Electronic Supplementary Material (ESI) for Physical Chemistry Chemical Physics

Theoretical Investigations into the Nucleation of Silica Growth in Basic Solution Part II – Derivation and Benchmarking of a First Principles Kinetic Model of Solution Chemistry. Supplementary Information.

Grant J. McIntosh

School of Chemical Sciences, University of Auckland, Private Bag 92019, Auckland, New Zealand

Table S1. Full kinetic parameters; pre-exponential factor in L-mol-s-K units, activation energies are in kJ mol^{-1}; [-] denotes a site of negative charge in a particular cluster.

A	T^n	E_a	Reaction
1.46×10^{45}	-12.227	117.0	$2Si(OH)_4$ ==> $(OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
6.62×10^{28}	-6.574	135.4	$(OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $2Si(OH)_4$
1.45×10^{02}	2.570	32.4	$Si(OH)_4 + Si[O\text{-}](OH)_3$ ==> $Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$
4.68×10^{11}	0.411	35.6	$Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$ ==> $Si(OH)_4 + Si[O\text{-}](OH)_3$
3.89×10^{12}	-0.443	38.2	$Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$ ==> $[O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
1.00×10^{12}	0.410	81.6	$[O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$
# Trimer			
1.08×10^{13}	0	18.0	$Si(OH)_4 + [O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si(OH)_4...[O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
5.00×10^{13}	0	13.6	$Si(OH)_4...[O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si(OH)_4 + [O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
1.39×10^{12}	-0.634	28.3	$Si(OH)_4...[O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$
2.57×10^{11}	0.805	15.7	$Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$ ==> $Si(OH)_4...[O\text{-}](OH)_2Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
2.94×10^{12}	0	29.0	$Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$ ==> $[O\text{-}]Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
3.98×10^{12}	0.125	83.1	$[O\text{-}]Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si[\text{-}](OH)_4\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$
3.04×10^{10}	1.640	89.8	$[O\text{-}]Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $cyc\{\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\}$
5.61×10^{10}	1.088	42.6	$cyc\{\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\}$ ==> $[O\text{-}]Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
1.10×10^{11}	1.035	46.7	$cyc\{\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\}$ ==> $cyc\{\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si[O\text{-}](OH)\text{-}\}.H_2O$
5.88×10^{12}	0.285	89.7	$cyc\{\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si[O\text{-}](OH)\text{-}\}.H_2O$ ==> $cyc\{\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si(OH)_2\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\}$
1.08×10^{13}	0	18.0	$Si[O\text{-}](OH)_3 + (OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si[O\text{-}](OH)_3...(OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
5.00×10^{13}	0	5.0	$Si[O\text{-}](OH)_3...(OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si[O\text{-}](OH)_3 + (OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
3.71×10^{11}	0.067	16.7	$Si[O\text{-}](OH)_3...(OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si(OH)_3\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$
1.46×10^{13}	-0.395	14.2	$Si(OH)_3\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$ ==> $Si[O\text{-}](OH)_3...(OH)_3Si\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
6.13×10^{12}	-0.370	60.3	$Si(OH)_3\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$ ==> $Si(OH)_3\text{-}O\text{-}Si(OH)[O\text{-}]\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$
5.22×10^{12}	-0.120	80.2	$Si(OH)_3\text{-}O\text{-}Si(OH)[O\text{-}]\text{-}O\text{-}Si(OH)_3.H_2O$ ==> $Si(OH)_3\text{-}O\text{-}Si[\text{-}](OH)_3\text{-}O\text{-}Si(OH)_3$

Tetramer

1.14×10^{13}	0	18.0	Si(OH)$_4$ + [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$...[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
5.00×10^{13}	0	5.8	Si(OH)$_4$...[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$ + [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
8.84×10^{11}	0.305	31.0	Si(OH)$_4$...[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[-](OH)$_4$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
4.36×10^{11}	0.338	8.7	Si[-](OH)$_4$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_4$ + [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
3.31×10^{11}	0.700	68.5	Si[-](OH)$_4$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==> [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.55×10^{12}	0.355	129.2	[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[-](OH)$_4$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
1.75×10^{10}	-0.051	40.7	[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_2$ }-O-Si(OH)$_3$
4.35×10^{08}	2.149	51.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_2$ }-O-Si(OH)$_3$ ==> [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
4.34×10^{11}	0.581	46.5	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_2$ }-O-Si(OH)$_3$ ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-] }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
2.98×10^{13}	-0.965	52.4	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-] }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_2$ }-O-Si(OH)$_3$
3.67×10^{10}	0.544	51.0	[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-}
1.92×10^{09}	1.172	44.6	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-} ==> [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
6.05×10^{10}	0.593	48.1	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-} ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-}.H$_2$O
9.67×10^{12}	-0.642	75.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-}.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-}

1.14×10^{13}	0	18.0	Si[O-](OH)$_3$ + Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
5.00×10^{13}	0	5.0	Si[O-](OH)$_3$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$ + Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
9.22×10^{09}	0.442	35.1	Si[O-](OH)$_3$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
2.75×10^{06}	3.613	40.3	Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==> Si[O-](OH)$_3$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
5.22×10^{08}	1.775	41.7	Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.00×10^{11}	0	84.4	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
1.77×10^{11}	1.164	41.9	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$
6.11×10^{11}	1.188	22.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
4.30×10^{11}	0.562	61.6	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$ ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
4.21×10^{11}	0.292	103.7	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$

1.14×10^{13}	0	18.0	Si(OH)$_4$ + Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
5.00×10^{13}	0	40.4	Si(OH)$_4$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$ + Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
2.20×10^{10}	1.332	38.3	Si(OH)$_4$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si[-](OH)$_4$
1.57×10^{11}	1.083	35.5	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si[-](OH)$_4$ ==> Si(OH)$_4$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.53×10^{13}	-0.829	59.2	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si[-](OH)$_4$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O
1.56×10^{12}	-0.364	91.7	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si[-](OH)$_4$
8.93×10^{10}	0.242	51.9	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$
5.74×10^{10}	0.670	29.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O

1.14×10^{13}	0	18.0	Si[O-](OH)$_3$ + Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...{Si(OH)$_3$-O-}Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
5.00×10^{13}	0	5.0	Si[O-](OH)$_3$...{Si(OH)$_3$-O-}Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$ + Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.44×10^{11}	0.382	32.4	Si[O-](OH)$_3$...{Si(OH)$_3$-O-}Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_2${-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_3$
9.65×10^{09}	1.685	25.0	Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_2${-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_3$ ==> Si[O-](OH)$_3$...{Si(OH)$_3$-O-}Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
3.14×10^{11}	0.781	23.2	Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_2${-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O
5.78×10^{12}	-0.723	61.8	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_2${-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_3$

1.11×10^{13}	0	18.0	Si(OH)$_4$ + cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O
5.00×10^{13}	0	5.0	Si(OH)$_4$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$ + cyc{-O-Si(OH)$_2$.O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O

1.21×10^{12}	-0.667	7.3	Si(OH)$_4$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si[-](OH)$_4$
5.12×10^{11}	0.311	5.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si[-](OH)$_4$ ==> Si(OH)$_4$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$.O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O
2.59×10^{10}	2.213	48.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si[-](OH)$_4$ ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O
3.27×10^{11}	1.059	72.9	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si[-](OH)$_4$
1.11×10^{13}	0	18.0	Si[O-](OH)$_3$ + cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O
5.00×10^{13}	0	35.7	Si[O-](OH)$_3$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$ + cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O
2.84×10^{10}	-0.243	15.5	Si[O-](OH)$_3$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_2$ }-O-Si(OH)$_3$
1.23×10^{10}	1.270	13.2	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[-](OH)$_2$ }-O-Si(OH)$_3$ ==> Si[O-](OH)$_3$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O
1.01×10^{11}	0	55.3	(OH)$_3$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + [O-](OH)$_2$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
6.48×10^{08}	2.659	32.2	Si(OH)$_3$-O-Si[-](OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==>(OH)$_3$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + [O-](OH)$_2$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O

#CONDENSD STRUCTURES

2.87×10^{11}	0.653	47.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> bicyc{term(OH)$_4$}
3.58×10^{11}	0.663	12.0	bicyc{term(OH)$_4$} ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
2.48×10^{11}	0.859	83.8	bicyc{term(OH)$_4$} ==> bicyc{term(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O
1.96×10^{13}	-0.157	87.0	bicyc{term(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O ==> bicyc{term(OH)$_4$}
3.17×10^{10}	0.286	23.4	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-}.H$_2$O ==> bicyc{bridge(OH)$_2$}
1.75×10^{11}	0.522	20.8	bicyc{bridge(OH)$_2$} ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-}.H$_2$O
1.01×10^{13}	-0.201	74.2	bicyc{bridge(OH)$_2$} ==> bicyc{bridge(OH)[O]-}.H$_2$O
4.33×10^{12}	-0.305	73.5	bicyc{bridge(OH)[O]-}.H$_2$O ==> bicyc{bridge(OH)$_2$}
1.63×10^{12}	-1.374	1.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si(OH)$_3$[O-].H$_2$O ==> bicyc{bridge(OH)$_2$}
9.24×10^{10}	0.385	18.9	bicyc{bridge(OH)$_2$} ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si(OH)$_3$[O-].H$_2$O
2.02×10^{13}	-0.841	42.0	bicyc{term(OH)2[O]-}.H$_2$O ==> tetcluster{(OH)$_2$}
5.70×10^{11}	0.212	4.5	tetcluster{(OH)$_2$} ==> bicyc{term(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O
1.34×10^{15}	-1.246	86.4	tetcluster{(OH)$_2$} ==> tetcluster{(O-)}
7.25×10^{12}	-0.374	106.6	tetcluster{(O-)} ==> tetcluster{(OH)$_2$}

pH reactions

1.18×10^{08}	0	56.1	H$_2$O ==> H + OH
1.32×10^{14}	0	0.3	H + OH ==> H$_2$O
1.27×10^{90}	-27.613	98.3	Si(OH)$_4$ ==> Si[O-](OH)$_3$ + H
1.70×10^{14}	0	0.3	Si[O-](OH)$_3$ + H ==> Si(OH)$_4$
3.00×10^{14}	0	0.3	[O-](OH)$_2$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H ==> (OH)$_3$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.90×10^{90}	-27.613	94.3	(OH)$_3$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> [O-](OH)$_2$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H

Trimer

3.00×10^{14}	0	0.3	[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O + H ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O

1.90×10^{90}	-27.613	0.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H
# Tetramer			
3.00×10^{14}	0	0.3	[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==> [O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-}.H$_2$O + H ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-} ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-}.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-] }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$ ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-] }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H2O + H ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$.H2O + H ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$ ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O + H ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_3$
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_3$ ==> Si(OH)$_3$-O-Si(OH){-O-Si(OH)$_3$}-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si(OH)$_2$[O-].H2O + H==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH) }-O-Si(OH)$_3$ ==> cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-SiOH }-O-Si(OH)$_2$[O-].H$_2$O + H
#CONDENSD STRUCTURES			
3.00×10^{14}	0	0.3	bicyc{term(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O + H ==> bicyc
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	bicyc==> bicyc{term(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	bicyc{bridge(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O + H ==> bicyc
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	bicyc==> bicyc{bridge(OH)$_2$[O]-}.H$_2$O + H
3.00×10^{14}	0	0.3	tetcluster{(O-)}+ H ==> tetcluster
1.90×10^{90}	-27.613	0.0	tetcluster==> tetcluster{(O-)} + H
# Intermolecular encounter pair pH reactions			
1.04×10^{13}	0	11.5	Si(OH)$_4$...[O-](OH)$_2$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...(OH)$_3$Si-O-Si(OH)$_3$.H2O
1.00×10^{14}	0	0.3	Si[O-](OH)$_3$...(OH)$_3$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$...[O-](OH)$_2$Si-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.85×10^{15}	0	4.6	Si(OH)$_4$...[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.00×10^{14}	0	0.3	Si[O-](OH)$_3$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$...[O-]Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
9.41×10^{12}	0	0.4	Si(OH)$_4$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...{Si(OH)$_3$-O-}Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.00×10^{14}	0	0.3	Si[O-](OH)$_3$...{Si(OH)$_3$-O-}Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O ==> Si(OH)$_4$...Si(OH)$_3$-O-Si(OH)[O-]-O-Si(OH)$_3$.H$_2$O
1.00×10^{14}	0	0.3	Si(OH)$_4$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O ==> Si[O-](OH)$_3$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O
9.59×10^{13}	0	29.3	Si[O-](OH)$_3$...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-}.H$_2$O ==> Si(OH)4...cyc{-O-Si(OH)$_2$-O-Si(OH)$_2$-O-Si[O-](OH)-}.H$_2$O