

## 电场辅助 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧的反应分子动力学研究

洪樱珊, 王静, 黄福全, 姜曦灼  
(东北大学机械工程与自动化学院, 沈阳 110819)

**摘要:** 采用反应力场分子动力学方法 (ReaxFF MD) 研究了电场辅助条件下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中的燃烧特性。明确了反应过程中 NH<sub>3</sub> 分子数、中间产物种类及重要自由基随电场强度的变化规律, 以及电场强度对燃烧反应路径的影响。结果表明, 电场缩短了第一个 NH<sub>3</sub> 分子的分解时间, 改变了 NH<sub>3</sub> 消耗速率及 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧的系列反应路径, 从而影响了氮氧化物 (NO<sub>x</sub>) 生成量。从微观层面揭示了外加电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧反应的影响, 为利用外加电场调控燃烧提供了理论依据。

**关键词:** 电场; NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧; 反应力场; 分子动力学; 氮氧化物 (NO<sub>x</sub>)

**中图分类号:** TK16 **文献标志码:** A **文章编号:** 1006-8740 (2024) 06-0619-07

### Reactive Force Field Molecular Dynamics Study of NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> Combustion Assisted by an Electric Field

Hong Yingshan, Wang Jing, Huang Fuquan, Jiang Xizhuo  
(School of Mechanical Engineering and Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China)

**Abstract:** In this study, a reactive force field molecular dynamics (ReaxFF MD) method was used to investigate the NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> combustion in air assisted by an electric field. The variation of numbers of reactants, intermediate species and representative radicals with varying electric strengths was investigated. The reaction pathways under varying electric field strengths were revealed. The results show that the electric field shortens the time that the first NH<sub>3</sub> molecule decomposes, alters the consumption rate of NH<sub>3</sub> and the reaction pathways, and therefore affects the yield of nitrogen oxides. This paper reveals the mechanism for the effects of the electric field on the combustion from the atomic perspective and lays theoretical foundations for regulating combustion via the external electric field.

**Keywords:** electric field; NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> combustion; reactive force field; molecular dynamics; nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>)

氨作为一种新型清洁燃料, 可有效减少二氧化碳排放、减缓温室效应<sup>[1-2]</sup>, 但同时氨也存在点火困难、层流火焰速度低、稳定性差等缺点<sup>[3]</sup>, 且氨在空气中不完全燃烧会产生氮氧化物 (NO<sub>x</sub>)。在 NH<sub>3</sub> 中添加一

些具有反应活性的气体 (如 CH<sub>4</sub> 等<sup>[3-5]</sup>) 可以改善氨的燃烧特性、提高燃烧效率等, 但研究也表明在加入 CH<sub>4</sub> 后, NO<sub>x</sub> 的生成量会有所增加<sup>[6-7]</sup>。

利用电场增强燃烧、控制燃烧火焰特性是一种提

收稿日期: 2024-03-01.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (52106132, 52211530095).

作者简介: 洪樱珊 (1998—), 女, 硕士研究生, 2270328@stu.neu.edu.cn.

通信作者: 姜曦灼, 女, 博士, 教授, jiangxz@mail.neu.edu.cn.

高能源转化效率、降低燃烧污染物排放的手段<sup>[8-9]</sup>。多年来人们开展了各种实验和数值工作来研究直流电场对火焰燃烧行为的影响<sup>[10-11]</sup>。研究表明,电场可以改变燃烧反应区域中的离子分布和电荷分布,从而改变火焰的形态<sup>[12]</sup>和稳定性<sup>[13-15]</sup>,以及降低燃烧过程中污染物质的排放<sup>[16]</sup>。一般来说,外电场对火焰特性的影响可以归结为两个主要因素,一是“离子风”假说,即电场通过改变微观带电粒子的运动,增加带电粒子与其他中性原子或分子碰撞和动量交换的频率,从而改变火焰行为<sup>[17-18]</sup>,二是电场促使更多的带电自由基移动到反应区,从而激发链式反应<sup>[19-20]</sup>。

为了揭示电场对燃烧特性的影响,前人开展了系列研究。Luo 等<sup>[21]</sup>揭示了外加直流电场对小型扩散火焰中的速度场、质量分数分布和温度场的影响。Chien 等<sup>[22]</sup>实验研究了直流电场对层流扩散火焰的影响,观察到火焰高度向负极方向的单向增长,并指出离子风有时会促进火焰与周围空气的混合。这些研究都证明电场改变了燃烧特性。还有一部分研究者从微观层面上探索了电场对反应速率、NO<sub>x</sub> 排放以及基元反应路径的影响<sup>[23-26]</sup>。Jiang 等<sup>[23-24]</sup>利用反应力场和电子力场分子动力学模拟方法研究了电场辅助乙醇氧化反应,揭示了电场在改变反应活化能、调控反应路径和影响产物生成分布方面的作用机制。Bai 等<sup>[26]</sup>研究了电场对 C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N(化石燃料中主要含氮化合物)燃烧过程中燃料 NO<sub>x</sub> 形成的影响,表明电场能降低 C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N 燃烧过程中 CO 和 NO 的排放。

鉴于电场在改善燃烧特性和控制 NO<sub>x</sub> 方面的潜在优势,如果将电场作用于 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧反应,可以期待电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧特性和 NO<sub>x</sub> 排放的改变。然而,目前鲜有文献报道电场条件下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧反应的特性,还需要针对电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧的影响开展进一步的研究。

综上所述,本文采用反应分子动力学模拟方法研究不同强度的外加电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧的影响。首先将研究电场对反应物反应速率及开始时间的影响,考察生成物种类随时间演化规律,对比分析电场对反应路径及中间产物和自由基的影响,最后探索电场对 NO<sub>x</sub> 的排放的影响。

## 1 研究方法

### 1.1 反应分子动力学

反应力场(reactive force field, ReaxFF)分子动力学模拟(molecular dynamics, MD)是一种基于力场的分子模拟方法。与传统的分子动力学模拟方法不同,

其模拟框架结合了量子力学计算和经典力学模拟的优势,能够模拟复杂的化学反应过程。反应力场的势能可以用方程表示为

$$E_{\text{system}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{over}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{tors}} + E_{\text{vdWaaals}} + E_{\text{Coulomb}} + E_{\text{specific}}$$

式中:  $E_{\text{system}}$  为系统总能量;  $E_{\text{bond}}$ 、 $E_{\text{over}}$ 、 $E_{\text{angle}}$  和  $E_{\text{tors}}$  分别代表键能、过饱和键能、键角能和扭转(二面角)能;  $E_{\text{Coulomb}}$  为静电相互作用能;  $E_{\text{vdWaaals}}$  为范德华力相互作用势能;  $E_{\text{specific}}$  为根据研究内容设置的特定能量<sup>[27]</sup>。ReaxFF 力场最初是针对碳氢化合物开发的<sup>[28]</sup>,后来扩展到更广泛的系统。它的可靠性和有效性已通过广泛的试验验证,具体介绍可在文献<sup>[27-28]</sup>中获得。

### 1.2 算例

为研究电场强度对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧过程的影响,选取 6 个不同的电场强度 ( $E = 2 \times 10 \text{ V/m}$ 、 $2 \times 10^2 \text{ V/m}$ 、 $2 \times 10^3 \text{ V/m}$ 、 $2 \times 10^4 \text{ V/m}$ 、 $2 \times 10^5 \text{ V/m}$ 、 $2 \times 10^6 \text{ V/m}$ ) 应用于该系统。电场强度的选择均基于以往研究<sup>[24, 29]</sup>。为了便于比较,设置了一个没有施加电场的 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中的反应,其模拟结果与以往研究一致<sup>[5]</sup>,验证了模型的准确性。本研究共涉及 7 种情况,每种情况分别设置了 5 组不同的初始结构,共进行 35 次模拟。

本研究模拟体系压力为 0.5 MPa,计算得到模拟盒子边长为 431 nm,模拟体系中 NH<sub>3</sub>、CH<sub>4</sub>、O<sub>2</sub> 和 N<sub>2</sub> 的分子数分别为 200 个、100 个、2 000 个和 7 800 个。模拟过程使用周期性边界条件,在正则系综(NVT)下进行。时间步长选取 0.1 fs,每 1 ps 输出一原子轨迹。体系的温度控制采用 Nosé-Hoover 热浴法<sup>[30]</sup>。选取 0.3 的键序截断值<sup>[24]</sup>识别标准分析模拟过程的中间产物。

在对系统进行升温模拟之前首先在低温条件下对模型进行平衡计算,以避免模拟过程中出现能量过高导致模型崩溃的现象。平衡温度为 300 K,平衡时间持续 40 ps。待体系能量基本稳定后,在没有电场情况下进行 500 ps 升温,体系温度从 300 K 逐渐加热到 3 000 K。500 ps 后保持 3 000 K 的温度,同时将上述强度之一的电场施加到  $x$  轴正方向上。

### 1.3 模拟细节

本研究采用的分子动力学模拟平台为 LAMMPS<sup>[31]</sup>(large-scale atomic/molecular massively parallel simulator),使用 C/H/N/O<sup>[32]</sup>力场参数进行计算,此力场的正确性在以往研究中已经过验证。分子结构可视化采用 VMD 软件<sup>[33]</sup>,反应路径使用 ChemTraYzer<sup>[34]</sup>脚本代码分析,该代码是针对

ReaxFF MD 方法开发的辅助软件,其通过统计学方法获取 MD 模拟复杂化学反应网络的定量模型,与以前的 MD 机制研究相比,该方法允许我们从单个模拟中识别、量化和评估多种反应. 其余后处理使用自编代码实现.

初始模型的构建借助 PACKMOL<sup>[35]</sup>代码实现,图 1 所示为本研究中一种典型的模拟初始构型.

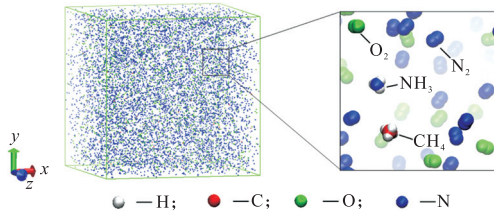


图 1 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 模拟体系初始构型

Fig.1 One model initial configuration of the NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> system

## 2 结果分析与讨论

### 2.1 电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧反应的影响

图 2(a) 和 (b) 研究了不同电场强度  $E$  下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧过程中 NH<sub>3</sub> 和 CH<sub>4</sub> 分子的消耗速率,可以看出电场对燃料反应速率的影响呈非线性关系. 如图 2(a) 所示,低强度外加电场 ( $E$  为  $2 \times 10$  V/m、 $2 \times 10^2$  V/m) 在前 6000 ps 延缓了 NH<sub>3</sub> 的反应速率,而中高强度电场对 NH<sub>3</sub> 反应速率的影响不明显. 此外,在 6000 ps 之后,无电场情况下 NH<sub>3</sub> 的反应速率逐渐超过有电场的情况. 对于图 2(b),可以观察到在 4000 ps 以前,电场加速了 CH<sub>4</sub> 分子的反应速率.

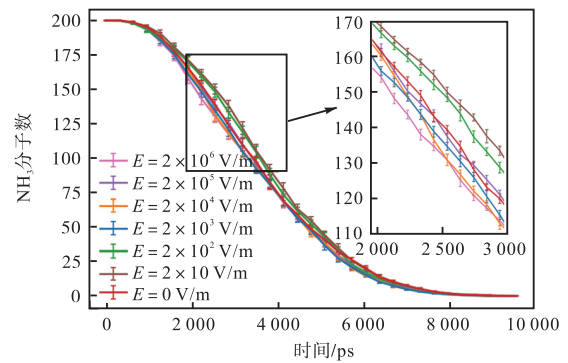
同时,为了研究电场对 NH<sub>3</sub> 燃烧点火性能的影响,对每组电场强度下第 1 个 NH<sub>3</sub> 分子分解开始的时刻进行了统计. 如图 2(c) 所示,电场强度为  $2 \times 10^4$  V/m 时 NH<sub>3</sub> 分解的最早,无电场条件下 NH<sub>3</sub> 首次分解的时间最晚,这说明施加电场缩短了第 1 个 NH<sub>3</sub> 分子分解的时间,这也意味着宏观上,电场会缩短 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中的点火延迟时间.

图 2(d) 表示不同电场强度下生成的中间产物物质种类随时间的变化规律. 总体趋势表明物质种类呈现先增加后减少的趋势,但随电场变化的复杂性尤为显著. 电场是导致新物质产生还是仅仅改变了反应速率而不改变中间产物的种类尚不可知. 因此,需要进一步分析反应过程的生成物以及反应路径.

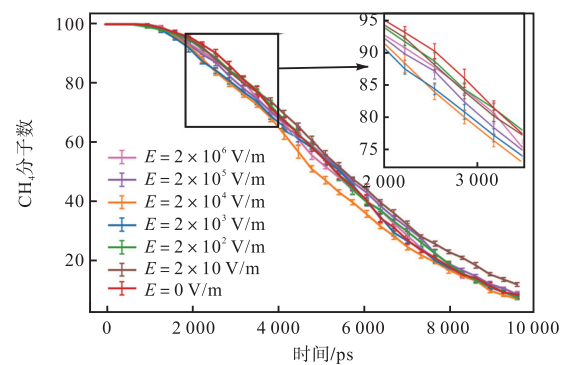
### 2.2 电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧中间产物种类及燃烧反应路径的影响

为了确定外加电场对 NH<sub>3</sub> 反应机理的影响,本文进一步对不同电场强度下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧

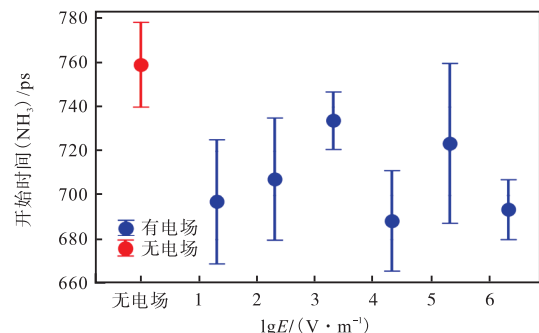
的中间产物和反应路径进行了对比. 图 3 比较了有无电场条件下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧共有的及独特



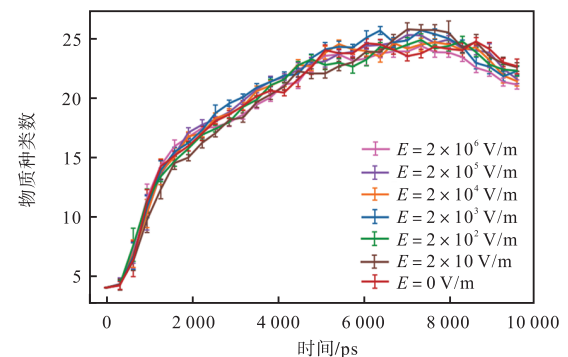
(a) NH<sub>3</sub> 分子数随时间变化规律



(b) CH<sub>4</sub> 分子数随时间变化规律



(c) 第 1 个 NH<sub>3</sub> 分子开始消耗的时间



(d) 中间产物种类随时间变化规律

图 2 不同电场强度下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 分子反应速率及中间产物随时间演化规律

Fig.2 Time evolution of reaction rates and intermediate products of NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> molecules at different electric field strength

的中间产物。例如, CH<sub>3</sub>、CH<sub>2</sub>O、CH<sub>3</sub>O、CO、CO<sub>2</sub>、CNO、H、HO、HO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O、HNO、H<sub>2</sub>N、HN<sub>2</sub>、N、N<sub>2</sub>、NO、NO<sub>2</sub>、O 和 O<sub>3</sub> 是所有电场强度下共有的中间产物。CO<sub>4</sub> 和 CN<sub>3</sub>O 只出现在无电场的反应中。

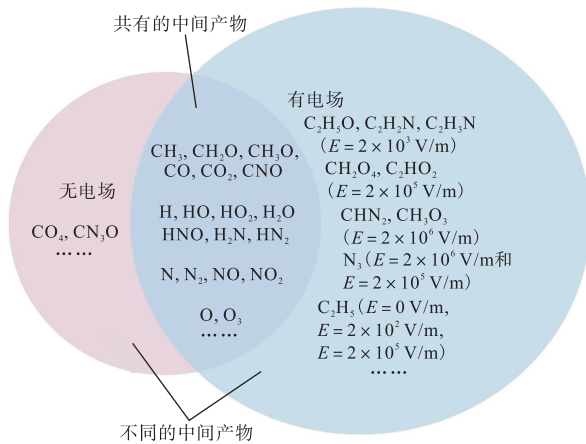


图3 有无电场情况下共有的中间产物及不同的中间产物  
Fig.3 Common intermediates and unique intermediates among cases with and without an electric field

表 1 对比了在不同电场强度下 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧的反应路径, 其中反应式 (R1) ~ (R22) 分别表示仅在对应电场强度下发生的反应路径。表 1 表明施加电场并不只是改变了反应速率, 同时也促使了基元反应的多样化。

表 1 不同电场强度下特殊的反应路径

Tab.1 Unique reaction pathways under different electric field strength

$E/(V \cdot m^{-1})$	反应编号	反应路径
0	R1	$HO_2 + CO \rightarrow CO_2 + HO$
	R2	$HO_2 + H_2 \rightarrow H_2O_2 + H$
$2 \times 10$	R3	$CH_4 + N_2 \rightarrow HN_2 + CH_3$
	R4	$H_3N + HO \rightarrow H_2 + H_2NO$
	R5	$H_3N + O \rightarrow H + HN + HO$
	R6	$O_2 + H + HN \rightarrow HNO + HO$
$2 \times 10^2$	R7	$HO_2 + H_2N \rightarrow HNO + H + HO$
$2 \times 10^3$	R8	$CH_2N_2 \rightarrow CHN_2 + H$
	R9	$CH_2O + H \rightarrow CO + H + H_2$
$2 \times 10^4$	R10	$CHO + HO \rightarrow CO_2 + H_2$
	R11	$H_2N_2 + HO \rightarrow N_2 + H_2O + H$
	R12	$O_2 + H_2O_2 \rightarrow HO_2 + HO_2$
	R13	$O_2 + HO_2 \rightarrow HO + O_3$
$2 \times 10^5$	R14	$CHN + O \rightarrow H + CNO$
	R15	$HO_2 + CH_3 \rightarrow CH_2O + H + HO$
	R16	$O_3 \rightarrow O_2 + O$
	R17	$O_2 + CH_2O_2 \rightarrow CH_2O_4$
	R18	$N_2 + H_2N + O \rightarrow H_2O + N_3$
$2 \times 10^6$	R19	$CH_2O_2 + HO \rightarrow CH_3O_3$
	R20	$CN + O \rightarrow CNO$
	R21	$HO_2 + HO \rightarrow H_2O_2 + O$
	R22	$CH_2O_2 + HO \rightarrow CH_3O_3$

### 2.3 电场对常见中间产物的影响

在燃烧反应过程中, 自由基的变化规律会直接影响反应过程。以往的研究表明<sup>[35-36]</sup>, 随着反应的进行自由基的浓度也会随之发生变化, 并且自由基的浓度对火焰燃烧速度有很大影响。在对反应路径进行分析时发现, NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 在空气中燃烧反应中出现的主要自由基有 H、O、OH、HO<sub>2</sub> 等, 其中 OH、O 的生成数量较多, 图 4(a)、(b) 分别统计了这两种自由基随时间的变化规律。可以看到在 6 000 ps 以前, 由于自由基生成的量较少, 电场对自由基生成量的影响规律并不明显, 在 8 000 ps 以后, 持续施加的电场增加了自由基的产量, 但是自由基增加的数量并不随电场强度的增加线性增加。

反应过程出现的主要中间产物还有 NH<sub>2</sub>、CH<sub>3</sub>、HNO、N<sub>2</sub>H、HN 等。已有研究表明, 这些中间产物对 NO<sub>x</sub> 的生成有关键作用<sup>[37]</sup>。在本研究中, NH<sub>2</sub>、CH<sub>3</sub> 分别是 NH<sub>3</sub> 和 CH<sub>4</sub> 裂解或与其他自由基发生反应得到的, 图 4(c)、(d) 为 NH<sub>2</sub> 和 CH<sub>3</sub> 随时间的变化规律。随着反应进行, NH<sub>2</sub> 和 CH<sub>3</sub> 物质的量均呈现先增加后减少的趋势, 在达到峰值后它们会与其他自由基(如 H、HO、O) 结合被消耗。NH<sub>2</sub> 可与其他自由基结合生成一氧化氮(NO), 涉及的反应路径有 NH<sub>2</sub> + O → H<sub>2</sub> + NO, HNO + NH<sub>2</sub> → NH<sub>3</sub> + NO, HNO + NH<sub>2</sub> → NH<sub>3</sub> + NO 等。如图 4(c) 所示, 电场影响了 NH<sub>2</sub> 达到峰值的时间和其达到峰值的个数, 其中电场强度  $E$  为  $2 \times 10^2$  V/m 时 NH<sub>2</sub> 的峰值最大, 而  $E = 2 \times 10^6$  V/m 时达到峰值的时间最短且 NH<sub>2</sub> 生成量的最大值在所有情况中最少。图 4(d) 中, CH<sub>3</sub> 是由 CH<sub>4</sub> 裂解得到的, 前 4 000 ps 电场增加了 CH<sub>3</sub> 的生成速率, 这与图 2(b) 提及的电场加速 CH<sub>4</sub> 初始分解速度的研究结果一致。CH<sub>3</sub> 在一些条件下会促进 NO<sub>x</sub> 的生成<sup>[7,36,38]</sup>, 不利于氮氧化物减排。

### 2.4 电场对 NO<sub>x</sub> 生成量的影响

氨不完全燃烧会产生 NO<sub>x</sub>, 有研究指出外加电场可以调控燃烧过程 NO<sub>x</sub> 的生成<sup>[19]</sup>, 本文进一步研究了电场对 NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> 燃烧过程中产生的 NO<sub>x</sub> 的影响, 图 5(a)、(b) 分别为不同电场强度下 NO 和 NO<sub>2</sub> 分子数随时间的变化规律。在本研究中, NO<sub>x</sub> 的主要组成为 NO, NO<sub>2</sub> 的生成量相对较少, 且 NO<sub>2</sub> 在反应后期呈下降趋势, 这是因为反应过程中存在将 NO<sub>2</sub> 还原为 NO 的反应路径, 如 H + NO<sub>2</sub> → NO + HO 等。

在 6 500 ps 之前, 低强度电场 ( $E$  为  $2 \times 10$  V/m、 $2 \times 10^2$  V/m) 可以抑制 NO 的生成, 而高强度电场 ( $E = 2 \times 10^6$  V/m) 在整个反应过程中都加快了 NO<sub>x</sub> 的生成。在 6 500 ps 以后, 任何强度的电场均促进 NO

生成. 图 6 进一步统计了不同时刻下 NO<sub>x</sub> 的生成量 (个数), 可以看出在反应初期 (如 5 000 ps 以前), 采用低强度电场 ( $E = 2 \times 10$  V/m、 $2 \times 10^2$  V/m) 可以抑制 NO<sub>x</sub> 的生成; 而持续地施加电场并不能抑制 NO<sub>x</sub> 的生成. 该结果为制定利用电场调控 NO<sub>x</sub> 的生成策略提供了理论支撑.

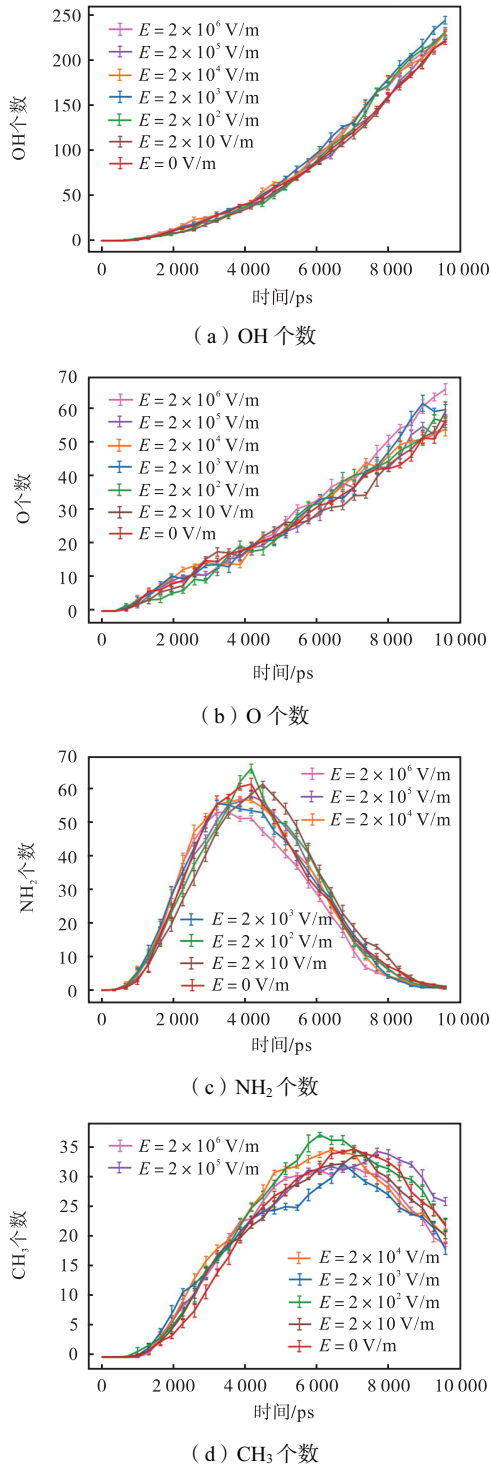


图 4 不同电场强度下自由基和中间产物的分子数随时间的变化

Fig.4 Time evolution of reactants and species number under different electric field strength.

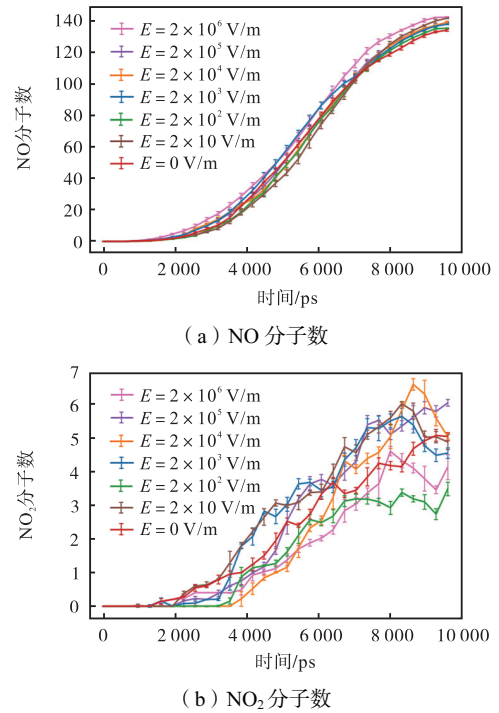


图 5 不同电场强度下 NO<sub>x</sub> 生成量随时间的变化规律  
Fig.5 Time evolution of NO<sub>x</sub> generation at different electric field intensities

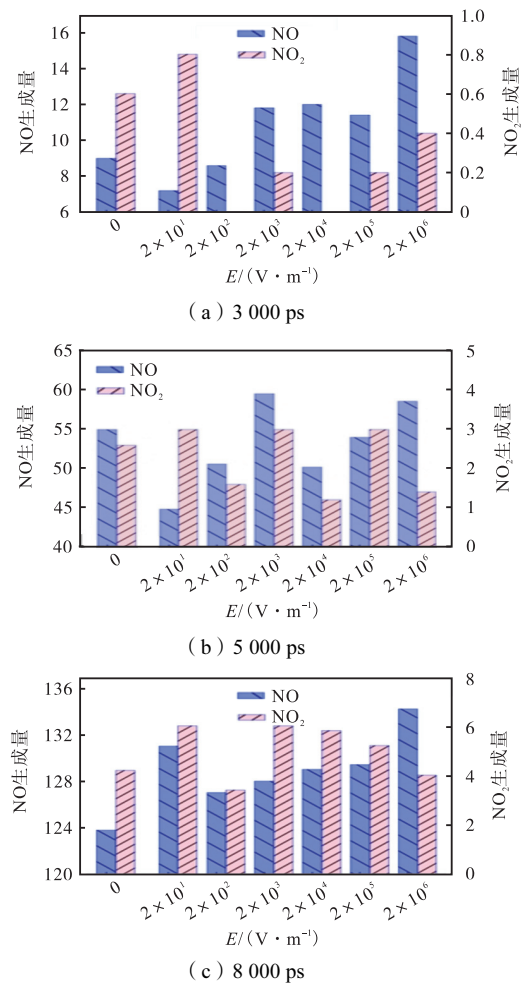


图 6 反应进行不同时间下 NO<sub>x</sub> 生成量  
Fig.6 NO<sub>x</sub> generation at different reaction times

本文研究结果揭示了外加电场在  $\text{NH}_3/\text{CH}_4$  燃烧过程中的重要作用,为燃烧反应的理解和优化提供了有价值的信息.未来将进一步探究电场调控氮氧化物的生成规律,为辅助燃烧系统的设计和  $\text{NO}_x$  调控策略的制定提供理论依据.

### 3 结 论

本文采用了 ReaxFF 分子动力学方法,从分子/原子层面探究了外加电场强度对  $\text{NH}_3/\text{CH}_4$  在空气中燃烧过程的影响,探索了不同外加电场强度对反应物、生成物、中间产物和自由基生成量的影响规律,并揭示了不同电场条件下的基元反应路径.

研究表明,电场改变了  $\text{NH}_3/\text{CH}_4$  在空气中燃烧反应的反应特性,高强度外加电场在反应初期阶段可以加速  $\text{NH}_3$  的消耗;本研究中涉及的所有外加电场均能够缩短第 1 个  $\text{NH}_3$  分子分解的时间,即缩短点火延迟;电场促进更多样、更复杂的中间产物和反应路径的生成.此外,本研究还揭示了外加电场对燃烧过程中氮氧化物( $\text{NO}_x$ )的影响,在反应初期(如 5 000 ps 以前),采用低强度电场( $E$  为  $2 \times 10 \text{ V/m}$ 、 $2 \times 10^2 \text{ V/m}$ )可以抑制  $\text{NO}_x$  的生成;而持续地施加电场并不能抑制  $\text{NO}_x$  的生成.

#### 参考文献:

- [1] MacFarlane D R, Cherepanov P V, Choi J, et al. A roadmap to the ammonia economy[J]. *Joule*, 2020, 4(6): 1186-1205.
- [2] Kobayashi H, Hayakawa A, Somarathne K D K A, et al. Science and technology of ammonia combustion[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, 37(1): 109-133.
- [3] Chai W S, Bao Y, Jin P, et al. A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021, 147: 111254.
- [4] Valera-Medina A, Morris S, Runyon J, et al. Ammonia, methane and hydrogen for gas turbines[J]. *Energy Procedia*, 2015, 75: 118-123.
- [5] Wang J, Jiang X Z, Luo K H. Exploring reaction mechanism for ammonia/methane combustion via reactive molecular dynamics simulations[J]. *Fuel*, 2023, 331: 125806.
- [6] Xiao H, Lai S, Valera-Medina A, et al. Study on counterflow premixed flames using high concentration ammonia mixed with methane[J]. *Fuel*, 2020, 275: 117902.
- [7] Ariemma G B, Sorrentino G, Ragucci R, et al. Ammonia/Methane combustion: Stability and  $\text{NO}_x$  emissions[J]. *Combustion and Flame*, 2022, 241: 112071.
- [8] Barmina I, Kolmickovs A, Valdmans R, et al. Control of combustion dynamics by an electric field[J]. *Chemical Engineering Transactions*, 2015, 43: 973-978.
- [9] Bradley D, Ibrahim S M A. The effects of electrical fields upon electron energy exchanges in flame gases[J]. *Combustion and Flame*, 1974, 22(1): 43-52.
- [10] Cessou A, Varea E, Criner K, et al. Simultaneous measurements of OH, mixture fraction and velocity fields to investigate flame stabilization enhancement by electric field[J]. *Experiments in Fluids*, 2012, 52(4): 905-917.
- [11] Hutchins A R, Reach W A, Kribs J D, et al. Effects of electric fields on stabilized lifted propane flames[J]. *Journal of Energy Resources Technology*, 2014, 136(2): 022203.
- [12] Imamura O, Chen B, Nishida S, et al. Combustion of ethanol fuel droplet in vertical direct current electric field[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 2005-2011.
- [13] Bradley D, Nasser S H. Electrical coronas and burner flame stability[J]. *Combustion and Flame*, 1984, 55(1): 53-58.
- [14] Kim G T, Park D G, Cha M S, et al. Flow instability in laminar jet flames driven by alternating current electric fields[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36(3): 4175-4182.
- [15] Gan Y, Luo Z, Cheng Y, et al. The electro-spraying characteristics of ethanol for application in a small-scale combustor under combined electric field[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 87: 595-604.
- [16] Saito M, Arai T, Arai M. Control of soot emitted from acetylene diffusion flames by applying an electric field[J]. *Combustion and Flame*, 1999, 119(3): 356-366.
- [17] Kim M K, Chung S H, Kim H H. Effect of electric fields on the stabilization of premixed laminar bunsen flames at low AC frequency: Bi-ionic wind effect[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(3): 1151-1159.
- [18] Altendorfner F, Kuhl J, Zigan L, et al. Study of the influence of electric fields on flames using planar LIF and PIV techniques[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 3195-3201.
- [19] Alqaity A B S, Chen B, Han J, et al. New insights into methane-oxygen ion chemistry[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36(1): 1213-1221.
- [20] Wisman D L, Marcum S D, Ganguly B N. Electrical control of the thermodiffusive instability in premixed

- propane-air flames[J]. *Combustion and Flame*, 2007, 151(4): 639-648.
- [21] Luo Y, Gan Y, Jiang X. Investigation of the effect of DC electric field on a small ethanol diffusion flame[J]. *Fuel*, 2017, 188: 621-627.
- [22] Chien Y C, Escofet-Martin D, Dunn-Rankin D. Ion current and carbon monoxide release from an impinging methane/air coflow flame in an electric field[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 204: 250-259.
- [23] Jiang X Z, Feng M, Zeng W, et al. Study of mechanisms for electric field effects on ethanol oxidation via reactive force field molecular dynamics[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, 37(4): 5525-5535.
- [24] Jiang X Z, Luo K H. Reactive and electron force field molecular dynamics simulations of electric field assisted ethanol oxidation reactions[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, 38(4): 6605-6613.
- [25] Tan S, Xia T, Shi Y, et al. Enhancing the oxidation of toluene with external electric fields: a reactive molecular dynamics study[J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 1710.
- [26] Bai Z, Jiang X Z, Luo K H. Reactive force field molecular dynamics simulation of pyridine combustion assisted by an electric field[J]. *Fuel*, 2023, 333: 126455.
- [27] Senftle T P, Hong S, Islam M M, et al. The ReaxFF reactive force-field: Development, applications and future directions[J]. *NPJ Computational Materials*, 2016, 2(1): 1-14.
- [28] 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.
- [29] Luo Y, Gan Y, Jiang X. Investigation of the effect of DC electric field on a small ethanol diffusion flame[J]. *Fuel*, 2017, 188: 621-627.
- [30] Martyna G J, Klein M L, Tuckerman M. Nosé-Hoover chains: The canonical ensemble via continuous dynamics[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1992, 97(4): 2635-2643.
- [31] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, 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.
- [32] Zhang L, Duin A C T, Zybin S V, et al. Thermal decomposition of hydrazines from reactive dynamics using the ReaxFF reactive force field[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2009, 113(31): 10770-10778.
- [33] Humphrey W, Dalke A, Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics[J]. *Journal of Molecular Graphics*, 1996, 14(1): 33-38.
- [34] Döntgen M, Przybylski-Freund M D, Kröger L C, et al. Automated discovery of reaction pathways, rate constants, and transition states using reactive molecular dynamics simulations[J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2015, 11(6): 2517-2524.
- [35] Martínez L, Andrade R, Birgin E G, et al. PACKMOL: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations[J]. *Journal of Computational Chemistry*, 2009, 30(13): 2157-2164.
- [36] Tian Z, Li Y, Zhang L, et al. An experimental and kinetic modeling study of premixed  $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$  flames at low pressure[J]. *Combustion and Flame*, 2009, 156(7): 1413-1426.
- [37] Garo A, Hilaire C, Puechberty D. Experimental study of methane-oxygen flames doped with nitrogen oxide or ammonia: Comparison with modeling[J]. *Combustion Science and Technology*, 1992, 86(1-6): 87-103.
- [38] Hori M, Matsunaga N, Marinov N, et al. An experimental and kinetic calculation of the promotion effect of hydrocarbons on the NO- $\text{NO}_2$  conversion in a flow reactor[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1998, 27(1): 389-396.