

多烷基苯磺酸钠水溶液的表面性质*

姜小明 张路 安静仪 赵淮 俞稼镛

(中国科学院理化技术研究所, 北京 100101)

摘要 研究了多烷基苯磺酸钠的结构, 特别是侧链碳原子数的增加, 对其表面活性的影响, 并与其它烷基苯磺酸钠进行了比较. 结果表明, 随着苯环上侧链碳原子数的增加, 多烷基苯磺酸钠的临界胶束浓度(cmc)降低, 但侧链上 CH_2 降低 cmc 的程度远小于主链上 CH_2 的作用. 当侧链碳原子数增加时, 多烷基苯磺酸钠的饱和吸附量(Γ_{\max})降低, 表现出与主链不同的变化规律. 从多烷基苯磺酸钠的结构解释了 cmc 和 Γ_{\max} 的变化规律.

关键词: 多烷基苯磺酸钠, 分子结构, 临界胶束浓度, 饱和吸附量

中图分类号: O647.3

表面活性剂的化学结构与表面性质密切相关, 例如疏水基长度的变化、分支及极性基位置对表面性质都有重要影响. 有关烷基苯磺酸钠分子结构与性质关系的研究已有大量报道^[1-2], 但均集中在主链的变化^[3](如: 改变链长, 是否支化等), 而对于苯环上短侧链的变化如何影响烷基苯磺酸钠的表面性质的报道还很少. 这主要是烷基苯磺酸钠纯化困难, 含短碳链取代基的多取代的烷基苯磺酸钠不易合成. 本文用自制的高纯度多烷基苯磺酸钠系列, 研究了侧链的变化对烷基苯磺酸钠表面性质的影响.

1 实验部分

1.1 试剂与仪器

多种多烷基苯磺酸钠, 自制^[4], 其分子结构经 IR 和 $^1\text{H NMR}$ 确定, 纯度大于 98.0%, 各烷基苯磺酸钠的克拉夫特点(Krafft point)均在 0~20 $^{\circ}\text{C}$, 其结构及编号见图 1; 氯化钠为分析纯; 实验用水为二次蒸馏水.

表面张力测定用 DATAPHYSICS dcat21 接触角/表面张力测量仪; 水温(30 $^{\circ}\text{C}$)用 BX-101 型超级恒温槽控制.

1.2 实验方法

配制一系列不同浓度的多烷基苯磺酸钠水溶液和多烷基苯磺酸钠的 NaCl 水溶液($c(\text{NaCl})=0.171 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$), 静置 8 h, 30 $^{\circ}\text{C}$ 下用 Wilhelmy-plate 法测定

平衡表面张力.

2 理论计算

烷基苯磺酸钠的饱和吸附量(Γ_{\max})由 Gibbs 吸附公式^[5]计算:

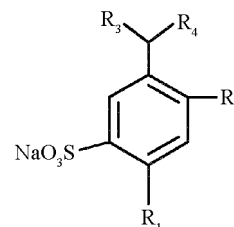
$$\Gamma_{\max} = [-1/(2.303nRT)] \times [d\gamma/d\lg\alpha]_{\max} \quad (1)$$

式中 α 为烷基苯磺酸钠在溶液中的活度; R 是气体常数; T 是绝对温度; n 为疏水碳氢链的碳原子数; γ 为烷基苯磺酸钠水溶液的表面张力.

A_{\min} 为饱和吸附时烷基苯磺酸钠分子在溶液表面的极限占有面积, 可由公式(2)计算^[6]:

$$A_{\min} = 1/[N\Gamma_{\max}] \quad (2)$$

N 是阿佛加得罗常数, 标准吸附自由能(ΔG_{ad}^0)可由公式(3)计算^[4]:



5,6-1,1: $R_1=R_2=\text{CH}_3$, $R_3=\text{C}_5\text{H}_{11}$, $R_4=\text{C}_6\text{H}_{13}$
 5,6-3,3: $R_1=R_2=i\text{-C}_3\text{H}_7$, $R_3=\text{C}_5\text{H}_{11}$, $R_4=\text{C}_6\text{H}_{13}$
 5,6-2,0: $R_1=\text{C}_2\text{H}_5$, $R_2=\text{H}$, $R_3=\text{C}_5\text{H}_{11}$, $R_4=\text{C}_6\text{H}_{13}$

图 1 多烷基苯磺酸钠的分子结构及编号

Fig.1 The molecular structures and serial numbers of sodium alkylbenzenesulfonates

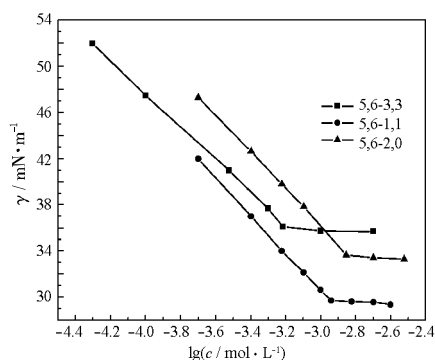
图2 多烷基苯磺酸钠在纯水中的 γ -lgc 曲线

Fig.2 Surface tension vs lgc of sodium alkylbenzenesulfonates in pure water

$$\Delta G_{ad}^0 = 2.303RT \lg \alpha_{R^-,cmc} - 0.602 \pi_{cmc} A_{min} \quad (3)$$

式中 $\alpha_{R^-,cmc}$ 为临界胶束浓度时表面活性剂阴离子的活度, π_{cmc} 为临界胶束浓度时表面活性剂溶液的表面压. pC_{20} 是将水溶液表面张力降低 $20 \text{ mN} \cdot \text{m}^{-1}$ 所需表面活性剂浓度的负对数, 可由公式(4)计算^[5]:

$$pC_{20} = [(\gamma_0 - 20 - \gamma_{cmc}) / (2.303nR\Gamma_{max})] - \lg \alpha_{cmc} \quad (4)$$

式中 γ_0 为纯水的表面张力, γ_{cmc} 为临界胶束浓度时表面活性剂溶液的表面张力, α_{cmc} 为临界胶束浓度时表面活性剂的活度.

3 结果与讨论

图2和图3分别为 30°C 时多烷基苯磺酸钠在纯水及 $0.171 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ NaCl 水溶液中表面张力随浓度变化的曲线. 由 γ -lgc 曲线计算各多烷基苯磺酸钠的表面性质数据, 列于表1和表2.

表1 多烷基苯磺酸钠在水溶液中的表面性质参数

Table 1 Surficial properties of sodium alkylbenzenesulfonates in pure water

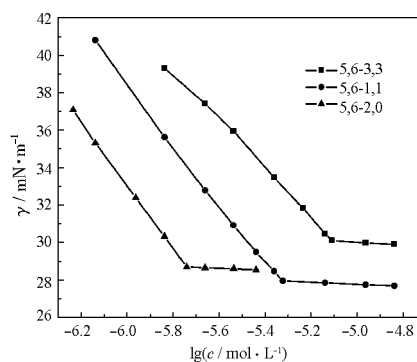
Surfactants	10^{-3} cmc $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$	$10^{10} \Gamma_{max}$ $\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2}$	A_{min} nm^2	γ_{cmc} $\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$	π_{cmc} $\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$	pC_{20}	ΔG_{ad}^0 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
5,6-3,3	0.63	1.23	1.35	35.91	35.09	4.26	-47.06
5,6-1,1	1.15	1.44	1.18	29.61	41.49	4.23	-46.52
5,6-2,0	1.40	1.38	1.20	33.66	37.54	3.95	-43.66

cmc is the critical micelle concentration; Γ_{max} is the surface excess concentration at surface saturation. A_{min} is minimum areas. γ_{cmc} is the surface tension at the cmc; π_{cmc} is the effectiveness of a surfactant in reduing surface tension. pC_{20} is the efficiency of a surfactant in reduing surface tension. ΔG_{ad}^0 is the standard free energy change upon adsorption.

表2 多烷基苯磺酸钠在氯化钠溶液中的表面性质参数

Table 2 Surficial properties of sodium alkylbenzenesulfonates in $0.171 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ NaCl solution

Surfactants	10^{-3} cmc $\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$	$10^{10} \Gamma_{max}$ $\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2}$	A_{min} nm^2	γ_{cmc} $\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$	π_{cmc} $\text{mN} \cdot \text{m}^{-1}$	pC_{20}	ΔG_{ad}^0 $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
5,6-3,3	0.110	2.21	0.75	30.12	41.08	5.61	-47.86
5,6-1,1	0.065	2.84	0.58	27.95	43.25	5.47	-45.74
5,6-2,0	0.025	2.90	0.57	28.70	42.50	5.85	-47.63

图3 多烷基苯磺酸钠在氯化钠溶液中的 γ -lgc 曲线Fig.3 Surface tension vs lgc of sodium alkylbenzenesulfonates in $0.171 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ NaCl solution

3.1 支链烷基苯磺酸钠的结构与 cmc 的关系

临界胶束浓度(cmc)是表面活性剂的重要性质之一. 为了研究烷基苯磺酸钠的主链、侧链对 cmc 的影响, 表3列出了单取代烷基苯磺酸钠、单取代烷基萘磺酸钠、三取代烷基苯磺酸钠(分子结构见图4)及多取代烷基苯磺酸钠的 cmc 数据.

从表3可知, 碳氢主链碳原子数的增加和短侧链中碳原子数的增加对 cmc 的降低程度是不同的. I-III 组考查芳环上碳氢主链碳原子数的增大对 cmc 的影响. 其中 1、2、3 为单取代烷基苯磺酸钠, 碳氢主链每增加两个碳原子, cmc 约为原值的 1/4; 4、5、6 为单取代烷基萘磺酸钠, 碳氢主链每增加两个碳, cmc 约为原值的 1/4. 大体上计算, 碳氢主链平均每增加一个碳, cmc 降低一半. 第 III 组 7、8、9 为三烷基苯磺酸钠, 碳氢主链每增加一个碳, cmc 降低一半.

表 3 不同结构烷基芳基磺酸钠在 30 °C 水溶液中的临界胶束浓度

Table 3 cmc of the different sodium alkylbenzenesulfonates in aqueous solution (30 °C)

Group	No.	Surfactants	10^{-3} cmc(mol·L ⁻¹)	<i>B</i>
I	1	<i>p</i> -2-C ₁₄ H ₂₉ C ₆ H ₄ SO ₃ Na	1.534 ^[6]	0.28
	2	<i>p</i> -2-C ₁₆ H ₃₃ C ₆ H ₄ SO ₃ Na	0.438 ^[6]	
	3	<i>p</i> -2-C ₁₈ H ₃₇ C ₆ H ₄ SO ₃ Na	0.112 ^[6]	
II	4	1-(<i>n</i> -C ₆ H ₁₃)-4-C ₁₀ H ₆ SO ₃ Na	10 ^[7]	0.28
	5	1-(<i>n</i> -C ₈ H ₁₇)-4-C ₁₀ H ₆ SO ₃ Na	2.4 ^[7]	
	6	1-(<i>n</i> -C ₁₀ H ₂₁)-4-C ₁₀ H ₆ SO ₃ Na	0.80 ^[7]	
III	7	3,4-3,3 (<i>N_c</i> =14)	4.0 ^[4]	0.30
	8	4,4-3,3 (<i>N_c</i> =15)	2.0 ^[4]	
	9	4,5-3,3 (<i>N_c</i> =16)	1.0 ^[4]	
IV	10	<i>p</i> -5-C ₁₂ H ₂₅ C ₆ H ₄ SO ₃ Na(<i>N_c</i> =12)	1.63 ^[8]	0.068
	11	5,6-1,1 (<i>N_c</i> =14)	1.15	
	12	5,6-3,3 (<i>N_c</i> =18)	0.68	

① *N_c* is the total carbon number of alkyl chain of an alkylbenzenesulfonate.

② Although surfactants in group III and IV are all alkylbenzenesulfonates, the position of alkyl chain at benzene ring is different, so the cmc in group III and IV can't be compared.

③ *B* is a constant for the ionic type of alkylbenzenesulfonate.

根据表面活性剂作用原理, 离子型表面活性剂碳氢链的碳原子数在 8~16 的范围时, cmc 随碳原子数变化呈现一定的规律, 即在同系物中每增加一个碳原子, cmc 下降一半^[9]. 在表 3 中, 无论单取代烷基苯磺酸钠、单取代烷基萘磺酸钠, 还是三烷基苯磺酸钠, 碳氢主链碳原子数的变化引起的 cmc 的变化基本符合这一规律.

但当多烷基苯磺酸钠 11 和 12(表 3 第 IV 组)的短侧链碳原子数变化时, 引起 cmc 的变化与上述规律差异很大. 比较 10、11 和 12, 它们主链碳原子数相同, 10 和 11 的主链支化位置只有一个碳原子之差, 有一定的可比性, 11 比 10 短侧链增加了两个碳原子, 但 11 的临界胶束浓度的降低不足 10 的一半. 11 和 12 主链分支的位置完全相同, 12 比 11 侧链增

加了四个碳原子, cmc 的降低仍不足一半. 上述结果表明, 主链与短侧链碳原子数的增大, 对降低 cmc 的程度是不同的. 短侧链降低 cmc 的能力, 远小于主链. 这说明多烷基苯磺酸钠在形成胶团的过程中, 短侧链的疏水相互作用不如主链明显.

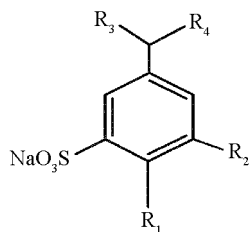
直链离子型表面活性剂同系物满足公式:

$$\lg \text{cmc} = A - Bn$$

A、*B* 均为经验常数, 其大小分别代表极性基和疏水基对表面活性剂形成胶团能力的影响的强弱. 表 3 列出不同支链烷基苯磺酸钠的经验常数 *B* 的值. 从表中可以看出 I、II、III 的 *B* 值相近, 都在 0.30 左右, 而 IV 的 *B* 值则小得多. 这说明多烷基苯磺酸钠形成胶团时, 侧链的影响不如主链影响大.

Caponetti 等^[10]用小角度中子衍射法(SANS)研究支链烷基苯磺酸钠胶团结构时, 提出了胶团的结构模型. 在该模型中, 侧链位于胶团的栅栏层附近. 从胶团形成过程来看, 一方面, 短侧链的增加, 使表面活性剂分子间疏水相互作用增强, cmc 降低; 另一方面, 短侧链的增加使表面活性剂分子形成胶束时空间阻碍增大, cmc 升高. 这两个相互竞争的因素决定了短侧链降低 cmc 的程度没有主链明显.

从胶团形成的热力学来看, *B* 值反映疏水基中一个次甲基由水环境转移到胶团时标准 Gibbs 自由能的改变量, 一般表面活性剂的 *B* 值与次甲基由水环境转移到碳氢环境时自由能的改变量相符合^[11]. 而多取代烷基苯磺酸盐邻位的侧链在形成胶团时并



3,4-3,3: R₁=*i*-C₃H₇, R₂=*n*-C₃H₇, R₃=C₃H₇, R₄=C₄H₉
 4,4-3,3: R₁=*i*-C₃H₇, R₂=*n*-C₃H₇, R₃=C₄H₉, R₄=C₄H₉
 4,5-3,3: R₁=*i*-C₃H₇, R₂=*n*-C₃H₇, R₃=C₄H₉, R₄=C₅H₁₁

图 4 三烷基苯磺酸钠(表 3 中第 III 组)的分子结构图

Fig.4 The molecular structure of sodium trialkylbenzenesulfonates (Table 3, group III)

表 4 烷基苯磺酸钠在水溶液中的 Γ_{\max}

Tables 4 Γ_{\max} of sodium alkylbenzenesulfonates in water				
Group	No.	Surfactants	$T / ^\circ\text{C}$	$10^{10} \Gamma_{\max}$ $\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2}$
I	1	$\text{C}_9\text{H}_{19}\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{Na}$	75	1.8 ^[6]
	2	$\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{Na}$	75	2.1 ^[6]
	3	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{Na}$	75	2.8 ^[6]
II	4	4,7-1($N_c=13$)	30	1.45 ^[8]
	5	6,7-1($N_c=15$)	30	1.46 ^[8]
	6	8,7-1($N_c=17$)	30	1.87 ^[8]
III	7	$p\text{-5-C}_{12}\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{Na}$ ($N_c=12$)	30	1.50 ^[10]
	8	5,6-1,1($N_c=14$)	30	1.44
	9	5,6-3,3($N_c=18$)	30	1.23

未转移到完全的碳氢环境中,导致 B 值的降低.

3.2 多烷基苯磺酸钠的结构与 Γ_{\max} 的关系

Γ_{\max} 是衡量表面活性剂吸附能力的重要参数.为了研究烷基苯磺酸钠中碳氢主链和短侧链对 Γ_{\max} 的影响,表 4 列出了单取代直链烷基苯磺酸钠(I),二取代支链烷基苯磺酸钠(II)及多取代支链烷基苯磺酸钠(III)的 Γ_{\max} .第 I、II 组研究碳氢主链对于 Γ_{\max} 的影响,第 III 组研究短侧链对 Γ_{\max} 的影响.

从表 4 中可知,对于烷基芳基磺酸钠,碳氢主链和短侧链的碳原子数增加对 Γ_{\max} 有不同影响.1、2、3 为单取代烷基苯磺酸钠,随着主链碳原子数的增加, Γ_{\max} 也随之略有增加;4、5、6 为二取代支链烷基苯磺酸钠, Γ_{\max} 也是随主链碳原子数的增加而增大.7、8、9 为多烷基苯磺酸钠, Γ_{\max} 随着侧链碳原子数的增加反而降低.

考查多烷基苯磺酸钠的 Γ_{\max} 时,主要考虑界面化学势与体相化学势的差值、分子的独占面积(即不允许其它分子进入的面积,由表面活性剂分子大小及其在界面上的排列方式决定)及离子头之间的排斥力的影响.

对于第 I 组和第 II 组烷基苯磺酸钠,随着碳氢主链的增加,疏水性增强,界面化学势与体相化学势的差值增大,因此 Γ_{\max} 增大.对第 III 组烷基苯磺酸钠,其主链碳原子数保持不变, Γ_{\max} 受侧链的影响:短侧链碳原子数的增加使分子代表性面积增大,导致 Γ_{\max} 降低.

3.3 多烷基苯磺酸钠的结构与 pC_{20} 、 ΔG_{ad}^0 的关系

pC_{20} 可以作为表面活性剂降低表面张力效率的度量.从表 5 可知,多烷基苯磺酸钠的 pC_{20} 随着侧链碳原子数的增加而增加.

ΔG_{ad}^0 是表面活性剂的标准吸附自由能.从同系

表 5 烷基苯磺酸钠在水溶液中的 pC_{20} 、 ΔG_{ad}^0

Table 5 pC_{20} and ΔG_{ad}^0 of sodium alkylbenzenesulfonates in water		
Surfactants	pC_{20}	$\Delta G_{\text{ad}}^0(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$
$p\text{-5-C}_{12}\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_4\text{SO}_3\text{Na}$	3.99	-43.20
5,6-1,1	4.23	-46.52
5,6-3,3	4.26	-47.06

物的吸附标准自由能可推算出每增加一个次甲基对自由能的贡献约为 $3.0\sim 3.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ [9].从表 5 可知, ΔG_{ad}^0 随着侧链碳原子数的增加而降低,说明侧链碳原子数的增加使表面活性剂疏水性增强.但侧链增加 4 个碳原子,自由能的改变量仅为 $0.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 左右.这是由于多取代烷基苯磺酸盐在表面上排列时,侧链大部分处于水环境中造成的.

3.4 氯化钠对多烷基苯磺酸钠性质的影响

从表 1 和表 2 可知,加入氯化钠后,多烷基苯磺酸钠 5,6-3,3、5,6-1,1 和 5,6-2,0 的 cmc 与纯水中的 cmc 相比,分别降低了 5.7、17.6 和 56 倍.这说明多烷基苯磺酸钠因侧链的不同而对盐的敏感性是不同的.加入氯化钠后,电性排斥变弱,多烷基苯磺酸钠的空间阻碍成为影响 cmc 的重要因素.多烷基苯磺酸钠 5,6-3,3、5,6-1,1 和 5,6-2,0 的空间阻碍依次降低,胶团越容易形成,因此 cmc 降低程度增大,对盐的敏感性增强.

从表 1 和表 2 还可看出,加入氯化钠后,5,6-3,3、5,6-1,1 和 5,6-2,0 的 Γ_{\max} 、 pC_{20} 都增大了.说明无机盐的加入,提高了表面活性剂降低表面张力的效率.加入无机盐,对 ΔG_{ad}^0 影响不大.

4 结论

在多烷基苯磺酸钠溶液中,随着短侧链的碳原子数的增加,cmc 降低,但降低的程度远小于主链对 cmc 的降低程度.短侧链碳原子数的增加,使 Γ_{\max} 降低,表现出与主链不同的变化规律.短侧链碳原子数的增加,使 pC_{20} 增大, ΔG_{ad}^0 更负.加氯化钠后, pC_{20} 增大,但对 ΔG_{ad}^0 影响不大.从多烷基苯磺酸钠的结构来看,较大的空间位阻和分子独占面积是造成上述实验结果的主要原因.

References

- 1 Tsubone, K.; Rosen, M. J. *J. Colloid and Interface Sci.*, **2001**, **244** (2): 394
- 2 Rosen, M. J.; Cohen, A. W.; Dahanayake, M. D.; Hua, X. Y. *J. Phys.*

- Chem.*, **1982**, **86**: 541
- 3 Wang, L.; Zhang, L.; Chu, Y. P.; Zhao, S.; Yu, J. Y. *Acta Phys.-Chim. Sin.*, **2004**, **20**(12): 1451 [王琳, 张路, 楚艳苹, 赵澹, 俞稼镛. 物理化学学报(*Wuli Huaxue Xuebao*), **2004**, **20**(12): 1451]
- 4 Jiang, X. M.; Xu, Z. C.; An, J. Y.; Zhao, S.; Yu, J. Y. *Fine Chemicals*, **2005**, **21**: 808 [姜小明, 徐志成, 安静仪, 赵澹, 俞稼镛. 精细化工(*Jingxi Huagong*), **2005**, **21**: 808]
- 5 Dahanayake, M. D.; Coben, A. W.; Rosen, M. J. *Phys. Chem.*, **1986**, **90**: 2413
- 6 Shi, F. Q.; Zhang, L.; An, J. Y.; Zhao, S.; Yu, J. Y. *Photographic Sci. & Phot. Chem.*, **2005**, **23**: 175 [史福强, 张路, 安静仪, 赵澹, 俞稼镛. 感光科学与光化学(*Ganguangkexue Yu Guang Huaxue*), **2005**, **23**: 175]
- 7 Tan, X. L.; Zhang, L.; Zhao, S.; Li, W.; Ye, J. P.; Yu, J. Y.; An, J. Y. *Langmuir*, **2004**, **20**: 7010
- 8 Wang, L. Ph. D. Dissertation. Beijing: Technical Institute of Physics Chemistry, Chinese Academy of Sciences, 2004 [王琳. 博士学位论文. 北京: 中国科学院理化技术研究所, 2004]
- 9 Zhao, G. X. Principles of surfactants action. Beijing: China Light Industry Press, 2003: 704 [赵国玺. 表面活性剂作用原理. 北京: 轻工业出版社, 2003: 704]
- 10 Caponetti, E.; Triolo, R.; Patience, C. J. *Colloid and Interface Sci.*, **1987**, **116**: 200
- 11 Rosen, M. J. Surfactants and interfacial phenomena. New Jersey: John Wiley and Sons, Inc., 2004: 145

Surface Properties of Sodium Alkylbenzenesulfonates with Additional Side Chains*

JIANG, Xiao-Ming ZHANG, Lu AN, Jing-Yi ZHAO, Sui YU, Jia-Yong

(*Technical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101*)

Abstract The relationships between the structures of sodium alkylbenzenesulfonates with additional side chains and surface properties, especially the influence of the side chains, were studied. From the surface tension measured in pure water and 0.171 mol·L⁻¹ NaCl solutions, the following parameters were calculated: the critical micelle concentration (cmc), the surface excess concentration at surface saturation (Γ_{\max}), the minimum area (A_{\min}), the surface tension at the cmc (γ_{\max}), the effectiveness of a surfactant in reducing surface tension (π_{cmc}), the efficiency of a surfactant in reducing surface tension (pC_{20}), the standard free energy change upon adsorption (ΔG_{ad}^0). The main chain and side chain have different effects on the surface properties. With increasing the number of carbons in the main chain or the side chains, cmc decreases, but the decrease degree of cmc is quite different, the main chain decreases cmc to a greater degree than the side chains do. While the number of carbons increases, the main chain increases Γ_{\max} , but the side chain decreases Γ_{\max} . These surface properties were explained by the structures of sodium alkylbenzenesulfonate with additional side chains.

Keywords: Alkylbenzenesulfonate, Molecular structure, Critical micelle concentration, Surface excess concentration