



DME/n-Butane 혼합 연료의 농도 성층화에 의한 HCCI엔진연소의 압력 상승률 저감에 관한 연구

임옥택 · †박규열

울산대학교 기계자동차공학부

(2010년 10월 26일 접수, 2011년 6월 21일 수정, 2011년 6월 21일 채택)

An Investigation on the Effect of Fuel Stratification of DME/n-Butane mixture on Reduction of Pressure Rise-Rate in HCCI Combustion

Ocktaeck Lim · † Kyuyeol Park

School of Mechanical and Automotive Engineering, Ulsan Univ. Mugeo-dong, Ulsan, 680-749, Korea

(Received October 26, 2010; Revised June 21, 2011; Accepted June 21, 2011)

요 약

본 연구에서는 DME와 n-Butane 연료를 사용하여 혼합연료 및 성층화효과가 HCCI 연소 특성에 미치는 영향을 화학반응수치계산을 통해서 알아보고자 한다. 우선, 기존에 완성된 DME와 n-Butane 반응스킴을 이용하여 새로운 화학 반응 모델을 만들고 기존의 DME 화학 반응 모델과 n-Butane 화학 반응 모델과 비교하여 유효성을 확보한다. 나아가, 자발화 특성이 다른 DME와 n-Butane 두 연료의 혼합비 변화에 따른 HCCI 연소 특성을 파악한다. 마지막으로, 혼합 연료를 각각 성층급기했을 경우에 압력상승률 저감 효과를 파악한다.

Abstract - This study investigates the effects of the DME and n-Butane mixture and of the stratification on combustion characteristics of HCCI engine by chemical reaction calculation. First, the existing DME reaction scheme and n-Butane is combined to make new chemical reaction model, then validating the effectiveness of new scheme. Furthermore, this study verify the HCCI combustion characteristics according to the changes of DME and n-Butane mixture ratio, which shows different auto ignition characteristics. Finally, it confirms the effects of stratification of mixture fuel on the reduction of pressure rise rate.

Key words : combustion, knocking, dme, hcci, n-butane, numerical analysis, pressure rise rate, stratification

1. 서 론

Homogeneous Charge Compression Ignition(예혼합 압축착화, 이하 HCCI) 기관은 고효율·저공해를 실현하는 차세대엔진기관으로서 주목받고 있다[1]. HCCI기관은 자기착화연소이며, 연소는 화학반응에

지배되고 있다. 그리고 반응이 시작해서 열발생이 일어나면 온도가 상승되고, 온도의 상승에 의해 반응이 촉진되어서 자기 가속적으로 연소가 진행되는 성질을 가진다. 그 때문에, 고부하시에는 연소실내가 가파르고 급격한 압력상승에 의해 노킹이 생기고, 운전 영역이 제한된다. 압력상승을 완만하게 해서 노킹을 회피하는 방법으로서, 연소실내 예혼합기의 착화시기를 분산화 시키는 방법[2,3], 피스톤

†교신저자:kypark@ulsan.ac.kr

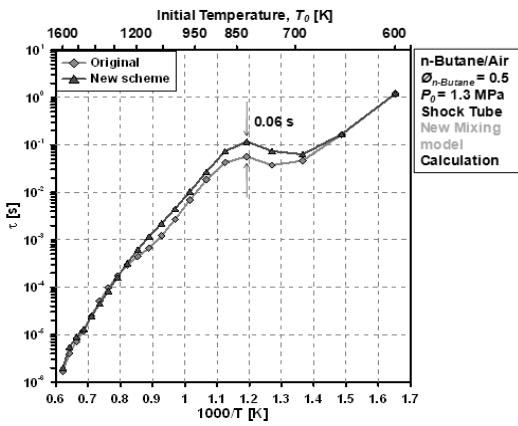


Fig. 2. Shock-Tube results of n-Butane.

운동에 의한 압력 및 온도의 상승이 마이너스가 되는 팽창행정에 연소위상을 지연시키는 방법[4]을 들 수 있다.

본 연구에서는 DME와 n-Butane 연료를 사용하여 혼합연료 및 성층화효과가 HCCI 연소 특성에 미치는 영향을 화학반응수치계산을 통해서 알아보려 한다. 우선, 기존에 완성된 DME와 n-Butane 반응스킴을 이용하여 새로운 화학 반응 모델을 만들고 기존의 DME 화학 반응 모델과 n-Butane 화학 반응 모델과 비교하여 유효성을 확보한다. 둘째로, 자발화 특성이 다른 DME와 n-Butane 두 연료의 혼합비 변화에 따른 HCCI 연소 특성을 파악한다. 마지막으로, 혼합 연료를 각각 성층급기 했을 경우에 압력상승률 저감 효과를 파악 한다

II. DME와 n-Butane의 기본 반응 스킴 작성

DME와 n-Butane를 연료로 하는 단위반응 수치계산을 하기 위해서 DME의 기본 반응 스킴과 n-Butane의 기본 반응 스킴을 결합한 DME/n-Butane 기본 반응 스킴을 작성하였으며 해당 반응 스킴은 부록에 첨부하였다. 계산코드는 Sandia Lab에서 개발한 CHEMKIN[5]과 SENKIN[6]을 수정하여 이용하였다. Curran의 DME 모델[7](화학종수 : 80, 기본 반응수 : 351)과 Kojima 의 n-Butane 모델[8](화학종수 : 141, 기본 반응수 : 468)을 이용하였다. n-Butane 모델에는 DME 모델과 중복되는 기본 반응과 화학종이 있고 독립적으로 n-Butane에만 존재하는 기본 반응과 화학종이 있다. 이런 경우에는 DME의 스킴을 기본 스킴으로 정하여 작성하였다. DME 모델에는 없고 n-Butane에만 존재하는 기본 반응과 화학 종을 DME

모델에 결합하였다. 최종적으로는 화학종수 185, 기본 반응수 730 되는 기본 반응 스킴을 작성하였다. Chemkin 패키지의 Senkin을 이용하여 성층 급기를 구현할 경우 프로그램 내에 있는 실린더를 나타내는 파일의 값을 수정하여 시뮬레이션 하였다.

III. 시뮬레이션 결과 및 논의

3.1. DME와 n-Butane의 기본 반응 스킴의 유효성 검증

DME 모델과 n-Butane 모델을 결합한 DME/n-butane의 기본 반응 스킴의 유효성을 확인하기 위해서 검증된 모델과 두 모델을 결합한 새로운 모델을 shock tube 조건에서 계산을 하였다. 기존의 계산 조건은 Table 1과 같다. Fig. 1은 DME만 연료로 사용한 경우의 shock tube 계산 결과이다. 각 점들은 초기 온도에 따른 고온 산화 반응의 지연 시간을 나타내고 있다. 빨간색 선은 기존의 검증된 Curran의 모델을

Table 1. Shock tube conditions

	θ [-]	Po [MPa]	To [K]	Volume [cc]
DME	0.5	1.3	600~1300	1044
n-Butane	0.5	1.3	600~1300	1044

	Composition of pre-mixture [%]				
	N ₂	O ₂	Ar	DME	n-Butane
DME	76.4	20.6	1.0	2.0	0
n-Butane	76.8	20.7	1.0	0	1.6

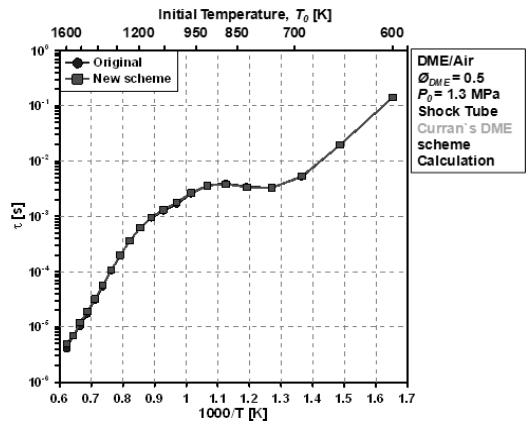


Fig. 1. Shock-Tube results of DME.

사용한 결과이고 파란색 선은 DME모델과 n-Butane 모델을 결합한 새로운 모델의 계산 결과이다. 초기 온도 600에서부터 1300 K까지 전 영역에서 거의 모든 점들이 일치하는 것을 알 수 있다. DME 모델을 기본으로 n-Butane 모델을 결합했기 때문에 큰 오차가 없는 결과가 나온 것으로 판단이 된다. Fig. 2는 n-Butane만 연료로 사용한 경우의 shock tube 계산 결과이다. 계산 결과, 초기 온도 700에서부터 950 K까지 약간의 오차가 발생하였다. 최대 오차는 800 K에서 약 0.06s 발생하였다. 단위 반응식 중의 각 화학종의 열역학적 정보(Thermodynamic Database)가 필요하다. DME 모델은 cal/mole 단위로 입력되어 있고, n-Butane 모델은 J/mole 단위로 입력되어 있다. n-Butane 모델의 열역학적 정보의 단위를 DME 모델 처럼 cal/mole 단위로 바꾸는 과정에서 약간의 오차가 발생하였다. 그리고 DME 모델과 n-Butane 모델 사이에는 중복되는 화학종이 있다. 이 때, 중복되는 화학종의 열역학적 정보가 조금씩 다른 경우가 있다. n-Butane 모델은 제거하고 DME 모델을 기본으로 하였기 때문에 수치 계산 과정에서 오차가 발생했을 것으로 판단된다. Shock tube의 계산 결과, 새로운 모델에서 DME 연료를 사용했을 때는 기존의 모델 결과와 거의 오차가 없었고 n-Butane 연료를 사용했을 때는 약간의 오차가 발생하였다. 전반적으로 고온 산화 반응의 지연시간에 대한 경향이 거의 비슷하기 때문에 본 연구에서는 기존의 DME와 n-Butane 모델을 결합한 새로운 모델을 가지고 수치 계산하였다.

3.2. DME와 n-Butane의 혼합비 변화에 따른 HCCI 연소 특성의 변화

투입 열량을 일정으로 한 조건에서 DME와 n-Butane의 혼합비를 변화에 따른 HCCI 연소 특성을 조사하였다. Table 2는 계산의 초기조건을 보여준다. 우선 혼합비의 결과만을 알아보기 위해서 농도 성층화가 없는 균일한 조건에서 계산을 하였다. DME와 n-Butane의 혼합비는 다음과 같이 정의 하였다.

$$X_{DME} = \frac{n_{DME}}{n_{DME} + n_{n-Butane}} \quad (1)$$

- n_{DME} : 1 cycle 동안 공급되는 DME의 몰 수 [mol/cycle]
- $n_{n-Butane}$: 1 cycle 동안 공급되는 n-Butane의 몰 수 [mol/cycle]

Table 2. Calculative conditions for DME/n-Butane ratio

P ₀ :101.3 kPa / T ₀ : 400 K Ne: 750 rpm / Q _m :1100±1 J/cycle							
X _{DME}	θ _{DME} [-]	θ _{n-Butane} [-]	Composition of pre-mixture [%]				
			N ₂	O ₂	Ar	DME	n-Butane
1.00	0.346	0	76.16	20.50	0.98	2.36	0.00
0.95	0.311	0.035	76.25	20.53	0.98	2.13	0.11
0.90	0.279	0.068	76.34	20.55	0.98	1.91	0.22
0.85	0.251	0.096	76.42	20.57	0.98	1.72	0.30
0.80	0.225	0.123	76.49	20.59	0.98	1.54	0.39
0.75	0.202	0.146	76.56	20.61	0.98	1.39	0.46
0.70	0.181	0.168	76.61	20.63	0.98	1.24	0.53
0.60	0.143	0.206	76.72	20.66	0.98	0.98	0.65
0.50	0.111	0.239	76.81	20.68	0.98	0.77	0.76
0.40	0.082	0.268	76.89	20.70	0.99	0.57	0.85
0.30	0.058	0.293	76.96	20.72	0.99	0.40	0.93
0.20	0.036	0.315	77.02	20.74	0.99	0.25	1.00
0.10	0.017	0.335	77.07	20.75	0.99	0.12	1.07
0	0	0.352	77.12	20.76	0.99	0.00	1.12

DME 혼합 비율, X_{DME}를 1.00에서 0까지 0.1씩 변화시키면서 계산하였다. 초기 압력, P₀=0.1MPa, 초기 온도, T₀=400K, 투입 열량, Q_m=1100 J/cycle, 엔진 회전 속도, Ne=750 rpm이다. 혼합비율에 따른 연소 특성을 알아보기 위해서 투입 열량은 1100 J/cycle로 일정하게 되도록 DME와 n-Butane의 당량비를 조절 하였으며 이는 당량비가 0.173~0.176에 해당되며 HCCI엔진에서 저부하 영역에 속한다. Fig. 4는 X_{DME} = 1.0, 0.9, 0.8, 0.7 그리고 motoring 에 대한 가스 압력, 가스 온도 및 열 발생률을 보여준다. 혼합 비율이 0.7보다 작은 경우는 연소가 발생되지 않았다. DME와 n-Butane를 비교했을 경우, DME가 n-Butane 보다 착화성이 뛰어나다. 자발화가 잘 일어나는 DME의 당량비가 적어서 연소가 발생되지 않았고 그 영향으로 인하여 n-Butane마저 연소가 발생되지 않았다. 고온 산화 반응의 열 발생률이 작아지는 것을 알 수 있다. 저온 산화 반응과 고온 산화 반응의 시작 시기를 알아보기 위해서 가스 압력, 온도, 열 발생률을 Fig.4에 확대해서 나타냈다. 저온 산화 반응은 750 ± 6 K에서, 고온 산화 반응은 963 ± 2 K에서 발생하였다. 저온 산화 반응의 시작시기는 거의 비슷하지만 혼합비율이 작아짐에 따라 저온 산화 반응 및 고온 산화 반응의 시작 시기는 지각 되는 것을

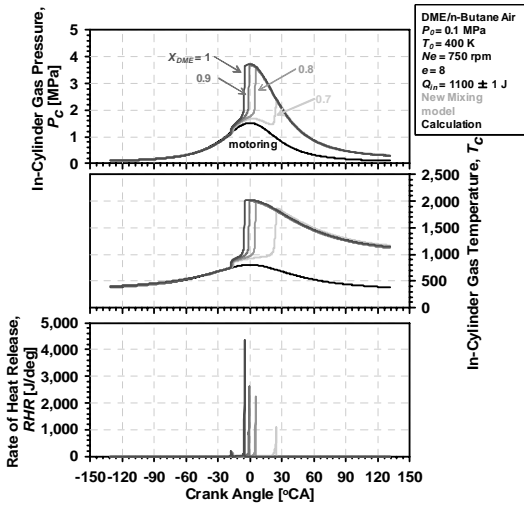


Fig. 3. Histories of in-cylinder gas pressure, temperature and rate of heat release for DME/n-Butane ratio.

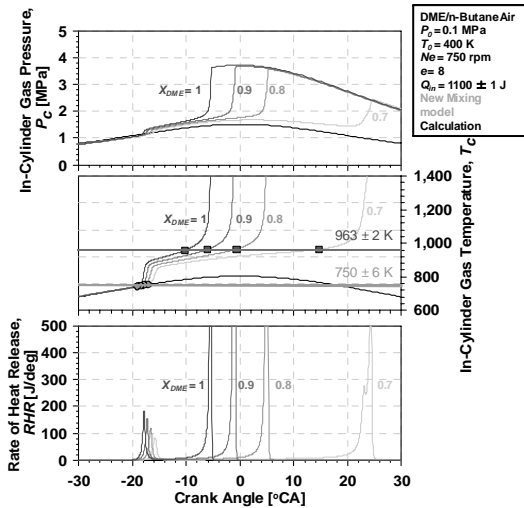


Fig. 4. Histories of in-cylinder gas pressure, temperature and rate of heat release for DME/n-Butane ratio.

알 수 있다. 고온 산화 반응과 마찬가지로 저온 산화 반응의 열발생을 또한 작아지는 것을 확인하였다. DME와 n-Butane의 혼합비에 따른 저온 산화 반응과 고온 산화 반응의 시작 시기, CA50를 Fig. 5에 나타냈다. 혼합비가 작아짐에 따라서 저온 산화 반응 시기는 -19.14에서 -17.16 deg까지 약 1.98 deg 지각 되

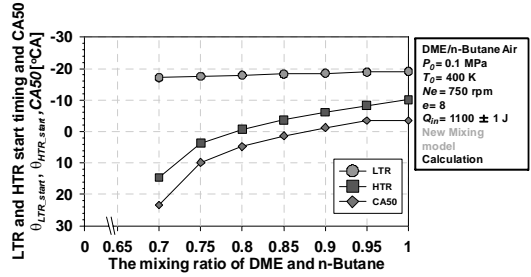


Fig. 5. LTR and HTR start timing, CA50 as function of DME/n-Butane ratio.

었다. 하지만 고온 산화 반응은 n-Butane의 당량비가 많아질수록 약 30.15 deg 지각 되었다. CA50 또한 TDC 이후에 발생하는 경향을 보여 주었다. 자발화 특성이 서로 다른 DME와 n-Butane을 혼합했을 경우, 혼합비에 따라서 고온 산화 반응의 시작 시기가 달라지는 것을 확인하였다. 따라서 두 연료를 각각 불균질하게 공급 하였을 경우에는 고온 산화 반응의 시작시기가 달라져서 압력 상승률의 저감에 큰 효과가 있을 것으로 판단이 된다.

3.3. 혼합 연료의 농도 성층화에 의한 압력 상승률 저감 효과

DME와 n-Butane의 혼합비에 따라서 고온 산화 반응의 시작 시기가 달라지는 것을 확인하였다. 이번 절에서는 각각의 연료를 성층급기 했을 경우에 압력 상승률 저감에 어떤 영향을 미치는지 알아보았다. 초기 압력, P^0 은 0.1MPa, 초기 온도, T^0 는 400 K, 엔진 회전 수, Ne는 750 rpm이다. 성층급기 방법을 6가지로 정의 하였다. 초기 조건을 Fig. 6에 표시하였다. Case 1은 DME 연료만 성층 급기 하고 n-Butane은 공급하지 않았다. 평균 당량비, ϕ_{DME} 는 0.346이다. DME의 농도 성층화 크기, $\Delta\phi_{DME}$ 는 0.2로 하였고 각각의 영역의 농도 차이는 0.05이다. Case 2는 DME는 균일하게 공급하고 n-Butane만 성층 급기 하였다. DME의 당량비, ϕ_{DME} 는 0.225이다. n-Butane의 당량비, $\phi_{n-Butane}$ 는 0.123이고 n-Butane의 농도 성층화 크기, $\Delta\phi_{n-Butane}$ 는 0.2이다. DME와 n-Butane의 혼합비는 80%이다. Case 3은 DME를 성층 급기 하고 n-Butane은 균일하게 공급하였다. DME의 당량비, ϕ_{DME} 는 0.225이며, DME의 농도 성층화 크기, $\Delta\phi_{DME}$ 는 0.2이다. n-Butane의 당량비, $\phi_{n-Butane}$ 는 0.123이다. DME와 n-Butane의 혼합비는 80%이다. Case 4는 DME와 n-Butane, 두 연료 모두를 성층 급기 하였다. DME의 당량비, ϕ_{DME} 는 0.225이며, n-Butane의 당량비, $\phi_{n-Butane}$ 는 0.123이다. 두 연료의 농도 성층화 크

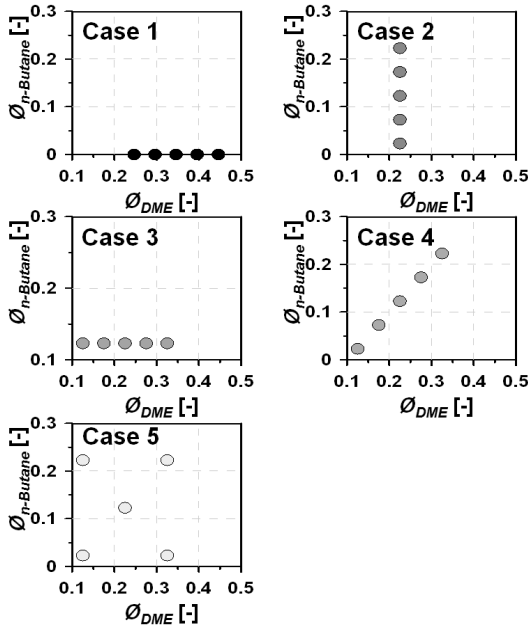


Fig. 6. Equivalence ratio of each zone (for case1 ~ case5).

기는 0.2이다. 두 연료가 저 당량비 영역에서 고 당량비 영역까지 함께 존재하도록 설정하였다. DME의 당량비가 높은 영역에서는 n-Butane의 당량비도 높다. DME와 n-Butane의 혼합비는 80%이다. 마지막으로 Case 5는 DME와 n-Butane, 두 연료 모두를 성층 급기 하였다. 두 연료 모두, 저 당량비 영역부터 고 당량비 영역까지 골고루 분포하도록 설정하였다. Fig. 7은 Case1 ~ Case5에 대한 실린더 내의 가스 압력 변화를 보여준다. 각 조건에서 최대 압력 상승률은 다음과 같은 결과가 나왔다. Case1: = 7.84 MPa/ms, Case2: = 10.26 MPa/ms, Case3: = 2.42 MPa/ms, Case4: = 3.76 MPa/ms, Case5: = 2.16 MPa/ms. Case1은 Case2를 제외한 다른 경우보다 최대 압력 상승률이 더 크다. 비록 DME만 성층급기를 하면 균일하게 공급했을 때보다 최대 압력 상승률은 감소하지만 두 연료를 동시에 성층 급기 했을 때보다 최대 압력 상승률 저감 효과가 적다는 것을 알 수 있다. Case2는 최대 압력 상승률이 가장 높게 나왔다. n-Butane의 저온 산화 반응의 열 발생량은 DME에 비해서 적다. 그래서 저온 산화 반응 이후, 실린더 내부의 온도 차이가 만들어 지지 않았고 그로 인하여 고온 산화 반응이 분산되지 않아 최대 압력 상승률이 높게 나왔다. Case3은 DME 연료만 성층 급기 했을 때의 조건이다. 최대 압력 상승률이 상당히 적게 나왔는데, 이

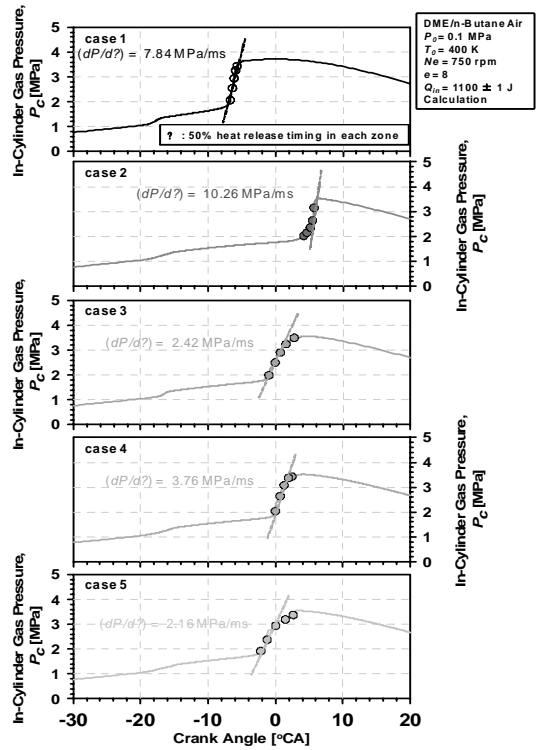


Fig. 7. Maximum pressure rise rate for case 1.

는 DME의 저온 산화 반응의 열 발생량이 크기 때문에 저온 산화 반응 이후 실린더 내부의 온도 차이가 크게 발생하였다. Case1도 Case3과 마찬가지로 DME의 농도 성층화 효과가 있지만 자발화 특성이 강한 DME는 TDC 이전에, 즉 압축 과정에서 연소가 발생하면서 최대 압력 상승률이 높게 나왔다. 그렇지만 Case3은 n-Butane으로 인하여 CA50가 TDC 이후에 발생하였다. 팽창 과정에서 연소가 발생하면서 압력 상승률 저감에 큰 영향을 미치게 되었다. DME와 n-Butane을 동시에 성층급기 하면 최대 압력 상승률이 감소하는 것을 Case4, 5에서 확인할 수 있다. 이와 같이, 자발화 특성이 다른 DME 및 n-Butane을 이용했을 경우, DME는 고온 산화 반응의 시기를 분산시키고, n-Butane은 열 발생 시기는 TDC 이후로 늦춰 최대 압력 상승률 저감에 큰 효과를 얻을 수 있다.

IV. 결론

본 연구에서는 DME와 n-Butane 연료를 사용하여 혼합연료 및 성층화효과가 HCCI 연소 특성에 미치

는 영향을 화학반응수치계산을 통해서 알아보았다. 나아가 DME와 n-Butane 두 연료의 혼합연료에 대한 새로운 화학 반응 모델을 만들고 자발화 특성이 다른 DME와 n-Butane 두 연료의 혼합비 변화에 따른 HCCI 연소 특성을 파악하였다. 마지막으로, 혼합 연료를 각각 성층급기 했을 경우에 압력상승률 저감 효과를 파악하였다.

1. DME와 n-Butane는 연료에 따라 저온 산화 반응과 고온 산화 반응은 각각 일정한 온도에서 발생하였다. 하지만 DME와 n-Butane의 혼합비를 변화시키면 저온 산화 반응과 고온 산화 반응의 시작 시기가 달라졌으며 고온 산화 반응은 TDC 이후에 발생하게 되었다. 따라서 연소실 내에 DME와 n-Butane을 성층 급기 하면, 고온 산화 반응의 시작시기가 분산되고 최대 압력 상승률이 저감된다고 판단할 수 있다.

2. DME만 층상급기 하는 경우보다 DME는 층상급기를 하고 n-Butane은 균일하게 공급하면 최대 압력 상승률이 더 저감되었다. DME의 성층화가 고온 산화 반응의 착화 시기를 분산 시켰기 때문에 전체 연소 기간이 길어졌다. 그리고 n-Butane에 의해서 고온 산화 반응의 착화 시기가 지연되었기 때문에 TDC 이후에서도 연소가 발생하여 피스톤 팽창 효과에 의해 NO_x 저감이 예상된다.

후 기

이 논문은 2002년 울산대학교 교내연구비에 의하여 연구되었습니다. 지원에 감사합니다.

참고문헌

- [1] R. H. Thring : Homogeneous-Charge Compression-Ignition (HCCI) Engines, SAE Paper 892068(1989)
- [2] Magnus Sjöberg, John E. Dec, Nicholas P. Cernansky : Potential of Thermal Stratification and Combustion Retard for Reducing Pressure-Rise Rates in HCCI Engines, Based on Multi-Zone Modeling and Experiments, SAE Paper 2005-01-0113(2005)
- [3] Kengo Kumano and Norimasa Iida: Analysis of the Effect of Charge Inhomogeneity on HCCI Combustion by Chemiluminescence Measurement, SAE Paper 2004-01-1902(2004)
- [4] 山下大輔, 權淳杓, 佐藤進, 飯田訓正 : HCCI 機関におけるメタン/DME混合燃料の自着火と燃焼機構に関する研究, 自動車技術会論文集, Vol.36, No.6, p.85-90 (2005)
- [5] Luz A. E., Kee R. J. and Miller J. A.: SENKIN: A FORTRAN Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis, Sandia National Laboratories Report, SAND87-8248 (1988)
- [6] Luz A. E., Rupley F. and Miller J. A.: CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics, Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009B (1989)
- [7] H. J. Curran, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, P. Dagaut, J-C Boettner and M. Cathonnet: A Wide Range Modeling Study of Dimethyl Ether Oxidation, International Journal Chemical Kinetics, Vol. 30-3, p.229-241 (1998)
- [8] S. Kojima: Detailed Modeling of n-Butane Autoignition Chemistry, Combustion and Flame, No.99, p.87-136(1994)

부록 A

A	B	C	D
1. CH ₃ OCH ₃	1. CH	1. <i>n</i> -C ₄ H ₁₀	1. N
2. CH ₂ OCH ₂ O ₂ H	2. CHCO	2. C ₂ H ₄ CHO	2. NO
3. CH ₃ COCH ₂ O ₂	3. CHO	3. C ₃ H ₄ O	3. NO ₂
4. CH ₃ CO ₂	4. CH ₂	4. C ₃ H ₅	4. N ₂ O
5. CH ₃ OCHO	5. CH ₂ CHO	5. C ₃ H ₅ O	5. HCN
6. CH ₃ OCH ₂	6. CH ₂ CO	6. C ₃ H ₅ O ₂	6. NH
7. CH ₃ OCH ₂ O	7. CH ₂ O	7. C ₃ H ₆	7. CN
8. CH ₃ OCH ₂ OH	8. CH ₂ OCHO	8. <i>n</i> -C ₃ H ₇	8. NCO
9. CH ₃ OCH ₂ O ₂	9. CH ₂ OH	9. <i>i</i> -C ₃ H ₇	9. HNCO
10. CH ₃ OCH ₂ O ₂ H	10. CH ₃	10. <i>n</i> -C ₃ H ₇ O	10. C
11. CH ₃ OCO	11. CH ₃ CHO	11. <i>i</i> -C ₃ H ₇ O	
12. C ₂ H ₃ CHO	12. CH ₃ CO	12. <i>n</i> -C ₃ H ₇ O ₂	
13. C ₂ H ₃ CO	13. CH ₃ COCH ₂	13. <i>i</i> -C ₃ H ₇ O ₂	
14. C ₂ H ₄ O ₂ H	14. CH ₃ COCH ₂ O	14. <i>n</i> -C ₃ H ₇ O ₂ H	
15. C ₂ H ₅ OH	15. CH ₃ COCH ₂ O ₂ H	15. <i>i</i> -C ₃ H ₇ O ₂ H	
16. HCO ₂	16. CH ₃ COCH ₃	16. C ₃ H ₈	
17. HCO ₃	17. CH ₃ CO ₃	17. C ₄ H ₅	
⋮	⋮	⋮	
⋮	⋮	⋮	
34. HCO ₃ H	46. H ₂ O ₂	95. C ₄ H ₆	

A: Only in DME(No. 34)
 B: Both in DME and *n*-Butane(No. 46)
 C: Only in *n*-Butane Scheme(No. 95)
 D: Only in NO_x Scheme(No. 10)
 Total: No. 185

Fig. A1 Species in DME & n-Butane scheme

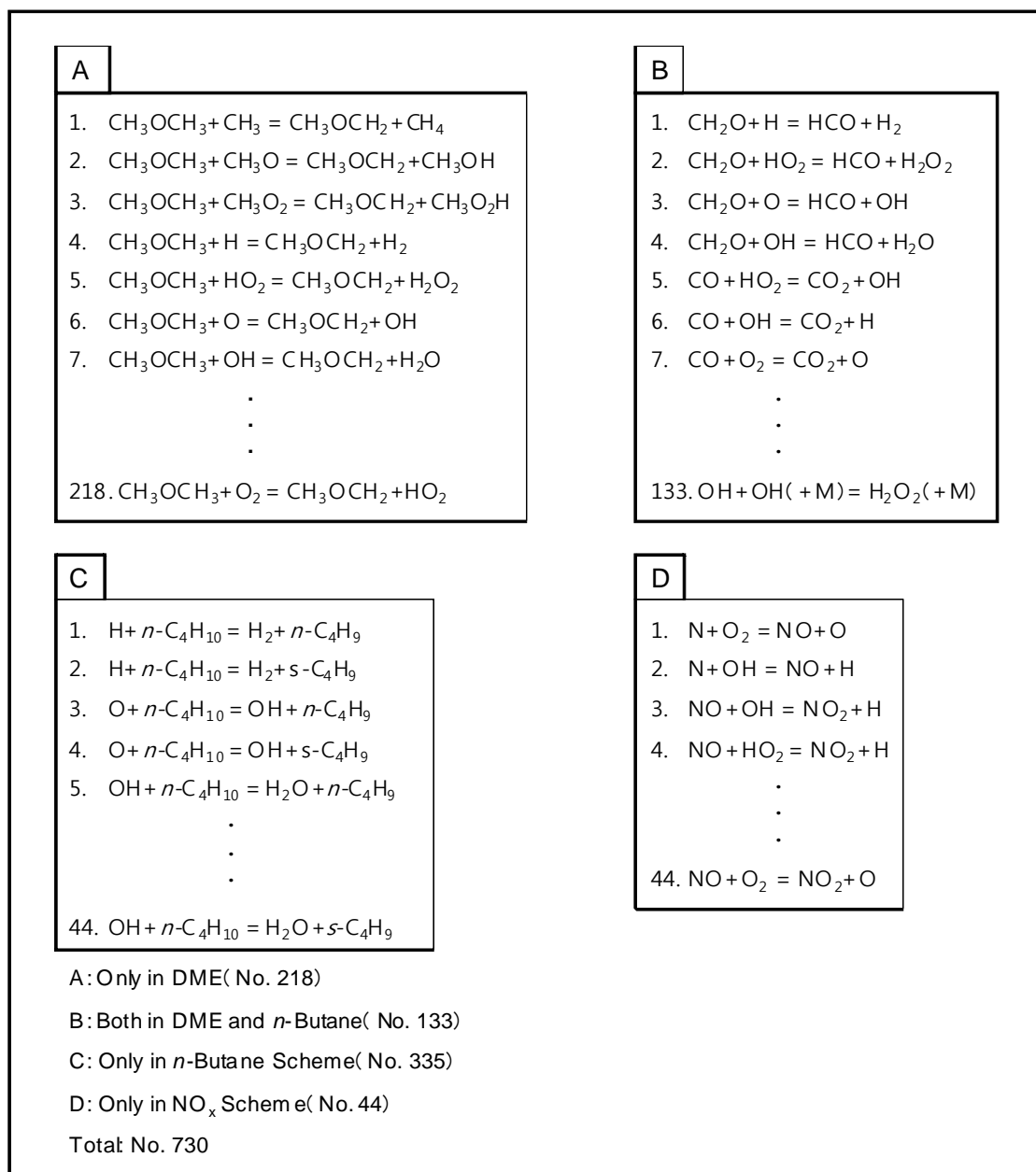


Fig. A2 Elementary reaction in DME & *n*-Butane scheme