

**TCVN 7160 : 2002
ISO 2131 - 1972**

**CHẤT HOẠT ĐỘNG BỀ MẶT – PHÂN LOẠI ĐƠN GIẢN
SURFACE ACTIVE AGENTS – SIMPLIFIED
CLASSIFICATION**

Lời nói đầu

TCVN 7160 : 2002 hoàn toàn tương đương với ISO 2131-1972.

TCVN 7160 : 2002 do Ban kỹ thuật tiêu chuẩn TCVN/TC 91 "Chất hoạt động bề mặt" biên soạn, Tổng cục Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng đề nghị, Bộ Khoa học và Công nghệ ban hành.

Foreword

TCVN 7160 : 2002 is identical with ISO 2131-1972.

TCVN 7160 : 2002 is prepared by Technical Committee TCVN/TC91 "Surface active agents", submitted by the Directorate for Standards and Quality (STAMEQ), and approved by the Ministry of Science and Technology.

Chất hoạt động bề mặt – Phân loại đơn giản

Surface active agents – Simplified classification

1 Phạm vi và lĩnh vực áp dụng

Tiêu chuẩn này qui định cách đơn giản hóa việc phân loại chất hoạt động bề mặt (sau đây gọi là phân loại đơn giản), phù hợp với cách phân loại khoa học (ISO/R 896) về sắp xếp các gốc.

2 Nguyên tắc chung

Việc phân loại đơn giản chất hoạt động bề mặt cho phép những đặc tính của chúng được biểu thị bằng một hệ thống chữ và số rút gọn, gồm có một chữ cái và bốn con số (năm con số đối với trường hợp hợp chất gồm vài nhóm ưa nước), đối với các nguyên tố cấu trúc chính của phân tử dùng:

- 1) chữ cái để chỉ đặc tính ion;
- 2) con số thứ nhất để chỉ nhóm ưa nước;
- 3) con số thứ hai để chỉ nhóm kỵ nước;
- 4) con số thứ ba để chỉ nhóm chức trung gian;
- 5) con số thứ tư để chỉ tính chất bổ sung của nhóm ưa nước;
- 6) con số thứ năm (trong ngoặc đơn giữa

1 Scope and Field of Application

This Standard establishes simplified classification of surface active agents, in conformity, regarding the arrangement of radicals, with the scientific classification (ISO/R 896)

2 Principle

The simplified classification of surface active agents enables their characteristics to be expressed by an abbreviated lettering and numbering system, consisting of a letter and four figures (five in the case of compounds comprising several hydrophilic groups), for the main structural elements of the molecule, using

- 1) the letter to designate the ionic character;
- 2) the 1st figure to designate the hydrophilic group;
- 3) the 2nd figure to designate the hydrophobic group;
- 4) the 3rd figure to designate an intermediate functional group;
- 5) the 4th to designate a supplementary property of the hydrophilic group;
- 6) the 5th figure (in parentheses between the

con số thứ nhất và thứ hai) để chỉ nhóm ưa nước thứ hai của hợp chất gồm vài nhóm ưa nước mang những đặc tính ion khác nhau.

Dựa vào bảng phân loại cho trong phụ lục A xuất phát từ cách phân loại khoa học chung, áp dụng các nguyên tắc qui định trong điều 3, tiến hành xác định những con số tương ứng với các nhóm có trong phân tử.

3 Nguyên tắc phân loại

3.1 Chọn nhóm ưa nước

Nguyên tắc 1

Nhóm ưa nước là điểm khởi đầu cho sự phân loại. Đặc tính ion của nó sẽ được chỉ ra ở một trong những chữ cái sau đây:

- A đối với những nhóm ưa nước anion;
- C đối với những nhóm ưa nước cation;
- N đối với những nhóm ưa nước non-ion;
- Z đối với những hợp chất lưỡng tính đích thực.

Nguyên tắc 2

Số thứ nhất trong thứ tự đánh số tiếp theo để chỉ những nhóm ưa nước chính, được lựa chọn từ sự có mặt của vài nhóm ưa nước với những đặc tính ion đồng nhất, tham khảo sự phân chia trong bảng A.1 của phụ lục A:

cho những nhóm:

- anion: 2 - 3 - 4 - 5 - 6 - 7 - 8 - 9 - 1
- cation: 5 - 6 - 7 - 8 - 9 - 1 - 2 - 3 - 4
- non-ion: 3 - 4 - 5 - 6 - 1 - 2 - 7 - 8 - 9

1st and 2nd) to designate the second hydrophilic group of compounds comprising several hydrophilic group of different ionic characters.

The operation is carried out by determining, from the classification Table given in the Annex arising from the general scientific classification, the figures which correspond to the groups present in the molecule, by the application of the rules defined in section 3.

3 Rules of classification

3.1 Choice of the hydrophilic group

Rule 1

The hydrophilic group is the point of departure for the classification. Its ionic character shall be designated by one of the following letters:

- A for anionic hydrophilic groups;
- C for cationic hydrophilic groups;
- N for non-ionic hydrophilic groups;
- Z for true ampholytic compounds.

Rule 2

In the presence of several hydrophilic groups with identical ionic characters, select as the principal hydrophilic group that which is designated first in the following numbering order, with reference to the divisions in the table in the annex A:

for groups which are

- anionic: 2 - 3 - 4 - 5 - 6 - 7 - 8 - 9 - 1
- cationic: 5 - 6 - 7 - 8 - 9 - 1 - 2 - 3 - 4
- non-ionic: 3 - 4 - 5 - 6 - 1 - 2 - 7 - 8 - 9

Nguyên tắc 3

Khi có mặt của vài nhóm ưa nước với những đặc tính ion khác nhau, phải xem xét hai phương án sau:

- a) khi có mặt của những nhóm anion và cation (hợp chất lưỡng tính), sử dụng chữ cái Z để chỉ ra nhóm cation thứ nhất và nhóm anion thứ hai, trong ngoặc đơn, áp dụng nguyên tắc 2 nếu cần thiết;
- b) khi có mặt của một nhóm ion và một nhóm non- ion, sử dụng chữ cái biểu thị những đặc tính của nhóm ion để chỉ ra nhóm thứ nhất này và nhóm non-ion thứ hai, trong ngoặc đơn, áp dụng nguyên tắc 2 nếu cần thiết;

3.2 Chọn nhóm kỵ nước**Nguyên tắc 4**

Nhóm kỵ nước đã xác định chính là gốc quan trọng nhất đối với tác động kỵ nước, nó thường là chuỗi hydrocacbon dài nhất (kể cả vòng).

Nguyên tắc 5

Theo nguyên tắc 4, một chuỗi hydrocacbon béo được coi như đủ dài nếu nó gồm ít nhất 8 nguyên tử cacbon.

Nguyên tắc 6

Nếu chất hoạt động bề mặt không bao gồm một chuỗi hydrocacbon với ít nhất 8 nguyên tử cacbon, thì chấp nhận gốc vòng như là một nhóm kỵ nước đã xác định.

Rule 3

In the presence of several hydrophilic groups with different ionic characters, two alternatives must be considered;

- a) in the presence of anionic and cationic groups (ampholytic compounds), use the letter Z. Designate the cationic group first and the anionic group second, in parentheses, applying Rule 2 if necessary;
- b) in the presence of an ionic group and a non-ionic group, use as the letter that which characterises the ionic group. Designate this first and the non-ionic group second, in parentheses, applying Rule 2 if necessary.

3.2 Choice of the hydrophobic group**Rule 4**

The determinant hydrophobic group is the most important radical for the hydrophobic behaviour; in general, it is usually the longest hydrocarbon chain (including rings), as far removed as possible from the principal hydrophilic group.

Rule 5

An aliphatic hydrocarbon chain shall be regarded as sufficiently long, in the terms of Rule 4, if it consists of at least 8 carbon atoms.

Rule 6

If the surface active agent does not contain a hydrocarbon chain with at least 8 carbon atoms, take a cyclic residue as the determinant hydrophobic group.

3.3 Chọn nhóm chức trung gian

Nguyên tắc 7

Chọn lựa một nhóm chức trung gian gần nhất với một nhóm ưa nước chính.

Chú thích – Chất hoạt động bề mặt quan trọng nhất phù hợp với công thức:



trong đó những chữ cái F, R', X trong bảng A.1 của phụ lục A có nghĩa như sau:

- R để chỉ nhóm kỵ nước chính;
- X để chỉ một chức trung gian;
- R' để chỉ một chuỗi hydrocacbon ngắn;
- F để chỉ nhóm ưa nước chính.

Những chữ F, R', X trong bảng A.1 của phụ lục A có nghĩa giống nhau; mặt khác chữ r, cũng được sử dụng trong bảng, để chỉ một hydro hoặc gốc alkyl.

3.4 Chọn tính chất bổ sung của nhóm ưa nước

Nguyên tắc 8

Tính chất bổ sung của nhóm ưa nước là tính chất bổ sung của nhóm ưa nước chính, được lựa chọn cho phù hợp với số thứ tự trong bảng A.1.

3.5 Chú thích

Nhiều thành phần trong ngoặc đơn có thể bị mất, vì vậy cần thiết ghi chép sự phân loại trên phiếu đục lỗ hoặc trên máy tính. Trong trường hợp các hợp chất có hai hoặc nhiều nhóm ưa nước có đặc tính ion giống nhau, chèn số 0 vào giữa con số thứ nhất và con số thứ hai đang tồn tại. Trong trường hợp các hợp chất gồm có vài nhóm đặc tính ion khác nhau, đơn thuần bỏ dấu ngoặc đơn.

3.3 Choice of the intermediate functional group

Rule 7

Choose as the intermediate functional group the one which is nearest to the principal hydrophilic group.

NOTE – The most important surface active agents correspond to the formula



In which the letter F, R', X in the table A.1 given in the Annex A have the following meaning:

- R indicates the principal hydrophobic group;
- X indicates an intermediate function;
- R' indicates a short hydrocarbon chain;
- F indicates the principal hydrophilic group.

The letters F, R', X in the Table A.1 given in the annex A have the same meaning; on the other hand the letter r, used also in the table, indicates a hydrogen or alkyl residue.

3.4 Choice of the supplementary property of the hydrophilic group

Rule 8

The supplementary property of hydrophilic group shall be that of the principal hydrophilic group; it shall be selected in accordance with the numbering order in the table A.1.

3.5 Note

Should it appear to record the classification on punched cards or a computer, any parentheses there may be should disappear. In the case of compounds having two or more hydrophilic group with identical characters, insert 0 between the first and second figures obtained. In the case of compounds having several groups of different ionic characters, merely omit the parentheses.

Vi dụ A 1031 (xem Phụ lục B, điều B.1) trở thành A 10031 và ví dụ Z 2(1)002 (xem Phụ lục B, điều B.4) trở thành Z 21002.

Example A 1031 (see appendix B, section B.1) becomes A 10031 and example Z 2(1)002 (see appendix B, section B.4) becomes Z 21002.

Phụ lục A

(qui định)

Bảng A.1 - Phân loại đơn giản chất hoạt động bề mặt

Nhóm ưa nước			Xác định nhóm ký nước	Nhóm chức trung gian	Tính chất bổ sung của nhóm ưa nước		
anion	cation	non-ion			anion	cation	non-ion
			0 Gốc béo không nhánh	0 Không có	0 Không có	0 Không có	0 Không có
1 -COOH	1 Amin bậc nhất	1 Nhóm hydroxyl béo	1 Gốc béo nhánh	1 -COO - R' - F	1 Muối kim loại kiềm Li, Na, K v.v. (Nhóm Ia)	1 1 hoặc 2 gốc ký nước. Anion vô cơ	1 Chức hydroxyl đặc trưng
2 -OSO ₃ H	2 Amin bậc hai	2 Nhóm hydroxyl của alicyclic hoặc chất thơm	2 Gốc alicyclic tepen	2 -OOC - R' - F	2 Muối kim loại kiềm thổ Mg, Ca, Sr, Ba v.v. (Nhóm IIa)	2 1 hoặc 2 gốc ký nước. Anion hữu cơ	2 Chức este đặc trưng
3 -SO ₃ H	3 Amin bậc 3	3 Không có nhánh polyete trên dây hợp chất trung gian	3 Gốc benzen không ngưng tụ	3 -CON(r) - R' - F -N(r)CO - R' - F Chức trung gian 1 và 2	3 Muối của kim loại Cu, Ag, Zn, Cd, Hg (Nhóm Ib và IIb)	3 1 hoặc 2 gốc ký nước. Gốc benzyl và tương tự. Anion vô cơ	3 Chức este đặc trưng
4 -S-SO ₃ H	4 Oxit amin	4 Có nhánh polyete trên dây hợp chất trung gian	4 Gốc thơm với vòng ngưng tụ	4 -SO ₂ N(r) - R' - F -N(r)SO ₂ - R' - F	4 Muối kim loại chuyển tiếp Cr, Mn, Fe, Co, Ni (Nhóm V Ia, VIIa, VIII)	4 1 hoặc 2 gốc ký nước. Gốc benzyl và tương tự. Anion hữu cơ	4 Chức amit đặc trưng
5 -SO ₃ H Các chức sunfua khác, bao gồm -SO ₂ NH(r)	5 Amoni bậc 4	5 Dẫn xuất của sorbitan, mannitan, cacbohydrat và tương tự	5 Gốc vòng di đa với 1 nguyên tử không cacbon trên vòng	5 O - R' - (O - R') _n -F Chức trung gian 1, 2 và 3	5 Muối của kim loại Al, In, Sn, Pb, Bi (Nhóm IIIb đến Vb)	5 3 gốc ký nước. Anion vô cơ	5 Chức sulfamid đặc trưng SO ₂ N(r) ₂
6 Este của axit orthophosphoric	6 Pyridin imidazolin và tương tự	6 Dẫn xuất của sorbitan, mannitan, oxy alkyl cacbohydrat	6 Gốc vòng di đa với 2 hoặc nhiều hơn các nguyên tử không cacbon trên vòng	6 -S - R' - F -SO - R' - F -SO ₂ - R' - F	6 Muối của kim loại nhóm lantan và actin La, Ce, Th, U v.v...	6 3 gốc ký nước. Anion hữu cơ	6
7 Axit phosphonic	7 Sunphonic	7 Nhóm carbonyl	7 Gốc trùng hợp	7 -N(r) - R' - F	7 Muối amoni	7 Những phức kim loại	7
8 Peraxit	8 Phosphonic	8 Ure, ureides, polypeptit	8 Gốc chứa nguyên tố khác trong chuỗi	8 Những nhóm khác - X - R' - F	8 Muối bazơ hữu cơ	8 Betain	8 Chất dẫn xuất hữu cơ chứa kim loại
9 Các chức anion khác	9 Các chức cation khác	9 Các chức non-ion khác	9 Các gốc ký nước khác	9	9 Muối phức kim loại Bazơ hữu cơ chứa kim loại	9 Những đặc trưng đặc biệt khác	9 Những chức đặc trưng khác

Annex A

(normative)

Table A.1 - Simplified classification of surface active agents


Hydrophilic group			Determinant hydrophobic group	Intermediate functional group	Supplementary properties of the hydrophilic group		
anionic	cationic	non-ionic			anionic	cationic	non-ionic
			0 Non-branched aliphatic residue	0 Absence of	0 Absence of	0 Absence of	0 Absence of
1 -COOH	1 Primary amine	1 Aliphatic hydroxyl group	1 Branched aliphatic residue	1 -COO - R' - F	1 Alkaline metal salts Li, Na, K etc. (Group Ia)	1 1 or 2 hydrophobic residues. Inorganic anion	1 Characterising hydroxyl function
2 -OSO ₃ H	2 Secondary amine	2 Alicyclic or aromatic hydroxyl group	2 Alicyclic residue terpenes	2 -OOC - R' - F	2 Alkaline earth metal salts Mg, Ca, Sr, Ba etc. (Group IIa)	2 1 or 2 hydrophobic residues. Organic anion	2 Characterising ester function
3 -SO ₃ H	3 Tertiary amine	3 Non-branched polyether on intermediate chain	3 Non-condensed benzene residue	3 -CON(r) - R' - F -N(r)CO - R' - F 1 and 2 intermediate functions	3 Salts of metal Cu, Ag, Zn, Cd, Hg (Groups Ib and IIb)	3 1 or 2 hydrophobic residues. Benzyl radical and similar. Inorganic anion	3 Characterising ester function
4 -S-SO ₃ H	4 Amino oxide	4 Branched polyether on intermediate chain	4 Aromatic residue with condensed rings	4 -SO ₂ N(r) - R' - F -N(r)SO ₂ - R' - F	4 Transition metal salts Cr, Mn, Fe, Co, Ni (Groups VIa, VIIa, V(II))	4 1 or 2 hydrophobic residues. Benzyl radical and similar. Organic anion	4 Characterising amide function
5 -SO ₂ H Other sulphur function, including -SO ₂ NH(r)	5 Quaternary ammonium	5 Derivatives of sorbitan, mannitan, carbohydrates and similar	5 Heterocyclic residue with 1 non-carbon atom on the ring	5 -O - R' - (O - R') _n F 1, 2 and 3 intermediate functions	5 Salts of metal Al, In, Sn, Pb, Bi (Groups IIIb to Vb)	5 Three hydrophobic residues. Inorganic anion	5 Characterising sulphamide function -SO ₂ N(r) ₂
6 Orthophosphoric acid esters	6 Pyridinium imidazolium and similar	6 Derivatives of sorbitan, mannitan, oxy alkyl carbohydrates	6 Heterocyclic residue with 2 or more non-carbon atoms on the ring	6 -S - R' - F -SO - R' - F -SO ₂ - R' - F	6 Lanthanum and actinium group metal salts La, Ce, Th, U etc...	6 Three hydrophobic residues. Organic anion	6
7 Phosphonic acids	7 Sulphonium	7 Carbonyl group	7 Polymer residue	7 N(r) - R' - F	7 Ammonium salts	7 Metallic complexes	7
8 Per acids	8 Phosphonium	8 Ure, ureides, polypeptides	8 Residue containing other elements in chain	8 Others -X - R' - F	8 Organic base salts	8 Betain	8 Organo-metallic derivatives
9 Other anionic functions	9 Other cationic functions	9 Other non-ionic functions	9 Other hydrophobic residues	9	9 Salts of complex metals. Organometallic bases	9 Other specialized characteristics	9 Other characterising functions

Phụ lục B

(tham khảo)

Ví dụ áp dụng phân loại giản đơn

B.1 Chất hoạt động bề mặt anion


Natri stearat	$C_{17}H_{35}COONa$	A 1001
Natri lauroyl sarcosinat	$C_{11}H_{23} - CO - N - CH_2 - COONa$ $ $ CH_3	A 1031
Natri laurylsunphat	$C_{12}H_{25} - OSO_3Na$	A 2001
Natri lauryl etoxy-ete sunphat	$C_{12}H_{25} - OCH_2 - CH_2 - OCH_2 - CH_2 - OSO_3Na$	A 2051
Muối natri của este sunphuric của lauroyl etanolamit	$C_{11}H_{23} - CO - NH - CH_2 - CH_2 - OSO_3Na$	A 2031
Natri alkylsunphonat	$C_{11}H_{23} - CH - C_2H_5$ $ $ SO_3Na	A 3001
Natri oleyl-oxyetan sunphonat	$C_{17}H_{33} - COO - CH_2 - CH_2 - SO_3Na$	A 3011
Muối natri của oleyl-metyltauric	$C_{17}H_{33} - CO - N - CH_2 - CH_2 - SO_3Na$ $ $ CH_3	A 3031
Natri alkylaryl-sunphonat	$C_{12}H_{25} - $  $ - SO_3Na$	A 3301
Natri mono-alkylphosphat	$C_{12}H_{25} - O - P = (ONa)_2$ $ $ O	A 6001
Natri dioctylsunphocuccinat	$C_8H_{17} - OOC - CH_2 - CH - SO_3Na$ $ $ $C_8H_{17} - OOC$	A 3021

Appendix B

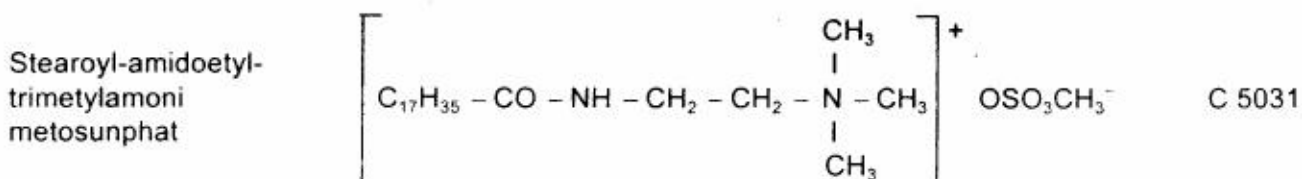
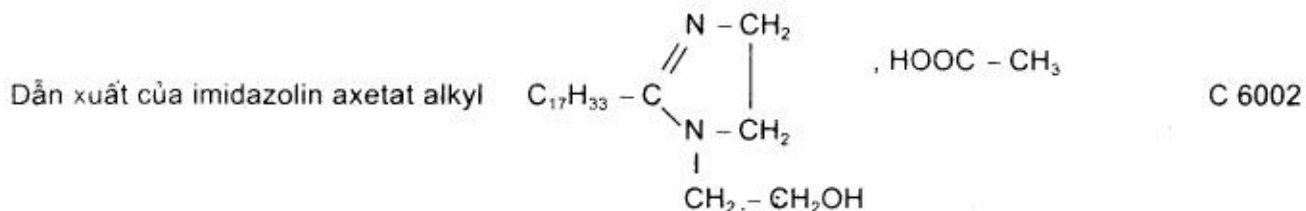
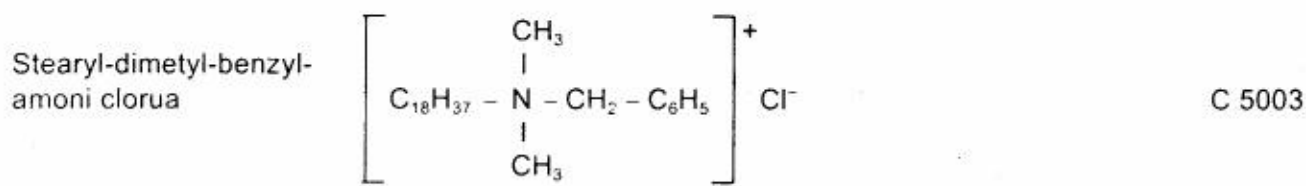
(informative)

Examples of application of the simplified classification

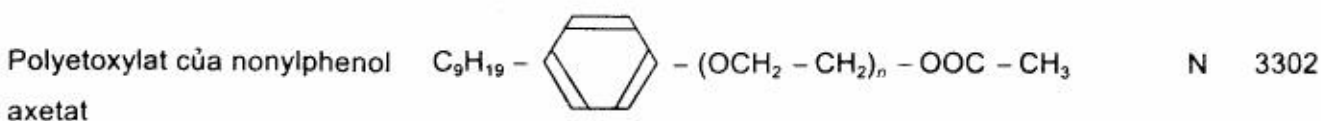
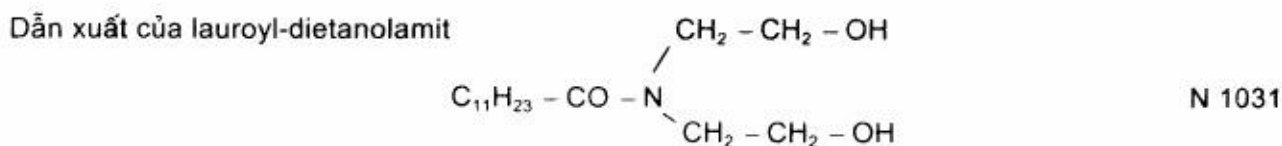
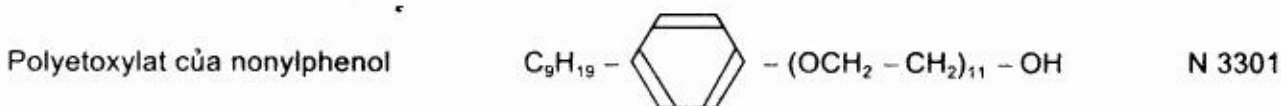
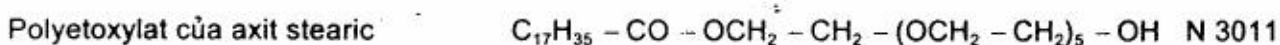
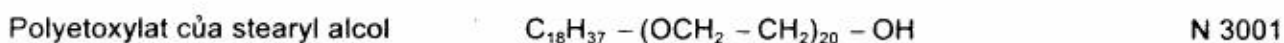
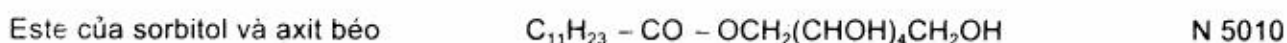
B.1 Anionic surface active agents

Sodium stearate	$C_{17}H_{35}COONa$	A 1001
Sodium lauroyl sarcosinate	$C_{11}H_{23} - CO - N - CH_2 - COONa$ CH_3	A 1031
Sodium laurylsulphate	$C_{12}H_{25} - OSO_3Na$	A 2001
Sodium lauryl ethoxy-ether sulphate	$C_{12}H_{25} - OCH_2 - CH_2 - OCH_2 - CH_2 - OSO_3Na$	A 2051
Sodium salt of the sulphuric ester of lauroyl ethanolamide	$C_{11}H_{23} - CO - NH - CH_2 - CH_2 - OSO_3Na$	A 2031
Sodium alkylsulphonate	$C_{11}H_{23} - CH - C_2H_5$ SO_3Na	A 3001
Sodium oleyl-oxyetane sulphonate	$C_{17}H_{33} - COO - CH_2 - CH_2 - SO_3Na$	A 3011
Sodium salt of oleyl-methyltauride	$C_{17}H_{33} - CO - N - CH_2 - CH_2 - SO_3Na$ CH_3	A 3031
Sodium alkylaryl-sulphonate	$C_{12}H_{25} - $  $- SO_3Na$	A 3301
Sodium mono-alkylphosphate	$C_{12}H_{25} - O - P = (ONa)_2$ O	A 6001
Sodium dioctylsulphosuccinate	$C_8H_{17} - OOC - CH_2 - CH - SO_3Na$ $C_8H_{17} - OOC$	A 3021

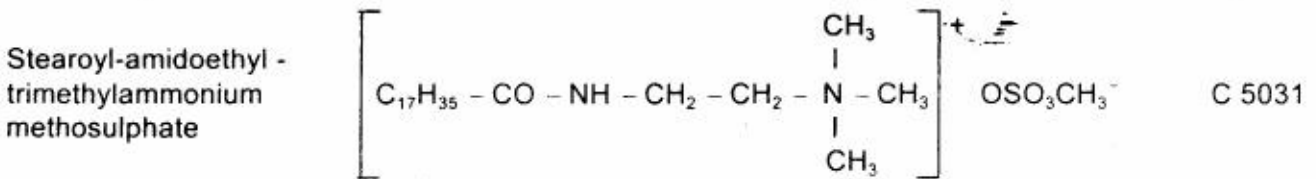
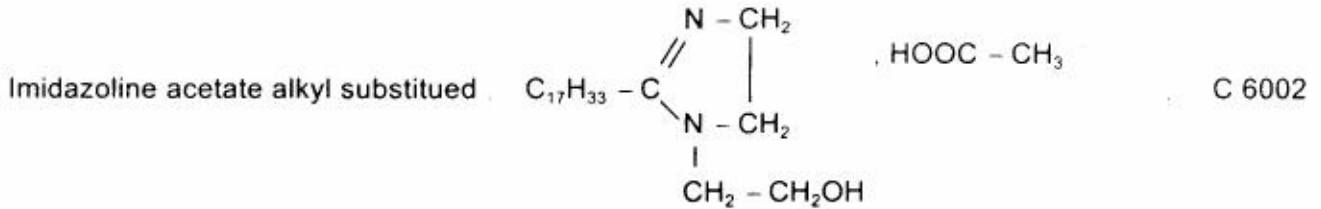
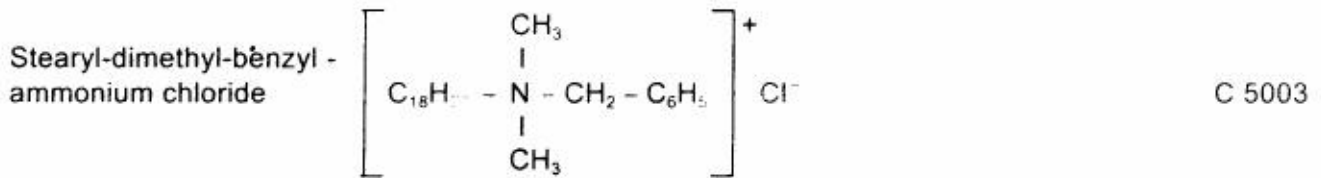
B.2 Chất hoạt động bề mặt cation



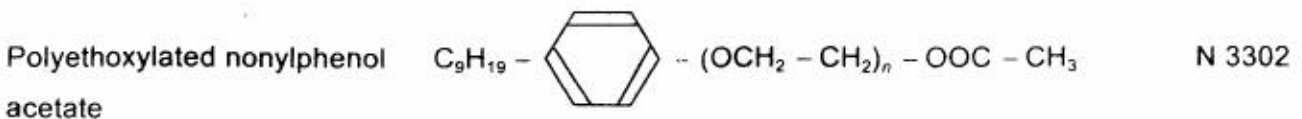
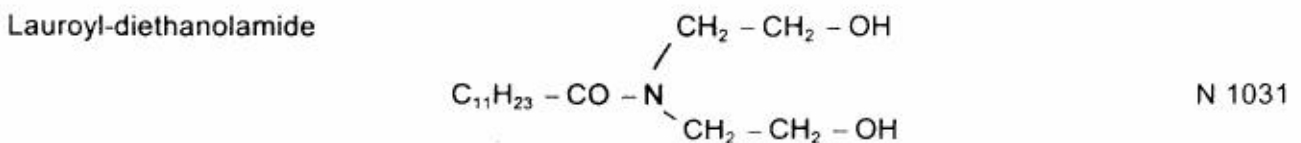
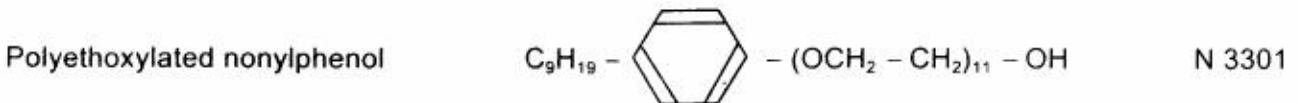
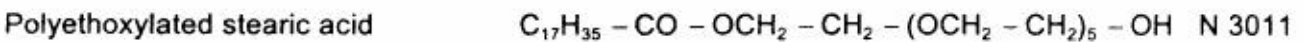
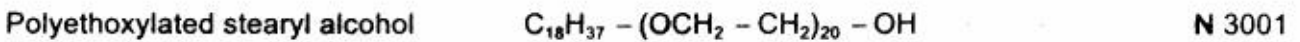
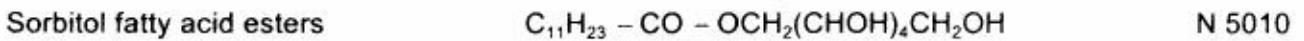
B.3 Chất hoạt động bề mặt non-ion

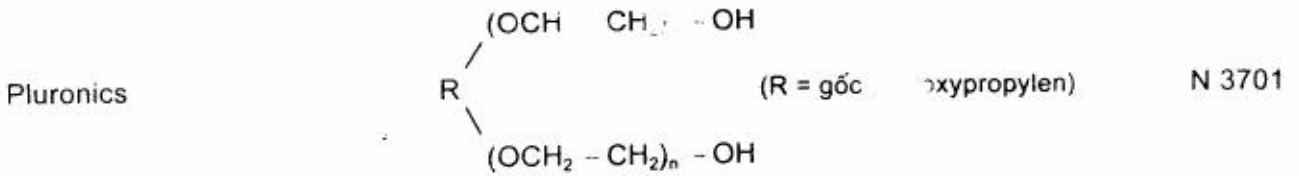
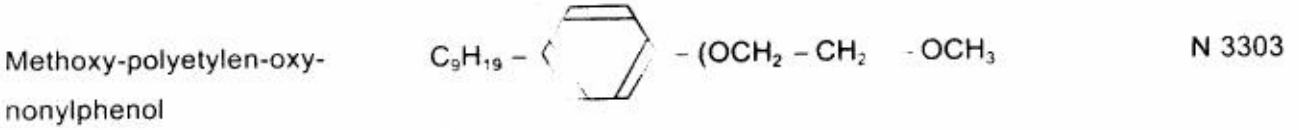


B.2 Cationic surface active agents

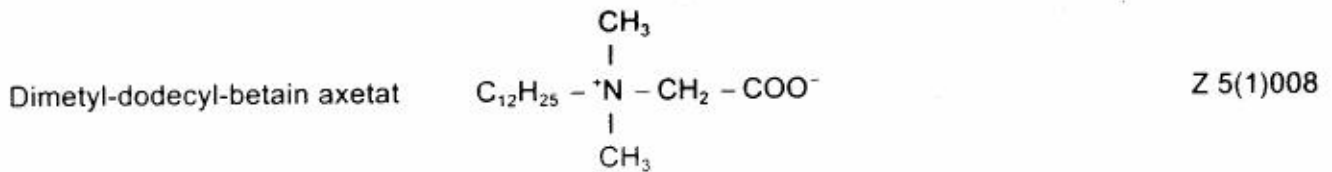
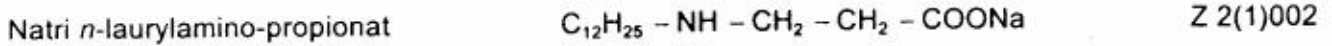


B.3 Non-ionic surface active agents

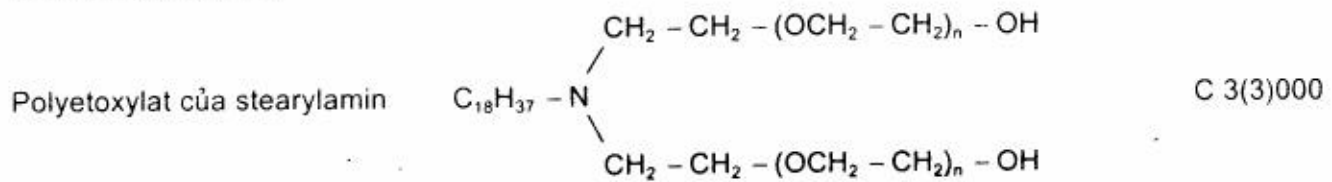
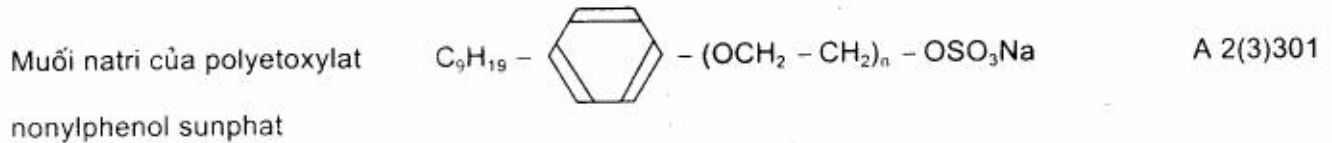




B.4 Chất hoạt động bề mặt ampholyt



B.5 Chất hoạt động bề mặt với nhóm ưa nước ion và non-ion



Methoxy-polyethylene-oxy-nonylphenol $C_9H_{19} - \text{C}_6\text{H}_4 - (\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)_n - \text{OCH}_3$ N 3303

Pluronics $\begin{matrix} (\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)_n - \text{OH} \\ | \\ \text{R} \\ | \\ (\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)_n - \text{OH} \end{matrix}$ (R = gốc polyoxypropylen) N 3701

B.4 Ampholyte surface active agents

Sodium n-laurylamino-propionate $C_{12}H_{25} - \text{NH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{COONa}$ Z 2(1)002

Dimethyl-dodecyl-betaine acetate $C_{12}H_{25} - \begin{matrix} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{N}^+ - \text{CH}_2 - \text{COO}^- \\ | \\ \text{CH}_3 \end{matrix}$ Z 5(1)008

B.5 Surface active agents with ionic and non-ionic hydrophilic groups

Sodium salts of polyethoxylated nonylphenol sulphate $C_9H_{19} - \text{C}_6\text{H}_4 - (\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)_n - \text{OSO}_3\text{Na}$ A 2(3)301

Polyethoxylated stearylamine $C_{18}H_{37} - \text{N} \begin{matrix} \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - (\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)_n - \text{OH} \\ | \\ \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - (\text{OCH}_2 - \text{CH}_2)_n - \text{OH} \end{matrix}$ C 3(3)000