

食品や医薬品の評価、有害物質モニタリングなど、私たちの周りに存在する化学物質（有機化合物）を管理し、安心・安全な生活を守るためには"定量分析"が欠かせません。定量 NMR(qNMR)法¹⁾は、定量分析結果の信頼性が高く、計量トレーサビリティを確保できる手法として、現在国内外に広く普及が進んでいます。

このため、国際度量衡局（BIPM）では、qNMR 法の定量分析の信頼性確保に有用な 8 つの重要な内標準物質を「Octad of standards for qNMR purity measurements」として選定し、ユーザが対象物質に応じて正しく用いることができるように、これら 8 つの内標準物質の基礎的な化学情報や溶媒への溶解性をレポートとしてまとめ、2018 年から順次公開してきました（参考 1）。

このたび、最後の 1 物質である「安息香酸」の利用ガイドが公開されましたのでご案内します（<https://www.bipm.org/en/-/2023-03-29-qnmr-octad>）。本レポートを含む一連のガイド作成においては、計量標準総合センター（NMIJ）物質計測標準研究部門の山崎太一主任研究員らが共著者として大きく貢献しています。

また、NMIJ は、上記の 8 つのうち 6 つの内標準物質に対して国内供給に貢献するのみならず（参考 2）、有機化合物の定量的な純度評価における qNMR 法の測定手順などを定めた国際規格（ISO 24583、2022 年 12 月発行）²⁾の開発にも参画しており、qNMR 法を用いた信頼性の高い定量分析を支える枠組みづくりを支援してきました。引き続き、qNMR 法が適切に利用されるよう、関係機関と連携し研究開発や普及啓発を推進してまいります。

- 1) Synthesiology, Vol.2 No.1, 2009 「食品・環境中の有害成分分析のための有機標準物質の拡充 – 定量 NMR 法による効率的な計量トレーサビリティの実現 –」
- 2) 産総研プレスリリース「qNMR (定量 NMR)法が国際規格 (ISO) に – 医薬品や試薬、食品成分などの有機化合物の定量分析の信頼性向上に貢献 –」

【参考 1】 BIPM が選ぶ 8 つの qNMR 用内標準物質

ISRD-01：マレイン酸（2018 年公開）

ISRD-02：ジメチルスルホン（2018 年公開）

ISRD-03：フタル酸水素カリウム（2018 年公開）

ISRD-04：テレフタル酸ジメチル（2019 年公開）

ISRD-05：3,5-ビス（トリフルオロメチル）安息香酸（2019 年公開）

ISRD-06：1,4-ビス（トリメチルシリル）ベンゼン (-d₄)（2019 年公開）

ISRD-07：4,4-ジメチル-4-シラペンタン-1-スルホン酸-d₆（2019 年公開）

ISRD-08：安息香酸

【参考 2】

表 qNMR 法において重要な信頼性の高い内標準物質に対する NMIJ の貢献

Octad ID	内標準物質名	NMIJ の貢献	標準物質情報
ISRD-01	マレイン酸	依頼試験	メーカーの標準物質
ISRD-02	ジメチルスルホン	依頼試験	メーカーの標準物質
ISRD-03	フタル酸水素カリウム	CRM 供給	NMIJ CRM 4603-a
ISRD-05	3,5-ビス（トリフルオロメチル）安息香酸	CRM 供給	NMIJ CRM 4601-c
ISRD-06	1,4-ビス（トリメチルシリル）ベンゼン	依頼試験	メーカーの標準物質
ISRD-07	4,4-ジメチル-4-シラペンタン-1-スルホン酸-d ₆	依頼試験	メーカーの標準物質