

## 金属表面电场调控正癸烷裂解及沉积的分子动力学研究

周文君<sup>1,2</sup>, 陆毅<sup>1,2</sup>, 周伟星<sup>1,2</sup>, 贾贞健<sup>1,2</sup>

(1. 哈尔滨工业大学能源科学与工程学院, 哈尔滨 150000;

2. 哈尔滨工业大学郑州研究院, 郑州 450000)

**摘要:** 航空煤油在发动机喷嘴表面的裂解结焦现象影响了发动机的运行安全, 为了抑制喷嘴表面结焦, 本工作提出利用金属表面电场调控替代燃料正癸烷分子在金属表面的碳沉积过程。研究工作主要利用 ReaxFF 分子动力学方法模拟了不同温度下带电金属表面催化裂解过程, 研究发现低温裂解环境中, 带电 Ni 金属层通过提高正癸烷分子的吸附能和抑制分子扩散, 从而降低了催化裂解速率, 并抑制了金属表面的碳沉积。而高温环境中, 分子克服了表面电场对分子扭转和扩散运动的影响, 并通过改变金属电性调控电荷转移和脱氢反应程度, 进而调控正癸烷的裂解和沉积。在裂解结焦实验中, 正电荷金属表面抑制了结焦的生成。本工作为抑制航空发动机碳氢燃料裂解结焦提供了新的方法和理论基础。

**关键词:** ReaxFF; 正癸烷; 裂解; 结焦; 电场

中图分类号: TK16

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2025)02-0120-09

## Molecular Dynamics Study of Decomposition and Deposition of n-Decane Regulated by Electric Field on Metal Surface

Zhou Wenjun<sup>1,2</sup>, Lu Yi<sup>1,2</sup>, Zhou Weixing<sup>1,2</sup>, Jia Zhenjian<sup>1,2</sup>

(1. School of Energy Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150000, China;

2. Zhengzhou Research Institute, Harbin Institute of Technology, Zhengzhou 450000, China)

**Abstract:** The cracking and coking of aviation kerosene on the surface of the engine nozzle affects the operation safety of the engine. In order to inhibit the coking on the nozzle surface, this work proposes to use the electric field on the metal surface to regulate the carbon deposition process of the alternative fuel n-decane. The research work mainly uses the ReaxFF molecular dynamics method to simulate the catalytic cracking process on the charged metal surface at different temperatures. The study found that in the low-temperature cracking environment, the charged Ni metal layer reduces the catalytic cracking rate and inhibits the carbon deposition on the metal surface by increasing the adsorption energy of n-decane molecules and inhibiting molecular diffusion. In the high-temperature environment, the molecules overcome the influence of the surface electric field on the molecular torsion and diffusion motion. The electric field regulates the charge transfer and dehydrogenation reaction degree by changing the metal electrical properties, thereby regulating the cracking and deposition of n-decane. In the cracking and coking experiment, the positively charged metal surface inhibits the formation of coke. This work provides a new method

收稿日期: 2024-05-11.

基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2022YFE0204100); 国家自然科学基金重大研究计划资助项目(91741204); 国家自然科学基金资助项目(52106137).

作者简介: 周文君(1992—), 男, 博士研究生, zhouwj2019@163.com.

通信作者: 周伟星, 女, 博士, 教授, zhouweixing@hit.edu.cn.

and theoretical basis for inhibiting the cracking and coking of hydrocarbon fuels in aviation engines.

**Keywords:** ReaxFF; n-decane; pyrolysis; coke; electric field

吸热型碳氢燃料裂解对于提高航空发动机的换热具有一定效果,然而,燃料在高温环境中可能直接在喷嘴表面裂解积碳,导致局部换热恶化,影响发动机运行安全<sup>[1-3]</sup>.因此,碳氢燃料在金属壁面裂解结焦问题亟需解决.

碳氢燃料在高温环境下的裂解沉积速率与金属的活性有关,降低金属壁面的反应性是抑制壁面碳沉积的方法之一<sup>[4]</sup>.传统的抑制结焦的方法中,在金属壁面涂覆惰性涂层可以有效抑制燃油与壁面的反应<sup>[5-6]</sup>,然而涂层厚度控制成本较高,并且对于较长尺寸输油管的内壁难以形成均匀的涂层.成本低廉、不改变部件结构和成分的抑制结焦方法有待进一步地开发.降低壁面活性的机制在于抑制原子之间的电荷传递,而电场对于电荷的输运具有显著的影响<sup>[7-10]</sup>.因此,利用电场改变壁面和分子活性为抑制壁面结焦提供了可能.

在关于电场调控化学反应的研究中,Gray 等<sup>[11]</sup>利用带电金属表面构建匀强电场调控了甲烷蒸气重整反应中水的偶极矩,提高了甲烷重整效率,同时抑制了催化剂表面积碳.另外,电场对化学反应的方向表现出选择性. Shaik 等<sup>[12]</sup>尝试在酶催化反应中施加电场,通过调整电场的方向成功调控了酶催化反应方向. Fu 等<sup>[13]</sup>利用带正电荷的 Cu 提高对硝酸盐的选择性,从而提高 N<sub>2</sub> 的分离性能.在航空燃料的热化学反应研究中, Sayed 等<sup>[14]</sup>观察到在层流扩散火焰中施加电场可以减小碳颗粒的体积分数.已有研究的反应体系中均包含了大量电负性较高的离子化合物或等离子体,受到电场的调控作用显著<sup>[15-16]</sup>.对于非极性燃料的裂解过程,短链自由基是主要的裂解产物<sup>[17]</sup>,相对于离子化合物的电负性较弱,烷烃燃料在电场对烷烃的裂解影响规律和调控机理尚不明确.因此,本工作将针对非极性的正癸烷替代燃料在金属表面电场中的裂解结焦过程进行研究.

在微观反应机理研究中, ReaxFF 分子动力学方法<sup>[18]</sup>为化学反应的动态观察提供了更清晰的视角.而其中的电荷计算功能对于电化学反应过程的描述非常重要<sup>[19]</sup>.已有报道利用 ReaxFF 分子动力学方法开展电场反应体系的研究,说明了 ReaxFF 分子动力学方法对于描述高温电化学反应过程具有较好的适用性<sup>[20-22]</sup>.

航空发动机部件材料的成分包括 Ni、Ti、Al、Sn、

Zr、Si 和 C 等元素,对于镍基超合金材料,绝大部分为单晶 Ni 成分,包含了 2% ~ 3% 的 Ru<sup>[23]</sup>.因此本工作采用 ReaxFF MD 方法模拟了航空替代燃料正癸烷在 Ni 金属表面的裂解反应过程.通过评估不同电性 Ni 表面下正癸烷催化裂解速率、反应类型和产物数量分布,得到金属表面电场对燃料裂解沉积的影响规律.通过对系统能量、运动位移和电荷转移分析,揭示金属表面电场对燃料裂解过程的作用机理.这项工作为电场调节燃料裂解效率和碳沉积提供了详细的理论验证.

## 1 实验与模拟方法

### 1.1 模拟方法

本工作采用 LAMMPS<sup>[24]</sup>开源分子动力学计算程序包建立尺寸为 3.4 nm × 2.9 nm × 5.0 nm 的周期性边界盒子,空间底部放置 3 层 Ni 原子层,在原子层上方空间填充 20 个正癸烷分子,模拟 Ni 金属表面空间的正癸烷裂解结焦过程.在进行模拟反应前,反应体系在 300 K 下运行 10 ps 后使系统内分子达到平衡状态.高温裂解模拟过程中,保持 Ni 金属层温度在 500 K,避免金属原子飞离催化层.正癸烷分子的模拟温度设置在 2 100 ~ 2 400 K 之间,以加速反应进程.在金属表面电场的模拟中,设置 Ni 金属层为恒定电荷,通过调整表面电荷构建不同强度的表面电场,允许 Ni 金属与燃料之间交换电荷.图 1 为 3 种时间步长下的正癸烷分子数量变化,结果表明不同的时间步长会对反应的进程产生影响,20 ps 内正癸烷分子数在较大的时间步长下减少更快,考虑到计算成本,本工作选用 0.25 fs 作为时间步长,与 0.1 fs 的时间步长结果相对接近.模拟时间 200 ps,所有算例均

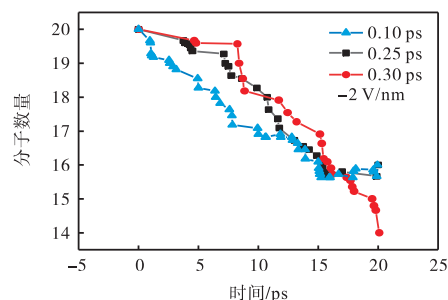


图 1 模拟时间步长对正癸烷裂解反应进程的影响  
Fig.1 Effect of simulation timestep on pyrolysis reaction process of n-decane

采用 NVT 系综,即体系的原子数量  $N$ 、体积  $V$  和温度  $T$  保持不变,系综采用 Nose-Hoover 恒温器来控制温度.力场采用 Mueller<sup>[25]</sup>发布的 Ni—C—H 力场.

### 1.2 实验方法

正癸烷裂解结焦的验证实验采用固定床反应器.如图 2 所示,反应系统由油泵、预热器、混合气瓶、石英反应器、泡沫镍电极片(1 mm × 1 mm)和直流电源组成.燃料从油泵进入到预热器后加热到 200 °C 进行气化,与氮气混合进入石英管反应器,混合气体被马弗炉加热到 650 °C 发生裂解反应,气体流速为 60 mL/min.在表面电场的模拟中,将泡沫 Ni 片连接在电路中以形成表面电场.公式(1)中,根据高斯定律<sup>[26]</sup>,选用 24 V 的电源和 20 MΩ 的电阻构建垂直于金属片方向的 1.95 V/nm 强度电场,与分子动力学模拟中 2 V/nm 的电场强度接近,通过反接电极可以构建-2 V/nm 的电场.实验结果使用扫描电子显微镜(SEM,在 20 kV 下操作的 FEI Quanta 200 FEG)对反应后的泡沫 Ni 片进行观测.

$$E = \frac{I}{2S \cdot \epsilon_0} \tag{1}$$

$$\epsilon_0 = 8.854\ 187\ 818 \times 10^{-12}$$

式中: $\epsilon_0$  是真空介电常数, F/m;  $I$  是电路的电流, A;  $S$  是金属上表面的面积, m<sup>2</sup>, 可以根据金属片的面积和电流计算得到.

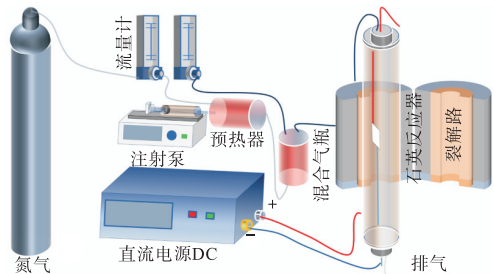


图 2 裂解实验系统装置

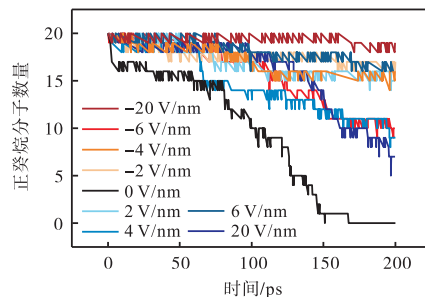
Fig.2 Experimental equipment of pyrolysis system

## 2 结果

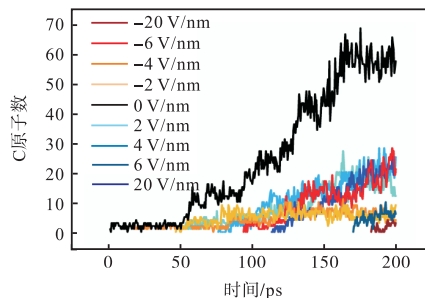
### 2.1 低温环境下电场对正癸烷裂解沉积的作用规律

图 3(a)比较了 2 100 K 下正癸烷在不同强度和方向时表面电场中的裂解情况.结果表明,正癸烷的裂解速率在 Ni 金属表面电场的作用下被抑制.在 -20 V/nm 的表面电场中正癸烷几乎不发生裂解,而在 20 V/nm 时仅有少部分分子裂解.对比正癸烷的平均裂解速率,由图 3(b)可知,电场抑制了分子沉积在 Ni 金属层表面.200 ps 时的分子空间分布如图 3(c)显示,相对于无电场情况,分子在电场作用下远

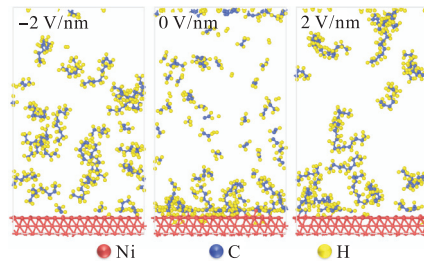
离金属表面,例如-2 V/nm 强度的电场下分子主要分布在反应空间的中间位置.结果表明 2 100 K 下正癸烷的裂解和分子沉积均受到电场的抑制.



(a) 正癸烷的分子消耗情况



(b) Ni 金属层表面的 C 原子数



(c) 反应体系内分子的空间分布

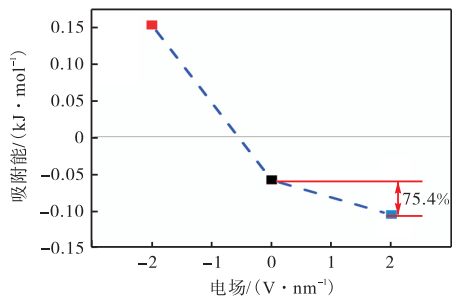
图 3 2 100 K 时不同强度表面电场中正癸烷在 Ni 表面的变化

Fig.3 Change of n-decane under the surface electric field of different intensities at 2 100 K

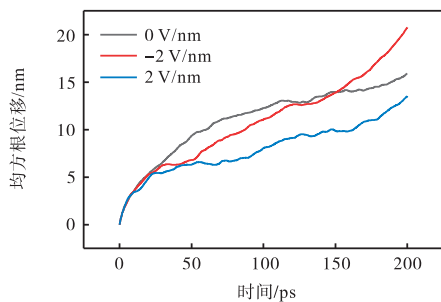
### 2.2 低温环境下电场抑制正癸烷裂解沉积的作用机理

为了揭示金属表面电场对正癸烷分子裂解和沉积抑制的作用机理,计算了 Ni 金属层对单个正癸烷分子吸附能,如图 4(a)所示,-2 V/nm 表面电场下吸附能为吸热反应,意味着分子在金属表面非常不稳定,从而抑制了正癸烷分子进一步的裂解和沉积.而在 2 V/nm 电场下,金属对分子的吸附过程为放热反应,相对于无电场情况吸附能显著提高,有利于分子的吸附,然而,这与正向电场抑制分子沉积的结果不一致.在均方根位移(root mean square displacement, RMSD)统计图中,发现电场限制了分子的扩散运动,尤其是正向表面电场的 RMSD 曲线显著降低,见图 4(b).另外,在分子吸附过程(50 ps 内)中,电场作用

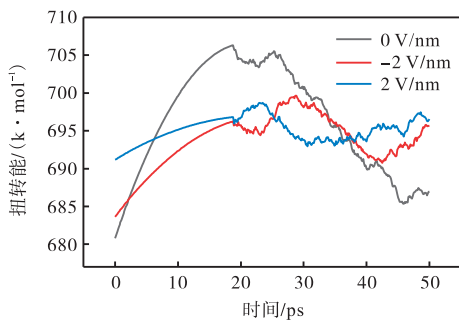
下分子的旋转也被抑制,不利于分子扩散到金属表面,因此降低了正电荷金属表面对正癸烷分子的吸附效果.



(a) Ni 金属表面的吸附能



(b) 反应体系的均方根位移



(c) 扭转能

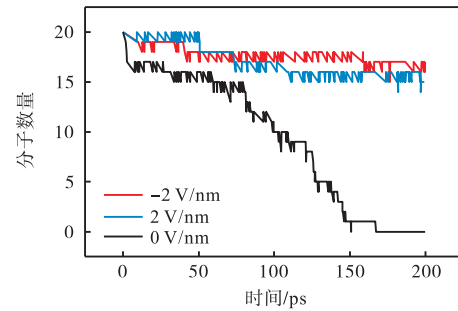
图 4 2100 K 下正癸烷分子在 Ni 金属表面相互作用

Fig.4 Interaction energy of n-decane molecules on Ni metal surface at 2100 K

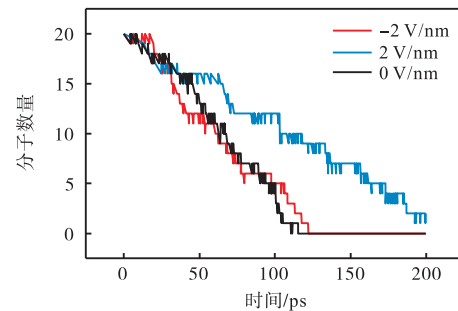
### 2.3 高温环境下电场对正癸烷裂解沉积的作用规律

在 2100 K 下正癸烷的裂解和碳沉积被金属表面电场抑制,有助于高温环境下保持燃油性质稳定,并减少壁面结焦.而在更高温度的燃烧环境中,分子的反应活性可能增强,而受到电场的抑制作用减弱.图 5 分析了不同温度下,金属表面电场对正癸烷裂解的影响.结果表明,随着反应温度的提高,分子的裂解速度相对于低温环境提高,电场对分子裂解的抑制作用减弱.随着温度提高,负向电场下的分子消耗逐渐加快.在 2300 K 时,负向电场相对于无电场更快地促进正癸烷分解,但正向电场仍然表现为抑制作用,此时,金属表面电场的方向性对分子的裂解速率具有

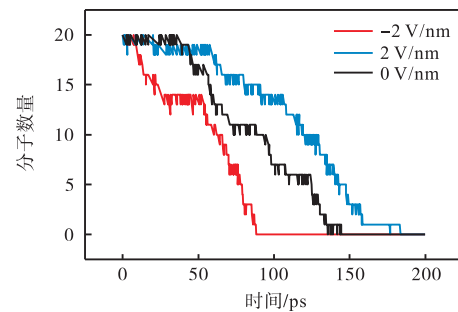
调控作用.



(a) 2100 K



(b) 2200 K



(c) 2300 K

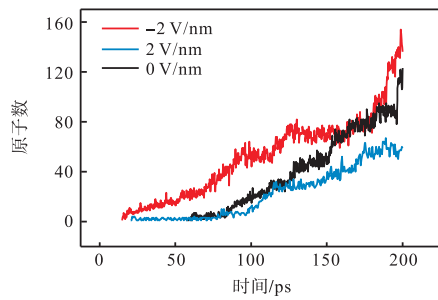
图 5 正癸烷在不同温度和表面电场下的分子消耗情况

Fig.5 Molecular consumption of n-decane at different temperatures and surface electric fields

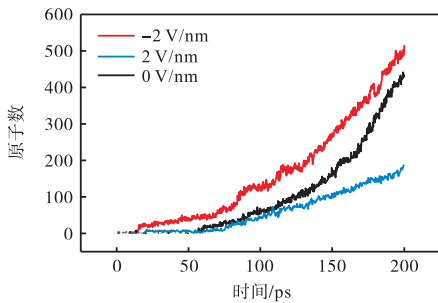
如图 6 所示,高温下金属表面的原子数量表明,电场对碳氢物质在金属表面沉积的作用与对正癸烷裂解的影响规律一致,负向电场加快了碳氢物质的沉积,而正向电场表现为抑制作用.相对于无电场作用,负电场不改变催化反应的比例,说明正癸烷的裂解进程被加速,但是不改变反应路径.而正电场中催化反应比例提高到 93.7%,说明虽然正电场中的裂解反应速率降低,但是空间内的正癸烷分解反应减少,只能通过与 Ni 进行催化裂解反应,在后续的反应类型数量分析中,也证明了正电场中的双分子裂解反应减少.

### 2.4 电场对金属壁面吸附分子的影响

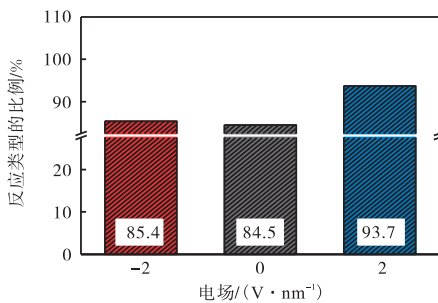
提高反应温度后,分子具有更高的动能,如图 7



(a) C 原子



(b) H 原子

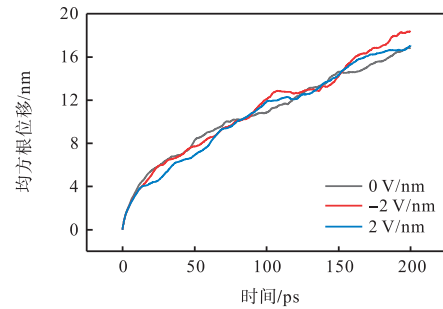


(c) 反应类型

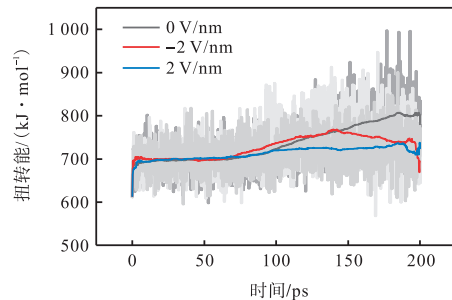
图 6 2300 K 下金属表面的碳氢原子数量和反应类型比例

Fig.6 Ratio of the number of carbon and hydrogen atoms and reaction types on the metal surface at 2300 K

和图 8 所示,在吸附阶段(75 ps 内),相对于低温反应,分子的运动位移受到电场的抑制作用显著减弱. 在 75 ps 内,负电荷金属表面附近的分子数量与无电场的情况相似;而正向电场对正癸烷分子的运动位移产生轻微的抑制,金属表面吸附的分子数量相对于负向电场较少,意味着较低的反应概率和沉积量. 分子在吸附阶段的旋转同样不再受到空间电场的影响,直到反应后期,由于分子与不同电性的金属表面发生反应才引起扭转能产生差别. 值得关注的是,在 100 ps 时,正癸烷在正电荷金属表面电场空间内已经发生裂解,但是没有沉积在金属表面. 结果表明,高温环境下电场可以调控裂解速率和碳沉积,利用正向电场可以减少金属壁面的碳沉积.



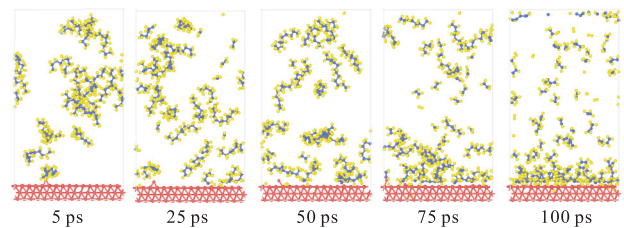
(a) 均方根位移



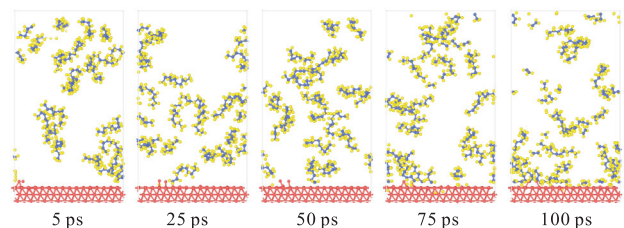
(b) 扭转能

图 7 2300 K 正癸烷催化裂解过程的运动和能量

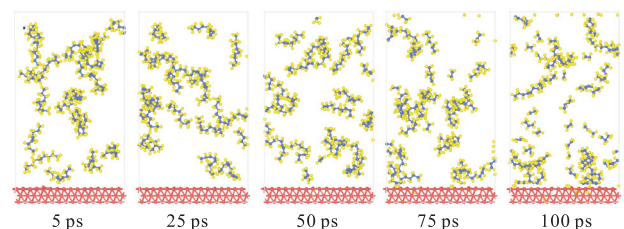
Fig.7 Motion and energy during the catalytic cracking of n-decane at 2300 K



(a) -2 V/nm



(b) 0 V/nm



(c) 2 V/nm

● Ni ● C ● H

图 8 2300 K 不同电性的 Ni 金属表面催化裂解正癸烷过程

Fig.8 Catalytic cracking of n-decane on Ni metal surface with different electrical properties at 2300 K

## 2.5 电场对裂解反应和产物的影响

Ni 金属对于烷烃的脱氢过程非常重要<sup>[27]</sup>, 如图 9 所示, 电场作用下正癸烷主要的裂解产物中, 氢自由基是产量最丰富产物. 引入电场后, 正向电场中氢自由基的最终产量相对于无电场情况提高了 18.6%, 而负向电场降低了 54.6%. 对应于反应过程中键数的变化, 如图 10 所示, 电场的方向调控了 C—H 键断裂和 Ni—H 键的增长速度, 进而调控了正癸烷的裂解速率. 在 100 ps 时, 负方向电场中 C—C 键数量趋于稳定, 此时乙烯的数量开始减少, 而氢气增长, Ni—C 键持续增长加速金属表面结焦. 而正向电场延迟了乙烯产生的时间, 并抑制了乙烯的脱氢, 从而未产生大量的氢气. 结果表明, 负向电场加速了正癸烷裂解沉积进程, 而负电场改变了裂解反应路径, 抑制脱氢反应, 从而减少碳沉积.

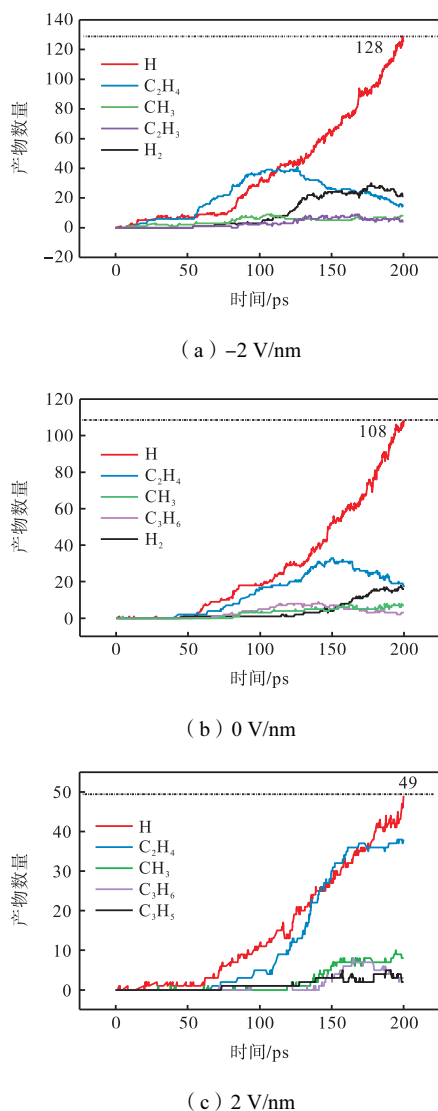


图 9 2300 K 时电场下正癸烷的主要裂解产物

Fig.9 Main pyrolysis products of n-decane at different temperatures and electric fields at 2300 K

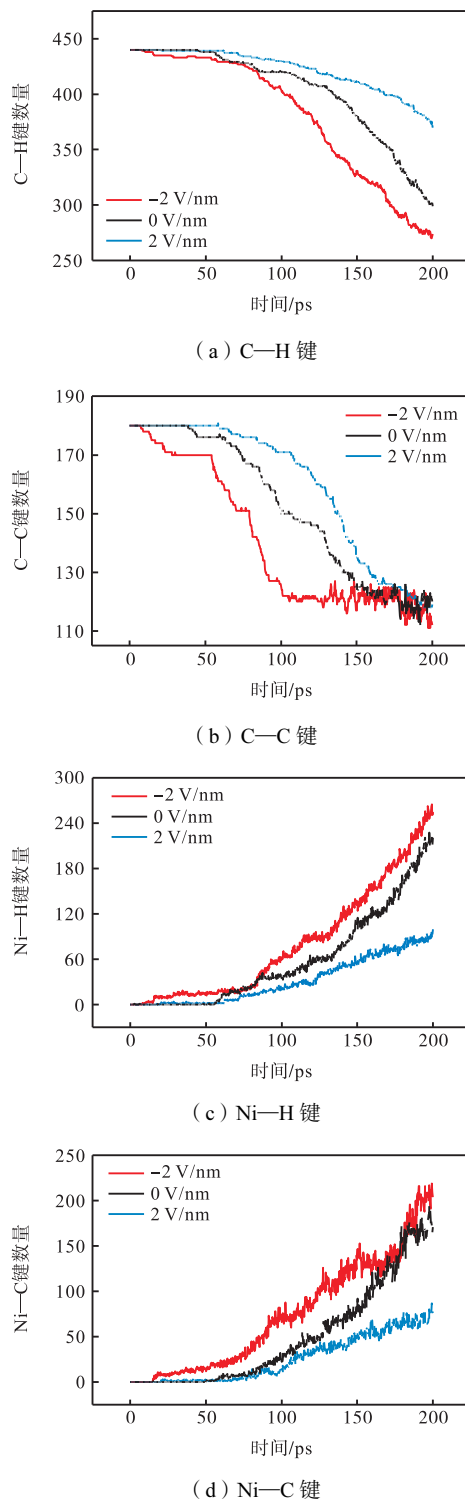


图 10 电场作用下化学键的数量

Fig.10 The number of main products and chemical bonds under the electric field

在反应过程中, 分子可能在金属表面发生脱氢反应, 双分子裂解反应和加成反应. 图 11 为各反应类型的数量随时间的变化, 负电性的金属表面对正电性的氢原子具有更强的吸引力, 有利于脱氢反应发生, 从而生成更多的自由基参与双分子裂解反应. 相反地, 正电金属表面不利于脱氢反应发生, 导致双分子

反应和加成反应均被抑制,从而降低了分子的裂解和金属表面碳生长速率.

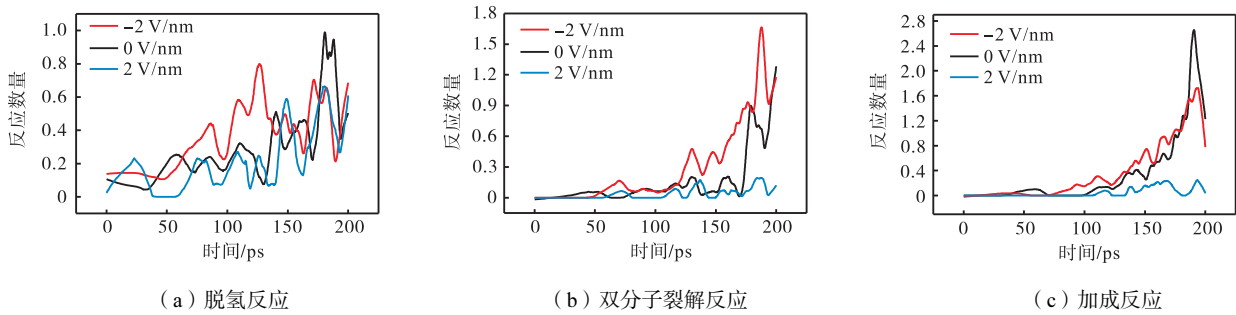


图 11 2300 K 各类型反应数量

Fig.11 Reaction number of different types at 2300 K

2.6 电场调控催化裂解过程中的电荷传递

催化裂解过程中正癸烷与金属不断进行电荷转移,图 12 分析了各元素的电荷变化,结果表明,反应过程中 Ni 金属的电子向燃料分子转移,燃料的整体电荷数持续降低,金属表面空间内燃料组分的电负性

增强. 电荷的转移速度随着温度升高而增加,增强分子反应活性,而电场通过改变金属的电性调控了分子的电荷传递速率. 在电荷传递过程中, C 原子的电荷下降趋势与 C—C 键数量的变化一致. Ni—H 键和 Ni—C 键的形成引起了 H 和 C 电荷下降,而负电性

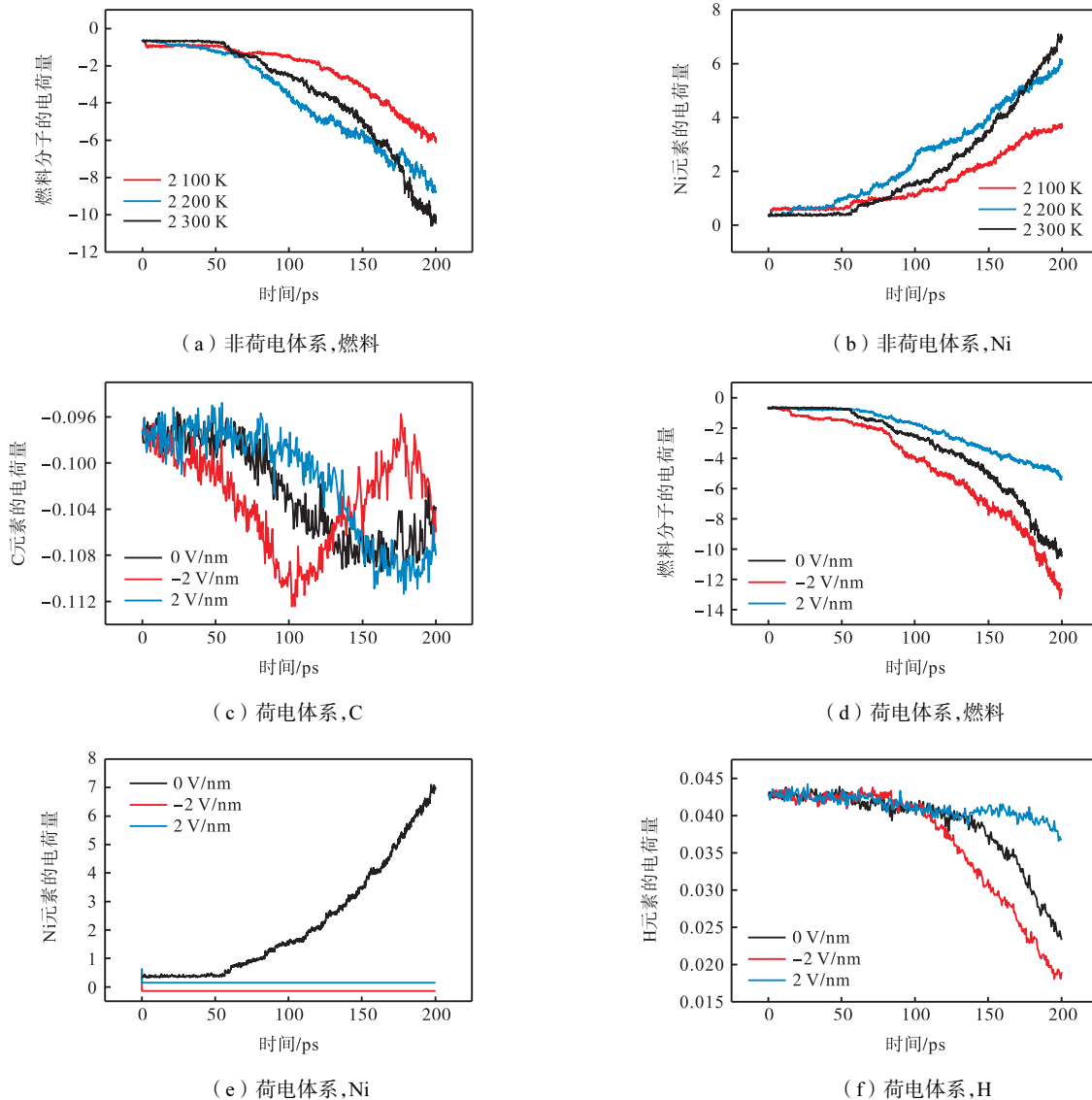


图 12 2300 K 下裂解体系内各组分的电荷变化

Fig.12 Charge changes of each component in the pyrolysis system at 2300 K

的 Ni 金属具有更强的夺氢能力,加快了 Ni 向 H 传递电子. 100 ps 后,正癸烷的裂解产物沉积在 Ni 表面后进行电荷平衡,当 C 的电荷小于 Ni 时,C 的电荷值逐渐升高. 由于正电性金属表面与 H 具有相同的电性,抑制了负电场中 H 的电荷转移,不利于脱氢反应进行. 自由基产物在 Ni 表面的电荷传递被抑制.

### 2.7 电场对金属壁面吸附分子的影响

在 2300 K 下,正电 Ni 金属抑制了碳氢物质的沉积,如图 13 所示,正电金属表面的碳原子相对无电场和负向电场减少. 在 Ni 金属催化正癸烷裂解的实验中负电金属表面电场在 650 °C 下抑制了焦炭的生成. 并且在放大的 SEM 图像中, Ni 表面的丝状碳明显减少,验证了金属电性对裂解结焦具有调控的作用.

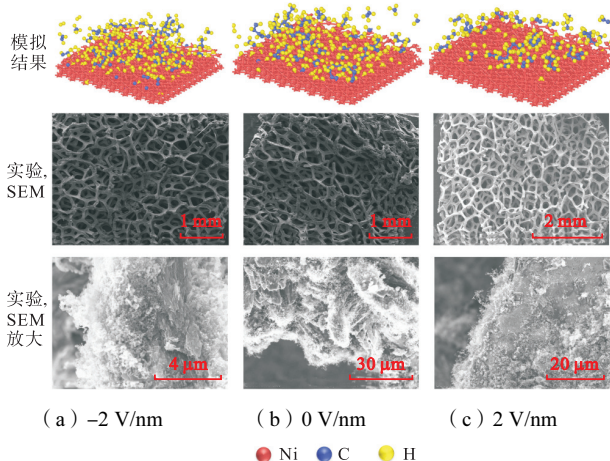


图 13 Ni 金属催化裂解正癸烷反应后的表面形貌

Fig.13 Surface morphology after catalytic cracking of n-decane on a Ni metal

## 3 结论

本研究利用分子动力学方法模拟了正癸烷分子在 Ni 金属表面的催化裂解过程. 研究发现,在低温环境中,带电荷的 Ni 金属层降低了正癸烷分子的裂解速率,同时抑制了分子在金属表面的沉积. 在详细的反应过程中,一方面,正向表面电场中,正癸烷分子吸附到 Ni 表面的能量相对于无电场情况降低了 75.4%,而负电荷表面吸附正癸烷分子为吸热反应,造成表面吸附的分子不稳定. 而另一方面,表面电场对正癸烷分子的旋转产生抑制作用,限制了分子扩散到 Ni 金属表面,从而降低了 Ni 催化正癸烷的概率和金属表面的碳沉积量.

当提高反应温度时,分子获得更高的动能,克服了电场对分子扭转和扩散运动的影响,正癸烷在金属表面催化裂解的速率相对于低温环境提高. 随着模

拟温度提高到 2300 K 时,带电金属表面对正癸烷裂解表现为正电荷抑制和负电荷促进的选择性. 负电荷 Ni 表面由于具有更强的氧化能力,促进了脱氢反应发生,产生更多的自由基参与正癸烷的双分子裂解反应;而正电荷 Ni 抑制了 H 的电荷转移,不利于脱氢反应进行,从而抑制了正癸烷的裂解,而未脱氢的碳氢分子不易沉积在金属表面. 在正癸烷裂解结焦实验中,负电荷 Ni 表面附着焦炭较多,而正电荷表面抑制了结焦的生成. 本工作为抑制航空发动机碳氢燃料裂解结焦提供了新的方法和理论基础.

### 参考文献:

- [1] Wang Chong, Du Chongpeng, Shang Jianxuan, et al. A comprehensive review of the thermal cracking stability of endothermic hydrocarbon fuels[J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2023, 169: 105867.
- [2] Xu Keke, Sun Xing, Meng Hua. Conjugate heat transfer, endothermic fuel pyrolysis and surface coking of aviation kerosene in ribbed tube at supercritical pressure [J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2018, 132: 209-218.
- [3] Wang Renting, Ye Tongqi, Bao Zewei, et al. Numerical analysis of pyrolysis and coking of aviation kerosene in a rectangular U-bend tube under one-side heating[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2023, 214: 124379.
- [4] 高爽,唐石云,胡生望,等. TiN 和 TiC 涂层对碳氢燃料裂解结焦的影响[J]. *燃料化学学报*, 2014, 42(8): 1017-1024.  
Gao Shuang, Tang Shiyun, Hu Shengwang, et al. The anti-coking effect of TiN and TiC coatings during pyrolysis of hydrocarbon fuel[J]. *Journal of Fuel Chemistry and Technology*, 2014, 42(8): 1017-1024(in Chinese).
- [5] Altina O, Esera S, Jamesb A, et al. Ti and Al oxide coatings on in conel718 against metal sulfide formation and carbon deposition from heated JP-8 fuel[J]. *ACS Division of Fuel Chemistry*, 2004, 49(2): 778-780.
- [6] 邹腾修,龚贤龙,邓松辉,等. MOCVD 制备中温 TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 复合涂层及其抑焦性能研究[J]. *化学研究与应用*, 2018, 30(7): 1179-1185.  
Zou Tengxiu, Gong Xianlong, Deng Songhui, et al. Preparation and anti-coking performance of TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composite coatings by MOCVD[J]. *Chemical Research Application*, 2018, 30(7): 1179-1185(in Chinese).
- [7] Sellner Bernhard, Valiev Marat, Kathmann Shawn M.

- Charge and electric field fluctuations in aqueous nacl electrolytes[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2013, 117(37): 10869-10882.
- [8] Borca Bogdana, Michnowicz Tomasz, Pétuya Rémi, et al. Electric-field-driven direct desulfurization[J]. *ACS Nano*, 2017, 11(5): 4703-4709.
- [9] Shetty Manish, Ardagh M A, Pang Yutong, et al. Electric-field-assisted modulation of surface thermochemistry[J]. *ACS Catalysis*, 2020, 10(21): 12867-12880.
- [10] Li Dan, Jing Wenheng, Li Shuaiqiang, et al. Electric field-controlled ion transport in TiO<sub>2</sub> nanochannel[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2015, 7(21): 11294-11300.
- [11] Gray Jake T, Che Fanglin, Mcewen Jean-Sabin, et al. Field-assisted suppression of coke in the methane steam reforming reaction [J]. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2020, 260: 118132.
- [12] Shaik Sason, Mandal Debasish, Ramanan Rajeev. Oriented electric fields as future smart reagents in chemistry [J]. *Nature Chemistry*, 2016, 8(12): 1091-1098.
- [13] Fu Wenyang, Du Yingying, Jing Jiana, et al. Highly selective nitrate reduction to ammonia on CoO/Cu foam via constructing interfacial electric field to tune adsorption of reactants[J]. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2023, 324: 122201.
- [14] Sayed-Kassem Ahmad, Gillon Pascale, Idir Mahmoud, et al. On the effect of a DC electric field on soot particles' emission of a laminar diffusion flame[J]. *Combustion Science and Technology*, 2022, 194(1): 213-224.
- [15] Yontar A, Küçükosman R, Değirmenci H. Exploring electric field forces and polarization influence on combustion in Fe-additive fuel droplets[J]. *Fuel*, 2024, 367: 131544.
- [16] Zuo Lei, Wang Junfeng, Mei Deqing, et al. Electric field-influencing combustion behaviors of droplets of ethanol, biodiesel and diesel[J]. *Fuel*, 2024, 357: 129649.
- [17] Wang Pan, Yan Jia, Yan Tong, et al. Kinetic study of H-abstraction and preliminary pyrolysis of n-decane in post-injection fuels[J]. *Combustion and Flame*, 2024, 262: 113367.
- [18] van Duin Adri C T, Dasgupta Siddharth, Lorant Francois, et al. ReaxFF: A reactive force field for hydrocarbons[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2001, 105(41): 9396-9409.
- [19] Rappe Anthony K, Goddard William A. Charge equilibration for molecular dynamics simulations[J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 1991, 95(8): 3358-3363.
- [20] Zhou Wenjun, Zhou Weixing, Yifei Yue, et al. A ReaxFF and DFT study of effect and mechanism of an electric field on JP-10 fuel pyrolysis[J]. *Journal of the Energy Institute*, 2023, 111: 101445.
- [21] Yu Minggao, Lou Rongyang, Li Haitao, et al. Reactive force field molecular dynamics (ReaxFF-MD) simulation of lignite combustion under an external electric field[J]. *Fuel*, 2024, 358: 130184.
- [22] Koski Jason P, Moore Stan G, Clay Raymond C, et al. Water in an external electric field: Comparing charge distribution methods using ReaxFF simulations[J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2022, 18(1): 580-594.
- [23] 张鹏, 朱强, 秦鹤勇, 等. 航空发动机用耐高温材料的研究进展[J]. *材料导报*, 2014, 28(11): 27-31.
- Zhang Peng, Zhu Qiang, Qin Heyong, et al. Research progress of high temperature materials for aero engines [J]. *Materials Reports*, 2014, 28(11): 27-31 (in Chinese).
- [24] Thompson Aidan P, Aktulga H M, Berger Richard, et al. LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales[J]. *Computer Physics Communications*, 2022, 271: 108171.
- [25] Mueller Jonathan E., van Duin Adri C T, Goddard William A. Development and validation of ReaxFF reactive force field for hydrocarbon chemistry catalyzed by nickel[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2010, 114(11): 4939-4949.
- [26] Liang Chengsheng. The strength distribution of uniform charged spherical producing electric field[C]//*Proceedings of the Software Engineering and Knowledge Engineering: Theory and Practice*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [27] Klimesch P, Henzler M. The kinetics of dehydrogenated adsorption of ethylene on Ni(111) [J]. *Surface Science*, 1979, 90(1): 57-64.