**Resumen**

Este trabajo se centra en el estudio de las estructuras y propiedades del fósforo negro y su subestructura monocapa denominada fosforeno. El estudio comprende tres grandes apartados: un estudio de la formación del fósforo rojo a partir del fósforo blanco para entender el mecanismo de polimerización, un estudio de las propiedades electrónicas del fósforo negro y sus subestructuras formadas por capas de fosforeno, y la reactividad del fosforeno frente a diferentes especies atómicas. Para el primer apartado se utilizó el paquete de química cuántica ORCA para simular moléculas pequeñas. Para los otros dos apartados se utilizó el paquete de cálculo de estructura electrónica y modelado de materiales a escala nanométrica Quantum Espresso.

Para entender la polimerización de las moléculas de fósforo se optimizaron por separado las estructuras de P4 y de los aniones. A continuación, se situaron los aniones y la molécula de P4 a una distancia cercana, y se optimizó el sistema, lo que permitió observar las interacciones entre las moléculas y cuantificar las cargas para cada átomo en las nuevas estructuras obtenidas. El mecanismo de formación se basa en la propagación de cargas: los átomos de fósforo cargados negativamente activan nuevas moléculas de fósforo blanco, uniéndose entre sí, lo que extiende la estructura y forma fósforo rojo.

El estudio de la estructura cristalina del fósforo negro nos permitió corroborar y reproducir resultados reportados en la literatura; al reducir el número de capas del material, el band gap aumenta. Esto se logró mediante la optimización de las estructuras, cálculos de SCF y cálculos de bandas. Además, se observó el comportamiento de diferentes pseudopotenciales para determinar cuáles producen valores de band gap e información estructural más cercanos a los experimentales.

Por último, se estudiaron las interacciones del fosforeno con átomos de Litio, Berilio, Aluminio, Flúor y Cloro. Los cálculos de optimización nuevamente ayudaron a obtener las estructuras más estables de las cuales podemos extraer información como la energía de adsorción. El análisis de carga de Bader nos permitió entender cómo se distribuyen las cargas electrónicas cuando los átomos son adsorbidos a la superficie del fosforeno y cómo impacta en la densidad electrónica del fosforeno. El berilio mostró una fuerte capacidad de donar carga al fosforeno, mientras que el flúor produce el efecto opuesto, siendo el halógeno el que retira la mayor carga.

**Palabras Clave:**

Fosforo negro, fosforeno, semiconductor, teoría de la funcional de la densidad, materiales 2D.

**Abstract**

This work is focused on the study of the structures and properties of black phosphorus and its monolayer substructure called phosphorene. The study comprises three main sections: a study of the formation of red phosphorus starting from white phosphorus to understand the polymerization mechanism, a study of the electronic properties of black phosphorus and its substructures formed by phosphorene layers, and the reactivity of phosphorene towards different atomic species. For the first section, the quantum chemistry package ORCA was used to simulate small molecules. For the other two sections, the electronic structure calculation and nanoscale material modeling package Quantum Espresso was used.

To understand the polymerization of phosphorus molecules, the structures of P4 and the anions were optimized separately. Then, the anions and the P4 molecule were placed at a close distance, and the system was optimized, which allowed observing the interactions between the molecules and quantifying the charges for each atom in the new structures obtained. The mechanism of formation is based on charge propagation: the negatively charged phosphorus atoms activate new white phosphorus molecules, linking between each other, which extends the structure and forms red phosphorus.

The study of the crystal structure of black phosphorus allowed us to corroborate and reproduce results reported in the literature; by reducing the number of layers of the material, the band gap increases. This was achieved by optimizing the structures, SCF calculations, and band calculations. In addition, the behavior of different pseudopotentials was observed to determine which ones produce band gap values ​​and structural information closest to the experimental ones.

Finally, the interactions of phosphorene with lithium, beryllium, aluminum, fluorine, and chlorine atoms were studied. The optimization calculations again helped to obtain the most stable structures from which we can extract information such as adsorption energy. The Bader charge analysis allowed us to understand how the electronic charges are distributed when the atoms are adsorbed to the phosphorene surface and how it impacts the electron density of phosphorene. Beryllium showed the strongest capacity to donate charge to the phosphorene, while fluorine produces the opposite effect, being the halogen that withdraws the highest charge.

**Keywords:**

Black phosphorus, phosphorene, semiconductor, density functional theory, 2D materials