

JIS

定量核磁気共鳴分光法通則（qNMR 通則）

JIS K 0138 : 2018

平成 30 年 1 月 22 日 制定

日本工業標準調査会 審議

（日本規格協会 発行）

日本工業標準調査会標準第一部会 化学・環境技術専門委員会 構成表

	氏名	所属
(委員長)	千葉 光 一	関西学院大学
(委員)	今井 勇	一般社団法人日本ゴム工業会
	大石 美奈子	公益社団法人日本消費生活アドバイザー・コンサルタント・相談員協会
	大野 香代	一般社団法人産業環境管理協会
	小川 修	一般社団法人日本塗料工業会
	倉品 秀夫	公益社団法人自動車技術会
	小森 亨一	一般社団法人日本分析機器工業会
	斉藤 良	日本プラスチック工業連盟
	四角目 和広	一般財団法人化学物質評価研究機構
	高津 章子	国立研究開発法人産業技術総合研究所
	中島 眞理	株式会社ブリヂストン
	中村 優	地方独立行政法人東京都立産業技術研究センター
	野中 玲子	一般社団法人日本化学工業協会
	保倉 明子	東京電機大学
	松永 直樹	拓殖大学
	三浦 安史	石油連盟
	森川 淳子	東京工業大学
	山崎 初美	主婦連合会
	山田 美佐子	一般財団法人日本消費者協会

主 務 大 臣：経済産業大臣 制定：平成 30.1.22

官 報 公 示：平成 30.1.22

原案作成協力者：一般財団法人日本規格協会

(〒108-0073 東京都港区三田 3-13-12 三田 MT ビル TEL 03-4231-8530)

審 議 部 会：日本工業標準調査会 標準第一部会 (部会長 酒井 信介)

審議専門委員会：化学・環境技術専門委員会 (委員長 千葉 光一)

この規格についての意見又は質問は、上記原案作成協力者又は経済産業省産業技術環境局 国際標準課 (〒100-8901 東京都千代田区霞が関 1-3-1 E-mail:jisc@meti.go.jp 又は FAX 03-3580-8625) にご連絡ください。

なお、日本工業規格は、工業標準化法第 15 条の規定によって、少なくとも 5 年を経過する日までに日本工業標準調査会の審議に付され、速やかに、確認、改正又は廃止されます。

目 次

	ページ
1 適用範囲	1
2 引用規格	1
3 用語及び定義	1
4 qNMR の概要	6
4.1 qNMR の原理	6
4.2 ¹ H qNMR の原理	7
5 装置	9
5.1 一般事項	9
5.2 設置条件及び安全	9
5.3 装置構成の概要	11
6 ¹ H qNMR の準備	12
6.1 一般的事項	12
6.2 試料及び qNMR 用基準物質のひょう量	12
6.3 基準物質	12
6.4 重水素化溶媒の選定	13
6.5 NMR 試料管	13
6.6 NMR 装置の最適化	13
6.7 試料溶液の調製	14
6.8 ¹ H qNMR 測定条件の設定	14
7 測定	16
7.1 ¹ H qNMR 測定条件	16
7.2 測定操作	16
7.3 FID データの処理及び保存	16
8 解析	16
8.1 一般	16
8.2 計算式	17
8.3 分析値の表し方	17
8.4 データの整理及び保存	17
9 データの質の管理	17
9.1 一般事項	17
9.2 NMR 装置の適格性確認	18
9.3 システム適合性試験	18
9.4 トレーサビリティの確保	18
9.5 分析値の信頼性の確保	18
10 個別規格で ¹ H qNMR として取り入れる際に記載すべき事項	19

	ページ
附属書 A (参考) 試料溶液の調製	20
附属書 B (参考) ^1H qNMR スペクトルの測定	28
附属書 C (参考) ^1H qNMR スペクトル解析	33
附属書 D (参考) 試料のひょう量	38
附属書 E (参考) 不確かさの求め方	42
解 説	46

まえがき

この規格は、工業標準化法に基づき、日本工業標準調査会の審議を経て、経済産業大臣が制定した日本工業規格である。

この規格は、著作権法で保護対象となっている著作物である。

この規格の一部が、特許権、出願公開後の特許出願又は実用新案権に抵触する可能性があることに注意を喚起する。経済産業大臣及び日本工業標準調査会は、このような特許権、出願公開後の特許出願及び実用新案権に関わる確認について、責任はもたない。

白 紙

定量核磁気共鳴分光法通則 (qNMR 通則)

General rules for quantitative nuclear magnetic resonance spectroscopy

1 適用範囲

この規格は、核種プロトン (^1H) を用いた定量核磁気共鳴分光法 (以下, qNMR という。) によって、化学物質の純度又は含有率を内標準法に基づいて定量分析する場合の通則について規定する。

なお、溶媒に溶解する非交換性 ^1H をもつ物質に適用できる。

2 引用規格

次に掲げる規格は、この規格に引用されることによって、この規格の規定の一部を構成する。これらの引用規格は、その最新版 (追補を含む。) を適用する。

JIS B 7609 分銅

JIS K 0050 化学分析方法通則

JIS K 0211 分析化学用語 (基礎部門)

JIS K 0215 分析化学用語 (分析機器部門)

ISO 17034, General requirements for the competence of reference material producers

3 用語及び定義

この規格で用いる主な用語、定義、記号及び略号は、**JIS K 0050**、**JIS K 0211** 及び **JIS K 0215** によるほか、次による。

3.1

核磁気共鳴, **NMR** (nuclear magnetic resonance)

原子核が磁場中においてラジオ波を吸収する共鳴現象。

3.2

定量核磁気共鳴分光法, **qNMR** (quantitative NMR)

NMR を用いた定量分析法。

3.3

^1H 核定量核磁気共鳴分光法, **^1H qNMR** (^1H quantitative NMR)

プロトン (^1H) を観測核とした qNMR 分光法。

3.4

シグナル (signal)

NMR の共鳴信号。信号ともいう。

3.5

ラジオ波 (radio frequency, RF)