

化学品商品学

(试用教材)

上海财经学院经贸系
商品学教研室编
一九八一年七月

化学商品学目录

第一章 概 论	1
第一节 化学商品基本概念	1
第二节 有机化合物分子结构基础理论	1
一 烷烃的价键理论	1
二 分子结构的立体概念	5
三 有机化合物的命名法	12
四 分子间的作用力	15
第三节 化学商品的分类	18
一 石油和石油制品	18
二 塑料和塑料制品	18
三 橡胶与橡胶制品	19
四 桐油与油漆商品	19
五 日用化学商品	20
六 皮革与皮革制品	20
七 化学肥料与农药	21
第二章 石油和石油制品	21
第一节 石油的成因和炼制	21
第二节 石油的化学成分	26
一 开链烷烃	26
二 环烷烃	34
三 芳香烃	35
四 非烃化合物	36
第三节 石油的加工	38
一 裂 解	38
二 重 整	39
第四节 石油的物理性质和品质指标	40
一 颜色 and 气味	41
二 密度与比重	41
三 粘 度	42

四	浊点(云点)、冰点(结晶点)、凝固点 (凝点)和熔点	42
五	闪点、燃点、自燃点和爆炸界限	43
六	馏分(馏程)	44
七	燃料用油的质量指标(辛烷值和十六烷值)	45
八	评定油品质量的其他指标	54
第五节	石油产品的安全储运	57
一	石油产品在储运过程中可能造成的危害性	57
二	石油产品的安全储运	57
第三章	塑料和塑料制品	58
第一节	概 述	58
第二节	塑料用树脂的化学反应类别	60
一	聚合反应所生成的树脂	60
二	缩聚反应所生成的树脂	66
三	共聚反应所生成的树脂	72
四	两种以上单体共聚而生成的树脂	75
第三节	树脂的分子结构形态和主要性质	76
一	线型高分子结构	76
二	网状高分子结构	77
第四节	塑料的分类、性能与成型方法	78
一	塑料的分类	78
二	塑料的一般性能	80
三	塑料的几种主要成型方法	81
第五节	塑料制品的质量检查和品种鉴别	84
一	塑料制品的质量检查	84
二	日用塑料制品鉴别	86
第六节	塑料制品的包装和储运	89
第四章	橡胶与橡胶制品	94
第一节	概 述	94
第二节	天然橡胶	96
一	天然胶乳	96

二	生胶片	96
三	天然橡胶的成分、结构及其理化性质	97
第三节	合成橡胶	100
(一)	丁钠橡胶	101
(二)	丁苯橡胶	101
(三)	氯丁橡胶	101
(四)	丁晴橡胶	102
(五)	丁基橡胶	102
(六)	再生橡胶	103
第四节	橡胶的配合剂	104
第五节	胶鞋与轮胎的质量要求	106
一	胶鞋的质量要求	106
二	轮胎的质量要求	108
第六节	橡胶制品的包装与保管养护	110
一	包装	110
二	保管养护	110
第五章	桐油和油漆	112
第一节	桐油	112
一	桐油的化学成分和性质	112
二	桐油的品质	115
三	桐油的包装与储运	118
第二节	油漆	120
一	油漆原料	121
二	油漆的品质指标	126
三	几种主要的油漆	127
四	油漆的包装和保管	129
第六章	日用化学品	130
第一节	肥皂	130
一	概述	130
二	制皂原料	130
三	肥皂的制造	138

四	肥皂的组成和性质	141
五	肥皂的品质指标	147
六	肥皂的包装和保管	150
第二节	合成洗涤剂	151
一	合成洗涤剂的优点	151
二	合成洗涤剂的结构和分类	152
三	合成洗衣粉	162
四	合成洗涤剂的品质指标	166
五	合成洗涤剂的储存保管	169
第七章	化学肥料	170
第一节	概 述	170
第二节	化学肥料的特点和分类	172
第三节	几种主要的化学肥料	174
第四节	化学肥料的储运	189
第七章	化学农药	190
第一节	概 述	190
第二节	化学农药的分类	192
第三节	化学农药的剂型	193
第四节	几种主要的杀虫剂	194
一	无机杀虫剂	194
二	植物性杀虫剂	195
三	有机合成杀虫剂	199
第五节	除莠剂与植物生长调节剂	214
第六节	化学农药的质量指标	222
第七节	化学农药的安全储运	223

第一章 概 论

第一节 化学品商品基本概念

化学品商品学是研究化学品商品的使用价值、结构、品质、理化属性、储存条件与其它有关的各个问题。

化学品商品是指商品原料来源于天然与合成的(纯品或混合物),通过化学、物理方法或机械加工(在一定温度与压力下)而形成的产品,称化学品商品。

例如:石油和石油制品。石油是天然的化工原料,经炼制以后可得到汽油、煤油、柴油等石油制品外,还有相当多的重油馏分。如果重油经过催化裂解,可生成大量汽油和各种低碳不饱和烃类,不饱和烃再经过分离和聚合或共聚能获得多种的树脂产品、塑料、橡胶和合成纤维等三大合成材料。

化学品商品的原料来源。除石油和化学合成外,尚有煤、页岩油、天然气、动植物油脂、树胶、胶乳和农副产品等。

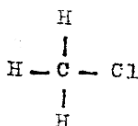
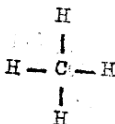
化学品商品的生产与发展、建筑在社会主义现代化建设和科学技术的基础上。

化学品商品的种类和数量十分繁多。为了便于教学的顺利进行,所以有必要学习有关化学基础理论知识。

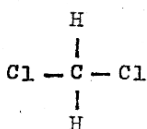
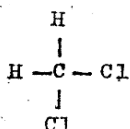
第二节 有机化合物分子结构基础理论

一、烷烃的价键理论:

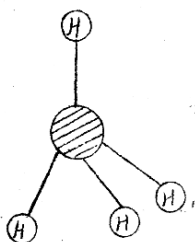
(一) 碳原子正四面体学说。甲烷 CH_4 的一个氢原子如果被氯原子取代后则得氯甲烷 CH_3Cl 。它的平面结构式如下所示:



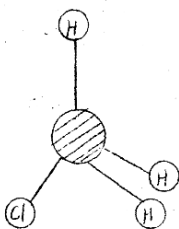
甲烷的两个氢原子被氯原子取代后，所生成的二氯甲烷 CH_2Cl_2 。如果也按氯甲烷那样写成平面结构式，则可以写成两种式子。如下式所示：



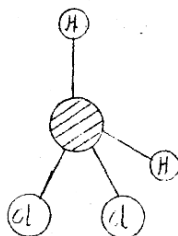
粗看起来似乎两个氯原子的相对位置是不同的，但事实上 CH_2Cl_2 只有一种结构，并无两种异构体存在。为了解释这个问题，1874年就有人提出了分子中碳原子的正四面体学说。根据这个学说，碳原子以及和它相连的四个原子或原子团而不是在同一个平面上。可以用一个正四面体模型来代表分子的碳原子，碳原子位于正四面体的中心，它的四个价键对称地分布在碳原子的周围，从正四面体中心指向四个顶点。下面是甲烷、氯甲烷和二氯甲烷分子中碳原子正四面体模型图。



甲烷 Methane



氯甲烷
Chloromethane

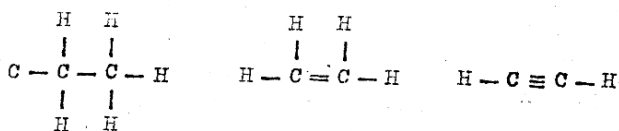
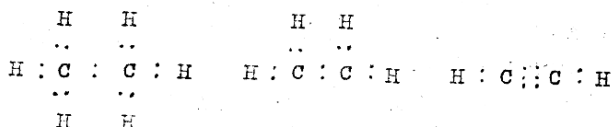


二氯甲烷
Dichloromethane

从上面这些图中可以看出，二氯甲烷只有一种，并无四种异

构体。前面所表示的二氯甲烷的两种平面结构式，只是同一个立体模型的不同投影式而已。

(二) 化学键的特性。化学键有离子键和共价键之分。由正负离子静电引力相互吸引且结合起来的化学键，叫做离子键。由原子间共用电子对而形成的化学键叫做共价键，就是由化合物的两原子各自供给相等数目的电子，作为双方所共有，并使每个原子都能达到它的稳定结构（八隅体），这种共用电子对与双方原子核相互吸引，使两原子连结起来。两原子间共用一对电子所形成的键，称为单键，由两对或叁对共用电子所形成的键则分别称为双键和叁键。下面是表示乙烷、乙烯和乙炔分子中共用电子对的电子结构式：



乙烷 (Ethane)

乙烯 (Ethene)

乙炔 (Ethyne)

如用一根短线来表示一对共用电子，那末就成为普通的结构式。如上所示。在高聚物分子中原子与原子间多半是通过共价键相结合。化学反应是由分子间相互撞击而引起的。所以一般需要较长的反应时间才能发生，增加温度也能提高分子间的碰撞次数。分子运动速度增强，可以提高反应速率。

(三) 键长、键能和键角。两原子必须在相当接近时，它们的价电子才能相互作用（交迭）而形成共价键。两原子间的距离愈近，它们的电子云的交迭程度就愈大，而形成的共价键为最稳定。但过

于接近则由于增加了两原子核间的斥力，反而使体系变得不稳定。因此，由共价键所连接的原子，其原子核之间有着一定的距离，这个距离称为键长。不同的共价键有不同的键长。下面是一些常见的共价键的键长：（注： $1 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ）

C—C 单键键长 $1.54 \text{ \AA}$ ， C—H 键长 $1.09 \text{ \AA}$
C—H 单键键长 $1.47 \text{ \AA}$ ， C—O 单键键长 $1.43 \text{ \AA}$

在形成共价键时，由于体系的能量降低，放出一部分能量。反之，要使共价键断裂，则须吸收一部分能量。

例如，A和B两个原子（气体）结合成A—B分子（气体）时，所放出的能量称为键能。也就是由A—B分子裂解为A、B两个原子时需要吸收的能量相当。键能的大小，用每克分子千卡数来表示。下面是几个键能的数据：

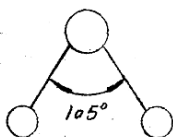
C—C 单键键能为 82.8 千卡/克分子

C—H 单键键能为 69.0 千卡/克分子

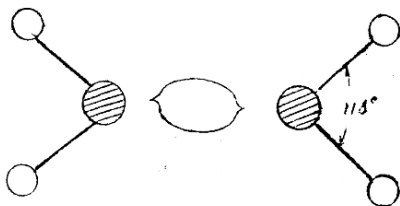
C—H 键能为 88.7 千卡/克分子

C—O 单键键能为 85.5 千卡/克分子

离子键和S电子无方向性，故无键角，但P电子和 sp^3 、 sp^2 、 sp 杂化电子具有方向性，所以形成的共价键，也具有方向性。电子云密度大的地方，决定着键的方向。因此，任何一个二价以上的原子，在它与其他原子所形成的两个共价键之间有着一个夹角称为键角。例如：



水 H_2O

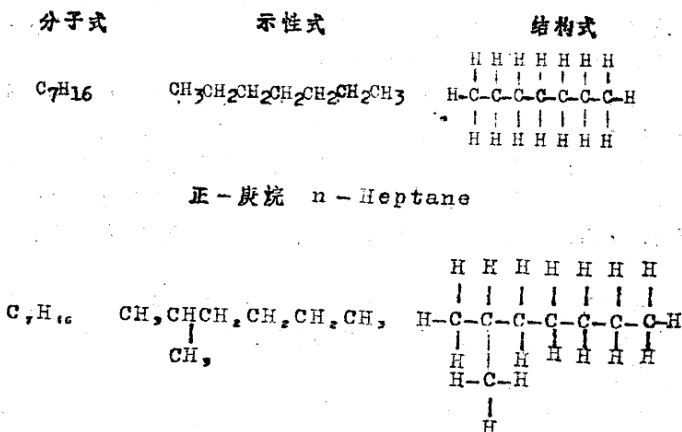


乙烯 $CH_2=CH_2$

三 分子结构的立体概念

(一) 同分异构现象。同分异构现象，是指分子式相同，而结构不相同的两种或两种以上的化合物。例如石油产品中含有的正庚烷和 2-甲基己烷是互为同分异构体。

它们的分子式均为 C_7H_{16} ，而结构式不同：

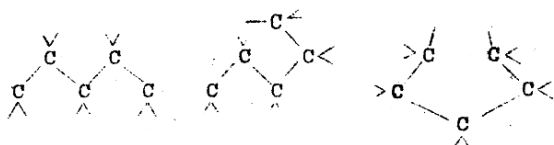


2-甲基己烷 2-Methyl hexane

事实上正庚烷的同分异构体共有九种，上述两种是九种当中的两种。烷烃的异构体数目随着碳原子数的增加而大幅度增多。如 C_7H_{16} 共有 18 种异构体，而 $C_{10}H_{22}$ 共有异构体 159 种之多。

上述结构，由于每个碳原子上相连的四个原子或原子团并不完全相同，彼此间的相互影响也不同，因此，每个碳原子上键角也并不完全相同，但都近于 $109^\circ 28'$ 。根据 X-射线的分析，证明 C-C 键距为 $1.54 \text{ \AA}$ ，而且除了乙烷外，整个烷烃分子的碳链并不排布在一条直线上，实际上是曲折的成锯齿状排列。例如：

正庚烷分子中碳链的排布就有如下的几种方式：



烷烃分子结构中主要是单键，而单键结构在空间可以自由旋转，因此以上的几种排布方式，在室温下（液态）就经常不断地在互相转变着，但正—戊烷并没有异构物。

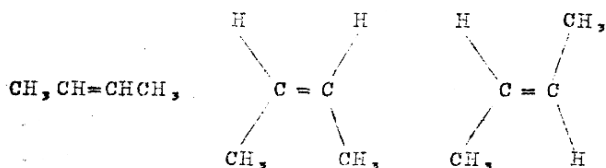
虽然正—烷烃的碳链实际上是曲折的，但为了方便起见一般在书写时，仍经常写成链状的形式，因此，正烷烃也称为直链烷烃。

(二) 几何异构现象。在有机化合物中除了上述同分异构现象外，还有几何异构现象和旋光异构现象。旋光异构在食品商品学中加以讨论外，几何异构现象在化学品商品中涉及范围较广，故作适当讨论。

一般具有碳碳双键的化合物。由于双键没有对称轴，所以不能自由旋转，这样就造成原子在空间排布不同而引起的异构现象称为几何异构现象（或称顺反异构现象）。

按德国 IUPAC 命名法，“次序规则” Sequencerule 决定，采用 Z (Zusammen 同) 和 E (Entgegen 对)

例如：



丁烯—〔2〕

顺—丁烯—〔2〕

反—丁烯—〔2〕

同—丁烯—〔2〕

对—丁烯—〔2〕

Butene—〔2〕

Cis-Butene—〔2〕

Trans-Butene—〔2〕

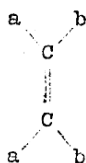
或 Z-Butene—〔2〕

E-Butene—〔2〕

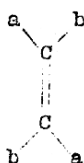
沸点 3.8℃

沸点 0.95℃

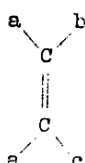
在有机化合物的分子结构中，如果以双键相连的两个碳原子（或其他原子）其中任何一个原子都带有不同的原子或原子团时，它们都能产生几何异构现象。例如：



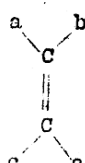
顺式 Cis-
(Z) 同



反式 Trans-
(Z) 对

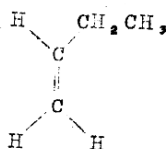
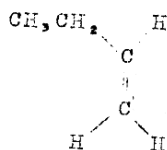


顺式 Cis-
(Z) 同



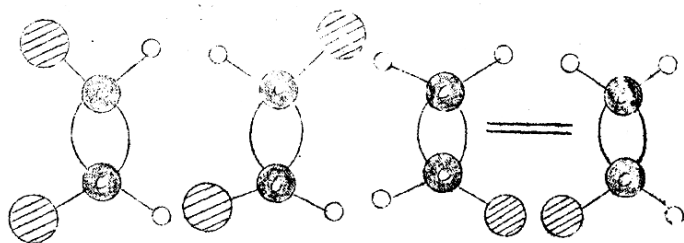
反式 Trans-
(Z) 对

如果双键相连的两个碳原子，其中任何一个碳原子所连接的两个相同的原子或原子团时，它在空间排列只有一个，因此，它就没有几何异构体存在。例如：



丁烯-(1) Butene-(1)

下面用模型来表示：



顺式 (同)

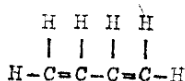
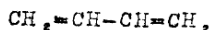
反式 (对)

无几何异构体

(三) 丁二烯-〔1.3〕和巴二烯-〔2.4〕的分子结构

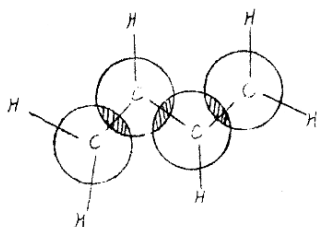
在有机化合物的分子结构中，具有两个或两个以上共轭双键的化合物时，它们的立体结构怎样？这是我们要讨论的主要内容。

丁二烯-〔1.3〕的分子结构是具有一定的代表性。在丁二烯-〔1.3〕的分子中，双键和单键交替排列而发生相互影响的特殊结构体系有着密切的关系。我们把这种特殊结构体系称为共轭体系（ $\pi-\pi$ 共轭体系）。



丁二烯-〔1.3〕

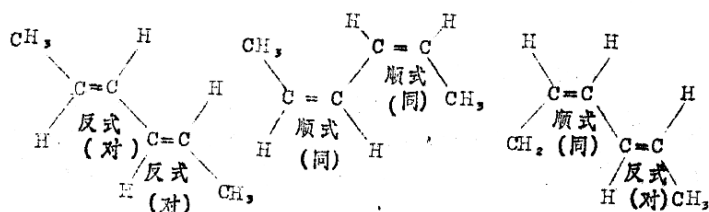
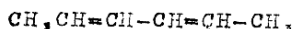
Butadiene-〔1.3〕



丁二烯-〔1.3〕平面结构图

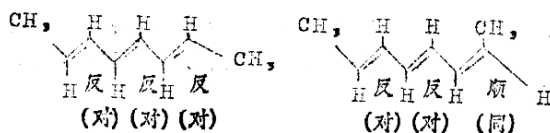
丁二烯-[1.3]分子中，所有单键（σ键）处在同一平面上。C₁与C₄之间由于p电子的相互交迭，因而体系变得较为稳定，当处在一定条件下C₁和C₄两个双键同时发生断裂而形成1.4加成聚合反应。

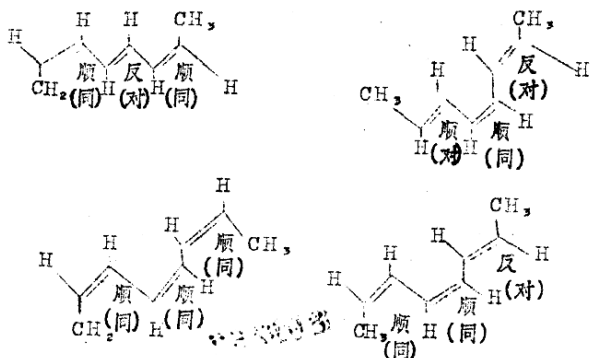
己二烯-[2.4]的分子结构，由于两个双键所处的位置与丁二烯-[1.3]相似，所以它也是一个共轭体系的结构。只不过在丁二烯-[1.3]分子中C₁与C₄中各加一个甲基而形成的一种结构，由于所加入的二个甲基，影响到原子和原子团在空间排布不同而造成了下列的几何异构：



己二烯-[2.4] Hexadiene-[2.4]

上述己二烯-[2.4]分子结构中，能形成三种几何异构体即：反式-反式、或（对-对），顺式-顺式或（同-同）和顺式-反式或（同-对）。如果共轭体系中的双键相应增加时，它们的几何异构体就变得比较复杂。例如：



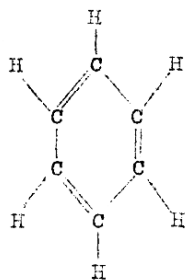


辛三烯 - [2, 4, 6] Octatriene - [2, 4, 6]

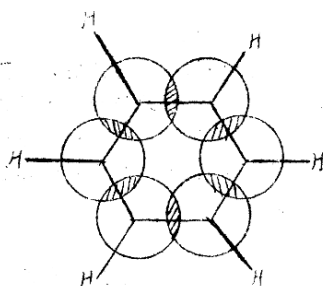
(四) 芳香烃分子结构

苯的分子结构，是芳香族化合物结构的基础。我们知道苯分子式为 C_6H_6 ，从表面上看，它的化学性质似乎应该显示出不饱和化合物的特性，但苯的不饱和性质，并不明显，在通常情况下，苯与卤素、硫酸等不发生加成反应，苯也不被 $KMnO_4$ 所氧化。但苯比较容易发生取代反应，苯的这种特性一般被称做芳香性。

在 1865 年第一个提出苯的结构式，是具有单键和双键交替排列的六碳环结构式来表示：



近来根据光谱法，电子衍射法和 X-射线等物理方法的研究结果，确证苯分子中的六碳环成等边六角形排在同一个平面上。所有的 σ -电子 (σ 键) 都处在同一平面，它们的所有 p 电子云长轴都垂直于碳环的平面，而且各个相邻的电子云相互交迭形成一个闭合的共轭体系。例如：



苯分子结构平面图

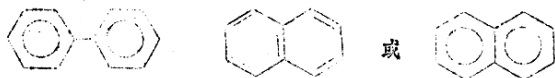
为了书写和学习方便起见，故采用下列两种式子：



苯分子结构的简写图

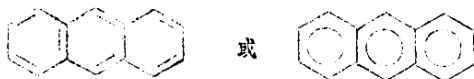
目前在文献资料中以及有关参考资料中，常常采用这两种式子，为了简便起见，碳原子和氢原子都可以不写出来，即把苯的结构式写成(I)式或(II)式均可。

同理，在多环芳烃和稠环芳烃的结构与苯环结构相似，但它们的体系稳定性比苯环为差。它们的结构式可简写为：



联苯
Diphenyl

萘 Naphthalene



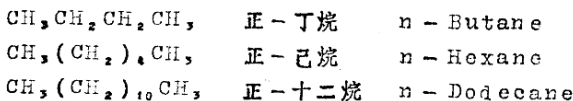
蒽 Anthracene

三 有机化合物的命名法

有机化合物的种类很多，到目前为止已发现的约有300万种以上，而且分子结构比较复杂，其同分异构现象又较普遍，所以我们必须熟练地掌握好有机化合物的命名方法及为重要。在命名时不仅要表示分子的组成和所含各元素的原子数目，而且还要表示出分子的结构。下面我们讨论几种命名方法：

(一) 开链化合物的命名法

烷烃命名原则如下：直链烷烃，可按照它所含碳原子的数目称为正一“某”烷。正字通常可以省去，即称某烷。碳原子数在十个以下时，可用天干名目（即甲、乙、丙、丁、戊、己、庚、辛、壬、癸）来表示。碳原子数在十个以上时，则直接用数字来表示，例如：



带支链的烷烃可以看作是直链烷烃的烷基衍生物。可按下列规定命名：（系统命名法或称国际命名法、日内瓦命名法。）

(1) 从结构式中选定最长的碳链作为主链，把支链看作取代基（取代基取代烷分子中的氢原子）。根据主链所含碳原子的数目而称为“某”烷。

(2) 主链上的碳原子，以靠近支链的一端开始，依次标明阿拉伯号码1、2、3、4、5、6……。取代基的位置，由它所连的主链上碳原子的号数来表示。

(3) 把取代基的名称写在烷烃名称前面，并注明位置。如含有几个不相同的取代基，把简单的写在前面。复杂的写在后面，相同的取代基则可合并，则在前面标明中国数字如二、三、四等。例如：

