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

Supporting Information

for

Ammonolysis of Ketene as a Potential Source of Amide in Troposphere : A Quantum Chemical Investigation

Saptarshi Sarkar,[‡] Subhasish Mallick,[‡] Pradeep Kumar[*] and Biman Bandyopadhyay[*]

Department of Chemistry, Malaviya National Institute of Technology Jaipur, Jaipur, 302017,India
[‡]Equal contribution
email: pradeep.chy@mnit.ac.in; biman.chy@mnit.ac.in

Table of contents

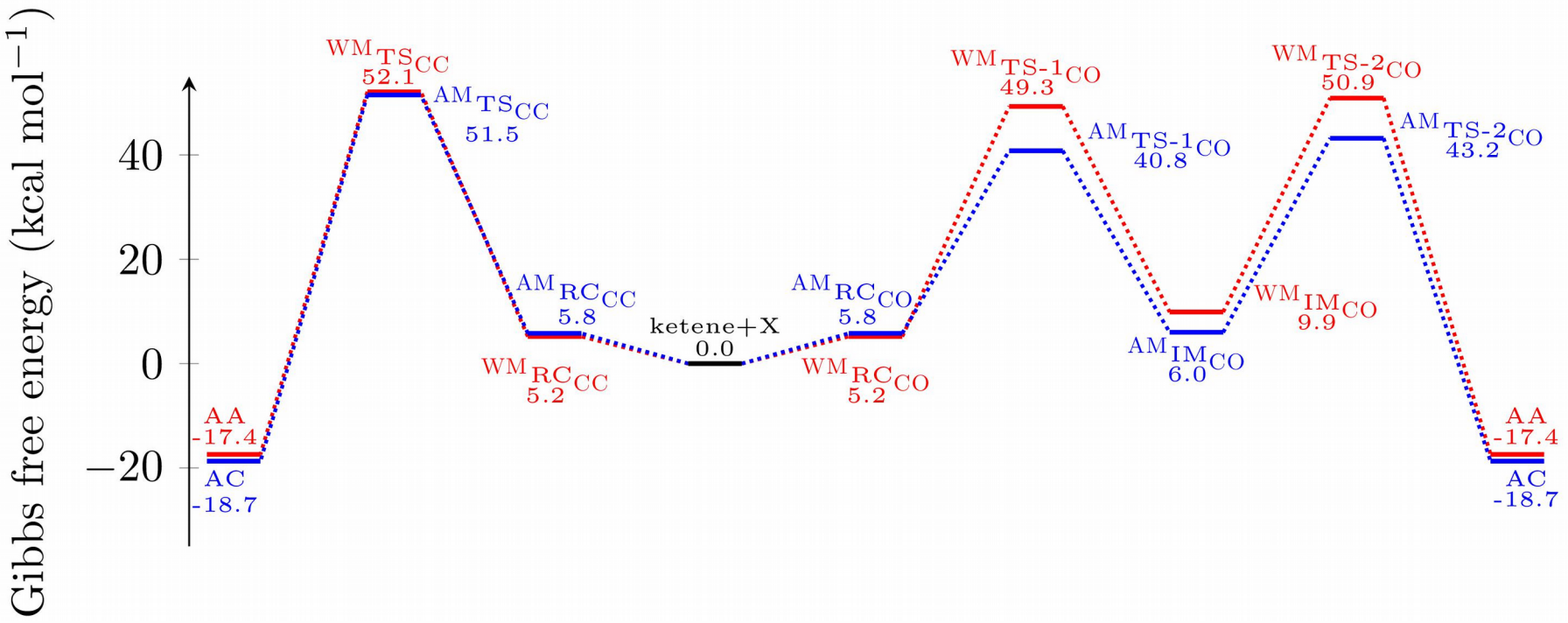

Figure S1: ZPE corrected potential energy profile for hydrolysis (red) and ammonolysis (blue) at C=C and C=O bond of ketene calculated at the CCSD(T)/CBS//MP2/aug-cc-pVTZ level of theory

Table S1: Comparison of relative ZPE corrected energies (kcal mol^{-1}) with the findings of earlier investigations for hydrolysis and ammonolysis of ketene

a: Hydrolysis

Species	This Work	Nguyen et al.[a,1]	Nguyen et al.[b,2]	Cannizzaro et al.[c,3]
^{WM}RC	-2.0	-	-	-
^{WM}TS$_{CC}$	42.3	42.7	40.6	42.0
AA	-32.0	-32.2	−38.5	−34.4
^{WM}TS-1$_{CO}$	38.2	38.6	38.5	38.2
^{WM}IM$_{CO}$	-4.7	-5.9	−6.5	−6.6
^{WM}TS-2$_{CO}$	39.1	39.3	39.0	38.7

[a]– Calculated at CCSD(T)/CBS(aVTZ,aVQZ) level of theory
[b]– Calculated at QCISD(T)/6-31G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) level of theory
[c]– Calculated at G2//MCSCF/6-31G(d) level of theory

b: Ammonolysis

Species	This Work	Raspoet et al.[a,4]	Sung et al.[b,5]	Chang Kon Kim et al.[c,6]
^{AM}RC	-2.2	-	-3.04	-
^{AM}TS$_{CC}$	40.3	41.4	39.80	39.71
AC	-32.4	-32.6	-37.60	-34.78
^{AM}TS-1$_{CO}$	28.3	31.4	30.03	28.67
^{AM}IM$_{CO}$	-9.0	-2.6	-5.90	-6.32
^{AM}TS-2$_{CO}$	31.3	-	33.13	31.52

[a]– Calculated at QCISD(T)/6-311++G(d,p) level of theory
[b]– Calculated at MP2/6-31G* level of theory
[c]– Calculated at MP2/6-31+G(d,p)//B3LYP/6-311+G(3df,2p) level of theory

Table S2: Rate constants (cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1}) for ammonolysis of ketene at different temperatures within 200 to 2500 K using TST theory

T(K)	k_{CC}^{AC}			k_{CO}^{AC}					k_{tot}^{AC}
	k_{eq}	k_{uni}	k_{CC}	k_{eq}	k_1	k_{-1}	k_2	k_{CO}	
213	4.3×10^{-23}	1.9×10^{-20}	4.9×10^{-42}	4.3×10^{-23}	1.0×10^{-13}	8.0×10^{-19}	2.4×10^{-15}	2.7×10^{-35}	2.7×10^{-35}
216	4.1×10^{-23}	2.4×10^{-20}	5.9×10^{-42}	4.1×10^{-23}	1.3×10^{-13}	1.3×10^{-18}	3.0×10^{-15}	3.2×10^{-35}	3.2×10^{-35}
219	3.8×10^{-23}	3.0×10^{-20}	7.0×10^{-42}	3.8×10^{-23}	1.7×10^{-13}	2.2×10^{-18}	3.7×10^{-15}	3.9×10^{-35}	3.9×10^{-35}
224	3.5×10^{-23}	4.5×10^{-20}	9.5×10^{-42}	3.5×10^{-23}	2.6×10^{-13}	5.2×10^{-18}	5.4×10^{-15}	5.4×10^{-35}	5.4×10^{-35}
230	3.1×10^{-23}	7.4×10^{-20}	1.4×10^{-41}	3.1×10^{-23}	4.3×10^{-13}	1.4×10^{-17}	8.4×10^{-15}	8.1×10^{-35}	8.1×10^{-35}
235	2.9×10^{-23}	1.1×10^{-19}	1.9×10^{-41}	2.9×10^{-23}	6.7×10^{-13}	3.1×10^{-17}	1.2×10^{-14}	1.2×10^{-34}	1.2×10^{-34}
250	2.3×10^{-23}	4.0×10^{-19}	5.6×10^{-41}	2.3×10^{-23}	2.5×10^{-12}	3.4×10^{-16}	3.9×10^{-14}	3.5×10^{-34}	3.5×10^{-34}
259	2.1×10^{-23}	8.8×10^{-19}	1.1×10^{-40}	2.1×10^{-23}	5.7×10^{-12}	1.4×10^{-15}	8.0×10^{-14}	6.9×10^{-34}	6.9×10^{-34}
280	1.7×10^{-23}	6.1×10^{-18}	6.1×10^{-40}	1.7×10^{-23}	4.0×10^{-11}	3.3×10^{-14}	4.4×10^{-13}	3.6×10^{-33}	3.6×10^{-33}
290	1.5×10^{-23}	1.6×10^{-17}	1.4×10^{-39}	1.5×10^{-23}	1.0×10^{-10}	1.5×10^{-13}	1.0×10^{-12}	8.0×10^{-33}	8.0×10^{-33}
298	1.4×10^{-23}	3.5×10^{-17}	3.0×10^{-39}	1.4×10^{-23}	2.2×10^{-10}	4.6×10^{-13}	2.0×10^{-12}	1.5×10^{-32}	1.5×10^{-32}
300	1.4×10^{-23}	4.3×10^{-17}	3.5×10^{-39}	1.4×10^{-23}	2.6×10^{-10}	6.2×10^{-13}	2.4×10^{-12}	1.7×10^{-32}	1.7×10^{-32}
310	1.3×10^{-23}	1.2×10^{-16}	9.0×10^{-39}	1.3×10^{-23}	6.8×10^{-10}	2.5×10^{-12}	5.8×10^{-12}	3.6×10^{-32}	3.6×10^{-32}
320	1.2×10^{-23}	3.2×10^{-16}	2.3×10^{-38}	1.2×10^{-23}	1.7×10^{-09}	1.0×10^{-11}	1.4×10^{-11}	7.3×10^{-32}	7.3×10^{-32}
200	5.8×10^{-23}	7.1×10^{-21}	2.5×10^{-42}	5.8×10^{-23}	3.6×10^{-14}	8.1×10^{-20}	9.4×10^{-16}	1.2×10^{-35}	1.2×10^{-35}
250	2.3×10^{-23}	4.0×10^{-19}	5.6×10^{-41}	2.3×10^{-23}	2.5×10^{-12}	3.4×10^{-16}	3.9×10^{-14}	3.5×10^{-34}	3.5×10^{-34}
300	1.4×10^{-23}	4.3×10^{-17}	3.5×10^{-39}	1.4×10^{-23}	2.6×10^{-10}	6.2×10^{-13}	2.4×10^{-12}	1.7×10^{-32}	1.7×10^{-32}
350	1.0×10^{-23}	7.7×10^{-15}	4.8×10^{-37}	1.0×10^{-23}	2.7×10^{-08}	5.3×10^{-10}	2.1×10^{-10}	4.8×10^{-31}	4.8×10^{-31}
400	8.6×10^{-24}	1.5×10^{-12}	7.8×10^{-35}	8.6×10^{-24}	1.7×10^{-06}	1.6×10^{-07}	2.2×10^{-08}	1.0×10^{-29}	1.0×10^{-29}
450	7.8×10^{-24}	1.7×10^{-10}	8.1×10^{-33}	7.8×10^{-24}	5.3×10^{-05}	1.8×10^{-05}	1.8×10^{-06}	2.2×10^{-28}	2.2×10^{-28}
500	7.4×10^{-24}	9.7×10^{-09}	4.3×10^{-31}	7.4×10^{-24}	9.0×10^{-04}	8.8×10^{-04}	8.8×10^{-05}	3.7×10^{-27}	3.7×10^{-27}
550	7.3×10^{-24}	2.9×10^{-07}	1.3×10^{-29}	7.3×10^{-24}	9.6×10^{-03}	2.2×10^{-02}	2.5×10^{-03}	4.2×10^{-26}	4.2×10^{-26}
600	7.4×10^{-24}	5.0×10^{-06}	2.2×10^{-28}	7.4×10^{-24}	7.0×10^{-02}	3.3×10^{-01}	4.2×10^{-02}	3.5×10^{-25}	3.5×10^{-25}
650	7.7×10^{-24}	5.8×10^{-05}	2.7×10^{-27}	7.7×10^{-24}	3.8×10^{-01}	3.3	4.9×10^{-01}	2.2×10^{-24}	2.2×10^{-24}
700	8.0×10^{-24}	4.8×10^{-04}	2.3×10^{-26}	8.0×10^{-24}	1.6	2.4×10^{01}	4.1	1.1×10^{-23}	1.1×10^{-23}
750	8.4×10^{-24}	3.0×10^{-03}	1.5×10^{-25}	8.4×10^{-24}	5.7	1.4×10^{02}	2.6×10^{01}	4.6×10^{-23}	4.6×10^{-23}
800	8.9×10^{-24}	1.5×10^{-02}	8.0×10^{-25}	8.9×10^{-24}	1.7×10^{01}	6.3×10^{02}	1.3×10^{02}	1.6×10^{-22}	1.6×10^{-22}
850	9.4×10^{-24}	6.3×10^{-02}	3.6×10^{-24}	9.4×10^{-24}	4.6×10^{01}	2.4×10^{03}	5.7×10^{02}	5.0×10^{-22}	5.0×10^{-22}
900	1.0×10^{-23}	2.3×10^{-01}	1.4×10^{-23}	1.0×10^{-23}	1.1×10^{02}	8.0×10^{03}	2.1×10^{03}	1.4×10^{-21}	1.4×10^{-21}
950	1.1×10^{-23}	7.0×10^{-01}	4.5×10^{-23}	1.1×10^{-23}	2.4×10^{02}	2.3×10^{04}	6.6×10^{03}	3.4×10^{-21}	3.5×10^{-21}
1000	1.1×10^{-23}	2.0	1.4×10^{-22}	1.1×10^{-23}	4.9×10^{02}	6.2×10^{04}	1.9×10^{04}	7.9×10^{-21}	8.0×10^{-21}
1050	1.2×10^{-23}	5.0	3.7×10^{-22}	1.2×10^{-23}	9.4×10^{02}	1.5×10^{05}	4.9×10^{04}	1.7×10^{-20}	1.7×10^{-20}
1100	1.3×10^{-23}	1.2×10^{01}	9.2×10^{-22}	1.3×10^{-23}	1.7×10^{03}	3.3×10^{05}	1.2×10^{05}	3.4×10^{-20}	3.5×10^{-20}
1150	1.4×10^{-23}	2.6×10^{01}	2.2×10^{-21}	1.4×10^{-23}	2.9×10^{03}	6.9×10^{05}	2.6×10^{05}	6.5×10^{-20}	6.7×10^{-20}
1200	1.5×10^{-23}	5.2×10^{01}	4.7×10^{-21}	1.5×10^{-23}	4.7×10^{03}	1.3×10^{06}	5.3×10^{05}	1.2×10^{-19}	1.2×10^{-19}
1250	1.6×10^{-23}	1.0×10^{02}	9.7×10^{-21}	1.6×10^{-23}	7.3×10^{03}	2.5×10^{06}	1.0×10^{06}	2.1×10^{-19}	2.2×10^{-19}
1300	1.7×10^{-23}	1.9×10^{02}	1.9×10^{-20}	1.7×10^{-23}	1.1×10^{04}	4.4×10^{06}	1.9×10^{06}	3.5×10^{-19}	3.7×10^{-19}
1350	1.8×10^{-23}	3.3×10^{02}	3.6×10^{-20}	1.8×10^{-23}	1.6×10^{04}	7.6×10^{06}	3.5×10^{06}	5.6×10^{-19}	6.0×10^{-19}
1400	2.0×10^{-23}	5.5×10^{02}	6.5×10^{-20}	2.0×10^{-23}	2.3×10^{04}	1.2×10^{07}	5.9×10^{06}	8.9×10^{-19}	9.5×10^{-19}
1450	2.1×10^{-23}	9.0×10^{02}	1.1×10^{-19}	2.1×10^{-23}	3.3×10^{04}	2.0×10^{07}	9.8×10^{06}	1.4×10^{-18}	1.5×10^{-18}
1500	2.2×10^{-23}	1.4×10^{03}	1.9×10^{-19}	2.2×10^{-23}	4.5×10^{04}	3.0×10^{07}	1.6×10^{07}	2.0×10^{-18}	2.2×10^{-18}
1550	2.4×10^{-23}	2.2×10^{03}	3.1×10^{-19}	2.4×10^{-23}	6.0×10^{04}	4.5×10^{07}	2.4×10^{07}	3.0×10^{-18}	3.3×10^{-18}
1600	2.5×10^{-23}	3.3×10^{03}	4.9×10^{-19}	2.5×10^{-23}	7.9×10^{04}	6.6×10^{07}	3.6×10^{07}	4.3×10^{-18}	4.7×10^{-18}
1650	2.7×10^{-23}	4.8×10^{03}	7.6×10^{-19}	2.7×10^{-23}	1.0×10^{05}	9.4×10^{07}	5.4×10^{07}	6.0×10^{-18}	6.7×10^{-18}
1700	2.8×10^{-23}	6.8×10^{03}	1.2×10^{-18}	2.8×10^{-23}	1.3×10^{05}	1.3×10^{08}	7.7×10^{07}	8.3×10^{-18}	9.4×10^{-18}
1750	3.0×10^{-23}	9.6×10^{03}	1.7×10^{-18}	3.0×10^{-23}	1.7×10^{05}	1.8×10^{08}	1.1×10^{08}	1.1×10^{-17}	1.3×10^{-17}
1800	3.2×10^{-23}	1.3×10^{04}	2.5×10^{-18}	3.2×10^{-23}	2.1×10^{05}	2.4×10^{08}	1.5×10^{08}	1.5×10^{-17}	1.8×10^{-17}
1850	3.4×10^{-23}	1.8×10^{04}	3.6×10^{-18}	3.4×10^{-23}	2.5×10^{05}	3.2×10^{08}	2.1×10^{08}	2.0×10^{-17}	2.3×10^{-17}
1900	3.6×10^{-23}	2.4×10^{04}	5.1×10^{-18}	3.6×10^{-23}	3.1×10^{05}	4.2×10^{08}	2.8×10^{08}	2.6×10^{-17}	3.1×10^{-17}
1950	3.8×10^{-23}	3.1×10^{04}	7.0×10^{-18}	3.8×10^{-23}	3.7×10^{05}	5.5×10^{08}	3.6×10^{08}	3.3×10^{-17}	4.1×10^{-17}

2000	4.0×10^{-23}	4.0×10^{04}	9.6×10^{-18}	4.0×10^{-23}	4.4×10^{05}	7.0×10^{08}	4.7×10^{08}	4.3×10^{-17}	5.2×10^{-17}
2050	4.2×10^{-23}	5.1×10^{04}	1.3×10^{-17}	4.2×10^{-23}	5.2×10^{05}	8.8×10^{08}	6.1×10^{08}	5.4×10^{-17}	6.7×10^{-17}
2100	4.4×10^{-23}	6.5×10^{04}	1.7×10^{-17}	4.4×10^{-23}	6.1×10^{05}	1.1×10^{09}	7.7×10^{08}	6.8×10^{-17}	8.5×10^{-17}
2150	4.7×10^{-23}	8.1×10^{04}	2.3×10^{-17}	4.7×10^{-23}	7.2×10^{05}	1.4×10^{09}	9.7×10^{08}	8.4×10^{-17}	1.1×10^{-16}
2200	4.9×10^{-23}	1.0×10^{05}	3.0×10^{-17}	4.9×10^{-23}	8.3×10^{05}	1.7×10^{09}	1.2×10^{09}	1.0×10^{-16}	1.3×10^{-16}
2250	5.2×10^{-23}	1.2×10^{05}	3.8×10^{-17}	5.2×10^{-23}	9.5×10^{05}	2.0×10^{09}	1.5×10^{09}	1.3×10^{-16}	1.6×10^{-16}
2300	5.4×10^{-23}	1.5×10^{05}	4.9×10^{-17}	5.4×10^{-23}	1.1×10^{06}	2.4×10^{09}	1.8×10^{09}	1.5×10^{-16}	2.0×10^{-16}
2350	5.7×10^{-23}	1.8×10^{05}	6.2×10^{-17}	5.7×10^{-23}	1.2×10^{06}	2.9×10^{09}	2.2×10^{09}	1.8×10^{-16}	2.5×10^{-16}
2400	6.0×10^{-23}	2.2×10^{05}	7.8×10^{-17}	6.0×10^{-23}	1.4×10^{06}	3.4×10^{09}	2.7×10^{09}	2.2×10^{-16}	3.0×10^{-16}
2450	6.3×10^{-23}	2.6×10^{05}	9.7×10^{-17}	6.3×10^{-23}	1.6×10^{06}	4.0×10^{09}	3.2×10^{09}	2.6×10^{-16}	3.6×10^{-16}
2500	6.6×10^{-23}	3.0×10^{05}	1.2×10^{-16}	6.6×10^{-23}	1.8×10^{06}	4.7×10^{09}	3.8×10^{09}	3.1×10^{-16}	4.3×10^{-16}

Table S3: Rate constants (cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1}) for the hydrolysis of KM at different temperatures 200 to 2500 K using TST theory

T(K)	k_{CC}^{AA}			k_{CO}^{AA}					k_{tot}^{AA}
	k_{eq}	k_{uni}	k_{CC}	k_{eq}	k_1	k_{-1}	k_2	k_{CO}	
213	4.1×10^{-23}	2.0×10^{-22}	3.3×10^{-44}	5.0×10^{-23}	1.8×10^{-22}	2.1×10^{-23}	3.2×10^{-16}	3.6×10^{-44}	6.9×10^{-44}
216	3.9×10^{-23}	2.6×10^{-22}	4.1×10^{-44}	4.7×10^{-23}	2.7×10^{-22}	3.7×10^{-23}	3.9×10^{-16}	5.1×10^{-44}	9.2×10^{-44}
219	3.7×10^{-23}	3.4×10^{-22}	5.1×10^{-44}	4.5×10^{-23}	4.0×10^{-22}	6.2×10^{-23}	4.8×10^{-16}	7.2×10^{-44}	1.2×10^{-43}
224	3.4×10^{-23}	5.4×10^{-22}	7.5×10^{-44}	4.1×10^{-23}	7.8×10^{-22}	1.5×10^{-22}	6.6×10^{-16}	1.3×10^{-43}	2.0×10^{-43}
230	3.1×10^{-23}	9.5×10^{-22}	1.2×10^{-43}	3.8×10^{-23}	1.8×10^{-21}	4.3×10^{-22}	1.0×10^{-15}	2.7×10^{-43}	3.9×10^{-43}
235	2.9×10^{-23}	1.5×10^{-21}	1.8×10^{-43}	3.5×10^{-23}	3.5×10^{-21}	1.0×10^{-21}	1.4×10^{-15}	4.9×10^{-43}	6.7×10^{-43}
250	2.4×10^{-23}	6.7×10^{-21}	6.5×10^{-43}	2.9×10^{-23}	2.7×10^{-20}	1.4×10^{-20}	4.0×10^{-15}	3.1×10^{-42}	3.8×10^{-42}
259	2.2×10^{-23}	1.7×10^{-20}	1.5×10^{-42}	2.7×10^{-23}	9.3×10^{-20}	6.6×10^{-20}	7.7×10^{-15}	9.8×10^{-42}	1.1×10^{-41}
280	1.8×10^{-23}	1.6×10^{-19}	1.1×10^{-41}	2.2×10^{-23}	1.7×10^{-18}	2.4×10^{-18}	3.6×10^{-14}	1.5×10^{-40}	1.6×10^{-40}
290	1.7×10^{-23}	4.7×10^{-19}	3.1×10^{-41}	2.0×10^{-23}	6.9×10^{-18}	1.3×10^{-17}	7.8×10^{-14}	5.6×10^{-40}	5.9×10^{-40}
298	1.6×10^{-23}	1.1×10^{-18}	7.3×10^{-41}	1.9×10^{-23}	2.1×10^{-17}	4.9×10^{-17}	1.4×10^{-13}	1.6×10^{-39}	1.7×10^{-39}
300	1.6×10^{-23}	1.4×10^{-18}	9.0×10^{-41}	1.9×10^{-23}	2.8×10^{-17}	6.8×10^{-17}	1.7×10^{-13}	2.1×10^{-39}	2.2×10^{-39}
310	1.5×10^{-23}	4.6×10^{-18}	2.7×10^{-40}	1.8×10^{-23}	1.1×10^{-16}	3.5×10^{-16}	3.7×10^{-13}	8.1×10^{-39}	8.3×10^{-39}
320	1.4×10^{-23}	1.5×10^{-17}	8.2×10^{-40}	1.7×10^{-23}	4.5×10^{-16}	1.8×10^{-15}	8.2×10^{-13}	3.0×10^{-38}	3.1×10^{-38}
200	5.4×10^{-23}	6.4×10^{-23}	1.4×10^{-44}	6.4×10^{-23}	3.3×10^{-23}	2.1×10^{-24}	1.4×10^{-16}	8.4×10^{-45}	2.2×10^{-44}
250	2.4×10^{-23}	6.7×10^{-21}	6.5×10^{-43}	2.9×10^{-23}	2.7×10^{-20}	1.4×10^{-20}	4.0×10^{-15}	3.1×10^{-42}	3.8×10^{-42}
300	1.6×10^{-23}	1.4×10^{-18}	9.0×10^{-41}	1.9×10^{-23}	2.8×10^{-17}	6.8×10^{-17}	1.7×10^{-13}	2.1×10^{-39}	2.2×10^{-39}
350	1.2×10^{-23}	5.5×10^{-16}	2.7×10^{-38}	1.5×10^{-23}	2.4×10^{-14}	1.9×10^{-13}	9.9×10^{-12}	1.4×10^{-36}	1.4×10^{-36}
400	1.1×10^{-23}	1.9×10^{-13}	8.1×10^{-36}	1.3×10^{-23}	8.3×10^{-12}	1.6×10^{-10}	7.6×10^{-10}	3.6×10^{-34}	3.6×10^{-34}
450	1.0×10^{-23}	3.2×10^{-11}	1.3×10^{-33}	1.2×10^{-23}	1.0×10^{-09}	4.1×10^{-08}	5.9×10^{-08}	2.9×10^{-32}	3.0×10^{-32}
500	9.9×10^{-24}	2.3×10^{-09}	9.3×10^{-32}	1.2×10^{-23}	5.1×10^{-08}	3.9×10^{-06}	3.2×10^{-06}	1.1×10^{-30}	1.2×10^{-30}
550	1.0×10^{-23}	8.6×10^{-08}	3.4×10^{-30}	1.2×10^{-23}	1.3×10^{-06}	1.7×10^{-04}	1.1×10^{-04}	2.4×10^{-29}	2.8×10^{-29}
600	1.0×10^{-23}	1.8×10^{-06}	7.4×10^{-29}	1.3×10^{-23}	2.0×10^{-05}	4.1×10^{-03}	2.2×10^{-03}	3.5×10^{-28}	4.2×10^{-28}
650	1.1×10^{-23}	2.4×10^{-05}	1.0×10^{-27}	1.3×10^{-23}	2.0×10^{-04}	6.1×10^{-02}	3.0×10^{-02}	3.5×10^{-27}	4.5×10^{-27}
700	1.1×10^{-23}	2.2×10^{-04}	1.0×10^{-26}	1.4×10^{-23}	1.5×10^{-03}	6.2×10^{-01}	2.9×10^{-01}	2.6×10^{-26}	3.6×10^{-26}
750	1.2×10^{-23}	1.5×10^{-03}	7.4×10^{-26}	1.5×10^{-23}	8.3×10^{-03}	4.7	2.1	1.5×10^{-25}	2.3×10^{-25}
800	1.3×10^{-23}	8.4×10^{-03}	4.4×10^{-25}	1.6×10^{-23}	3.8×10^{-02}	2.8×10^{01}	1.2×10^{01}	7.3×10^{-25}	1.2×10^{-24}
850	1.4×10^{-23}	3.8×10^{-02}	2.1×10^{-24}	1.7×10^{-23}	1.4×10^{-01}	1.4×10^{02}	5.8×10^{01}	3.0×10^{-24}	5.1×10^{-24}
900	1.5×10^{-23}	1.4×10^{-01}	8.7×10^{-24}	1.8×10^{-23}	4.8×10^{-01}	5.5×10^{02}	2.3×10^{02}	1.0×10^{-23}	1.9×10^{-23}
950	1.6×10^{-23}	4.8×10^{-01}	3.1×10^{-23}	2.0×10^{-23}	1.4	1.9×10^{03}	8.1×10^{02}	3.2×10^{-23}	6.4×10^{-23}
1000	1.7×10^{-23}	1.4	9.9×10^{-23}	2.1×10^{-23}	3.6	6.0×10^{03}	2.5×10^{03}	9.1×10^{-23}	1.9×10^{-22}
1050	1.9×10^{-23}	3.8	2.9×10^{-22}	2.3×10^{-23}	8.7	1.7×10^{04}	7.0×10^{03}	2.3×10^{-22}	5.2×10^{-22}
1100	2.0×10^{-23}	9.4	7.6×10^{-22}	2.5×10^{-23}	1.9×10^{01}	4.3×10^{04}	1.8×10^{04}	5.5×10^{-22}	1.3×10^{-21}
1150	2.2×10^{-23}	2.1×10^{01}	1.8×10^{-21}	2.7×10^{-23}	4.0×10^{01}	1.0×10^{05}	4.2×10^{04}	1.2×10^{-21}	3.1×10^{-21}
1200	2.3×10^{-23}	4.5×10^{01}	4.2×10^{-21}	2.9×10^{-23}	7.7×10^{01}	2.2×10^{05}	9.1×10^{04}	2.6×10^{-21}	6.8×10^{-21}
1250	2.5×10^{-23}	9.0×10^{01}	9.0×10^{-21}	3.1×10^{-23}	1.4×10^{02}	4.6×10^{05}	1.9×10^{05}	5.1×10^{-21}	1.4×10^{-20}
1300	2.7×10^{-23}	1.7×10^{02}	1.8×10^{-20}	3.3×10^{-23}	2.5×10^{02}	9.0×10^{05}	3.7×10^{05}	9.6×10^{-21}	2.8×10^{-20}
1350	2.9×10^{-23}	3.1×10^{02}	3.6×10^{-20}	3.5×10^{-23}	4.3×10^{02}	1.7×10^{06}	6.8×10^{05}	1.7×10^{-20}	5.3×10^{-20}

1400	3.1×10^{-23}	5.4×10^{02}	6.7×10^{-20}	3.8×10^{-23}	6.9×10^{02}	3.0×10^{06}	1.2×10^{06}	3.1×10^{-20}	9.7×10^{-20}
1450	3.3×10^{-23}	9.0×10^{02}	1.2×10^{-19}	4.1×10^{-23}	1.1×10^{03}	5.1×10^{06}	2.1×10^{06}	5.1×10^{-20}	1.7×10^{-19}
1500	3.5×10^{-23}	1.5×10^{03}	2.1×10^{-19}	4.3×10^{-23}	1.7×10^{03}	8.5×10^{06}	3.4×10^{06}	8.4×10^{-20}	2.9×10^{-19}
1550	3.8×10^{-23}	2.3×10^{03}	3.5×10^{-19}	4.6×10^{-23}	2.5×10^{03}	1.4×10^{07}	5.5×10^{06}	1.3×10^{-19}	4.8×10^{-19}
1600	4.0×10^{-23}	3.5×10^{03}	5.6×10^{-19}	4.9×10^{-23}	3.6×10^{03}	2.1×10^{07}	8.6×10^{06}	2.1×10^{-19}	7.7×10^{-19}
1650	4.3×10^{-23}	5.2×10^{03}	9.0×10^{-19}	5.3×10^{-23}	5.2×10^{03}	3.2×10^{07}	1.3×10^{07}	3.1×10^{-19}	1.2×10^{-18}
1700	4.6×10^{-23}	7.6×10^{03}	1.4×10^{-18}	5.6×10^{-23}	7.2×10^{03}	4.8×10^{07}	1.9×10^{07}	4.7×10^{-19}	1.9×10^{-18}
1750	4.9×10^{-23}	1.1×10^{04}	2.1×10^{-18}	6.0×10^{-23}	9.9×10^{03}	6.9×10^{07}	2.8×10^{07}	6.8×10^{-19}	2.8×10^{-18}
1800	5.2×10^{-23}	1.5×10^{04}	3.1×10^{-18}	6.3×10^{-23}	1.3×10^{04}	9.8×10^{07}	4.0×10^{07}	9.7×10^{-19}	4.1×10^{-18}
1850	5.5×10^{-23}	2.1×10^{04}	4.5×10^{-18}	6.7×10^{-23}	1.8×10^{04}	1.4×10^{08}	5.5×10^{07}	1.4×10^{-18}	5.9×10^{-18}
1900	5.8×10^{-23}	2.8×10^{04}	6.5×10^{-18}	7.1×10^{-23}	2.3×10^{04}	1.9×10^{08}	7.6×10^{07}	1.9×10^{-18}	8.4×10^{-18}
1950	6.1×10^{-23}	3.7×10^{04}	9.2×10^{-18}	7.5×10^{-23}	2.9×10^{04}	2.5×10^{08}	1.0×10^{08}	2.6×10^{-18}	1.2×10^{-17}
2000	6.5×10^{-23}	4.9×10^{04}	1.3×10^{-17}	8.0×10^{-23}	3.7×10^{04}	3.3×10^{08}	1.4×10^{08}	3.5×10^{-18}	1.6×10^{-17}
2050	6.9×10^{-23}	6.4×10^{04}	1.7×10^{-17}	8.4×10^{-23}	4.7×10^{04}	4.4×10^{08}	1.8×10^{08}	4.6×10^{-18}	2.2×10^{-17}
2100	7.2×10^{-23}	8.1×10^{04}	2.4×10^{-17}	8.9×10^{-23}	5.8×10^{04}	5.7×10^{08}	2.3×10^{08}	6.0×10^{-18}	3.0×10^{-17}
2150	7.6×10^{-23}	1.0×10^{05}	3.2×10^{-17}	9.4×10^{-23}	7.2×10^{04}	7.2×10^{08}	3.0×10^{08}	7.8×10^{-18}	3.9×10^{-17}
2200	8.1×10^{-23}	1.3×10^{05}	4.2×10^{-17}	9.9×10^{-23}	8.8×10^{04}	9.2×10^{08}	3.7×10^{08}	1.0×10^{-17}	5.2×10^{-17}
2250	8.5×10^{-23}	1.6×10^{05}	5.4×10^{-17}	1.0×10^{-22}	1.1×10^{05}	1.1×10^{09}	4.7×10^{08}	1.3×10^{-17}	6.7×10^{-17}
2300	8.9×10^{-23}	2.0×10^{05}	7.0×10^{-17}	1.1×10^{-22}	1.3×10^{05}	1.4×10^{09}	5.8×10^{08}	1.6×10^{-17}	8.6×10^{-17}
2350	9.4×10^{-23}	2.4×10^{05}	9.0×10^{-17}	1.2×10^{-22}	1.5×10^{05}	1.7×10^{09}	7.1×10^{08}	2.0×10^{-17}	1.1×10^{-16}
2400	9.9×10^{-23}	2.9×10^{05}	1.1×10^{-16}	1.2×10^{-22}	1.8×10^{05}	2.1×10^{09}	8.7×10^{08}	2.5×10^{-17}	1.4×10^{-16}
2450	1.0×10^{-22}	3.5×10^{05}	1.4×10^{-16}	1.3×10^{-22}	2.1×10^{05}	2.6×10^{09}	1.1×10^{09}	3.1×10^{-17}	1.7×10^{-16}
2500	1.1×10^{-22}	4.1×10^{05}	1.8×10^{-16}	1.3×10^{-22}	2.4×10^{05}	3.1×10^{09}	1.3×10^{09}	3.8×10^{-17}	2.2×10^{-16}

Table S4: Rate constants (cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1}) for ammonolysis of ketene at different temperatures within 200 to 2500 K using RRKM theory

T(K)	k_{CC}^{AC}			k_{CO}^{AC}					k_{tot}^{AC}
	k_{eq}	k_{uni}	k_f	k_{eq}	k_1	k_{-1}	k_2	k_f	
213	4.3×10^{-23}	2.2×10^{-20}	5.8×10^{-42}	4.3×10^{-23}	9.3×10^{-14}	7.2×10^{-19}	2.6×10^{-14}	2.4×10^{-35}	2.4×10^{-35}
216	4.1×10^{-23}	2.8×10^{-20}	6.9×10^{-42}	4.1×10^{-23}	1.2×10^{-13}	1.2×10^{-18}	2.9×10^{-14}	2.9×10^{-35}	2.9×10^{-35}
219	3.8×10^{-23}	3.6×10^{-20}	8.2×10^{-42}	3.8×10^{-23}	1.6×10^{-13}	2.1×10^{-18}	3.3×10^{-14}	3.6×10^{-35}	3.6×10^{-35}
224	3.5×10^{-23}	5.3×10^{-20}	1.1×10^{-41}	3.5×10^{-23}	2.4×10^{-13}	4.8×10^{-18}	4.2×10^{-14}	5.1×10^{-35}	5.1×10^{-35}
230	3.1×10^{-23}	8.5×10^{-20}	1.6×10^{-41}	3.1×10^{-23}	4.1×10^{-13}	1.3×10^{-17}	5.7×10^{-14}	7.7×10^{-35}	7.7×10^{-35}
235	2.9×10^{-23}	1.3×10^{-19}	2.2×10^{-41}	2.9×10^{-23}	6.4×10^{-13}	3.0×10^{-17}	7.3×10^{-14}	1.1×10^{-34}	1.1×10^{-34}
250	2.3×10^{-23}	4.5×10^{-19}	6.3×10^{-41}	2.3×10^{-23}	2.5×10^{-12}	3.4×10^{-16}	1.7×10^{-13}	3.4×10^{-34}	3.4×10^{-34}
259	2.1×10^{-23}	9.9×10^{-19}	1.2×10^{-40}	2.1×10^{-23}	5.6×10^{-12}	1.4×10^{-15}	2.9×10^{-13}	7.0×10^{-34}	7.0×10^{-34}
280	1.7×10^{-23}	6.7×10^{-18}	6.7×10^{-40}	1.7×10^{-23}	4.0×10^{-11}	3.4×10^{-14}	1.2×10^{-12}	3.9×10^{-33}	3.9×10^{-33}
290	1.5×10^{-23}	1.7×10^{-17}	1.6×10^{-39}	1.5×10^{-23}	1.0×10^{-10}	1.5×10^{-13}	2.4×10^{-12}	8.8×10^{-33}	8.8×10^{-33}
298	1.4×10^{-23}	3.8×10^{-17}	3.2×10^{-39}	1.4×10^{-23}	2.2×10^{-10}	4.7×10^{-13}	4.3×10^{-12}	1.7×10^{-32}	1.7×10^{-32}
300	1.4×10^{-23}	4.6×10^{-17}	3.8×10^{-39}	1.4×10^{-23}	2.7×10^{-10}	6.3×10^{-13}	4.9×10^{-12}	2.0×10^{-32}	2.0×10^{-32}
310	1.3×10^{-23}	1.2×10^{-16}	9.6×10^{-39}	1.3×10^{-23}	6.9×10^{-10}	2.6×10^{-12}	1.1×10^{-11}	4.3×10^{-32}	4.3×10^{-32}
320	1.2×10^{-23}	3.4×10^{-16}	2.5×10^{-38}	1.2×10^{-23}	1.8×10^{-9}	1.0×10^{-11}	2.3×10^{-11}	8.9×10^{-32}	8.9×10^{-32}
200	5.8×10^{-23}	8.5×10^{-21}	2.9×10^{-42}	5.8×10^{-23}	3.1×10^{-14}	6.9×10^{-20}	1.5×10^{-14}	1.1×10^{-35}	1.1×10^{-35}
250	2.3×10^{-23}	4.5×10^{-19}	6.3×10^{-41}	2.3×10^{-23}	2.5×10^{-12}	3.4×10^{-16}	1.7×10^{-13}	3.4×10^{-34}	3.4×10^{-34}
300	1.4×10^{-23}	4.6×10^{-17}	3.8×10^{-39}	1.4×10^{-23}	2.7×10^{-10}	6.3×10^{-13}	4.9×10^{-12}	2.0×10^{-32}	2.0×10^{-32}
350	1.0×10^{-23}	8.0×10^{-15}	5.0×10^{-37}	1.0×10^{-23}	2.8×10^{-8}	5.4×10^{-10}	2.9×10^{-10}	6.0×10^{-31}	6.0×10^{-31}
400	8.6×10^{-24}	1.6×10^{-12}	8.0×10^{-35}	8.6×10^{-24}	1.7×10^{-6}	1.7×10^{-7}	2.5×10^{-8}	1.2×10^{-29}	1.2×10^{-29}
450	7.8×10^{-24}	1.8×10^{-10}	8.3×10^{-33}	7.8×10^{-24}	5.4×10^{-5}	1.9×10^{-5}	1.9×10^{-6}	2.4×10^{-28}	2.4×10^{-28}
500	7.4×10^{-24}	9.9×10^{-9}	4.4×10^{-31}	7.4×10^{-24}	9.3×10^{-4}	9.0×10^{-4}	9.2×10^{-5}	3.8×10^{-27}	3.8×10^{-27}
550	7.3×10^{-24}	2.9×10^{-7}	1.3×10^{-29}	7.3×10^{-24}	9.8×10^{-3}	2.3×10^{-2}	2.5×10^{-3}	4.4×10^{-26}	4.4×10^{-26}
600	7.4×10^{-24}	5.2×10^{-6}	2.3×10^{-28}	7.4×10^{-24}	7.2×10^{-2}	3.4×10^{-1}	4.4×10^{-2}	3.6×10^{-25}	3.7×10^{-25}
650	7.7×10^{-24}	6.0×10^{-5}	2.7×10^{-27}	7.7×10^{-24}	3.9×10^{-1}	3.4	5.1×10^{-1}	2.3×10^{-24}	2.3×10^{-24}
700	8.0×10^{-24}	4.9×10^{-4}	2.3×10^{-26}	8.0×10^{-24}	1.7	25	4.2	1.2×10^{-23}	1.2×10^{-23}
750	8.4×10^{-24}	3.1×10^{-3}	1.6×10^{-25}	8.4×10^{-24}	5.9	1.4×10^{2}	27	4.8×10^{-23}	4.8×10^{-23}
800	8.9×10^{-24}	1.5×10^{-2}	8.2×10^{-25}	8.9×10^{-24}	18	6.5×10^{2}	1.4×10^{2}	1.7×10^{-22}	1.7×10^{-22}
850	9.4×10^{-24}	6.5×10^{-2}	3.7×10^{-24}	9.4×10^{-24}	48	2.5×10^{3}	5.9×10^{2}	5.2×10^{-22}	5.2×10^{-22}
900	1.0×10^{-23}	2.3×10^{-1}	1.4×10^{-23}	1.0×10^{-23}	1.1×10^{2}	8.3×10^{3}	2.1×10^{3}	1.4×10^{-21}	1.4×10^{-21}
950	1.1×10^{-23}	7.2×10^{-1}	4.6×10^{-23}	1.1×10^{-23}	2.5×10^{2}	2.4×10^{4}	6.8×10^{3}	3.6×10^{-21}	3.6×10^{-21}
1000	1.1×10^{-23}	2.0	1.4×10^{-22}	1.1×10^{-23}	5.1×10^{2}	6.4×10^{4}	2.0×10^{4}	8.2×10^{-21}	8.3×10^{-21}
1050	1.2×10^{-23}	5.2	3.8×10^{-22}	1.2×10^{-23}	9.7×10^{2}	1.5×10^{5}	5.1×10^{4}	1.8×10^{-20}	1.8×10^{-20}
1100	1.3×10^{-23}	1.2×10^{1}	9.5×10^{-22}	1.3×10^{-23}	1.7×10^{3}	3.4×10^{5}	1.2×10^{5}	3.5×10^{-20}	3.6×10^{-20}
1150	1.4×10^{-23}	26	2.2×10^{-21}	1.4×10^{-23}	3.0×10^{3}	7.1×10^{5}	2.7×10^{5}	6.8×10^{-20}	7.0×10^{-20}
1200	1.5×10^{-23}	54	4.8×10^{-21}	1.5×10^{-23}	4.8×10^{3}	1.4×10^{6}	5.5×10^{5}	1.2×10^{-19}	1.3×10^{-19}
1250	1.6×10^{-23}	1.0×10^{2}	1.0×10^{-20}	1.6×10^{-23}	7.6×10^{3}	2.6×10^{6}	1.1×10^{6}	2.1×10^{-19}	2.2×10^{-19}
1300	1.7×10^{-23}	1.9×10^{2}	2.0×10^{-20}	1.7×10^{-23}	1.2×10^{4}	4.6×10^{6}	2.0×10^{6}	3.6×10^{-19}	3.8×10^{-19}
1350	1.8×10^{-23}	3.4×10^{2}	3.7×10^{-20}	1.8×10^{-23}	1.7×10^{4}	7.8×10^{6}	3.6×10^{6}	5.8×10^{-19}	6.2×10^{-19}
1400	2.0×10^{-23}	5.7×10^{2}	6.7×10^{-20}	2.0×10^{-23}	2.4×10^{4}	1.3×10^{7}	6.1×10^{6}	9.2×10^{-19}	9.9×10^{-19}
1450	2.1×10^{-23}	9.3×10^{2}	1.2×10^{-19}	2.1×10^{-23}	3.4×10^{4}	2.0×10^{7}	1.0×10^{7}	1.4×10^{-18}	1.5×10^{-18}
1500	2.2×10^{-23}	1.5×10^{3}	2.0×10^{-19}	2.2×10^{-23}	4.7×10^{4}	3.1×10^{7}	1.6×10^{7}	2.1×10^{-18}	2.3×10^{-18}
1550	2.4×10^{-23}	2.3×10^{3}	3.2×10^{-19}	2.4×10^{-23}	6.2×10^{4}	4.7×10^{7}	2.5×10^{7}	3.1×10^{-18}	3.4×10^{-18}
1600	2.5×10^{-23}	3.4×10^{3}	5.1×10^{-19}	2.5×10^{-23}	8.2×10^{4}	6.8×10^{7}	3.8×10^{7}	4.4×10^{-18}	4.9×10^{-18}
1650	2.7×10^{-23}	4.9×10^{3}	7.9×10^{-19}	2.7×10^{-23}	1.1×10^{5}	9.8×10^{7}	5.6×10^{7}	6.2×10^{-18}	7.0×10^{-18}
1700	2.8×10^{-23}	7.0×10^{3}	1.2×10^{-18}	2.8×10^{-23}	1.4×10^{5}	1.4×10^{8}	8.0×10^{7}	8.6×10^{-18}	9.8×10^{-18}
1750	3.0×10^{-23}	9.8×10^{3}	1.8×10^{-18}	3.0×10^{-23}	1.7×10^{5}	1.9×10^{8}	1.1×10^{8}	1.2×10^{-17}	1.3×10^{-17}
1800	3.2×10^{-23}	1.4×10^{4}	2.6×10^{-18}	3.2×10^{-23}	2.1×10^{5}	2.5×10^{8}	1.6×10^{8}	1.6×10^{-17}	1.8×10^{-17}
1850	3.4×10^{-23}	1.8×10^{4}	3.7×10^{-18}	3.4×10^{-23}	2.6×10^{5}	3.4×10^{8}	2.1×10^{8}	2.1×10^{-17}	2.4×10^{-17}
1900	3.6×10^{-23}	2.4×10^{4}	5.2×10^{-18}	3.6×10^{-23}	3.2×10^{5}	4.4×10^{8}	2.9×10^{8}	2.7×10^{-17}	3.2×10^{-17}
1950	3.8×10^{-23}	3.2×10^{4}	7.2×10^{-18}	3.8×10^{-23}	3.8×10^{5}	5.7×10^{8}	3.8×10^{8}	3.5×10^{-17}	4.2×10^{-17}

2000	4.0×10^{-23}	4.1×10^{4}	9.9×10^{-18}	4.0×10^{-23}	4.6×10^{5}	7.2×10^{8}	4.9×10^{8}	4.4×10^{-17}	5.4×10^{-17}
2050	4.2×10^{-23}	5.3×10^{4}	1.3×10^{-17}	4.2×10^{-23}	5.4×10^{5}	9.1×10^{8}	6.3×10^{8}	5.6×10^{-17}	7.0×10^{-17}
2100	4.4×10^{-23}	6.7×10^{4}	1.8×10^{-17}	4.4×10^{-23}	6.4×10^{5}	1.1×10^{9}	8.0×10^{8}	7.0×10^{-17}	8.8×10^{-17}
2150	4.7×10^{-23}	8.4×10^{4}	2.3×10^{-17}	4.7×10^{-23}	7.4×10^{5}	1.4×10^{9}	1.0×10^{9}	8.7×10^{-17}	1.1×10^{-16}
2200	4.9×10^{-23}	1.0×10^{5}	3.1×10^{-17}	4.9×10^{-23}	8.6×10^{5}	1.7×10^{9}	1.3×10^{9}	1.1×10^{-16}	1.4×10^{-16}
2250	5.2×10^{-23}	1.3×10^{5}	3.9×10^{-17}	5.2×10^{-23}	9.9×10^{5}	2.1×10^{9}	1.6×10^{9}	1.3×10^{-16}	1.7×10^{-16}
2300	5.4×10^{-23}	1.5×10^{5}	5.0×10^{-17}	5.4×10^{-23}	1.1×10^{6}	2.5×10^{9}	1.9×10^{9}	1.6×10^{-16}	2.1×10^{-16}
2350	5.7×10^{-23}	1.9×10^{5}	6.4×10^{-17}	5.7×10^{-23}	1.3×10^{6}	3.0×10^{9}	2.3×10^{9}	1.9×10^{-16}	2.6×10^{-16}
2400	6.0×10^{-23}	2.2×10^{5}	8.0×10^{-17}	6.0×10^{-23}	1.5×10^{6}	3.5×10^{9}	2.8×10^{9}	2.3×10^{-16}	3.1×10^{-16}
2450	6.3×10^{-23}	2.7×10^{5}	1.0×10^{-16}	6.3×10^{-23}	1.6×10^{6}	4.1×10^{9}	3.3×10^{9}	2.7×10^{-16}	3.7×10^{-16}
2500	6.6×10^{-23}	3.1×10^{5}	1.2×10^{-16}	6.6×10^{-23}	1.8×10^{6}	4.8×10^{9}	3.9×10^{9}	3.2×10^{-16}	4.5×10^{-16}

Table S5: Rate constants (cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1}) for the hydrolysis of KM at different temperatures 200 to 2500 K using RRKM theory

T (K)	k_{CC}^{AA}			k_{CO}^{AA}					k_{tot}^{AA}
	K_{eq}	K_{uni}	K_f	K_{eq}	k_1	k_{-1}	k_2	k_f	
213	4.1×10^{-23}	3.2×10^{-22}	5.3×10^{-44}	5.0×10^{-23}	2.7×10^{-22}	3.2×10^{-23}	4.0×10^{-15}	5.3×10^{-44}	2.6×10^{-43}
216	3.9×10^{-23}	4.1×10^{-22}	6.5×10^{-44}	4.7×10^{-23}	3.9×10^{-22}	5.3×10^{-23}	4.5×10^{-15}	7.4×10^{-44}	3.7×10^{-43}
219	3.7×10^{-23}	5.3×10^{-22}	7.9×10^{-44}	4.5×10^{-23}	5.7×10^{-22}	8.9×10^{-23}	5.1×10^{-15}	1.0×10^{-43}	5.1×10^{-43}
224	3.4×10^{-23}	8.2×10^{-22}	1.1×10^{-43}	4.1×10^{-23}	1.1×10^{-21}	2.1×10^{-22}	6.2×10^{-15}	1.8×10^{-43}	9.1×10^{-43}
230	3.1×10^{-23}	1.4×10^{-21}	1.8×10^{-43}	3.8×10^{-23}	2.4×10^{-21}	5.9×10^{-22}	8.0×10^{-15}	3.6×10^{-43}	1.8×10^{-42}
235	2.9×10^{-23}	2.2×10^{-21}	2.6×10^{-43}	3.5×10^{-23}	4.6×10^{-21}	1.4×10^{-21}	1.0×10^{-14}	6.5×10^{-43}	3.2×10^{-42}
250	2.4×10^{-23}	9.1×10^{-21}	8.8×10^{-43}	2.9×10^{-23}	3.3×10^{-20}	1.8×10^{-20}	2.1×10^{-14}	3.9×10^{-42}	2.0×10^{-41}
259	2.2×10^{-23}	2.2×10^{-20}	1.9×10^{-42}	2.7×10^{-23}	1.1×10^{-19}	8.0×10^{-20}	3.3×10^{-14}	1.2×10^{-41}	5.9×10^{-41}
280	1.8×10^{-23}	1.9×10^{-19}	1.4×10^{-41}	2.2×10^{-23}	2.0×10^{-18}	2.7×10^{-18}	1.1×10^{-13}	1.7×10^{-40}	8.6×10^{-40}
290	1.7×10^{-23}	5.5×10^{-19}	3.7×10^{-41}	2.0×10^{-23}	7.8×10^{-18}	1.4×10^{-17}	2.1×10^{-13}	6.3×10^{-40}	3.1×10^{-39}
298	1.6×10^{-23}	1.3×10^{-18}	8.5×10^{-41}	1.9×10^{-23}	2.3×10^{-17}	5.4×10^{-17}	3.5×10^{-13}	1.8×10^{-39}	9.0×10^{-39}
300	1.6×10^{-23}	1.7×10^{-18}	1.0×10^{-40}	1.9×10^{-23}	3.1×10^{-17}	7.4×10^{-17}	4.0×10^{-13}	2.3×10^{-39}	1.2×10^{-38}
310	1.5×10^{-23}	5.2×10^{-18}	3.0×10^{-40}	1.8×10^{-23}	1.2×10^{-16}	3.8×10^{-16}	7.9×10^{-13}	8.7×10^{-39}	4.4×10^{-38}
320	1.4×10^{-23}	1.6×10^{-17}	9.2×10^{-40}	1.7×10^{-23}	4.8×10^{-16}	1.9×10^{-15}	1.6×10^{-12}	3.2×10^{-38}	1.6×10^{-37}
200	5.4×10^{-23}	1.1×10^{-22}	2.4×10^{-44}	6.4×10^{-23}	5.1×10^{-23}	3.3×10^{-24}	2.6×10^{-15}	1.3×10^{-44}	6.6×10^{-44}
250	2.4×10^{-23}	9.1×10^{-21}	8.8×10^{-43}	2.9×10^{-23}	3.3×10^{-20}	1.8×10^{-20}	2.1×10^{-14}	3.9×10^{-42}	2.0×10^{-41}
300	1.6×10^{-23}	1.7×10^{-18}	1.0×10^{-40}	1.9×10^{-23}	3.1×10^{-17}	7.4×10^{-17}	4.0×10^{-13}	2.3×10^{-39}	1.2×10^{-38}
350	1.2×10^{-23}	5.8×10^{-16}	2.8×10^{-38}	1.5×10^{-23}	2.5×10^{-14}	2.0×10^{-13}	1.5×10^{-11}	1.5×10^{-36}	7.4×10^{-36}
400	1.1×10^{-23}	2.0×10^{-13}	8.4×10^{-36}	1.3×10^{-23}	8.6×10^{-12}	1.7×10^{-10}	9.1×10^{-10}	3.8×10^{-34}	1.9×10^{-33}
450	1.0×10^{-23}	3.3×10^{-11}	1.3×10^{-33}	1.2×10^{-23}	1.0×10^{-9}	4.3×10^{-8}	6.4×10^{-8}	3.0×10^{-32}	1.5×10^{-31}
500	9.9×10^{-24}	2.4×10^{-9}	9.6×10^{-32}	1.2×10^{-23}	5.2×10^{-8}	4.0×10^{-6}	3.4×10^{-6}	1.1×10^{-30}	5.7×10^{-30}
550	1.0×10^{-23}	8.8×10^{-8}	3.5×10^{-30}	1.2×10^{-23}	1.3×10^{-6}	1.8×10^{-4}	1.1×10^{-4}	2.5×10^{-29}	1.3×10^{-28}
600	1.0×10^{-23}	1.8×10^{-6}	7.6×10^{-29}	1.3×10^{-23}	2.1×10^{-5}	4.2×10^{-3}	2.3×10^{-3}	3.6×10^{-28}	1.8×10^{-27}
650	1.1×10^{-23}	2.4×10^{-5}	1.1×10^{-27}	1.3×10^{-23}	2.1×10^{-4}	6.3×10^{-2}	3.1×10^{-2}	3.6×10^{-27}	1.8×10^{-26}
700	1.1×10^{-23}	2.3×10^{-4}	1.0×10^{-26}	1.4×10^{-23}	1.5×10^{-3}	6.5×10^{-1}	3.0×10^{-1}	2.7×10^{-26}	1.4×10^{-25}
750	1.2×10^{-23}	1.6×10^{-3}	7.7×10^{-26}	1.5×10^{-23}	8.6×10^{-3}	4.9	2.2	1.6×10^{-25}	7.9×10^{-25}
800	1.3×10^{-23}	8.7×10^{-3}	4.5×10^{-25}	1.6×10^{-23}	3.9×10^{-2}	29	13	7.6×10^{-25}	3.8×10^{-24}
850	1.4×10^{-23}	3.9×10^{-2}	2.2×10^{-24}	1.7×10^{-23}	1.5×10^{-1}	1.4×10^{2}	60	3.1×10^{-24}	1.5×10^{-23}
900	1.5×10^{-23}	1.5×10^{-1}	9.0×10^{-24}	1.8×10^{-23}	4.9×10^{-1}	5.7×10^{2}	2.4×10^{2}	1.1×10^{-23}	5.4×10^{-23}
950	1.6×10^{-23}	5.0×10^{-1}	3.2×10^{-23}	2.0×10^{-23}	1.4	2.0×10^{3}	8.4×10^{2}	3.4×10^{-23}	1.7×10^{-22}
1000	1.7×10^{-23}	1.5	1.0×10^{-22}	2.1×10^{-23}	3.8	6.2×10^{3}	2.6×10^{3}	9.4×10^{-23}	4.7×10^{-22}
1050	1.9×10^{-23}	4.0	3.0×10^{-22}	2.3×10^{-23}	9.0	1.7×10^{4}	7.2×10^{3}	2.4×10^{-22}	1.2×10^{-21}
1100	2.0×10^{-23}	9.7	7.8×10^{-22}	2.5×10^{-23}	20	4.5×10^{4}	1.8×10^{4}	5.7×10^{-22}	2.9×10^{-21}
1150	2.2×10^{-23}	22	1.9×10^{-21}	2.7×10^{-23}	41	1.1×10^{5}	4.3×10^{4}	1.3×10^{-21}	6.4×10^{-21}

1200	2.3×10^{-23}	47	4.3×10^{-21}	2.9×10^{-23}	80	2.3×10^{5}	9.5×10^{4}	2.7×10^{-21}	1.3×10^{-20}
1250	2.5×10^{-23}	93	9.4×10^{-21}	3.1×10^{-23}	1.5×10^{2}	4.8×10^{5}	1.9×10^{5}	5.3×10^{-21}	2.6×10^{-20}
1300	2.7×10^{-23}	1.8×10^{2}	1.9×10^{-20}	3.3×10^{-23}	2.6×10^{2}	9.3×10^{5}	3.8×10^{5}	1.0×10^{-20}	5.0×10^{-20}
1350	2.9×10^{-23}	3.2×10^{2}	3.7×10^{-20}	3.5×10^{-23}	4.4×10^{2}	1.7×10^{6}	7.1×10^{5}	1.8×10^{-20}	9.1×10^{-20}
1400	3.1×10^{-23}	5.6×10^{2}	6.9×10^{-20}	3.8×10^{-23}	7.2×10^{2}	3.1×10^{6}	1.3×10^{6}	3.2×10^{-20}	1.6×10^{-19}
1450	3.3×10^{-23}	9.4×10^{2}	1.2×10^{-19}	4.1×10^{-23}	1.1×10^{3}	5.3×10^{6}	2.2×10^{6}	5.3×10^{-20}	2.7×10^{-19}
1500	3.5×10^{-23}	1.5×10^{3}	2.1×10^{-19}	4.3×10^{-23}	1.7×10^{3}	8.8×10^{6}	3.6×10^{6}	8.7×10^{-20}	4.4×10^{-19}
1550	3.8×10^{-23}	2.4×10^{3}	3.6×10^{-19}	4.6×10^{-23}	2.6×10^{3}	1.4×10^{7}	5.7×10^{6}	1.4×10^{-19}	7.0×10^{-19}
1600	4.0×10^{-23}	3.6×10^{3}	5.8×10^{-19}	4.9×10^{-23}	3.8×10^{3}	2.2×10^{7}	8.9×10^{6}	2.2×10^{-19}	1.1×10^{-18}
1650	4.3×10^{-23}	5.4×10^{3}	9.3×10^{-19}	5.3×10^{-23}	5.4×10^{3}	3.3×10^{7}	1.4×10^{7}	3.3×10^{-19}	1.6×10^{-18}
1700	4.6×10^{-23}	7.9×10^{3}	1.4×10^{-18}	5.6×10^{-23}	7.5×10^{3}	4.9×10^{7}	2.0×10^{7}	4.8×10^{-19}	2.4×10^{-18}
1750	4.9×10^{-23}	1.1×10^{4}	2.2×10^{-18}	6.0×10^{-23}	1.0×10^{4}	7.2×10^{7}	2.9×10^{7}	7.1×10^{-19}	3.5×10^{-18}
1800	5.2×10^{-23}	1.6×10^{4}	3.2×10^{-18}	6.3×10^{-23}	1.4×10^{4}	1.0×10^{8}	4.1×10^{7}	1.0×10^{-18}	5.0×10^{-18}
1850	5.5×10^{-23}	2.2×10^{4}	4.7×10^{-18}	6.7×10^{-23}	1.8×10^{4}	1.4×10^{8}	5.8×10^{7}	1.4×10^{-18}	7.1×10^{-18}
1900	5.8×10^{-23}	2.9×10^{4}	6.7×10^{-18}	7.1×10^{-23}	2.4×10^{4}	1.9×10^{8}	7.9×10^{7}	2.0×10^{-18}	9.8×10^{-18}
1950	6.1×10^{-23}	3.9×10^{4}	9.5×10^{-18}	7.5×10^{-23}	3.1×10^{4}	2.6×10^{8}	1.1×10^{8}	2.7×10^{-18}	1.3×10^{-17}
2000	6.5×10^{-23}	5.1×10^{4}	1.3×10^{-17}	8.0×10^{-23}	3.9×10^{4}	3.5×10^{8}	1.4×10^{8}	3.6×10^{-18}	1.8×10^{-17}
2050	6.9×10^{-23}	6.6×10^{4}	1.8×10^{-17}	8.4×10^{-23}	4.9×10^{4}	4.5×10^{8}	1.9×10^{8}	4.8×10^{-18}	2.4×10^{-17}
2100	7.2×10^{-23}	8.4×10^{4}	2.4×10^{-17}	8.9×10^{-23}	6.1×10^{4}	5.9×10^{8}	2.4×10^{8}	6.3×10^{-18}	3.1×10^{-17}
2150	7.6×10^{-23}	1.1×10^{5}	3.3×10^{-17}	9.4×10^{-23}	7.5×10^{4}	7.5×10^{8}	3.1×10^{8}	8.1×10^{-18}	4.1×10^{-17}
2200	8.1×10^{-23}	1.3×10^{5}	4.3×10^{-17}	9.9×10^{-23}	9.1×10^{4}	9.5×10^{8}	3.9×10^{8}	1.0×10^{-17}	5.2×10^{-17}
2250	8.5×10^{-23}	1.7×10^{5}	5.6×10^{-17}	1.0×10^{-22}	1.1×10^{5}	1.2×10^{9}	4.9×10^{8}	1.3×10^{-17}	6.7×10^{-17}
2300	8.9×10^{-23}	2.0×10^{5}	7.3×10^{-17}	1.1×10^{-22}	1.3×10^{5}	1.5×10^{9}	6.0×10^{8}	1.7×10^{-17}	8.4×10^{-17}
2350	9.4×10^{-23}	2.5×10^{5}	9.3×10^{-17}	1.2×10^{-22}	1.6×10^{5}	1.8×10^{9}	7.4×10^{8}	2.1×10^{-17}	1.1×10^{-16}
2400	9.9×10^{-23}	3.0×10^{5}	1.2×10^{-16}	1.2×10^{-22}	1.9×10^{5}	2.2×10^{9}	9.0×10^{8}	2.6×10^{-17}	1.3×10^{-16}
2450	1.0×10^{-22}	3.6×10^{5}	1.5×10^{-16}	1.3×10^{-22}	2.2×10^{5}	2.7×10^{9}	1.1×10^{9}	3.2×10^{-17}	1.6×10^{-16}
2500	1.1×10^{-22}	4.3×10^{5}	1.9×10^{-16}	1.3×10^{-22}	2.5×10^{5}	3.2×10^{9}	1.3×10^{9}	4.0×10^{-17}	2.0×10^{-16}

Table S6: Concentrations of WM and AM (molecules cm^{-3}) at various altitudes in troposphere

Altitude (km)	T (K)	[WM][a]	[AM][b]
0	298	5.2×10^{17}	2.5×10^{11}
5	259	2.4×10^{16}	7.6×10^{9}
10	230	4.9×10^{15}	8.5×10^{8}
15	213	2.0×10^{13}	1.2×10^{8}

[a] – References 7, [b] - Reference 8-10

Table S7: Concentrations of AM and WM (molecules cm^{-3}) within 280K to 320K at 0 km altitude

Reactants		280 K	290 K	298 K	300 K	310 K	320 K
AM[a]	0.1 ppbv	2.6×10^{9}	2.5×10^{9}	2.5×10^{9}	2.4×10^{9}	2.4×10^{9}	2.3×10^{9}
	10 ppbv	2.6×10^{11}	2.5×10^{11}	2.5×10^{11}	2.4×10^{11}	2.4×10^{11}	2.3×10^{11}
	2900 ppbv	7.6×10^{13}	7.3×10^{13}	7.1×10^{13}	7.1×10^{13}	6.9×10^{13}	6.7×10^{13}
WM[b]	20% RH	5.2×10^{16}	9.6×10^{16}	1.5×10^{17}	1.7×10^{17}	2.9×10^{17}	4.1×10^{17}
	100% RH	2.6×10^{17}	4.8×10^{17}	7.7×10^{17}	8.6×10^{17}	1.5×10^{18}	2.3×10^{18}

[a] – References 11-14, [b] - Reference 7

Table S8: Absolute energies (Hartree) of all the species involved in hydrolysis and ammonolysis of ketene calculated at the two different levels of theory

species	MP2/aug-cc-pVTZ	CCSD(T)/CBS
KM	-152.334603	-152.432031467
AM	-56.4605408	-56.5070882913
WM	-76.3289923	-76.3759356964
^{AM}RC	-208.8004392	-208.9443872707
^{WM}RC	-228.6682806	-228.8127696799
^{AM}TS$_{CC}$	-208.7354563	-208.8766636847
^{AM}TS-1$_{CO}$	-208.7551032	-208.8975402061
^{AM}TS-2$_{CO}$	-208.7497369	-208.8917433762
^{WM}TS$_{CC}$	-228.6019314	-228.7414263585
^{WM}TS-1$_{CO}$	-228.6065993	-228.7499202387
^{WM}TS-2$_{CO}$	-228.6055461	-228.749164927
^{AM}IM$_{CO}$	-208.8156465	-208.9612304395
^{WM}IM$_{CO}$	-228.67674	-228.8239273689
AC	-208.8543744	-208.9984866861
AA	-228.7226153	-228.8682688663

Table S9: Relative ZPE corrected energies (kcal mol^{-1}) of all species with respect to the isolated reactants calculated using two different levels of theory

species	MP2/aug-cc-pVTZ	CCSD(T)/CBS//MP2/aug-cc-pVTZ
^{AM}RC	-2.2	-2.2
$^{AM}TS_{CC}$	38.5	40.3
$^{AM}TS\text{-}1_{CO}$	27.3	28.3
$^{AM}IM_{CO}$	-8.0	-9.0
$^{AM}TS\text{-}2_{CO}$	30.1	31.3
AC	-32.4	-32.4
^{WM}RC	-1.9	-2.0
$^{WM}TS_{CC}$	39.3	42.3
$^{WM}TS\text{-}1_{CO}$	37.5	38.2
$^{WM}IM_{CO}$	-2.9	-4.7
$^{WM}TS\text{-}2_{CO}$	38.6	39.1
AA	-31.2	-32.0

Table S10: Optimized geometries in Cartesian coordinates and normal mode frequencies of all species calculated at MP2/aug-cc-pVTZ level of theory

species	Cartesian coordinates (Å)			Vibrational frequencies (cm^{-1})		
ketene	C	0.00022000	-1.21545900	0.00000000		
	H	-0.94094800	-1.73755600	0.00000000	433.8184	502.3029	584.0250
	H	0.94156500	-1.73723700	0.00000000	984.8421	1152.7747	1409.3953
	C	0.00000000	0.10169100	0.00000000	2200.8952	3227.4056	3336.6530
	O	-0.00024200	1.26967500	0.00000000			
WM	H	0.00000000	0.75816200	-0.47292300			
	H	0.00000000	-0.75816200	-0.47292300	1628.4005	3821.6010	3947.4441
	O	0.00000000	0.00000000	0.11823100			
AM	N	-0.00000100	-0.00002200	-0.11390700			
	H	0.74017500	-0.57621000	0.26588800	1036.0525	1668.6736	1668.6867
	H	-0.86914800	-0.35281700	0.26584700	3504.4346	3651.5437	3651.5633
	H	0.12898000	0.92918400	0.26561700			
^{AM}RC	C	-1.23365000	-1.10910100	-0.00002600			
	H	2.87404500	-0.77658600	0.00002100	42.1349	81.9897	110.8245
	H	-0.42172700	-1.81512700	-0.00009200	122.4639	189.5055	267.3244
	H	-2.27047500	-1.39846700	0.00008700	416.6457	515.4062	587.7334
	C	-0.92872000	0.17152800	0.00002700	979.9449	1071.3218	1147.4887
	O	-0.68125300	1.31497500	-0.00001200	1396.6662	1666.5612	1667.3367
	H	2.05753400	0.37117300	-0.81067700	2195.3158	3226.3398	3342.8808
	H	2.05733200	0.37094800	0.81083100	3494.2350	3636.9158	3641.0420
	N	2.01821900	-0.23518600	-0.00001200			
$^{AM}TS_{CC}$	C	-0.14862700	-1.35687300	-0.05936200			
	H	1.08474900	-0.69978800	-0.54572100	-1807.9932	239.0503	444.0250
	H	0.54400600	-1.79726600	0.65536500	481.3171	598.1195	636.9249
	H	-1.02153300	-1.95709800	-0.27932600	770.6675	836.4894	919.9190
	C	-0.30511000	0.05072900	0.08403700	961.0659	1084.7400	1156.2377
	O	-1.17862800	0.87683800	0.01473700	1412.0923	1507.1621	1546.7541
	H	1.31382900	1.23333900	-0.70087700	1795.2468	1896.3234	3132.5828
	H	1.66245300	0.72802000	0.84561400	3244.3182	3492.0545	3614.1375
	N	1.22399200	0.47356400	-0.03442900			
$^{AM}TS\text{-}1_{CO}$	C	1.47109200	-0.29244100	0.00000500			
	H	2.26569300	0.43517100	0.00000100	-1636.6012	303.6369	415.2731
	H	1.70322800	-1.34419200	0.00001400	517.3461	666.8993	716.8323
	C	0.19514700	0.12297200	0.00000000	735.8586	839.0691	1006.2928
	O	-0.43678000	1.26101600	-0.00001100	1027.4226	1073.7348	1238.9900
	N	-0.98469500	-0.81635700	0.00000500	1423.2986	1448.8472	1572.4122
	H	-1.07548900	-1.38342400	0.83673500	1739.9101	2167.3267	3216.2304
	H	-1.07548800	-1.38343100	-0.83672100	3321.5572	3499.9600	3614.2656
	H	-1.42827800	0.31905900	-0.00000200			
$^{AM}IM_{CO}$	C	1.18842400	-0.76832800	0.01632000			
	H	1.14328300	-1.84459200	0.03647100	215.0596	406.7756	454.0106
	H	2.15229100	-0.28607700	-0.01850300	510.8703	582.5578	678.8568
	C	0.05971100	-0.04276000	-0.00534900	690.2921	722.7826	937.0665
	N	-1.23182600	-0.53597800	-0.09039300	980.0963	1128.6089	1221.6471
	H	-1.31281800	-1.50851100	0.15909400	1427.2538	1459.8879	1640.3608
	H	-1.90626400	0.04149600	0.38914900	1738.5437	3210.5694	3310.3799
	O	0.01690500	1.32140600	-0.00749200	3580.7405	3699.1068	3833.3232
	H	0.92224000	1.64481100	0.06064500			

^{AM}TS-2$_{CO}$	C -1.15476300 -0.77036800 -0.05289100 H -1.14601900 -1.75598200 -0.50317100 H -1.72352300 -0.70477800 0.87059100 C 0.04574700 0.00091800 0.02034700 N 1.32172900 -0.38592500 0.01380700 H 1.56012100 -1.34760500 0.16534300 H 2.05106900 0.29244900 -0.12211200 O -0.25243500 1.26566400 0.00054100 H -1.32017800 0.70877100 -0.31636200	-1963.3858 320.1188 429.9222 454.4298 537.8429 630.9868 737.3834 801.5870 998.7996 1055.3121 1092.0104 1172.5867 1425.4410 1521.7205 1534.6600 1656.8229 2006.7119 3141.4993 3231.1699 3621.4357 3767.7426
AC	C 1.35939400 -0.32842000 -0.00026200 H 1.74349600 -0.24714000 1.01586300 H 1.46796000 -1.35741900 -0.33622100 H 1.94526700 0.32986900 -0.63501900 C -0.07418500 0.14599400 -0.00825800 O -0.37512800 1.33056100 0.00268800 N -1.01660500 -0.84142800 -0.01856200 H -0.76821200 -1.81009800 0.04938500 H -1.98250700 -0.57515200 0.06553900	34.6511 147.1806 427.8200 521.8600 548.2395 659.7296 861.3770 989.5267 1060.7112 1120.4594 1353.4486 1413.3125 1492.4697 1511.1250 1624.1853 1766.6670 3086.9533 3174.6065 3199.2797 3619.1253 3769.3819
^{WM}RC	C -1.27059700 -1.06465300 0.00347400 H -2.32015200 -1.30213500 0.02055700 H -0.49917400 -1.81494800 -0.01923600 C -0.89895200 0.19692600 0.00271600 O -0.57602500 1.32147000 0.00248600 H 2.85000900 -0.53322800 0.23011800 H 1.93502800 0.66316400 0.02239500 O 1.95747300 -0.29728200 -0.03885700	60.3195 76.5312 108.9435 129.1487 188.5643 200.1132 425.8039 510.5781 583.6677 981.0281 1150.7842 1400.2908 1628.9378 2198.5187 3226.7351 3340.9699 3810.8768 3936.0904
^{WM}TS$_{CC}$	C -0.18963000 1.31421800 -0.04004900 H -1.17614300 0.42441500 -0.43973700 H -0.77125600 1.57239100 0.83932900 H 0.43927500 2.11243500 -0.41742700 C 0.44519200 0.06144200 0.08105700 O 1.38013800 -0.63050300 0.00409400 O -1.18331400 -0.79015100 -0.12343000 H -1.59983500 -0.99797100 0.72646800	-1751.2021 284.0457 372.7855 461.5842 523.7154 592.9883 715.5263 763.8899 855.9813 1054.7144 1088.8611 1405.8109 1500.3168 1797.7336 2056.3765 3145.9452 3237.1562 3774.0255
^{WM}TS-1$_{CO}$	C -1.48346100 -0.20359500 0.00369400 C -0.20700500 0.18045000 -0.01209900 O 0.56500200 1.18993900 0.01728100 O 0.90885200 -0.92679300 -0.10111700 H 1.40348100 0.11874200 -0.00988700 H 0.93643400 -1.40105400 0.74608300 H -2.24208000 0.55787200 0.07287100 H -1.74586800 -1.24185100 -0.08794700	-1595.1115 396.9129 440.7998 580.5096 631.1252 635.4145 695.7761 771.6382 995.5898 1019.0154 1181.1846 1355.2955 1443.7642 1833.5129 2144.3980 3228.8073 3340.7273 3747.3873
^{WM}IM$_{CO}$	C -1.38636000 0.00000000 -0.00000100 H -1.93327400 0.92830900 0.00000500 H -1.93327400 -0.92830900 0.00000000 C -0.04602300 0.00000000 -0.00000100 H 0.19187400 1.86896400 0.00000800 O 0.75481900 -1.08651200 0.00000100 H 0.19187400 -1.86896400 0.00000100 O 0.75481900 1.08651200 -0.00000100	255.6345 436.2394 466.2777 548.6214 667.5895 671.8797 705.5638 950.0747 984.8527 1169.5950 1245.8456 1455.5429 1461.9619 1730.7768 3215.1783 3314.5496 3835.0678 3836.8780
^{WM}TS-2$_{CO}$	C -1.23481200 -0.61143200 -0.04745000 H -1.36673200 -1.61311100 -0.42983400 H -1.85676700 -0.34657700 0.80143500 C 0.04721300 -0.02886100 0.03212100	-2096.3979 429.4593 507.8192 569.9283 623.2398 742.1049 788.5172 999.3891 1062.2396 1145.8141 1212.3591 1424.9629

	H	1.89999500	0.02206000	-0.11645800			
	O	-0.01355100	1.26216600	-0.00865200	1518.8338	1602.2227	1982.1075
	H	-1.15600900	0.85745600	-0.36890300	3162.4510	3264.6164	3751.9438
	O	1.21418900	-0.64692500	0.03436900			
AA	C	-1.38957600	-0.10898800	-0.00018800			
	H	-1.66420100	-0.69050100	-0.87800200	78.2029	422.8000	549.6503
	H	-1.66565700	-0.68813300	0.87873700	583.3796	662.0860	874.2742
	H	-1.90758400	0.84292000	-0.00185000	1008.4613	1076.2691	1206.3355
	C	0.08920600	0.12609300	0.00098700	1342.5950	1422.4304	1492.5434
	O	0.64337500	1.20177500	-0.00025600	1501.0882	1810.5101	3097.5105
	H	1.71170600	-0.80459300	-0.00057600	3181.2393	3223.7003	3752.1871
	O	0.77262000	-1.04706500	-0.00013300			

References:

1. Nguyen, T. L., Xue, B. C., Ellison, G. B., & Stanton, J. F. (2013). Theoretical study of reaction of ketene with water in the gas phase: formation of acetic acid?. *J. Phys. Chem. A* 2013, 117, 10997–11005.

2. Nguyen, M. T., & Raspoet, G. (1999). The hydration mechanism of ketene: 15 years later. *Canadian journal of chemistry*, *77*(5-6), 817-829.

3. Cannizzaro, C. E.; Houk, K. N. Theoretical Study of the Stereoselective Additions of Chiral Alcohols to Ketene. J. Am. Chem. Soc. 2004, 126, 10992−11008.

4. Raspoet, G.; Nguyen, M. T.; Kelly, S.; Hegarty, A. F. Amination of ketenes: Evidence for a mechanism involving enols of amides as intermediates. The Journal of Organic Chemistry 1998, 63, 9669–9677.

5. Sung, K.; Tidwell, T. T. Amination of ketene: A theoretical study. Journal of the American Chemical Society 1998, 120, 3043–3048.

6. Kim, C. K., Lee, K. A., Chen, J., Lee, H. W., Lee, B. S., & Kim, C. K. (2008). Theoretical Studies on the Addition Reactions of Ketene with NH_3 in the Gas Phase and in Non-Aqueous Solutions. *Bulletin of the Korean Chemical Society*, *29*(7), 1335-1343.

7. J. M. Anglada, G. J. Hoffman, L. V. Slipchenko, M. M. Costa, M. F. Ruiz-López and J. S. Francisco, *J. Phys. Chem. A.*, 2013, 117, 10381.

8. Nowak, J. B.; Neuman, J. A.; Bahreini, R.; Brock, C. A.; Middlebrook, A. M.; Wollny, A. G.; Holloway, J. S.; Peischl, J.; Ryerson, T. B.; Fehsenfeld, F. C. *J. Geophys. Res.*, 2010, 115.

9. Oelhaf, H.; Leupolt, A.; Fischer, H. *Appl. Opt.*, 1983, 22, 647.

10. Höpfner, M.; Volkamer, R.; Grabowski, U.; Orphal, M. G. J.; Stiller, G.; von Clarmann, T.; Wetzel, G. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 2016, 16, 14357.

11. Atmospheric Chemistry and Global Change, ed. Brasseur, G. P.; Orlando, J. J.; Tyndall, G. S. Oxford University Press, 1999.

12. Aneja, V. P.; Nelson, D. R.; Roelle, P. A.; Walker, J. T.; Battye, W. Agricultural ammonia emissions and ammonium concentrations associated with aerosols and precipitation in the southeast United States. *J. Geophys. Res.* 2003, 108 .

13. Warner, J.; Wei, Z.; Strow, L.; Dickerson, R.; Nowak, J. The global tropospheric ammonia distribution as seen in the 13 year AIRS measurement record. *Atmos. Chem. Phys Discuss.* 2015, 15 .

14. Hiranuma, N.; Brooks, S. D.; Thornton, D. C.; Auvermann, B. W. Atmospheric ammonia mixing ratios at an open-air cattle feeding facility. *J. Air Waste Manage. Assoc.* 2010, 60, 210–218.