



中华人民共和国国家计量技术规范

JJF 1855—2020

纯度标准物质定值计量技术规范 有机物纯度标准物质

Metrological Technical Specification for Purity Assessment of Certified
Reference Materials—Organic Purity Certified Reference Materials

2020-09-11 发布

2021-03-11 实施

国家市场监督管理总局 发布

纯度标准物质定值计量技术规范

有机物纯度标准物质

Metrological Technical Specification for Purity
Assessment of Certified Reference Materials—
Organic Purity Certified Reference Materials

The logo for JJF 1855—2020 is enclosed in a decorative rectangular border with a repeating diamond pattern. The text "JJF 1855—2020" is centered within this border.

JJF 1855—2020

归口单位：全国标准物质计量技术委员会

主要起草单位：中国计量科学研究院

参加起草单位：中国医学科学院药物研究所

本规范由全国标准物质计量技术委员会负责解释

本规范主要起草人：

李红梅（中国计量科学研究院）

黄 挺（中国计量科学研究院）

张 伟（中国计量科学研究院）

参加起草人：

吕 扬（中国医学科学院药物研究所）

杨世颖（中国医学科学院药物研究所）

目 录

引言	(II)
1 范围	(1)
2 引用文件	(1)
3 术语	(1)
3.1 有机纯度	(1)
3.2 质量平衡法	(1)
3.3 定量核磁共振法	(1)
3.4 热分析法	(1)
4 通用要求	(1)
4.1 标准物质候选物的筛选	(1)
4.2 标准物质定性分析	(1)
4.3 纯度定值方式选取原则	(2)
5 定值方法分类、原理与要求	(2)
5.1 质量平衡法	(2)
5.2 定量核磁共振法	(2)
5.3 热分析法	(3)
5.4 库仑法	(3)
5.5 滴定法	(3)
5.6 密度法	(4)
5.7 分子光谱法(外标校正法)	(4)
6 定值与不确定度评定	(4)
6.1 质量平衡法	(4)
6.2 定量核磁共振法	(12)
6.3 热分析法	(12)
6.4 定值结果与不确定度的合成	(14)
6.5 均匀性和稳定性的不确定度	(15)
6.6 合成标准不确定度	(15)
6.7 扩展不确定度	(15)
7 计量溯源性说明	(15)
7.1 通用要求	(15)
7.2 具体方法要求	(15)

引 言

有机纯度标准物质是标准物质的重要组成部分，是复杂基质有机物测量的源头校准标准。本规范以《国际纯粹与应用化学联合会有机纯度技术报告——有机化合物纯度的SI定值方法》（IUPAC Organic Purity Technical Report—Methods for the SI Value Assignment of the Purity of Organic Compounds）为依据制定，以规范我国有机纯度标准物质的定值。

本规范为首次发布。

纯度标准物质定值计量技术规范

有机物纯度标准物质

1 范围

本规范适用于指导均质且有明确分子结构的有机物（通常相对分子质量 $<5\ 000$ ）的纯度定值及其纯度标准物质的研制。

2 引用文件

JJF 1005 标准物质通用术语和定义

JJF 1343 标准物质定值的通用原则及统计学原理

JJF 1507 标准物质的选择与应用

国际纯粹与应用化学联合会有机纯度技术报告——有机化合物纯度的 SI 定值方法 (IUPAC Organic Purity Technical Report—Methods for the SI Value Assignment of the Purity of Organic Compounds)

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

3 术语

JJF 1005 界定的及以下术语和定义适用于本规范。

3.1 有机纯度 purity of organic compound

有机化合物中主体成分的含量。通常以质量分数（g/g）及其倍数表示，简称纯度。

3.2 质量平衡法 mass balance method

在基于被测物质质量分数的总和为 100% 的前提下，通过扣减其中所有杂质组分的含量，获得主体成分含量即纯度的方法。

3.3 定量核磁共振法 quantitative nuclear magnetic resonance method, qNMR

基于核磁共振谱图中信号的积分面积与产生相应共振谱线的原子核数之间的正比关系进行物质纯度定值的方法。

3.4 热分析法 thermal analysis method

根据物质的熔点与纯度的关系，基于范特霍夫（van't Hoff）方程，计算物质纯度的方法。

4 通用要求

4.1 标准物质候选物的筛选

应在合理成本的前提下，选择纯度相对较高、均匀性和稳定性良好的样品，可以是市售、定制或再加工的样品。