

表面活性剂简化分类

GB 5328—85

ISO 2131—1972

Surface active agents—Simplified classification

本标准等同采用国际标准ISO 2131—1972《表面活性剂—简化分类》，并补充了一些表面活性剂简化分类应用实例。

本标准规定了按基团排列的表面活性剂简化分类。

1 原理

表面活性剂的简化分类是用缩写字母和数字表示它的特征，包括一个字母和四个数字（化合物含有不同离子特征的几个亲水基时可有五个数字）。根据分子的主要结构单元，用：

- (1) 字母表示离子特征；
- (2) 第一个数字表示亲水基团；
- (3) 第二个数字表示疏水基团；
- (4) 第三个数字表示中间官能团；
- (5) 第四个数字表示亲水基团补充性质；

(6) 第五个数字（放在第一个和第二个数字之间，括在括号内）表示化合物含有不同离子特征的几个亲水基时的第二亲水基团。

按表面活性剂简化分类表规定进行编号分类时采用第3章所规定的规则来确定分子中相应基团的数字。

2 分类规则

2.1 亲水基团的选定

规则1

亲水基团是分类的出发点。用下列字母表示它的离子特征：

- A——阴离子亲水基团；
C——阳离子亲水基团；
N——非离子亲水基团；
Z——两性化合物。

规则2

含有相同离子特征的几个亲水基时，参照分类表，按下列数字的顺序选择主要亲水基团。各基团的顺序为：

- 阴离子：2—3—4—5—6—7—8—9—1
阳离子：5—6—7—8—9—1—2—3—4
非离子：3—4—5—6—1—2—7—8—9

规则3

含有不同离子特征的几个亲水基时，应采取下列两种方法之一：

- (1) 在阴离子和阳离子基团都存在时（两性化合物），选用字母Z，然后先表示阳离子基团，再在括号内表示阴离子基团，必要时采用规则2；

(2) 在离子基团和非离子基团都存在时, 选用表示离子基团特征的字母, 然后先表示离子基团, 再在括号内表示非离子基团。

2.2 疏水基团的选定

规则4

决定性疏水基团是指最主要的疏水性质的基团, 通常取最长而离主要亲水基团尽可能远的 烃 链 (包括环)。

规则5

根据规则4, 脂族烃链至少应有8个碳原子。

规则6

如表面活性剂不含8个或8个以上碳原子的烃链, 则取环的残基作为决定性疏水基团。

2.3 中间官能团的选定

规则7

选择最靠近主要亲水基团的基团作为中间官能团。

注: 最主要的表面活性剂符合下式: $R-X-R'-F$

式中:

R ——主要疏水基团;

X ——中间官能团;

R' ——短烃链;

F ——主要亲水基团。

分类表中的字母 F 、 R' 、 X 也具有相同意义, 字母 r 表示氢或烷基残基。

2.4 亲水基团补充性质的选定

规则8

亲水基团补充性质是指主要亲水基团而言, 按表中数字顺序来选择。

注: 如需将本简化分类记录在穿孔卡片上或计算机中, 则应取消任何括号。化合物含有相同离子特征的两个或更多亲水基团时, 在第一个和第二个数字之间插入0。化合物含有不同离子特征的几个基团时, 只省去括号。

例如: A 1031 改成 A 10031; Z 2 (1) 002 改成 Z 21002。

表面活性剂简化分类表

亲 水 基 团			决定性 疏水基团	中间官能团	亲 水 基 团 补 充 性 质		
阴离子	阳离子	非离子			阴 离 子	阳 离 子	非离子
			0 非支化的脂 族残基	0 无	0 无	0 无	0 无
1 —COOH	1 伯胺	1 脂族羟基	1 支化的脂族 残基	1 —COO—R'—F	1 Li、Na、K等碱金属 盐 (I a族)	1 1个或2个疏水残基, 无机阴离子	1 具有羟基特 征的官能团
2 —OSO ₃ H	2 仲胺	2 脂环或芳族羟基	2 脂环残基 类	2 —OOC—R'—F	2 Mg、Ca、Sr、Ba等 碱土金属盐 (II a族)	2 1个或2个疏水残基, 有机阴离子	2 具有酯特征 的官能团
3 —SO ₃ H	3 叔胺	3 中间链上的非支化聚醚	3 非稠环的苯残 基	3 1个或2个中间官能团 —CON (r)—R'—F —N (r)CO—R'—F	3 Cu、Ag、Zn、Cd、Hg 金属盐 (I b族和II b族)	3 1个或2个疏水残基, 苯基及类似物, 无机 阴离子	3 具有醚特征 的官能团
4 —S—SO ₃ H	4 氧化胺	4 中间链上的支化聚醚	4 稠环的芳族残 基	4 —SO ₂ N (r)—R'—F —N (r)SO ₂ —R'—F	4 Cr、Mn、Fe、Co、Ni 过渡金属盐 (IV a、VII a、 VIII族)	4 1个或2个疏水残基, 苯基及类似物, 有机阴 离子	4 具有酰胺特 征的官能团
5 —SO ₂ H 其它含硫官能 团, 包括 —SO ₂ NH(r)	5 季铵	5 山梨糖醇酐、甘露糖醇 酐糖类或类似物的衍生物	5 环上有一个非 碳原子的杂环 残基	5 1, 2或3个中间官能团 —O—R'—(O—R') _n F	5 Al、In、Sn、Pb、Bi 金属盐 (III b至V b族)	5 3个疏水残基, 无机阴 离子	5 具有磺酰胺 特征的官能团 —SO ₂ N(r) ₂
6 • 正磷酸酯	6 吡啶鎓、咪 唑啉鎓或类似 物	6 山梨糖醇酐烷氧基糖类 和甘露糖醇酐烷氧基糖类 的衍生物	6 环上有2个或 更多非碳原子 的杂环残基	6 —S—R'—F —SO—R'—F —SO ₂ —R'—F	6 La、Ce、Th、U等镧系 和锕系金属盐	6 3个疏水残基, 有机阴 离子	6
7 膦酸	7 铈	7 羰基	7 聚合物残基	7 —N (r)—R'—F	7 铵盐	7 金属络合物	7
8 过酸	8 镨	8 尿素、酰胺、多肽	8 链中含其他元 素的残基	8 其它 —X—R'—F	8 有机碱盐	8 甜菜碱	8 有机金属 衍生物
9 其他阴离子 官能团	9 其他阳离子 官能团	9 其他非离子官能团	9 其他疏水残基	9	9 络合金属盐、有机金 属碱	9 其他专有特征	9 其他特征的 官能团

附 录 A
简化分类应用实例
(补充件)

表 A1 阴离子表面活性剂

名 称	结 构 式	分 类
硬脂酸钠 Sodium stearate	$C_{17}H_{35}COONa$	A1001
月桂酰肌氨酸钠 Sodium lauroyl sarcosinate	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ C_{11}H_{23}CON-CH_2-COONa \end{array}$	A1031
月桂基硫酸钠 Sodium laurylsulphate	$C_{12}H_{25}OSO_3Na$	A2001
乙氧基化月桂基硫酸钠 Sodium lauryl ethoxy-ether sulphate (Sodium ethoxylated lauryl sulphate)	$C_{12}H_{25}-OCH_2-CH_2-OCH_2-CH_2OSO_3Na$	A2051
月桂酰替氨乙基硫酸钠 Sodium salt of the sulphuric ester of lauroyl ethanolamide	$C_{11}H_{23}CO-NH-CH_2-CH_2-OSO_3Na$	A2031
烷基磺酸钠 Sodium alkylsulphonate	$\begin{array}{c} C_{11}H_{23}-CH-C_2H_5 \\ \\ SO_3Na \end{array}$	A3001
油酰乙氧基磺酸钠 Sodium oleyl-oxyethane sulphate (Sodium isethionate)	$C_{17}H_{33}-COO-CH_2-CH_2SO_3Na$	A3011
油酰甲基牛磺酸钠 Sodium salt of oleyl-methyltauride	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ C_{17}H_{33}-CO-N-CH_2-CH_2SO_3Na \end{array}$	A3031

续表 A1

名 称	结 构 式	分 类
烷基芳基磺酸钠 Sodium alkylaryl-sulphonate	$C_{12}H_{25}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{SO}_3\text{Na}$	A3301
单烷基磷酸钠 Sodium mono-alkylphosphate	$C_{12}H_{25}-O-\overset{\overset{\text{O}}{\parallel}}{\text{P}}=(\text{ONa})_2$	A6001
磺基琥珀酸二辛酯钠盐 Sodium dioctyl sulphosuccinate	$C_8H_{17}-\text{OOC}-\text{CH}_2-\underset{\underset{\text{C}_8H_{17}-\text{OOC}}{\mid}}{\text{CH}}-\text{SO}_3\text{Na}$	A3021
酰化缩多氨酸钠* Sodium salt of acylated polypeptide (Lamepon A)	$C_{17}H_{33}\text{CO}-\underset{\underset{\mid}{\text{NHCHCO}}}{\text{[]}}_n\text{ONa}$	A1031
烷基磺酰替氨基乙酸钠* Sodium alkyl-sulphonyl-amido-acetate	$C_{12}H_{25}\text{SO}_2\text{NHCH}_2\text{COONa}$	A1041
环烷酸钠* Sodium naphthenate	$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{CH}-\text{COONa} \\ \mid \quad \mid \\ \text{CH}_2 \quad \text{CH}_2 \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{CH}_2 \end{array}$	A1201
松香酸钠* Sodium abietate	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{COONa} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{O}_2 \end{array}$	A1201
硫酸化蓖麻酸钠盐* Sodium salt of sulphated ricinoleic acid	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5-\underset{\underset{\text{OSO}_3\text{Na}}{\mid}}{\text{CH}}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COONa}$	A2001
月桂基硫酸镁* Magnesium laurylsulphate	$C_{12}H_{25}\text{OSO}_3\text{Mg}_{\frac{1}{2}}$	A2002
乙氧基化月桂基硫酸钙* Calcium ethoxylated laurylsulphate	$C_{12}H_{25}\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OSO}_3\text{Ca}_{\frac{1}{2}}$	A2052

* 为增补的表面活性剂简化分类实例。

续表 A1

名 称	结 构 式	分 类
环烷硫酸钠* Sodium naphthene sulphate	$ \begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{CH}-\text{OSO}_3\text{Na} \\ \quad \\ \text{CH}_2 \quad \text{CH}_2 \\ \diagdown \quad / \\ \text{CH}_2 \end{array} $	A2201
α -烯基磺酸钠* α -Olefine sulphonate (AOS)	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{SO}_3\text{Na}$ $ \begin{array}{c} \text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{CH}-\text{CH}_2\text{CH}_2-\text{SO}_3\text{Na} \\ \\ \text{OH} \end{array} $	A3001
α -磺基硬脂酸甲酯钠盐* Sodium salt of α -sulphostearic acid methyl ester	$ \begin{array}{c} \text{C}_{16}\text{H}_{33}-\text{CH}-\text{COOCH}_3 \\ \\ \text{SO}_3\text{Na} \end{array} $	A3001
油酰替对甲氧基苯胺磺酸钠* Sodium oleoyl- <i>p</i> -anisidine sulphonate	$ \begin{array}{c} \text{C}_{17}\text{H}_{33}\text{CO}-\text{NH}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{OCH}_3 \\ \\ \text{SO}_3\text{Na} \end{array} $	A3031
二丁基萘磺酸钠* Sodium dibutyl-naphthalene sulphonate	$ \begin{array}{c} \text{C}_4\text{H}_9 \quad \text{SO}_3\text{Na} \\ \quad \\ \text{C}_{10}\text{H}_7 \\ \\ \text{C}_4\text{H}_9 \end{array} $	A3401
甲撑二萘磺酸钠* Sodium dinaphthylmethane sulphonate	$ \begin{array}{c} \text{NaO}_3\text{S}-\text{C}_{10}\text{H}_7-\text{CH}_2-\text{C}_{10}\text{H}_7-\text{SO}_3\text{Na} \end{array} $	A3401
十七烷基苯并咪唑磺酸钠* Sodium heptadecyl-benzimidazole mono-sulphonate	$ \begin{array}{c} \text{C}_{17}\text{H}_{35}-\text{C} \begin{array}{l} \nearrow \text{NH} \\ \searrow \text{N} \end{array} -\text{C}_6\text{H}_4-\text{SO}_3\text{Na} \end{array} $	A3601

* 为增补的表面活性剂简化分类实例。

表 A2 阳离子表面活性剂

名 称	结 构 式	分 类
十八烷基二甲基苄基氯化铵 Stearyl-dimethyl-benzylammonium chloride	$\left[\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{C}_{18}\text{H}_{37}-\text{N}-\text{CH}_2-\text{C}_6\text{H}_5 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \right]^+ \text{Cl}^-$	C5003
烷基咪唑啉乙酸盐 Imidazoline acetate alkyl substituted	$\begin{array}{c} \text{N}-\text{CH}_2 \\ // \quad \\ \text{C}_{17}\text{H}_{35}-\text{C}-\text{N}-\text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH} \end{array} \quad \text{HOOC}-\text{CH}_3$	C6002
十八酰替氨乙基三甲基甲硫酸铵 Stearoyl-amidoethyl-trimethylammonium methosulphate	$\left[\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{C}_{17}\text{H}_{35}-\text{CO}-\text{NH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{N}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \right]^+ \text{OSO}_3\text{CH}_3^-$	C5031
月桂基二甲基氧化胺 Dimethyl-laurylamine oxide	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{C}_{12}\text{H}_{25}-\text{N}=\text{O} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C4000
月桂胺乙酸盐* Laurylamine acetate	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{NH}_2\text{CH}_3\text{COOH}$	C1002
月桂基单乙醇胺盐酸盐* Lauryl-monoethanolamine hydrochloride	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{OH} \cdot \text{HCl}$	C2001
三乙醇胺单硬脂酸酯甲酸盐* Triethanolamine mono-stearate formate	$\text{C}_{17}\text{H}_{35}\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{N} \begin{cases} \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH} \\ \cdot \text{HCOOH} \\ \text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH} \end{cases}$	C3012
油酰替氨乙基二乙胺盐酸盐* Oleoyl-amidoethyl-diethylamine hydrochloride	$\text{C}_{17}\text{H}_{33}\text{CONH}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{N} \begin{cases} \text{C}_2\text{H}_5 \\ \cdot \text{HCl} \\ \text{C}_2\text{H}_5 \end{cases}$	C3031
十六烷基三甲基溴化铵* Cetyl-trimethyl-ammonium bromide	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ (\text{C}_{16}\text{H}_{33}-\text{N}-\text{CH}_3)^+ \text{Br}^- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C5001

* 为增补的表面活性剂简化分类实例。

续表 A2

名 称	结 构 式	分 类
十八烷基二甲基羟乙基硝酸铵* Stearyl-dimethyl-hydroxyethyl ammonium nitrate	$[C_{18}H_{37}N(CH_3)_2(C_2H_4OH)]^+ NO_3^-$	C 5001
十六烷基溴化吡啶* Cetyl pyridinium bromide	$[C_{16}H_{33}-N \langle \text{pyridine ring} \rangle]^+ Br^-$	C 6001
十八酰替氨甲基氯化吡啶* Stearoyl-amidomethyl pyridinium chloride	$[C_{17}H_{35}CO-NHCH_2-N \langle \text{pyridine ring} \rangle]^+ Cl^-$	C 6031
十二烷基二甲基甲硫酸铯* Dodecyl-dimethyl sulphonium methyl sulphate	$[C_{12}H_{25}-\overset{\overset{CH_3}{ }}{S}-CH_3]^+ OSO_3CH_3^-$	C 7001
十二烷基二甲基苯基溴化磷* Dodecyl-dimethyl-phenyl phosphonium bromide	$[C_{12}H_{25}-\overset{\overset{CH_3}{ }}{P}-\langle \text{phenyl ring} \rangle]^+ Br^-$	C 8001

* 为增补的表面活性剂简化分类实例。

表 A3 非离子表面活性剂

名 称	结 构 式	分 类
山梨糖醇脂肪酸酯 Sorbitol fatty acid esters	$C_{11}H_{23}-CO-OCH_2(CHOH)_4CH_2OH$	N 5010
聚乙氧基化十八醇 Polyethoxylated stearyl alcohol	$C_{18}H_{37}-(OCH_2-CH_2)_{20}-OH$	N 3001
聚乙氧基化十八酸 Polyethoxylated stearic acid	$C_{17}H_{35}-CO-OCH_2-CH_2(OCH_2-CH_2)_5OH$	N 3011
聚乙氧基化壬基酚 Polyethoxylated nonylphenol	$C_9H_{19}-\langle \text{phenyl ring} \rangle-(OCH_2-CH_2)_{11}-OH$	N 3301

续表 A3

名 称	结 构 式	分 类
月桂酰二乙醇胺 Lauryl diethanolamide	$\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{CO}-\text{N} \begin{cases} \text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \\ \text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH} \end{cases}$	N 1031
聚乙氧基化壬基酚乙酸酯 Polyethoxylated nonylphenol acetate	$\text{C}_9\text{H}_{19}-\text{C}_6\text{H}_4-(\text{OCH}_2-\text{CH}_2)_n-\text{OOCCH}_3$	N 3302
聚乙氧基化甲氧基壬基酚 Methoxy polyethylene-oxy-nonylphenol	$\text{C}_9\text{H}_{19}-\text{C}_6\text{H}_4-(\text{OCH}_2-\text{CH}_2)_n-\text{OOCCH}_3$	N 3303
聚乙氧基化聚丙烯二醇嵌段共聚物 Polyethoxylated polypropyleneglycol block copolymer (Pluronic)	$\text{R} \begin{cases} (\text{OCH}_2-\text{CH}_2)_n\text{OH} \\ (\text{OCH}_2-\text{CH}_2)_n\text{OH} \end{cases} \quad (\text{R} = \text{聚丙烯残基})$	N 3701
甘油单油酸酯* Glycerol mono-oleate	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{CH}_2-\text{O}-\text{C}-(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3 \\ \\ \text{HC}-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{OH} \end{array}$	N 1011
聚乙氧基化蓖麻油* Polyethoxylated castor oil	$\begin{array}{c} \text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7-\text{C}(=\text{O})-\text{OCH}_2 \\ \\ (\text{OC}_2\text{H}_4)_x-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7-\text{C}(=\text{O})-\text{OCH} \\ \\ (\text{OC}_2\text{H}_4)_y-\text{OH} \\ \\ \text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7-\text{C}(=\text{O})-\text{OCH}_2 \\ \\ (\text{OC}_2\text{H}_4)_z-\text{OH} \end{array}$	N 3001
蔗糖单硬脂酸酯* Sucrose mono-stearate	$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{O}-\text{OC}-\text{C}_{17}\text{H}_{35} \qquad \text{CH}_2\text{OH} \\ \qquad \qquad \qquad \\ \text{OH} \qquad \qquad \qquad \text{OH} \end{array}$ 	N 5010

* 为增补的表面活性剂简化分类实例。

附加说明:

本标准由中华人民共和国轻工业部提出,由轻工业部日用化学工业科学研究所归口。

本标准由轻工业部日用化学工业科学研究所负责起草。

本标准主要起草人萧安民、马洁薇、沈来意、王佩维。