

二维半导体SeSC₂晶体结构、稳定性和物理性质的理论研究

董国会, 张雨欣, 肖佳韵, 常旭, 丁仪, 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4月6日; 录用日期: 2026年5月6日; 发布日期: 2026年5月18日

摘要

新型二维晶体及其新特性为纳米电子器件的发展提供了动力, 因此寻找它们是一项持续的基础研究重点。通过第一性原理计算发现, 二维三元材料SeSC₂是一种稳定的间接带隙半导体, 其带隙宽度为2.43 eV。声子谱和分子动力学模拟等结果证实了其优异的稳定性。通过施加-3%~3%的双轴应力, 其电子能带结构可在0.78~3.09 eV范围内调节。化学修饰也是改变SeSC₂薄膜能带结构的有效方法, 氢化、氟化和氯化处理的SeSC₂薄膜分别具有3.49 eV、2.57 eV和1.89 eV的间接带隙。此外, 三元SeSC₂薄膜和化学修饰的SeSC₂薄膜展现出新颖的光学特性。这些独特性质有望在未来纳米光电领域获得应用。

关键词

SeSC₂单层, 三元化合物, 电子特性, 双轴应力, 二维材料

Theoretical Study on Crystal Structure, Stability and Physical Properties of Two-Dimensional Semiconductor SeSC₂

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

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

Received: April 6, 2026; accepted: May 6, 2026; published: May 18, 2026

Abstract

Novel two-dimensional crystals and their new properties provide impetus for the development of

*通讯作者。

文章引用: 董国会, 张雨欣, 肖佳韵, 常旭, 丁仪, 胡永红. 二维半导体 SeSC₂ 晶体结构、稳定性和物理性质的理论研究[J]. 材料科学, 2026, 16(5): 131-140. DOI: 10.12677/ms.2026.165107

nanoelectronic devices, therefore, the search for them is a fundamental ongoing research focus. Here, the two-dimensional ternary material SeSC_2 was found to be a stable semiconductor with an indirect band gap of 2.43 eV by first principle calculation. Its excellent stability is confirmed through the phonon spectrum and molecular dynamics simulation, etc. Through applying external small biaxial strain ($-3\% \sim 3\%$), its electronic band structure can be tuned in the range of 0.78~3.09 eV. Chemical modification is also a useful method to change the band structure of the SeSC_2 sheet. The hydrogenated, fluoridated, and chlorinated SeSC_2 sheets are found to have indirect band gaps of 3.49 eV, 2.57 eV and 1.89 eV, respectively. Moreover, the ternary SeSC_2 sheet and chemically modified SeSC_2 sheets exhibit novel optical properties. These unique properties are promising for applications in future nano-optoelectronic fields.

Keywords

SeSC_2 Sheet, Ternary Compound, Electronic Properties, Biaxial Strain, 2D Material

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

石墨烯的发现为二维材料的科学发展提供了巨大推动力,其数量正逐年呈爆发式增长[1]。二维半导体独特的几何结构和性质使其在纳米电子器件领域的应用前景十分广阔。新型二维半导体及其独特特性为新型光电器件的设计制备与性能提升提供了可能[2]。典型二维半导体在晶体管、柔性电子、光电器件、太阳能电池、光电探测器和发光二极管等领域展现出广泛的应用潜力。各类新一代纳米电子器件对材料性能提出严苛且多样化的需求,这促使人们不断开发新型材料[3]。过去二十年间,二维半导体材料的数量持续增长,这些材料推动了光电子学、生物医学、催化和能量存储等领域的重大进展[4]。

二维半导体在此根据所含元素数量简单分为三类:单质半导体、双元素半导体及多元素半导体。单质材料种类较少,迄今相关研究已趋于成熟完善[5]。代表性单质二维半导体包括硅烯、锗烯、锗锡烯、磷烯、碲烯、铋烯以及硼烯。因其适宜的带隙与高载流子迁移率,这些材料大多成为光电器件领域极具潜力的候选材料。此外,通过化学修饰、掺杂和外部应力等手段可轻松调控单质半导体的物理性质。目前实验室成功合成的单质二维半导体材料屈指可数。双元素半导体材料已引起广泛关注,其典型代表有二硫化钼、硒化锗和二硫化钨[6]。新型二维半导体元素的探索正如火如荼开展。例如学者近期报道了多种具有新颖结构和电子特性的二维半导体(如 $\alpha\text{-CSe}$ 、 $\beta\text{-CSe}$ 和 h-CSe),这些材料通过应力和化学功能化可产生新颖且可调控的光电特性,被认为在光电器件领域具有巨大的应用前景[7]。

近年来,关于多元二维半导体的研究报告激增。由于其种类繁多且结构更为复杂,这些材料更有可能满足新一代电子设备多样化的材料特性需求[8]。代表性的三元二维半导体包括三元过渡金属硫属化合物、过渡金属碳氮化物以及三元二维氧化物。Janus型 a-TeSSe 单层被报道是一种窄间接带隙半导体,具有优异的光吸收系数、卓越的垂直压电性和超高 ZT 值,表明其在光电、压电和热电应用中具有潜力。 BMX_2 ($\text{M} = \text{Ga, In}; \text{X} = \text{S, Se}$)三元硫属化合物作为间接半导体,具有高面内和面外压电系数,是压电器件的理想候选材料。 ZnX_2Z_4 ($\text{X} = \text{In, Al, Ga}; \text{Z} = \text{S, Se, Te}$)作为新型半导体,具备理想的间接带隙、高电子迁移率、超低晶格热导率和高 ZT 值,有望成为光电和热电材料的候选者。对 p-SiXY_4 ($\text{X} = \text{Si, C, Ge}; \text{Y} = \text{C, B, N}$)五元材料稳定性、电子和光学性质的系统研究表明,六种 p-SiXY_4 单层具有优异稳定性与适合光催化水分解氧化还原电位的间接带隙。 XCrY_3 ($\text{X} = \text{Al, Ga, In}; \text{Y} = \text{S, Se, Te}$)单层在环境条件下稳定,其居里

温度接近甚至超过室温。特别是 GaCrSe_3 和 InCrTe_3 单层具有合适的直接带隙，因此二维 XCrY_3 单层有望应用于自旋电子器件。新型 β 相 MX_2N_4 ($\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$; $\text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$) 单层半导体被证实具有结构稳定性、弹性特性和载流子迁移率优势，是场效应晶体管应用的潜在候选材料。硼碳氮化物(BCN)作为新一代二维材料，其特性已在催化、电化学储能、能源生成、纳米电子学和力学纳米传感器等领域实现多项应用。尽管已有大量关于新型多元二维半导体晶体及其多样化应用的报道，但这些发现仅揭示了多元二维半导体家族潜力的冰山一角。替代掺杂是从二元二维半导体获得三元二维半导体材料最简单且最有效的途径。

近年来，二维碳硫属化合物成为研究热点，若干由碳与VI族元素构成的二元二维单层材料已被理论预测具有优异的稳定性和光电性能[9]-[13]。本文报道了一种具有优异稳定性与光电性能的二元二维 SeSC_2 材料。通过化学修饰，我们从三元二维 SeSC_2 半导体中获得了三种绝缘体材料，并通过声子谱计算证实了这些材料具有良好的动力学稳定性。本研究将推动新型三元二维碳硫属化合物的开发，并深化对二维 SeSC_2 晶体的理解。

2. 计算方法

基于密度泛函理论(DFT)，采用第一性原理模拟软件包(VASP)对二维 SeSC_2 单层的晶格结构进行了完全优化。利用 VASP 软件包开展了电子结构和光学性质的第一性原理计算。研究同时采用广义梯度近似(GGA)和 Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06)方法计算二维 SeSC_2 单层的电子性质。平面波截断能设置为 600 eV，弛豫计算采用 $9 \times 9 \times 1$ 的 k 点网格，电子性质计算采用 $13 \times 13 \times 1$ 的 k 点网格。为确定热力学稳定性，基于平衡结构采用 $3 \times 3 \times 1$ 超胞进行了第一性原理分子动力学(AIMD)模拟和声子谱计算。同时，也通过 $3 \times 3 \times 1$ 超胞的 AIMD 模拟验证化学稳定性。计算中总能量收敛至小于 10^{-6} eV，最大原子力小于 0.001 eV/Å。沿 z 轴方向设置 35 Å 的真空层以避免相互作用。

3. 结果与讨论

3.1. 几何结构

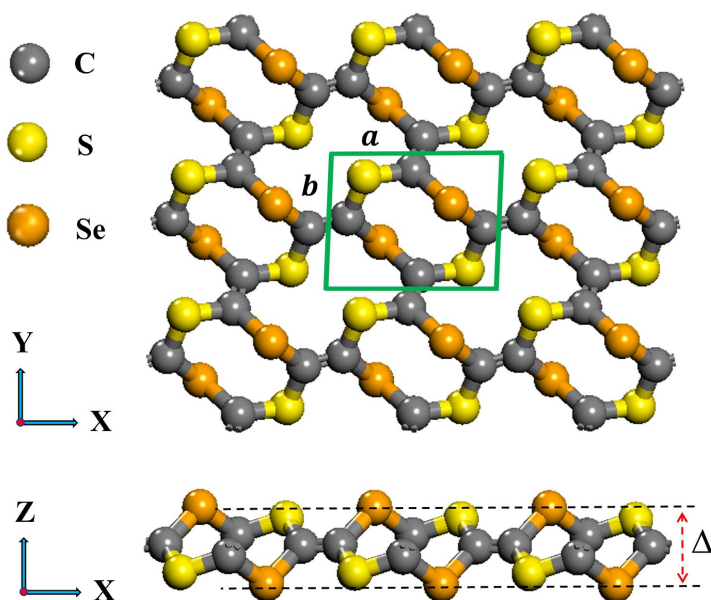


Figure 1. Geometric structures of the SeSC_2 sheet: (a) Top view; (b) Side view
图 1. SeSC_2 单层结构的几何构型: (a) 俯视图; (b) 侧视图

图 1 展示了完全优化后的 SeSC₂ 单层几何结构。二维 SeSC₂ 晶体、全氢化、全氟化和全氯化 SeSC₂ 单层以及二维 CSe 晶体的优化晶格参数均列于表 1。SeSC₂ 单层的晶格参数为 $a = 5.93 \text{ \AA}$ 、 $b = 4.66 \text{ \AA}$ ，键长 $l_{C-S} = 1.76 \text{ \AA}$ 和 $l_{C-C} = 1.36 \text{ \AA}$ 。SeSC₂ 单层的 l_{C-C} 键长比 CSe 单层短 1.4%， l_{C-S} 键长略短于 CS 单层。SeSC₂ 单层的 l_{C-S} 键长为 1.76 \AA ，较 l_{C-Se} 键长短 8.3%。SeSC₂ 单层的晶格参数 a 和 b 均小于 CSe 单层，而 b 轴晶格参数大于 CS 单层。SeSC₂ 单层的层厚度 Δ 略小于 CS 单层，但比 CSe 单层厚 10%。这些结果表明，SeSC₂、CSe 和 CS 单层中的原子相互作用强度存在细微差异。SeSC₂ 单层的内聚能略高于 CSe 和 CS 单层，说明三者均具有良好的热稳定性。

Table 1. The lattice parameter of the SeSC₂ sheet and their fully hydrogenated, fluorinated, and chlorinated products, along with comparative data for other 2D materials

表 1. SeSC₂ 单层及其完全氢化、氟化和氯化产物的晶格参数，以及其他二维材料的对比数据

	a	b	l_{C-C}	l_{C-S}	l_{C-Se}	l_{C-X}	Δ	E_{coh}	E_g
SeSC ₂ sheet	5.93	4.66	1.36 (double)	1.76	1.92	—	2.60	-5.95	2.43
H-SeSC ₂ sheet	6.14	4.50	1.52 (single)	1.82	2.02	1.10	2.88	-5.26	3.49
F-SeSC ₂ sheet	5.97	5.34	1.58 (single)	1.82	2.06	1.39	3.47	-5.30	2.57
Cl-SeSC ₂ sheet	6.09	5.72	1.54 (single)	1.82	2.11	1.80	4.12	-4.73	1.89
CS sheet	6.04	3.73	1.37 (double)	1.77	—	—	2.64	-6.08	2.09
CSe sheet	6.15	4.70	1.38 (double)	—	1.91	—	2.36	-5.96	2.31

3.2. 稳定性

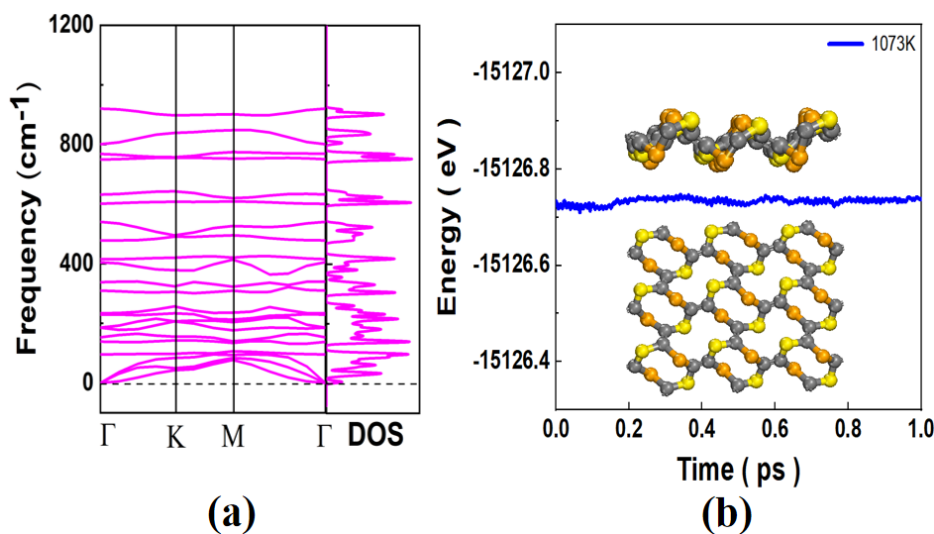


Figure 2. (a) The phonon spectra calculated with the primitive cell of SeSC₂ sheet and corresponding density of states; (b) The total energy of the $3 \times 3 \times 1$ supercell of the SeSC₂ sheet under 1073 K as a function of the time and the final frame

图 2. (a) 基于 SeSC₂ 单层原胞计算得到的声子谱及对应态密度；(b) 1073 K 温度下 SeSC₂ 单层 $3 \times 3 \times 1$ 超胞总能量随时间变化曲线及最终构型

材料结构的稳定性是判断二维材料能否通过实验合成的关键。除上述热稳定性考量外，还需进一步考虑材料的机械稳定性、动力学稳定性及高温稳定性。为判断 SeSC₂ 单层的动态稳定性，计算了其声子谱并绘制于图 2(a)中。从图 2(a)可见不存在虚频(零点以下的声子能带色散)，表明 SeSC₂ 单层具有优异的

动态稳定性。随后通过不同温度下的从头算分子动力学(MD)模拟验证其高温稳定性。MD 模拟采用包含 72 个原子的大尺寸 SeSC_2 超胞, 使用模守恒赝势, 平面波截断能设为 800 eV。在高于 1073 K (如 1273 K 和 1173 K) 温度下, SeSC_2 单层中的化学键会在约 0.5 ps 模拟时间内断裂。研究发现, SeSC_2 单层可耐受 1073 K 高温长达 1 ps 而不发生结构破坏。图 2(b)展示了 SeSC_2 单层总能量随模拟时间的变化曲线, 其构型在 1 ps 内保持完整, 表明该材料可在 1073 K 高温下稳定存在。与 1273 K 下的 CS 单层及 3273 K 下的 CSe 单层相比, SeSC_2 单层的耐受温度较低, 但其最高耐受温度仍远高于室温。因此, SeSC_2 单层有望在未来实验室实验中合成, 并成为高温环境下光电器件的候选材料。对于二维材料, 机械稳定性的判据为是否满足以下条件: $C_{11} > C_{12}$ 且 $C_{66} > 0$ 。通过第一性原理计算获得 SeSC_2 单层的弹性常数为 $C_{11} = 211.13$ GPa、 $C_{12} = 7.15$ GPa、 $C_{66} = 53.08$ GPa, 明显满足上述稳定性条件。

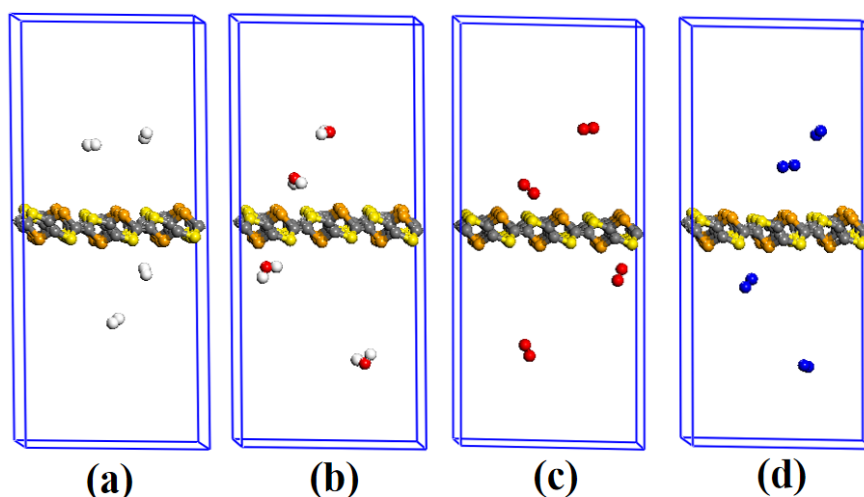


Figure 3. The snapshots of the final frame of the SeSC_2 sheets at the end of 1 ps for the MD simulation at 300 K with high pressure gas environments: (a) H_2 ; (b) H_2O ; (c) O_2 ; (d) N_2

图 3. 300 K 高压气体环境下分子动力学模拟 1 皮秒结束时 SeSC_2 薄片最终帧快照: (a) H_2 ; (b) H_2O ; (c) O_2 ; (d) N_2

二维材料实验室合成的关键在于其在常压空气中的化学稳定性。为验证 SeSC_2 单层在室温空气中的化学稳定性, 研究团队采用高压气体(H_2 、 H_2O 、 O_2 和 N_2) 在 300 K 条件下进行了相应的从头算分子动力学模拟。模拟过程中气体分子数密度为 $3.94 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ 。图 3 展示了 300 K 高压气体(H_2 、 H_2O 、 O_2 和 N_2) 分子动力学模拟 1 皮秒末超晶胞中 SeSC_2 单层的终帧结构快照。 SeSC_2 单层在 1 皮秒后仍保持完整结构, 证明其在室温空气中具有化学稳定性。基于对 SeSC_2 单层多重稳定性的研究, 我们预测该材料未来有望在实验室实现合成。

3.3. 电子结构

二维材料的新基态结构不可避免地会引发独特的电子结构特性。正是这些独特的电子结构特性决定了它们在未来电子器件领域的特殊应用方向, 例如电子器件、光电器件和能量存储领域。通过采用最新的 HSE 方法计算了 SeSC_2 单层的电子能带结构, 如图 4 所示。图 3(a)显示, 在 HSE 水平下获得了 2.43 eV 的间接带隙。因此, 可发现 SeSC_2 单层是一种具有合适带隙的间接半导体。图 4(a)同时绘制了 SeSC_2 单层的投影态密度(PDOS)。从图 4(a)右侧可见, 在导带底(CBM)附近, C-p 轨道贡献最大; 在价带顶(VBM)附近, S-p 轨道贡献最大, 而 C-p 轨道和 O-p 轨道起到次要贡献作用。图 4(b)展示了 SeSC_2 单层在 G 点的 VBM 和 CBM, 可明显看出 p 轨道是主要贡献者。

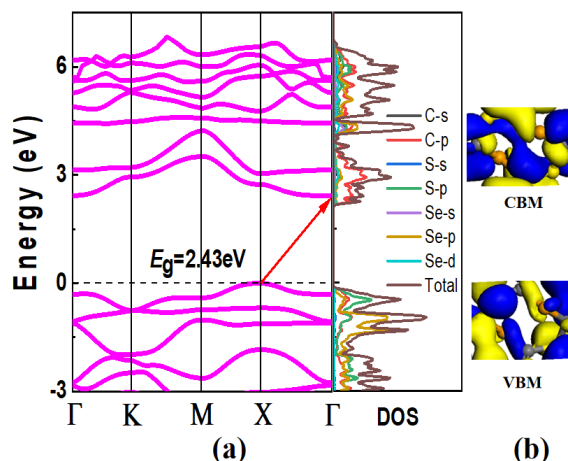


Figure 4. (a) Energy band structure and PDOS of the SeSC₂ sheet; (b) The isosurfaces ($0.05 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$) of the CBM and the VBM at different K-points

图 4. (a) SeSC₂ 单层的能带结构与投影态密度(PDOS); (b) 不同 K 点处导带底(CBM)与价带顶(VBM)的等值面($0.05 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$)

3.4. 应力能带调控

二维材料的能带工程具有重要意义，因为其物理性质对结构变化高度敏感。通过施加外部应力，二维材料的几何结构必然发生改变，进而引起物理性质的变化。本研究通过施加双轴应力对 SeSC₂ 单层的能带进行调控。图 5 展示了采用 GGA 和 HSE 两种计算方法得到的 SeSC₂ 单层带隙随双轴应力的变化规律。GGA 方法通常会低估晶体带隙值，而 HSE 方法是当前获取精确可靠的材料带隙值的最先进方法。从图 5 可以发现，虽然两种方法计算的带隙值存在差异，但 SeSC₂ 单层带隙值随双轴应力大小的变化规律完全一致。后续将选取 HSE 方法计算出的双轴应力下 SeSC₂ 带隙值进行讨论。研究发现：随着拉伸双轴应力的增大，SeSC₂ 单层的带隙逐渐减小；而在压缩应力作用下，带隙随应力幅度的增加呈现先增大后减小的趋势。在 HSE 水平下，SeSC₂ 单层在 -2% 双轴应力时达到最大带隙 3.09 eV，在 3% 双轴应力时获得最小带隙 0.78 eV。这种宽范围的带隙调控意味着 SeSC₂ 单层可能具有新颖而广泛的应用前景。图 6 绘制了六种不同双轴应力下 SeSC₂ 单层的详细能带结构图，结果显示价带顶(VBM)和导带底(CBM)的位置随双轴应力的增加而变化。但值得注意的是，随着双轴应力的改变，VBM 和 CBM 在动量空间中的位置始终不重合。这表明双轴应力不会改变 SeSC₂ 单层的能带隙类型。

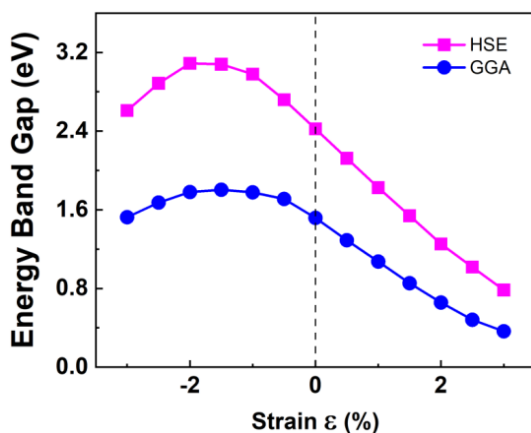


Figure 5. Band gaps of the 2D SeSC₂ sheet as functions of the biaxial strain

图 5. 二维 SeSC₂ 单层带隙随双轴应力的变化关系

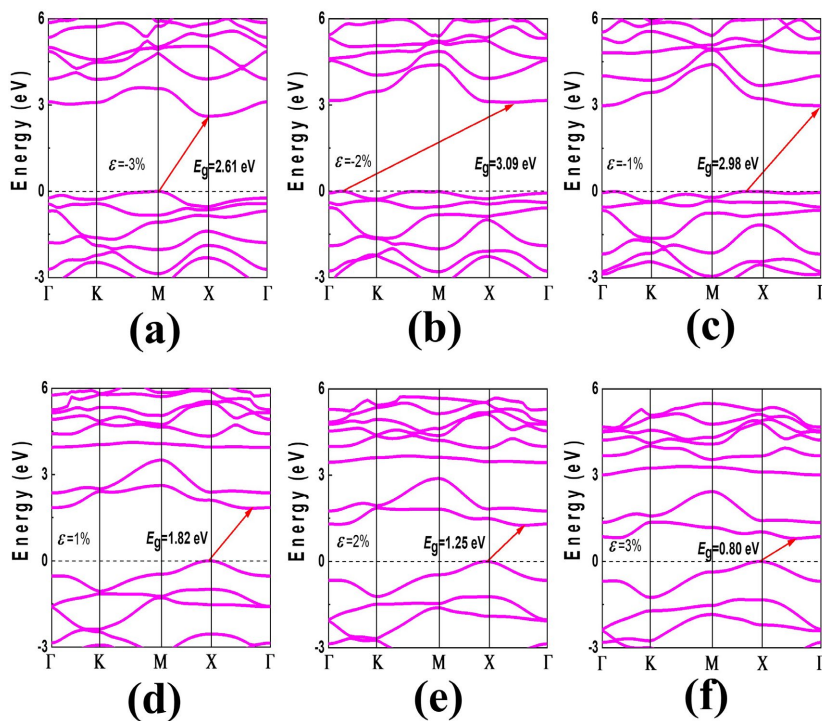


Figure 6. Band structures of the 2D SeSC₂ sheets under the biaxial strains at HSE level
图 6. 双轴应力下二维 SeSC₂ 薄片在 HSE 能级的能带结构

3.5. 化学修饰

氢化和卤化是二维材料化学改性的两种重要方法，也是调控二维材料电子结构特性的有效途径。SeSC₂ 单层中碳碳双键的存在使其能够通过氢化和卤化进行化学改性，且不会破坏除碳碳双键外的其他化学键。经过几何优化后的氢化、氟化和氯化 SeSC₂ 单层的晶格构型如图 7 所示，晶格参数和对应键长列于表 1。由表 1 可知，氢化 SeSC₂ 单层中除 b 外的晶格参数 (a 和 b) 在化学改性后均有所增加，这是因为化学改性过程中伴随碳碳双键向碳碳单键的转变，而单键键长更长。由于元素特性差异，碳原子与氢、氟、氯原子之间的键长存在明显区别。二维 SeSC₂ 晶体的单层厚度 Δ 、二维 SeSC₂ 晶体中的键长 l_{C-S} 和 l_{C-Se} 在化学改性后均增加。这些氢化、氟化和氯化 SeSC₂ 单层的内聚能值虽有所提升但仍为负值，且与纯 CS 和 CSe 单层的内聚能值相近，表明它们均具有良好的热稳定性。

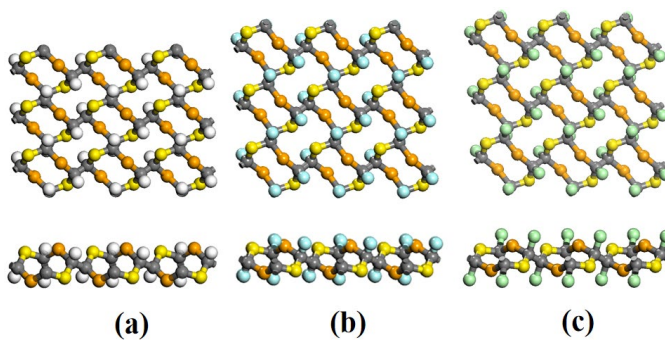


Figure 7. Optimized $3 \times 3 \times 1$ super lattices of the hydrogenated (a), fluorinated (b), and chlorinated (c) SeSC₂ sheets from top view and side view

图 7. 氢化(a)、氟化(b)和氯化(c)的 SeSC₂ 单层优化 $3 \times 3 \times 1$ 超晶格结构俯视图和侧视图

为进一步研究这些完全氢化、氟化和氯化 SeSC_2 薄片的动态稳定性, 我们计算了它们的声子谱并绘制于图 8。有趣的是, 完全氢化 SeSC_2 薄片的声子谱未出现虚频, 这表明该四元二维材料具有优异的动力学稳定性。而完全氟化和氯化 SeSC_2 薄片的声子谱均显示明显虚频, 表明其动态稳定性较差。通过 HSE 方法计算得到这些氢化、氟化和氯化 SeSC_2 薄片的能带结构(如图 9 所示)。从图 9 可以发现, 氢化、氟化和氯化 SeSC_2 薄片分别呈现 3.49 eV、2.57 eV 和 1.89 eV 的宽间接带隙。与氢化和氟化 SeSC_2 薄片相比, 完全氯化 SeSC_2 薄片表现出相对较小的间接带隙(1.89 eV)。因此可以得出结论: 化学改性是调控二维 SeSC_2 晶体电子能带结构的有效方法。

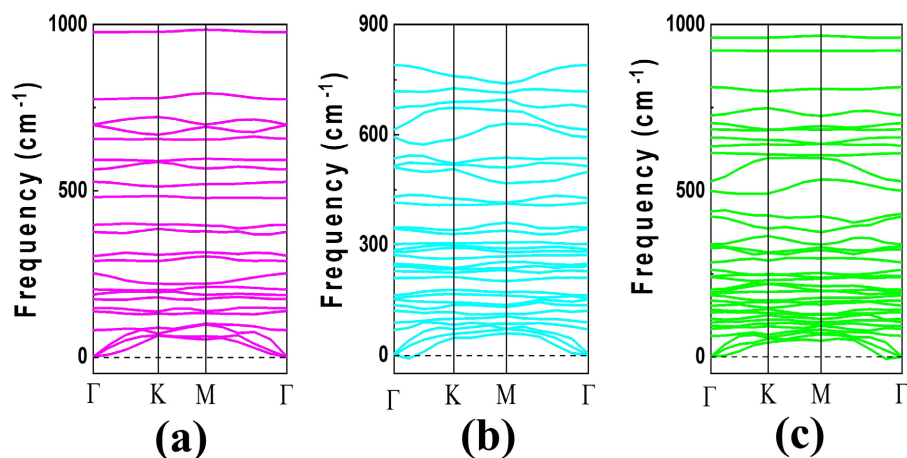


Figure 8. The phonon spectra of the fully hydrogenated (a), fluoridated (b), and chlorinated (c) SeSC_2 sheets
图 8. 全氢化(a)、氟化(b)和氯化(c) SeSC_2 单层的声子谱

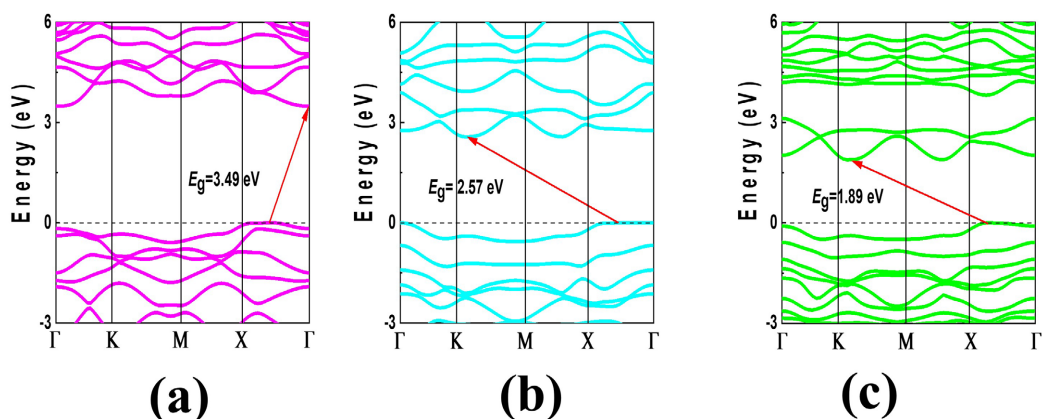


Figure 9. The band structures of the fully hydrogenated (a), fluoridated (b), and chlorinated (c) SeSC_2 sheets
图 9. 完全氢化(a)、氟化(b)和氯化(c)的 SeSC_2 单层的能带结构

3.6. 光学性质

基于电子能带结构可进一步计算二维材料的光学性质。二维材料的吸收系数等光学参数通常为判断其在电子器件中的应用潜力提供有用信息。为探究这些 SeSC_2 薄膜的潜在应用, 基于吸收系数研究了其在偏振光下的光吸收性能。图 10 绘制了这些 SeSC_2 薄膜的吸收光谱。如图所示, 纯的与氯化的 SeSC_2 薄膜的吸收光谱呈现四个吸收峰, 氢化 SeSC_2 薄膜有两个吸收峰, 氟化 SeSC_2 薄膜则显示三个吸收峰。表 2 列出了这些纯净及化学改性 SeSC_2 薄膜吸收峰的参数。纯净 SeSC_2 薄膜在强度超过 10^4 cm^{-1} 时的吸收光

谱覆盖 2.33 eV 至 11.60 eV 能量范围, 对应波长范围从 532 nm (绿光)到 107 nm (紫外光)。氢化 SeSC₂ 薄膜在强度超过 10⁴ cm⁻¹时的吸收光谱覆盖 3.03 eV 至 11.33 eV 能量范围, 对应波长从 409 nm (紫光)到 109 nm (紫外光)。氟化 SeSC₂ 薄膜在强度超过 10⁴ cm⁻¹时的吸收光谱覆盖 2.4 eV 至 11.32 eV 能量范围, 对应波长从 516 nm (绿光)到 110 nm (紫外光)。氯化 SeSC₂ 薄膜在强度超过 10⁴ cm⁻¹时的吸收光谱覆盖 2.13 eV 至 10.30 eV 能量范围, 对应波长从 582 nm (橙光)到 120 nm (紫外光)。研究发现, 氢化、氟化和氯化处理分别使吸收波长范围缩小了 0.97 eV、0.35 eV 和 1.1 eV。综上所述, 这些 SeSC₂ 薄膜在可见光区的橙光与绿光波段以及紫外光区均表现出强吸收特性, 在橙光和紫外光光学器件与仪器中具有潜在应用价值, 因此是紫外光电器件的重要二维基底材料。

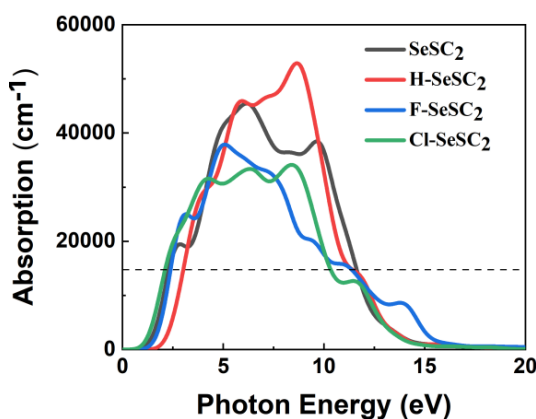


Figure 10. Absorption spectra of the pure, hydrogenated, fluorinated, and chlorinated SeSC₂ sheets (H-, F-, and Cl-SeSC₂)
图 10. 纯化、氢化、氟化和氯化 SeSC₂ 单层(H-, F-和 Cl-SeSC₂)的吸收光谱

Table 2. The peak parameters of the absorption spectra of the pure SeSC₂ sheets and the fully hydrogenated, fluorinated, and chlorinated SeSC₂ sheets

表 2. 纯 SeSC₂ 单层及完全氢化、氟化和氯化 SeSC₂ 单层的吸收光谱峰值参数

Configuration		Peak one	Peak two	Peak three	Peak four	Photon energy range
SeSC ₂ sheet	Position	2.86	6.16	8.21	9.64	2.33~11.60
	Strength	1.95 × 10 ⁴	4.54 × 10 ⁴	3.64 × 10 ⁴	3.85 × 10 ⁴	
H-C ₂ SSe sheet	Position	—	5.94	8.25	—	3.03~11.33
	Strength	—	4.59 × 10 ⁴	5.29 × 10 ⁴	—	
F-C ₂ SSe sheet	Position	3.15	5.07	—	13.78	2.40~11.32
	Strength	2.50 × 10 ⁴	3.79 × 10 ⁴	—	0.86 × 10 ⁴	
Cl-C ₂ SSe sheet	Position	4.26	6.31	8.39	11.45	2.13~10.30
	Strength	3.16 × 10 ⁴	3.33 × 10 ⁴	3.41 × 10 ⁴	1.26 × 10 ⁴	

4. 结论

综上所述, 本研究基于密度泛函理论计算, 对二维 SeSC₂ 半导体及其三种化学修饰形态(全氢化、全氟化和全氯化 SeSC₂ 单层)进行了详细研究。二维 SeSC₂ 晶体被证明具有热力学和动力学稳定性, 通过从头算分子动力学模拟验证了该材料在高达 1073 K 温度下的稳定性, 并证实其在室温空气中具有优异的化学稳定性。研究结果表明, 二维 SeSC₂ 晶体具备实验制备的可行性。SeSC₂ 单层是一种具有 2.43 eV 适中

带隙的间接带隙半导体, 具备良好的光利用效率。通过双轴应力调控研究发现: 随着双轴压缩应力增大, 带隙可增至 3.09 eV; 而拉伸应力会使带隙单调递减, 但所有应力条件下均保持间接带隙特性。通过对 SeSC₂ 单层进行典型化学修饰获得三种二维晶体, 声子谱计算表明仅全氢化 SeSC₂ 单层具有优异的动力学稳定性。最后通过详细计算对比吸收光谱发现, 纯 SeSC₂ 及其化学修饰单层在可见光区的橙光波段和紫外光区均呈现强吸收特性, 这些材料有望成为橙光以下可见光波段和紫外光电器件的理想衬底材料。本研究为二维材料家族增添了新成员, 研究成果将推动这类二维 SeSC₂ 晶体的实验合成进程。

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] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., *et al.* (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**, 666-669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
- [2] Tan, C., Cao, X., Wu, X., He, Q., Yang, J., Zhang, X., *et al.* (2017) Recent Advances in Ultrathin Two-Dimensional Nanomaterials. *Chemical Reviews*, **117**, 6225-6331. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00558>
- [3] Cheng, Z., Cao, R., Wei, K., Yao, Y., Liu, X., Kang, J., *et al.* (2021) 2D Materials Enabled Next-Generation Integrated Optoelectronics: From Fabrication to Applications. *Advanced Science*, **8**, Article ID: 2003834. <https://doi.org/10.1002/advs.202003834>
- [4] Li, J., Ding, Y., Zhang, D. and Zhou, P. (2019) Photodetectors Based on Two-Dimensional Materials and Their Van Der Waals Heterostructures. *Acta Physico-Chimica Sinica*, **35**, 1058-1077. <https://doi.org/10.3866/pku.whxb201812020>
- [5] Qu, G., Xia, T., Zhou, W., Zhang, X., Zhang, H., Hu, L., *et al.* (2020) Property-Activity Relationship of Black Phosphorus at the Nano-Bio Interface: From Molecules to Organisms. *Chemical Reviews*, **120**, 2288-2346. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00445>
- [6] Kumar, A., Mirzaei, A., Lee, M.H., Ghahremani, Z., Kim, T., Kim, J., *et al.* (2024) Strategic Review of Gas Sensing Enhancement Ways of 2D Tungsten Disulfide/Selenide-Based Chemiresistive Sensors: Decoration and Composite. *Journal of Materials Chemistry A*, **12**, 3771-3806. <https://doi.org/10.1039/d3ta06461a>
- [7] Lv, B., Hu, X., Liu, X., Zhang, Z., Song, J., Luo, Z., *et al.* (2022) Thermal Transport Properties of Novel Two-Dimensional CSe. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **22**, 17833-17841. <https://doi.org/10.1039/d0cp02298e>
- [8] Peng, Y., Tian, H., Yao, M., Li, X., Tang, X., Jiao, J., *et al.* (2024) First-Principles Prediction of High Carrier Mobility for β -Phase MX₂N₄ (M = Mo, W; X = Si, Ge) Monolayers. *Scientific Reports*, **14**, Article No. 22548. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-74256-0>
- [9] Dong, X., Mao, C., Qian, L., Hu, Y., Xue, L. and Huang, H. (2023) Designing Novel Monolayer and Multilayer H-CSe Crystals with Tunable Photoelectric Properties. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **25**, 26073-26080. <https://doi.org/10.1039/d3cp02560h>
- [10] Yuan, Z., Ding, Y., Huang, H., Liu, Z., Qian, L., Laref, A., *et al.* (2025) Semi-Chlorinated h-CSe as a Stable 2D Semiconductor with Novel Optoelectronic Properties for Nano Device Applications. *Materials Today Communications*, **45**, Article ID: 112224. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2025.112224>
- [11] 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 ID: 416312. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.416312>
- [12] Zhou, X., Qian, L., Huang, H., Yuan, Z. and Hu, Y. (2024) Hydrogenated h-CSe as a Promising 2D Direct Semiconductor for Optoelectronic Applications. *Physica B: Condensed Matter*, **691**, Article ID: 416179. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2024.416179>
- [13] 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 ID: 109195. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2024.109195>