

キャリアーガスを変更すると GC条件はどのように変更すればよいのか？

— 条件設定とモデルクロマトグラムの確認ができるツールをご紹介 —

第372回ガスクロマトグラフィー研究懇談会
2021/2/19（金）

Restek株式会社

海老原 卓也

Mail : Takuya.Ebihara@restek.com

条件設定に便利な2つのソフトウェア

分析条件の変更

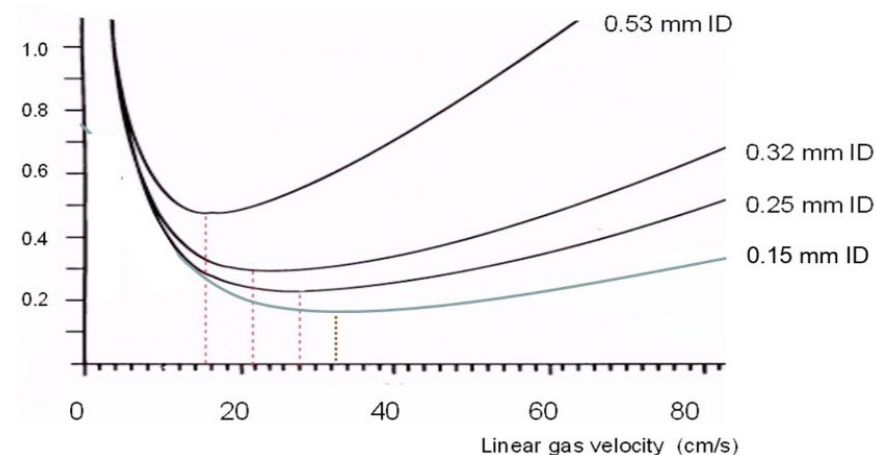
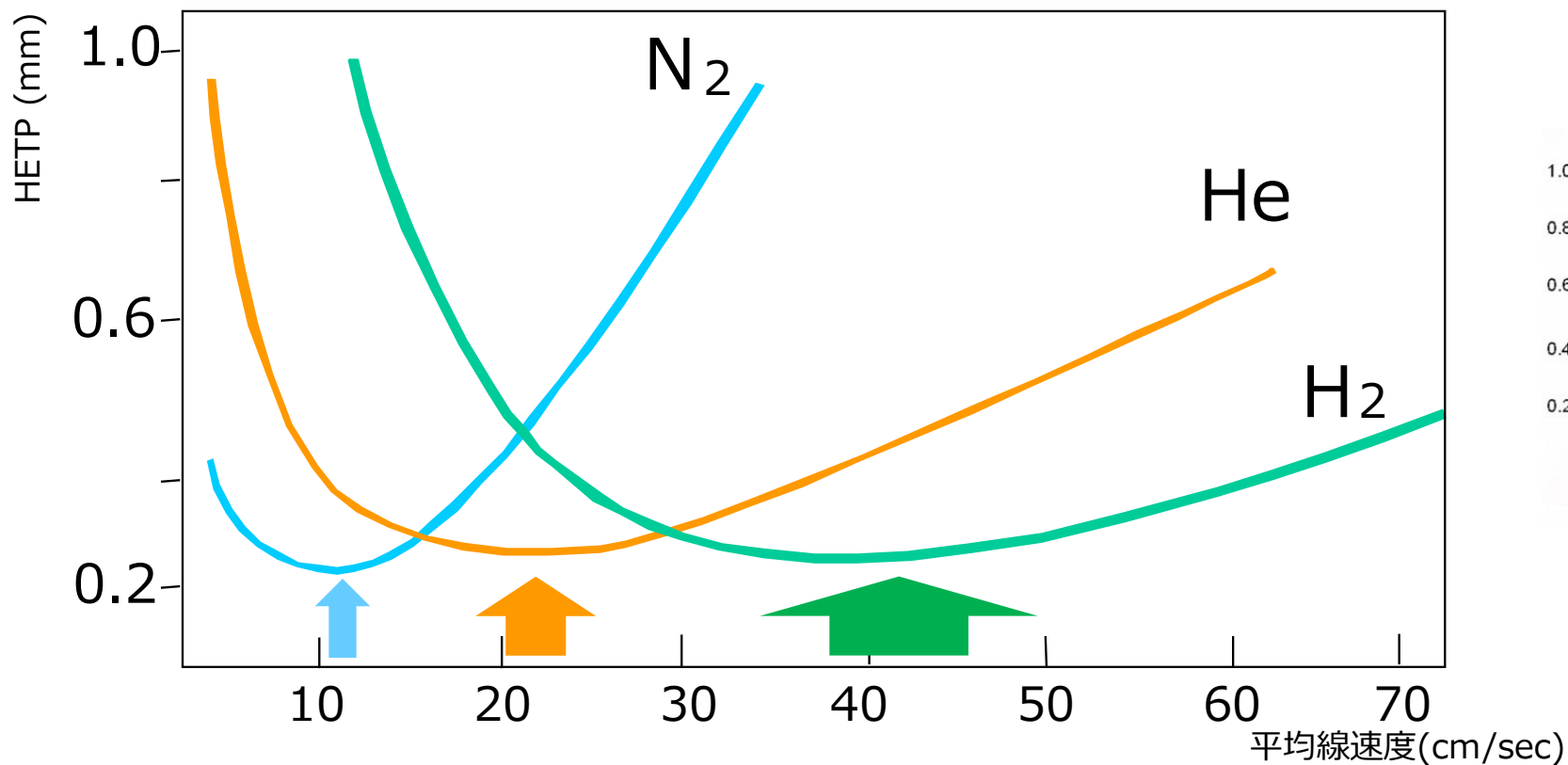
EZGC[®]
Method Translator

分離シミュレーション

Pro EZGC[®]
Chromatogram Modeler

- ※ これらのソフトは無料です。Restek社ホームページで動作します
- ※ EZGC Method Translatorは、ダウンロード版がございます
- ※ Pro EZGC Chromatogram Modelerは無料ですがユーザー登録が必要です

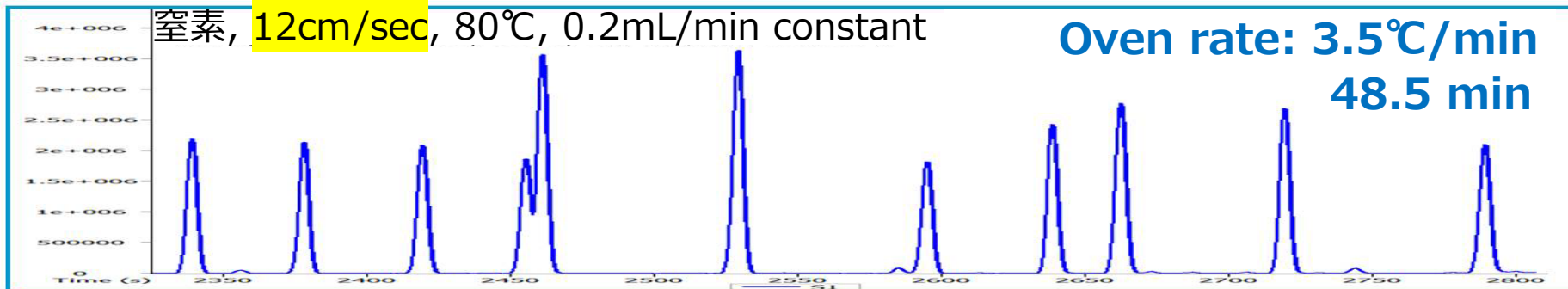
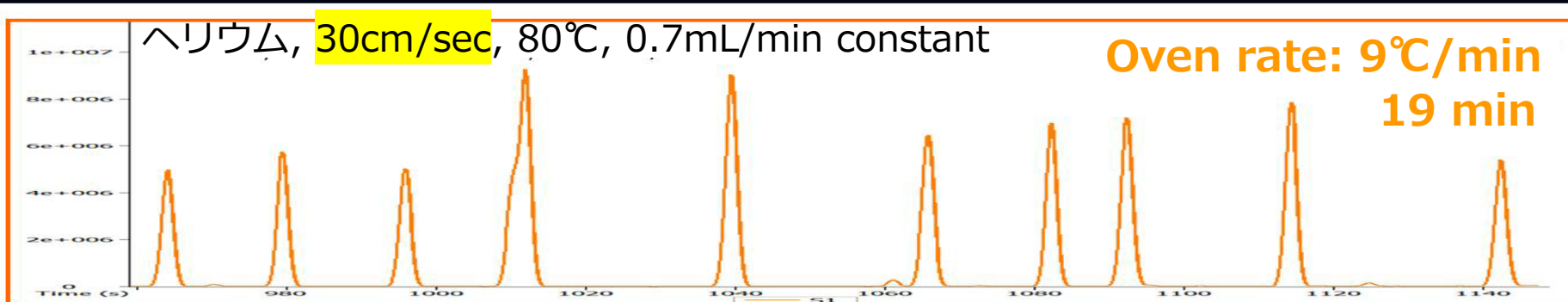
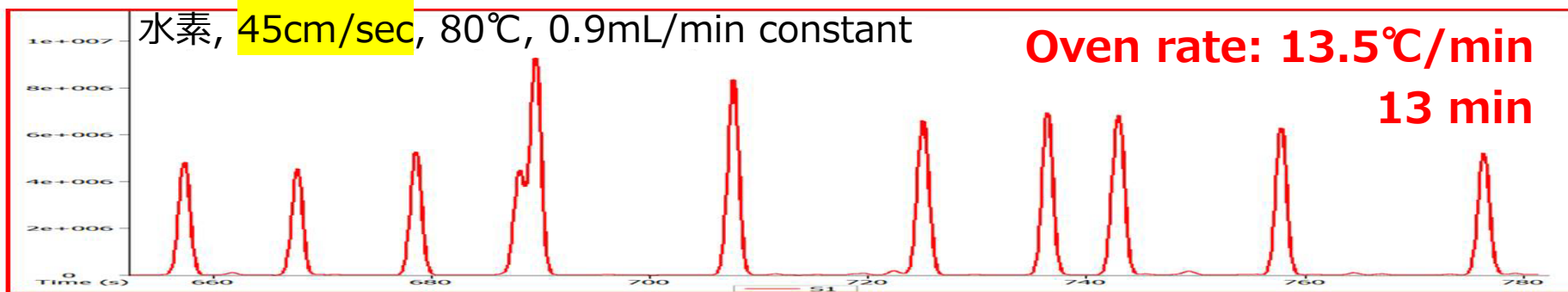
キャリアガスの種類と最適線速度



カラム内径が変わることでも最適線速度は異なる

HETP (理論段相当高さ) が最も小さくなる線速度が最も分離が良い。
水素、ヘリウム、窒素で最適線速度は異なる

キャリアーガスの種類による保持時間の違い



カラム : Rtx-CLPesticides
20m x 0.18mm, 0.18um
流量 : 各ガスの最適線速度で設定
定流量モード
検出器 : ECD

キャリアーガスを変更すると

- 最適線速度が変わるため、**流速を変更**する必要がある
- 流速が変わるとそれに応じて**昇温プログラムを変更**する必要がある
- キャリヤーガスの粘性が変わるため**圧力が変わる**



EZGC[®]
Method Translator

<https://www.restek.jp/ezgc-mtfc>

EZGC Method Translator の使い方

オリジナル (Original) に現在の条件を入力



変換後 (Translation) にキャリアガス、カラムサイズ、出口圧力を入力



青いセルに変換した流量値やオーブンプログラムが表示されます

Carrier Gas	Original	Translation
Carrier Gas	Helium	Hydrogen
Column		
Length	30.00	15.00 m
Inner Diameter	0.25	0.25 mm
Film Thickness	0.25	0.25 μm
Phase Ratio	250	250
Control Parameters		
Outlet Flow	1.40	1.75 mL/min
Average Velocity	34.01	57.77 cm/sec
Holdup Time	1.47	0.43 min
Inlet Pressure (gauge)	17.74	6.54 psi
Outlet Pressure (abs)	14.70	14.70 psi
Oven Program		
Control Method	Constant Flow	
Results		
Run Time	32.00	9.16 min
Speed		3.49 x

Carrier Gas	Original	Translation
Carrier Gas	Helium	
Column		
Length	30.00	m
Inner Diameter	0.25	mm
Film Thickness	0.25	μm
Temperature	40	°C
Control Parameters		
Outlet Flow	1.40	mL/min
Average Velocity	32.07	cm/sec
Holdup Time	1.56	min
Inlet Pressure (gauge)	15.27	psi
Outlet Pressure (abs)	14.70	psi
Inlet		
Temperature	250	°C
Liner Volume	1.00	mL
Flow	1.22	mL/min
Splitless Valve Time	1.2 to 1.7	min

EZGC Flow Calculatorは、キャリアーガス、カラムサイズを入力すると最適流量を算出

圧力単位の変更

検出器系の選択

- Atom (FIDなど大気圧系)
- Vacuum (MSなど真空系)

温度とライナー容量を入力するとスプリットレス注入時間の目安を表示

Control Methodは3つから選択可能

- 定流量
- 定線速度
- 定圧

Resultsは何を重視して変換するか

- Efficiency (分離効率を優先)
- Speed (時間短縮を優先)
- Translate (オリジナルから単に変換)
- Custom (変換後の値を手動で設定)

RESTEK

For software updates, web-based application, and technical support, visit us at...

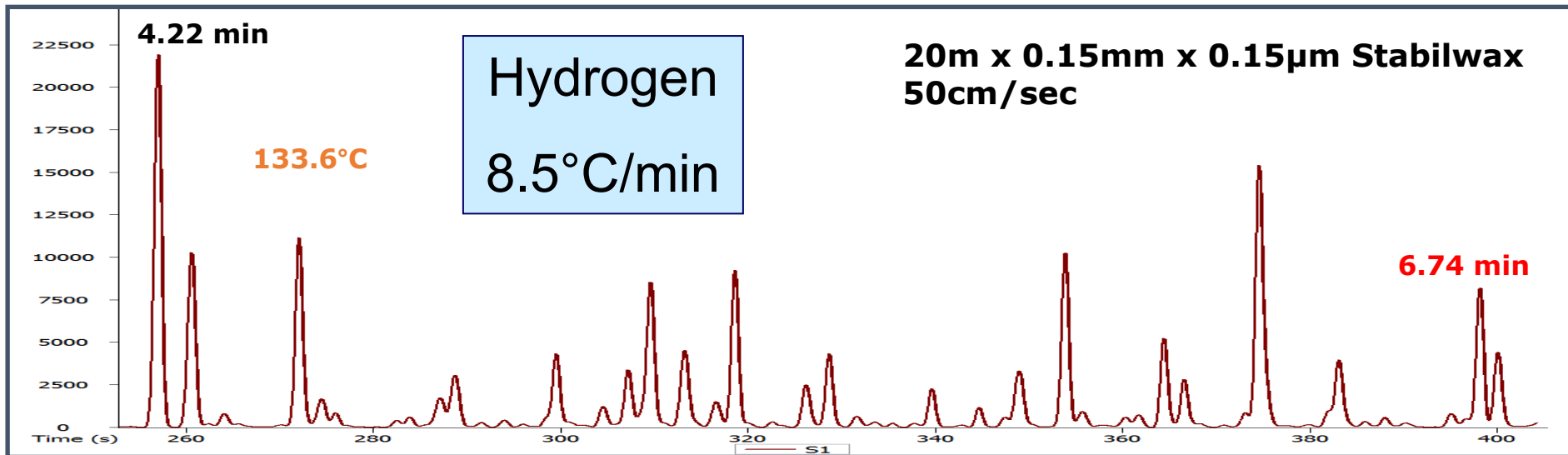
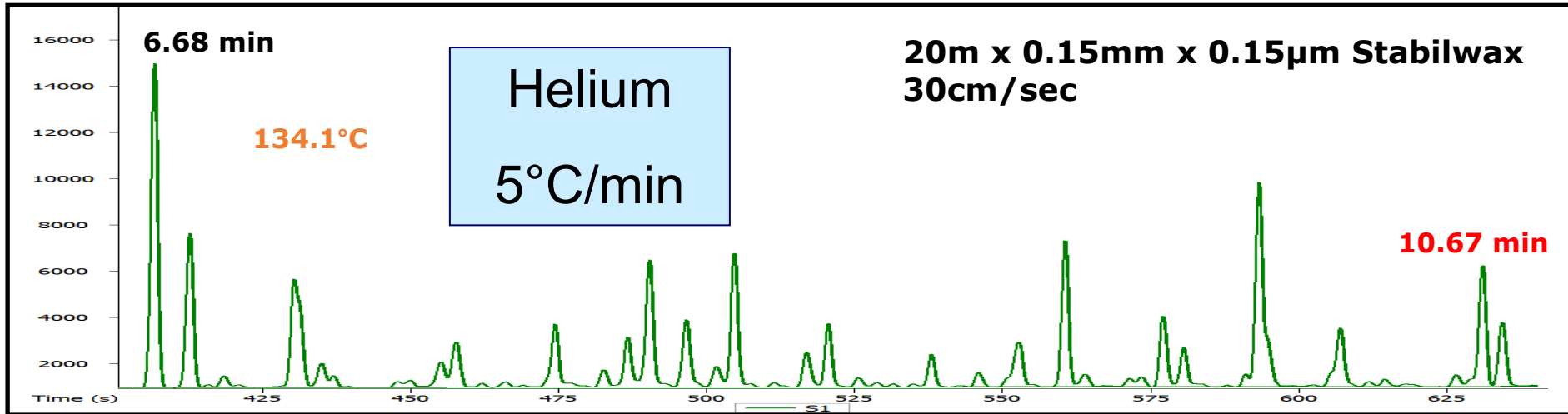
www.restek.com/ezgc-mtfc

©2020 Restek Corporation. All rights reserved.

<https://www.restek.jp/ezgc-mtfc>

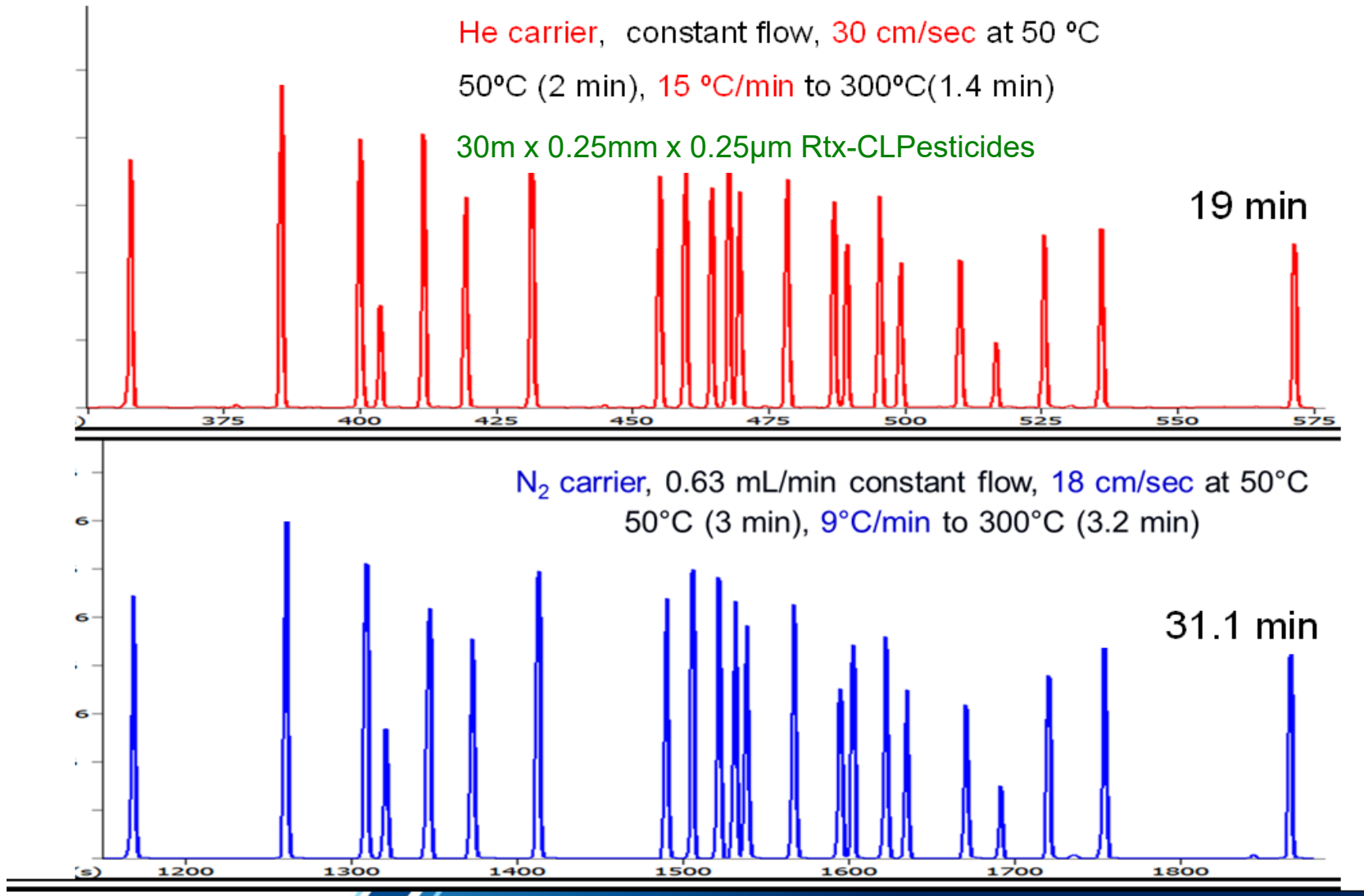
画面はダウンロード版

EZGC Method Translator 実例 ①



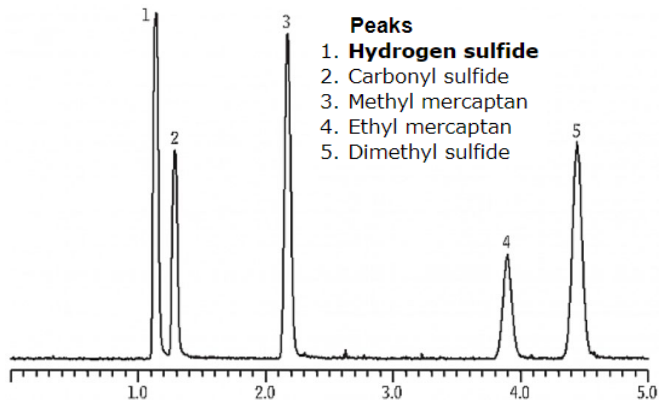
同等の分離
で条件移行

EZGC Method Translator 実例 ②



同等の分離
で条件移行

Pro EZGC クロマトグラムモデラーができること



Column
Sample Rxi-1ms, 30
Hydrogen su
dimethyl sulf
Diluent: Helium
Conc.: 100 ppbv
Injection
splitless
Inj. Temp.: 30 °C
Oven
Oven Temp.: 30 °C
Carrier Gas
He, constant
Linear Velocity: 48 cm/sec @
Detector
SCD @ 800 °C
Notes
Injection: sa

従来のアプリから得られる情報

- 固定のGCカラムの種類とサイズ
- 固定のGC条件
- 固定のピーク情報（保持時間）

条件を1から作りたい、成分を追加したらどこに出るの？
今の条件が最適か確認したい・・・
クロマトグラムを見ながら条件設定したい！



Pro EZGC[®]
Chromatogram Modeler



Pro EZGC Chromatogram Modeler

RESTEK Pure Chromatography

Welcome Guest! Register | Log In RFQ Quote 0 items

Columns | Supplies & Accessories | Reference Standards | Sample Handling | **Chromatograms** | Technical Resources | Training & Events | Contact Us

Enter search string or click for more options

Pro EZGC[®] Chromatogram Modeler

This new and improved version of our popular EZGC[®] chromatogram modeler is now offers advanced options for selecting phases, changing carrier gases, optimizing your results, and much more!

初めて使用する場合は、ユーザー登録が必要です。

ログイン

Log In to Get Started!

Don't have an account yet? **Click here to register for free!**

登録

Pro EZGC[®] Chromatogram Modeler

Carrier Gas: Nitrogen

Column: RTX-502.2

Length: 50.00 m

Inner Diameter: 0.25 mm

Film Thickness: 1.00 µm

Available Columns: 90-0.25, 5.00

Control Parameters

Column Flow: 2.00 mL/min

Average Velocity: 40.00 cm/sec

Holdup Time: 5.22 min

Inlet Pressure: 14.70 psi

Outlet Pressure (at): 14.70 psi

Oven Program

Number of Ramps (1-5): 30 1

Target Resolution: 5.00

Control Method: Method: 100.00

Unsaved. Click here to edit.

Chromatogram showing peaks at approximately 1.5, 2.0, and 2.5 minutes.

Peak	Retention Time (min)	Area (%)	Height (mm)	Width (min)
1. Acetaldehyde	1.76	28.7	0.018	0.77
2. Ethanol	2.04	15.2	0.014	0.7
3. Isopropyl Alcohol	2.38	15.2	0.014	0.7

Product Suggestions: Method: 100.00, 5.00 Resolution

<https://www.restek.com/proezgc>

Pro EZGC クロマトグラムモデラー 2つの検索方法 ①

化合物 タブの「化合物で検索」から検索開始

化合物名 や CAS.No を入力

液相の種類を選択

化合物 分析条件 My EZGC® <<

化合物で検索 液相で検索 >>

Pentane
Dichloromethane
Acetonitrile
Methanol

・ 化合物名
・ CAS.No

クリア 検索

5 種類の液相から 結果が見つかりました

Rxi-624Sil MS (4 化合物中4化合物を分離)

Rxi-624Sil MS (4 化合物中4化合物を分離)

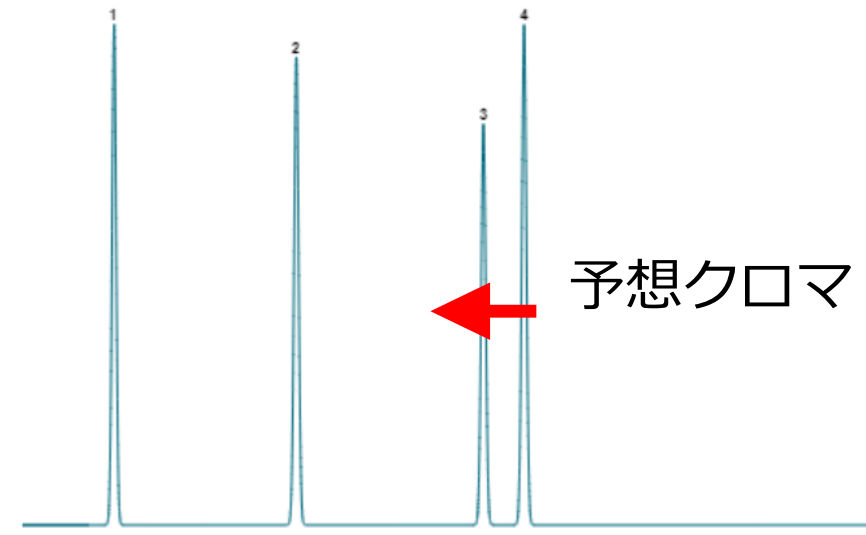
Rtx-VMS (4 化合物中4化合物を分離)

Rtx-502.2 (4 化合物中4化合物を分離)

Rtx-1 (4 化合物中4化合物を分離)

Stabilwax (4 化合物中4化合物を分離)

複数のカラムを Pro EZGC が提案



クリック&ドラッグで拡大、ダブルクリックでリセットされます。

カラム: Rxi®-624Sil MS, 30 m, 2.1 mm ID, 5 µm (300 Å)
 キャリアガス: ヘリウム, 定流量 @ 2.00 mL/min
 平均線速度: 40.97 cm/sec
 出口圧力(abs): 14.70 psi (大気圧)
 オープン温度: 35 °C (ホールド 1 min) から 130 °C @ 30 °C/min

最適な分析条件を提案

ピーク	t _R (min)	Area (%)	Width (min)	Temp (°C)
1. Methanol	2.04	19.8	0.022	66.3
2. Pentane	2.45	18.7	0.022	78.5
3. Acetonitrile	2.87	4	0.023	91.1
4. Dichloromethane	2.96	4	0.023	93.8

予想保持時間、分離度
ピーク幅 溶出温度

Pro EZGC クロマトグラムモデラー 2つの検索方法 ②

化合物 タブの「液相で検索」から検索開始

液相 と ライブラリ から化合物を選択

化合物
分析条件
My EZGC®
<<

液相で検索
化合物で検索 >>

液相: Rxi-5ms

ライブラリ: Pesticides

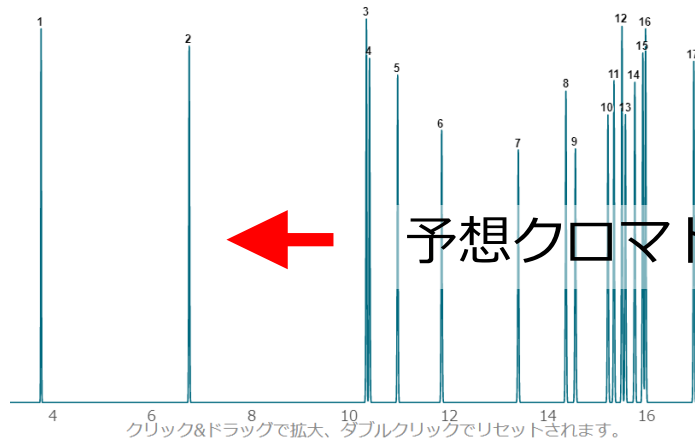
全て選択 化合物フィルター

化合物名	CAS #
α-BHC	319-84-6
β-BHC	319-85-7
γ-BHC	58-89-9
δ-BHC	319-86-8
λ-Cyhalothrin	91465-08-6
2,3,5,6-Tetrachloroaniline	3481-20-7
2,4'-DDD	53-19-0
2,4'-DDE	3424-82-6
2,4'-DDT	789-02-6
2,4'-Methoxychlor	30667-99-3
2,6-Dichlorobenzonitrile	1194-65-6
2-Phenylphenol	90-12-7

15 選択中 ■ 分離ターゲット

クリア

検索



予想クロマトグラム

カラム: Rxi®-5ms, 30 m, 0.25 mm ID, 0.25 μm (cat.# 13423)
 キャリアガス: ヘリウム, 流速: 1.40 mL/min
 平均線速度: 43.54 cm/s
 出口圧力(abs): 0.00 psi (真空)
 オープン温度: 80 °C (ホールド 1 min) から 245 °C @ 8 °C/min

最適な分析条件を提案

ピーク	tr (min)	R _s	Peak Width (min)	T _{peak} (°C)
1. Decane	3.76	98.4	0.030	102.1
2. Dodecane	6.75	93.8	0.038	126.0
3. Mevinphos isomer 1	10.71	2.1	0.041	158.7
4. Mevinphos isomer 2	10.96	1.7	0.043	158.7
5. Pebulate	11.05	2.0	0.047	163.5
6. Pentachlorobenzene	13.40	20.6	0.047	179.2
7. 2,3,5,6-Tetrachloroaniline	14.36	4.2	0.045	186.9
8. Phorate	14.55	4.2	0.049	188.4
9. Hexachlorobenzene	15.21	2.5	0.048	193.7
10. Pentachloronitrobenzene	15.33	2.5	0.048	194.6
11. γ-BHC	15.49	1.5	0.045	195.9
12. Terbutylazine	15.56	1.5	0.047	196.5
13. Fonofos	15.75	3.4	0.048	198.0
14. Chlorothalonil	15.91	1.2	0.046	199.3
15. Disulfoton	15.97	1.2	0.046	199.7
16. Terbacil	16.94	21.3	0.046	207.5
17. Vinclozolin				

予想保持時間、分離度
ピーク幅、溶出温度

Pro EZGC クロマトグラムモデラー分析条件の変更 ①

分析条件 タブから
条件の変更が可能

化合物 分析条件 My EZGC® <<

キャリアガス
ヘリウム

カラム Rxi-624Sil MS
長さ 30.00 m
内径 0.25 mm
膜厚 1.40 μm
選択可能なカラムサイズ 30, 0.25, 1.40

パラメータ
カラム流量 2.00 mL/min
平均線速度 40.97 cm/sec
ホールドアップタイム 1.22 min
注入口圧力 psi 19.94 psi
出口圧力(abs) 14.70 psi

オープンプログラム
恒温
昇温
昇温段数(1-5) 1
分難度設定 1.50
cat.# 13868 の推奨最高使用温度: 320 °C

流量コントロール
定流量

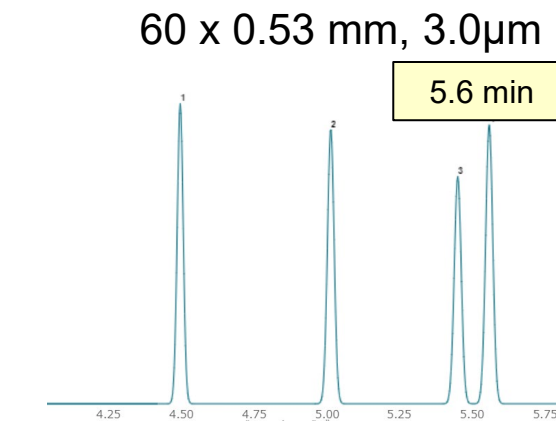
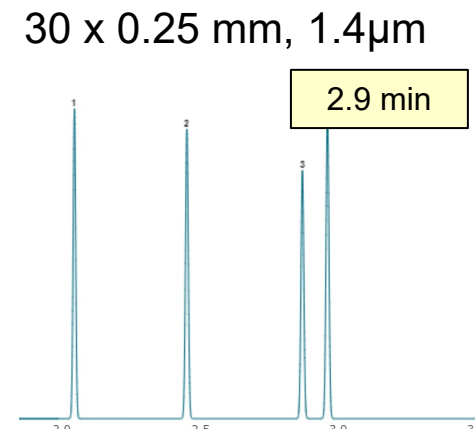
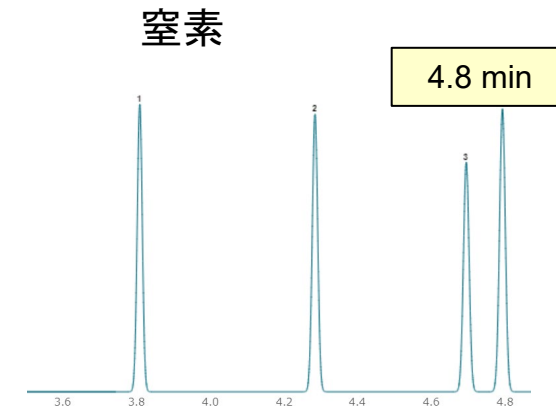
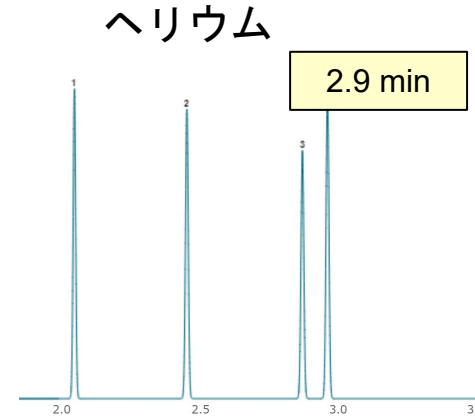
結果
変更 ● 効率 ● 分析時間 ● カスタム
分析時間 2.96 min
分離された化合物 4

ヘルプ

ヘリウム
ヘリウム
水素
窒素 ←
アルゴン/メタン

30, 0.25, 1.40
20, 0.18, 1.00
30, 0.25, 1.40
60, 0.25, 1.40
30, 0.32, 1.80
60, 0.32, 1.80
30, 0.53, 3.00
60, 0.53, 3.00 ←
75, 0.53, 3.00
105, 0.53, 3.00

パラメータは他の条件を変更
すると自動で反映
(結果のカスタムを選択すれば入力可)



Pro EZGC クロマトグラムモデラー分析条件の変更 ②

化合物 **分析条件** My EZGC® <<

キャリアガス
ヘリウム

カラム Rxi-624Sil MS
長さ 30.00 m
内径 0.25 mm
膜厚 1.40 μm
選択可能なカラムサイズ 30, 0.25, 1.40

パラメータ
カラム流量 2.00 mL/min
平均線速度 51.33 cm/sec
ホールドアップタイム 0.97 min
注入口圧力 psi 17.96 psi
出口圧力(abs) 0.00 psi
Atm 真空

オープンプログラム

恒温 昇温

昇温段数(1-5)	昇温レート (°C/min)	温度 (°C)	ホールドタイム (min)
1	8	100	0
	50		0.5

分離度設定 1.50

オープンプログラムの調整

cat.# 13868 の推奨最高使用温度: 320 °C

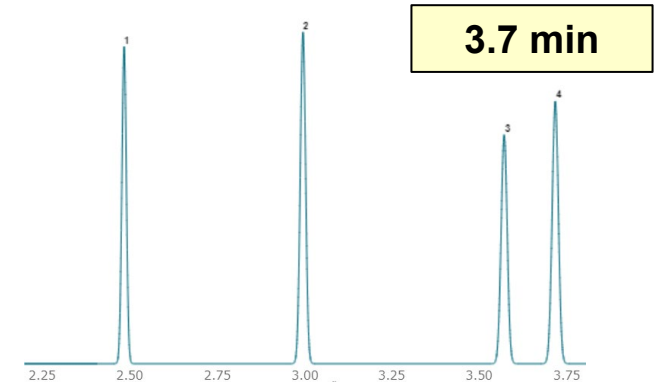
流量コントロール
定流量

結果
変更 ● 効率 ● 分析時間 ● カスタム

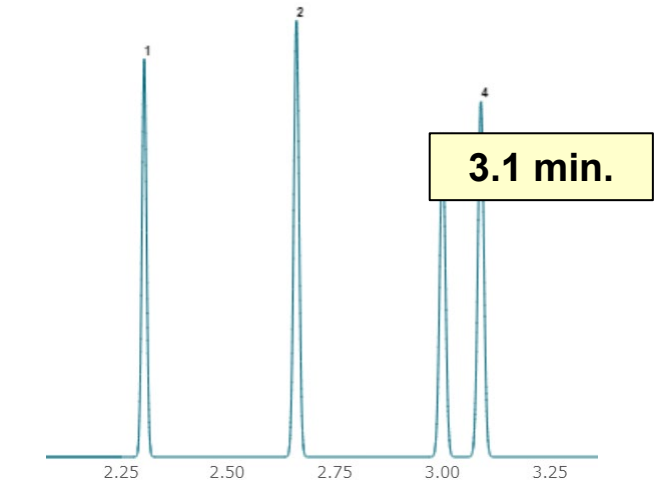
分析時間 2.37 min
分離された化合物 4

元に戻す やり直す

昇温レート (°C/min)	温度 (°C)	ホールドタイム (min)
8	100	0
	50	0.5

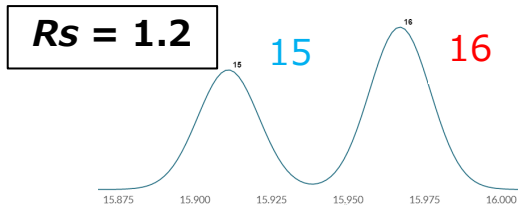
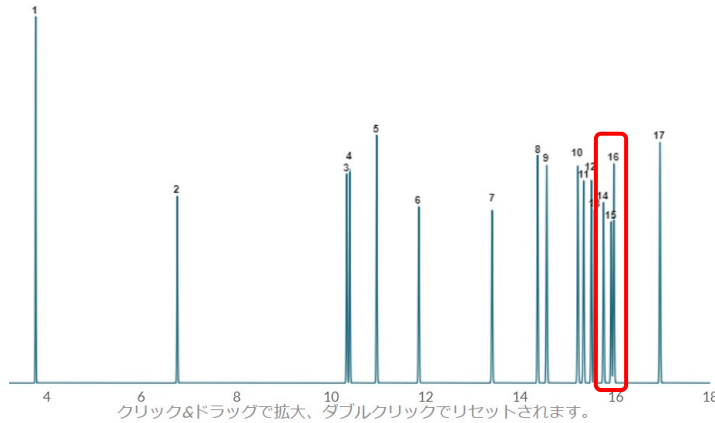


昇温レート (°C/min)	温度 (°C)	ホールドタイム (min)
26	100	2
	50	0.5



Pro EZGC クロマトグラムモデラー MSライブラリーの確認

クロマトグラム



クロマトグラムで重なったピークを
マススペクトルに重ね描き

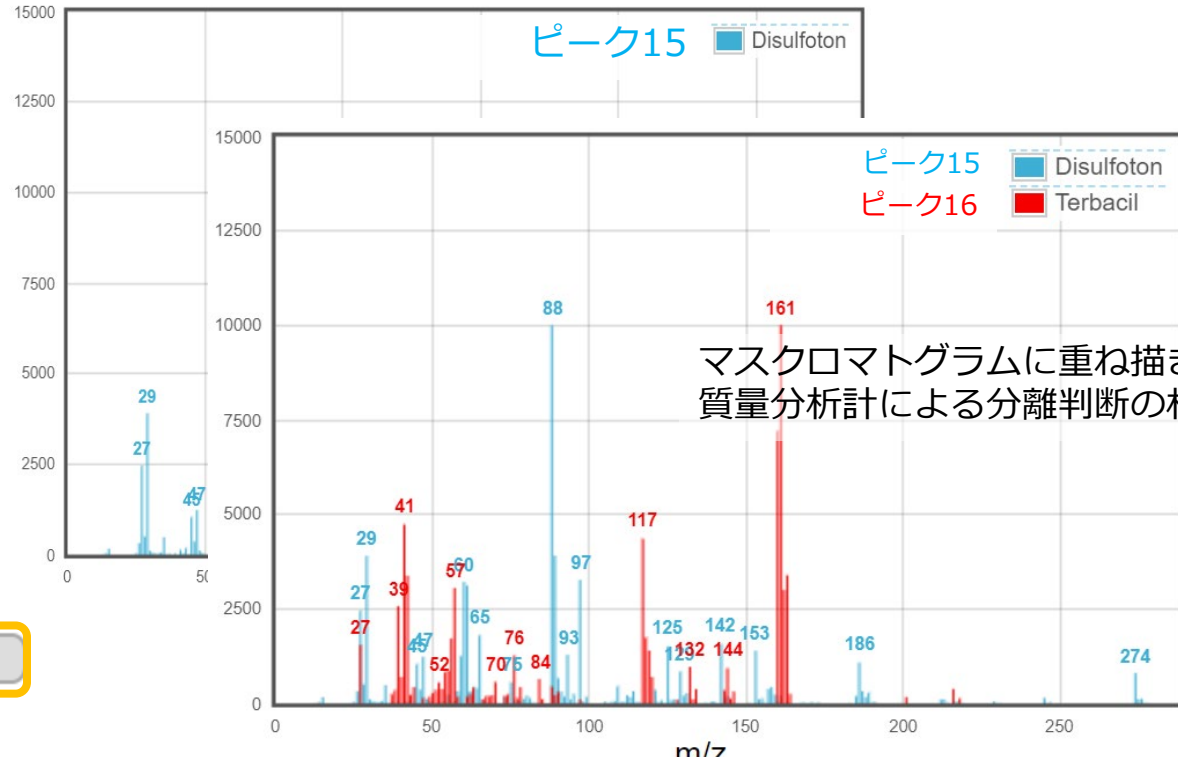
Show coelutions

ピークリスト

11. γ -BHC	15.33	2.5	0.048	194.6
12. Terbutylazine	15.49	1.5	0.045	195.9
13. Fonofos	15.56	1.5	0.047	196.5
14. Chlorothalonil	15.75	3.4	0.048	198.0
15. Disulfoton	15.91	1.2	0.046	199.3
16. Terbacil	15.97	1.2	0.046	199.7
17. Vinclozolin	16.94	21.3	0.046	207.5

分離が悪いピークは
色付きで表示
Rs: 0~1
Rs: 1~1.4

虫眼鏡をクリックするとマススペクトルを表示



マスクロマトグラムに重ね描きした結果。
質量分析計による分離判断の材料になる。

シミュレーション結果の保存/呼び出し

保存

ProEZGC® クロマトグラムモデラー

ご意見をお送りください ? [保存] [印刷] [共有] 言語

化合物 分析条件 My EZGC®

キャリアガス 窒素

カラム Rxi-624Sil MS

長さ	30.00	m
内径	0.25	mm
膜厚	1.40	µm
選択可能なカラムサイズ	30, 0.25, 1.40	

パラメータ

カラム流量	0.63	mL/min
平均線速度	30.07	cm/sec
ホールドアップタイム	1.66	min
注入口圧力	1.94	psi

溶媒4成分

タイトルを入力



呼び出し

My EZGC タブから
保存した条件を呼び出し

保存した
データ一覧

ProEZGC® クロマトグラムモデラー

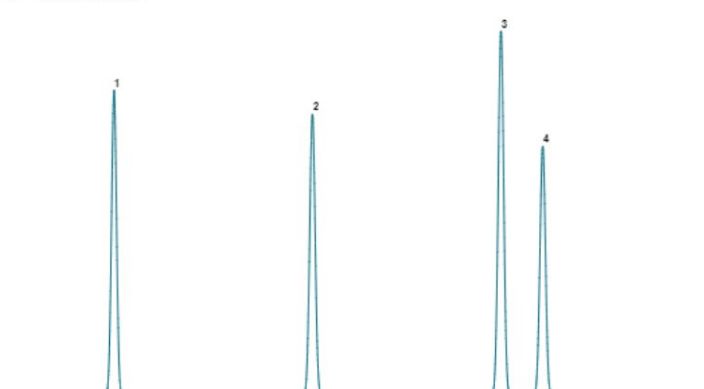
ご意見をお送りください ? [保存] [印刷] [共有] 言語

化合物 分析条件 My EZGC®

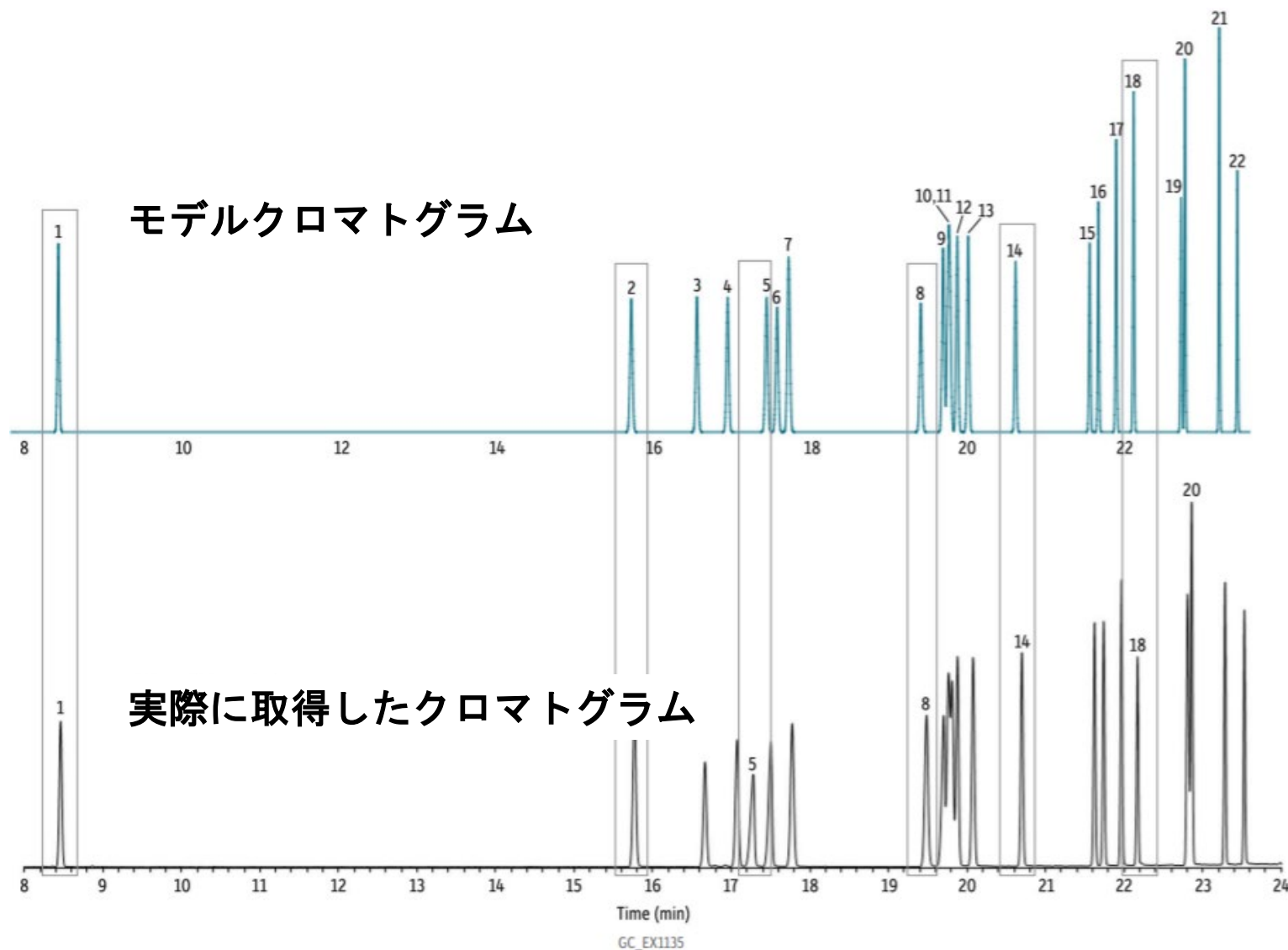
保存した結果

- 溶媒4成分
Pentane, Dichloromethane, Acetonitrile, Methanol
- トランス脂肪酸
C13:0, C16:0, C18:1 (trans-9), C18:2 (all-cis-9,12), C18:2 (all-trans-9,12)...
- フタル酸エステル類
2-Ethylhexyl isodecyl phthalate, Benzyl 2-ethylhexyl phthalate, Bis(2-(ethoxyethoxy)ethyl)phthalate, Bis(2-ethoxyethyl)phthalate, Bis(2-ethylhexyl)hexahydro phthalate...
- 医薬品中残留溶媒 Class 2 MixB 日本薬局方条件
1,2-Dimethoxyethane, 2-Hexanone, Trichloroethene, n-Hexane, Tetralin...
- 医薬品中残留溶媒 Class 3 A
1-Propanol, Anisole, 2-Butanol, Methyl tert-butyl ether, 2-Propanol...

溶媒4成分



シミュレーションと実際のクロマトグラム比較

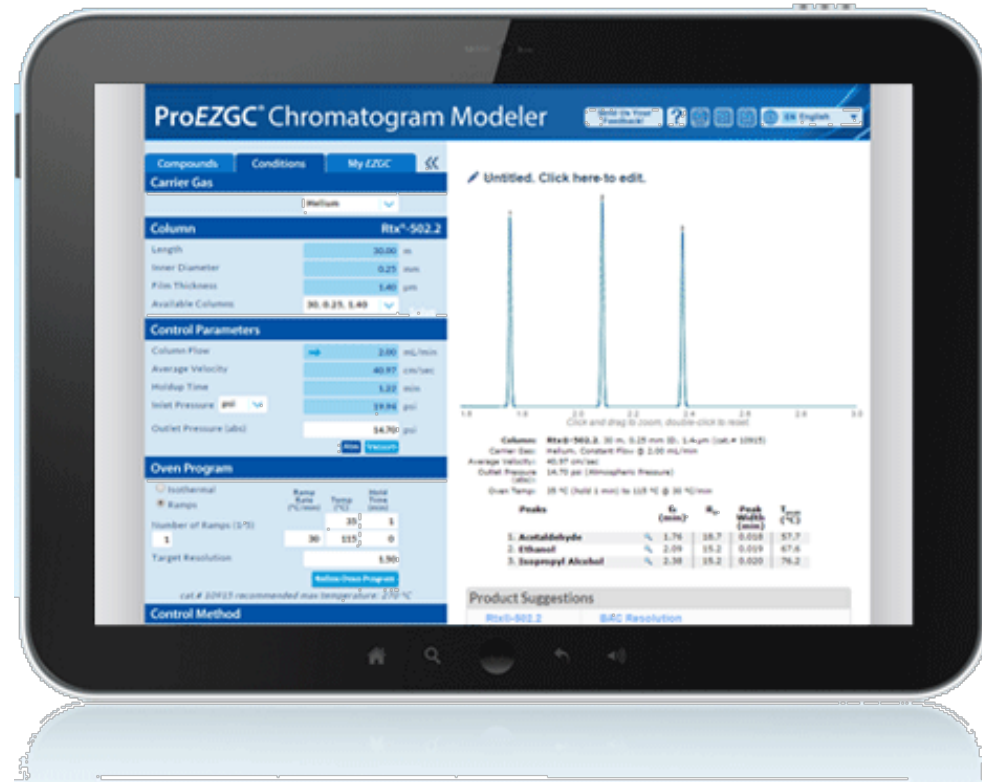


Column	Rtx-440, 30 m, 0.25 mm ID, 0.25 μ m (cat.# 12923)
Sample	Minnesota Ag List 1 pesticide kit (cat.# 32408)
Diluent:	Acetone
Conc.:	100 ppm
Injection	
Inj. Vol.:	1 μ L split (split ratio 25:1)
Liner:	4 mm Precision liner w/wool (cat.# 23305.1)
Inj. Temp.:	300 $^{\circ}$ C
Oven	
Oven Temp.:	100 $^{\circ}$ C (hold 0.5 min) to 175 $^{\circ}$ C at 4 $^{\circ}$ C/min to 250 $^{\circ}$ C at 14.5 $^{\circ}$ C/min
Carrier Gas	He, constant flow
Flow Rate:	2.0 mL/min
Detector	MS
Mode:	Scan

シミュレーションで対応していない事項

- データベースに登録されている化合物のみシミュレーション可能
- 注入方法・注入溶媒は考慮されていません
- オープンプログラムのスタート温度とホールド時間は溶媒の沸点や注入方法に応じて入力し直します
- 出口圧の選択（大気圧、真空）は可能ですが、検出器の種類や感度は考慮されていません
- Plotカラムやパックドカラムに対応していません
- ピーク形状は100%ガウス分布であり、過負荷やテーリングなど考慮されません

ご清聴ありがとうございました



タブレットのOSにも対応

<https://www.restek.com/proezgc>

<https://www.restek.jp/ezgc-mtfc>