

Askinteraktioner med syrebärare i en CLC-process

– Enskilda och sammansatta askor

Examensarbete för Högskoleingenjörsprogrammet i kemiteknik

LISA ERESUND

Avdelningen för Oorganisk miljö kemi, Chalmers tekniska högskola
Göteborg, Sverige, 2013
Rapport Nr. KBTX08

Sammanfattning

Koldioxidinfångning med hjälp av *kemcyklisk förbränning* eller *Chemical Looping Combustion*, CLC, är ett relativt nytt forskningsområde, vilket betyder att det ännu är många lösa trådar som inte undersökts i full utsträckning. Tekniken går ut på att förbränning sker utan inblandning av kväve från luften, genom att en syrebärrpartikel först oxideras i en luftreaktor och sedan bär med sig enbart syret till en bränslereaktor där den reduceras. Syrebärrpartikeln består oftast av en metalloxid och ett hjälpämne.

Detta arbete har undersökt hur enskilda askkomponenter som ingår i fossila bränslen påverkar och interagerar med syrebäraren och dess funktion. Experimenten genomfördes på ett sådant sätt att de skulle efterlikna vad som sker i luftreaktorn respektive bränslereaktorn i en CLC-process. Till detta användes två tubugnar, en oxiderande med luft och en reducerande med 5 % vätgas och 95 % argon. Varje blandning kördes med ett prov i varje ugn för att studera vilken effekt den reducerande respektive den oxiderande miljön hade på provet. Proverna kördes i 900°C med undantag för kaliumsalterna som kördes vid lägre temperaturer på grund av salternas låga smältpunkter. Därefter analyserades proverna med röntgendiffraction (X-Ray Diffraction, XRD).

En tidigare studie¹ har gjorts på området men utan att undersöka nickeloxid som syrebärare. Nickeloxid visade sig vara en syrebärare som i jämförelse med Fe-, Mn- och Cu-oxid inte är speciellt benägen att reagera med flera av de mineraler som är vanliga i bränslen. Dock fanns interaktioner mellan Ni och pyrit där ämnen med sammansättningen (Ni, Fe, S) bildades. Bärarmaterialet NiAl_2O_4 reagerade med kaliumkarbonat och bildade då KAlO_2 .

Fortsättningsvis gjordes även studier på blandningar av sju utvalda mineraler liknande de som förekommer i brunkol respektive stenkol. Där testades Ni, Cu, Mn, Fe och ilmenit som syrebärare gentemot de två mineralblandningarna.

I de kombinerade experimenten var nickeloxid och ilmenit de minst reaktiva syrebärarna med en, eller möjligtvis två (för ilmenit), bildade nya produkter vardera. Den mest reaktiva syrebäraren var kopparoxid som reagerade med olika mineraler i alla faser, vilket totalt sett resulterade i bildandet av 10 nya produkter. Något förvånande reagerade alla syrebärare med stenkolsblandningen i reducerande miljö.

Resultaten från dessa experiment gav indikationer på att interaktionerna mellan askor och vissa syrebärare minskade i en blandning av askmineralerna. Dock gör komplexiteten på de sammansatta blandningarna resultaten svårtolkade.

Abstract

Carbon capture using the technology of *Chemical Looping Combustion*, CLC, is a relatively novel procedure. In CLC air free combustion is performed. Two chambers are used, one air reactor with oxidising environment and one fuel reactor with reducing environment. Between them an oxygen carrier is cycled to carry the oxygen from the air- to the fuel reactor. The carrier particle consists of a metal oxide and a supporting material.

This project has examined how ash components from coal interact with the oxygen carrier. The experiments were executed in a way that resembles what happens in the air- and the fuel reactor respectively, in a CLC process. Two ovens were used, one oxidising with air and one reducing with a gas mixture composed of 5 % hydrogen and 95 % argon gas. Each mixture was run with one sample in each oven to see what effect the reducing and the oxidising environment had on the sample. Both ovens were run at 900°C for all samples except the potassium salts that had to be run at lower temperatures due to their lower melting points. Subsequently, each sample was studied and analysed by using X-Ray Diffraction, XRD.

A previous study¹ has been conducted on this area but without examining nickel oxide as an oxygen carrier. In this study nickel oxide showed relatively good behaviour compared to Fe-, Mn- and Cu-oxide, and in combination with single minerals the only interaction for Ni was with pyrite, forming (Ni, Fe, S). The supporting material NiAl_2O_4 reacted only with potassium carbonate forming KAlO_2 .

Continuously, studies were also performed on two mixtures of seven chosen minerals, resembling the composition in natural coal ash. In these experiments five different oxygen carriers, Ni, Cu, Mn, Fe and Ilmenite, were used.

In the combined ash reactions, ilmenite and nickel oxide seemed to be the least reactive oxygen carriers, producing one, or possibly two (for ilmenite), new products each. The most ash interactive oxygen carrier was copper oxide, reacting in all phases with different minerals, in a total of 10 reactions. Surprisingly all oxygen carriers reacted with the bituminous coal mixture.

The results indicated that interactions between ash components and oxygen carriers are inhibited when in a coal mixture. The complexity that is shown when analysing a mixture should be more examined for further understanding on how these minerals behave and interact with each other.

Innehållsförteckning

1. Inledning	1
1.1 Syfte.....	1
2. Bakgrund	2
2.1 Koldioxidlagring.....	2
2.2 CLC- Kemcyklisk förbränning.....	3
2.3 Askkomponenter.....	4
2.4 Syrebärare.....	4
2.4.1. Bärarmaterial.....	5
2.4.2 NiO/NiAl ₂ O ₄ som syrebärare.....	5
3. Utförande	6
3.1 Uppsättning.....	6
3.2 Material.....	7
3.3 Experimentmetod.....	8
3.3.1 Experimentdel 1: NiO som syrebärare i enskilda askinteraktioner.....	8
3.3.2 Experimentdel 2: kombinerade askinteraktioner med olika syrebärare.....	9
3.4 XRD.....	9
4. Resultat	10
4.1 Resultat från experimentdel 1.....	12
4.2 Resultat från experimentdel 2.....	12
5. Diskussion	15
5.1 Metodval.....	15
5.2 Material.....	15
6. Slutsatser	17
Källförteckning	18
Bilaga 1 - Diffraktogram över enskilda askinteraktioner med NiO/NiAl₂O₄ som syrebärare	
Bilaga 2 - Diffraktogram över kombinerade askinteraktioner med olika syrebärare	
Bilaga 3 - Tabell över alla ämnen funna i varje prov	

1. Inledning

En av våra största nutida utmaningar är att minska den mänskliga påverkan på klimatet, som till stor del beror på utsläpp av växthusgaser.² En växthusgas som förekommer i stor omfattning är koldioxid. Koldioxiden bildas vid vanlig förbränning i till exempel kraftverk, bilmotorer och värme pannor.

En möjlig åtgärd för att minska mängden koldioxid som släpps ut till atmosfären är att lagra koldioxiden i jordskorpan. Ett problem är då att dessförinnan separera koldioxiden från övriga gaser. Dessa två delar kallas tillsammans *Koldioxidinfångning och Lagring*, (*Carbon Capture and Storage, CCS*), vilket är ett flitigt använt begrepp i diskussionerna om vilka framtida lösningar som finns på koldioxidproblematiken. Hela processen skall dessutom ske på ett ekonomiskt hållbart tillvägagångssätt. Gasseparationsteknikerna som oftast behövs kräver stora mängder energi och är därför dyra. Men det finns det andra lösningar där ingen sådan separation av gaser krävs. En av dessa tekniker är kemcyklisk förbränning som kommer ifrån det engelska uttrycket *Chemical Looping Combustion*, för det mesta förkortad till CLC.³

I CLC sker bränsleomvandlingen utan inblandning av luft, vilket sker genom att endast syre får lov att passera in till bränslekammaren. Detta möjliggörs genom att en *syrebärare* oxideras i en luftkammare och sedan avger sitt syre när den kommer i kontakt med bränslet i bränslekammaren. Det enda som avgår från bränslereaktorn blir då en gasström med CO₂ och H₂O, samt en partikelström med reducerad syrebärare som förs tillbaka till luftreaktorn och där oxideras på nytt. Från luftreaktorn går en gasström ut, med främst N₂ och oreagerad O₂, vilken kan återföras till luften utan problem.

I tidigare arbeten testades främst bränsle i gasform, men då den största mängden fossilt bränsle finns tillgängligt i form av fasta partiklar som kol, har även studier på senare tid börjat fokusera mer på fastbränsle. En viktig aspekt som det saknas studier på är hur bränslets innehåll av askor påverkar syrebäraren. Denna kunskap är av stor betydelse, dels för att se om CLC går att använda på alla bränslen och dels för att se om olika syrebärare passar till olika bränslen beroende på bränslenas mineralinnehåll.

1.1 Syfte

Målet med detta arbete är att undersöka hur olika mineraler som är vanliga i askor interagerar med syrebärare i en CLC-process. Arbetet är ett komplement och en fortsättning till ett tidigare arbete¹ där fyra syrebärare testades tillsammans med olika askkomponenter. I detta arbete testas ytterligare en syrebärare, nickeloxid, mot tio tidigare använda askkomponenter. Dessutom testas var och en av de fem syrebärare som har ingått i detta och det tidigare arbetet gentemot en blandning av sju askkomponenter som finns i kol. Denna blandning har gjorts för att efterlikna sammansättningen i två naturliga kol; brunkol och stenkol.

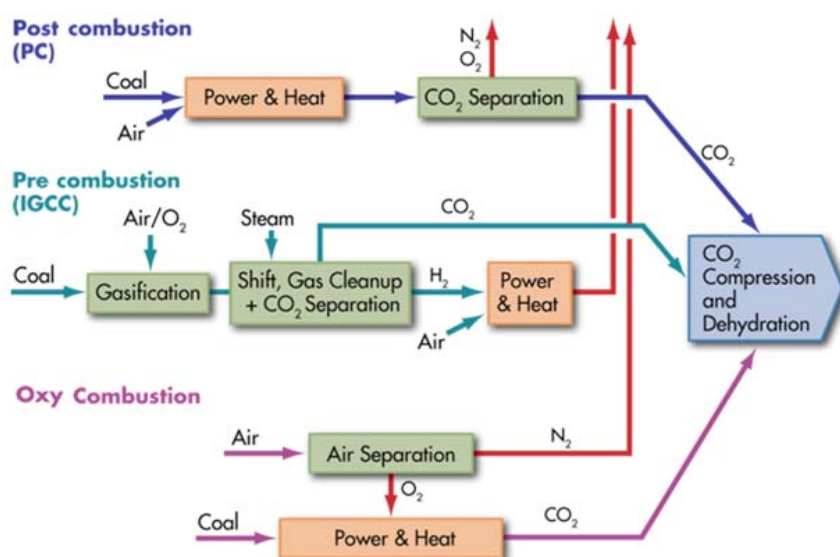
2. Bakgrund

Här presenteras översiktligt de tekniker som finns för koldioxidavskiljning samt mer ingående hur CLC fungerar. Det följer även en presentation av hur askkomponenter och syrebärare påverkar en CLC-process.

2.1 Koldioxidlagring

Koldioxidlagring (Carbon Capture and Storage, CCS) är ett samlingsnamn för de tekniker som har till uppgift att fånga in och lagra koldioxid. Tekniken består av tre delar: *avskiljning*, *transport* samt *lagring*.⁴ Kemcyklisk förbränning ingår i den första delen, avskiljning.

De tre vanligaste koldioxidavskiljningsteknikerna är: *oxy-fuel combustion*, *post-combustion*, samt *pre-combustion*^{3,5}, vilka visas överskådligt i figuren nedan:



Figur 1. Tekniker för CO2-infångning [5]

Oxy-fuel Combustion fungerar genom att kvävet tas bort från luften så att förbränningen sker i syrgas. Förbränningsgasen består då till största del av koldioxid och vatten, precis som i CLC.⁶

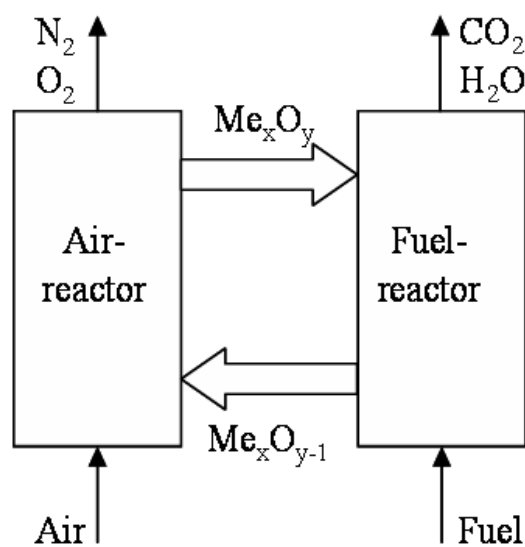
I *Post Combustion* avskiljer man koldioxiden från övriga gaser efter att förbränningen har skett och svaveloxider, kväveoxider samt partiklar såsom flygaska har avlägsnats. Ofta fångas koldioxiden upp med hjälp av ett kemiskt lösningsmedel. Lösningen släpper sedan ifrån sig koldioxiden under upphettning, och gasen förs då vidare för att komprimeras och sedan lagras. Lösningemedlet kan därefter återföras till processen för att användas på nytt. Den reade förbränningsgasen som mestadels består av vattenånga och kvävgas kan återföras till luften.⁷

I *Pre Combustion* förgasas kolbränslet med syrgas vilket resulterar i syntetgas

bestående av CO₂, CO och H₂. Syntetgasen renas sedan från partiklar och svavel. Ånga tillförs och sedan sker vatten/gas-skiftet vilket producerar koldioxid genom reaktionen: $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$. Gasseparation sker sedan där H₂ avlägsnas för att användas som bränsle och CO₂ isoleras för vidare lagring.⁸

För alla tre ovanstående tekniker är nackdelen att de kräver energi för gasseparation. Energimängden som krävs för att kunna få ut koldioxiden i ren form summerat med den utrustning som krävs för att själva tekniken skall fungera, gör så att processen blir kostsam, framförallt inom pre-combustion.^{9,3}

2.2 CLC- Kemcyklisk förbränning



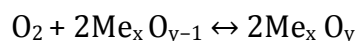
Figur 2. Schematisk bild över en CLC-process. H. Leion, paper 1

En lovande metod³ för att kunna utskilja koldioxid är kemcyklisk förbränning (*Chemical Looping Combustion, CLC*). I CLC sker ingen kontakt mellan luften och bränslet. Detta möjliggörs genom att en fast syrebärare, vanligtvis en metalloxid, bär syret från en luftreaktor vidare till en bränslereaktor. I bränslereaktorn reduceras metalloxiden för att därefter föras tillbaka till luftreaktorn och oxideras på nytt i en ny cykel. Konsekvensen av detta blir att endast syret kan reagera med bränslet, vilket endast ger koldioxid och vattenånga som biprodukter. Detta medför att energikrävande och fördyrande gasseparationstekniker inte behövs för

denna teknik.¹⁰

Det som händer i en CLC-process är att en luftström går in i luftreaktorn för att oxidera syrebäraren. Syrebäraren förs sedan vidare in till bränslereaktorn där den reduceras samtidigt som bränslet oxideras. De biprodukter som bildas blir då främst kvävgas och oreagerad syrgas i luftreaktorn. Från bränslereaktorn går främst koldioxid och vattenånga ut som biprodukter och vattenångan kan enkelt kondenseras bort.

Reaktionen som sker i luftreaktorn är:



Huvudreaktionerna i bränslereaktorn sker enligt formeln:



I de flesta studier som gjorts tidigare har syntetgas (syngas) eller metan använts som bränsle, alltså endast gaser.¹¹ För fasta bränslen uppstod frågan hur

sammansättningen på bränslet kan påverka processen. Det finns än så länge endast en publikation på detta område (C. Sahaa et al. 2012) och då undersöktes kopparoxid som syrebärare gentemot mineralinnehållet i två brunkol¹². Andra skillnader mellan gasbränslen och fasta bränslen är skillnader i reaktionstid vilket även medför skillnader i den mängd bränsle som behövs¹¹.

En designuppsättning som ofta används inom CLC är fluidiserade bäddar både i luft- och i bränslereaktorn^{3, 6, 9-13, 15-19}. Den syrebärande metalloxiden används då som bäddmaterial medan bränslet i bränslereaktorn flödar genom bädden varvid redox-reaktionen kan ske. En cyklon används mellan bränslereaktorn och luftreaktorn för att separera partiklar och gas¹³.

Summan av reaktionerna i en CLC-process är exoterm och lika stor som vid konventionell förbränning. I luftreaktorn är reaktionen alltid exoterm eftersom det endast är en oxidationsreaktion som sker där. I bränslereaktorn sker redox-reaktioner i form av en endoterm reduktionsreaktion för metalloxiden och en exoterm oxidationsreaktion för bränslet. Den totala entalpin i bränslereaktorn kan därför vara både positiv eller negativ beroende av dessa två reaktioners entalpier. Den totala mängden energi som bildas i processen är dock densamma som nettoreaktionen i konventionell förbränning.

2.3 Askkomponenter

Olika bränslens mineralsammansättning kan skilja sig åt. Vilka som ingår som föreningar och askor kan vara av stor betydelse för hur effektiv bränsleomvandlingen och processen i stort blir eftersom vissa mineraler kan ge problem i form av slaggprodukter på värmeöverföringsytorna. Detta kan även ge bakslag i form av att anläggningen kan behöva stängas av för att rengöras. Exempel på mineraler som ger dessa negativa effekter vid konventionell förbränning är pyrit och illit.¹⁴ Ett annat problem som beror av mängden svavel i kolet är att svaveloxider kan bildas som då måste renas från utluften. Dock är detta inte enbart negativt eftersom svavel även ökar omvandlingshastigheten hos bränslet i CLC.¹¹

De askkomponenter som valts ut för försöken inom detta arbete ingår som mineraler i de flesta typer av kol världen över.²³

2.4 Syrebärare

Syrebäraren är mycket viktig för att processen skall fungera och kunna användas kommersiellt. Krav ställs på att dess fysikaliska egenskaper gör den tillräckligt stabil och värmetålig men även på att den har en hög reaktionshastighet både då den reduceras och när den oxideras. Några av de krav som skall uppfyllas för att en syrebärare skall vara lämplig för industriellt bruk är:

- Att den har en hög reaktionshastighet både vid oxidation och reduktion
- Att den är beständig, det vill säga tål flera cykler
- Att den ej är benägen att agglomerera eller deponeras på ytorna i reaktorn

- Att den har en tillräckligt hög fysikalisk hårdhet och mekanisk slitstyrka
- Att den har en tillräckligt hög smältpunkt

Exempel på syrebärare som använts vid olika CLC-försök är kopparoxid, järnoxid, manganoxid, ilmenit (järntitanoxid) samt nickeloxid. Dessa har utvärderats vid flera tillfällen under olika förhållanden och är de syrebärare som används i detta arbete.^{12, 15, 16, 17}

2.4.1. Bärarmaterial

Ett bärarmaterial kan användas för att ge en större reaktionsyta samt för att göra en syrebärare mer stabil. Bärarmaterialet och metalloxiden bildar då tillsammans en syrebärrpartikel. Bärarmaterialet bör inte delta i någon reaktion, vilket det dock ofta har visat sig göra. Exempel på vanliga bärarmaterial är Al_2O_3 , ZrO_2 och TiO_2 .⁹ Ilmenit är ett exempel på en syrebärare som inte har något bärarmaterial.

2.4.2 NiO/NiAl₂O₄ som syrebärare

I detta arbete analyseras främst nickeloxid som syrebärare, då övriga syrebärare som tas upp i detta arbete redan har analyserats tidigare¹.

Försök har visat att TiO_2 är ett bra bärarmaterial för nickeloxid, men även Al_2O_3 har använts som bärarmaterial vid flera försök, vilket även gäller för detta arbete. Då denna syrebärrpartikel innehållandes Al_2O_3 användes i en tidigare studie visade det sig att NiAl_2O_4 inte var inert utan också var involverad i förbränningsprocessen. En viss mängd av den reducerade formen av syrebäraren oxiderades även till NiAl_2O_4 . En medvetenhet krävs därför om vart dessa jämvikter ligger. Enligt ett försök i denna studie minskade andelen reaktivt NiO från 65 % till 24 %, samtidigt som andelen NiAl_2O_4 ökade.¹⁹

Nickel har använts som syrebärare under många studier för CLC-tekniken. Bland annat på Chalmers med framgångsrika resultat¹⁸. En viktig aspekt till nickels fördel är dess höga omvandlingsfaktor och stabilitet.^{19,20} Enligt en 1000-timmars studie i en 10kW-anläggning där en nickelbaserad syrebärare användes, låg omvandlingen på ca 98 % konstant och syrebärrpartikelns livslängd beräknades till 33 000 timmar. En viss agglomeration syntes i slutet av testet, främst i luftreaktorn.²¹

Ett problem med nickel är att den är allergiframkallande. Studier har dessutom visat på både luftvägsproblem och cancerrisker vid inandning²². Nickel används trots detta till diverse legeringar och som korrosionsskydd. Om nickel används kommersiellt bör ingen risk för inandning av nickelpartiklar föreligga. All kontakt med metallen bör ske med skyddsutrustning (handskar, labbrock och skyddsglasögon) för att undvika kontakt.

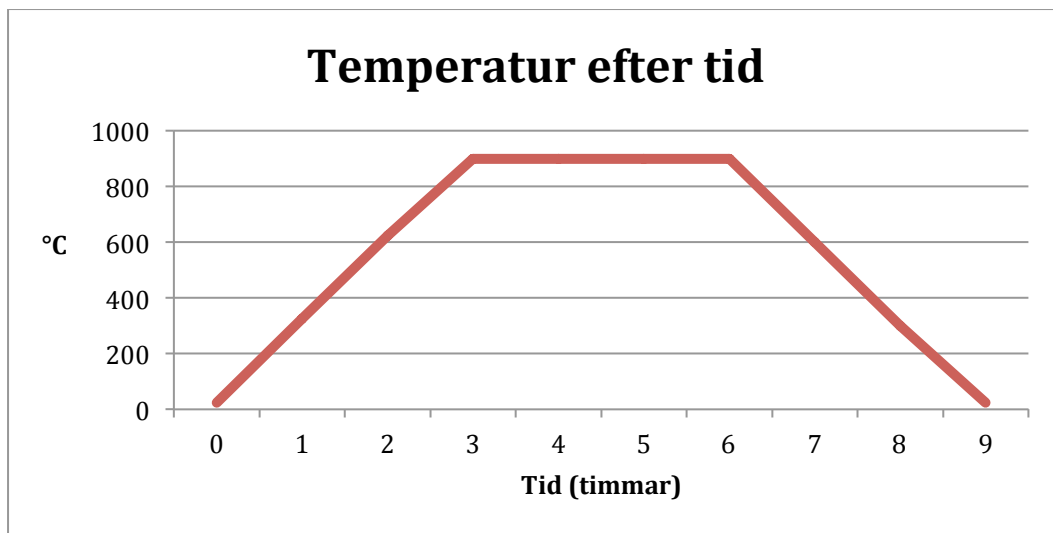
3. Utförande

Studien utfördes i två delar. Första delen gjordes med NiO/NiAl₂O₄ som syrebärare tillsammans med var och en av de tio askkomponenter som valts ut, detta för att se vilka möjliga reaktioner som kunde ske mellan varje mineral och syrebäraren. Denna del följer som ett komplement till ett tidigare arbete¹ där fyra andra syrebärare testades på samma sätt.

Möjligheten finns även att mineralerna i ett kol kan interagera inte bara med syrebäraren utan även med varandra och därför utökades arbetet till att även testa blandningar av de utvalda mineralerna. I den andra delen gjordes blandningar med jämförelsevis liknande proportioner som mineralerna har i två naturligt förekommande kolsorter: stenkol respektive brunkol²³. De två blandningarna kördes både utan syrebärare som ett referensprov, samt med var och en av de fem syrebärarna: NiO/NiAl₂O₄, CuO/MgAl₂O₄, ilmenit, Fe₂O₃/MgAl₂O₄ samt Mn₃O₄/MgO-ZrO₂.

3.1 Uppsättning

För att efterlikna vad som sker i en CLC-process används två tubugnar: den ena för att efterlikna luftreaktorn och den andra för att efterlikna bränslereaktorn. Den första har två öppna ändar så att luft kan flöda fritt igenom den. Den andra regleras genom att använda en gasblandning innehållandes 5 % vätgas och 95 % argon som flödar igenom ugnen. Provbehållarna placeras mitt i ugnen för att undvika temperaturgradienter. Därför är det inte lämpligt att köra fler än 3 prov samtidigt i en ugn. Vanligtvis genomförs experimenten vid 900°C under två timmar (total tid ca 15 h inklusive uppvärmning och nedkylning efter ett ramp-program), vilket visas i figur 3 nedan.



Figur 3. Temperatur/Tid diagram över ugnskörningar

Den efterföljande analysen genomfördes med hjälp av röntgendiffraktion där provet kördes efter ett förinställt program. Programmet ger ut ett diffraktogram med toppar över vilka ämnen som hittats i provet. Se vidare kap. 3.4.

3.2 Material

En syrebärare består av en aktiv metall, ofta tillsammans med ett inert bärarmaterial. De fem syrebärare som analyserats i detta arbete är följande:

- NiO/NiAl₂O₄
- CuO/MgAl₂O₄
- Ilmenit
- Fe₂O₃/MgAl₂O₄
- Mn₃O₄/MgO-ZrO₂

Syrebäraren med nickeloxid används i form av en blandning av 40 % NiO och 60 % NiAl₂O₄.

De övriga syrebärarna har följande sammansättningar:

- CuO/MgAl₂O₄ 40/60 %
- Ilmenit: Fe₂O₃/TiO₂ 47.4/52.6 %
- Fe₂O₃/MgAl₂O₄ 60/40 %
- Mn₃O₄/MgO-ZrO₂ 40/60 %

För ilmenit är den angivna sammansättningen startprodukter. Då ilmenit ändrar fassammansättning med temperaturen i ett komplext system är det svårt att säga den faktiska sammansättningen¹⁷.

Sju mineraler valdes ut från en vanlig mineralkomposition²³ i brunkol, med avseende att studera varje minerals interaktioner med nickeloxid. Även tre olika mineraler från biobränsle togs med för att representera biobränsle. Vissa ämnen såsom fosfater saknas, men då dessa endast finns i mycket liten mängd i de studerade kolen anses det inte nödvändigt att ta med dem i denna studie. Mineralerna som har valts ut ses i tabell 1 nedan.

Mineral	Kemisk formel
Kvarts	SiO ₂
Kaolinit	Al ₂ (Si ₂ O ₅)(OH) ₄
Illit	(K,H ₂ O)Al ₂ (Al,Si)Si ₃ O ₁₀ (OH) ₂
Kalcit	CaCO ₃
Pyrit	FeS ₂
Montmorillonit	(Na,Ca) _{0,3} (Al,Mg) ₂ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂ *nH ₂ O
Siderit	FeCO ₃
Kaliumsulfat	K ₂ SO ₄
Sylvit	KCl
Pottaska	K ₂ CO ₃

Tabell 1. Mineral och deras kemiska beteckningar

Mineraler kan delas in på olika sätt, bland annat avseende dess kemiska sammansättning eller dess kristallstruktur.

Kvarts, illit, montmorillonit och kaolinit är alla silikater, vilket är den vanligaste mineralgruppen i jordskorpan. De har tillsammans tre olika kristallstrukturer: trigonal, monoklinisk och triklinisk. För kvarts sker en brytpunkt vid 575°C då lågkvarts övergår till högkvarts. De två varianterna skiljer sig åt genom att de är stabila inom olika temperaturintervall.²⁴ Även kaolinit förändras under värmebehandling då olika fastransformationer sker med början vid ca 550°C. Vid 900°C bildar kaolinit en spinellstruktur.

Karbonater är en annan grupp mineraler vari siderit, kalcit och kaliumkarbonat ingår. De två senare har sina smältpunkter under 900°C, närmare bestämt 825°C respektive 891°C. Detta medför att experiment med prover där dessa ämnen ingår kan smälta då de körs vid 900°C.

Kaliumklorid är en isometrisk halid, ett salt. Detta mineral har en smältpunkt på 790°C vilket betyder att den har lägst smältpunkt av de mineral som ingår i denna studie. Kalium ingår även i kaliumsulfat vilken är den enda sulfaten som ingår i denna studie. Mineralet har en kokpunkt på 1069°C och är vanlig i konstgödsel.

Järnsulfid, även kallad pyrit, har en isometrisk kristallstruktur och är det vanligaste sulfidmineralet. Hälsovarning ges för att en mindre stabil form av järnsulfid, melanterit, innehåller svavelsyra. Därför bör hud- och luftvägskontakt med detta ämne undvikas. Vid värmebehandling med tillgång till luft bildas svaveloxider, vilka kan ge upphov till surt regn i kontakt med vattenånga.^{25,26}

3.3 Experimentmetod

Först mortlas mineralen till lämplig partikelstorlek. Denna behandling görs för att få en större kontaktyta mellan partiklarna vilket ökar reaktionshastigheten. Då experimenten görs med en stillaliggande blandning istället för i en fluidiserande bädd ger detta en längre kontakttid och därmed en större chans till reaktion.

3.3.1 Experimentdel 1: NiO som syrebärare i enskilda askinteraktioner

Vart och ett av de mineral som testas avseende dess enskilda interaktioner med NiO, blandas först i varsitt provrör med 2g mineral + 2g NiO/NiAl₂O₄. Provrören skakas sedan för att få en homogen blandning. Därefter fördelas blandningen i två rena keramiska båtar, en för oxidering och en för reducering. Dessa placeras sedan i två olika ugnar. Den ena ugnen har vätgastillförsel vilket representerar den reducerande fasen. Den andra ugnen är öppen i bägge ändar och får därigenom lufttillförsel. Denna ugn representerar den oxiderande fasen. För askkomponenterna från brunkol körs bägge ugnarna vid 900°C, men för vissa mineraler från biobränsle genomförs experimenten vid lägre temperaturer för att undvika smältor: för KCl körs ugnarna vid 750°C både i oxiderande- och i reducerande fas och för K₂CO₃ är temperaturen 850°C vid reducering. Totala

antalet experiment blir därmed: 10 ämnen x 1 syrebärare x 2 miljöer = 20 st. För de experiment som genomförs vid samma temperatur körs upp till tre prov samtidigt i varje ugn vilket förkortar den totala experimenttiden.

3.3.2 Experimentdel 2: kombinerade askinteraktioner med olika syrebärare

I experimentdel två genomförs ugnsförsök med en syrebärare tillsammans med en blandning av sju mineraler. Förutom nickeloxid testas även de fyra övriga syrebärarna från det tidigare arbetet. De kombinerade försöken görs för att se om det ger någon skillnad då mineralerna är blandade jämfört med då de testas enskilt med en syrebärare. Då en blandning av mineraler används kan de förutom att reagera med syrebäraren även reagera med varandra. Speciellt intressant är att se om de syrebärare som blivit förstörda av vissa mineraler även blir det i en blandning.

Blandningarna gjordes enligt följande recept:

Mineral	Brunkol	Stenkol
Kvarts	0,342	0,457
Kaolinit	0,322	0,399
Montmorillonit	0,042	0,020
Kalcit	0,186	0,059
Siderit	0,010	0,019
Pyrit	0,098	0,047
Totalt	1,000	1,000

Tabell 2. Mineralinnehåll i de syntetiska blandningarna

Proven bereds sedan genom att använda en kolblandning + en syrebärare i lika viktdelar. Totalt blir det 10 provblandningar och varje provblandning med syrebärare + mineral körs på samma sätt som i experimentdel 1 i både reducerande och i oxiderande miljö. Detta ger sammanlagt 20 ugnsexperiment: 5 syrebärare x 2 kolblandningar x 2 miljöer. Därefter analyseras proverna med röntgendiffraktometer, vilken förklaras nedan.

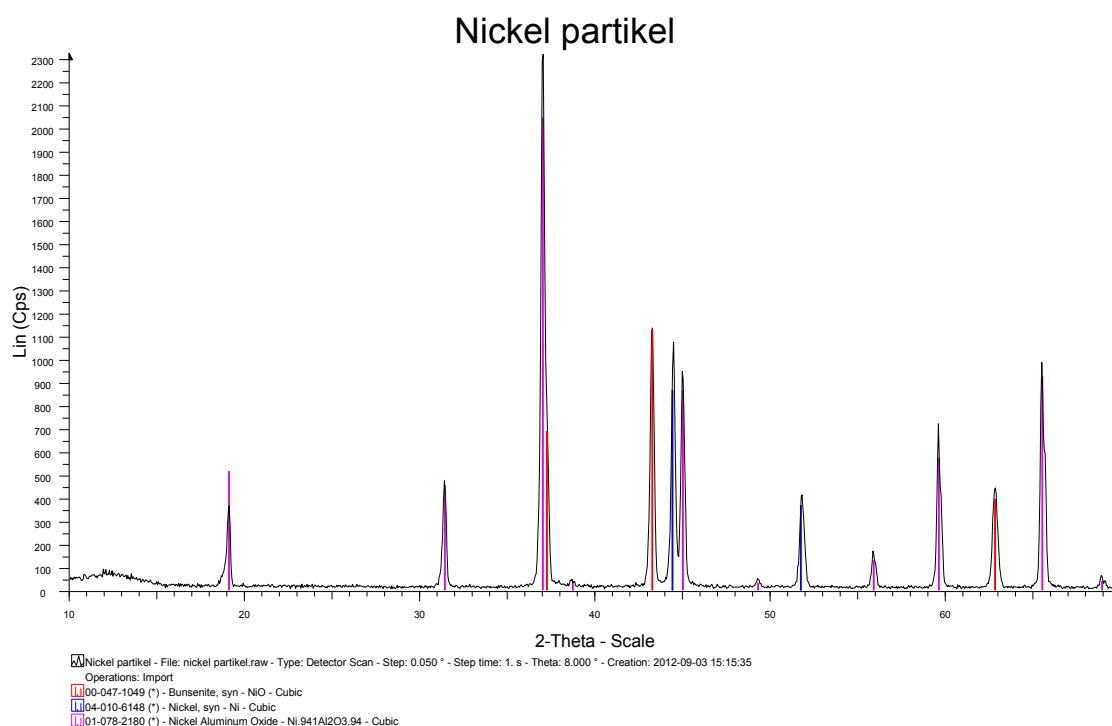
3.4 XRD

Röntgendiffraktion, kallad XRD efter X-Ray Diffraction, är en analysmetod som används för att bestämma sammansättningen hos ett prov, utifrån vilka kristallina ämnen som finns där. Varje kristallint ämne ger ett visst diffraktionsmönster. Genom att söka i en databas med befintliga data, vilka jämförs mot provets mönster, kan provets sammansättning utredas. Principen för röntgenspridningen fås genom Braggs lag; $n\lambda = 2d\sin\theta$, där θ är spridningsvinkeln, d är ett gitteravstånd, det vill säga avstånd mellan atomlagren, och λ är strålningens våglängd.^{27,28}

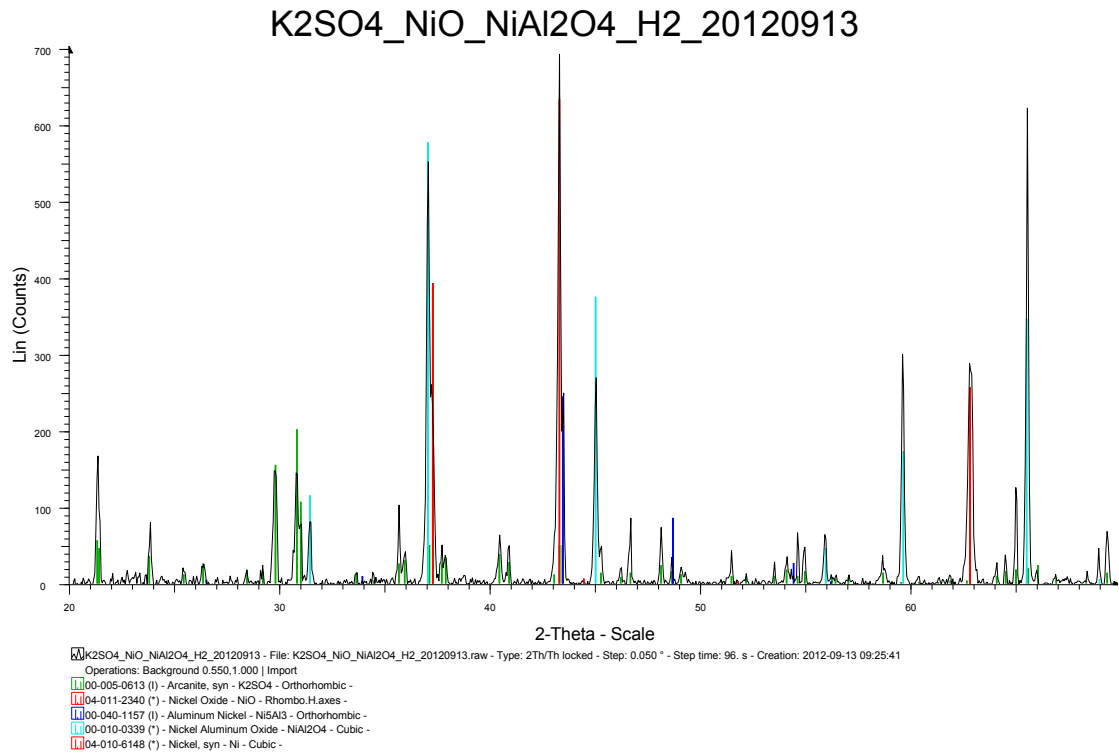
4. Resultat

Proven analyserades genom att använda röntgendiffraktion efter ugnskörningarna. Utifrån diffraktogrammen kunde ämnena i proven till stor del identifieras. Här nedan, i figur 4-6, ses exempel på tre olika diffraktogram med olika komplicerad avläsningsgrad. Den första visar en ren syrebärrarpartikel och är tydlig att avläsa. Sedan visas ett diffraktogram från en blandning av K_2SO_4 tillsammans med $NiO/NiAl_2O_4$ som behandlats i vätgas. Detta diffraktogram har fler toppar men som ändå kan urskiljas från varandra. Det tredje diffraktogrammet representerar kolblandningarna och visar många toppar som kan vara svåra att skilja från varandra. Här är därför identifieringsfasen mer komplicerad.

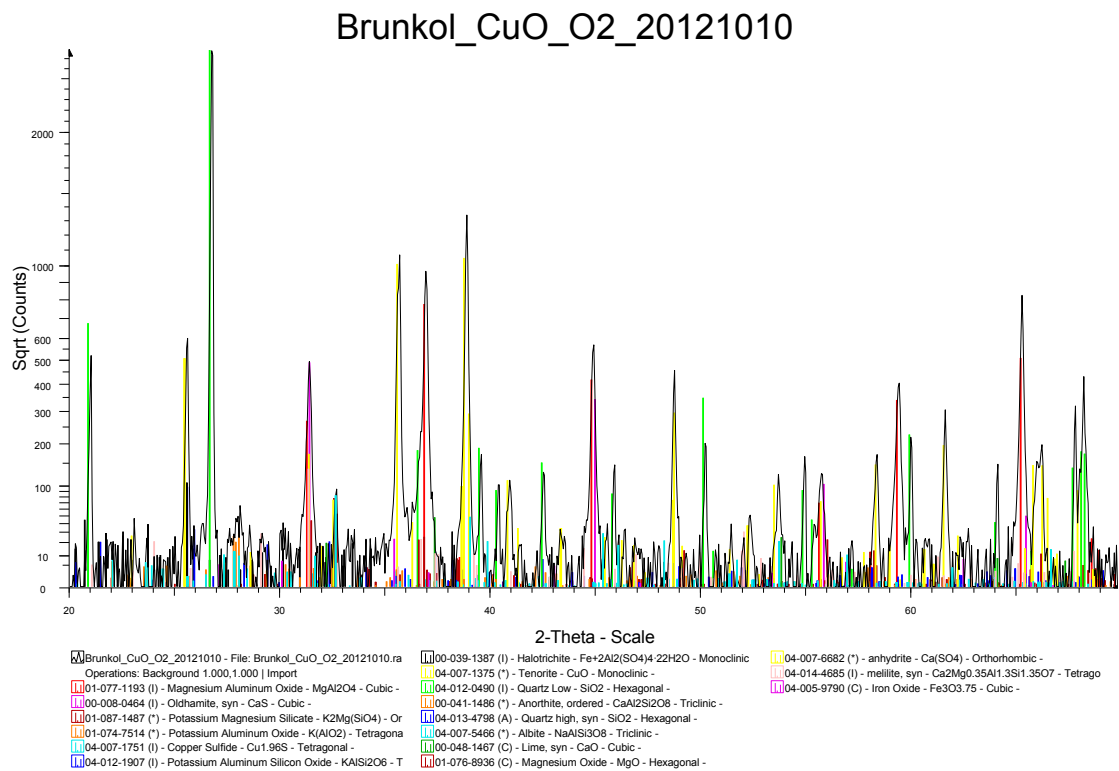
De ämnen som har identifierats i varje prov presenteras i tabell 3 och 4 nedan.



Figur 4. Diffraktogram för syrebärraren $NiO/NiAl_2O_4$, obehandlad



Figur 5. K₂SO₄ med NiO/ NiAl₂O₄ i reducerande fas



Figur 6. Brunkolsblandning tillsammans med CuO/MgAl₂O₄ i oxiderande fas

Se bilaga 1-2 för resterande diffraktogram.

4.1 Resultat från experimentdel 1

NiO/NiAl ₂ O ₄	Oxiderande miljö	Reducerande miljö
Kalcit	Ingen reaktion	Ingen reaktion
Illit	Ingen reaktion	Ingen reaktion
K ₂ CO ₃	KAlO ₂	KAlO ₂
K ₂ SO ₄	Ingen reaktion	Ingen reaktion
Kaolinit	Ingen reaktion	Ingen reaktion
KCl	Ingen reaktion	Ingen reaktion
Kvarts	Ingen reaktion	Ingen reaktion
Montmorillonit	Ingen reaktion	Ingen reaktion
Pyrit	Ingen reaktion	Fe _{4.6} Ni _{4.4} S ₈
Siderit	Ingen reaktion	Ingen reaktion
Flygaska	Ingen reaktion	Ingen reaktion

Tabell 3. Eventuella reaktioner mellan NiO/NiAl₂O₄ och enskilda askkomponenter.

Som visas i tabellen ovan reagerade nickeloxid som syrebärare endast med pyrit i reducerande miljö, medan det icke inerta bärarmaterialet reagerade med kaliumkarbonat i både oxiderande och i reducerande miljö. Att nickel och svavel reagerar med varandra har påvisats tidigare. Eftersom fossila bränslen alltid innehåller svavel betyder det att svavel alltid kommer att behöva tas hänsyn till vid användning av nickel i en syrebärare.²⁹

Som jämförelse mot det tidigare arbetet¹ är nickeloxid mindre reaktivt med askkomponenterna än de fyra övriga syrebärarna som alla hade fler interaktioner.

4.2 Resultat från experimentdel 2

Den syntetiska askblandningen testades först utan syrebärare för att ha som referensprov och vissa inbördes reaktioner kunde då ses, som exempelvis att oldhamit bildades i vätgasmiljö.

Ca₃Fe₂+3(SiO₄)₃ var ett ämne som återfanns i referensproven med de kombinerade askorna. Dock återfanns ämnet inte i alla kombinationer. Ca₃Fe₂+3(SiO₄)₃ kan därför antingen komma från en reaktion med en syrebärare eller som ett resultat av inbördes reaktioner i kolblandningarna. Ämnet påträffades i 7 prov, där 3 prov kom från test av en järninnehållande syrebärare (ilmenit och Fe₂O₃) och resterande från de övriga tre syrebärarna.

Syrebärare	Brunkol O ₂	Stenkol O ₂	Brunkol H ₂	Stenkol H ₂
NiO/NiAl ₂ O ₄	Ingen reaktion	Ingen reaktion	Ingen reaktion	Al _{0.7} Fe ₃ Si _{0.3} , (FeNi ₂₉ S ₂₇) _{1.19}
CuO/MgAl ₂ O ₄	Cu ₂ S, K ₂ Mg(SiO ₄)	Cu ₂ S, K ₂ Mg(SiO ₄)	Cu ₂ S, Cu ₅ FeS ₄ , K ₂ Mg(SiO ₄)	K ₂ Mg(SiO ₄), Cu ₂ S, Fe _{0.77} Mg _{0.29} Al _{1.93} O ₄
Fe ₂ O ₃ /MgAl ₂ O ₄	Ca ₃ Fe ₂ + 3(SiO ₄) ₃	Ca ₃ Fe ₂ +3(SiO ₄) ₃	Mg ₄ Si ₇	Al _{0.7} Fe ₃ Si _{0.3} , Fe ₇ SiO ₁₀
Mn ₃ O ₄ /MgO- ZrO ₂	Ingen reaktion	(Mn _{0.773} Fe _{0.069} Al _{0.158})(Al _{0.962} Mn _{0.035} Fe _{0.003})SiO ₅	MnS	(FeO) _{0.099} (MnO) _{0.901} , Mn ₂ (SiO ₄)
Ilmenit, FeTiO ₃	Ca ₃ Fe ₂ + 3(SiO ₄) ₃	Ingen reaktion	Ingen reaktion	Fe ₇ SiO ₁₀

Tabell 4. Översikt av vilka sammansatta askinteraktioner som har skett med varje syrebärare.

I tabell 4 ovan visas fyra olika kolumner. En vardera för brunkol respektive stenkol i reducerande fas med vätgas samt i oxiderande fas med luft. I varje rad visas vilka reaktioner som skett för varje syrebärare med en viss kolblandning i en viss fas.

Reaktionerna skiljer sig mellan stenkol och brunkol samt mellan H₂ och O₂, men utan något tydligt inbördes mönster. Det som däremot kan ses är att flest reaktioner totalt sett (för alla syrebärare tillsammans) skett med stenkol i reducerande miljö. Genomgående för denna miljö är att Si och Fe ingår i alla de produkter som tillkommit som effekt av askinteraktioner med respektive syrebärare. Orsaken måste bero på skillnader i de två kolens olika inbördes mineralhalter: båda kolblandningarna innehåller samma mineraler fast i olika mängd. Det som skiljer är att stenkol har högre halt av kvarts, kaolinit och siderit, medan brunkol har högre halt av resterande mineraler. Eftersom Si ingår i kvarts och Fe ingår i siderit och dessa båda mineral finns i högre dos i stenkol som är den mest reaktiva blandningen, antas att dessa mineral medverkar till de reaktioner som sker.

NiO/NiAl₂O₄ är den syrebärare som reagerar minst, därefter kommer ilmenit. Dock kan ämnet Ca₃Fe₂+3(SiO₄)₃ komma från inbördes reaktioner i kolblandningen eftersom det har hittats även i prov som inte har en järninnehållande syrebärare. Emellertid finns Ca₃Fe₂+3(SiO₄)₃ inte genomgående i alla prov. Detta indikerar att miljön påverkar om denna reaktion sker eller ej: ämnet har endast bildats i oxiderande miljö men till exempel inte hos varken NiO/NiAl₂O₄ eller ilmenit som syrebärare till stenkol, och inte heller hos CuO/MgAl₂O₄ som syrebärare till brunkol. Däremot har ämnet påträffats med Mn₃O₄/ZrO₂ i både brunkol och stenkol.

Den syrebärare som totalt sett reagerar mest är CuO/MgAl₂O₄, men hälften av reaktionerna sker med bärarmaterialet som då bildar K₂Mg(SiO₄). En fråga är då om andra bärarmaterial som reagerar mindre kan användas tillsammans med CuO för att få en stabilare syrebärare.

I reducerande miljö reagerar svavel ofta med kalcium och bildar då oldhamit (se bilaga 3). Resultaten från studien tyder på att detta gäller för alla kombinerade askinteraktioner förutom med NiO/NiAl₂O₄ som syrebärare. Denna reaktion skulle möjligtvis kunna skydda mot svavelinteraktioner. En svavelinteraktion som förekommit i försök med enskilda askor är bildandet av pentlandit (Fe,Ni,S) genom att nickel reagerar med pyrit. Eftersom oldhamit inte bildades i de kombinerade försöken tillsammans med nickel, går detta resonemang inte att styrka. Dessutom bildades Cu₂S i alla miljöer med CuO som syrebärare.

Frågan kvarstår då varför inte pentlandit bildades i de kombinerade askförsöken med NiO/NiAl₂O₄, när inte heller oldhamit bildades i dessa försök. Dock bildades oldhamit i de enskilda askförsöken då NiO/NiAl₂O₄ hettades upp tillsammans med flygaska under H₂. Orsaken kan vara att oldhamit antingen inte syns i de kombinerade försöken med NiO/NiAl₂O₄ eller att bildandet har inhiberats.

5. Diskussion

5.1 Metodval

Då denna studie bygger på ett tidigare arbete har samma metod använts som i det tidigare arbetet.¹ Orsaken är både att det blir lättare att jämföra resultaten samt tidsbesparingen för att utveckla en ny metod.

Att proverna ligger stilla i formar i ugnen medför att det övre lagret får en annan kontakt med gasmediet än det undre lagret. Det kan tänkas bli en gradient i provet. Dock är kontaktytan mellan syrebärare och askmineral stor jämfört med i en fluidiserande bädd, vilket betyder att reaktioner dem emellan ges större möjlighet och därför inte behöver ske i lika stor omfattning i en riktig CLC-process. Det vill säga att om ingen reaktion sker i dessa försök är det i stort sett omöjligt för reaktionen att ske i en fluidiserad bädd.

De reaktioner som ger den viktigaste informationen för CLC:s användningsområde är de som sker i den reducerande fasen, som alltså liknar bränslereaktorn. Det är här syrebäraren och bränslet har kontakt och därefter bör syrebäraren separeras från askan innan återförsel till luftreaktorn för start av en ny cykel. Om inte askan avlägsnas blandas syrebäraren ständigt ut och riskerar även onödigt kontakt med ämnen som kan ge upphov till agglomeration och därmed en förstörd syrebärare.

Att det finns askinteraktioner kan vara ofrånkomligt och därför bör det utredas i vilken mängd de sker och därigenom vilken mängd av syrebäraren som blir förstörd. Vidare kan kostnad för varje syrebärare lättare beräknas och jämföras.

Vad som hade kunnat tilläggas i studien men som bortprioriterades på grund av tidsbrist är att undersöka proverna och agglomerationsgrad med svepelektronmikroskop, SEM. En fråga som därför kvarstår är om agglomerationen ökar eller minskar i kontakt med askor. I det tidigare arbetet¹ visade SEM att agglomeration skett vid vissa försök för de fyra syrebärarna i enskilda askinteraktioner. Eftersom NiO/NiAl₂O₄ endast har använts här hade det varit intressant att titta på vissa prover med hjälp av SEM.

5.2 Material

Nickel har använts som syrebärarmaterial i många studier under utvecklingen av CLC-tekniken. Därför var det önskvärt att bygga på den tidigare studien¹, som gjordes på fyra ofta använda syrebärare, genom att även undersöka potentiella askinteraktioner för NiO som syrebärare. Även om nickel är relativt dyr att använda till syrebärarmaterial så kan NiO/NiAl₂O₄ ändå vara motiverad genom att den fungerar relativt bra och har få askinteraktioner.

För att få en helhetsbild måste alla delar undersökas och summeras, förslagsvis genom olika index; till exempel utifrån hur stor energiutveckling som sker, hur lång livslängd partiklarna har, om oönskade reaktioner sker med vissa

askkomponenter, vilka syrebärare som är lämpliga för olika bränslen (beroende av vilket mineralinnehåll de har) och om de därför går att göra bränslespecifika.

Om inga läckage finns så borde inte några farliga utsläpp av nickeloxid vara ett problem eftersom partiklarna cirkulerar och därmed används i ett stort antal cykler. Hur många cykler varje syrebärare kan användas till är dock inte klarlagt, men en fingervisning mot 33000 timmar fanns i en tidigare studie²¹.

6. Slutsatser

NiO/NiAl₂O₄ reagerar med få askmineral i de enskilda försöken jämfört med de fyra syrebärare som testats på samma sätt tidigare.

NiO/NiAl₂O₄ och ilmenit är de två syrebärare som visat sig vara minst reaktiva med kolblandningar och utifrån endast den aspekten lämpade att använda med fastbränsle i CLC.

En minskning av interaktioner mellan syrebärare och askmineral påvisas när askkomponenter blandas. Resultatet tyder på att det istället sker inbördes reaktioner i askan.

Bärarmaterialet som önskas vara så oreaktivt som möjligt, verkar ofta delta i reaktioner med askkomponenter. NiAl₂O₄ reagerade med kalium i både reducerande och oxiderande miljö. Dock syntes inte denna reaktion i de kombinerade askförsöken. ZrO var det enda bärarmaterialet som inte verkade delta i någon reaktion.

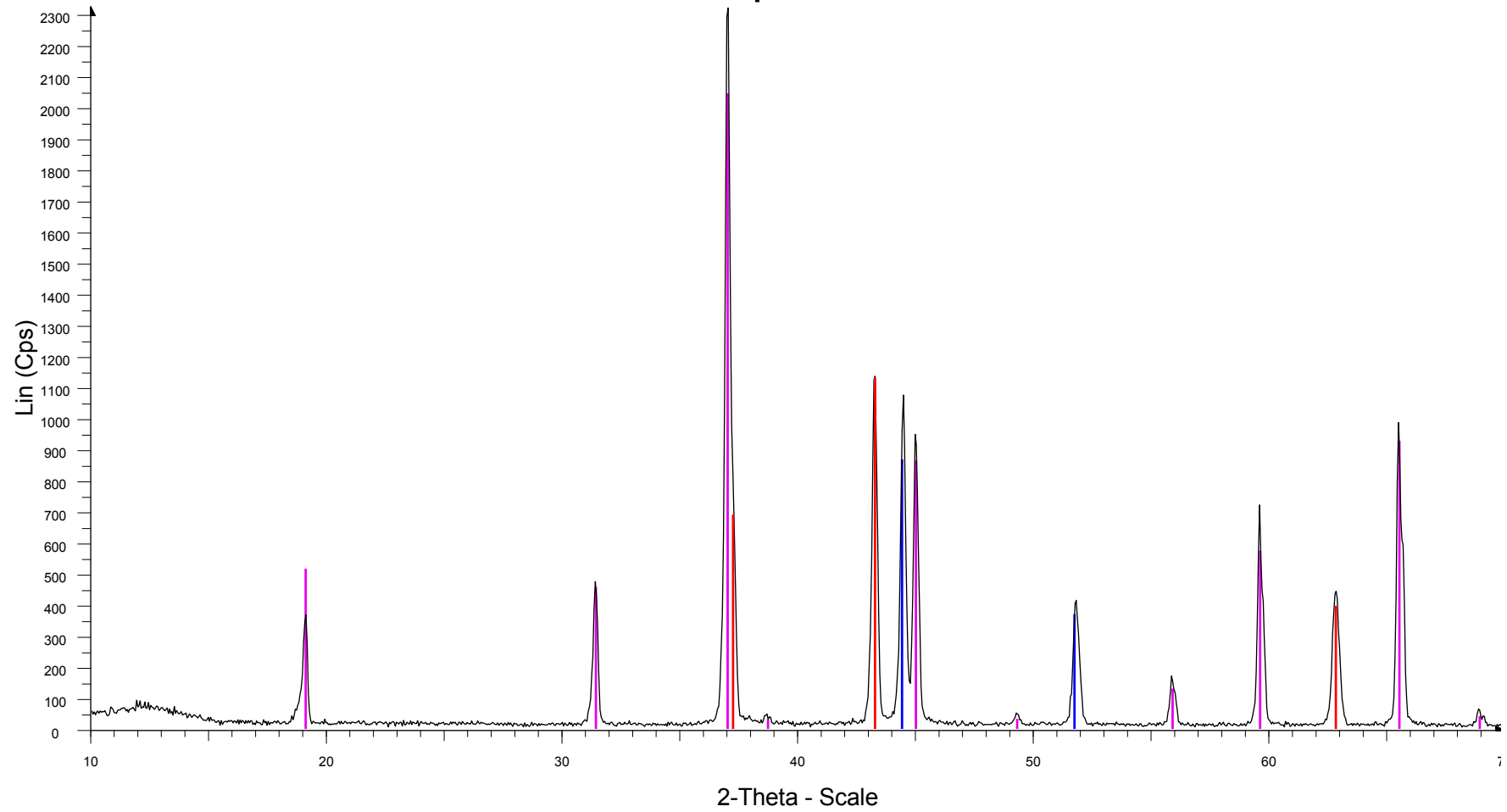
Bränslets inbördes mineralhalter påverkar dess interaktioner med syrebärarna, vilket visade sig genom att de kombinerade försöken med de två kolblandningarna skiljde sig åt i bildade produkter och antal reaktioner. En ökande mängd Si- och Fe-innehållande mineral verkar ge fler interaktioner med syrebärarna.

Källförteckning

- ¹ R. Edland, A. Högberg, T. Karlsson, R. Larsén, A. Östberg, M. Östergren (2012) *Syrebärarens interaktion med askkomponenter i en CLC process*. Kandidatarbete KBTX-01-12-12. Avdelningen för organisk miljö kemi, Chalmers tekniska högskola
- ² Intergovernmental Panel on Climate Change (2007) *IPCC Fourth Assessment Report: Climate Change*. Cambridge University Press
- ³ J. Adanez, A. Abad, F. Garcia-Labiano, P. Gayan, L. F. de Diego (2012) *Progress in Chemical-Looping Combustion and Reforming technologies*. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 38, ss. 215-282
- ⁴ Sveriges Geologiska Undersökning om koldioxidlagring
<http://www.sgu.se/sgu/sv/geologi/koldioxidlagring.html> (hämtad 2012-10-23)
- ⁵ Global CCS Institute – CO2 capture technologies
<http://cdn.globalccsinstitute.com/sites/default/files/publications/29701/co2-capture-technologies.pdf> (hämtad 2012-10-24)
- ⁶ M. B. Toftegaard, J. Brix, P. A. Jensen, P. Glarborg, A. D. Jensen (2010) *Oxy-fuel combustion of solid fuels*. Progress in Energy and Combustion Science, vol. 36, ss. 581–625
- ⁷ Vattenfall. Technology – Capture of CO₂
<http://www.vattenfall.com/en/ccs/postcombustion.htm> (hämtad 2013-01-07)
- ⁸ Imperial College London. Research: Carbon Capture and Storage
<http://www3.imperial.ac.uk/carboncaptureandstorage/carboncapture/igcc> (hämtad 2013-01-07)
- ⁹ T. Mattisson, A. Lyngfelt, H. Leion (2009) *Chemical-looping with oxygen uncoupling for combustion of solid fuels*, International Journal of Greenhouse Gas Control, vol. 3, 1, ss. 11-19
- ¹⁰ R. Siriwardane, H. Tian, G. Richards, T. Simonyi and J. Poston (2009) *Chemical-Looping Combustion of Coal with Metal Oxide Oxygen Carriers*. Energy & Fuels, vol. 23, ss. 3885–3892
- ¹¹ H. Leion, T. Mattisson, A. Lyngfelt (2006) *The use of petroleum coke as fuel in chemical-looping combustion*. Fuel, vol. 86, ss. 1947-1958
- ¹² C. Saha, S. Zhang, K. Heina, R. Xiaob, S. Bhattacharya (2012) *Chemical looping combustion (CLC) of two Victorian brown coals – Part I: Assessment of interaction between CuO and minerals inherent in coals during single cycle experiment*. Fuel, In Press, Corrected Proof
DOI: 10.1016/j.fuel.2012.08.009
- ¹³ M.K. Chandel, A. Hoteit, A. Delebarre (2009) *Experimental investigation of some metal oxides for chemical looping combustion in a fluidized bed reactor*. Fuel, vol. 88, Issue 5, ss. 898–908
- ¹⁴ S. Srinivasachar, J. J. Helble, A.A. Boni (1989, Dallas, conference) *A physical and chemical basis for understanding inorganic mineral transformations in coal based on model-mineral experiments*. PSI Technology Company
- ¹⁵ E. Jerndal, T. Mattisson, A. Lyngfelt (2006) *Thermal Analysis of Chemical-Looping Combustion*. Chemical Engineering Research and Design, vol. 84, ss. 795-806
- ¹⁶ J. Adánez, L. F. de Diego, F. García-Labiano, P. Gayán, A. Abad (2004) *Selection of Oxygen Carriers for Chemical-Looping Combustion*. Energy Fuels, vol. 18, ss. 371-377
- ¹⁷ H. Leion, A. Lyngfelt, M. Johansson, E. Jerndal, T. Mattisson (2008) *The use of ilmenite as an oxygen carrier in chemical-looping combustion*. Chemical Engineering Research and Design

- ¹⁸ E. Johansson, T. Mattisson, A. Lyngfelt, H. Thunman (2006) *A 300 W laboratory reactor system for chemical-looping combustion with particle circulation*. Fuel, vol. 85, ss. 1428-1438
- ¹⁹ C. Dueso, A. Abad, F. García-Labiano, L. F. de Diego, P. Gayán, J. Adánez, A. Lyngfelt (2010) *Reactivity of a NiO/Al₂O₃ oxygen carrier prepared by impregnation for chemical-looping combustion*. Fuel, vol. 89, ss. 3399-3409
- ²⁰ A. Rubel, K. Liu, J. Neathery, D. Taulbee (2009) *Oxygen carriers for chemical looping combustion of solid fuels*. Fuel, vol. 88, ss. 876-884
- ²¹ C. Linderholm, T. Mattisson, A. Lyngfelt (2009) *Long-term integrity testing of spray-dried particles in a 10 kW chemical-looping combustor using natural gas as fuel*. Fuel, vol. 88, 11, ss. 2083–2096
- ²² K. S. Kasprzaka, F. W. Sunderman Jr, K. Salnikow (2003) *Nickel carcinogenesis*. Mutation Research/Fundamental and Molecular Mechanisms of Mutagenesis, vol. 533, ss. 67-97
- ²³ S. V. Vassilev, C. G. Vassileva, D. Baxter, L. K. Andersen (2010) *Relationships between chemical and mineral composition of coal and their potential applications as genetic indicators. Part 2. Mineral classes, groups and species*. Geologica balcanica, vol. 39, ss. 43-67
- ²⁴ Kvarts, National Encyklopedin <http://www.ne.se/kvarts> (2012-11-02)
- ²⁵ Databas för mineraler: The mindat and locality database <http://www.mindat.org/> (hämtad 2012-10-05)
- ²⁶ Databas för mineraler: Mineralogy database <http://webmineral.com/> (hämtad 2012-10-05)
- ²⁷ Scintag (nu Thermo) (1999) *Basics of X-ray diffraction*. <http://epswww.unm.edu/xrd/xrdbasics.pdf> (hämtad 2012-09-19)
- ²⁸ Thermo powder diffractometer, Technical Description. http://www.thermo.com/eThermo/CMA/PDFs/Various/121File_11769.pdf (hämtad 2012-09-19)
- ²⁹ P. Davis, R. A. Mariott, E. Fitzpatrick, H. Wan, F. Bernard, & D. C. Peter (2008) *Fossil fuel development requires long-term sulfur strategies*. Oil & Gas Journal, vol. 106, ss. 45-46, 48, och 50-53

Nickel partikel



Nickel partikel - File: nickel partikel.raw - Type: Detector Scan - Step: 0.050 ° - Step time: 1. s - Theta: 8.000 ° - Creation: 2012-09-03 15:15:35

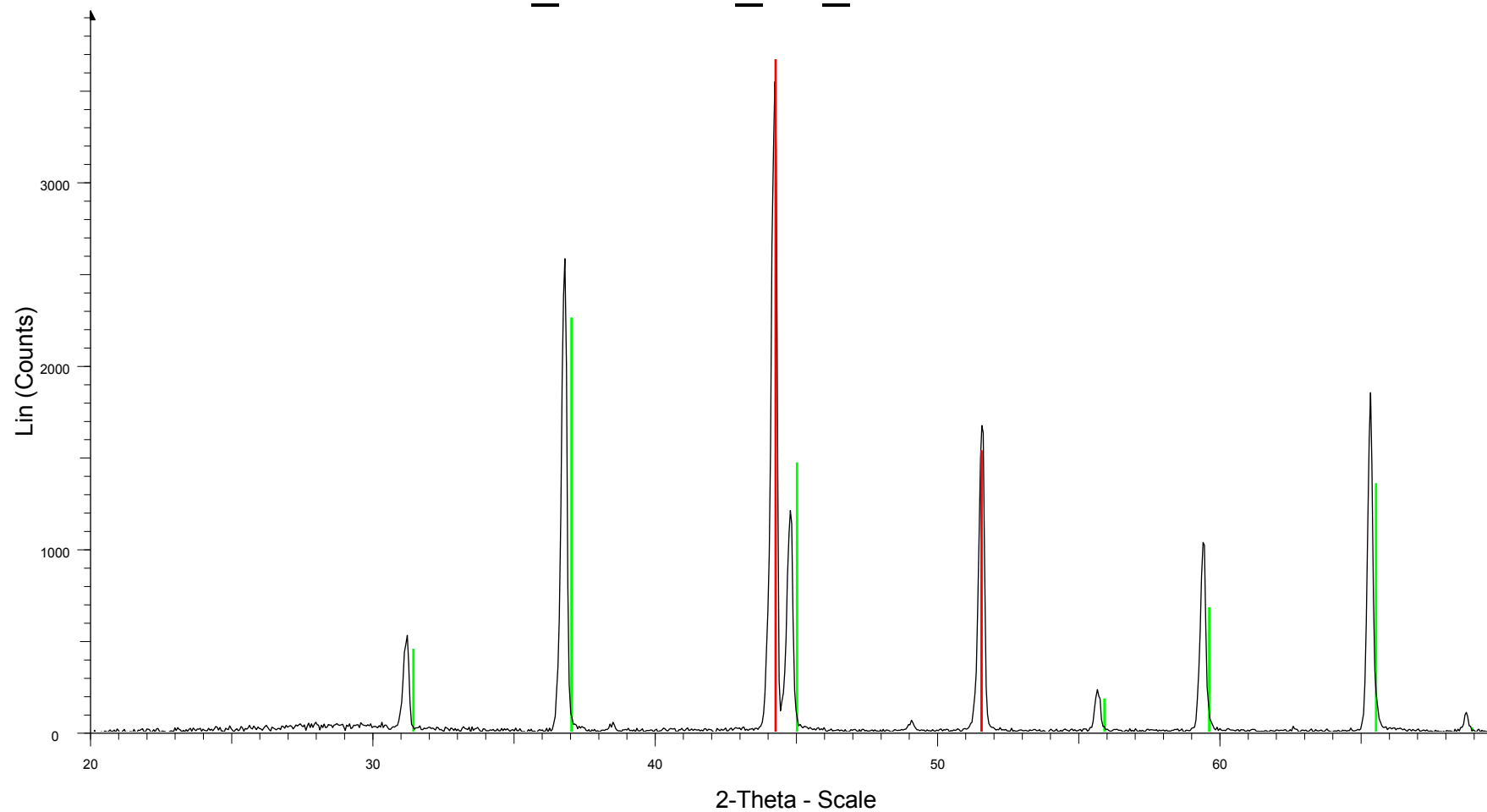
Operations: Import

00-047-1049 (*) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic

04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic

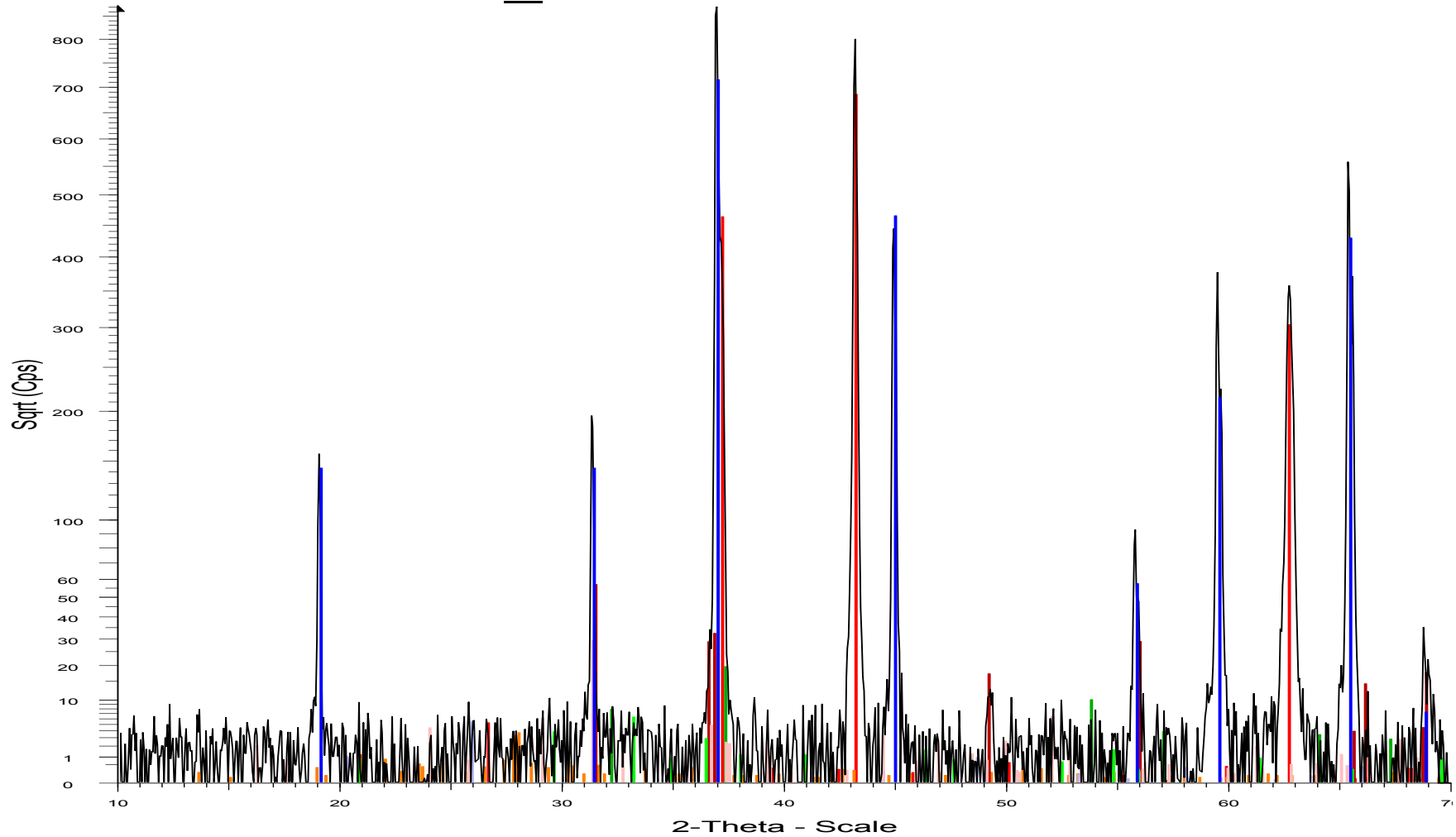
01-078-2180 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni₉₄Al₂O_{3.94} - Cubic

NiO_NiAl2O4_H2_20120906



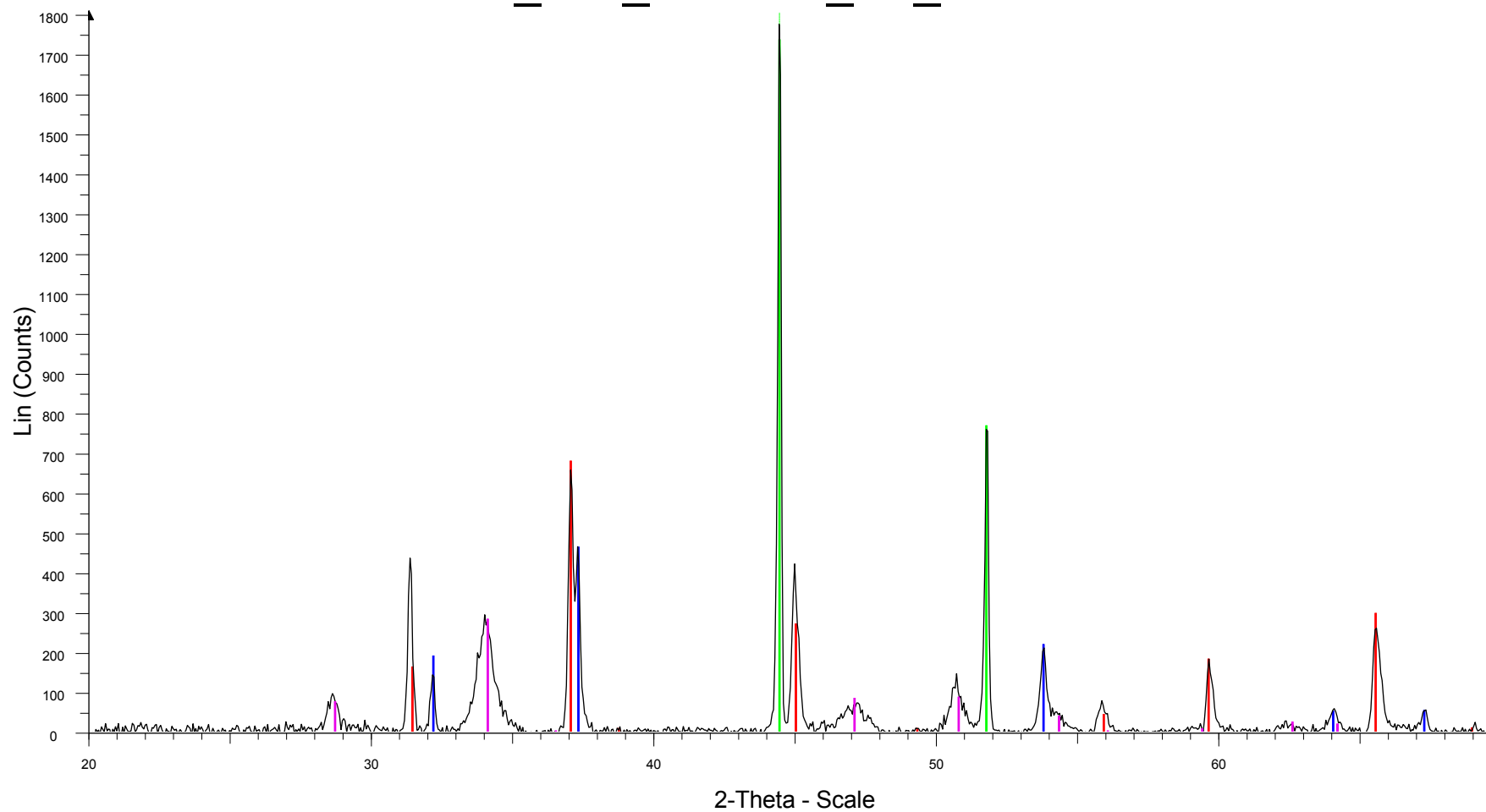
NiO_NiAl2O4_H2_20120906 - File: NiO_NiAl2O4_H2_20120906.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-06 09:09:57
Operations: Background 0.000,1.000 | Import
00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 73.4 %
04-007-0401 (I) - Nickel Aluminum - NiO.92Al0.08 - Cubic - S-Q 26.6 %

NiO_NiAl2O4 oxiderad



- ▣ NiO_NiAl2O4 oxiderad - File: NiO_NiAl2O4 oxiderad.raw - Type: 2T
 Operations: Background 0.257,1.000 | Import
- | | |
|--|--|
| <p> ▣ 04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Y: 78.69 % - d x by: 1. - WL
 ▣ 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Y: 82.08 % - d
 ▣ 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO2 - Y: 0.59 % - d x by: 1. - WL: 1.
 ▣ 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl2Si2O8 - Y: 0.41 % - d x
 ▣ 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO2 - Y: 0.61 % - d x by: 1. -
 ▣ 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Y: 2.23 % - d x by: 1. - WL: 1.5 </p> | <p> ▣ 01-076-8936 (C) - Magnesium Oxide - MgO - Y: 6.51 % - d x by: 1. -
 ▣ 04-014-4685 (I) - melilite, syn - Ca2Mg0.35Al1.3Si1.35O7 - Y: 3.34
 ▣ 00-010-0288 (*) - Andradite, syn - Ca3Fe2+3(SiO4)3 - Y: 0.71 % - d </p> |
|--|--|

CaCO3_NiO_NiAl2O4_H2_20120912

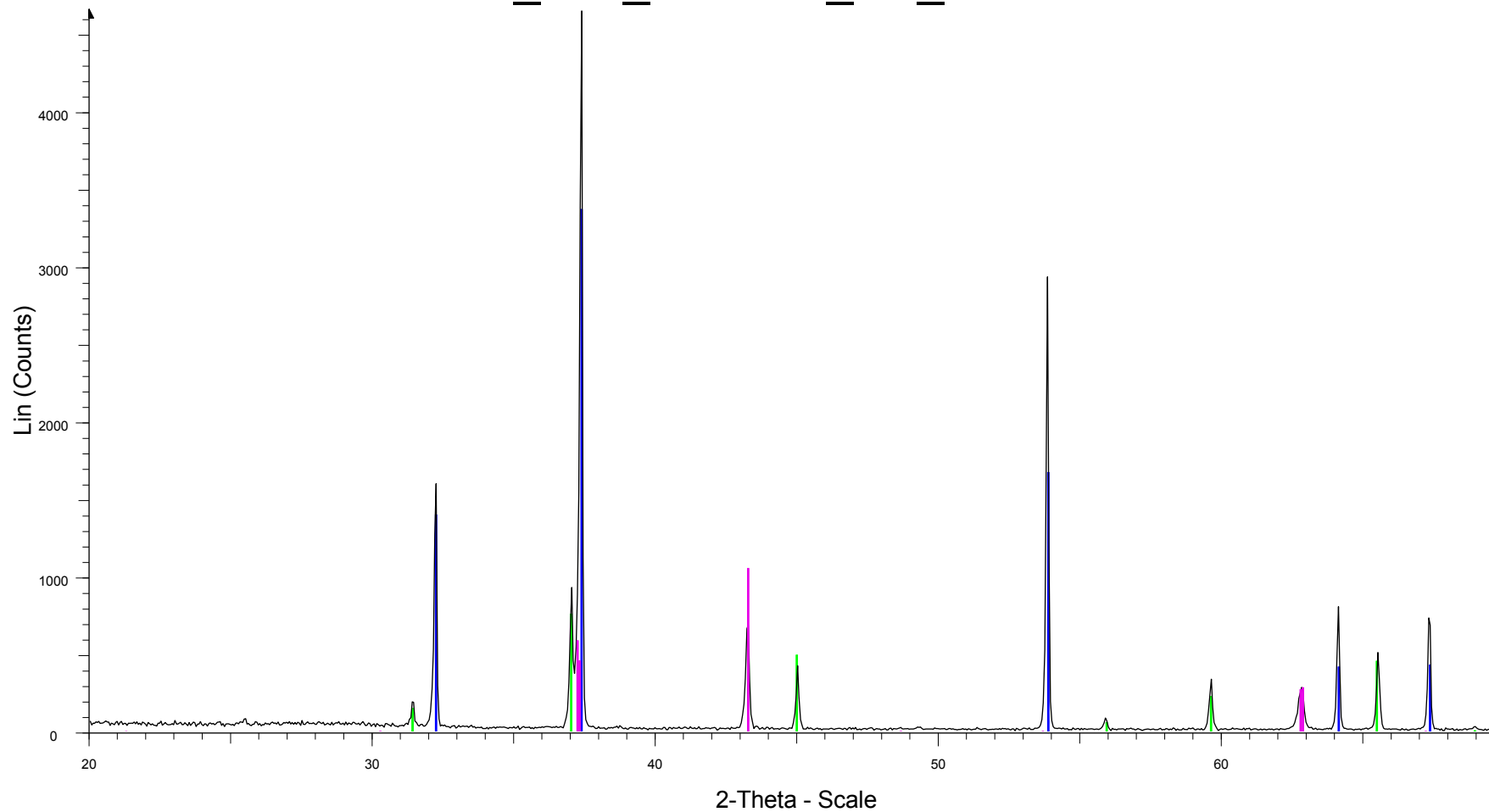


CaCO3_NiO_NiAl2O4_H2_20120912 - File: CaCO3_NiO_NiAl2O4_H2_20120912.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-12 10:31:01

Operations: Background 0.457,1.000 | Import

- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 34.5 %
- 01-070-5490 (*) - Lime, syn - CaO - Cubic - S-Q 15.0 %
- 01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni.941Al2O3.95 - Cubic - S-Q 36.7 %
- 00-044-1481 (*) - Portlandite, syn - Ca(OH)₂ - Hexagonal - S-Q 13.8 %

CaCO3_NiO_NiAl2O4_O2_20120907



CaCO3_NiO_NiAl2O4_O2_20120907 - File: CaCO3_NiO_NiAl2O4_O2_20120907.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-07 14:41:52

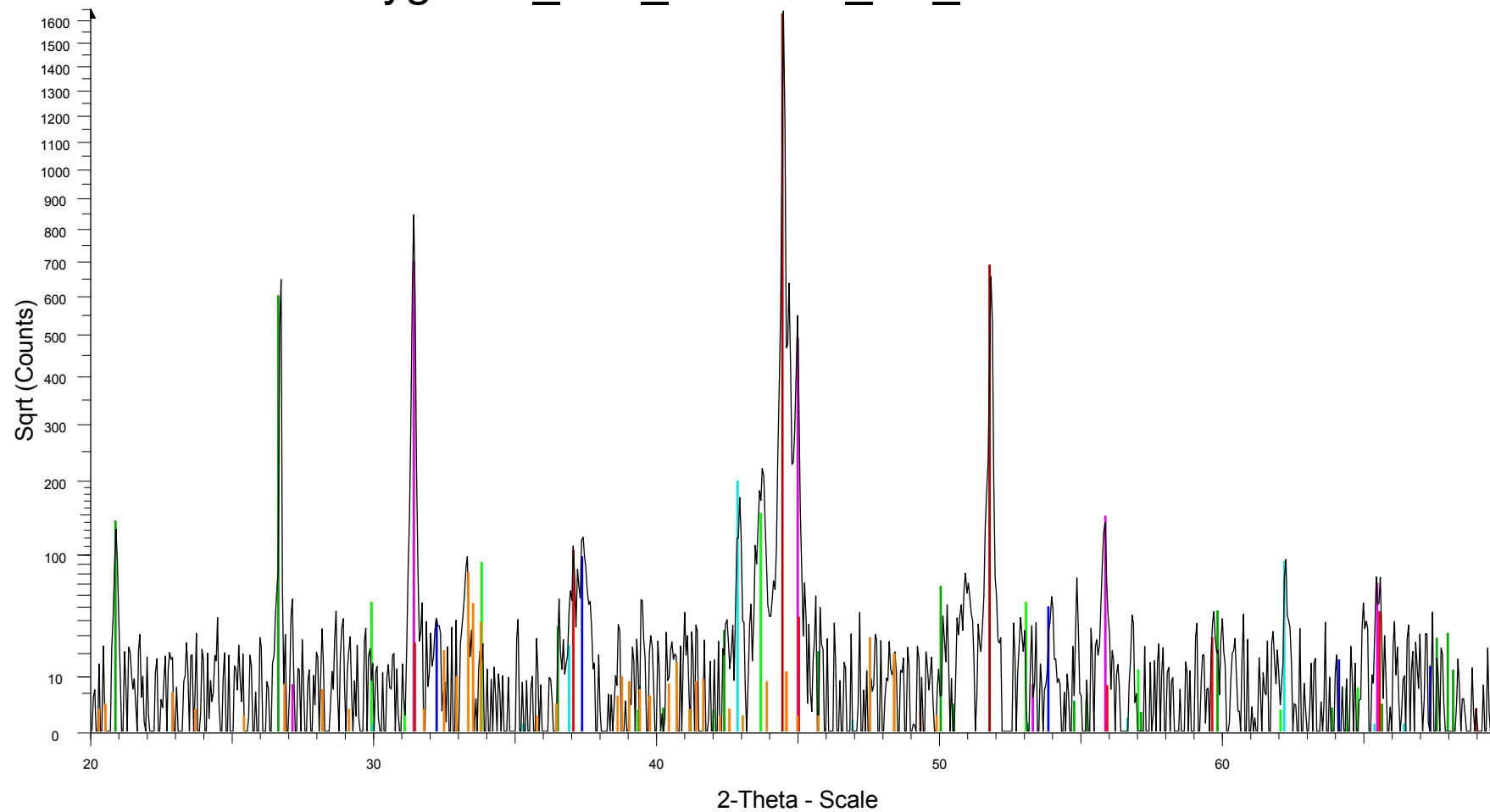
Operations: Import

04-011-8430 (I) - Calcium Oxide - CaO - Cubic - S-Q 51.7 %

00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 32.9 %

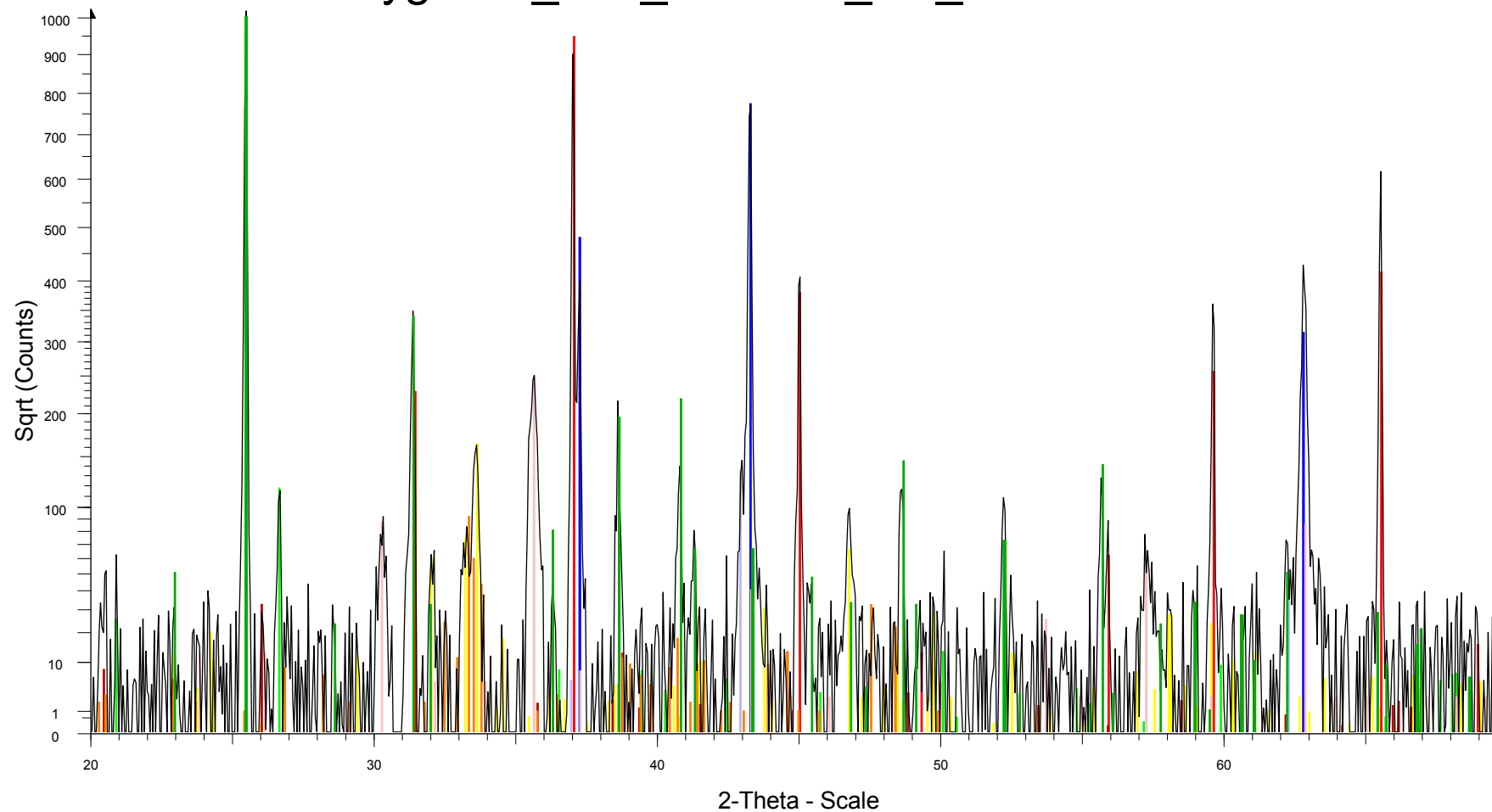
01-089-3080 (I) - Nickel Oxide - NiO - Rhombo.H.axes - S-Q 15.4 %

Flygaska_NiO_NiAl2O4_H2_20121006



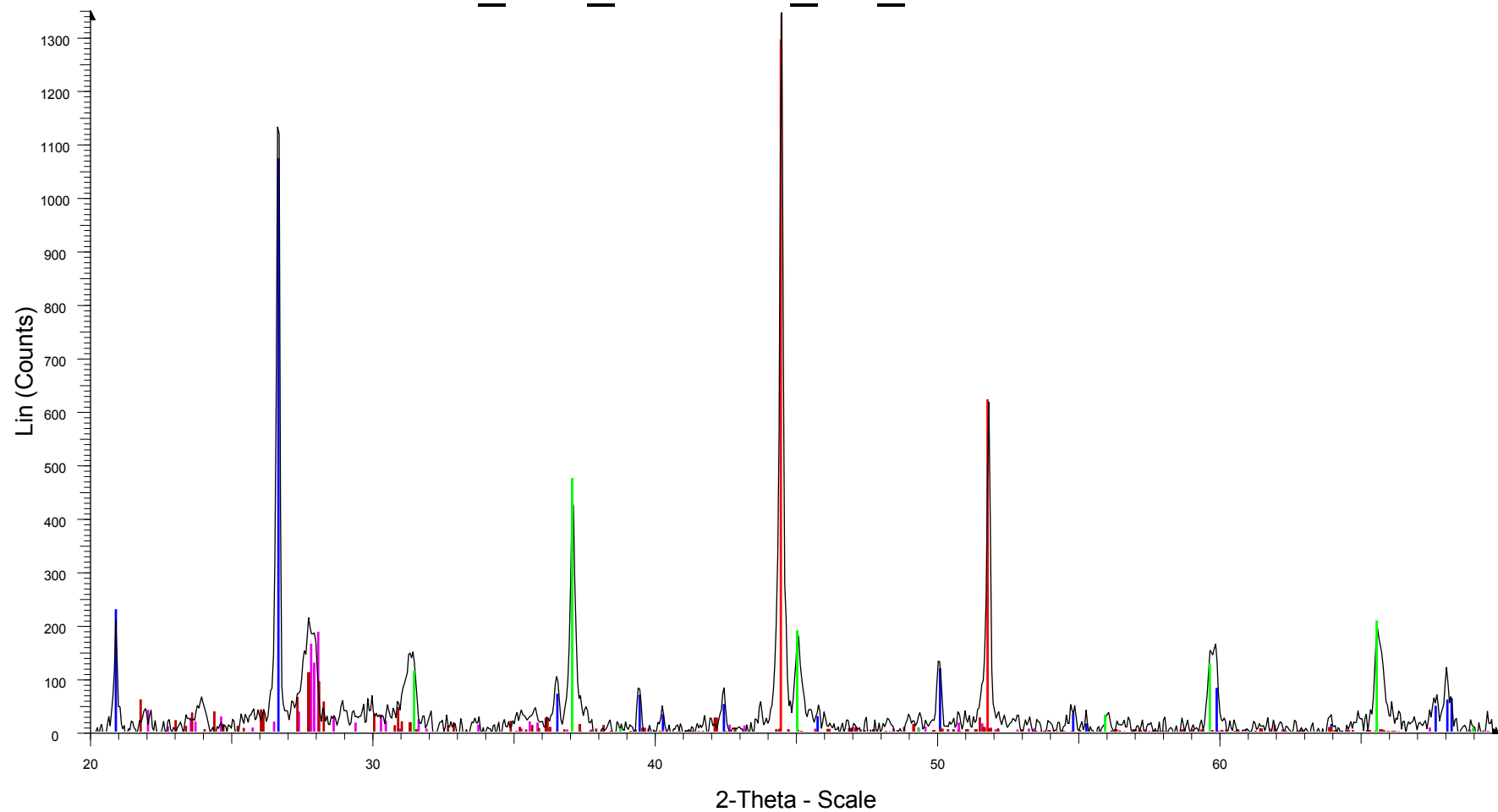
- 00-035-0591 (*) - Merwinite, syn - $\text{Ca}_3\text{Mg}(\text{SiO}_4)_2$ - Monoclinic -
- 00-029-0726 (*) - Pyrrhotite-11T - Fe_{1-x}S - Hexagonal -
- 00-008-0464 (I) - Oldhamite, syn - CaS - Cubic -
- 01-089-1961 (I) - Quartz low, syn - SiO_2 - Hexagonal -
- 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic -
- 04-009-5447 (N) - Magnesium Oxide - MgO - Cubic -
- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic -
- 01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - $\text{Ni}_{0.941}\text{Al}_2\text{O}_{3.95}$ - Cubic -

Flygaska_NiO_NiAl2O4_O2_20121010



- Operations: Background 1.000,1.000 | Import
- 04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO4) - Orthorhombic -
 - 04-014-6631 (*) - brownmillerite, syn - Ca2Fe1.559Al0.441O5 - Orthorhombic -
 - 04-011-2340 (*) - Nickel Oxide - NiO - Rhombo.H.axes -
 - 01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni.941Al2O3.95 - Cubic -
 - 01-075-8322 (*) - Quartz - SiO2 - Hexagonal -
 - 01-070-2516 (I) - Quartz low, syn - SiO2 - Hexagonal -
 - 00-045-0946 (*) - Periclase, syn - MgO - Cubic -
 - 00-039-1346 (*) - Maghemite-C, syn - Fe2O3 - Cubic -
 - 00-035-0591 (*) - Merwinite, syn - Ca3Mg(SiO4)2 - Monoclinic -

Illite_NiO_NiAl2O4_H2_20120906

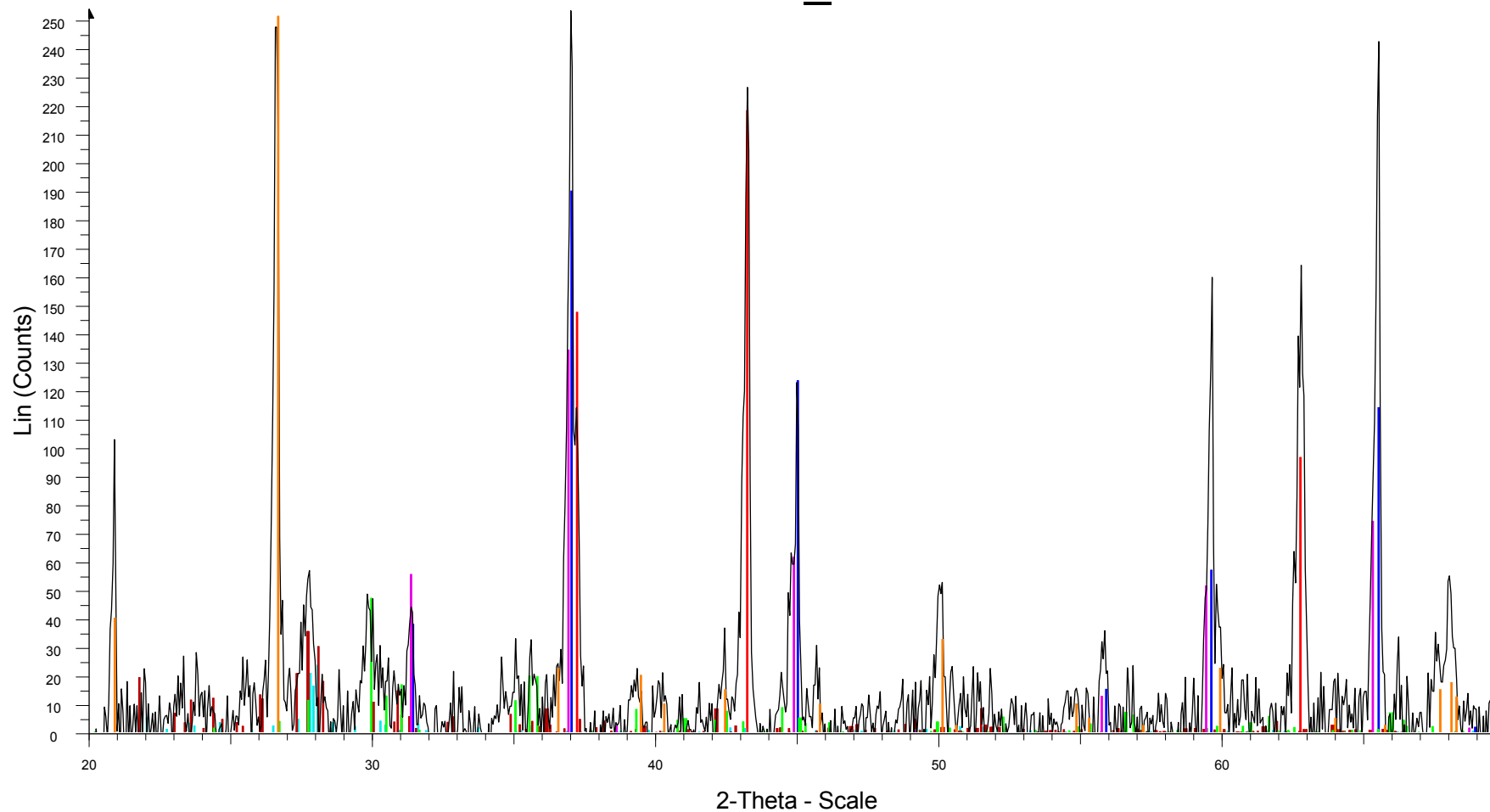


Illite_NiO_NiAl2O4_H2_20120906 - File: Illite_NiO_NiAl2O4_H2_20120906.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-06 09:27:34

Operations: Background 0.120,1.000 | Fourier 15.282 x 1 | Smooth 0.050 | Import

- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 14.2 %
- 01-075-8322 (*) - Quartz - SiO₂ - Hexagonal - S-Q 25.6 %
- 01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni₉₄Al₂O_{3.95} - Cubic - S-Q 13.1 %
- 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - S-Q 32.7 %
- 01-087-1790 (I) - Potassium Aluminum Silicate - K(AlSi₃O₈) - Triclinic - S-Q 14.5 %

Illite + NiO/NiAl2O4_O2 20120906

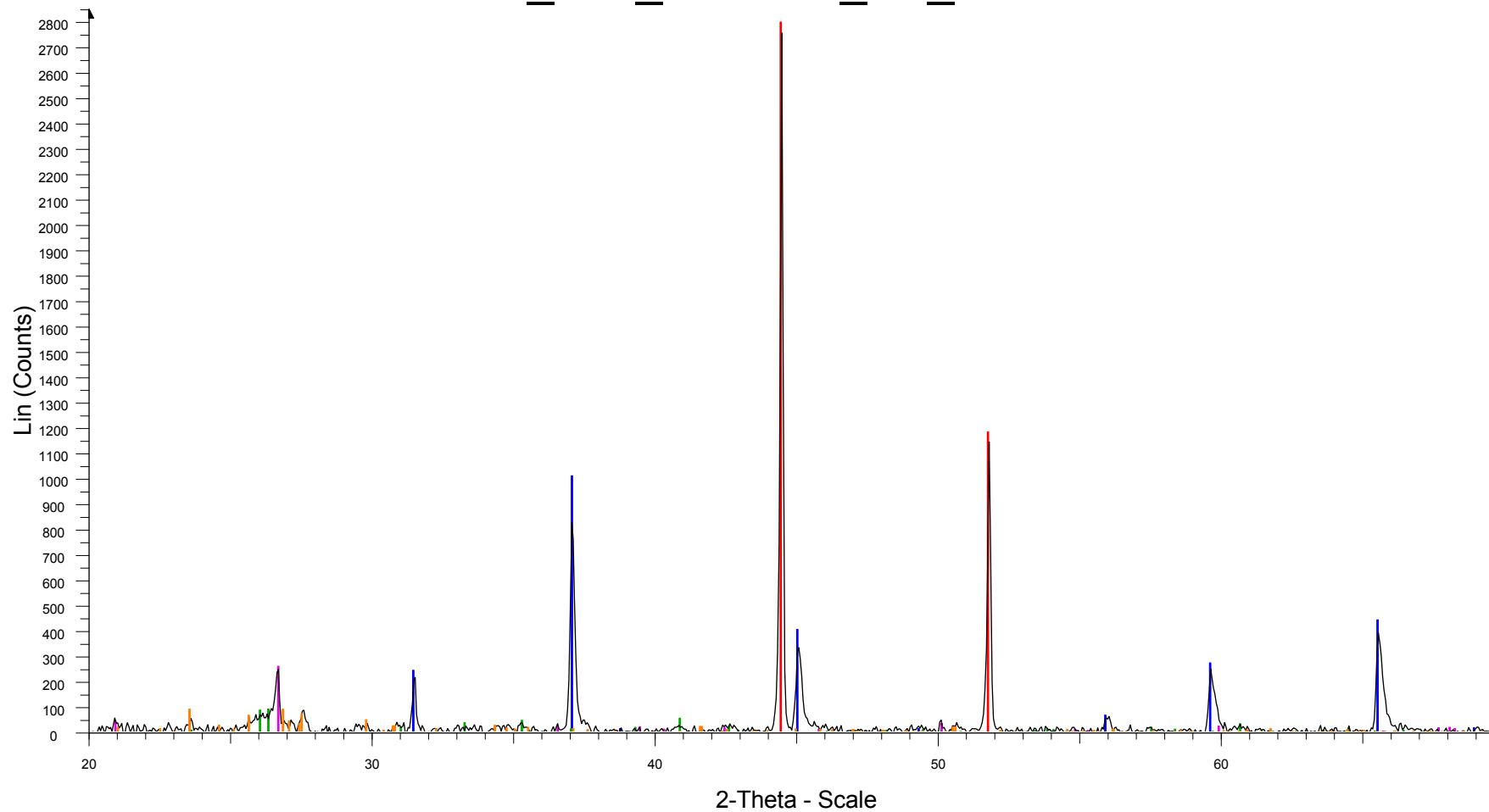


Illite + NiO/NiAl2O4_O2 20120906 - File: Illite_NiO_NiAl2O4_O2 20120906.raw - Type: 2Th/Th locked - S 04-007-5667 (C) - Ringwoodite, syn - Mg2SiO4 - Cubic - S-Q 16.2 %

Operations: Background 0.145,1.000 | Import

- 04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic - S-Q 9.6 %
- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 24.9 %
- 00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO2 - Hexagonal - S-Q 15.4 %
- 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl2Si2O8 - Triclinic - S-Q 12.1 %
- 01-087-1790 (I) - Potassium Aluminum Silicate - K(AlSi3O8) - Triclinic - S-Q 13.5 %
- 04-013-1858 (*) - clinopyroxene, syn; Diopside, potassian, syn - K0.12Ca0.88Mg0.83Al0.19Si1.98O6 - M

Kaolinite_NiO_NiAl2O4_H2_20120907



Kaolinite_NiO_NiAl2O4_H2_20120907 - File: Kaolinite_NiO_NiAl2O4_H2_20120907.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-07 15:29:45

Operations: Fourier 16.025 x 1 | Background 0.457,1.000 | Fourier 16.650 x 1 | Import

01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni.941Al2O3.95 - Cubic -

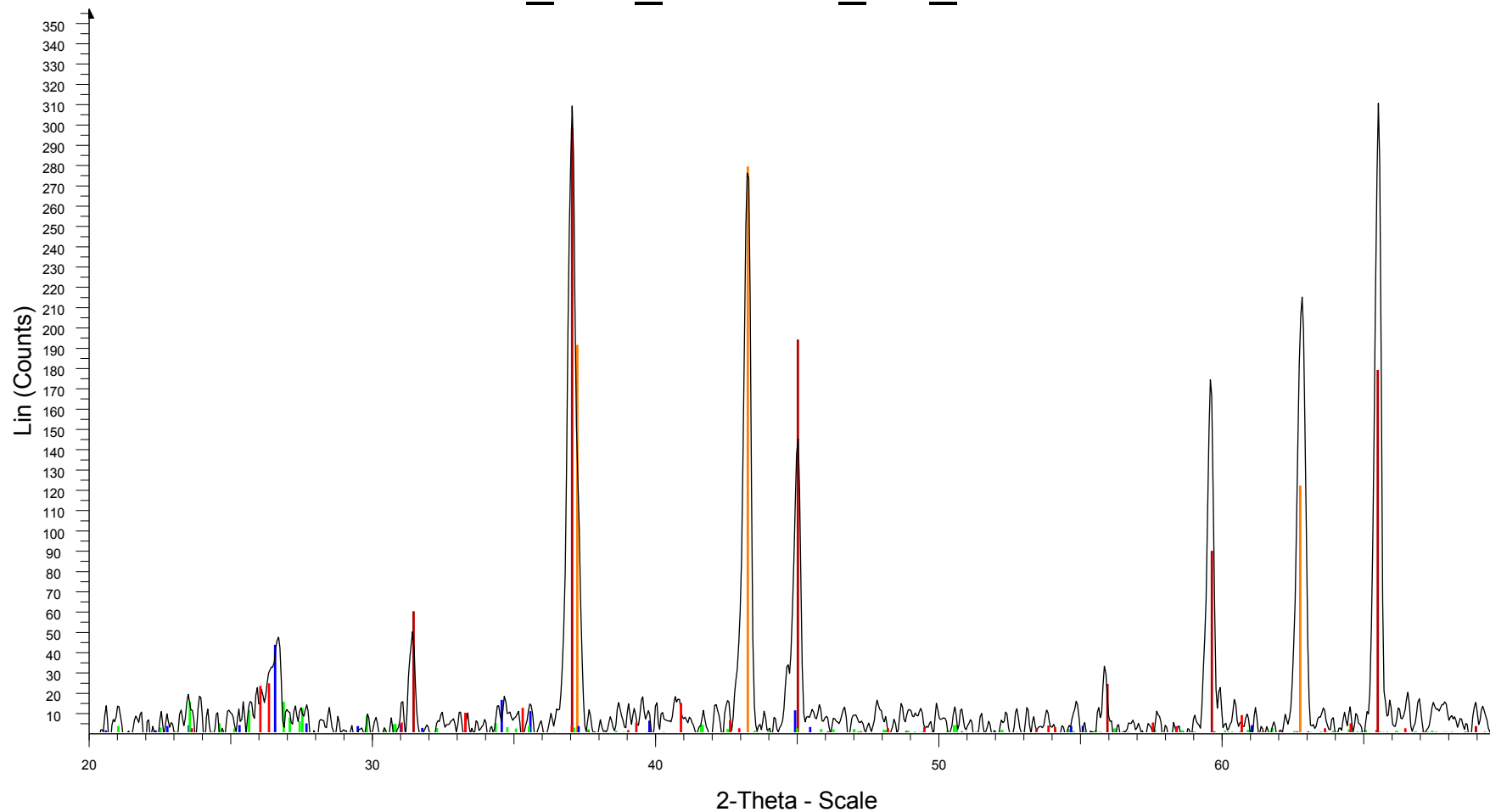
04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic -

00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO2 - Hexagonal -

00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al6Si2O13 - Orthorhombic -

04-009-3700 (I) - orthoclase - KAlSi3O8 - Monoclinic -

Kaolinite_NiO_NiAl2O4_O2_20120907

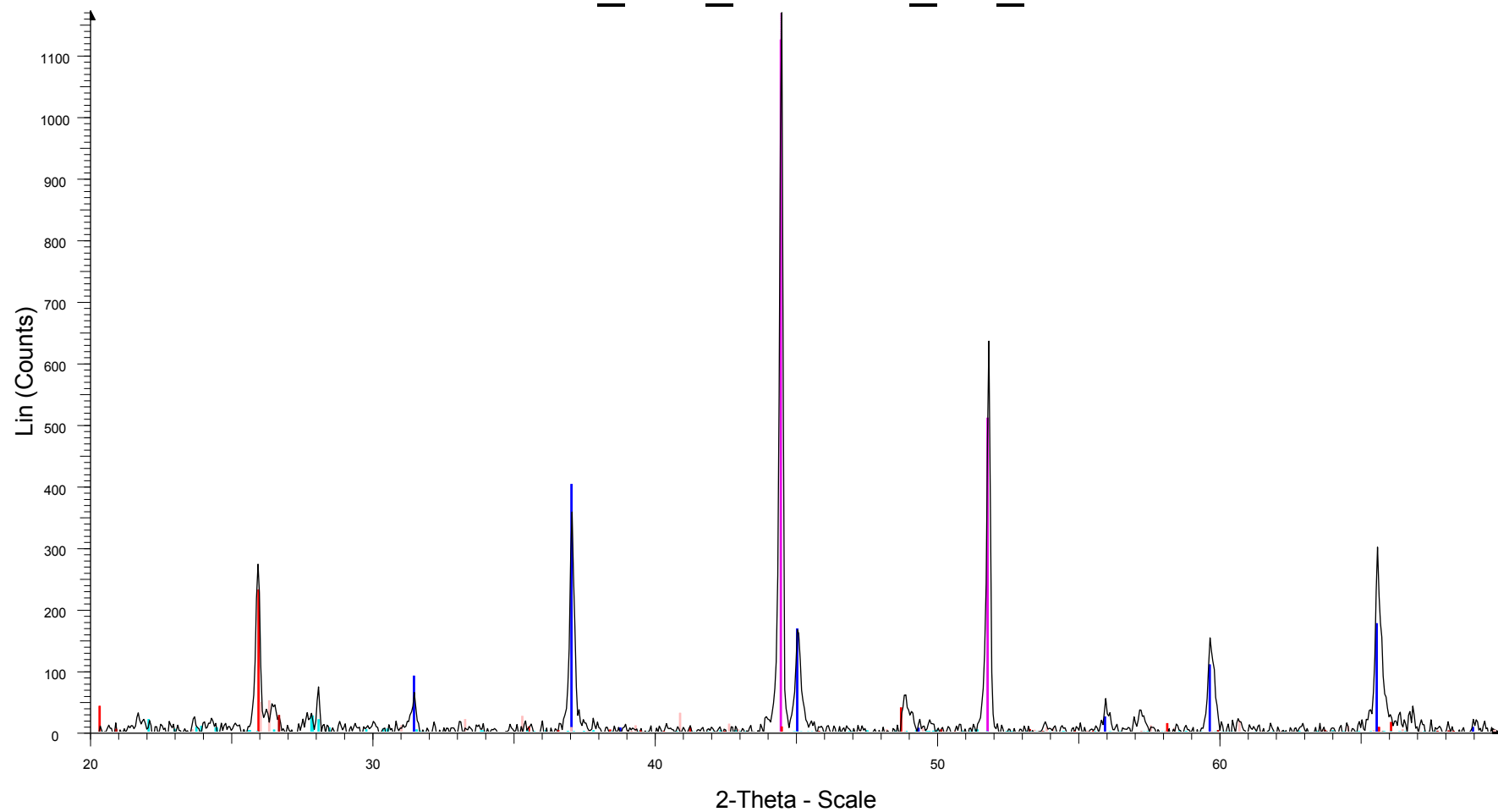


Kaolinite_NiO_NiAl2O4_O2_20120907 - File: Kaolinite_NiO_NiAl2O4_O2_20120907.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-07 13:52:33

Operations: X Offset 0.083 | Smooth 0.110 | Fourier 16.025 x 1 | Background 0.457,1.000 | Y Scale Add -20 | Import

- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic -
- 04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic -
- 00-046-0741 (I) - Potassium Aluminum Silicate - KAl3Si3O11 - Monoclinic -
- 00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al6Si2O13 - Orthorhombic -
- 04-009-3700 (I) - orthoclase - KAlSi3O8 - Monoclinic -

Montmorillonite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912

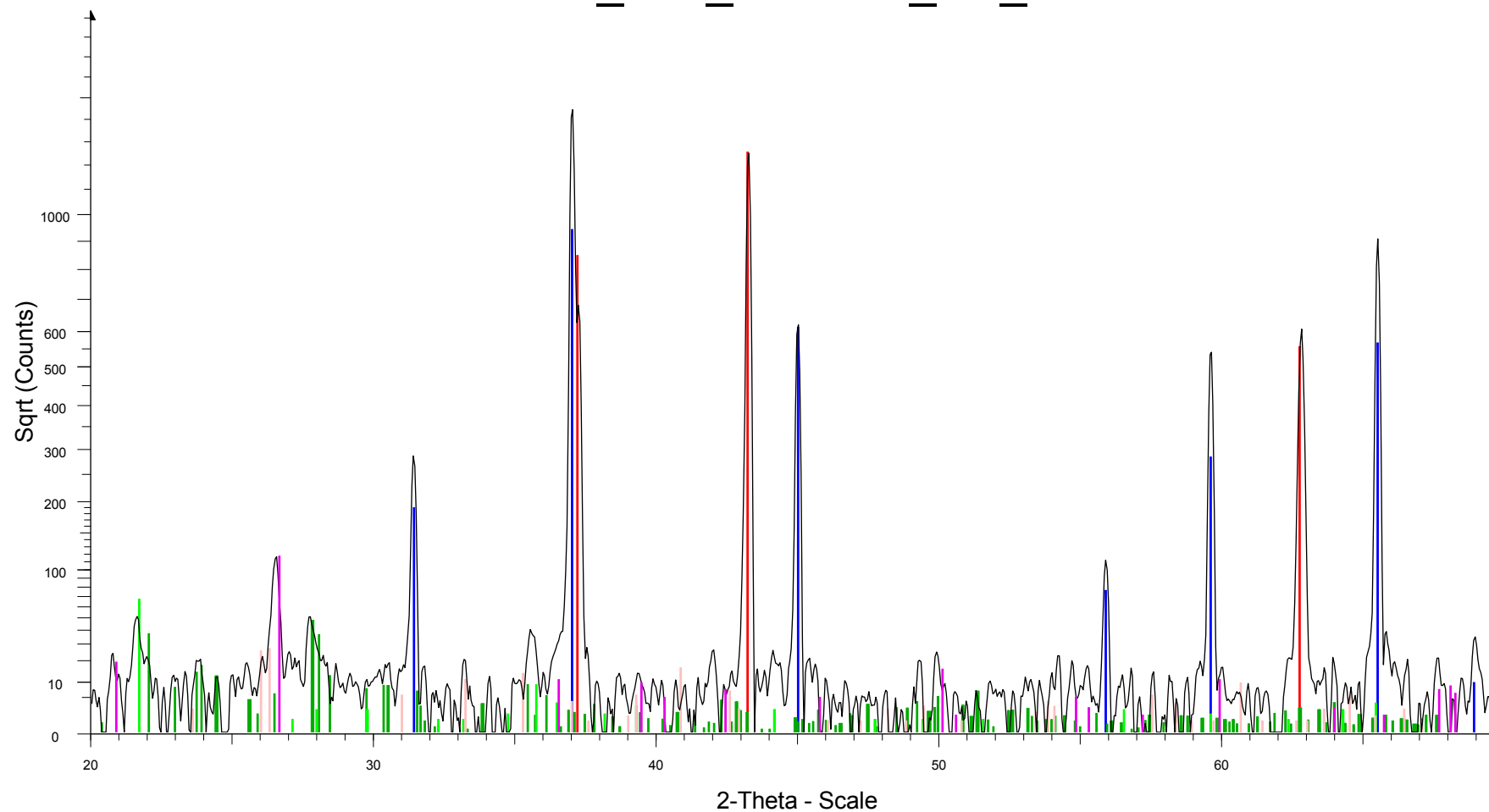


Montmorillonite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912 - File: Montmorillonite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-12 09:25:55

Operations: Fourier 16.025 x 1 | Background 0.457,1.000 | Import

- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic -
- 01-078-2180 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni.941Al2O3.94 - Cubic -
- 00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO2 - Hexagonal -
- 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO2 - Hexagonal -
- 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi3O8 - Triclinic -
- 00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al6Si2O13 - Orthorhombic -

Montmorillonite_NiO_NiAl2O4_O2_20120906

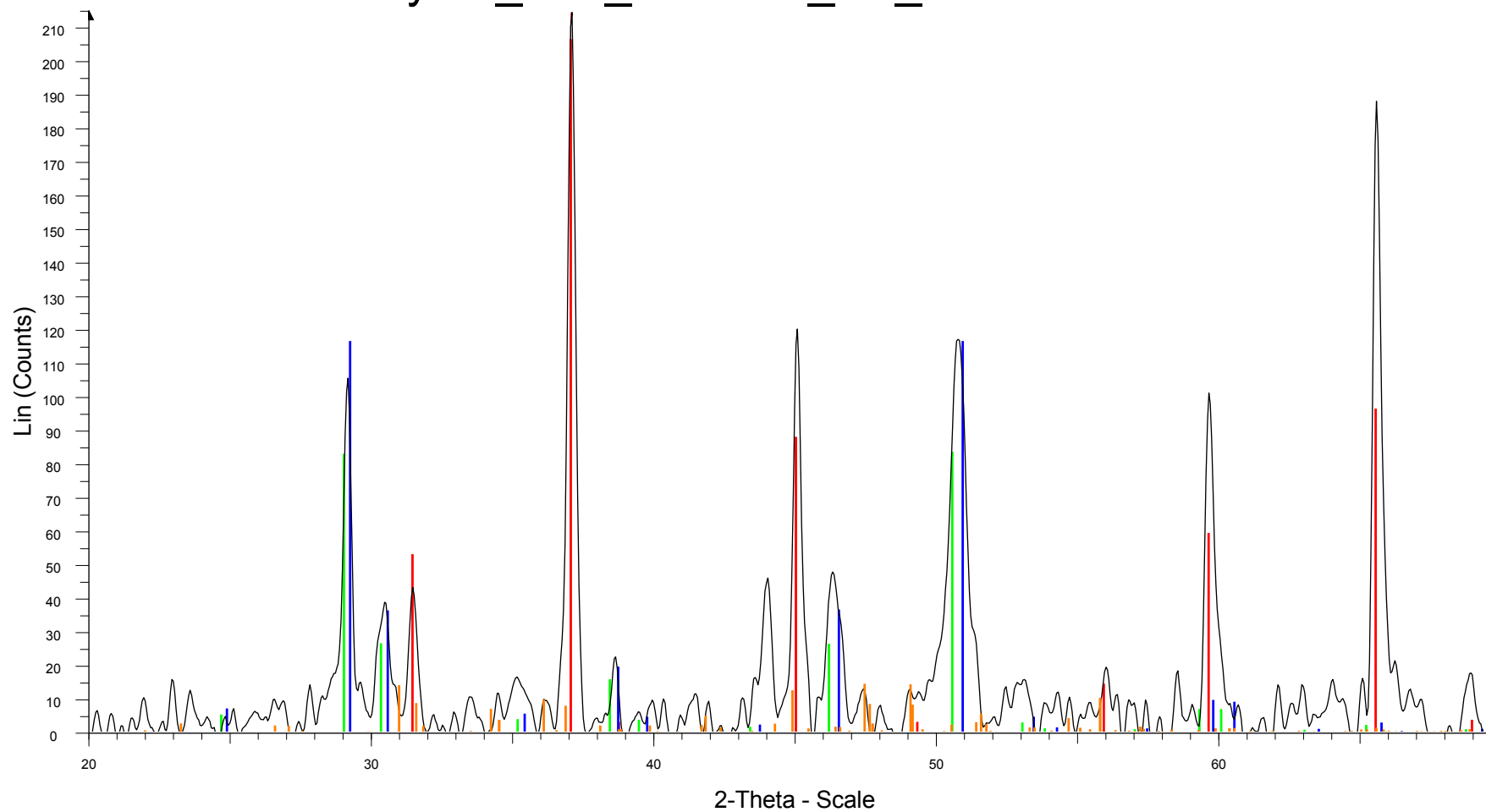


Montmorillonite_NiO_NiAl2O4_O2_20120906 - File: Montmorillonite_NiO_NiAl2O4_O2_20120906.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-06 08:50:13

Operations: Smooth 0.150 | Fourier 16.025 x 1 | Background 0.081,1.000 | Import

- 04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic -
- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic -
- 00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO2 - Hexagonal -
- 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi3O8 - Triclinic -
- 00-060-0061 (*) - Magnesium Aluminum Silicate - Mg2Al4Si5O18 - Orthorhombic -
- 00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al6Si2O13 - Orthorhombic -

Pyrite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912



Pyrite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912 - File: Pyrite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-12 10:58:27

Operations: Smooth 0.050 | Smooth 0.050 | Background 0.457,1.000 | Smooth 0.150 | Y Scale Add -10 | Smooth 0.201 | Y Scale Add -83 | Import

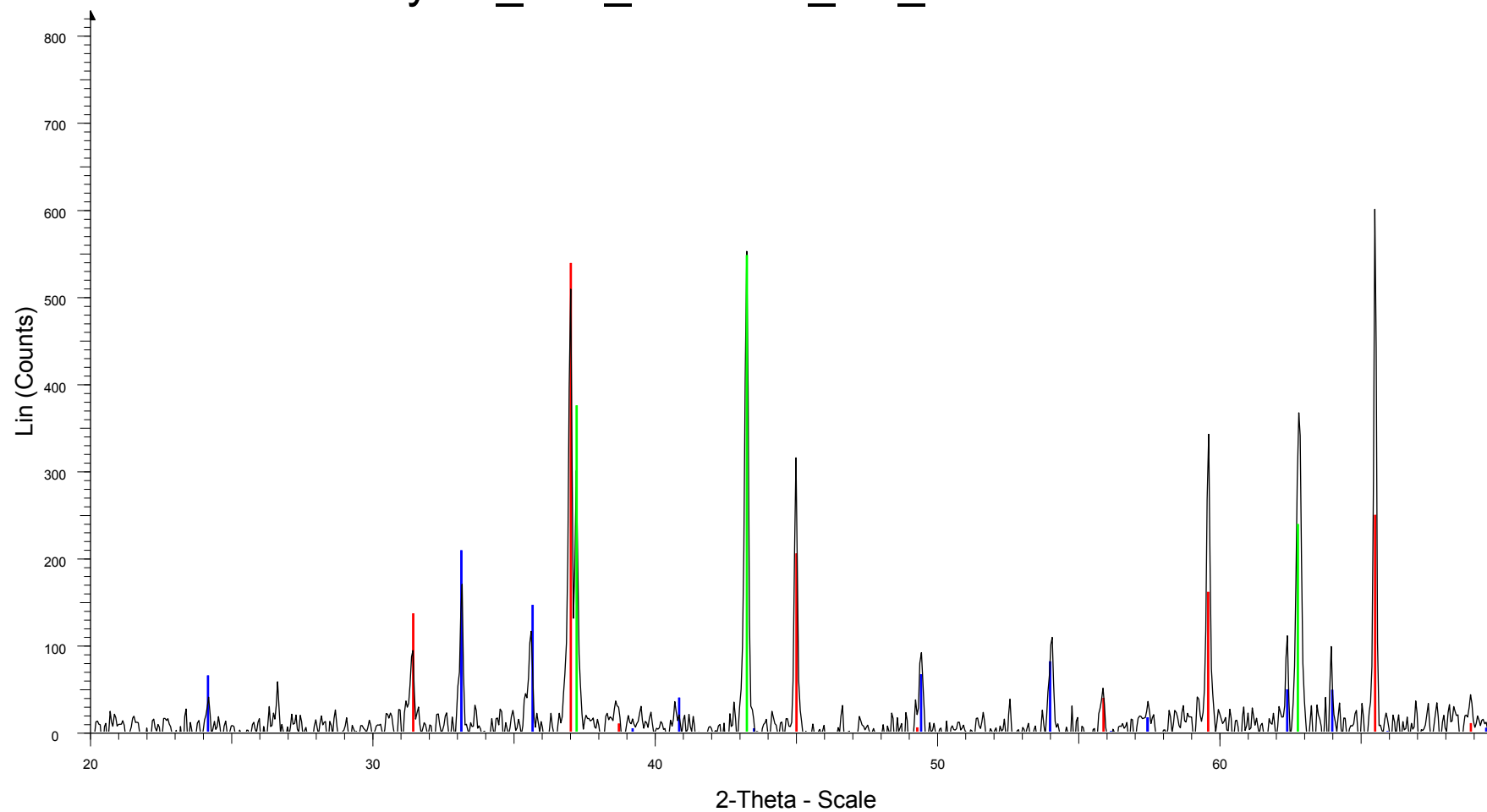
01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni₉₄Al₂O_{3.95} - Cubic - S-Q 58.4 %

04-013-1953 (I) - pentlandite, syn - Fe_{4.6}Ni_{4.4}S₈ - Cubic - S-Q 18.8 %

01-075-8674 (I) - Pentlandite, syn - (Ni_{4.26}Fe_{4.74})S₈ - Cubic - S-Q 13.6 %

04-012-0858 (I) - Iron Sulfide - FeS - Monoclinic - S-Q 9.2 %

Pyrite_NiO_NiAl2O4_O2_20120913



Pyrite_NiO_NiAl2O4_O2_20120913 - File: Pyrite_NiO_NiAl2O4_O2_20120913.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-13 13:41:26

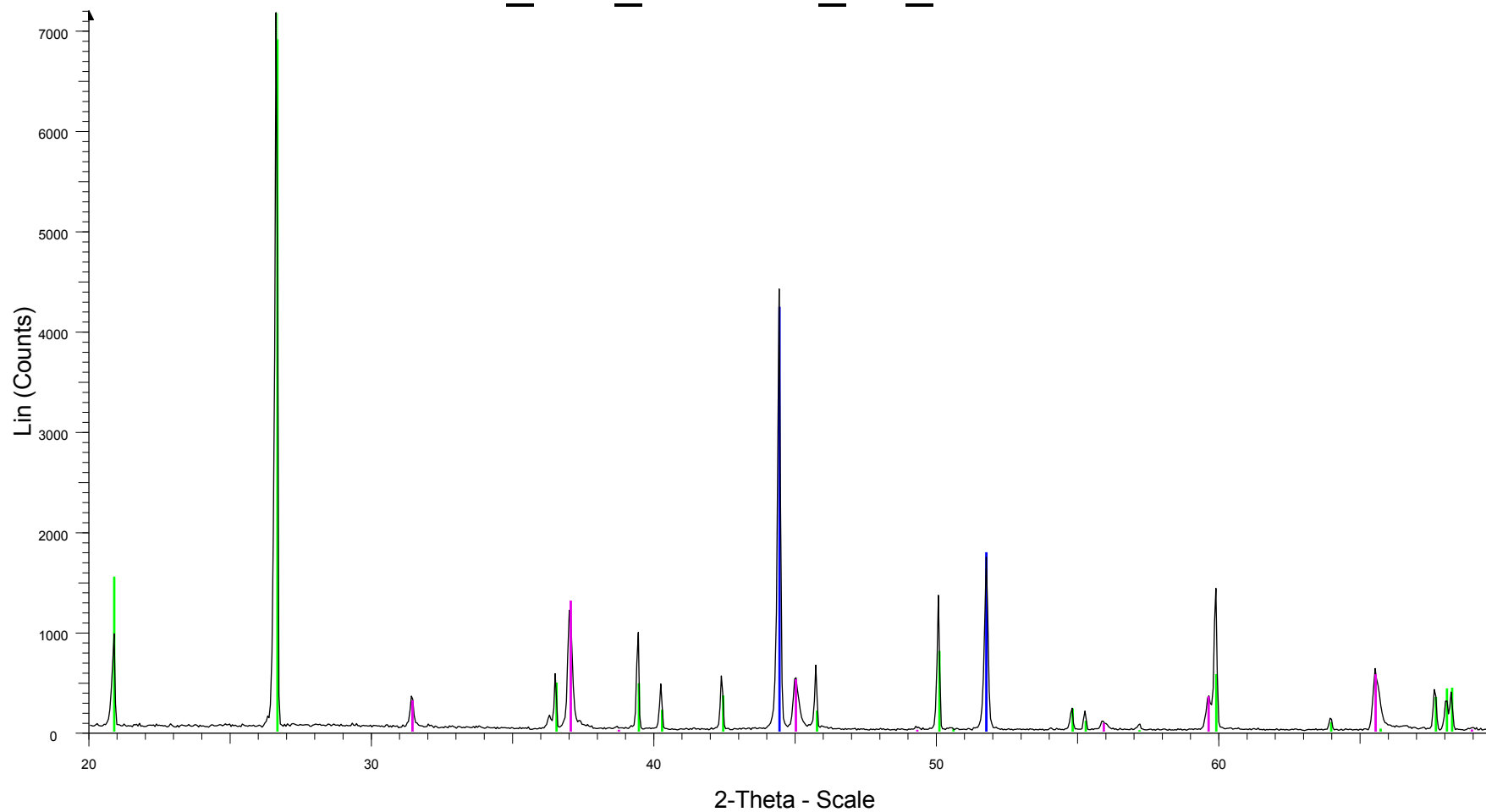
Operations: Fourier 13.328 x 1 | Background 0.977,1.000 | Smooth 0.050 | Import

01-076-8400 (*) - Hematite, syn - Fe2O3 - Rhombo.H.axes - S-Q 17.8 %

04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic - S-Q 30.9 %

01-081-0711 (*) - Nickel Aluminum Oxide - (Ni0.203Al0.797)(Al1.203Ni0.797)O4 - Cubic - S-Q 51.3 %

Quartz_NiO_NiAl2O4_H2_20120907



Quartz_NiO_NiAl2O4_H2_20120907 - File: Quartz_NiO_NiAl2O4_H2_20120907.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-07 15:03:00

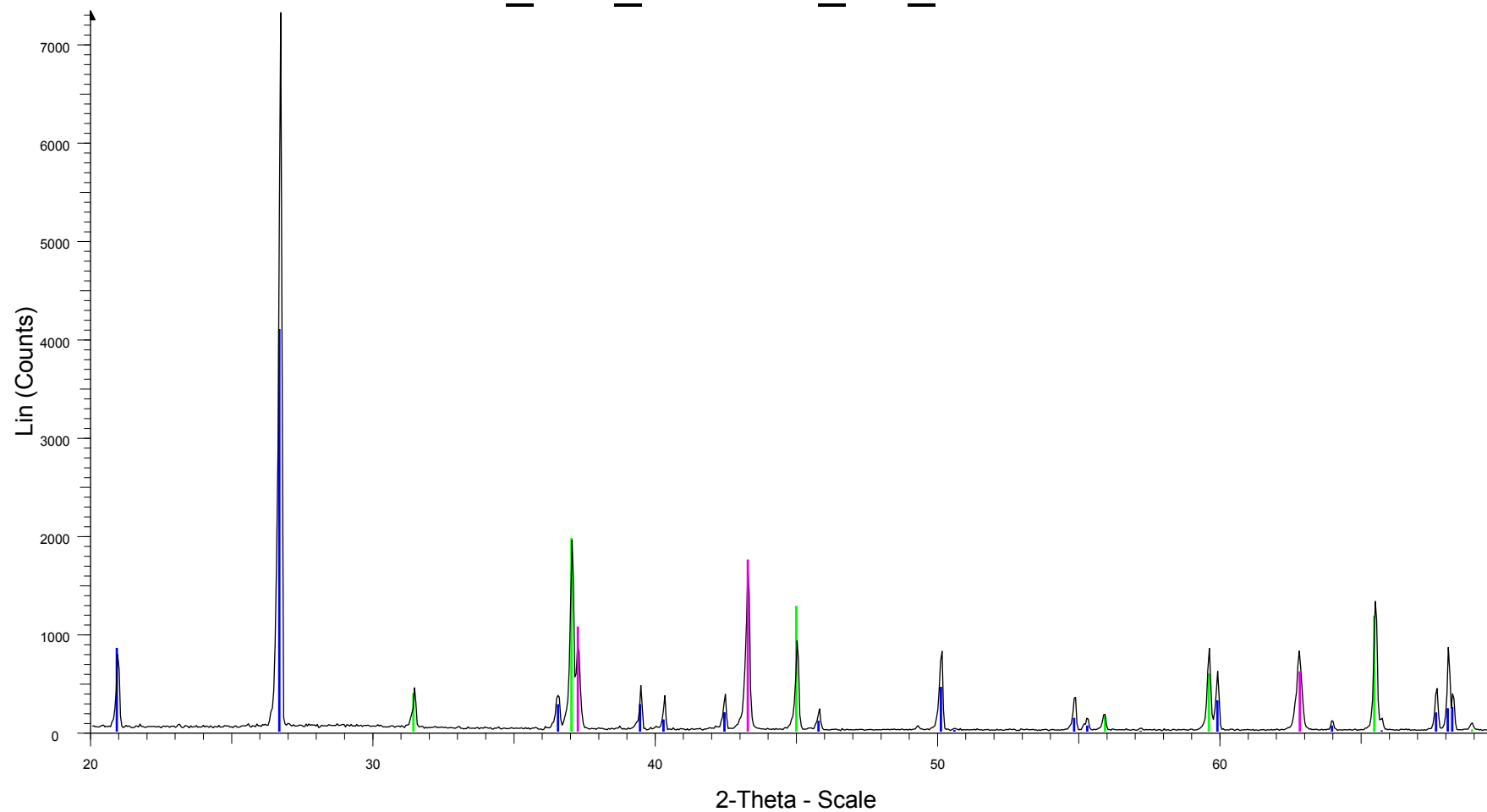
Operations: Import

04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 16.7 %

01-076-9281 (I) - Quartz alpha, syn - SiO2 - Hexagonal - S-Q 68.7 %

01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni.941Al2O3.95 - Cubic - S-Q 14.6 %

Quartz_NiO_NiAl2O4_O2_20120907

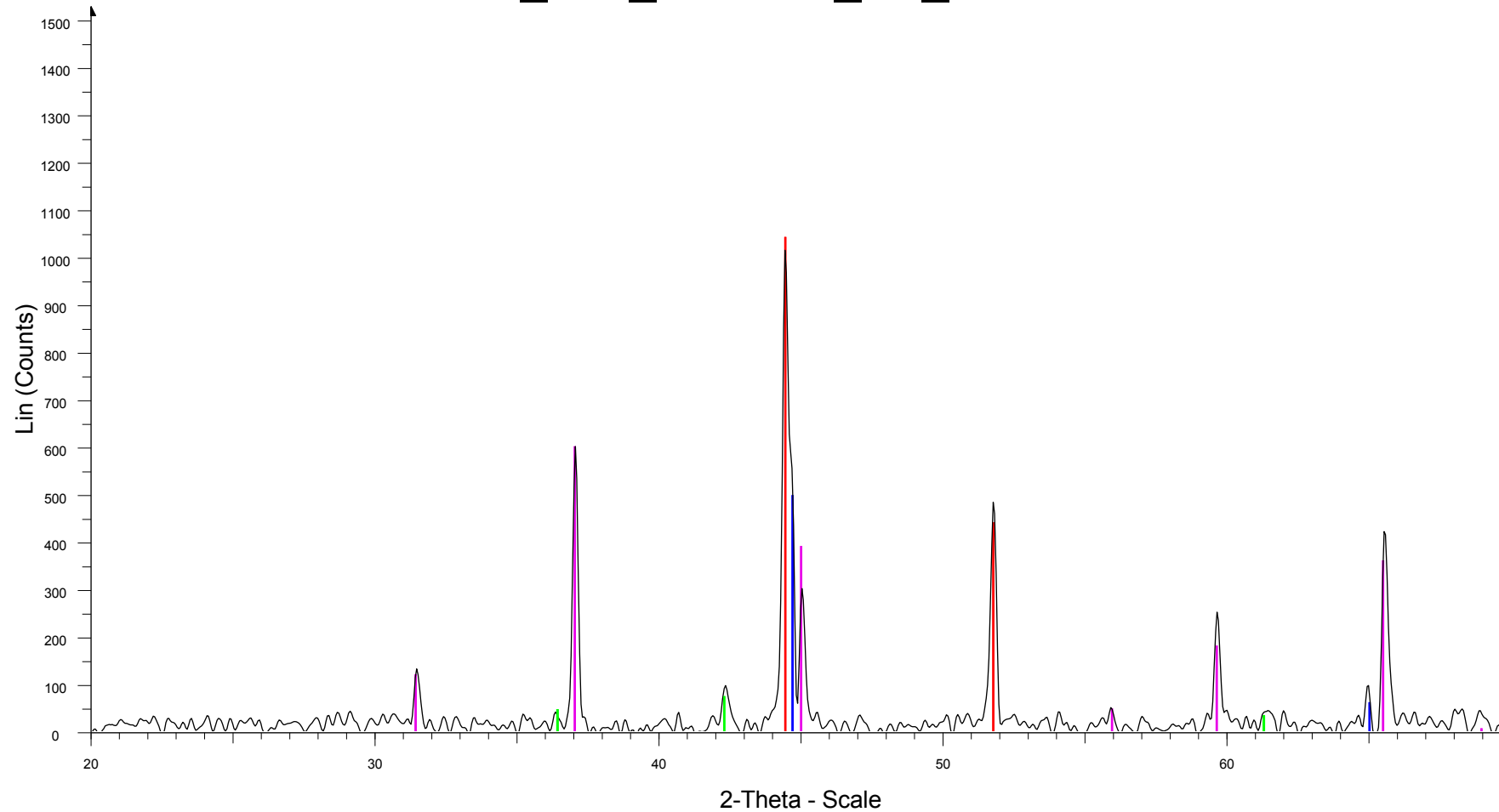


Quartz_NiO_NiAl2O4_O2_20120907 - File: Quartz_NiO_NiAl2O4_O2_20120907.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-07 14:07:45

Operations: Import

- 01-076-9282 (I) - Quartz alpha, syn - SiO₂ - Hexagonal - S-Q 46.7 %
- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl₂O₄ - Cubic - S-Q 43.3 %
- 00-047-1049 (*) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic - S-Q 10.0 %

Siderite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912



Siderite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912 - File: Siderite_NiO_NiAl2O4_H2_20120912.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-12 10:00:41

Operations: Fourier 16.025 x 1 | Background 0.457,1.000 | Smooth 0.150 | Y Scale Add -42 | Fourier 9.029 x 1 | Y Scale Add -250 | Import

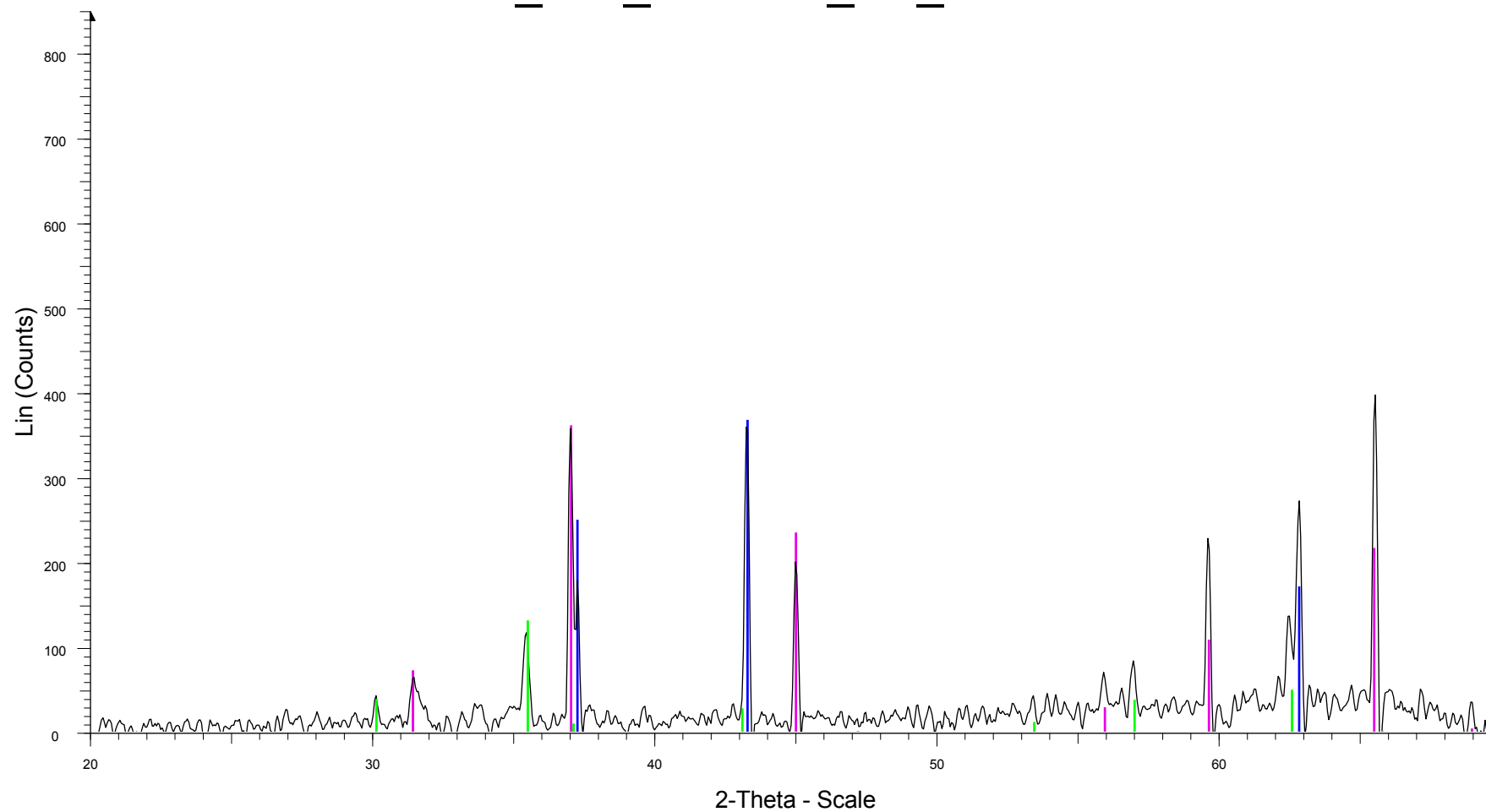
00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 65.4 %

04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 24.4 %

04-007-9753 (*) - Iron, syn - Fe - Cubic - S-Q 7.5 %

01-085-0625 (I) - Iron Oxide - Fe.942O - Rhombo.H.axes - S-Q 2.7 %

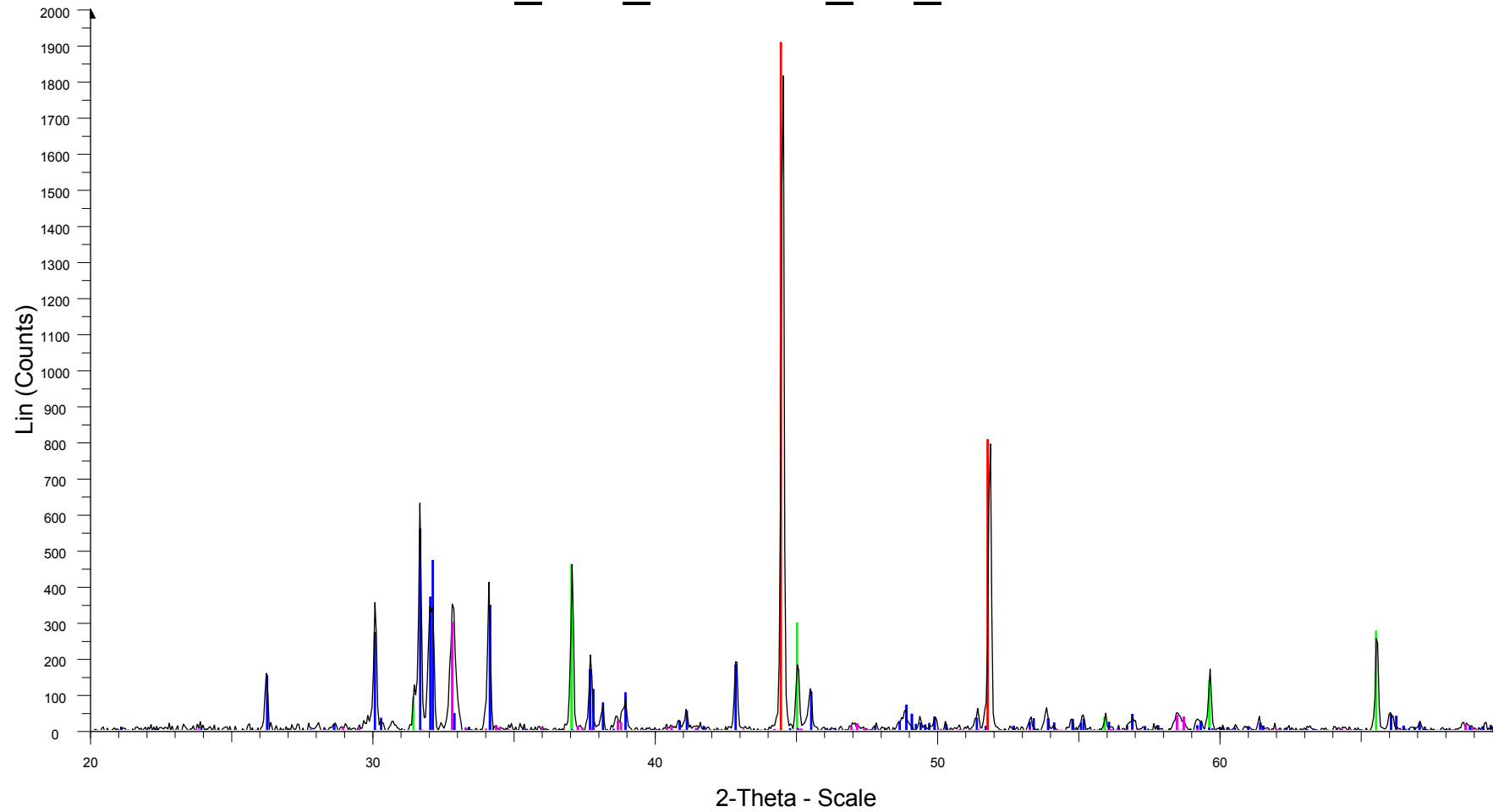
Siderite_NiO_NiAl2O4_O2_20120917



Siderite_NiO_NiAl2O4_O2_20120917 - File: Siderite_NiO_NiAl2O4_O2_20120917.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-17 11:18:02
Operations: Smooth 0.150 | Fourier 16.025 x 1 | Background 0.012,1.000 | Smooth 0.050 | Fourier 15.908 x 1 | Strip kAlpha2 0.167 | Import

- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl₂O₄ - Cubic - S-Q 69.5 %
- 01-071-1179 (*) - Bunsenite - NiO - Cubic - S-Q 22.4 %
- 01-086-1338 (*) - Iron Oxide - Fe₂O₃ - Cubic - S-Q 8.1 %

K2CO3_NiO_NiAl2O4_H2_20121009

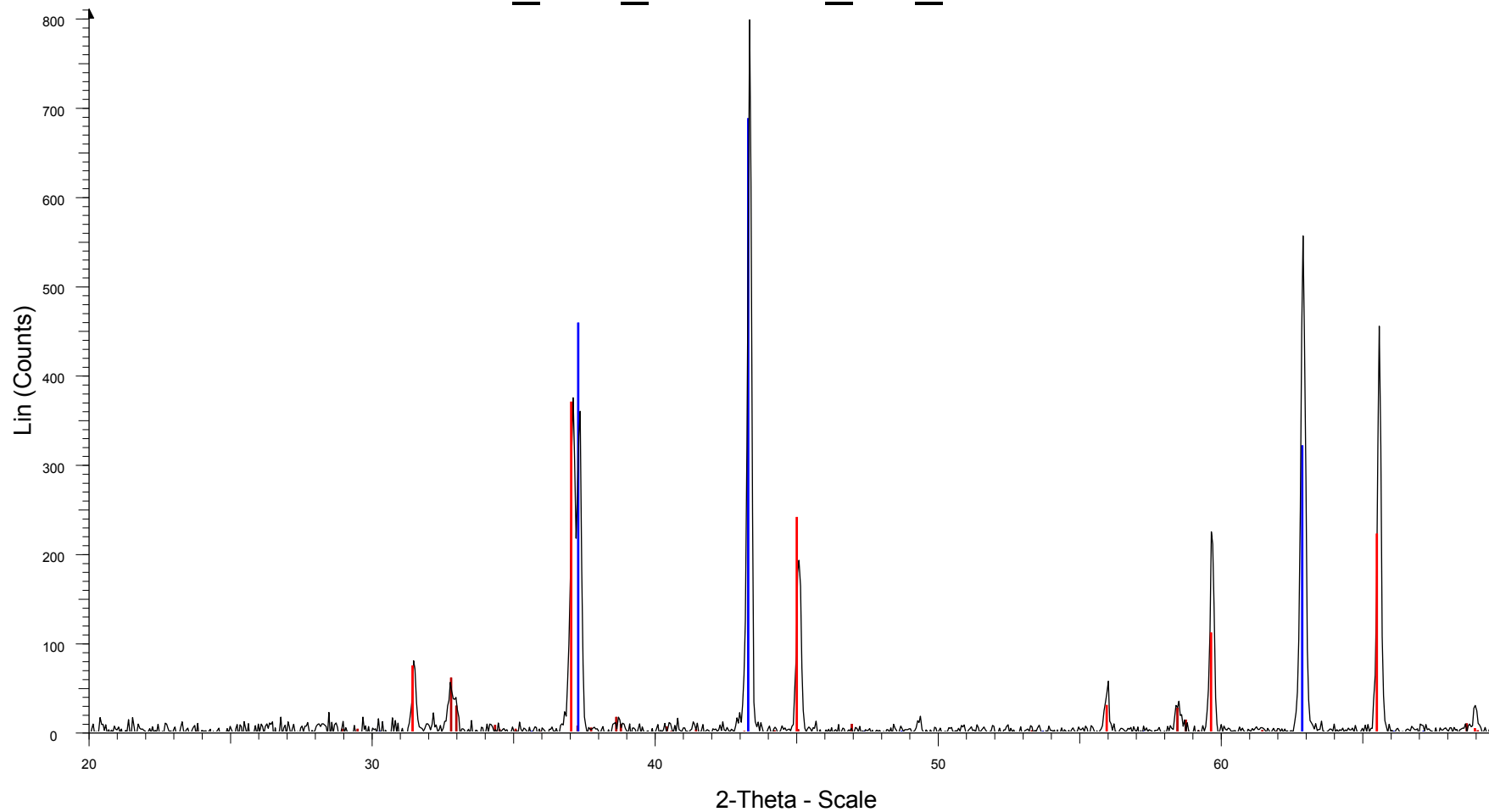


K2CO3_NiO_NiAl2O4_H2_20121009 - File: K2CO3_NiO_NiAl2O4_H2_20121009.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-10-09 10:57:52

Operations: Background 0.813,1.000 | Import

- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 25.6 %
- 01-087-0730 (*) - Potassium Carbonate - K2(CO3) - Monoclinic - S-Q 40.3 %
- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 22.9 %
- 04-008-6553 (*) - Potassium Aluminum Oxide - KAlO2 - Orthorhombic - S-Q 11.1 %

K2CO3_NiO_NiAl2O4_O2_20120924

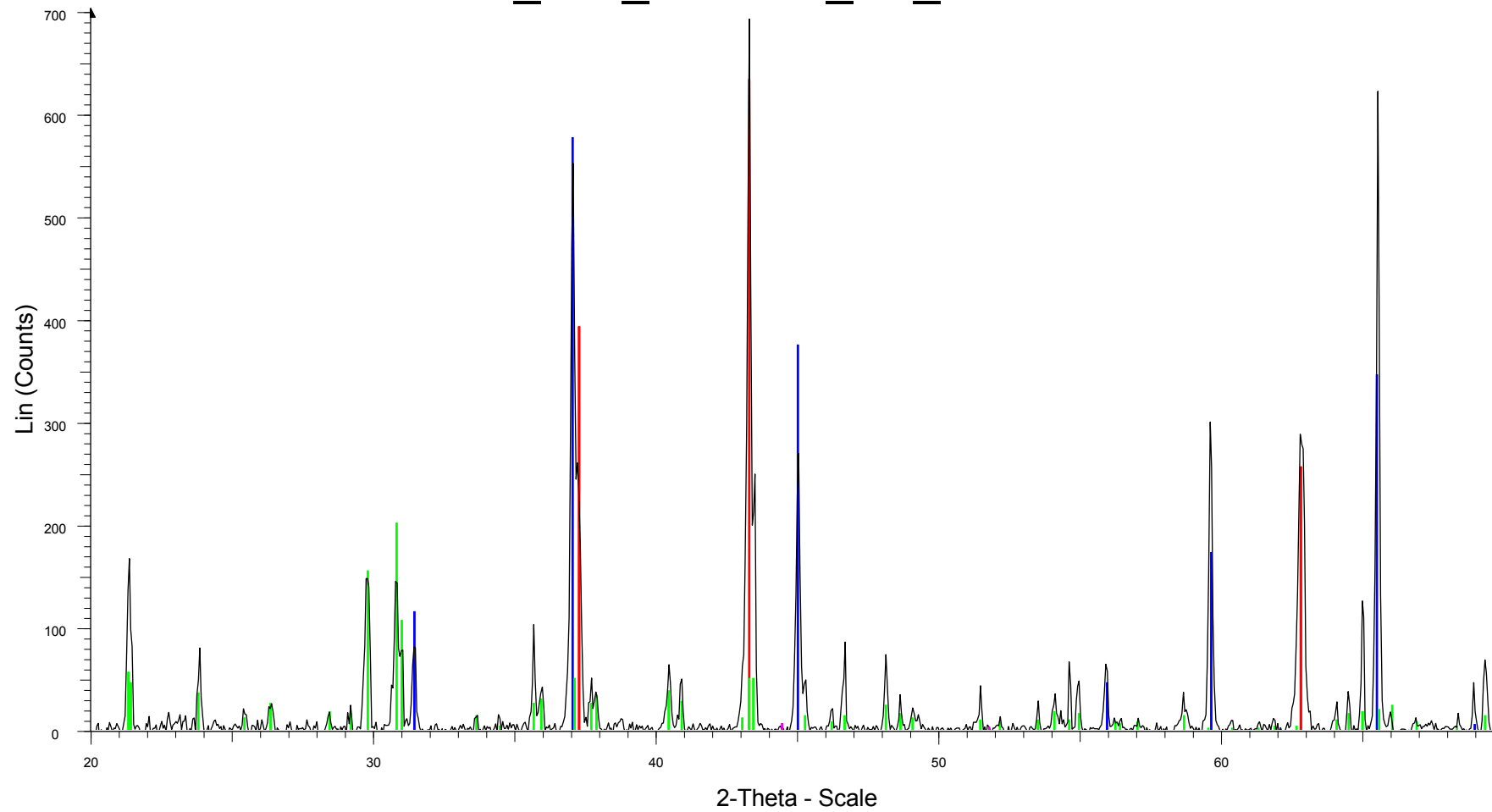


K2CO3_NiO_NiAl2O4_O2_20120924 - File: K2CO3_NiO_NiAl2O4_O2_20120924.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-24 16:07:08

Operations: Background 0.813,1.000 | Import

- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl₂O₄ - Cubic -
- 00-053-0809 (I) - Potassium Aluminum Oxide - KAlO₂ - Orthorhombic -
- 01-089-5881 (I) - Nickel Oxide - NiO - Cubic -

K2SO4_NiO_NiAl2O4_H2_20120913

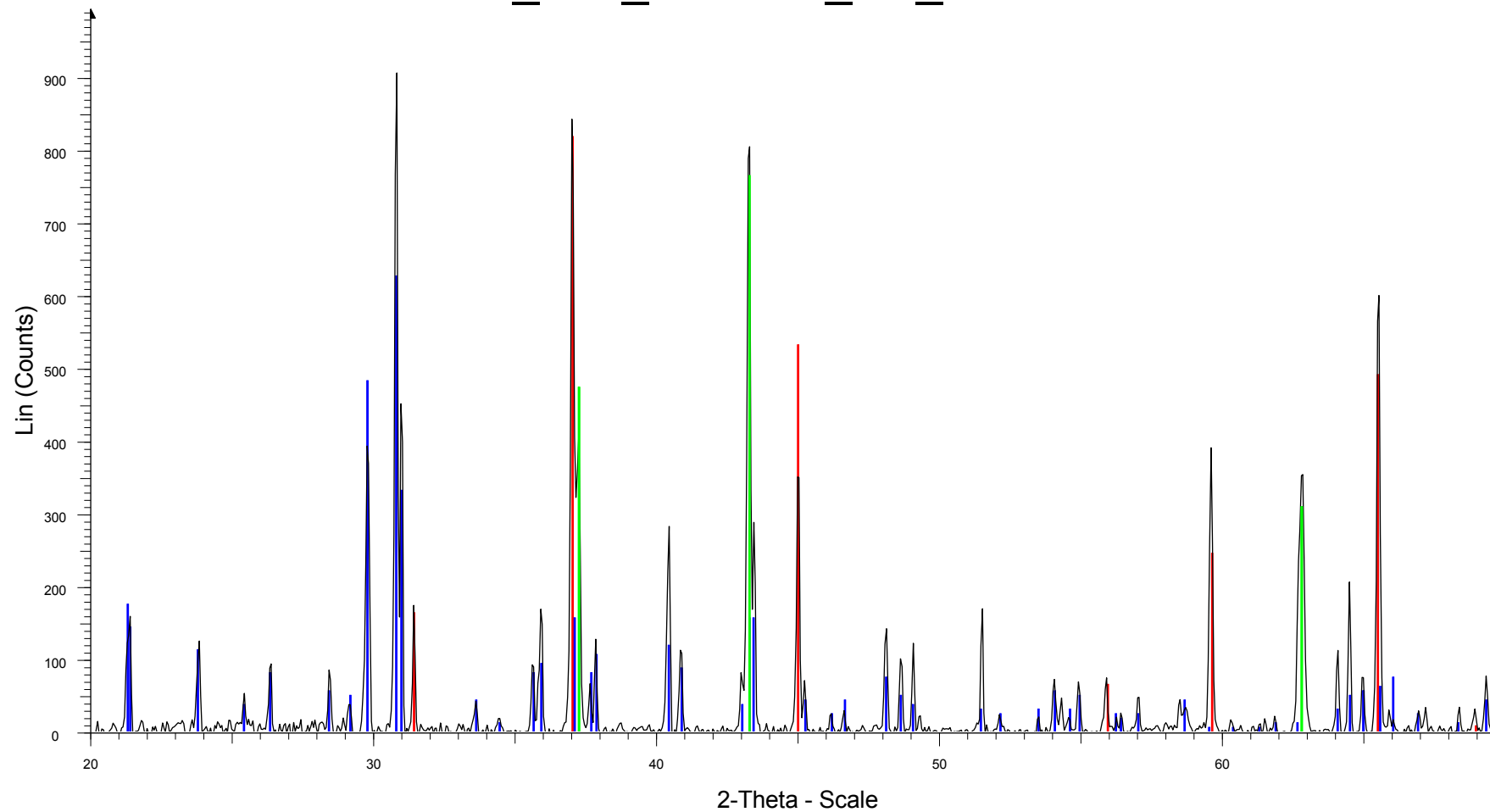


K2SO4_NiO_NiAl2O4_H2_20120913 - File: K2SO4_NiO_NiAl2O4_H2_20120913.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-13 09:25:41

Operations: Background 0.550,1.000 | Import

- 04-011-2340 (*) - Nickel Oxide - NiO - Rhombo.H.axes - S-Q 20.5 %
- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 60.5 %
- 00-005-0613 (I) - Arcanite, syn - K2SO4 - Orthorhombic - S-Q 18.8 %
- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 0.1 %

K2SO4_NiO_NiAl2O4_O2_20120913



K2SO4_NiO_NiAl2O4_O2_20120913 - File: K2SO4_NiO_NiAl2O4_O2_20120913.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-13 09:50:55

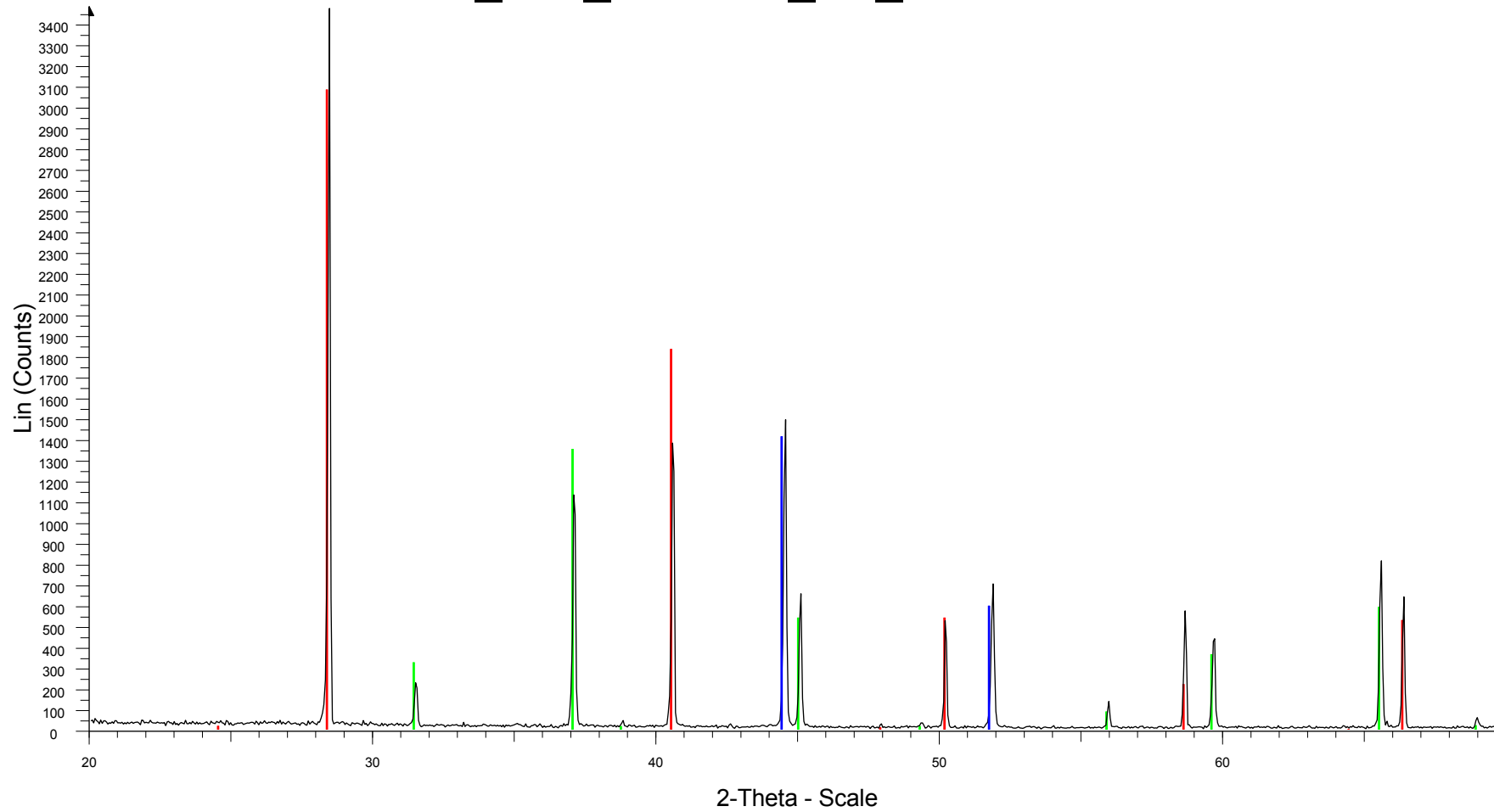
Operations: Fourier 15.869 x 1 | Background 0.550,1.000 | Import

00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl2O4 - Cubic - S-Q 50.8 %

00-005-0613 (I) - Arcanite, syn - K2SO4 - Orthorhombic - S-Q 34.6 %

04-011-2340 (*) - Nickel Oxide - NiO - Rhombo.H.axes - S-Q 14.7 %

KCl_NiO_NiAl2O4_H2_20120914

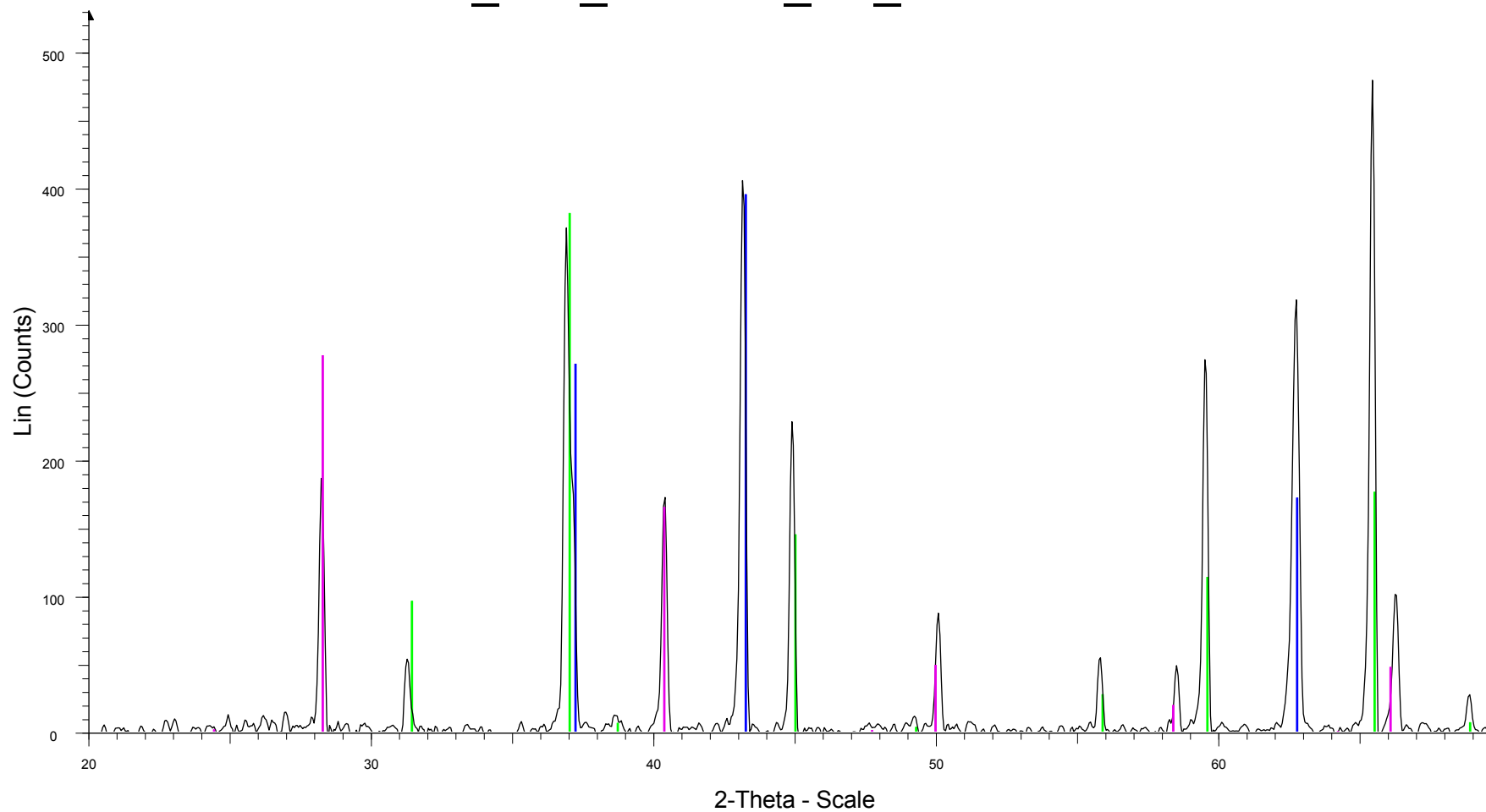


KCl_NiO_NiAl2O4_H2_20120914 - File: KCl_NiO_NiAl2O4_H2_20120914.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-14 09:42:39

Operations: Import

- 04-002-3657 (I) - Sylvite, syn - KCl - Cubic - S-Q 41.8 %
- 01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni.941Al2O3.95 - Cubic - S-Q 42.6 %
- 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - S-Q 15.6 %

KCl_NiO_NiAl2O4_O2_20120914



KCl_NiO_NiAl2O4_O2_20120914 - File: KCl_NiO_NiAl2O4_O2_20120914.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 ° - Step time: 96. s - Creation: 2012-09-14 09:22:47

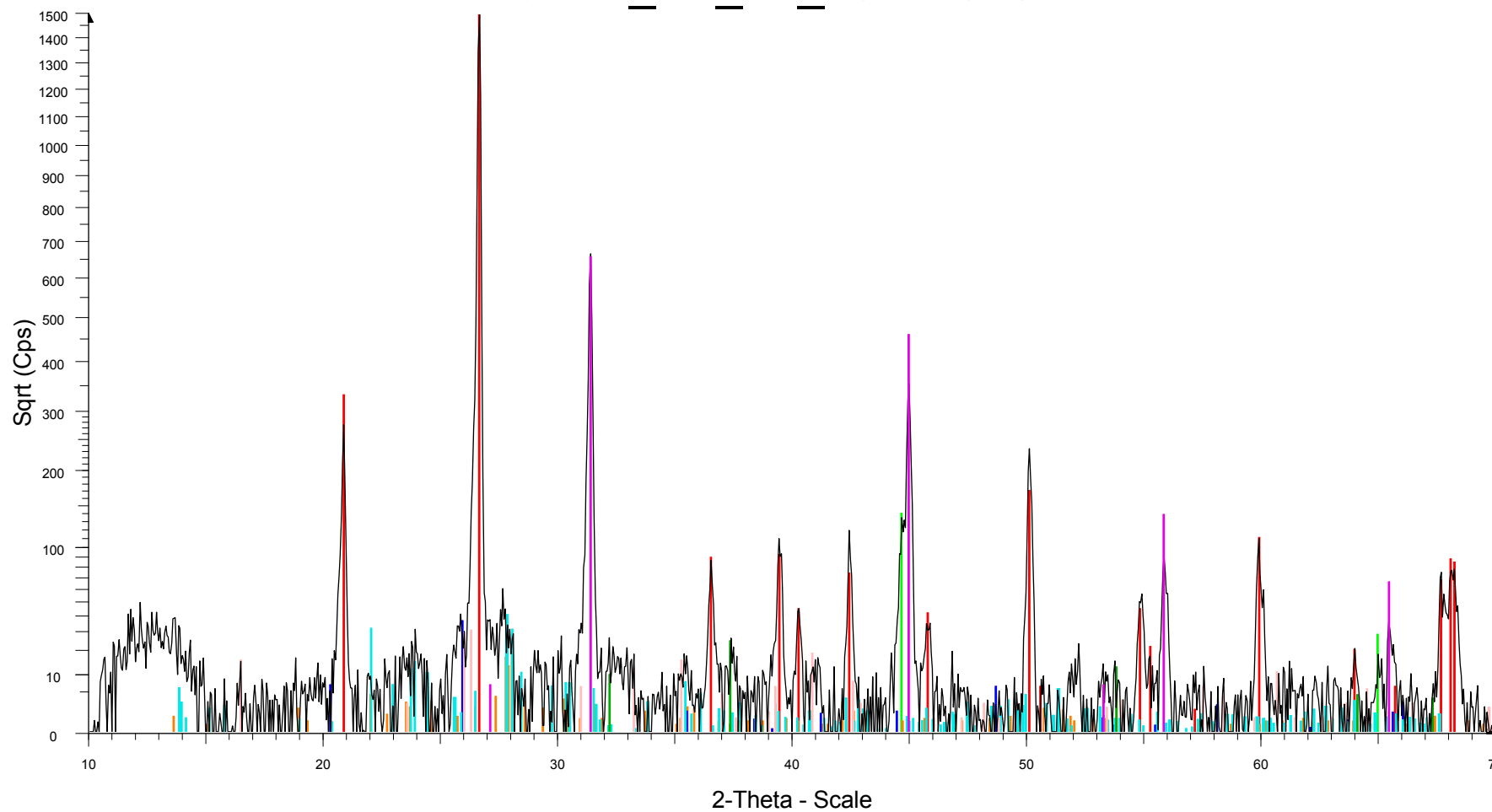
Operations: X Offset 0.042 | X Offset 0.125 | X Offset 0.187 | Smooth 0.150 | Fourier 16.025 x 1 | Background 0.457,1.000 | Import

01-081-0711 (*) - Nickel Aluminum Oxide - (Ni_{0.203}Al_{0.797})(Al_{1.203}Ni_{0.797})O₄ - Cubic - S-Q 51.2 %

04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic - S-Q 31.5 %

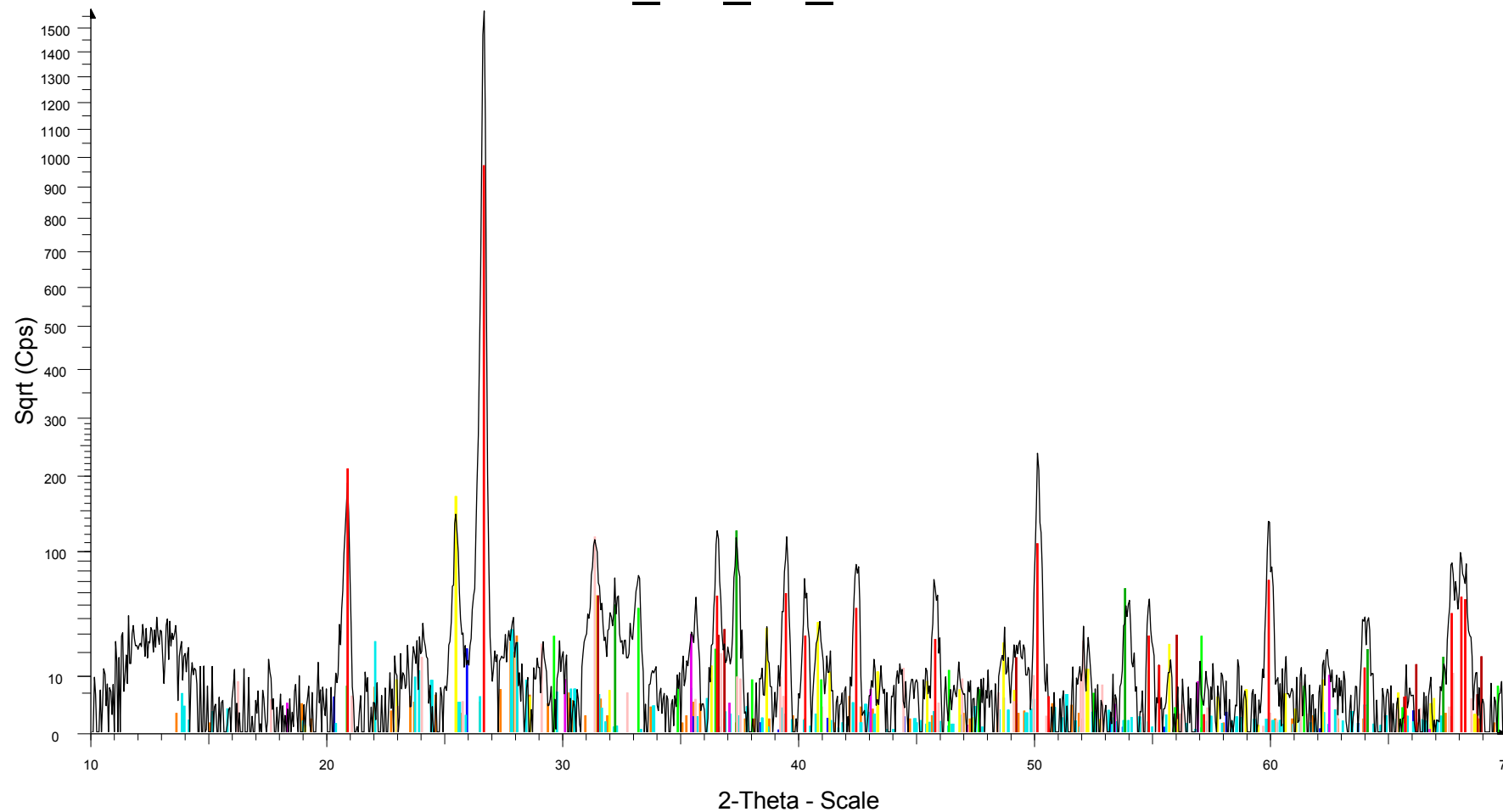
04-012-3360 (I) - Sylvite, syn - KCl - Cubic - S-Q 17.3 %

Brunkol_H2_ref_20121016



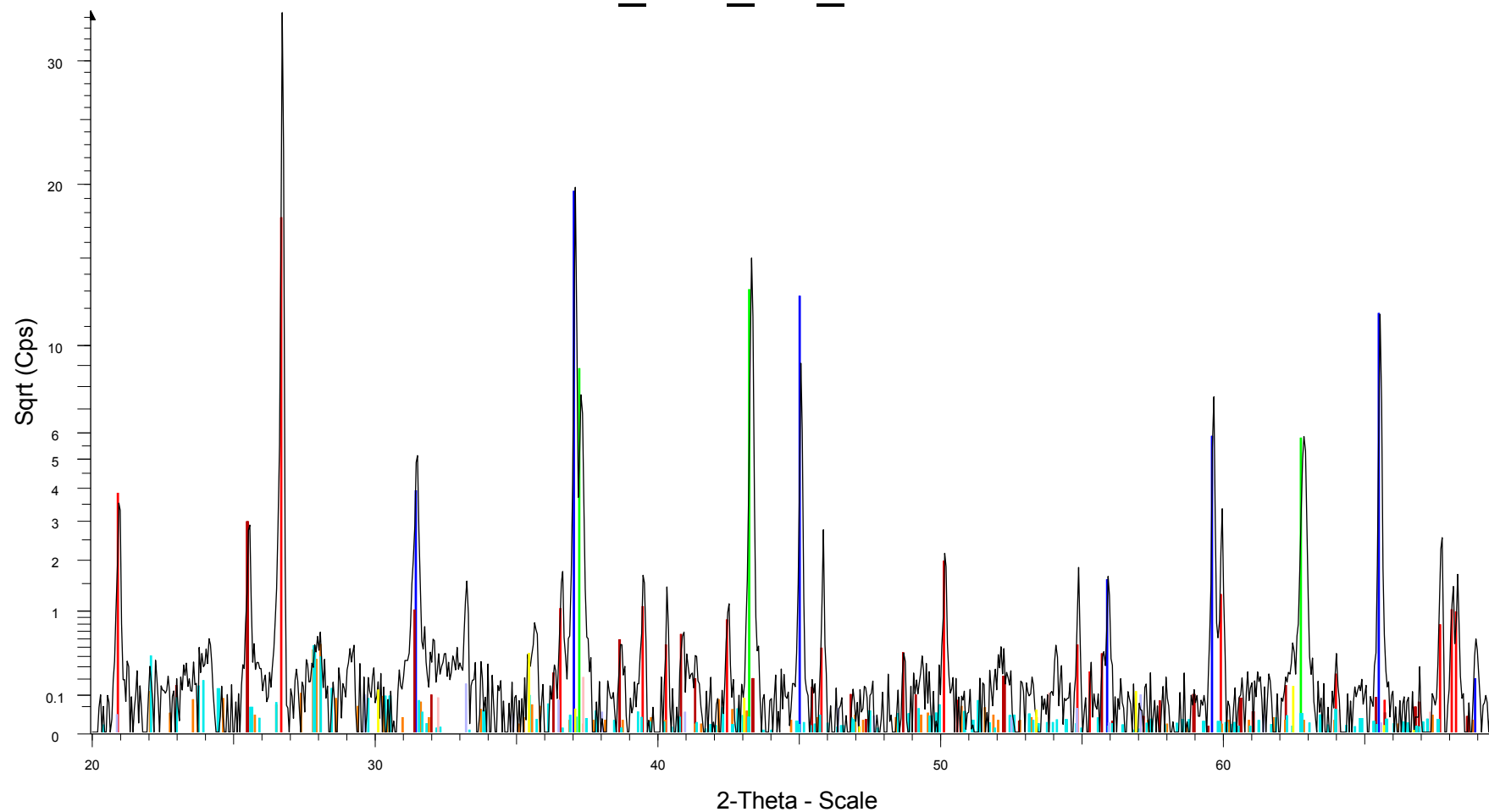
- Brunkol_H2_ref_20121016 - File: Brunkol_H2_ref_20121016.raw - Type: 2Th alone - Step: 0.050 ° - Step
Operations: Background 0.257,1.000 | Import
- 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO₂ - Hexagonal
 - 00-006-0696 (*) - Iron, syn - Fe - Cubic
 - 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic
 - 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO₂ - Hexagonal
 - 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic
 - 00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al₆Si₂O₁₃ - Orthorhombic
 - 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic
 - 00-008-0464 (I) - Oldhamite, syn - CaS - Cubic

Brunkol_O2_ref_20121016



- Brunkol_O2_ref_20121016 - File: Brunkol_O2_ref_20121016.raw - Type: 2Th alone - Step: 0.050 ° - Step
Operations: Background 0.257,1.000 | Import
- | | |
|---|--|
| 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO ₂ - Hexagonal | 04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO ₄) - Orthorhombic |
| 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl ₂ Si ₂ O ₈ - Triclinic | 04-014-4685 (I) - mellilite, syn - Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇ - Tetragonal |
| 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO ₂ - Hexagonal | 04-005-9790 (C) - Iron Oxide - Fe ₃ O _{3.75} - Cubic |
| 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi ₃ O ₈ - Triclinic | 00-010-0288 (*) - Andradite, syn - Ca ₃ Fe ₂₊₃ (SiO ₄) ₃ - Cubic |
| 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic | |
| 01-076-8936 (C) - Magnesium Oxide - MgO - Hexagonal | |

Brunkol_NiO_O2_20121011

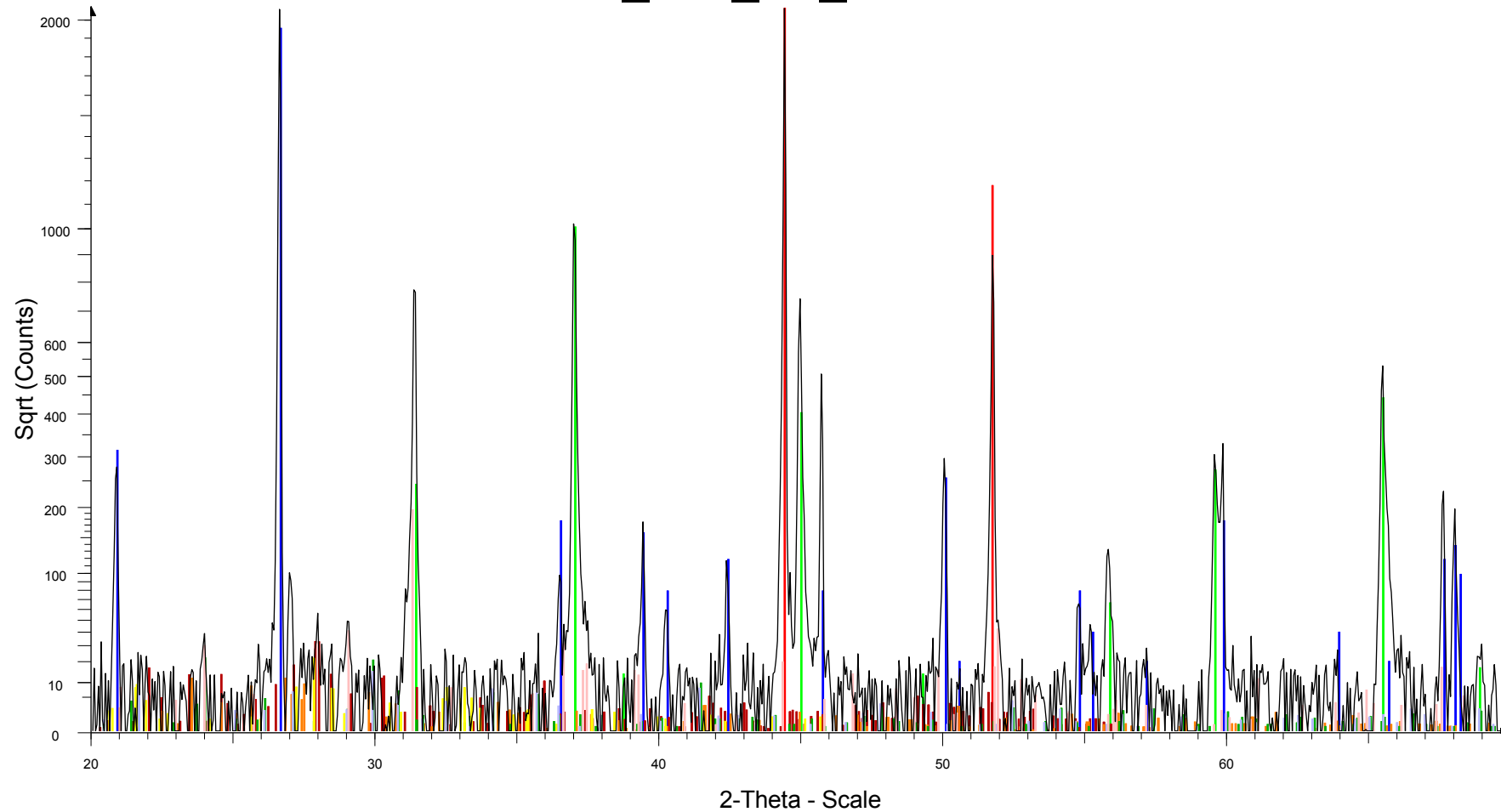


Brunkol_NiO_O2_20121011 - File: Brunkol_NiO_O2_20121011.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050
 Operations: X Offset -0.063 | Background 0.257,1.000 | Import

- 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO₂ - Hexagonal
- 00-010-0339 (*) - Nickel Aluminum Oxide - NiAl₂O₄ - Cubic
- 04-001-9373 (I) - Bunsenite, syn - NiO - Cubic
- 04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO₄) - Orthorhombic
- 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic
- 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic

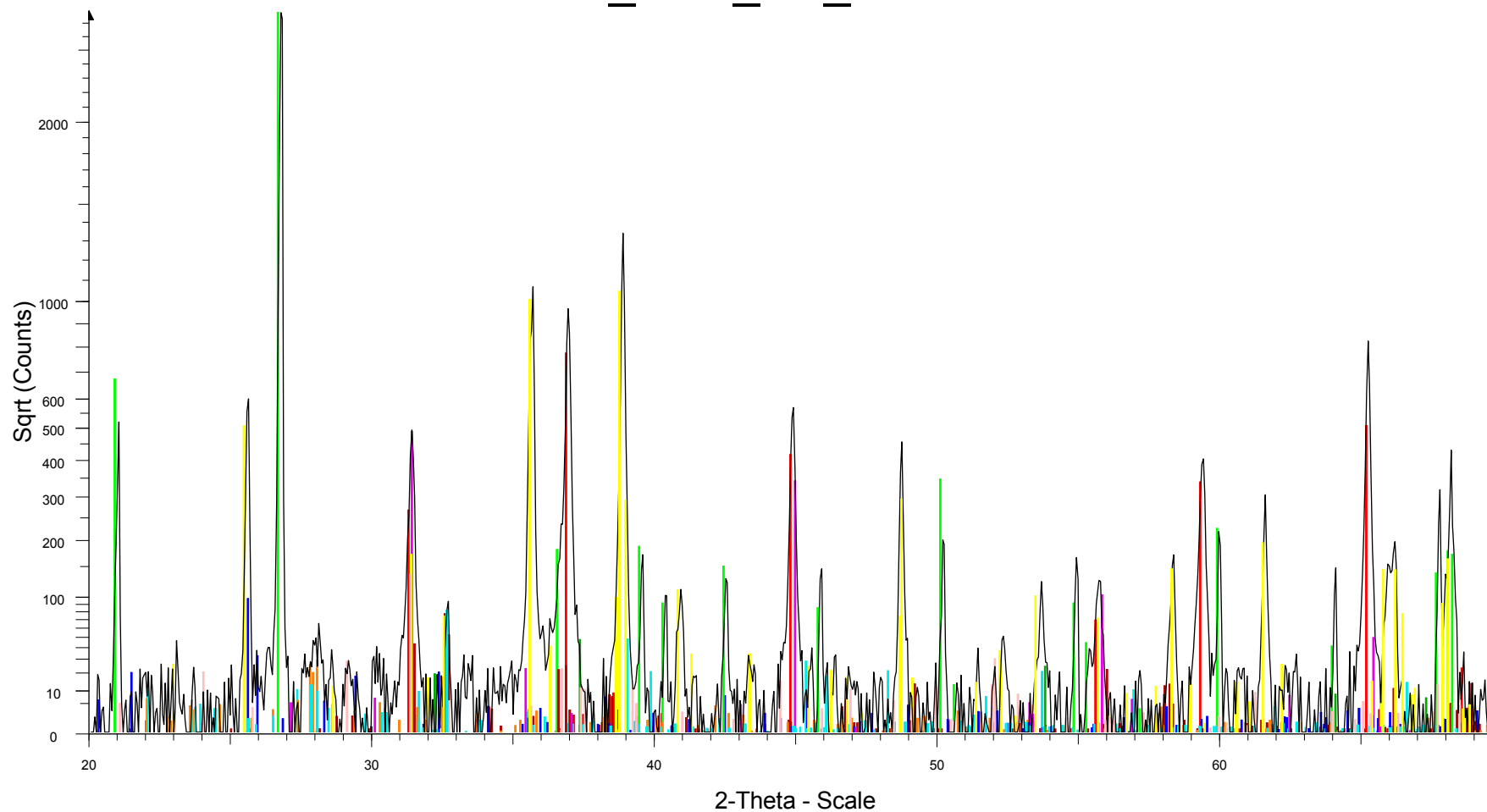
- 04-005-9790 (C) - Iron Oxide - Fe₃O_{3.75} - Cubic
- 00-010-0288 (*) - Andradite, syn - Ca₃Fe₂₊₃(SiO₄)₃ - Cubic
- 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic

Brunkol_NiO_H2_20121011



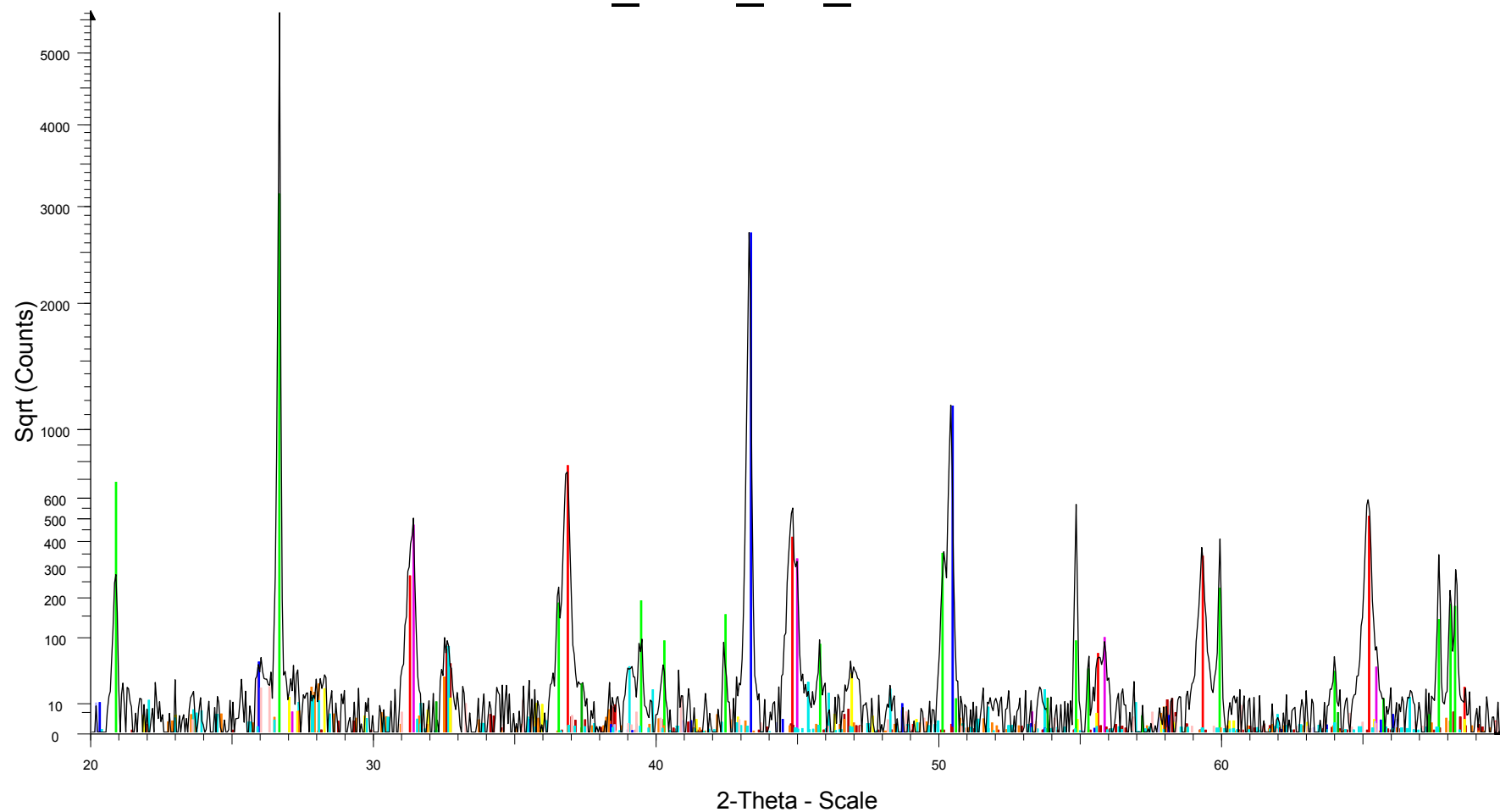
- Brunkol_NiO_H2_20121011 - File: Brunkol_NiO_H2_20121011.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.050 °
 Operations: Background 1.000,1.000 | Import
- | | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> ■ 04-010-6148 (*) - Nickel, syn - Ni - Cubic - ■ 00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO₂ - Hexagonal - ■ 01-078-2182 (*) - Nickel Aluminum Oxide - Ni₉₄Al₂O_{3.95} - Cubic - ■ 04-011-2514 (*) - anorthite - CaAl₂(SiO₄)₂ - Triclinic - ■ 04-009-3700 (I) - orthoclase - KAlSi₃O₈ - Monoclinic - ■ 01-072-9682 (*) - Potassium Silicon Aluminum Oxide - K_{22.4}K₉₆(Si_{96.96}Al_{95.04}O₃₈₄) - Cubic - | <ul style="list-style-type: none"> ■ 00-039-1375 (I) - Phillipsite-Ca - KCa(Si₅Al₃)O₁₆·6H₂O - Monoclinic - ■ 00-043-0147 (C) - Potassium Aluminum Silicate - K_{11.1}Si₁₂Al₁₂O₄₈ - Cubic - ■ 01-076-7530 (I) - Akermanite-Gehlenite, syn - Ca₂(Al_{0.65}Mg_{0.35})(Al_{0.65}Si_{1.35})O₇ - Tetragonal - |
|--|--|

Brunkol_CuO_O2_20121010



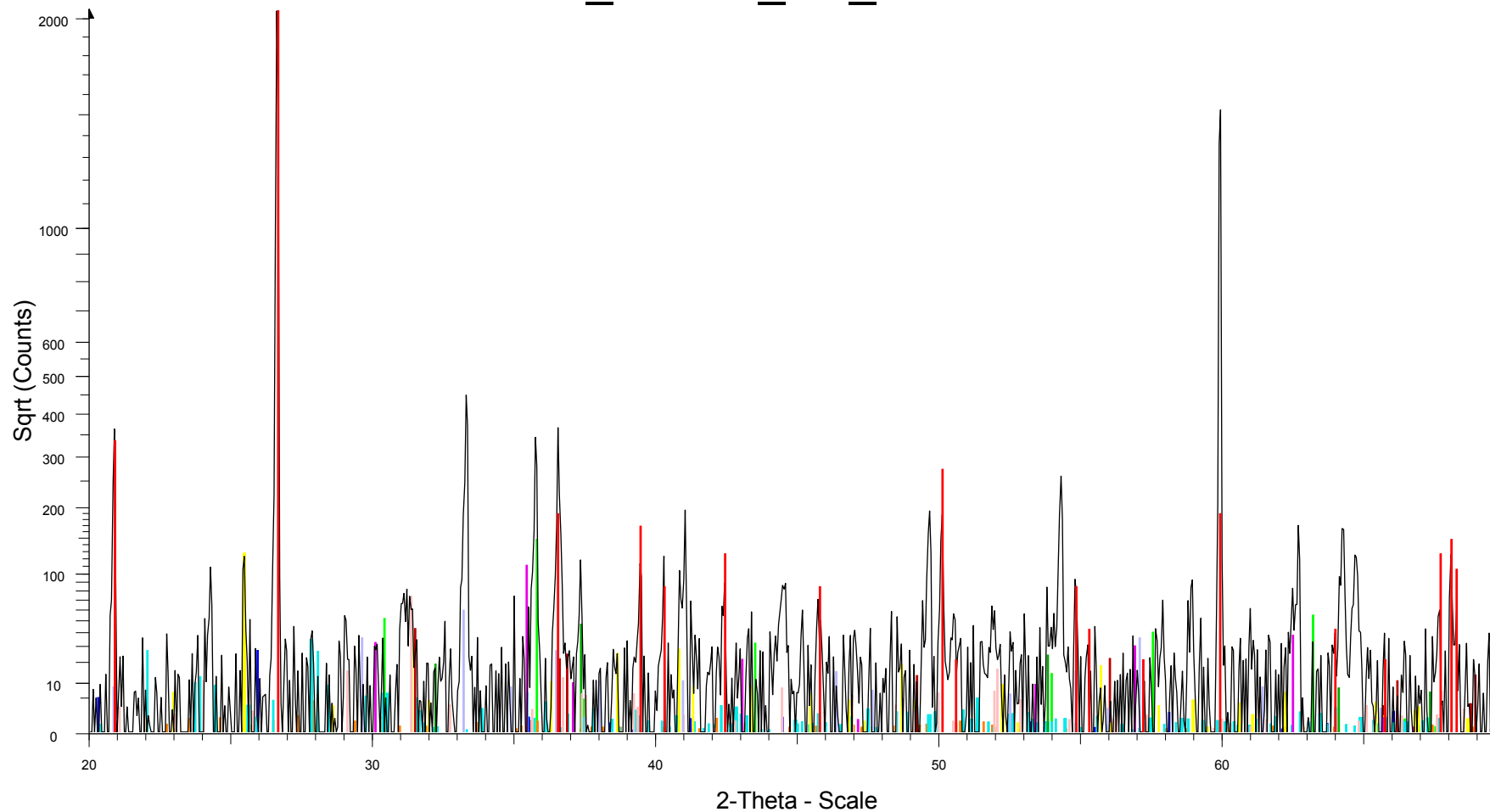
- W Brunkol_CuO_O2_20121010 - File: Brunkol_CuO_O2_20121010.ra
 Operations: Background 1.000,1.000 | Import
- | | | |
|--|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> ■ 01-077-1193 (I) - Magnesium Aluminum Oxide - MgAl₂O₄ - Cubic - ■ 00-008-0464 (I) - Oldhamite, syn - CaS - Cubic - ■ 01-087-1487 (*) - Potassium Magnesium Silicate - K₂Mg(SiO₄) - Or ■ 01-074-7514 (*) - Potassium Aluminum Oxide - K(AlO₂) - Tetragona ■ 04-007-1751 (I) - Copper Sulfide - Cu_{1.96}S - Tetragonal - ■ 04-012-1907 (I) - Potassium Aluminum Silicon Oxide - KAlSi₂O₆ - T | <ul style="list-style-type: none"> ■ 04-007-1375 (*) - Tenorite - CuO - Monoclinic - ■ 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO₂ - Hexagonal - ■ 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - ■ 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO₂ - Hexagonal - ■ 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic - ■ 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic - ■ 01-076-8936 (C) - Magnesium Oxide - MgO - Hexagonal - ■ 04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO₄) - Orthorhombic - | <ul style="list-style-type: none"> ■ 04-014-4685 (I) - melilite, syn - Ca₂Mg_{0.35}Al_{1.3}Si_{1.35}O₇ - Tetrago ■ 04-005-9790 (C) - Iron Oxide - Fe₃O_{3.75} - Cubic - |
|--|---|---|

Brunkol_CuO_H2_20121010



- ▮ Brunkol_CuO_H2_20121010 - File: Brunkol_CuO_H2_20121010.ra
 Operations: Background 1.000,1.000 | Import
- | | | |
|---|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> ▮ 01-077-1193 (I) - Magnesium Aluminum Oxide - MgAl₂O₄ - Cubic - ▮ 04-001-2746 (I) - Copper, syn - Cu_{0.99} - Cubic - ▮ 00-008-0464 (I) - Oldhamite, syn - CaS - Cubic - ▮ 01-087-1487 (*) - Potassium Magnesium Silicate - K₂Mg(SiO₄) - Or ▮ 01-074-7514 (*) - Potassium Aluminum Oxide - K(AlO₂) - Tetragona ▮ 04-007-1751 (I) - Copper Sulfide - Cu_{1.96}S - Tetragonal - | <ul style="list-style-type: none"> ▮ 00-042-1405 (*) - Bornite - Cu₅FeS₄ - Orthorhombic - ▮ 01-080-1387 (*) - Hydrogen Aluminum Silicate - H(AlSi₂O₆) - Hexa ▮ 04-012-5002 (I) - Magnesium Aluminum Silicon Oxide - Mg_{0.2}Al_{0.4} ▮ 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO₂ - Hexagonal - ▮ 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - ▮ 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO₂ - Hexagonal - ▮ 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic - ▮ 00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al₆Si₂O₁₃ - Orthorhombic - | <ul style="list-style-type: none"> ▮ 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic - |
|---|--|--|

Brunkol_Fe2O3_O2_20121011



Brunkol_Fe2O3_O2_20121011 - File: Brunkol_Fe2O3_O2_20121011.raw - Type: 2Th/Th locked - Step:
Operations: Background 1.000,1.000 | Import

01-076-2856 (*) - Magnesioferrite, syn - (Mg_{0.198}Fe_{0.802})(Mg_{0.802}Fe_{1.198})O₄ - Cubic - S-Q 4.1 %

00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO₂ - Hexagonal - S-Q 66.1 %

00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - S-Q 1.5 %

04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO₂ - Hexagonal - S-Q 0.6 %

04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic - S-Q 5.7 %

00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic - S-Q 1.1 %

01-076-8936 (C) - Magnesium Oxide - MgO - Hexagonal - S-Q 2.7 %

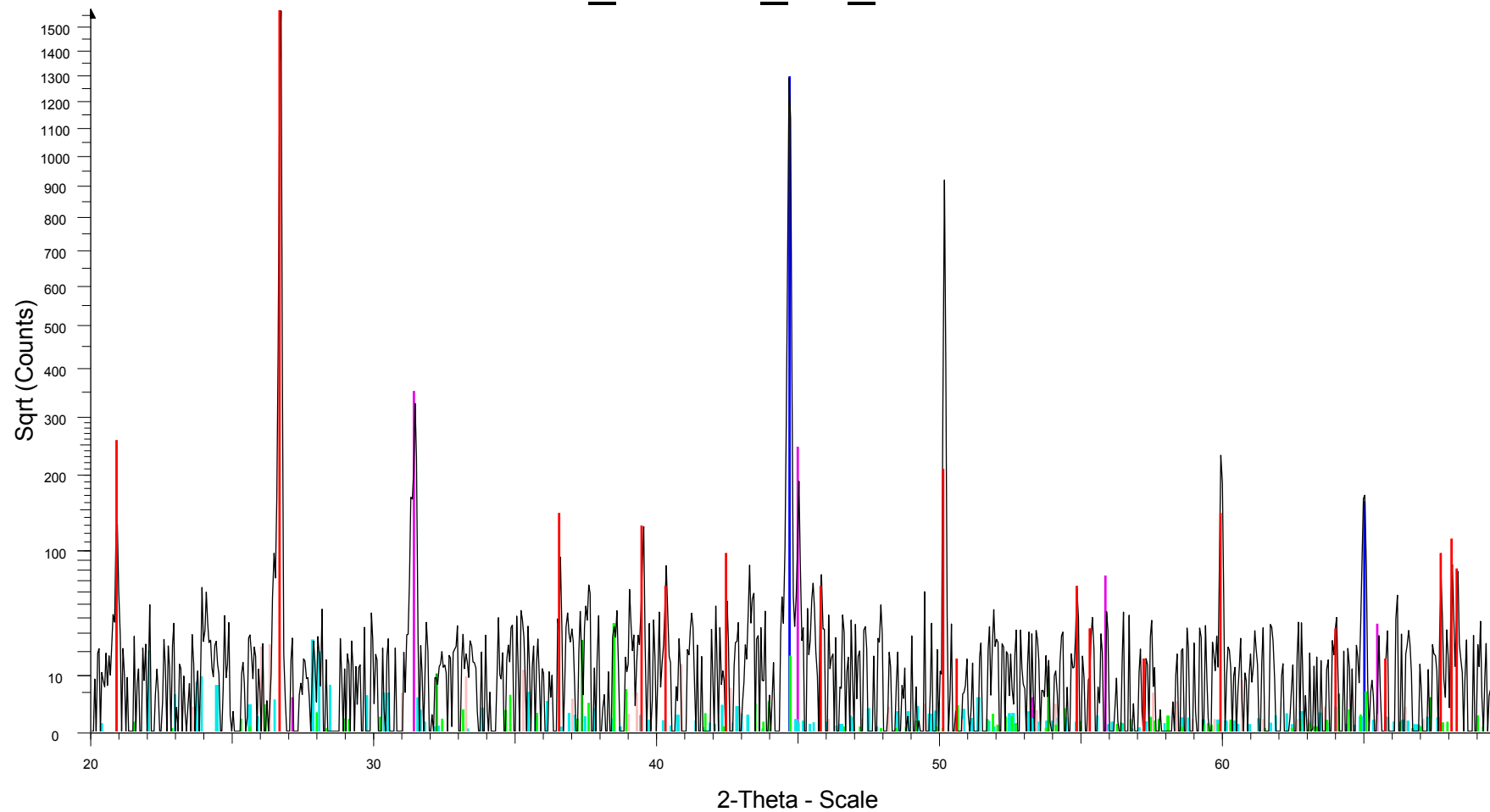
04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO₄) - Orthorhombic - S-Q 7.9 %

04-014-4685 (I) - melilite, syn - Ca₂Mg_{0.35}Al_{1.3}Si_{1.35}O₇ - Tetragonal - S-Q 3.2 %

04-005-9790 (C) - Iron Oxide - Fe₃O_{3.75} - Cubic - S-Q 2.4 %

00-010-0288 (*) - Andradite, syn - Ca₃Fe₂+3(SiO₄)₃ - Cubic - S-Q 4.9 %

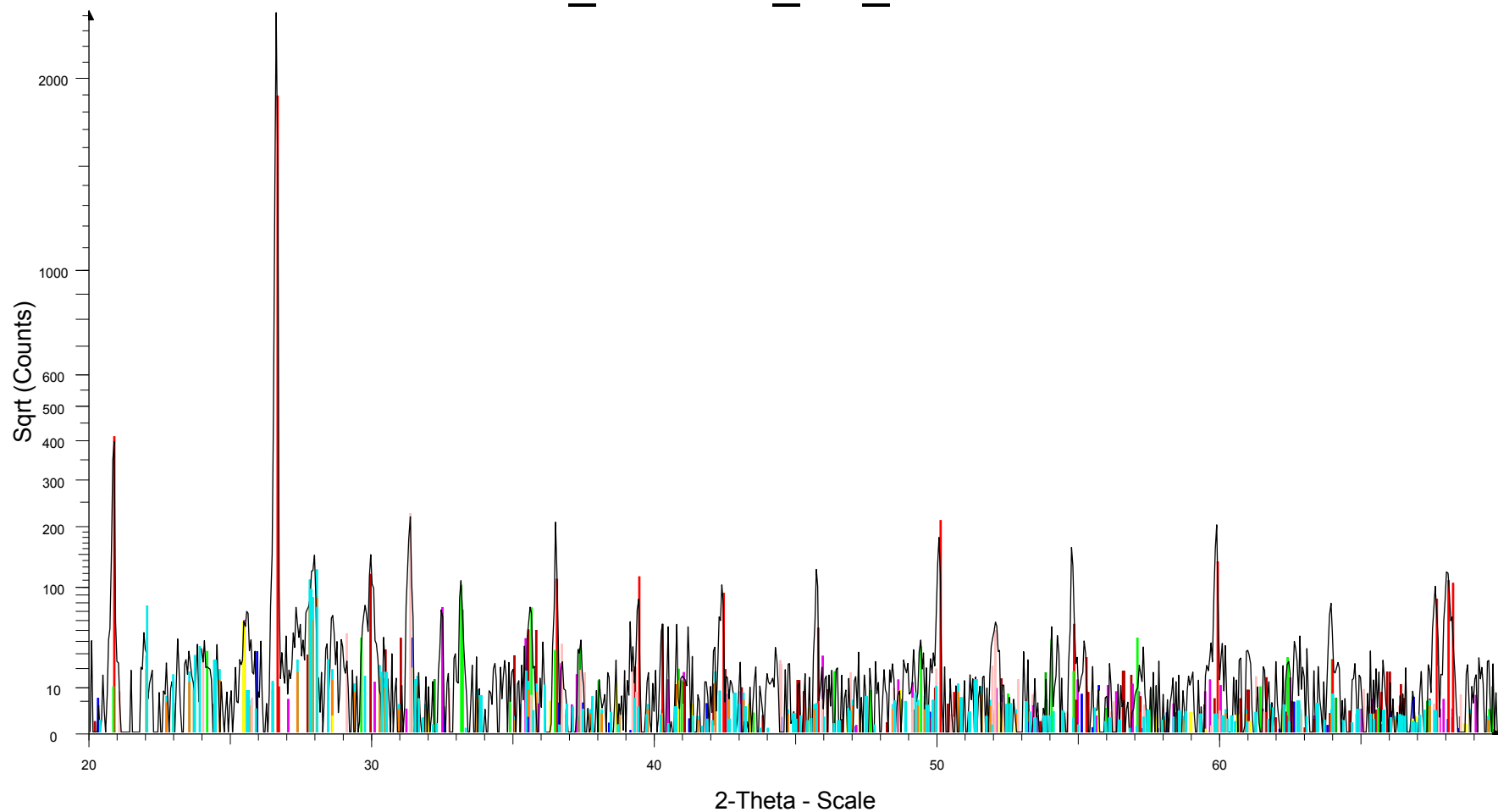
Brunkol_Fe2O3_H2_20121010



Brunkol_Fe2O3_H2_20121010 - File: Brunkol_Fe2O3_H2_20121010.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0 04-013-6959 (C) - Magnesium Silicon - Mg4Si7 - Monoclinic -
Operations: Fourier 16.025 x 1 | Background 1.000,1.000 | Import

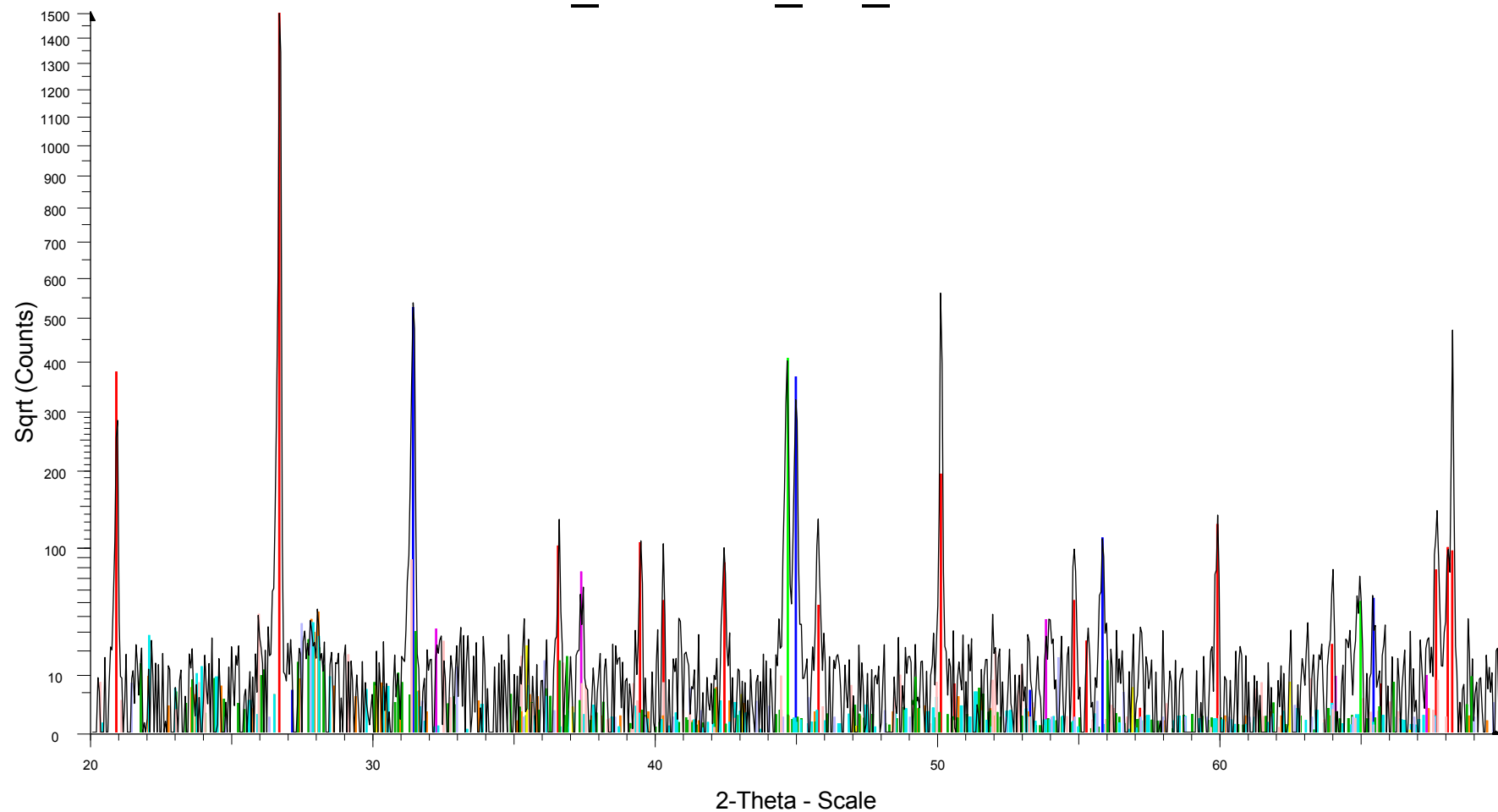
- 00-008-0464 (I) - Oldhamite, syn - CaS - Cubic -
- 00-046-1045 (*) - Quartz, syn - SiO2 - Hexagonal -
- 04-007-9753 (*) - Iron, syn - Fe - Cubic -
- 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi3O8 - Triclinic -
- 00-015-0776 (I) - Mullite, syn - Al6Si2O13 - Orthorhombic -
- 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic -

Brunkol_Illmenite_O2_20121011



- ▣ Brunkol_Illmenite_O2_20121011 - File: Brunkol_Illmenite_O2_20121011.raw - Type: 2Th/Th locked - Ste
 Operations: Background 1.000,1.000 | Import
- | | |
|--|--|
| <ul style="list-style-type: none"> ▣ 04-005-4661 (*) - brookite - TiO₂ - Orthorhombic - ▣ 01-076-9684 (*) - Hematite - Fe₂O₃ - Rhombo.H.axes - ▣ 00-047-0421 (*) - Iron Titanium Oxide - Fe₃Ti₃O₁₀ - Orthorhombic - ▣ 04-013-1858 (*) - clinopyroxene, syn; Diopside, potassian, syn - K_{0.12}Ca_{0.88}Mg_{0.83}Al_{0.19}Si_{1.98}O₆ - M ▣ 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - ▣ 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO₂ - Hexagonal - | <ul style="list-style-type: none"> ▣ 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - ▣ 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO₂ - Hexagonal - ▣ 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic - ▣ 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic - ▣ 04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO₄) - Orthorhombic - ▣ 04-014-4685 (I) - melilite, syn - Ca₂Mg_{0.35}Al_{1.3}Si_{1.35}O₇ - Tetragonal - ▣ 04-005-9790 (C) - Iron Oxide - Fe₃O_{3.75} - Cubic - ▣ 00-010-0288 (*) - Andradite, syn - Ca₃Fe₂₊₃(SiO₄)₃ - Cubic - |
|--|--|

Brunkol_Illmenite_H2_20121006

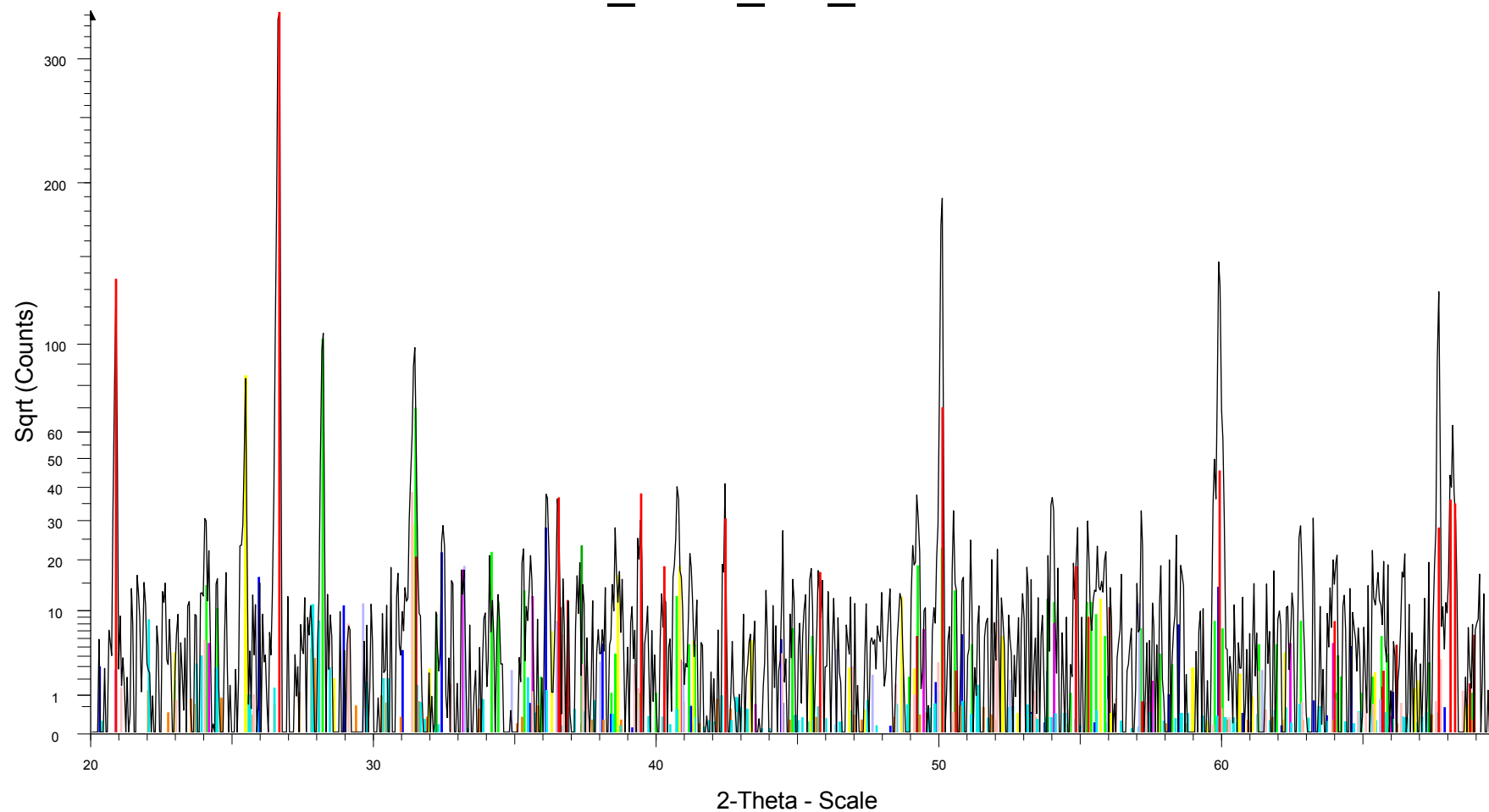


Brunkol_Illmenite_H2_20121006 - File: Brunkol_Illmenite_H2_20121006.raw - Type: 2Th/Th locked - Ste
 Operations: Fourier 19.425 x 1 | Background 0.813,1.000 | Import

- 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO2 - Hexagonal -
- 00-008-0464 (I) - Oldhamite, syn - CaS - Cubic -
- 00-029-0733 (*) - Ilmenite, syn - Fe+2TiO3 - Rhombo.H.axes -
- 04-007-9753 (*) - Iron, syn - Fe - Cubic -
- 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl2Si2O8 - Triclinic -
- 04-002-6758 (I) - Lime, syn - CaO - Cubic -

- 01-087-1790 (I) - Potassium Aluminum Silicate - K(AlSi3O8) - Triclinic -
- 01-076-8936 (C) - Magnesium Oxide - MgO - Hexagonal -
- 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi3O8 - Triclinic -
- 04-005-9790 (C) - Iron Oxide - Fe3O3.75 - Cubic -
- 00-020-0866 (I) - Potassium Calcium Magnesium Sulfate - K2CaMg(SO4)3 - Cubic -
- 01-070-7347 (*) - Rutile - TiO2 - Tetragonal -
- 04-014-4685 (I) - melilite, syn - Ca2Mg0.35Al1.3Si1.35O7 - Tetragonal -
- 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO2 - Hexagonal -

Brunkol_MnO_O2_20121009



Brunkol_MnO_O2_20121009 - File: Brunkol_MnO_O2_20121009.raw - Type: 2Th/Th locked - Step: 0.05
 Operations: Fourier 17.862 x 1 | Fourier 18.448 x 1 | Background 0.813,1.000 | Import

- 00-037-1484 (*) - Baddeleyite, syn - ZrO₂ - Monoclinic - S-Q 10.0 %
- 04-007-1841 (*) - hausmannite - Mn₃O₄ - Tetragonal - S-Q 2.5 %
- 00-033-0664 (*) - Hematite, syn - Fe₂O₃ - Rhombo.H.axes - S-Q 1.9 %
- 04-012-0490 (I) - Quartz Low - SiO₂ - Hexagonal - S-Q 53.0 %
- 00-041-1486 (*) - Anorthite, ordered - CaAl₂Si₂O₈ - Triclinic - S-Q 3.3 %
- 04-013-4798 (A) - Quartz high, syn - SiO₂ - Hexagonal - S-Q 0.8 %

- 04-007-5466 (*) - Albite - NaAlSi₃O₈ - Triclinic - S-Q 4.3 %
- 00-048-1467 (C) - Lime, syn - CaO - Cubic - S-Q 1.3 %
- 01-076-8936 (C) - Magnesium Oxide - MgO - Hexagonal - S-Q 3.1 %
- 04-007-6682 (*) - anhydrite - Ca(SO₄) - Orthorhombic - S-Q 12.4 %
- 04-014-4685 (I) - melillite, syn - Ca₂Mg_{0.35}Al_{1.3}Si_{1.35}O₇ - Tetragonal - S-Q 3.9 %
- 00-010-0288 (*) - Andradite, syn - Ca₃Fe₂₊₃(SiO₄)₃ - Cubic - S-Q 3.6 %

Bilaga 3

NiO

	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
CaCO ₃ , H ₂	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al ₂ O ₃ .95	Cubic	36,7
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	34,5
	01-070-5490 (*)	Lime, syn	CaO	Cubic	15
	00-044-1481 (*)	Portlandite, syn	Ca(OH) ₂	Hexagonal	13,8
CaCO ₃ , O ₂	04-011-8430 (I)	Calcium Oxide	CaO	Cubic	51,7
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	32,9
	01-089-3080 (I)	Nickel Oxide	NiO	Rhombo.H.	15,4
Illite, H ₂	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	14,2
	01-075-8322 (*)	Quartz	SiO ₂	Hexagonal	25,6
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al ₂ O ₃ .95	Cubic	13,1
	00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	32,7
	01-087-1790 (I)	Potassium Aluminum Silica	K(AlSi ₃ O ₈)	Triclinic	14,5
Illite, O ₂	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	24,9
	04-007-5667 (C)	Ringwoodite, syn	Mg ₂ SiO ₄	Cubic	16,2
	00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO ₂	Hexagonal	15,4
	01-087-1790 (I)	Potassium Aluminum Silica	K(AlSi ₃ O ₈)	Triclinic	13,5
	00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	12,1
	04-001-9373 (I)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic	9,6
	04-013-1858 (*)	clinopyroxene, syn; Diopsid	K _{0.12} Ca _{0.88} Mg _{0.83} Al _{0.19} Si	Monoclinic	8,3
K ₂ CO ₃ , H ₂	01-087-0730 (*)	Potassium Carbonate	K ₂ (CO ₃)	Monoclinic	40,3
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	25,6
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	22,9

	04-008-6553 (*)	Potassium Aluminum Oxide	KAlO ₂	Orthorhombic	11,1
K₂CO₃, O₂	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	01-089-5881 (I)	Nickel Oxide	NiO	Cubic	
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	
	00-053-0809 (I)	Potassium Aluminum Oxide	KAlO ₂	Orthorhombic	
K₂SO₄, H₂	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	04-011-2340 (*)	Nickel Oxide	NiO	Rhombo.H.	20,5
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	60,5
	00-005-0613 (I)	Arcanite, syn	K ₂ SO ₄	Orthorhombic	18,8
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	0,1
K₂SO₄, O₂	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	50,8
	00-005-0613 (I)	Arcanite, syn	K ₂ SO ₄	Orthorhombic	34,6
	04-011-2340 (*)	Nickel Oxide	NiO	Rhombo.H.	14,7
Kaolinite, H₂	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni _{0.941} Al ₂ O _{3.95}	Cubic	
	00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO ₂	Hexagonal	
	00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al ₆ Si ₂ O ₁₃	Orthorhombic	
	04-009-3700 (I)	orthoclase	KAlSi ₃ O ₈	Monoclinic	
Kaolinite, O₂	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄	Cubic	
	04-001-9373 (I)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic	
	00-046-0741 (I)	Potassium Aluminum Silica	KAl ₃ Si ₃ O ₁₁	Monoclinic	
	00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al ₆ Si ₂ O ₁₃	Orthorhombic	
	04-009-3700 (I)	orthoclase	KAlSi ₃ O ₈	Monoclinic	
KCl, H₂	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni _{0.941} Al ₂ O _{3.95}	Cubic	42,6
	04-002-3657 (I)	Sylvite, syn	KCl	Cubic	41,8
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	15,6

	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
KCl, O2	01-081-0711 (*)	Nickel Aluminum Oxide	(Ni0.203Al0.797)(Al1.203Ni0.797)	Cubic	51,2
	04-001-9373 (I)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic	31,5
	04-012-3360 (I)	Sylvite, syn	KCl	Cubic	17,3
Montmorillonite, H2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	
	01-078-2180 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al2O3.94	Cubic	
	04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO2	Hexagonal	
	00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO2	Hexagonal	
	04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi3O8	Triclinic	
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al6Si2O13	Orthorhombic		
Montmorillonite, O2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	04-001-9373 (I)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic	
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl2O4	Cubic	
	00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO2	Hexagonal	
	04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi3O8	Triclinic	
	00-060-0061 (*)	Magnesium Aluminum Silicate	Mg2Al4Si5O18	Orthorhombic	
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al6Si2O13	Orthorhombic		
Pyrite, H2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al2O3.95	Cubic	
	04-013-1953 (I)	pentlandite, syn	Fe4.6Ni4.4S8	Cubic	
	01-075-8674 (I)	Pentlandite, syn	(Ni4.26Fe4.74)S8	Cubic	
04-012-0858 (I)	Iron Sulfide	FeS	Monoclinic		
Pyrite, O2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	01-081-0711 (*)	Nickel Aluminum Oxide	(Ni0.203Al0.797)(Al1.203Ni0.797)	Cubic	51,3
	04-001-9373 (I)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic	30,9
01-076-8400 (*)	Hematite, syn	Fe2O3	Rhombo.H.	17,8	
Quartz, H2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	01-076-9281 (I)	Quartz alpha, syn	SiO2	Hexagonal	68,7
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	16,7
01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al2O3.95	Cubic	14,6	

	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
Quartz, O2	01-076-9282 (I)	Quartz alpha, syn	SiO2	Hexagonal	50
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl2O4	Cubic	40,6
	00-047-1049 (*)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic	9,4
Siderite, H2	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl2O4	Cubic	65,4
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	24,4
	04-007-9753 (*)	Iron, syn	Fe	Cubic	7,5
	01-085-0625 (I)	Iron Oxide	Fe.942O	Rhombo.H.	2,7
Siderite, O2	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl2O4	Cubic	69,5
	01-071-1179 (*)	Bunsenite	NiO	Cubic	22,4
	01-086-1338 (*)	Iron Oxide	Fe2.910O4	Cubic	8,1
Flygaska, H2	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic	
	00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
	01-089-1961 (I)	Quartz low, syn	SiO2	Hexagonal	
	00-035-0591 (*)	Merwinite, syn	Ca3Mg(SiO4)2	Monoclinic	
	00-029-0726 (*)	Pyrrhotite-11T	Fe1-xS	Hexagonal	
	00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	
	04-009-5447 (N)	Magnesium Oxide	MgO	Cubic	
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al2O3.95	Cubic	
Flygaska, O2	04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO4)	Orthorhombic	
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al2O3.95	Cubic	
	04-011-2340 (*)	Nickel Oxide	NiO	Rhombo.H.axes	
	01-075-8322 (*)	Quartz	SiO2	Hexagonal	
	00-039-1346 (*)	Maghemite-C, syn	Fe2O3	Cubic	
	04-014-6631 (*)	brownmillerite, syn	Ca2Fe1.559Al0.441O5	Orthorhombic	
	00-045-0946 (*)	Periclase, syn	MgO	Cubic	
	00-035-0591 (*)	Merwinite, syn	Ca3Mg(SiO4)2	Monoclinic	
	01-070-2516 (I)	Quartz low, syn	SiO2	Hexagonal	

Brunkol

	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System S-Q
NiO/NiAl ₂ O ₄ , H2	00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO ₂	Hexagonal
	04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic
	01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al ₂ O _{3.95}	Cubic
	04-009-3700 (I)	orthoclase	KAlSi ₃ O ₈	Monoclinic
	04-011-2514 (*)	anorthite	CaAl ₂ (SiO ₄) ₂	Triclinic
	00-039-1375 (I)	Phillipsite-Ca	KCa(Si ₅ Al ₃)O ₁₆ ·6H ₂ O	Monoclinic
	00-043-0147 (C)	Potassium Aluminum Silicate	K _{11.1} Si ₁₂ Al ₁₂ O ₄₈	Cubic
	01-076-7530 (I)	Akermanite-Gehlenite, syn	Ca ₂ (Al _{0.65} Mg _{0.35})(Al _{0.65} Si _{1.35})O ₇	Tetragonal
	01-072-9682 (*)	Potassium Silicon Aluminum Oxide	K _{22.4} K ₉₆ (Si _{96.96} Al _{95.04} O ₃₈₄)	Cubic
	NiO/NiAl ₂ O ₄ , O2	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl ₂ O ₄
04-012-0490 (I)		Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal
04-001-9373 (I)		Bunsenite, syn	NiO	Cubic
04-007-6682 (*)		anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhombic
00-041-1486 (*)		Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic
04-007-5466 (*)		Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic
00-048-1467 (C)		Lime, syn	CaO	Cubic
04-005-9790 (C)		Iron Oxide	Fe ₃ O _{3.75}	Cubic
00-010-0288 (*)		Andradite, syn	Ca ₃ Fe ₂₊₃ (SiO ₄) ₃	Cubic
CuO H2		04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂
	04-001-2746 (I)	Copper, syn	Cu _{0.99}	Cubic
	01-077-1193 (I)	Magnesium Aluminum Oxide	MgAl ₂ O ₄	Cubic
	00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic
	01-087-1487 (*)	Potassium Magnesium Silicate	K ₂ Mg(SiO ₄)	Orthorhombic
	01-074-7514 (*)	Potassium Aluminum Oxide	K(AlO ₂)	Tetragonal
	04-007-1751 (I)	Copper Sulfide	Cu _{1.96} S	Tetragonal
	00-042-1405 (*)	Bornite	Cu ₅ FeS ₄	Orthorhombic
	01-080-1387 (*)	Hydrogen Aluminum Silicate	H(AlSi ₂ O ₆)	Hexagonal
	04-012-5002 (I)	Magnesium Aluminum Silicon Oxide	Mg _{0.2} Al _{0.4} Si _{0.6} O ₂	Hexagonal
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	

04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al ₆ Si ₂ O ₁₃	Orthorhombic
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic

CuO, O2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal	
04-007-1375 (*)	Tenorite	CuO	Monoclinic	
01-077-1193 (I)	Magnesium Aluminum Oxide	MgAl ₂ O ₄	Cubic	
00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
01-087-1487 (*)	Potassium Magnesium Silicate	K ₂ Mg(SiO ₄)	Orthorhombic	
01-074-7514 (*)	Potassium Aluminum Oxide	K(AlO ₂)	Tetragonal	
04-007-1751 (I)	Copper Sulfide	Cu _{1.96} S	Tetragonal	
04-012-1907 (I)	Potassium Aluminum Silicon Oxide	KAlSi ₂ O ₆	Tetragonal	
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	
04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	
01-076-8936 (C)	Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	
04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhombic	
04-014-4685 (I)	melilite, syn	Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇	Tetragonal	
04-005-9790 (C)	Iron Oxide	Fe ₃ O _{3.75}	Cubic	

Fe₂O₃, H2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO ₂	Hexagonal	
04-007-9753 (*)	Iron, syn	Fe	Cubic	
00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al ₆ Si ₂ O ₁₃	Orthorhombic	
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	
04-013-6959 (C)	Magnesium Silicon	Mg ₄ Si ₇	Monoclinic	

Fe₂O₃, O2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
00-046-1045 (*)	Quartz, syn	SiO ₂	Hexagonal	63,4
01-076-2856 (*)	Magnesioferrite, syn	(Mg _{0.198} Fe _{0.802})(Mg _{0.802} Fe _{1.198})O ₄	Cubic	2,5
00-010-0288 (*)	Andradite, syn	Ca ₃ Fe ₂₊₃ (SiO ₄) ₃	Cubic	10,2
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	1,4

04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	0,5
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	5,5
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	1,1
01-076-8936 (C)	Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	2,6
04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhombic	7,5
04-014-4685 (I)	melilite, syn	Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇	Tetragonal	3
04-005-9790 (C)	Iron Oxide	Fe ₃ O _{3.75}	Cubic	2,3

Ilmenite, H2

	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)		Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal	
00-008-0464 (I)		Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
00-029-0733 (*)		Ilmenite, syn	Fe+2TiO ₃	Rhombo.H.axes	
04-007-9753 (*)		Iron, syn	Fe	Cubic	
00-041-1486 (*)		Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	
04-002-6758 (I)		Lime, syn	CaO	Cubic	
01-087-1790 (I)		Potassium Aluminum Silicate	K(AlSi ₃ O ₈)	Triclinic	
01-076-8936 (C)		Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	
04-007-5466 (*)		Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	
04-005-9790 (C)		Iron Oxide	Fe ₃ O _{3.75}	Cubic	
00-020-0866 (I)		Potassium Calcium Magnesium Sulfate	K ₂ CaMg(SO ₄) ₃	Cubic	
01-070-7347 (*)		Rutile	TiO ₂	Tetragonal	
04-014-4685 (I)		melilite, syn	Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇	Tetragonal	
04-013-4798 (A)		Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	

Ilmenite, O2

	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)		Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal	
04-014-4685 (I)		melilite, syn	Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇	Tetragonal	
04-007-5466 (*)		Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	
04-005-4661 (*)		brookite	TiO ₂	Orthorhombic	
01-076-9684 (*)		Hematite	Fe ₂ O ₃	Rhombo.H.axes	
00-047-0421 (*)		Iron Titanium Oxide	Fe ₃ Ti ₃ O ₁₀	Orthorhombic	
04-013-1858 (*)		clinopyroxene, syn; Diopside, potassian, s	K _{0.12} Ca _{0.88} Mg _{0.83} Al _{0.19} Si _{1.98} O ₆	Monoclinic	
00-041-1486 (*)		Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	
04-013-4798 (A)		Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	
00-048-1467 (C)		Lime, syn	CaO	Cubic	
04-007-6682 (*)		anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhombic	

04-005-9790 (C)	Iron Oxide	Fe ₃ O _{3.75}	Cubic
00-010-0288 (*)	Andradite, syn	Ca ₃ Fe ₂ +3(SiO ₄) ₃	Cubic

Mn₃O₄, H2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal	
00-037-1484 (*)	Baddeleyite, syn	ZrO ₂	Monoclinic	
00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
04-003-1517 (I)	Alabandite, syn	MnS	Cubic	
00-006-0696 (*)	Iron, syn	Fe	Cubic	
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	
04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al ₆ Si ₂ O ₁₃	Orthorhombic	
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	

Mn₃O₄, O2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal	53
00-037-1484 (*)	Baddeleyite, syn	ZrO ₂	Monoclinic	10
04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhomt	12,4
04-007-1841 (*)	hausmannite	Mn ₃ O ₄	Tetragonal	2,5
00-033-0664 (*)	Hematite, syn	Fe ₂ O ₃	Rhombo.H.	1,9
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	3,3
04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	0,8
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	4,3
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	1,3
01-076-8936 (C)	Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	3,1
04-014-4685 (I)	melilite, syn	Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇	Tetragonal	3,9
00-010-0288 (*)	Andradite, syn	Ca ₃ Fe ₂ +3(SiO ₄) ₃	Cubic	3,6

Stenkol

NiO/NiAl₂O₄, H2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal
04-010-6148 (*)	Nickel, syn	Ni	Cubic
01-078-2182 (*)	Nickel Aluminum Oxide	Ni.941Al ₂ O _{3.95}	Cubic
00-031-1096 (I)	Potassium Sulfide	K ₂ S ₆	Triclinic
01-077-3556 (*)	Nickel Iron Sulfide	(FeNi ₂₉ S ₂₇) _{1.19}	Orthorhombic

00-022-1118 (I)	Iron Silicate	Fe7SiO10	Monoclinic
04-011-2514 (*)	anorthite	CaAl2(SiO4)2	Triclinic
04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO2	Hexagonal
04-009-3700 (I)	orthoclase	KAlSi3O8	Monoclinic
04-015-2580 (*)	Magnesium	Mg	Hexagonal
01-072-9682 (*)	Potassium Silicon Aluminum Oxide	K22.4K96(Si96.96Al95.04O384)	Cubic
01-075-3763 (*)	Hercynite, magnesian, syn	Fe.77Mg.29Al1.93O4	Cubic

NiO/NiAl2O4, O2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System
	04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO2	Hexagonal
	04-001-9373 (I)	Bunsenite, syn	NiO	Cubic
	00-010-0339 (*)	Nickel Aluminum Oxide	NiAl2O4	Cubic
	04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO4)	Orthorhombic
	00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl2Si2O8	Triclinic
	04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi3O8	Triclinic
	00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic
	04-005-9790 (C)	Iron Oxide	Fe3O3.75	Cubic

CuO H2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	04-001-2746 (I)	Copper, syn	Cu0.99	Cubic	
	04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO2	Hexagonal	
	01-077-1193 (I)	Magnesium Aluminum Oxide	MgAl2O4	Cubic	
	00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
	01-087-1487 (*)	Potassium Magnesium Silicate	K2Mg(SiO4)	Orthorhombic	
	01-089-7389 (I)	Potassium Hydroxide	KOH	Orthorhombic	
	04-007-1751 (I)	Copper Sulfide	Cu1.96S	Tetragonal	
	01-080-1387 (*)	Hydrogen Aluminum Silicate	H(AlSi2O6)	Hexagonal	
	04-012-5002 (I)	Magnesium Aluminum Silicon Oxide	Mg0.2Al0.4Si0.6O2	Hexagonal	
	04-015-2580 (*)	Magnesium	Mg	Hexagonal	
	01-075-3763 (*)	Hercynite, magnesian, syn	Fe.77Mg.29Al1.93O4	Cubic	
	04-003-6923 (I)	Potassium Oxide	K2O	Cubic	
	04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO2	Hexagonal	

CuO, O2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
	04-007-1375 (*)	Tenorite	CuO	Monoclinic	21,6
	01-077-1193 (I)	Magnesium Aluminum Oxide	MgAl2O4	Cubic	38,9

04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO2	Hexagonal	20,6
04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO4)	Orthorhomt	7,1
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi3O8	Triclinic	1,9
01-087-1487 (*)	Potassium Magnesium Silicate	K2Mg(SiO4)	Orthorhomt	1,4
01-074-7514 (*)	Potassium Aluminum Oxide	K(AlO2)	Tetragonal	1,3
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl2Si2O8	Triclinic	2,6
01-089-7389 (I)	Potassium Hydroxide	KOH	Orthorhomt	0,9
04-007-1751 (I)	Copper Sulfide	Cu1.96S	Tetragonal	1,4
04-005-9790 (C)	Iron Oxide	Fe3O3.75	Cubic	0,7
01-076-8936 (C)	Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	0,8
00-010-0288 (*)	Andradite, syn	Ca3Fe2+3(SiO4)3	Cubic	0,8

Fe2O3, H2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO2	Hexagonal	
01-075-4401 (*)	Spinel, ferrian, syn	MgAl1.41Fe0.59O4	Cubic	
01-075-4400 (*)	Spinel, ferrian, syn	MgAl1.53Fe0.47O4	Cubic	
01-075-3763 (*)	Hercynite, magnesian, syn	Fe.77Mg.29Al1.93O4	Cubic	
01-077-7980 (N)	Wuestite, syn	FeO	Cubic	
00-039-1346 (*)	Maghemite-C, syn	Fe2O3	Cubic	
00-045-1204 (C)	Aluminum Iron Silicon	Al0.7Fe3Si0.3	Cubic	
00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic	
04-013-6959 (C)	Magnesium Silicon	Mg4Si7	Monoclinic	
00-022-1118 (I)	Iron Silicate	Fe7SiO10	Monoclinic	
04-007-9753 (*)	Iron, syn	Fe	Cubic	
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al6Si2O13	Orthorhombic	

Fe2O3, O2

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	SQ
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO2	Hexagonal	
04-006-6579 (I)	Iron Oxide	Fe2O3	Rhombo.H.axes	
01-075-4400 (*)	Spinel, ferrian, syn	MgAl1.53Fe0.47O4	Cubic	
04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO4)	Orthorhombic	
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi3O8	Triclinic	
04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO2	Hexagonal	
04-014-4685 (I)	melilite, syn	Ca2Mg0.35Al1.3Si1.35O7	Tetragonal	
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl2Si2O8	Triclinic	
01-076-8936 (C)	Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	

	00-010-0288 (*)	Andradite, syn	Ca₃Fe₂+3(SiO₄)₃	Cubic
Ilmenite, H2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System S-Q
	04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal
	04-007-9753 (*)	Iron, syn	Fe	Cubic
	00-029-0733 (*)	Ilmenite, syn	Fe+2TiO ₃	Rhombo.H.axes
	01-070-7347 (*)	Rutile	TiO ₂	Tetragonal
	00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic
	00-022-1118 (I)	Iron Silicate	Fe ₇ SiO ₁₀	Monoclinic
	04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal
	01-087-1790 (I)	Potassium Aluminum Silicate	K(AlSi ₃ O ₈)	Triclinic
	04-012-1401 (*)	Copper Silicon Oxide	CuSiO ₃	Orthorhombic
	00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic
	04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic
	04-014-4685 (I)	melilite, syn	Ca ₂ Mg _{0.35} Al _{1.3} Si _{1.35} O ₇	Tetragonal
	04-015-2580 (*)	Magnesium	Mg	Hexagonal
Ilmenite, O2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System S-Q
	04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal
	00-047-0421 (*)	Iron Titanium Oxide	Fe ₃ Ti ₃ O ₁₀	Orthorhombic
	01-076-9684 (*)	Hematite	Fe ₂ O ₃	Rhombo.H.axes
	04-013-1858 (*)	clinopyroxene, syn; Diopside, potassian, s	K _{0.12} Ca _{0.88} Mg _{0.83} Al _{0.19} Si _{1.98} O ₆	Monoclinic
	04-005-4661 (*)	brookite	TiO ₂	Orthorhombic
	04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal
	00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic
	04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhombic
	04-005-9790 (C)	Iron Oxide	Fe ₃ O _{3.75}	Cubic
	04-005-4661 (*)	brookite	TiO ₂	Orthorhombic
	04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic
Mn₃O₄, H2	SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System S-Q
	04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal
	00-037-1484 (*)	Baddeleyite, syn	ZrO ₂	Monoclinic
	01-077-2362 (I)	Iron Manganese Oxide	(FeO) _{0.099} (MnO) _{0.901}	Cubic
	00-008-0464 (I)	Oldhamite, syn	CaS	Cubic
	00-035-0591 (*)	Merwinite, syn	Ca ₃ Mg(SiO ₄) ₂	Monoclinic
	00-006-0696 (*)	Iron, syn	Fe	Cubic

04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic
00-015-0776 (I)	Mullite, syn	Al ₆ Si ₂ O ₁₃	Orthorhombic
04-007-9023 (*)	tephroite, syn	Mn ₂ (SiO ₄)	Orthorhombic

Mn₃O₄, O₂

SS-VVV-PPPP	Compound Name	Formula	System	S-Q
04-012-0490 (I)	Quartz Low	SiO ₂	Hexagonal	55,2
00-037-1484 (*)	Baddeleyite, syn	ZrO ₂	Monoclinic	18,8
04-007-6682 (*)	anhydrite	Ca(SO ₄)	Orthorhomt	9
04-007-1841 (*)	hausmannite	Mn ₃ O ₄	Tetragonal	5,6
00-033-0664 (*)	Hematite, syn	Fe ₂ O ₃	Rhombo.H.	1,9
00-041-1486 (*)	Anorthite, ordered	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	Triclinic	2,6
04-013-4798 (A)	Quartz high, syn	SiO ₂	Hexagonal	0,4
04-007-5466 (*)	Albite	NaAlSi ₃ O ₈	Triclinic	0,5
00-048-1467 (C)	Lime, syn	CaO	Cubic	0,3
01-076-8936 (C)	Magnesium Oxide	MgO	Hexagonal	1,6
00-010-0288 (*)	Andradite, syn	Ca ₃ Fe ₂₊₃ (SiO ₄) ₃	Cubic	2,2
01-073-7395 (*)	Manganese Aluminum Iron Silicon Oxide	(Mn _{0.773} Fe _{0.069} Al _{0.158})(Al _{0.962} Mn _{0.03})	Orthorhomt	1,9