Electronic Supplementary Material (ESI) for Physical Chemistry Chemical Physics.

Supplement 4: Relative enthalpies and Gibbs free energies

Table 1: Relative entalphies of reactants (ΔH_r) pre-reaction complexes(ΔH_{pk1}), transition states (reaction barrier, $\Delta H^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔH_{pk2}) and products (ΔH_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K. All enthalpies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to enthalpy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Enthalpies are shown relative to reactants.

reaction	ΔH_r/eV	ΔH_{pk1}/eV	$\Delta H^{\ddagger}$/eV	ΔH_{pk2}/eV	ΔH_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	-0.02	1.77	-0.48	-0.47
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-0.12	1.37	-0.73	-0.71
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	-0.17	1.67	-0.78	-0.77
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	-0.14	1.66	-0.85	-0.82
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	-0.12	1.70	-0.64	-0.61
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	-0.17	1.67	-0.74	-0.70
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	-0.21	1.67	-0.92	-0.89
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.60	1.61
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.01	1.22	1.23
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.57
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.88
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-5.04
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-5.15
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.96
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.67
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	-0.07	0.00	-	0.45
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	-0.09	0.44	-	0.30
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	-0.15	0.42	-	0.14
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.36	-0.32
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.18	-0.52	-0.48
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.11	-0.56	-0.52
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.44	-0.42
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-1.17
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-1.13
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-1.02
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	-0.05	-	-	-0.16
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.73
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.24	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.03	-	-2.06
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-0.09	0.21	-0.59	-0.57
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-0.16	-0.04	-0.83	-0.81
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-0.26	-0.10	-0.92	-0.98
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-0.13	0.02	-0.99	-0.97
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	-0.09	0.29	-0.09	0.00
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.08	0.32	-0.09	-0.00
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.14	0.31	-0.04	0.06
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.09	0.45	0.12	0.18
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.09	0.21	-0.64	-0.63
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.01	0.22	-0.80	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.13	0.21	-0.69	-0.54
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.12	0.18	-0.56	-0.43
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.03	0.19	-0.49	-0.45
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.03	0.10	-0.50	-0.44
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.03	0.21	-0.42	-0.37
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.04	0.19	-0.31	-0.25

Table 2: Relative entalphies of reactants (ΔH_r) pre-reaction complexes(ΔH_{pk1}), transition states (reaction barrier, $\Delta H^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔH_{pk2}) and products (ΔH_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K. All enthalpies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to enthalpy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Enthalpies are shown relative to reactants.

reaction	ΔH_r/eV	ΔH_{pk1}/eV	$\Delta H^{\ddagger}$/eV	ΔH_{pk2}/eV	ΔH_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	-0.02	1.76	-0.47	-0.46
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-0.11	1.37	-0.72	-0.70
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	-0.17	1.67	-0.77	-0.76
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	-0.14	1.65	-0.84	-0.81
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	-0.11	1.70	-0.63	-0.60
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	-0.16	1.67	-0.73	-0.70
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	-0.20	1.66	-0.91	-0.88
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.61	1.61
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.01	1.23	1.24
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.58
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.89
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-5.05
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-5.15
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.97
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.68
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	-0.06	-0.00	-	0.44
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	-0.09	0.43	-	0.30
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	-0.15	0.41	-	0.14
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.36	-0.31
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.18	-0.51	-0.47
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.11	-0.56	-0.52
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.44	-0.41
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-1.18
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-1.14
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-1.02
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	-0.04	-	-	-0.16
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.73
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.24	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.03	-	-2.07
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-0.08	0.20	-0.59	-0.57
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-0.15	-0.05	-0.83	-0.81
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-0.26	-0.11	-0.92	-0.97
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-0.12	0.01	-0.99	-0.96
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	-0.11	0.29	-0.11	0.00
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.07	0.32	-0.09	-0.00
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.13	0.32	-0.04	0.06
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.09	0.45	0.12	0.18
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.08	0.21	-0.63	-0.63
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.01	0.22	-0.80	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.13	0.20	-0.69	-0.54
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.12	0.17	-0.56	-0.43
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.04	0.19	-0.49	-0.45
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.04	0.10	-0.50	-0.44
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.04	0.20	-0.42	-0.37
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.05	0.18	-0.31	-0.25

Table 3: Relative entalphies of reactants (ΔH_r) pre-reaction complexes(ΔH_{pk1}), transition states (reaction barrier, $\Delta H^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔH_{pk2}) and products (ΔH_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K. All enthalpies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to enthalpy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Enthalpies are shown relative to reactants.

reaction	ΔH_r/eV	ΔH_{pk1}/eV	$\Delta H^{\ddagger}$/eV	ΔH_{pk2}/eV	ΔH_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	-0.01	1.76	-0.44	-0.44
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-0.10	1.36	-0.69	-0.68
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	-0.16	1.66	-0.74	-0.74
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	-0.13	1.65	-0.82	-0.79
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	-0.10	1.70	-0.60	-0.59
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	-0.14	1.67	-0.70	-0.68
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	-0.19	1.66	-0.87	-0.86
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.64	1.63
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.00	1.26	1.25
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.59
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.90
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-5.05
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-5.16
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.99
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.68
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	-0.05	-0.01	-	0.43
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	-0.07	0.43	-	0.29
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	-0.14	0.41	-	0.13
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.36	-0.30
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.17	-0.51	-0.45
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.11	-0.55	-0.50
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.42	-0.39
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-1.19
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-1.14
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-1.01
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	-0.03	-	-	-0.15
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.72
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.24	-	-1.95
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.03	-	-2.08
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-0.08	0.19	-0.59	-0.56
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-0.14	-0.06	-0.82	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-0.25	-0.11	-0.91	-0.96
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-0.12	0.01	-0.98	-0.95
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	-0.13	0.30	-0.13	0.00
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.05	0.34	-0.07	-0.00
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.12	0.33	-0.02	0.06
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	-0.08	0.45	0.12	0.18
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.08	0.21	-0.61	-0.63
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.01	0.22	-0.78	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.11	0.21	-0.68	-0.54
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	-0.12	0.18	-0.56	-0.43
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.05	0.18	-0.49	-0.44
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.05	0.09	-0.51	-0.44
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.05	0.20	-0.42	-0.36
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	-0.06	0.18	-0.31	-0.24

Table 4: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K and 50 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.21	2.15	-0.20	-0.32
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.21	1.83	-0.38	-0.49
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.14	2.12	-0.46	-0.56
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.21	2.12	-0.46	-0.58
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.20	2.12	-0.35	-0.47
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.23	2.15	-0.37	-0.45
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.18	2.18	-0.52	-0.62
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.51	1.38
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.12	1.01
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.14
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.41
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.56
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.64
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.48
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.16
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.22	0.39	-	0.87
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.23	0.86	-	0.74
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.14	0.87	-	0.58
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.65
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.80
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.85
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.50	-0.72
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.78
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.69
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.58
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.26	-	-	0.22
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.21	0.61	-0.27	-0.51
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.15	0.41	-0.45	-0.69
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.12	0.34	-0.55	-0.87
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.25	0.47	-0.59	-0.83
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.29	0.61	0.29	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.22	0.64	0.20	0.02
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.20	0.66	0.29	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.24	0.84	0.46	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.20	0.54	-0.43	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.31	0.59	-0.51	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.18	0.57	-0.40	-0.55
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.25	0.54	-0.22	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.48	-0.27	-0.37
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.27	0.41	-0.23	-0.34
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.26	0.50	-0.15	-0.29
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.27	0.48	-0.04	-0.17

Table 5: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K and 100 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.20	2.14	-0.21	-0.33
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.20	1.81	-0.39	-0.50
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.13	2.11	-0.48	-0.57
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.20	2.11	-0.47	-0.60
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.19	2.11	-0.36	-0.48
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.21	2.13	-0.39	-0.47
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.17	2.17	-0.53	-0.64
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.51	1.38
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.12	1.01
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.15
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.42
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.58
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.66
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.49
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.17
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.21	0.38	-	0.85
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.22	0.85	-	0.72
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.13	0.86	-	0.57
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.64
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.78
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.84
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.50	-0.71
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.79
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.70
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.59
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.25	-	-	0.21
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.20	0.60	-0.28	-0.51
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.14	0.40	-0.46	-0.69
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.11	0.33	-0.57	-0.87
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.23	0.46	-0.60	-0.83
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.28	0.60	0.28	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.21	0.63	0.19	0.02
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.19	0.65	0.28	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.23	0.82	0.45	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.19	0.53	-0.44	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.30	0.58	-0.52	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.17	0.56	-0.41	-0.55
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.23	0.52	-0.23	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.22	0.46	-0.28	-0.38
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.26	0.40	-0.25	-0.36
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.25	0.49	-0.17	-0.30
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.26	0.47	-0.05	-0.18

Table 6: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K and 200 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.18	2.13	-0.23	-0.34
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.18	1.80	-0.41	-0.52
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.12	2.10	-0.49	-0.58
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.19	2.09	-0.48	-0.61
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.18	2.10	-0.37	-0.49
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.20	2.12	-0.40	-0.48
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.16	2.16	-0.54	-0.65
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.51	1.38
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.12	1.01
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.17
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.43
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.59
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.67
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.50
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.18
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.20	0.37	-	0.84
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.21	0.84	-	0.71
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.12	0.85	-	0.56
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.62
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.77
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.82
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.50	-0.70
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.80
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.71
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.60
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.24	-	-	0.19
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.19	0.59	-0.29	-0.51
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.13	0.39	-0.47	-0.69
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.09	0.31	-0.58	-0.87
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.22	0.45	-0.61	-0.83
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.26	0.59	0.26	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.20	0.61	0.18	0.02
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.18	0.64	0.26	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.22	0.81	0.44	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.18	0.52	-0.45	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.29	0.57	-0.53	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.16	0.55	-0.43	-0.55
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.22	0.51	-0.24	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.21	0.45	-0.29	-0.40
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.24	0.39	-0.26	-0.37
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.24	0.48	-0.18	-0.31
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.25	0.46	-0.06	-0.19

Table 7: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K and 300 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.18	2.12	-0.23	-0.35
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.18	1.79	-0.41	-0.52
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.11	2.09	-0.50	-0.59
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.18	2.09	-0.49	-0.62
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.17	2.09	-0.38	-0.50
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.19	2.12	-0.40	-0.49
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.15	2.15	-0.55	-0.66
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.51	1.38
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.12	1.01
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.17
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.44
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.59
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.68
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.51
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.19
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.19	0.36	-	0.84
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.20	0.83	-	0.70
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.11	0.84	-	0.55
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.62
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.76
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.82
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.50	-0.69
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.81
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.72
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.61
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.23	-	-	0.19
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.18	0.58	-0.30	-0.51
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.12	0.38	-0.48	-0.69
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.09	0.31	-0.58	-0.87
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.21	0.44	-0.62	-0.83
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.26	0.58	0.26	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.19	0.61	0.17	0.02
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.17	0.63	0.26	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.21	0.81	0.43	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.17	0.51	-0.46	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.28	0.56	-0.54	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.15	0.54	-0.43	-0.55
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.22	0.50	-0.25	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.20	0.45	-0.30	-0.40
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.24	0.38	-0.27	-0.37
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.47	-0.19	-0.32
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.24	0.45	-0.07	-0.20

Table 8: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K and 400 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.17	2.11	-0.24	-0.36
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.17	1.79	-0.42	-0.53
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.11	2.08	-0.50	-0.59
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.18	2.08	-0.49	-0.62
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.16	2.09	-0.38	-0.50
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.19	2.11	-0.41	-0.49
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.14	2.15	-0.55	-0.66
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.51	1.38
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.12	1.01
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.18
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.45
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.60
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.68
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.51
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.19
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.19	0.36	-	0.83
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.20	0.83	-	0.70
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.11	0.84	-	0.55
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.61
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.76
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.81
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.50	-0.69
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.81
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.72
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.61
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.22	-	-	0.18
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.17	0.58	-0.30	-0.51
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.11	0.37	-0.48	-0.69
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.08	0.30	-0.59	-0.87
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.21	0.44	-0.62	-0.83
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.25	0.57	0.25	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.18	0.60	0.17	0.02
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.16	0.62	0.25	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.21	0.80	0.43	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.16	0.50	-0.46	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.28	0.55	-0.54	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.15	0.53	-0.44	-0.55
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.21	0.50	-0.26	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.20	0.44	-0.31	-0.41
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.37	-0.27	-0.38
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.46	-0.19	-0.32
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.45	-0.07	-0.20

Table 9: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 200 K and 500 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.17	2.11	-0.24	-0.36
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.17	1.79	-0.42	-0.53
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.10	2.08	-0.50	-0.60
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.17	2.08	-0.50	-0.62
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.16	2.08	-0.39	-0.51
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.19	2.11	-0.41	-0.49
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.14	2.14	-0.56	-0.66
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.51	1.38
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.12	1.01
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.18
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.45
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.60
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.68
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.52
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.20
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.18	0.36	-	0.83
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.19	0.82	-	0.70
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.10	0.83	-	0.55
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.61
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.76
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.81
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.50	-0.68
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.82
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.73
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.62
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.22	-	-	0.18
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.17	0.57	-0.31	-0.51
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.11	0.37	-0.49	-0.69
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.08	0.30	-0.59	-0.87
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.21	0.43	-0.63	-0.83
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.25	0.57	0.25	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.18	0.60	0.16	0.02
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.16	0.62	0.25	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.20	0.80	0.42	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.16	0.50	-0.47	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.27	0.55	-0.55	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.14	0.53	-0.44	-0.55
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.21	0.50	-0.26	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.19	0.44	-0.31	-0.41
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.37	-0.27	-0.38
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.22	0.46	-0.19	-0.33
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.23	0.44	-0.07	-0.21

Table 10: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K and 50 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.26	2.25	-0.13	-0.28
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.29	1.94	-0.30	-0.44
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.22	2.23	-0.39	-0.50
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.30	2.23	-0.36	-0.53
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.28	2.23	-0.28	-0.43
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.32	2.26	-0.28	-0.39
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.28	2.31	-0.42	-0.56
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.48	1.33
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.09	0.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.29
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.44
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.52
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.36
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.03
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.30	0.49	-	0.97
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.31	0.97	-	0.84
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.22	0.99	-	0.70
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.73
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.88
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.93
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.52	-0.80
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.68
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.57
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.47
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.34	-	-	0.31
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.28	0.71	-0.19	-0.50
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.23	0.52	-0.35	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.21	0.45	-0.46	-0.85
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.34	0.59	-0.49	-0.80
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.39	0.69	0.39	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.29	0.72	0.27	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.28	0.75	0.37	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.32	0.93	0.55	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.27	0.62	-0.38	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.39	0.68	-0.44	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.26	0.66	-0.33	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.63	-0.14	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.30	0.55	-0.22	-0.35
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.34	0.49	-0.17	-0.32
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.34	0.57	-0.09	-0.27
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.35	0.56	0.03	-0.15

Table 11: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K and 100 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.25	2.23	-0.15	-0.30
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.27	1.92	-0.31	-0.45
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.21	2.22	-0.40	-0.52
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.28	2.22	-0.38	-0.54
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.26	2.21	-0.29	-0.44
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.31	2.25	-0.30	-0.41
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.26	2.30	-0.43	-0.57
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.48	1.33
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.09	0.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.05
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.31
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.46
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.53
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.37
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.04
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.28	0.48	-	0.96
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.30	0.96	-	0.83
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.20	0.97	-	0.68
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.72
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.86
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.92
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.52	-0.78
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.69
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.59
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.48
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.32	-	-	0.30
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.27	0.70	-0.20	-0.50
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.21	0.51	-0.37	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.20	0.43	-0.48	-0.85
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.32	0.57	-0.50	-0.80
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.37	0.67	0.37	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.28	0.70	0.26	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.27	0.73	0.35	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.31	0.92	0.53	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.26	0.61	-0.39	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.37	0.67	-0.45	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.25	0.65	-0.35	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.32	0.61	-0.15	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.28	0.53	-0.23	-0.37
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.33	0.47	-0.18	-0.33
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.32	0.56	-0.10	-0.28
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.33	0.54	0.02	-0.16

Table 12: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K and 200 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.23	2.22	-0.16	-0.31
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.26	1.91	-0.33	-0.47
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.19	2.20	-0.42	-0.53
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.27	2.20	-0.39	-0.56
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.25	2.20	-0.31	-0.46
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.29	2.23	-0.31	-0.42
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.25	2.28	-0.45	-0.59
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.48	1.33
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.09	0.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.07
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.32
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.47
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.55
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.39
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.06
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.27	0.46	-	0.94
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.28	0.94	-	0.81
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.19	0.96	-	0.67
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.70
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.85
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.90
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.52	-0.77
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.71
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.60
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.50
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.31	-	-	0.28
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.25	0.68	-0.22	-0.50
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.20	0.49	-0.38	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.18	0.42	-0.49	-0.85
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.31	0.56	-0.52	-0.80
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.36	0.66	0.36	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.26	0.69	0.25	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.25	0.72	0.34	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.29	0.90	0.52	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.24	0.59	-0.41	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.36	0.65	-0.47	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.23	0.63	-0.36	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.31	0.60	-0.17	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.27	0.52	-0.25	-0.38
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.31	0.46	-0.20	-0.35
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.31	0.54	-0.12	-0.30
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.32	0.53	0.00	-0.18

Table 13: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K and 300 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.23	2.21	-0.17	-0.32
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.25	1.90	-0.34	-0.48
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.18	2.19	-0.43	-0.54
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.26	2.20	-0.40	-0.56
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.24	2.19	-0.31	-0.47
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.28	2.23	-0.32	-0.43
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.24	2.27	-0.46	-0.60
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.48	1.33
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.09	0.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.45
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.61
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.68
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.40
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.07
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.26	0.45	-	0.93
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.28	0.93	-	0.81
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.18	0.95	-	0.66
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.69
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.84
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.89
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.52	-0.76
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.71
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.61
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.50
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.30	-	-	0.27
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.12	0.55	-0.35	-0.62
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.06	0.36	-0.51	-0.79
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.05	0.29	-0.62	-0.97
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.18	0.42	-0.65	-0.92
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.35	0.65	0.35	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.25	0.68	0.24	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.25	0.71	0.33	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.28	0.90	0.51	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.11	0.46	-0.54	-0.78
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.23	0.52	-0.60	-0.77
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.10	0.50	-0.49	-0.68
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.18	0.46	-0.30	-0.57
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.26	0.51	-0.25	-0.39
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.31	0.45	-0.21	-0.36
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.30	0.53	-0.13	-0.31
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.31	0.52	-0.00	-0.18

Table 14: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K and 400 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.22	2.20	-0.18	-0.33
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.24	1.89	-0.34	-0.48
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.18	2.19	-0.43	-0.55
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.25	2.19	-0.41	-0.57
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.23	2.18	-0.32	-0.47
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.28	2.22	-0.33	-0.44
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.23	2.27	-0.46	-0.60
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.48	1.33
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.09	0.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.08
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.34
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.49
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.56
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.40
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.07
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.25	0.45	-	0.93
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.27	0.93	-	0.80
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.17	0.94	-	0.65
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.69
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.83
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.89
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.52	-0.75
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.72
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.62
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.51
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.29	-	-	0.27
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.24	0.67	-0.23	-0.50
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.18	0.48	-0.39	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.17	0.40	-0.51	-0.85
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.29	0.54	-0.53	-0.80
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.34	0.64	0.34	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.25	0.67	0.23	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.24	0.70	0.32	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.28	0.89	0.50	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.23	0.58	-0.42	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.64	-0.48	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.22	0.62	-0.38	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.29	0.58	-0.18	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.25	0.50	-0.26	-0.40
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.30	0.44	-0.21	-0.36
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.29	0.53	-0.13	-0.31
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.30	0.51	-0.01	-0.19

Table 15: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 250 K and 500 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.21	2.20	-0.18	-0.33
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.24	1.89	-0.35	-0.49
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.17	2.18	-0.44	-0.55
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.25	2.18	-0.41	-0.58
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.23	2.18	-0.33	-0.48
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.27	2.21	-0.33	-0.44
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.23	2.26	-0.47	-0.61
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.48	1.33
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.02	1.09	0.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-4.09
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.34
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.49
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.57
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.41
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-5.08
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.25	0.44	-	0.92
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.26	0.92	-	0.79
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.17	0.94	-	0.65
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.38	-0.68
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.20	-0.55	-0.83
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.57	-0.88
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.52	-0.75
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.73
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.62
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.51
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.29	-	-	0.26
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.74
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.23	-	-1.94
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.04	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.23	0.66	-0.24	-0.50
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.18	0.47	-0.40	-0.66
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.16	0.40	-0.51	-0.85
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.29	0.54	-0.54	-0.80
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.34	0.64	0.34	0.01
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.24	0.67	0.23	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.23	0.70	0.32	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.27	0.88	0.50	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.22	0.57	-0.43	-0.65
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.63	-0.49	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.21	0.61	-0.38	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.29	0.58	-0.19	-0.44
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.25	0.50	-0.26	-0.40
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.29	0.44	-0.22	-0.37
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.29	0.52	-0.14	-0.32
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.30	0.51	-0.01	-0.20

Table 16: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 300 K and 50 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.32	2.34	-0.07	-0.25
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.37	2.05	-0.21	-0.39
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.30	2.35	-0.31	-0.45
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.39	2.35	-0.27	-0.47
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.36	2.33	-0.21	-0.39
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.42	2.38	-0.20	-0.33
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.37	2.44	-0.32	-0.50
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.45	1.27
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.06	0.90
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.93
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.17
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.32
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.39
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.23
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.90
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.37	0.59	-	1.08
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.39	1.08	-	0.95
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.29	1.10	-	0.81
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.81
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.56	-0.96
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.58	-1.01
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.53	-0.88
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.57
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.46
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.36
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.41	-	-	0.41
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.36	0.81	-0.11	-0.49
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.30	0.64	-0.26	-0.63
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.30	0.56	-0.37	-0.82
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.43	0.70	-0.39	-0.77
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.48	0.77	0.48	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.36	0.80	0.35	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.37	0.83	0.45	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.40	1.03	0.63	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.70	-0.33	-0.66
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.46	0.77	-0.36	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.75	-0.26	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.43	0.72	-0.05	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.62	-0.16	-0.33
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.42	0.57	-0.10	-0.29
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.41	0.65	-0.02	-0.25
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.43	0.63	0.10	-0.13

Table 17: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 300 K and 100 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.30	2.33	-0.09	-0.27
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.35	2.04	-0.23	-0.40
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.28	2.33	-0.33	-0.47
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.37	2.33	-0.28	-0.49
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.34	2.32	-0.23	-0.41
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.40	2.36	-0.21	-0.35
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.35	2.42	-0.34	-0.51
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.45	1.27
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.06	0.90
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.94
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.19
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.34
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.41
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.25
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.92
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.35	0.57	-	1.06
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.38	1.06	-	0.94
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.27	1.08	-	0.79
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.80
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.56	-0.94
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.58	-1.00
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.53	-0.86
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.59
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.48
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.37
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.39	-	-	0.39
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.34	0.80	-0.12	-0.49
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.28	0.62	-0.27	-0.63
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.29	0.54	-0.39	-0.82
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.41	0.68	-0.41	-0.77
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.47	0.75	0.47	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.35	0.78	0.33	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.35	0.81	0.43	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.39	1.01	0.61	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.32	0.69	-0.35	-0.66
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.44	0.76	-0.38	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.32	0.74	-0.28	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.41	0.70	-0.07	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.35	0.60	-0.18	-0.35
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.40	0.55	-0.12	-0.31
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.40	0.63	-0.04	-0.27
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.41	0.62	0.09	-0.14

Table 18: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 300 K and 200 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.28	2.31	-0.10	-0.28
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.33	2.02	-0.25	-0.42
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.26	2.31	-0.35	-0.49
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.35	2.32	-0.30	-0.51
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.32	2.30	-0.24	-0.43
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.38	2.35	-0.23	-0.37
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.34	2.40	-0.36	-0.53
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.45	1.27
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.06	0.90
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.96
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.21
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.36
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.43
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.27
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.93
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.33	0.56	-	1.04
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.36	1.04	-	0.92
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.25	1.06	-	0.77
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.78
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.56	-0.92
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.58	-0.98
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.53	-0.84
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.61
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.50
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.39
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.38	-	-	0.37
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.32	0.78	-0.14	-0.49
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.26	0.60	-0.08	-0.63
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.27	0.52	-0.41	-0.82
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.39	0.67	-0.43	-0.77
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.45	0.73	0.45	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.33	0.76	0.31	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.33	0.80	0.41	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.37	0.99	0.60	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.31	0.67	-0.36	-0.66
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.43	0.74	-0.40	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.30	0.72	-0.30	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.39	0.68	-0.09	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.33	0.59	-0.20	-0.37
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.39	0.53	-0.14	-0.33
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.38	0.61	-0.06	-0.28
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.39	0.60	0.07	-0.16

Table 19: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 300 K and 300 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.27	2.30	-0.11	-0.29
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.32	2.01	-0.26	-0.43
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.48	2.30	-0.36	-0.50
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.34	2.31	-0.31	-0.52
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.31	2.29	-0.25	-0.44
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.37	2.34	-0.24	-0.38
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.33	2.39	-0.37	-0.54
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.45	1.27
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.06	0.90
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.97
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.22
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.37
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.44
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.28
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.94
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.32	0.55	-	1.03
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.35	1.03	-	0.91
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.24	1.05	-	0.76
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.77
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.56	-0.91
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.58	-0.97
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.53	-0.83
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.62
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.51
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.40
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.37	-	-	0.36
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.31	0.77	-0.15	-0.49
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.25	0.59	-0.30	-0.63
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.26	0.51	-0.42	-0.82
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.38	0.65	-0.44	-0.77
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.44	0.72	0.44	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.32	0.75	0.30	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.32	0.78	0.40	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.36	0.98	0.58	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.29	0.66	-0.37	-0.66
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.42	0.73	-0.41	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.29	0.71	-0.31	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.38	0.67	-0.10	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.32	0.58	-0.21	-0.38
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.52	-0.15	-0.34
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.60	-0.07	-0.29
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.38	0.59	0.06	-0.17

Table 20: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 300 K and 400 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.27	2.29	-0.12	-0.30
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.31	2.00	-0.27	-0.44
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.25	2.29	-0.37	-0.50
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.33	2.30	-0.32	-0.52
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.30	2.28	-0.26	-0.45
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.36	2.33	-0.25	-0.39
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.32	2.39	-0.38	-0.55
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.45	1.27
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.06	0.90
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.98
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.22
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.38
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.44
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.29
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.95
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.31	0.54	-	1.02
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.34	1.02	-	0.90
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.24	1.05	-	0.75
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.76
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.56	-0.90
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.58	-0.96
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.53	-0.82
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.63
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.51
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.41
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.36	-	-	0.35
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.30	0.76	-0.16	-0.49
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.25	0.58	-0.31	-0.63
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.25	0.50	-0.42	-0.82
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.38	0.65	-0.44	-0.77
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.43	0.72	0.43	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.31	0.74	0.29	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.31	0.78	0.40	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.35	0.98	0.58	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.29	0.65	-0.38	-0.66
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.41	0.72	-0.42	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.28	0.70	-0.31	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.38	0.66	-0.10	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.31	0.57	-0.21	-0.39
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.51	-0.15	-0.35
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.36	0.59	-0.08	-0.30
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.58	0.05	-0.18

Table 21: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 300 K and 500 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.26	2.28	-0.13	-0.31
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.31	1.99	-0.27	-0.44
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.24	2.29	-0.37	-0.51
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.33	2.29	-0.33	-0.53
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.30	2.27	-0.27	-0.45
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.36	2.32	-0.26	-0.39
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.31	2.38	-0.38	-0.56
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.45	1.27
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.06	0.90
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.99
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.23
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.38
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.45
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.29
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.96
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.31	0.53	-	1.02
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.33	1.02	-	0.89
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.23	1.04	-	0.75
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.75
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.56	-0.90
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.12	-0.58	-0.95
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.14	-0.53	-0.82
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.63
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.52
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.41
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.35	-	-	0.35
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.04
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.30	0.75	-0.17	-0.49
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.24	0.58	-0.31	-0.63
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.24	0.50	-0.43	-0.82
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.37	0.64	-0.45	-0.77
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.43	0.71	0.43	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.30	0.74	0.29	0.03
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.31	0.77	0.39	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.35	0.97	0.57	0.19
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.28	0.64	-0.39	-0.66
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.40	0.72	-0.42	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.28	0.69	-0.32	-0.56
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.37	0.66	-0.11	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.31	0.56	-0.22	-0.39
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.36	0.51	-0.16	-0.35
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.35	0.59	-0.08	-0.31
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.58	0.04	-0.18

Table 22: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K and 50 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.37	2.44	-0.00	-0.21
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.44	2.17	-0.13	-0.33
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.38	2.46	-0.24	-0.40
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.47	2.47	-0.17	-0.42
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.43	2.44	-0.14	-0.36
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.51	2.50	-0.11	-0.27
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.47	2.57	-0.23	-0.43
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.42	1.21
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.03	0.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.82
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.05
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.20
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.26
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.11
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.77
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.44	0.69	-	1.18
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.47	1.19	-	1.06
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.36	1.22	-	0.92
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.90
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.57	-1.04
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.58	-1.10
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.15	-0.55	-0.96
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.47
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.35
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.25
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.49	-	-	0.50
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.03
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.43	0.92	-0.03	-0.47
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.37	0.75	-0.16	-0.61
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.40	0.67	-0.28	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.52	0.82	-0.29	-0.73
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.59	0.85	0.59	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.43	0.87	0.42	0.04
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.45	0.91	0.53	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.49	1.13	0.72	0.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.41	0.79	-0.28	-0.67
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.54	0.87	-0.29	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.41	0.85	-0.19	-0.57
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.52	0.80	0.03	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.44	0.69	-0.10	-0.32
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.50	0.64	-0.03	-0.27
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.49	0.72	0.04	-0.23
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.51	0.71	0.17	-0.10

Table 23: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K and 100 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.35	2.42	-0.03	-0.24
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.42	2.15	-0.15	-0.36
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.35	2.44	-0.26	-0.42
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.45	2.45	-0.19	-0.44
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.41	2.42	-0.16	-0.38
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.49	2.48	-0.13	-0.29
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.45	2.55	-0.25	-0.46
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.42	1.21
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.03	0.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.07
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.22
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.28
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.13
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.79
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.42	0.67	-	1.16
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.45	1.17	-	1.04
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.34	1.20	-	0.90
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.88
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.57	-1.02
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.58	-1.08
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.15	-0.55	-0.94
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.49
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.37
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.27
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.46	-	-	0.48
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.03
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.41	0.90	-0.05	-0.47
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.35	0.73	-0.18	-0.61
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.38	0.65	-0.30	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.50	0.80	-0.31	-0.73
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.57	0.83	0.57	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.41	0.85	0.40	0.04
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.43	0.89	0.51	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.46	1.11	0.70	0.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.39	0.76	-0.30	-0.67
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.52	0.85	-0.31	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.39	0.82	-0.21	-0.57
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.50	0.78	0.01	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.42	0.67	-0.13	-0.34
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.48	0.62	-0.05	-0.29
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.47	0.70	0.02	-0.25
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.49	0.69	0.15	-0.13

Table 24: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K and 200 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.33	2.40	-0.05	-0.26
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.40	2.13	-0.17	-0.38
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.33	2.42	-0.28	-0.44
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.43	2.43	-0.21	-0.46
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.39	2.40	-0.18	-0.40
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.47	2.46	-0.15	-0.32
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.42	2.53	-0.27	-0.48
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.42	1.21
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.03	0.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.86
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.09
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.24
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.30
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.15
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.81
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.40	0.65	-	1.14
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.43	1.14	-	1.02
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.32	1.17	-	0.88
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.86
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.57	-1.00
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.58	-1.06
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.15	-0.55	-0.92
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.51
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.39
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.29
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.44	-	-	0.46
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.03
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.39	0.88	-0.07	-0.47
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.33	0.71	-0.20	-0.61
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.35	0.63	-0.32	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.48	0.78	-0.33	-0.73
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.54	0.80	0.54	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.39	0.83	0.38	0.04
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.41	0.87	0.49	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.44	1.09	0.67	0.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.37	0.74	-0.32	-0.67
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.50	0.83	-0.34	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.37	0.80	-0.23	-0.57
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.48	0.76	-0.01	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.40	0.65	-0.15	-0.36
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.46	0.60	-0.07	-0.31
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.45	0.68	-0.00	-0.27
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.47	0.67	0.13	-0.15

Table 25: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K and 300 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.32	2.39	-0.06	-0.27
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.39	2.12	-0.19	-0.39
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.32	2.40	-0.30	-0.46
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.42	2.42	-0.23	-0.47
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.38	2.39	-0.19	-0.42
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.46	2.45	-0.16	-0.33
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.41	2.52	-0.28	-0.49
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.42	1.21
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.03	0.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.87
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.10
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.26
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.32
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.16
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.82
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.38	0.64	-	1.13
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.42	1.13	-	1.01
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.31	1.16	-	0.87
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.85
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.57	-0.99
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.58	-1.05
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.15	-0.55	-0.90
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.53
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.40
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.30
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.43	-	-	0.45
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.03
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.38	0.86	-0.08	-0.47
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.32	0.70	-0.21	-0.61
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.34	0.62	-0.33	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.47	0.76	-0.35	-0.73
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.53	0.79	0.53	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.38	0.82	0.36	0.04
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.39	0.86	0.48	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.43	1.07	0.66	0.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.36	0.73	-0.33	-0.67
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.48	0.81	-0.35	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.36	0.79	-0.24	-0.57
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.47	0.75	-0.02	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.38	0.64	-0.16	-0.37
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.45	0.59	-0.09	-0.32
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.44	0.67	-0.01	-0.28
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.46	0.66	0.12	-0.16

Table 26: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K and 400 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.31	2.38	-0.07	-0.28
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.38	2.11	-0.20	-0.40
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.31	2.40	-0.30	-0.46
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.41	2.41	-0.23	-0.48
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.37	2.38	-0.20	-0.42
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.45	2.44	-0.17	-0.34
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.40	2.51	-0.29	-0.50
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.42	1.21
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.03	0.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.88
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.11
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.27
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.33
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.17
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.83
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.38	0.63	-	1.12
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.41	1.12	-	1.00
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.30	1.15	-	0.86
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.84
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.57	-0.98
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.58	-1.04
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.15	-0.55	-0.90
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.53
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.41
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.31
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.42	-	-	0.44
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.03
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.37	0.85	-0.09	-0.47
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.31	0.69	-0.22	-0.61
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.33	0.61	-0.34	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.46	0.75	-0.35	-0.73
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.52	0.78	0.52	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.37	0.81	0.35	0.04
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.38	0.85	0.47	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.42	1.06	0.65	0.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.35	0.72	-0.34	-0.67
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.47	0.81	-0.36	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.35	0.78	-0.25	-0.57
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.46	0.74	-0.03	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.63	-0.17	-0.38
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.44	0.58	-0.10	-0.33
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.43	0.66	-0.02	-0.29
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.45	0.65	0.11	-0.17

Table 27: Relative Gibbs free energies of reactants (ΔG_r) pre-reaction complexes(ΔG_{pk1}), transition states ($\Delta G^{\ddagger}$), post–reaction complexes (ΔG_{pk2}) and products (ΔG_p) for reactions in silane–ammonia plasma at 350 K and 500 Pa. All Gibbs free energies are calculated with MP2/aug–cc–pVTZ//CASPT2/aug–cc–pVTZ method and vibrational contribution to entropy is calculated with MP2/aug–cc–pVTZ. Entropy of hydrogen molecule is taken from NIST-JANAF themochemical tables.[1] Relative Gibbs free energies are shown relative to reactants.

reaction	ΔG_r/eV	ΔG_{pk1}/eV	$\Delta G^{\ddagger}$/eV	ΔG_{pk2}/eV	ΔG_p/eV
$NH_3 + SiH_4 \longrightarrow SiH_3NH_2 + H_2$	0.0	0.31	2.37	-0.07	-0.28
$NH_3 + SiH_3NH_2 \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2 + H_2$	0.0	0.38	2.10	-0.20	-0.40
$NH_3 + SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow SiH(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.31	2.39	-0.31	-0.47
$NH_3 + SiH(NH_2)_3 \longrightarrow Si(NH_2)_4 + H_2$	0.0	0.40	2.40	-0.24	-0.49
$SiH_4 + NH_2SiH_3 \longrightarrow (SiH_3)_2NH + H_2$	0.0	0.36	2.37	-0.21	-0.43
$SiH_4 + (SiH_3)_2NH \longrightarrow (SiH_3)_3N + H_2$	0.0	0.44	2.43	-0.18	-0.34
$SiH_3NH_2 + (NH_2)_3SiH \longrightarrow SiH_3{-}NH{-}Si(NH_2)_3 + H_2$	0.0	0.40	2.50	-0.30	-0.50
$SiH_3NH_2 \longrightarrow SiHNH_2 + H_2$	0.0	-	2.59	1.42	1.21
$SiH_2(NH_2)_2 \longrightarrow Si(NH_2)_2 + H_2$	0.0	-	3.03	1.03	0.84
$NH_2^{\cdot} + SiH_3^{\cdot} \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	-	-	-3.89
$NH_2^{\cdot} + SiH_2NH_2^{\cdot} \longrightarrow SiH_2(NH_2)_2$	0.0	-	-	-	-4.12
$NH_2^{\cdot} + SiH(NH_2)_2^{\cdot} \longrightarrow SiH(NH_2)_3$	0.0	-	-	-	-4.27
$NH_2^{\cdot} + Si(NH_2)_3^{\cdot} \longrightarrow Si(NH_2)_4$	0.0	-	-	-	-4.33
$SiH_3^{\cdot} + SiH_3NH^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_2NH$	0.0	-	-	-	-4.18
$SiH_3^{\cdot} + (SiH_3)_2N^{\cdot} \longrightarrow (SiH_3)_3N$	0.0	-	-	-	-4.84
$SiH_3^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_3^{\cdot}$	0.0	0.37	0.62	-	1.12
$NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2NH_3^{\cdot}$	0.0	0.40	1.12	-	0.99
$(NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot}$	0.0	0.29	1.15	-	0.85
$NH_3SiH_3^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.27	-0.39	-0.83
$NH_2SiH_2NH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	-	0.21	-0.57	-0.97
$(NH_2)_2SiHNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	-	0.13	-0.58	-1.03
$(NH_2)_3SiNH_3^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	-	0.15	-0.55	-0.89
$SiH_2 + NH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_3$	0.0	-	-	-	-0.54
$SiH_2 + NH_2SiH_3 \longrightarrow SiH_2{-}NH_2SiH_3$	0.0	-	-	-	-0.42
$SiH_2 + NH(SiH_3)_2 \longrightarrow SiH_2{-}NH(SiH_3)_2$	0.0	-	-	-	-0.32
$SiH_2{-}NH_3 + NH_3 \longrightarrow NH_3{-}SiH_2{-}NH_3$	0.0	0.42	-	-	0.43
$SiH_2{-}NH_3 \longrightarrow SiH_3NH_2$	0.0	-	1.44	-	-1.75
$SiH_2{-}NH_2SiH_3 \longrightarrow NH(SiH_3)_2$	0.0	-	1.22	-	-1.93
$SiH_2{-}NH(SiH_3)_2 \longrightarrow N(SiH_3)_3$	0.0	-	1.05	-	-2.03
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow NH_2SiH_3 + H^{\cdot}$	0.0	0.36	0.85	-0.10	-0.47
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow (NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot}$	0.0	0.30	0.68	-0.23	-0.61
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_3SiH + H^{\cdot}$	0.0	0.33	0.60	-0.35	-0.80
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_4Si + H^{\cdot}$	0.0	0.45	0.75	-0.36	-0.73
$SiH_3^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_4 + SiH_3^{\cdot}$	0.0	0.52	0.78	0.52	0.02
$SiH_3^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.36	0.80	0.35	0.04
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.38	0.85	0.46	0.07
$SiH_3^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + SiH_4$	0.0	0.42	1.06	0.65	0.20
$NH_2^{\cdot} + SiH_4 \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.72	-0.35	-0.67
$NH_2^{\cdot} + NH_2SiH_3 \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.47	0.80	-0.36	-0.65
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_2SiH_2 \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.34	0.78	-0.26	-0.57
$NH_2^{\cdot} + (NH_2)_3SiH \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + NH_3$	0.0	0.45	0.74	-0.04	-0.45
$SiH_4 + H^{\cdot} \longrightarrow SiH_3^{\cdot} + H_2$	0.0	0.37	0.63	-0.17	-0.39
$NH_2SiH_3 + H^{\cdot} \longrightarrow NH_2SiH_2^{\cdot} + H_2$	0.0	0.43	0.58	-0.10	-0.34
$(NH_2)_2SiH_2 + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_2SiH^{\cdot} + H_2$	0.0	0.42	0.65	-0.03	-0.30
$(NH_2)_3SiH + H^{\cdot} \longrightarrow (NH_2)_3Si^{\cdot} + H_2$	0.0	0.44	0.64	0.10	-0.17

1. M. W. Chase, *Journal of Physical and Chemical Reference Data, Monograph*, 1998, *9*, 1–1951