

ガスクロマトグラフで3成分混合液体中の各成分の質量分率を求める方法

(注意：3成分とも気化して検出器で検出される場合にのみ適用できる)

1. 標準溶液を調製し、GCの相対感度を求める。

A, B, Cの3成分の質量をそれぞれ測定して混合し、A:B:Cが質量比 $w_A : w_B : w_C$ で混合した標準溶液とする。この標準溶液をガスクロマトグラフ(GC)に打ち込むと、時間の経過に伴い図1のような出力信号が得られる。それぞれの成分で分離カラム内での移動速度が異なるので、出口(検出器)に到達するまでの所要時間が異なるためである(図2)。それぞれ成分のピーク面積(各成分の信号を積分して得られる面積) S_A, S_B, S_C を求める。このとき、ピーク面積に対する質量(感度の逆数)の相対値 $\alpha_A, \alpha_B, \alpha_C$ は次式となる。

$$\alpha_A : \alpha_B : \alpha_C = \frac{w_A}{S_A} : \frac{w_B}{S_B} : \frac{w_C}{S_C} \quad (1)$$

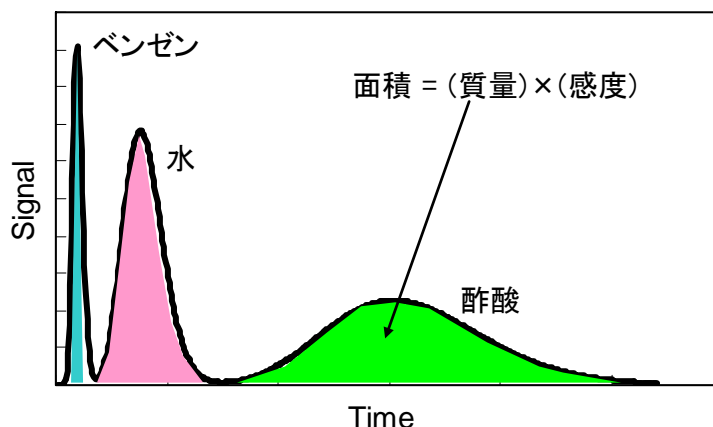


図1 GCに試料を打ち込んだときの出力信号の模式図 (分離カラムにDEGSを用いた場合。各成分のピークが現れる順番は分離カラム種類によってこれと異なることがある。)

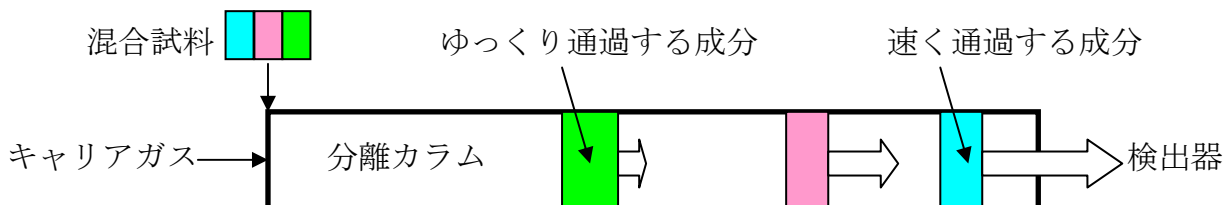


図2 GCカラム内分離の模式図

2. 未知試料溶液の組成の測定

未知試料をGCに打ち込み、それぞれの成分のピーク面積 Y_A, Y_B, Y_C を求める。このとき、1.で求めた各成分のピーク面積に対する質量(相対値)を使って、未知試料中のA, B, Cの質量の相対値 M_A, M_B, M_C が求められる。

$$M_A : M_B : M_C = \alpha_A Y_A : \alpha_B Y_B : \alpha_C Y_C \quad (2)$$

ここで3成分系溶液中の質量分率の総和が1であることを考えると、A, B, Cの質量分率 x_A, x_B, x_C は次式で求められる。

$$x_A = \frac{M_A}{M_A + M_B + M_C} = \frac{\alpha_A Y_A}{\alpha_A Y_A + \alpha_B Y_B + \alpha_C Y_C},$$

$$x_B = \frac{\alpha_B Y_B}{\alpha_A Y_A + \alpha_B Y_B + \alpha_C Y_C}, \quad x_C = \frac{\alpha_C Y_C}{\alpha_A Y_A + \alpha_B Y_B + \alpha_C Y_C} \quad (3)$$

データ整理方法(例)

黄色の部分が1次データであり、1次データを使って2次データ(水色)の部分进行計算する。

1.標準溶液を調製し、GCの相対感度を求める。

成分	①質量 [g]	②ピーク面積	質量/ピーク面積 (相対値)
A ベンゼン	① _A	② _A	(① _A /② _A)
B 水	① _B	② _B	(① _B /② _B)
C 酢酸	① _C	② _C	(① _C /② _C)

2.未知試料溶液の組成の測定

未知試料 1)

成分	ピーク面積	質量(相対値)	質量分率 [-]
A ベンゼン	③ _A	④ _A =③ _A ×(① _A /② _A)	x _A =④ _A /⑤
B 水	③ _B	④ _B =③ _B ×(① _B /② _B)	x _B =④ _B /⑤
C 酢酸	③ _C	④ _C =③ _C ×(① _C /② _C)	x _C =④ _C /⑤

質量(相対値)の総和 ⑤=④_A+④_B+④_C=_____

未知試料 2)

成分	ピーク面積	質量(相対値)	質量分率 [-]
A ベンゼン	③ _A	④ _A =③ _A ×(① _A /② _A)	x _A =④ _A /⑤
B 水	③ _B	④ _B =③ _B ×(① _B /② _B)	x _B =④ _B /⑤
C 酢酸	③ _C	④ _C =③ _C ×(① _C /② _C)	x _C =④ _C /⑤

質量(相対値)の総和 ⑤=④_A+④_B+④_C=_____

.....以下他の未知試料についても同様に質量分率を求める