

陈 锋 编著

表面活性剂 性质、结构、 计算与应用



中国科学技术出版社

表面活性剂性质、结构、
计算与应用

江苏工业学院图书馆
藏书章

中国科学技术出版社
北京

图书在版编目(CIP)数据

表面活性剂性质、结构、计算与应用/陈锋编著. —北京:
中国科学技术出版社, 2004.3

ISBN 7-5046-3733-5

I. 表... II. 陈... III. 表面活性剂 IV. TQ423

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 011109 号

著 者 陈 锋

中国科学技术出版社出版

北京市海淀区中关村南大街 16 号 邮政编码: 100081

电话: 010-62103206 传真: 010-62183872

<http://www.kjbooks.com.cn>

科学普及出版社发行部发行 各地新华书店经售

北京长宁印刷有限公司印刷

*

开本: 850 毫米×1168 毫米 1/32 印张: 9.125 字数: 230 千字

2004 年 3 月第 1 版 2004 年 3 月第 1 次印刷

印数: 1-1500 册 定价: 25.00 元

(凡购买本社的图书, 如有缺页、倒页、
脱页者, 本社发行部负责调换)

内 容 简 介

本书简要叙述了表面活性剂的分类、合成方法与产品特点，重点介绍其在现代材料科学、纳米材料制备、冶金工业、固体粉末表面改性、环境保护中的应用。从分子结构角度介绍了表面活性剂结构与性能的关系，利用量子化学理论对表面活性剂的性能进行了研究。书中结合作者多年的实践经验，介绍了许多实用配方。

本书可供从事表面活性剂、精细化工、材料科学、冶金、化学、环保等科研、开发和生产技术人员阅读，也可作为大专院校相关专业的参考书。

编 者：薛 琳 王 贵
录 一 编：王 琳 王 贵
英 语 译：王 琳 王 贵
平 译 文：王 琳 王 贵

介 简 容 内

香 函 合、美 台 治 原 封 部 函 奏 了 对 路 线 图 本
地、学 科 科 科、外 界 与 其 踪 个 意 重、总 特 品 产 出 效
程、对 函 函 奏 未 保 护 固、正 工 金 命、善 博 科 林 米
部 函 奏 了 踪 个 意 前 琳 崇 子 命 从。用 函 函 中 外 路 线
康 校 函 函 学 外 子 量 用 味、原 关 函 函 函 函 函 函 函
羊 及 科 科 合 科 中 年。家 招 了 行 批 函 函 函 函 函 函
。衣 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函
科 林、工 山 函 函、函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函
科 函 函 函 函 函、科 科 科 科 科、科 科、金 命、科 科
科 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函 函
。科 科

责任编辑：张楠
封面设计：赵一东
责任校对：赵丽英
责任印制：安利平

前 言

随着全球经济的发展，人类生活条件的改善，科学技术的进步，作为精细化工中的一个重要分支的表面活性剂工业，正处于蓬勃发展阶段。素有工业“味素”之称的表面活性剂，随着现代科学及工业技术的发展，应用越来越广泛。新的表面活性剂的研究正朝着对人温和、更环保和高效多功能方向发展，突破传统概念的表面活性剂正不断出现，而这一切使人们更加从本质上了解和认识表面活性剂，深入研究其结构与性能之间的关系。

尽管国内外已出版了一些关于表面活性剂的著作，但多为叙述其应用及合成工艺，而有关探讨其结构与性质的关系，特别是从量子化学角度研究结构与性质关系的书籍很难见到。表面活性剂的应用虽广泛，但其应用的基本原理却万变不离其宗。其结构与性质的关系，在不同的应用中的表现，既有共性也有个性，这对选择表面活性剂有着十分重要的作用。为此，本书重点介绍了与此相关的内容。

近年来，表面活性剂在现代科学及工业领域中的应用很快，特别是在现代材料科学、纳米材料制备、环境保护等方面。这些应用拓展了表面活性剂的使用范围，并使相关领域的研究人员更加重视表面活性剂的选择方法及其结构与性能之间的关系。作者结合多年的教学与科研实践，在书中介绍了一些理论与经验，以及多种实用配方。

本书分为三大部分。第一部分为第一章至第七章，介绍了表面活性剂的基本性质，叙述了表面活性剂的分类、合成方法与产品特点及主要用途；第二部分为第八章至第十章，介绍了表面活性剂的

应用原理，重点介绍其在现代材料科学、纳米材料制备、固体粉末表面改性以及在冶金、金属加工领域中的应用，探讨了表面活性剂的结构与其应用性能之间的关系，介绍了在实际工作中筛选表面活性剂的方法；第三部分为第十一章，简介了量子化学的基本原理、计算方法和软件资源，并结合实际介绍了表面活性剂的量子化学计算和应用，进而从量子化学的角度探讨表面活性剂的结构与表面张力、界面吸附等性质的关系。

在本书的编写过程中，作者参考了大量的国内外文献，其中多为 20 世纪 90 年代以来的文献，以便读者进一步阅读。

作者衷心感谢中国科学技术出版社对本书的大力支持，对为编写本书提供支持的东北大学理学院化学系及分子科学与工程中心的领导和师生，特别是王宏光老师，在此表示致谢。

限于作者水平，书中难免有错误之处，如蒙读者不吝指正，将深表感谢。

编者

2004 年 2 月

目 录

第一章 绪论	(1)
第一节 界面与表面	(1)
第二节 表面张力	(2)
一、界面现象	(2)
二、表面张力	(4)
三、界面张力	(5)
第三节 表面活性与表面活性剂	(5)
第四节 表面活性剂分子的结构特点与分类	(7)
一、分子结构特点	(7)
二、分类	(9)
第五节 表面活性剂的发展概况及应用	(11)
第二章 表面活性剂理化性质及其结构	(14)
第一节 溶解性	(14)
第二节 化学稳定性	(15)
一、酸度的影响	(15)
二、无机盐的影响	(16)
三、氧化剂的影响	(16)
第三节 毒性、杀菌力和刺激性	(17)
一、毒性与杀菌力	(17)
二、刺激性	(18)
第四节 生物降解性	(20)
一、生物降解性与表面活性剂	(20)
二、表面活性剂的结构与生物降解的关系	(20)

第五节 表面活性剂的亲水亲油平衡(<i>HLB</i>)	(23)
一、表面活性剂 <i>HLB</i> 值的计算	(23)
二、表面活性剂 <i>HLB</i> 值的测定	(26)
三、表面活性剂 <i>HLB</i> 值的应用	(26)
第六节 表面活性剂在溶液中的状态	(29)
一、表面活性剂溶液的一些性质	(29)
二、胶团化作用	(31)
三、临界胶团浓度与表面活性剂结构间的关系	(34)
第七节 表面活性剂在界面的吸附	(36)
一、表面活性剂在溶液表面的吸附	(36)
二、表面活性剂在固 - 液界面上的吸附	(38)
第三章 阴离子表面活性剂	(43)
第一节 羧酸盐类表面活性剂	(44)
一、脂肪酸盐——皂	(44)
二、疏水基通过中间链与羧基连接的表面活性剂	(45)
三、脂肪酸	(47)
第二节 磺酸盐类表面活性剂	(50)
一、烷基苯磺酸盐(Alkyl Benzen Sulforate, ABS)	(50)
二、烷基磺酸盐	(52)
三、烯基磺酸盐(Alpha-Olefin Sulfonate, AOS)	(54)
四、其他磺酸盐类表面活性剂	(54)
第三节 硫酸酯盐类表面活性剂	(56)
一、合成方法	(57)
二、性质及应用	(58)
第四节 磷酸酯(盐)类表面活性剂	(59)
一、合成方法	(59)
二、应用	(61)

第四章 阳离子表面活性剂	(62)
第一节 概述	(62)
第二节 开链季铵盐类阳离子表面活性剂	(64)
一、合成方法	(64)
二、应用	(66)
第三节 杂环类阳离子表面活性剂	(66)
一、烷基吡啶卤代物	(67)
二、烷基吗啉盐	(67)
三、烷基氮戊环和氮己环阳离子卤代物	(68)
四、烷基咪唑啉阳离子表面活性剂	(69)
第四节 亲油基通过中间链连接的阳离子表面活性剂	(70)
一、萨帕明(Sapamine)	(70)
二、索罗明类阳离子表面活性剂(Soromine)	(71)
第五节 聚合型阳离子表面活性剂	(72)
第六节 镱盐阳离子表面活性剂	(72)
一、镱化合物	(72)
二、氧化镱和镱化合物	(73)
三、碘镱化合物	(73)
第五章 两性离子表面活性剂	(74)
第一节 概述	(74)
一、分类	(74)
二、优点及用途	(75)
三、特点	(76)
第二节 两性咪唑啉衍生物表面活性剂	(78)
一、分类	(78)
二、合成	(79)
三、应用	(82)

第三节 表面活性甜菜碱	(83)
一、命名	(83)
二、合成	(84)
三、应用	(86)
第四节 氨基酸类表面活性剂	(86)
一、氨基酸两性离子表面活性剂	(87)
二、氨基磺酸两性离子表面活性剂	(88)
第五节 卵磷脂	(90)
一、卵磷脂的结构	(90)
二、卵磷脂的生产	(91)
三、卵磷脂的应用	(92)
第六章 非离子表面活性剂	(93)
第一节 概述	(93)
一、分类	(93)
二、特点	(96)
三、用途	(97)
第二节 环氧乙烷	(97)
一、物理性质	(97)
二、结构	(98)
三、化学性质	(98)
四、环氧乙烷的制造	(99)
五、环氧乙烷的爆炸危险和毒性	(100)
第三节 聚氧乙烯型非离子表面活性剂	(100)
一、合成	(101)
二、性质与结构	(102)
第四节 多元醇类非离子表面活性剂	(108)
一、乙二醇酯	(110)
二、甘油酯	(110)

三、聚甘油酯(PGE)	(111)
四、失水山梨醇酯及其聚氧乙烯化合物	(112)
五、蔗糖酯	(113)
第五节 聚氧乙烯多元醇酯类非离子表面活性剂	(114)
第六节 含氮的非离子表面活性剂	(116)
一、烷基醇酰胺非离子表面活性剂	(117)
二、氧化胺	(118)
第七节 聚醚	(120)
一、全嵌段非离子表面活性剂	(120)
二、混合物嵌段非离子表面活性剂	(121)
第七章 特种表面活性剂	(122)
第一节 氟表面活性剂	(122)
一、合成	(122)
二、性质	(123)
三、应用	(124)
第二节 硅表面活性剂	(125)
一、性质与结构	(125)
二、有机硅表面活性剂的应用	(127)
第三节 高分子表面活性剂	(129)
一、高分子表面活性剂的分类	(129)
二、高分子表面活性剂的合成	(131)
三、高分子表面活性剂的特性	(133)
四、高分子表面活性剂的应用	(135)
第四节 生物表面活性剂	(135)
一、生物表面活性剂的分类	(136)
二、生物表面活性剂的制备	(136)
三、生物表面活性剂的优点及应用	(138)

第八章 表面活性剂的应用性能及其结构	(141)
第一节 润湿	(141)
一、润湿作用	(141)
二、润湿过程	(141)
三、接触角与润湿方程	(145)
四、固体表面的润湿性质	(146)
五、表面活性剂的润湿作用	(147)
六、润湿剂的种类和应用	(148)
七、润湿剂的选择	(156)
第二节 分散	(157)
一、分散剂的分类	(157)
二、常用分散剂的结构和性能	(159)
三、分散剂的选择和应用	(163)
第三节 乳化	(164)
一、乳状液的一般性质	(165)
二、乳状液的类型鉴别及其影响因素	(166)
三、乳状液的制备	(168)
四、乳化机理及乳状液的稳定性	(174)
第四节 表面活性剂的增溶作用	(178)
一、增溶作用	(178)
二、增溶作用的实质	(178)
三、增溶作用的方式	(179)
四、增溶作用的影响因素	(180)
第五节 防腐	(183)
一、表面活性剂防腐原理	(184)
二、表面活性剂疏水基的长度基对缓蚀作用的影响	(186)
三、表面活性剂浓度的影响	(186)
四、具有缓蚀作用的表面活性剂分类及常见种类	(187)

第九章 表面活性剂在材料工程中的应用	(189)
第一节 表面活性剂在纳米材料-纳米结构材料制备中的应用	(189)
一、表面活性剂在纳米结构材料制备中的应用	(190)
二、表面活性剂在纳米材料制备中的应用 ——微乳液制备纳米颗粒	(190)
第三节 表面活性剂在材料科学其他方面中的应用	(196)
一、在无机粉料表面改性中的应用	(196)
二、在湿化学法制备精细陶瓷粉末中的应用	(197)
三、在机械合金化中的应用	(198)
四、在粉碎粉体颗粒中的应用	(199)
五、在防止无机盐粉料结块中的应用	(201)
第四节 粉末材料制备及粉末材料表面改性中表面活性剂的选择	(201)
一、具有润湿、分散双重性能的表面活性剂	(202)
二、表面活性剂分子结构与润湿性和分散性的关系	(206)
三、表面活性剂用量与润湿性和分散性的关系	(210)
第十章 表面活性剂在工业中的应用	(212)
第一节 表面活性剂在金属清洗中的应用	(212)
一、溶剂基金属清洗剂	(212)
二、水基清洗剂	(214)
三、碱性清洗剂	(218)
四、酸性清洗剂	(219)
第二节 金属加工用表面活性剂	(222)
一、切削液及其分类	(223)
二、非水溶性切削油	(223)
三、水溶性切削液	(225)

四、水溶性切削液添加剂中的抗菌剂	(228)
五、配方举例	(229)
第三节 金属防锈用表面活性剂	(230)
一、防锈用缓蚀剂及其分类	(231)
二、水溶性缓蚀剂和防锈水剂	(232)
三、油溶性缓蚀剂及防锈油脂	(233)
四、气相防锈剂	(237)
第四节 表面活性剂在环境保护方面中的应用 ——在废水处理中的应用	(239)
一、絮凝作用	(240)
二、用作水处理剂的高分子表面活性剂的品种	(241)
第十一章 表面活性剂的量子化学计算	(247)
第一节 量子化学的发展	(247)
第二节 量子化学计算方法简介	(249)
一、半经验分子轨道法	(250)
二、从头计算法(ab-initio)	(255)
第三节 量子化学应用程序及网络资源简介	(256)
第四节 表面活性剂的量子化学计算	(258)
一、浮选药剂的量子化学研究	(258)
二、烷基硫酸盐表面张力的量子化学研究	(261)
附表	(266)
参考文献	(274)

代相面素 节二第

第一章 绪论

象聚面界, 一

第一节 界面与表面

尽管我们周围的物质世界变化万千,但在一定条件下,物质一般以气、液、固三种聚集状态形式存在,其中每种聚集状态又称为相。相与相的分界面,我们称之为界面。例如,水可以以气态水蒸气、液态水和固态冰的聚集状态形式存在,其中每种聚集状态分别对应称之为气相、液相和固相。而水的不同聚集状态,即不同相的水,如冰水混合体系中固相—固态冰与液相—液态水之间形成的固相与液相的分界面,即所谓界面。

我们周围的物质通常条件下为气、液、固三态。界面的类型取决于相互接触的两相物质的聚集状态。因此,通常界面类型可分为以下五种:液—气,液—液,液—固,固—气,固—固。

由于人眼通常看不见气相,因此我们把含有气相组成的界面又叫表面,即把液—气和固—气类型的界面称为表面。

由两相组成的体系有一个界面(或表面);两个以上的相组成的体系最多可有 C_n^2 个界面(或表面)。

界面不是一个简单的几何面,而是从一个相到另一个相的过渡层。它具有一定的厚度,约有几个分子厚。界面的性质与相邻的两个体相的性质不同,是由两个相邻的个体相所含物质的性质决定的。

界面的状态由表面自由能或表面张力来描述。

第二节 表面张力

一、界面现象

在两相之间的界面,物质界面层的分子与内部分子周围的环境不同,内部分子所受四周邻近相同分子的作用力是对称的,各个方向的力彼此抵消。

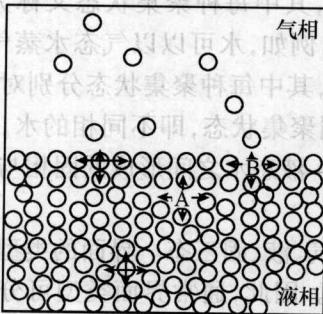


图 1-1 表面分子与内部分子受力不同

做功。

在液-气两相界面,液体表面的分子 B 受液相分子对它的引力要比气相分子对它的引力强,它所受力是不对称的,结果产生了表面分子受到指向液体内部的拉力。由于这种拉力的存在,表面分子不如液相内的分子相对稳定,它有向液相内迁移的趋势,所以液体表面总有自动缩小的趋势。从能量上看,要将液相分子移到表面需要对它做功,也就是说要增加体系的表面积,就必须对体系做功,而这样就会增加体系的能量,体系就会变得比较不稳定。因此,为了使体系处于稳定状态,其表面积要尽可能取最小值,所以液滴在无外力影响下,它的形状总是以球型为最稳定。

表面层的分子,一方面受到本相内物质分子的作用,另一方面又受到性质不同的另一相中物质分子的作用,因此表面层的物质与内部不同。我们以气-液两相界面为例(图 1-1)。

在液相中,液相分子 A 受到其周围分子的作用力是对称的,在液相内移动不需