

JJF 1033-2016 《计量标准考核规范》实施与应用

化学计量器具建标指南

■ 寿永祥 张 毅 刘 庆 / 主编

■ 郑春蓉 张 克 / 主审



中国质量标准出版传媒有限公司
中国标准出版社

JJF 1033—2016 《计量标准考核规范》实施与应用

化学计量器具建标指南

寿永祥 张毅 刘庆 主编
郑春蓉 张克 主审

中国质量标准出版传媒有限公司
中国标准出版社

北京

图书在版编目 (CIP) 数据

化学计量器具建标指南: JJF 1033—2016 《计量标准考核规范》实施与应用/寿永祥, 张毅, 刘庆主编. —北京: 中国质量标准出版传媒有限公司, 2019. 10
ISBN 978 - 7 - 5026 - 4725 - 4

I. ①化… II. ①寿… ②张… ③刘… III. ①化学计量学—计量仪器—标准—中国—指南 IV. ①06 - 04
②TB99 - 65

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2019) 第 149871 号

中国质量标准出版传媒有限公司 出版发行
中国标准出版社
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.spc.net.cn

总编室: (010)68533533 发行中心: (010)51780238

读者服务部: (010)68523946

中国标准出版社秦皇岛印刷厂印刷

各地新华书店经销

*

开本 787 × 1092 1/16 印张 23.5 字数 561 千字

2019 年 10 月第一版 2019 年 10 月第一次印刷

*

定价 80.00 元

如有印装差错 由本社发行中心调换

版权专有 侵权必究

举报电话: (010) 68510107

编 委 会

主 编	寿永祥	张 毅	刘 庆			
主 审	郑春蓉	张 克				
副主编	杨 波	何 欣	林 楨	楼 舸	魏 崑	饶 红
	李 杰	祝天宇	赵海波	王金恒		
编 委	万 力	云彩丽	王雪原	白常山	朱 兰	李 晗
	陈田新	陈 宇	邵志新	余海洋	施力予	杨嘉伟
	岳宗龙	荀其宁	袁 礼	高旭辉	隋 峰	谢 琪
	蔡冶强	薛 巍	黄敢生	薛 元	李 霞	李晓红
	丁峰元	朱佳奇	张佳仁	尹业琳	林 娜	朱 敏
	周李华	陈全森	杨 威	许俊斌	韩 强	王旭辉
	李海全	朱钟曦	汪伟庆	刘 丹	曹 平	王杨柳
	甄啸啸	刘建松	龙 阳	林春江	孟渭娟	辛平乐
	尤 冰	刘靳抒	高 锦	王伯阳	艾银国	邹 庆
	刘 鼎	李 衍	朱玉平	赵 荣	毕晓东	秦开智
	闵瑞屏	张 玲	张 虎	刘秀丽	刘国军	王雪原
	杨红艳	周四清	周选超	魏 明	张 雯	李海燕
	许 澍	蔡锡松	梁 亮	屈汝国	李晶晶	张 燕
	朱小文	叶建平	高 丽	卫睿华	畅碧帅	高鹏贵
	郭学军	张 辰	茅晓晨	杨天鹤	谢 帅	莫淑琴
	方春泉	胡德龙	卢 锋	孔骏懿	洪 玲	武 佳
	张家琪	曾慧琴	丁 斌	范 斐	李 伟	罗 斌
	傅 晖	魏海捷	李新玲	阮 社	刘 鑫	

前 言

化学计量是计量学在化学科学领域内的重要应用，其基本任务是研究发展化学测量理论和技术，实现化学计量的技术应用，建立化学计量基准和标准，保障化学计量的量值溯源性和量值的准确、一致。近年来，随着化学计量技术的不断发展，成分分析、物理化学特性专业新增了许多国家计量检定规程和计量技术规范，部分规程和规范进行了修订，一些规程和规范的适用范围、测量方法和技术指标也都有了比较明显的变化。作为计量标准考核依据的 JJF 1033—2016《计量标准考核规范》已于 2017 年 5 月 30 日实施。各级法定计量检定机构、企业单位内部的计量部门开展建标、复查工作都应按照新的考核规范的要求执行。另外，根据我国有关政策要求，第三方校准机构在申请校准资质前也要依据 JJF 1033 建立相关计量标准。因此，急需编写《化学计量器具建标指南》，对计量标准的考核、建立和复查工作提供指导。

本书按照 JJF 1033—2016 的要求，结合各计量检定机构、基层计量单位实际建标情况以及目前计量技术、设备的发展状况，对常用的成分分析、物理化学特性计量器具建标过程予以指导。从基础知识到计量标准器的选择，从计量标准的考核要求到计量标准的考核程序，并配有 15 个《计量标准考核（复查）申请书》和《计量标准技术报告》的编写示例，可供从事化学计量检定、校准工作的技术人员、管理人员及计量标准考核人员参考。

本书的编者来自上海市计量测试技术研究院、中国测试技术研究院、云南省计量测试技术研究院、浙江省计量科学研究院、广州计量检测技术研究院、内蒙古自治区计量测试研究院、江苏省计量科学研究院、山东省计量科学研究院、陕西省计量科学研究院、黑龙江省计量检定测试院、甘肃省计量研究院、西安市计量技术研究院、苏州市计量测试研究所等法定计量检定机构，都是长期从事

计量管理和技术工作的领导、专家和学科带头人。

本书在编写的过程中得到北京林电伟业电子有限公司、四川中测标物科技有限公司、山东恒量测试科技有限公司、济南市大秦机电设备有限公司等单位的大力支持。

希望本书的出版能够对提高和规范各级计量单位的建标工作起到积极的推动作用。因编校时间仓促加之编者水平和能力有限，难免存在不足之处，恳请广大读者批评指正。在此，特向所有关心、支持本书编辑、出版的领导、专家和朋友们致以衷心的感谢！

编 者

2019年3月

目 录

第一章 基础知识	(1)
第一节 化学计量	(1)
第二节 化学计量名词术语	(3)
第三节 化学计量单位表示及换算	(18)
第四节 化学计量器具检定系统	(22)
第五节 标准物质	(28)
第二章 建标指导	(30)
第一节 计量标准的考核要求	(30)
第二节 计量标准的考核程序	(31)
第三节 《计量标准考核(复查)申请书》的编写	(31)
第四节 《计量标准技术报告》的编写	(37)
第三章 化学计量器具建标申请书和技术报告编写示例	(45)
示例 3.1 原子吸收分光光度计检定装置	(45)
示例 3.2 傅立叶变换红外光谱仪校准装置	(67)
示例 3.3 化学需氧量(COD)测定仪检定装置	(85)
示例 3.4 四极杆电感耦合等离子体质谱仪校准装置	(105)
示例 3.5 气相色谱仪检定装置	(125)
示例 3.6 旋光仪及旋光糖量计检定装置	(153)
示例 3.7 总有机碳分析仪检定装置	(177)
示例 3.8 pH 计测定仪检定装置	(195)
示例 3.9 紫外、可见、近红外分光光度计检定装置	(213)
示例 3.10 熔点测定仪检定装置	(239)
示例 3.11 酶标分析仪检定装置	(259)
示例 3.12 毛细管黏度计检定装置	(287)
示例 3.13 可燃气体检测报警器检定装置	(307)
示例 3.14 氨气检测报警器检定装置	(327)
示例 3.15 氯乙烯气体检测报警仪检定装置	(347)
参考文献	(366)

第一章 基础知识

第一节 化学计量

一、化学量

化学是在分子和原子层次上研究物质的组成、结构、性质、用途、制法和变化规律的自然科学。化学量包括物质的化学成分量、材料的物理化学特性量及相关的工程特性量。化学量是“隐藏”在物质的结构及组成的“内部”的量，化学测量是确定化学及其相关量值的一组操作，化学量的计量往往需要通过：①对被测对象的了解说明；②采样；③样品制备；④测量、分析方法的选择；⑤测量、分析设备计量特性的校准；⑥测量、分析条件的选择控制；⑦定性、定量分析测量；⑧分析的数据处理；⑨分析结果正确性的验证等多个步骤来完成，其中每一个步骤都包含了多种因素的复杂影响。化学测量是通过解析测量的每一个步骤中化学、物理学数据，最大限度地获取物质正确的化学组成、结构、特性等信息的综合性极强的科学。

二、化学测量的量值溯源

化学计量是关于化学及其相关领域实现单位统一、量值准确可靠的活动。国际单位制(SI)中与化学测量密切相关的物质的量的单位摩尔(mol)已通过阿伏伽德罗常数 N_A 准确定义，即1mol物质的量精确包含 $6.02214076 \times 10^{23}$ 个基本粒子。

化学量的溯源过程比一般的物理计量过程复杂很多，化学计量不可能有长期不变的反复使用的基准、标准。在多数情况下，化学测量的量值溯源是以标准物质为参照对象，通过：①基准、标准测量方法；②分析仪器设备的逐级检定或校准；③测量比对等三种途径得以实现的。化学测量的量值溯源方式如图1-1所示。

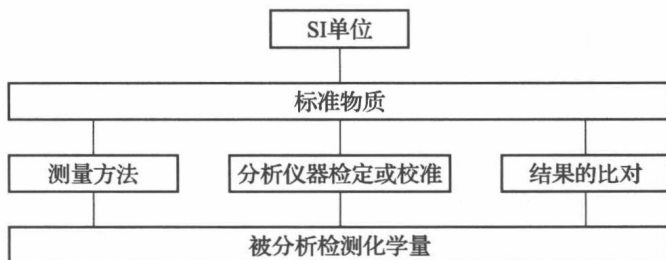


图 1-1 化学测量的量值溯源方式

在测量方法方面，国际物质的量咨询委员会(CCQM)将测量方法划分为基准测量方法(PMM)、标准测量方法(RMM)、有效测量方法(VMM)和工作测量方法四个层级。

1. 基准测量方法 (PMM)

基准测量方法是具有最高计量特性的方法，它的测量原理、测量程序已被完全、准确地描述、理解和定义。基准测量方法的测量模型中的各种参量都能用 SI 单位表示，不需要用相同量的标准作参照，最终测得值的不确定度可以直接用 SI 单位表述。这也是过去习惯将基准测量方法称为绝对测量方法的原因。

国际计量委员会 (CIPM) 物质的量咨询委员会 (CCQM) 认为可能成为基准测量方法的有：同位素稀释质谱法、电量法 (库仑法)、重量 (质量) 法、滴定法、凝固点下降法、差示扫描量热法、腔衰荡光谱法和中子活化分析法。

2. 标准测量方法 (RMM)

经过系统的研究，确切而清晰地描述了准确测量特定化学成分所必需的条件和程序，其准确度和不确定度已得到相关权威机构认可的测量方法。该方法适用于一级标准物质的赋值，也可用于评价同一量的其他测量方法。

3. 有效测量方法 (VMM)

已被证明技术性能可以满足其应用目的并得到相关行业认同的方法。二级标准物质的赋值常采用此类方法，有效测量方法常常以行业、部门分析方法标准的形式规定。在仪器检定、校准中使用的方法大多也属于此类方法。

4. 工作测量方法

为获得测量结果而采用的测量方法，根据测量目的的要求，可以是标准测量方法、有效测量方法或其他自己编写并得到确认的方法。

测量方法四个层级的划分是一种计量学地位的划分，它们之间的差别只是计量学水平的区分。不同层级的测量方法常常以国际、国家、行业、部门分析方法标准的形式规定。目前，我国关于化学量检测分析方法的国家标准已经有 5000 余项，并且还在不断增加。

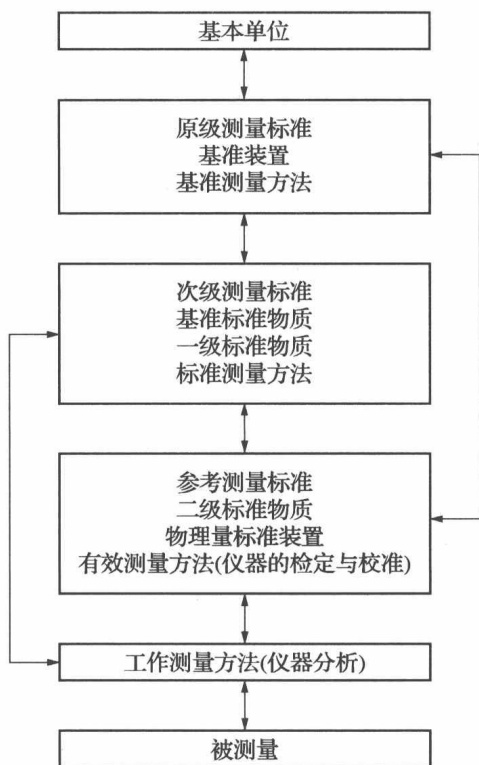


图 1-2 化学计量量值溯源、传递关系

三、化学计量仪器的量值传递和溯源

化学计量仪器的量值传递和溯源方法主要有两种形式：①标准物质作为溯源和传递标准进行比较测量；②分析仪器逐级检定与校准。化学计量的量值溯源、传递关系如图 1-2 所示。

四、化学分析仪器的计量标准

现代化学计量常常涉及光学、电学、热学、力学等物理量的计量标准，这些物理量的计量标准的量值在化学测量仪器中必须通过与标准物质的比对转化为正确的化学量

值,标准物质在化学量的量值溯源中占据着关键的主导地位。可以说,分析测量的可靠溯源来自于有证标准物质的应用。

化学计量标准存在的问题是:①很多分析仪器测量范围很宽,而检定、校准化学计量仪器的计量标准复现的量值只能覆盖仪器测量范围的很小一部分;②同一种分析仪器可以测量多种,甚至上千种不同物质,而计量标准的标准物质所能复现的量值只是仪器常规测量范围内某个或某些量值;③受标准物质研制水平的限制,标准物质特性值的不确定度经常会出现大于被检定、校准仪器允许示值误差的 $1/3$ 的情况,造成仪器检定、校准结果的不确定度达到允许示值误差的 $2/3$ 以上。因此,化学分析仪器检定合格,只证明该仪器的计量特性符合规程要求。化学分析仪器检定合格并不能完全保证满足该仪器实际工作的需要,也就是说,分析仪器使用中按实际测量要求对仪器进行校准是仪器分析必不可少的重要环节。

五、化学计量技术的发展

未来化学计量技术的发展主要表现在以下几个方面:

1. 化学计量基本单位的发展

计量基本单位的实现已由物理学理论为基础的宏观实物基准,转为建立在量子效应基础上的基本物理常数定义的微观基准。物质的量的单位摩尔(mol)的定义:精确地包含 $6.02214076 \times 10^{23}$ 个基本粒子的系统的物质的量,并且认定阿伏伽德罗常数 N_A 是基本物理常数,其值是固定不变的。

2. 测量技术和测量仪器的发展

化学量的测量,除基础的化学分析测试之外都必须依靠化学测量仪器来实现。化学测量仪器的研究、开发、检定与校准,是化学测量工作的重要环节。随着现代科学技术的发展,化学计量测试技术正在向自动、实时、在线、动态、快速、多参数和高精密测量的方向发展。

3. 标准物质的研制开发

大力提高标准物质的研制水平,减小现有标准物质特性量值的不确定度,开发新的标准物质种类,特别是开发用于分析仪器实际校准的基体标准物质,以适应国家对环境、土壤、食品安全和生命科学等方面的检测需求。

第二节 化学计量名词术语

一、基本通用术语

1. 法定计量单位

国家法律、法规规定使用的测量单位。

我国的法定计量单位包括:

- (1) 国际单位制的基本单位;
- (2) 国际单位制的辅助单位;
- (3) 国际单位制中具有专门名称的导出单位;

- (4) 国家选定的非国际单位制单位；
- (5) 由以上单位构成的组合形式的单位；
- (6) 由词头和以上单位所构成的十进倍数和分数单位。

2. 制外测量单位（简称制外单位）

不属于给定单位制的测量单位。

例如：化学计量中的浊度 NTU、 H^+ 活度 pH、容量 L 是 SI 制外单位。

3. 倍数单位

给定测量单位乘以大于 1 的整数得到的测量单位。

在 SI 制中，乘以的整数是 SI 词头规定的十进倍数。

4. 量纲为一的量（又称无量纲量）

在其量纲表达式中与基本量相对应的因子的指数均为零的量。

量纲为一的量的测量单位和值均是数，但是这样的量比一个数表达了更多的信息。例如：气体标准物质中氧的摩尔分数 100×10^{-6} 、甲基对硫磷中硫的质量分数 0.1218、空气中氧的体积分数 20.9%、苯在 20℃ 的折射率 1.5012。

二、测量标准的术语

1. 测量标准

具有确定的量值和相关联的测量不确定度，实现给定量定义的参照对象。

测量标准是为了定义、实现、保存及复现量的单位或一个或多个量值，用作参考的实物量具、测量仪器、标准物质或测量系统。

2. 国际测量标准

国际协议签约方承认的并旨在世界范围使用的测量标准。

3. 国家测量标准（简称国家标准）

经国家权威机构承认，在一个国家或经济体内作为同类量的其他测量标准定值依据的测量标准。在我国称为计量基准或国家计量标准。

4. 原级测量标准（简称原级标准）

使用原级参考测量程序或约定选用的一种人造物品建立的测量标准。

在化学计量中，物质的量浓度的原级测量标准由将已知物质的量的化学成分溶解到已知体积的溶液中制备而成；气体组分含量标准的原级测量标准根据各气体组分的摩尔质量通过称量法混合制备而成。

5. 次级测量标准（简称次级标准）

通过用同类量的原级测量标准对其进行校准而建立的测量标准。

次级标准常常是与相同特性或量的原级测量标准比对而赋予特性值和不确定度的测量标准。

6. 参考测量标准（简称参考标准）

在给定机构或给定地区内指定用于校准或检定同类量其他测量标准的测量标准。

在我国，参考测量标准按其法律地位、使用和管辖范围不同，可以分为社会公用计量标准、部门计量标准和企事业单位计量标准。在给定地区实施计量监督时具有公证作用，

作为统一本地区量值依据的参考测量标准称为社会公用计量标准。

7. 工作测量标准（简称工作标准）

用于日常校准或检定测量仪器或测量系统的测量标准。

一般部门计量标准和企事业单位计量标准大多属于工作标准。我国计量管理中，将准确度低于计量基准的次级测量标准、参考测量标准和工作测量标准统称为计量标准。

8. 本征测量标准（简称本征标准）

基于现象或物质固有和可复现的特性建立的测量标准。

本征测量标准过去习惯称自然标准，其给定量值和不确定度通过协议（如国际文件）给定，不需要通过与同类的其他测量标准的关系确定。例如，在化学计量中，纯铜、纯铝的样本作为（金属）电导率的本征测量标准；光谱分析仪器波长标准物质，如光谱灯的发射谱线、1,2,4-三氯苯试剂、萘试剂、聚苯乙烯薄膜、氧化钛溶液的吸收波长都是本征测量标准。这些“本征”参考波长值通常在光谱仪器的检定规程、校准规范或相关技术标准中直接给出。

“本征”固有和可复现的特性并不意味着本征测量标准可以不精心地操作、使用和维护。

9. 计量标准的溯源性

通过文件规定的不间断的比较链，将计量标准所复现的参考量值与规定的参照对象，通常是与（国家）计量基准或国际测量标准联系起来特性，不间断的比较链是指不确定度不间断。我国计量标准的量值采用检定或校准的方式溯源至计量基准或社会公用计量标准；当不能采用检定或校准方式溯源时，应当通过计量比对的方式确保计量标准量值的一致性。

10. 计量标准的测量范围

JJF 1033—2016《计量标准考核规范》中的定义为：在规定条件下，由具有一定的仪器不确定度的计量标准能够测量出的同类量的一组量值。

VIM 2007（ISO/IEC GUIDE 99：2007《国际计量学词汇——基础通用的概念和相关术语》）中没有计量标准的测量范围的定义。

计量标准的测量范围可理解为：在规定条件下，计量标准以一定的不确定度实现、保存及复现同类参照对象的一个或一组量值。

11. 计量标准的不确定度

JJF 1033—2016中的定义为：在检定或校准结果的不确定度中，由计量标准引入的测量不确定度分量。它包括计量标准器及配套设备所引入的不确定度。

根据计量标准的定义，计量标准实现、复现的量值具有一定的不确定度是计量标准自身的特性，计量标准的不确定度与计量标准是否用于检定、校准或用于其他任何测量、用途无关。不应把计量标准的不确定度局限地定义为“在检定或校准结果的不确定度中，由计量标准引入的测量不确定度分量”。

12. 计量标准的准确度等级

在规定工作条件下，符合规定的计量要求，使计量标准的测量误差或不确定度保持在规定极限内的计量标准的等别或级别。

“等”与“级”是计量器具在使用时由计量特性确定的。“级”根据示值误差大小确

定, 表明示值误差的档次, 按计量器具的标称值使用; “等” 根据量值、示值的扩展不确定度大小确定, 表明量值扩展不确定度的档次, 按该计量器具检定、校准证书上给出的量值使用。

13. 计量标准的最大允许误差

对给定的计量标准, 由规范或规程所允许的, 相对于已知参考量值的测量误差的极限值。

14. 计量标准的稳定性

计量标准保持其计量特性随时间恒定的能力。

在计量标准考核中, 计量标准的稳定性通常用其计量特性在规定时间间隔内发生的变化量表示。稳定性是计量标准最重要的基本特性。

三、测量仪器的主要特性

1. 被测量

拟测量的量。

被测量是拟接受测量的量。化学分析的被测量是某物质中某组分的含量。

2. 影响量

在直接测量中不影响实际被测的量, 但会影响示值与测量结果之间关系的量。

3. 示值

由测量仪器或测量系统给出的量值。

分析仪器的示值与相应的被测量(输入量)不必是同类量的值。如分光光度计的被测量是物质某组分的含量, 而示值则是透射比或吸光度。

4. 测得的量值(又称量的测得值)

代表测量结果的量值。

测得值通常并不是“测量结果”, 代表测量结果的测得值往往是通过重复测量得到的一组测得值的平均值, 此测得值通常附有一个与单个测得值相比已减小了的与其相关联的测量不确定度, 即平均值的 uncertainty。人们习惯上将测得的量值表述为“实际值”“测量值”“校准值”“检定值”“测定值”“估计值”“最佳估计值”等, 这些表述没有明确的计量学的定义, 容易引起误解。

5. 测量结果

与其他有用的相关信息一起赋予被测量的一组量值。

注意定义中的测量结果是“一组量值”, 而检定或校准报告的结果通常报告的是单个值, 因此检定或校准报告的结果应该包含报告的单个量值的“相关信息”, 即报告这单个测得的量值的测量不确定度。对于一般的检定或校准, 当测得值的 uncertainty 小于计量器具允许误差的 $1/3$ 时, 被认为测得值的测量 uncertainty 可忽略, 测量结果可表示为单个测得的量值。但化学计量中检定或校准测得值的 uncertainty 往往超过测量仪器允许误差的 $1/3$, 其 uncertainty 的影响不可以忽略不计, 因此在大多数情况下, 化学计量检定的测量结果只报告单个值而不报告该量值的 uncertainty 的做法是不妥当的。

6. 参考量值(简称参考值)

用作与同类量的值进行比较的基础的量值。

在检定或校准中，测量标准复现的量值称为输入量的参考量值，化学计量的参考量值通常为带有测量不确定度的一种物质复现的量值，如有证标准物质的特性量值。

参考量值习惯上常被表述为“真值”“约定真值”“实际值”“校准值”“标准值”，这些称谓没有明确的定义，容易引起误解，有些表述本身就是错误的概念，应该避免使用。

7. 测量误差（简称误差）

测得的量值减去参考量值。

8. 示值误差

测量仪器示值与对应输入量的参考量值之差。

VIM 2007 中对测量仪器特性表述已不使用“示值误差”这个术语，但在我国，因为计量检定规程以及校准规范中已习惯将示值误差作为考核计量器具性能的主要指标，JJF 1001—2011《通用计量术语及定义》根据此情况保留了测量仪器的“示值误差”这一术语。但必须明确的是，所谓“示值误差”并不是测量仪器示值的“误差”，它只是仪器示值误差中的已定系统误差分量。VIM 2007 和 JJF 1001 在描述测量仪器计量准确度特性时，对于仪器的系统误差，引入了更明确的术语“仪器偏移”。

9. 偏移（又称偏倚）

系统测量误差的估计值。

在环境、电力、石化、数据处理等领域的十几个国家标准中，“偏移”多翻译为“偏倚”，这个术语已经广泛采用了二十多年，它们定义的含义是完全相同的。定义中的“估计值”并不是说系统测量误差是“估计”得到的，只是表明测量得到的系统测量误差只是一个近似的值。

10. 仪器偏移

重复测量示值的平均值减去参考量值。

11. 仪器的测量不确定度

由所用的测量仪器或测量系统所引起的测量不确定度的分量。

除原级测量标准采用其他方法外，仪器的不确定度通过对测量仪器或测量系统校准得到。在规定的参考条件下进行仪器校准时，输入的参考值被认为是不变的，在环境等影响可以忽略的参比条件下，仪器示值的变动是仪器自身电气、机械特性引起的，此时仪器示值的变动评定的测量不确定度就是仪器的测量不确定度。

12. 测量误差与测量不确定度

当今测量理论和测量数据的处理方法主要有“误差法（有时称为传统法或真值法）”“不确定度方法”“IEC 法”。传统“误差法”认为真值是唯一的，测量的目的是确定尽可能接近单一真值的测得值，该值与真值的偏差由随机误差和系统误差组成，通常假定这两种误差可以识别并用不同的方式处理。然而，随机量值用“误差”表示是否合理，如何将系统误差同随机变动的量合成得到测得值的总误差并没有规则可循，同时，由于真值是不可知的，测得值的误差也只是作为估计的值，测得值也常被称为“估计值”，但测得值的误差通常仅能“估计”出总误差绝对值的上限，这个估计值的误差也并未表征出未定系统误差和随机误差部分，这些问题使“误差法”理论遇到了很大的困惑。虽然测量误差的定义已修改为“测得的量值减去参考量值”，但是在实际测量中“参考量值”的确定仍然是一个令人困惑的问题，只有在计量检定或校准中，测量标准复现的量值才被认为是

单个参考量值，此时计量器具的误差是可知的。但在绝大多数测量中，被测量难以确定或不存在“参考量值”，测得值的“品质”不可能用“测量误差”进行评价。因此，当今测量理论和测量数据的处理方法逐步向“不确定度方法”发展。“不确定度方法”认为不可能通过测量得到“真值”，而是假定测量程序没有错误的情况下，测量能获得被测量合理区间内定义一致的一组值，附加的有用信息可缩小合理赋予被测量量值的区间，但即使最完善的测量也不能无限缩小分散区间而使测得值为单一值，这也就是现今对“测量结果”的定义。测量结果通常可以用单一测得值（如一组测得值的平均值）与该值的相关信息（主要是不确定度）表征。“误差方法”或“不确定度方法”都认为真值是存在的，但实际上是不可知的。而IEC法则认为既然真值是不可知的，则完全不必提及真值，通过测量方法校准得到单一测得值，并给出被测量值的分布区间，用校准所证实的计量特性来确认结果的兼容性，依靠测量结果计量兼容性评定测量结果的有效性，IEC法的处理与“不确定度方法”是基本一致的。随着科学技术的发展，测量数据的处理方法正在由“误差方法”向“不确定度方法”转化。

13. 测量仪器的稳定性（简称稳定性）

测量仪器保持其计量特性随时间恒定的特性。

稳定性可以用计量特性变化到某个规定的量所经过的时间间隔表示，也可以用特性在规定时间内发生的变化表示。仪器的稳定性常常用仪器示值的漂移表示。

14. 仪器漂移

由于测量仪器计量特性的变化引起的示值在一段时间内的连续或增量变化。

仪器漂移既与被测量的变化无关，也与任何认识到的影响量的变化无关，是仪器自身的工作特性不稳定引起的，不应把仪器工作时各影响量变动引起的示值变动称为仪器漂移。但在实际检定或校准中，由于并没有规定控制严格的参比条件，因而检定或校准测量所得到的漂移往往包含了影响量变动引起的示值变化，测得的仪器漂移往往并不是真实的仪器漂移。对于化学分析仪器，通常认为24h内的漂移是短期漂移。对于连续检测仪器、在线仪器，通常要求时间间隔为7天~3个月的长期漂移。

15. 阶跃响应时间（简称响应时间）

测量仪器或测量系统的输入量值在两个规定常量值之间发生突然变化的瞬间，到与相应示值达到其最终稳定值的规定极限内时的瞬间，这两者间的持续时间。

16. 测量仪器的校正（简称校正）

利用测量数据建立测量体系的模型，并对模型中的常量进行估计，将测量系统的响应转换为需研究的量的过程。测量仪器的校正可以包括线性及非线性、单变量及多变量校正等。

分析仪器检定合格只是表明仪器的“测量误差”在规程所允许的极限范围内，实际工作中还必须对仪器进行校正才能得到正确的测量结果。

17. 测量仪器的调整（简称调整）

为使测量仪器提供相应于给定被测量的指定示值，在测量仪器上进行的一组操作。

测量仪器的调整类型包括：零位调整、偏置量调整、量程（示值）调整（有时称为增益、灵敏度调整）。

18. 校准曲线

物质的特定性质、体积、浓度等和测得值或显示值之间关系的曲线。

校准曲线表示了示值与被测量值间一对一的关系，可以由被测量的示值计算出被测量的量值。

19. 相关系数

表征变量之间线性相关程度的量，一般用字母 r 表示。由于研究对象的不同，相关系数有多种定义方式。仪器分析中，通常将输入量同输出量间线性相关关系的统计指标称为相关系数。

20. 线性

测试系统的输出与输入系统能否像理想系统那样保持正常值比例关系的一种度量。

21. 线性误差

分析仪器的线性误差通常用校准曲线（实测曲线）值与拟合理想直线（理想直线）值间的最大偏差表示。

校准曲线上各输入点测得的线性误差是不相同的，为了便于检定或校准结果的比较，在计量检定规程或校准规范中常常规定某一输入点的线性误差为检定结果，在报告线性误差时，必须说明是校准曲线什么测量点的线性误差。

相关系数大小与线性误差大小并没有对应关系。相关系数接近于 1 的程度与数据组数 n 相关，当 n 较小时，相关系数的波动较大，相关系数容易接近于 1，这也容易给人一种这曲线测量误差小的假象。此时，仅凭相关系数较大就判定变量 x 与 y 之间有密切的线性关系是不妥当的。例如：原子吸收分光光度计检定规程规定的工作曲线输入量的点数 n 为 4，当工作曲线的相关系数达到检定合格规定的 0.997 时，曲线上某些点的线性相对误差可能达到 100% 以上。

22. 示值区间（又称示值范围）

极限示值界限内的一组量值。

示值区间通常可以计量器具的最小和最大量值涵盖的区间表示。

23. 测量区间（又称测量范围）

在规定条件下，由具有一定的仪器不确定度的测量仪器或测量系统能够测量出的一组同类量的量值。

测量范围是按要求的准确度（误差，不确定度）能够定量测量的被测量的量值范围，测量范围下限不应与示值区间下限相混淆。例如：仪器示值区间是 0 ~ 1000，如果该仪器的误差是满量程的 $\pm 1\%$ ，则该仪器任意示值的误差都可能达到 ± 10 ，若测量结果要求相对误差不大于 $\pm 5\%$ ，则测量范围的下限是 200，此时仪器测得值的相对误差为 $\pm (10/200) \times 100\% = \pm 5\%$ ，当测得值小于 200 时，测量结果的相对误差会大于 $\pm 5\%$ ，因此，此测量仪器在相对误差不大于 $\pm 5\%$ 时的测量范围是 200 ~ 1000。

24. 分辨力

引起相应示值产生可觉察到变化的被测量的最小变化。

25. 检出限 [又称检测（下）限]

目前，国际、国内对检出限 [检测（下）限] 没有统一的定义，各种标准中检出限及计算方法也不一致。检出限一般可分为仪器检出限（IDL）、分析方法检出限（MDL）

和“定量下限”(RQL)。国际理论与应用化学联合会(IUPAC)1998年发表的《分析术语指南》中对分析方法检出限作如下规定:检出限以浓度(或质量)表示,是指由特定的分析步骤能够合理地检测出的最小分析信号 x_L 求得的最低浓度 c_L (或质量 q_L)。MDL一般由式(1-1)确定:

$$MDL = x + ks/S \quad (1-1)$$

式中: x ——空白多次测得信号对应量值的平均值,空白指与待测样品组成完全一致但不含待测组分的样品;

s ——足够多次空白测量的标准偏差;

S ——测量方法在低含量时的灵敏度(低含量时校准曲线的斜率);

k ——根据所需的包含概率选定的常数为包含因子。

为了正确评估 x 和 S ,测定次数必须足够多,如 $n \geq 20$ 。IUPAC要求用灵敏度 S 测量检出限时,校准曲线测量的低含量应不大于预期检出限的10倍,以单一含量确定灵敏度 S 时,单一含量应不大于预期检出限的5倍。

仪器检出限是指分析仪器能够检测的被分析物的最低量(含量或质量),这个量不考虑任何样品制备处理的影响,只考虑分析仪器能测出的与噪声或空白的响应值相区别的小信号。因此,仪器检定、校准求得的检出限常可用于不同仪器测量能力的比较。我国色谱和质谱分析将仪器检出限规定为在检测器上产生相当于2倍基线噪声信号时相当的含量(浓度或质量),光谱仪器常将相当于3倍空白测量响应值的标准偏差对应的含量(浓度或质量)作为仪器的检出限。应注意,现在有一些规程、规范在计算仪器检出限时,采用较高含量的标准物质测得仪器的灵敏度 S ,这是不符合IUPAC和ISO推荐的检出限测量方法的要求的。

检出限定义中的所谓“检出”是指“定性”检出,测量得到的某物质的检出限量值并不具有“定量”的意义。检出限置信水平约为90%,不是说检出限测得值的置信水平,而是表示以此量值判定样品中被测量成分“检出”“未检出”这个结论的置信水平约为90%。

同一测量方法,同一测量仪器,测量不同物质的响应信号是不相同的,计算得到的检出限也不相同,因此在报告检出限时必须明确报告是什么物质的检出限,必要时还应报告检出限测量的测量条件等相关信息。

能够正确定量测定的量称为“定量下限”(RQL),即在测量不确定度(测量误差)能满足预定要求的前提下,用特定方法能准确地定量测定待测物质的最小量(浓度或质量)。

各国、各标准对“定量下限”(RQL)量值的确定并没有统一的规定,美国EPA SW-846(固体废弃物化学物理分析方法)规定4MDL、英国环保和全球环境监测系统水监测操作指南规定4.6MDL、美国自然资源办公室规定5MDL、日本JIS规定10MDL为定量下限(RQL)。ISO建议逐步降低被测量的含量进行测量,以测得值的相对标准偏差达到10%时的含量为仪器该测量的定量下限,IUPAC推荐以空白测得值标准偏差的10倍相对应的被测量的含量作为仪器分析的定量下限,我国一般也都采用IUPAC的建议。

有关痕量分析中报告数据的一般准则见表1-1。