

Supplementary Information for

Dissociative charge transfer through a conical intersection: quantum thermal rate constants up to 1000 K for the $\text{He}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{He} + \text{H} + \text{H}^+$ reaction.

Dario De Fazio^{*a}, Vincenzo Aquilanti^b and Carlo Petrongolo^c

^a *Istituto di Struttura della Materia, Consiglio Nazionale delle Ricerche, 00010 Montelibretti (Roma), Italy.*

^b *Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università di Perugia, 60123 Perugia, Italy.*

^c *Istituto per i Processi Chimico Fisici, Consiglio Nazionale delle Ricerche, 56124 Pisa, Italy.*

Table SI 1. State specific rate constants for $j_0=0-7$ as a function of temperature. Temperature (T) in Kelvin, rate constants in $10^{-13} \text{ cm}^3 / \text{s}$

T	$J_0 = 0$	$J_0 = 1$	$J_0 = 2$	$J_0 = 3$	$J_0 = 4$	$J_0 = 5$	$J_0 = 6$	$J_0 = 7$
50	0.0910	0.0543	0.0502	0.1859	0.0516	0.0648	0.1052	0.3123
100	0.1603	0.0722	0.1075	0.2581	0.0717	0.0894	0.1590	0.4188
150	0.1871	0.0819	0.1278	0.2909	0.0878	0.1020	0.1867	0.4648
200	0.1958	0.0896	0.1402	0.3103	0.1012	0.1102	0.2031	0.4912
250	0.1964	0.0964	0.1485	0.3232	0.1112	0.1166	0.2137	0.5085
300	0.1934	0.1022	0.1545	0.3327	0.1182	0.1220	0.2212	0.5210
350	0.1890	0.1071	0.1593	0.3340	0.1230	0.1267	0.2267	0.5305
400	0.1839	0.1110	0.1631	0.3459	0.1260	0.1308	0.2311	0.5380
450	0.1790	0.1143	0.1664	0.3509	0.1278	0.1344	0.2347	0.5443
500	0.1741	0.1168	0.1693	0.3552	0.1289	0.1375	0.2379	0.5498
550	0.1696	0.1189	0.1718	0.3591	0.1294	0.1401	0.2407	0.5546
600	0.1655	0.1206	0.1741	0.3626	0.1295	0.1424	0.2432	0.5590
650	0.1617	0.1220	0.1762	0.3659	0.1294	0.1444	0.2455	0.5631
700	0.1582	0.1231	0.1781	0.3689	0.1292	0.1462	0.2477	0.5669
750	0.1550	0.1241	0.1799	0.3719	0.1288	0.1477	0.2499	0.5706
800	0.1522	0.1250	0.1816	0.3747	0.1285	0.1492	0.2519	0.5741
850	0.1496	0.1257	0.1833	0.3774	0.1281	0.1505	0.2539	0.5776
900	0.1473	0.1264	0.1849	0.3801	0.1277	0.1517	0.2558	0.5811
950	0.1451	0.1271	0.1865	0.3827	0.1273	0.1528	0.2578	0.5845
1000	0.1432	0.1277	0.1880	0.3853	0.1270	0.1539	0.2597	0.5880