

Supplementary Information for
Effect of water on the oxidation of CO by
Criegee intermediate.

Amit Kumar, Subhasish Mallick, and Pradeep Kumar*

Department of Chemistry, Malaviya National Institute of Technology Jaipur, Jaipur,
302017, India

E-mail: pradeep.chy@mnit.ac.in

Sl. No.

Contents

1. **Table S1:** Optimized geometries in Cartesian coordinates and all normal mode frequencies calculated at the M062X/aug-cc-pVTZ level of theory.
2. **Table S2:** Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS1 within the temperature range of 213-1400 K.
3. **Table S3:** Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1400 K.
4. **Table S4:** Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS3 within the temperature range of 213-1400 K.
5. **Table S5:** The total bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel within the temperature range of 213-1400 K.
6. **Table S6:** Relative energies (ΔE) including ZPE in kcal mol^{-1} for all the species with respect to the isolated reactants at the M06-2X/aug-cc-pVTZ//CCSD(T)/CBS level of theory in the presence of H_2O .
7. **Table S7:** Concentration of different bimolecular species in in molecules cm^{-3} , calculated using the k_{eq1} values of path A, B, and C for H_2O catalyzed channel.
8. **Table S8:** Concentration of different bimolecular species in in molecules cm^{-3} , calculated using the k_{eq1} values of path A, B, and C for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel.
9. **Table S9:** Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS1 within the temperature range of 213-1400K.
10. **Table S10:** Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1400K.
11. **Table S11:** Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS3 within the temperature range of 213-1400K.
12. **Figure S1:** Gibbs free energy profile for $\text{CH}_2\text{OO} + \text{CO}$ reaction in presence of H_2O calculated at M06-2X/aug-cc-pVTZ level of theory.
13. **Table S12:** Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS1 within the temperature range of 213-1400 K.
14. **Table S13:** Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1400 K.
15. **Table S14:** Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS3 within the temperature range of 213-1400 K.
16. **Table S15:** The total bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel within the temperature range of 213-1400 K.

Sl. No.**Contents**

17. **Table S16:**Relative energies (ΔE) including ZPE in kcal mol⁻¹ for all the species with respect to the isolated reactants at the M06-2X/aug-cc-pVTZ//CCSD(T)/CBS level of theory in the presence of (H₂O)
18. **Table S17:** Termolecular rate constant k_t in (cm⁶ molecule⁻² sec⁻¹) for (H₂O)₂ catalyzed channel corresponds to TS1 within the temperature range of 213-1400K.
19. **Table S18:** Termolecular rate constant k_t in (cm⁶ molecule⁻² sec⁻¹) for (H₂O)₂ catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1400K.
20. **Table S19:** Termolecular rate constant k_t in (cm⁶ molecule⁻² sec⁻¹) for (H₂O)₂ catalyzed channel corresponds to TS3 within the temperature range of 213-1400K.
21. **Table S20:** Concentrations of H₂O and (H₂O)₂ in molecules cm⁻³, k_t in cm⁶ molecule⁻² sec⁻¹ and k_{eff} in cm³ molecule¹ sec¹ at higher altitude.
22. **Table S21:** Absolute energies in Hartree for the uncatalyzed channel optimized at M06-2X/aug-cc-pVTZ level of theory.

Table S1: Optimized geometries in Cartesian coordinates and normal mode frequencies of all species calculate at M062X/aug-cc-pVTZ level of theory

compound	cartesian coordinate(Å)			frequency(cm ⁻¹)			
CH ₂ OO	O	-1.167369	0.192586	0.000105	538.3305	697.3217	929.575
	O	0.006904	-0.459273	-0.000058	1022.7741	1260.7685	1432.8735
	C	1.054173	0.202791	-0.000096	1629.6696	3139.9976	3290.8134
	H	0.986317	1.284825	0.000206			
	H	1.972367	-0.368079	-0.000004			
CO	C	0.00	0.00	-0.640774	2272.4229		
	O	0.00	0.00	0.480581			
WM	O	0.00	0.00	0.116356	1619.135	3870.5222	3973.6259
	H	0.00	0.762511	-0.465425			
	H	0.00	-0.762511	-0.465425			
CI-CO	O	-0.721097	1.208374	0.198852	75.6097	111.6637	136.8406
	O	-1.210084	0.107856	-0.404976	168.4595	190.9485	541.7498
	C	-1.166233	-0.966006	0.210963	699.3429	930.6858	1039.4746
	H	-0.76154	-0.977327	1.21611	1262.0199	1437.1265	1636.1261
	H	-1.553608	-1.827074	-0.316513	2226.3558	3144.1455	3292.5125
	O	1.643938	-0.603723	-0.058612			
	C	1.935083	0.483396	-0.007914			
TS _{unecat}	O	-0.185313	1.182386	0.188343	-449.1088	273.4263	341.9915
	O	-1.057837	0.257581	-0.349913	454.6682	576.2288	695.8124
	C	-0.911602	-0.863959	0.216346	778.9603	981.9863	1099.8722
	H	-0.653526	-0.907604	1.265532	1242.6743	1414.2409	1575.3033
	H	-1.331049	-1.706682	-0.318346	1835.2116	3155.3252	3290.8577
	O	1.137298	-0.757176	-0.11308			
	C	1.383501	0.389285	-0.00801			
PC _{unecat}	O	-0.824533	1.224417	0.000262	51.5768	104.7025	138.576
	O	1.328516	-0.7387	0.000698	178.5905	183.3187	679.2347
	C	2.088384	0.188163	-0.000442	697.2965	1225.1999	1279.0935
	H	1.724619	1.227979	-0.000441	1407.9795	1537.037	1858.9497
	H	3.179573	0.034758	-0.001482	2439.7529	2963.8966	3042.9404
	O	-1.737651	-0.898334	-0.000371			
	C	-1.260858	0.151537	-0.000022			
RC _{cat} ^{WM}	O	-0.828205	-0.067364	1.17843	62.0548	81.9293	101.173
	O	-1.356913	0.753725	0.231276	116.056	127.8849	157.5479
	C	-1.174581	0.487317	-0.964119	167.4058	177.7876	225.6515
	H	-0.619612	-0.402924	-1.248902	480.0927	561.7726	654.2646
	H	-1.613098	1.195509	-1.656012	711.619	910.1248	1095.7788
	O	1.556385	1.063613	-0.407607	1291.7234	1469.7402	1628.5819
	C	1.904256	0.536457	0.524016	1649.9132	2236.1548	3116.5923
	O	0.282091	-2.065056	-0.357754	3271.166	3587.3124	3938.7121
	H	-0.048772	-1.548728	0.400373			
	H	0.676568	-2.865841	-0.009598			
TS3 _{cat} ^{WM}	O	0.051584	-0.374701	1.046528	-463.0239	28.1729	143.1803
	O	0.274318	0.962535	0.74705	156.4858	176.8795	267.0026
	C	0.237083	1.130381	-0.512347	346.9112	371.6368	472.493
	H	-0.477141	0.580148	-1.11108	477.0026	591.4821	702.9409
	H	0.700425	2.048718	-0.852084	803.759	984.2778	1141.2631
	O	1.529032	-0.402658	-0.79227	1257.156	1415.1492	1569.0308
	C	1.25611	-1.190621	0.04203	1620.5791	1824.4079	3149.7681
	O	-2.373587	-0.297794	-0.402875	3286.4159	3776.1718	3944.7605
	H	-1.814201	-0.625401	0.343823			
	H	-3.21902	-0.741086	-0.316224			

compound	cartesian coordinate(Å)			frequency(cm^{-1})			
PC ^{WM} _{cat}	O	-1.203961	1.221072	-0.000508	11.39	48.7386	68.197
	O	0.689567	-1.065309	-0.000476	78.921	107.1714	135.1259
	C	1.827017	-1.453401	0.000058	158.8111	166.1379	177.0222
	H	2.668665	-0.746085	0.000639	272.6641	446.1401	686.4288
	H	2.055685	-2.530653	0.000037	696.0605	1236.8254	1288.4091
	O	-2.3923	-0.76018	0.000517	1410.2356	1540.74	1615.4512
	C	-1.786137	0.220293	-0.000005	1847.5811	2442.7889	2975.6081
	O	1.937228	1.508857	0.000232	3072.5832	3817.8255	3946.6627
	H	1.111876	1.009114	-0.000136			
H	1.674224	2.430752	0.00102				
CI-WM	O	0.473282	-1.185947	0.185804	110.0291	170.8853	222.4337
	O	1.088024	-0.076841	-0.324213	227.221	435.8778	535.2058
	C	0.797367	1.017543	0.168923	683.1509	714.847	895.9319
	H	0.087788	1.067178	0.986579	1080.0972	1270.1542	1455.3823
	H	1.290426	1.872939	-0.275681	1640.6278	1662.7099	3140.6972
	O	-1.853691	0.211905	-0.016529	3286.5343	3550.2406	3937.0225
	H	-1.231877	-0.53787	0.057151			
H	-2.59146	-0.100441	-0.542076				
WM-CO	O	1.069794	0.205387	0.001228	32.4226	71.0477	106.1902
	C	2.11628	-0.200261	-0.001545	132.3502	207.4264	1619.5945
	O	-2.155208	-0.15651	0.000322	2264.1188	3868.2754	3969.2895
	H	-1.268897	0.211247	0.004109			
	H	-2.745472	0.599302	-0.00724			
TS1 ^{WM} _{cat}	C	0.042979	1.107502	0.934391	-406.8409	26.77	118.7138
	O	0.097857	1.549267	-0.263843	132.97	146.7253	168.493
	O	0.127698	0.462375	-1.116642	213.6647	422.4229	442.7815
	C	-1.246802	-0.364958	0.198741	515.9257	610.6998	627.9782
	H	0.668854	0.275185	1.238241	852.4864	999.0864	1159.3541
	H	-0.308195	1.830762	1.664005	1246.6414	1400.1414	1562.1243
	O	-1.766837	-1.347422	0.013363	1619.0598	2212.0645	3118.9463
	O	1.892731	-1.177628	0.234543	3243.2466	3656.4514	3940.5954
	H	1.467426	-0.720941	-0.510432			
H	2.583258	-1.733013	-0.129982				
TS2 ^{WM} _{cat}	O	-0.959775	-1.178806	-0.426468	-704.3882	29.0273	59.9997
	O	0.303556	-0.227113	-0.126437	101.5592	121.4006	179.4117
	C	-1.84507	-1.003569	0.385182	194.9272	265.3927	345.3013
	H	-1.708013	-0.310084	1.213311	452.0085	508.9288	529.6087
	H	-2.772976	-1.563645	0.254391	588.5608	673.9222	1191.6442
	O	3.041136	-0.079318	0.069624	1252.1809	1483.1487	1640.5889
	C	2.02769	0.411404	0.119791	1772.7735	2205.8478	3074.61
	O	-1.658296	1.689114	-0.002217	3201.9046	3581.0038	3941.071
	H	-0.783691	1.276319	-0.133598			
	H	-1.644006	2.519385	-0.479961			

compound	cartesian coordinate(Å)			frequency(cm ⁻¹)			
RC ^{WD} _{cat}	O	0.444324	-0.902456	0.9069	22.6468	46.2999	64.6629
	O	0.189388	0.453902	1.061897	84.75	91.2857	114.1249
	C	-0.104147	1.084109	0.041509	162.2417	166.3993	173.8039
	H	-0.137451	0.576535	-0.915446	218.832	243.3605	282.6463
	H	-0.276549	2.143674	0.166808	310.9418	425.4682	524.0827
	O	2.609511	0.518132	-0.668328	550.8073	730.6268	743.3693
	C	2.952387	-0.51362	-0.376344	860.5341	887.9578	1117.4914
	O	-1.695367	-1.532813	-0.507637	1258.3039	1452.155	1642.1093
	H	-0.885495	-1.45759	0.061519	1671.4995	1676.0722	2233.8615
	H	-2.051988	-2.413001	-0.382117	3156.5146	3189.0347	3300.7458
	O	-2.54948	1.02219	-0.384317	3528.5178	3925.3923	3937.8836
	H	-3.23911	1.20795	0.2558			
	H	-2.485858	0.047858	-0.445671			
TS1 ^{WD} _{cat}	C	0.479116	-0.796993	1.18376	-378.4092	35.2788	46.7069
	O	0.485825	-1.738595	0.319249	71.1015	98.6406	127.784
	O	0.108609	-1.174407	-0.903825	156.146	173.0673	186.9048
	C	1.425569	0.45239	-0.084113	228.873	257.6012	344.4801
	H	-0.330298	-0.076906	1.211583	410.2165	474.9591	515.769
	H	1.03867	-1.012105	2.090622	602.4895	665.2213	868.2031
	O	1.969526	1.22628	-0.686715	895.268	986.2511	1185.148
	O	-0.898588	1.926437	0.551946	1229.9366	1392.3819	1563.46
	H	-1.594165	1.385302	0.137521	1628.1726	1643.2565	2260.416
	H	-0.977102	2.806787	0.181595	3130.2921	3249.1125	3260.7863
	O	-2.295033	-0.210421	-0.36964	3633.5404	3938.4316	3942.8978
	H	-3.049185	-0.612539	-0.801416			
	H	-1.478743	-0.65728	-0.705908			
WD	O	1.504931	0.009816	-0.120973	84.5182	126.783	148.4515
	H	0.556624	-0.005585	0.063449	193.5486	355.6011	606.3369
	H	1.934985	-0.061144	0.732492	1618.9862	1635.644	3772.5038
	O	-1.386115	-0.007941	0.111671	3859.7328	3944.091	3958.8595
	H	-1.723819	-0.73758	-0.413414			
	H	-1.718313	0.789302	-0.308107			
CI-WD	C	0.992857	1.136948	-0.159209	41.8972	97.4679	160.7208
	O	1.280777	0.110797	0.45911	216.8151	231.5149	271.3756
	O	1.25365	-1.072317	-0.279911	287.3066	293.4652	449.2527
	H	0.793221	1.07351	-1.221611	478.4996	525.5963	720.3005
	H	1.00602	2.0581	0.406997	835.8207	863.729	972.4596
	O	-1.439344	1.293205	0.049914	1110.752	1255.3886	1447.9704
	H	-1.566177	0.317571	0.074398	1632.9366	1661.7728	1685.7502
	H	-2.131023	1.63671	-0.518922	3156.7731	3185.4551	3299.8708
	O	-1.359331	-1.393706	-0.02343	3409.448	3920.9668	3928.4911
	H	-1.57138	-1.978283	0.706059			
	H	-0.37381	-1.433131	-0.137133			
WD-CO	C	1.253842	-0.668707	0.00903	75.3634	83.555	118.0603
	O	2.254045	-0.166202	-0.009127	140.3226	145.8441	179.8125
	O	-0.617154	1.564124	0.082974	196.5079	233.8935	283.9718
	H	-1.2943	0.878975	-0.006124	479.6977	634.0547	1616.8034
	H	-0.934349	2.319359	-0.414857	1636.6889	2291.1837	3748.3335
	O	-1.88453	-0.96527	-0.100884	3814.9842	3939.9421	3940.5497
	H	-2.350563	-1.407693	0.611614			
	H	-0.962733	-1.239611	-0.02852			

compound	cartesian coordinate(Å)			frequency(cm ⁻¹)			
TS2 ^{WD} _{cat}	C	1.185705	-1.428046	0.355514	-695.0639	24.8734	48.4629
	O	0.370809	-1.315019	-0.54306	68.9148	88.1388	156.1938
	O	-0.805242	-0.282763	-0.136603	197.3566	218.5549	255.0682
	H	1.045487	-0.899265	1.295618	264.5364	270.6748	295.4385
	H	2.012205	-2.122339	0.22088	419.5113	450.2917	484.6648
	C	-2.463041	0.416642	0.184463	511.6433	548.5754	674.3575
	O	-3.495035	-0.031478	0.103648	753.4014	897.0326	1182.2755
	O	2.907983	0.257264	0.203728	1236.7701	1467.6657	1640.7576
	H	2.258071	0.983153	0.077597	1664.4845	1742.7227	2197.8419
	H	3.532255	0.3316	-0.520927	3102.8511	3222.3925	3310.2472
	O	0.80272	1.873533	-0.185862	3448.4461	3920.4339	3931.0703
	H	0.463658	2.584472	0.360246			
	H	0.10246	1.178502	-0.208081			
TS3 ^{WD} _{cat}	O	-0.505154	-1.089726	0.520283	-465.5737	32.1004	33.4086
	O	-1.002737	-1.015933	-0.777157	58.4753	156.224	160.2531
	C	-0.847173	0.17122	-1.21489	185.4797	191.7129	223.0056
	H	0.044144	0.742292	-0.965817	276.1872	332.6902	352.3984
	H	-1.476406	0.407368	-2.065338	357.2672	473.5419	573.361
	O	-1.677566	0.948266	0.43159	592.6946	706.9192	709.9714
	C	-1.317825	0.255937	1.317582	836.6575	990.0953	1195.6367
	O	2.278863	-0.997462	0.159689	1256.1617	1411.2642	1569.3577
	H	1.374029	-1.224616	0.42614	1613.3883	1636.5582	1821.3764
	H	2.853808	-1.691253	0.485719	3100.9262	3256.4572	3674.2295
	O	1.698357	1.674794	-0.219024	3711.6971	3932.73	3942.03
	H	1.708175	2.199733	0.583377			
	H	2.152146	0.844016	-0.003278			
PC ^{WD} _{cat}	O	0.982127	1.492283	0.493312	75.9137	85.6545	92.0472
	O	-0.528791	-1.103665	1.11698	117.9353	122.4304	128.1177
	C	-0.566304	-1.875569	0.193457	155.5737	185.2245	189.6703
	H	-1.519836	-2.195714	-0.249263	205.5041	227.0916	237.0734
	H	0.352327	-2.29342	-0.239205	287.7149	326.6071	390.8546
	O	2.151601	-0.387333	-0.168516	625.1711	682.1884	687.8876
	C	1.547014	0.540765	0.155564	747.4373	1221.7799	1279.3576
	O	-2.022754	1.199019	0.334642	1409.27	1540.0337	1640.3607
	H	-1.729514	0.471527	0.902316	1646.9701	1836.0966	2440.9566
	H	-1.45799	1.935751	0.584785	2994.7219	3082.2735	3603.4949
	O	-0.541224	-0.02794	-1.6927	3762.5981	3907.3388	3931.4774
	H	-0.704773	0.204356	-2.608439			
	H	-1.152145	0.507414	-1.154068			

Table S2: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS1 within temperature range 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	2.43×10^{-19}	2.11×10^{-24}	2.47×10^{-20}	3.71×10^{-24}
216	2.82×10^{-19}	2.97×10^{-24}	2.75×10^{-20}	5.08×10^{-24}
219	3.26×10^{-19}	4.13×10^{-24}	3.06×10^{-20}	6.89×10^{-24}
224	4.12×10^{-19}	7.04×10^{-24}	3.63×10^{-20}	1.13×10^{-23}
235	6.66×10^{-19}	2.11×10^{-23}	5.15×10^{-20}	3.09×10^{-23}
250	1.20×10^{-18}	8.06×10^{-23}	7.91×10^{-20}	1.07×10^{-22}
259	1.66×10^{-18}	1.68×10^{-22}	1.00×10^{-19}	2.09×10^{-22}
265	2.03×10^{-18}	2.66×10^{-22}	1.16×10^{-19}	3.20×10^{-22}
278	3.06×10^{-18}	6.79×10^{-22}	1.57×10^{-19}	7.58×10^{-22}
280	3.25×10^{-18}	7.79×10^{-22}	1.64×10^{-19}	8.59×10^{-22}
290	4.34×10^{-18}	1.50×10^{-21}	2.02×10^{-19}	1.57×10^{-21}
298	5.39×10^{-18}	2.46×10^{-21}	2.37×10^{-19}	2.48×10^{-21}
300	5.68×10^{-18}	2.77×10^{-21}	2.46×10^{-19}	2.76×10^{-21}
310	7.33×10^{-18}	4.93×10^{-21}	2.97×10^{-19}	4.69×10^{-21}
320	9.32×10^{-18}	8.47×10^{-21}	3.54×10^{-19}	7.72×10^{-21}
330	1.17×10^{-17}	1.41×10^{-20}	4.19×10^{-19}	1.23×10^{-20}
350	1.78×10^{-17}	3.60×10^{-20}	5.70×10^{-19}	2.92×10^{-20}
375	2.83×10^{-17}	1.02×10^{-19}	8.05×10^{-19}	7.60×10^{-20}
400	4.29×10^{-17}	2.55×10^{-19}	1.10×10^{-18}	1.77×10^{-19}
425	6.22×10^{-17}	5.76×10^{-19}	1.45×10^{-18}	3.74×10^{-19}
450	8.72×10^{-17}	1.20×10^{-18}	1.87×10^{-18}	7.33×10^{-19}
475	1.19×10^{-16}	2.32×10^{-18}	2.36×10^{-18}	1.35×10^{-18}
500	1.57×10^{-16}	4.23×10^{-18}	2.93×10^{-18}	2.34×10^{-18}
550	2.60×10^{-16}	1.21×10^{-17}	4.31×10^{-18}	6.15×10^{-18}
600	4.02×10^{-16}	2.95×10^{-17}	6.04×10^{-18}	1.40×10^{-17}
650	5.90×10^{-16}	6.36×10^{-17}	8.18×10^{-18}	2.84×10^{-17}
700	8.31×10^{-16}	1.24×10^{-16}	1.07×10^{-17}	5.29×10^{-17}
750	1.13×10^{-15}	2.25×10^{-16}	1.37×10^{-17}	9.14×10^{-17}
800	1.50×10^{-15}	3.82×10^{-16}	1.73×10^{-17}	1.49×10^{-16}
850	1.94×10^{-15}	6.14×10^{-16}	2.13×10^{-17}	2.32×10^{-16}
900	2.46×10^{-15}	9.45×10^{-16}	2.59×10^{-17}	3.45×10^{-16}
950	3.07×10^{-15}	1.40×10^{-15}	3.11×10^{-17}	4.97×10^{-16}
1000	3.78×10^{-15}	2.00×10^{-15}	3.70×10^{-17}	6.93×10^{-16}
1100	5.49×10^{-15}	3.78×10^{-15}	5.08×10^{-17}	1.25×10^{-15}
1200	7.68×10^{-15}	6.55×10^{-15}	6.75×10^{-17}	2.09×10^{-15}
1300	1.04×10^{-14}	1.06×10^{-14}	8.76×10^{-17}	3.28×10^{-15}
1400	1.36×10^{-14}	1.62×10^{-14}	1.11×10^{-16}	4.88×10^{-15}

Table S3: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS2 within temperature range 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	9.02×10^{-19}	7.84×10^{-24}	9.17×10^{-20}	5.63×10^{-26}
216	1.06×10^{-18}	1.11×10^{-23}	1.03×10^{-19}	8.57×10^{-26}
219	1.23×10^{-18}	1.56×10^{-23}	1.16×10^{-19}	1.29×10^{-25}
224	1.58×10^{-18}	2.71×10^{-23}	1.39×10^{-19}	2.48×10^{-25}
235	2.65×10^{-18}	8.36×10^{-23}	2.05×10^{-19}	9.60×10^{-25}
250	4.99×10^{-18}	3.35×10^{-22}	3.28×10^{-19}	5.04×10^{-24}
259	7.06×10^{-18}	7.16×10^{-22}	4.26×10^{-19}	1.25×10^{-23}
265	8.81×10^{-18}	1.16×10^{-21}	5.03×10^{-19}	2.21×10^{-23}
278	1.38×10^{-17}	3.06×10^{-21}	7.05×10^{-19}	7.07×10^{-23}
280	1.47×10^{-17}	3.53×10^{-21}	7.41×10^{-19}	8.37×10^{-23}
290	2.02×10^{-17}	6.98×10^{-21}	9.40×10^{-19}	1.89×10^{-22}
298	2.56×10^{-17}	1.17×10^{-20}	1.13×10^{-18}	3.49×10^{-22}
300	2.72×10^{-17}	1.33×10^{-20}	1.18×10^{-18}	4.05×10^{-22}
310	3.60×10^{-17}	2.42×10^{-20}	1.46×10^{-18}	8.30×10^{-22}
320	4.69×10^{-17}	4.27×10^{-20}	1.78×10^{-18}	1.63×10^{-21}
330	6.04×10^{-17}	7.29×10^{-20}	2.16×10^{-18}	3.08×10^{-21}
350	9.63×10^{-17}	1.95×10^{-19}	3.09×10^{-18}	9.91×10^{-21}
375	1.63×10^{-16}	5.85×10^{-19}	4.62×10^{-18}	3.63×10^{-20}
400	2.60×10^{-16}	1.54×10^{-18}	6.65×10^{-18}	1.14×10^{-19}
425	3.96×10^{-16}	3.67×10^{-18}	9.24×10^{-18}	3.18×10^{-19}
450	5.82×10^{-16}	7.99×10^{-18}	1.25×10^{-17}	7.96×10^{-19}
475	8.27×10^{-16}	1.62×10^{-17}	1.65×10^{-17}	1.82×10^{-18}
500	1.14×10^{-15}	3.07×10^{-17}	2.13×10^{-17}	3.87×10^{-18}
550	2.03×10^{-15}	9.46×10^{-17}	3.37×10^{-17}	1.44×10^{-17}
600	3.36×10^{-15}	2.46×10^{-16}	5.05×10^{-17}	4.42×10^{-17}
650	5.22×10^{-15}	5.63×10^{-16}	7.24×10^{-17}	1.16×10^{-16}
700	7.74×10^{-15}	1.16×10^{-15}	1.00×10^{-16}	2.68×10^{-16}
750	1.10×10^{-14}	2.20×10^{-15}	1.34×10^{-16}	5.60×10^{-16}
800	1.52×10^{-14}	3.89×10^{-15}	1.76×10^{-16}	1.08×10^{-15}
850	2.05×10^{-14}	6.48×10^{-15}	2.25×10^{-16}	1.95×10^{-15}
900	2.69×10^{-14}	1.03×10^{-14}	2.83×10^{-16}	3.32×10^{-15}
950	3.45×10^{-14}	1.57×10^{-14}	3.50×10^{-16}	5.39×10^{-15}
1000	4.37×10^{-14}	2.32×10^{-14}	4.28×10^{-16}	8.38×10^{-15}
1100	6.67×10^{-14}	4.59×10^{-14}	6.17×10^{-16}	1.83×10^{-14}
1200	9.72×10^{-14}	8.29×10^{-14}	8.55×10^{-16}	3.58×10^{-14}
1300	1.36×10^{-13}	1.39×10^{-13}	1.15×10^{-15}	6.41×10^{-14}
1400	1.85×10^{-13}	2.19×10^{-13}	1.51×10^{-15}	1.07×10^{-13}

Table S4: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed channel corresponds to TS3, within temperature range 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	6.37×10^{-24}	5.53×10^{-29}	6.48×10^{-25}	1.14×10^{-27}
216	8.39×10^{-24}	8.81×10^{-29}	8.18×10^{-25}	1.71×10^{-27}
219	1.09×10^{-23}	1.39×10^{-28}	1.03×10^{-24}	2.55×10^{-27}
224	1.68×10^{-23}	2.87×10^{-28}	1.48×10^{-24}	4.81×10^{-27}
235	4.05×10^{-23}	1.28×10^{-27}	3.13×10^{-24}	1.77×10^{-26}
250	1.19×10^{-22}	7.98×10^{-27}	7.83×10^{-24}	8.76×10^{-26}
259	2.14×10^{-22}	2.17×10^{-26}	1.29×10^{-23}	2.09×10^{-25}
265	3.09×10^{-22}	4.06×10^{-26}	1.77×10^{-23}	3.62×10^{-25}
278	6.52×10^{-22}	1.45×10^{-25}	3.34×10^{-23}	1.10×10^{-24}
280	7.27×10^{-22}	1.74×10^{-25}	3.66×10^{-23}	1.29×10^{-24}
290	1.23×10^{-21}	4.24×10^{-25}	5.71×10^{-23}	2.80×10^{-24}
298	1.82×10^{-21}	8.28×10^{-25}	7.99×10^{-23}	5.02×10^{-24}
300	2.00×10^{-21}	9.74×10^{-25}	8.66×10^{-23}	5.78×10^{-24}
310	3.16×10^{-21}	2.12×10^{-24}	1.28×10^{-22}	1.14×10^{-23}
320	4.86×10^{-21}	4.42×10^{-24}	1.85×10^{-22}	2.15×10^{-23}
330	7.30×10^{-21}	8.80×10^{-24}	2.61×10^{-22}	3.93×10^{-23}
350	1.54×10^{-20}	3.12×10^{-23}	4.93×10^{-22}	1.18×10^{-22}
375	3.51×10^{-20}	1.26×10^{-22}	9.99×10^{-22}	3.99×10^{-22}
400	7.28×10^{-20}	4.33×10^{-22}	1.86×10^{-21}	1.16×10^{-21}
425	1.39×10^{-19}	1.29×10^{-21}	3.25×10^{-21}	3.01×10^{-21}
450	2.50×10^{-19}	3.43×10^{-21}	5.36×10^{-21}	7.06×10^{-21}
475	4.24×10^{-19}	8.28×10^{-21}	8.44×10^{-21}	1.52×10^{-20}
500	6.85×10^{-19}	1.84×10^{-20}	1.28×10^{-20}	3.04×10^{-20}
550	1.59×10^{-18}	7.41×10^{-20}	2.64×10^{-20}	1.02×10^{-19}
600	3.28×10^{-18}	2.41×10^{-19}	4.93×10^{-20}	2.86×10^{-19}
650	6.13×10^{-18}	6.61×10^{-19}	8.50×10^{-20}	6.90×10^{-19}
700	1.06×10^{-17}	1.59×10^{-18}	1.37×10^{-19}	1.49×10^{-18}
750	1.73×10^{-17}	3.45×10^{-18}	2.11×10^{-19}	2.93×10^{-18}
800	2.69×10^{-17}	6.86×10^{-18}	3.10×10^{-19}	5.35×10^{-18}
850	4.01×10^{-17}	1.27×10^{-17}	4.40×10^{-19}	9.17×10^{-18}
900	5.76×10^{-17}	2.21×10^{-17}	6.07×10^{-19}	1.49×10^{-17}
950	8.04×10^{-17}	3.66×10^{-17}	8.15×10^{-19}	2.33×10^{-17}
1000	1.09×10^{-16}	5.80×10^{-17}	1.07×10^{-18}	3.49×10^{-17}
1100	1.89×10^{-16}	1.30×10^{-16}	1.75×10^{-18}	7.15×10^{-17}
1200	3.06×10^{-16}	2.61×10^{-16}	2.70×10^{-18}	1.32×10^{-16}
1300	4.69×10^{-16}	4.78×10^{-16}	3.96×10^{-18}	2.27×10^{-16}
1400	6.86×10^{-16}	8.14×10^{-16}	5.59×10^{-18}	3.64×10^{-16}

Table S5: The total bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for H_2O catalyzed and uncatalyzed channel, within the temperature range of 213-1400 K

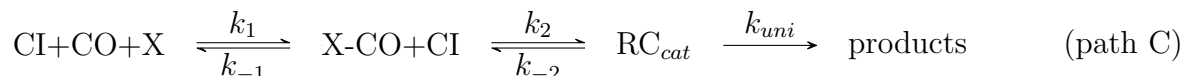
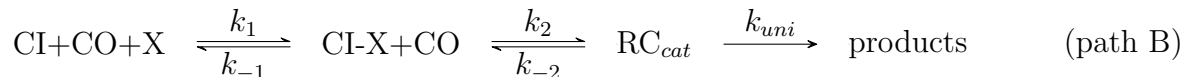
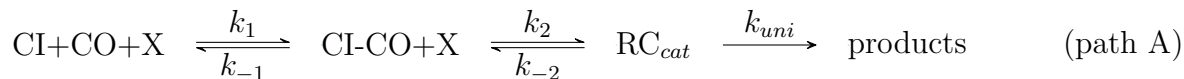
Temp (K)	k_{tot}^{cat}	k_{tot}^{uncat}	k_{tot}
213	6.03×10^{-19}	3.77×10^{-24}	6.03×10^{-19}
216	6.95×10^{-19}	5.17×10^{-24}	6.95×10^{-19}
219	7.99×10^{-19}	7.03×10^{-24}	7.99×10^{-19}
224	1.00×10^{-18}	1.15×10^{-23}	1.00×10^{-18}
235	1.59×10^{-18}	3.19×10^{-23}	1.59×10^{-18}
250	2.81×10^{-18}	1.12×10^{-22}	2.81×10^{-18}
259	3.84×10^{-18}	2.22×10^{-22}	3.84×10^{-18}
265	4.68×10^{-18}	3.43×10^{-22}	4.68×10^{-18}
278	6.99×10^{-18}	8.30×10^{-22}	6.99×10^{-18}
280	7.41×10^{-18}	9.44×10^{-22}	7.41×10^{-18}
290	9.83×10^{-18}	1.76×10^{-21}	9.83×10^{-18}
298	1.22×10^{-17}	2.83×10^{-21}	1.22×10^{-17}
300	1.28×10^{-17}	3.17×10^{-21}	1.28×10^{-17}
310	1.65×10^{-17}	5.53×10^{-21}	1.65×10^{-17}
320	2.08×10^{-17}	9.37×10^{-21}	2.08×10^{-17}
330	7.48×10^{-17}	1.55×10^{-20}	7.48×10^{-17}
350	1.18×10^{-16}	3.93×10^{-20}	1.18×10^{-16}
375	1.97×10^{-16}	1.13×10^{-19}	1.97×10^{-16}
400	3.12×10^{-16}	2.92×10^{-19}	3.12×10^{-16}
425	4.74×10^{-16}	6.95×10^{-19}	4.74×10^{-16}
450	6.93×10^{-16}	1.54×10^{-18}	6.94×10^{-16}
475	9.83×10^{-16}	3.18×10^{-18}	9.86×10^{-16}
500	1.36×10^{-15}	6.24×10^{-18}	1.37×10^{-15}
550	2.44×10^{-15}	2.07×10^{-17}	2.46×10^{-15}
600	4.10×10^{-15}	5.84×10^{-17}	4.15×10^{-15}
650	6.53×10^{-15}	1.45×10^{-16}	6.67×10^{-15}
700	9.98×10^{-15}	3.22×10^{-16}	1.03×10^{-14}
750	1.48×10^{-14}	6.55×10^{-16}	1.54×10^{-14}
800	2.12×10^{-14}	1.24×10^{-15}	2.25×10^{-14}
850	2.98×10^{-14}	2.19×10^{-15}	3.20×10^{-14}
900	4.10×10^{-14}	3.68×10^{-15}	4.47×10^{-14}
950	5.52×10^{-14}	5.91×10^{-15}	6.12×10^{-14}
1000	7.32×10^{-14}	9.11×10^{-15}	8.24×10^{-14}
1100	1.23×10^{-13}	1.96×10^{-14}	1.43×10^{-13}
1200	1.96×10^{-13}	3.80×10^{-14}	2.34×10^{-13}
1300	2.98×10^{-13}	6.76×10^{-14}	3.66×10^{-13}
1400	4.37×10^{-13}	1.12×10^{-13}	5.49×10^{-13}

Table S6: Relative energies (ΔE) including ZPE in kcal mol¹ for all the species with respect to the isolated reactants at the CCSD(T)/CBS level of theory in the presence of H₂O as a catalyst.

Species	ΔE
CI-CO	-1.48
PC _{uncat}	-121.43
RC _{cat}	-8.50
TS1 _{cat}	3.48
TS2 _{cat}	3.38
TS3 _{cat}	7.43
PC _{cat}	-125.26
Product	-119.22
CI-WM	-6.75
WM-CO	-0.40

1 Concentration of precursors

A general scheme for the catalyzed channels can be expressed as follows.



where, CI=CH₂OO; X= WM and WD (WM=H₂O and WD= (H₂O)₂)

The K_{eq1} for path A can be expressed as below.

$$K_{eq1}^{pathA} = \frac{[CI - CO]}{[CI][CO]} \quad (1)$$

and

$$[CI - CO] = K_{eq1}^{pathA} [CI][CO] \quad (2)$$

Similarly, the concentration of CI-X and X-CO can be calculated from path B and path C, which can be expressed as below.

$$[CI - X] = K_{eq1}^{pathB} [CI][X] \quad (3)$$

and

$$[X - CO] = K_{eq1}^{pathC} [X][CO] \quad (4)$$

Consequently, the concentration of different precursors molecules has been tabulated in the below Tables.

Table S7: Concentration of different bimolecular species in in molecules cm^{-3} , calculated using the k_{eq1} values of path A, B, and C for H_2O catalyzed channel

Temp (K)	k_{eq1}^{pathA}	k_{eq1}^{pathB}	k_{eq1}^{pathC}	$[\text{H}_2\text{O}]$	$[\text{CO}]$	$[\text{CI}]$	$[\text{CI-CO}]$	$[\text{CI-WM}]$	$[\text{WM-CO}]$
280	9.67×10^{-25}	4.03×10^{-21}	1.92×10^{-23}	2.58×10^{17}	1.00×10^{13}	5.00×10^4	4.83×10^{-7}	5.20×10^1	4.95×10^7
290	9.13×10^{-25}	2.64×10^{-21}	1.96×10^{-23}	4.78×10^{17}	1.00×10^{13}	5.00×10^4	4.57×10^{-7}	6.31×10^1	9.36×10^7
298	8.76×10^{-25}	1.92×10^{-21}	1.99×10^{-23}	7.73×10^{17}	1.00×10^{13}	5.00×10^4	4.38×10^{-7}	7.43×10^1	1.54×10^8
300	8.68×10^{-25}	1.78×10^{-21}	2.00×10^{-23}	8.58×10^{17}	1.00×10^{13}	5.00×10^4	4.34×10^{-7}	7.64×10^1	1.72×10^8
310	8.30×10^{-25}	1.24×10^{-21}	2.05×10^{-23}	1.46×10^{18}	1.00×10^{13}	5.00×10^4	4.15×10^{-7}	9.02×10^1	2.99×10^8
320	7.98×10^{-25}	8.78×10^{-22}	2.10×10^{-23}	2.35×10^{18}	1.00×10^{13}	5.00×10^4	3.99×10^{-7}	1.03×10^2	4.93×10^8

Table S8: Concentration of different bimolecular species in in molecules cm^{-3} , calculated using the k_{eq1} values of path A, B, and C for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel

Temp (K)	k_{eq1}^{pathA}	k_{eq1}^{pathB}	k_{eq1}^{pathC}	$[\text{H}_2\text{O}]$	$[\text{CO}]$	$[\text{CI}]$	$[\text{CI-CO}]$	$[\text{CI-WD}]$	$[\text{WD-CO}]$
280	9.67×10^{-25}	3.05×10^{-19}	7.95×10^{-24}	5.00×10^4	1.00×10^{13}	2.05×10^{14}	4.83×10^{-7}	3.12	1.63×10^4
290	9.13×10^{-25}	1.42×10^{-19}	6.78×10^{-24}	5.00×10^4	1.00×10^{13}	5.91×10^{14}	4.57×10^{-7}	4.19	4.01×10^4
298	8.76×10^{-25}	7.97×10^{-20}	6.02×10^{-24}	5.00×10^4	1.00×10^{13}	1.36×10^{15}	4.38×10^{-7}	5.42	8.19×10^4
300	8.68×10^{-25}	6.94×10^{-20}	5.85×10^{-24}	5.00×10^4	1.00×10^{13}	1.62×10^{15}	4.34×10^{-7}	5.62	9.48×10^4
310	8.30×10^{-25}	3.56×10^{-20}	5.11×10^{-24}	5.00×10^4	1.00×10^{13}	4.06×10^{15}	4.15×10^{-7}	7.22	2.07×10^5
320	7.98×10^{-25}	1.91×10^{-20}	4.51×10^{-24}	5.00×10^4	1.00×10^{13}	9.04×10^{15}	3.99×10^{-7}	8.62	4.08×10^5

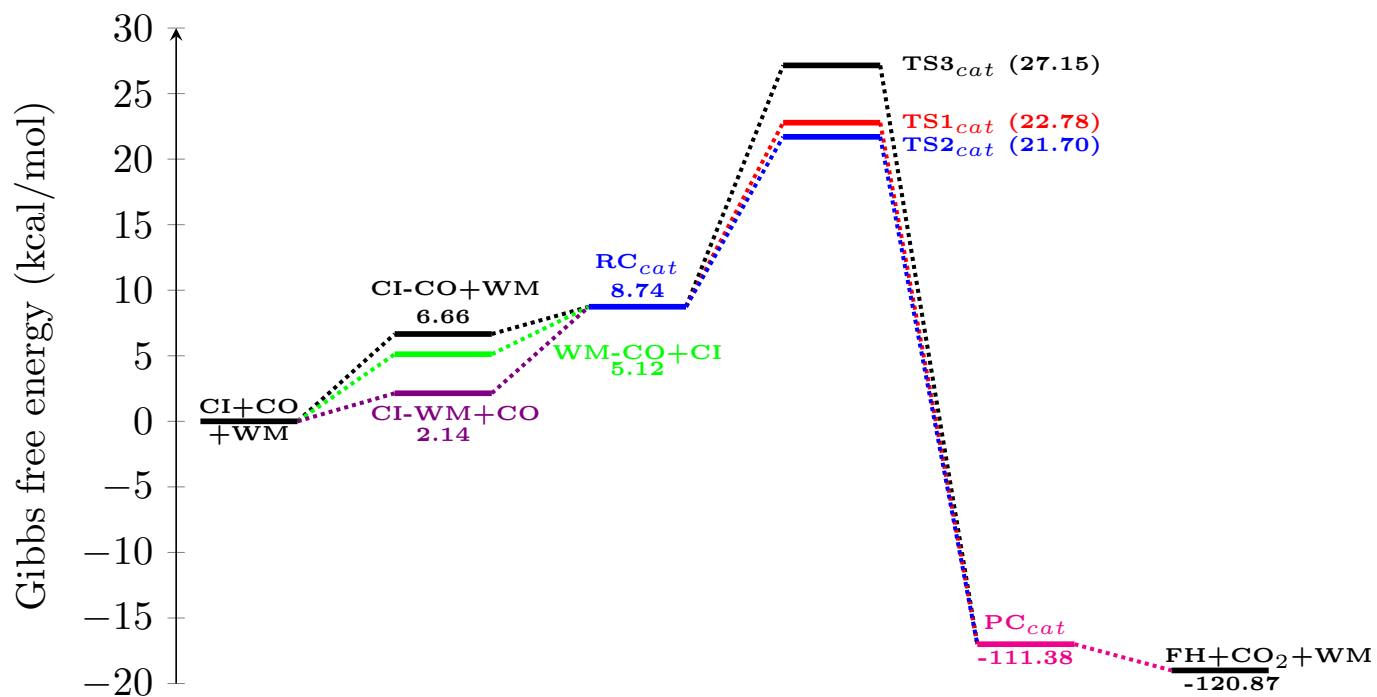


Figure S1: Gibbs free energy profile for $\text{CH}_2\text{OO} + \text{CO}$ reaction in presence of H_2O calculated at CCSD(T)/CBS//M062X/aug-cc-pVTZ level of theory, where $\text{CI}=\text{CH}_2\text{OO}$, $\text{FH}=\text{CH}_2\text{O}$; CI-CO , CI-WM and WM-CO are pre-reactive complexes.

Table S12: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS1 within temperature range 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	5.77×10^{-14}	3.20×10^{-24}	2.94×10^{-17}	3.71×10^{-24}
216	5.29×10^{-14}	4.51×10^{-24}	3.03×10^{-17}	5.08×10^{-24}
219	4.87×10^{-14}	6.32×10^{-24}	3.13×10^{-17}	6.89×10^{-24}
224	4.26×10^{-14}	1.09×10^{-23}	3.28×10^{-17}	1.13×10^{-23}
235	3.24×10^{-14}	3.31×10^{-23}	3.62×10^{-17}	3.09×10^{-23}
250	2.32×10^{-14}	1.30×10^{-22}	4.09×10^{-17}	1.07×10^{-22}
259	1.93×10^{-14}	2.75×10^{-22}	4.37×10^{-17}	2.09×10^{-22}
265	1.73×10^{-14}	4.41×10^{-22}	4.57×10^{-17}	3.20×10^{-22}
278	1.37×10^{-14}	1.15×10^{-21}	4.99×10^{-17}	7.58×10^{-22}
280	1.33×10^{-14}	1.32×10^{-21}	5.06×10^{-17}	8.59×10^{-22}
290	1.13×10^{-14}	2.58×10^{-21}	5.39×10^{-17}	1.57×10^{-21}
298	1.01×10^{-14}	4.28×10^{-21}	5.66×10^{-17}	2.48×10^{-21}
300	9.78×10^{-15}	4.84×10^{-21}	5.73×10^{-17}	2.76×10^{-21}
310	8.53×10^{-15}	8.72×10^{-21}	6.07×10^{-17}	4.69×10^{-21}
320	7.52×10^{-15}	1.52×10^{-20}	6.42×10^{-17}	7.72×10^{-21}
330	6.67×10^{-15}	2.57×10^{-20}	6.77×10^{-17}	1.23×10^{-20}
350	5.39×10^{-15}	6.72×10^{-20}	7.49×10^{-17}	2.92×10^{-20}
375	4.28×10^{-15}	1.96×10^{-19}	8.42×10^{-17}	7.60×10^{-20}
400	3.52×10^{-15}	5.03×10^{-19}	9.40×10^{-17}	1.77×10^{-19}
425	2.97×10^{-15}	1.17×10^{-18}	1.04×10^{-16}	3.74×10^{-19}
450	2.58×10^{-15}	2.49×10^{-18}	1.15×10^{-16}	7.33×10^{-19}
475	2.28×10^{-15}	4.92×10^{-18}	1.26×10^{-16}	1.35×10^{-18}
500	2.05×10^{-15}	9.16×10^{-18}	1.37×10^{-16}	2.34×10^{-18}
550	1.72×10^{-15}	2.72×10^{-17}	1.62×10^{-16}	6.15×10^{-18}
600	1.52×10^{-15}	6.86×10^{-17}	1.89×10^{-16}	1.40×10^{-17}
650	1.38×10^{-15}	1.52×10^{-16}	2.18×10^{-16}	2.84×10^{-17}
700	1.29×10^{-15}	3.06×10^{-16}	2.51×10^{-16}	5.29×10^{-17}
750	1.23×10^{-15}	5.66×10^{-16}	2.86×10^{-16}	9.14×10^{-17}
800	1.20×10^{-15}	9.80×10^{-16}	3.24×10^{-16}	1.49×10^{-16}
850	1.17×10^{-15}	1.61×10^{-15}	3.65×10^{-16}	2.32×10^{-16}
900	1.17×10^{-15}	2.51×10^{-15}	4.10×10^{-16}	3.45×10^{-16}
1000	1.18×10^{-15}	5.48×10^{-15}	5.10×10^{-16}	6.93×10^{-16}

Table S13: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS2 within temperature range 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	2.38×10^{-11}	1.32×10^{-21}	1.22×10^{-14}	5.63×10^{-26}
216	2.01×10^{-11}	1.71×10^{-21}	1.15×10^{-14}	8.57×10^{-26}
219	1.71×10^{-11}	2.21×10^{-21}	1.09×10^{-14}	1.29×10^{-25}
224	1.31×10^{-11}	3.34×10^{-21}	1.01×10^{-14}	2.48×10^{-25}
235	7.64×10^{-12}	7.82×10^{-21}	8.53×10^{-15}	9.60×10^{-25}
250	3.96×10^{-12}	2.22×10^{-20}	6.98×10^{-15}	5.04×10^{-24}
259	2.77×10^{-12}	3.94×10^{-20}	6.27×10^{-15}	1.25×10^{-23}
265	2.22×10^{-12}	5.66×10^{-20}	5.87×10^{-15}	2.21×10^{-23}
278	1.41×10^{-12}	1.18×10^{-19}	5.14×10^{-15}	7.07×10^{-23}
280	1.32×10^{-12}	1.31×10^{-19}	5.04×10^{-15}	8.37×10^{-23}
290	9.69×10^{-13}	2.21×10^{-19}	4.61×10^{-15}	1.89×10^{-22}
298	7.67×10^{-13}	3.26×10^{-19}	4.32×10^{-15}	3.49×10^{-22}
300	7.25×10^{-13}	3.59×10^{-19}	4.25×10^{-15}	4.05×10^{-22}
310	5.54×10^{-13}	5.66×10^{-19}	3.94×10^{-15}	8.30×10^{-22}
320	4.31×10^{-13}	8.71×10^{-19}	3.68×10^{-15}	1.63×10^{-21}
330	3.41×10^{-13}	1.31×10^{-18}	3.46×10^{-15}	3.08×10^{-21}
350	2.23×10^{-13}	2.78×10^{-18}	3.09×10^{-15}	9.91×10^{-21}
375	1.40×10^{-13}	6.42×10^{-18}	2.76×10^{-15}	3.63×10^{-20}
400	9.45×10^{-14}	1.35×10^{-17}	2.52×10^{-15}	1.14×10^{-19}
425	6.71×10^{-14}	2.63×10^{-17}	2.35×10^{-15}	3.18×10^{-19}
450	4.98×10^{-14}	4.81×10^{-17}	2.21×10^{-15}	7.96×10^{-19}
475	3.83×10^{-14}	8.29×10^{-17}	2.12×10^{-15}	1.82×10^{-18}
500	3.05×10^{-14}	1.37×10^{-16}	2.04×10^{-15}	3.87×10^{-18}
550	2.08×10^{-14}	3.28×10^{-16}	1.96×10^{-15}	1.44×10^{-17}
600	1.54×10^{-14}	6.97×10^{-16}	1.92×10^{-15}	4.42×10^{-17}
650	1.22×10^{-14}	1.34×10^{-15}	1.92×10^{-15}	1.16×10^{-16}
700	1.01×10^{-14}	2.38×10^{-15}	1.95×10^{-15}	2.68×10^{-16}
750	8.62×10^{-15}	3.96×10^{-15}	2.00×10^{-15}	5.60×10^{-16}
800	7.63×10^{-15}	6.25×10^{-15}	2.06×10^{-15}	1.08×10^{-15}
850	6.91×10^{-15}	9.45×10^{-15}	2.15×10^{-15}	1.95×10^{-15}
900	6.38×10^{-15}	1.38×10^{-14}	2.24×10^{-15}	3.32×10^{-15}
1000	5.72×10^{-15}	2.66×10^{-14}	2.48×10^{-15}	8.38×10^{-15}

Table S14: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS3, within temperature range 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	1.77×10^{-18}	9.78×10^{-29}	9.01×10^{-22}	1.14×10^{-27}
216	1.85×10^{-18}	1.58×10^{-28}	1.06×10^{-21}	1.71×10^{-27}
219	1.94×10^{-18}	2.52×10^{-28}	1.25×10^{-21}	2.55×10^{-27}
224	2.09×10^{-18}	5.35×10^{-28}	1.61×10^{-21}	4.81×10^{-27}
235	2.44×10^{-18}	2.50×10^{-27}	2.73×10^{-21}	1.77×10^{-26}
250	2.95×10^{-18}	1.66×10^{-26}	5.20×10^{-21}	8.76×10^{-26}
259	3.27×10^{-18}	4.65×10^{-26}	7.40×10^{-21}	2.09×10^{-25}
265	3.49×10^{-18}	8.92×10^{-26}	9.24×10^{-21}	3.62×10^{-25}
278	3.98×10^{-18}	3.33×10^{-25}	1.45×10^{-20}	1.10×10^{-24}
280	4.06×10^{-18}	4.04×10^{-25}	1.55×10^{-20}	1.29×10^{-24}
290	4.46×10^{-18}	1.01×10^{-24}	2.12×10^{-20}	2.80×10^{-24}
298	4.78×10^{-18}	2.03×10^{-24}	2.69×10^{-20}	5.02×10^{-24}
300	4.87×10^{-18}	2.41×10^{-24}	2.85×10^{-20}	5.78×10^{-24}
310	5.29×10^{-18}	5.41×10^{-24}	3.76×10^{-20}	1.14×10^{-23}
320	5.72×10^{-18}	1.16×10^{-23}	4.89×10^{-20}	2.15×10^{-23}
330	6.16×10^{-18}	2.37×10^{-23}	6.25×10^{-20}	3.93×10^{-23}
350	7.08×10^{-18}	8.84×10^{-23}	9.85×10^{-20}	1.18×10^{-22}
375	8.30×10^{-18}	3.80×10^{-22}	1.63×10^{-19}	3.99×10^{-22}
400	9.58×10^{-18}	1.37×10^{-21}	2.56×10^{-19}	1.16×10^{-21}
425	1.09×10^{-17}	4.30×10^{-21}	3.83×10^{-19}	3.01×10^{-21}
450	1.24×10^{-17}	1.19×10^{-20}	5.50×10^{-19}	7.06×10^{-21}
475	1.39×10^{-17}	3.00×10^{-20}	7.66×10^{-19}	1.52×10^{-20}
500	1.55×10^{-17}	6.92×10^{-20}	1.04×10^{-18}	3.04×10^{-20}
550	1.89×10^{-17}	2.98×10^{-19}	1.78×10^{-18}	1.02×10^{-19}
600	2.27×10^{-17}	1.03×10^{-18}	2.83×10^{-18}	2.86×10^{-19}
650	2.70×10^{-17}	2.97×10^{-18}	4.26×10^{-18}	6.90×10^{-19}
700	3.16×10^{-17}	7.48×10^{-18}	6.13×10^{-18}	1.49×10^{-18}
750	3.67×10^{-17}	1.69×10^{-17}	8.51×10^{-18}	2.93×10^{-18}
800	4.24×10^{-17}	3.47×10^{-17}	1.15×10^{-17}	5.35×10^{-18}
850	4.85×10^{-17}	6.63×10^{-17}	1.51×10^{-17}	9.17×10^{-18}
900	5.52×10^{-17}	1.19×10^{-16}	1.94×10^{-17}	1.49×10^{-17}
1000	7.03×10^{-17}	3.27×10^{-16}	3.05×10^{-17}	3.49×10^{-17}

Table S15: The total bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed and uncatalyzed channel, within the temperature range of 213-1400 K

Temp (K)	k_{tot}^{cat}	k_{tot}^{uncat}	k_{tot}
213	2.39×10^{-11}	3.77×10^{-24}	2.39×10^{-11}
216	2.02×10^{-11}	5.17×10^{-24}	2.02×10^{-11}
219	1.71×10^{-11}	7.03×10^{-24}	1.71×10^{-11}
224	1.32×10^{-11}	1.15×10^{-23}	1.32×10^{-11}
235	7.68×10^{-12}	3.19×10^{-23}	7.68×10^{-12}
250	3.99×10^{-12}	1.12×10^{-22}	3.99×10^{-12}
259	2.80×10^{-12}	2.22×10^{-22}	2.80×10^{-12}
265	2.24×10^{-12}	3.43×10^{-22}	2.24×10^{-12}
278	1.43×10^{-12}	8.30×10^{-22}	1.43×10^{-12}
280	1.34×10^{-12}	9.44×10^{-22}	1.34×10^{-12}
290	9.85×10^{-13}	1.76×10^{-21}	9.85×10^{-13}
298	7.82×10^{-13}	2.83×10^{-21}	7.82×10^{-13}
300	7.39×10^{-13}	3.17×10^{-21}	7.39×10^{-13}
310	5.66×10^{-13}	5.53×10^{-21}	5.66×10^{-13}
320	4.42×10^{-13}	9.37×10^{-21}	4.42×10^{-13}
330	3.51×10^{-13}	1.55×10^{-20}	3.51×10^{-13}
350	2.31×10^{-13}	3.93×10^{-20}	2.31×10^{-13}
375	1.48×10^{-13}	1.13×10^{-19}	1.48×10^{-13}
400	1.01×10^{-13}	2.92×10^{-19}	1.01×10^{-13}
425	7.25×10^{-14}	6.95×10^{-19}	7.25×10^{-14}
450	5.47×10^{-14}	1.54×10^{-18}	5.47×10^{-14}
475	4.30×10^{-14}	3.18×10^{-18}	4.30×10^{-14}
500	3.49×10^{-14}	6.24×10^{-18}	3.49×10^{-14}
550	2.50×10^{-14}	2.07×10^{-17}	2.51×10^{-14}
600	1.99×10^{-14}	5.84×10^{-17}	1.99×10^{-14}
650	1.72×10^{-14}	1.45×10^{-16}	1.74×10^{-14}
700	1.63×10^{-14}	3.22×10^{-16}	1.66×10^{-14}
750	1.67×10^{-14}	6.55×10^{-16}	1.74×10^{-14}
800	1.85×10^{-14}	1.24×10^{-15}	1.98×10^{-14}
850	2.18×10^{-14}	2.19×10^{-15}	2.40×10^{-14}
900	2.67×10^{-14}	3.68×10^{-15}	3.03×10^{-14}
1000	4.24×10^{-14}	9.11×10^{-15}	5.15×10^{-14}

Table S16: Relative energies (ΔE) including ZPE in kcal mol¹ for all the species with respect to the isolated reactants at the CCSD(T)/CBS level of theory in the presence of (H₂O)₂ as a catalyst.

Species	ΔE
CI-CO	-1.48
PC _{uncat}	-121.43
RC _{cat}	-13.42
TS1 _{cat}	-0.74
TS2 _{cat}	-3.21
TS3 _{cat}	3.54
PC _{cat}	-128.84
Product	-119.22
CI-WD	-11.84
WD-CO	- 1.84

Table S17: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS1 within the temperature range of 213-1400K

Temp (K)	PATH A			PATH B			PATH C			
	keq1	keq2	kt	keq1	keq2	kt	keq1	keq2	kt	
213	1.80×10^{-24}	8.52×10^{-13}	1.04×10^{-37}	3.43×10^{-16}	4.72×10^{-23}	1.04×10^{-37}	3.72×10^{-23}	4.35×10^{-16}	6.77×10^{-2}	1.04×10^{-37}
216	1.73×10^{-24}	5.17×10^{-13}	9.17×10^{-38}	2.28×10^{-16}	4.41×10^{-23}	9.17×10^{-38}	3.39×10^{-23}	2.97×10^{-16}	1.02×10^{-1}	9.17×10^{-38}
219	1.67×10^{-24}	3.18×10^{-13}	8.12×10^{-38}	1.53×10^{-16}	4.13×10^{-23}	1.53×10^{-38}	3.10×10^{-23}	2.04×10^{-16}	1.53×10^{-1}	8.12×10^{-38}
224	1.57×10^{-24}	1.46×10^{-13}	6.67×10^{-38}	8.09×10^{-17}	3.73×10^{-23}	6.67×10^{-38}	2.69×10^{-23}	1.12×10^{-16}	2.92×10^{-1}	6.67×10^{-38}
235	1.39×10^{-24}	2.95×10^{-14}	4.49×10^{-38}	2.19×10^{-17}	3.02×10^{-23}	4.49×10^{-38}	2.00×10^{-23}	3.30×10^{-17}	1.10	4.49×10^{-38}
250	1.20×10^{-24}	4.20×10^{-15}	2.79×10^{-38}	4.43×10^{-18}	2.36×10^{-23}	2.79×10^{-38}	1.41×10^{-23}	7.40×10^{-18}	5.52	2.79×10^{-38}
259	1.12×10^{-24}	1.45×10^{-15}	2.16×10^{-38}	1.86×10^{-18}	2.07×10^{-23}	2.16×10^{-38}	1.17×10^{-23}	3.29×10^{-18}	1.33×10^1	2.16×10^{-38}
265	1.07×10^{-24}	7.47×10^{-16}	1.84×10^{-38}	1.08×10^{-18}	1.91×10^{-23}	1.84×10^{-38}	1.04×10^{-23}	1.98×10^{-18}	2.31×10^1	1.84×10^{-38}
278	9.78×10^{-25}	1.95×10^{-16}	1.34×10^{-38}	3.58×10^{-19}	1.63×10^{-23}	1.34×10^{-38}	8.22×10^{-24}	7.09×10^{-19}	7.04×10^1	1.34×10^{-38}
280	9.67×10^{-25}	1.60×10^{-16}	1.28×10^{-38}	3.05×10^{-19}	1.59×10^{-23}	1.28×10^{-38}	7.95×10^{-24}	6.11×10^{-19}	8.28×10^1	1.28×10^{-38}
290	9.13×10^{-25}	6.29×10^{-17}	1.03×10^{-38}	1.42×10^{-19}	1.43×10^{-23}	1.03×10^{-38}	6.78×10^{-24}	2.99×10^{-19}	1.80×10^2	1.03×10^{-38}
298	8.76×10^{-25}	3.12×10^{-17}	8.82×10^{-39}	7.97×10^{-20}	1.33×10^{-23}	8.82×10^{-39}	6.02×10^{-24}	1.75×10^{-19}	3.23×10^2	8.82×10^{-39}
300	8.68×10^{-25}	2.63×10^{-17}	8.49×10^{-39}	6.94×10^{-20}	1.30×10^{-23}	8.49×10^{-39}	5.85×10^{-24}	1.54×10^{-19}	3.72×10^2	8.49×10^{-39}
310	8.30×10^{-25}	1.17×10^{-17}	7.08×10^{-39}	3.56×10^{-20}	1.19×10^{-23}	7.08×10^{-39}	5.11×10^{-24}	8.30×10^{-20}	7.32×10^2	7.08×10^{-39}
320	7.98×10^{-25}	5.44×10^{-18}	6.00×10^{-39}	1.91×10^{-20}	1.10×10^{-23}	6.00×10^{-39}	4.51×10^{-24}	4.65×10^{-20}	1.38×10^3	6.00×10^{-39}
330	7.70×10^{-25}	2.66×10^{-18}	5.14×10^{-39}	1.06×10^{-20}	1.02×10^{-23}	5.14×10^{-39}	4.02×10^{-24}	2.70×10^{-20}	2.51×10^3	5.14×10^{-39}
350	7.27×10^{-25}	7.24×10^{-19}	3.92×10^{-39}	3.65×10^{-21}	9.03×10^{-24}	3.92×10^{-39}	3.27×10^{-24}	1.01×10^{-20}	7.44×10^3	3.92×10^{-39}
375	6.89×10^{-25}	1.74×10^{-19}	2.95×10^{-39}	1.13×10^{-21}	7.95×10^{-24}	2.95×10^{-39}	2.64×10^{-24}	3.42×10^{-21}	2.46×10^4	2.95×10^{-39}
400	6.63×10^{-25}	5.02×10^{-20}	2.33×10^{-39}	4.11×10^{-22}	7.19×10^{-24}	2.33×10^{-39}	2.20×10^{-24}	1.34×10^{-21}	7.00×10^4	2.33×10^{-39}
425	6.48×10^{-25}	1.69×10^{-20}	1.93×10^{-39}	1.68×10^{-22}	6.64×10^{-24}	1.93×10^{-39}	1.89×10^{-24}	5.92×10^{-22}	1.76×10^5	1.93×10^{-39}
450	6.39×10^{-25}	6.46×10^{-21}	1.65×10^{-39}	7.67×10^{-23}	6.24×10^{-24}	1.65×10^{-39}	1.66×10^{-24}	2.88×10^{-22}	3.99×10^5	1.65×10^{-39}
475	6.35×10^{-25}	2.75×10^{-21}	1.45×10^{-39}	3.82×10^{-23}	5.95×10^{-24}	1.45×10^{-39}	1.50×10^{-24}	1.52×10^{-22}	8.28×10^5	1.45×10^{-39}
500	6.36×10^{-25}	1.28×10^{-21}	1.30×10^{-39}	2.05×10^{-23}	5.73×10^{-24}	1.30×10^{-39}	1.37×10^{-24}	8.58×10^{-23}	1.60×10^6	1.30×10^{-39}
550	6.49×10^{-25}	3.47×10^{-22}	1.12×10^{-39}	7.06×10^{-24}	5.47×10^{-24}	1.12×10^{-39}	1.19×10^{-24}	3.26×10^{-23}	4.97×10^6	1.12×10^{-39}
600	6.71×10^{-25}	1.19×10^{-22}	1.02×10^{-39}	2.95×10^{-24}	5.37×10^{-24}	1.02×10^{-39}	1.07×10^{-24}	1.48×10^{-23}	1.28×10^7	1.02×10^{-39}
650	7.02×10^{-25}	4.88×10^{-23}	$9.71\text{E-}40$	1.43×10^{-24}	5.37×10^{-24}	$9.71\text{E-}40$	1.00×10^{-24}	7.70×10^{-24}	2.84×10^7	$9.71\text{E-}40$
700	7.39×10^{-25}	2.30×10^{-23}	$9.56\text{E-}40$	7.82×10^{-25}	5.45×10^{-24}	$9.56\text{E-}40$	9.54×10^{-25}	4.46×10^{-24}	5.61×10^7	$9.56\text{E-}40$
750	7.82×10^{-25}	1.22×10^{-23}	$9.64\text{E-}40$	4.68×10^{-25}	5.58×10^{-24}	$9.64\text{E-}40$	9.27×10^{-25}	2.82×10^{-24}	1.01×10^8	$9.64\text{E-}40$
800	8.30×10^{-25}	7.03×10^{-24}	$9.93\text{E-}40$	3.01×10^{-25}	5.76×10^{-24}	$9.93\text{E-}40$	9.13×10^{-25}	1.90×10^{-24}	1.70×10^8	$9.93\text{E-}40$
850	8.83×10^{-25}	4.38×10^{-24}	1.04×10^{-39}	2.07×10^{-25}	5.98×10^{-24}	1.04×10^{-39}	9.09×10^{-25}	1.36×10^{-24}	2.68×10^8	1.04×10^{-39}
900	9.41×10^{-25}	2.90×10^{-24}	1.10×10^{-39}	1.49×10^{-25}	6.24×10^{-24}	1.10×10^{-39}	9.12×10^{-25}	1.02×10^{-24}	4.03×10^8	1.10×10^{-39}
1000	1.07×10^{-24}	1.47×10^{-24}	1.26×10^{-39}	8.72×10^{-26}	6.84×10^{-24}	1.26×10^{-39}	9.36×10^{-25}	6.37×10^{-25}	8.01×10^8	1.26×10^{-39}

Table S18: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for $(\text{H}_2\text{O})_2$ catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1400K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kumi	kt	keq1	keq2	kumi	kt	keq1	keq2	kumi	kt
213	1.80×10 ⁻²⁴	8.52×10 ⁻¹³	2.79×10 ¹	4.29×10 ⁻³⁵	3.43×10 ⁻¹⁶	4.72×10 ⁻²³	2.79×10 ¹	4.29×10 ⁻³⁵	3.72×10 ⁻²³	4.35×10 ⁻¹⁶	2.79×10 ¹	4.29×10 ⁻³⁵
216	1.73×10 ⁻²⁴	5.17×10 ⁻¹³	3.89×10 ¹	3.48×10 ⁻³⁵	2.28×10 ⁻¹⁶	4.41×10 ⁻²³	3.89×10 ¹	3.48×10 ⁻³⁵	3.39×10 ⁻²³	2.97×10 ⁻¹⁶	3.89×10 ¹	3.48×10 ⁻³⁵
219	1.67×10 ⁻²⁴	3.18×10 ⁻¹³	5.36×10 ¹	2.84×10 ⁻³⁵	1.53×10 ⁻¹⁶	4.13×10 ⁻²³	5.36×10 ¹	2.84×10 ⁻³⁵	3.10×10 ⁻²³	2.04×10 ⁻¹⁶	5.36×10 ¹	2.84×10 ⁻³⁵
224	1.57×10 ⁻²⁴	1.46×10 ⁻¹³	8.98×10 ¹	2.05×10 ⁻³⁵	8.09×10 ⁻¹⁷	3.73×10 ⁻²³	8.98×10 ¹	2.05×10 ⁻³⁵	2.69×10 ⁻²³	1.12×10 ⁻¹⁶	8.98×10 ¹	2.05×10 ⁻³⁵
235	1.39×10 ⁻²⁴	2.95×10 ⁻¹⁴	2.59×10 ²	1.06×10 ⁻³⁵	2.19×10 ⁻¹⁷	3.02×10 ⁻²³	2.59×10 ²	1.06×10 ⁻³⁵	2.00×10 ⁻²³	3.30×10 ⁻¹⁷	2.59×10 ²	1.06×10 ⁻³⁵
250	1.20×10 ⁻²⁴	4.20×10 ⁻¹⁵	9.43×10 ²	4.76×10 ⁻³⁶	4.43×10 ⁻¹⁸	2.36×10 ⁻²³	9.43×10 ²	4.76×10 ⁻³⁶	1.41×10 ⁻²³	7.40×10 ⁻¹⁸	9.43×10 ²	4.76×10 ⁻³⁶
259	1.12×10 ⁻²⁴	1.45×10 ⁻¹⁵	1.91×10 ³	3.09×10 ⁻³⁶	1.86×10 ⁻¹⁸	2.07×10 ⁻²³	1.91×10 ³	3.09×10 ⁻³⁶	1.17×10 ⁻²³	3.29×10 ⁻¹⁸	1.91×10 ³	3.09×10 ⁻³⁶
265	1.07×10 ⁻²⁴	7.47×10 ⁻¹⁶	2.97×10 ³	2.36×10 ⁻³⁶	1.08×10 ⁻¹⁸	1.91×10 ⁻²³	2.97×10 ³	2.36×10 ⁻³⁶	1.04×10 ⁻²³	1.98×10 ⁻¹⁸	2.97×10 ³	2.36×10 ⁻³⁶
278	9.78×10 ⁻²⁵	1.95×10 ⁻¹⁶	7.25×10 ³	1.38×10 ⁻³⁶	3.58×10 ⁻¹⁹	1.63×10 ⁻²³	7.25×10 ³	1.38×10 ⁻³⁶	8.22×10 ⁻²⁴	7.09×10 ⁻¹⁹	7.25×10 ³	1.38×10 ⁻³⁶
280	9.67×10 ⁻²⁵	1.60×10 ⁻¹⁶	8.25×10 ³	1.28×10 ⁻³⁶	3.05×10 ⁻¹⁹	1.59×10 ⁻²³	8.25×10 ³	1.28×10 ⁻³⁶	7.95×10 ⁻²⁴	6.11×10 ⁻¹⁹	8.25×10 ³	1.28×10 ⁻³⁶
290	9.13×10 ⁻²⁵	6.29×10 ⁻¹⁷	1.54×10 ⁴	8.85×10 ⁻³⁷	1.42×10 ⁻¹⁹	1.43×10 ⁻²³	1.54×10 ⁴	8.85×10 ⁻³⁷	6.78×10 ⁻²⁴	2.99×10 ⁻¹⁹	1.54×10 ⁴	8.85×10 ⁻³⁷
298	8.76×10 ⁻²⁵	3.12×10 ⁻¹⁷	2.46×10 ⁴	6.72×10 ⁻³⁷	7.97×10 ⁻²⁰	1.33×10 ⁻²³	2.46×10 ⁴	6.72×10 ⁻³⁷	6.02×10 ⁻²⁴	1.75×10 ⁻¹⁹	2.46×10 ⁴	6.72×10 ⁻³⁷
300	8.68×10 ⁻²⁵	2.63×10 ⁻¹⁷	2.76×10 ⁴	6.30×10 ⁻³⁷	6.94×10 ⁻²⁰	1.30×10 ⁻²³	2.76×10 ⁴	6.30×10 ⁻³⁷	5.85×10 ⁻²⁴	1.54×10 ⁻¹⁹	2.76×10 ⁴	6.30×10 ⁻³⁷
310	8.30×10 ⁻²⁵	1.17×10 ⁻¹⁷	4.75×10 ⁴	4.60×10 ⁻³⁷	3.56×10 ⁻²⁰	1.19×10 ⁻²³	4.75×10 ⁴	4.60×10 ⁻³⁷	5.11×10 ⁻²⁴	8.30×10 ⁻²⁰	4.75×10 ⁴	4.60×10 ⁻³⁷
320	7.98×10 ⁻²⁵	5.44×10 ⁻¹⁸	7.92×10 ⁴	3.44×10 ⁻³⁷	1.91×10 ⁻²⁰	1.10×10 ⁻²³	7.92×10 ⁴	3.44×10 ⁻³⁷	4.51×10 ⁻²⁴	4.65×10 ⁻²⁰	7.92×10 ⁴	3.44×10 ⁻³⁷
330	7.70×10 ⁻²⁵	2.66×10 ⁻¹⁸	1.28×10 ⁵	2.62×10 ⁻³⁷	1.06×10 ⁻²⁰	1.02×10 ⁻²³	1.28×10 ⁵	2.62×10 ⁻³⁷	4.02×10 ⁻²⁴	2.70×10 ⁻²⁰	1.28×10 ⁵	2.62×10 ⁻³⁷
350	7.27×10 ⁻²⁵	7.24×10 ⁻¹⁹	3.08×10 ⁵	1.62×10 ⁻³⁸	3.65×10 ⁻²¹	9.03×10 ⁻²⁴	3.08×10 ⁵	1.62×10 ⁻³⁸	3.27×10 ⁻²⁴	1.01×10 ⁻²⁰	3.08×10 ⁵	1.62×10 ⁻³⁸
375	6.89×10 ⁻²⁵	1.74×10 ⁻¹⁹	8.08×10 ⁵	9.67×10 ⁻³⁸	1.13×10 ⁻²¹	7.95×10 ⁻²⁴	8.08×10 ⁵	9.67×10 ⁻³⁸	2.64×10 ⁻²⁴	3.42×10 ⁻²¹	8.08×10 ⁵	9.67×10 ⁻³⁸
400	6.63×10 ⁻²⁵	5.02×10 ⁻²⁰	1.88×10 ⁶	6.27×10 ⁻³⁸	4.11×10 ⁻²²	7.19×10 ⁻²⁴	1.88×10 ⁶	6.27×10 ⁻³⁸	2.20×10 ⁻²⁴	1.34×10 ⁻²¹	1.88×10 ⁶	6.27×10 ⁻³⁸
425	6.48×10 ⁻²⁵	1.69×10 ⁻²⁰	3.97×10 ⁶	4.34×10 ⁻³⁸	1.68×10 ⁻²²	6.64×10 ⁻²⁴	3.97×10 ⁶	4.34×10 ⁻³⁸	1.89×10 ⁻²⁴	5.92×10 ⁻²²	3.97×10 ⁶	4.34×10 ⁻³⁸
450	6.39×10 ⁻²⁵	6.46×10 ⁻²¹	7.70×10 ⁶	3.18×10 ⁻³⁸	7.67×10 ⁻²³	6.24×10 ⁻²⁴	7.70×10 ⁶	3.18×10 ⁻³⁸	1.66×10 ⁻²⁴	2.88×10 ⁻²²	7.70×10 ⁶	3.18×10 ⁻³⁸
475	6.35×10 ⁻²⁵	2.75×10 ⁻²¹	1.40×10 ⁷	2.44×10 ⁻³⁸	3.82×10 ⁻²³	5.95×10 ⁻²⁴	1.40×10 ⁷	2.44×10 ⁻³⁸	1.50×10 ⁻²⁴	1.52×10 ⁻²²	1.40×10 ⁷	2.44×10 ⁻³⁸
500	6.36×10 ⁻²⁵	1.28×10 ⁻²¹	2.38×10 ⁷	1.94×10 ⁻³⁸	2.05×10 ⁻²³	5.73×10 ⁻²⁴	2.38×10 ⁷	1.94×10 ⁻³⁸	1.37×10 ⁻²⁴	8.58×10 ⁻²³	2.38×10 ⁷	1.94×10 ⁻³⁸
550	6.49×10 ⁻²⁵	3.47×10 ⁻²²	6.00×10 ⁷	1.35×10 ⁻³⁸	7.06×10 ⁻²⁴	5.47×10 ⁻²⁴	6.00×10 ⁷	1.35×10 ⁻³⁸	1.19×10 ⁻²⁴	3.26×10 ⁻²³	6.00×10 ⁷	1.35×10 ⁻³⁸
600	6.71×10 ⁻²⁵	1.19×10 ⁻²²	1.30×10 ⁸	1.04×10 ⁻³⁸	2.95×10 ⁻²⁴	5.37×10 ⁻²⁴	1.30×10 ⁸	1.04×10 ⁻³⁸	1.07×10 ⁻²⁴	1.48×10 ⁻²³	1.30×10 ⁸	1.04×10 ⁻³⁸
650	7.02×10 ⁻²⁵	4.88×10 ⁻²³	2.49×10 ⁸	8.53×10 ⁻³⁹	1.43×10 ⁻²⁴	5.37×10 ⁻²⁴	2.49×10 ⁸	8.53×10 ⁻³⁹	1.00×10 ⁻²⁴	7.70×10 ⁻²⁴	2.49×10 ⁸	8.53×10 ⁻³⁹
700	7.39×10 ⁻²⁵	2.30×10 ⁻²³	4.36×10 ⁸	7.43×10 ⁻³⁹	7.82×10 ⁻²⁵	5.45×10 ⁻²⁴	4.36×10 ⁸	7.43×10 ⁻³⁹	9.54×10 ⁻²⁵	4.46×10 ⁻²⁴	4.36×10 ⁸	7.43×10 ⁻³⁹
750	7.82×10 ⁻²⁵	1.22×10 ⁻²³	7.09×10 ⁸	6.75×10 ⁻³⁹	4.68×10 ⁻²⁵	5.58×10 ⁻²⁴	7.09×10 ⁸	6.75×10 ⁻³⁹	9.27×10 ⁻²⁵	2.82×10 ⁻²⁴	7.09×10 ⁸	6.75×10 ⁻³⁹
800	8.30×10 ⁻²⁵	7.03×10 ⁻²⁴	1.09×10 ⁹	6.33×10 ⁻³⁹	3.01×10 ⁻²⁵	5.76×10 ⁻²⁴	1.09×10 ⁹	6.33×10 ⁻³⁹	9.13×10 ⁻²⁵	1.90×10 ⁻²⁴	1.09×10 ⁹	6.33×10 ⁻³⁹
850	8.83×10 ⁻²⁵	4.38×10 ⁻²⁴	1.58×10 ⁹	6.10×10 ⁻³⁹	2.07×10 ⁻²⁵	5.98×10 ⁻²⁴	1.58×10 ⁹	6.10×10 ⁻³⁹	9.09×10 ⁻²⁵	1.36×10 ⁻²⁴	1.58×10 ⁹	6.10×10 ⁻³⁹
900	9.41×10 ⁻²⁵	2.90×10 ⁻²⁴	2.20×10 ⁹	6.01×10 ⁻³⁹	1.49×10 ⁻²⁵	6.24×10 ⁻²⁴	2.20×10 ⁹	6.01×10 ⁻³⁹	9.12×10 ⁻²⁵	1.02×10 ⁻²⁴	2.20×10 ⁹	6.01×10 ⁻³⁹
1000	1.07×10 ⁻²⁴	1.47×10 ⁻²⁴	3.89×10 ⁹	6.11×10 ⁻³⁹	8.72×10 ⁻²⁶	6.84×10 ⁻²⁴	3.89×10 ⁹	6.11×10 ⁻³⁹	9.36×10 ⁻²⁵	6.37×10 ⁻²⁵	3.89×10 ⁹	6.11×10 ⁻³⁹

Table S20: Concentrations of H_2O and $(\text{H}_2\text{O})_2$ in molecules cm^{-3} , k_t in $\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$ and k_{eff} in $\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$ at higher altitude.

Altitude (km)	Temp (K)	$[\text{H}_2\text{O}]$	$[(\text{H}_2\text{O})_2]$	k_t^{WM}	k_t^{WD}	k_{eff}^{WM}	k_{eff}^{WD}
5	259	2.40×10^{16}	2.70×10^{12}	7.88×10^{-42}	1.06×10^{-35}	5.67×10^{-25}	8.57×10^{-23}
10	229	4.90×10^{15}	2.30×10^{11}	3.67×10^{-42}	3.09×10^{-36}	5.39×10^{-26}	2.13×10^{-24}
15	212	2.00×10^{13}	6.30×10^6	1.63×10^{-42}	8.85×10^{-37}	9.78×10^{-29}	1.67×10^{-29}

Table S21: Absolute energies in Hartree for the uncatalyzed channel optimized at M06-2X/aug-cc-pVTZ level of theory.

Species	CCSD(T)/aug-cc-pVDZ	CCSD(T)-aug-cc-pVTZ	CCSD(T)/aug-cc-pVQZ	CCSD(T)-F12/cc-pVTZ
CI	-189.1688643	-189.3306171	-189.3791775	-189.3927083015
CO	-113.0725861	-113.161723	-113.1901287	-113.198651758
TS1 _{uncat}	-302.2281981	-302.4798976	-302.5563883	-302.5782708535