

DOI:10.12158/j.2096-3203.2021.01.020

# X-蜡生成过程中自由基产生的分子动力学仿真

沈殷和<sup>1,2</sup>, 齐波<sup>1,2</sup>, 林元棣<sup>3</sup>, 张毅涛<sup>1,2</sup>

- (1. 新能源电力系统国家重点实验室(华北电力大学),北京 102206;
- 2. 华北电力大学高电压与电磁兼容北京重点实验室,北京 102206;
- 3. 国网江苏省电力有限公司电力科学研究院,江苏 南京 211103)

**摘要:**油纸绝缘结构设备在解体时常有黄色蜡状沉积物存在,因其不具有固定化学式而被称为 X-蜡。X-蜡在较低温度下形成,并伴有大量气体产生,形成后会依附在绝缘纸上并进入孔隙中使得介损增大,导致整体损耗增大,局部温度上升。文中基于分子动力学对 X-蜡产生过程的第一步——自由基的产生进行了模拟,建立了含有 30 个分子的矿物绝缘油仿真模型,基于 ReaxFF 力场模拟了 473 K,393 K,373 K 下油模型的自由基产生情况,通过生成的轨迹文件捕捉各温度下第一个自由基的产生过程。仿真过程中发现环烷烃上的碳氢键易发生均裂形成 2 个自由基,大分子自由基之间重组能够形成 X-蜡,氢自由基之间相互作用产生氢气。通过分析温度曲线可发现在仿真温度范围内,自由基产生速度和温度呈正相关。

**关键词:**油纸绝缘;X-蜡;ReaxFF 力场;自由基;分子动力学

中图分类号:TM855

文献标志码:A

文章编号:2096-3203(2021)01-0142-05

## 0 引言

油纸绝缘结构设备在解体时常有黄色蜡状沉积物存在。这种沉积物没有固定的化学表达式,被称作 X-蜡<sup>[1]</sup>。X-蜡通常出现在变压器、电流互感器和套管等油纸绝缘结构中<sup>[2-3]</sup>,并伴有大量故障特征气体。马卫平等人在高压电流互感器解体过程中,发现绝缘层多处存在 X-蜡<sup>[4-5]</sup>;甘德刚等人对 500 kV 换流变压器网侧故障套管进行解体时,在导电杆上发现 X-蜡<sup>[6]</sup>。Orlando Girlanda 等人通过实验测量,发现 X-蜡会使得 50 Hz 下介损增大,导致整体损耗增大,局部温度上升<sup>[7]</sup>。但目前还未有针对 X-蜡产生机理的详细报道。

近年来 ReaxFF 力场<sup>[8]</sup>被广泛应用于描述复杂化学反应过程。文献[9]采用 ReaxFF 反应力场构建山茶籽绝缘油模型,模拟高温下热解和产气的规律。文献[10—12]利用 ReaxFF 力场对绝缘纸和纤维素的高温裂解过程进行研究。文献[13]基于 ReaxFF 力场对聚酰亚胺高温下绝缘失效的微观机理进行了模拟分析。研究证明,ReaxFF-MD 方法可以动态地描述反应物成键断键过程,揭示产物的生成路径,为 X-蜡产生的动态模拟提供良好基础。

文中基于分子动力学采用 ReaxFF 力场模拟绝缘油在温度 473 K,393 K,373 K 下自由基的产生过

程,并分析蜡的形成方式和组成成分,为更好地理解 X-蜡产生机理奠定了基础。

## 1 绝缘油分子动力学仿真

### 1.1 仿真对象

油纸绝缘结构中常用的绝缘油型号为 25 号,故文中仿真采用的绝缘油模型构建借鉴了刘枫林等人利用质谱仪测得的新疆克拉玛 25 号环烷基矿物油成分组成,链烃和环烷烃占环烷烃矿物油总质量的 88.6%。具体分布如下:链烃质量分数为 11.6%;环烷烃质量分数为 77.0%,其中一环烷烃 15.5%,二环烷烃 28.5%,三环烷烃 23.3%,四环烷烃 9.7%<sup>[14]</sup>。

环烷基油作为混合物,把油中所有成分的分子结构和在油中的含量表示出来是没有必要且不现实的。环烷烃分子在环烷基油中占主要部分,模拟过程中只要能够充分体现环烷基的物化特性即可。根据所测得的组分分布,可以将整个油模型等效为 5 种烃类分子组成<sup>[15]</sup>。即链烃 C<sub>12</sub>H<sub>26</sub>,一环烷烃 C<sub>14</sub>H<sub>28</sub>,二环烷烃 C<sub>13</sub>H<sub>24</sub>,三环烷烃 C<sub>16</sub>H<sub>28</sub>和四环烷烃 C<sub>16</sub>H<sub>26</sub>,其形态如图 1 所示。

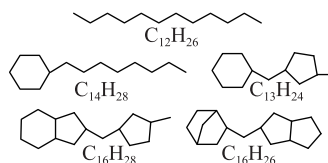


图 1 环烷基油模型的 5 种单体分子  
Fig.1 Five monomer molecules of naphthenic oil model

收稿日期:2020-07-31;修回日期:2020-09-07

基金项目:国家电网有限公司科技项目(SCJSDK00ZPJS190-0269)

## 1.2 仿真环境及过程

在分子动力学软件中构建绝缘油模型,并模拟烃类分子在不同温度下的分解情况,步骤如下:

(1) 根据环烷基油的 5 种主要组成部分,搭建 5 种单体分子的三维模型,然后利用 Forcite 模块分别对各个分子进行几何结构优化,优化力场采用适用于有机小分子和高分子的 COMPASS 力场。

(2) 利用 Amorphous Cell 模块建立不定形液态系统,液体密度设为  $0.2 \text{ g/cm}^3$ 。液体系统共包含 30 个分子<sup>[16]</sup>,依据矿物绝缘油中各成分的质量分数计算出分子个数。计算步骤如下:

$$\bar{m} = \sum m(\text{C}_x\text{H}_y)\omega(\text{C}_x\text{H}_y) = 196.169 \quad (1)$$

$$n = 30\bar{m}\omega(\text{C}_x\text{H}_y)/m(\text{C}_x\text{H}_y) \quad (2)$$

式中:  $m(\text{C}_x\text{H}_y)$  为各组分的分子量;  $\omega(\text{C}_x\text{H}_y)$  为各组分所占质量分数。

由此计算出链烃、一环烷烃、二环烷烃、三环烷烃和四环烷烃的个数分别为 5, 5, 10, 7, 3。构建完成后得到初步模型,如图 2 所示。可以看到,在初步模型中,分子在盒子中分布不均匀,导致低密度区域的形成,要解决这个问题,必须对该液体系统进行优化,执行短暂的能量最小化过程,并施加一个分子动力学弛豫过程来平衡盒子<sup>[17-19]</sup>。

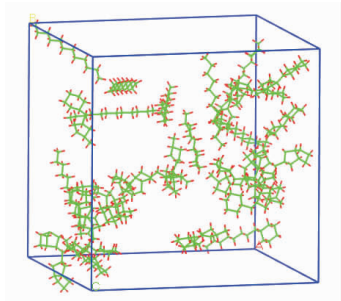


图 2 构建初期盒子构型

Fig.2 Early configuration of the cell

(3) 动力学弛豫过程主要分为 3 步。① 对系统进行退火。在周期性变化的温度下运行分子动力学进行弛豫处理,在 NVT(分子数、体积和温度不变)正则系统下,将退火循环数设置为 5,将初始温度设置为 300 K,中循环温度设置为 500 K。② 在 NPT(分子数、压强和温度不变)正则系统下,对系统进行加压和减压处理,加压时设置压强为 0.1 GPa,解压时设置压强为 0.1 MPa。③ 利用 Forcite 模块中的 Dynamics 功能,使系统在 NVT 正则系统下达到 300 K 下的平衡状态,平衡时系统密度达到了  $0.82 \text{ g/cm}^3$ ,平衡状态下油模型如图 3 所示。

## 1.3 步长、温度及其他参数的选择

在分子模拟中,积分步长的选择十分重要,太

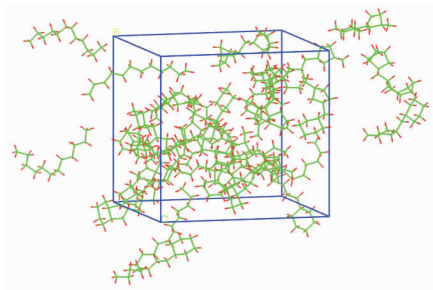


图 3 平衡状态下油模型

Fig.3 The oil model in equilibrium

长的时间步长会造成分子间的激烈碰撞,导致体系数据溢出;太短的时间步长会降低模拟过程搜索相空间的能力;一般选取的时间步长为体系各个自由度中最短运动周期的  $1/10$ <sup>[20]</sup>。根据红外光谱中的波数可以计算出化学键的频率:

$$\bar{\nu} = 1307\sqrt{k/\mu} \quad (3)$$

式中:  $k$  为化学键的力常数,与键能和键长有关,具体见表 1;  $\mu$  为双原子折合质量,  $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ ,  $m_1, m_2$  为原子的分子量。

表 1 不同种类碳氢键对应的力常数

Table 1 Force constants of hydrocarbon bonds

键	对应分子	$k$ 值
H—C	$\text{CH}_3\text{X}$	4.7~5.0
H—C	$\text{CH}_2\text{—CH}_2$	5.1
H—C	$\text{CH}\equiv\text{CH}$	5.9

从而计算得到绝缘油模型中最小振动周期:

$$\bar{\nu} = 1307\sqrt{5.1 \times 13/12} = 3072.15 \text{ cm}^{-1} \quad (4)$$

$$f = c\bar{\nu} = 9.22 \times 10^{13} \text{ Hz} \quad (5)$$

$$T = 1/f = 1.08 \times 10^{-14} \text{ s} \quad (6)$$

式中:  $c$  为光速。

取振动周期的  $1/10$  作为积分步长,所以选择积分步长为 1 fs。若积分步长过小,2 次相邻计算间分子的运动变化很小,会导致在设置的模拟时间内得不到想要的结果。若积分步长过大,就会使仿真过程中温度急剧上升,体系数据溢出导致仿真终止。

目前研究显示, X-蜡在较低温度下就能产生。Orlando Girlanda 等人解体故障套管时在绝缘纸上发现了 X-蜡,经过绝缘纸的 DP 测量发现绝缘纸并没有发生分解<sup>[7]</sup>,而变压器中常用的 B 级绝缘纸在  $130 \text{ }^\circ\text{C}$  的条件下,纤维素中葡萄糖键就会断开发生分解<sup>[21]</sup>,可见 X-蜡在  $130 \text{ }^\circ\text{C}$  以下就能够产生。温度过高也不利于 X-蜡的形成,文献[5]认为 X-蜡由碳原子数为 12~24 的烷烃组成,而文献[22]在热解理论中提到,温度超过  $200 \text{ }^\circ\text{C}$  时,  $\text{C}_{10}$  以上的烷烃会全部受热分解,所以温度过高并不利于大分子的 X-蜡

形成,文中将仿真的上限温度设为 200 ℃。文献 [1]指出 110 ℃是矿物油中产生 X-蜡的阈值温度,低于阈值温度无法产生 X-蜡。综合考虑,文中选择仿真温度为 473 K,393 K 和 373 K。

采用 Gulp 模块的 Dynamics 功能进行模拟仿真,观察液态体系在不同温度下的分解动态变化过程。力场选择 ReaxFF6.0,系统设置为 NVT 正则系统,仿真时间为 100 ps。仿真结束后会生成 xtd 格式的轨迹文件以及仿真过程中温度、能量和压力随时间变化的曲线,可以通过播放轨迹文件观看各分子的运动情况和化学键的断裂情况。

## 2 仿真结果分析

ReaxFF 力场是根据各粒子间的距离来确定相互间的作用力强弱,可以很好地表示化学键成键和断键情况。文中根据分子间的距离判断化学键是否断裂。当化学键两原子间距离扩大为原来的 5 倍时,则认为化学键已经断裂。

经过多次仿真并通过轨迹文件捕捉到 473 K 下第一个自由基的产生,如图 4 所示,发生分解的分子为四环烷烃  $C_{16}H_{26}$ 。

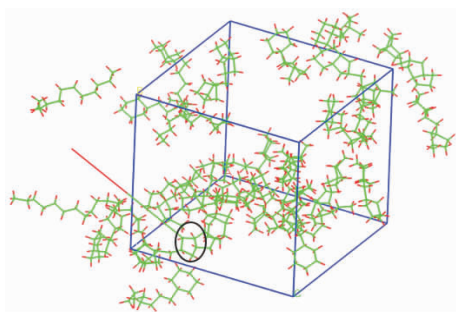


图 4 473 K 下第一个自由基的产生

Fig.4 First free radical generation at 473 K

从图中可以看到,四环烷烃五元环上的碳氢键发生断裂。观察温度变化趋势图和轨迹文件,可知在前 15 ps,分子主要处于振动过程而没有发生化学键的断裂;在 15 ps 左右,化学键开始发生断裂。

393 K 下的结果与 473 K 下相似,但是分解速度相比于 473 K 情况下慢了很多,化学键的断裂发生在 90 ps 左右。通过轨迹文件捕捉到 393 K 下第一个自由基的产生,如图 5 所示,发生分解的分子同样为四环烷烃  $C_{16}H_{26}$ 。

373 K 下的仿真结果对比 393 K 和 473 K 下的结果有些不同。在仿真时间 100 ps 内并没有发生分解,延长仿真时间发现在 130 ps 左右发生化学键断裂。捕捉到的率先发生分解的分子为三环烷烃  $C_{16}H_{28}$ 。第一个自由基的产生情况如图 6 所示。

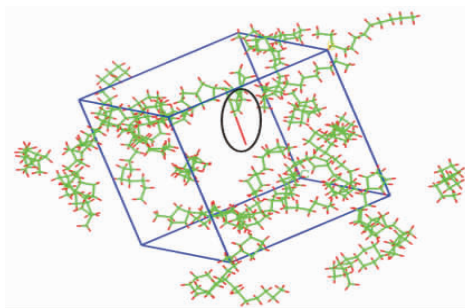


图 5 393 K 下第一个自由基的产生

Fig.5 First free radical generation at 393 K

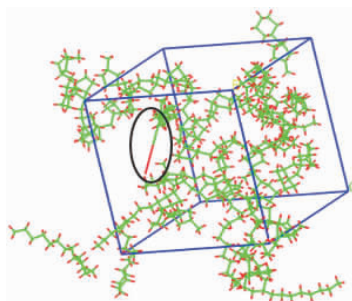


图 6 373 K 下第一个自由基的产生

Fig.6 First free radical generation at 373 K

对比不同温度下化学键断裂的情况,发现环烷烃的碳氢键更容易发生断裂,当碳氢键发生断裂后就会形成自由基,即一个较大分子量的烃类自由基和一个氢自由基。由于自由基的化学性质很活泼,自由基之间很容易相互作用形成新的产物,2 个氢自由基相互作用会形成氢气;氢自由基和烃类自由基作用会重新形成环烷烃,再次进入反应当中;2 个烃类自由基相互作用形成不溶于油的 X-蜡,所以 X-蜡分子量也会大于组成绝缘油的烃分子。

为验证该观点,采集 500 kV 主变套管导电杆上的 X-蜡试样,采用 vario EL cube 元素分析仪通过燃烧法进行元素分析<sup>[23]</sup>,结果如表 2 所示。

表 2 元素分析结果

Table 2 Chemical element analysis

元素类型	原子数比/%	质量比/%
C	20	88.43
H	35	12.88
O	0.4	2.40

通过元素分析法获得的蜡状物的 C、H、O 元素质量比,计算 C、H、O 元素原子数比为 20:35:0.4,即最简式为  $C_{20}H_{35}O_{0.4}$ 。考虑到仪器的测量误差在 1%~3% 范围内,因而忽略氧元素,获得蜡状物的元素 C、H 比例为 20:35。通过元素分析,推断该套管蜡状物主要成分是 C、H,其最简式是为  $C_{20}H_{35}$ 。可以看到这种 X-蜡的分子量大于绝缘油中的母体烃。

而且由于不同环烷烃之间碳氢键键能的差距不明显,在外界因素作用下,会有多种烷烃发生分解并形成不同种类自由基,自由基的相互组合是完全随机的,存在多种链终止反应<sup>[24]</sup>,会生成多种大分子产物,导致 X-蜡以混合物形式存在。

仿真结果表明,473 K,393 K,373 K 温度下,第一个自由基产生时间分别为 15 ps,90 ps,130 ps。可以看到,在仿真温度范围内,温度越高,第一个自由基产生的时间越短。

### 3 结论

文中基于分子动力学建立了含有 30 个分子的矿物绝缘油仿真模型,在 ReaxFF 力场中模拟 473 K,393 K,373 K 下油模型中 X-蜡产生过程的自由基生成情况,结论如下:

(1) X-蜡生成第一步为化学键的均裂形成 2 个自由基,在仿真温度范围内,自由基产生速度与温度呈正相关,通过仿真发现这个过程主要发生在环烷烃分子上。环烷烃分子上碳氢键易发生断裂形成 2 个自由基,2 个大分子量的自由基重组后就会形成 X-蜡。

(2) 仿真过程中步长应该设置为体系各个自由度中最短运动周期的 1/10,积分步长选择过小,2 次相邻计算间分子的运动变化很小,会导致在设置的模拟时间内得不到想要的结果。积分步长选择过大,就会使仿真过程中温度急剧上升,体系数据溢出导致仿真终止。

#### 参考文献:

- [1] KUHNKE M, HOMEIER K, WERLE P, et al. Investigation of the formation of wax-like substances in silicone and ester fluids [C]//2016 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP). Toronto, ON, 2016:861-864.
- [2] 胡琼华,杨斌,王竞丰. 500 kV 充油设备不容忽视的油质检测项目[J]. 今日科苑,2009(4):63.  
HU Qionghua, YANG Bin, WANG Jingfeng. 500 kV oil quality testing items that cannot be ignored[J]. Modern Science, 2009(4):63.
- [3] 张曼,许文超,牛涛,等. 特高压直流对 500 kV 变压器直流偏磁的影响分析[J]. 电力工程技术,2017,36(6):78-83.  
ZHANG Man, XU Wenchao, NIU Tao, et al. Influence of HVDC systems on 500 kV transformer DC magnetic bias[J]. Electric Power Engineering Technology, 2017, 36(6):78-83.
- [4] 马卫平,敖明,程方晓. 高压电流互感器油中溶解气体异常原因分析[J]. 变压器,2011,48(5):63-67.  
MA Weiping, AO Ming, CHENG Fangxiao. Analysis of abnormal data of oil dissolved gas for high voltage CT[J]. Transformer, 2011, 48(5):63-67.
- [5] 李明星,唐亮,陈志勇,等. 220 kV 电流互感器油色谱气体含量超标分析及防范措施[J]. 河北电力技术,2008(1):29-30.  
LI Mingxing, TANG Liang, CHEN Zhiyong, et al. Analysis and precautions on exceeding standard of oil chromatogram gas containing in 220 kV current transformer[J]. Hebei Electric Power, 2008(1):29-30.
- [6] 甘德刚,冯运,陈凌,等. 一起 500 kV 换流变压器网侧套管故障分析[J]. 变压器,2017,54(9):68-71.  
GAN Degang, FENG Yun, CHEN Ling, et al. Fault analysis of 500 kV net-side bushing of converter transformer [J]. Transformer, 2017, 54(9):68-71.
- [7] GIRLANDA O, JONSSON L, JOHANSSON K, et al. Experimental evaluation and simulations of X-wax in transformer bushings [C]//2017 International Symposium on Electrical Insulating Materials (ISEIM). Toyohashi, 2017:745-748.
- [8] VAN DUIN A C T, DASGUPTA S, LORANT F, et al. ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons[J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2001, 105(41):9396-9409.
- [9] 相晨萌,周淦,李剑,等. 基于分子动力学模拟的植物绝缘油过热分解产气特性[J]. 高电压技术,2018,44(11):3595-3603.  
XIANG Chenmeng, ZHOU Quan, LI Jian, et al. Gas production characteristics of vegetable insulating oils under thermal decomposition based on molecular dynamic simulation[J]. High Voltage Engineering, 2018, 44(11):3595-3603.
- [10] 闫江燕,王学磊,李庆民,等. 绝缘纸高温裂解的分子动力学模拟研究[J]. 中国电机工程学报,2015,35(22):5941-5949.  
YAN Jiangyan, WANG Xuelei, LI Qingmin, et al. Molecular dynamics simulation on the pyrolysis of insulating paper[J]. Proceedings of the CSEE, 2015, 35(22):5941-5949.
- [11] ZHENG M, WANG Z, LI X, et al. Initial reaction mechanisms of cellulose pyrolysis revealed by ReaxFF molecular dynamics [J]. Fuel, 2016, 177(1):130-141.
- [12] LI X, MO Z, LIU J, et al. Revealing chemical reactions of coal pyrolysis with GPU-enabled ReaxFF molecular dynamics and cheminformatics analysis [J]. Molecular Simulation, 2015, 41(1-3):13-27.
- [13] 鲁旭,韩帅,李庆民,等. 聚酰亚胺高温裂解机理的反应分子动力学模拟[J]. 电工技术学报,2016,31(12):14-23.  
LU Xu, HAN Shuai, LI Qingmin, et al. Reactive molecular dynamics simulation of polyimide pyrolysis mechanism at high temperature[J]. Transactions of China Electrotechnical Society, 2016, 31(12):14-23.
- [14] 刘枫林,徐魏. 石蜡基和环烷基变压器油的性能比较[J]. 变压器,2004(7):27-30.  
LIU Fenglin, XU Wei. Characteristic comparison between paraffine-base and naphthene-base transformer oils [J]. Transformer, 2004(7):27-30.
- [15] 朱孟兆. 油浸绝缘纸热老化机理的分子动力学研究[D]. 重庆:重庆大学,2011.  
ZHU Mengzhao. Molecular dynamics study of thermal aging of oil-impregnated insulation paper [D]. Chongqing: Chongqing



- University, 2011.
- [16] 杜林,王五静,张彼德,等. 基于 ReaxFF 场的矿物绝缘油热解分子动力学模拟[J]. 高电压技术, 2018, 44(2): 488-497.
- DU Lin, WANG Wujing, ZHANG Bide, et al. Molecular dynamics simulation of mineral insulating oil pyrolysis based on force field ReaxFF[J]. High Voltage Engineering, 2018, 44(2): 488-497.
- [17] 凡朋,周登波,严海健,等. 纳米二氧化硅掺杂低密度聚乙烯微观特性的分子模拟[J]. 高电压技术, 2017, 43(9): 2875-2880.
- FAN Peng, ZHOU Dengbo, YAN Haijian, et al. Microcosmic properties of LDPE/SiO<sub>2</sub> nano-composite by molecular simulation[J]. High Voltage Engineering, 2017, 43(9): 2875-2880.
- [18] 杨青,陈新,兰逢涛,等. 聚乙烯/乙烯-醋酸乙烯酯共聚物界面相容性的分子动力学研究[J]. 高电压技术, 2016, 42(11): 3626-3633.
- YANG Qing, CHEN Xin, LAN Fengtao, et al. Molecular dynamics study of the interfacial properties of polyethylene and ethylene-vinylacetate copolymer composites[J]. High Voltage Engineering, 2016, 42(11): 3626-3633.
- [19] CASTRO M F, KAMAT A M, RUSSO J M F, et al. Combustion of an Illinois No.6 coal char simulated using an atomistic char representation and the ReaxFF reactive force field[J]. Combustion and Flame, 2012, 159(3): 1272-1585.
- [20] 陈正隆,徐为人,汤立达. 分子模拟的理论与实践[M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.
- CHEN Zhenglong, XU Weiren, TANG Lida. Theory and practice of molecular simulation[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [21] JOCELYN Jalbert, ROLAND Gilbert, PIERRE Te'treault. Identification of a chemical indicator of the rupture of 1,4-b-glycosidic bonds of cellulose in an oil-impregnated insulating paper system[J]. Cellulose, 2007(14): 295-309.
- [22] SHIRAI M, SHIMOJI S, ISHII T. Thermodynamic study on the thermal decomposition of insulating oil[J]. IEEE Transactions on Electrical Insulation, 1977, 12(4): 272-280.
- [23] SOKOLOVA O V, VOROZHTSOV D L. Development of rapid method for determining the total carbon in boron carbide samples with elemental analyzer[J]. Russian Journal of Applied Chemistry, 2014, 87(11): 1640-1643.
- [24] 李青月. 正己烷热裂解一次自由基反应分子模拟及反应机理研究[D]. 大庆: 东北石油大学, 2015.
- LI Qingyue. Molecular simulation and reaction mechanism of free radical reactions mechanism of n-hexane thermal cracking[D]. Daqing: Northeast Petroleum University, 2015.

作者简介:



沈殷和

沈殷和(1996),男,硕士在读,研究方向为电气设备绝缘在线监测诊断与故障诊断(E-mail: syh960321@163.com);

齐波(1980),男,博士,教授,博士生导师,研究方向为电气设备绝缘在线监测与故障诊断、空间电场/电荷测量技术、新型介电材料的研制与应用;

林元棣(1988),男,博士,工程师,从事变压器状态评估与寿命预测工作。

## Molecular dynamics simulation of free radical generation during X-wax generation

SHEN Yinhe<sup>1,2</sup>, QI Bo<sup>1,2</sup>, LIN Yuandi<sup>3</sup>, ZHANG Yitao<sup>1,2</sup>

(1. State Key Laboratory of Alternate Electrical Power System with Renewable Energy Sources

(North China Electric Power University), Beijing 102206, China; 2. Beijing Key Laboratory of High Voltage and Electromagnetic Compatibility, North China Electric Power University, Beijing 102206, China;

3. State Grid Jiangsu Electric Power Co., Ltd. Research Institute, Nanjing 211103, China)

**Abstract:** Oil-paper insulation structure equipment often has yellow waxy deposits when it disintegrates. It is called X-wax because it does not have a fixed chemical formula. X-wax will generate a large amount of gas during the formation process. After formation, X-wax will adhere to the insulation paper and enter the pores to increase the dielectric loss, resulting in an increase in overall loss and a rise in local temperature. However, there is no detailed report on the mechanism of X-wax production. Based on molecular dynamics, the first step of the X-wax production process is simulated; the generation of free radicals, and a mineral insulating oil simulation model containing 30 molecules is established. The free radical generation in the oil model is simulated based on the ReaxFF force field at 473 K, 393 K and 373 K and the first free radical generation at each temperature with the generated trajectory file is captured. During the simulation process, it is found that the carbon-hydrogen bonds on the naphthenes are easily split into two free radicals, and the recombination between the macromolecular radicals could form X-wax, and the hydrogen radicals interacted to generate hydrogen. Through the analysis of the temperature curve, it is found that within the simulated temperature range, the free radical generation rate and temperature are positively correlated.

**Keywords:** oil-paper insulation; X-wax; ReaxFF force field; free radical; molecular dynamics

(编辑 方晶)