Les NOx sont formés dans les moteurs à combustion interne par la réaction de l'azote de l'air avec l'oxygène à haute température (1800–2500 K). Trois mécanismes principaux expliquent cette formation : le mécanisme thermique (Zeldovich), dominant à haute température (>2000 K), où N® réagit avec O et O® pour former NO ; le mécanisme prompt (Fenimore), se produisant près de la flamme, avec réaction de N® et d'hydrocarbures (CH) ; et le mécanisme du carburant, impliquant l'oxydation directe d'azote présent dans certains carburants. Le mécanisme thermique est exponentiellement dépendant de la température, contrairement au mécanisme prompt.