

二维CrSe₂/InN异质结中的Z型电荷转移机制： 第一性原理研究

闫凯慧

贵州大学大数据与信息工程学院，贵州 贵阳

收稿日期：2026年5月8日；录用日期：2026年6月1日；发布日期：2026年6月8日

摘要

随着全球能源危机与环境污染问题的日益加剧，开发利用太阳能等可再生能源已成为可持续发展的关键路径。光催化技术通过半导体材料将太阳能转化为化学能，在分解水制氢、污染物降解等领域展现出巨大潜力。合理构建具备高效电荷分离和出色氧化还原能力的二维范德华异质结被认为是设计高效光催化剂的有效途径。在本文中，我们设计了一种新颖二维CrSe₂/InN异质结构并基于第一性原理计算探讨了其光催化分解水的潜力。结果表明，CrSe₂/InN异质结具有II型交错能带对齐特性，并表现出1.21 eV的直接带隙，在内建电场和能带弯曲的作用下，界面间载流子迁移方式遵循直接Z电荷转移机制。光吸收谱表明，CrSe₂/InN异质结比InN和CrSe₂单层表现出显著增强的可见光响应，太阳能到氢能(STH)转换效率达到13.33%。这些理论预测表明CrSe₂/InN异质结在利用太阳能驱动水分解方面具有巨大应用潜力。

关键词

CrSe₂/InN异质结，Z型电荷转移机制，第一性原理计算，光催化

Z-Scheme Charge Transfer Mechanism in Two-Dimensional CrSe₂/InN Heterojunction: A First-Principles Study

Kaihui Yan

College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang Guizhou

Received: May 8, 2026; accepted: June 1, 2026; published: June 8, 2026

Abstract

With the increasing global energy crisis and environmental pollution, the development and utilization

of renewable energy sources such as solar energy have become critical pathways for sustainable development. Photocatalytic technology, which converts solar energy into chemical energy using semiconductor materials, has shown great potential in areas such as water splitting for hydrogen production and pollutant degradation. The rational construction of two-dimensional van der Waals heterostructures with efficient charge separation and excellent redox capability is considered an effective approach for designing high-performance photocatalysts. In this paper, we design a novel two-dimensional CrSe₂/InN heterostructure and investigate its potential for photocatalytic water splitting based on first-principles calculations. The results show that the CrSe₂/InN heterojunction exhibits a type-II staggered band alignment with a direct bandgap of 1.21 eV. Under the influence of the built-in electric field and band bending, the interlayer charge carrier migration follows a direct Z-scheme mechanism. Optical absorption spectra reveal that the CrSe₂/InN heterostructure exhibits significantly enhanced visible-light response compared to InN and CrSe₂ monolayers, achieving a solar-to-hydrogen (STH) conversion efficiency of 13.33%. These theoretical predictions suggest that the CrSe₂/InN heterostructure holds great potential for solar-driven water splitting applications.

Keywords

CrSe₂/InN Heterojunction, Z-Scheme Charge Transfer Mechanism, First-Principles Calculations, Photocatalysis

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

近年来,化石能源(煤炭、石油及天然气)的持续消耗导致全球性能源危机与环境恶化问题日益严峻。在此背景下,开发可持续的清洁能源解决方案已成为当务之急[1]。太阳能因其可再生性、环境友好性与全球普适性等特征被视为理想替代能源,但其固有的能量密度低、分布不均及存储困难等缺陷严重制约了实际应用。相较之下,氢能凭借其高能量密度、可存储运输特性及零碳排放优势,被认为是实现太阳能转化与利用的理想能量载体[2]。自1972年Fujishima和Honda首次报道TiO₂的光催化特性以来,已发展出多种高效半导体光催化剂。特别是二维材料光催化剂,凭借其超大比表面积、优异的载流子迁移率及可调控的带隙结构,在光催化领域引起广泛关注[3]-[5]。然而,单组分催化剂普遍面临光谱响应、能带对齐和载流子分离三重效应难以协同优化难题,导致其催化效率仍低于实际应用要求。

为了应对这个困境,研究人员提出通过将两个二维材料垂直堆叠构建二维范德华异质结。由于两个单层材料通过相对较弱的范德华力固定在一起,因此形成后的范德华异质结通常保留了单层材料的电子特性。此外,不同材料的层间相互作用和电荷转移也为形成后的异质结引入了一些新的物理特性。近年来,模拟植物光合作用的直接Z型光催化剂在提高光催化效率方面取得了显著成功,为光催化分解水提供了一种创新的有效途径[6]-[8]。例如实验合成的直接Z型光催化剂CoWO₄/CdS [9]和ZnIn₂S₄/ReS₂ [10]异质结表现出高效的电荷分离效率和显著的析氢活性。理论上提出的WSSe/GaO [11]和PtSe₂/SnS₂ [12]范德华异质结则展现出增强的可见光吸收和优异的光催化性能。因此,设计新型直接Z型光催化剂是实现高效太阳能驱动水分解制氢的有效策略。

构建高效光催化异质结的关键在于单层材料的理性选择。III族氮化物单层因其高导热性和高效载流子传输能力而被广泛应用于各种器件中。其中,InN是一种直接带隙半导体,具备优异的电子传输性能和

窄带隙特性,有望应用于新型光电器件的制造[13]。另一方面新型二维材料过渡金属硫族化合物已经通过实验实现,如二维 CrSe₂ 作为新型直接带隙半导体,具有高动态稳定性。然而,过往研究表明,CrSe₂ 单层无法满足析氢反应(HER)和析氧反应(OER)的带边电位要求[14],限制了其在光催化领域的应用。

基于 InN 和 CrSe₂ 单层材料的优异特性,本文设计了一种新型 CrSe₂/InN 异质结,并通过第一性原理计算方法系统研究了其电子结构与光学性质,以评估其在太阳能驱动水分解应用中的可行性。

2. 计算方法

本研究采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,所有计算均通过 VASP 软件包实现[15][16]。计算中选用广义梯度近似框架下的 PBE 泛函描述交换关联作用[17],并引入 DFT-D3 方法以准确处理长程范德华相互作用[18]。采用以 Γ 点为中心的 $9 \times 9 \times 1$ k 点网格对布里渊区进行采样,平面波截断能设为 500 eV,能量和力的收敛标准分别设定为 10^{-5} eV 和 0.001 eV/Å。为避免周期性边界条件引入的镜像相互作用,沿垂直方向设置了 20 Å 的真空层。鉴于 PBE 泛函会系统性低估半导体带隙,我们进一步采用 HSE06 杂化泛函对能带结构、带边位置及光学性质等关键电子特性进行精确计算,以确保研究结果的可靠性[19]。

3. 结果和讨论

3.1. 几何结构和稳定性

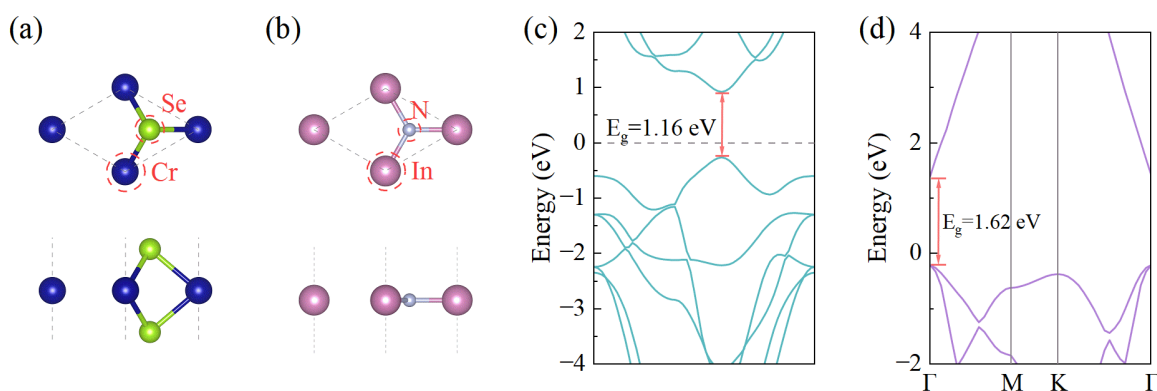


Figure 1. (a) Top and side views of optimized CrSe₂ monolayer; (b) top and side views of optimized InN monolayer; (c) band structure of CrSe₂ monolayer; (d) band structure of InN monolayer

图 1. (a) CrSe₂ 和(b) InN 单层优化后的俯视图和侧视图; (c) CrSe₂ 和(d) InN 单层的能带结构

在构建 CrSe₂/InN 异质结之前,我们首先计算了 InN 和 CrSe₂ 单层的几何结构与电子特性。充分几何优化后的 InN 和 CrSe₂ 单层分别如图 1(a)和图 1(b)所示。InN 和 CrSe₂ 单层的晶格常数分别为 3.58 Å 和 3.21 Å。图 1(c)和图 1(d)展示了单层 CrSe₂ 和 InN 的能带结构。单层 InN 属于直接带隙半导体,带隙值为 1.62 eV,其导带最小值(CBM)和价带最大值(VBM)均位于高对称点 Γ 点。单层 CrSe₂ 则表现出 1.16 eV 的直接带隙,其 CBM 和 VBM 均位于高对称点 K 点。上述结果与已有理论研究结果一致[13][14],表明本文所采用的计算方法及参数设置具有较高的准确性。

为了构建稳定的异质结模型,两个单层之间的晶格失配率应控制在 5%以内。由于单层 InN 与 CrSe₂ 的元胞之间存在较大的晶格失配,我们采用 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 的 InN 超胞与 2×2 的 CrSe₂ 超胞进行垂直堆叠,从而构建 CrSe₂/InN 异质结模型。为定量描述异质结界面处晶格常数的差异程度,本文引入晶格失配率的计算公式如下:

$$\delta = \frac{2|a_{\text{CrSe}_2} - a_{\text{InN}}|}{a_{\text{InN}} + a_{\text{CrSe}_2}} \times 100\% \quad (1)$$

其中 a_{CrSe_2} 和 a_{InN} 分别为 CrSe_2 和 InN 几何优化后的晶格常数，计算得到 CrSe_2/InN 的晶格失配率仅为 3.47%，表明界面处晶格应变较小，这为实验制备 CrSe_2/InN 异质结提供了可行性依据。基于两种材料对称性，我们考察了三种可能的堆叠构型，如图 2 所示。

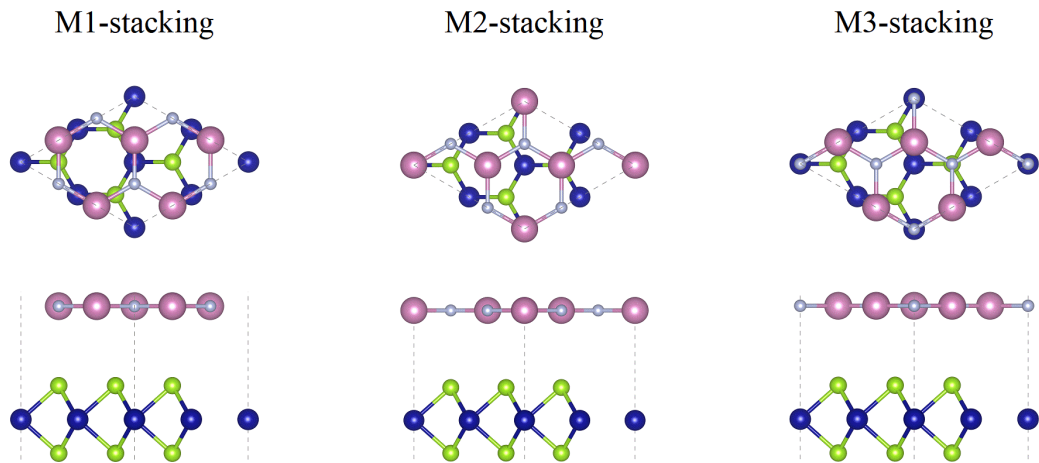


Figure 2. Top and side views of three stacking configurations of the CrSe_2/InN heterostructure.
图 2. CrSe_2/InN 异质结的 3 种堆叠构型的俯视图和主视图

在讨论一个体系的物理特性之前，确定其最稳定的结构至关重要，因为结构越稳定，越易于实验制备。为了找到最稳定的堆叠构型，计算了上述三种堆叠方式的结合能，结合能的计算公式如下：

$$E_b = E_{\text{CrSe}_2/\text{InN}} - E_{\text{CrSe}_2} - E_{\text{InN}} \quad (2)$$

其中 $E_{\text{CrSe}_2/\text{InN}}$ 代表 CrSe_2/InN 异质结总能量， E_{CrSe_2} 和 E_{InN} 分别代表 2×2 的 CrSe_2 和 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 的 InN 两个单层的总能量。如表 1 所示， CrSe_2/InN 异质结三种堆叠模型的结合能均为负值，表明这些结构都是相对稳定的，其中 M1 堆叠方式的 CrSe_2/InN 异质结结合能最低，表明其最稳定。因此，在以下关于电子结构和光学性质的计算中，仅考虑 M1 堆叠方式的 CrSe_2/InN 异质结。

Table 1. Lattice constant (a), interlayer distance (d), and binding energy (E_b) of the CrSe_2/InN heterostructure under different stacking configurations

表 1. 不同堆叠结构下 CrSe_2/InN 异质结的晶格常数(a)、层间距离(d)和结合能(E_b)

Stacking structure	a (Å)	d (Å)	E_b (eV)
M1-stacking	6.31	3.33	-0.90
M2-stacking	6.31	3.37	-0.89
M3-stacking	6.31	3.34	-0.89

3.2. 电子特性

确定了 CrSe_2/InN 异质结的最稳定的构型之后，如图 3 所示，采用 HSE06 杂化泛函方法探究了异质结的能带结构和态密度。 CrSe_2/InN 异质结的 CBM 和 VBM 分别位于布里渊区的 K 点和 Γ 点，表现出 1.21 eV 的间接带隙，该值小于其构成的两个单层的带隙。此外，可以看出 CrSe_2/InN 异质结的 VBM 都主要

由 InN 贡献, 而其 CBM 则由 CrSe₂ 贡献。如图 3(b) 分波态密度进一步分析所示, CrSe₂/InN 异质结的 VBM 主要由 InN 单层的 In 原子的 p 轨道和 N 原子的 p 轨道贡献, CBM 主要由 CrSe₂ 单层的 Cr 原子的 d 轨道贡献。总之, CrSe₂/InN 异质结呈现典型 II 型交错能带对准特性。

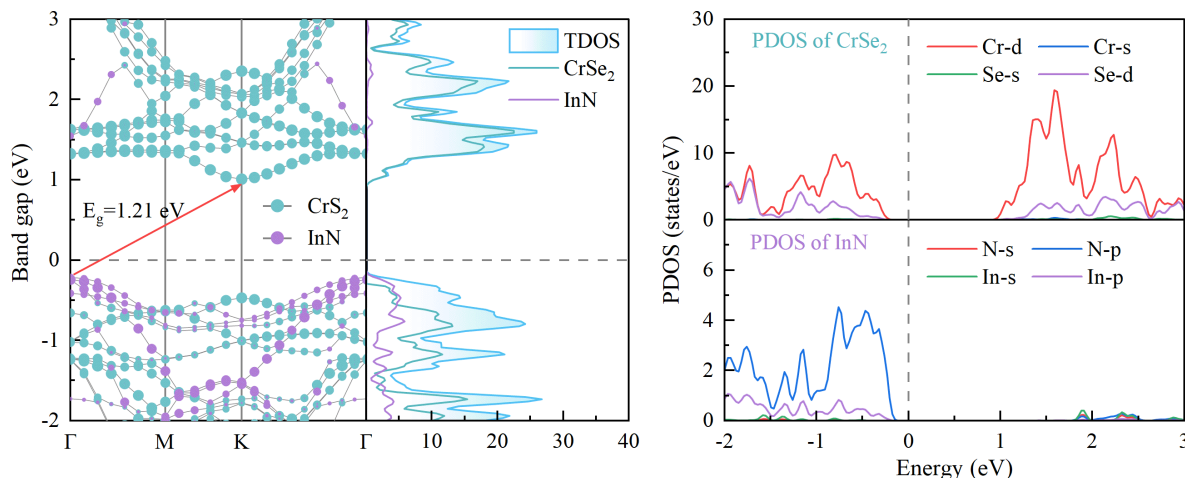


Figure 3. (a) Projected band structure and (b) projected density of states of the CrSe₂/InN heterostructure
图 3. CrSe₂/InN 异质结的(a) 投影能带和(b) 投影态密度

用于水分解的光催化剂需要合适的带边位置, 具体来说, 这两个条件如下: 首先, 参与氧化反应的 VBM 电位必须低于水分解析氧反应的氧化电位(E_{H_2O/O_2}); 其次, 还原反应中涉及的 CBM 电位必须高于水分解析氢反应的还原电位(E_{H^+/H_2})。原始单层 CrSe₂ 和 InN 的带边位置如图 4 的左侧所示。对于接触前的原始 CrSe₂ 单层, 其 CBM 和电位分别低于 E_{H^+/H_2} 和 E_{H_2O/O_2} , 这表明 CrSe₂ 单层仅满足第一个条件, 说明其只能催化 OER。对于 InN 单层, 其仅满足 CBM 电位高于 E_{H_2O/O_2} 的条件, 因此也无法单独实现光催化全解水。CrSe₂ 和 InN 接触形成异质结后的带边的位置如图 4 的右侧所示。由于两个单层依靠范德华力结合, 因此异质结形成后基本保留原来两个单层的带边位置, 包括低于 E_{H_2O/O_2} 的 VBM 电位(由 CrSe₂ 层提供)和高于 E_{H^+/H_2} 的 CBM 电位(由 InN 层提供)。

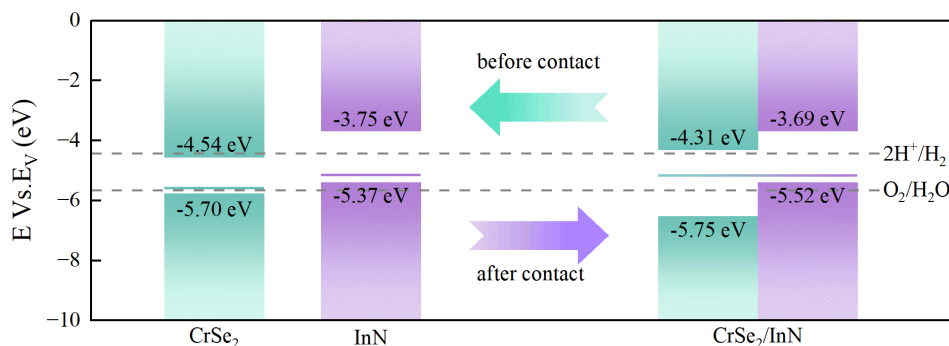


Figure 4. Band edge positions of CrSe₂ and InN before and after contact
图 4. CrSe₂ 和 InN 接触前后的带边位置

功函数是分析两个半导体接触时界面电荷转移的关键因素。因此, 有必要分析界面上的功函数和电荷转移模式, 功函数可由下面的公式表达:

$$\Phi = E_{vac} - E_F \quad (3)$$

其中 E_{vac} 和 E_F 分别表示计算出的真空能级和费米能级的静电势。如图 5(a)和图 5(b)所示，单层 CrSe₂ 和 InN 的功函数分别为 5.41 eV 和 5.16 eV。在 CrSe₂/InN 异质结形成过程中，电子从高能位置迁移到低能位置，即电子从能量较高的 InN 层转移到能量较低的 CrSe₂ 层，导致 InN 侧电子减少，而 CrSe₂ 侧电子增加。这种电子迁移导致负电荷在 CrSe₂ 层积累和正电荷在 InN 层积累，最终导致在界面上形成从 InN 到 CrSe₂ 的内置电场。同时这个过程也导致 InN 侧的费米能级降低，CrSe₂ 侧的费米能级升高，最终在同一能级达到平衡。如图 5(c)所示，形成后的 CrSe₂/InN 异质结的功函数位于两种单层材料的功函数之间(5.34 eV)。

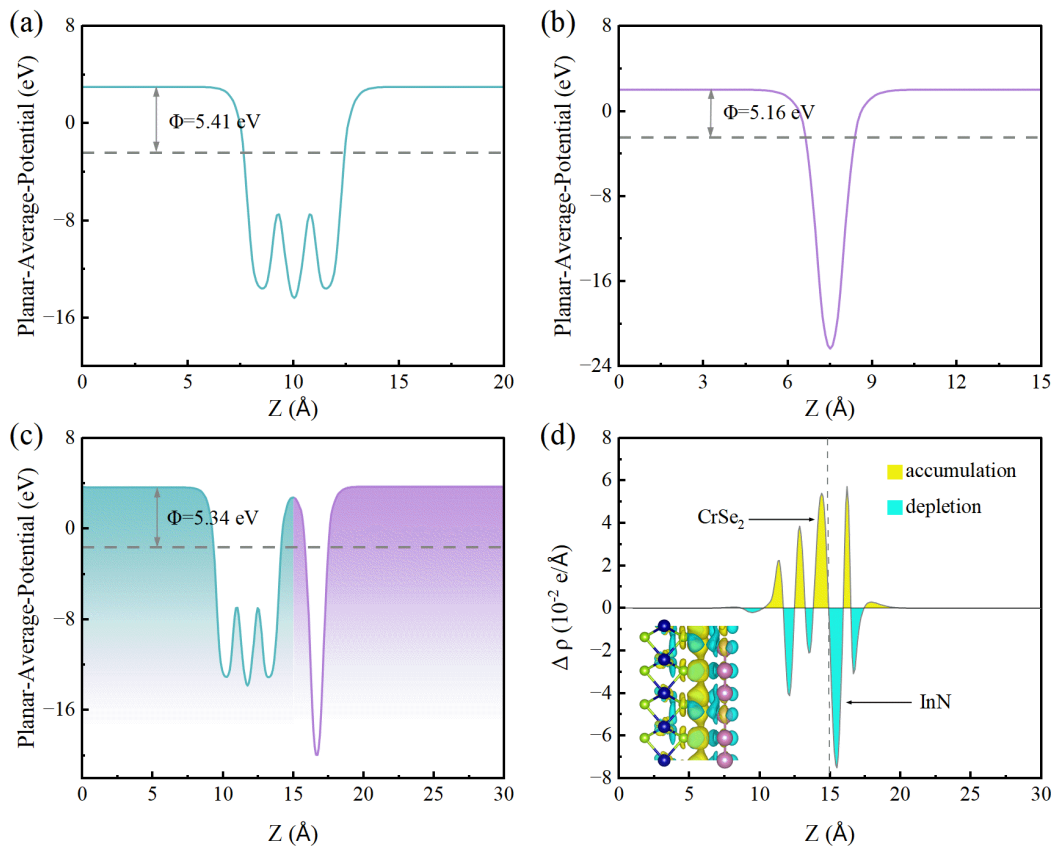


Figure 5. (a) Average electrostatic potential of CrSe₂, (b) InN monolayer, and (c) CrSe₂/InN heterostructure; (d) Differential charge density of the CrSe₂/InN heterostructure along the Z-direction

图 5. (a) CrSe₂、(b) InN 单层及(c) CrSe₂/InN 异质结的平均静电势，(d) CrSe₂/InN 异质结沿 Z 方向的差分电荷密度

CrSe₂/InN 异质结的形成导致了电荷的重新分布，为了更好地了解层间电荷的变化，使用以下公式计算 Z 方向上异质结的平均差分电荷密度：

$$\Delta\rho_b = \rho_{CrSe_2/InN} - \rho_{CrSe_2} - \rho_{InN} \quad (4)$$

其中， $\rho_{CrSe_2/InN}$ 代表 CrSe₂/InN 异质结沿着 Z 方向的电荷密度， ρ_{CrSe_2} 和 ρ_{InN} 分别代表 CrSe₂ 和 InN 单层沿着 Z 方向的电荷密度。CrSe₂/InN 异质结沿着 Z 方向的平面平均差分电荷密度如图 5(d)所示，正值表示电荷积累，负值表示电荷耗尽。可以看出，电荷密度的重新分布主要发生在界面，在 InN 侧表现为电子耗尽，CrSe₂ 侧表现为电子积累。

3.3. 能带对齐和载流子迁移路径

为了确定 CrSe₂/InN 的异质结类型，分析了其能带对齐和激发态载流子转移机制，如图 6 所示。通常，当 CrSe₂ 与 InN 接触时存在三种典型的载流子迁移路径：① 电子从 InN 的 CBM 向 CrSe₂ 的 CBM 跃迁；② 空穴从 CrSe₂ 的 VBM 向 InN 的 VBM 跃迁；③ 由界面耦合引起的电子 - 空穴辐射复合。原则上，路径①和②中的载流子迁移与路径③中的复合之间存在潜在竞争。如果① ③的迁移过程快于②的复合过程，光激发电子和空穴会迅速分离并分别留在 CrSe₂ 的 CBM 中以及 InN 的 VBM，显示出传统的 II 型路径。相比之下，如果路径③复合速率高于路径①和②的迁移速率，则 CrSe₂ 的 CBM 处的光激发电子倾向于与 InN 的 VBM 处的空穴重新组合，从而形成一个 Z 型迁移路径。

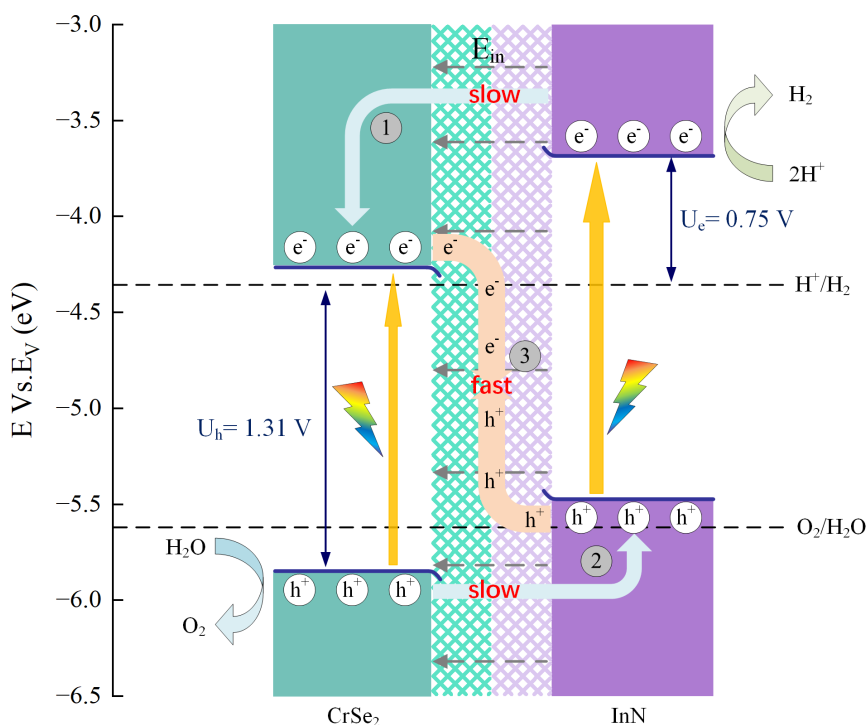


Figure 6. Band alignment and charge carrier migration pathway of the CrSe₂/InN heterostructure
图 6. CrSe₂/InN 异质结能带排列和载流子迁移路径

图 6 显示了 CrSe₂/InN 异质结的能带排列，在 CrSe₂/InN 异质结界面，InN 价带中的空穴被 CrSe₂ 的电子吸引，而导带电子则经历库仑排斥。由于这些潜在效应，导致 InN 界面上的能带向上弯曲。相反，CrSe₂ 侧表现出互补的向下能带弯曲，从而建立了一个独特的势垒。此外，上述分析表明功函数差异导致在异质结界面产生了一个从 InN 指向 CrSe₂ 的内建电场。能带弯曲和内建电场的协同作用抑制了电子沿路径①和③的电荷迁移，同时促进光生电子 - 空穴通过路径②复合，因此当 CrSe₂/InN 异质结产生光生电子空穴对时，由于路径①和③的电荷转移被抑制，路径②的复合过程明显高于路径①和③的电荷迁移过程，从而导致电子在 InN 的 CBM 处的积聚和空穴在 CrSe₂ 的 VBM 处的积聚。内置电场和能带弯曲的协同效应表明，CrSe₂/InN 异质结的载流子迁移遵循直接 Z 型光催化机制。

在光催化分解水的反应过程中，吸收光子能量的光生载流子会产生外部电位，为催化反应的顺利进行提供足够的动力。如前所述，参与催化反应的光生电子和光生空穴主要积聚在 InN 层的 CBM 和 CrSe₂ 层的 VBM 上。因此光生电子外电势为 InN 层的 CBM 和 E_{H^+/H_2} 的电位差，而光生空穴外电势为 CrSe₂ 层

的 VBM 和 E_{H^+/H_2} 的电位差。如图 6 所示, InN 层的 CBM 上的每个光生电子可以为析氢反应提供 0.75 V 的外势, 而 CrSe₂ 层的 VBM 上的每个光生空穴可为析氧反应提供 1.31 V 的外势。

3.4. 光学性质和太阳能制氢效率

光吸收特性是评估材料捕捉和利用光子效率的基本指标和前提, 直接决定光催化性能。由于常规三维光吸收计算方法得到的结果会受到二维模型中真空层厚度的影响, 我们采用了 Wang 等人专为二维材料提出的方法来计算吸收系数。该方法通过归一化光导率的实部对光吸收效率进行近似, 其表达式如下[20]:

$$A(\omega) = \text{Re} \frac{\delta_{2D}(\omega)}{\epsilon_0 \cdot c} \quad (5)$$

其中 $\delta_{2D}(\omega)$ 表示二维光导率, ϵ_0 和 c 分别是真空中的介电函数和光速。如图 7(a)所示, 在可见光范围内, 与 CrSe₂ 和 InN 单层相比, CrSe₂/InN 异质结整体上表现出更优异的可见光响应。该异质结在可见光区间呈现三个光吸收峰, 其中最高峰位于 399 nm 处, 吸收效率为 29.20%, 高于单层 CrSe₂ (28.61%, 386 nm) 和单层 InN (4.32%, 525 nm)。在靠近红外的可见光范围(510 nm~700 nm)内, 异质结继承并超越了 CrSe₂ 单层的吸收优势, 该波段对应较高的太阳能辐照功率, 从而增强了 CrSe₂/InN 异质结捕获高能光子的能力。此外, 在紫外区(200 nm~380 nm), CrSe₂/InN 异质结的光吸收效率总体上高于两个单层。这表明 CrSe₂/InN 异质结能够吸收更多太阳能, 具有更优异的太阳能收集能力。

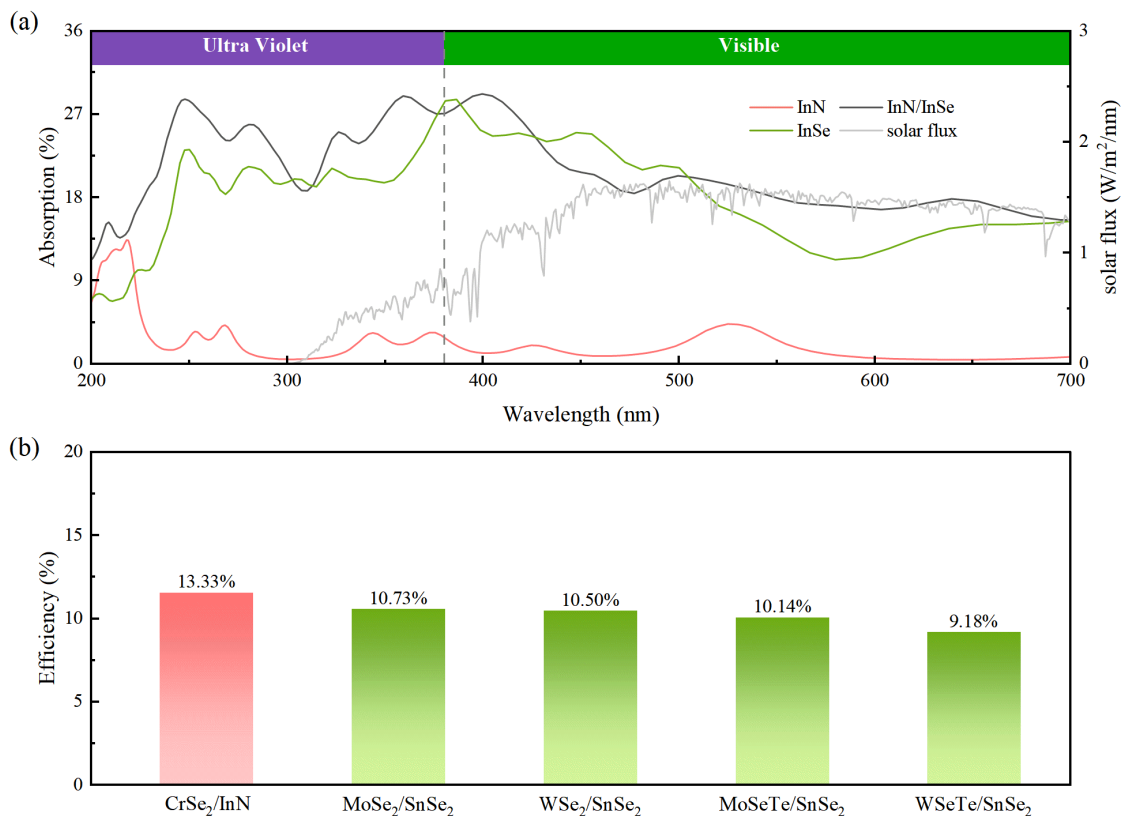


Figure 7. (a) Light absorption efficiency of CrSe₂, InN monolayers, and the InN/CrSe₂ heterostructure; (b) Comparison of solar-to-hydrogen (STH) conversion efficiency of the CrSe₂/InN heterostructure with other direct Z-scheme heterostructures.

图 7. (a) CrSe₂、InN 单层和 InN/CrSe₂ 异质结的光吸收效率; (b) CrSe₂/InN 异质结与其他直接 Z 型异质结的太阳能到氢能(STH)转换效率对比

为了更准确地评估 CrSe₂/InN 异质结在太阳能驱动氢能生产中的潜力,进一步计算了 STH 转换效率。计算公式如下[21]:

$$\eta_{\text{STH}} = 0.5 \times \frac{\Delta G \int_E^{\infty} \frac{P(\hbar\omega)}{\hbar\omega} d(\hbar\omega)}{\int_0^{\infty} P(\hbar\omega) d(\hbar\omega)} \quad (6)$$

其中, ΔG 为 1.23 V 的水分解电位差, $P(\hbar\omega)$ 是光子能量 $\hbar\omega$ 下 AM1.5G 太阳能通量, 系数 0.5 表示考虑到电子-空穴结合过程, 在 Z 型异质结光催化分解水中, 只有一半的光生载流子参与析氢反应。E 是可用于水分解的光子能量, E 取值由以下表达式确定:

$$E = \begin{cases} E_g, & (\chi(\text{H}_2) \geq 0.2, \chi(\text{O}_2) \geq 0.6) \\ E_g + 0.2 - \chi(\text{H}_2), & (\chi(\text{H}_2) \leq 0.2, \chi(\text{O}_2) \geq 0.6) \\ E_g + 0.6 - \chi(\text{O}_2), & (\chi(\text{H}_2) \geq 0.2, \chi(\text{O}_2) \leq 0.6) \\ E_g + 0.8 - \chi(\text{H}_2) - \chi(\text{O}_2), & (\chi(\text{H}_2) \leq 0.2, \chi(\text{O}_2) \leq 0.6) \end{cases} \quad (7)$$

上式中, E_g 代表异质结的带隙值, $\chi(\text{H}_2)$ 与 $\chi(\text{O}_2)$ 分别表示 HER 和 OER 对应的过电势。如图 7(b) 所示, 最终计算得到的 STH 转换效率为 13.33%, 满足商业制氢的最低要求(10%), 也高于其他直接 Z 型光催化剂, 例如 MoSe₂/SnSe₂ (10.73%) [22]、WSe₂/SnSe₂ (10.50%) [22]、MoSeTe/SnSe₂ (10.14%) [23] 和 WSeTe/SnSe₂ (9.18%) [23]。这表明 CrSe₂/InN 异质结是一种具有良好前景的高效光催化剂, 可用于产氢领域。

4. 结论

基于密度泛函理论的第一性原理计算, 本文系统研究了二维 CrSe₂/InN 异质结的电子结构及光催化机理。负的结合能证实了该异质结的热力学稳定性。能带结构分析表明, CrSe₂/InN 异质结呈现出交错的能带排列, 带隙值为 1.21 eV。结合能带排列与内建电场的分析, 确定了该异质结中载流子的迁移路径遵循直接 Z 型机制。在紫外至可见光范围内, 与构成其结构的两个单层相比, CrSe₂/InN 异质结表现出显著增强的光吸收能力。此外, 其 STH 转换效率达 13.33%, 已满足商业制氢的最低要求(10%)。综上所述, CrSe₂/InN 异质结作为一种新型直接 Z 型光催化剂, 有望在太阳能驱动的全解水领域得到广泛应用。

参考文献

- [1] Lianos, P. (2017) Review of Recent Trends in Photoelectrocatalytic Conversion of Solar Energy to Electricity and Hydrogen. *Applied Catalysis B: Environmental*, **210**, 235-254. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2017.03.067>
- [2] Zhou, P., Navid, I.A., Ma, Y., Xiao, Y., Wang, P., Ye, Z., et al. (2023) Solar-To-Hydrogen Efficiency of More than 9% in Photocatalytic Water Splitting. *Nature*, **613**, 66-70. <https://doi.org/10.1038/s41586-022-05399-1>
- [3] Chen, Q., Wang, H., Luan, Q., Duan, R., Cao, X., Fang, Y., et al. (2020) Synergetic Effects of Defects and Acid Sites of 2D-ZnO Photocatalysts on the Photocatalytic Performance. *Journal of Hazardous Materials*, **385**, Article ID: 121527. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121527>
- [4] Matta, S.K., Zhang, C., Jiao, Y., O'Mullane, A. and Du, A. (2018) Versatile Two-Dimensional Silicon Diphosphide (SiP₂) for Photocatalytic Water Splitting. *Nanoscale*, **10**, 6369-6374. <https://doi.org/10.1039/c7nr07994j>
- [5] Xia, Y., Zhang, G., Qian, W., Wang, Y., Cao, X., Zhu, X., et al. (2024) Dimension Dependent Photocatalysis over ZnIn₂S₄: Controllable Synthesis and Catalytic Mechanism Insight. *International Journal of Hydrogen Energy*, **57**, 69-76. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.12.295>
- [6] Niu, X., Bai, X., Zhou, Z. and Wang, J. (2020) Rational Design and Characterization of Direct Z-Scheme Photocatalyst for Overall Water Splitting from Excited State Dynamics Simulations. *ACS Catalysis*, **10**, 1976-1983. <https://doi.org/10.1021/acscatal.9b04753>
- [7] Yuan, Y., Guo, R., Hong, L., Ji, X., Lin, Z., Li, Z., et al. (2021) A Review of Metal Oxide-Based Z-Scheme Heterojunction Photocatalysts: Actualities and Developments. *Materials Today Energy*, **21**, Article ID: 100829.

- <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2021.100829>
- [8] Zhang, R., Zhang, L., Zheng, Q., Gao, P., Zhao, J. and Yang, J. (2018) Direct Z-Scheme Water Splitting Photocatalyst Based on Two-Dimensional Van Der Waals Heterostructures. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **9**, 5419-5424. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcelett.8b02369>
- [9] Cui, H., Li, B., Zhang, Y., Zheng, X., Li, X., Li, Z., *et al.* (2018) Constructing Z-Scheme Based CoWO₄/CdS Photocatalysts with Enhanced Dye Degradation and H₂ Generation Performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, **43**, 18242-18252. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.08.050>
- [10] Jia, L., Ma, N., Shao, P., Ge, Y., Liu, J., Dong, W., *et al.* (2024) Incorporating ReS₂ Nanosheet into ZnIn₂S₄ Nanoflower as Synergistic Z-Scheme Photocatalyst for Highly Effective and Stable Visible-Light-Driven Photocatalytic Hydrogen Evolution and Degradation. *Small*, **20**, Article ID: 2404622. <https://doi.org/10.1002/smll.202404622>
- [11] Liu, L., Xu, L., Wang, Q., Jin, Z., Yang, Y., Li, Y., *et al.* (2026) Visible-Light-Driven Spontaneous Water Splitting in a 2D Janus WSSe/GaO Z-Scheme Heterostructure. *ChemPhysChem*, **27**, e202500893. <https://doi.org/10.1002/cphc.202500893>
- [12] Wang, J., Luan, L., Chen, J., Zhang, Y., Wei, X., Fan, J., *et al.* (2023) PtSe₂/SnS₂ Heterostructure as a Direct Z-Scheme Photocatalyst for Water Decomposition. *Materials Science in Semiconductor Processing*, **155**, Article ID: 107225. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.107225>
- [13] Ozbey, D.H., Kilic, M.E. and Durgun, E. (2023) Promising Anisotropic Mechanical, Electronic, and Charge Transport Properties of 2D Inn Alloys for Photocatalytic Water Splitting. *Applied Surface Science*, **638**, Article ID: 157982. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.157982>
- [14] Zhao, P., Liang, Y., Ma, Y., Huang, B. and Dai, Y. (2019) Janus Chromium Dichalcogenide Monolayers with Low Carrier Recombination for Photocatalytic Overall Water-Splitting under Infrared Light. *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**, 4186-4192. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b11240>
- [15] Hafner, J. (2008) *Ab-Initio* simulations of Materials Using VASP: Density-functional Theory and Beyond. *Journal of Computational Chemistry*, **29**, 2044-2078. <https://doi.org/10.1002/jcc.21057>
- [16] Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996) Efficiency of *Ab-Initio* Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Computational Materials Science*, **6**, 15-50. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- [17] Perdew, J.P., Burke, K. and Ernzerhof, M. (1996) Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, **77**, 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
- [18] Moellmann, J. and Grimme, S. (2014) DFT-D3 Study of Some Molecular Crystals. *The Journal of Physical Chemistry C*, **118**, 7615-7621. <https://doi.org/10.1021/jp501237c>
- [19] Heyd, J., Scuseria, G.E. and Ernzerhof, M. (2003) Hybrid Functionals Based on a Screened Coulomb Potential. *The Journal of Chemical Physics*, **118**, 8207-8215. <https://doi.org/10.1063/1.1564060>
- [20] Wang, V., Xu, N., Liu, J., Tang, G. and Geng, W. (2021) VASPKIT: A User-Friendly Interface Facilitating High-Throughput Computing and Analysis Using VASP Code. *Computer Physics Communications*, **267**, Article ID: 108033. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108033>
- [21] Hua, L., Wang, Y. and Li, Z. (2024) Arsenene/Ti₂CO₂ Heterojunction as a Promising Z-scheme Photocatalyst for Overall Water Splitting. *Advanced Functional Materials*, **34**, Article ID: 2408353. <https://doi.org/10.1002/adfm.202408353>
- [22] Fan, Y., Wang, J. and Zhao, M. (2019) Spontaneous Full Photocatalytic Water Splitting on 2D MoSe₂/SnSe₂ and WSe₂/SnSe₂ vdW Heterostructures. *Nanoscale*, **11**, 14836-14843. <https://doi.org/10.1039/c9nr03469b>
- [23] Wang, L., Shen, T., Liu, J., Fang, Z., Ren, J. and Li, S. (2024) Designing Triple-Layer Photocatalytic Systems Based on Direct Z-Scheme Photocatalytic Systems: Towards Higher Solar-To-Hydrogen Efficiency. *Applied Surface Science*, **669**, Article ID: 160470. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2024.160470>