

# TMCS/PTES 改性制备疏水硅胶及其正戊烷/正己烷吸附性能研究

罗宇浩<sup>1</sup>, 冯廷雪<sup>2</sup>, 杨立辉<sup>3</sup>, 董彦超<sup>1,3</sup>, 刘娜<sup>1</sup>, 黄雪莉<sup>1</sup>, 黄河<sup>1</sup>

(1. 新疆大学 化工学院, 省部共建碳基能源资源化学与利用国家重点实验室, 乌鲁木齐 830017; 2. 新疆新业能源化工有限公司, 五家渠 831399; 3. 中油(新疆)石油工程有限公司, 克拉玛依 834000)

**摘要:** 水汽在硅胶(SG)中引发的竞争吸附严重制约了其在高湿度条件下的应用。本研究利用三甲基氯硅烷(TMCS)和苯基三乙氧基硅烷(PTES)对 SG 进行改性, 通过一系列表征手段探究材料的物理和化学特性, 结合动态吸附平衡实验和原位红外光谱实验探究吸附材料对正戊烷和正己烷的吸附性能。结果表明: 改性后的硅胶抗湿性明显增强, TMCS 改性时, 其达到阈值浓度后, 改性硅胶的孔结构参数不再发生变化, 17%(体积分数)TMCS 的改性硅胶(SG-17%-TMCS)接触角达 130.8°, 总孔容保持率高达 96.6%; PTES 改性受多方面因素的共同影响, 其中 pH 和温度影响较大, 100%(体积分数)TMCS 的改性硅胶(SG-100%-PTES)接触角达 137.4°, 但比表面积和孔容显著下降至 153 m<sup>2</sup>/g 和 0.061 cm<sup>3</sup>/g。吸附结果表明: TMCS 改性硅胶在高湿条件下仍能保持较好的正戊烷和正己烷吸附能力, 且其相对优势随湿度升高进一步凸显, 5 次高湿条件下吸脱附循环后对正戊烷和正己烷的容量保持率分别维持在约 90%和 92%; PTES 改性硅胶由于自身孔道结构的限制和分子空间位阻效应, 吸附性能下降。本研究阐明了改性条件对 TMCS 和 PTES 改性硅胶疏水性能的影响及改性后材料对正戊烷和正己烷的吸附作用, 为高湿废气中正戊烷和正己烷的高效脱除与回收提供了理论参考。

**关键词:** 疏水改性; 孔结构调控; 空间位阻; 竞争吸附

中图分类号: TQ424

文献标志码: A

文章编号:

## Hydrophobic Silica Gel Modified by TMCS/PTES: Preparation and Its *n*-Pentane/*n*-Hexane Adsorption Performance

LUO Yuhao<sup>1</sup>, FENG Tingxue<sup>2</sup>, YANG Lihui<sup>3</sup>, DONG Yanchao<sup>1,3</sup>, LIU Na<sup>1</sup>, HUANG Xueli<sup>1</sup>, HUANG He<sup>1</sup>

(1. State Key Laboratory of Chemistry and Utilization of Carbon Based Energy Resources, College of Chemical Engineering, Xinjiang University, Urumqi 830017, China; 2. Xinjiang Xinye Energy & Chemical Co., Ltd., Wujiaqu 831399, China; 3. CPECC (Xinjiang) Petroleum Engineering Co., Ltd., Karamay 834000, China)

**Abstract:** Competitive adsorption induced by water vapor severely restricts the application of silica gel under high-humidity conditions. In this study, silica gel was hydrophobically modified using trimethylchlorosilane (TMCS) and phenyltriethoxysilane (PTES). Physicochemical properties of the synthesized materials were evaluated by various characterization techniques. Additionally, adsorption performance towards *n*-pentane and *n*-hexane was assessed by dynamic adsorption equilibrium experiments coupled with *in-situ* infrared spectroscopy. Results indicate that the modified silica gels exhibit significantly enhanced moisture resistance. TMCS modification is highly concentration-dependent, and pore structural parameters of the modified silica gel remain constant after reaching the threshold concentration. The optimal sample modified by 17% (in volume) TMCS (SG-17%-TMCS) achieves a contact angle of 130.8° and retains 96.6% of its total pore volume. Conversely, PTES modification depends on multiple interacting factors, with

收稿日期: 2026-03-23; 收到修改稿日期: 2026-09-08; 网上出版日期: XXXX-XX-XX

基金项目: 新疆维吾尔自治区“天山英才”青年拔尖人才(2024TSYCCX0022)

Xinjiang Uygur Autonomous Region "Tianshan Talents" Youth Top-notch Talent Project (2024TSYCCX0022)

作者简介: 罗宇浩(2000-), 男, 硕士研究生. E-mail: 1821033535@qq.com

LUO Yuhao (2000-), male, Master candidate. E-mail: 1821033535@qq.com

通信作者: 黄河, 副教授. E-mail: xjuhuanghe@xju.edu.cn

HUANG He, associate professor. E-mail: xjuhuanghe@xju.edu.cn

pH and temperature exerting the most significant impacts. The optimal PTES-modified (100%, in volume) sample exhibits a contact angle of  $137.4^\circ$ , but its specific surface area and pore volume decrease markedly to  $153 \text{ m}^2/\text{g}$  and  $0.061 \text{ cm}^3/\text{g}$ . Adsorption tests reveal that the TMCS-modified silica gel maintains high adsorption selectivity for *n*-pentane and *n*-hexane even under high-humidity conditions, and its performance advantage expands further as humidity increases. After five adsorption-desorption cycles under high humidity, the capacity retention rates for *n*-pentane and *n*-hexane remain at approximately 90% and 92%. In contrast, adsorption capacity of the PTES-modified silica gel decreases due to severe limitations imposed by its altered pore structure and pronounced molecular steric hindrance. This study elucidates how modification conditions affect the hydrophobicity of TMCS- and PTES-modified silica gels, alongside their consequent adsorption behaviors towards *n*-pentane and *n*-hexane. These findings provide a solid theoretical reference for the efficient removal and recovery of *n*-pentane and *n*-hexane from high-humidity exhaust gases.

**Key words:** hydrophobic modification; pore structure regulation ; steric hindrance; competitive adsorption

烃类物质作为挥发性有机化合物(VOCs)的主要组分,普遍存在于工业尾气、油气回收及化工废气中,其高效分离与回收不仅是大气污染防控的关键环节,更能实现资源循环利用,具有重要的环保与经济价值。与传统的蒸馏、冷凝等分离方法相比,吸附驱动的气体分离技术具有能耗低、操作条件温和、工艺灵活性强及设备投资小等突出优点,广泛应用于废气处理和气体净化领域。硅胶是一种常用吸附剂,较强的亲水性导致其强度、寿命和选择性差,不适用高湿度混合气体的分离。通过表面疏水改性降低硅胶对水蒸气的亲和力,是提升其高湿条件下烃类吸附性能的重要途径<sup>[1-3]</sup>。

近年来,疏水硅胶及有机功能化硅基多孔材料已被广泛用于挥发性有机化合物(VOCs)和有机蒸气的吸附回收。Gan 等<sup>[4]</sup>指出,吸附剂在复杂湿度条件下的选择性、稳定性和再生性能仍是限制其工程应用的重要问题。Li 等<sup>[5]</sup>通过共缩聚法构建功能化有序介孔二氧化硅,显著提升了含湿条件下 VOCs 吸附-脱附过程中硅基材料的再生性能。Deng 等<sup>[6]</sup>合成了具有定制介孔结构的疏水杂化硅胶并将其应用于含湿有机溶剂回收,其最优样品对 HFE-7200 的吸附容量较商业介孔活性炭提高 174%。Lu 等<sup>[7]</sup>制备了疏水聚二乙烯基苯/二氧化硅(PDVB/SiO<sub>2</sub>)复合吸附剂,该材料在高湿气流中对甲苯表现出较好的动态吸附和再生性能。Liu 等<sup>[8]</sup>则通过调控介孔二氧化硅表面官能团,构建了有机基团富集且羟基受限的疏水介孔硅材料,显著提高了材料在湿态条件下的甲苯吸附能力和抗湿稳定性。上述研究表明,表面疏水化、调控孔结构和引入有机功能基团能够有效改善硅基材料在含湿 VOCs 体系中的吸附和再生性能。然而现有关于疏水硅基材料的研究多集中于复杂条件下芳香族 VOCs、含氧 VOCs 或高价值有机溶剂回收,对高湿条件下正戊烷和正己烷等轻质烷烃组分的吸附关注不足,这在一定程度上限制了疏水硅胶在含湿烷烃混合气体分离中的应用。

为拓宽疏水硅胶在烷烃蒸气吸附领域的应用,已有研究开始关注疏水硅基材料对正己烷、戊烷/己烷及汽油蒸气的吸附行为。Huang 等<sup>[9]</sup>采用 TMCS 对硅胶进行微波辅助疏水改性,显著降低了水汽吸附并保持较好的烷烃蒸气吸附与循环稳定性。Wang 等<sup>[10]</sup>采用 TMCS 对 SBA-15 进行后接枝疏水改性,所得产物 SBA-15-TMCS 对正己烷和汽油蒸气表现出更低的水蒸气吸附量和更高的动态吸附容量。尽管相关研究已证明疏水改性能够有效提高硅基材料对烷烃和汽油蒸气的吸附性能<sup>[11-12]</sup>,但现有工作多以单一烷烃或汽油蒸气为模型对象,主要关注吸附容量提升和水汽吸附量降低,对正戊烷/正己烷在高湿条件下的动态吸附行为、水汽竞争影响以及不同硅烷改性方式对孔结构和烃类传质性能影响的研究仍较为匮乏。因此,采用不同硅烷改性剂对硅胶进行疏水改性,探索高湿条件下疏水改性硅胶对正戊烷和正己烷吸附和传质性能的影响规律,具有重要的研究意义与应用价值。

本研究选用 TMCS 和 PTES 作为改性剂,对商用硅胶进行表面疏水改性。通过调控改性剂浓度、pH、温度和老化时间,系统比较两类有机硅烷对硅胶表面润湿性、微观形貌和孔结构的差异化影响;进一步采用动态吸附实验评价改性材料在不同湿度条件下对正戊烷和正己烷的吸附性能。在此基础上,结合原位红外光谱实验分析不同改性基团对烷烃分子吸附亲和力和传质行为的影响,阐明高湿条件下疏水层构建方式、有效孔结构保持与烃类吸附传质之间的内在关联。

## 1 实验部分

取适量 TMCS 或 PTES,与正己烷混合配制改性液,其中 TMCS 或 PTES 体积分数分别为 5%、9%、17%、23%、33%、41%和 100%,搅拌 30 min 后,加入 5 g 活化后的硅胶。通过添加乙

醇、盐酸/氨水调节改性剂混合液至所需 pH, 密封后在室温(25±3) °C下静置老化不同时间(24、48、72 h)。老化后使用正己烷溶液滤洗 2~3 次, 去除未完全反应的改性剂混合液, 随后将样品在 150 °C 烘箱中干燥 4 h, 得到改性后耐水硅胶, 记为 SG-*x*-TMCS/PTES, 其中 *x* 表示改性剂的体积分数。试剂、材料表征、吸附实验见补充材料。

## 2 结果与讨论

### 2.1 改性条件的影响

接触角是评价材料疏水性能的重要参数, 本节考察了改性剂浓度对样品接触角的影响(图 1(a))。改性前硅胶的接触角为 17.9°, 表现出强烈的亲水性; 经 TMCS 改性后接触角显著增大, 说明硅胶由亲水性向疏水性转变; 随着 TMCS 体积分数升高, 接触角逐渐增大, 当体积分数达到 17% 时接触角迅速上升至 125.4°, 继续提高 TMCS 体积分数接触角变化不明显。该现象表明硅胶表面及孔道内可反应硅羟基位点趋于饱和后, 继续增加 TMCS 浓度难以进一步提高材料疏水性<sup>[13]</sup>。PTES 改性与 TMCS 改性表现出不同的变化规律, 低体积分数下接触角先降低后缓慢升高, 整体变化幅度较小; 随着 PTES 体积分数进一步增加, 接触角逐渐增大, 并在 PTES 体积分数为 100% 时达到最大值。这是由于低浓度 PTES 水解和缩合程度有限, 部分未完全缩合的极性基团会增加表面亲水性, 随着 PTES 浓度升高, 其与表面硅羟基的缩合接枝逐渐增强, 样品疏水性随之提高<sup>[14]</sup>。综合不同改性浓度下的接触角变化可知, SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES 样品表现出较优的疏水性能。

基于 SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES, 进一步考察了改性 pH、温度和老化时间对样品接触角的影响(图 1)。PTES 与硅胶表面的反应通常包括水解和缩合接枝两个过程: PTES 首先发生水解生成硅醇结构, 随后再与硅胶表面硅羟基发生缩合接枝, 其中缩合接枝过程相对缓慢<sup>[15]</sup>。当改性温度由 20 °C 提高至 40 °C 时, SG-100%-PTES 的接触角进一步增大, 说明适当升高温度能够促进 PTES 的水解缩合反应, 提高表面疏水化程度<sup>[16]</sup>。然而当温度继续升高至 60 °C 时, 样品疏水性反而下降。这是由于 PTES 分子自聚速率开始大于与硅羟基反应速率。相比之下, TMCS 分子中 Si-Cl 键具有较高反应活性, 致使其改性速率较快, 常温下即可完成反应, 因此其疏水性随温度升高几乎没有变化。pH 对两种硅烷改性

体系的影响也存在明显差异。对于 PTES 改性体系, 弱酸性条件有利于其水解和后续缩合接枝反应, 其中 PTES 在 pH 5 时呈现最佳疏水性, 在 pH 3 时疏水性减弱, 这是因为酸性过强会导致硅胶表面羟基被质子化, 反应活性下降。对于 TMCS 改性体系, 受其 Si-Cl 键较高的反应活性和亲电性影响, TMCS 的疏水改性对酸性变化并不敏感<sup>[17]</sup>。在碱性环境中, 两种材料的疏水性均明显下降, 表明强碱环境不利于硅胶疏水化改性。高浓度氢氧根离子会使硅胶骨架发生急剧的化学解聚, 导致 Si-O-Si 键断裂并破坏原有孔壁结构及表面接枝层, 因此材料疏水性降低<sup>[18]</sup>。改性时间同样会影响表面疏水层的形成。硅烷化改性是受表面接枝、分子间缩合、局部沉积及基体稳定性共同影响的动态过程, 时间过长, 会引发基底表面刻蚀或改性剂分子的杂乱沉积, 破坏疏水单分子层<sup>[19]</sup>。因此, 随着老化时间延长, 材料的接触角均先增大后下降, 在 48 h 接触角最大分别为 130.8°(SG-17%-TMCS) 和 137.4°(SG-100%-PTES)。

上述结果表明, TMCS 和 PTES 对硅胶的疏水改性机制存在明显差异。TMCS 分子尺寸小、反应活性高, 可快速与表面硅羟基发生封端反应, 其疏水化过程主要受可反应羟基数量控制, 当接枝位点趋于饱和后, 继续强化改性条件对接触角提升有限。相比之下, PTES 需先水解再缩合接枝, 反应过程对 pH 和温度更敏感。

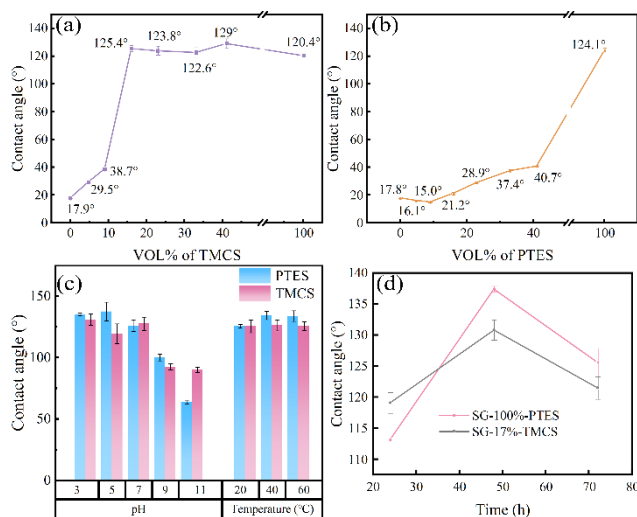


图 1 硅烷化改性条件对接触角的影响

Fig. 1 Effect of silanization conditions on contact angle

(a) TMCS; (b) PTES; (c) pH and temperature (aging time: 48 h); (d) Aging time (for 17% TMCS and 100% PTES)

### 2.2 官能团分析

改性前后硅胶的 FT-IR 图谱如图 2 所示。经 TMCS 改性后, 样品在 2850~2980  $\text{cm}^{-1}$  和 1350  $\text{cm}^{-1}$  处出现新的 C-H 对称伸缩振动和弯曲振动吸收峰,

同时  $840\sim 850\text{ cm}^{-1}$  处出现特定硅键合的烷基 C-H 振动<sup>[20]</sup>, 表明硅胶表面引入甲基基团。此外,  $3300\sim 3700\text{ cm}^{-1}$  范围内的 O-H 峰强度明显减弱, 而  $1000\sim 1100\text{ cm}^{-1}$  处 Si-O-Si 峰强度明显上升, 表明硅胶表面部分硅羟基在改性过程中被消耗, 并与 TMCS 发生硅烷化反应(式(2)), Si-OH 转变为 Si-O-Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> 和 Si-O-Si 结构<sup>[21]</sup>。经 PTES 改性后, 样品在  $1604\text{ cm}^{-1}$  处出现苯基 C-C 键的面内伸缩振动峰,  $700$  和  $735\text{ cm}^{-1}$  处的峰分别对应苯环的面外环变形和同相面外摆动,  $1432\text{ cm}^{-1}$  处出现的峰归属于 C-H 键耦合的环拉伸, 这些特征峰的出现表明 PTES 发生了改性反应(式(3, 4)), 其水解缩合后形成的苯基硅烷结构被成功引入硅胶表面<sup>[22]</sup>。

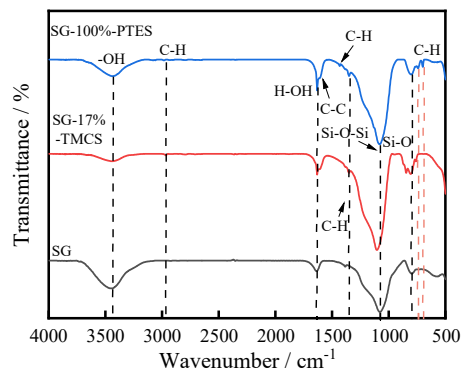
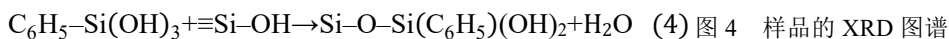
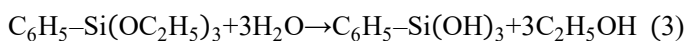
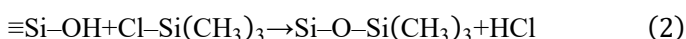


图2 样品的 FT-IR 图谱

Fig. 2 FT-IR spectra of samples

## 2.3 形貌分析

由图 3 可知, 改性前后样品的表面形貌发生明显变化。未改性 SG 表面主要由不规则块状颗粒堆积而成, 经 TMCS 和 PTES 改性后, 样品表面颗粒堆积更加致密。和 TMCS 相比, PTES 改性后颗粒的粒径更小, 结构更致密。这可能与 PTES 分子中苯基体积较大、空间位阻效应更强有关。由此可见, 不同改性基团在调控硅胶表面化学环境的同时, 也会通过影响颗粒间聚集和表面覆盖行为进一步改变材料的表面形貌。

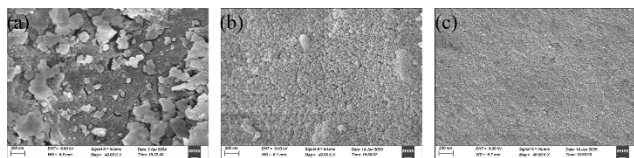


图3 样品的 SEM 照片

Fig. 3 SEM images of samples

(a) SG; (b) SG-17%-TMCS; (c) SG-100%-PTES

## 2.4 结构分析

由图 3 可知, 样品呈现出典型的无定形宽峰, 改性前后的硅胶 XRD 图谱差异不大, 说明改性未破坏硅胶本身的无定形网络结构<sup>[23]</sup>。PTES 改性后  $2\theta=57^\circ$  处 SiO<sub>2</sub> 衍射峰消失, 可能与苯基硅烷物种在孔道内接枝、缩合和局部沉积有关, 导致局部孔道结构有序度下降或衍射信号被有机层覆盖<sup>[24]</sup>。

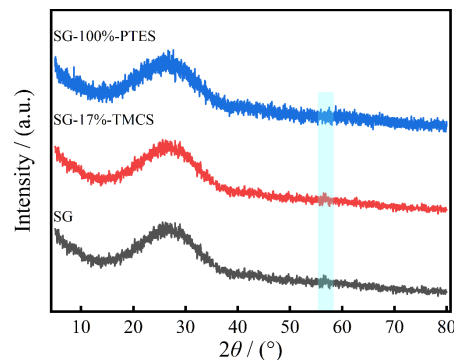


图4 样品的 XRD 图谱

Fig. 4 XRD patterns of samples

## 2.5 抗湿性能

基于 SG、SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES, 考察了不同相对湿度下样品的吸水性能。由图 S2 可知, 在较低相对湿度下三种样品的吸水量差异较小, 随着相对湿度升高, SG 吸水量显著增加, 相比之下 SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES 吸水量增加幅度较小, 且二者整体变化趋势较为接近, 说明硅烷化改性能有效降低硅胶对水蒸气的吸附能力, 提高材料的抗湿性能。结合样品与水滴接触 24 h 后的表面润湿状态可知, SG-100%-PTES 表面水滴出现明显的吸收现象, 而 SG-17%-TMCS 表面水滴仍保持较完整形态, 表明二者在长期液态水接触条件下的表面润湿稳定性存在差异。与 SG-100%-PTES 相比, SG-17%-TMCS 在高湿环境中表现出更持久的表面润湿稳定性。

## 2.6 孔结构表征分析

由图 5 可知, 改性前后样品 N<sub>2</sub> 吸附脱附等温线均属于 IV 型, 并伴随明显的毛细冷凝特征, 表明材料为介孔结构<sup>[25]</sup>。从孔径分布来看, SG-17%-TMCS 样品孔径主要集中在 2~4 nm 之间; SG-100%-PTES 呈现双介孔特征, 孔径主要集中在 0.9~1.7 nm 和 1.9~3.1 nm<sup>[26]</sup>。改性后样品比表面积(*S*<sub>BET</sub>)和孔容均有所下降, 其中 SG-100%-PTES 下降幅度更明显, 表明 PTES 改性对孔结构的影响更显著; 改性后样品平均孔径上升, SG-17%-TMCS 样品上升幅度更明显。SG-100%-TMCS 样品的比表面积、孔径和孔容与 SG-17%-TMCS 差异较小, 表明 TMCS 改性剂体

积分超过 17%后, 继续增大体积分数对硅胶的吸附性能与孔结构已无显著影响。这是因为 TMCS 主要通过孔壁表面硅羟基反应形成相对均匀的单分子疏水层, 当可反应硅羟基位点趋于饱和后, 继续增加 TMCS 浓度难以引起孔结构的显著变化<sup>[27]</sup>。而 PTES 分子含有体积较大的苯基结构, 并且其乙氧基水解后可进一步发生缩合反应, 生成的有机硅物种可能在孔壁或孔口处沉积, 占据孔道空间, 从而导致有效孔径减小、孔容降低甚至部分孔道堵塞<sup>[28]</sup>。结合 FT-IR 图谱中硅羟基吸收峰明显减弱的结果可以推测, PTES 改性过程中不仅发生了表面接枝反应, 还可能伴随硅烷醇之间的缩合聚集, 进一步加剧了局部孔道堵塞和孔结构损失<sup>[29-31]</sup>。

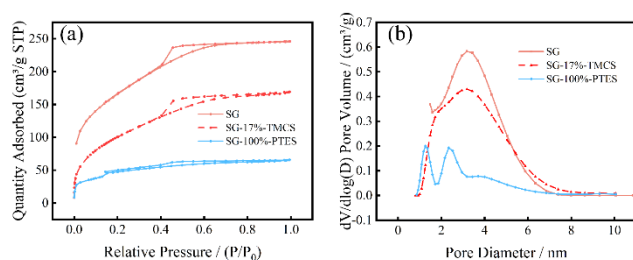


图5 样品的(a) N<sub>2</sub> 脱吸附等温线和(b)孔径分布

Fig. 5 (a) N<sub>2</sub> adsorption-desorption isotherms and (b) pore size distribution of samples

表1 样品的孔径结构特征

| Table 1 Pore structure characteristics of sample |                                                   |                                                      |                          |
|--------------------------------------------------|---------------------------------------------------|------------------------------------------------------|--------------------------|
| Sample                                           | $S_{\text{BET}}/(\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1})$ | $V_{\text{total}}/(\text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1})$ | Average pore diameter/nm |
| SG                                               | 602                                               | 0.319                                                | 2.88                     |
| SG-17%-TMCS                                      | 372                                               | 0.308                                                | 3.14                     |
| SG-100%-TMCS                                     | 372                                               | 0.308                                                | 3.16                     |
| SG-100%-PTES                                     | 153                                               | 0.061                                                | 2.97                     |

## 2.7 热重分析

由图 6 可知, 改性后样品的总失重量均较 SG 有所增加, 说明硅烷化过程中有机基团或有机硅物种被成功引入硅胶表面及孔道内, 并在升温过程中发生热分解。SG 仅在 60 °C附近出现明显失重峰, 主要对应于物理吸附水的脱除<sup>[32]</sup>, 随后温度上升表面羟基缓慢脱水缩合形成硅氧烷网络, 质量缓慢下降。SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES 在中高温区均出现新的 DTG 失重峰, 表明硅烷化改性后有机硅组分被成功引入样品中, 但二者的热分解行为存在明显差异。SG-17%-TMCS 在约 480 °C处出现新的失重峰, 主要对应于表面三甲基硅基结构中有机基团的热裂解, 说明 TMCS 与表面硅羟基反应后形

成了相对稳定的甲基疏水层, 计算得到 TMCS 摩尔接枝量为 0.748 mmol/g<sup>[33]</sup>。相比之下, SG-100%-PTES 在约 263 和 500 °C处出现多阶段失重峰, 分别与未完全缩合的乙氧基、低聚硅氧烷或弱结合有机硅物种的分解, 以及苯基硅烷结构的进一步热分解有关, 计算得到 PTES 摩尔接枝量为 0.359 mmol/g<sup>[34]</sup>。该结果说明, PTES 改性过程较 TMCS 更为复杂, 除表面接枝外, 还伴随水解缩合、低聚物生成和局部沉积等过程。

结合孔结构参数变化进一步分析两种改性方式的差异, TMCS 改性后, 样品比表面积由 602 m<sup>2</sup>/g 降至 372 m<sup>2</sup>/g, 但总孔容仅由 0.319 cm<sup>3</sup>/g 降至 0.308 cm<sup>3</sup>/g, 保持率为 96.6%, 说明 TMCS 主要以小分子封端形式覆盖孔壁表面, 并未造成明显的孔道堵塞。相比之下, SG-100%-PTES 的比表面积和总孔容分别降至 153 m<sup>2</sup>/g 和 0.061 cm<sup>3</sup>/g, 保持率仅为 25.4% 和 19.1%。尽管其接枝量低于 SG-17%-TMCS, 但孔结构损失更加严重, 表明 PTES 改性导致的孔道堵塞并不完全取决于接枝量, 而与其水解缩聚、苯基空间位阻以及有机硅低聚物在孔道内沉积密切相关。由此可见, TMCS 改性更有利于在提高疏水性的同时保持介孔结构, 而 PTES 改性则更容易引起孔道收缩和堵塞。

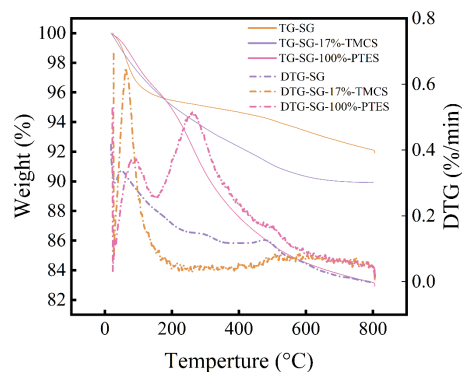


图6 样品的 TG/DTG 曲线

Fig. 6 TG/DTG curves of samples

## 2.8 吸附动力学模拟与内扩散阻力分析

为明确吸附过程中的速率控制步骤, 采用准一级、准二级动力学模型及颗粒内扩散模型对水汽、正戊烷和正己烷的吸附过程进行拟合, 相关拟合曲线及参数见补充材料图 S3~图 S5 和表 S1~表 S3。结果表明, 三种样品对水汽的吸附均更符合准一级动力学模型, 说明水汽吸附主要受物理扩散控制。颗粒内扩散分析显示, SG 的水汽吸附具有多阶段传质特征, 颗粒内扩散为主要限速步骤; 而 SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES 经疏水改性后, 水汽进入孔道受到抑制, 吸附过程主要受外表面液膜扩散控

制。对烃类吸附而言, SG 和 SG-17%-TMCS 对正戊烷的吸附更符合准二级动力学模型, 表明吸附速率受界面相互作用和孔内扩散共同影响; 对正己烷的吸附则更符合准一级动力学模型, 说明其吸附过程以物理扩散为主。颗粒内扩散结果表明, SG 和 SG-17%-TMCS 仍能保持有效孔道扩散, 而 SG-100%-PTES 因 PTES 缩聚和孔道堵塞导致内扩散受限, 正戊烷和正己烷吸附主要停留在外表面或浅层孔道。由此可见, SG-17%-TMCS 在削弱水汽竞争吸附的同时能够较好保持烃类分子的传质通道, 这是其吸附性能优于 SG-100%-PTES 的主要原因。

## 2.9 不同湿度下样品对正戊烷和正己烷的吸附性能

由图 7 可知, 随着相对湿度升高, 三种样品对正戊烷和正己烷的穿透时间均出现不同程度提前, 表明水汽竞争吸附会削弱材料对轻烃分子的有效吸附能力。对于正戊烷吸附而言, 疏水改性后样品的抗湿吸附性能明显增强, 其中 SG-17%-TMCS 在各湿度条件下均表现出最长的穿透时间, 且其优势随湿度升高更加明显。这主要得益于 TMCS 改性有效

消耗了硅胶表面的亲水性硅羟基, 并引入非极性甲基疏水层, 从而降低了水分子对吸附位点和孔道空间的竞争占据。SG-100%-PTES 虽然比表面积和孔容明显低于 SG-17%-TMCS, 但其苯基结构可能与烷烃分子中的 C-H 键形成弱 CH- $\pi$  相互作用, 因此高湿条件下仍表现出一定的烃类吸附优势。对于正己烷吸附而言, 由于正己烷分子量、沸点及分子间作用力均高于正戊烷, 其在材料表面的吸附作用更强, 因此整体穿透时间和饱和时间均较正戊烷明显延长。同时, 三种样品在正己烷吸附过程中的饱和平衡时间差异相对缩小, 说明较强的表面相互作用在一定程度上削弱了不同材料间的吸附差异。进一步比较不同湿度下的穿透曲线可以发现, 随着相对湿度升高, SG 和 SG-100%-PTES 的穿透时间均明显缩短, 而 SG-17%-TMCS 仍能保持相对较长的穿透时间, 表明其高湿环境中具有更稳定的轻烃吸附能力。综合来看, 湿度越高, 水汽竞争作用越显著, SG-17%-TMCS 相较 SG 和 SG-100%-PTES 的抗湿吸附优势也越突出<sup>[35-39]</sup>。

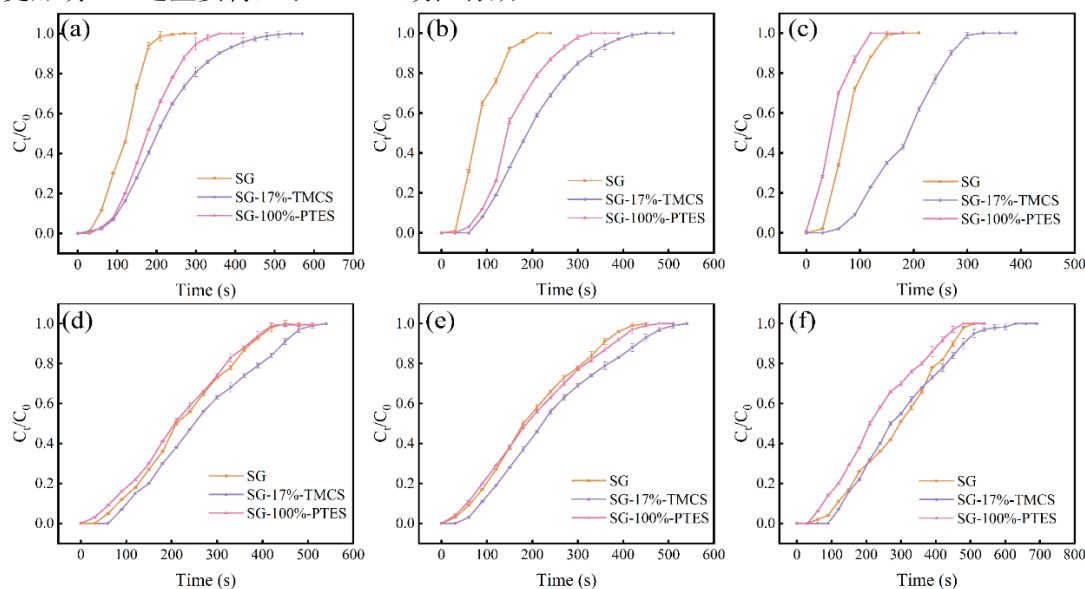


图 7 不同相对湿度下样品的动态穿透曲线

Fig. 7 Dynamic breakthrough curves of samples under different relative humidities  
(a-c) *n*-pentane; (d-f) *n*-hexane; (a, d) RH=50%; (b, e), RH=70%; (c, f), RH=90%

同时, 高湿吸附过程表明疏水改性对正戊烷/正己烷吸附具有双重作用。一方面, 疏水基团能够减弱硅胶表面羟基与水分子的氢键作用, 降低水汽对吸附位点和孔道空间的竞争占据; 另一方面, 过度接枝或缩聚会造成孔道堵塞, 使目标烃类分子的内扩散和孔内富集受到限制。因此, 高湿条件下吸附性能并不单纯取决于接触角大小, 而是取决于疏

水性增强与孔结构保持之间的平衡, 这正是 SG-17%-TMCS 的优势。甲基疏水层能够有效抑制水汽竞争, 同时总孔容保持率较高, 使正戊烷和正己烷分子仍可进入孔道内部并完成吸附富集。SG-100%-PTES 虽然表面疏水性增强, 但缩聚反应和空间位阻影响导致其孔容明显下降, 进而削弱了烃类分子的传质效率并减少了有效吸附空间。因此, SG-

100%-PTES 未表现出与其接触角相匹配的高湿动态吸附优势。该结果表明, 高湿烃类吸附剂的结构优化应避免单纯追求表面疏水性, 而应同时关注疏水层厚度、孔道开放程度和分子扩散阻力之间的协同关系。

## 2.10 不同温度下材料对正戊烷和正己烷吸附的原位红外光谱

采用原位红外吸附技术跟踪样品对正戊烷和正己烷的动态吸附及竞争吸附过程, 结果见图 8。在 40 °C 时, 当吸附气体由正戊烷切换为正己烷时, 仅 SG-100%-PTES 呈现进一步吸附, 而 SG-17%-TMCS 的甲基峰强度减弱, SG 样品减弱更为明显。在 60 °C 时, SG 切换至正己烷后较快出现脱附信号, SG-100%-PTES 也由吸附阶段迅速转入脱附阶段, 而 SG-17%-TMCS 仍保持一定吸附响应, 这说明 SG

和 SG-100%-PTES 的吸附作用较弱。在 80 °C 时, SG 和 SG-100%-PTES 的短暂吸附-脱附过程进一步加快。

随着温度升高, SG 和 SG-100%-PTES 对正戊烷/正己烷的相互作用均出现减弱趋势, 而 SG-17%-TMCS 在吸附温度由 40 °C 上升至 60 °C 时, 其甲基峰强度反而增大, 这表明正己烷与材料表面的相互作用增强, 并与预先吸附的正戊烷发生竞争吸附; 随着吸附过程进行, 正己烷逐步取代正戊烷占据部分吸附位点, 最终达到新的吸附平衡。同时在温度升高后, 相较于其他两种材料, SG-17%-TMCS 吸附时间大幅缩短, 即竞争吸附速率大幅加快, 说明 SG-17%-TMCS 在中温条件下对正戊烷和正己烷具有更好的吸附性能。

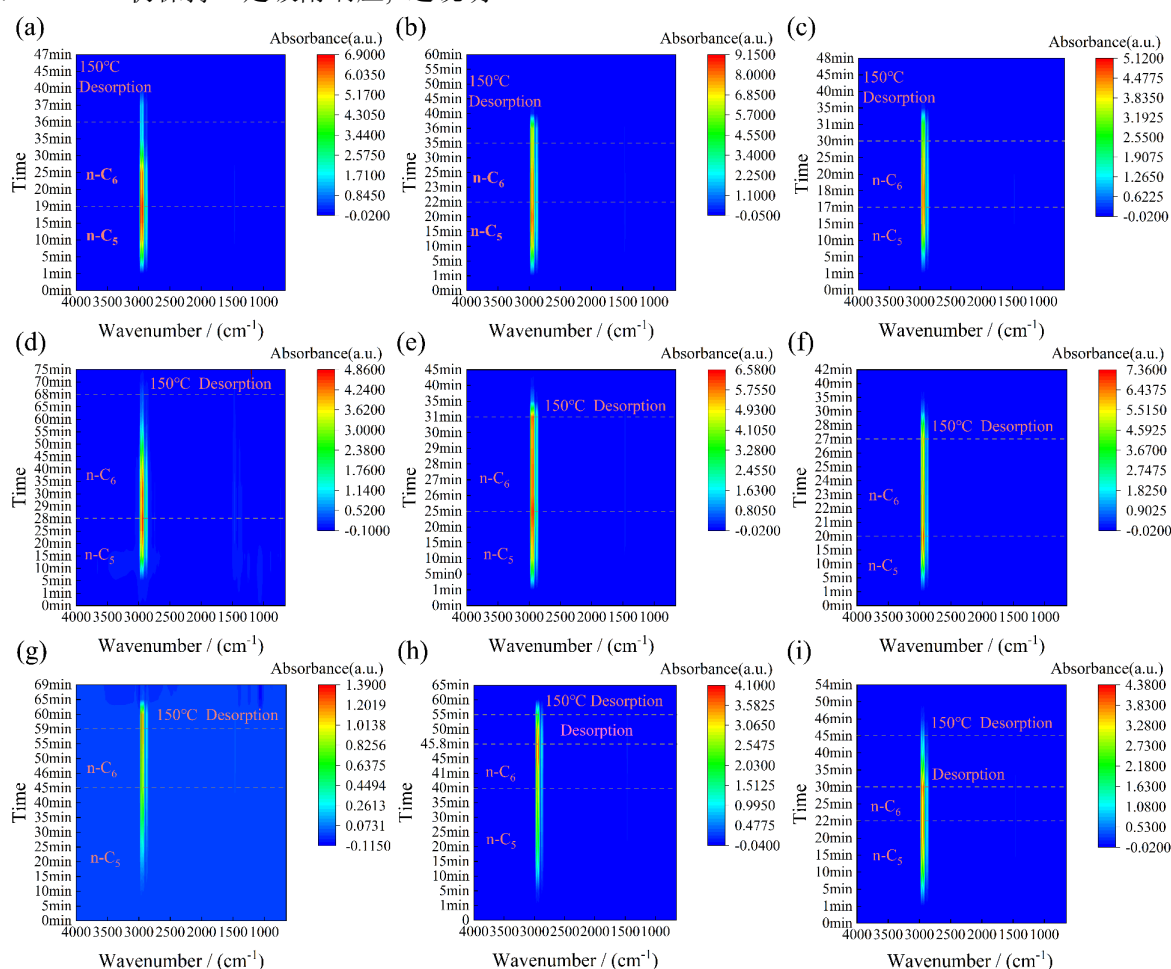


图 8 不同温度下样品的原位红外光谱图

Fig. 8 *In situ* FT-IR spectra of samples at different temperatures

(a-c) SG; (d-f) SG-17%-TMCS; (g-i) SG-100%-PTES; (a, d, g) 40 °C; (b, e, h) 60 °C; (c, f, i) 80 °C

## 2.11 脱附再生与循环稳定性

由图 9 可知, 随着吸脱附循环次数的增加, 三种样品对正戊烷和正己烷的容量保持率均呈下降趋

势, 但下降幅度存在明显差异。其中, SG 的容量保持率下降最为显著, 第 5 次循环后分别降至约 80% 和 83%; SG-100%-PTES 的容量保持率下降幅度较

SG有所减缓,第5次循环后仍保持在约87%和90%;SG-17%-TMCS表现出最稳定的循环性能,第5次循环后对正戊烷和正己烷的容量保持率仍分别维持在约90%和92%。该结果表明,疏水改性能够有效提升硅胶在循环吸附-再生过程中的稳定性,通过削弱水汽竞争吸附与保持较好的孔道结构,SG-17%-TMCS表现出最优的循环再生稳定性。

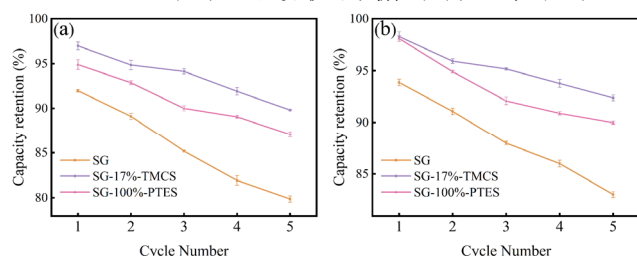


图9 相对湿度90%条件下不同样品对正戊烷和正己烷的循环吸附-脱附稳定性

Fig. 9 Cyclic adsorption-desorption stability of different samples towards *n*-pentane and *n*-hexane under relative humidity of 90%

### 3 结论

本研究采用 TMCS 和 PTES 对硅胶进行疏水改性,结果表明两者均可显著提高硅胶疏水性,SG-17%-TMCS 和 SG-100%-PTES 接触角分别达到  $130.8^\circ$  和  $137.4^\circ$ ,但二者对孔结构和吸附性能的影响存在明显差异。TMCS 主要通过小分子甲基封端消耗表面硅羟基,在增强疏水性的同时保持较好的介孔结构,而 PTES 受水解缩聚和空间位阻影响,虽具有较大接触角,但比表面积和孔容明显下降。高湿动态吸附、原位红外及循环实验表明,水汽竞争会削弱硅胶对正戊烷与正己烷的吸附能力,但 SG-17%-TMCS 凭借疏水屏蔽与孔结构保持的协同作用,在不同湿度条件下均表现出更稳定的动态吸附性能,并在相对湿度 90%、5 次循环后仍保持约 90%和 92%的正戊烷与正己烷容量保持率。

### 补充材料

本文相关补充材料可登录 <https://doi.org/10.15541/jim20260129>查看。

### 参考文献:

[1] LI X Q, ZHANG L, YANG Z Q, *et al.* Adsorption materials for volatile organic compounds (VOCs) and the key factors for VOCs adsorption process: a review. *Separation and Purification Technology*, 2020, **235**: 116213.

[2] HANG W L, SUN J X, ZHAO R H, *et al.* Selective adsorption of VOCs/water vapor on activated carbon: the role of adsorbent and VOC molecular polarity. *Separations*, 2025, **12**(4): 86.

[3] WU L X, ZHU Y, YUAN J, *et al.* Advances in adsorption, absorption, and catalytic materials for VOCs generated in typical industries. *Energies*, 2024, **17**(8): 1861.

[4] GAN G Q, FAN S Y, LI X Y, *et al.* Adsorption and membrane separation for removal and recovery of volatile organic compounds. *Journal of Environmental Sciences*, 2023, **123**: 96.

[5] LI J, CAI J X, LIU X, *et al.* Design and synthesis of a water-resistant mesoporous silica gel for the VOC adsorption-desorption treatment. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2023, **62**(48): 20833.

[6] DENG W X, CAI R, YANG H, *et al.* Hydrophobic organic hybrid silica gels with high adsorption selectivity for fluorocarbon solvents. *ACS Omega*, 2025, **10**(20): 20784.

[7] LU H F, CAO J J, ZHOU Y, *et al.* Novel hydrophobic PDVB/R-SiO<sub>2</sub> for adsorption of volatile organic compounds from highly humid gas stream. *Journal of Hazardous Materials*, 2013, **262**: 83.

[8] LIU S, PENG Y, CHEN J J, *et al.* Engineering surface functional groups on mesoporous silica: towards a humidity-resistant hydrophobic adsorbent. *Journal of Materials Chemistry A*, 2018, **6**(28): 13769.

[9] HUANG W Q, XU J X, TANG B, *et al.* Adsorption performance of hydrophobically modified silica gel for the vapors of *n*-hexane and water. *Adsorption Science & Technology*, 2018, **36**(3/4): 888.

[10] WANG H N, YANG Q Q, ZHANG Z H, *et al.* Organosiliceous nanotubes with enhanced hydrophobicity and VOCs adsorption performance under dry and humid conditions. *Journal of Porous Materials*, 2020, **27**(4): 1179.

[11] WANG H N, TANG M, HAN L, *et al.* Synthesis of hollow organo-siliceous spheres for volatile organic compound removal. *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, **2**(45): 19298.

[12] WANG H N, WANG T, HAN L, *et al.* VOC adsorption and desorption behavior of hydrophobic, functionalized SBA-15. *Journal of Materials Research*, 2016, **31**(4): 516.

[13] MAHADIK D B, RAO A V, RAO A P, *et al.* Effect of concentration of trimethylchlorosilane (TMCS) and hexamethyldisilazane (HMDZ) silylating agents on surface free energy of silica aerogels. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2011, **356**(1): 298.

[14] MILLOT Y, HERVIER A, AYARI J, *et al.* Revisiting alkoxysilane assembly on silica surfaces: grafting versus homo-condensation in solution. *Journal of the American Chemical Society*, 2023, **145**(12): 6671.

[15] KUNIYOSHI M, TAKAHASHI M, TOKUDA Y, *et al.* Hydrolysis and polycondensation of acid-catalyzed phenyltriethoxysilane (PhTES). *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 2006, **39**(2): 175.

[16] WU X X, ZHANG W, LI Z, *et al.* Effects of various methylchlorosilanes on physicochemical properties of ambient pressure dried silica aerogels. *Journal of Nanoparticle Research*, 2019, **21**(11): 234.

- [17] MALFAIT W J, ZHAO S Y, VEREL R, *et al.* Surface chemistry of hydrophobic silica aerogels. *Chemistry of Materials*, 2015, **27**(19): 6737.
- [18] CROISSANT J G, FATIEIEV Y, KHASHAB N M. Degradability and clearance of silicon, organosilica, silsesquioxane, silica mixed oxide, and mesoporous silica nanoparticles. *Advanced Materials*, 2017, **29**(9): 1604634.
- [19] VANSANT E F, VAN DER VOORT P, VRANCKEN K C. Characterization and chemical modification of the silica surface. Amsterdam: Elsevier, 1995.
- [20] GONTHIER J, RILLING T, SCOPPOLA E, *et al.* In operando  $\mu$ CT imaging of silylated silica aerogels during ambient pressure drying and spring-back. *Chemistry of Materials*, 2023, **35**(18): 7683.
- [21] CHAKRABORTY S, PISAL A A, KOTHARI V K, *et al.* Synthesis and characterization of fibre reinforced silica aerogel blankets for thermal protection. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2017, **2017**(1): 1.
- [22] WU Z, ZHANG L, LI J, *et al.* Organic—inorganic hybridization for the synthesis of robust *in situ* hydrophobic polypropylsilsesquioxane aerogels with fast oil absorption properties. *RSC Advances*, 2018, **8**(11): 5695.
- [23] TANHEITAFINO S, SHOFIYANI A, SASRI R, *et al.* Synthesis and characterization of trimethylchlorosilane-modified silica xerogel. *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi*, 2020, **23**(7): 249.
- [24] ZEMKE F, GONTHIER J, SCOPPOLA E, *et al.* Origin of the springback effect in ambient-pressure-dried silica aerogels: the effect of surface silylation. *Gels*, 2023, **9**(2): 160.
- [25] BLACHNIO M, ZIENKIEWICZ-STRZALKA M, DERYLO-MARCZEWSKA A, *et al.* Chitosan—silica composites for adsorption application in the treatment of water and wastewater from anionic dyes. *International Journal of Molecular Sciences*, 2023, **24**(14): 11818.
- [26] YANG Q H, YANG J, LIU J, *et al.* Synthesis and characterization of phosphonic acid functionalized organosilicas with bimodal nanostructure. *Chemistry of Materials*, 2005, **17**(11): 3019.
- [27] ÇOK S S, GIZLI N. Hydrophobic silica aerogels synthesized in ambient conditions by preserving the pore structure *via* two-step silylation. *Ceramics International*, 2020, **46**(17): 27789.
- [28] GOKULAKRISHNAN N, KARBOWIAK T, BELLAT J P, *et al.* Improved hydrophobicity of inorganic—organic hybrid mesoporous silica with cage-like pores. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2013, **421**: 34.
- [29] CHEN J H, LIU N S, WANG Y Z, *et al.* Aminated spherical  $\text{SiO}_2$  synthesized from fly ash and its application for  $\text{Pb}^{2+}$  and  $\text{Cu}^{2+}$  sorption. *Water*, 2024, **16**(8): 1149.
- [30] SAKPAL T, KUMAR A, KAMBLE S P, *et al.* Carbon dioxide capture using amine functionalized silica gel. *Indian Journal of Chemistry Section A-Inorganic Bio-Inorganic Physical Theoretical & Analytical Chemistry*, 2012, **51**(9): 1214.
- [31] BAE J Y, JANG S G, CHO J, *et al.* Amine-functionalized mesoporous silica for efficient  $\text{CO}_2$  capture: stability, performance, and industrial feasibility. *International Journal of Molecular Sciences*, 2025, **26**(9): 4313.
- [32] CHARMAS B, KUCIO K, SYDORCHUK V, *et al.* Characterization of multimodal silicas using TG/DTG/DTA, Q-TG, and DSC methods. *Colloids and Interfaces*, 2019, **3**(1): 6.
- [33] JITIANU A, LAMMERS K, ARBUCKLE-KIEL G A, *et al.* Thermal analysis of organically modified siloxane melting gels. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2012, **107**(3): 1039.
- [34] RAHMAT N, SADON N, YUSOF M A. Thermogravimetric analysis (TGA) profile at different calcination conditions for synthesis of PTES-SBA-15. *American Journal of Applied Sciences*, 2017, **14**(10): 938.
- [35] CHOMA J, SZCZĘŚNIAK B, KAPUSTA A, *et al.* A concise review on porous adsorbents for benzene and other volatile organic compounds. *Molecules*, 2024, **29**(23): 5677.
- [36] HUNTER-SELLARS E, TEE J J, PARKIN I P, *et al.* Adsorption of volatile organic compounds by industrial porous materials: impact of relative humidity. *Microporous and Mesoporous Materials*, 2020, **298**: 110090.
- [37] GUO J X, HE S L, LIU X X, *et al.* Hydrophobic modification of walnut shell biomass-derived porous carbon for the adsorption of VOCs at high humidity. *Chemical Engineering Journal*, 2024, **488**: 150792.
- [38] LI Z R, JIN Y Q, CHEN T, *et al.* Trimethylchlorosilane modified activated carbon for the adsorption of VOCs at high humidity. *Separation and Purification Technology*, 2021, **272**: 118659.
- [39] FU L P, ZHU J H, HUANG W Q, *et al.* Preparation of nano-porous carbon-silica composites and its adsorption capacity to volatile organic compounds. *Processes*, 2020, **8**(3): 372.

# TMCS/PTES 改性制备疏水硅胶及其正戊烷/正己烷吸附性能研究

罗宇浩<sup>1</sup>, 冯廷雪<sup>2</sup>, 杨立辉<sup>3</sup>, 董彦超<sup>1,3</sup>, 刘娜<sup>1</sup>, 黄雪莉<sup>1</sup>, 黄河<sup>1</sup>

(1. 新疆大学 化工学院, 省部共建碳基能源资源化学与利用国家重点实验室, 乌鲁木齐 830017; 2. 新疆新业能源化工有限公司, 五家渠 831399; 3. 中油(新疆)石油工程有限公司, 克拉玛依 834000)

## S1 试剂

对硅胶(北京华腾环宇科技有限公司)进行筛选, 获得完整结构的颗粒尺寸, 在 150 °C 真空箱中干燥 4 h, 获得活化后的硅胶颗粒。TMCS、PTES 购自上海麦克林试剂有限公司, 乙醇、正戊烷和正己烷购自天津鑫铂特化工有限公司, 实验用水均为蒸馏水, 用于吸附和再生过程的 99.99% N<sub>2</sub> 由新疆金红山气体检测有限责任公司提供。

## S2 材料表征

采用麦克默瑞提克(上海)仪器有限公司 ASAP2460 型吸附仪表征样品的孔结构参数。采用奥德利诺 OCA 25 型接触角测量仪定量评估改性后样品的静态水接触角, 每次在压片后的样品表面注射 5 μL 去离子水, 将三个不同位置的水接触角平均值作为样品的接触角结果。利用赛默飞世尔傅里叶变换红外(FT-IR)光谱仪表征改性后样品中的官能团。使用德国布鲁克公司 D8-Advance 型号 X-射线衍射仪测定样品物相结构。采用 Zeiss EVO LS-15 型扫描电子显微镜(SEM)拍摄材料形貌照片。采用 STA7300 热分析仪测定样品在 N<sub>2</sub> 氛围下由室温以 10 °C/min 速率提升至 800 °C 时的热稳定性, 改性剂的接枝密度由公式(S1)进行计算。采用德国布鲁克 INVENIO 型的原位漫反射红外傅里叶变换光谱仪(DRIFTS)测定吸附剂对吸附质分子的吸附和解吸行为。在 DRIFTS 池中, 首先在 150 °C 的 N<sub>2</sub> 氛围下, 以 30 mL/min 流速预处理吸附剂 30 min, 随后降温至 40、60、80 °C 作为后续吸附环境温度, 利用 N<sub>2</sub> 气流将鼓泡器中的吸附质带入 DRIFTS 池中, 鼓泡器在恒温水浴锅中维持在 40 °C。

$$G = \frac{\Delta W}{100 - \Delta W} \times \frac{1000}{M_w} \quad (S1)$$

式中,  $G$  为摩尔接枝量,  $\Delta W$  为改性剂特征官能团在特定分解温度区间内的质量变化,  $M_w$  为接枝有机基团的摩尔质量。

## S3 吸附实验

采用自制动态吸附装置进行高湿动态吸附实验(实验装置见补充材料图 S1)。通过湿度调节单元控制进气相对湿度(RH=50%、70%、90%), 并利用鼓泡与 N<sub>2</sub> 稀释方式分别配置含正戊烷或正己烷的湿空气进料, 考察样品在水蒸气与烃组分共存条件下的动态吸附行为, 出口处采用定制在线红外煤气分析仪对正戊烷或正己烷浓度进行实时测定。

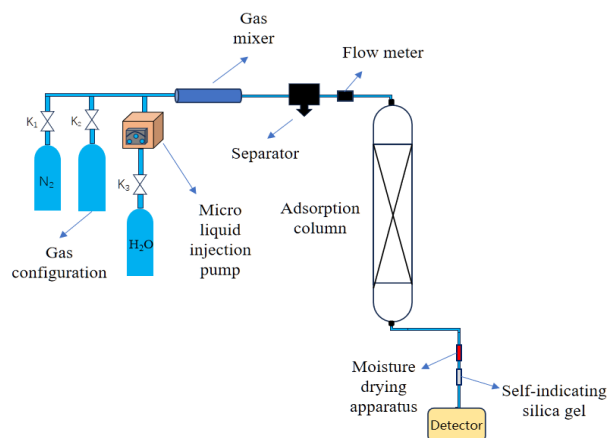


图 S1 动态吸附实验装置图

Fig. S1 Schematic diagram of the dynamic adsorption experimental setup

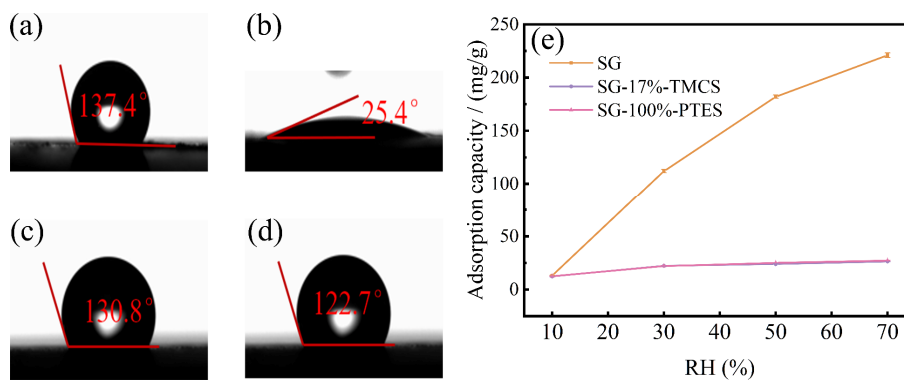


图 S2 表面润湿稳定性与抗湿性能

Fig. S2 Surface Wetting Stability and Moisture Resistance

(a, b) SG-100%-PTES and (c, d) SG-17%-TMCS (a, c) before and (b, d) after water contact angle for 24 h ; (e) Static water vapor adsorption curves of the samples at different relative humidities

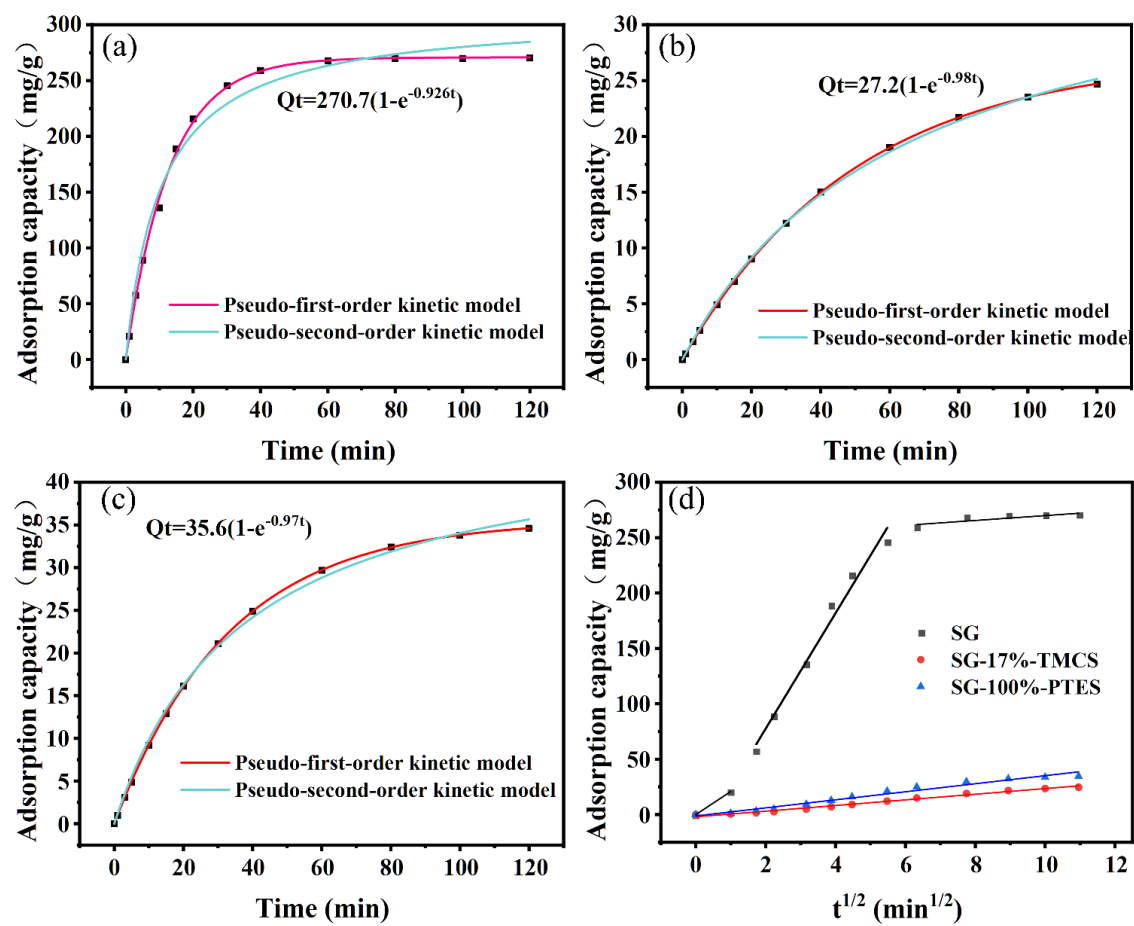


图 S3 样品吸附水汽的准一级和准二级动力学方程回归及内扩散模拟

Fig. S3 Regression of pseudo-first-order and pseudo-second-order kinetic models and intraparticle diffusion simulation for water vapor adsorption on the samples

(a) SG; (b) SG-17%-TMCS; (c) SG-100%-PTES; (d) Intraparticle diffusion simulation. RH=90%

表 S1 样品吸附水汽的的动力学方程回归数据

Table S1 Kinetic equation regression data of samples for water vapor adsorption

| Sample       | Pseudo-first-orde     |                                     |       | Pseudo-second-order                                                     |                                     |       |
|--------------|-----------------------|-------------------------------------|-------|-------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-------|
|              | $k_1/\text{min}^{-1}$ | $q_e/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$ | $R_1$ | $k_2/(\times 10^{-3}, \text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1})$ | $q_e/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$ | $R_2$ |
| SG           | 7.9                   | 270                                 | 0.999 | 0.03                                                                    | 309.71                              | 0.996 |
| SG-17%-TMCS  | 0.98                  | 27.1                                | 0.999 | 0.39                                                                    | 38.8                                | 0.992 |
| SG-100%-PTES | 0.97                  | 35.6                                | 0.999 | 0.57                                                                    | 46.8                                | 0.998 |

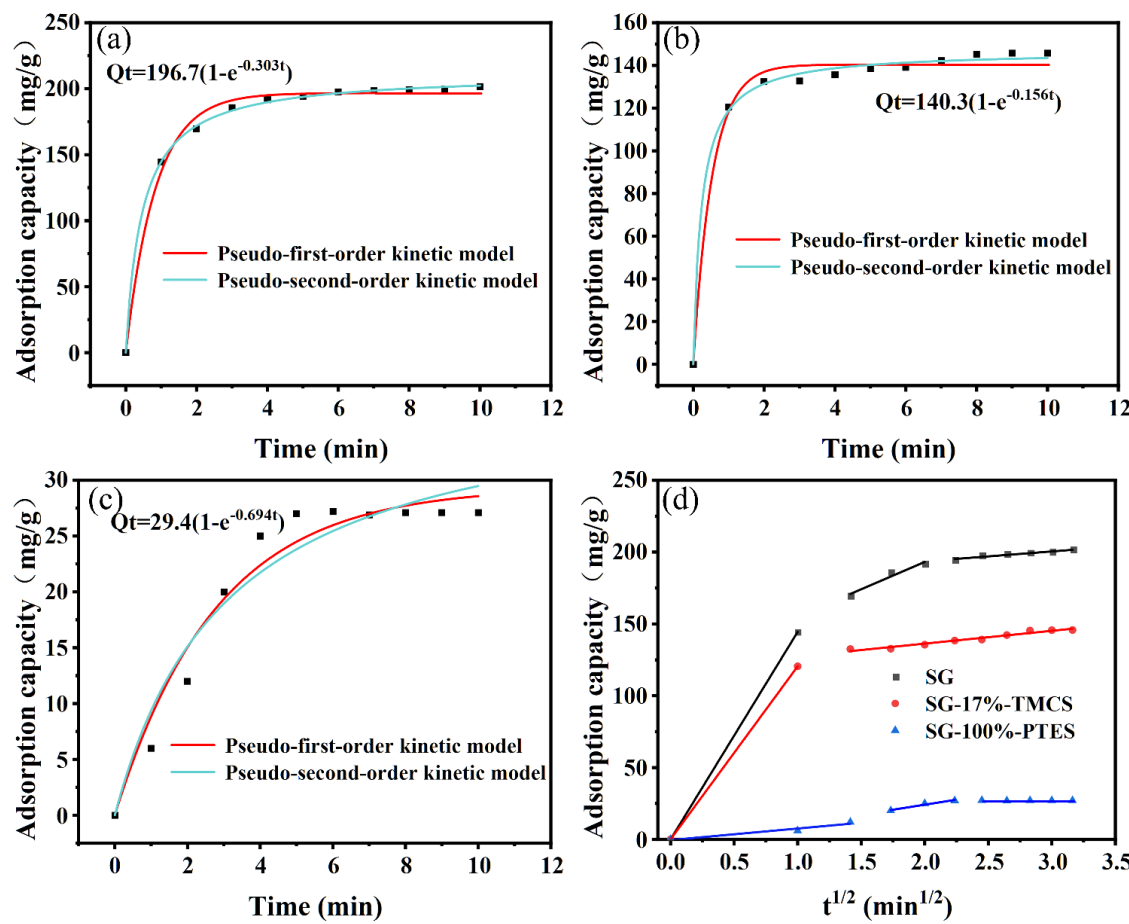


图 S4 样品吸附正戊烷的准一级和准二级动力学方程回归及内扩散模拟  
Fig. S4 Regression of pseudo-first-order and pseudo-second-order kinetic models and intraparticle diffusion simulation for *n*-pentane adsorption on the samples

(a) SG; (b) SG-17%-TMCS; (c) SG-100%-PTES; (d) Intraparticle diffusion simulation. RH=0

表 S2 样品吸附正戊烷的动力学方程回归数据

| Sample       | Pseudo-first-order    |                                     |       | Pseudo-second-order                                                     |                                     |       |
|--------------|-----------------------|-------------------------------------|-------|-------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-------|
|              | $k_1/\text{min}^{-1}$ | $q_e/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$ | $R_1$ | $k_2/(\times 10^{-3}, \text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1})$ | $q_e/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$ | $R_2$ |
| SG           | 0.30                  | 196.7                               | 0.993 | 10.2                                                                    | 211.8                               | 0.999 |
| SG-17%-TMCS  | 0.16                  | 140.4                               | 0.988 | 28.9                                                                    | 146.8                               | 0.997 |
| SG-100%-PTES | 0.699                 | 29.4                                | 0.959 | 8.3                                                                     | 38.7                                | 0.938 |

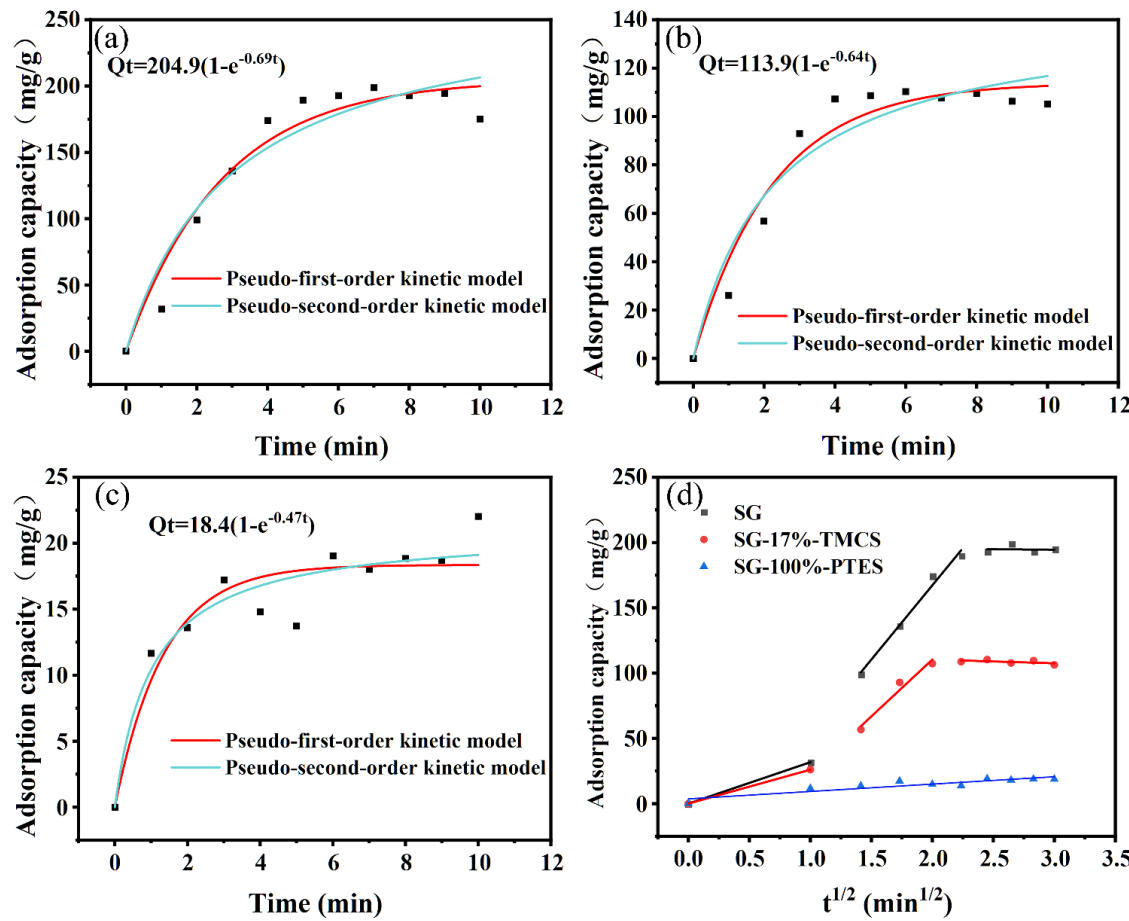


图 S5 样品吸附正己烷的准一级和准二级动力学方程回归及内扩散模拟  
Fig. S5 Regression of pseudo-first-order and pseudo-second-order kinetic models and intraparticle diffusion simulation for *n*-hexane adsorption on the sample

(a) SG; (b) SG-17%-TMCS; (c) SG-100%-PTES; (d) Intraparticle diffusion simulation. RH=0

表 S3 样品吸附正己烷的动力学方程回归数据

Table S3 Kinetic equation regression data of samples for *n*-hexane adsorption

| Sample       | Pseudo-first-order    |                                     |       | Pseudo-second-order                                                     |                                     |       |
|--------------|-----------------------|-------------------------------------|-------|-------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|-------|
|              | $k_1/\text{min}^{-1}$ | $q_e/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$ | $R_1$ | $k_2/(\times 10^{-3}, \text{g}\cdot\text{mg}^{-1}\cdot\text{min}^{-1})$ | $q_e/(\text{mg}\cdot\text{g}^{-1})$ | $R_2$ |
| SG           | 0.69                  | 204.9                               | 0.946 | 1.3                                                                     | 268.2                               | 0.920 |
| SG-17%-TMCS  | 0.639                 | 113.9                               | 0.947 | 3.1                                                                     | 143.1                               | 0.916 |
| SG-100%-PTES | 18.4                  | 0.47                                | 0.858 | 46.5                                                                    | 21.1                                | 0.898 |