

Použití CQMA metody ke stanovení fázového složení materiálů

Zdeněk Klika



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

MŠMT
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

Vybrané metody používané ke kvantitativnímu studiu minerálních fází

- **XRD**

- i) **Intenzity vybraných difrakčních linií**
- ii) **XQPA**
- iii) **Ritveldova technika**

- ***Mikroskopické metody***

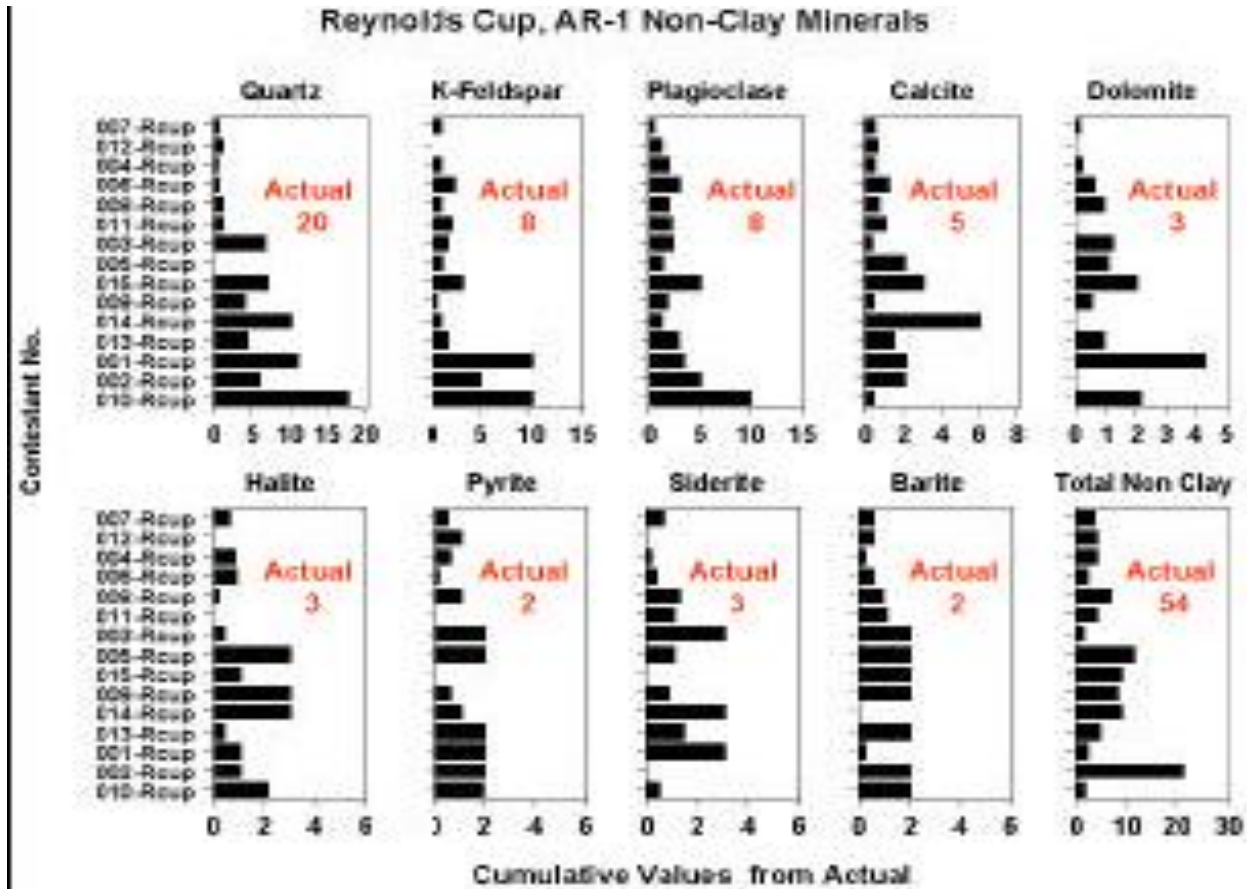
- i) **Bodová analýza (optická a elektron mikroskopie)**

- ***Normativní metody***

- i) **CIPW**

- ***Metody založené na hmotové bilanci***

Round Robin Tests pro nejlíové minerály



CÍL PRESENTACE

A. Nový software (CQMA) ke stanovení kvantitativní minerální analýzy krystalických fází

B. Stanovení amorfních fází v experimentálně připravených kordieritech

B1. XRD metoda

B2. Nově navržené CQMA metody

C. Porovnání stanovených obsahů fází XRD a CQMA metodami

A. Software CQMA použitý ke kvantitativnímu stanovení krystalických minerálů

Vstupní data k výpočtu CQMA v analyzovaných vzorcích:

- 1) Úplná chemická analýza**
- 2) Identifikace minerálů**
- 3) Krystalochemické vzorce všech minerálů**

Úplná chemická analýza

Krystalochemický nebo oxidický typ vzorce

SamplesOxides/.....			
SiO ₂	52.95		
TiO ₂	0.81		
Al ₂ O ₃	25.27		
Fe ₂ O ₃	4.44		
FeO	0:30		
CaO	0.70		
MgO	13.26		
Na ₂ O	0.21		
K ₂ O	2.06		
H ₂ O*	...		
SO ₃	...		
P ₂ O ₅	--		
CO ₂			
Total	100.05		

Kaolinit



nebo



Základní použité rovnice k výpočtům CQMA

$$(SiO_2)_{CHA} = (SiO_2)_{MLC} \cdot c_{MLC} + (SiO_2)_{Kaol} \cdot c_{Kaol} + (SiO_2)_Q \cdot c_Q$$

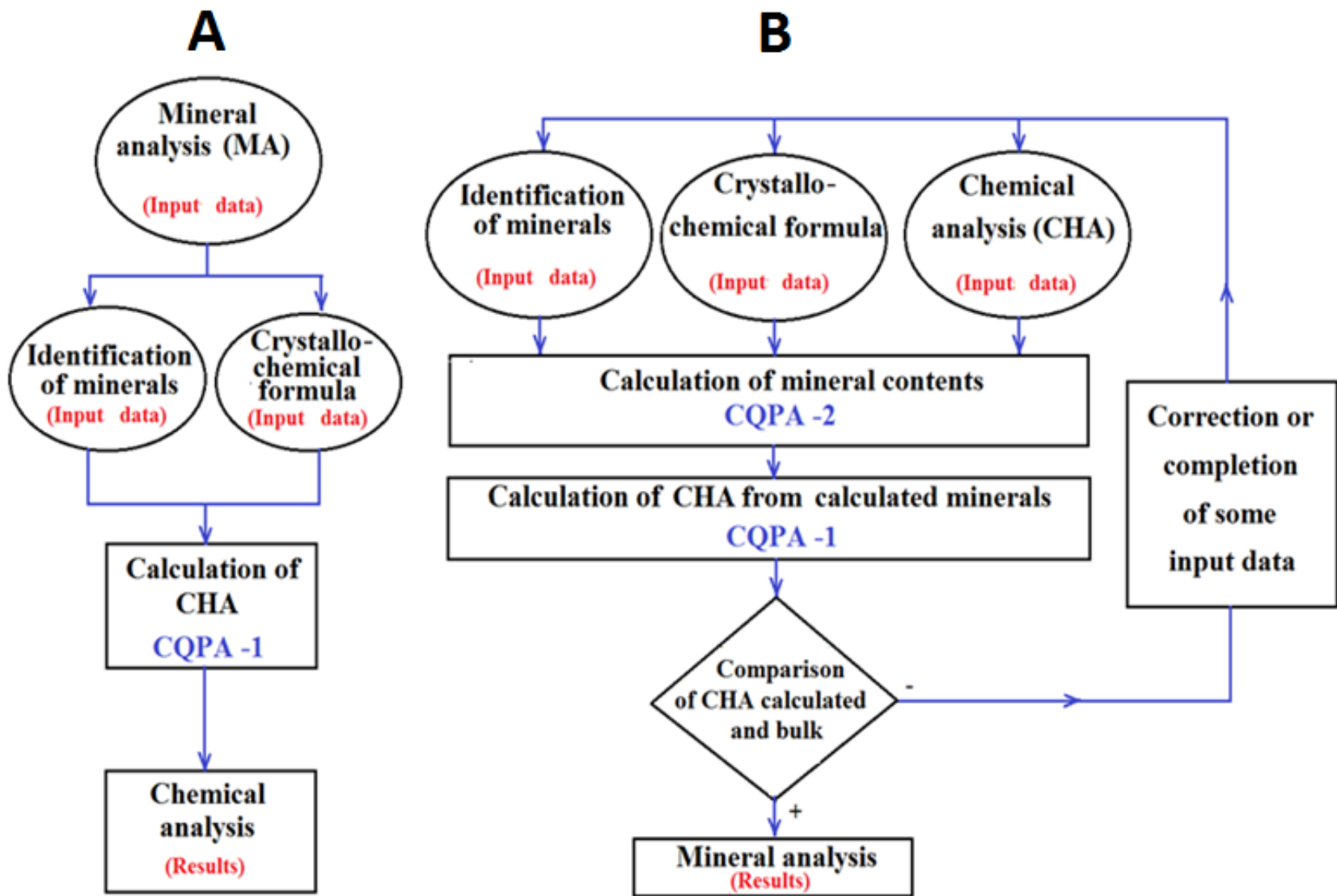
$$(Al_2O_3)_{CHA} = (Al_2O_3)_{MLC} \cdot c_{MLC} + (Al_2O_3) \cdot c_{Kaol}$$

.....

.....

$$(c_i)_{calc} = \sum_{j=1}^n w_{i,j} \cdot w_j$$

$$\sum_{i=1}^m \left((c_i)_{exp} - (c_i)_{calc} \right)^2 = \sum_{i=1}^m \left((c_i)_{exp} - \sum_{j=1}^n w_{i,j} \cdot w_j \right)^2 = \min$$



Jednoduché schéma CQMA programu

Výpočet chemické analýzy (CQMA A) vzorku pískovce (C)

n	název minerálu	koncentr	SiO2	TiO2	Al2O3	Fe2O3	FeO	MgO	CaO	Na2O	K2O	H2O+	S2-	SO3	CO2	P2O5	BaO	delta O	
	Analýza	Suma:	100.000	73.248	0.000	14.040	0.873	1.844	0.326	1.117	1.847	3.017	1.403	0.000	0.000	2.286	0.000	0.000	0.000

Krystalochemické vzorce identifikovaných minerálů ve vzorku pískovce

j	název minerálu	krystalochemický vzorec	MA_exp
4	křemen	SiO2	48.17
30	VOLITELNÝ 1	1·(FeO)·1·(CO2)	1.40
31	VOLITELNÝ 2	3.00·(SiO2)·1.39·(Al2O3)·0.11·(Fe2O3)·0.45·(K2O)·1.00·(H2O+)	19.87
56	VOLITELNÝ 3	1.76·(SiO2)·0.775·(Al2O3)·1.96·(FeO)·1.37·(MgO)·1.00·(H2O+)	0.21
57	VOLITELNÝ 4	3.40·(SiO2)·1.30·(Al2O3)·0.35·(K2O)·1.00·(H2O+)	10.72
58	VOLITELNÝ 5	2.91·(SiO2)·0.542·(Al2O3)·0.50·(Na2O)	15.56
59	VOLITELNÝ 6	0.63·(FeO)·0.37·(MgO)·1.00·(CaO)·2·(CO2)	4.07
Suma koncentrací			100.00

Volitelné fáze s různými krystalochemickými vzorci (Vol. 1 – 6):

- 1- siderit,
- 2- muscovit 2M1,
- 3- chlorit IIb,
- 4- muscovit 1M,
- 5- albit,
- 6- ankerit

Krystalochemické vzorce a vypočtené obsahy minerálů (CQMA-B) v pískovci (C)

j	název minerálu	krystalochemický vzorec	MA_calc
4	křemen	SiO ₂	50.843
30	VOLITELNÝ 1	1·(FeO)·1·(CO ₂)	0.000
31	VOLITELNÝ 2	3.00·(SiO ₂)·1.39·(Al ₂ O ₃)·0.11·(Fe ₂ O ₃)·0.45·(K ₂ O)·1.00·(H ₂ O+)	10.525
56	VOLITELNÝ 3	1.76·(SiO ₂)·0.775·(Al ₂ O ₃)·1.96·(FeO)·1.37·(MgO)·1.00·(H ₂ O+)	3.743
57	VOLITELNÝ 4	3.40·(SiO ₂)·1.30·(Al ₂ O ₃)·0.35·(K ₂ O)·1.00·(H ₂ O+)	15.838
58	VOLITELNÝ 5	2.91·(SiO ₂)·0.542·(Al ₂ O ₃)·0.50·(Na ₂ O)	12.064
59	VOLITELNÝ 6	0.63·(FeO)·0.37·(MgO)·1.00·(CaO)·2·(CO ₂)	4.837
Suma koncentrací			97.849

Krystalochemické vzorce volitelných minerálů :

1- siderit; 2- muscovit 2M1; 3- chlorit Iib; 4- muscovit 1M; 5- albit; 6- ankerit

Vstupní chemická analýza ChA_{calc} a rozdíly ChA_{calc} a ChA_{exp}

i	oxid	ChA_exp [%]	ChA1 [%]	ChA2 [%]	ChA3 [%]	ChA4 [%]	ChA_calc [%]	Diff
1	SiO ₂	73.00	73.000	0.000	73.000	73.000	73.000	-0.0000
2	TiO ₂	0.42	0.420	0.000	0.420	0.000	0.000	-0.4200
3	Al ₂ O ₃	12.22	12.220	0.000	12.220	12.438	12.438	0.2177
4	Fe ₂ O ₃	0.40	0.400	0.000	0.400	0.462	0.462	0.0622
5	FeO	2.27	2.270	0.000	2.270	2.393	2.393	0.1231
6	MgO	1.17	1.170	0.000	1.170	0.871	0.871	-0.2987
7	CaO	1.37	1.370	0.000	1.370	1.328	1.328	-0.0421
8	Na ₂ O	1.82	1.820	0.000	1.820	1.432	1.432	-0.3882
9	K ₂ O	2.79	2.790	0.000	2.790	2.462	2.462	-0.3281
10	H ₂ O+	2.38	2.380	0.000	2.380	1.379	1.379	-1.0011
11	S ²⁻	0.02	0.020	0.000	0.020	0.000	0.000	-0.0200
12	SO ₃		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.0000
13	CO ₂	2.07	2.070	0.000	2.070	2.084	2.084	0.0142
14	P ₂ O ₅	0.10	0.100	0.000	0.100	0.000	0.000	-0.1000
15	BaO		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.0000
16	delta O		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.0000
Suma:		100.03	100.030	0.000	100.030	97.849	97.849	1.6049

SSDCH

$$\sum_{i=1}^n [(c_i)_{calc} - (c_i)_{exp}]^2$$

Ukázka výpočtů 6-ti standardů bez amorfních fází

KH – Limestone

BM – Basalt

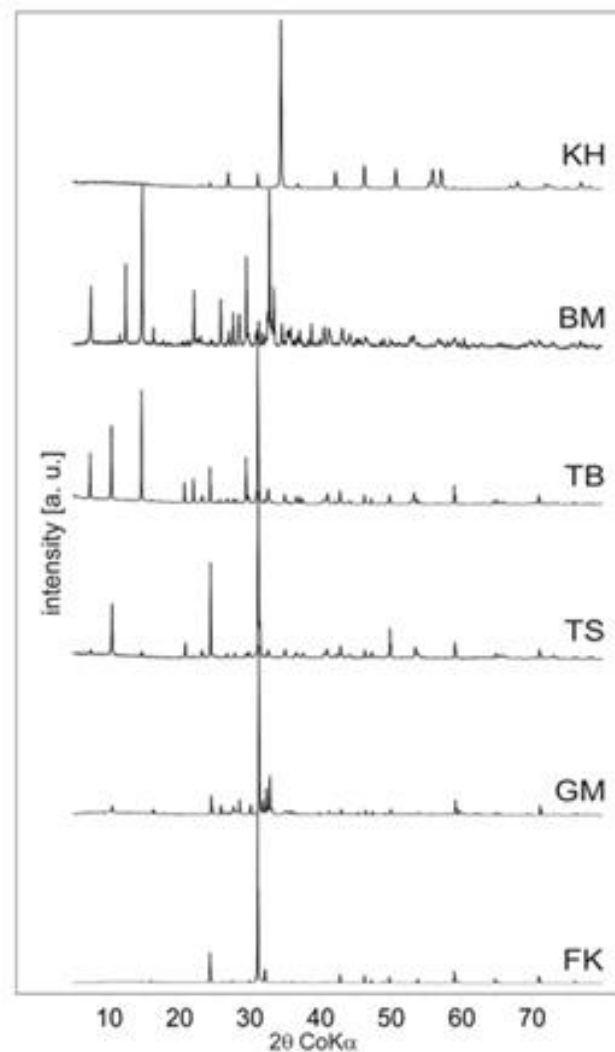
TB – Slate

TS – Black shale

GM – Granite

FK – Feldspathic sand

Identifikace XRD metodou



Doporučené výsledky celkových chemických analýz (váh. %) 6-ti referenčních mezinárodních standardů hornin

	KH		BM		TB		TS		GM		FK	
	\bar{x}	s	\bar{x}	s	\bar{x}	s	\bar{x}	s	\bar{x}	s	\bar{x}	s
SiO ₂	8.61	0.19	49.51	0.19	60.24	0.18	62.71	0.30	73.50	0.18	88.18	0.29
TiO ₂	0.134	0.021	1.14	0.07	0.934	0.056	0.71	0.10	0.213	0.023	0.058	0.013
Al ₂ O ₃	2.41	0.22	16.23	0.29	20.60	0.24	15.94	0.25	13.55	0.22	6.20	0.12
Fe ₂ O ₃	0.55	0.12	1.60	0.22	0.91	0.18	6.72	0.13	0.75	0.21	0.26*)	0.02
FeO	0.34	0.06	7.28	0.14	5.43	0.10	0.66	0.09	1.14	0.17	-	-
MnO	0.087	0.011	0.145	0.014	0.052	0.011	0.040	0.006	0.043	0.007	0.004	0.002
MgO	0.723	0.14	7.46	0.17	1.94	0.18	1.77	0.08	0.377	0.08	0.15	0.04
CaO	47.79	0.36	6.46	0.19	0.328	0.12	0.13	0.04	1.04	0.13	0.10	0.01
Na ₂ O	0,108	0.04	4.64	0.17	1.31	0.08	0.09	0.021	3.76	0.14	0.26	0.03
K ₂ O	0.413	0.06	0.203	0.045	3.85	0.13	4.88	0.21	4.74	0.18	4.13	0.15
P ₂ O ₅	0.12	0.015	0.105	0.014	0.095	0.014	0.29	0.04	0.063	0.010	0.076	0.004
CO ₂	37.60	0.26	1.34	0.07	0.129	0.043	1.39	0.12	0.278	0.047	0.022	0.005
H ₂ O ⁺	1.00	0.29	3.62	0.05	3.82	0.22	4.03	0.14	0.349	0.052	0.40	0.13

Note: KH – Limestone; BM – Basalt; TB – Slate; TS – Black shale; GM – Granite; FK – Feldspathic sand;

– reference value, s – standard deviation

*)Total Fe as Fe₂O₃

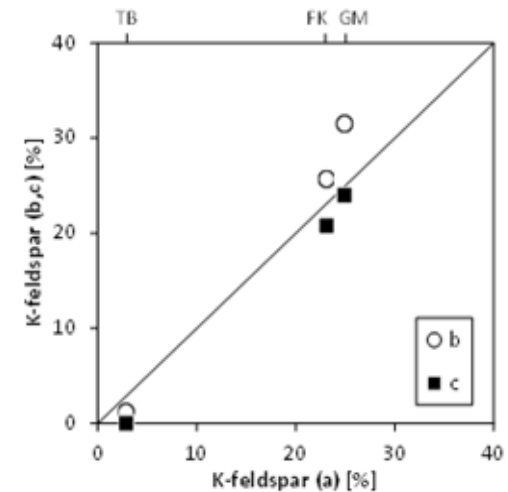
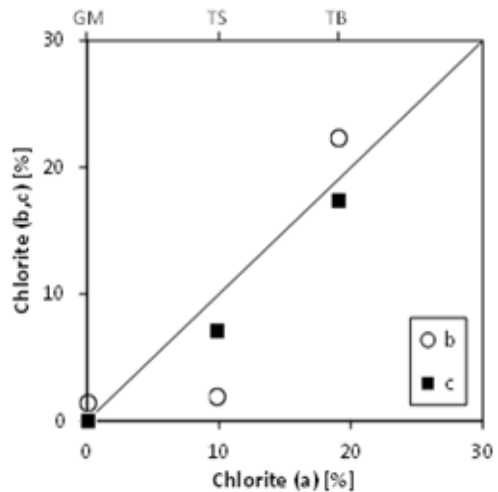
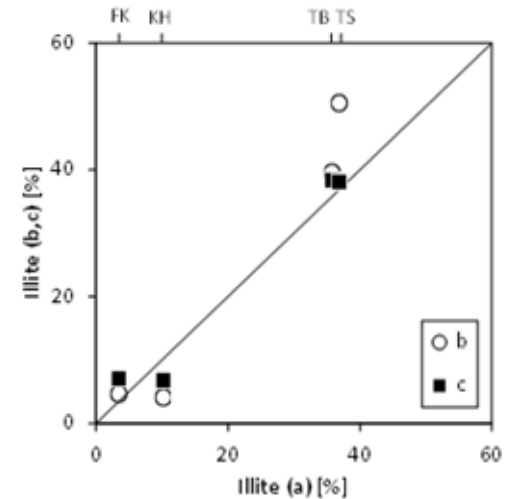
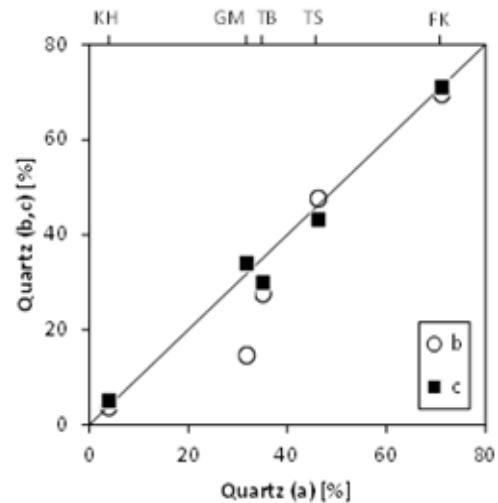
Vypočtené krystalochemické vzorce identifikovaných minerálů s použitím Ritveldovy metody

Mineral	Crystallochemical formula	Sample
Quartz	SiO_2	All samples
Illite	$\text{K}_{0.69}(\text{Al}_{1.97})[\text{Al}_{0.60}\text{Si}_{3.40}]\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	KH, FK
	$\text{K}_{0.85}(\text{Al}_{2.05})[\text{Al}_{1.00}\text{Si}_{3.00}]\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	TS
	$\text{K}_{0.91}(\text{Al}_{1.95}\text{Fe(III)}_{0.08})[\text{Al}_{1.00}\text{Si}_{3.00}]\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	TB
Biotite	$\text{K}_{1.00}(\text{Mg}_{1.35}\text{Fe(II)}_{1.65})[\text{Al}_{1.00}\text{Si}_{3.00}]\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	GM,
Chlorite–IIb	$(\text{Mg}_{2.50}\text{Fe(II)}_{2.68}\text{Al}_{1.00})[\text{Al}_{1.36}\text{Si}_{2.64}]\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	GM
	$(\text{Mg}_{3.62}\text{Fe(II)}_{1.56}\text{Al}_{1.00})[\text{Al}_{1.36}\text{Si}_{2.64}]\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	BM
	$(\text{Mg}_{4.26}\text{Fe(II)}_{0.92}\text{Al}_{1.00})[\text{Al}_{1.36}\text{Si}_{2.64}]\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	TS
	$(\text{Mg}_{2.48}\text{Fe(II)}_{2.70}\text{Al}_{1.00})[\text{Al}_{1.36}\text{Si}_{2.64}]\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	TB
K-feldspar	KAlSi_3O_8	TB, GM, FK
Plagioclase (Albite)	$\text{Na}_{0.75}\text{Ca}_{0.25}(\text{Al}_{1.25}\text{Si}_{2.75})\text{O}_8$	GM
	$\text{Na}_{1.00}\text{Al}_{1.00}\text{Si}_{3.00}\text{O}_{8.00}$	BM, TB
Calcite	CaCO_3	KH, BM,
Apatite	$\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$	GM
Mg/Fe hornblende	$(\text{Na}_{0.86}\text{K}_{0.40}\text{Ca}_{1.61})(\text{Mg}_{2.93}\text{Fe(II)}_{1.40}\text{Al}_{0.93})[\text{Al}_{1.93}\text{Si}_{6.07}]\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	GM
	$(\text{Na}_{0.34}\text{Ca}_{2.10})(\text{Mg}_{2.85}\text{Fe(II)}_{2.37})[\text{Al}_{0.98}\text{Si}_{7.02}]\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	BM

Závislost mezi % obsahy minerálů stanovených XRD(b), nebo CQMA(c) metodami a doporučenými referenčními minerálními obsahy (a) pro křemen, illit, chlorit a K-živec.

KH – Limestone;
 BM – Basalt;
 TB – Slate;
 TS – Black shale;
 GM – Granite;
 FK – Feldspathic sand;

Diagram SSDM kritérií
 pro 5 referenčních vzorků
 b – XRD; c - CQMA



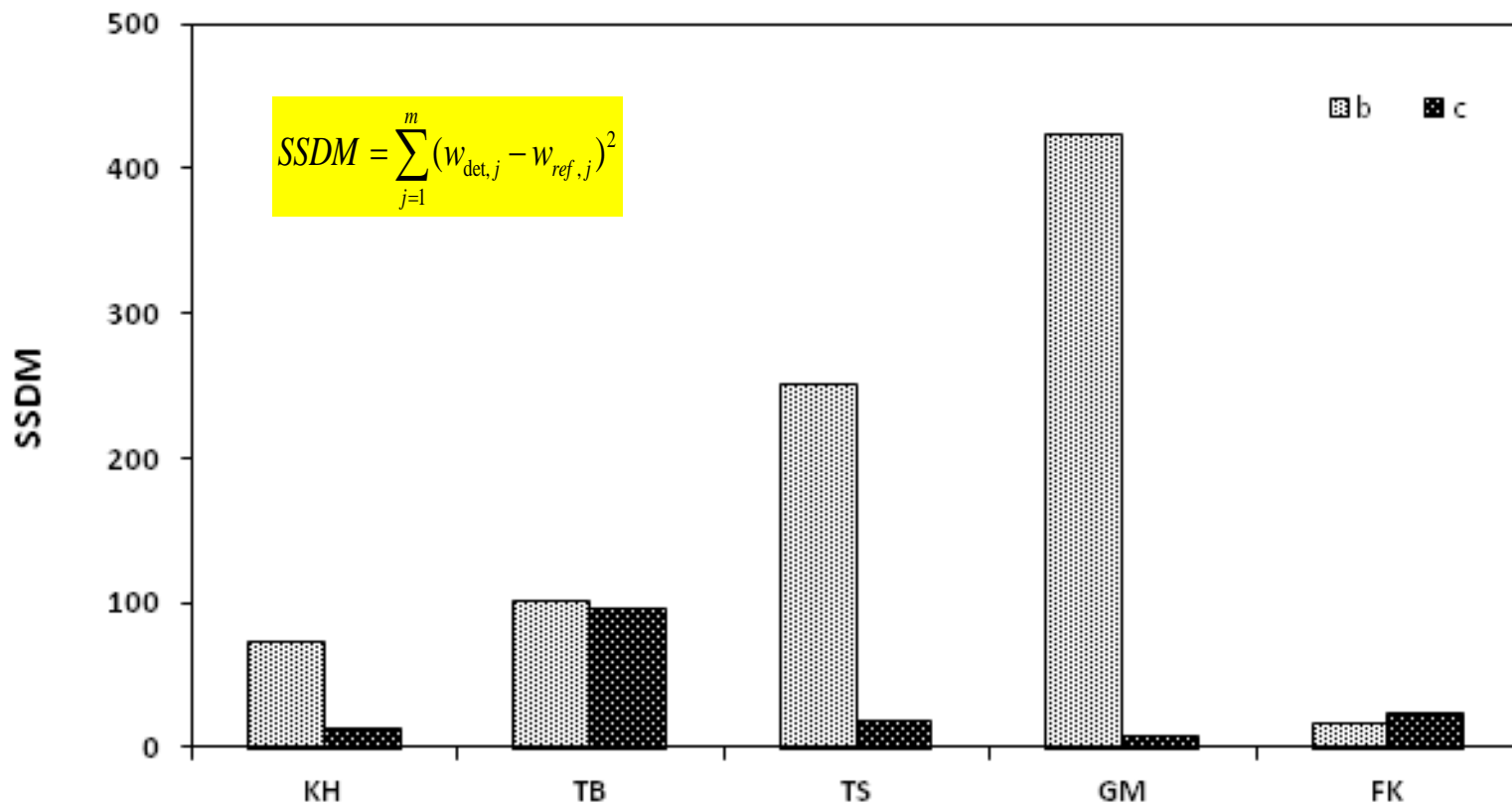


Diagram SSDM kriterií pro 5 referentních vzorků

b – XRD; c - CQMA

KH – Limestone;
 BM – Basalt;
 TB – Slate;
 TS – Black shale;
 GM – Granite;
 FK – Feldspathic sand;

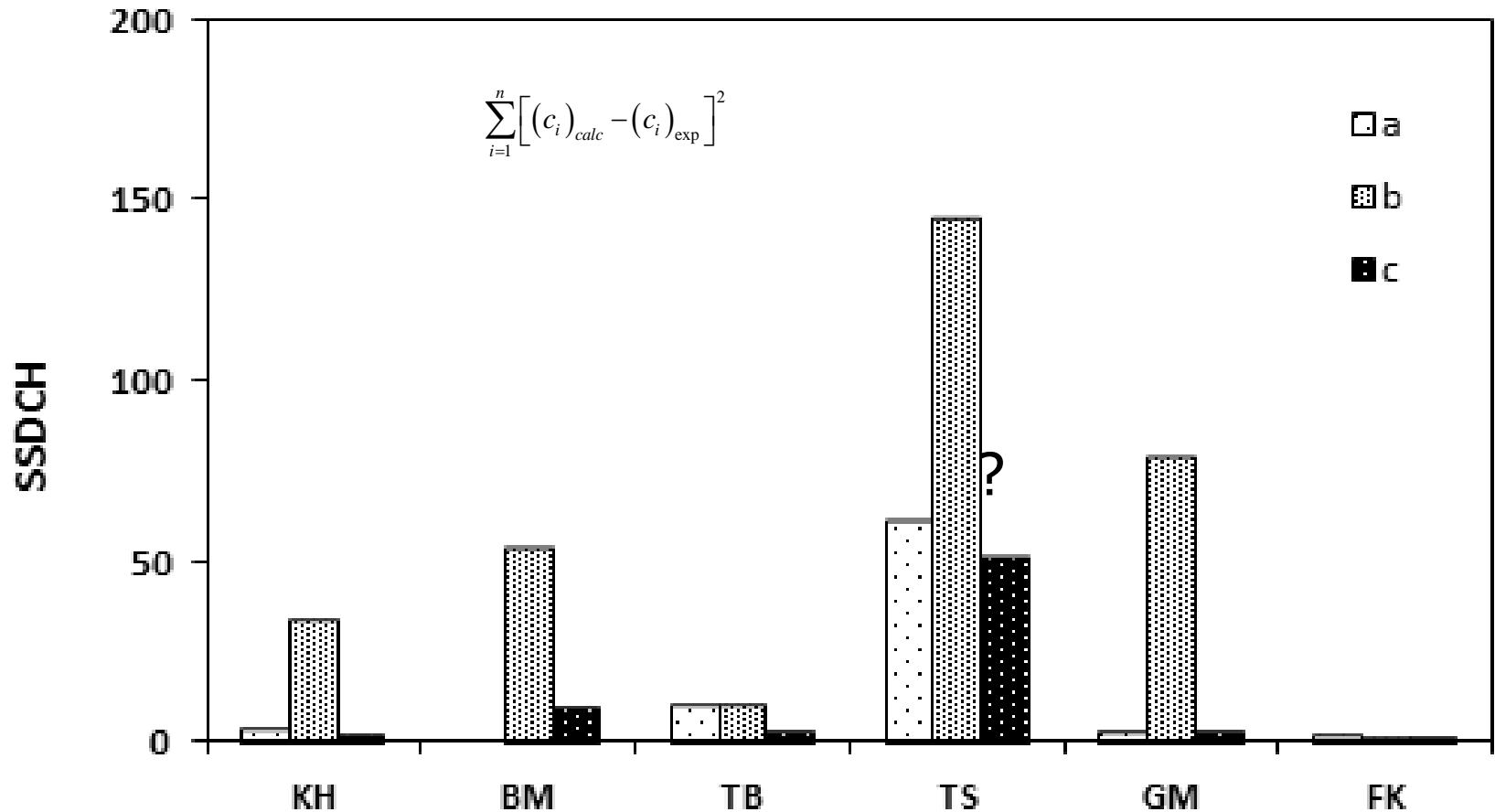


Diagram of SSDCH criteria for 6 reference samples

a – reference; b – XRD; c – CQMA;

KH – Limestone;
 BM – Basalt;
 TB – Slate;
 TS – Black shale;
 GM – Granite;
 FK – Feldspathic sand;

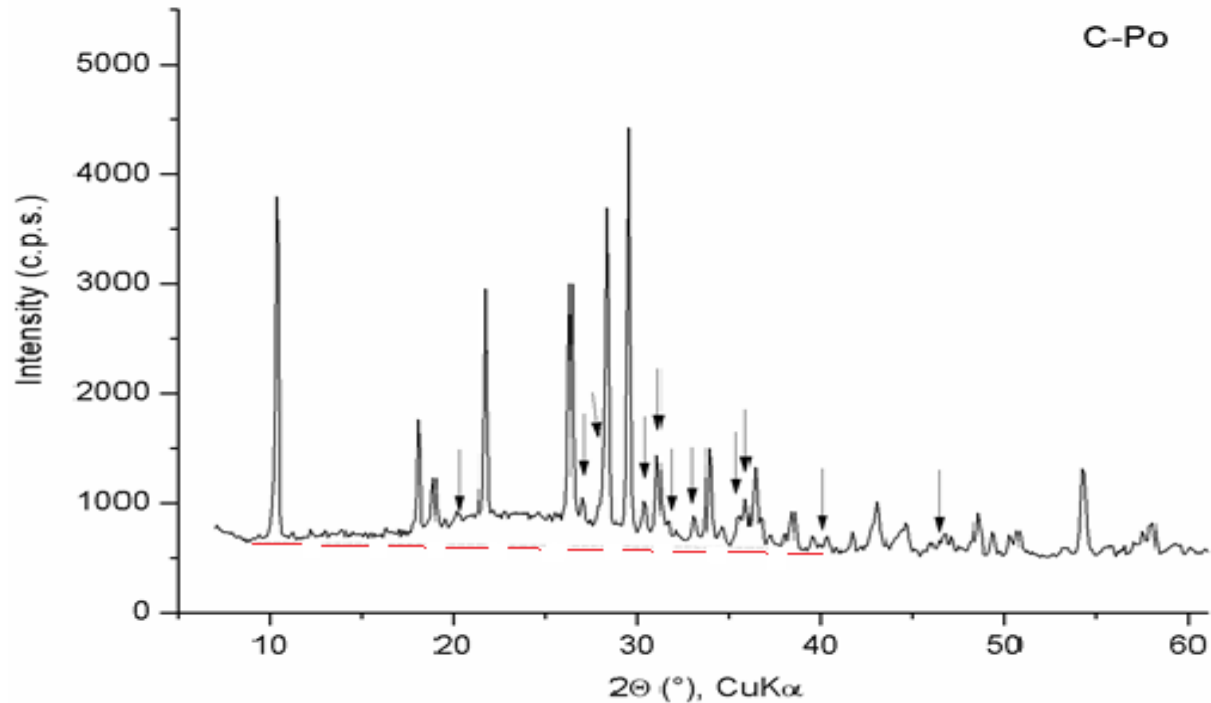
B. Stanovení amorfních fází v experimentálně připravených kordieritech

6 vzorků tohoto typu bylo připraveno ze směsi 6 různých kaolinitů z různých čs. nalezišť a 1 vermikulitu z Brazílie. V následující ukázce jsou prezentovány výsledky pro 1 vybranou směs připravenou z 1 vzorku **kaolinitu z Chlumčan** s 1 vzorkem vermikulitu připraveném v poměru **1 : 1** a vyžíhaném při teplotě **1300 stupňů Celsia**.

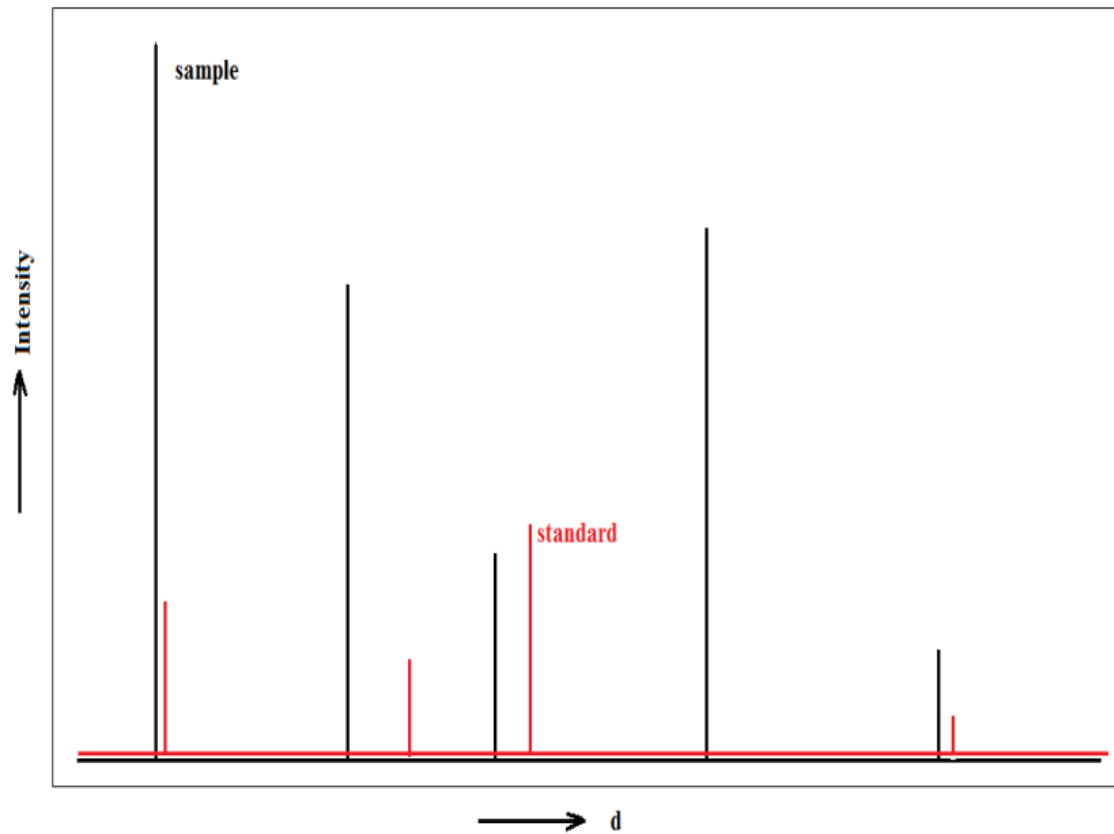
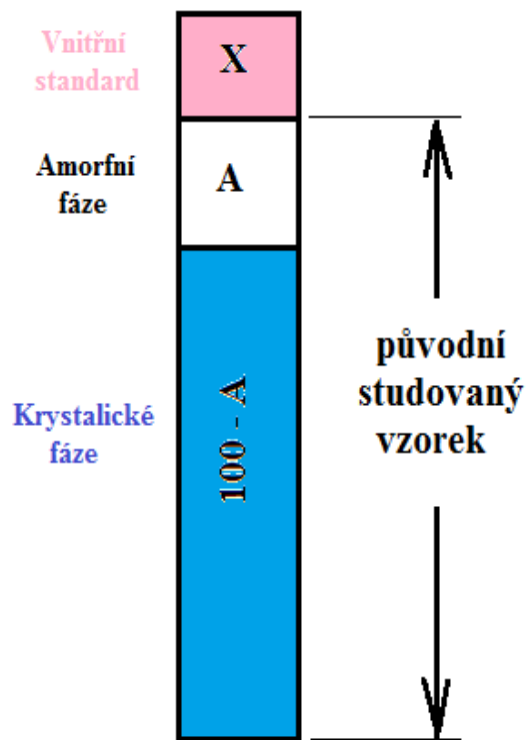
B1. XRD metoda

B2. Nově navržené CQMA metody

B1. XRD metoda



XRD difraktogram vzorku kordieritu (C-ChPo). Indialit (neoznačený) a enstatit (šipkou označené) píky; plocha nekystalických fází je odseparovaná přerušovanou lini.



Grafické znázornění různých součástí vzorku (vlevo); difrakční záznam vzorku s vnitřním standardem (vpravo)

XRD data pro výpočet krystalických a amorfní fáze (.....software). Data pro kordierit připraveném z kaolinitu v Chlumčanech.

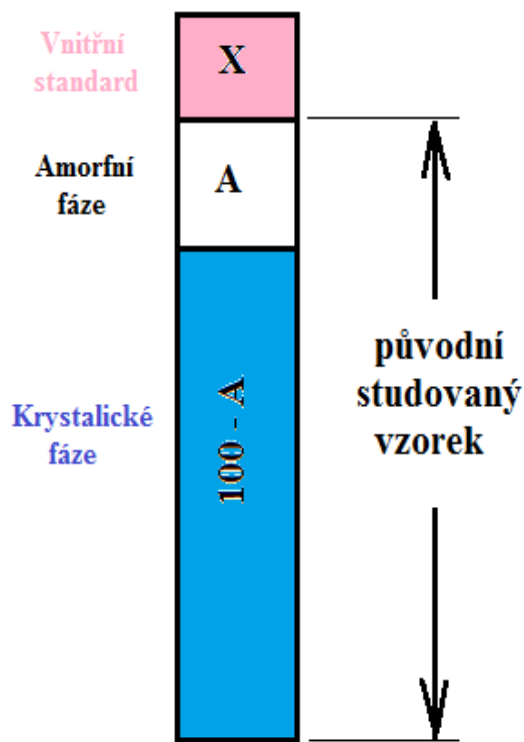
Phases	Rietveld	Spiked	original	XRD přepočet	XRD solo
Amorphous	0	70.91	78.05	-	-
Zinkite	31.44	9.15	0.00	-	-
Cordierite	44.33	12.90	14.19	64.66	Asi dtto XRD přepočet
Enstatite	24.22	7.05	7.75	35.34	Asi dtto XRD přepočet
Sum	100.0	100.0	100.0	100.0	
Přep. faktory		9.15/31.4 =0.2910	78.05/(100-9.15) =1.101	100/(100-31.44) = 1.459	

Poznámky. Přepočítávací faktory z XRD dat:

Spiked: z Rietveldu na Spiked (**0.2910**); amorfni fáze = 100 –suma krystal. fází v Spiked;

Original: ze Spiked na Original (**Spiked x 1.101**); z Rietveldu na **XRD přepočet** (**Rietveld x 1.459**);

Rovnice použité pro výpočet amorfni fáze A, resp. X.



Rietveld : % vztažená na krystalické fáze vzorku včetně vnitřního standardu; $100 - A + X$

$$\% \text{ korundu } x_R = \frac{100 - X}{(100 - A) + X} \quad (\text{rov. I});$$

$$\text{z toho } A = \frac{x_R (100 + X) - 100X}{x_R}$$

Spiked : % vztažená na celý vzorek včetně amorfni fáze a vnitřního standardu; $100 + X$

$$\% \text{ korundu } x_S = \frac{100 - X}{100 + X} \quad (\text{rov. II});$$

B2. Nově navržené CQMA metody

B2A – Minimální obsah amorfni fáze

**B2B – Obsahy všech fází vypočtené s použitím
krystalochemického vzorce amorfni fáze**

**B2C – Obsahy všech fází vypočtené s použitím
krystalochemických vzorců všech fází**

B2A – Minimální obsah amorfní fáze

Manuscript ID: materials-575610

Type of manuscript: Article in Journal Materials

Title: Crystallization and quantification of crystalline and non-crystalline phases in kaolin-based cordierites

Authors: Marta Valášková *, Zdeněk Klika, Boris Novosad, Bedřich Smetana

file:///C:/Users/pc/AppData/Local/Microsoft/Windows/INetCache/Content.Outlook/RONPLIR2/materials-12-03104.pdf

For the CQMA calculation the crystallochemical formulas of **cordierite $\text{Ca}_{0.1}\text{Mg}_{1.90}\text{Fe(III)}_{0.40}\text{Al}_{3.60}\text{Si}_{5.00}\text{O}_{18}$** and **enstatite MgSiO_3** were used. The selected crystallochemical formula of cordierite includes all Fe(III) and Ca present in individual 6 ED-XRF analyses of ceramic samples (Table 4) while the surplus of Si and all percentages of Ti, Na and K is supposed to be present in non-crystalline phases. The oxidic formula of non-crystalline phases based on 10SiO_2 were calculated and show that in amorphous phases the SiO_2 prevails (Table 7). **Of course, the calculation was performed supposing that all Al, Fe(III), Mg and Ca 9 (Table 4) are completely included in both crystalline phases (cordierite and enstatite). From this results that calculated percentages of crystalline phases is the highest possible while non-crystalline phase the lowest possible.**

Kvantitativní obsah minerálů v keramických vzorcích (CQMA)

Phases	C-Bo	C-Se	C-Po	C-Ka	C-Br	C-Ch
Amorphous	9.4	8.8	15.1	9.3	11.1	10.6
Cordierite	84.0	85.1	75.2	84.1	81.7	82.3
Enstatite	6.2	5.8	8.9	6.5	6.8	6.7
Sum	99.5	99.7	99.2	99.9	99.6	99.6

Note: calculated oxidic formula of non-crystalline phases

C-Bo: $0.29\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.152\text{K}_2\text{O} \cdot 0.61\text{TiO}_2 \cdot 10\text{SiO}_2$

C-Br: $0.26\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.141\text{K}_2\text{O} \cdot 0.82\text{TiO}_2 \cdot 10\text{SiO}_2$

C-Ch: $0.27\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.172\text{K}_2\text{O} \cdot 0.81\text{TiO}_2 \cdot 10\text{SiO}_2$

C-Ka: $0.28\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.172\text{K}_2\text{O} \cdot 0.96\text{TiO}_2 \cdot 10\text{SiO}_2$

C-Po: $0.15\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.65\text{K}_2\text{O} \cdot 0.36\text{TiO}_2 \cdot 10\text{SiO}_2$

C-Se: $0.31\text{Na}_2\text{O} \cdot 0.145\text{K}_2\text{O} \cdot 0.60\text{TiO}_2 \cdot 10\text{SiO}_2$

Ovšem správný (skutečný) výpočet obsahů minerálů, včetně amorfního podílu není v těchto typech vzorků možný, bez znalosti jeho úplné krystalochemického složení. To lze do určité míry suplovat informacemi o jeho chemickém složení. K tomuto účely byly provedeny XRF bodové analýzy na mikrosondě. Byly to:

B2B) XRF analýzy amorfní fáze

B2C) XRF analýzy všech dostupných krystalických, včetně fází.

Skenovací elektronová mikroskopie a energiově dispersní XDS mikroanalýza, včetně všech XRD analýz byly provedeny na HGF VŠB.

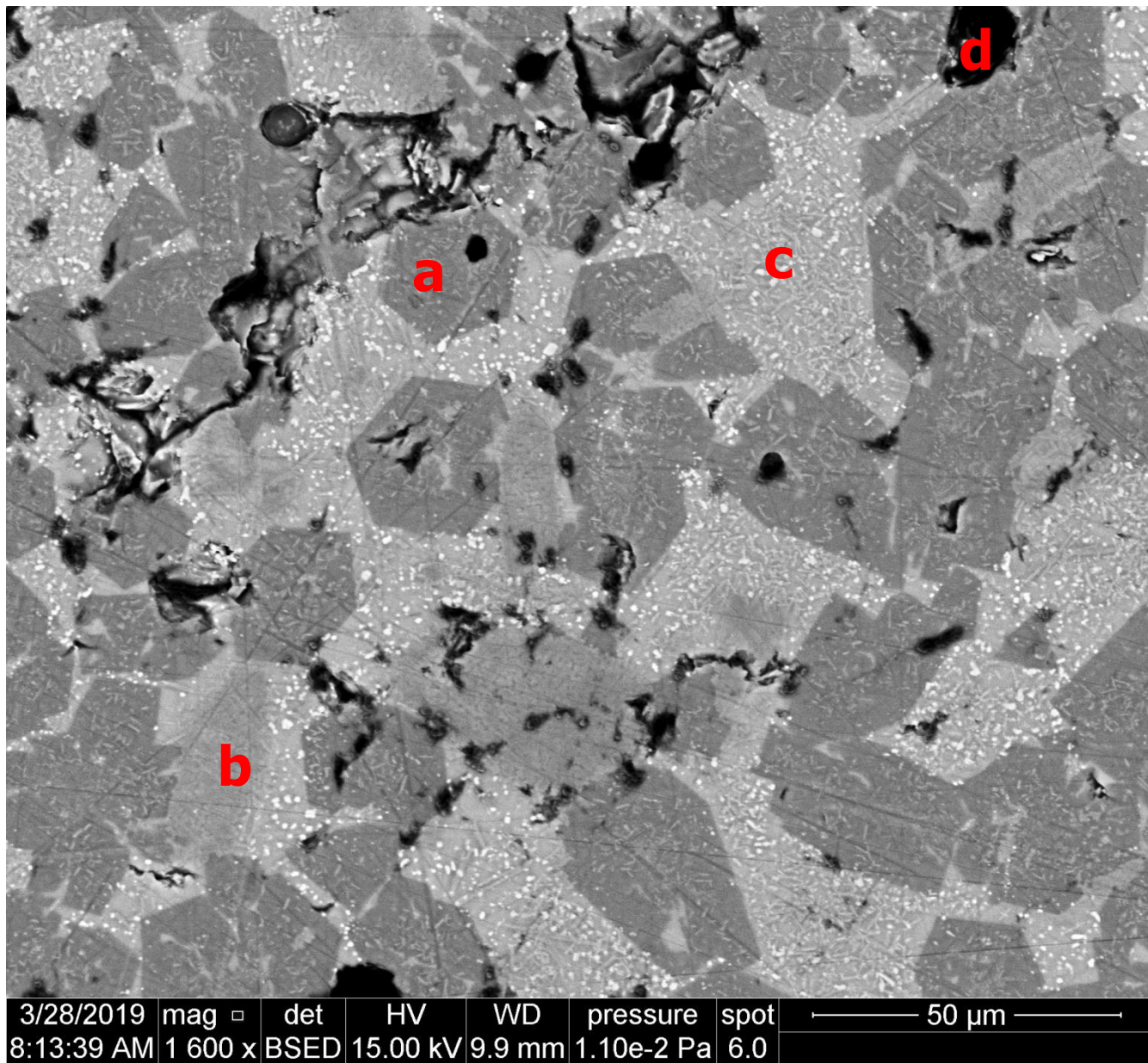


Foto 1. Textura of Chlumčany sample; a – fáze 1 (cordierit/indialit), b – fáze 2 (enstatit), c – fáze 3 (amorfní – nekystalická) ; d – póry.

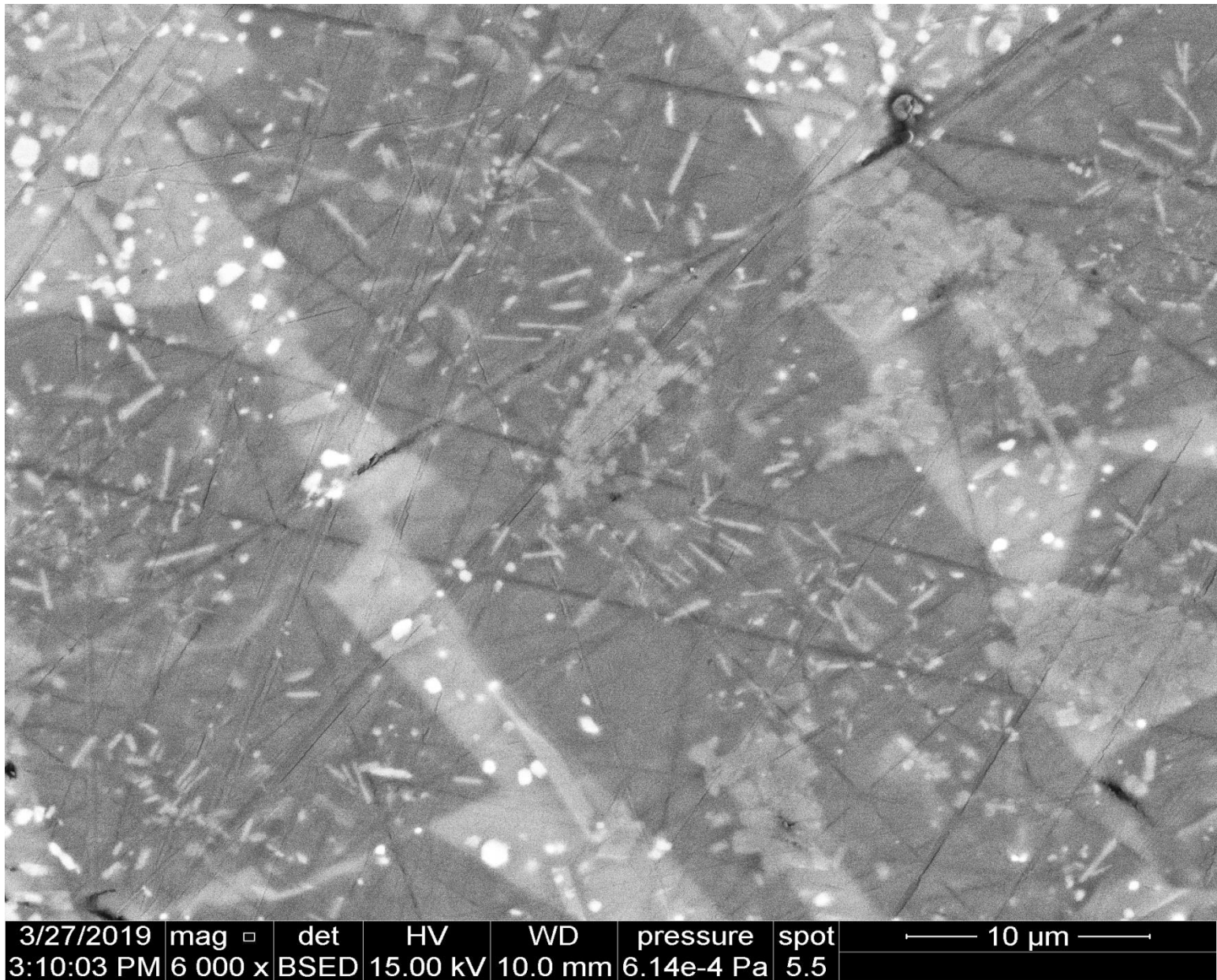


Foto 2. Neidentifikované mikrokrystalické minerály přítomné ve všech fázích a, b i c.

Vypočtené krystalochemické nebo oxidické vzorce minertálních fází ve vzorku z Chlumčan

Pro výpočty B2A :

Kordierit: $\text{Ca}_{0.1}\text{Mg}_{1.90}\text{Fe}^{3+}_{0.40}\text{Al}_{3.60}\text{Si}_{5.00}\text{O}_{18}$

Enstatit: MgSiO_3

Amorfní fáze : Průměrná oxidická CHA analýza amorfní fáze byla vypočtena jako doplněk k CHA analýzám obou krystalických fází“

10.0SiO₂ 0.81TiO₂ 0.27Na₂O 1.72 K₂O

Pro výpočty B2B :

Kordierit: $\text{Ca}_{0.1}\text{Mg}_{1.90}\text{Fe}^{3+}_{0.40}\text{Al}_{3.60}\text{Si}_{5.00}\text{O}_{18}$

Enstatit: MgSiO_3

Amorfní fáze: Průměrná oxidická CHA analýza amorfní fáze 3 z mikrosondy“

10SiO₂ 0.25TiO₂ 1.74Al₂O₃ 0.46Fe₂O₃ 1.08MgO 1.47CaO 0.15Na₂O 0.48K₂O (mikrosonda)

Pro výpočty B2C s použitím XRF analýz z mikrosondy :

Průměrná CHA krystalické fáze 1 z mikrosondy („kordierit“)

10SiO₂ 3.81Al₂O₃ 0.44Fe₂O₃ 3.67MgO 0.29CaO 0.029K₂O

Průměrná CHA krystalické fáze 2 z mikrosondy („enstatit“):

10SiO₂ 0.01TiO₂ 0.32Al₂O₃ 0.69Fe₂O₃ 7.77MgO 0.31CaO 0.09K₂O

Průměrná oxidická CHA analýza amorfní fáze 3 („nekrystalická fáze“)

10SiO₂ 1.74Al₂O₃ 0.46Fe₂O₃ 1.08MgO 1.48CaO 0.15Na₂O 0.48K₂O

C. Porovnání stanovených obsahů fází XRD a CQMA metodami

Přehled vypočtených obsahů (hm.%) Z XRD a CQMA analýz s použitím krystalochemických a nebo oxidických vzorců

Minerální fáze	XRD	CQMA ¹⁻³⁾		
		CQMA ¹⁾	CQMA ²⁾	CQMA ³⁾
Kordierit	14.2	82.3	71.7	69.7
Enstatit	7.8	6.7	9.0	15.4
Amorfní fáze	78.1	10.6	19.8	15.2
Poměr P1 a P2	1.82 0.28	12.3 8.4	7.97 4.1	4.52 5.6
SUMA	100.1	99.6	100.5	100.3

Kde: index 1) odpovídá metodě B2A, index 2) metodě B2B a index 3) metodě B2C

Vypočtené procentuální poměry:

P1 = kordierit/enstatit;

P2 = kordierit + enstatit / amorfní fáze;

Přehled vypočtených chemických analýz z obsahů (hm.%) stanovených XRD a CQMA metodami analýz s použitím relevantních krystalochemických a nebo oxidických vzorců

Samples: Oxides	XRF	XRD1	XRD2	XRD3	CQMA1 B2A	CQMA2 B2B	CQMA3 B2C
SiO ₂	52.95	78.18	56.34	52.94	52.96	52.71	52.68
TiO ₂	0.81	3.21	1.48	1.48	0.81	0.38	0.29
Al ₂ O ₃	25.27	4.35	17.51	16.02	25.64	25.33	25.48
Fe ₂ O ₃	4.44	0.76	6.20	6.72	4.39	5.21	3.06
MgO	13.26	4.93	8.18	6.46	13.24	13.62	13.88
CaO	0.70	0.13	6.29	6.35	0.77	2.22	2.44
Na ₂ O	0.21	0.82	0.69	0.69	0.21	0.18	0.74
K ₂ O	2.06	7.60	3.35	9.33	2.04	0.85	2.36
Total	99.75	99.99	100.0	100.0	99.70	100.50	100.32
SSDCH		1184	138	220	0.01	4.83	5.78

$$SSDCH = \sum_{i=1}^n [(c_i)_{calc} - (c_i)_{exp}]^2$$

Naše materiály s obsahem amorfní fáze:

- OCK a VPK kaly
- Popílky
- Strusky
- Další ?

Děkuji Vám za pozornost