اخیرا گزارش سنتز فسفرن، که فسفر سیاه تک‌لایه یا چندلایه، است، افق جدید و جذابی در حوزه‌ی مواد دوبعدی ایجاد کرده است. این ماده‌ی دوبعدی جذاب، ویژگی‌های بسیار خوبی بمنظور کاربرد در نانوافزاره‌ها به نمایش میگذارد. در این پژوهش، با استفاده از محاسبات مبتنی‌برنظریه، جذب ملکول‌های گازNO ، NH3، CO، و H2S بر روی تک‌لایه‌ی فسفرن مورد مطالعه قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که عملکرد حسگری فسفرن بسیار قابل قبول است و توانایی بالقوه‌ای در قابلیت تفکیک گازها داراست. تک‌لایه‌ی فسفرن بیشترین حساسیت را به گازهای مبتنی بر اتم N و بخصوص ملکول NO نشان می‌دهد. ما مکان‌های بهینه‌ی جذب هر یک از گازها را بدست می‌آوریم و مکانیزم حس گازها توسط لایه‌ی دوبعدی را شناسایی می‌کنیم که همان نظریه‌ی انتقال بار بین ملکول گاز و لایه در توجیه مکانیزم حسگرهای گاز است. در این مکانیزم هرچه انتقال بار بین ملکول و لایه بیشتر باشد، مقاوت لایه کاهش می‌یابد و لذا در عمل، با محاسبه‌ی تغییرات مقاومت لایه و شدت آن قادر به حس گازها و تعیین غلظتشان خواهیم بود. در ادامه بمنظور کاراتر کردن حسگر فسفرن و یافتن ویژگی‌های جدید در آن، پس از مطالعه‌ی ویژگی‌های مکانیکی فسفرن، به مطالعه‌ی نقش کرنش در عملکرد حسگری فسفرن می‌پردازیم. در مطالعه‌ی مکانیکی فسفرن به تاثیر کرنش بر ساختار باند تک‌لایه‌ی فسفرن می‌پردازیم. مشاهده می‌شود که با اعمال کرنش، نه تنها اندازه‌ی گاف انرژی و نوع نیمه‌هادی از مستقیم به غیر مستقیم، که نوع ماده از نیمه‌هادی به فلز نیز تغییر می‌کند. ضریب پواسون برای جهت‌های زیگزاگ و آرمچیر را در سلول‌واحد بدست آوردیم که در اعمال کرنش‌های تک‌محوره به ابرسلول‌های فسفرن ما را در تخمین کرنش خودبخودی، که به اثر پواسون معروف است، در جهت عکس اعمال کرنش کمک کرد تا حجم محاسبات را کاهش دهیم. نتایج تاثیر اعمال کرنش در حسگری گاز نشان می‌دهد، اعمال کرنش به تک‌لایه، قابلیت تفکیک گازها در حسگر را بشدت بهبود می‌بخشد. ما مکان‌های بهینه‌ی جذب هر یک از گازها در کرنش‌های متفاوت را بدست می‌آوریم و مکانیزم تغییرات انرژی جذب گازها در اثر اعمال کرنش را شناسایی می‌کنیم. این مکانیزم شامل تاثیر کرنش بر مشخصه‌ی الکترونیکی لایه‌ی فسفرن است که عاملی است تا میزان و چگونگی انتقال بار بین ملکول و لایه تغییر یابد. در بررسی‌های بیشتر مشاهده می‌شود، قطبیدگی مغناطیسی گاز NO در اعمال کرنش‌های مختلف به لایه تغییر می‌کند، مکانیزمی مشابه در این پدیده یافت می‌شود بطوریکه تاثیر کرنش بر مشخصه‌ی الکترونیکی لایه، عاملی است در تغییر تعامل الکترونیکی بین ملکول و لایه که در نهایت میزان قطبیدگی این گاز پارامغناطیس را تغییر می‌دهد.