



中华人民共和国国家标准

GB/T 48167—2026

定量核磁共振波谱氢谱内标法分析通则

General rules for quantitative ^1H nuclear magnetic resonance spectroscopy
analysis by internal standard method

2026-08-28 发布

2026-12-01 实施

国家市场监督管理总局 发布
国家标准化管理委员会

目 次

前言 III

1 范围 1

2 规范性引用文件 1

3 术语和定义 1

4 分析方法原理 2

5 试剂和材料 2

 5.1 溶剂 2

 5.2 内标物 2

 5.3 核磁管 2

6 仪器 2

 6.1 核磁共振波谱仪 2

 6.2 天平 3

7 样品处理 3

 7.1 样品称量 3

 7.2 样品溶解 3

8 分析方法的优化 3

 8.1 一般规定 3

 8.2 重复时间和激发脉冲角度 3

 8.3 样品管的旋转 4

 8.4 谱宽和激发中心位置 4

 8.5 扫描次数和信噪比 4

 8.6 数据点数和采集时间 4

 8.7 控温 5

9 分析结果的计算与评价 5

 9.1 定量分析的结果计算 5

 9.2 定量分析结果的评价 5

10 安全注意事项..... 6

附录 A（资料性） 常见内标物及其性质 7

附录 B（资料性） 定量测试建议的参考条件 9

前 言

本文件按照 GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由中华人民共和国科学技术部提出。

本文件由全国仪器分析测试标准化技术委员会(SAC/TC 481)归口。

本文件起草单位：中国计量科学研究院、北京化工大学、国标(北京)检验认证有限公司、中国医学科学院药物研究所、北京大学、美国药典委员会上海代表处、上海药明康德新药开发有限公司、北京微量化学研究所、布鲁克(北京)科技有限公司、中轻技术创新中心有限公司、中国农业科学院农业质量标准与检测技术研究所、北京市食品检验研究院(北京市食品安全监控和风险评估中心)、有研工程技术研究院有限公司、吉林省产品质量监督检验院、中化学科学技术研究有限公司、武汉中科牛津波谱技术有限公司。

本文件主要起草人：张伟、宋德伟、黄挺、姚欢、苏福海、胡高飞、万康妮、王亚男、扶晖、刘洋、张静、涂光忠、吕娟、钟其顶、王道兵、周剑、李明、苏保宁、龚炜、李先江、李雪瑶、李玮、刘美、薛探龙、王潇、王彤彤、邴炜、冯翠萍、颜贤忠。

定量核磁共振波谱氢谱内标法分析通则

1 范围

本文件规定了使用定量核磁共振波谱氢谱内标法进行有机化合物纯度分析的通用规则。

本文件适用于使用定量核磁共振波谱氢谱内标法对含有可产生准确定量核磁共振信号氢原子(^1H)并且分子结构明确的有机化合物进行纯度分析。

本文件不适用于对仅含有羟基、氨基和巯基等基团中氢原子(^1H)的化合物进行纯度分析。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中,注日期的引用文件,仅该日期对应的版本适用于本文件;不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

GB/T 6379.1 测量方法与结果的准确度(正确度与精密度) 第1部分:总则与定义

GB/T 13966 分析仪器术语

GB/T 14666 分析化学术语

GB/T 27411 检测实验室中常用不确定度评定方法与表示

GB/T 27417 合格评定 化学分析方法确认和验证指南

JJF 1448 超导脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪校准规范

JJF 1855 纯度标准物质定值计量技术规范 有机物纯度标准物质

JJG 1036 电子天平检定规程

3 术语和定义

GB/T 6379.1、GB/T 13966、GB/T 14666、GB/T 27411、GB/T 27417、JJF 1448 和 JJF 1855 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1

定量核磁共振波谱法 quantitative nuclear magnetic resonance spectroscopy method

基于核磁共振谱图中信号响应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化合物纯度测定的方法。

3.2

定量核磁共振波谱氢谱法 quantitative ^1H nuclear magnetic resonance spectroscopy method

使用氢(^1H)原子核作为观测核的定量核磁共振波谱法(3.1)。

3.3

有机化合物纯度 purity of organic compound

有机化合物中主体成分的含量。

注:通常以质量分数克每克(g/g)及其倍数表示。