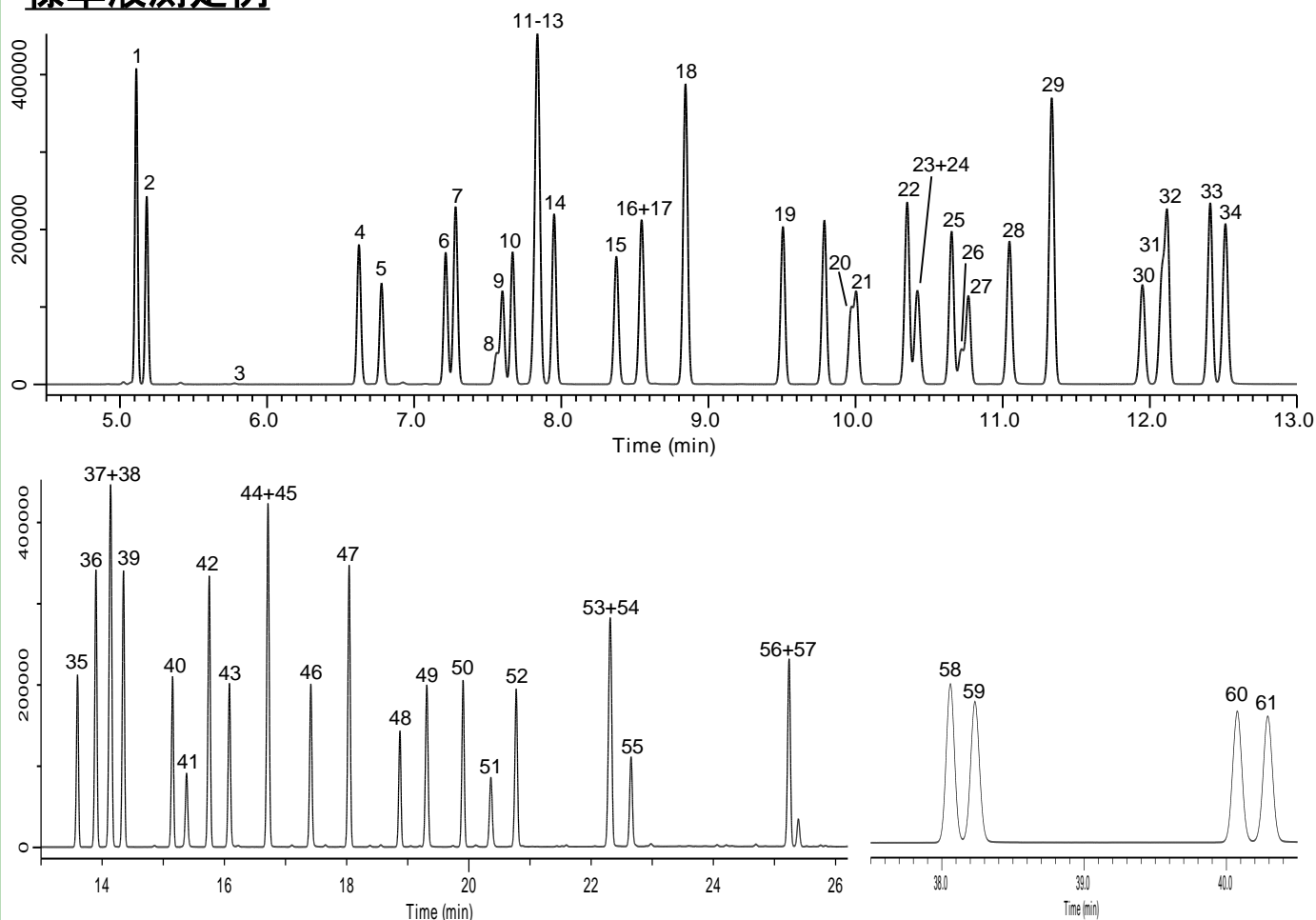


保持指標とは、直鎖アルカンの炭素数を基準とし、直鎖アルカンと対象成分の保持比を相対的に表した指標であり、定性分析に非常に有効な情報の一つとなります。

恒温分析では直鎖アルカンの保持比の対数が、昇温分析では直鎖アルカンの保持比が直鎖アルカンの炭素数と直線関係があることから、保持指標を求めることができます。

今回はInertCap WAXを使用して、有機溶剤61成分の昇温分析及び恒温分析での保持指標を求めましたので、ご紹介致します。

標準液測定例



Conditions

System : GC-FID
Column : InertCap WAX
 0.25 mm I.D. × 60 m df = 0.25 μm
Col. Temp. : 40 °C - 5 °C/min - 220 °C
Carrier Gas : He 160 kPa
Injection : Split flow 150 mL/min
 240 °C
Detection : FID Range 10¹⁰
 240 °C
Sample Size : Mixed evenly
 0.2 μL

上記クロマト条件。

恒温分析条件は、線速度が一定になるように圧力を調節。

昇温分析における保持指標

ピークNo.	ピーク名	保持指標	保持時間	ピークNo.	ピーク名	保持指標	保持時間
1	<i>n</i> -Hexane	599	5.122	34	2-Methyl-1-propanol (Isobutyl alcohol)	1093	12.526
2	Ethyl ether	616	5.189	35	Isopentyl acetate (Isoamyl acetate)	1126	13.612
3	Carbon disulfide	735	5.813	36	Ethylbenzene	1135	13.922
4	Acetone	820	6.632	37	1-Butanol	1142	14.145
5	Methyl acetate	831	6.784	38	<i>p</i> -Xylene	1143	14.168
6	<i>trans</i> -1,2-Dichloroethylene	861	7.218	39	<i>m</i> -Xylene	1149	14.375
7	Tetrahydrofuran	866	7.293	40	<i>n</i> -Pentyl acetate	1173	15.172
8	Carbon tetrachloride	885	7.576	41	2-Methoxyethanol (Methyl cellosolve)	1179	15.394
9	1,1,1-Trichloroethane	888	7.613	42	<i>o</i> -Xylene	1190	15.730
10	Ethyl acetate	893	7.676	43	3-Methyl-1-butanol (Isoamyl alcohol)	1201	16.108
11	Methanol	902	7.821	44	2-Ethoxyethanol (Cellosolve)	1219	16.670
12	<i>tert</i> -Butanol	903	7.838	45	Chlorobenzene	1219	16.686
13	Isopropyl acetate	903	7.862	46	1-Pentanol(Amyl alcohol)	1243	17.441
14	Methyl ethyl ketone	908	7.954	47	Styrene	1263	18.070
15	2-Propanol (Isopropyl alcohol)	927	8.381	48	2-Ethoxyethyl acetate (Cellosolve acetate)	1289	18.898
16	Ethanol	935	8.549	49	Cyclohexanone	1301	19.292
17	Dichloromethane	935	8.549	50	1-Methylcyclohexanol	1321	19.938
18	Benzene	949	8.862	51	<i>N,N</i> -Dimethylformamide	1333	20.310
19	<i>n</i> -Propyl acetate	979	9.525	52	4-Methylcyclohexanone	1349	20.810
20	<i>cis</i> -1,2-Dichloroethylene	1000	9.967	53	2-Butoxyethanol (Butyl cellosolve)	1394	22.259
21	Trichloroethylene	1001	10.020	54	Cyclohexanol	1395	22.293
22	4-Methyl-2-pentanone (MIBK)	1014	10.366	55	<i>N,N</i> -Dimethylacetamide	1406	22.614
23	Acetonitrile	1016	10.425	56	1,1,2,2-Tetrachloroethane	1502	25.248
24	Isobutyl acetate	1018	10.468	57	1,2-Dichlorobenzene	1503	25.268
25	2-Butanol	1025	10.659	58	<i>o</i> -Cresol	2029	38.084
26	Chloroform	1027	10.719	59	Phenol	2036	38.256
27	Tetrachloroethylene	1029	10.779	60	<i>p</i> -Cresol	2112	40.101
28	1-Propanol	1039	11.054	61	<i>m</i> -Cresol	2121	40.316
29	Toluene	1050	11.348				
30	1,4-Dioxane	1072	11.967				
31	1,2-Dichloroethane	1077	12.087				
32	<i>n</i> -Butyl acetate	1078	12.138				
33	2-Hexanone(MBK)	1089	12.434				

昇温分析の場合・・・

※保持時間の単位：分

直鎖アルカンの保持比と直鎖アルカンの炭素数が直線関係にあるので、保持指標は以下の式で表される。

$$\text{保持指標 } I = 100 \times \frac{t_R - t_{R(Z)}}{t_{R(Z+1)} - t_{R(Z)}} + 100 \times Z$$

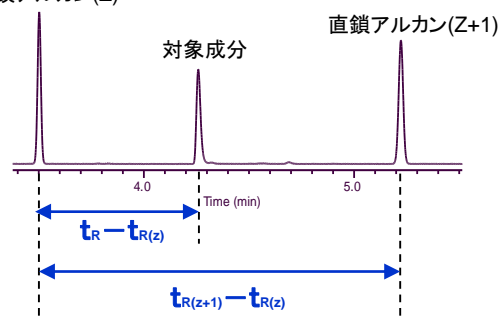
t_R =対象成分の保持時間

$t_{R(Z)}$ =対象成分の前に出てくる直鎖アルカンの保持時間

$t_{R(Z+1)}$ =対象成分の後に出てくる直鎖アルカンの保持時間

Z =保持時間 $t_{R(Z)}$ の直鎖アルカンの炭素数

直鎖アルカン(Z)



恒温分析における保持指標－1

昇温時の ピーク順序	ピーク名	40℃		80℃		120℃		160℃	
		保持指標	保持時間	保持指標	保持時間	保持指標	保持時間	保持指標	保持時間
1	<i>n</i> -Hexane	600	5.102	597	4.613	600	4.388	608	4.192
2	Ethyl ether	623	5.149	619	4.638	620	4.398	625	4.175
3	Carbon disulfide	734	5.937	758	4.916	788	4.537	814	4.250
4	Acetone	823	7.274	829	5.192	837	4.605	848	4.290
5	Methyl acetate	837	7.522	838	5.232	839	4.608	844	4.268
6	<i>trans</i> -1,2-Dichloroethylene	867	8.395	868	5.402	870	4.662	865	4.282
7	Tetrahydrofuran	866	8.348	885	5.512	903	4.729	920	4.325
8	Carbon tetrachloride	885	8.953	895	5.583	905	4.735	925	4.329
9	1,1,1-Trichloroethane	886	8.984	899	5.613	911	4.748	923	4.328
10	Ethyl acetate	893	9.244	894	5.582	894	4.711	891	4.301
11	Methanol	903	9.590	899	5.616	890	4.702	879	4.292
12	<i>tert</i> -Butanol	907	9.752	893	5.573	878	4.678	875	4.308
13	Isopropyl acetate	904	9.663	904	5.651	900	4.724	897	4.306
14	Methyl ethyl ketone	905	9.708	915	5.746	925	4.781	929	4.333
15	2-Propanol (Isopropyl alcohol)	934	11.023	923	5.809	909	4.744	897	4.306
16	Ethanol	941	11.387	933	5.905	923	4.777	912	4.318
17	Dichloromethane	940	11.449	939	5.956	940	4.819	933	4.337
18	Benzene	945	11.690	964	6.224	982	4.945	1000	4.408
19	<i>n</i> -Propyl acetate	980	13.977	983	6.460	984	4.954	987	4.393
20	<i>cis</i> -1,2-Dichloroethylene	998	15.572	1003	6.726	1008	5.040	1014	4.426
21	Trichloroethylene	997	15.381	1007	6.788	1016	5.071	1028	4.445
22	4-Methyl-2-pentanone (MIBK)	1009	16.445	1021	7.014	1032	5.135	1044	4.467
23	Acetonitrile	1011	16.613	1024	7.056	1037	5.158	1053	4.480
24	Isobutyl acetate	1017	17.283	1021	7.011	1023	5.099	1032	4.468
25	2-Butanol	1030	18.557	1023	7.037	1013	5.057	1000	4.408
26	Chloroform	1027	18.444	1031	7.178	1033	5.142	1036	4.455
27	Tetrachloroethylene	1021	17.662	1040	7.342	1059	5.263	1070	4.487
28	1-Propanol	1044	20.178	1038	7.311	1030	5.126	1026	4.442
29	Toluene	1040	19.755	1061	7.757	1082	5.382	1094	4.528
30	1,4-Dioxane	1062	22.597	1081	8.212	1100	5.486	1122	4.601
31	1,2-Dichloroethane	1075	24.559	1081	8.218	1090	5.428	1106	4.570
32	<i>n</i> -Butyl acetate	1078	25.039	1082	8.227	1085	5.398	1079	4.502
33	2-Hexanone(MBK)	1083	25.777	1094	8.543	1106	5.522	1109	4.555

※保持時間の単位:分

恒温分析の場合・・・

直鎖アルカンの保持比の対数と直鎖アルカンの炭素数が直線関係にあるので、保持指標は以下の式で表される。

$$\text{保持指標 } I = 100 \times \frac{\log t'_R - \log t'_{R(Z)}}{\log t'_{R(Z+1)} - \log t'_{R(Z)}} + 100 \times Z$$

t_R =対象成分の保持時間

$t_{R(Z)}$ =対象成分の前に出てくる直鎖アルカンの保持時間

$t_{R(Z+1)}$ =対象成分の後に出てくる直鎖アルカンの保持時間

Z =保持時間 $t_{R(Z)}$ の直鎖アルカンの炭素数

t'_R =補正保持時間 $t'_R = t_R - t_0$

t_0 =ホールドアップタイム(非保持成分の溶出時間)

恒温分析における保持指標－2

昇温時の ピーク順序	ピーク名	40℃		80℃		120℃		160℃	
		保持指標	保持時間	保持指標	保持時間	保持指標	保持時間	保持指標	保持時間
34	2-Methyl-1-propanol (Isobutyl alcohol)	1098	28.408	1091	8.464	1082	5.384	1079	4.522
35	Isopentyl acetate (Isoamyl acetate)	1122	34.836	1130	9.646	1136	5.727	1144	4.665
36	Ethylbenzene	1119	34.016	1143	10.110	1165	5.961	1185	4.728
37	1-Butanol	1146	40.928	1144	10.169	1139	5.755	1133	4.625
38	<i>p</i> -Xylene	1126	35.768	1150	10.403	1174	6.042	1192	4.748
39	<i>m</i> -Xylene	1131	37.315	1156	10.651	1181	6.102	1200	4.768
40	<i>n</i> -Pentyl acetate	1170	50.041	1178	11.614	1185	6.142	1186	4.730
41	2-Methoxyethanol (Methyl cellosolve)	1169	49.163	1184	11.947	1199	6.277	1212	4.823
42	<i>o</i> -Xylene	1169	49.865	1197	12.588	1225	6.567	1251	4.928
43	3-Methyl-1-butanol (Isoamyl alcohol)	1204	65.220	1206	13.092	1205	6.342	1201	4.792
44	2-Ethoxyethanol (Cellosolve)	1210	68.302	1225	14.230	1237	6.718	1248	4.937
45	Chlorobenzene	1197	61.774	1224	14.194	1254	6.940	1280	5.035
46	1-Pentanol(Amyl alcohol)	1245	90.214	1248	15.847	1248	6.858	1237	4.882
47	Styrene	1238	85.588	1264	17.059	1290	7.482	1314	5.175
48	2-Ethoxyethyl acetate (Cellosolve acetate)	1291	130.916	1295	19.867	1297	7.606	1296	5.098
49	Cyclohexanone	1254	97.037	1296	20.033	1338	8.410	1380	5.522
50	1-Methylcyclohexanol	—	—	1322	22.918	1337	8.393	1353	5.368
51	<i>N,N</i> -Dimethylformamide	1296	135.198	1328	23.693	1359	8.908	1389	5.573
52	4-Methylcyclohexanone	1293	132.801	1336	24.760	1378	9.415	1422	5.810
53	2-Butoxyethanol (Butyl cellosolve)	—	—	1394	34.407	1419	10.356	1423	5.819
54	Cyclohexanol	—	—	1394	34.468	1420	10.386	1427	5.850
55	<i>N,N</i> -Dimethylacetamide	—	—	1394	34.360	1436	10.892	1454	6.091
56	1,1,2,2-Tetrachloroethane	—	—	1516	65.713	1519	14.362	1513	6.693
57	1,2-Dichlorobenzene	—	—	1476	52.969	1519	14.362	1548	7.028
58	<i>o</i> -Cresol	—	—	—	—	2006	121.239	2021	23.460
59	Phenol	—	—	—	—	2004	120.335	2026	23.851
60	<i>p</i> -Cresol	—	—	—	—	2076	169.940	2099	30.503
61	<i>m</i> -Cresol	—	—	—	—	2083	175.611	2106	31.330

※保持時間の単位:分



ジーエルサイエンス株式会社

〒163-1130 東京都新宿区西新宿 6-22-1 新宿スクエアタワー 30F
TEL.03-5323-6611 FAX.03-5323-6622

※各試験法は、変更される場合がありますので、分析の前に確認されることをお薦めします。

データに起因し、直接的または間接的に生じたいかなる損害に対しましては、当社が責任をおうものではありません。また、記載事項につきましては、予告無しに改訂する場合がありますので、あらかじめご了承ください。

カスタマーサポートセンターでは、ノウハウのご提供と分析に関するフォローを行なっております。お困りの際には、カスタマーサポートセンターまでお気軽にお問い合わせください。

カスタマーサポートセンター (土・日・祝除く9:00-17:00)

☎ 04-2934-1100 ✉ info@gl.s.co.jp



【アプリケーションの検索はこちら】

https://www.gl.s.co.jp/technique/app/app_search.html