

## Under what conditions does (SiO)<sub>N</sub> nucleation occur? A bottom-up kinetic modelling evaluation

Stefan T. Bromley\*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional (IQTCUB),  
Universitat de Barcelona, C/ Martí i Franquès 1, E-08028 Barcelona, Spain*

<sup>2</sup>*Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), 08010 Barcelona, Spain*

Juan Carlos Gomez Martin<sup>3</sup>, John M. C. Plane\*<sup>3</sup>

<sup>3</sup>*School of Chemistry, University of Leeds, Leeds, LS2 9JT, UK*

\* Corresponding authors: [s.bromley@ub.edu](mailto:s.bromley@ub.edu), [J.M.C.Plane@leeds.ac.uk](mailto:J.M.C.Plane@leeds.ac.uk)

### Supplementary Information 2

**Table S2.** Rotational constants and vibrational frequencies of the (SiO)<sub>N</sub> clusters for N = 1-20.

<i>N</i>	Rotational constants / GHz	Vibrational frequencies / cm <sup>-1</sup>
1	21.627	1246
2	11.464 5.893 3.892	232 530 555 752 791 833
3	2.635 2.635 1.317	94 94 208 304 304 522 573 611 611 723 945 945
4	1.339 1.157 0.689	48 60 66 86 100 102 272 296 378 409 532 541 565 589 763 951 986 999
5	1.428 0.431 0.418	39 52 66 141 148 175 177 271 287 312 336 397 430 542 589 605 637 665 711 794 799 928 966 972
6	0.837 0.315 0.303	17 36 48 70 77 98 106 135 156 177 233 273 289 311 353 402 411 531 538 554 587 623 657 673 790 831 938 967 987 1000

7	0.466 0.466 0.279	93 214 332 520 705 979	93 254 332 520 715	93 254 341 662 843	167 259 410 666 857	190 263 412 666 857	190 270 412 687 974	214 270 479 705 974
8	0.351 0.335 0.268	57 189 267 402 641 817	84 222 309 408 658 876	88 235 317 437 668 897	90 238 323 450 670 941	123 242 342 558 693 968	151 254 350 583 698 1001	173 263 369 627 787 1020
9	0.290 0.227 0.216	67 173 253 343 515 696 903	73 177 261 357 521 725 974	81 195 277 368 608 728 977	81 197 296 390 621 797 1007	113 210 306 416 630 866 1020	116 225 329 425 652 890 1027	145 237 329 463 684 897
10	0.231 0.177 0.134	28 145 239 329 478 625 767 978	49 148 260 332 493 658 849 987	57 158 273 333 496 675 850 997	76 182 289 351 552 691 869 1008	96 186 290 360 558 701 878 1024	105 203 298 376 582 741 896	106 230 315 391 618 751 921
11	0.242 0.099 0.090	23 133 217 295 373 524 688 848 984	45 149 222 311 386 531 703 864 1004	53 150 224 323 395 567 734 886 1007	68 154 254 336 436 622 736 892 1031	88 187 268 348 438 632 763 924	88 201 287 355 470 669 782 953	114 202 289 363 504 681 837 975
12	0.199 0.101 0.087	24 126 205 280 332 421 601 741 901 1032	40 137 220 284 339 447 625 769 942 1049	72 145 224 293 364 455 628 787 959 1072	85 159 235 293 366 491 665 792 996	92 167 245 295 377 494 689 855 1000	102 179 266 323 387 526 709 877 1016	122 203 274 328 402 559 717 897 1028
13	0.157 0.082 0.077	20 101 148 251	23 117 167 262	41 120 172 262	45 128 196 273	71 135 209 277	88 137 220 281	101 148 233 286

		292	298	314	324	330	350	357
		369	372	381	407	415	425	447
		470	484	494	530	569	589	611
		611	649	691	700	721	738	755
		783	793	835	884	898	910	960
		979	1007	1018	1031	1039	1056	1064
		1068	1101					
14	0.193 0.051 0.047	14	15	32	68	74	85	95
		107	110	125	125	128	168	194
		195	197	208	212	224	233	235
		249	250	267	267	279	287	292
		293	309	313	321	332	335	339
		343	352	362	381	383	392	408
		412	423	444	466	498	523	527
		575	610	623	628	651	663	689
		706	724	759	761	770	806	809
		869	873	892	894	923	928	956
		979	991	1001	1006	1028	1047	1051
		1074						
15	0.133 0.053 0.051	13	28	29	33	52	66	72
		96	98	101	110	115	128	144
		144	149	156	161	174	178	186
		202	207	231	254	268	273	278
		284	303	311	313	316	320	329
		336	337	343	347	361	363	372
		379	380	410	418	430	432	436
		488	499	528	535	566	584	600
		609	628	655	674	715	722	735
		741	760	781	801	815	825	854
		888	900	936	947	971	982	1002
		1003	1008	1035	1036	1051	1076	1082
16	0.100 0.075 0.062	14	47	70	73	82	88	92
		109	114	122	140	148	151	153
		164	170	180	195	198	202	206
		207	225	245	253	255	265	270
		273	277	287	291	305	321	323
		324	328	332	344	345	358	362
		370	372	377	385	400	405	409
		414	418	431	446	459	500	519
		539	559	621	628	641	658	674
		677	696	713	722	737	755	791
		803	808	854	869	871	885	889
		915	919	935	957	979	983	1014
		1015	1026	1028	1046	1056	1069	
17	0.080 0.067 0.051	2	28	42	43	51	63	72
		74	89	93	104	110	115	138
		145	148	152	160	178	192	195
		197	205	212	216	222	226	245
		251	254	257	263	271	279	289
		292	299	302	311	320	324	333

		335	340	345	358	364	369	371
		378	382	389	391	413	415	417
		445	446	460	510	515	551	605
		615	624	633	636	676	688	690
		701	715	740	754	791	802	811
		816	857	874	877	905	915	920
		951	969	993	997	1023	1026	1035
		1038	1047	1078	1099	1115		
18	0.089 0.047 0.046	10	15	21	35	51	54	56
		63	72	73	76	88	90	106
		115	116	133	137	148	152	176
		180	188	195	200	208	217	226
		226	230	233	236	238	249	258
		260	276	276	287	290	308	317
		318	324	329	329	334	334	345
		346	358	360	364	374	386	389
		395	400	411	416	434	438	444
		467	500	507	563	576	591	601
		609	614	640	677	683	686	687
		716	747	750	760	768	815	827
		893	897	928	947	953	1003	1004
		1006	1011	1039	1044	1063	1082	1083
		1084	1089	1118	1127			
19	0.087 0.050 0.050	39	63	68	68	75	75	85
		86	103	125	129	129	132	132
		145	157	179	179	187	188	194
		201	201	219	223	227	227	251
		251	262	264	264	268	272	273
		291	291	291	301	314	314	328
		329	332	332	335	340	340	343
		346	363	377	377	386	394	397
		411	411	419	438	438	454	454
		489	489	490	528	528	563	588
		588	593	596	596	613	658	658
		686	708	712	712	731	745	746
		778	778	788	821	821	844	879
		906	906	917	931	945	945	962
		962	1001	1001	1031	1031	1031	1044
		1120	1120	1168				
20	0.072 0.047 0.042	29	34	52	57	63	65	75
		77	85	95	109	111	117	126
		129	132	141	142	149	163	176
		178	185	186	192	197	204	219
		220	222	242	254	255	264	264
		265	268	269	274	283	285	293
		298	309	315	325	329	330	334
		335	337	342	342	350	361	372
		373	378	386	390	412	415	416
		419	422	442	454	454	488	491
		491	528	535	563	567	589	590

		598	605	610	634	662	682	706
		715	721	735	742	745	776	786
		792	805	818	839	890	909	922
		928	931	954	962	984	985	1012
		1021	1036	1039	1048	1054	1073	1097
		1123	1170					