王欢业（1986—），男，山东蓬莱人，博士，研究员，研究方向为生物有机地球化学。主要承担工作：部分样品采集、论文撰写指导。

王政（1977—），男，陕西西安人，博士，研究员，研究方向为同位素地球化学。主要承担工作：数据采集与处理。

刘虎（1989—），男，河北承德人，博士，副研究员，研究方向为同位素地球化学。主要承担工作：数据采集与处理。

刘金召（1988—），男，陕西岐山人，博士，副研究员，研究方向为生态水文地球化学。主要承担工作：数据采集与处理。

朱梦姝（1992—），女，陕西西安人，硕士，研究方向为湖泊沉积与环境。主要承担工作：文献资料查询与收集。

## 参考文献

- [1] EGLINTON G, HAMILTON R J. Leaf epicuticular waxes[J]. *Science*, 1967, 156(3780): 1322–1335. DOI: 10.1126/science.156.3780.1322.
- [2] KOLATTUKUDY P E. Plant waxes[J]. *Lipids*, 1970, 5(2): 259–275. DOI: 10.1007/BF02532477.
- [3] CRANWELL P A. Chain-length distribution of n-alkanes from lake sediments in relation to post-glacial environmental change[J]. *Freshwater Biology*, 1973, 3(3): 259–265. DOI: 10.1111/j.1365-2427.1973.tb00921.x.
- [4] BEGLEY I S, SCRIMGEOUR C M. High-precision  $\delta^2\text{H}$  and  $\delta^{18}\text{O}$  measurement for water and volatile organic compounds by continuous-flow pyrolysis isotope ratio mass spectrometry[J]. *Analytical Chemistry*, 1997, 69(8): 1530–1535. DOI: 10.1021/ac960935r.
- [5] BILKE S, MOSANDL A. Measurements by gas chromatography/pyrolysis/mass spectrometry: fundamental conditions in  $^2\text{H}/^1\text{H}$  isotope ratio analysis[J]. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2002, 16(5): 468–472. DOI: 10.1002/rcm.599.
- [6] LIU W G, WANG Z, CUI L L, et al. Variation of compound-specific hydrogen isotope ratios under changing temperature program in gas chromatography/thermal conversion/isotope ratio mass spectrometry[J]. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2012, 26(16): 1746–1752. DOI: 10.1002/rcm.6283.
- [7] CAO Y N, LIU W G, SAUER P E, et al. An evaluation of alumina reaction tube conditioning for high-precision  $^2\text{H}/^1\text{H}$  isotope measurements *via* gas chromatography/thermal conversion/isotope ratio mass spectrometry[J]. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, 2012, 26(22): 2577–2583. DOI: 10.1002/rcm.6378.
- [8] SESSIONS A L, BURGOYNE T W, SCHIMMELMANN A, et al. Fractionation of hydrogen isotopes in lipid biosynthesis[J]. *Organic Geochemistry*, 1999, 30(9): 1193–1200. DOI: 10.1016/S0146-6380(99)00094-7.
- [9] XIE S, NOTT C J, AVSEJS L A, et al. Palaeoclimate records in compound-specific  $\delta\text{D}$  values of a lipid biomarker in ombrotrophic peat[J]. *Organic Geochemistry*, 2000, 31(10): 1053–1057. DOI: 10.1016/S0146-6380(00)00116-9.
- [10] SAUER P E, EGLINTON T I, HAYES J M, et al. Compound-specific D/H ratios of lipid biomarkers from sediments as a proxy for environmental and climatic conditions[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2001, 65(2): 213–222. DOI: 10.1016/s0016-7037(00)00520-2.
- [11] HUANG Y S, SHUMAN B, WANG Y, et al. Hydrogen isotope ratios of palmitic acid in lacustrine sediments record late Quaternary climate variations[J]. *Geology*, 2002, 30(12): 1103. DOI: 10.1130/0091-7613(2002)030<1103:hiropa>2.0.co;2.
- [12] 刘虎. 中国湖泊水生植物叶蜡氢同位素地球化学[D]. 北京: 中国科学院大学(中国科学院地球环境研究所), 2019. [LIU H. Hydrogen isotopic geochemistry of leaf waxes in aquatic plants from Chinese lakes[D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences), 2019.]
- [13] LIU W G, HUANG Y S. Compound specific D/H ratios and molecular distributions of higher plant

- leaf waxes as novel paleoenvironmental indicators in the Chinese Loess Plateau[J]. *Organic Geochemistry*, 2005, 36(6): 851 – 860. DOI: 10.1016/j.orggeochem.2005.01.006.
- [14] HOU J Z, TIAN Q, WANG M D. Variable apparent hydrogen isotopic fractionation between sedimentary *n*-alkanes and precipitation on the Tibetan Plateau[J]. *Organic Geochemistry*, 2018, 122: 78 – 86. DOI: 10.1016/j.orggeochem.2018.05.011.
- [15] WANG Z, LIU H, CAO Y N. Choosing a suitable  $\varepsilon_{w-p}$  by distinguishing the dominant plant sources in sediment records using a new Pta index and estimating the paleo- $\delta D_p$  spatial distribution in China[J]. *Organic Geochemistry*, 2018, 121: 161–168. DOI: 10.1016/j.orggeochem.2018.01.002.
- [16] WANG Z, AN Z S, LIU Z H, et al. Hydroclimatic variability in loess  $\delta D_{wax}$  records from the central Chinese Loess Plateau over the past 250 ka[J]. *Journal of Asian Earth Sciences*, 2018, 155: 49–57. DOI: 10.1016/j.jseaes.2017.11.008.
- [17] WANG Z, LIU W G, WANG H, et al. New chronology of the Chinese loess-paleosol sequence by leaf wax  $\delta D$  records during the past 800 k.y[J]. *Geology*, 2021, 49(7): 847–850. DOI: 10.1130/g48833.1.
- [18] WANG Z, ZHANG F, XING M, et al. The centennial-resolution loess  $\delta D_{wax}$  record indicates summer precipitation variations in the marginal region of the East Asian monsoon during the last deglaciation[J]. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, 2024, 635: 111961. DOI: 10.1016/j.palaeo.2023.111961.
- [19] 刘东生. 黄土与环境[M]. 北京: 科学出版社, 1985. [LIU D S. Loess and environment[M]. Beijing: Science Press, 1985.]
- [20] AN Z S, TUNGHSENG L, LU Y C, et al. The long-term paleomonsoon variation recorded by the loess-paleosol sequence in Central China[J]. *Quaternary International*, 1990, 7/8: 91–95. DOI: 10.1016/1040-6182(90)90042-3.
- [21] 孙有斌, 卢红选, 章泽科. 黄土高原古气候变化定量重建的新进展[J]. *地质学报*, 2024, 98(3): 1006–1023. DOI: 10.19762/j.cnki.dizhixuebao.2023062. [SUN Y B, LU H X, ZHANG Z K. New progress in quantitative reconstruction of paleoclimate changes in the Chinese Loess Plateau[J]. *Acta Geologica Sinica*, 2024, 98(3): 1006–1023. DOI: 10.19762/j.cnki.dizhixuebao.2023062.]
- [22] LIU W G, YANG H. Multiple controls for the variability of hydrogen isotopic compositions in higher plant *n*-alkanes from modern ecosystems[J]. *Global Change Biology*, 2008, 14(9): 2166–2177. DOI: 10.1111/j.1365-2486.2008.01608.x.
- [23] LIU W G, YANG H, LI L W. Hydrogen isotopic compositions of *n*-alkanes from terrestrial plants correlate with their ecological life forms[J]. *Oecologia*, 2006, 150(2): 330–338. DOI: 10.1007/s00442-006-0494-0.
- [24] LIU J Z, LIU W G, AN Z S, et al. Different hydrogen isotope fractionations during lipid formation in higher plants: Implications for paleohydrology reconstruction at a global scale[J]. *Scientific Reports*, 2016, 6: 19711. DOI: 10.1038/srep19711.
- [25] LIU W G, WANG H Y, LENG Q, et al. Hydrogen isotopic compositions along a precipitation gradient of Chinese Loess Plateau: Critical roles of precipitation/evaporation and vegetation change as controls for leaf wax  $\delta D$ [J]. *Chemical Geology*, 2019, 528: 119278. DOI: 10.1016/j.chemgeo.2019.119278.
- [26] LIU J Z, ZHAO J J, HE D, et al. Effects of plant types on terrestrial leaf wax long-chain *n*-alkane

biomarkers: Implications and paleoapplications[J]. Earth-Science Reviews, 2022, 235: 104248. DOI: 10.1016/j.earscirev.2022.104248.

[27] LIU H, WANG S Z, WANG H Y, et al. Apparent fractionation of hydrogen isotope from precipitation to leaf wax *n*-alkanes from natural environments and manipulation experiments[J]. Science of The Total Environment, 2023, 877: 162970. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.162970.

[28] LIU J Z, AN Z S, WU H W, et al. Comparison of *n*-alkane concentrations and  $\delta D$  values between leaves and roots in modern plants on the Chinese Loess Plateau[J]. Organic Geochemistry, 2019, 138: 103913. DOI: 10.1016/j.orggeochem.2019.103913.

## 论文引用格式

曹蕴宁, 刘卫国, 王欢业, 等. 黄土高原叶蜡正构烷烃氢同位素数据集[J/OL]. 中国科学数据, 2025, 10(4). (2025-11-24). DOI: 10.11922/11-6035.csd.2025.0089.zh.

## 数据引用格式

刘卫国, 王欢业, 王政, 等. 黄土高原叶蜡正构烷烃氢同位素数据集[DS/OL]. 中国科学院地球环境研究所黄土科学数据中心, 2025. (2025-11-21). DOI: 10.12262/lscd.geochemistry.2333.

# A dataset of hydrogen isotopes in leaf wax *n*-alkanes on the Loess Plateau

CAO Yunning<sup>1\*</sup>, LIU Weiguo<sup>1</sup>, WANG Huanye<sup>1</sup>, WANG Zheng<sup>1</sup>,  
LIU Hu<sup>1</sup>, LIU Jinzhao<sup>1</sup>, ZHU Mengshu<sup>1</sup>

1. State Key Laboratory of Loess Science, Institute of Earth Environment, Chinese Academy of Sciences, Xi'an 710061, P.R. China

\*Email: caoyunning@ieecas.cn

**Abstract:** The Loess Plateau is the largest loess deposition area in the world, characterized by a fragile ecosystem and high sensitivity to climate change, making it one of the key regions for global change research. Hydrogen isotopes in leaf waxes are widely used in global paleoenvironmental and paleoclimatic reconstruction studies, and play an important role in tracing climate and hydrological changes on the Loess Plateau. This dataset compiles hydrogen isotope data of leaf wax *n*-alkanes from various types of samples in the Loess Plateau region, including modern plants, surface soils, loess-paleosol sequences, and controlled-water-cultivated plants from field scientific observation stations. The data were extracted from published, peer-reviewed journal articles. Leaf wax hydrogen isotope data are typically obtained by extracting *n*-alkanes from plants or sediments and analyzing them using a gas chromatograph-high temperature pyrolysis-isotope ratio mass spectrometer system (GC-TC-IRMS). The dataset covers samples from 2000 to 2019, including 249 modern plant samples from 90 sites, 70 surface soil samples from 69 sites, 486 samples from the Xifeng loess-paleosol sequence dating past 800 ka, 71 samples from the Luochuan loess-paleosol sequence dating past 250 ka, and 36 water control experimental plant samples at

the Gaolan Field Scientific Observation and Research Station. This dataset is expected to provide valuable empirical data for studies on the modern processes of leaf wax hydrogen isotopes and global change studies in the Loess Plateau and northwestern China.

**Key words:** Loess Plateau; leaf wax; *n*-alkanes; hydrogen isotopes

### Dataset Profile

| Title                     | A dataset of hydrogen isotopes in leaf wax n-alkanes on the Loess Plateau                                                                                                                                                                        |                     |                            |                                                                |
|---------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|----------------------------|----------------------------------------------------------------|
| Data authors              | $\delta D_{\text{wax}}$<br>samples type                                                                                                                                                                                                          | Publication<br>year | Data producers             | Institute                                                      |
|                           | Modern plants                                                                                                                                                                                                                                    | 2005                | LIU Weiguo                 | Institute of Earth Environment,<br>Chinese Academy of Sciences |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2006                | LIU Weiguo                 |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2008                | LIU Weiguo                 |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2019                | LIU Weiguo,<br>WANG Huanye |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2016                | LIU Jinzhao                |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2019                | LIU Jinzhao                |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2023                | LIU Hu                     |                                                                |
|                           | Loess-paleosol                                                                                                                                                                                                                                   | 2005                | LIU Weiguo                 |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2018                | WANG Zheng,<br>LIU Weiguo  |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2021                | WANG Zheng,<br>LIU Weiguo  |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2024                | WANG Zheng                 |                                                                |
|                           | Surface soils                                                                                                                                                                                                                                    | 2019                | LIU Weiguo,<br>WANG Huanye |                                                                |
|                           |                                                                                                                                                                                                                                                  | 2018                | WANG Zheng                 |                                                                |
| Data corresponding author | CAO Yunning (caoyunning@ieecas.cn)                                                                                                                                                                                                               |                     |                            |                                                                |
| Time range                | The samples were collected during: 1) 2000–2013 (modern plants), 2) 2019 (water-controlled plants), 3) 2012–2013 (surface soils), and 4) 2001–2015 (loess-paleosol sequences, representing depositional records spanning up to 800 ka).          |                     |                            |                                                                |
| Geographical scope        | The Loess Plateau region (41°24.000′–34°12.000′N, 113°02.000′–101°59.000′E).                                                                                                                                                                     |                     |                            |                                                                |
| Data volume               | 132.05 KB                                                                                                                                                                                                                                        |                     |                            |                                                                |
| Data format               | *.xlsx                                                                                                                                                                                                                                           |                     |                            |                                                                |
| Data service system       | <a href="https://doi.org/10.12262/lscd.Geochemistry.2333">https://doi.org/10.12262/lscd.Geochemistry.2333</a><br><a href="https://www.scidb.cn/doi/10.12262/lscd.Geochemistry.2333">https://www.scidb.cn/doi/10.12262/lscd.Geochemistry.2333</a> |                     |                            |                                                                |
| Sources of funding        | National Natural Science Foundation of China (41873008); National Key Research and Development Program of China (Grant No.2013CB955900).                                                                                                         |                     |                            |                                                                |

|                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Dataset composition</b> | <p>The dataset comprises four Excel data files: (1) <math>\delta D</math>-Plants.xlsx: Modern plant leaf wax <i>n</i>-alkane hydrogen isotope data from the Loess Plateau, containing 249 <math>\delta D</math> measurements from 90 sampling sites collected during 2000–2013. (2) <math>\delta D</math>-Soils.xlsx: Surface soil leaf wax <i>n</i>-alkane hydrogen isotope data from the Loess Plateau, including 70 <math>\delta D</math> measurements from 69 sampling sites collected in 2012 and 2013. (3) <math>\delta D</math>-Loesses.xlsx: Loess-paleosol sequence <i>n</i>-alkane hydrogen isotope data from the Loess Plateau, including 486 <math>\delta D</math> measurements from the Xifeng profile spanning the past 800 ka and 71 <math>\delta D</math> measurements from the Luochuan profile spanning the past 250 ka. (4) <math>\delta D</math>-plants-RM.xlsx: Controlled-water experiment data containing 36 <math>\delta D</math> measurements from plant samples at the Gansu Gaolan Field Scientific Observation and Research Station for Agricultural Ecosystem in 2019.</p> |
|----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|