

ESTUDIO DE LOS EFECTOS DE LA DISPERSIÓN DE MUCHOS CUERPOS EN LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELECTRÓNICAS Y ÓPTICAS DEL FOSFORENO.

Armando A. Morín-Martínez¹, Alba Vargas-Caamal¹, Filiberto Ortiz-Chi², José Luis Cabellos¹ y Gabriel Merino¹

¹Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN - Mérida. Antigua Carr. a Progreso km 6, Cordemex, 97310 Mérida, Yuc., México.

² Cátedra CONACYT, División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco; México

e-mail: armando.morin@cinvestav.mx, jose.cabellos@cinvestav.mx, gmerino@cinvestav.mx

El fosforeno tiene características únicas que lo distinguen entre los demás materiales 2D como el grafeno,¹ tales como las propiedades optoelectrónicas, estructura tipo acordeón o corrugada (ver Fig. 1), entre otras. Las interacciones intercapas son determinantes en el comportamiento de los sistemas e influyen en las propiedades del sistema; una distancia promedio de 3.30 Å denota un espacio regulado por interacciones de van der Waals, las cuales brindan estabilidad a la geometría. En este trabajo presentaremos cálculos a primeros principios de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del fosforeno azul³ y negro² desde la monocapa hasta varias capas incluyendo los métodos de dispersión de dos cuerpos⁴ y dispersión de muchos cuerpos.⁵ También presentamos un análisis de las interacciones no covalentes en las bicapas. Los cálculos se realizan en el marco de la teoría del funcional de la densidad, tal y como está implementada en el código computacional VASP.⁶

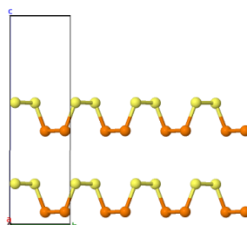


Fig 1. Vista lateral de la bicapa del fosforeno negro.

1. Novoselov, K.; Geim, A.K.; Morozov, S.V.; Jiang, D.; Zhang, Y; Dubonos, S.V.; Grigorieva, I.V. *Science*, **2004**, 306, 666-669.
2. Liu, H.; Neal, A.; Zhu, Z.; Luo, Z.; Xu, X.; Tománek, D.; Ye, P. *ACS Nano*, **2014**, 8, 4033-4041
3. Zhu, Z.; Tománek, D. *Phys. Rev. Lett.* **2014**, 112.
4. Tkatchenko, A.; Scheffler, M. *Phys. Rev. Lett.* **2009**, 108.
5. Ambrosetti, A.; Reilly, A.M.; DiStasio, R.A.; Tkatchenko, A. *J. Chem. Phys.* **2014**, 140.
6. Kresse, G.; Furthmüller, J. *Comput. Mat. Sci.* **1996**, 6