

多级序构材料强化的光热界面水蒸发

张丽娟¹, 万家炜^{1,2}, 杨乃亮^{1,2}, 王 丹³

(1. 中国科学院过程工程研究所 生物药制备与递送全国重点实验室, 北京 100190;

2. 中国科学院大学, 北京 101408; 3. 深圳大学化学与环境工程学院, 广东 深圳 518071)

摘 要: 淡水资源短缺已成为人类社会可持续发展的关键瓶颈, 光热界面水蒸发以低能耗、零碳排放、分布式应用等优势, 成为海水淡化与污水处理的前沿技术。该技术的核心在于能量转换与物质传递的协同优化, 而传统研究思路难以实现光、热、水传输的高效耦合。基于功能基元序构的研究范式, 为新型光热界面水蒸发提供了新的材料设计思路。本文以中空多壳层结构(HoMS)为典型体系, 系统综述了多级序构特征在光热界面水蒸发中的典型优势。文章阐明亚纳米功能基元、纳米颗粒、多级壳层的跨尺度递进构筑规律, 揭示多级序构在强化光吸收、调控热局域化、优化毛细输运、降低水蒸发能耗等方面的优势。同时, 指出当前领域在规模化制备、机械耐久性、界面污染及蒸发冷凝匹配等方面的关键挑战, 并展望功能基元多元化、序构多样化及第三级次序构的发展方向, 期望为新一代高效、稳定、可工程化的光热水处理材料提供理论参考与设计思路。

关键词: 功能基元; 多级序构; 中空多壳层结构; 光热界面水蒸发

中图分类号: O782 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2026)07-2285-14

网络出版时间: 2026-06-05



传统材料学研究, 以还原论为指导, 通过拆解材料的组成单元来理解其整体的“构效关系”。这种研究范式可以借助理论模拟手段, 基于已有的数据, 进行推理演绎。但是, 材料的宏观性能往往不是微观组分性质的简单加和, 还会通过协同效应, 获得性能的大幅提升。所以, 面对实际的研究体系, 材料科学研究者经常利用实验结果反推原因, 进而总结归纳指导新材料的设计。正是在这一背景下, 以“功能基元-序构-性能”为核心的材料研究新范式应运而生^[1]。“功能基元”和“序构”的引入, 是材料科学领域一次重要的跃迁, 是中国材料学领域定义材料学研究方式、引领材料学研究范式的重要里程碑。

在众多应用场景中, 太阳能界面水蒸发(interfacial solar steam generation, ISSG)技术因其重要的战略价值, 以及涉及能量转换和物质传递的多个过程, 成为验证和发展这一新范式的理想模型。ISSG 技术利

用太阳能驱动水蒸发, 从而实现海水脱盐、污水净化等目的, 具有低成本、无二次污染、无须复杂基础设施等优势, 是极具潜力的水体净化与水资源重整的绿色途径^[2-4]。然而, ISSG 不仅是简单的相变过程, 而是一个串联了光捕获、光热转换、热局域化、水输运、水汽扩散以及表界面抗盐与净化的多步耦合系统^[2-4], 这种多步耦合的复杂性, 恰恰呼唤一种能够系统解构并协同优化各环节的设计框架。

本文以太阳能界面水蒸发为应用场景, 以功能基元-序构为主线, 归纳了目前典型的材料特点, 提出面向水资源重整的多级序构的材料设计思路。本文梳理了以中空多壳层结构(hollow multishelled structure, HoMS)为模型的多级序构材料在 ISSG 中的作用机制及发展现状, 探讨了多级序构在能量转换与物质传递中的强化规律, 并展望了功能基元序构这一研究范式在 ISSG 领域可能的发展及突破方向。

收稿日期: 2026-03-13。 修订日期: 2026-05-06。

基金项目: 国家自然科学基金项目(92163209, 52572118, 22293043);

深圳大学 2035 追求卓越研究计划 B(2024B005)。

第一作者: 张丽娟(1983—), 女, 博士, 副研究员。

通信作者: 杨乃亮(1984—), 男, 博士, 研究员;

王 丹(1969—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2026-03-13. Revised date: 2026-05-06.

First author: ZHANG Lijuan (1983—), female, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: zhanglijuan@ipe.ac.cn

Correspondent author: YANG Nailiang (1984—), male, Ph.D., Professor.

WANG Dan (1969—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: nlyang@ipe.ac.cn; danwang@szu.edu.cn

1 多级序构材料简介

不同的功能基元具有不同的原子组成、排布方式及电子结构等。作为承载特定物理化学性质的基本功能单元,功能基元的本征特性(电子结构、能带特征、光吸收/发射行为、表面能等)决定了最终性能的潜在上限。然而,如何将这些功能基元组合在一起同样至关重要。这就需要对功能基元进行合理的序构。序构是指功能基元在三维空间的排列方式,包括长程有序、长程无序乃至特定的梯度分布结构。当功能基元按照特定方式排列时,它们之间的电磁耦合、热耦合、机械耦合可能产生单一基元所不具备的协同增强现象。序构与功能基元的对应关系可概括为基元决定功能的可能性,序构决定功能的实现度。基元提供了材料的基本物性边界,而序构则通过调控基元间的耦合、传输与协同,将这些可能性转化为实际性能。

面向水资源重整,本课题组基于功能基元序构的研究范式,提出了多级序构的研究思路。“多级序构材料”不同于传统的“分级结构材料”(hierarchical structured materials)。传统分级结构侧重材料在不同尺度上的层级分布,强调“结构嵌套结构”的结构特征;而多级序构材料是以“序”为核心的材料设计范式,其核心是从亚纳米功能基元出发,通过原子畴–纳米序–微米序的跨尺度有序组装。它既强调层级间的序,也关注不同尺度上序之间的耦合关联与功能协同。HoMS 是一种典型的分级结构,由纳米颗粒组装而成,具有规整的多级次结构和丰富的孔道结构。但是 HoMS 不只强调尺度堆叠,其核心优势在于物质和能量在穿过多壳层时具有时空顺序性,从而在光催化、串联催化、药物递送中,实现光吸收、能量转换与物质运输的次序化调控,而非简单的结构叠加^[5–7]。这种由序驱动的跨尺度协同效应,使得 HoMS 超越了传统分级结构的范畴,成为多级序构材料的典型代表。

HoMS 在光热界面水蒸发的传热过程中展现出独特的能量转换调控机制。在增加太阳光吸收方面,通过调控功能基元及其序构,可精准调控材料的电子结构与非辐射弛豫,从而强化本征光热转化效率;HoMS 序构的纳米颗粒可以引发光的散射,而壳层的次序排布,使入射光在相邻壳层间发生多次散射与共振吸收,显著延长光程从而提升光吸收效率^[7]。在减少热损耗方面, HoMS 借助壳间中空腔体与多级界面形成热局域化效应,将光热转换产生的热量

富集在蒸发界面附近,减少热量向体相耗散;此外,壳层间的空气空腔可以进一步阻挡热量的径向散失,从而最大限度减少热耗散,提升整体能量利用效率^[8]。同时, HoMS 凭借跨尺度孔道结构与限域空间的协同作用,展现出独特的物质传递优势。HoMS 壳层间的中空腔体提供持续的毛细驱动力,保障蒸发界面的液态水稳定供给;同时,纳米级堆积孔道可改变水分子的聚集状态,有效降低界面水的表观蒸发焓,从而减少水–汽相变所需的能量;HoMS 的多级贯通孔道体系为水蒸气提供了低阻逸出通道。通过序的调控,多级序构材料可以同步优化光吸收、热管理与物质传递,从而在光热界面水蒸发中实现更稳定、高效的能量转换与物质传递。

2 第一级序构: 以原子畴为基元构筑纳米颗粒

功能基元决定多级序构可能的应用方向,第一级次序构赋予材料纳米尺度的物理化学特性,第二级次序构则带来光热界面水蒸发性能的突破。如图 1 所示,多级序构框架将光热界面蒸发材料的设计分解为递进的层次:一级序构以亚纳米原子畴为功能基元,构筑纳米颗粒;二级序构将这些纳米颗粒组装为 HoMS。通过多级序构的有机耦合则能够产生超越单一尺度的协同增强效应,从而显著强化光热界面水蒸发过程。

第一级次序构以亚纳米短程有序体为功能基元,并将其组装为纳米颗粒。这一级次中,短程有序体是指在亚纳米尺度上呈现出特定的原子排列、构成了纳米颗粒中的最小重复单元、表现出基本理化属性的原子畴。例如,金属中具有特定原子数的幻数团簇、原子晶体中的原胞,又如氧化物材料中广泛存在的金属–氧八面体(如 TiO_6 八面体)或金属–氧四面体(如 SiO_4 四面体)等配位多面体,都属于功能基元的典型代表。而将这些短程有序体作为功能基元,通过化学键合或物理聚合进一步组装,即可形成纳米颗粒为代表的第二级次序构。功能基元若呈长程有序排列,则构成晶态序构;若呈长程无序排列,则构成非晶态序构。而根据光热转换机理的不同,第一级次序构体可分为金属等离激元共振型、局域激发态非辐射弛豫型、缺陷辅助的非辐射弛豫型等。

2.1 自由载流子共振与弛豫机制

以金属原子或原子簇为功能基元构建的纳米颗粒,是一类典型的光热转换材料。当金属纳米颗粒

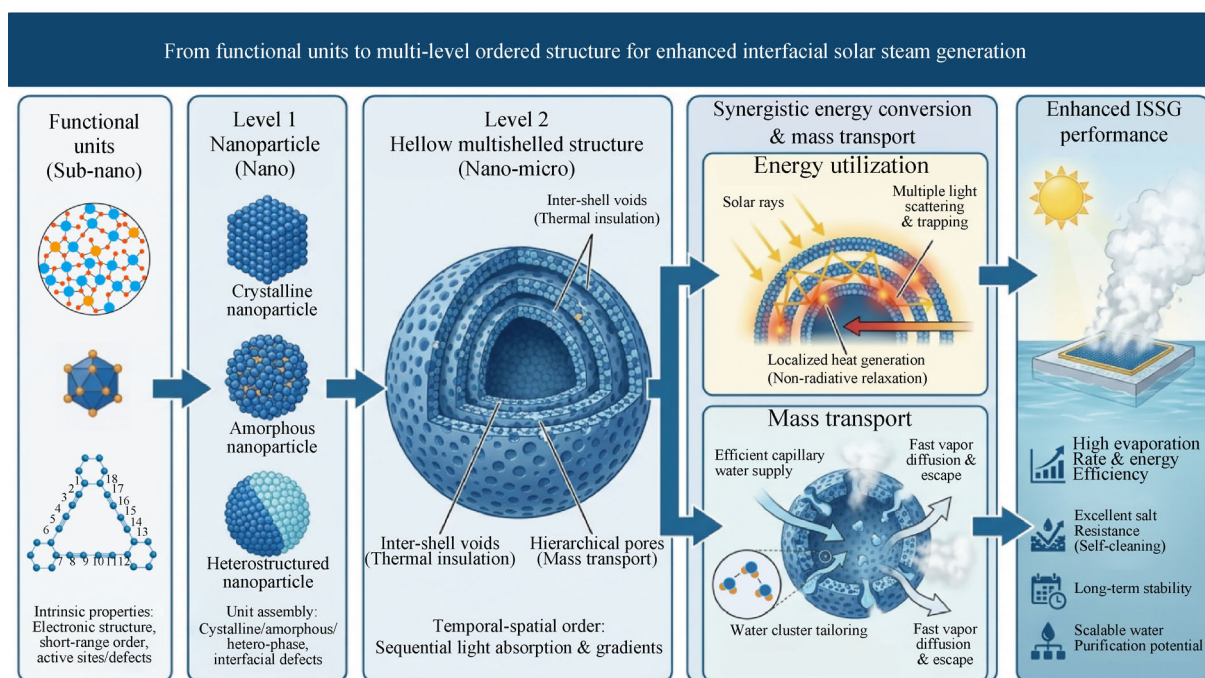


图 1 多级序构强化光热界面水蒸发性能。从功能基元、一级序构(亚纳米原子畴组装为纳米颗粒)到二级序构(纳米颗粒组装为 HoMS)的能量转换与物质传递跨尺度关联示意图

Fig. 1 Enhanced interfacial solar steam generation by multi-level ordered structures. Schematic diagram illustrating the cross-scale correlation of enhanced energy conversion and mass transfer, from functional unit to the first ordered structure (sub-nano atomic domains assembled into nanoparticles) and to the secondary ordered structure (nanoparticles assembled into HoMS)

内自由电子的集体振动频率与入射光子频率相匹配时,二者就会发生强烈的共振,即产生局域表面等离子共振(localized surface plasmon resonance, LSPR)^[9]。在共振过程中捕获的光能可通过非辐射弛豫迅速转化为热能,并释放到周围环境中。因此,金属纳米颗粒常被视为高效的光热转换器^[10]。这一现象是块体金属所不具备的纳米尺寸特征。因此,以 Au、Ag、Pd、In 等贵金属原子为功能基元构筑的纳米颗粒,可作为第一级次序构体,实现高效的光热转换。

然而,由于成本问题,贵金属等离子材料作为海水淡化、污水处理等水体重整材料的应用前景受到挑战,因此目前其光热转换效应的研究更多集中在生物医药等高附加值及不可替代领域^[11]。加拿大国立科学研究院的 Wang 等^[12]构筑了 TiN/semi-rGO 纳米复合材料,利用“等离激元”功能基元及其序构实现连续快速的 ISSG。在功能基元层面,Ti-N 原子团簇具有本征的金属性,而由 Ti-N 基元序构的纳米颗粒,具有了等离激元共振效应,为高效光热转换提供了必要条件。在此基础之上,进一步引入了半还原氧化石墨烯(semi-rGO)纳米片作为另一个级别的序构体。semi-rGO 增强了光吸收的同时还提高了热辐射传递。semi-rGO 表面保留的亲水基团

提供了快速水润湿能力,其疏松的层状结构与 TiN 纳米颗粒共同构筑了微孔通道,保障了水的毛细运输和团簇化蒸发。通过从亚纳米尺度到微纳尺度的多级次序结构设计,利用传热与传质的协同作用,当 TiN 质量分数为 25%时,所得纳米复合材料在 1 个太阳光照下的表面温度可达 82.1 °C,ISSG 蒸发速率达 1.76 kg·m⁻²·h⁻¹,光热转换效率高达 99.1%,同时兼具低成本、高亲水性和高稳定性。

2.2 局域激发态的非辐射弛豫机制

半导体材料的光热转换机理不同于金属的 LSPR 效应,半导体价带电子吸收光子能量跃迁至导带,形成非平衡载流子;非平衡载流子在回到基态的过程中通过载流子-载流子散射、载流子-声子散射等过程,将多余能量传递给晶格;最后,晶格振动将热量传递至周围环境。

Yang 等^[13]构建了 λ-Ti₃O₅ 微纳颗粒,利用 Ti-Ti 二聚体在费米能级附近诱导的平带电子结构,极大提升了材料的联合态密度(joint density of states, JDOS),从而在全太阳光谱范围内实现 96.4%的平均吸收率,并通过非辐射弛豫过程实现约 92.4%的光热转换效率。在传热方面,利用 λ-Ti₃O₅ 微纳颗粒的低热导率实现热局域化;在传质方面,λ-Ti₃O₅ 表面独特的 U 型沟槽与 Ti-Ti 二聚体协同促进水分子的

解离与质子转移, 频繁形成亚稳态 H_3O^+ 单元, 使邻近水分子以短氢键聚集成小团簇蒸发, 实际汽化焓降至 $1696 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。在此基础上, 将这些颗粒进一步组装成具有锥形腔的三维多孔水凝胶蒸发器, 可以视为更高一级的序构, 最终在 1 个太阳光照下对 3.5%(质量分数)的盐水实现了约 $6.09 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 的蒸发速率, 且无盐析出。该研究不仅揭示了第一级次序构纳米颗粒在光热转换效率、传热及传质提升中的核心作用, 还展示了从原子尺度(平带与 U 型沟槽)到纳米/微米尺度(颗粒)再到宏观三维结构的多级序构设计, 如何协同实现高效光热界面水蒸发。

半导体异相结/异质结通过在界面处调控能量传递路径, 有效分离光生载流子并延长其寿命, 从而抑制载流子复合、促进非辐射弛豫, 显著增强光热转换效率。如图 2a 所示, 以 MoS_2 为例, 当 Mo 与 S 以三棱柱配位形式作为功能基元时, 形成热力学稳定的 2H 相; 当 Mo 与 S 以八面体配位形式作为功能基元时, 形成亚稳态 1T 相; 两相共存构成的 1T/2H MoS_2 异相结展现出优异的光热转换性能。实验中, 通过水热法可制备出花球状结构的 1T/2H MoS_2 晶相异质结(图 2b)。首先, 1T 相较 2H 相具有

更窄的带隙, 有利于扩展可见光的吸收; 其次, 两相间的相互作用不仅稳定了亚稳态的 1T 相, 还促进了光生载流子的非辐射弛豫过程; 第三, 花球状结构有助于光在材料内多次散射, 进一步增强光吸收与热转换。Li 等^[14]将 1T/2H MoS_2 花球负载于 $\text{CNT}@\text{C}$ 多孔膜上, 蒸发速率在 1 个太阳光照下达到 $2.53 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$, 30 次循环及 12 h 连续测试中性能稳定且表面无盐结晶, 展现出优异的抗盐堵能力和海水淡化潜力。

除了半导体异相结, 半导体异质结的光热转换现象的研究更为普遍。Zhang 等^[15]及 Wang 等^[16]利用 $\text{CuO}/\text{ZnO}(\text{CZO})$ 异质结纳米颗粒在宽太阳光谱范围内的强吸光能力, 以及其界面能带弯曲诱导的快速载流子分离与非辐射弛豫特性, 将其与水凝胶网络互穿, 构建出兼具高效光热转换与快速水运输的蒸发体系。在一个太阳光照下, 该体系的蒸发速率达 $2.35 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$, 能量效率为 95.28%。Chen 等^[17]通过调控铜离子价态与空间分布, 构建了 Type-II 型能带排列 $\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$ 异质结纳米颗粒(图 2c 和图 2d), 其光吸收率可达 75.1%。在 1 个太阳光照下, $\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$ 纳米颗粒表面温度可升至约 72°C , 特定

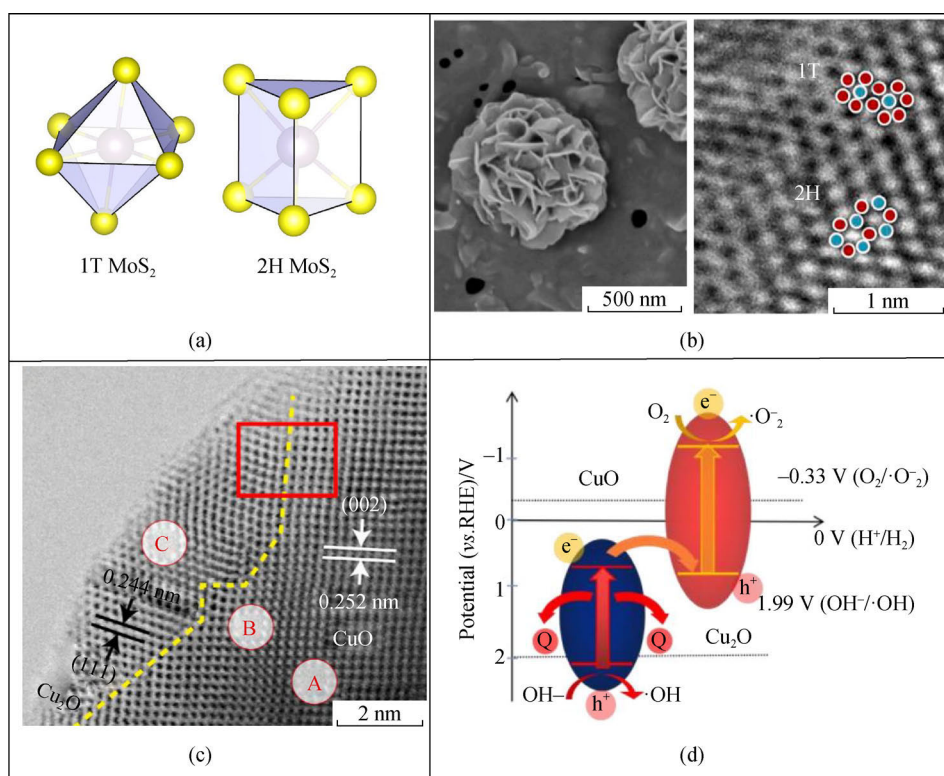


图 2 (a) 1T- MoS_2 和 2H- MoS_2 的基元结构; (b) 花球状结构的 1T/2H MoS_2 异相结的 SEM 照片^[14]; (c) 球差校正透射电子显微镜照片显示出 CuO 和 Cu_2O 的异质结构及其 (d) Type-II 型能带位置示意图^[15]

Fig. 2 (a) Functional units of 1T- MoS_2 and 2H- MoS_2 ; (b) SEM image of 1T/2H MoS_2 flower sphere^[14]; (c) Cs-TEM image of $\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$ heterostructure and (d) scheme of Type-II band position for $\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$ ^[15]

热容量为 $1.12 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, 充分体现了其对光热转换的调控能力。

这个过程不依赖于半导体能带, 通过光诱导电子转移形成电荷分离态, 这个电荷分离态也有可能通过非辐射弛豫回到基态, 从而完成光热转换。Lan 等^[18]报道了一种具有光致自由基的超稳定钴(II)-有机复合物 NKU-123, Co^{2+} 与有机配体之间在光激发后发生电子转移, 生成一个局域的自由基型激发态, 在其能量通过自旋-轨道耦合或振动耦合耗散的同时可以将热量局域地转移给环境, 实现高效的光热转换。在 $1 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 强度的 808 nm 激光照射下, NKU-123 表面温度在 6 s 内即可从 25.5°C 升至 215.1°C , 实现超快光热响应。基于 NKU-123 的太阳能蒸发器在 1 个太阳光强照射下纯水和海水的水蒸发速率分别达到 $1.44 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 和 $1.30 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$, 蒸发效率分别为 97.8% 和 87.9%。

2.3 缺陷辅助的非辐射弛豫机制

在材料制备中, 往往包含多种结构缺陷, 这些缺陷在本征带隙之间引入缺陷能级, 形成带尾态, 使材料能够吸收能量低于本征带隙的光子, 从而将光吸收范围扩展至更长波段。而且, 光生载流子很容易被这些缺陷能级捕获, 通过多声子发射过程弛豫至基态, 完成光热转换。本质上, 缺陷辅助的非辐射弛豫机制仍然是第二类光热转换机制的延伸, 而缺陷在其中扮演了能量阶梯的

角色。

Hu 等^[19]研究发现, 对 TiO_2 进行 N 掺杂后, 其在紫外光区的光热转换效率从 65% 显著提升至 82%。霍尔测试与 DFT 模拟结果表明, N 掺杂导致深能级缺陷态密度大幅增加。由此推断, 光热转换过程主要通过缺陷相关的非辐射跃迁实现, 光热转换效率与缺陷态密度及缺陷能级位置密切相关。该工作还明确指出, 这一缺陷诱导的光热转换增强机制可推广至其他非金属掺杂体系, 如 S 掺杂和氧空位体系。

晶态材料中缺陷可视为本征周期性的局部破坏, 而非晶材料的长程无序性本身即可视为一种“全空间分布的缺陷态”, 这为调控光吸收与光热转换提供了独特优势。以 Ta-O 八面体为功能基元(图 3a)构筑的长程有序晶态 $\beta\text{-Ta}_2\text{O}_5$ 是典型的直接带隙半导体, 主要吸收紫外光, 光热转换效率受限。而长程无序的非晶态 Ta_2O_5 转变为间接带隙半导体(图 3b 和图 3c), 可促进非辐射弛豫。非晶态 Ta_2O_5 相较于晶态具有更大的热容量和更低的卡皮查(Kapitza)热阻, 有利于热交换。而分子动力学模拟显示, 与结晶样品相比, 非晶样品所构成的水分子通道具有更大的水通量。实验结果表明, 经碳掺杂后, 非晶态样品的光热界面水蒸发速率明显高于晶态样品。由此可见, 一级序构在 ISSG 中发挥着拓展光谱响应及提升蒸发速率的关键作用^[20]。

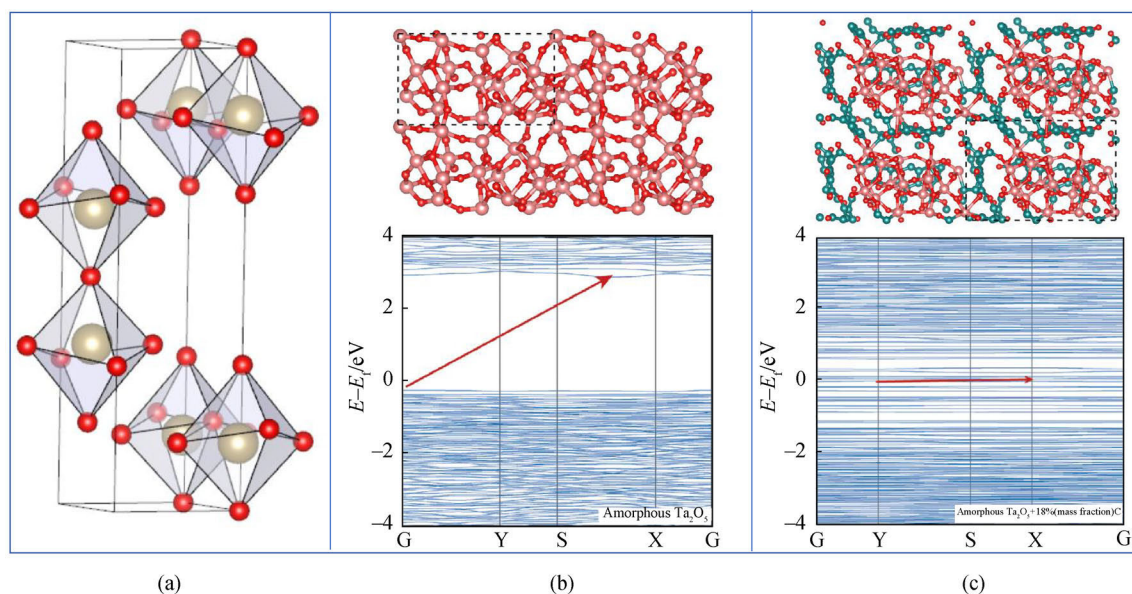


图 3 (a)晶态 Ta_2O_5 的功能基元结构; (b)非晶态 Ta_2O_5 和 (c)非晶态 $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{C}$ [18%(质量分数)C] 的几何模型及其相应的能带结构^[20](其中, 粉色小球代表 Ta, 红色小球代表 O, 青色小球代表 C)

Fig. 3 Functional unit of crystalline Ta_2O_5 ; (b) geometric models of amorphous Ta_2O_5 and (c) amorphous $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{C}$ (18%(mass fraction)C) and their corresponding band structures^[20]. Pink spheres represent Ta, red spheres represent O, and cyan spheres represent C

3 第二级次序构：以纳米颗粒为基元构筑多壳层结构

将第一级次序构的纳米颗粒进一步组装、堆积，可形成第二级次序构。HoMS 作为第二级次序构的典型代表，其序构可通过王丹研究员发展的次序模板法精准构筑^[5, 21]。HoMS 自外而内由多个壳层依次排列形成，壳壁本身具有一定数量的孔道结构，壳层之间具有相对独立的壳层间隙^[22]。该结构既易于调控物质的传输，又可根据需求赋予每个空间相对独立的特性^[22]。在光热界面水蒸发中，这种多壳层结构使入射光发生多次反射、散射而增强吸收；多级空腔形成热局域化减少热耗散；纳米级壳层间的毛细作用促进水输运；纳米颗粒堆积形成的小孔

调变了水分子的聚集状态，降低了蒸发能耗。我们将以中空多壳层结构为例，归纳总结第二级次序构在传热和传质角度的强化规律。

3.1 时空顺序性增强光捕获能力

HoMS 在增强光吸收方面展现出独特的时空顺序性^[7, 21]。多个壳层呈现严格的空排布顺序，能够实现光的选择性次序吸收。Lien 等^[23]采用基于麦克斯韦波动方程的时域有限差分法 (finite-different time-domain, FDTD)，模拟了从单壳层到三壳层结构 ZnO 纳微材料的光电行为(图 4a)。结果表明，多壳层结构诱导入射光在不同壳层间多次反射与散射，引发壳层间的光子共振，有效延长了光子在材料内部的传播路径，从而大幅提升了对太阳光的捕获效率。

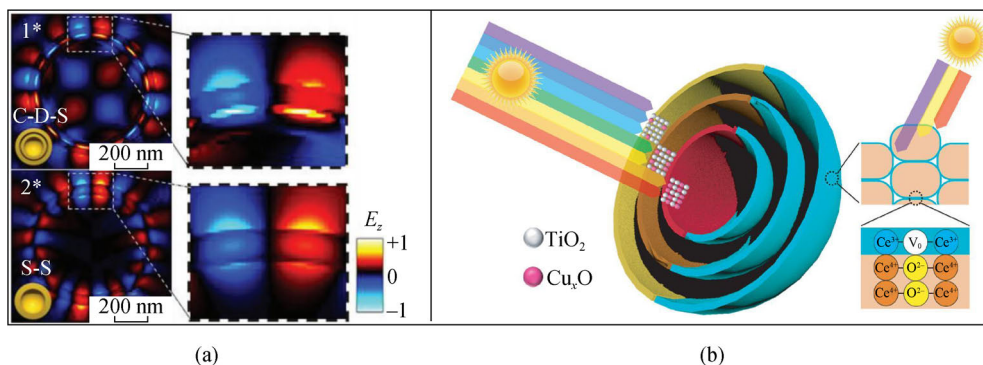


图 4 (a) 时域有限差分法模拟的入射光在中空多壳层结构间的光子共振现象^[23]。(b) 异质多壳层结构 $\text{TiO}_2\text{-Cu}_x\text{O}$ HoMSs(左) 及 $\text{CeO}_2\text{-CeFeO}_3$ HoMSs(右) 对太阳光的次序吸收^[7]

Fig. 4 (a) Photon resonance phenomenon of incident light between hollow multishelled structures simulated by FDTD^[23]; (b) Sequential absorption of solar light by heterogeneous multishelled structures $\text{TiO}_2\text{-Cu}_x\text{O}$ HoMSs (left) and $\text{CeO}_2\text{-CeFeO}_3$ HoMSs (right)^[7]

针对 HoMS 的时空顺序性导致的光吸收的增强现象，Wei 等^[7]提出了一级序构纳米颗粒以及二级序构 HoMS 协同次序吸光的概念。如图 4b 所示，四壳层 $\text{TiO}_2\text{-Cu}_x\text{O}$ HoMS 壳层中的 Cu/Ti 比例从外向内逐渐增加，使得外壳能够优先吸收穿透能力弱的短波长光，而内壳则吸收穿透能力强的长波长光，从而增强了整体的光吸收能力。而在四壳层 $\text{CeO}_2\text{-CeFeO}_3$ HoMS 中，一级序构的纳米颗粒表面是含有氧空位的 CeFeO_3 ，内部是缺陷较少的 CeO_2 ，这种纳米颗粒从边缘到内部对太阳光次序吸收，使四壳层 $\text{CeO}_2\text{-CeFeO}_3$ HoMS 的吸光范围扩大至可见光区。通过对内外壳层进行异质组分设计，还可以构建级联的能带结构，使不同能量的光子在不同壳层被有效吸收和利用，减少能量损失。Wei 等^[24]构建了 $\text{SrTiO}_3\text{-TiO}_2$ 异质结 HoMS，异质界面与多壳层结构结合，既优化了能带结构，又增强了光捕获能

力；La/Rh 共掺杂 $\text{SrTiO}_3\text{:La/Rh}$ HoMSs^[25]成功将光吸收边缘扩展到 520 nm，相较于 $\text{SrTiO}_3\text{:La/Rh}$ 纳米粒子，表现出更高的捕光能力。

3.2 热局域化增强光热转换效率

以纳米颗粒为功能基元构筑的 HoMS 凭借多级序构，在光热界面水蒸发中实现了显著的热局域化。异质界面、非晶态等界面处的能带失配与缺陷态协同增强了非辐射弛豫过程，从而将光生载流子高效转化为热能。HoMS 各壳层间的空气间隙形成热阻网络，可有效抑制径向热传导，将热量锁定在材料表层。在 $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ HoMS 中^[17]，异质纳米颗粒通过非辐射跃迁将光能转化为热能，形成热局域化的表界面。红外热成像显示，在 1 个太阳光照射 2 min 后， $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ 纳米颗粒的平衡温度为 72.02 °C，而具有三壳层结构的 $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ HoMS 则达到 78.84 °C(图 5a)。在光热界面水蒸发实

验中, 三壳层 $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ HoMS 可以在 5 min 内迅速升至稳定的平衡温度 41.65°C , 显著高于相应单壳层结构 $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ 的 39.68°C (图 5b)。HoMS 序构放大了异质界面的光热转化优势, 使蒸发速率提升至 $3.2\text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$ 。

类似地, 非晶序构中全空间分布的缺陷态作为非辐射弛豫中心, 可促进表面热局域化。COMSOL Multiphysics(多物理场耦合分析软件)仿真模拟显示, HoMS 序构会形成一个内层温度较高、外层温度较低的温度梯度场; 而从 COMSOL 仿真模拟的湿度场数据可以看出, 晶态材料的界面被高湿度水汽包围, 导致蒸发的驱动力下降; 而水汽不会

在非晶态材料界面堆积, 因此可以维持稳定的蒸发过程(图 5c~图 5d)。实验结果同样显示, 非晶态 $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{C}$ HoMS 的蒸发速率要远高于晶体材料, 达到 $4.02\text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$, 并能保持稳定运行超过 30 d^[20]。值得注意的是, 将该 HoMS 材料磨碎后, 尽管仍保持分级结构, 但其蒸发速率降至约 $2.8\text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$, 凸显了完整序构对性能的关键贡献^[20]。此外, Wang 等^[8]在对热塑性聚氨酯(TSPU)/ TiO_2 HoMS 复合材料的传热性能测试中同样发现, HoMS 具有明显的热局域化效应, 可将热存储在 HoMS 区域。该材料在高温下会提升整体的导热系数, 智能释放热量, 展示了 HoMS 作为智能热调节器的应用潜力。

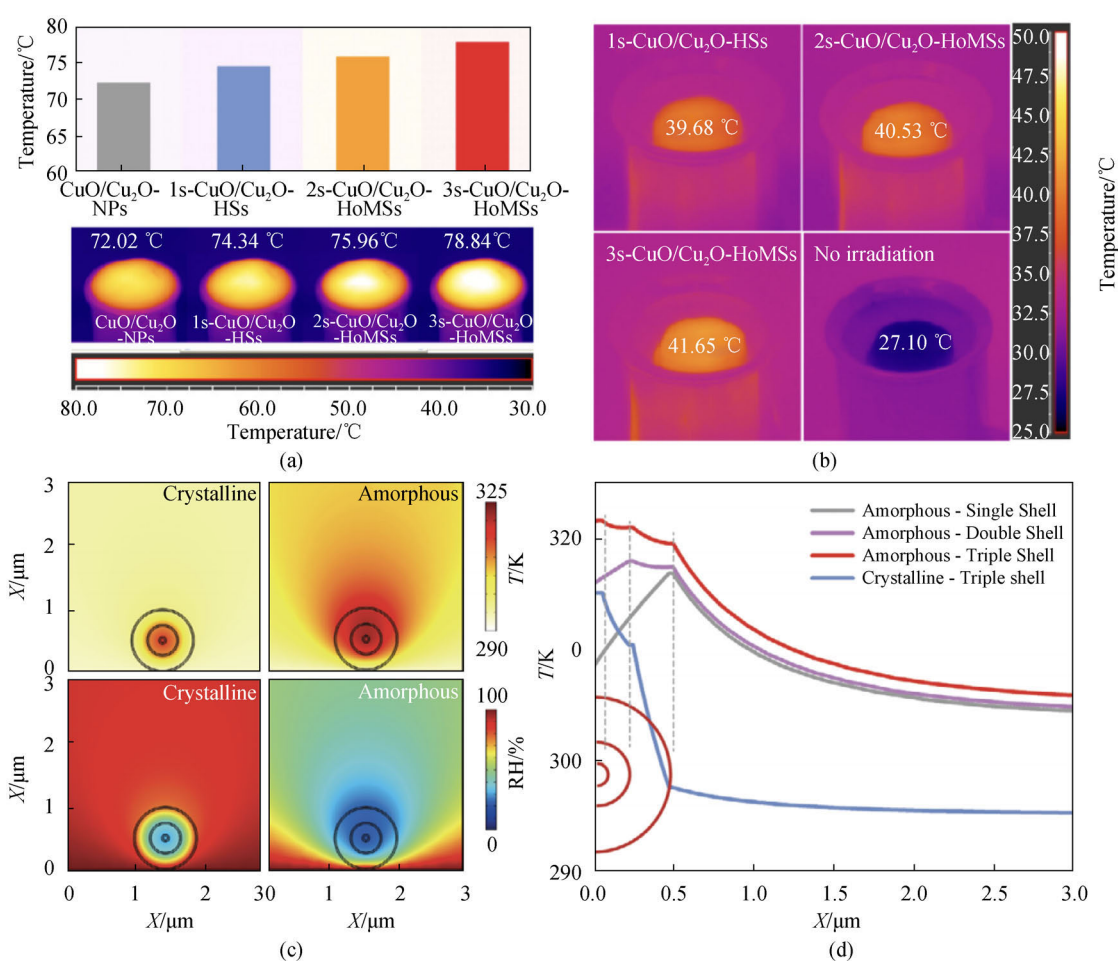


图 5 (a) $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ 一级序构的纳米颗粒与中空、多壳层序构在 1 个太阳光照射下的界面温度及(b)不同序构材料在光热界面水蒸发时的界面温度^[17]; (c~d)COMSOL 仿真模拟揭示序构对传热和传质的影响规律^[20]

Fig. 5 (a) Interface temperature of $\text{CuO/Cu}_2\text{O}$ nanoparticles, hollow and multishelled ordered structures under solar irradiation, and (b) Interface temperature of different ordered materials during water evaporation at the photothermal interface^[17]; (c~d) COMSOL simulation reveals the influence of sequence structure on heat and mass transfer^[20]

3.3 多级孔道中的物质传输调控

在第二级次序构的构筑过程中, 纳米颗粒的堆积不仅形成了多级空腔, 而且在壳层表面构筑了丰富的孔道结构。通过调控一级序构的颗粒尺寸, 可

以调控孔道尺寸; 通过调控纳米颗粒的表面能, 可影响物质在孔道内的传输行为, 进而实现能量与物质传递的协同优化。

当孔道尺寸较大时, 水分子以体相蒸发为主,

与宏观状态没有明显的差异;而当尺寸逐渐减小时,将表现出限域超流体的特性^[26]。分子仅需在一个较低的能量驱动下,即以一个超高的速率进行扩散。调控纳米颗粒堆积过程中,优化孔道尺寸可利于水簇的形成与快速输运。如图6所示,分子动力学(MD)模拟显示,针对非晶态 Ta₂O₅/C HoMS 材料^[20],当堆积孔尺寸为 1.75 nm 时,水蒸发通量获得明显增加。限域空间有效限制了水分子的聚集状态,形成由界面向体相的非均匀氢键网络,使水分子以团簇形式蒸发,降低了实际蒸发能耗;同时水体中的重金属离子、病毒等污染物被截留在本体水中,从而完成了对真实海水、含重金属污水、含新冠假病毒

水体、强酸及强碱水体的高速、有效净化。净化后海水中 Na⁺、Mg²⁺、K⁺、Ca²⁺浓度降低 1~2 个数量级,重金属离子[Cd²⁺、Pb²⁺、Cr(VI)]、Cu²⁺均降至 WHO 标准以下,新冠假病毒 SC2-P 从初始 1×10⁷ particles·mL⁻¹ 降至(11.8±1.4) particles·mL⁻¹(浓缩 100 倍后检出),去除率达 6 个数量级,乐果和亚甲基蓝溶液经净化后,其浓度降至紫外-可见吸收光谱检测限以下;而针对极端酸、碱(2 mol/L H₂SO₄、4 mol/L NaOH)水体的处理,经净化后水体 pH 值符合国标饮用水标准。除了原位截留,在针对含有有机物的废水净化中,还可以通过半导体基元在光照下产生氧自由基,实现对水体中的大肠杆菌有效灭活^[17]。

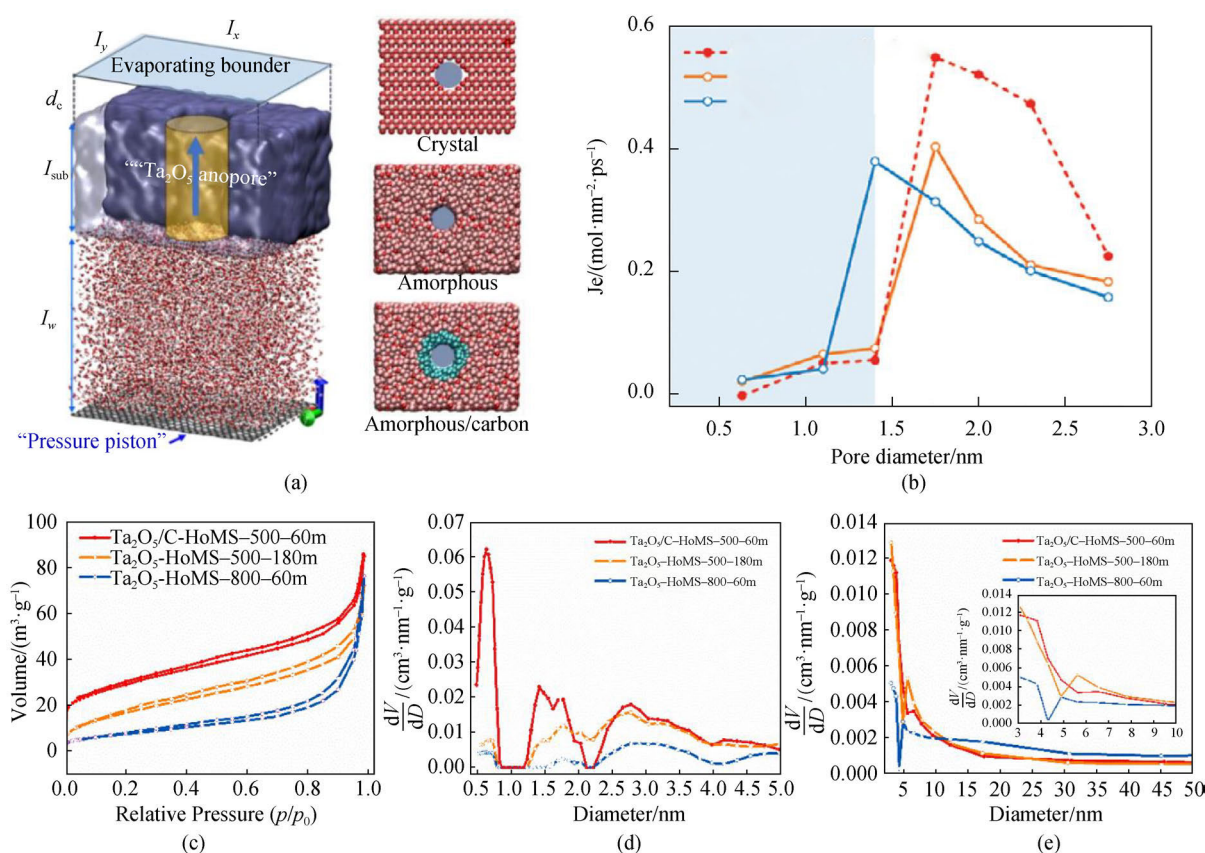


图6 分子动力学模拟与孔隙结构分析。(a)分子动力学模拟中构建的不同类型 Ta₂O₅ 纳米孔蒸发过程几何模型;(b)纳米孔尺寸与水蒸发效率之间的关系。不同 Ta₂O₅ 样品的孔隙结构;(c)N₂ 吸附-脱附等温线;(d)基于 DFT-Monte Carlo 方法计算的微孔孔径分布与累积孔隙体积;(e)基于 BJH 方法计算的孔径分布曲线^[20]

Fig. 6 Molecular dynamics simulation and pore structure analysis. (a) Geometric models of different types of Ta₂O₅ nanopore evaporation processes constructed in molecular dynamics simulations; (b) The relationship between nanopore size and water evaporation efficiency. Pore structures of different Ta₂O₅ samples; (c) N₂ adsorption-desorption isotherms; (d) Pore size distribution and cumulative pore volume calculated based on DFT Monte Carlo method; (e) Aperture distribution curve calculated based on BJH method^[20]

除了常规水体外,含放射性核素的水体对人类和自然的危害极大,排放标准更为苛刻。因常规方法难以实现高效截流,导致其达标排放成为世界难题。石墨炔是以六元碳环与二炔键构成的亚纳米孔

为功能基元的二维结构,其表面拓扑有序非均匀的电荷分布,为离子锚定提供了可能,有望实现对含放射性元素水体的有效净化。石墨炔的亚纳米孔道(~0.5 nm)可有效锚定 U、Sr、Cs 等放射性元素离子;

而吸附后产生的道南效应,可有效抑制盐分结晶,阻止离子向表面迁移。通过构建石墨炔 HoMS 序构,在实现高效光热界面水蒸发的同时,将常规水体中放射性元素浓度降低 6~7 个数量级,达到饮用水级别,将含 U、Sr、Cs 等放射性元素的水体净化到海洋排放标准(Cs^+ 降至 0.010 mg/L, Sr^{2+} 降至 0.172 mg/L,后者低于排放标准 0.193 mg/L)以下,实现了放射性废水的安全排放^[27]。

4 光热界面水蒸发中的其他多级序构材料

以 HoMS 作为多级序构材料模型,可明晰序构在强化能量转换及物质传递的优势,从而实现光热界面水蒸发的性能突破。利用该范式,也可用来理解其他高性能光热界面水蒸发材料的结构优势、归纳科学问题,从而将二级序构向宏观三维尺度延伸,构建厘米乃至米级三级序构,将进一步凸显序构的优势,为高效、稳定、抗盐的太阳能水净化提供全新方向,推动该研究范式向实际应用跨越。

4.1 其他多级序构光热界面水蒸发材料

利用序构强化能量高效利用与物质快速传递是多级序构材料设计的核心,在各类高性能光热界面水蒸发材料中均有体现(表 1)。在能量转换层面,多级序构通过多尺度界面与空间排布,系统性提升光吸收与热局域效率,突破单层与无序结构的性能上限。多级序构通过在不同尺度引入精细光学界面,增加光在材料内部的多次散射与吸收路径。Sun 等^[28]开发了 LPJM/LM/PAN 多尺度仿生纤维蒸发器,利用液态金属纳米颗粒的 LSPR 效应与纤维内互联孔道协同,使光吸收率达到 90.9%,其高效的光吸收和光热转换能力使得水蒸发速率达到 $2.66 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 。Lee 等^[29]构建了纳米纤维素/MOF 衍生的分级气凝胶,该气凝胶具有双层结构,上层为 Au 负载 ZIF-8 衍生多孔碳层,下层为垂直排列的微通道水传输层,二者协同使得光吸收率达 95.9%,蒸发速率达 $2.36 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 。在另外一项研究中,Guo 等^[30]构建了基于炭黑纳米材料的介孔/大孔多级序构的水泥基发泡蒸发器,其独特的“微阵列结构”将蒸发面积扩大 623%,实现 96.9%的宽带光吸收,结合纳米级凝胶孔削弱水氢键,最终实现了 $5.47 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 的超高蒸发速率。这些跨材料的序构体系表明,通过多次散射延长光程、强化吸收机制是多级序构增强光捕获的有效设计原则,该机制本身具有跨材料普适性。

在热局域化方面,通过周期性隔热层的引入、

低导热系数基质选择与限域结构的多级序构设计,将热有效限域于蒸发界面,最大限度减少热量向水体深处耗散。例如, Han 等^[31]构建了还原氧化石墨烯/MXene 气凝胶体系, MXene 泡沫的定向层状结构结合其本征低热导率,通过热局域策略协同抑制热耗散,实现了 $2.04 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 的蒸发速率,并在 100 h 内保持性能稳定。此外, Liang 等^[32]利用三维还原氧化石墨烯(rGO)泡沫材料构建了 $60 \mu\text{m}$ 的微孔通道,其低热导率显著抑制了热扩散。该设计使蒸发界面温度迅速升至 88.7°C ,实现了强烈的热局域化效应,进而将太阳能热利用效率提升至近 100%。结合微孔系统优异的毛细管输水性能,最终实现了 $2.4 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 的蒸发速率。

多级序构从分子尺度到介观尺度协同调控水的赋存状态与输运路径,实现低能耗、高速率蒸发。多级序构诱导的多级孔道能提供大量的纳米限域空间,从而通过局域作用调控水分子间氢键排布,改变水分子的聚集状态,降低打破氢键网络所需的活化能,实现更经济的相变路径。例如, Hao 等^[33]制备了 CM/CH 基水凝胶体系,大量亲水官能团形成的氢键网络使体系的实际蒸发焓从 $2425 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$ 降至 $1352.25 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$,在 1 个太阳光照下,其蒸发速率达 $2.98 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 。此外,在水泥基炭黑泡沫蒸发器的纳米凝胶孔中,水泥水化产物赋予的纳米限域空间减弱了水分子间的氢键作用,使表观蒸发焓降低至 $496 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$,将水蒸发所需的能量需求降低约 80%^[31]。

在另外一方面,多级序构通过构建跨尺度的结构设计实现充足水供给与高效热管理的动态平衡,同时降低盐分积聚风险。Ni 等^[34]开发的 SH@FPCP 仿生 PolyHIPE/水凝胶复合蒸发器,互联大孔可作为快速蒸气的逃逸通道,贯穿其中的水凝胶细丝持续补水并溶解积盐,蒸发速率达 $3.19 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ 并稳定运行逾一周。此外, Guo 等^[35]构筑了兼具垂直通道与分级孔的气凝胶(HFA@PPy)。小孔道毛细补水,大孔道协同渗透压与重力实现盐分自回流,在 1 个太阳光辐照下,20%(质量分数)盐水中循环 20 次后蒸发速率仍保持 $3.79 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$,表面无盐结晶。这些研究表明,多级序构诱导的毛细通道不仅是快速补水的结构基础,更是实现主动抗盐、维持长期稳定性的关键序构设计。

综上,在光热界面水蒸发这一涉及多个能量转换和物质传递的复杂体系中,多级序构这一普适的材料设计范式,可用于多种光热界面水蒸发材料的设计。

表 1 不同级序构材料及其性能对比表

Table 1 Comparison of materials with different multi-level ordered structures and their performance

The Ordered Structures	Materials	Architectural feature	Optical absorbance	Evaporation rate	Energy efficiency/%	Stability	Applicable water bodies	Refs.
First ordered structures	TiN/semi-rGO			1.760	99.10	10 h	Seawater and organic dye-containing waste water	[12]
	MoS ₂ -CNT@C-2	Hierarchically porous structure	95.50	2.530		60 h	Seawater	[14]
	λ-Ti ₃ O ₅	Flatband electronic structure induced by Ti–Ti dimers	96.40	6.090	95.92	100 h	Seawater	[13]
	NKU-123([Co(CA)(bpy)] _n)	2D Metal-Organic Assembly		1.442	97.80	24 h	Seawater and organic dye-containing wastewater	[18]
	Amorphous Ta ₂ O ₅ /C	HoMS		4.020		30 d	Seawater, water polluted by organic matter, heavy metal ions, bacteria, and even extremely acidic/alkaline or radioactive water.	[20]
Second ordered structures	3s-CuO/Cu ₂ O-HoMSs	HoMS	82.17	3.200		80 h	Seawater and water polluted by organic matter, heavy metal ions, and bacteria	[17]
	TiO ₂ -Cu _x O、CeO ₂ -CeFeO ₃	HoMS				96 h		[7]
	LM/PAN ₂₁	Hierarchically porous structure	90.90	2.660	96.50	60 d	Seawater and organic dye-containing wastewater	[28]
	AuNP-loaded ZIF-8-derived carbon/nanocellulose aerogel		95.50	2.360	119.00	40 h	Seawater	[29]
	CB/Cement-based foam	Hierarchically porous structure	96.90	5.470	93.30	30 d	Seawater and heavy metal-containing wastewater	[30]
	Reduced graphene oxide/MXene foam	Multi-level layered structure	98.00	2.040		100 h	Seawater and organic dye-containing wastewater	[31]
	g-C ₃ N ₄ /MXene hydrogel	Hetero-embedded structure	98.00	2.980	97.40	15 d	Seawater and water polluted by organic matter, heavy metal ions, and bacteria	[33]
	Alginate fiber aerogel/Polypyrrole		95.00	4.270	99.00	240 h	Seawater, water polluted by organic matter, heavy metal ions, bacteria, and acidic/alkaline water.	[35]
	RGO-coated bamboo paper	Three-dimensional fin structure	97.15	2.940	>100.00		Seawater	[36]
	Carbon nanofiber-reinforced carbon aerogel	Three-dimensional columnar structure	97.20	3.820	95.50	30 h	Seawater, oil-water emulsion, acidic/alkaline water	[37]
Third ordered structures	Carbonized balsa wood	Three-dimensional interconnected bimodal porous structure	97.00	0.800	57.00	60 d	Seawater	[38]
	Surface carbonized basswood	Three-dimensional hierarchical oriented pore structure			75.00	60 d	High concentrated salt solution, fatty acid polluted solution	[39]

4.2 向第三级宏观序构的跨越

当前研究多聚焦于两级序构的调控，第三级序构，即将二级序构材料可控组装为宏观三维序构材

料，实现从微纳尺度到宏观尺度的跨越，已经开始起步。

通过界面诱导、外场辅助组装形成三维超晶体、

柱状阵列、仿生树形等宏观序构,可同步捕获太阳能与环境热辐射,打破仅界面蒸发的效率限制,强化宏观蒸发体的高比表面水蒸发,这一方向已成为近期研究热点。例如, Wang 等^[36]以 rGO 纳米片为光热基元,负载于竹纤维纸制成复合膜,再组装为水平基座+垂直翅片的三维阵列。在 1 个太阳光的辐照下,基座作为热蒸发面驱动水蒸发;翅片从环境吸热($\sim 2.26\text{ W}$)并回收水蒸气冷凝潜热(占回收能量 $>80\%$),实现“热蒸发-冷吸热-潜热回收”多级能量耦合,蒸发速率达 $2.94\text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$ 。Yan 等^[37]通过将碳纳米纤维(CNF)和碳化海藻酸盐冷冻干燥与高温碳化构筑了碳纳米纤维增强碳气凝胶(CNFA),进而将 CNFA 加工为柱状三维宏观序构。在 1 个太阳光的辐照下,顶部光热界面升温至 $37.1\text{ }^{\circ}\text{C}$,驱动太阳能界面蒸发;而侧壁因水分蒸发温度降至低于环境温度,可自发从环境吸收对流与辐射能量,实现“太阳能蒸发+侧壁自然蒸发”的协同增效。该三维宏观序构蒸发器的总蒸发速率达 $3.82\text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$,能量利用效率为 95.5% 。这些研究展示了三级宏观序构在捕获环境能量与回收潜热方面的独特优势,为未来光热界面水蒸发提供了新的性能突破方向。

此外,第三级宏观序构可通过分区与梯度设计,精准引导离子定向迁移,降低盐结晶风险,提升设备稳定性。近年来涌现的研究已充分验证该策略的有效性。例如, He 等^[38]通过在蒸发器中构建双峰多级多孔序构材料,其 $180\sim 390\text{ }\mu\text{m}$ 的宽大导管与 $18\sim 39\text{ }\mu\text{m}$ 的狭窄管胞三维互通,实现了水的快速泵送与盐离子的横向扩散:宽大导管负责快速补水,管胞内蒸发浓缩形成的盐离子通过纹孔和射线细胞横向扩散至宽大导管,再回流至下层水体。该机制使蒸发器在 6 倍太阳光强、 15% (质量分数)盐水中达到 $6.4\text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{h}^{-1}$ 的蒸发速率,连续 7 h 无盐结晶,循环 20 天性能稳定。而单峰孔结构或堵塞宽通道的对照样品因缺乏横向扩散通道,蒸发速率下降 $18\%\sim 29\%$ 。在另外一项研究中, Kuang 等^[39]构建了由毫米级主通道(约 1 mm)与微通道(约 $12\text{ }\mu\text{m}$)组成的多级复合蒸发系统。利用主通道间水传导速率差异形成的横向浓度梯度,通过 $1\sim 2\text{ }\mu\text{m}$ 类木质部颗粒孔隙实现快速盐分交换,结合微通道带来的有效的毛细管驱动持续供水,该蒸发器在 20% (质量分数) NaCl 溶液中蒸发效率达 75.1% ,可连续稳定运行 100 h。

综上,这些与第三级宏观序构相似的相关报道,均通过跨尺度的综合设计,实现了更高的能量利用

效率,并从源头实现盐离子浓度稀释与分流,极大提升了 ISSG 长期运行的可靠性和工程化潜力。

5 总结与展望

功能基元序构的研究范式,为光热界面水蒸发体系中的能量转换与物质传递协同强化提供了全新的视角,在太阳能驱动水蒸发、海水淡化、污水净化及水资源重整等领域展现出不可替代的作用。多级序构在增强光捕获、优化热局域、调控水分子传输、强化界面传质等方面展现了独特优势。然而,多级序构科学概念的深化、向工程实用的迈进,仍面临多重挑战。面向下一代高效、稳定、可规模化的光热水处理技术,未来需在基元多元化、序构多样化、序构精准化 3 个方向持续突破,同时直面规模化制备、复杂水体稳定性、机械耐久性、界面污染、成本可控性、蒸发/冷凝不匹配等现实制约因素,深度挖掘光热效应对反应动力学的强化作用,开拓基于光热界面水蒸发的颠覆性应用场景,最终推动多级序构材料成为支撑碳中和与分布式水网络的核心材料平台。

基元多元化是构筑高性能、宽光谱、多功能多级序构体系的核心基础。当前针对基元的研究,往往只关注组分、吸光机制、热管理能力等单一维度。未来须突破传统基元边界,构建多机制、宽光谱、强适配的功能基元。开拓共轭聚合物、有机-无机杂化分子等功能基元,通过精准分子设计调控吸光波段、载流子弛豫与表面浸润,实现柔性、低成本、环境友好光热体系的构建。更重要的是,推动光热效应与光催化、热催化、选择性吸附等过程深度耦合,使同一基元同时具备高效吸光发热、污染物降解、重金属捕集、离子筛分等多重功能,大幅提升光子利用率与复杂水体净化深度,为高盐、高毒、难降解废水处理提供一体化解决方案。

序构多样化创新是释放多级序构跨尺度优势、破解光热蒸发核心难题的关键路径。多级序构的本质并非固定结构,而是可设计、可调控、可协同的组装结构。未来可深度借鉴自然体系的精巧结构,发展系列仿生多级序构。例如,效仿植物叶片蒸腾与树木输水机制,构筑垂直贯通微通道与纳米限域层耦合的序构体系,实现快速补水、限域蒸发与热局域同步优化;借鉴沙漠甲虫昼夜集水与雾水收集机制,构建亲疏水交替、润湿性梯度可控的序构界面,实现水输运、抗盐结晶与蒸汽快速逸出的协同作用;借鉴海绵、蜂巢等多孔结构,构筑梯度孔径、

层级贯通的孔道序构，平衡毛细供水、蒸汽扩散与热阻调控。与此同时，发展异质结序构、核-壳梯度序构、非对称 Janus 序构、多壳层异质复合序构等新形态，实现光吸收、热分布、水输运、离子吸附/排斥、污染物降解的多目标协同优化。通过序构多样化创新，有望同时解决快速补水不足、热泄漏严重、盐结晶堵塞、界面污染失效等行业共性难题，使多级序构从性能提升材料进化为具备场景自适应能力的功能系统。

第三级次序构的精准构筑与可控组装，是多级序构从纳米/微米单一体走向宏观实用器件的关键步骤。目前，以 HoMS 为代表的第二级序构已实现可控制备与量产，单颗粒尺度的光、热、质调控机制已较为清晰。然而，将大量 HoMS 基元进行空间有序排列、定向连接与尺度延伸，形成均一、稳定、可编程的第三级宏观序构，仍面临组装均匀性差、界面结合弱等瓶颈。一旦实现对第三级次序构的精准调控，将有望实现类光子晶体的光管理能力，通过周期性排布强化光散射、延长光程，从而实现全光谱高效捕获。同时，通过宏观性能可编程化，可基于实际应用需求反向设计基元类型、二级序构形态与三级组装方式，完成从微观结构到宏观功能的精准定制。未来可借鉴胶体晶体、超材料与超晶体的组装策略，发展界面诱导组装、电场/磁场辅助组装、3D 打印序构等方法，实现三维立体序构的可控构筑，为大面积、模块化、高性能光热器件提供底层技术支撑。

尽管多级序构在材料设计层面展现出巨大潜力，但其迈向实际应用仍受多重现实制约，必须在推进前沿创新的同时系统性解决工程化难题。1) 规模化均匀可控制备仍是一大短板，实验室常规化学反应方法难以放大，序构均匀性、批次稳定性与结构完整性在放大过程中难以保持，亟须发展连续化、低能耗、高通量的宏量制备技术，在降低成本的同时保证序构不被破坏。2) 真实高盐与复杂水体下的长期稳定性缺乏大规模、系统化验证；在含盐、含油、含胶体与微生物的实际水体中，材料易出现孔道堵塞、盐垢沉积、界面污染、骨架腐蚀与结构坍塌；数百小时连续运行后的性能衰减规律、失效机制与寿命预测仍不清晰，亟须建立标准化评价体系与长效稳定策略。3) 机械耐久性与结构可靠性不足，多级序构多为多孔、低密度、低力学强度体系，在水流冲刷、风力扰动、弯曲形变、紫外辐照与干湿循环条件下易破损、粉化、分层，难以满足户外

长期服役要求，亟须发展高强、高韧、耐溶胀、耐冲刷的多级序构体系。4) 界面污染与再生维护问题突出，有机吸附、生物膜生长与无机沉积会持续降低光热效率，而现有的清洗再生方法复杂、能耗高，难以在分布式场景应用，亟须发展自清洁、自修复、抗污染的智能序构体系。5) 蒸发与冷凝速率严重不匹配已成为系统级瓶颈，材料端蒸发速率在急速突破，但被动冷凝效率通常较低，高湿度环境下蒸汽扩散受阻、潜热累积进一步抑制系统效率，亟须发展强化冷凝、多级潜热回用技术，实现蒸发冷凝动态同步。

更进一步，未来应挖掘光热局域高温对界面动力学的强化效应，将“热”从单纯驱动蒸发的能量源，升级为加速界面反应、强化传质分离、提升净化深度的核心动力，开拓撒手铜应用场景。利用多级序构精准构建的局域高温场，提升界面反应动力学速率，加速有机污染物的热催化与光热协同降解、强化难降解工业废水的矿化过程、提升重金属离子的氧化还原与捕集动力学、促进油/水混合物的快速分离与高黏流体的低黏度输运。在传统蒸发技术难以覆盖的场景中，如高盐危废废水、高黏度污泥脱水、低温环境快速产水、含油污水净化、放射性废水安全处理等，多级序构可凭借光热动力学强化效应实现高效产水与资源回收同步进行。

参考文献:

- [1] JIANG X M, DENG S Q, WHANGBO M H, et al. Material research from the viewpoint of functional motifs[J]. Natl Sci Rev, 2022, 9(7): nwac017.
- [2] WANG Z L, FENG X, LI Y J, et al. Energy-mass transfer in photothermal desalination: Multi-scale innovations and distributed water solutions toward sustainability[J]. Adv Mater, 2026, 38(4): e10796.
- [3] MAO K, ZHANG Y X, TAN S C. Functionalizing solar-driven steam generation towards water and energy sustainability[J]. Nat Water, 2025, 3(2): 144–156.
- [4] CHEN X B, LIU S Y, YANG N L, et al. Hierarchical structure regulation for sequential steps in solar vapor generation[J]. EcoMat, 2023, 5(7): e12348.
- [5] MAO D, WANG C, LI W, et al. Hollow multishelled structure: Synthesis chemistry and application[J]. Chem Res Chin Univ, 2024, 40(3): 346–393.
- [6] WEI Y Z, ZHAO D C, WANG D. Mesoscience in hollow multi-shelled structures[J]. Adv Sci, 2024, 11(8): 2305408.
- [7] WEI Y Z, WAN J W, YANG N L, et al. Efficient sequential harvesting of solar light by heterogeneous hollow shells with hierarchical pores[J]. Natl Sci Rev, 2020, 7(11): 1638–1646.
- [8] WANG K, XU L K, WANG J, et al. Smart heat isolator with hollow multishelled structures[J]. Green Energy Environ, 2023, 8(4): 1154–1160.
- [9] JAUFFRED L, SAMADI A, KLINGBERG H, et al. Plasmonic heating of nanostructures[J]. Chem Rev, 2019, 119(13): 8087–8130.

- [10] CUI X M, RUAN Q F, ZHUO X L, et al. Photothermal nanomaterials: A powerful light-to-heat converter[J]. *Chem Rev*, 2023, 123(11): 6891–6952.
- [11] KIM M, LEE J H, NAM J M. Plasmonic photothermal nanoparticles for biomedical applications[J]. *Adv Sci*, 2019, 6(17): 1900471.
- [12] WANG Y, LIU X L, ZHANG Q Z, et al. Stable, cost-effective TiN-based plasmonic nanocomposites with over 99% solar steam generation efficiency[J]. *Adv Funct Mater*, 2023, 33(15): 2212301.
- [13] YANG B, ZHANG Z M, LIU P T, et al. Flatband λ -Ti₃O₅ towards extraordinary solar steam generation[J]. *Nature*, 2023, 622(7983): 499–506.
- [14] LI S, LIU T, YAO Y, et al. MoS₂ supported hydrophilic porous membrane for solar water evaporation[J]. *Sep Purif Technol*, 2025, 353: 128566.
- [15] ZHANG K, CAI W F, ZHAO S F, et al. Hierarchical CuO/ZnO heterojunction with improved spectrum absorption for interfacial solar steam generation[J]. *Ind Eng Chem Res*, 2023, 62(36): 14557–14567.
- [16] WANG W T, ZHANG K, WANG Y H, et al. A CuO/ZnO heterostructure interpenetrated with hydrogel network for efficient solar water evaporation[J]. *Ind Eng Chem Res*, 2024, 63(36): 15890–15900.
- [17] CHEN X B, LI P, WANG J, et al. Multishelled CuO/Cu₂O induced fast photo-vapour generation for drinking water[J]. *Nano Res*, 2022, 15(5): 4117–4123.
- [18] LAN W L, GOU X S, WU Y W, et al. The influence of light-generated radicals for highly efficient solar-thermal conversion in an ultra-stable 2D metal-organic assembly[J]. *Angew Chem Int Ed*, 2024, 63(20): e202401766.
- [19] HU X, WANG S Y, LI J, et al. Defect states-related photothermal conversion of UV photons in TiO₂-based materials[J]. *ACS Appl Energy Mater*, 2024, 7(7): 2918–2924.
- [20] CHEN X B, YANG N L, WANG Y L, et al. Highly efficient photothermal conversion and water transport during solar evaporation enabled by amorphous hollow multishelled nanocomposites[J]. *Adv Mater*, 2022, 34(7): 2107400.
- [21] WANG J Y, WAN J W, YANG N L, et al. Hollow multishell structures exercise temporal-spatial ordering and dynamic smart behaviour[J]. *Nat Rev Chem*, 2020, 4(3): 159–168.
- [22] 王丹. 中空多壳层结构材料[J]. *科学通报*, 2019, 64(34): 3515. WANG Dan. *Chin Sci Bull*, 2019, 64(34): 3515.
- [23] LIEN D H, DONG Z H, RETAMAL J R D, et al. Resonance-enhanced absorption in hollow nanoshell spheres with omnidirectional detection and high responsivity and speed[J]. *Adv Mater*, 2018, 30(34): 1801972.
- [24] WEI Y Z, WANG J Y, YU R B, et al. Constructing SrTiO₃-TiO₂ heterogeneous hollow multi-shelled structures for enhanced solar water splitting[J]. *Angew Chem Int Ed*, 2019, 58(5): 1422–1426.
- [25] WEI Y Z, WAN J W, WANG J Y, et al. Hollow multishelled structured SrTiO₃ with La/Rh co-doping for enhanced photocatalytic water splitting under visible light[J]. *Small*, 2021, 17(22): 2005345.
- [26] LUKYANOV A V, SUSHCHIKH M M, BAINES M J, et al. Superfast nonlinear diffusion: Capillary transport in particulate porous media[J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 109(21): 214501.
- [27] ZHAN S H, CHEN X B, XU B, et al. Hollow multishelled structured graphdiyne realized radioactive water safe-discharging[J]. *Nano Today*, 2022, 47: 101626.
- [28] SUN Y X, LIU D, ZHANG F, et al. Multiscale biomimetic evaporators based on liquid metal/polyacrylonitrile composite fibers for highly efficient solar steam generation[J]. *Nano-Micro Lett*, 2025, 17: 129.
- [29] LEE S, LEE K, JEON Y, et al. Nanocellulose-MOF-derived carbon hybrid aerogels with hierarchical micro/nanostructures for solar-driven water evaporation[J]. *Adv Sci*, 2026, 13: e16158.
- [30] GUO J J, DU Z X, ZUO W Q, et al. Metasurface enhanced photothermal cement foam for robust and high-throughput seawater desalination[J]. *Carbon Energy*, 2026: e70156.
- [31] YANG H M, LI W, GAO Y N, et al. Hierarchically aligned reduced graphene oxide/MXene foam enabling Marangoni-driven salt-resistant desalination via bidirectional ion reflux[J]. *J Colloid Interface Sci*, 2025, 700: 138617.
- [32] LIANG H X, LIAO Q H, CHEN N, et al. Thermal efficiency of solar steam generation approaching 100 % through capillary water transport[J]. *Angew Chem Int Ed*, 2019, 58(52): 19041–19046.
- [33] HAO S Y, GUO C, CHEN X T, et al. Dual-mode light-responsive chitosan-based hybrid hydrogel for efficient solar-driven water evaporation and multifunctional water purification[J]. *Water Res*, 2026, 292: 125353.
- [34] NI J H, YU M Q, ZHANG X Z Y, et al. Biomimetic design of porous polymerized high internal phase emulsion (PolyHIPE)/hydrogel solar evaporator for salt-resistant desalination and energy generation[J]. *Chin J Polym Sci*, 2026, 44(5): 1381–1392.
- [35] GUO Z H, HANG C, LI K, et al. Highly efficient solar seawater evaporation by aerogel with vertical channels and hierarchical pores structure based on high-absorbent alginate fibers[J]. *Chem Eng J*, 2024, 501: 157562.
- [36] WANG Y D, WU X, SHAO B, et al. Boosting solar steam generation by structure enhanced energy management[J]. *Sci Bull*, 2020, 65(16): 1380–1388.
- [37] YAN J, WU Q F, WANG J J, et al. Carbon nanofiber reinforced carbon aerogels for steam generation: Synergy of solar driven interface evaporation and side wall induced natural evaporation[J]. *J Colloid Interface Sci*, 2023, 641: 1033–1042.
- [38] HE S M, CHEN C J, KUANG Y D, et al. Nature-inspired salt resistant bimodal porous solar evaporator for efficient and stable water desalination[J]. *Energy Environ Sci*, 2019, 12(5): 1558–1567.
- [39] KUANG Y D, CHEN C J, HE S M, et al. A high-performance self-regenerating solar evaporator for continuous water desalination[J]. *Adv Mater*, 2019, 31(23): 1900498.

作者贡献声明:

张丽娟: 设计论文框架、撰写论文

杨乃亮: 提出多级序构材料的概念框架、完善论文框架、绘制图表、修订论文

万家炜: 完善论文框架, 修订论文

王丹: 提出研究方向、修订论文

Enhanced Interfacial Solar Steam Generation by Multi-Level Ordered Structured Materials

ZHANG Lijuan¹, WAN Jiawei^{1,2}, YANG Nailiang^{1,2}, WANG Dan³

(1. State Key Laboratory of Biopharmaceutical Preparation and Delivery, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; 2. Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China; 3. College of Chemistry and Environmental Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518071, Guangdong, China)

Extended Abstract

The global shortage of freshwater has evolved into a fundamental bottleneck restricting sustainable socioeconomic development. Conventional desalination and wastewater remediation technologies are constrained by high energy consumption, costly infrastructure construction, and limited adaptability to scattered and remote water-deficient regions. As an emerging low-carbon water purification technology, interfacial solar steam generation (ISSG) features passive solar utilization, modular structural flexibility, and broad environmental applicability, offering a viable solution for seawater desalination, saline wastewater treatment, and complex polluted water remediation. Unlike conventional evaporation processes, ISSG involves a coupled multi-physical process encompassing solar harvesting, photothermal conversion, interfacial thermal localization, multiscale water transport, and vapor migration. Its overall efficiency fundamentally relies on the synergistic optimization of energy conversion and mass transfer. However, most existing material design strategies merely focus on single-scale structural modification or simple compositional tuning, lacking cross-scale systematic design logic, and thus struggle to achieve coordinated regulation of light absorption, heat management and water transport. In this context, the material research paradigm centered on “functional unit-ordered structure” has emerged as an innovative theoretical framework. It transcends traditional reductionism, highlighting that material macroscopic properties originate from the controllable ordered assembly of basic functional units across multiple scales, rather than the simple superposition of individual component performances.

Based on this paradigm, this review systematically establishes the conceptual connotation and theoretical system of multi-level ordered materials, and clearly distinguishes them from conventional hierarchical materials. Different from hierarchical structures that only emphasize geometric nesting at various scales, multi-level ordered materials take “order” as the core design principle, focusing on the cross-scale ordered arrangement from sub-nano meter atomic domains to nano- and microscale dimensions, as well as the functional synergy generated by inter-scale correlation. Taking hollow multishelled structures (HoMS) as the typical model system, this review comprehensively elaborates the research progress and internal regulation mechanisms of multi-level ordered materials in the field of ISSG. This paper clarifies the progressive construction logic of two ordered systems: the first level refers to nanoparticles assembled from sub-nano atomic domain functional units, while the second level corresponds to HoMS self-assembled from such nanoparticles. We systematically summarize multiple photothermal conversion mechanisms of primary functional units, including localized surface plasmon resonance of metallic motifs, bandgap modulation and nonradiative relaxation in semiconductor systems, as well as defect and amorphous-assisted photothermal regulation. Representative material systems are analyzed in depth, revealing the inherent correlation between atomic arrangement, electronic structure and photothermal behavior.

On this basis, this review further clarifies the inherent advantages of HoMS as secondary ordered structures in optical regulation, thermal management and mass transfer. Benefiting from unique temporal-spatial ordering characteristics, HoMS enables stepwise light absorption and intershell resonant scattering, effectively broadening spectral response and extending optical propagation paths. The multilayered cavity and interfacial thermal resistance network can confine heat at the evaporation interface and suppress heat dissipation into bulk water. In terms of mass transfer, cross-scale pore channels formed by nanoparticle stacking optimize capillary water supply; nanoconfinement modulates water molecular aggregation and reduces actual evaporation enthalpy; interconnected pore pathways also provide low-resistance channels for rapid vapor escape, achieving integrated optimization of water replenishment, phase transition and vapor diffusion. Beyond HoMS, this review further extends the multi-level ordered design philosophy to a wide range of photothermal materials, including biomimetic channel arrays, gradient porous aerogels, asymmetric interface evaporators and carbon-based composite frameworks, verifying the universal applicability of this design paradigm in optimizing energy conversion and mass transport. Meanwhile, the development potential of third-level macroscopic ordered structures is further explored, and the structural superiority of micro-nano units assembled into three-dimensional architectures in ambient energy capture, latent heat recycling and directional salt migration regulation is analyzed.

Summary and Prospects At present, large-scale homogeneous fabrication of multi-level ordered structures remains challenging, and it is difficult to maintain structural integrity and ordering consistency during mass production. Long-term service performance in high-salinity, oily and complex actual water environments lacks systematic verification, and problems such as salt deposition, pore blockage and interfacial fouling easily cause performance degradation. In addition, most porous ordered materials exhibit insufficient mechanical toughness against water scouring and dry-wet cyclic aging, while the mismatch between high evaporation capacity and limited condensation efficiency has become a prominent system-level constraint. Corresponding future research directions are proposed as, advancing the diversification of functional units to construct multi-mechanism photothermal libraries; innovating diversified ordered configurations by learning from natural bionic structures; realizing controllable assembly of third-level macroscopic ordered architectures. At the same time, future studies should address engineering bottlenecks such as scalable preparation, long-term stability and mechanical durability, and fully exploit photothermally induced kinetic enhancement effects to expand application scenarios in high-salinity wastewater, oily sewage, sludge dehydration and radioactive water purification. This review systematically clarifies the regulation mechanism of multi-level ordered structures in energy conversion and mass transport, summarizes existing challenges and future development paths, and provides solid theoretical support and rational design guidance for the development of high-efficiency, stable and engineerable photothermal evaporation materials and decentralized water resource allocation systems.

Keywords functional unit; multi-level ordered structure; hollow multishelled structure; interfacial solar steam generation