

## Моделирование спонтанного образования новых углеродных макромолекул при удалении водорода ударами электронов

Синица А.С.<sup>1,2</sup>, Полынская Ю.Г.<sup>1</sup>, Лебедева И.В.<sup>3</sup>, Книжник А.А.<sup>1,2</sup>, Попов А.М.<sup>4</sup>

*alexsinitsa91@gmail.com*

<sup>1</sup> ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия

<sup>2</sup> НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия

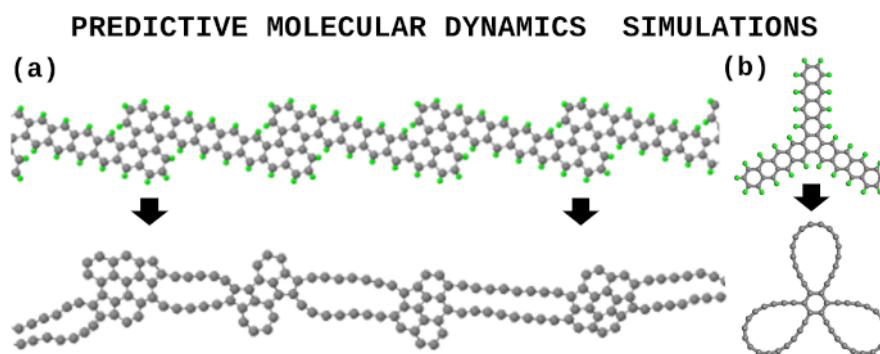
<sup>3</sup> Simune Atomistics, Сан-Себастьян, Испания

<sup>4</sup> Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Трансформация структуры при облучении электронами в просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) является одним из способов синтеза уникальных углеродных наноструктур. Мы предлагаем новую стратегию такого синтеза: 1) прекурсор, углеводородная макромолекула или нанобъект, синтезируется традиционными химическими методами; 2) этот прекурсор помещается в ПЭМ с энергией электронов, достаточной для удаления атомов водорода, но недостаточной для того, чтобы вызвать разрыв или образование связей между атомами углерода; 3) в результате удаления водорода прекурсор становится нестабильным и трансформируется в новую углеродную макромолекулу или нанобъект, который не может быть получен традиционными химическими методами.

С помощью моделирования методом молекулярной динамики (МД) мы демонстрируем возможность получения новых углеродных нанобъектов на примере трансформации нанолент графена в нанобъекты, содержащие кратные углеродные цепочки, [1, 2] и старфенов [3] в молекулы с формой пропеллера под действием облучения электронами. В моделировании МД использован алгоритм CompuTEM для адекватного описания трансформации структуры при облучении электронами. Представлены также результаты моделирования с использованием алгоритма CompuTEM для таких процессов в ПЭМ как разрезание нанотрубки и графена катализатором [4,5] и синтез эндофуллеренов [6].

Исследование поддержано грантом Российского научного фонда № 22-73-00023, <https://rscf.ru/project/22-73-00023/>.



Моделирование трансформации структуры (а) наноленты графена и (b) молекулы [16]старфена при облучении электронами с энергией 45 кэВ

### ССЫЛКИ

- 1) Sinitsa A. S. et al. // Carbon. – 2018. – Т. 140. – С. 543-556.
- 2) Sinitsa A. S. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2021. – Т. 23. – №. 1. – С. 425-441.
- 3) Matsokin N. A. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2023. – Т. 25. – №. 40. – С. 27027-27033.
- 4) Lebedeva I. V. et al. // Nanoscale. – 2014. – Т. 6. – №. 24. – С. 14877-14890.
- 5) Sinitsa A. S. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2023. – Т. 25. – №. 30. – С. 20715-20727.
- 6) Sinitsa A. S. et al. // Nano letters. – 2017. – Т. 17. – №. 2. – С. 1082-1089.