

УДК 544.1, 544.272, 544.18, 66.092

**REAXFF МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ОКТАДЕКАНА**© Р. Х. Шаяхметова\*<sup>1</sup>, Э. М. Хамитов<sup>2</sup>, А. Г. Мустафин<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Башкирский государственный университет  
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН  
Россия, Республика Башкортостан, 450054 г. Уфа, пр. Октября, 71.

Тел.: +7 (937) 343 41 99.

\*Email: shayakhmetovarih@gmail.com

*Добавление 2-этилгексаноата никеля к мазуту и вакуумному газойлю при термодинамических процессах приводит к изменению характера деструктивных процессов, что обусловлено образованием наночастиц никеля размером 80 нм в углеводородной среде. В настоящей работе проведено изучение термического разложения октадекана в рамках молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF. С целью подбора оптимальных условий для моделирования каталитического крекинга компонентов тяжелой нефтяной фракции в присутствии наночастиц никеля с силовыми полями Ni/C/H. По результатам мономолекулярной деструкции, показано, что значение энергии активации реакции иницирования соответствует разрыву связи C–C в алканах. Определены пути деструкции октадекана при моделировании 10 молекул в боксе с периодическими граничными условиями. Показано, что оптимальная температура моделирования находится в диапазоне 2273–2773 К. Полученные данные будут полезны при моделировании деструкции октадекана в присутствии нанокластеров никеля.*

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, ReaxFF, октадекан, термический крекинг, моделирование.

**Введение**

Каталитический крекинг является одним из наиболее распространенных методов углубления переработки тяжелых нефтяных фракций. Известно, что добавление 2-этилгексаноата никеля к мазуту и вакуумному газойлю западносибирской нефти при термодинамических процессах приводит к изменению характера деструктивных процессов, по сравнению с термическим воздействием [1]. Эти изменения обусловлены образованием наночастиц никеля размером 80 нм в углеводородной среде [2]. Наногетерогенный катализ является актуальным и эффективным направлением в нефтепереработке тяжелых нефтяных фракций и широко изучается в последние годы [3–8].

С целью увеличения глубины переработки тяжелых нефтяных фракций актуально изучение крекинга в присутствии ультрадисперсных суспензий металлов. Исследование процесса деструкции компонентов тяжелой нефтяной фракции в присутствии нанокластеров металлов возможно методами квантовой химии [9], но является чрезвычайно трудоемким. Молекулярная динамика с силовыми полями ReaxFF [10–11], позволяет моделировать реакционные события в больших многокомпонентных системах и является новым перспективным методом для решения задач фундаментального и прикладного характера. Методы, основанные на квантовой механике, дают ценные и важные знания о системе, но требуют колоссальных машинных ресурсов для исследования больших систем, таких как нанокластеры металлов. Молекулярно-динамический подход, основанный на принципах

классической физики, позволяет изучать эволюцию больших многокомпонентных систем, но бессильен в описании химических взаимодействий. Метод ReaxFF был разработан, чтобы преодолеть недостатки приведенных выше подходов. ReaxFF – межатомный потенциал, который неявно описывает реакционные взаимодействия, основан на высокоточных оценочных расчетах теории функционала плотности. В настоящее время разработаны силовые поля ReaxFF для множества систем [12–15], в частности для углеводородных смесей в присутствии различных металлов [16–19].

Вакуумный газойль является сложной смесью парафиновых, нафтеновых, ароматических углеводородов. Поэтому в качестве модельного парафинового компонента, для симуляции термического разложения, был выбран октадекан. В настоящей работе проведено изучение термического разложения октадекана в рамках молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF. Цель исследования – подбор оптимальных условий термического крекинга, для последующего моделирования каталитического крекинга компонентов тяжелой нефтяной фракции в присутствии наночастиц никеля с силовыми полями Ni/C/H [16].

**Методическая часть**

Расчеты проводили в одноименной программе ReaxFF [10]. Предварительно молекулу октадекана подвергали процедуре минимизации энергии. Далее проводили молекулярно-динамическую (MD) симуляцию без реактивных итераций в NVT-ансамбле при температуре 100 К для уравнивания сис-

темы. Для всех симуляций было использовано силовое поле С/Н/О [20]. Мономолекулярное термическое разложение октадекана проводилось при температуре 3500 К в NVT-ансамбле с константой затухания 100 фс, в течение 2.5 пс, 50000 итераций, временной шаг 0.05 фс. Моделирование 10 молекул октадекана в боксе с периодическими граничными условиями проводили при температурах 1773, 2273 и 2773 К. Предварительное уравнивание этой системы проводили в NPT-ансамбле при 298 К в течение 250 пс, полученная система имеет плотность 0.8526 г/мл. Реактивную динамику этой системы проводили в течение 125 пс, 500 000 итераций, временной шаг 0.25 фс, в NVT-ансамбле с константой затухания 100 фс. Визуализацию результатов расчетов проводили с помощью VMD [21].

### Обсуждение результатов

**Мономолекулярное термическое разложение октадекана.** При термическом крекинге парафинов происходит разрыв связей С–С с образованием более низкомолекулярных парафиновых и олефиновых углеводородов и водорода. Механизм распада носит радикальный характер [22]. В табл. 1 показана схема разложения октадекана, полученная при мономолекулярной симуляции при 3500 К. Реакция инициирования (№1 в табл. 1) происходит за счет разрыва связи С–С, что согласуется с известным механизмом термического крекинга. Следует отметить, что при реалистичном термическом разложении углеводородов обычно требуется микросекунда до миллисекунды, но для реактивного моделирования временная шкала обычно ограничена несколькими наносекундами из-за вычислительных затрат. Следовательно, повышение температу-

ры вынужденная мера и необходима для ускорения реактивных событий.

Таблица 1

Схема превращения углеводородных фрагментов при мономолекулярном разложении октадекана при 3500 К.

№	Схема превращений	Время, пс	Состав финальной системы, 2.50 пс
1	$C_{18}H_{38} \rightarrow C_{12}H_{25} + \cdot C_6H_{13}$	0.59	$2 \times \cdot C_2H_5$
2	$\cdot C_6H_{13} \rightarrow \cdot C_4H_9 + C_2H_4$	0.64	$1 \times C_4H_8$
3	$\cdot C_{12}H_{25} \rightarrow \cdot C_{10}H_{21} + C_2H_4$	0.88	$5 \times C_2H_4$
4	$C_{10}H_{21} \rightarrow \cdot C_8H_{17} + C_2H_4$	1.13	
5	$\cdot C_8H_{17} \rightarrow \cdot C_6H_{13} + C_2H_4$	1.18	
6	$\cdot C_6H_{13} \rightarrow C_4H_8 + \cdot C_2H_5$	1.25	
7	$\cdot C_4H_9 \rightarrow \cdot C_2H_5 + C_2H_4$	1.43	

На рис. 1 показан профиль поверхности потенциальной энергии (ППЭ) стадии инициирования, реакция эндотермическая, энергия активации 79.05 ккал/моль соответствует разрыву связи С–С в алканах [23]. Реакция инициирования при высоких температурах моделирования и в условиях реального эксперимента при типичных температурах крекинга имеют аналогичных механизм [24]. При дальнейшей симуляции наблюдается разрыв связей в радикальных фрагментах  $\cdot C_6H_{13}$ ,  $C_{10}H_{21}$ ,  $C_8H_{17}$ ,  $C_4H_9$  с образованием более мелких радикалов и молекул этилена (реакции 2–5, 7 в табл. 1). В реакции 6 (табл. 1) углеводородный фрагмент распадается на циклобутан и этильный радикал. Эволюция мономолекулярной системы показана на рис. 2.

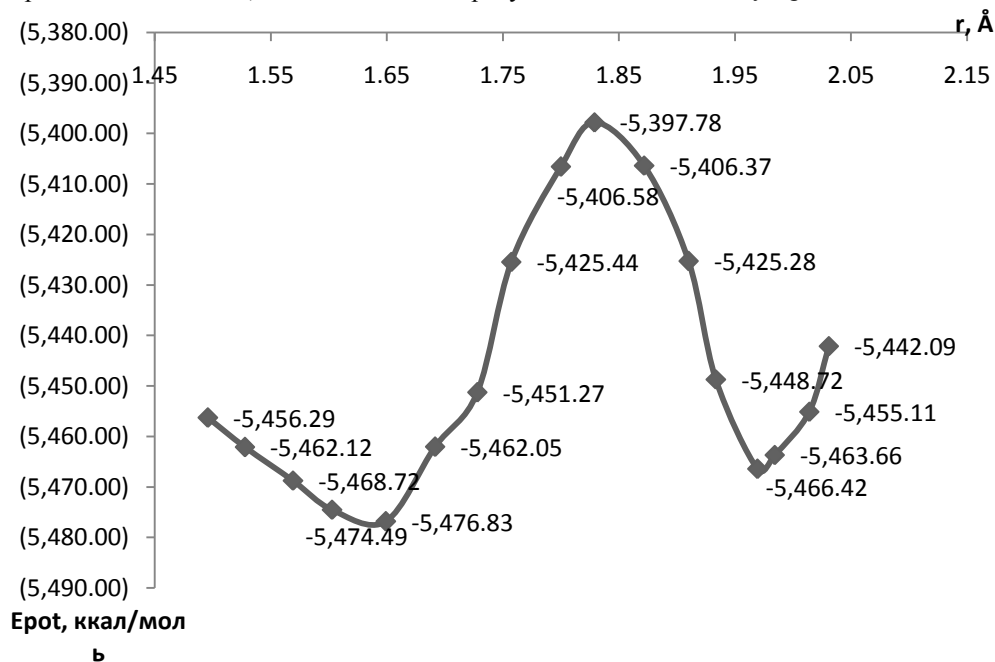


Рис. 1. ППЭ реакции инициирования  $C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{12}H_{25} + \cdot C_6H_{13}$  при 3500 К.

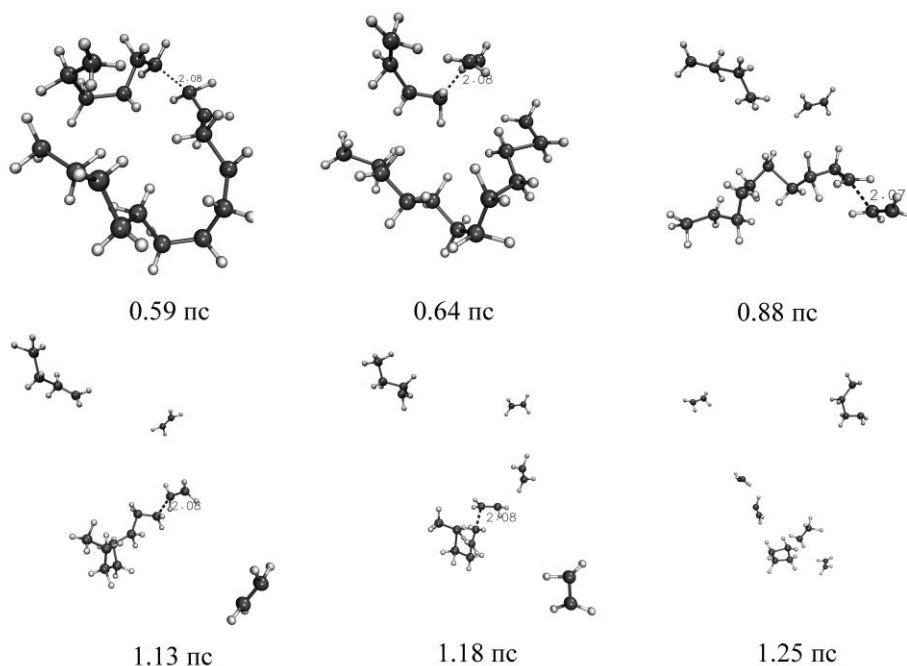


Рис. 2. Эволюция мономолекулярного термического разложения октадекана при 3500 К. Пунктиром показано место разрыва связи.

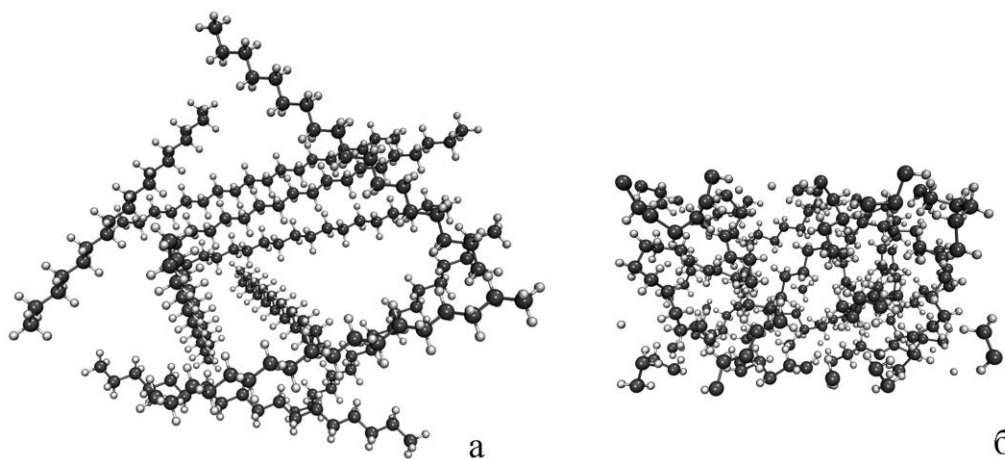


Рис. 3. Бокс с 10 молекулами октадекана: а – исходное приближение; б – уравновешенная система.

**Термическое разложение 10 молекул октадекана в боксе с периодическими граничными условиями.** Молекулы октадекана были помещены в случайном порядке в бокс размером  $35 \times 35 \times 35 \text{ \AA}$  (рис. 3а). В результате молекулярно-динамической симуляции в NPT-ансамбле при 298 К в течение 250 пс была получена система размером  $16.626 \times 13.126 \times 22.695 \text{ \AA}$  с плотностью 0.8526 г/мл (рис. 3б). Экспериментальное значение плотности октадекана – 0.7768 г/мл [25].

После приведения системы к нормальному физическому состоянию было выполнено молекулярно динамическое моделирование с реактивными итерациями при температуре 1773, 2273, 2773 К в течение 125 пс. Установлено, что при температуре 1773 К не наблюдается разрыва связей. На следующем температурном интервале при 2273 К наблюдаются следующие пути деструкции исходного вещества (табл. 2).

Таблица 2

Реакции с участием октадекана при 2273 К

№	Схема превращений	Время, пс	Состав финальной системы, 125 пс
1	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_3H_7 + \cdot C_{15}H_{31}$	47.94	$1 \times CH_4$ $17 \times C_2H_4$
2	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{14}H_{29} + \cdot C_4H_9$	52.79	$1 \times \cdot CH_2(CH_2)_2CH_2 \cdot$ $1 \times C_6H_{14}$
5	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{13}H_{27} + \cdot C_5H_{11}$	105.49	$5 \times C_{18}H_{38}$ $1 \times \cdot C_2H_5$
6	$C_{18}H_{38} + \cdot CH_3 \rightarrow C_{18}H_{37} + CH_4$	105.51	$1 \times \cdot C_5H_{11}$ $1 \times C_{13}H_{28}$
7	$C_{18}H_{38} + \cdot CH_3 \rightarrow C_{13}H_{28} + \cdot C_6H_{13}$	120.08	$1 \times \cdot C_6H_{13}$ $1 \times \cdot C_{18}H_{37}$

Таблица 3

Реакции с участием октадекана при 2773 К

№	Схема превращений	Время, пс	Состав финальной системы, 125 пс
1	$C_{18}H_{38} \rightarrow C_{12}H_{25} + \cdot C_6H_{13}$	1.25	$39 \times C_2H_4$ $5 \times H_2$
2	$C_{18}H_{38} \rightarrow CH_2=CH(CH_2)_5CH_3 + H_2$	2.34	$2 \times \cdot CH_2CH_2CH=CH_2$ $10 \times CH_4$
3	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{14}H_{29} + \cdot C_4H_9$	6.34	$8 \times CH_3CH=CH_2$ $1 \times CH_2=C=CH_2$
4	$C_{18}H_{38} + \cdot H \rightarrow \cdot C_{18}H_{37} + H_2$	7.54	$4 \times C_2H_6$ $1 \times CH_2=CHC \equiv CH$
5	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{15}H_{31} + \cdot C_3H_7$	15.14	$1 \times \cdot C_3H_7$ $4 \times CH_3-CHCH=CH_2$
6	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{17}H_{35} + \cdot CH_3$	19.38	$2 \times CH_2=CHCH=CH_2$ $1 \times CH_2=C \cdot CH=CH_2$
7	$C_{18}H_{38} + \cdot H \rightarrow \cdot C_{18}H_{37} + H_2$	20.28	$1 \times CH_2=CH(CH_2)_2CH=CH_2$ $1 \times CH_2=CHCH_2CH=CH_2$
8	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{15}H_{31} + \cdot C_3H_7$	24.16	$1 \times CH_2=C \cdot H$ $1 \times \cdot CH_3$
9	$C_{18}H_{38} \rightarrow \cdot C_{11}H_{21} + \cdot C_7H_{15}$	26.13	
10	$C_{18}H_{38} + \cdot CH_2(CH_2)_5CH_2 \cdot \rightarrow \cdot C_{18}H_{37} + \cdot C_7H_{15}$	33.84	

В промежуточных превращениях образуются бирадикалы. Бирадикалы при термическом разложении углеводородов экстремально неустойчивы и быстро диссоциируют на более мелкие углеводородные фрагменты в течении нескольких фемто секунд. Поэтому их трудно обнаружить с существующими экспериментальными методами анализа [23]. Бирадикалы обнаружены в следующих теоре-

тических работах [26–29]. Возможным условием образования бирадикалов может быть высокая энергия, подаваемая из внешнего источника [23].

При температуре 2773 К молекулы  $C_{18}H_{38}$  полностью расходуются в течение 34 пс (табл. 3). Происходит разрыва С–Н связи (реакция № 2), финальная система содержит более мелкие углеводородные фрагменты, по сравнению с симуляцией

при 2273 К, что обусловлено более высокой температурой вычислительного эксперимента.

Таким образом, проведено молекулярно-динамическое моделирование ReaxFF термического разложения октадекана с использованием силового поля C/H/O [20]. По результатам мономолекулярной деструкции, показано, что значение энергии активации реакции иницирования соответствует разрыву связи C–C в алканах и говорит о адекватности выбранного силового поля. Определены пути деструкции октадекана при моделировании 10 молекул в боксе с периодическими граничными условиями. Показано, что оптимальная температура моделирования находится в диапазоне 2273–2773 К. Полученные данные будут полезны при моделировании деструкции октадекана в присутствии нанокластеров никеля.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-00851.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Мустафин И. А., Абдуллин М. Ф., Судакова О. М., Мустафин А. Г., Галиахметов Р. Н., Валинурова Э. Р. Деструктивное превращение газойля в присутствии наноразмерного катализатора на основе никеля // Нефтехимия. 2018. Т. 58, №3. С. 275–281.
2. Мустафин И. А., Боков Л. Е., Галиахметов Р. Н., Судакова О. М., Ганцев А. В. Образование ультрадисперсной суспензии никеля и цинка в промышленном вакуумном газойле // Башкирский химический журнал. 2017. Т. 24, №1. С. 82–87.
3. Хаджиев С. Н., Кадиев Х. М., Кадиева М. Х. Синтез и свойства наноразмерных систем – эффективных катализаторов гидроконверсии тяжелого нефтяного сырья // Нефтехимия. 2014. Т. 54, №5. С. 327–351.
4. Ultrasound-Assisted Modification of Zeolite Catalyst for Dimethyl Ether Conversion to Olefins with Magnesium Compounds. / E. Kolesnikova E., K. Obukhova T., V. Kolesnichenko N., N. Bondarenko G., V. Arapova O., N. Khadzhiev S., 2018. P. 863–868.
5. Khadzhiev S. N. Nanoheterogeneous catalysis: A new sector of nanotechnologies in chemistry and petroleum chemistry (A review) // Petroleum Chemistry. 2011. Vol. 51, No 1. P. 1–15.
6. Applications of Nanocatalyst in New Era. / Chaturvedi S., Dave P., Shah N. K., 2012.
7. Catalysis: A brief review on Nano-Catalyst. / Singh S., Tandon P., 2014. P. 106–115.
8. Окунев А. Г., Пархомчук Е. В., Лысиков А. И., Парунин П. Д., Семейкина В. С., Пармона В. Н. Каталитическая гидропереработка тяжелого нефтяного сырья // Успехи химии. 2015. Т. 84, №9. С. 981–999.
9. Puyina M. G., Khamitov E. M., Galiakhmetov R. N., Mustafin I. A., Mustafin A. G. Enhancing 4-propylheptane dissociation with nickel nanocluster based on molecular dynamics simulations // Journal of Molecular Graphics and Modelling. 2017. Vol. 72. P. 106–111.
10. van Duin A. C. T., Goddard W. A., Islam M. M., van Schoot H., Trnka T., Yakovlev A. L. ReaxFF // Book ReaxFF / Editor. Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands: SCM, 2016.
11. Senftle T. P., Hong S., Islam M. M., Kylasa S. B., Zheng Y., Shin Y. K., Junkermeier C., Engel-Herbert R., Janik M. J., Aktulga H. M., Verstraelen T., Grama A., van Duin A. C. T. The ReaxFF reactive force-field: development, applications and future directions // Npj Computational Materials. 2016. Vol. 2. P. 15011.
12. Keith J. A., Fantauzzi D., Jacob T., van Duin A. C. T. Reactive forcefield for simulating gold surfaces and nanoparticles // Physical Review B. 2010. Vol. 81, No 23. P. 235404.
13. Islam M. M., Ostadhossein A., Borodin O., Yeates A. T., Tipton W. W., Hennig R. G., Kumar N., van Duin A. C. T. ReaxFF molecular dynamics simulations on lithiated sulfur cathode materials // Physical Chemistry Chemical Physics. 2015. Vol. 17, No 5. P. 3383–3393.
14. Huygh S., Bogaerts A., van Duin A. C. T., Neyts E. C. Development of a ReaxFF reactive force field for intrinsic point defects in titanium dioxide // Computational Materials Science. 2014. Vol. 95. P. 579–591.
15. Ostadhossein A., Rahnamoun A., Wang Y., Zhao P., Zhang S., Crespi V. H., van Duin A. C. T. ReaxFF Reactive Force-Field Study of Molybdenum Disulfide (MoS2) // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2017. Vol. 8, No 3. P. 631–640.
16. Mueller J. E., van Duin A. C. T., Goddard W. A. Development and Validation of ReaxFF Reactive Force Field for Hydrocarbon Chemistry Catalyzed by Nickel // The Journal of Physical Chemistry C. 2010. Vol. 114, No 11. P. 4939–4949.
17. Chenoweth K., van Duin A. C. T., Persson P., Cheng M.-J., Oxgaard J., Goddard W. A. Development and Application of a ReaxFF Reactive Force Field for Oxidative Dehydrogenation on Vanadium Oxide Catalysts // The Journal of Physical Chemistry C. 2008. Vol. 112, No 37. P. 14645–14654.
18. Raju M., Ganesh P., Kent P. R. C., van Duin A. C. T. Reactive Force Field Study of Li/C Systems for Electrical Energy Storage // Journal of Chemical Theory and Computation. 2015. Vol. 11, No 5. P. 2156–2166.
19. Zhang W., van Duin A. C. T. Improvement of the ReaxFF Description for Functionalized Hydrocarbon/Water Weak Interactions in the Condensed Phase // The Journal of Physical Chemistry B. 2018. Т. 122, №14. С. 4083–4092.
20. van Duin A. C. T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W. A. ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons // The Journal of Physical Chemistry A. 2001. Vol. 105, No 41. P. 9396–9409.
21. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics // Journal of Molecular Graphics. 1996. Vol. 14, No 1. P. 33–38.
22. Greensfelder B. S., Voge H. H., Good G. M. Catalytic and Thermal Cracking of Pure Hydrocarbons: Mechanisms of Reaction // Industrial & Engineering Chemistry. 1949. Vol. 41, No 11. P. 2573–2584.
23. Chen Z., Sun W., Zhao L. High-Temperature and High-Pressure Pyrolysis of Hexadecane: Molecular Dynamic Simulation Based on Reactive Force Field (ReaxFF) // The Journal of Physical Chemistry A. 2017. Vol. 121, No 10. P. 2069–2078.
24. Wang Q.-D., Hua X.-X., Cheng X.-M., Li J.-Q., Li X.-Y. Effects of Fuel Additives on the Thermal Cracking of n-Decane from Reactive Molecular Dynamics // The Journal of Physical Chemistry A. 2012. Vol. 116, No 15. P. 3794–3801.
25. National Center for Biotechnology Information. PubChem Compound Database; CID=11635, URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/11635>.
26. Chenoweth K., van Duin A. C. T., Dasgupta S., Goddard W. A. Initiation Mechanisms and Kinetics of Pyrolysis and Combustion of JP-10 Hydrocarbon Jet Fuel // The Journal of Physical Chemistry A. 2009. Vol. 113, No 9. P. 1740–1746.
27. Liu L., Bai C., Sun H., Goddard W. A. Mechanism and Kinetics for the Initial Steps of Pyrolysis and Combustion of 1,6-Dicyclopropane-2,4-hexyne from ReaxFF Reactive Dynamics // The Journal of Physical Chemistry A. 2011. Vol. 115, No 19. P. 4941–4950.
28. O'Neal H. E., Benson S. W. Biradical mechanism in small ring compound reactions // The Journal of Physical Chemistry. 1968. Vol. 72, No 6. P. 1866–1887.
29. Milov A. D., Ponomarev A. B., Tsvetkov Y. D. Electron-electron double resonance in electron spin echo: Model biradical systems and the sensitized photolysis of decalin // Chemical Physics Letters. 1984. Vol. 110, No 1. P. 67–72.

*Поступила в редакцию 28.11.2018 г.*

**REAXFF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION  
OF THERMAL DECOMPOSITION OF OCTADECANE**© **R. Kh. Shayakhmetova**<sup>1\*</sup>, **E. M. Khamitov**<sup>2</sup>, **A. G. Mustafin**<sup>1,2</sup><sup>1</sup>*Bashkir State University  
32 Zaki Validi Street, 450076 Ufa, Republic Bashkortostan, Russia.*<sup>2</sup>*Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of RAS  
71 Oktyabrya Avenue, 450054 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

Phone: +7(937) 343 41 99.

\*Email: shayakhmetovr@gmail.com

Addition of nickel 2-ethylhexanoate to fuel oil and vacuum gasoil during thermocatalytic processes leads to change of nature of the destructive processes. The reason of the change is formation in the hydrocarbon environment of nickel nanoparticles of 80 nanometers in size. In the present work, the study of thermal decomposition of octadecane was carried out. The decomposition process was studied in terms of molecular dynamics with ReaxFF potential. The authors considered the optimal conditions for modeling the catalytic cracking of the components of the heavy oil fraction in the presence of nickel nanoparticles with Ni/C/H force fields. According to the results of monomolecular destruction, it was shown that the value of the activation energy of the initiation reaction corresponds to the breaking of the C–C bond in alkanes. The pathways of destruction of octadecane were determined by modeling 10 molecules in a box with periodic boundary conditions. It is shown that the optimal simulation temperature lies within the range from 2273 K to 2773 K. The obtained data will be useful in modeling the destruction of octadecane in the presence of nickel nanoclusters.

**Keywords:** molecular dynamics, ReaxFF, cracking, octadecane, modeling.

Published in Russian. Do not hesitate to contact us at bulletin\_bsu@mail.ru if you need translation of the article.

**REFERENCES**

1. Mustafin I. A., Abdullin M. F., Sudakova O. M., Mustafin A. G., Galiakhmetov R. N., Valinurova E. R. *Neftekhimiya*. 2018. Vol. 58, No. 3. Pp. 275–281.
2. Mustafin I. A., Bokov L. E., Galiakhmetov R. N., Sudakova O. M., Gantsev A. V. *Bashkirskii khimicheskii zhurnal*. 2017. Vol. 24, No. 1. Pp. 82–87.
3. Khadzhiev S. N., Kadiev Kh. M., Kadieva M. Kh. *Neftekhimiya*. 2014. Vol. 54, No. 5. Pp. 327–351.
4. Ultrasound-Assisted Modification of Zeolite Catalyst for Dimethyl Ether Conversion to Olefins with Magnesium Compounds. / E. Kolesnikova E., K. Obukhova T., V. Kolesnichenko N., N. Bondarenko G., V. Arapova O., N. Khadzhiev S., 2018. Pp. 863–868.
5. Khadzhiev S. N. *Petroleum Chemistry*. 2011. Vol. 51, No 1. Pp. 1–15.
6. Applications of Nanocatalyst in New Era. / Chaturvedi S., Dave P., Shah N. K., 2012.
7. Catalysis: A brief review on Nano-Catalyst. / Singh S., Tandon P., 2014. Pp. 106–115.
8. Okunev A. G., Parkhomchuk E. V., Lysikov A. I., Parunin P. D., Semeikina V. S., Parmona V. N. *Uspekhi khimii*. 2015. Vol. 84, No. 9. Pp. 981–999.
9. Ilyina M. G., Khamitov E. M., Galiakhmetov R. N., Mustafin I. A., Mustafin A. G. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2017. Vol. 72. Pp. 106–111.
10. van Duin A. C. T., Goddard W. A., Islam M. M., van Schoot H., Trnka T., Yakovlev A. L. *ReaxFF. Book ReaxFF / Editor. Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands: SCM*, 2016.
11. Senftle T. P., Hong S., Islam M. M., Kylasa S. B., Zheng Y., Shin Y. K., Junkermeier C., Engel-Herbert R., Janik M. J., Aktulga H. M., Verstraelen T., Grama A., van Duin A. C. T. *Npj Computational Materials*. 2016. Vol. 2. Pp. 15011.
12. Keith J. A., Fantauzzi D., Jacob T., van Duin A. C. T. *Physical Review B*. 2010. Vol. 81, No 23. Pp. 235404.
13. Islam M. M., Ostadhossein A., Borodin O., Yeates A. T., Tipton W. W., Hennig R. G., Kumar N., van Duin A. C. T. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2015. Vol. 17, No 5. Pp. 3383–3393.
14. Huygh S., Bogaerts A., van Duin A. C. T., Neyts E. C. *Computational Materials Science*. 2014. Vol. 95. Pp. 579–591.
15. Ostadhossein A., Rahnamoun A., Wang Y., Zhao P., Zhang S., Crespi V. H., van Duin A. C. T. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2017. Vol. 8, No 3. Pp. 631–640.
16. Mueller J. E., van Duin A. C. T., Goddard W. A. *The Journal of Physical Chemistry* Pp. 2010. Vol. 114, No 11. Pp. 4939–4949.
17. Chenoweth K., van Duin A. C. T., Persson P., Cheng M.-J., Oxgaard J., Goddard W. A. *The Journal of Physical Chemistry* Pp. 2008. Vol. 112, No 37. Pp. 14645–14654.
18. Raju M., Ganesh P., Kent P. R. C., van Duin A. C. T. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2015. Vol. 11, No 5. Pp. 2156–2166.

19. Zhang W., van Duin A. C. T. The Journal of Physical Chemistry B. 2018. Vol. 122, No. 14. Pp. 4083–4092.
20. van Duin A. C. T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W. A. The Journal of Physical Chemistry A. 2001. Vol. 105, No 41. Pp. 9396–9409.
21. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. Journal of Molecular Graphics. 1996. Vol. 14, No 1. Pp. 33–38.
22. Greensfelder B. S., Voge H. H., Good G. M. Industrial & Engineering Chemistry. 1949. Vol. 41, No 11. Pp. 2573–2584.
23. Chen Z., Sun W., Zhao L. The Journal of Physical Chemistry A. 2017. Vol. 121, No 10. Pp. 2069–2078.
24. Wang Q.-D., Hua X.-X., Cheng X.-M., Li J.-Q., Li X.-Y. The Journal of Physical Chemistry A. 2012. Vol. 116, No 15. Pp. 3794–3801.
25. National Center for Biotechnology Information. PubChem Compound Database; CID=11635, URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/11635>.
26. Chenoweth K., van Duin A. C. T., Dasgupta S., Goddard W. A. The Journal of Physical Chemistry A. 2009. Vol. 113, No 9. Pp. 1740–1746.
27. Liu L., Bai C., Sun H., Goddard W. A. The Journal of Physical Chemistry A. 2011. Vol. 115, No 19. Pp. 4941–4950.
28. O'Neal H. E., Benson S. W. The Journal of Physical Chemistry. 1968. Vol. 72, No 6. Pp. 1866–1887.
29. Milov A. D., Ponomarev A. B., Tsvetkov Y. D. Chemical Physics Letters. 1984. Vol. 110, No 1. Pp. 67–72.

*Received 28.11.2018.*