

Supplementary Material

pH as a primary control in environmental microbiology:

1. Thermodynamic perspective

Qusheng Jin*, Matthew F. Kirk

*** Correspondence:** Q.J.: qjin@uoregon.edu

1 Supplementary Data

We calculated the energy yields of microbial redox reactions by simulating the speciation of dissolved mass using the React program of the software package Geochemist's Workbench version 9.0 (Bethke, 2008). We updated the LLNL thermodynamic database "thermo.dat" by importing the entries for methanol, ethanol, lactic acid, propionic acid, and butyric acid from the Version 8, Release 6 of the LLNL dataset (Delany and Lundeen, 1989). We also added new entries for natural ferrihydrite and goethite. The log K value for ferrihydrite dissolution ($\text{Fe}(\text{OH})_3 + 3\text{H}^+ = \text{Fe}^{+++} + 3\text{H}_2\text{O}$) at 25 °C is 2.7 (Lindsay, 1979), and that for goethite dissolution ($\text{FeOOH} + 3\text{H}^+ = \text{Fe}^{+++} + 2\text{H}_2\text{O}$) is 1.4 (Bigham et al., 1996).

The input script for simulating chemical speciation at different pHs is:

temperature = 25 C

pH = 7

decouple ALL

swap Goethite for Fe^{+++}

swap Lactate for Lactic_acid(aq)

swap Propanoate for Propanoic_acid(aq)

swap Butanoate for Butanoic_acid(aq)

Goethite = 1 free g

Na^+ = 10 mmol/kg

Ca^{++} = 2 mmol/kg

HCO_3^- = 3 mmol/kg

SO_4^{--} = 1.0 mmol/kg

Cl^- = 10 mmol/kg

Lactate = .01 mmol/kg
 CH₃COO⁻ = .01 mmol/kg
 Propanoate = .01 mmol/kg
 Butanoate = .01 mmol/kg
 Ethanol(aq) = .01 mmol/kg
 Methanol(aq) = .01 mmol/kg

CH₄(aq) = .001 mmol/kg
 Fe⁺⁺ = .010 mmol/kg
 HS⁻ = .001 mmol/kg
 H₂(aq) = 1e-4 mmol/kg

fix pH
 precip off
 go

pickup
 slide pH to 14
 balance off

(cont'd)
 slide pH to 1

The output of the simulation includes the activities of chemical species at different pHs (table S1).

Table S1. Activities of chemical species at different pHs in the hypothetical freshwater environment.

pH	Butanoate activity	CH ₃ COO- activity	CH ₄ (aq) activity	Ethanol(aq) activity	Fe ⁺⁺ activity	H ⁺ activity	H ₂ (aq) activity	H ₂ S(aq) activity	HCO ₃ - activity	Lactate activity	Methanol(aq) activity	Propanoate activity	SO ₄ --
1	1.55E-09	1.71E-09	1.07E-06	9.99E-06	3.01E-06	0.1	1.07E-07	9.99E-07	1.29E-08	1.37E-08	9.99E-06	1.29E-09	8.17E-06
1.06	1.78E-09	1.96E-09	1.07E-06	9.99E-06	3.04E-06	0.0871	1.07E-07	9.99E-07	1.48E-08	1.57E-08	9.99E-06	1.48E-09	8.36E-06
1.12	2.05E-09	2.25E-09	1.07E-06	9.99E-06	3.06E-06	0.07586	1.07E-07	9.99E-07	1.70E-08	1.80E-08	9.99E-06	1.70E-09	8.54E-06
1.18	2.35E-09	2.57E-09	1.07E-06	9.99E-06	3.08E-06	0.06607	1.07E-07	9.99E-07	1.95E-08	2.07E-08	9.99E-06	1.95E-09	8.71E-06
1.24	2.70E-09	2.95E-09	1.06E-06	9.99E-06	3.20E-06	0.05754	1.06E-07	9.99E-07	2.24E-08	2.37E-08	9.99E-06	2.24E-09	9.78E-06
1.3	3.10E-09	3.43E-09	1.04E-06	1.00E-05	3.64E-06	0.05012	1.04E-07	1.00E-06	2.58E-08	2.73E-08	1.00E-05	2.57E-09	1.50E-05
1.36	3.56E-09	3.96E-09	1.03E-06	1.00E-05	4.07E-06	0.04365	1.03E-07	1.00E-06	2.96E-08	3.13E-08	1.00E-05	2.96E-09	2.26E-05
1.42	4.09E-09	4.57E-09	1.02E-06	1.00E-05	4.43E-06	0.03802	1.02E-07	1.00E-06	3.40E-08	3.59E-08	1.00E-05	3.40E-09	3.30E-05
1.48	4.69E-09	5.26E-09	1.01E-06	1.00E-05	4.73E-06	0.03311	1.01E-07	1.00E-06	3.90E-08	4.12E-08	1.00E-05	3.90E-09	4.70E-05
1.54	5.39E-09	6.05E-09	1.01E-06	1.00E-05	4.97E-06	0.02884	1.01E-07	1.00E-06	4.48E-08	4.73E-08	1.00E-05	4.48E-09	6.50E-05
1.6	6.19E-09	6.95E-09	1.01E-06	1.00E-05	5.16E-06	0.02512	1.01E-07	1.00E-06	5.14E-08	5.43E-08	1.00E-05	5.14E-09	8.71E-05
1.66	7.10E-09	7.99E-09	1.01E-06	1.00E-05	5.30E-06	0.02188	1.01E-07	1.00E-06	5.91E-08	6.23E-08	1.00E-05	5.90E-09	0.000113
1.72	8.16E-09	9.18E-09	1.01E-06	1.00E-05	5.42E-06	0.01905	1.01E-07	1.00E-06	6.78E-08	7.14E-08	1.00E-05	6.77E-09	0.000142
1.78	9.36E-09	1.05E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.51E-06	0.0166	1.01E-07	1.00E-06	7.79E-08	8.19E-08	1.00E-05	7.78E-09	0.000173
1.84	1.08E-08	1.21E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.57E-06	0.01445	1.01E-07	1.00E-06	8.94E-08	9.39E-08	1.00E-05	8.93E-09	0.000204
1.9	1.23E-08	1.39E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.63E-06	0.01259	1.01E-07	1.00E-06	1.03E-07	1.08E-07	1.00E-05	1.03E-08	0.000234
1.96	1.42E-08	1.60E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.67E-06	0.01096	1.01E-07	1.00E-06	1.18E-07	1.23E-07	1.00E-05	1.18E-08	0.000263
2.08	1.87E-08	2.10E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.74E-06	0.008318	1.01E-07	1.00E-06	1.55E-07	1.62E-07	1.00E-05	1.55E-08	0.000315
2.08	1.87E-08	2.10E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.74E-06	0.008318	1.01E-07	1.00E-06	1.55E-07	1.62E-07	1.00E-05	1.55E-08	0.000315
2.14	2.14E-08	2.41E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.77E-06	0.007244	1.01E-07	1.00E-06	1.78E-07	1.85E-07	1.00E-05	1.78E-08	0.000337
2.2	2.46E-08	2.77E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.79E-06	0.00631	1.01E-07	1.00E-06	2.05E-07	2.12E-07	1.00E-05	2.04E-08	0.000357
2.26	2.82E-08	3.18E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.80E-06	0.005495	1.01E-07	1.00E-06	2.35E-07	2.43E-07	1.00E-05	2.34E-08	0.000375
2.32	3.24E-08	3.65E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.82E-06	0.004786	1.01E-07	1.00E-06	2.70E-07	2.78E-07	1.00E-05	2.69E-08	0.000391
2.38	3.72E-08	4.19E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.83E-06	0.004169	1.01E-07	1.00E-06	3.10E-07	3.17E-07	1.00E-05	3.09E-08	0.000405
2.44	4.26E-08	4.81E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.84E-06	0.003631	1.01E-07	1.00E-06	3.56E-07	3.62E-07	1.00E-05	3.54E-08	0.000418
2.5	4.89E-08	5.51E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.85E-06	0.003162	1.01E-07	1.00E-06	4.09E-07	4.14E-07	1.00E-05	4.07E-08	0.000429

Supplementary Material

2.56	5.61E-08	6.32E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.86E-06	0.002754	1.01E-07	1.00E-06	4.69E-07	4.72E-07	1.00E-05	4.67E-08	0.00044
2.62	6.44E-08	7.25E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.87E-06	0.002399	1.01E-07	1.00E-06	5.39E-07	5.37E-07	1.00E-05	5.35E-08	0.000449
2.68	7.38E-08	8.32E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.87E-06	0.002089	1.01E-07	1.00E-06	6.18E-07	6.11E-07	1.00E-05	6.14E-08	0.000457
2.74	8.47E-08	9.54E-08	1.01E-06	1.00E-05	5.88E-06	0.00182	1.01E-07	1.00E-06	7.10E-07	6.95E-07	1.00E-05	7.04E-08	0.000464
2.8	9.71E-08	1.09E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.88E-06	0.001585	1.01E-07	1.00E-06	8.15E-07	7.89E-07	1.00E-05	8.08E-08	0.000471
2.86	1.11E-07	1.25E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	0.00138	1.01E-07	1.00E-06	9.36E-07	8.94E-07	1.00E-05	9.26E-08	0.000476
2.98	1.46E-07	1.64E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	0.001047	1.01E-07	1.00E-06	1.23E-06	1.14E-06	1.00E-05	1.22E-07	0.000486
2.98	1.46E-07	1.64E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	0.001047	1.01E-07	1.00E-06	1.23E-06	1.14E-06	1.00E-05	1.22E-07	0.000486
3.1	1.92E-07	2.15E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000794	1.01E-07	1.00E-06	1.63E-06	1.45E-06	1.00E-05	1.60E-07	0.000494
3.1	1.92E-07	2.15E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000794	1.01E-07	1.00E-06	1.63E-06	1.45E-06	1.00E-05	1.60E-07	0.000494
3.16	2.19E-07	2.47E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000692	1.01E-07	1.00E-06	1.87E-06	1.62E-06	1.00E-05	1.83E-07	0.000497
3.22	2.51E-07	2.82E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000603	1.01E-07	1.00E-06	2.14E-06	1.81E-06	1.00E-05	2.09E-07	0.000499
3.28	2.87E-07	3.22E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000525	1.01E-07	1.00E-06	2.46E-06	2.02E-06	1.00E-05	2.40E-07	0.000502
3.34	3.28E-07	3.68E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000457	1.01E-07	1.00E-06	2.82E-06	2.24E-06	1.00E-05	2.74E-07	0.000504
3.4	3.74E-07	4.20E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	0.000398	1.01E-07	1.00E-06	3.24E-06	2.48E-06	1.00E-05	3.13E-07	0.000506
3.46	4.27E-07	4.78E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000347	1.01E-07	1.00E-06	3.72E-06	2.74E-06	1.00E-05	3.58E-07	0.000507
3.52	4.87E-07	5.45E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000302	1.01E-07	1.00E-06	4.27E-06	3.00E-06	1.00E-05	4.08E-07	0.000509
3.58	5.54E-07	6.20E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000263	1.01E-07	1.00E-06	4.90E-06	3.28E-06	1.00E-05	4.65E-07	0.00051
3.64	6.31E-07	7.05E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000229	1.01E-07	1.00E-06	5.63E-06	3.57E-06	1.00E-05	5.30E-07	0.000511
3.7	7.17E-07	7.99E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.0002	1.01E-07	1.00E-06	6.46E-06	3.87E-06	1.00E-05	6.03E-07	0.000512
3.76	8.13E-07	9.06E-07	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000174	1.01E-07	1.00E-06	7.42E-06	4.17E-06	1.00E-05	6.86E-07	0.000513
3.82	9.21E-07	1.02E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000151	1.01E-07	1.00E-06	8.51E-06	4.48E-06	1.00E-05	7.78E-07	0.000514
3.88	1.04E-06	1.16E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000132	1.01E-07	1.00E-06	9.77E-06	4.78E-06	1.00E-05	8.82E-07	0.000514
3.94	1.18E-06	1.30E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	0.000115	1.01E-07	1.00E-06	1.12E-05	5.09E-06	1.00E-05	9.98E-07	0.000515
4	1.32E-06	1.46E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	1.00E-04	1.01E-07	1.00E-06	1.29E-05	5.38E-06	1.00E-05	1.13E-06	0.000515
4.06	1.49E-06	1.64E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	8.71E-05	1.01E-07	9.99E-07	1.48E-05	5.67E-06	1.00E-05	1.27E-06	0.000516
4.12	1.67E-06	1.83E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	7.59E-05	1.01E-07	9.99E-07	1.69E-05	5.94E-06	1.00E-05	1.43E-06	0.000516
4.18	1.86E-06	2.04E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	6.61E-05	1.01E-07	9.99E-07	1.94E-05	6.21E-06	1.00E-05	1.60E-06	0.000516
4.24	2.07E-06	2.27E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	5.75E-05	1.01E-07	9.99E-07	2.23E-05	6.46E-06	1.00E-05	1.79E-06	0.000517
4.3	2.30E-06	2.51E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	5.01E-05	1.01E-07	9.98E-07	2.55E-05	6.69E-06	1.00E-05	2.00E-06	0.000517
4.36	2.54E-06	2.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.91E-06	4.37E-05	1.01E-07	9.98E-07	2.93E-05	6.91E-06	1.00E-05	2.22E-06	0.000517

4.42	2.80E-06	3.03E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	3.80E-05	1.01E-07	9.98E-07	3.36E-05	7.11E-06	1.00E-05	2.46E-06	0.000517
4.48	3.07E-06	3.31E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	3.31E-05	1.01E-07	9.97E-07	3.85E-05	7.29E-06	1.00E-05	2.71E-06	0.000517
4.6	3.64E-06	3.90E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	2.51E-05	1.01E-07	9.96E-07	5.04E-05	7.62E-06	1.00E-05	3.25E-06	0.000518
4.6	3.64E-06	3.90E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	2.51E-05	1.01E-07	9.96E-07	5.04E-05	7.62E-06	1.00E-05	3.25E-06	0.000518
4.66	3.94E-06	4.20E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	2.19E-05	1.01E-07	9.95E-07	5.78E-05	7.76E-06	1.00E-05	3.54E-06	0.000518
4.72	4.25E-06	4.50E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	1.91E-05	1.01E-07	9.94E-07	6.61E-05	7.88E-06	1.00E-05	3.84E-06	0.000518
4.78	4.55E-06	4.81E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	1.66E-05	1.01E-07	9.93E-07	7.56E-05	8.00E-06	1.00E-05	4.14E-06	0.000518
4.84	4.86E-06	5.11E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	1.45E-05	1.01E-07	9.92E-07	8.64E-05	8.10E-06	1.00E-05	4.45E-06	0.000518
4.9	5.16E-06	5.40E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.90E-06	1.26E-05	1.01E-07	9.91E-07	9.87E-05	8.19E-06	1.00E-05	4.75E-06	0.000518
4.96	5.45E-06	5.68E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	1.10E-05	1.01E-07	9.89E-07	0.000113	8.27E-06	1.00E-05	5.05E-06	0.000518
5.02	5.74E-06	5.96E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	9.55E-06	1.01E-07	9.88E-07	0.000129	8.34E-06	1.00E-05	5.35E-06	0.000518
5.14	6.27E-06	6.46E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	7.24E-06	1.01E-07	9.84E-07	0.000167	8.46E-06	1.00E-05	5.92E-06	0.000518
5.14	6.27E-06	6.46E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.89E-06	7.24E-06	1.01E-07	9.84E-07	0.000167	8.46E-06	1.00E-05	5.92E-06	0.000518
5.2	6.51E-06	6.69E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.88E-06	6.31E-06	1.01E-07	9.81E-07	0.00019	8.50E-06	1.00E-05	6.18E-06	0.000518
5.26	6.74E-06	6.91E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.88E-06	5.50E-06	1.01E-07	9.78E-07	0.000216	8.55E-06	1.00E-05	6.43E-06	0.000518
5.32	6.96E-06	7.10E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.88E-06	4.79E-06	1.01E-07	9.75E-07	0.000245	8.58E-06	1.00E-05	6.66E-06	0.000518
5.38	7.15E-06	7.28E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.87E-06	4.17E-06	1.01E-07	9.71E-07	0.000277	8.62E-06	1.00E-05	6.88E-06	0.000518
5.44	7.33E-06	7.45E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.87E-06	3.63E-06	1.01E-07	9.67E-07	0.000313	8.65E-06	1.00E-05	7.09E-06	0.000518
5.5	7.50E-06	7.60E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.86E-06	3.16E-06	1.01E-07	9.62E-07	0.000353	8.67E-06	1.00E-05	7.27E-06	0.000518
5.56	7.65E-06	7.74E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.86E-06	2.75E-06	1.01E-07	9.57E-07	0.000397	8.69E-06	1.00E-05	7.44E-06	0.000517
5.62	7.78E-06	7.86E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.85E-06	2.40E-06	1.01E-07	9.51E-07	0.000446	8.71E-06	1.00E-05	7.60E-06	0.000517
5.68	7.91E-06	7.97E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.85E-06	2.09E-06	1.01E-07	9.43E-07	0.000499	8.73E-06	1.00E-05	7.74E-06	0.000517
5.74	8.02E-06	8.07E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.84E-06	1.82E-06	1.01E-07	9.36E-07	0.000557	8.74E-06	1.00E-05	7.86E-06	0.000517
5.8	8.11E-06	8.16E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.83E-06	1.59E-06	1.01E-07	9.27E-07	0.00062	8.75E-06	1.00E-05	7.98E-06	0.000517
5.86	8.20E-06	8.23E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.83E-06	1.38E-06	1.01E-07	9.16E-07	0.000687	8.76E-06	1.00E-05	8.08E-06	0.000517
5.92	8.28E-06	8.30E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.82E-06	1.20E-06	1.01E-07	9.05E-07	0.000759	8.77E-06	1.00E-05	8.17E-06	0.000517
5.98	8.34E-06	8.36E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.81E-06	1.05E-06	1.01E-07	8.92E-07	0.000835	8.78E-06	1.00E-05	8.25E-06	0.000517
6.04	8.40E-06	8.42E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.80E-06	9.12E-07	1.01E-07	8.78E-07	0.000915	8.79E-06	1.00E-05	8.32E-06	0.000516
6.1	8.46E-06	8.46E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.79E-06	7.94E-07	1.01E-07	8.63E-07	0.000998	8.79E-06	1.00E-05	8.38E-06	0.000516
6.16	8.50E-06	8.50E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.78E-06	6.92E-07	1.01E-07	8.45E-07	0.001084	8.80E-06	1.00E-05	8.44E-06	0.000516
6.22	8.54E-06	8.54E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.77E-06	6.03E-07	1.01E-07	8.26E-07	0.001171	8.80E-06	1.00E-05	8.48E-06	0.000516

Supplementary Material

6.28	8.58E-06	8.57E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.76E-06	5.25E-07	1.01E-07	8.05E-07	0.00126	8.80E-06	1.00E-05	8.53E-06	0.000516
6.34	8.61E-06	8.60E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.75E-06	4.57E-07	1.01E-07	7.83E-07	0.001349	8.81E-06	1.00E-05	8.56E-06	0.000515
6.4	8.64E-06	8.62E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.74E-06	3.98E-07	1.01E-07	7.58E-07	0.001437	8.81E-06	1.00E-05	8.60E-06	0.000515
6.46	8.66E-06	8.64E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.73E-06	3.47E-07	1.01E-07	7.32E-07	0.001524	8.81E-06	1.00E-05	8.62E-06	0.000515
6.52	8.68E-06	8.66E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.72E-06	3.02E-07	1.01E-07	7.04E-07	0.001609	8.81E-06	1.00E-05	8.65E-06	0.000515
6.58	8.70E-06	8.67E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.71E-06	2.63E-07	1.01E-07	6.74E-07	0.00169	8.81E-06	1.00E-05	8.67E-06	0.000515
6.64	8.71E-06	8.69E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.70E-06	2.29E-07	1.01E-07	6.43E-07	0.001769	8.81E-06	1.00E-05	8.69E-06	0.000514
6.7	8.73E-06	8.70E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.69E-06	2.00E-07	1.01E-07	6.11E-07	0.001843	8.81E-06	1.00E-05	8.71E-06	0.000514
6.76	8.74E-06	8.71E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.68E-06	1.74E-07	1.01E-07	5.77E-07	0.001913	8.81E-06	1.00E-05	8.72E-06	0.000514
6.82	8.75E-06	8.72E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.68E-06	1.51E-07	1.01E-07	5.43E-07	0.001978	8.81E-06	1.00E-05	8.73E-06	0.000514
6.88	8.76E-06	8.73E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.67E-06	1.32E-07	1.01E-07	5.09E-07	0.002039	8.81E-06	1.00E-05	8.74E-06	0.000514
7	8.77E-06	8.74E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.65E-06	1.00E-07	1.01E-07	4.40E-07	0.002146	8.81E-06	1.00E-05	8.76E-06	0.000514
7.14	8.78E-06	8.75E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.63E-06	7.24E-08	1.01E-07	3.62E-07	0.002248	8.81E-06	1.00E-05	8.77E-06	0.000513
7.21	8.79E-06	8.75E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.62E-06	6.17E-08	1.01E-07	3.26E-07	0.00229	8.81E-06	1.00E-05	8.78E-06	0.000513
7.28	8.79E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.62E-06	5.25E-08	1.01E-07	2.92E-07	0.002327	8.81E-06	1.00E-05	8.78E-06	0.000513
7.35	8.79E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.61E-06	4.47E-08	1.01E-07	2.59E-07	0.002359	8.81E-06	1.00E-05	8.79E-06	0.000513
7.42	8.80E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.59E-06	3.80E-08	1.01E-07	2.30E-07	0.002387	8.81E-06	1.00E-05	8.79E-06	0.000513
7.49	8.80E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.58E-06	3.24E-08	1.01E-07	2.02E-07	0.00241	8.81E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000513
7.56	8.80E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.57E-06	2.75E-08	1.01E-07	1.78E-07	0.002431	8.81E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000513
7.63	8.80E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.56E-06	2.34E-08	1.01E-07	1.55E-07	0.002447	8.81E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000513
7.7	8.80E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.54E-06	2.00E-08	1.01E-07	1.35E-07	0.002461	8.81E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000513
7.77	8.81E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.52E-06	1.70E-08	1.01E-07	1.18E-07	0.002472	8.81E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000513
7.84	8.81E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.50E-06	1.45E-08	1.01E-07	1.02E-07	0.002481	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000513
7.91	8.81E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.48E-06	1.23E-08	1.01E-07	8.79E-08	0.002488	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000513
7.98	8.81E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.45E-06	1.05E-08	1.01E-07	7.58E-08	0.002492	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000513
8.05	8.81E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.42E-06	8.91E-09	1.01E-07	6.53E-08	0.002494	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000514
8.12	8.81E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.39E-06	7.59E-09	1.01E-07	5.61E-08	0.002494	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000514
8.19	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.35E-06	6.46E-09	1.01E-07	4.82E-08	0.002492	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000514
8.26	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.30E-06	5.50E-09	1.01E-07	4.13E-08	0.002488	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000514
8.33	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.25E-06	4.68E-09	1.01E-07	3.54E-08	0.002482	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000514
8.4	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.19E-06	3.98E-09	1.01E-07	3.03E-08	0.002473	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000514

8.47	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.12E-06	3.39E-09	1.01E-07	2.59E-08	0.002462	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000515
8.54	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.04E-06	2.88E-09	1.01E-07	2.21E-08	0.002449	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000515
8.61	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.95E-06	2.46E-09	1.01E-07	1.89E-08	0.002433	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000515
8.68	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.86E-06	2.09E-09	1.01E-07	1.61E-08	0.002413	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000516
8.75	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.75E-06	1.78E-09	1.01E-07	1.38E-08	0.002391	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000516
8.82	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.63E-06	1.51E-09	1.01E-07	1.17E-08	0.002364	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000517
8.89	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.50E-06	1.29E-09	1.01E-07	1.00E-08	0.002334	8.82E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000517
8.96	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.36E-06	1.10E-09	1.01E-07	8.52E-09	0.002299	8.82E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000518
9.03	8.82E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.21E-06	9.33E-10	1.01E-07	7.26E-09	0.00226	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000519
9.1	8.82E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.05E-06	7.94E-10	1.01E-07	6.19E-09	0.002215	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.00052
9.17	8.82E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.89E-06	6.76E-10	1.01E-07	5.27E-09	0.002166	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.00052
9.24	8.82E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.72E-06	5.75E-10	1.01E-07	4.49E-09	0.002111	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000521
9.31	8.82E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.54E-06	4.90E-10	1.01E-07	3.83E-09	0.00205	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000522
9.38	8.82E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.36E-06	4.17E-10	1.01E-07	3.26E-09	0.001984	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000524
9.45	8.82E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.18E-06	3.55E-10	1.01E-07	2.77E-09	0.001913	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000525
9.52	8.82E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.01E-06	3.02E-10	1.01E-07	2.36E-09	0.001836	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000526
9.59	8.82E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.83E-06	2.57E-10	1.01E-07	2.01E-09	0.001754	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000527
9.66	8.82E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.66E-06	2.19E-10	1.01E-07	1.71E-09	0.001668	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000528
9.73	8.82E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.50E-06	1.86E-10	1.01E-07	1.46E-09	0.001578	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000529
9.8	8.82E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.35E-06	1.59E-10	1.01E-07	1.24E-09	0.001485	8.82E-06	1.00E-05	8.82E-06	0.000531
9.87	8.81E-06	8.79E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.20E-06	1.35E-10	1.01E-07	1.06E-09	0.00139	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000532
9.94	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.06E-06	1.15E-10	1.01E-07	8.99E-10	0.001293	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000533
10.01	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.93E-06	9.77E-11	1.01E-07	7.65E-10	0.001197	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000534
10.08	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.81E-06	8.32E-11	1.01E-07	6.51E-10	0.001101	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000534
10.15	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.70E-06	7.08E-11	1.01E-07	5.54E-10	0.001007	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000535
10.22	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.59E-06	6.03E-11	1.01E-07	4.72E-10	0.000915	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000536
10.29	8.81E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.49E-06	5.13E-11	1.01E-07	4.01E-10	0.000827	8.81E-06	1.00E-05	8.81E-06	0.000536
10.36	8.80E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.40E-06	4.37E-11	1.01E-07	3.41E-10	0.000744	8.80E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000537
10.43	8.80E-06	8.78E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.31E-06	3.72E-11	1.01E-07	2.91E-10	0.000665	8.80E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000537
10.5	8.80E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.22E-06	3.16E-11	1.01E-07	2.47E-10	0.000592	8.80E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000538
10.57	8.80E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.14E-06	2.69E-11	1.01E-07	2.10E-10	0.000524	8.80E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000538

Supplementary Material

10.64	8.80E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.06E-06	2.29E-11	1.01E-07	1.79E-10	0.000462	8.80E-06	1.00E-05	8.80E-06	0.000538
10.71	8.79E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	9.88E-07	1.95E-11	1.01E-07	1.52E-10	0.000406	8.79E-06	1.00E-05	8.79E-06	0.000538
10.78	8.79E-06	8.77E-06	1.01E-06	1.00E-05	9.15E-07	1.66E-11	1.01E-07	1.30E-10	0.000355	8.79E-06	1.00E-05	8.79E-06	0.000538
10.85	8.79E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	8.44E-07	1.41E-11	1.01E-07	1.10E-10	0.000309	8.79E-06	1.00E-05	8.79E-06	0.000538
10.92	8.79E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	7.75E-07	1.20E-11	1.01E-07	9.37E-11	0.000269	8.79E-06	1.00E-05	8.79E-06	0.000537
10.99	8.78E-06	8.76E-06	1.01E-06	1.00E-05	7.09E-07	1.02E-11	1.01E-07	7.97E-11	0.000233	8.78E-06	1.00E-05	8.78E-06	0.000537
11.06	8.78E-06	8.75E-06	1.01E-06	1.00E-05	6.44E-07	8.71E-12	1.01E-07	6.78E-11	0.000201	8.78E-06	1.00E-05	8.78E-06	0.000536
11.13	8.77E-06	8.75E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.82E-07	7.41E-12	1.01E-07	5.77E-11	0.000174	8.77E-06	1.00E-05	8.77E-06	0.000536
11.2	8.77E-06	8.75E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.23E-07	6.31E-12	1.01E-07	4.90E-11	0.00015	8.77E-06	1.00E-05	8.77E-06	0.000535
11.27	8.77E-06	8.74E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.66E-07	5.37E-12	1.01E-07	4.17E-11	0.000129	8.77E-06	1.00E-05	8.77E-06	0.000534
11.34	8.76E-06	8.74E-06	1.01E-06	1.00E-05	4.13E-07	4.57E-12	1.01E-07	3.55E-11	0.00011	8.76E-06	1.00E-05	8.76E-06	0.000533
11.41	8.75E-06	8.73E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.62E-07	3.89E-12	1.01E-07	3.01E-11	9.45E-05	8.75E-06	1.00E-05	8.75E-06	0.000532
11.48	8.75E-06	8.72E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.15E-07	3.31E-12	1.01E-07	2.56E-11	8.09E-05	8.75E-06	1.00E-05	8.75E-06	0.00053
11.55	8.74E-06	8.72E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.70E-07	2.82E-12	1.01E-07	2.17E-11	6.92E-05	8.74E-06	1.00E-05	8.74E-06	0.000529
11.62	8.73E-06	8.71E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.29E-07	2.40E-12	1.01E-07	1.85E-11	5.91E-05	8.73E-06	1.00E-05	8.73E-06	0.000527
11.69	8.72E-06	8.70E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.91E-07	2.04E-12	1.01E-07	1.57E-11	5.04E-05	8.72E-06	1.00E-05	8.72E-06	0.000524
11.76	8.70E-06	8.68E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.56E-07	1.74E-12	1.01E-07	1.33E-11	4.30E-05	8.70E-06	1.00E-05	8.70E-06	0.000521
11.83	8.69E-06	8.67E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.25E-07	1.48E-12	1.01E-07	1.13E-11	3.66E-05	8.69E-06	1.00E-05	8.69E-06	0.000518
11.9	8.67E-06	8.65E-06	1.01E-06	1.00E-05	9.78E-08	1.26E-12	1.01E-07	9.56E-12	3.12E-05	8.67E-06	1.00E-05	8.67E-06	0.000515
11.9	8.67E-06	8.65E-06	1.01E-06	1.00E-05	9.78E-08	1.26E-12	1.01E-07	9.56E-12	3.12E-05	8.67E-06	1.00E-05	8.67E-06	0.000515
12.04	8.63E-06	8.61E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.48E-08	9.12E-13	1.01E-07	6.85E-12	2.26E-05	8.63E-06	1.00E-05	8.63E-06	0.000506
12.04	8.63E-06	8.61E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.48E-08	9.12E-13	1.01E-07	6.85E-12	2.26E-05	8.63E-06	1.00E-05	8.63E-06	0.000506
12.18	8.57E-06	8.56E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.74E-08	6.61E-13	1.01E-07	4.89E-12	1.63E-05	8.57E-06	1.00E-05	8.57E-06	0.000495
12.25	8.54E-06	8.53E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.86E-08	5.62E-13	1.01E-07	4.12E-12	1.38E-05	8.54E-06	1.00E-05	8.54E-06	0.000488
12.32	8.51E-06	8.50E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.24E-08	4.79E-13	1.01E-07	3.47E-12	1.17E-05	8.51E-06	1.00E-05	8.51E-06	0.00048
12.39	8.46E-06	8.46E-06	1.01E-06	1.00E-05	8.06E-09	4.07E-13	1.01E-07	2.92E-12	9.88E-06	8.46E-06	1.00E-05	8.46E-06	0.000472
12.46	8.42E-06	8.42E-06	1.01E-06	1.00E-05	5.18E-09	3.47E-13	1.01E-07	2.45E-12	8.35E-06	8.42E-06	1.00E-05	8.42E-06	0.000463
12.53	8.37E-06	8.37E-06	1.01E-06	1.00E-05	3.28E-09	2.95E-13	1.01E-07	2.05E-12	7.04E-06	8.37E-06	1.00E-05	8.37E-06	0.000453
12.6	8.31E-06	8.32E-06	1.01E-06	1.00E-05	2.06E-09	2.51E-13	1.01E-07	1.71E-12	5.94E-06	8.31E-06	1.00E-05	8.31E-06	0.000442
12.67	8.25E-06	8.26E-06	1.01E-06	1.00E-05	1.29E-09	2.14E-13	1.01E-07	1.42E-12	4.99E-06	8.25E-06	1.00E-05	8.25E-06	0.00043
12.74	8.19E-06	8.20E-06	1.02E-06	1.00E-05	7.98E-10	1.82E-13	1.02E-07	1.18E-12	4.19E-06	8.19E-06	1.00E-05	8.19E-06	0.000417

12.81	8.12E-06	8.14E-06	1.02E-06	1.00E-05	4.93E-10	1.55E-13	1.02E-07	9.71E-13	3.51E-06	8.12E-06	1.00E-05	8.12E-06	0.000403
12.88	8.04E-06	8.07E-06	1.02E-06	1.00E-05	3.03E-10	1.32E-13	1.02E-07	7.98E-13	2.94E-06	8.04E-06	1.00E-05	8.04E-06	0.000389
12.95	7.96E-06	7.99E-06	1.02E-06	1.00E-05	1.86E-10	1.12E-13	1.02E-07	6.51E-13	2.45E-06	7.96E-06	1.00E-05	7.96E-06	0.000374
13.02	7.88E-06	7.92E-06	1.03E-06	1.00E-05	1.14E-10	9.55E-14	1.03E-07	5.29E-13	2.03E-06	7.88E-06	1.00E-05	7.88E-06	0.000358
13.09	7.79E-06	7.84E-06	1.03E-06	1.00E-05	6.97E-11	8.13E-14	1.03E-07	4.26E-13	1.68E-06	7.79E-06	1.00E-05	7.79E-06	0.000342
13.16	7.70E-06	7.76E-06	1.04E-06	1.01E-05	4.26E-11	6.92E-14	1.04E-07	3.41E-13	1.39E-06	7.70E-06	1.01E-05	7.70E-06	0.000326
13.23	7.61E-06	7.67E-06	1.04E-06	1.01E-05	2.60E-11	5.89E-14	1.04E-07	2.70E-13	1.14E-06	7.61E-06	1.01E-05	7.61E-06	0.000309
13.3	7.52E-06	7.59E-06	1.05E-06	1.01E-05	1.58E-11	5.01E-14	1.05E-07	2.12E-13	9.39E-07	7.52E-06	1.01E-05	7.52E-06	0.000292
13.37	7.43E-06	7.50E-06	1.06E-06	1.01E-05	9.66E-12	4.27E-14	1.06E-07	1.65E-13	7.67E-07	7.43E-06	1.01E-05	7.43E-06	0.000276
13.44	7.33E-06	7.42E-06	1.07E-06	1.01E-05	5.88E-12	3.63E-14	1.07E-07	1.27E-13	6.26E-07	7.33E-06	1.01E-05	7.33E-06	0.00026
13.51	7.24E-06	7.35E-06	1.08E-06	1.01E-05	3.58E-12	3.09E-14	1.08E-07	9.72E-14	5.09E-07	7.24E-06	1.01E-05	7.24E-06	0.000244
13.58	7.16E-06	7.27E-06	1.09E-06	1.01E-05	2.19E-12	2.63E-14	1.09E-07	7.34E-14	4.13E-07	7.16E-06	1.01E-05	7.16E-06	0.00023
13.65	7.08E-06	7.21E-06	1.11E-06	1.01E-05	1.33E-12	2.24E-14	1.11E-07	5.49E-14	3.35E-07	7.08E-06	1.01E-05	7.08E-06	0.000215
13.72	7.01E-06	7.15E-06	1.13E-06	1.02E-05	8.14E-13	1.91E-14	1.13E-07	4.07E-14	2.71E-07	7.01E-06	1.02E-05	7.01E-06	0.000202
13.79	6.95E-06	7.10E-06	1.15E-06	1.02E-05	4.97E-13	1.62E-14	1.15E-07	3.00E-14	2.19E-07	6.95E-06	1.02E-05	6.95E-06	0.00019
13.86	6.90E-06	7.07E-06	1.18E-06	1.02E-05	3.05E-13	1.38E-14	1.18E-07	2.19E-14	1.78E-07	6.90E-06	1.02E-05	6.90E-06	0.000178
13.93	6.87E-06	7.05E-06	1.22E-06	1.03E-05	1.87E-13	1.18E-14	1.22E-07	1.60E-14	1.44E-07	6.87E-06	1.03E-05	6.87E-06	0.000168
14	6.85E-06	7.05E-06	1.26E-06	1.03E-05	1.15E-13	1.00E-14	1.26E-07	1.16E-14	1.17E-07	6.85E-06	1.03E-05	6.85E-06	0.000159

References

- Bethke, C.M. (2008) *Geochemical and Biogeochemical Reaction Modeling*, 2nd ed. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- Bigham, J.M., Schwertmann, U., Traina, S.J., Winland, R.L. and Wolf, M. (1996) Schwertmannite and the chemical modeling of iron in acid sulfate waters. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 60, 2111-2121.
- Delany, J.M. and Lundeen, S.R. (1989) The LLNL thermochemical database. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL 21658.
- Lindsay, W.L. (1979) *Chemical equilibria in soils*. John Wiley and Sons Ltd., New York.