

# Supporting Information

For

## Barium Sulfate Scale Formation and Inhibition in the Presence of Rigid and Flexible Triphosphonate Additives

E.D. Athanasopoulos, E. Armakola, P.G. Koutsoukos, K.D. Demadis

Table with equilibria used for the calculation of supersaturation, cif file for

**[Ba(H<sub>4</sub>BTP)(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]<sub>n</sub>.**

<b>Equilibrium</b>	<b>Logk</b>
$\text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{OH}^-$	-13,997
$\text{Ba}^{2+} + \text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{BaOH}^+ + \text{H}^+$	-13,357
$\text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-} \Leftrightarrow \text{HSO}_4^{2-}$	1,99
$\text{Na}^+ + \text{SO}_4^{2-} \Leftrightarrow \text{NaSO}_4^-$	0,73
$\text{NaSO}_4^- \cdot 10\text{H}_2\text{O} \Leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{SO}_4^{2-} + 2\text{H}_2\text{O}$	-1,114
$\text{Na}_2\text{SO}_4 \Leftrightarrow 2\text{Na}^+ + \text{SO}_4^{2-}$	0,3217
$\text{NaCl} \Leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$	1,6025
$\text{BaSO}_4 \Leftrightarrow \text{Ba}^{2+} + \text{SO}_4^{2-}$	-9,98
(AMP) $\text{HN}^+ \text{-H}_6\text{L} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{N-H}_6\text{L}$	-4,32
$\text{HN}^+ \text{-H}_6\text{L} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HN}^+ \text{-H}_5\text{L}^-$	1,08
$\text{HN}^+ \text{-H}_5\text{L}^- \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HN}^+ \text{-H}_4\text{L}^{2-}$	1,56
$\text{HN}^+ \text{-H}_4\text{L}^{2-} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HN}^+ \text{-H}_3\text{L}^{3-}$	2,04
$\text{HN}^+ \text{-H}_3\text{L}^{3-} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HN}^+ \text{-H}_2\text{L}^{4-}$	7,60
$\text{HN}^+ \text{-H}_2\text{L}^{4-} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{HN}^+ \text{-HL}^{5-}$	8,08
$\text{HN}^+ \text{-HL}^{5-} \Leftrightarrow \text{H}^+ + \text{N-L}^{6-}$	8,56
(BTP) $\text{H}_6\text{M} \Leftrightarrow 4\text{H}^+ + \text{H}_2\text{M}^{4-}$	3,45
$\text{H}_2\text{M}^{4-} \Leftrightarrow 2\text{H}^+ + \text{M}^{6-}$	8,68