

## Моделирование образования и трансформации углеродных наноструктур при облучении электронами в ПЭМ

Попов А.М.<sup>1</sup>

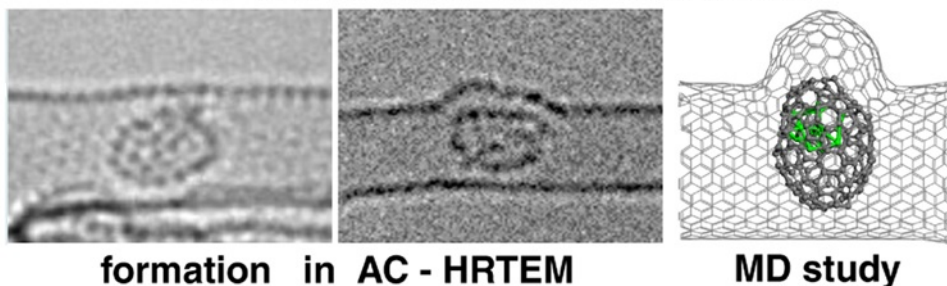
popov-isan@mail.ru

<sup>1</sup> Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

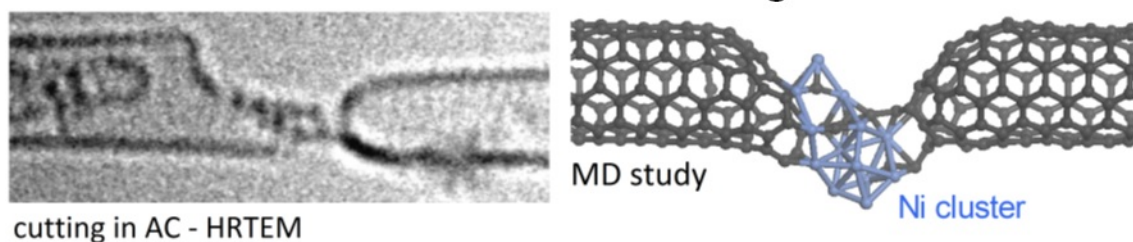
Развитие методов просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения привело к возможности не только получать изображение наноструктур с атомным разрешением, но и непосредственно наблюдать химические реакции и перестройку связей, индуцированные облучением электронами. Более того, возникла возможность осуществлять контроль *in situ* за процессами индуцированной облучением трансформации и образования наноструктур и даже управлять такими процессами.

В докладе будут рассмотрено моделирование методом молекулярной динамики с использованием алгоритма CompuTEM [1] образования и трансформации углеродных наноструктур при облучении электронами в просвечивающем электронном микроскопе. Будут представлены результаты моделирования следующих процессов: 1) разрезание нанотрубок и графена кластером металла (например, на игле зонда) при одновременном облучении электронами [2], 2) образование новых типов металлофуллеренов и гетерофуллеренов [3], 3) образование новых молекул и полимеров, содержащих атомарные цепочки углерода [4].

### Ni endohedral metallofullerenes



### Carbon nanotubes cutting



Примеры трансформации углеродных наноструктур в ПЭМ: сравнение эксперимента и моделирования.

#### Ссылки

1. S.T. Skowron, I.V. Lebedeva, A.M. Popov, E. Bichoutskaia, *Nanoscale* (2013) **5**, 6677-6692.
2. I.V. Lebedeva, T.W. Chamberlain, A.M. Popov, A.A. Knizhnik, T. Zoberbier, J. Biskupek, U. Kaiser, A.N. Khlobystov, *Nanoscale* (2014) **6**, 14877-14890.
3. A.S. Sinitsa, T.W. Chamberlain, T. Zoberbier, I.V. Lebedeva, A.M. Popov, A.A. Knizhnik, R.L. McSweeney, J. Biskupek, U. Kaiser, A.N. Khlobystov, *Nano Lett.* (2017) **17**, 1082-1089.
4. A.S. Sinitsa, Y.G. Polynskaya, Y.M. Kedalo, A.A. Knizhnik, A.M. Popov, *Physical Chemistry Chemical Physics* (2025) **27**, 12729-12737.