

MATERIAL SUPLEMENTAR

Quantificação de mullita proveniente de resíduos de caulim da região amazônica: uso do método de Rietveld

Marlice C. Martelli, Eric Mochiutti*, , João Pedro O. Lima e Roberto de F. Neves

Faculdade de Engenharia Química, Universidade Federal do Pará, 66075-110 Belém –
PA, Brasil

*e-mail: mochiuttieric@gmail.com

BRAGG R-Factors and weight fractions : CC80F20

=> Phase: 1 Fluorita

=> Bragg R-factor: 2.11 Fract(%): 21.17(0.39)

=> Phase: 2 Cristobalita

=> Bragg R-factor: 2.40 Fract(%): 26.64(0.59)

=> Phase: 3 Mullita

=> Bragg R-factor: 3.82 Fract(%): 52.19(0.83)

Figura 1S. Fatores R_{Bragg} e das frações em peso das fases, na amostra CC80F20, pelo refinamento executado no FullProf

BRAGG R-Factors and weight fractions: CC-1500

=> Phase 1: Mullita

=> Bragg R-factor: 3.76 Fract(%): 65.93(0.91)

=> Phase 2: Cristobalita

=> Bragg R-factor: 2.75 Fract(%): 34.07(0.44)

Figura 2S. Fatores R_{Bragg} e das frações em peso das fases, na amostra CC-1500, pelo refinamento executado no FullProf

CC80F20

=> Conventional Rietveld Rwp and Re: 13.6 10.8

> GoF-index: 1.2 Sqrt(Residual/N)

CC-1500

=> Conventional Rietveld Rwp and Re: 12.4 5.42

=> GoF-index: 2.3 Sqrt (Residual/N)

! FILE for FullProf Studio: generated automatically by FullProf

!Title: Name: fluorita

SPACEG F M -3 M

CELL 5.462000 5.462000 5.462000 90.0000 90.0000 90.0000 DISPLAY
MULTIPLE

BOX -0.15 1.15 -0.15 1.15 -0.15 1.15

ATOM Ca1 Ca 0.00000 0.00000 0.00000

ATOM F1 F- 0.25000 0.25000 0.25000

! FILE for FullProf Studio: generated automatically by FullProf

!Title: Name: cristobalita

SPACEG P 41 21 2

CELL 5.016497 5.016497 7.006660 90.0000 90.0000 90.0000 DISPLAY
MULTIPLE

BOX -0.15 1.15 -0.15 1.15 -0.15 1.15

ATOM Si1 Si 0.28062 0.28062 0.00000

ATOM O1 O- 0.27878 0.07425 0.18267

Figura 3S. Dados cristalográficos das fases obtidas da amostra CC80F20 – Parte 1

! FILE for FullProf Studio: generated automatically by FullProf

!Title: Name: mullita

SPACEG P B A M

CELL 7.543408 7.696620 2.886098 90.0000 90.0000 90.0000 DISPLAY
MULTIPLE

BOX -0.15 1.15 -0.15 1.15 -0.15 1.15

ATOM A11 A1 0.00000 0.00000 0.00000

ATOM A12 A1 0.14706 0.34268 0.50000

ATOM Si1 Si 0.14706 0.34268 0.50000

ATOM A13 A1 0.25650 0.20606 0.50000

ATOM Si2 Si 0.25650 0.20606 0.50000

ATOM O1 O- 0.35634 0.42322 0.50000

ATOM O2 O- 0.50000 0.00000 0.50000

ATOM O3 O- 0.48765 0.02687 0.50000

ATOM O4 O- 0.12582 0.22590 0.00000

Figura 4S. Dados cristalográficos das fases obtidas da amostra CC80F20 – Parte 2