Supplementary Material: Protonated phosphorus mononitride: spectroscopic parameters and formation routes relevant for astrochemistry

D. Comte[1], M. Melosso[2], S. Alessandrini[2], L. Bizzocchi[2], V.M. Rivilla[3], I. Jiménez-Serra[3], and C. Puzzarini[2]

[1]Scuola Superiore Meridionale, Napoli, Italy

[2]Department of Chemistry "Giacomo Ciamician", University of Bologna, Bologna, Italy

[3]Centro de Astrobiología (CSIC-INTA), Ctra. de Ajalvir Km. 4, Torrejón de Ardoz, 28850 Madrid, Spain

Table S1: Energetics of the potential energy surfaces (PESs) for the reactions PN+H_3^+, PH+NH^+, and PH^++NH. The electronic energies, E_e, and zero-point vibrational energies, ZPE, were computed at the revDSD/jun(T+d)Z level of theory.

Reactants	Stationary point	Products	E = E_e + ZPE (kJ/mol)
PN+H_3^+ [a]			**0**
	Min1		-375.0
	Min2		-372.7
	Min3		-25.4
	Min4		-33.9
	TS1		-369.6
	TS2		+15.3
	TS3		-24.1
		$PNH^+(^1\Sigma^+)$+H_2	-368.8
		$HPN^+(^1\Sigma^+)$+H_2	-18.8
PH+NH^+ [b]			**0**
PH^++NH			-322.3
	^{2}VdW		-353.5
	^{2}VdW-TS		-362.5
	^{2}Min1		-818.6
	^{2}Min2		-751.4
	^{2}Min3		-960.5
	^{2}Min4		-629.0
	^{2}TS1		-748.9
	^{2}TS2		-728.4
	^{2}TS3		-697.6
	^{2}TS4		-506.8
	^{2}TS5		-394.1
		$PNH^+(^1\Sigma^+)$+H	-747.8
		$HPN^+(^1\Sigma^+)$+H	-397.8
	^{4}VdW		-358.6
	^{4}VdW-TS		-362.1
	^{4}Min1		-550.3
	^{4}Min2		-374.6
	^{4}Min3		-492.8
	^{4}Min4		-234.2
	^{4}TS1		-371.9
	^{4}TS2		-340.9
	^{4}TS3		-234.5
		$PNH^+(^3A')$+H	-371.2
		$HPN^+(^3A')$+H	-223.0

[a] E_e (PN+H_3^+) = -397.05766 H and ZPE (PN+H_3^+) = 0.02024 H
[b] E_e (PH+NH^+) = -396.24121 H and ZPE (PH+NH^+) = 0.01222 H

Table S2: Long-range interaction and reaction rate coefficients for the ion–molecule reactions PN+H_3^+, PH+NH^+, and PH^++NH.

	k(T): PN+H_3^+ ($cm^3 molecule^{-1} s^{-1}$)		k(T): PH+NH^+ ($cm^3 molecule^{-1} s^{-1}$)						
T	V(r, θ) three-terms	$PNH^+(^1\Sigma^+)$	V(r, θ) three-terms	$PNH^+(^1\Sigma^+)$	$HPN^+(^1\Sigma^+)$	$PNH^+(^3A')$	$HPN^+(^3A')$	Total PNH^+	Total HPN^+
10	4.6×10^{-8}	4.1×10^{-8}	4.2×10^{-9}	1.1×10^{-9}	1.2×10^{-10}	2.3×10^{-9}	1.9×10^{-10}	3.5×10^{-9}	3.1×10^{-10}
20	3.2×10^{-8}	2.9×10^{-8}	3.2×10^{-9}	8.7×10^{-10}	8.9×10^{-11}	1.8×10^{-9}	1.4×10^{-10}	2.7×10^{-9}	2.3×10^{-10}
30	2.6×10^{-8}	2.4×10^{-8}	2.8×10^{-9}	7.6×10^{-10}	7.7×10^{-11}	1.5×10^{-9}	1.3×10^{-10}	2.3×10^{-9}	2.0×10^{-10}
40	2.3×10^{-8}	2.1×10^{-8}	2.5×10^{-9}	6.9×10^{-10}	7.1×10^{-11}	1.4×10^{-9}	1.2×10^{-10}	2.1×10^{-9}	1.9×10^{-10}
50	2.1×10^{-8}	1.9×10^{-8}	2.4×10^{-9}	6.5×10^{-10}	6.7×10^{-11}	1.3×10^{-9}	1.1×10^{-10}	2.0×10^{-9}	1.7×10^{-10}
60	1.9×10^{-8}	1.7×10^{-8}	2.3×10^{-9}	6.2×10^{-10}	6.3×10^{-11}	1.3×10^{-9}	1.0×10^{-10}	1.9×10^{-9}	1.7×10^{-10}
70	1.8×10^{-8}	1.6×10^{-8}	2.2×10^{-9}	6.0×10^{-10}	6.1×10^{-11}	1.2×10^{-9}	1.0×10^{-10}	1.8×10^{-9}	1.6×10^{-10}
80	1.7×10^{-8}	1.5×10^{-8}	2.1×10^{-9}	5.8×10^{-10}	5.9×10^{-11}	1.2×10^{-9}	9.6×10^{-11}	1.8×10^{-9}	1.6×10^{-10}
90	1.6×10^{-8}	1.4×10^{-8}	2.1×10^{-9}	5.6×10^{-10}	5.7×10^{-11}	1.1×10^{-9}	9.3×10^{-11}	1.7×10^{-9}	1.5×10^{-10}
100	1.5×10^{-8}	1.3×10^{-8}	2.0×10^{-9}	5.5×10^{-10}	5.6×10^{-11}	1.1×10^{-9}	9.1×10^{-11}	1.7×10^{-9}	1.5×10^{-10}
200	1.1×10^{-8}	9.8×10^{-9}	1.8×10^{-9}	4.9×10^{-10}	5.0×10^{-11}	9.9×10^{-10}	8.1×10^{-11}	1.5×10^{-9}	1.3×10^{-10}
300	9.2×10^{-9}	8.3×10^{-9}	1.7×10^{-9}	4.6×10^{-10}	4.8×10^{-11}	9.4×10^{-10}	7.8×10^{-11}	1.4×10^{-9}	1.3×10^{-10}
400	8.2×10^{-9}	7.4×10^{-9}	1.7×10^{-9}	4.5×10^{-10}	4.7×10^{-11}	9.2×10^{-10}	7.6×10^{-11}	1.4×10^{-9}	1.2×10^{-10}

	k(T): PH^++NH ($cm^3 molecule^{-1} s^{-1}$)				
T	V(r, θ) three-terms	$PNH^+(^1\Sigma^+)$	$HPN^+(^1\Sigma^+)$	$PNH^+(^3A')$	Total PNH^+
10	1.2×10^{-8}	3.5×10^{-9}	7.4×10^{-13}	6.9×10^{-9}	1.1×10^{-8}
20	8.2×10^{-9}	2.5×10^{-9}	5.3×10^{-13}	4.9×10^{-9}	7.4×10^{-9}
30	6.7×10^{-9}	2.0×10^{-9}	4.4×10^{-13}	4.0×10^{-9}	6.1×10^{-9}
40	5.9×10^{-9}	1.8×10^{-9}	3.9×10^{-13}	3.5×10^{-9}	5.3×10^{-9}
50	5.3×10^{-9}	1.6×10^{-9}	3.5×10^{-13}	3.2×10^{-9}	4.8×10^{-9}
60	4.9×10^{-9}	1.5×10^{-9}	3.2×10^{-13}	2.9×10^{-9}	4.4×10^{-9}
70	4.5×10^{-9}	1.4×10^{-9}	3.0×10^{-13}	2.7×10^{-9}	4.1×10^{-9}
80	4.3×10^{-9}	1.3×10^{-9}	2.8×10^{-13}	2.6×10^{-9}	3.8×10^{-9}
90	4.0×10^{-9}	1.2×10^{-9}	2.7×10^{-13}	2.4×10^{-9}	3.6×10^{-9}
100	3.9×10^{-9}	1.2×10^{-9}	2.6×10^{-13}	2.3×10^{-9}	3.5×10^{-9}
200	2.8×10^{-9}	8.5×10^{-10}	2.0×10^{-13}	1.7×10^{-9}	2.6×10^{-9}
300	2.4×10^{-9}	7.2×10^{-10}	1.7×10^{-13}	1.5×10^{-9}	2.2×10^{-9}
400	2.2×10^{-9}	6.5×10^{-10}	1.6×10^{-13}	1.3×10^{-9}	1.9×10^{-9}