

*Supporting Information*

# Efficient Extraction, Recovery, and Upgrading of Rare Earth Elements from Coal-Based Resources: Bioleaching and Precipitation

Zongliang Zhang, Landon Allen, Prasenjit Podder, Michael L. Free, and Prashant K. Sarswat \*

**Table S1.** Comparison of Visual Minteq species calculations for leaching solutions with added magnesium carbonate for iron removal.

Species	Concentration	Activity	Log Activity	Fraction
Dy(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	2.48 × 10 <sup>-26</sup>	1.83 × 10 <sup>-26</sup>	-25.74	0.00%
Dy(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	7.11 × 10 <sup>-06</sup>	5.25 × 10 <sup>-06</sup>	-5.28	2.85%
Dy <sup>+3</sup>	1.09 × 10 <sup>-04</sup>	7.06 × 10 <sup>-06</sup>	-5.15	43.65%
DyCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	6.20 × 10 <sup>-15</sup>	4.57 × 10 <sup>-15</sup>	-14.34	0.00%
DyHCO <sub>3</sub> <sup>+2</sup>	1.01 × 10 <sup>-11</sup>	2.99 × 10 <sup>-12</sup>	-11.52	0.00%
DyOH <sup>+2</sup>	1.74 × 10 <sup>-10</sup>	5.14 × 10 <sup>-11</sup>	-10.29	0.00%
DySO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.34 × 10 <sup>-04</sup>	9.87 × 10 <sup>-05</sup>	-4.01	53.51%
Eu(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1.12 × 10 <sup>-26</sup>	8.23 × 10 <sup>-27</sup>	-26.08	0.00%
Eu(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	2.43 × 10 <sup>-05</sup>	1.79 × 10 <sup>-05</sup>	-4.75	9.73%
Eu <sup>+3</sup>	9.37 × 10 <sup>-05</sup>	6.06 × 10 <sup>-06</sup>	-5.22	37.49%
EuCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	4.43 × 10 <sup>-15</sup>	3.27 × 10 <sup>-15</sup>	-14.49	0.00%
EuHCO <sub>3</sub> <sup>+2</sup>	8.11 × 10 <sup>-12</sup>	2.40 × 10 <sup>-12</sup>	-11.62	0.00%
EuOH <sup>+2</sup>	1.01 × 10 <sup>-10</sup>	2.98 × 10 <sup>-11</sup>	-10.53	0.00%
EuSO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.32 × 10 <sup>-04</sup>	9.73 × 10 <sup>-05</sup>	-4.01	52.78%
Fe(OH) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	6.04 × 10 <sup>-05</sup>	4.46 × 10 <sup>-05</sup>	-4.35	0.17%
Fe(OH) <sub>3</sub> (aq)	6.70 × 10 <sup>-12</sup>	7.10 × 10 <sup>-12</sup>	-11.15	0.00%
Fe(OH) <sub>4</sub> <sup>-</sup>	5.44 × 10 <sup>-17</sup>	4.01 × 10 <sup>-17</sup>	-16.40	0.00%
Fe(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1.20 × 10 <sup>-03</sup>	8.83 × 10 <sup>-04</sup>	-3.05	3.30%
Fe <sup>+3</sup>	4.83 × 10 <sup>-03</sup>	3.12 × 10 <sup>-04</sup>	-3.51	13.31%
Fe <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>+4</sup>	1.30 × 10 <sup>-03</sup>	9.99 × 10 <sup>-06</sup>	-5.00	3.58%
Fe <sub>3</sub> (OH) <sub>4</sub> <sup>+5</sup>	2.03 × 10 <sup>-04</sup>	1.01 × 10 <sup>-07</sup>	-7.00	0.56%
FeOH <sup>+2</sup>	2.85 × 10 <sup>-03</sup>	8.45 × 10 <sup>-04</sup>	-3.07	7.86%
FeSO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	2.58 × 10 <sup>-02</sup>	1.91 × 10 <sup>-02</sup>	-1.72	71.22%
Mg <sup>+2</sup>	8.51 × 10 <sup>-02</sup>	2.52 × 10 <sup>-02</sup>	-1.60	85.14%
Mg <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> <sup>+2</sup>	1.49 × 10 <sup>-16</sup>	4.41 × 10 <sup>-17</sup>	-16.36	0.00%
MgCO <sub>3</sub> (aq)	3.53 × 10 <sup>-16</sup>	3.74 × 10 <sup>-16</sup>	-15.43	0.00%
MgHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	4.69 × 10 <sup>-10</sup>	3.46 × 10 <sup>-10</sup>	-9.46	0.00%
MgOH <sup>+</sup>	3.71 × 10 <sup>-11</sup>	2.73 × 10 <sup>-11</sup>	-10.56	0.00%
MgSO <sub>4</sub> (aq)	1.49 × 10 <sup>-02</sup>	1.57 × 10 <sup>-02</sup>	-1.80	14.86%
Sc(OH) <sub>2</sub> <sup>+</sup>	5.96 × 10 <sup>-11</sup>	4.40 × 10 <sup>-11</sup>	-10.36	0.00%
Sc(OH) <sub>3</sub> (aq)	4.71 × 10 <sup>-17</sup>	4.99 × 10 <sup>-17</sup>	-16.30	0.00%
Sc(OH) <sub>4</sub> <sup>-</sup>	2.43 × 10 <sup>-22</sup>	1.79 × 10 <sup>-22</sup>	-21.75	0.00%
Sc(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1.72 × 10 <sup>-05</sup>	1.27 × 10 <sup>-05</sup>	-4.90	6.89%
Sc <sup>+3</sup>	4.19 × 10 <sup>-05</sup>	2.71 × 10 <sup>-06</sup>	-5.57	16.75%
Sc <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>+4</sup>	7.77 × 10 <sup>-11</sup>	5.97 × 10 <sup>-13</sup>	-12.22	0.00%
ScOH <sup>+2</sup>	1.31 × 10 <sup>-07</sup>	3.87 × 10 <sup>-08</sup>	-7.41	0.05%
ScSO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.91 × 10 <sup>-04</sup>	1.41 × 10 <sup>-04</sup>	-3.85	76.30%
Y(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1.44 × 10 <sup>-26</sup>	1.06 × 10 <sup>-26</sup>	-25.98	0.00%
Y(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1.98 × 10 <sup>-05</sup>	1.46 × 10 <sup>-05</sup>	-4.84	7.90%
Y <sup>+3</sup>	1.21 × 10 <sup>-04</sup>	7.80 × 10 <sup>-06</sup>	-5.11	48.25%
Y <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>+4</sup>	4.06 × 10 <sup>-18</sup>	3.12 × 10 <sup>-20</sup>	-19.51	0.00%
YCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	5.70 × 10 <sup>-15</sup>	4.20 × 10 <sup>-15</sup>	-14.38	0.00%
YHCO <sub>3</sub> <sup>+2</sup>	7.39 × 10 <sup>-12</sup>	2.19 × 10 <sup>-12</sup>	-11.66	0.00%
YOH <sup>+2</sup>	1.18 × 10 <sup>-10</sup>	3.50 × 10 <sup>-11</sup>	-10.46	0.00%
YSO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.10 × 10 <sup>-04</sup>	8.09 × 10 <sup>-05</sup>	-4.09	43.85%