

ГОСТ 29213—91
(ИСО 896—77)

МЕЖГОСУДАРСТВЕННЫЙ СТАНДАРТ

ВЕЩЕСТВА ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ

ОБОЗНАЧЕНИЯ

Издание официальное

БЗ 11—2003

ИПК ИЗДАТЕЛЬСТВО СТАНДАРТОВ
Москва

М Е Ж Г О С У Д А Р С Т В Е Н Н Ы Й С Т А Н Д А Р Т**ВЕЩЕСТВА ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫЕ****Обозначения**Surface active agents.
Scientific classification**ГОСТ**
29213—91
(ИСО 896—77)МКС 01.075
71.100.40
ОКП 24 8000Дата введения **01.01.93****ВВЕДЕНИЕ**

Обозначение (классификация) поверхностно-активных веществ позволяет четко и логично обозначить структурные химические группы поверхностно-активных веществ в виде десятичной системы обозначения. Ее целью является описание поверхностно-активного вещества в соответствии с его химической формулой.

Классификация основана на полярной (неполярной) структуре поверхностно-активных веществ, которая определяет его гидрофобные и липофильные свойства.

Предлагаемая классификация водорастворимых поверхностно-активных веществ способствует раздельному рассмотрению гидрофильной и гидрофобной частей молекулы. Поверхностно-активное вещество можно описать обозначением этих частей.

Однако множество возможных вариантов структуры гидрофобной части делает необходимым разделение этой части на несколько составных частей. Гидрофильная часть, более простая в структурном отношении, также требует четкой определенности ее характеристик, особенно ответственных за солюбилизацию в воде или в органической среде.

Однако раздельная классификация недостаточна, чтобы установить определенный классификационный индексный номер, который соответствовал бы индивидуальному продукту. Классификация не является точной химической номенклатурой. Напротив, она подразумевает, что несколько продуктов, имеющих очень близкие химические структуры и практические характеристики, будут обозначаться одним и тем же классификационным индексным номером. Более того, определенный классификационный индексный номер должен обозначать воссоздание структуры молекулы, которая будет приближенной, однако достаточно точной.

Использование десятичной классификации приемлемо для технических специалистов с обычным уровнем знаний химии и технологии поверхностно-активных веществ. Для однозначного определения классификационного индексного номера поверхностно-активного вещества необходимо строгое соблюдение правил классификации и тщательное изучение таблицы классификации.

1. НАЗНАЧЕНИЕ

Настоящий стандарт представляет научную классификацию поверхностно-активных веществ.

2. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ

Классификация применима как для поверхностно-активных веществ, используемых в водной среде, так и для поверхностно-активных веществ, применяемых в органических средах.

3. ОПРЕДЕЛЕНИЯ

3.1. **Основная гидрофильная группа** — группа, воплощающая одну и только одну функцию, которая рассматривается как наиболее важная с точки зрения гидрофильного поведения поверхностно-активного вещества.

3.2. **Вторичные гидрофильные группы** — группы, воплощающие функции солюбилизирующих свойств, отличающиеся от основной гидрофильной группы; эти группы служат только в качестве вторичного признака для характеристики поверхностно-активного вещества.

3.3. **Основной гидрофобный остаток**, определяющий гидрофобное поведение поверхностно-активного вещества, — остаток, представляющий собой радикал гидрофобного типа, рассматриваемый как единое целое вместе с его заместителями. Он должен связываться с основной гидрофильной группой четко определенным способом.

3.4. **Характерные гидрофобные остатки** — химические группы, которые гидрофобны не более чем основной гидрофобный остаток, с которым они функционально связаны. Они составляют либо промежуточную соединительную связь в пределах собственно молекулы, либо проявляются в виде вторичного гидрофобного остатка, присоединенного к основной части молекулы.

3.5. **Промежуточные функциональные группы** — группы, встречающиеся между гидрофобным остатком (остатками) и основной гидрофильной группой и присоединенные к последней либо углеводородной связью, либо характерным гидрофобным остатком. Они обуславливают характеристики гидрофобной части.

3.6. **Дополнительные свойства гидрофильной части** — свойства, которые позволяют достаточно полно описать гидрофильную часть и охарактеризовать солюбилизирующие свойства в водной среде или нерастворимость в воде в случае использования в органических средах.

4. ПРИНЦИП

Классификация поверхностно-активных веществ позволяет разделить их в соответствии со следующими характеристиками:

- 1) основная гидрофильная группа;
- 2) вторичные гидрофильные группы;
- 3) основной гидрофобный остаток;
- 4) характерные гидрофобные остатки;
- 5) промежуточные функциональные группы;
- 6) дополнительные свойства гидрофильного остатка.

5. ПРАВИЛА КЛАССИФИКАЦИИ

5.1. В основу классификации поверхностно-активных веществ положено определение основной гидрофильной группы, а также основного гидрофобного остатка. Для того чтобы избежать неоднозначных результатов, эти элементы необходимо определить, руководствуясь следующими правилами.

Правило 1

ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ КЛАССИФИКАЦИОННОГО ИНДЕКСНОГО НОМЕРА, ХАРАКТЕРИЗУЮЩЕГО ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОЕ ВЕЩЕСТВО, В ПЕРВУЮ ОЧЕРЕДЬ РАССМАТРИВАЕТСЯ ОСНОВНАЯ ГИДРОФИЛЬНАЯ ГРУППА.

5.2. Выделены три гидрофильные группы:

- гидрофильные группы с анионными свойствами;
- гидрофильные группы с катионными свойствами;
- гидрофильные группы с неионогенными свойствами.

Правило 2

ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОЕ ВЕЩЕСТВО, ОТНОСЯЩЕЕСЯ К КАЖДОЙ ИЗ ТРЕХ ГИДРОФИЛЬНЫХ ГРУПП, ОБОЗНАЧАЕТСЯ ПОСРЕДСТВОМ ОДНОЙ ИЗ ЦИФР: 1, 2, 3:

- 1 относится к группам с анионными свойствами;
- 2 относится к группам с катионными свойствами;
- 3 относится к группам с неионогенными свойствами.

5.3. В том случае, если поверхностно-активное вещество содержит только одну гидрофильную группу, результат получается однозначным. Если оно содержит несколько таких групп, то применяется правило 3.

Правило 3

Если молекула содержит более одной гидрофильной группы, то:

1. ОСНОВНОЙ ГИДРОФИЛЬНОЙ ГРУППОЙ ЯВЛЯЕТСЯ ТА, КОТОРАЯ ПОЯВЛЯЕТСЯ ПЕРВОЙ. ПОРЯДОК, В КОТОРОМ ДОЛЖНЫ БЫТЬ ВЫБРАНЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ГРУППЫ, СЛЕДУЮЩИЙ (см. таблицу):

а) катионная группа из колонки 2, указанная в ячейках 5, 6, 7, 8 и, возможно, 9, если функциональная группа является достаточно основной;

б) анионная группа из колонки 1, указанная в ячейках 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 и, возможно, 9, если функциональная группа достаточно кислая;

в) неионогенная группа из колонки 1, указанная в ячейках 3, 4, 5 и 6;

г) катионная группа из колонки 2, указанная в ячейках 1, 2, 3, 4 и, возможно, 9, если функциональная группа имеет слабоосновной характер;

д) анионная группа из колонки 1, указанная в ячейке 1 и, возможно, ячейке 9, если функциональная группа имеет слабокислый характер;

е) другие неионогенные группы из колонки 3, указанные в ячейках 1, 2, 7, 8 и 9.

Цифра, соответствующая основной группе, должна подчеркиваться.

2. ВТОРИЧНАЯ ГИДРОФИЛЬНАЯ ГРУППА ДОЛЖНА ВЫБИРАТЬСЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТОГО ЖЕ ПОРЯДКА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП.

Цифра, выбранная для этой вторичной гидрофильной группы, не приводится, если она находится в той же колонке, что и основная гидрофильная группа.

5.4. Гидрофобная часть поверхностно-активного вещества имеет более или менее сложную структуру, так как она может состоять из различных углеводородных остатков с гидрофобными свойствами, промежуточных водородных групп или заместителей.

Выбор основного гидрофобного остатка является существенным фактором в классификации поверхностно-активных веществ. Чтобы сделать однозначный выбор, необходимо соблюдать следующие правила:

Правило 4*

ОСНОВНОЙ ГИДРОФОБНЫЙ ОСТАТОК, КАК ПРАВИЛО, ЯВЛЯЕТСЯ УГЛЕВОДОРОДНЫМ ОСТАТКОМ, НАИБОЛЕЕ УДАЛЕННЫМ ОТ ОСНОВНОЙ ГИДРОФИЛЬНОЙ ГРУППЫ.

Принятие в качестве классификационного признака того факта, что основной гидрофобный остаток наиболее удален от основной гидрофильной группы, позволяет учесть максимальное количество информации, чтобы дополнительно охарактеризовать поверхностно-активное вещество.

Заместители, входящие в состав основного гидрофобного остатка, не влияют на выбор последнего.

В этом случае, если гидрофобный остаток, выбранный в качестве основного, включает структурные элементы как алифатического, так и циклического (например, ароматического) типов, необходимо принимать во внимание длину алифатических цепей для того, чтобы определить циклический характер гидрофобного остатка.

Правило 5

АЛИФАТИЧЕСКУЮ УГЛЕВОДОРОДНУЮ ЦЕПЬ НЕОБХОДИМО РАССМАТРИВАТЬ ДОСТАТОЧНО БОЛЬШОЙ ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ ПРАВИЛА 4, ЕСЛИ ЭТА ЦЕПЬ СОДЕРЖИТ ПО КРАЙНЕЙ МЕРЕ ВОСЕМЬ УГЛЕРОДНЫХ АТОМОВ.

Правило 6

В СЛУЧАЕ ОТСУТСТВИЯ АЛИФАТИЧЕСКОЙ УГЛЕВОДОРОДНОЙ ЦЕПИ С ВОСЕМЬЮ И БОЛЕЕ АТОМАМИ УГЛЕРОДА ЦИКЛИЧЕСКИЙ ОСТАТОК ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ ПРАВИЛА 4 НЕОБХОДИМО РАССМАТРИВАТЬ КАК ОСНОВНУЮ ЧАСТЬ.

Правило 7

В СЛУЧАЕ ОТСУТСТВИЯ АЛИФАТИЧЕСКОЙ УГЛЕВОДОРОДНОЙ ЦЕПИ С ВОСЕМЬЮ И БОЛЕЕ АТОМАМИ И КАКОГО-ЛИБО ЦИКЛИЧЕСКОГО ОСТАТКА В КАЧЕСТВЕ ОСНОВНОГО ГИДРОФОБНОГО ОСТАТКА НЕОБХОДИМО РАССМАТРИВАТЬ НАИБОЛЬШУЮ ГИДРОФОБНУЮ ЧАСТЬ.

Пример: Цепь C_6 в гексилсульфате натрия.

* В приложении Е на примерах, иллюстрирующих использование правил 4, 5 и 6, рассмотрены случаи классификации поверхностно-активных веществ, в гидрофильную часть которых входят как алифатические, так и циклические цепочки.

Правило 8

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЙ ГИДРОФОБНЫЙ ОСТАТОК ДОЛЖЕН УДОВЛЕТВОРЯТЬ ПРАВИЛУ 5 ИЛИ 6, ОПРЕДЕЛЯЮЩИМ ОСНОВНОЙ ГИДРОФОБНЫЙ ОСТАТОК.

Однако вторичная функциональная группа может входить в молекулу с двумя радикалами, которые не имеют большого значения при рассмотрении отдельно, но поскольку они связаны друг с другом, например функциональная группа дибутиламида — CO—N (C₄H₉)₂, — эти вторичные радикалы необходимо объединить вместе, а группу рассматривать в качестве характеристического гидрофобного радикала при условии, что он содержит по крайней мере восемь углеродных атомов.

В СООТВЕТСТВИИ С ПРАВИЛОМ 6 АРОМАТИЧЕСКАЯ ПРОМЕЖУТОЧНАЯ СВЯЗЬ, ДАЖЕ КОГДА ОНА НЕ ИМЕЕТ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ, ДОЛЖНА РАССМАТРИВАТЬСЯ КАК ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЙ ГИДРОФОБНЫЙ ОСТАТОК.

6. КЛАССИФИКАЦИЯ

Классификация основана на использовании десятичной системы с применением как минимум 10 цифр, разделенных на три группы из трех цифр, по крайней мере с одной дополнительной цифрой, таким образом, чтобы можно было определить основные гидрофильные группы.

Группы цифр записывают в виде колонок в соответствии с конститутивной последовательностью относительно позиций, рассмотренных выше.

Каждая колонка содержит подразделы, пронумерованные от 0 до 9. Ноль обычно означает, если не оговорено особо, отсутствие функциональных групп или характеристики в соответствии со специальными указаниями различных колонок.

Детальное описание элементов, используемых в классификации, приведено в приложении В, а обсуждение вопросов применения десятичной системы классификации — в приложении Г.

В приложении Е даны примеры этой классификации.

В приложении Д представлена система классификации для справок на перфокартах.

Обозначение поверхностно-активных веществ

Колонки 1—3

F₁ — Ключевая гидрофильная группа. Характеристические свойства

1 Анионная		2 Катионная		3 Неионогенная	
0	Отсутствует AA	0	Отсутствует AA	0	Отсутствует AA
1	—COOH BB	1	Первичный амин BB	1	Алифатическая гидроксильная группа BB
2	—OSO ₃ H CC	2	Вторичный амин CC	2	Алициклическая или ароматическая гидроксильная группа CC
3	—SO ₃ H DD	3	Третичный амин DD	3	Неразветвленный полиэфир при промежуточной цепи DD
4	—S—SO ₃ H EE	4	Изонитрил EE	4	Разветвленный полиэфир при промежуточной цепи EE
5	—SO ₂ H, включая другие серные функции —SO ₂ NH(r) FF	5	Четвертичные аммониевые катионы FF	5	Производные сорбитана, маннитана, углеводов FF
6	Эфиры ортофосфорной кислоты GG	6	Пиридиний-ион GG	6	Производные сорбитана, маннитана и оксикалированных углеводов GG
7	Фосфорные кислоты HH	7	Сульфоний-ион HH	7	Карбонильная группа HH

F₁ — Ключевая гидрофильная группа. Характеристические свойства

1 Анионная	2 Катионная	3 Неионогенная
8 Перкислоты KK	8 Фосфоний-ион KK	8 Уреазы, уреиды и полипептиды KK
9 Другие анионные функциональные группы LL	9 Другие катионные функциональные группы LL	9 Другие неионогенные функциональные группы LL

Колонки 4—6

R₁ — Основная гидрофобная часть. Важнейшие характеристические свойства

4 Состав	5 Замещение	6 Связь основной функции F ₁
0 Неразветвленная алифатическая группа AA	0 Отсутствие AA	0 Неароматическая первичная AA
1 Разветвленная алифатическая группа BB	1 Ненасыщенные связи —C=C— —C=C— BB	1 Неароматическая вторичная BB
2 Алифатическая группа, терпены CC	2 Алкильная группа, связанная с циклами CC	2 Неароматическая третичная CC
3 Неконденсированная бензольная группа DD	3 Циклическая группа DD	3 Промежуточной цепью к кольцу, первичная DD
4 Ароматическая группа с конденсированными кольцами EE	4 Заместители — галогены, нитро-, нитрозо-, амидогруппы EE	4 Промежуточной цепью к кольцу, вторичная EE
5 Гетероциклическая группа с одним неуглеродным атомом в кольце FF	5 Гидроксильная группа эфиров FF	5 Промежуточной цепью к кольцу, третичная FF
6 Гетероциклическая группа с двумя и более неуглеродными атомами в кольце GG	6 Карбоксильные функциональные группы и производные —COO(r) —CON(r) ₂ и т.п. GG	6 Прямой связью к ароматическому кольцу GG
7 Полимерная группа HH	7 Сульфидные и сульфатные функциональные группы HH	7 Прямой связью к неароматическому углеродному кольцу HH
8 Группа, содержащая другие элементы в цепи KK	8 Первичные, вторичные и третичные аминовые функциональные группы KK	8 Прямой связью через углеродный атом гетерокольца KK
9 Другие гидрофобные группы Z, Y, X	9 Другие заместители и заместители химически необозначенные ZZ	9 Прямой связью через неуглеродный атом гетерокольца ZZ

Колонки 7, 8, 9

R — гидрофобная часть. Дополнительные характеристические свойства

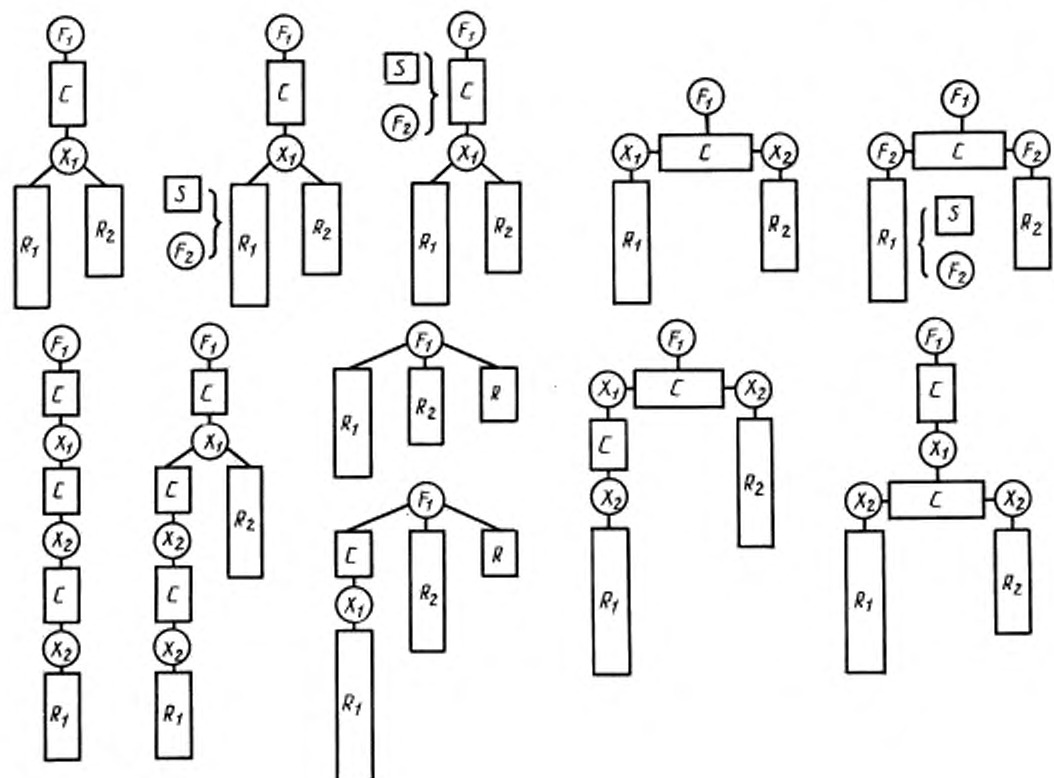
7 Промежуточная функциональная группа X ₁		8 Промежуточная функциональная группа X ₂		9 Характеристическая гидрофобная часть R ₂	
0	Отсутствует AA	0	Отсутствует AA	0	Отсутствует AA
1	—COO—F ₁ BB	1	—COO—R BB	1	BB Часть R ₂ идентичная части R ₁
2	—OOC—F ₁ CC	2	—OOC—R CC	2	CC Алифатическая разветвленная или неразветвленная
3	—CON(r)—F ₁ —N(r)CO—F ₁ одна и две промежуточные функциональные группы DD	3	—CON(r)—R —N(r)CO—R одна и две промежуточные функциональные группы DD	3	DD Насыщенные циклические углеводороды, олефиновые, циклические или алициклические углеводороды
4	—SO ₂ N(r)—F ₁ —N(r)SO ₂ —F ₁ EE	4	—SO ₂ N(r)—R —N(r)SO ₂ —R EE	4	EE Ароматическая гетероциклическая
5	—O—F ₁ FF одна, две, три промежуточные функциональные группы	5	—O—R FF одна, две, три промежуточные функциональные группы	5	FF Группа, замещенная гидроксилом или OR ₂
6	—S—F ₁ —SO—F ₁ —SO ₂ —F ₂ GG	6	—S—R —SO—R —SO ₂ —R GG	6	GG Группа, замещенная N(r) ₂ или NH(r)
7	—N(r)—F ₁ HH	7	—N(r)—R HH	7	HH Группы с —COOH и производными функциональными группами
8	Другие X—F ₁ KK	8	X—R KK	8	KK Группы с такими функциональными группами, как —SO ₃ H, —OSO ₃ H и аналогичными
Дополнительные заместители, характеристические свойства при отсутствии функциональной группы X ₁				9 LL Полимерная группа, содержащая Si, B и другие гидрофобные группы	
9	Дополнительные заместители —C=C— —C=C— LL	9	Заместители колонки 5 или промежуточная цепь C LL		

Гидрофильная часть
Дополнительные характеристические свойства

10/1 Анионные		10/2 Катионные		10/3 Неионогенные	
0	Отсутствие AA	0	Отсутствие AA	0	Отсутствие AA
1	Соли щелочных металлов: Li, Na, K и т.п. (группа I а) BB	1	Одна или две гидрофобные группы, неорганический анион BB	1	Характеристическая гидроксильная функциональная группа BB

Гидрофильная часть
Дополнительные характеристические свойства

10/1 Анионные	10/2 Катионные	10/3 Неионогенные
2 Соли щелочно-земельных металлов: Mg, Ca, Sr, Ba и т.п. (группа IIa)	2 Одна или две гидрофобные группы. Органический катион	2 Характеристическая кислотная функциональная группа
3 Соли драгоценных и переходных металлов: Cu, Ag, Zn, Cd, Hg (группа Ib и IIb)	3 Одна или две гидрофобные группы. Бензиловый радикал. Неорганический анион	3 Характеристическая эфирная функциональная группа
4 Соли переходных металлов: Cr, Mn, Fe, Co, Ni (группы VIa, VIIa и VIII)	4 Одна или две гидрофобные группы. Бензиловый радикал. Органический анион	4 Характеристическая амидная функциональная группа
5 Соли металлов с р-валентностями: Al, In, Sn, Pb, Bi (группа от IIIв до Vв)	5 Три гидрофобные группы. Неорганический анион	5 Характеристическая сульфамидная группа $-SO_2N(r)_2$
6 Соли лантанидов и актинидов: La, Ce, Th, U	6 Три гидрофобные группы. Органический анион	6
7 Аммониевые соли	7 Комплексные соединения металлов	7
8 Соли органических оснований	8 Бетаин	8 Металлоорганические производные
9 Соли комплексных соединений металлов.Metalлоорганические основания	9 Другие специальные характеристики	9 Другие характеристические функциональные группы



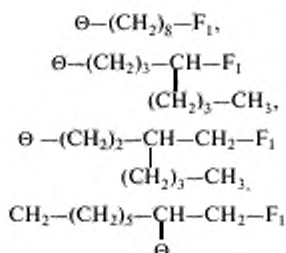
ПРИЛОЖЕНИЕ Б
Обязательное

ПРАВИЛА ОБОЗНАЧЕНИЯ

Случай поверхностно-активных веществ, гидрофобная часть которых состоит из алифатической цепи и колец, особенно важен. На следующих примерах показано применение правил 4, 5 и 6;

θ — обозначен циклический остаток (кольцо).

Для веществ



основной гидрофобный остаток представлен алифатической цепью с семью углеродными атомами, тогда как циклический остаток θ рассматривается как заместитель в основном гидрофобном остатке.

Колонка 2 обозначает основные функциональные группы (катионного типа) или функциональные группы, классифицируемые как таковые в солях.

Колонка 3 обозначает такие функциональные группы, которые не обладают ионогенными свойствами, или группы, классифицируемые как таковые для функциональных групп неионогенного типа. Например, простой эфир — производное спиртовой функциональной группы.

Обозначение основных функциональных групп с помощью цифр в колонках 1, 2 и 3 необходимо ограничить минимальным их количеством. Обозначения должны приводиться в порядке их относительной значимости в соответствии с приведенными выше правилами.

Обозначение дополнительных функциональных групп меньшей важности необходимо проводить в соответствии с колонкой 5 классификации. Например, гидроксильную группу рицинолевой кислоты нужно обозначать не как основную функцию, а как заместитель из колонки 5.

В.2. Вторая группа трех колонок: колонки 4, 5 и 6

«R₁ — Основной гидрофобный остаток. Важнейшие описательные свойства»

Эта группа предназначена для классификации элементов основного гидрофобного остатка (в основном наиболее удаленных от основной функциональной гидрофильной группы) и связи основной функциональной группы, определяющей полярные/неполярные структурные остаточные ионы молекулы.

Колонка 4 описывает состав основного гидрофобного радикала или остатка R₁. Она построена таким образом, что позволяет показать конститутивные элементы гидрофобных радикалов, четкое отличие одного элемента от другого, что делает возможным проведение полной классификации.

Несмотря на то, что колонка 4 считается основной, она часто является фактором, определяющим общий характер гидрофобного остатка. Изододецилбензолсульфонат классифицируется в подразделе 3 колонки 4: «неконденсированный бензольный остаток». Производные алкилбензимидазола классифицируются в подразделе 6 колонки 4: «гетероциклический остаток с 2 или 4 неуглеродными атомами в кольце».

Колонка 5 описывает заместители, которые могут встречаться в гидрофобной части, в частности в основном гидрофобном остатке, обозначенном в колонке 4.

Хотя один и тот же гидрофобный остаток может иметь несколько заместителей, желательно, чтобы в десятичной классификации отмечался единственный заместитель, тот, который полностью дифференцировал бы классифицируемую молекулу. За исключением какого-либо решающего признака этого эффекта следующим должен обозначаться в порядке своей важности основной углеродный заместитель (цепь или кольцо), затем заместитель вторичной функции F₁ наиболее полярный заместитель и в последнюю очередь степень насыщенности (замещение π электронами).

Колонка 6 обозначает способ, согласно которому основная гидрофильная группа F₁ связана с остатком молекулы. Колонка построена так, что позволяет получить дополнительную информацию о составе молекулы.

Например, использование цифры колонки 4, обозначающей кольцевые конститутивные элементы, в сочетании с обозначением для функциональной связи, непосредственно не связанной с кольцом, показывает существование углеродной цепи, отделяющей кольцо от функциональной группы.

В.3. Третья группа трех колонок: колонки 7, 8 и 9

«R — Гидрофобная часть. Дополнительные свойства»

В разделах от 0 до 8 колонок 7 и 8 описаны промежуточные функциональные группы, которые могут отделять основную гидрофильную группу F₁ либо от основного гидрофобного остатка, либо от характеристического гидрофобного остатка. Эти отделения также предполагают существование промежуточных углеродных связей C (или X).

Колонка 7 обозначает (от 0 до 8) промежуточную функциональную группу X₁, тесно связанную с основной гидрофильной функциональной группой F₁.

Колонка 8 обозначает (от 0 до 8) вторичную промежуточную функциональную группу X₂, которая может либо отделять основной гидрофобный радикал R₁ от функциональной группы F₁ посредством отделяющей связи (C или X), либо вводить дополнительный характеристический гидрофобный радикал R₂.

В сложных случаях, когда несколько промежуточных функциональных групп X₂ могут существовать в одной и той же молекуле, колонка 8 должна в первую очередь показать функциональную группу, которая вводит дополнительный характеристический гидрофобный радикал R₂. Если такой радикал отсутствует, то обозначаемая промежуточная функциональная группа X₂ должна быть функциональной группой, которая наиболее близко располагается относительно основного остатка R₁.

В связи с функциональными особенностями колонок 7 и 8 особое внимание необходимо уделить указанным данным в разд. 3 и 5.

В этих случаях для групп промежуточных полифункциональных связей, которые могут включать до трех промежуточных простых функциональных групп и группировок, делается оговорка. Число три — максимальное, как указано выше, количество функциональных групп этого рода, которые становятся гидрофильными группами, вполне удовлетворяющими обозначению неионогенной гидрофильной группы в колонке 3, первой группы трех колонок.

Примечание. Это применимо только в случае простых промежуточных связей, таких как $O-CH_2-CH_2-O$ полиэтиленоксидов.

Цифры 9 колонок 7 и 8 обеспечивают следующие дополнительные характеристики гидрофобной части R_1 (эти характеристики включены сюда для повышения гибкости классификации и в значительной степени расширяют при необходимости возможности сочетаний).

При отсутствии промежуточной функциональной группы X_1 (т.е. промежуточной соединительной связи C) цифра 9 колонки 7 предусматривает возможность обозначения дополнительной ненасыщенной связи в углеводородной цепи основного гидрофобного остатка. Эта информация важна в случае классификации линолевых и рицинолевых производных. Информацию можно расширить, чтобы охватить случай производных, включающих промежуточные функции X и промежуточные связи C при условии, что обозначения колонки 8, которая представляет главным образом промежуточные функциональные группы X_2 , используются в данный момент для обозначения промежуточной функции X_1 . Цифра 9 колонки 8 используется только в случае отсутствия промежуточной функциональной группы X_2 . Использование цифры 9 в классификации далее обозначает, что указания заместителей, находящихся в колонке 5 второй группы трех колонок, относятся исключительно к заместителям, встречающимся в более характеристической промежуточной связи C . Эта установка позволяет классифицировать такие продукты, как сульфированный глицериллаурат.

Колонка 9 группы описывает характеристический гидрофобный остаток R_2 , представленный функциональными связями в молекуле или функционально связанный как вторичный гидрофобный остаток с остальной частью молекулы.

Характеристический гидрофобный остаток R_2 этого рода включается в молекулу посредством функциональных связей X_1 и X_2 . Далее он становится характеристическим в том смысле, что обозначает, в частности, ароматическое или алифатическое свойство молекулы, которая станет явно приоритетной.

С другой стороны, колонка 9 также обозначает характеристический гидрофобный остаток R_2 , который проявляется как адекватный гидрофобный дополнительный радикал. Функционально связанный остаток этого рода может быть присоединен ко всей молекуле — посредством промежуточной функциональной группы X_2 (как в случае сульфированных диглицириновых кислот), функциональной группы заместителя F_2 или даже какими-либо промежуточными функциональными группами X или основными функциональными группами F_1 при условии, что эти функциональные группы поливалентны, например аминовая функциональная группа — вторичные или третичные амины, четвертичные аммониевые группы и т.п.

Цифра 1 колонки 9 используется только в случае характеристического радикала дополнительной природы. Остаток R_2 , который идентичен в соответствии с классификацией остатку R_1 , обозначен цифрой 1, в частности для различения полиглицеридов, диалкиламинов и т.п.

В.4. Четвертая группа трех колонок: колонки 10/1, 10/2, 10/3

«Гидрофильная часть. Дополнительные свойства»

Эта секция может использоваться в десятичной классификации в виде одной или двух цифр.

Дополнительные свойства полярных групп, обозначенных таким образом, относятся, в частности, к солеобразующим элементам ионных функциональных групп и преобразованным неионогенным функциональным группам. Они обеспечивают дополнительное описание сложных функциональных групп и позволяют оценить солюбилизирующие свойства.

Колонка 10/1 описывает анионные компоненты, обеспечивая системную таблицу солеобразующих катионов. Сложные катионы, описанные в ячейке 9 этой колонки, являются катионами, металлокоординированными с простыми молекулами, в которых гидрофобные свойства не являются доминирующими (NH_3 , этилендиамин, анилин и т.п.), или катионами истинных металлоорганических оснований.

Колонка 10/2 описывает катионные соединения, характеризуя наиболее точно состояние полифункциональной валентности гидрофильной группы (см. также колонку 9 третьей группы трех колонок, которая перекрывает часть этого функционального разнообразия). Это подчеркивает важную роль, которую играет солеобразующий анион.

Комплексы металлов, описанные в ячейке 7 колонки 10/2, являются соединениями солей металлов с молекулами, которые имеют состав поверхностно-активных веществ, являющимися в итоге основанием для

классификации при применении обозначений предшествующих групп колонок. Например, комплекс хлорида меди с двумя молекулами лаурилпропилендиамин.

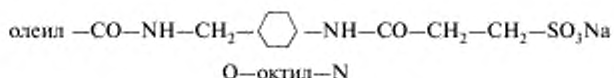
Колонка 10/3 представляет подробности для производных неионогенных функциональных групп, которые недостаточно полно описаны в колонке 3 первой группы трех колонок.

Ячейка 8 колонки 10/3 охватывает металлоорганические производные, которые считаются неионогенными и не могут более точно описываться в предыдущих классификационных группах. Например, триалкилалюминий.

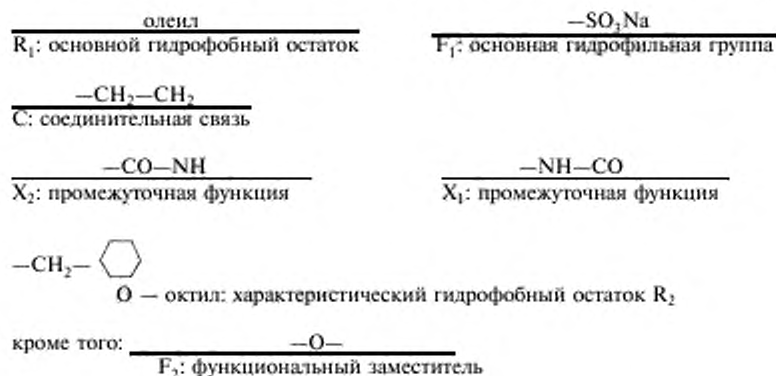
ПРИЛОЖЕНИЕ Г
Обязательное

**ОБСУЖДЕНИЕ ДЕСЯТИЧНОЙ СИСТЕМЫ ОБОЗНАЧЕНИЙ
ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ**

Г.1. В качестве примера молекулы, обозначение которой вызывает затруднение, рассмотрим сложную молекулу состава



Очевидно, что разнообразные элементы обозначения не позволяют точно и однозначно определить тип молекулы. Однако с помощью логического анализа состава молекулы можно прийти к следующему:



n — октил: вторичный характеристический гидрофобный остаток R₂.

Наиболее важными элементами молекулы являются:

первостепенные,

функциональная группа SO₃Na, обозначаемая цифрой 3 колонки 1;

основной гидрофобный остаток — олеил, обозначаемый цифрой 0 колонки 4;

второстепенные,

ненасыщенная связь олеинового остатка, обозначаемая цифрой 1 колонки 5;

связь основной функциональной группы, обозначаемой цифрой 0 колонки 6;

промежуточная функциональная группа X₁, обозначаемая цифрой 3 колонки 7;

промежуточная функциональная группа X₂, обозначаемая цифрой 3 колонки 8;

характеристический гидрофобный остаток ароматического типа, обозначаемый цифрой 4 колонки 9;

на последнем месте соль, образуемая катионом Na⁺, обозначаемая цифрой 1 колонки 10/1.

Таким образом, молекула должна обозначаться следующим индексным номером: 300.010.334.1.

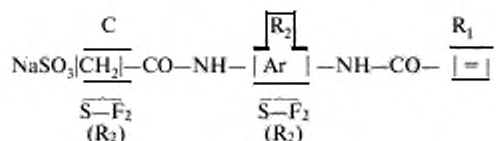
Г.2. Очевидно, что любой другой способ определения элементов предыдущей формулы представит меньше информации о составе молекулы. Наряду с этим необходимо признать, что возможно определить:

а) функциональную группу заместителя — O — характеристического бензольного остатка;

б) октиловый гидрофобный остаток, который является также характеристическим, но второстепенного значения.

С. 14 ГОСТ 29213—91

Г.3. Предыдущий индексный номер, однако, соответствует синтетической диаграмме, которая возможно будет следующей:



R₁ линейная или разветвленная цепь.

Обозначение индивидуально для какой-либо одной молекулы, соответствует какой-либо определенной химической молекуле, а не смеси.

Можно обозначать смесь двух поверхностно-активных веществ различного химического состава, представляя смесь двумя сериями цифр обозначения, соответствующими двум смешанным продуктам.

С другой стороны, нельзя обозначать неопределенный состав основного гидрофобного радикала, который часто встречается как результат преобразования природных жирных веществ или переработки синтетического сырья.

Например:

смесь C₁₂ — C₁₄ — C₁₆ цепей, полученных из природных жирных кислот;

состав сложных смесей окислалкилированных синтетических смесей;

смесь различных структурных тетрапропиленов и т.п.

ПРИЛОЖЕНИЕ Д
Обязательное

КЛАССИФИКАЦИЯ ДЛЯ СПРАВОК НА ПЕРФОКАРТАХ

Предыдущие обсуждения использования десятичной классификации подчеркивают важность работы технического персонала, применяющего систему. Кроме того, необходима дополнительная информация, которая не может использоваться в рамках простой десятичной системы.

Необходима классификация, предпочтительно на перфокартах, которая могла бы использоваться техническим персоналом для справок.

Для того чтобы система классификации для справок на перфокартах более полно соответствовала своему назначению, необходимо соблюдать следующие условия:

- а) не следует вносить какие-либо изменения в основные элементы классификации, отраженные в десятичной системе;
- б) необходимо соблюдать правила классификации, используемые в десятичной системе;
- в) необходимо обеспечить более подробную информацию относительно большего числа элементов системы классификации — основных функциональных групп, гидрофобных остатков, промежуточных связей, заместителей и других характеристик;
- г) необходимо предусмотреть состав гидрофобных остатков различного происхождения в сложных смесях;
- д) необходимо предусмотреть возможность наложения системы на перфокартах на систему десятичной классификации без каких-либо изменений способа представления.

Разработана и ниже описана классификация для справок на перфокартах подобного рода. Она накладывается на десятичную систему классификации, описанную выше. В данной классификации используются буквенные обозначения, приведенные либо в колонках, либо в дополнении к классификации. Эти буквенные обозначения соответствуют перфорациям на перфокартах.

Классификация для справок должна разрабатываться только специалистом.

Справочная классификация оформлена в виде четырех групп колонок, таких же как и в случае десятичной классификации.

В каждой колонке, кроме цифры десятичной классификации, имеются и две буквы справочной классификации, которые означают дополнительную перфорацию, соответствующую цифрам на перфокартах.

Д.1. Первая группа трех колонок: колонки 1, 2 и 3

При применении системы нельзя менять цифровые обозначения основной функциональной группы F_1 или любой другой функциональной группы, определяемой как неосновная функциональная группа. Более того, для обозначения любой другой функции или функциональной группы, которая описывается в подразделах колонок и которая могла бы быть представлена в молекуле в качестве дополнительной группы (т. е. не обозначенной в колонках 1, 2 и 3 десятичной классификации), в перфокарту должна вводиться соответствующая буква. Обозначение необходимо ввести, несмотря на состояние дополнительной характеристики функциональной группы, показываемой в основном в колонках 10/1, 10/2 и 10/3.

Например, если в молекуле присутствует функциональная группа —COOH в виде соли или какой-либо другой форме, которая не обозначена в десятичной системе, то на карточке должна перфорироваться буква В, соответствующая цифре 1 колонки 1.

Если в десятичную классификацию не включены две вторичные функциональные группы —COOH, то на карте должны перфорироваться В и В, соответствующие цифре 1 колонки 1.

Цифры, используемые в десятичной классификации, не должны перфорироваться. В этом случае остается порядок функциональных групп, который заложен в десятичной классификации.

Независимо от позиции гидрофильной функциональной группы в молекуле для обозначения гидрофильных групп необходимы функциональные группы или группы молекул: основной гидрофобный остаток, промежуточная связь в качестве заместителя, характеристический гидрофобный остаток или любой другой углеродный остаток молекулы (в случае поливалентных азотсодержащих функциональных групп). В этом случае можно оставить порядок функциональных групп, определяя позицию функциональной группы анионного, катионного и неионогенного типов, не обозначенных в десятичной классификации.

Например, десятичная классификация обозначает группу —SO₃H в качестве основной функциональной группы сульфированной пальмитиновой кислоты. Функциональная группа —COOH может быть включена только как функциональная группа-заместитель (колонка 5). В классификации для справок перфокарта должна иметь перфорации, соответствующие перфорациям 3 и В колонки 1, которые всегда четко означают, что порядок классификации зависит от функциональной группы —SO₃H (а не 3 и 1, указывающие на недостоверный порядок). Сульфированную себациновую кислоту следует обозначать перфорациями 3, В и В колонки 1.

Д.2. Вторая группа трех колонок: колонки 4, 5 и 6

Для обозначения гидрофобных остатков, отличающихся от основных гидрофобных остатков, можно использовать перфорации букв, соответствующих колонке 4. Однако не следует выполнять перфорацию для буквы, обозначающей гидрофобный остаток, уже обозначенный цифрой десятичной системы колонки 9. Перфорации букв колонки 4 необходимо использовать только в исключительных случаях для обозначения: либо гидрофильных остатков, идентичных основному остатку — триглицеридов, трилауриламинов и т.п.; либо характеристических гидрофобных остатков, обладающих вторичными характеристическими особенностями — октилового остатка, функционально связанного со всей молекулой.

Буква, соответствующая колонке 4, никогда не должна перфорироваться для обозначения характеристического гидрофобного остатка, расположенного между двумя промежуточными функциональными группами молекулы. Например, глицерид, который следует обозначить в десятичной классификации О (колонка 4) и 1 (колонка 9), на перфокартах должен классифицироваться с использованием перфорации О и А (колонка 4) и 1 (колонка 9), и не О, А, А (колонка 4).

Перфорированные буквы, соответствующие цифрам колонки 5, обозначают дополнительные заместители, не показанные десятичной классификацией, наличие остатка, как и любого гидрофобного остатка, который может быть обозначен перфорацией в колонке 4 в соответствии с правилами системы классификации, или промежуточных связей, независимо от степени их значимости, посредством перфорации цифр 9 колонок 7 и 8 в соответствии с правилами, приведенными ниже.

Буквы колонки 6 обозначают способы, посредством которых гидрофильные функциональные группы, отличные от основной гидрофильной функциональной группы (обозначение цифрой в десятичной классификации), связаны с гидрофобной частью.

Способ связи функциональных групп, уже обозначенный цифрой десятичной классификации, отличных от основной функциональной группы, должен обозначаться в порядке значимости функциональных групп. После этого должен использоваться порядок полярности.

Кроме групп трех колонок 4, 5 и 6 для получения дополнительной информации о состоянии смесей гидрофобных цепей, образующих часть состава, необходимо использовать три перфорации — Z, Y, X:

- перфорация Z обозначает средний гидрофобный остаток смеси цепей природных жирных кислот;
- перфорация Y обозначает средний гидрофобный остаток смеси цепей синтетических олефинов (например, оксипропанолы, синтетические спирты);
- перфорация X обозначает средний гидрофобный остаток смеси цепей полимерных олефинов.

Например, перфорация 3 колонки 4 и перфорация X соответствует додецилбензолсульфонату натрия, полученному путем конденсации бензола и полимеризованного тетрапропилена.

Д.3. Третья группа трех колонок: колонки 7, 8 и 9

Для цифр от 0 до 8 колонок 7 и 8 использование буквенных перфораций обозначает многочисленные промежуточные связи: соседние с основной гидрофильной функциональной группой колонки 7 и соседние с основным гидрофобным остатком или характеристические гидрофобные остатки вторичной природы колонки 8.

Для того чтобы избежать какой-либо неопределенности, касающейся использования букв колонок 7 и 8, необходимо в первую очередь обозначить сложные функциональные группы колонки 7, по крайней мере до того, как встретятся промежуточные функции, которые вводят характеристический гидрофобный остаток, не включая последнюю упомянутую промежуточную функциональную группу.

В классификации для справок необходимо использовать цифры 9 и соответствующие буквы колонок 7 и 8, учитывая следующее:

а) для перфорации цифры 9 на перфокартах нет необходимости твердо придерживаться ограничений, исходящих из десятичной классификации (отсутствие промежуточных функциональных групп X_1 и X_2 , соответственно), так как соответствующие функциональные группы на перфокарте можно обозначить буквами;

дополнительную степень ненасыщенности основного гидрофобного остатка или характеристического гидрофобного остатка вторичной природы необходимо маркировать буквенной перфорацией, соответствующей цифре 9 колонки 7;

буквенная перфорация, соответствующая цифре 9 колонки 8, означает, что в характеристических гидрофобных остатках или промежуточных соединительных связях присутствуют заместители, соответствующие буквам колонки 5;

б) буквенные обозначения, соответствующие колонке 8, никогда не должны дублировать обозначения справочной классификации, соответствующие колонке 4; они должны применяться в исключительных случаях для обозначения только характеристических гидрофобных остатков, присутствующих в молекуле между двумя промежуточными функциональными группами X.

Это позволяет подробно охарактеризовать цикличность или ее отсутствие в молекуле.

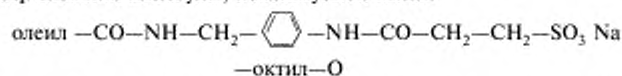
Д.4. Четвертая группа трех колонок: колонки 10/1, 10/2 и 10/3

В соответствии с десятичной классификацией перфорация цифр в этих трех колонках всегда обозначает функциональное состояние функциональных групп, индивидуально обозначенных цифрами в колонках 1, 2 и 3.

Буквенные перфорации, соответствующие определенным цифрам в колонках 10/1, 10/2 и 10/3, нужно использовать для описания функционального состояния функциональных групп, отличных от основной функциональной группы. В случае большого ряда факторов должен применяться уже упомянутый функциональный порядок, а затем другие функциональные группы в порядке полярности.

Справочная классификация, которая в действительности расширяет десятичную классификацию без какого-либо изменения обозначения цифр, довольно сложная и должна обслуживаться специалистами, которые будут расширять справочные данные классификации.

Рассмотрим пример сложной молекулы, используемой выше:



Эта молекула в соответствии с десятичной системой классификации имеет классификационный индексный номер 300.010.334.1, который нельзя изменить. Можно получить следующую информацию, неохватываемую десятичной классификацией:

а) октиловый вторичный характеристический гидрофобный остаток, обозначаемый перфорацией A колонки 4;

б) эфироксидный заместитель на промежуточной цепи, обозначенный перфорацией F колонки 5 и перфорацией I колонки 8, означающей, что этот заместитель располагается в промежуточной цепи.




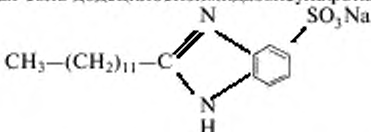
Классификационная справка, касающаяся этого продукта, будет следующей:

300.010.334.1;

xxx.AFx.x1x.x.

Вторая строчка обозначается дополнительной перфорацией.

ПРИМЕР ПРИМЕНЕНИЯ ОБОЗНАЧЕНИЯ
Е.1. Анионные поверхностно-активные вещества

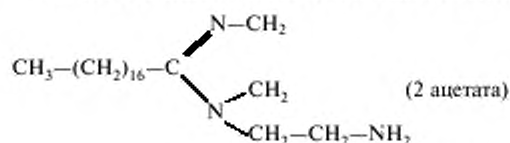
1. Лаурат натрия: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{10}-\text{COO}-\text{Na}$	100.000.000.1
2. Стеарат кальция: $[\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{16}-\text{COO}]-\text{Ca}$	100.000.000.2
3. Олеат натрия: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_7-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_7-\text{COO}-\text{Na}$	100.010.000.1
4. Линолеат натрия: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_4-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_7-\text{COO}-\text{Na}$	100.010.900.1
5. Рацинолеат аммония: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_5-\text{CHON}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-(\text{CH}_2)_7-\text{COO}-\text{NH}_4$	100.050.900.7
6. Натриевая соль олеинового эфира изотиовой кислоты: олеил- $\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{SO}_3\text{Na}$	300.010.100.1
7. бис-Диэтилгексил-сульфосукцинат натрия: (Этил) $_2$ -гексил- $\text{OOC}-\text{CH}-\text{SO}_3\text{Na}$ (Этил) $_2$ -гексил- $\text{OOC}-\text{CH}_2$	300.161.291.1
8. Стеарилметилтаурид натрия: $\text{C}_{17}\text{H}_{35}-\text{CO}-\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{SO}_3\text{Na}$ $\quad \quad \quad $ $\quad \quad \quad \text{CH}_3$	300.000.300.1
9. Натриевая соль <i>трет</i> -октилфенола, конденсированная с двумя молекулами этиленоксида и сульфированная: <i>t</i> -октил-  - $\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{SO}_3\text{Na}$	300.320.550.1
10. <i>изо</i> -Додecilбензолсульфонат натрия: <i>изо</i> - $\text{C}_{12}\text{H}_{25}-$  - SO_3Na	300.326.000.1
11. Додecilсульфат натрия: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{11}-\text{O}-\text{SO}_3\text{Na}$	200.000.000.1
12. <i>n</i> -Олеилсульфанилат натрия: олеил- $\text{CO}-\text{NH}-$  - SO_3Na	300.016.304.1
13. Додecilфосфоновая кислота: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{11}-\text{PO}_3\text{H}_2$	700.000.000.0
14. Натриевая соль додecilбензимидазолсульфоната 	300.626.000.1

Е.2. Катионные поверхностно-активные вещества

15. Додecilaminaцетат $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{11}-\text{NH}_2$ -ацетат	010.000.000.2
16. Додecilбензидиметиламмонийхлорид: $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{11}-\text{N}(\text{CH}_3)_2-\text{CH}_2-\text{C}_6\text{H}_5-\text{Cl}$	050.000.000.4

С. 18 ГОСТ 29213—91

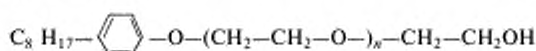
17. *n*-Гептадецил-*N*-аминоэтилимидазолинацетат: 010.623.700.2



Е.3. Неионогенные поверхностно-активные вещества

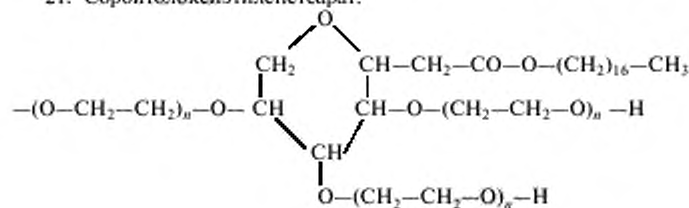
18. Этоксилированный додециловый спирт: 003.000.000.1
 $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_{11}-\text{O}(\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O})_n-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH}$

19. Этоксилированный октилфенол 005.320.500.1



20. Олеат полиэтиленгликоля:
 олеил- $\text{COO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-(\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2)_n-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH}$ 003.010.100.1

21. Сорбитолоксиэтиленстеарат: 006.000.100.1



ИНФОРМАЦИОННЫЕ ДАННЫЕ

1. РАЗРАБОТАН И ВНЕСЕН ТК 193 «Кислоты жирные синтетические, высшие жирные спирты, поверхностно-активные вещества»
2. УТВЕРЖДЕН И ВВЕДЕН В ДЕЙСТВИЕ Постановлением Комитета стандартизации и метрологии СССР от 26.12.91 № 2139
 Настоящий стандарт подготовлен методом прямого применения международного стандарта ИСО 896—77 «Вещества поверхностно-активные. Научная классификация» и полностью ему соответствует
3. ВВЕДЕН ВПЕРВЫЕ
4. ПЕРЕИЗДАНИЕ. Июль 2004 г.

Редактор *Л.В. Афанасенко*
 Технический редактор *В.И. Прусакова*
 Корректор *Т.И. Коновалова*
 Компьютерная верстка *А.И. Золотаревой*

Изд. лиц. № 02354 от 14.07.2000. Сдано в набор 09.06.2004. Подписано в печать 04.08.2004. Усл.печ.л. 2,32. Уч.-изд.л. 1,95.
 Тираж 83 экз. С 3076. Зак. 683.

ИПК Издательство стандартов, 107076 Москва, Колодезный пер., 14.
<http://www.standards.ru> e-mail: info@standards.ru
 Набрано в Издательстве на ПЭВМ

Отпечатано в филиале ИПК Издательство стандартов — тип. «Московский печатник», 105062 Москва, Лялин пер., 6.
 Пар № 080102