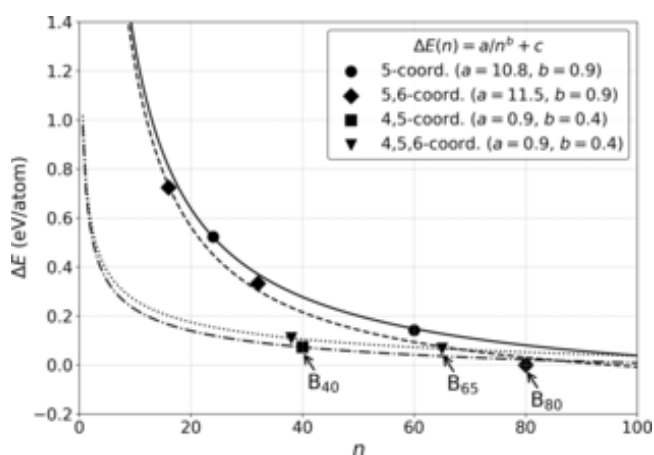


Od fulerenów do struktur 2D: przepis na projektowanie nanostruktur boru

2025-12-08

Dr hab. Nevill Gonzalez Szwacki z Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego opracował przełomowy model wyjaśniający różnorodność nanostruktur boru, od pustych w środku klastrów molekularnych po ultracienkie warstwy 2D. Jego badania, opublikowane w prestiżowym „2D Materials”, pokazują, że klucz do stabilności i właściwości elektronowych tych struktur tkwi w liczbie koordynacyjnej, czyli liczbie najbliższych sąsiadów danego atomu. Odkrycie to pozwala nie tylko zrozumieć istniejące nanostruktury boru, lecz także przewidywać i projektować nowe materiały o pożądanych właściwościach.



Stabilność energetyczna fulerenów boru w zależności od rozmiaru i lokalnego otoczenia atomów. Klastry B₄₀, B₆₅ i B₈₀ łączą świat struktur skończonych z pojedynczymi warstwami boru. (Źródło: N. Gonzalez Szwacki, Wydział Fizyki UW).

Bor, pierwiastek chemiczny sąsiadujący z węglem w układzie okresowym, jest znany ze swojej wyjątkowej zdolności do tworzenia złożonych sieci wiązań. W przeciwieństwie do węgla, który zazwyczaj łączy się z dwoma lub trzema sąsiadami, bor potrafi udzielić elektronów z wieloma atomami jednocześnie. Prowadzi to do powstawania szerokiej gamy nanostruktur, obejmujących zarówno fulereny, puste w środku klastry atomowe, jak i borofeny, czyli ultracienkie, metaliczne warstwy boru zbudowane z połączonych ze sobą trójkątnych i sześciokątnych jednostek.

Dr hab. Nevill Gonzalez Szwacki z Zakładu Struktury Materii Skondensowanej IFD Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego opracował przełomowy model wyjaśniający różnorodność nanostruktur boru. Przedstawiona w artykule analiza obejmuje ponad tuzin znanych nanostruktur boru, w tym eksperymentalnie zaobserwowane fulereny B_{40} i B_{80} . Z wykorzystaniem obliczeń kwantowo-mechanicznych z pierwszych zasad pokazano, że właściwości strukturalne, energetyczne i elektronowe tych układów można przewidzieć na podstawie udziału atomów tworzących wiązania z czterema, pięcioma i sześcioma sąsiadami. Wyniki ujawniają wyraźne powiązania między strukturami skończonymi a rozciągłymi. Dla przykładu, klaster B_{40} odpowiada pojedynczej warstwie borofenu χ_3 , natomiast struktury B_{65} , B_{80} i B_{92} są powiązane odpowiednio z borofenami β_{12} , α i β . Te powiązania strukturalne sugerują, że nowe fulerenowe formy boru mogą zostać otrzymane poprzez wykorzystanie znanych faz borofenu jako szablonów.

To podejście, oparte na liczbie koordynacyjnej, nie tylko łączy rodziny struktur wcześniej analizowane odrębnie, ale także wyjaśnia ogólne tendencje: zestawienie atomów boru z wyższą liczbą koordynacyjną zazwyczaj prowadzi do większej stabilności nanostruktur boru, podczas gdy ich właściwości elektronowe zależą w większym stopniu od geometrii i sposobu ułożenia orbitali. Na przykład, niektóre fulereny borowe, takie jak B_{40} , charakteryzują się dużymi przerwami energetycznymi dzięki swojej zwartej i symetrycznej budowie, podczas gdy struktury złożone z atomów boru o wyższej liczbie koordynacyjnej mogą mieć bardzo małą lub mniejszą przerwę energetyczną. W związku z tym liczba połączeń atomowych jest czynnikiem jednoczącym i predykcyjnym, a nie bezpośrednim wskaźnikiem właściwości elektronowych. – Przedstawiona koncepcja stanowi przewodnik po projektowaniu nowych nanostruktur boru o określonych cechach: magnetycznych, elektronowych czy mechanicznych. Może ona także wspierać przyszłe eksperymenty wykorzystujące metody wiązki klastrow lub wzrostu na powierzchni – podkreśla dr Nevill Gonzalez Szwacki.

Publikacja naukowca z UW pokazuje, że bor pozostaje wyjątkowo elastyczną platformą do tworzenia regulowanych materiałów w nanoskali, tworząc pomost między światem molekularnym a dwuwymiarowym.

Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego

Fizyka i astronomia na Uniwersytecie Warszawskim pojawiły się w 1816 roku w ramach ówczesnego Wydziału Filozofii. W roku 1825 powstało Obserwatorium Astronomiczne. Obecnie w skład Wydziału Fizyki UW wchodzi Instytut: Fizyki Doświadczalnej, Fizyki Teoretycznej, Geofizyki, Katedra Metod Matematycznych Fizyki oraz Obserwatorium Astronomiczne. Badania pokrywają niemal wszystkie dziedziny współczesnej fizyki, w skalach od kwantowej do kosmologicznej. Kadra naukowo-dydaktyczna Wydziału składa się z ponad 250 nauczycieli akademickich. Na Wydziale Fizyki UW studiuje ponad 1000 studentów i ok. 150 doktorantów. Uniwersytet Warszawski w rankingu szanghajskim dla poszczególnych dziedzin (Shanghai's Global Ranking of Academic Subjects) znajduje się wśród 300 najlepszych na świecie jednostek, kształcących w dziedzinie fizyki.

PUBLIKACJA NAUKOWE:

N. Gonzalez Szwacki, Coordination-driven design principles for boron fullerenes and borophenes: a predictive framework linking theory and experiment, 2D Materials 12, 045024 (2025).

<https://doi.org/10.1088/2053-1583/ae1514>

KONTAKT:

dr hab. Nevill Gonzalez Szwacki
Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego
gonz@fuw.edu.pl

POWIĄZANE STRONY WWW:

<https://www.fuw.edu.pl>
Strona Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego
<https://www.fuw.edu.pl/informacje-pracowni.html>
Serwis prasowy Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego

MATERIAŁY GRAFICZNE:

FUW251205b_fot01

https://www.fuw.edu.pl/11_files/press/images/2025/FUW251208b_fot01.png

Odpowiedniość strukturalna między fulerenami boru a dwuwymiarowymi borofoenami. Klaster B_{40} odpowiada warstwie γ_{2D} , natomiast B_{63} odpowiada warstwie β_{12} . (Źródło: N. Gonzalez Szwacki, Wydział Fizyki UW).

FUW251205b_fot02

https://www.fuw.edu.pl/11_files/press/images/2025/FUW251208b_fot02.png

Stabilność energetyczna fulerenów boru w zależności od rozmiaru i lokalnego otoczenia atomów. Klastry B_{40} , B_{63} i B_{80} łączą świat struktur skończonych z pojedynczymi warstwami boru. (Źródło: N. Gonzalez Szwacki, Wydział Fizyki UW).



[FUW251208_Od_fulerenów_do_struktur_2D.pdf \(530.7 kB\)](#)