

新型二维SeC₂O半导体及其光电性质

张雨欣, 董国会, 肖佳韵, 丁仪, 常旭, 胡永红*

湖北科技学院核技术与化学生物学院, 湖北 咸宁

收稿日期: 2026年3月25日; 录用日期: 2026年4月29日; 发布日期: 2026年5月12日

摘要

探索具有独特结构和性质的新型三元二维材料是当前的研究热点, 因其是研究高性能器件的理想候选材料。本文基于密度泛函理论, 从理论上预测了一种新型三元二维SeC₂O晶体。其优异的稳定性已从热力学、力学、分子动力学及高温环境等多方面得到验证。该晶体被证实为带隙2.79 eV的间接带隙半导体。在外加双轴应力(-20%~+20%)作用下, 其电子能带结构呈现丰富变化, 例如带隙在1.60至3.27 eV间连续变化。随后研究了氢化对其电子能带结构的影响: 通过三种氢化方案(包括一种完全氢化和两种半氢化)获得的二维SeC₂O晶体带隙值分别为4.10 eV、2.63 eV和3.33 eV。值得关注的是, 在三种氢化结构中, 有两种结构表现出良好的动力学稳定性, 其中一种半氢化二维SeC₂O晶体被证实为直接带隙半导体。最后对纯相及氢化二维SeC₂O晶体的光学特性进行了研究分析。本研究结果揭示了二维SeC₂O晶体在蓝光波段光电探测器方面具有应用前景。

关键词

SeC₂O单层膜, 三元化合物, 电子特性, 双轴应力, 二维材料

New Two-Dimensional SeC₂O Semiconductor and Its Optoelectronic Properties

Yuxin Zhang, Guohui Dong, Jiayun Xiao, Yi Ding, Xu Chang, Yonghong Hu*

School of Nuclear Technology and Chemistry & Biology, Hubei University of Science and Technology, Xianning Hubei

Received: March 25, 2026; accepted: April 29, 2026; published: May 12, 2026

Abstract

Discovering new ternary two-dimensional (2D) materials with unique structure and properties is a hot research topic, for it is a good candidate for investigating high-performance devices. In this paper,

*通讯作者。

文章引用: 张雨欣, 董国会, 肖佳韵, 丁仪, 常旭, 胡永红. 新型二维 SeC₂O 半导体及其光电性质[J]. 材料科学, 2026, 16(5): 1-11. DOI: 10.12677/ms.2026.165094

a new ternary 2D SeC₂O crystal was theoretically predicted based on density functional theory. Its excellent stability has been verified from multiple aspects, that is, from thermodynamics, mechanics, molecular dynamics, and high-temperature environments. It is found to be an indirect semiconductor with a band gap of 2.79 eV. Under the action of applied biaxial strain (−20%~+20%), its electronic band structure exhibits rich variations. For example, the band gap changes continuously from 1.60 to 3.27 eV. Next, the effect of hydrogenation on its electronic band structure was investigated. The band gap values of the 2D SeC₂O crystals obtained from three hydrogenation schemes (including one full hydrogenation and two semi-hydrogenation) are 4.10, 2.63, and 3.33 eV, respectively. Excitingly, it is found that among the three hydrogenated structures of the 2D SeC₂O crystals, two structures have good kinetic stability, and one semi-hydrogenated 2D SeC₂O crystal is found to be a direct band gap semiconductor. Finally, the optical properties of pure and hydrogenated 2D SeC₂O crystals were studied and analyzed. Our results indicate that the 2D SeC₂O crystals have application prospects in the field of blue light photodetectors.

Keywords

SeC₂O Monolayer, Ternary Compound, Electronic Properties, Biaxial Strain, 2D Materials

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

自石墨烯这一划时代发现以来,过去二十年间二维材料家族快速发展。丰富的结构类型与多元的元素组成催生了新型二维材料及其物理性质的繁荣。二维材料独特的性能与特殊的结构使其成为推动诸多特殊领域突破的理想候选材料[1]。其对一些苛刻特性要求的可满足性,使得二维材料能够应用于多种场景。当前单质与二元二维材料的理论与应用研究正处于高潮期,而三元及四元二维材料的研究仍处于起步阶段,相关研究报告相对较少[2]。

近年来,多类三元二维材料持续受到关注[3]。三元 SnS_{2-x}Se_x 合金纳米片表现出可调的光学特性与电子结构,其高光响应度和良好的光稳定性表明该材料在光电探测器等多种光电器件中具有应用潜力[3]。硒氧化铋(Bi₂O₂Se)被报道为能在空气中稳定存在的二维半导体,因其高迁移率、合适带隙和高介电常数,被认为是下一代高性能计算的候选材料。WSSe 单层被证实是具有 1.63 eV 带隙的直接半导体,其介电函数和吸收光谱的光学响应特性使其在光学气体传感器领域应用前景广阔。InXO (X = Se, Te)单层作为二维拓扑绝缘体,其本征压电性与非平庸能带拓扑共存的特点,在压电器件中具有重要的应用价值。Pd₄S₃Se₃ 单层是间接带隙半导体,新颖的光电特性使其在新功能器件领域应用广泛。通过第一性原理计算研究的 2D XWAZ₂ (X = S, Se, Te; A = Si, Ge; Z = N, P, As)单层稳定性、光催化和光学性质表明,该材料是光催化分解水的理想候选材料。三元二维材料具有调控物理性质的多重自由度,并展现出二元二维材料不具备的特性。该类材料通常分为金属磷硫属化合物、三元过渡金属硫属化合物、过渡金属碳氮化合物和二维三元氧化物等类别。由于其独特的结构与性能,三元二维材料在光电探测器、太阳能电池、能量存储、电催化剂、传感器和场效应晶体管等器件应用研究中展现出巨大潜力,对高性能器件的制备具有重要意义。

近期,二维碳硒化物和锗硒化物成为研究热点,理论预测其具有优异的光电和热电性能[4][5]。相关理论研究结果率先发表,进而指导实验科学家制备合成这类二维材料[6]-[8]。本文报道了一种新型三元二维 SeC₂O 单层材料,其具有良好的稳定性、可调能带隙和强光吸收特性。通过氢化 SeC₂O 单层,我们获

得了两种稳定的二维绝缘体。本研究将丰富三元二维材料体系, 指导实验合成工作, 并深化对二维 SeC_2O 晶体的理解。

2. 计算方法

基于密度泛函理论(DFT), 所有计算均采用平面波基组的第一性原理模拟软件包(VASP)完成。电子结构计算同时采用了广义梯度近似(GGA)下的 Perdew-Burke-Ernzerhof 泛函和 HSE06 提出的杂化泛函。电子波函数平面波展开的截断能设置为 500 eV。在布里渊区(BZ)内, 结构优化采用 $7 \times 7 \times 1$ K 点网格进行积分采样, 电子结构计算采用 $9 \times 9 \times 1$ K 点网格。处理离子-电子相互作用时, 考虑了 C 的 $2s^2 2p^2$ 电子、Se 的 $3d^{10} 4s^2 4p^4$ 电子以及 O 的 $2s^2 2p^4$ 电子。设置 35 Å 的真空层厚度以避免相邻层间任何可能的相互作用。自洽能量收敛精度设定为 10^{-7} eV。所有结构均经弛豫直至原子间最大作用力小于 10^{-5} eV/Å。光学吸收系数 $\alpha(\omega)$ 可通过以下表达式计算:

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{c} \left\{ \left[\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega) \right]^{1/2} - \varepsilon_1(\omega) \right\}^2 \quad (1)$$

3. 结果与讨论

3.1. 几何参数与稳定性特征

完全优化后的 SeC_2O 单分子层(ML)结构如图 1 所示, 相应结构参数列于表 1。 SeC_2O ML 的分子网格结构特征与 CSe ML 相同, 均由周期性八原子环通过碳-碳双键相互连接构成。该单分子层的周期性晶体学参数分别为 $a = 5.65 \text{ \AA}$ 、 $b = 4.03 \text{ \AA}$ 和 $\Delta = 2.92 \text{ \AA}$ 。与 CSe ML 相比, 二维 SeC_2O 的周期性晶格单元在平面内的面积减小了 20%, 在垂直于 X-Y 平面方向上的厚度增加了 23.7%。 SeC_2O ML 中碳-碳双键的键长比 CSe ML 短 0.02 Å, 而碳-硒单键的键长比 CSe ML 长 0.01 Å。与黑磷相比, 二维 SeC_2O 单层晶体更薄。

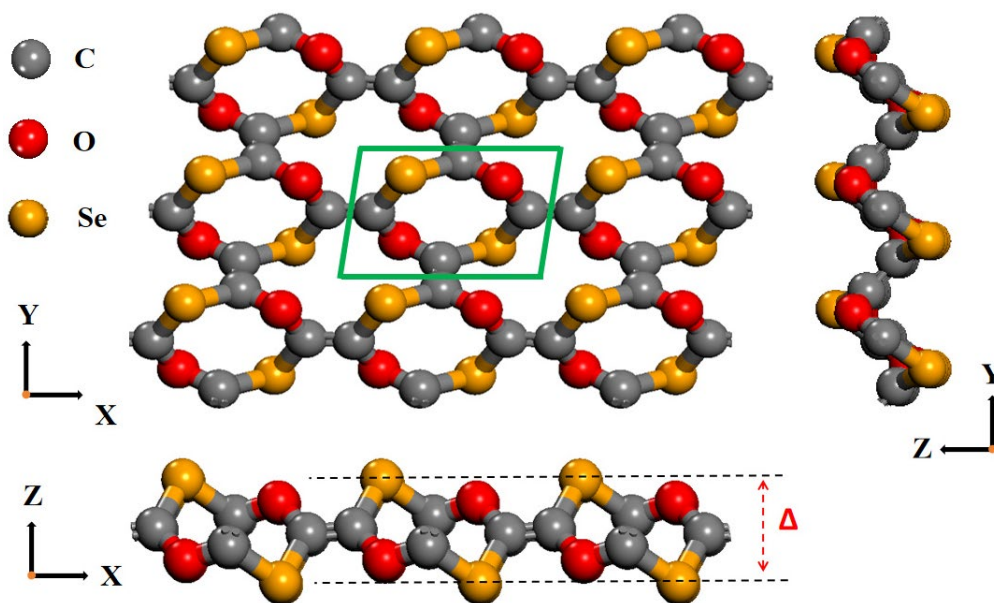


Figure 1. Structures of the SeC_2O ML from the top view (a) and side views (b). The green parallelogram represents the unit cell. The thickness is represented by Δ symbol

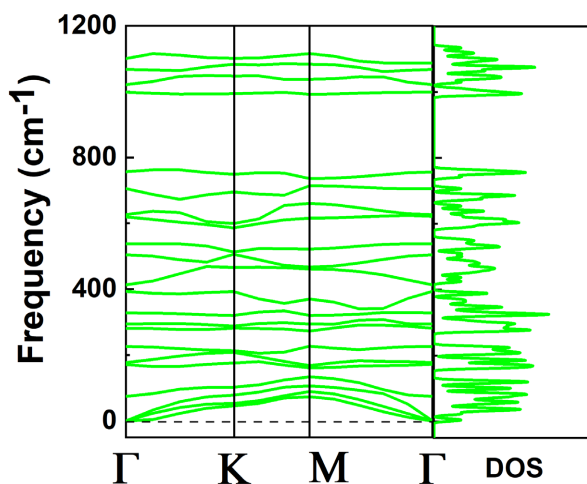
图 1. SeC_2O ML 的俯视结构(a)和侧视结构(b)。绿色平行四边形表示晶胞。厚度用 Δ 符号表示

Table 1. Structure parameter of the SeC₂O ML, black hosphorus, three types of hydrogenated SeC₂O MLs, pure CSe ML, and two types of hydrogenated CSe MLs. The unit of length is Å**表 1.** SeC₂O 单层、black hosphorus、三种氢化 SeC₂O 单层、纯 CSe 单层及两种氢化 CSe 单层的结构参数。长度单位为 Å

	a	b	l_{C-C}	l_{C-Se}	l_{C-O}	l_{C-H}	Δ	E_{coh}	E_g
SeC ₂ O ML	5.65	4.03	1.35 (double)	1.92	1.38	—	2.92	-7.02	2.79
FH-SeC ₂ O ML	5.49	4.40	1.54 (single)	2.01	1.41	1.10	2.96	-6.00	4.10
SH-SeC ₂ O ML (I型)	5.30	4.30	1.38 (double) 1.54 (single)	1.97	1.38	1.10	3.01	-6.42	2.63
SH-SeC ₂ O ML (II型)	5.44	4.32	1.36 (double) 1.53 (single)	1.96	1.40	1.10	3.06	-6.42	3.33
CSe ML	6.15	4.70	1.37 (double)	1.91	—	—	2.36	-5.96	2.31
FH-CSe ML	6.41	4.67	1.53 (single)	1.98	—	1.10	2.50	-5.03	2.78
SH-CSe ML	6.16	5.00	1.36 (double) 1.52 (single)	1.96	—	1.10	2.21	-5.78	2.52
Black hosphorus	3.31	4.38	$l_{P-P} = 2.17$	—	—	—	10.47	-5.23	1.73

二维材料的稳定性是决定其性能和应用的关键因素。内聚能是二维晶体热力学性质的重要参数之一。内聚能为负值表明材料具有热力学稳定性，负结合能的绝对值越大，其热力学稳定性越好。为研究 SeC₂O 单层的热力学稳定性，我们计算了其内聚能。如表 1 所示，其内聚能为-7.02 eV，低于典型二维材料黑磷的内聚能-5.23 eV，表明完全优化后的 SeC₂O 单层具有良好的热力学稳定性。SeC₂O 单层内聚能的绝对值大于 CSe 单层，因此 SeC₂O 单层具有比 CSe 单层更优异的热力学稳定性。

对于二维材料而言，计算和分析声子谱是判断其动力学稳定性的重要手段。通常，具有良好动力学稳定性的二维材料在其声子谱中不会出现虚频。基于广义梯度近似泛函，我们计算了 SeC₂O 单层的声子谱并绘制于图 2 中。从图 2 的声子谱可以看出，所有波矢均未出现低于零的虚振动频率，这说明 SeC₂O 单层具有良好的动力学稳定性。此外，图 2 中的最高频率达到 1115 cm⁻¹，高于 CSe 单层(900 cm⁻¹)和 MoS₂ 单层(473 cm⁻¹)，表明 SeC₂O 单层中硒、碳和氧原子间存在强键合作用。

**Figure 2.** The phonon spectrum of the SeC₂O ML and corresponding density of states
图 2. SeC₂O 单分子层的声子谱及对应态密度

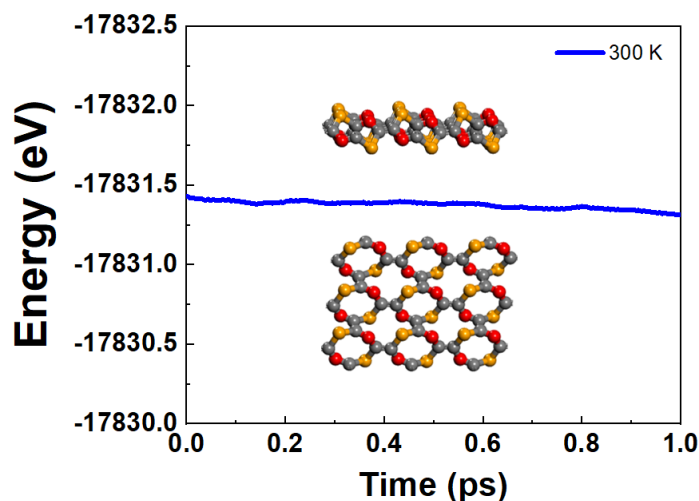


Figure 3. The MD simulation results of the SeC₂O ML under the temperature of 300 K
图 3. SeC₂O ML 在 300 K 温度下的 MD 模拟结果

二维晶体能否在室温或高温下稳定存在，是决定其应用范围大小的关键因素。作为典型二维材料，石墨烯具有极高的电子迁移率和力学性能，因此在高速电子器件和新型高强度材料开发领域展现出巨大潜力。但若无法在室温或高温下稳定存在，其实际应用将受到极大限制。研究二维晶体在不同温度下的稳定性对拓展其应用范围至关重要。为探究其高温稳定性，本研究采用从头算分子动力学模拟方法。为避免镜像层间相互作用的影响，在分子动力学模拟中采用了足够大的超晶胞(72 个原子)。为获得更高计算精度，选择了归一化势函数和 1000 eV 的截断能。将 SeC₂O 单层体系置于 300 K 温度条件下模拟 1 ps，其中模拟时间步长为 1 fs。模拟结果如图 3 所示，图中展示了总能量随模拟时间的变化曲线以及模拟结束时 SeC₂O 单层的结构快照。如图 3 所示，模拟结束时 SeC₂O 单层的最终几何结构整体保持完好，表明该材料在 300K 下能够保持稳定。

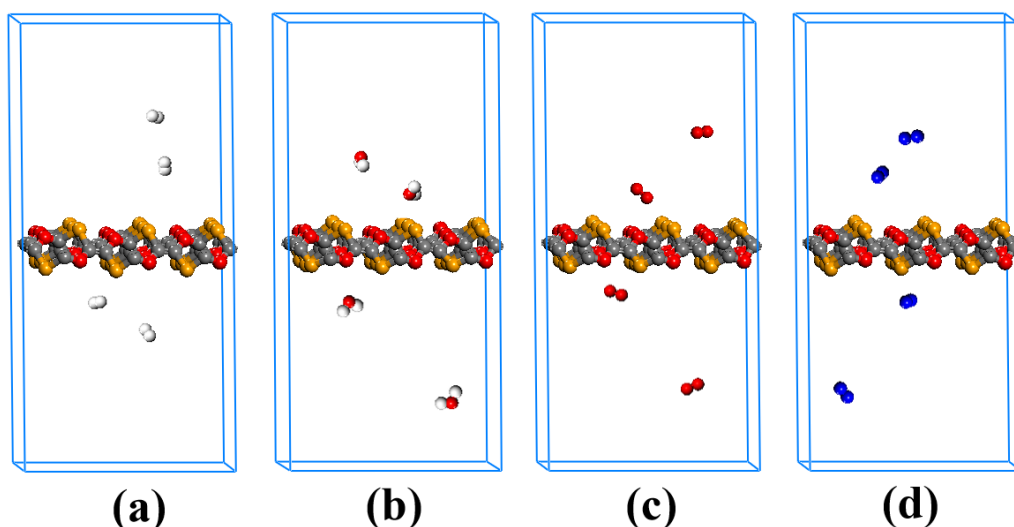


Figure 4. The pictures of the final frame of the SeC₂O MLs at the end of 1 ps for the MD simulation at 300 K with dense gas environments of (a) H₂, (b) H₂O, (c) O₂ and (d) N₂

图 4. 300 K 下分子动力学模拟 1 皮秒结束时 SeC₂O 分子层在(a) H₂、(b) H₂O、(c) O₂ 和(d) N₂ 稠密气体环境中的最终帧图像

二维材料实验室合成中, 环境空气中的化学稳定性至关重要。为验证 SeC_2O 单层材料在室温空气中的化学稳定性, 我们采用高压气体(H_2 、 H_2O 、 O_2 和 N_2)在 300 K 条件下进行了从头算分子动力学模拟。模拟中气体分子数密度为 $3.23 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ 。图 4 展示了 300 K 高压气体(H_2 、 H_2O 、 O_2 和 N_2)环境下, 经过 1 皮秒分子动力学模拟后超晶胞中 SeC_2O 单层材料的终帧快照。该单层材料在 1 皮秒后仍保持结构完整, 表明其在室温空气中具有化学稳定性。基于对多种稳定 SeC_2O 单层材料的研究, 我们预测该材料未来有望在实验室实现合成。

3.2. 电子特性

二维材料的电子能带结构特性决定了其在各类功能器件中的潜在应用。根据带隙尺寸, 二维材料可分为绝缘体、半导体和金属三大类。基于导带最小值(CBM)和价带最大值(VBM)在动量空间中的位置, 二维半导体又可进一步分为直接带隙半导体和间接带隙半导体。为探究二维 SeC_2O 材料的可能应用, 本研究采用 HSE 方法计算了其能带结构与分波投影态密度(如图 5 所示)。结果表明: SeC_2O 单层是一种宽带隙(2.79 eV)间接半导体, 其 CBM 与 VBM 分别位于第一布里渊区的不同动量点。图 5 右侧展示了 SeC_2O 单层的分波态密度分布, 可见 CBM 附近主要由 C 原子的 2p 轨道贡献, 而 VBM 附近则主要由 Se 原子的 4p 轨道与 C 原子的 2p 轨道共同贡献。

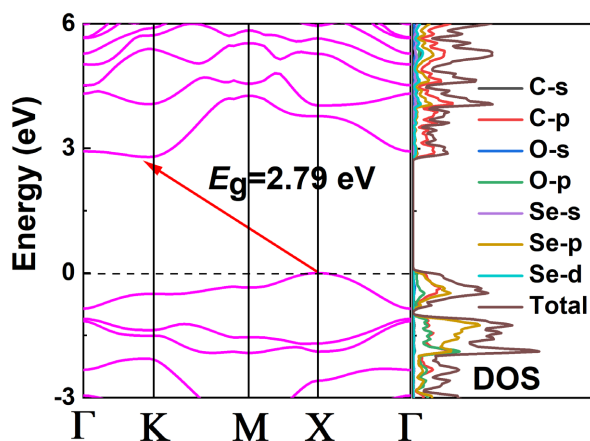


Figure 5. Band structures of SeC_2O ML and partial projected densities of states
图 5. SeC_2O 单分子层的能带结构及部分投影态密度

3.3. 应力能带工程

外部应力能够调控二维晶体的物理性质, 这源于应力对分子晶体几何结构、共价键强度以及电子轨道耦合方式的相应影响。二维材料在外加双轴应力下的带隙变化是决定其应用的重要电子能带结构特性。通过 GGA 和 HSE 方法计算了 SeC_2O 单层在(-20%~+20%)双轴应力范围内的带隙变化, 带隙值如图 6 所示(双轴应力步长为 4%)。相较于先进的 HSE 方法, GGA 方法低估了 SeC_2O 单层的带隙值, HSE 方法的带隙结果更接近实验结果。从图 6 可发现, 随着拉伸双轴应力的增加, SeC_2O 单层的带隙呈近似线性减小; 而在压缩双轴应力下, 其带隙变化相对复杂。根据图 6 数据, SeC_2O 单层在双轴应力下的可调带隙范围为 1.60~3.27 eV (HSE06 方法)。图 7 绘制了不同应力值下 SeC_2O 单层的电子能带结构图, 可见随着拉伸双轴应力的增加, 价带顶(VBM)和导带底(CBM)始终稳定存在于高对称点 X 和 K 处; 而压缩双轴应力则引发了 VBM 和 CBM 在电子结构中位置的复杂变化。总体而言, 双轴应力是调控和拓展其带隙及电子结构特性的有效手段。

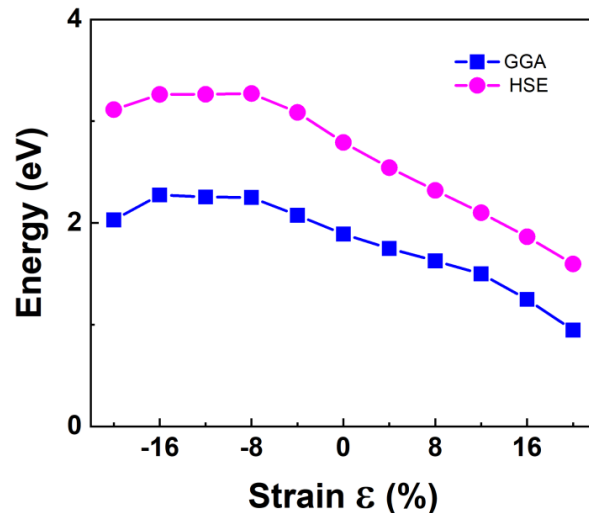


Figure 6. Band gap of the SeC₂O ML with the applied biaxial strain calculated by GGA and HSE methods
图 6. 采用 GGA 和 HSE 方法计算的 SeC₂O 单层材料在双轴应力作用下的带隙

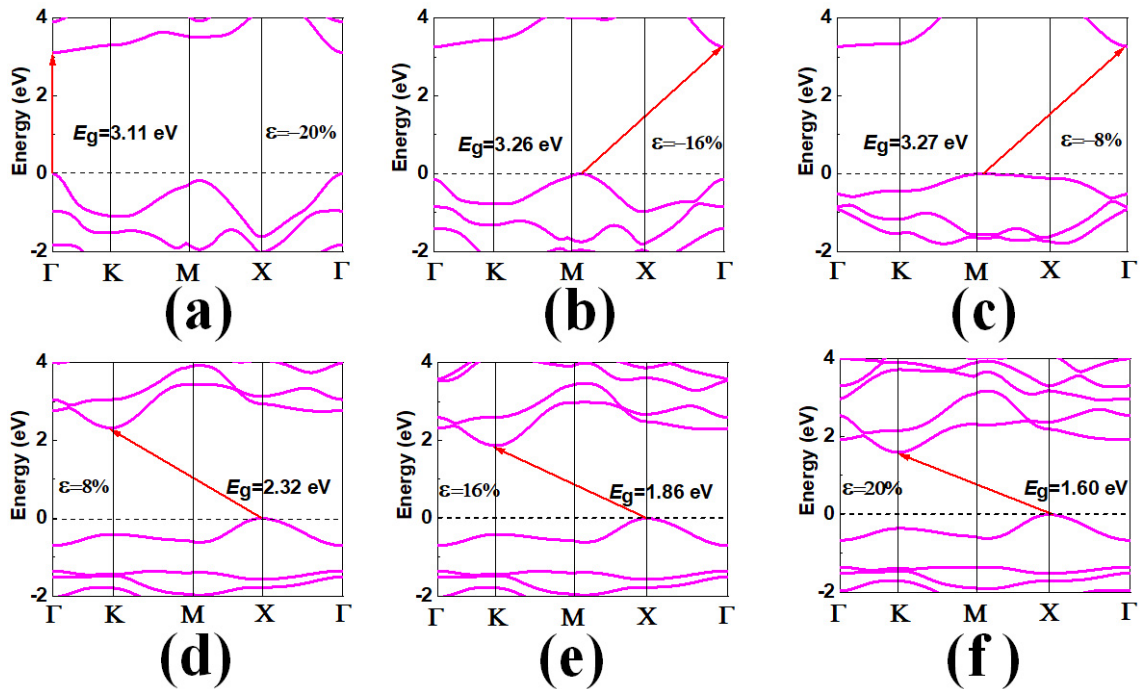


Figure 7. Electronic energy band structure of the SeC₂O ML under different biaxial strains
图 7. 不同双轴应力下 SeC₂O 单分子层的电子能带结构

3.4. 氢化效应

化学改性能够影响二维材料的物理和化学性质，从而获得更优异的器件功能。氢化是最常用的化学改性方法之一。本文研究了三种氢化 SeC₂O 单层的晶格结构、稳定性和电子结构。这些氢化 SeC₂O 单层的优化晶格结构如图 8 所示，几何参数、结合能和带隙值列于表 1。图 8(a)展示了全氢化(FH) SeC₂O 单层的俯视图与侧视图结构，图 8(b)和图 8(c)则呈现了两种不同半氢化(SH) SeC₂O 单层的俯视图与侧视图结构。由表 1 可知，这些 FH 和 SH SeC₂O 单层的晶格参数 a 均小于未氢化 SeC₂O 单层，而其晶格参数 b 和

层高度 Δ 则大于未氢化体系。全氢化 SeC_2O 单层的键长 $l_{\text{C-Se}}$ 较半氢化体系长 0.04 \AA ，而半氢化体系又较未氢化体系长 0.05 \AA 。氢化作用导致碳-碳双键转变为单键。I型和II型半氢化 SeC_2O 单层具有不同的 $l_{\text{C-C}}$ 和 $l_{\text{C-O}}$ 键长，这对应于 SeC_2O 单层在面内的各向异性特征。

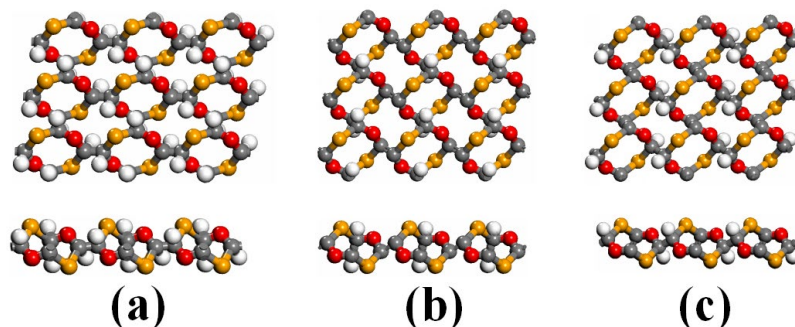


Figure 8. The lattice configurations of (a) FH SeC_2O ML, and (b) (c) two types of SH SeC_2O MLs
图 8. (a) FH SeC_2O 单层和(b) (c) 两种 SH SeC_2O 单层的晶格构型

稳定性是二维材料设计中首要考虑的特性。计算了三种氢化 SeC_2O 单层的内聚能并列于表 1。结果表明，全氢化和半氢化 SeC_2O 单层的结合能均为负值，说明它们具有良好的热稳定性。为进一步研究其动态稳定性，计算了三种氢化 SeC_2O 单层的声子谱如图 9 所示。局部图 9(d)~(f)分别对应整体图 9(a)~(c)。研究发现，全氢化和I型半氢化 SeC_2O 单层的声子谱均未出现虚频，这在图 9(d)和图 9(e)中清晰可见。而对于II型半氢化 SeC_2O 单层，其声子谱在图 9(f)的 Γ 点附近呈现明显负频率，表明其存在动力学不稳定性。因此，最终发现两种稳定二维晶体：全氢化 SeC_2O 单层和I型半氢化 SeC_2O 单层，这两种材料有望在不久的将来通过实验合成。

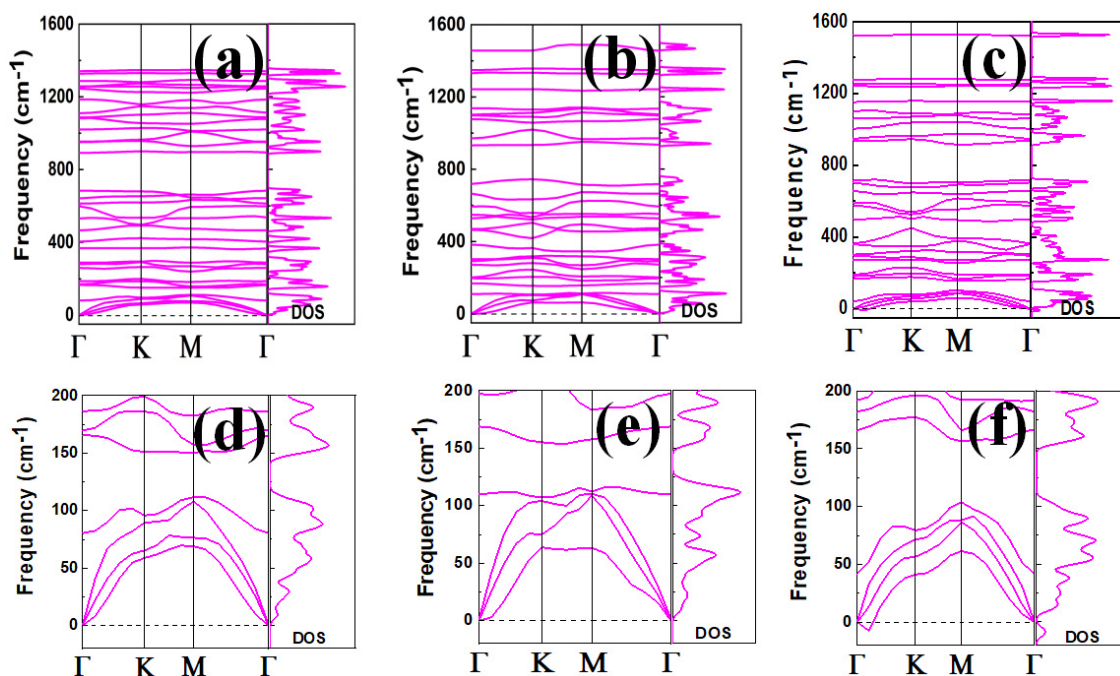


Figure 9. The phonon spectra of (a) FH SeC_2O ML, and (b) (c) two types of SH SeC_2O MLs
图 9. (a) FH SeC_2O 单层和(b) (c) 两种 SH SeC_2O 单层的声子谱

计算得到的氢化 SeC_2O 单层能带结构如图 10 所示。从图 10(a)可以看出, 全氢化 SeC_2O 单层转变为带隙宽度为 4.10 eV 的绝缘体。图 10(b)表明 I 型半氢化 SeC_2O 单层具有 2.63 eV 的适宜直接带隙。与图 5 对比发现, 半氢化使 I 型 SeC_2O 单层的导带底位置从高对称性 K 点转移至 X 点, 但价带顶仍保持在高对称性 X 点, 这种能带结构变化实现了从间接带隙半导体向直接带隙半导体的重要转变。直接带隙半导体具有高吸收率和高放电效率, 因此半氢化 SeC_2O 材料更适用于光电器件领域。图 10(c)中 II 型半氢化 SeC_2O 单层虽呈现 3.33 eV 间接带隙, 但因动力学稳定性较差, 无需进一步讨论。综上所述, 氢化处理可有效调控二维 SeC_2O 晶体的电子能带结构, 包括带隙值和半导体类型的转变。

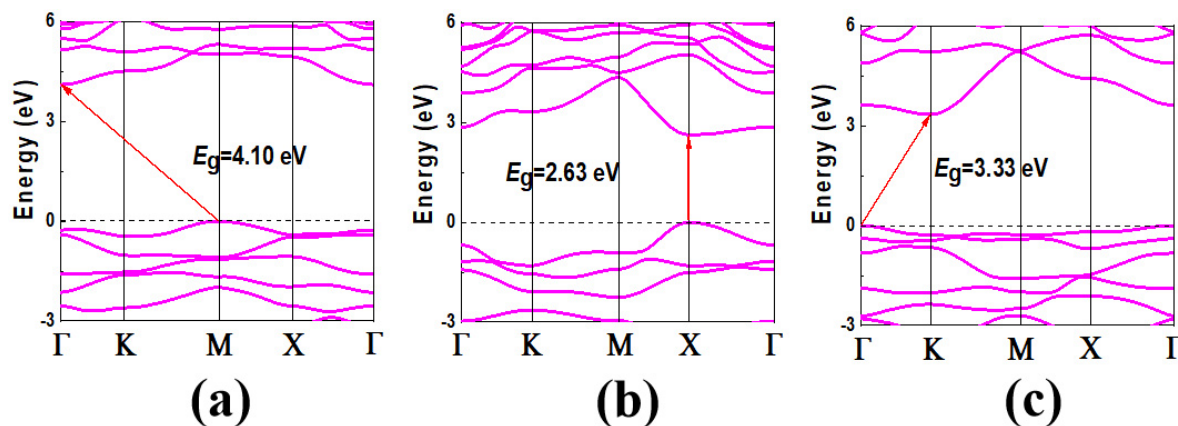


Figure 10. The band structures of (a) FH SeC_2O ML, and (b) (c) two types of SH SeC_2O MLs

图 10. (a) FH SeC_2O 单层和(b) (c) 两种 SH SeC_2O 单层的能带结构

3.5. 光学吸收光谱

二维材料的光学吸收光谱在诸多领域具有广泛应用, 包括光电器件、光伏技术、荧光材料、激光技术和光催化等。特别是, 二维材料的光学吸收光谱可用于设计和优化光电探测器、光纤传感器和光纤激光器等光电器件。根据公式(1), 我们计算并绘制了原始、FH 及 I 型 SH SeC_2O 单分子层的吸收光谱(图 11)。从图 11 可见, 单纯、FH 和 SH SeC_2O 单分子层的吸收光谱分别呈现三个、两个和三个明显峰值, 各吸收峰对应位置列于表 2。纯 SeC_2O 单分子层的最高吸收峰强度为 $4.2 \times 10^4 \text{cm}^{-1}$, 后续讨论中取其三分之一作为有效吸收强度(图 11 中水平虚线所示)。表 2 数据显示: 纯 SeC_2O 单分子层在(91 nm~441 nm)光波范围(对应紫光与紫外光)具有强吸收; FH SeC_2O 单分子层在(97 nm~281 nm)范围(紫外光)呈现强吸收; SH SeC_2O 单分子层则在(96 nm~260 nm) (紫外光)和(382 nm~574 nm) (绿光)区间存在强吸收。其中第一吸收峰对应蓝光, 第二、三吸收峰对应紫外光。基于上述计算结果与分析, 可得出结论: 这些 SeC_2O 单分子层适用于制造蓝绿光及紫外光电器件。

在分析材料光学性质时, 激子效应扮演着至关重要的角色, 尤其是在低维体系中, 电子-空穴之间的库仑相互作用会显著增强激子结合能, 进而主导光吸收、发光及光致发光谱的特征。传统的基于单粒子近似的计算方法(如标准的密度泛函理论(DFT)结合随机相位近似或独立粒子近似)虽然能够描述带间跃迁的基本轮廓, 但本质上忽略了电子-空穴间的相互作用, 因而无法准确捕捉激子共振峰的位置、强度及其对光学谱线的精细调控。更为精确的 GW + BSE 方法虽然能合理描述激子效应, 但其高昂的计算成本限制了其在大尺寸、复杂界面或非晶体系中的广泛应用。本研究由于计算资源的限制, 暂未采用 GW + BSE 方案, 因此当前展示的光学吸收谱主要反映的是单粒子能级间的跃迁信息, 可能低估了材料在低能区的光响应强度。值得注意的是, 激子效应在不同材料体系中的表现差异巨大: 对于具有较大激子结合

能的体系(如过渡金属硫族化合物、有机-无机杂化钙钛矿等),忽略激子效应可能导致对材料光学带隙及吸收边特征的严重误判。鉴于此,在后续工作中,我们将重点引入多体微扰理论框架下的激子效应计算,采用更高效的数值算法来降低计算复杂度,从而实现对材料光学性质的更精确描述。同时,我们也计划结合时间分辨的光谱实验手段(如瞬态吸收光谱),对理论预测进行直接验证与修正,以期建立从微观电子结构到宏观光学响应的完整物理图像。这些努力将有助于深入理解激子效应对材料光学性能的调控机制,并为开发高效率光电器件提供理论指导。

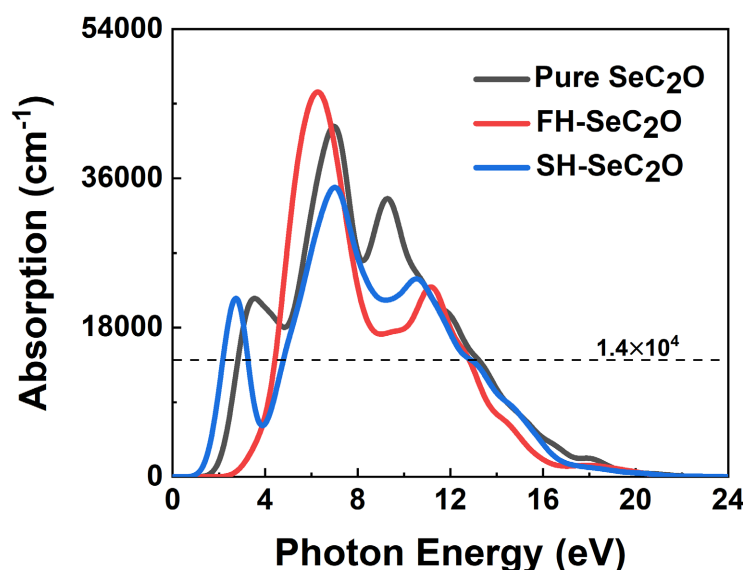


Figure 11. Absorption spectra of pure and two types of hydrogenated SeC_2O MLs
图 11. 纯及两种氢化 SeC_2O 单层的吸收光谱

Table 2. Absorption peak parameters of the three ty types of SeC_2O MLs
表 2. 三类 SeC_2O 单层的吸收峰参数

Material		Peak one	Peak two	Peak three	Valid absorption range
Pure SeC_2O ML	Position	3.53	6.84	9.27	2.81~13.21
	Strength	2.15×10^4	4.22×10^4	3.36×10^4	1.4×10^4
SH SeC_2O ML	Position	—	6.30	11.2	4.41~12.83
	Strength	—	4.64×10^4	2.29×10^4	1.4×10^4
FH SeC_2O ML	Position	2.71	7.00	10.58	2.16~3.25; 4.77~12.95
	Strength	2.15×10^4	3.49×10^4	2.39×10^4	1.4×10^4

4. 结论

我们通过第一性原理计算,报道了一种新型二维 SeC_2O 半导体材料。该材料在热力学、动力学及高温条件等多种稳定性测试中均表现出优异的稳定性。随后,我们深入研究了 SeC_2O 单层的电子能带结构,发现其是一种带隙为 2.79 eV 的宽间接带隙半导体,在功率电子器件、照明设备和光伏发电领域具有潜在应用价值。进一步通过施加-20%~20%的双轴应力调控 SeC_2O 单层的电子结构和能带特征,发现外应力是调节其带隙的有效手段,最大可调范围达 1.60~3.27 eV。此外,系统研究了氢化处理对 SeC_2O 单层的影响:研究发现全氢化 SeC_2O 单层呈绝缘体特性,而 I 型半氢化 SeC_2O 单层为直接带隙半导体,两者均

被证实具有良好的热力学和动力学稳定性。最后对比分析了纯相、全氢化及半氢化 SeC_2O 单层的吸收特性，发现三者均对紫外光有强吸收，其中I型半氢化 SeC_2O 单层还对蓝绿光区域表现出显著吸收特性，预示其在光电器件中的应用潜力。本研究拓展了三元二维材料体系， SeC_2O 二维材料的出现将为蓝绿光波段的光电探测器的设计与开发提供新方向。

基金项目

湖北省大学生创新创业训练计划项目(S202410927011)。

参考文献

- [1] Fei, Z., Zhao, W., Palomaki, T.A., Sun, B., Miller, M.K., Zhao, Z., *et al.* (2018) Ferroelectric Switching of a Two-Dimensional Metal. *Nature*, 560, 336-339. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0336-3>
- [2] Wang, L., Hu, P., Long, Y., Liu, Z. and He, X. (2017) Recent Advances in Ternary Two-Dimensional Materials: Synthesis, Properties and Applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 5, 22855-22876. <https://doi.org/10.1039/c7ta06971e>
- [3] Yu, J., Xu, C., Li, Y., Zhou, F., Chen, X., Hu, P., *et al.* (2015) Ternary $\text{SnS}_{2-x}\text{Se}_x$ Alloys Nanosheets and Nanosheet Assemblies with Tunable Chemical Compositions and Band Gaps for Photodetector Applications. *Scientific Reports*, 5, Article No. 17109. <https://doi.org/10.1038/srep17109>
- [4] Hu, Y., Zhang, S., Sun, S., Xie, M., Cai, B. and Zeng, H. (2015) Gese Monolayer Semiconductor with Tunable Direct Band Gap and Small Carrier Effective Mass. *Applied Physics Letters*, 107, Article 122107. <https://doi.org/10.1063/1.4931459>
- [5] Zhao, H., Mao, Y., Mao, X., Shi, X., Xu, C., Wang, C., *et al.* (2017) Band Structure and Photoelectric Characterization of Gese Monolayers. *Advanced Functional Materials*, 28, Article 1704855. <https://doi.org/10.1002/adfm.201704855>
- [6] Yuan, Z., Qian, L., Hu, Y., Mao, C., Zhou, X., Wei, G., *et al.* (2025) Designing a Novel Two-Dimensional CTe Semiconductor with Tunable Electronic and Optical Properties by Strain and Chemical Functionalization. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 188, Article 109195. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2024.109195>
- [7] Gong, H., Hu, Y., Huang, H., Mao, C., Peng, X., Qian, L., *et al.* (2024) Novel Two-Dimensional CS Semiconductor with Tunable Fantastic Electronic and Optical Properties. *Physica B: Condensed Matter*, 691, Article 416312. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.416312>
- [8] Dong, X., Mao, C., Xue, L., Qian, L., Hu Y. and Huang, H. (2023) Designing a Novel 2D CSe Crystal for Future Photoelectric Device. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25, 26073-26080.