

# Quantifizierung und chemische Identifizierung des NO<sub>x</sub>-Reduktionsmittels AdBlue (AUS32) mittels ATR-FTIR

Vorteile des Agilent Cary 630 FTIR für die einfache, schnelle und zuverlässige Messung von Flüssigkeiten



## Autoren

Geethika Weragoda,  
Wesam Alwan  
und Fabian Zieschang  
Agilent Technologies, Inc.

## Zusammenfassung

Das Agilent Cary 630 FTIR-Spektrometer ist ein unkompliziertes und einfach zu bedienendes Gerät für die Analyse von handelsüblichem AdBlue. Diese Studie beschreibt die Anwendung eines Cary 630 FTIR mit einem Diamant-ATR-Modul mit Einfachreflexion zur Identifizierung von handelsüblichem AdBlue gemäß der Norm ISO 22241-2. Darüber hinaus wurde die Studie auf die Quantifizierung von Harnstoff in handelsüblichem AdBlue unter Verwendung einer linearen Kalibrierungskurve ausgeweitet, die mit der Agilent MicroLab Quant Anwendung erstellt wurde. Diese FTIR-basierte Quantifizierung bietet eine einfachere und wirtschaftlichere Alternative zu den Methoden nach ISO 22241-2 für die routinemäßige Quantifizierung des Harnstoffgehalts in AdBlue unter Verwendung der Agilent MicroLab FTIR-Software.

## Einleitung

AdBlue ist der Handelsname für eine 32,5%ige wässrige Harnstofflösung hoher Reinheit, deren Qualitätsanforderungen durch die Norm ISO 22241 vorgegeben sind. In den USA ist es auch als DEF (Diesel Exhaust Fluid), in Brasilien als ARLA32 und außerhalb Europas unter der technischen Bezeichnung AUS32 bekannt. Ungeachtet seiner Bezeichnung muss diese Substanz jedoch immer die gleichen Spezifikationen erfüllen. AdBlue kommt in Fahrzeugen mit Dieselmotoren zum Einsatz, die mit selektiver katalytischer Reduktion (SCR) arbeiten. In der Praxis wird AdBlue in die Abgase eines Dieselmotors injiziert, um die für die Umwelt schädlichen Stickstoffoxidemissionen (NO<sub>x</sub>) zu reduzieren. Dafür wird AdBlue in das Abgasrohr vor dem SCR-Katalysator injiziert. Durch die Hitze zersetzt sich der Harnstoff in Ammoniak, und die schädlichen NO<sub>x</sub>-Gase werden durch selektive katalytische Reduktion zu Stickstoffgas und Wasserdampf reduziert (siehe Abbildung 1).<sup>1</sup>

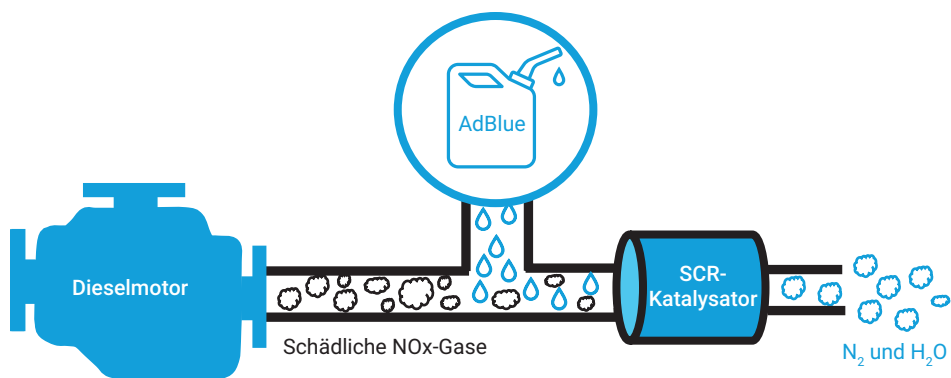
Die Nachfrage nach AdBlue ist groß, und es gibt derzeit einen Mangel an raffiniertem Harnstoff, dem Hauptbestandteil von AdBlue. Die gestiegene Nachfrage nach AdBlue ist auf die strengeren globalen Kraftstoffstandards zurückzuführen, insbesondere in Europa. Daher müssen Identität, Qualität und chemische Eigenschaften von AdBlue genau bestimmt werden, um sicherzustellen, dass die in ISO 22241 festgelegten Spezifikationen erfüllt werden. Gemäß ISO 22241-2, Anhang J, ist für die Identifizierung von AdBlue mit einer Harnstoffkonzentration von über 10 % (w/w) FTIR-Spektroskopie als analytische Methode vorgesehen. Darüber hinaus spezifiziert ISO 22241-2 eine Verbrennungsmethode (Anhang B) und eine Brechungsindexmethode (Anhang C) zur Quantifizierung des Harnstoffgehalts in AdBlue. Die Anwendung dieser Quantifizierungsmethoden kann jedoch zeitaufwendig sein und setzt Chemikalien,

Laborausrüstung und erfahrenes Personal voraus. In dieser Application Note soll die FTIR-Spektroskopie als einfachere und wirtschaftlichere Alternative für die routinemäßige Quantifizierung vorgestellt werden.

Bei der FTIR-Spektroskopie handelt es sich um eine schnelle und einfache Methode, die sowohl Informationen über die Identität als auch über die quantitative Zusammensetzung einer Probe liefert. Für die FTIR-Analyse wird nur ein minimales Probenvolumen benötigt, und in den meisten Fällen sind weder Probenvorbereitung noch Verbrauchsmaterialien erforderlich. Wenn Licht durch eine Harnstofflösung (AdBlue) fällt, wird Infrarotlicht absorbiert. Auf diese Weise wird ein Spektrum mit

charakteristischen Peaks erzeugt, das eine Identifizierung ermöglicht. Anhand handelsüblicher AdBlue-Proben erfasste FTIR-Spektren werden mit der 32,5%igen (w/w) Harnstoff-Standardlösung verglichen, um eine schnelle und einfache Identifizierung zu ermöglichen.

Das mit einem Diamantmodul für abgeschwächte Totalreflexion (ATR) ausgestattete Agilent Cary 630 FTIR-Spektrometer eignet sich hervorragend für die Analyse von handelsüblichem AdBlue (Abbildung 2). Als kleinstes Benchtop-FTIR-Spektrometer der Welt vereint das Cary 630 FTIR Robustheit, Flexibilität und höchste Leistung in einem ultrakompakten Design und ist ideal für die Routineanalyse. Die Konfiguration des Cary 630 FTIR kann ganz ohne



**Abbildung 1.** AdBlue wandelt in Verbindung mit SCR-Technologie zur selektiven katalytischen Reduktion schädliche NO<sub>x</sub>-Gase in Stickstoffgas und Wasserdampf um.



**Abbildung 2.** Agilent Cary 630 FTIR-Spektrometer mit einem Diamant-Probenerfassungsmodul für abgeschwächte Totalreflexion (ATR).

Ausrichtung durch den Anwender schnell mit einem Probenerfassungsmodul geändert werden. Die bedienerfreundliche Agilent MicroLab-Software bietet schrittweise Anleitungen mit anschaulichen Bildern, um den Benutzer durch den gesamten analytischen Arbeitsablauf zu führen. Die Software beruht auf einem methodenbasierten Ansatz, der es ermöglicht, Methoden sowohl zur Identifizierung als auch zur Quantifizierung einzurichten. Die Ergebnisse werden in einem leicht verständlichen Format angezeigt und auf der Grundlage von anpassbaren Grenzwerten farblich hervorgehoben, was eine schnelle und intuitive Überprüfung der Daten ermöglicht (Abbildung 3).

## Experimentelles

### Geräte

Für diese Studie wurde das Agilent Cary 630 FTIR-Spektrometer mit einem Diamant-ATR-Modul mit Einfachreflexion verwendet. Ein kleines Volumen einer Probe wurde auf den ATR-Kristall gegeben und anschließend die Datenerfassung mit der Agilent MicroLab-Software, Version 5.7, durchgeführt. Die ausgewählten Parameter sind in Tabelle 1 zusammengefasst (der ATR-Kristall wurde vor jeder Analyse mit destilliertem Wasser gereinigt).

**Tabelle 1.** Versuchsparameter für das Agilent Cary 630 FTIR-ATR-Modul.

| Parameter           | Einstellung                    |
|---------------------|--------------------------------|
| Spektralbereich     | 4000 bis 650* $\text{cm}^{-1}$ |
| Hintergrundscans    | 16                             |
| Probenscans         | 256                            |
| Spektrale Auflösung | 4* $\text{cm}^{-1}$            |

\* Gemäß Definition in ISO 22241

### Materialien und Methoden

#### Teil A: Bestimmung der Identität von handelsüblichem AdBlue

**Herstellung einer 32,5%igen (w/w) Harnstoff-Standardlösung:** Die 32,5%ige (w/w) Harnstoff-Standardlösung wurde in einem 10-ml-Messkolben durch vollständiges Auflösen von 3,25 g Harnstoffkristallen (CAS 57-13-6) in destilliertem Wasser hergestellt.

#### Proben für die Analyse:

- Es wurde eine selbst hergestellte Harnstofflösung mit einer Konzentration von 32,5 % (w/w) verwendet.
- Von einer örtlichen Tankstelle wurde eine Probe von handelsüblichem AdBlue erworben.

#### Teil B: Quantifizierung von Harnstoff in handelsüblichem AdBlue

##### Herstellung von Standardproben:

Zehn Standardproben von Harnstoff (CAS 57-13-6) mit bekannten Konzentrationen (10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50 und 60 % (w/w)) wurden in 10-ml-Messkolben durch entsprechende Verdünnung hergestellt. Anhand der Standardproben wurde eine Quantifizierungsmethode mit einer linearen Kalibrierungskurve erstellt. Dazu wurde die in der Agilent MicroLab-Softwaresuite enthaltene MicroLab Quant Anwendung verwendet.

##### Referenzproben:

Zur Bewertung der Quantifizierungsmethode wurden fünf Harnstoffproben (CAS 57-13-6) bekannter Konzentration (6, 12, 29, 33 und 43 % (w/w)) als Kontrolle in 10-ml-Messkolben hergestellt. Dazu wurden entsprechende Mengen an Harnstoffkristallen vollständig in destilliertem Wasser aufgelöst.

##### Proben für die Analyse:

- Es wurde die in Teil A hergestellte 32,5%ige (w/w) Harnstoff-Standardlösung verwendet.
- Von einer örtlichen Tankstelle wurde eine Probe von handelsüblichem AdBlue erworben.



**Abbildung 3.** Die Agilent MicroLab-Software erkennt automatisch das eingesetzte Probenerfassungsmodul und wendet die entsprechenden Parameter an. Die Software begleitet den Anwender mit schrittweisen Anleitungen und anschaulichen Bildern durch den gesamten analytischen Arbeitsablauf. Die farbcodierten Ergebnisse, die direkt nach der Datenerfassung angegeben werden, ermöglichen eine schnelle und intuitive Überprüfung der Daten.

# Ergebnisse und Diskussion

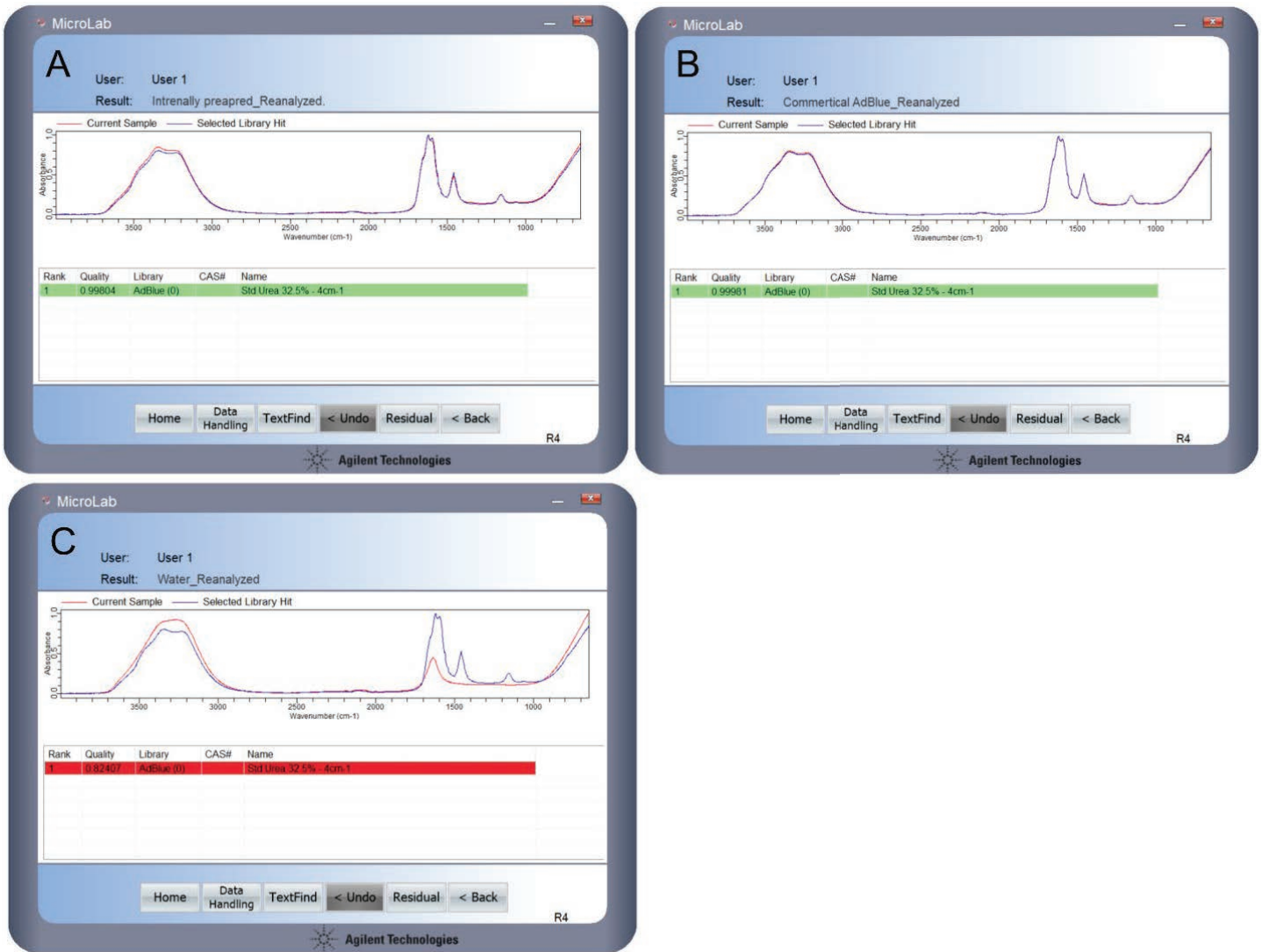
## Teil A: Bestimmung der Identität von handelsüblichem AdBlue

Die MicroLab-Software führt den Anwender mithilfe anschaulicher Bilder und einer benutzerfreundlichen Navigation durch den gesamten analytischen Arbeitsablauf. Es wurde eine FTIR-Methode für die routinemäßige Identifizierung von AdBlue-Lösungen in der MicroLab-Software erstellt, die auf ISO 22241-2 beruht. Die Methode zur Identifizierung von AdBlue wurde durch Hinzufügen des FTIR-Spektrums der 32,5%igen (w/w) Harnstoff-Standardprobe zu einer neuen

Spektrbibliothek erstellt. Die FTIR-Spektren der handelsüblichen AdBlue-Proben werden mithilfe dieser Methode mit der Referenzprobe verglichen. Nach der Datenerfassung führt die Software automatisch den Bibliotheksvergleich durch und berechnet für jede Probe automatisch den Hit Quality Index (HQI). Der HQI gibt an, wie gut das gemessene Spektrum mit dem Referenzspektrum in der Bibliothek übereinstimmt. Der HQI kann dann als Kriterium für „Bestanden“ oder „Nicht bestanden“ verwendet werden. Der Anwender kann Schwellenwerte für die Farbcodierung festlegen, die von der Software automatisch angewendet wird. Dies

ermöglicht eine einfache Interpretation und Identifizierung von Proben, die außerhalb des Spektrums liegen. Mit hoher Sicherheit identifizierte Proben werden grün angezeigt, während Proben, die mit geringer Sicherheit identifiziert wurden, rot dargestellt werden.

Zum Testen der oben beschriebenen Methode zur Identifizierung von AdBlue wurden die selbst hergestellte 32,5%ige (w/w) Harnstofflösung und eine handelsübliche AdBlue-Lösung analysiert. Nach der Datenerfassung führte die Software automatisch den Algorithmus zur Ähnlichkeitssuche durch und gab die Ergebnisse der Identifizierung aus. Wie in den



**Abbildung 4.** Eine qualitative Routinemethode zur Identifizierung von handelsüblichen AdBlue-Proben mit hoher Zuverlässigkeit. Farbcodierter Ergebnisbericht (A) für eine selbst hergestellte 32,5%ige (w/w) Harnstoffprobe, (B) eine handelsübliche AdBlue-Probe und (C) Wasser. Die Farbcodierung erleichtert die Interpretation der Ergebnisse und mindert das Risiko von Bedienfehlern.



Abbildungen 4A und 4B zu sehen ist, wurden die Proben mit einem HQI von 0,99804 bzw. 0,9998 (wobei 1 der höchste theoretische Wert ist) von der Software korrekt identifiziert und die Ergebnisse mit grüner Farbcodierung dargestellt. Bei der Analyse eines FTIR-Spektrums von Wasser zeigte ein rot kodiertes Ergebnis einen HQI von 0,82407 an und bestätigte somit die mangelnde Übereinstimmung des Spektrums (Abbildung 4C). Diese Ergebnisse zeigen, dass das Cary 630 FTIR mit einem Diamant-ATR-Modul eine schnelle und einfache Methode zur automatischen Identifizierung von handelsüblichem AdBlue darstellt, die den Anforderungen der Norm ISO 2224-2 (Anhang J) gerecht wird.

### Teil B: Quantifizierung von Harnstoff in handelsüblichem AdBlue

Laut ISO 22241-2 können zur Bestimmung des Harnstoffgehalts von AdBlue sowohl die Verbrennungsmethode als auch die Brechungsindexmethode eingesetzt werden. Beide Methoden können sich im Routineeinsatz jedoch als zeitaufwendig erweisen. Darüber hinaus erfordern diese Methoden ein zertifiziertes Referenzmaterial, Laborausüstung, erfahrenes Personal und sind zudem nur für die Bestimmung des Harnstoffgehalts im Bereich von 30 bis 35 % (w/w) geeignet. Aus diesem Grund ist es wichtig, alternative Methoden für die Routineanalyse des Harnstoffgehalts in handelsüblichem AdBlue zu evaluieren.<sup>2</sup> In dieser Application Note soll die FTIR-Spektroskopie als einfachere und wirtschaftlichere Alternative zu den Methoden nach ISO 22241 für die routinemäßige Quantifizierung untersucht werden.

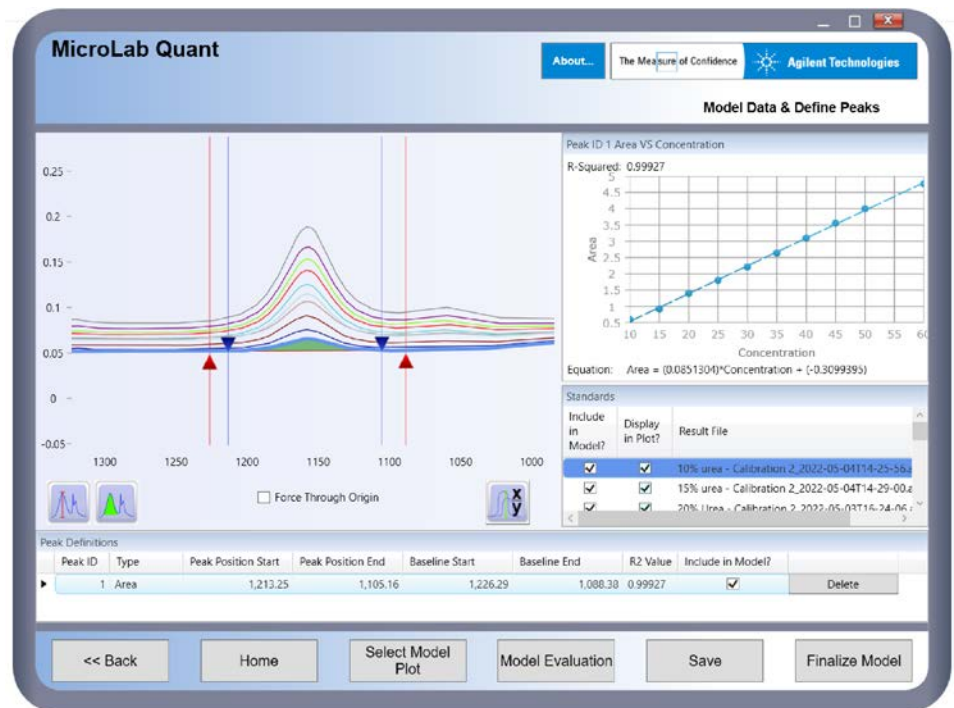
### Erstellen eines Quantifizierungsmodells (Kalibrierungskurve)

Zur Erstellung einer linearen Kalibrierungskurve wurde die Anwendung MicroLab Quant verwendet. Schrittweise Anleitungen zur Erstellung eines Quantifizierungsmodells finden Sie in der Agilent Anwendungsanleitung „Alcohol level determination in hand sanitizers by FTIR“ (5994-2827EN). Es wurden FTIR-Spektren von zehn Harnstoff-Standardproben mit bekannten Konzentrationen (10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50 und 60 % (w/w)) erfasst. Zur Erstellung der Kalibrierungskurve wurde der charakteristische Peak von Harnstoff bei 1157 cm<sup>-1</sup> verwendet, wobei die Fläche unter der Kurve herangezogen wurde. Wie in Abbildung 5 dargestellt, zeigt das Diagramm der Peakfläche als Funktion der Konzentration, dass das Quantifizierungsmodell eine ausgezeichnete Linearität mit

einem Korrelationskoeffizienten von R = 0,99934 aufweist. Dieses Modell wurde unter dem Namen „AdBlue Quantification“ für die Analyse von Proben gespeichert. Die neu entwickelte AdBlue-Quantifizierungsmethode wurde anhand folgender Kriterien bewertet: 1) Gesamtstandardfehler, berechnet mit der MicroLab Quant Anwendung und 2) Präzisionsmessungen auf der Grundlage von Reproduzierbarkeitsstudien.<sup>2</sup>

### Evaluierung des Quantifizierungsmodells

Nach der Erstellung des Quantifizierungsmodells kann es in der MicroLab Quant Anwendung evaluiert werden. Dafür gibt es zwei Möglichkeiten: mittels Funktion **Cross Validation** oder Funktion **Independent Set** auf der Registerkarte **Model Evaluation** (Abbildung 5).



**Abbildung 5.** Die Linearität der spektralen ATR-FTIR-Response wurde anhand der Peakfläche zwischen 1213,25 cm<sup>-1</sup> und 1105,16 cm<sup>-1</sup> evaluiert. Die Berechnungen der Kalibrierungskurve und des Korrelationskoeffizienten werden automatisch von der Software durchgeführt.

**Kreuzvalidierung:** Mithilfe dieser Funktion werden die Konzentrationen der Standardproben vorhergesagt, die zur Erstellung der Kalibrierungskurve verwendet wurden. Wie in Abbildung 6 dargestellt, werden die Konzentrationen mit einer hohen Genauigkeit vorhergesagt, nämlich mit einem Gesamtstandardfehler von 0,18.

**Validierung mit einem unabhängigen Satz:** Diese Funktion wurde verwendet, um das AdBlue-Quantifizierungsmodell anhand von Referenzproben bekannter Harnstoffkonzentration (6, 12, 29, 33 und 43 % (w/w)) zu evaluieren. Hierzu wurden die FTIR-Spektren dieser Proben erfasst und die zugehörigen Datendateien durch Klicken auf die Schaltfläche **Add Files** hinzugefügt. Die Probenkonzentration wurde dann in die Tabelle eingegeben. Die vorhergesagten Konzentrationen und der damit verbundene Gesamtfehler wurden durch Klicken auf die Schaltfläche **Predict** automatisch bestimmt. Wie in Abbildung 7 dargestellt, konnten die Konzentrationen der Referenzproben mithilfe des AdBlue-Quantifizierungsmodells mit einem Gesamtstandardfehler von 0,19 genau vorhergesagt werden.

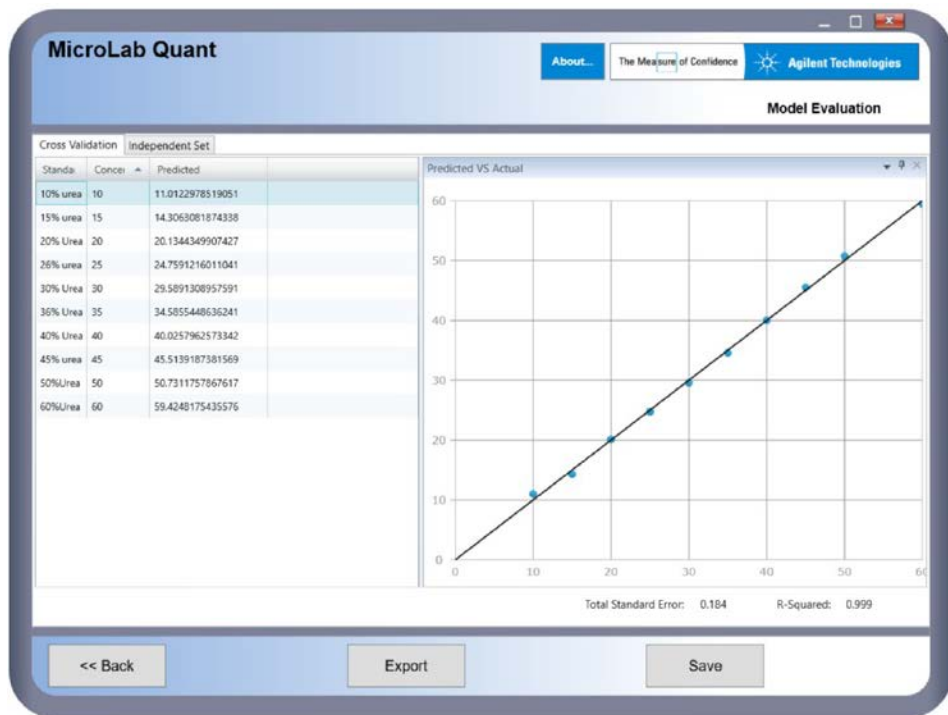


Abbildung 6. Kreuzvalidierung des AdBlue-Quantifizierungsmodells. Die Berechnungen wurden automatisch mit der Funktion „Cross Validation“ der Agilent MicroLab Quant Anwendung durchgeführt.

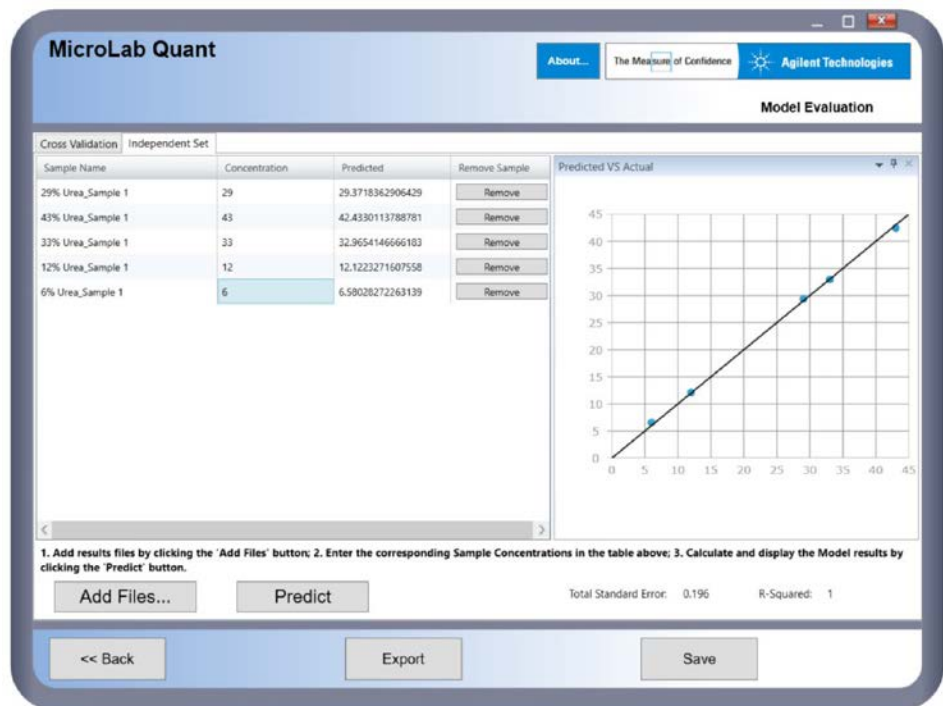


Abbildung 7. Evaluierung des AdBlue-Quantifizierungsmodells unter Verwendung der Funktion „Independent Set“ der MicroLab Quant Anwendung

## Präzision und Genauigkeit der Messung.

Präzision und Genauigkeit der Messung wurden unter Verwendung der 32,5%igen (w/w) Harnstoff-Standardprobe nach dem von Fojtikova, P. *et al.*<sup>2</sup> beschriebenen Verfahren evaluiert. Die Genauigkeit wird durch die prozentuale Wiederfindung der theoretischen Menge des Analyten in der Probe und die Präzision als Reproduzierbarkeit durch die relative Standardabweichung ausgedrückt. Die 32,5%ige (w/w) Harnstoff-Standardprobe wurde in sechs Aliquote aufgeteilt, und jedes Aliquot wurde mit der AdBlue-Quantifizierungsmethode analysiert (der ATR-Kristall wurde vor jeder Analyse mit destilliertem Wasser gereinigt). Wie aus Tabelle 2 hervorgeht, zeigte das Cary 630 FTIR mit einem Diamant-ATR-Modul mit Einfachreflexion bei den Konzentrationsmessungen eine ausgezeichnete Präzision mit einer Standardabweichung von nur 0,3 % und eine Genauigkeit von über 99 %.

**Tabelle 2.** Reproduzierbarkeit über sechs Aliquote einer 32,5%igen (w/w) Harnstoff-Standardprobe unter Verwendung des Agilent Cary 630 FTIR mit einem Diamant-ATR-Modul mit Einfachreflexion.

| Probe<br>(32,5 % (w/w) Harnstoffstandard) | Konzentration<br>(% (w/w)) |
|---|----------------------------|
| Probenaliquot 1                           | 31,9                       |
| Probenaliquot 2                           | 32,5                       |
| Probenaliquot 3                           | 32,7                       |
| Probenaliquot 4                           | 32,3                       |
| Probenaliquot 5                           | 32,9                       |
| Probenaliquot 6                           | 32,4                       |
| Mittlere Konzentration                    | 32,5                       |
| Genauigkeit (%)                           | > 99 %                     |
| Präzision (Standardabweichung %)          | 0,3                        |

## Analyse von handelsüblichen AdBlue-Proben

Für die Analyse wurden eine handelsübliche AdBlue-Probe, die von einer örtlichen Tankstelle erworben wurde, und die 32,5%ige (w/w) Harnstoff-Standardlösung verwendet. Die Harnstoffkonzentration einer AdBlue-Probe ist laut Definition in ISO 22241-2 das arithmetische Mittel aus drei Messungen, gerundet auf die nächsten 0,1 %. Um den Vorgaben der ISO-Methode gerecht zu werden, wurde jede Probe in drei Aliquote aufgeteilt; dann wurden die FTIR-Spektren erfasst. Jedes FTIR-Spektrum wurde mit der AdBlue-Quantifizierungsmethode analysiert. Für die mittleren Konzentrationen der einzelnen Proben wurden Ergebnisse mit einer hohen Genauigkeit erhalten. Die berechneten Standardabweichungen betragen für die 32,5%ige (w/w) Harnstoff-Standardlösung 0,4 % und für die handelsübliche AdBlue-Probe 0,6 % (Tabelle 3). Diese Ergebnisse machen deutlich, dass die Agilent MicroLab-Software eine einfache, genaue und wirtschaftliche Alternative für die Routineanalyse des Harnstoffgehalts in handelsüblichem AdBlue darstellt.

**Tabelle 3.** Analyse von handelsüblichem AdBlue und selbst hergestellten 32,5%igen (w/w) Harnstofflösungen unter Verwendung des Agilent Cary 630 FTIR-ATR-Moduls in Verbindung mit dem in der MicroLab Quant Anwendung erstellten AdBlue-Quantifizierungsmodell

| Probe                                   |                 | Konzentration (% (w/w)) | Mittlere Konzentration (% (w/w)) |
|---|-----------------|-------------------------|----------------------------------|
| 32,5%ige (w/w) Harnstoff-Standardlösung | Probenaliquot 1 | 31,9                    | 32,4 ± 0,4                       |
|   | Probenaliquot 2 | 32,5                    |                                  |
|   | Probenaliquot 3 | 31,7                    |                                  |
| Handelsübliches AdBlue                  | Probenaliquot 1 | 32,9                    | 32,4 ± 0,6                       |
|   | Probenaliquot 2 | 32,6                    |                                  |
|   | Probenaliquot 3 | 31,8                    |                                  |

## Eine schnelle, genaue und einfache alternative Methode zur Quantifizierung von AdBlue

Die Erstellung des Quantifizierungsmodells, das aus 10 Standardproben bestand, dauerte ungefähr 30 Minuten. Dies beinhaltete die Reinigung des Kristalls, die Messung des Hintergrunds, die Erfassung von Daten für 10 Standards (256 Scans pro Probe) sowie die Erstellung des entsprechenden Quantifizierungsmodells. Nach der Implementierung des Quantifizierungsmodells in eine MicroLab-Methode für die Routineanalyse dauerte die Analyse einer Probe etwa 2,5 Minuten, einschließlich der Reinigung des Kristalls, der Messung des Hintergrunds und der Erfassung des Probenspektrums (256 Scans pro Probe). Die Analyse kann jedoch beschleunigt und der Probendurchsatz erhöht werden, indem die Anzahl der Scans pro Probe reduziert wird (so werden z. B. für 128 Scans etwa 1,5 Minuten benötigt). Das Cary 630 FTIR mit einem Diamant-ATR-Modul mit Einfachreflexion stellte eine schnelle und zuverlässige alternative Methode zur Quantifizierung des Harnstoffgehalts in handelsüblichem AdBlue dar, bei der das Risiko von Bedienfehlern minimal ist.

## Fazit

Das Agilent Cary 630 FTIR-Spektrometer ist ein unkompliziertes und einfach zu bedienendes Gerät für die Analyse von handelsüblichem AdBlue.

Diese Application Note beschreibt die Anwendung des Cary 630 FTIR mit einem Diamant-ATR-Modul mit Einfachreflexion zur Entwicklung einer schnellen und einfachen Methode für die Identifizierung von handelsüblichem AdBlue gemäß ISO 22241-2.

Die FTIR-Spektroskopie bietet eine einfachere und wirtschaftlichere Alternative zu den Methoden nach ISO 22241-2 für die routinemäßige Quantifizierung des Harnstoffgehalts in AdBlue unter Verwendung der Agilent MicroLab-Software. Das Cary 630 FTIR-ATR liefert eine hochlineare Kalibrierungskurve mit hervorragender Reproduzierbarkeit, die die Effektivität des Geräts, der Methode und der analytischen Ergebnisse unter Beweis stellt.

## Literaturverweise

1. Foerter, D. C; Whiteman, C. S. Typical Installation Timelines for NOx Emissions Control Technologies on Industrial Sources. *Institute of Clean Air Companies (ICAC)* December **2006**.
2. Fojtikova, P. *et al.* Tracking AdBlue Properties During Tests of Selective Catalytic Reduction (SCR) Systems - the Suitability of Various Analytical Methods for Urea Content Determination. *Int. J. Energy Res.* **2020**, *44*, 2549–2559.

[www.agilent.com](http://www.agilent.com)

DE69273453

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2022  
Gedruckt in den USA, 4. August 2022  
5994-5092DEE