



中华人民共和国国家计量技术规范

JJF 1448—2014

超导脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪 校准规范

Calibration Specification for Superconducting Pulsed Fourier Transform
Nuclear Magnetic Resonance Spectrometers

2014-02-14 发布

2014-05-14 实施

国家质量监督检验检疫总局 发布

中 华 人 民 共 和 国
国 家 计 量 技 术 规 范
超 导 脉 冲 傅 里 叶 变 换 核 磁 共 振 谱 仪
校 准 规 范

JJF 1448—2014

国家质量监督检验检疫总局发布

*

中国质检出版社出版发行
北京市朝阳区和平里西街甲2号(100029)
北京市西城区三里河北街16号(100045)

网址:www.gb168.cn

服务热线:400-168-0010

010-68522006

2014年5月第一版

*

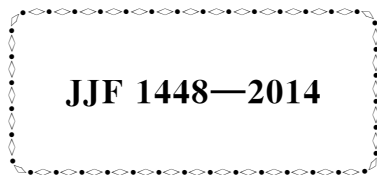
书号:155026·J-2903

版权专有 侵权必究

超导脉冲傅里叶变换

核磁共振谱仪校准规范

Calibration Specification for Superconducting
Pulsed Fourier Transform Nuclear Magnetic
Resonance Spectrometers



JJF 1448—2014

归口单位：全国物理化学计量技术委员会

起草单位：中国计量科学研究院

本规范委托全国物理化学计量技术委员会负责解释

本规范起草人：

张 伟（中国计量科学研究院）

黄 挺（中国计量科学研究院）

戴新华（中国计量科学研究院）

目 录

引言	(II)
1 范围	(1)
2 引用文件	(1)
3 术语和计量单位	(1)
3.1 化学位移	(1)
3.2 自由感应衰减 (FID)	(1)
3.3 线宽因子	(1)
4 概述	(1)
4.1 原理	(1)
4.2 仪器组成	(2)
5 计量特性	(2)
6 校准条件	(2)
6.1 实验室环境	(2)
6.2 标准物质	(2)
6.3 实验条件	(3)
7 校准项目和校准方法	(3)
7.1 ^1H 谱灵敏度	(3)
7.2 ^{13}C 谱灵敏度	(3)
7.3 ^1H 谱分辨力	(4)
7.4 ^{13}C 谱分辨力	(4)
7.5 ^1H 谱线型	(4)
7.6 ^{13}C 谱线型	(4)
7.7 ^1H 谱定量重复性	(4)
8 校准结果	(4)
9 复校时间间隔	(5)
附录 A 校准记录格式	(6)
附录 B 校准证书内页格式	(7)
附录 C 仪器建议参数	(8)
附录 D 不确定度评定	(9)

引 言

本规范部分参照采用国际文件 ASTM E386-90 (2011) 高分辨核磁共振 (NMR) 波谱学数据表征的实施标准 [Standard Practice for Data Presentation Relating to High-Resolution Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy]。

本规范为首次发布。

超导脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪 校准规范

1 范围

本规范适用于 300 MHz 及以上超导脉冲傅里叶变换核磁共振谱仪（以下简称仪器）的校准。

2 引用文件

ASTM E386-90 (2011) 高分辨核磁共振 (NMR) 波谱学数据表征的实施标准 (Standard Practice for Data Presentation Relating to High-Resolution Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy)

《分析化学手册——第七分册 核磁共振波谱分析》北京：化学工业出版社

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（包括所有的修改版）适用于本规范。

3 术语和计量单位

3.1 化学位移 chemical shift

处于同一磁场中的质子或其他磁性核，由于其在分子中所处的化学环境不同，而在不同的频率下发生共振的现象，其标度通常采用测量参比物与被测样品共振频率差表示，记为 δ ，量纲为 1。

$$\delta = \frac{\nu_S - \nu_R}{\nu_{\text{仪器}}} \times 10^6 \quad (1)$$

式中：

ν_S ——试样的共振频率，Hz；

ν_R ——参比物的共振频率，Hz；

$\nu_{\text{仪器}}$ ——仪器的工作频率，Hz。

3.2 自由感应衰减 (FID) free induction decay

自旋系统在脉冲作用下，接受线圈中出现感应信号，其强度随时间而衰减。

3.3 线宽因子 line broadening factor

对自由感应衰减信号的每个数据点进行指数型加权处理所采用的因子。当因子等于零时，不进行加权处理。

4 概述

4.1 原理

核磁共振波谱法，是研究某些有磁矩的原子核，在静磁场中由于磁矩和磁场相互作用形成一组分裂的能级，在合适频率的射频作用下，能级间发生跃迁而出现的共振现