

2024年2月14日  
計量標準総合センター

定量 NMR(qNMR)法<sup>1)</sup>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、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の定量分析法として広く普及が進んでいます。このため、国際度量衡局（BIPM）では、計量標準総合センター（NMIJ）と連携し、水素(<sup>1</sup>H)を対象とした qNMR 法の定量分析の信頼性確保に有用な内標準物質について、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、基礎的な化学情報や溶媒への溶解性をレポートとして公開してきました (<https://www.bipm.org/en/organic-analysis/qnmr>)。

このたび、NMIJ が世界に先駆けて供給していた <sup>19</sup>F を対象とした認証標準物質(CRM)である「3,5-ビス(トリフルオロメチル)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/-/2024-02-07-new-qnmr-standard>)。本レポートを含む一連のガイド作成においては、NMIJ の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、3種類の CRM 供給ならびに4種類の依頼試験によって、qNMR 用の内標準物質に対して国内供給に貢献し（参考2）、さらには、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）<sup>2)</sup>の作成にも参画し、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】



NMIJ が供給する認証標準物質

標準物質番号	物質名	対象核種
NMIJ CRM 4601-c	3,5-ビス(トリフルオロメチル)安息香酸	<sup>1</sup> H, <sup>19</sup> F
NMIJ CRM 4602-a	1,4-ビストリメチルシリル -2,3,5,6-テトラフルオロベンゼン	<sup>1</sup> H, <sup>19</sup> F
NMIJ CRM 4603-a	フタル酸水素カリウム	<sup>1</sup> H

### 【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-05/09	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 <sub>6</sub>	依頼試験	メーカーの標準物質