Supplementary Information for

Effect of Ammonia and Formic acid on the oxidation of CO by simple Criegee intermediate.

Amit Kumar and Pradeep Kumar*

Department of Chemistry, Malaviya National Institute of Technology Jaipur, Jaipur, 302017, India
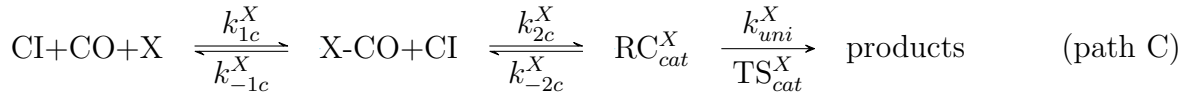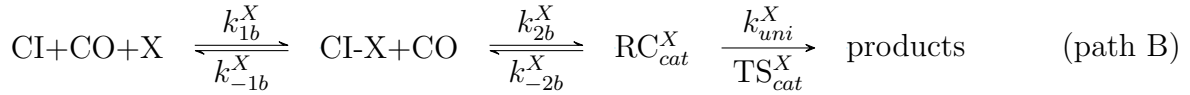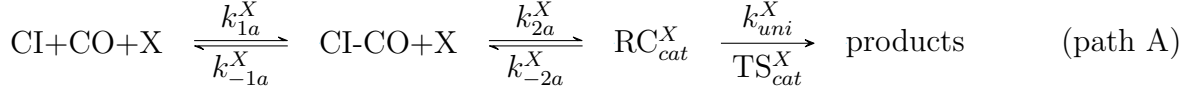
E-mail: pradeep.chy@mnit.ac.in

Sl. No.	Contents

Sl. No.	Contents

1 Formal proof for same value of termolecular rate constamt for path A, B and C

$$\text{CI+CO+X} \xrightleftharpoons[k_{-1a}^X]{k_{1a}^X} \text{CI-CO+X} \xrightleftharpoons[k_{-2a}^X]{k_{2a}^X} \text{RC}_{cat}^X \xrightarrow{k_{uni}^X} \text{TS}_{cat}^X \quad \text{products} \qquad \text{(path A)}$$

$$\text{CI+CO+X} \xrightleftharpoons[k_{-1b}^X]{k_{1b}^X} \text{CI-X+CO} \xrightleftharpoons[k_{-2b}^X]{k_{2b}^X} \text{RC}_{cat}^X \xrightarrow{k_{uni}^X} \text{TS}_{cat}^X \quad \text{products} \qquad \text{(path B)}$$

$$\text{CI+CO+X} \xrightleftharpoons[k_{-1c}^X]{k_{1c}^X} \text{X-CO+CI} \xrightleftharpoons[k_{-2c}^X]{k_{2c}^X} \text{RC}_{cat}^X \xrightarrow{k_{uni}^X} \text{TS}_{cat}^X \quad \text{products} \qquad \text{(path C)}$$

where CI=CH$_2$OO; X= AM, FA, AD and AW (AM=NH$_3$, FA=HCOOH, AD=(NH$_3$)$_2$ and AW=NH$_3$-H$_2$O) .

For path A,

$$K_{eq1} = \frac{[CI-CO]}{[CI][CO]} \tag{1}$$

and

$$K_{eq2} = \frac{[RC_{cat}^X]}{[CI-CO][X]} \tag{2}$$

and

$$k_t = K_{eq1} K_{eq2} k_{uni} \tag{3}$$

Therefore,

$$k_t = \frac{[RC_{cat}^X]}{[CI][CO][X]} k_{uni} \qquad (4)$$

It is evident from equation 4, as k_{uni} is same for all the paths, the values of k_t depends on the concentration of the isolated reactants and RC_{cat}. Therefore, the values of k_t are same for all the paths, whereas the bimolecular rate constant ($k_{bi}=K_{eq2}k_{uni}$) are different for the path A, B and C, which are defined as follows.

For path A

$$k_{bi} = \frac{[RC_{cat}^X]}{[CI-CO][X]} k_{uni} \qquad (5)$$

For path B

$$k_{bi} = \frac{[RC_{cat}^X]}{[CI-X][CO]} k_{uni} \qquad (6)$$

and For path C

$$k_{bi} = \frac{[RC_{cat}^X]}{[X-CO][CI]} k_{uni} \qquad (7)$$

Table S1: Optimized geometries in Cartesian coordinates and normal mode frequencies of all species calculate at M06-2X/aug-cc-pVTZ level of theory

compound	GEOMETRY				FREQUENCY		
CI	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			
AM	N	0	0	0.112225	1033.2919	1660.4155	1660.6925
	H	0	0.940561	-0.261858	3508.4386	3633.8182	3633.8396
	H	-0.814549	-0.47028	-0.261858			
	H	0.814549	-0.47028	-0.261858			
FA	C	0	0.421156	0	646.9752	667.8794	1069.9376
	H	-0.373354	1.450506	0	1161.5421	1320.6117	1407.3215
	O	1.151966	0.110007	0	1864.3379	3118.563	3782.4576
	O	-1.023304	-0.440213	0			
	H	-0.65594	-1.335795	0			
CO	C	0	0	-0.640774	2272.4229		
	O	0	0	0.480581			
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			
CI-AM	O	0.886141	-1.125979	0.183055	106.8828	151.9586	181.0689
	O	1.016229	0.106757	-0.401352	215.3251	279.8741	434.8311
	C	0.575003	1.070636	0.23227	530.2639	696.8345	889.9798
	H	0.180913	0.917154	1.227438	1058.0527	1099.2034	1255.6926

	H	0.639517	2.032019	-0.261134	1444.6757	1648.925	1661.1666
	H	-1.247871	-0.806341	0.033945	1675.2473	3155.4501	3299.027
	H	-2.657836	-0.194462	0.607134	3443.828	3580.5379	3631.4123
	N	-1.898801	-0.024895	-0.040268			
	H	-2.292093	-0.044148	-0.972748			
CI-FA	O	1.522375	-1.265974	0.256751	41.9567	49.0643	77.1525
	O	1.830864	-0.137619	-0.458304	119.7634	133.3384	215.1622
	C	1.720685	0.944039	0.123687	526.5886	648.7076	678.7974
	H	1.424088	0.955858	1.164877	697.0752	882.2009	1076.8781
	H	1.936685	1.825695	-0.465782	1114.5683	1169.0956	1255.0398
	C	-1.345807	-0.142304	0.034783	1320.844	1421.0003	1444.3947
	H	-0.703976	-1.027553	0.072453	1668.3331	1807.8019	3123.8851
	O	-0.940906	0.988968	0.112661	3149.2288	3293.2823	3788.1571
	O	-2.633153	-0.45248	-0.10933			
	H	-3.139511	0.372426	-0.136594			
AM-CO	O	1.273991	-0.00002	0.00944	26.0058	32.0058	40.6361
	C	2.395388	0.00008	-0.020557	60.7292	69.4349	1030.4775
	H	-1.527828	0.298073	0.045633	1659.306	1661.7479	2268.4946
	H	-2.547679	-0.921967	-0.302802	3509.6347	3632.7957	3636.3804
	N	-2.492724	0.00028	0.110902			
	H	-3.039677	0.621621	-0.471318			
FA-CO	O	1.870904	0.484973	-0.00011	27.1465	40.4119	81.6246
	C	2.432727	-0.488129	0.000289	94.7543	104.8495	653.2758
	C	-1.617691	-0.204638	0.000243	698.4783	1078.4397	1173.8733
	H	-2.710616	-0.27135	0.001026	1329.7019	1417.4851	1861.4758
	O	-0.877813	-1.142644	-0.000307	2252.3253	3097.9948	3783.3724
	O	-1.232566	1.074013	-0.000024			
	H	-0.263804	1.097224	-0.000687			
	O	-0.734834	-0.505214	1.193751	54.3403	70.5179	105.3759
	O	-1.588472	-0.357129	0.147706	109.8829	153.8761	160.7957
	C	-1.145536	-0.516963	-0.998526	170.6209	177.2415	190.3584

RC$_{cat}^{AM}$	H	-0.099253	-0.789963	-1.137064	254.3528	411.0792	552.302
	H	-1.871665	-0.3705	-1.788538	722.6239	912.0959	1099.9492
	O	0.337558	1.831433	-0.442216	1111.4868	1289.8044	1460.4466
	C	0.908218	1.655934	0.511808	1635.4926	1655.4392	1675.6313
	H	1.258796	-1.173337	0.564669	2235.5942	3076.4544	3255.8175
	H	2.208955	-2.276976	-0.187969	3460.3065	3585.6024	3623.8723
	N	1.875695	-1.321697	-0.231497			
	H	2.683196	-0.723885	-0.104234			
RC$_{cat}^{AM}$	O	0.327493	0.005472	-1.178431	26.3232	63.3242	71.7284
	O	0.434153	-1.211662	-0.571223	98.3401	103.0608	136.6712
	C	0.294455	-1.238581	0.658011	148.1194	176.1772	188.2447
	H	0.136005	-0.315352	1.201404	287.0223	303.9566	497.8356
	H	0.351332	-2.218412	1.11392	542.2006	685.0235	707.4772
	O	2.749156	0.256123	0.607318	921.6167	1035.6542	1078.3423
	C	2.717839	1.05372	-0.186498	1154.9628	1263.2352	1292.4099
	C	-2.043005	0.376366	-0.203312	1430.9275	1449.3524	1653.0386
	H	-2.224658	0.542065	-1.269144	1855.2964	2233.6982	3100.5856
	O	-2.234323	-0.665596	0.353376	3150.161	3295.2026	3853.5569
	O	-1.619197	1.453879	0.474933			
	H	-1.336658	2.136943	-0.143178			
TS1^{AM}	C	-1.071739	0.587814	0.937974	-412.2319	61.7026	111.7225
	O	-1.631656	0.517457	-0.208207	132.1063	155.0695	163.1685
	O	-0.691464	0.083947	-1.113415	191.6004	232.337	355.483
	C	-0.03775	-1.161374	0.292862	479.6789	517.1806	626.4021
	H	-0.058505	0.970099	1.027071	853.0478	1006.2294	1085.8911
	H	-1.765504	0.612014	1.77241	1167.0871	1250.7665	1403.6395
	O	0.834481	-1.854541	0.089693	1559.6696	1651.1982	1668.3084
	H	1.404053	1.04544	-0.766293	2167.6348	3104.2825	3240.6876
	H	2.654406	0.440025	0.08871	3482.9956	3600.1633	3627.0084
	N	1.97687	1.192297	0.06001			
	H	2.493499	2.052798	-0.071556			
	C	-1.946948	-1.106623	-0.003002	-713.8534	39.1757	75.3121

	O	-0.816547	-1.55319	0.002786	76.9373	137.555	154.8936
	O	0.286468	-0.392852	0.001205	157.8432	246.9321	267.9085
	H	-2.117026	-0.023056	-0.007909	330.3118	424.0786	525.291
	H	-2.765372	-1.83124	-0.002655	541.6007	595.5344	1105.9678
TS2^{AM}	C	1.934488	0.424144	-0.000652	1232.8662	1270.2529	1496.9804
	O	2.978091	-0.006145	-0.000927	1651.8294	1675.1615	1760.3617
	N	-1.549393	2.085739	0.000427	2192.0824	3005.245	3147.3801
	H	-1.558397	2.690972	-0.811119	3459.7823	3584.7066	3625.3143
	H	-0.660597	1.588042	0.001605			
	H	-1.562188	2.687481	0.814505			
	O	0.540962	0.138086	1.175009	-457.8337	56.1063	91.4265
	O	1.26743	0.858839	0.237791	131.5616	159.4285	229.7871
	C	0.656429	0.87006	-0.872952	256.8981	302.9433	358.0486
	H	-0.430585	0.873192	-0.897009	461.4445	581.0119	712.3249
	H	1.280468	1.142262	-1.71617	795.341	975.9235	1091.1217
TS3^{AM}	O	0.45102	-1.203849	-0.757232	1160.7363	1267.3551	1427.5928
	C	0.282735	-1.394202	0.393981	1570.965	1652.1036	1662.3781
	H	-1.961907	0.334702	0.866855	1828.2279	3096.0452	3256.2366
	H	-2.565796	-0.641612	-0.283254	3491.9242	3606.5729	3625.493
	N	-2.391412	0.329685	-0.052655			
	H	-3.292578	0.783904	0.027446			
	C	-1.553187	-0.138592	-0.097286	-294.3576	130.9221	173.683
	O	-0.580506	-0.959575	-0.555657	242.0224	283.8602	314.6688
	O	0.384612	-1.073125	0.517281	414.3733	564.8307	697.5868
	H	-2.048016	-0.503561	0.804742	839.3557	887.5051	923.1262
	H	-2.262271	0.057746	-0.900516	1053.3737	1206.7131	1235.2425
TS2$'_{AM}$	C	1.785064	-0.141899	0.311309	1313.7842	1402.0514	1500.7656
	O	1.591922	0.716787	-0.486105	1503.7659	1569.272	1636.8237
	H	0.014676	1.212578	-0.280812	1797.3421	2797.1059	3069.2103
	H	-1.470738	2.002449	0.121678	3141.6638	3471.6883	3571.0865
	N	-0.887446	1.185422	0.274313			
	H	-0.581006	1.143076	1.246439			

	C	-0.310897	2.125698	-0.277639	-704.662	26.8354	38.2217
	O	0.39235	1.647312	0.586562	44.6175	85.8707	112.7624
	O	1.151272	0.340682	0.043712	117.1128	136.2876	179.7562
	H	-0.318826	1.689351	-1.275443	254.5102	353.7154	506.2864
	H	-0.916572	2.99835	-0.028026	518.6082	593.9248	644.1154
$TS2^{FA}$	O	3.537838	-1.035864	0.004389	1192.226	1243.0821	1286.6143
	C	-1.762928	-0.945915	0.034953	1432.7202	1471.5055	1777.0613
	O	-2.274233	0.283743	-0.233346	1866.0319	2204.6327	3076.7537
	H	-3.237623	0.189894	-0.264527	3098.9309	3201.8502	3783.9194
	O	-2.449842	-1.907752	0.18693			
	H	-0.66883	-0.895241	0.082919			
	O	-0.608463	0.92525	0.394006	-474.2481	46.1593	53.3261
	O	-0.793763	-0.271059	1.080814	112.697	139.2903	172.7014
	C	-1.03563	-1.189214	0.229383	185.9818	294.7149	353.0274
	H	-0.487817	-1.213991	-0.700694	478.0179	598.1373	685.1773
	H	-1.501333	-2.072676	0.649053	707.2076	833.2516	881.2537
$TS3^{FA}$	O	-2.435548	-0.12089	-0.647677	993.8079	1090.6273	1151.4066
	C	-2.064699	1.001091	-0.611248	1242.3073	1243.6599	1388.5837
	C	2.517572	-0.134191	-0.254774	1399.4372	1432.1775	1561.9989
	H	3.602935	-0.188158	-0.390724	1810.5178	1824.6808	3094.2781
	O	1.785653	-1.079517	-0.397122	3164.1754	3302.0516	3444.7307
	O	2.141962	1.083791	0.079202			
	H	1.164035	1.108113	0.188418			
	O	-0.920109	-1.293905	0.0321	26.7363	36.298	74.8132
	O	0.249903	1.343402	-0.127298	90.5987	102.5345	113.9131
	C	1.420388	1.470668	0.109001	148.0607	181.7028	195.4221
	H	2.155279	1.662712	-0.686366	314.5983	346.0399	681.9393
	H	1.815682	1.423286	1.133968	696.6761	1084.1605	1203.7597
PC_{AM}	O	-2.565714	0.326969	-0.003641	1271.407	1410.1527	1539.331
	C	-1.727933	-0.463712	0.013339	1656.2739	1666.5831	1848.3115
	H	1.404202	-1.325931	-0.025459	2442.2376	2980.5824	3055.3309
	H	2.827555	-1.680155	0.690615	3496.461	3613.3252	3627.2987
	N	2.394272	-1.104279	-0.020576			

	H	2.770002	-1.403417	-0.912047			
PC^{FA}	O	1.466998	-1.484622	-0.000476	15.3318	24.5222	52.7878
	O	0.681113	1.301088	-0.007455	73.8858	87.3178	101.5136
	C	-0.167407	2.15155	0.000294	117.7131	143.7027	149.3835
	H	-0.566308	2.561833	0.939176	190.216	310.5308	651.9225
	H	-0.576004	2.56923	-0.931126	676.7505	684.7367	696.0738
	O	3.314283	-0.097328	0.00316	1103.2052	1176.2619	1214.7139
	C	2.37996	-0.773168	0.001285	1271.3564	1327.0216	1410.5861
	C	-1.903599	-0.416604	-0.000829	1423.6787	1539.9662	1830.8925
	H	-0.832593	-0.642717	-0.006527	1853.2122	2443.0118	2982.7794
	O	-2.368171	0.689706	0.005912	3061.2675	3122.0563	3793.1172
	O	-2.633126	-1.531401	-0.002272			
	H	-3.567596	-1.278556	0.003043			
CO$_2$	C	0	0	0	694.1376	694.1376	1410.9715
	O	0	0	1.155191	2443.6758		
	O	0	0	-1.155191			
AD	H	-2.15255	-0.81368	-0.07049	77.7318	82.9753	101.0892
	H	-0.85738	0.00036	-0.645	146.1927	222.7329	440.8265
	N	-1.56912	0.00001	0.07794	1047.5414	1077.7403	1646.316
	H	-2.15323	0.81324	-0.07032	1663.6917	1665.2577	1675.0525
	N	1.5691	0	-0.07793	3491.6582	3495.5698	3613.223
	H	2.15291	-0.81346	0.07023	3613.3071	3630.5744	3630.6531
	H	0.85753	-0.00004	0.64517			
	H	2.15286	0.81349	0.07033			
AW	H	-0.58804	-0.05095	-0.0044	65.1853	153.9747	172.6454
	H	-1.95313	-0.76318	-0.00176	197.4459	443.3111	684.304
	N	1.38237	-0.02344	-0.00029	1085.5552	1642.6441	1658.3388
	H	1.88023	-0.66512	0.60395	1664.6034	3506.3407	3626.7492
	H	1.58213	0.914	0.32746	3631.9805	3638.3324	3939.0277
	H	1.78143	-0.10832	-0.92691			
	O	-1.54741	0.10471	0.00046			

AD-CO	C	-2.14395	-0.11388	-0.00105	22.085	55.263	66.9424
	O	-1.42379	-0.97655	0.00075	83.0002	99.513	108.1669
	H	1.05543	1.12617	0.00046	121.4865	135.0501	153.7703
	H	2.44935	-1.30029	-0.8171	246.8877	387.7987	1060.7997
	H	2.45701	-1.3026	0.81146	1075.3545	1650.9663	1661.8043
	N	1.97545	-0.9363	-0.00006	1662.0728	1682.1058	2251.7152
	H	0.50568	2.43726	-0.81166	3464.371	3505.1725	3589.4097
	H	1.04037	-1.32634	0.00371	3625.47	3627.6359	3632.0039
	N	0.34496	1.85426	0.00006			
	H	0.50326	2.43573	0.81336			
AW-CO	C	2.5054	-0.48846	-0.00515	12.7178	23.5023	36.8199
	O	2.86107	0.5751	0.00051	78.7722	124.5531	133.8275
	H	-1.33516	-0.23995	0.00363	185.0058	191.9723	212.1129
	H	-3.90985	-0.50096	-0.33908	473.8108	706.9962	1087.0248
	H	-3.54131	0.46117	0.92647	1645.6102	1657.959	1662.1091
	N	-3.24692	0.18594	-0.0024	2271.5261	3506.7628	3617.2947
	H	-0.16076	-1.24302	-0.00346	3628.5376	3631.1887	3929.9305
	H	-3.32934	1.00105	-0.59779			
	O	-0.3645	-0.30624	0.00672			
TS1^{AD}	C	-1.58013	0.91694	-0.44753	-418.0301	41.8992	63.5288
	O	-1.99363	-0.27342	-0.66048	65.9222	115.0561	134.0152
	O	-0.96352	-1.13439	-0.35642	155.5577	162.3324	179.7587
	C	-0.54955	0.06436	1.18992	190.0204	199.2758	230.1844
	H	-0.57079	1.22485	-0.71578	285.2539	319.9794	468.8911
	H	-2.37573	1.64858	-0.33935	476.3752	511.0585	623.9371
	O	0.31349	-0.17052	1.88466	863.0728	1010.3351	1097.1355
	H	1.99489	2.36369	-1.12163	1136.4554	1174.7798	1237.7573
	H	1.91337	0.83861	-0.52403	1400.3192	1573.5043	1645.4687
	N	1.54186	1.78541	-0.42467	1658.0292	1673.7231	1689.216
	H	1.84361	2.12886	0.47936	2167.0692	3074.7504	3223.3267
	N	2.06564	-1.28902	-0.62694	3402.4072	3478.5336	3563.6003
	H	2.58718	-1.86889	-1.2719	3592.4849	3620.3814	3627.2367
	H	1.07763	-1.39737	-0.84137			

	H	2.20468	-1.67418	0.29958			
TS2^{AD}	C	-0.88547	-1.15866	0.02234	-699.7022	16.5677	29.1739
	O	0.12414	-1.15707	0.69887	52.5147	60.2858	86.027
	O	1.23184	-0.20793	0.02565	114.6413	127.4629	149.0339
	H	-0.8947	-0.67369	-0.95115	159.1823	193.1919	217.7496
	H	-1.76493	-1.68302	0.3999	262.8614	317.1896	368.5996
	C	2.86417	0.5052	-0.47978	380.8505	500.9844	525.9363
	O	3.92306	0.16145	-0.29515	528.5108	602.1416	974.9359
	H	-3.14564	0.46317	-0.22449	1140.948	1177.57	1234.0031
	H	-4.43233	-0.54085	0.01836	1464.1859	1649.3019	1650.2052
	H	-1.52785	2.30429	0.08649	1665.8144	1679.1873	1759.3508
	H	-0.25085	1.30915	0.37131	2194.137	3080.4955	3209.219
	N	-1.24597	1.44869	0.55005	3431.8591	3478.2629	3568.4049
	N	-4.0244	0.13538	-0.61298	3610.5273	3618.105	3645.4801
	H	-3.84526	-0.32409	-1.49575			
	H	-1.35035	1.60559	1.54558			
TS1^{AW}	C	-1.52452	1.0128	-0.19685	-415.6442	36.7194	60.368
	O	-1.92605	-0.05139	-0.78008	70.4869	104.7295	120.7853
	O	-0.90645	-0.97607	-0.70781	150.1445	157.0521	176.1178
	C	-0.59277	-0.28661	1.17237	203.1177	238.0437	262.7538
	H	-0.51237	1.38155	-0.33427	337.5676	462.1026	505.5554
	H	-2.32384	1.68561	0.09971	555.4739	619.8494	826.4806
	O	0.18513	-0.75716	1.8446	858.035	1008.8334	1127.1139
	H	1.86361	0.84647	-0.27823	1164.2654	1236.4309	1399.6908
	H	2.17809	2.17191	0.47889	1572.3595	1631.1134	1669.2853
	N	2.09055	-0.88701	-0.82545	1675.0241	2182.2756	3110.0113
	H	2.71456	-1.13055	-1.58381	3240.4134	3359.8895	3471.1959
	H	1.13401	-1.03728	-1.13949	3588.0666	3630.8505	3935.1438
	H	2.2589	-1.53877	-0.0687			
	O	1.49199	1.71875	-0.01284			
TS2^{AW}	C	1.15328	-1.20698	0.69506	-707.556	17.1964	45.6646
	O	0.27806	-1.4272	-0.12037	66.8174	97.5167	129.1533

	O	-0.89893	-0.33018	-0.07123	156.4999	163.2751	182.3098
	H	1.09809	-0.33733	1.35116	196.8578	199.9756	280.3127
	H	1.97731	-1.91872	0.75775	289.3226	358.9569	412.563
	C	-2.57073	0.45146	-0.09857	485.4763	516.8214	542.0109
	O	-3.60568	0.03052	-0.24603	612.3103	679.8695	860.3459
	H	2.509	0.89156	-0.32959	1181.7611	1258.0753	1485.2869
	H	2.98098	-0.38135	-1.29973	1631.8713	1635.6604	1658.0505
	H	0.54687	2.65148	0.25247	1753.9201	2207.4423	3072.4392
	H	0.03182	1.18386	0.18034	3196.2361	3468.9232	3501.8328
	N	3.29141	0.33804	-0.66371	3629.9313	3676.9339	3935.2361
	H	3.81121	-0.06437	0.10169			
	O	0.79025	1.74457	0.44425			
RC^{AD}	C	1.78073	-1.02474	0.14969	37.1662	57.763	75.7778
	O	2.15477	0.07887	-0.26984	89.508	111.7509	123.2275
	O	1.22093	0.91639	-0.79363	157.9814	169.8544	183.6363
	C	-0.15839	0.73117	1.56637	184.4706	194.9005	202.9635
	H	0.73389	-1.33159	0.0858	218.77	262.8951	324.9995
	H	2.57455	-1.63173	0.57008	337.4327	494.7747	552.6537
	O	-1.12272	1.2968	1.4618	729.8393	919.2675	1114.5229
	H	-1.62351	-2.84899	-0.15569	1133.788	1141.611	1271.8549
	H	-1.66524	-1.22552	-0.38671	1470.172	1645.8585	1651.387
	N	-1.33802	-1.96248	0.24246	1663.8055	1677.4013	1692.395
	H	-1.84351	-1.86122	1.11443	2259.549	3043.8781	3238.0565
	N	-1.69224	0.5084	-1.59736	3385.0931	3450.2311	3560.3604
	H	-1.85744	0.54965	-2.59516	3579.2886	3618.3102	3626.9481
	H	-0.69469	0.65191	-1.44547			
	H	-2.17009	1.30092	-1.18601			
RC^{AW}	C	1.79285	-0.74218	0.62834	50.305	60.6255	71.5184
	O	2.11321	-0.01264	-0.31928	79.8505	113.4458	119.4707
	O	1.14539	0.36917	-1.19487	135.1599	164.6143	170.2885
	C	-0.20561	1.44975	0.99278	184.7576	199.6471	221.861
	H	0.76893	-1.0924	0.74918	248.1973	270.6973	366.7843
	H	2.60994	-0.99028	1.2956	546.69	581.1101	714.3388

	O	-1.15487	1.92411	0.62644	842.5554	919.8121	1110.7576
	H	-1.5271	-1.27227	0.21287	1140.4754	1268.883	1467.5987
	H	-1.88521	-1.93325	1.58486	1627.7882	1652.8904	1674.0506
	N	-1.7278	-0.4985	-1.40702	1675.1368	2261.4459	3094.7064
	H	-1.96121	-1.05841	-2.21697	3255.9678	3304.4278	3437.3799
	H	-0.75063	-0.21623	-1.49025	3577.4715	3631.5727	3935.9468
	H	-2.29064	0.34219	-1.44423			
	O	-1.15284	-1.59755	1.06663			
PC^{AD}	C	-1.99284	-0.95181	-0.3802	46.5115	64.7874	76.0621
	O	-2.36204	0.13803	-0.03474	79.1251	93.1057	101.3167
	O	0.69712	-0.95809	-1.12049	112.9127	131.7384	139.5558
	C	1.55661	-0.57109	-0.44705	153.2451	171.9815	190.8261
	H	-1.54479	-1.66003	0.33059	213.9823	231.4961	279.347
	H	-2.08116	-1.28127	-1.42758	354.9995	404.754	679.6052
	O	2.45551	-0.20966	0.17855	684.4813	1094.9094	1101.4528
	H	-0.95444	-0.09349	2.24263	1224.1684	1282.6898	1407.0993
	H	0.15407	0.67736	1.33746	1543.4243	1640.9424	1651.6076
	N	-0.00665	-0.16049	1.89093	1661.8498	1676.4634	1847.7331
	H	0.62177	-0.12851	2.68379	2436.3015	2977.2762	3068.8986
	N	0.07791	2.02864	-0.50073	3472.0503	3490.1192	3587.5717
	H	0.14058	2.98238	-0.16637	3605.1395	3623.7131	3627.3616
	H	-0.90149	1.76135	-0.48105			
	H	0.35931	2.04023	-1.47381			
PC^{AW}	C	-1.28703	-1.53376	0.41147	8.8431	28.7453	41.417
	O	-2.32918	-1.43198	-0.18061	65.8084	106.7717	119.5387
	O	1.57112	-1.2177	-0.22399	136.7998	151.1066	164.8309
	C	2.26816	-0.29623	-0.16802	187.2989	210.5811	241.5312
	H	-0.78374	-0.66414	0.85888	252.962	260.3174	378.1443
	H	-0.78773	-2.5086	0.5217	565.7562	673.5011	698.8074
	O	3.01446	0.58339	-0.1234	816.5955	1137.4076	1233.5213
	H	-0.61191	1.56873	0.20557	1281.8643	1408.9769	1547.6042
	H	0.76383	2.21732	0.54504	1641.4003	1673.9813	1676.0591
	N	-2.3979	1.60407	-0.2793	1842.5054	2439.2928	2979.3359

	H	-3.03195	2.05355	0.36937	3074.4549	3389.4059	3461.4021
	H	-2.65427	0.61962	-0.3296	3581.5715	3626.0731	3924.3587
	H	-2.56848	2.00764	-1.19207			
	O	0.31518	1.37346	0.46743			

AD-CI	C	0.54314	-1.17433	0.48282	25.8083	70.354	107.3503
	O	1.41319	-0.74159	-0.32128	121.5981	134.0678	163.4395
	O	1.93474	0.50414	-0.12338	189.4009	197.0742	222.3141
	H	0.22765	-0.55739	1.31714	306.2432	366.4305	472.3107
	H	0.1876	-2.17867	0.28475	535.0196	691.5261	893.2479
	H	-1.94489	0.12155	-0.03183	968.2758	1054.9786	1131.8687
	H	-2.02821	-1.24788	-0.96956	1255.7353	1440.1172	1646.5231
	N	-0.73445	1.83672	0.1089	1649.6306	1654.6903	1666.0183
	H	-1.03838	2.34792	-0.71893	1682.6655	3149.2106	3295.0145
	H	0.26072	1.62252	-0.02295	3421.4099	3455.1504	3568.0324
	H	-0.79391	2.4965	0.88357	3599.938	3620.427	3647.6744
	N	-2.47512	-0.74112	-0.20929			
	H	-2.44587	-1.32811	0.62084			

AW-CI	C	0.96046	1.10044	-0.26507	44.7271	63.2208	145.0964
	O	1.44975	0.19297	0.41132	188.1944	200.5158	229.437
	O	1.44164	-1.07512	-0.13779	238.5889	262.9622	286.8471
	H	0.57555	0.87943	-1.25312	456.5974	528.9997	588.141
	H	0.97272	2.08807	0.17339	727.0743	869.5983	903.8064
	H	-1.65677	0.35477	0.02532	1096.2569	1181.7452	1250.9185
	H	-2.16512	1.7183	0.59893	1443.9922	1641.1449	1672.2724
	N	-1.45908	-1.42273	0.00897	1672.8913	1682.9458	3156.2369
	H	-1.76826	-1.93124	0.82793	3216.2016	3301.4804	3348.2581
	H	-0.43915	-1.51495	-0.0449	3562.3567	3627.0299	3926.6606
	H	-1.85448	-1.88951	-0.79767			
	O	-1.5431	1.3386	-0.02382			

TS3^{AD}	O	-0.4514	-1.14617	-0.41939	-457.9353	49.461	62.5316
	O	-1.62415	-0.5407	-0.85078	76.6883	124.7415	152.3065
	C	-1.57986	0.70309	-0.60581	162.5104	175.847	182.0872

H	-0.63166	1.24293	-0.63432	238.5255	257.5119	269.4003
H	-2.55081	1.18535	-0.63144	335.0728	358.6645	447.0959
O	-1.02863	0.27257	1.36148	464.7283	584.1387	720.2909
C	-0.32483	-0.66519	1.23498	808.682	980.5137	1095.4389
H	3.42839	-1.42626	-0.28984	1143.8996	1186.3651	1266.2615
H	1.90057	-1.34077	-0.87433	1430.827	1578.3327	1641.6414
H	1.84725	1.06879	-0.21091	1654.1946	1663.9697	1689.9075
N	2.5287	-0.97974	-0.16513	1829.5942	3039.1503	3239.8587
H	2.14766	-1.29343	0.7211	3407.6641	3495.3173	3561.2514
N	1.32161	1.94513	-0.20616	3605.6399	3618.5486	3628.4583
H	1.85667	2.61949	-0.73944			
H	1.31139	2.2731	0.75274			
TS3^{AW}	O	-0.438965	-0.997095	-0.640343	-457.4872	54.2715	58.0861
	O	-1.571763	-0.26731	-0.971598	78.9549	125.2742	137.3359
	C	-1.519755	0.874096	-0.419319	173.2069	175.8595	230.0808
	H	-0.56304	1.371522	-0.276312	267.836	284.3197	313.6669
	H	-2.476642	1.381344	-0.374477	363.091	459.7525	529.5397
	O	-1.112634	-0.03919	1.398981	585.7662	717.7675	804.3276
	C	-0.413955	-0.937967	1.09387	819.8656	984.5723	1123.0935
	H	1.957661	-1.137015	-0.997027	1168.321	1266.4056	1429.4294
	H	2.079293	-1.336376	0.604893	1575.8263	1633.0012	1658.0499
	O	1.392146	1.776249	-0.03832	1672.4219	1834.6601	3097.1256
	H	1.849894	2.309583	0.613329	3258.3718	3380.0857	3494.8392
	H	1.861783	0.911773	-0.059651	3603.5662	3629.4716	3930.1598
	N	2.472122	-0.827255	-0.179826			
	H	3.438178	-1.108048	-0.289041			

Table S2: Bimolecular rate constant k_b in (cm^3 molecule^1 sec^1) for AM catalyzed channel corresponds to TS1 within temperature range 213-1000 K

Temp (K)	path A	path B	path C	total
213	3.51×10^{-21}	4.92×10^{-24}	2.72×10^{-22}	3.79×10^{-21}
216	4.25×10^{-21}	6.71×10^{-24}	3.14×10^{-22}	4.57×10^{-21}
219	5.12×10^{-21}	9.09×10^{-24}	3.62×10^{-22}	5.49×10^{-21}
224	6.90×10^{-21}	1.48×10^{-23}	4.56×10^{-22}	7.37×10^{-21}
235	1.28×10^{-20}	4.02×10^{-23}	7.33×10^{-22}	1.35×10^{-20}
250	2.73×10^{-20}	1.38×10^{-22}	1.32×10^{-21}	2.87×10^{-20}
259	4.13×10^{-20}	2.69×10^{-22}	1.83×10^{-21}	4.34×10^{-20}
265	5.37×10^{-20}	4.12×10^{-22}	2.24×10^{-21}	5.63×10^{-20}
278	9.14×10^{-20}	9.72×10^{-22}	3.41×10^{-21}	9.58×10^{-20}
280	9.89×10^{-20}	1.10×10^{-21}	3.63×10^{-21}	1.04×10^{-19}
290	1.44×10^{-19}	2.01×10^{-21}	4.88×10^{-21}	1.51×10^{-19}
298	1.91×10^{-19}	3.17×10^{-21}	6.12×10^{-21}	2.00×10^{-19}
300	2.04×10^{-19}	3.54×10^{-21}	6.46×10^{-21}	2.14×10^{-19}
310	2.85×10^{-19}	6.01×10^{-21}	8.42×10^{-21}	2.99×10^{-19}
320	3.89×10^{-19}	9.89×10^{-21}	1.08×10^{-20}	4.10×10^{-19}
330	5.22×10^{-19}	1.58×10^{-20}	1.37×10^{-20}	5.52×10^{-19}
350	9.00×10^{-19}	3.76×10^{-20}	2.14×10^{-20}	9.59×10^{-19}
375	1.65×10^{-18}	9.79×10^{-20}	3.52×10^{-20}	1.79×10^{-18}
400	2.84×10^{-18}	2.28×10^{-19}	5.52×10^{-20}	3.12×10^{-18}
425	4.61×10^{-18}	4.85×10^{-19}	8.30×10^{-20}	5.18×10^{-18}
450	7.14×10^{-18}	9.54×10^{-19}	1.20×10^{-19}	8.21×10^{-18}
475	1.06×10^{-17}	1.76×10^{-18}	1.70×10^{-19}	1.26×10^{-17}
500	1.53×10^{-17}	3.07×10^{-18}	2.33×10^{-19}	1.86×10^{-17}
550	2.92×10^{-17}	8.12×10^{-18}	4.11×10^{-19}	3.77×10^{-17}
600	5.10×10^{-17}	1.86×10^{-17}	6.78×10^{-19}	7.02×10^{-17}
650	8.30×10^{-17}	3.79×10^{-17}	1.06×10^{-18}	1.22×10^{-16}
700	1.28×10^{-16}	7.09×10^{-17}	1.58×10^{-18}	2.00×10^{-16}
750	1.88×10^{-16}	1.23×10^{-16}	2.28×10^{-18}	3.14×10^{-16}
800	2.67×10^{-16}	2.02×10^{-16}	3.19×10^{-18}	4.72×10^{-16}
850	3.67×10^{-16}	3.14×10^{-16}	4.34×10^{-18}	6.86×10^{-16}
900	4.92×10^{-16}	4.69×10^{-16}	5.78×10^{-18}	9.68×10^{-16}
950	6.45×10^{-16}	6.77×10^{-16}	7.56×10^{-18}	1.33×10^{-15}
1000	8.29×10^{-16}	9.49×10^{-16}	9.72×10^{-18}	1.79×10^{-15}

Table S3: Bimolecular rate constant k_b in (cm^3 molecule^1 sec^1) for AM catalyzed channel corresponds to TS2 within temperature range 213-1000 K

Temp (K)	path A	path B	path C	total
213	2.65×10^{-20}	3.71×10^{-23}	2.05×10^{-21}	2.85×10^{-20}
216	3.18×10^{-20}	5.03×10^{-23}	2.36×10^{-21}	3.43×10^{-20}
219	3.82×10^{-20}	6.79×10^{-23}	2.71×10^{-21}	4.10×10^{-20}
224	5.14×10^{-20}	1.10×10^{-22}	3.40×10^{-21}	5.49×10^{-20}
235	9.54×10^{-20}	3.00×10^{-22}	5.47×10^{-21}	1.01×10^{-19}
250	2.07×10^{-19}	1.05×10^{-21}	1.00×10^{-20}	2.18×10^{-19}
259	3.19×10^{-19}	2.08×10^{-21}	1.41×10^{-20}	3.35×10^{-19}
265	4.19×10^{-19}	3.21×10^{-21}	1.75×10^{-20}	4.40×10^{-19}
278	7.35×10^{-19}	7.81×10^{-21}	2.74×10^{-20}	7.70×10^{-19}
280	7.99×10^{-19}	8.90×10^{-21}	2.93×10^{-20}	8.37×10^{-19}
290	1.19×10^{-18}	1.67×10^{-20}	4.04×10^{-20}	1.25×10^{-18}
298	1.61×10^{-18}	2.68×10^{-20}	5.17×10^{-20}	1.69×10^{-18}
300	1.74×10^{-18}	3.01×10^{-20}	5.49×10^{-20}	1.82×10^{-18}
310	2.48×10^{-18}	5.24×10^{-20}	7.35×10^{-20}	2.61×10^{-18}
320	3.49×10^{-18}	8.87×10^{-20}	9.70×10^{-20}	3.67×10^{-18}
330	4.81×10^{-18}	1.46×10^{-19}	1.26×10^{-19}	5.08×10^{-18}
350	8.76×10^{-18}	3.65×10^{-19}	2.08×10^{-19}	9.33×10^{-18}
375	1.72×10^{-17}	1.02×10^{-18}	3.66×10^{-19}	1.86×10^{-17}
400	3.14×10^{-17}	2.53×10^{-18}	6.12×10^{-19}	3.46×10^{-17}
425	5.42×10^{-17}	5.71×10^{-18}	9.77×10^{-19}	6.09×10^{-17}
450	8.89×10^{-17}	1.19×10^{-17}	1.50×10^{-18}	1.02×10^{-16}
475	1.40×10^{-16}	2.31×10^{-17}	2.23×10^{-18}	1.65×10^{-16}
500	2.12×10^{-16}	4.24×10^{-17}	3.22×10^{-18}	2.57×10^{-16}
550	4.43×10^{-16}	1.23×10^{-16}	6.24×10^{-18}	5.73×10^{-16}
600	8.40×10^{-16}	3.06×10^{-16}	1.12×10^{-17}	1.16×10^{-15}
650	1.47×10^{-15}	6.72×10^{-16}	1.88×10^{-17}	2.16×10^{-15}
700	2.41×10^{-15}	1.34×10^{-15}	2.99×10^{-17}	3.78×10^{-15}
750	3.76×10^{-15}	2.46×10^{-15}	4.56×10^{-17}	6.27×10^{-15}
800	5.63×10^{-15}	4.24×10^{-15}	6.71×10^{-17}	9.93×10^{-15}
850	8.10×10^{-15}	6.92×10^{-15}	9.57×10^{-17}	1.51×10^{-14}
900	1.13×10^{-14}	1.08×10^{-14}	1.33×10^{-16}	2.23×10^{-14}
950	1.54×10^{-14}	1.62×10^{-14}	1.81×10^{-16}	3.18×10^{-14}
1000	2.05×10^{-14}	2.35×10^{-14}	2.40×10^{-16}	4.42×10^{-14}

Table S4: Bimolecular rate constant k_b in (cm^3 molecule^1 sec^1) for AM catalyzed channel corresponds to TS3, within temperature range 213-1000 K

Temp (K)	path A	path B	path C	total
213	4.27×10^{-24}	5.98×10^{-27}	3.30×10^{-25}	4.60×10^{-24}
216	5.60×10^{-24}	8.85×10^{-27}	4.14×10^{-25}	6.03×10^{-24}
219	7.31×10^{-24}	1.30×10^{-26}	5.18×10^{-25}	7.84×10^{-24}
224	1.12×10^{-23}	2.40×10^{-26}	7.41×10^{-25}	1.20×10^{-23}
235	2.70×10^{-23}	8.51×10^{-26}	1.55×10^{-24}	2.87×10^{-23}
250	7.96×10^{-23}	4.02×10^{-25}	3.86×10^{-24}	8.38×10^{-23}
259	1.44×10^{-22}	9.37×10^{-25}	6.35×10^{-24}	1.51×10^{-22}
265	2.09×10^{-22}	1.60×10^{-24}	8.71×10^{-24}	2.19×10^{-22}
278	4.43×10^{-22}	4.71×10^{-24}	1.65×10^{-23}	4.65×10^{-22}
280	4.95×10^{-22}	5.52×10^{-24}	1.82×10^{-23}	5.19×10^{-22}
290	8.41×10^{-22}	1.18×10^{-23}	2.85×10^{-23}	8.81×10^{-22}
298	1.25×10^{-21}	2.08×10^{-23}	4.01×10^{-23}	1.31×10^{-21}
300	1.38×10^{-21}	2.39×10^{-23}	4.36×10^{-23}	1.45×10^{-21}
310	2.20×10^{-21}	4.64×10^{-23}	6.51×10^{-23}	2.31×10^{-21}
320	3.41×10^{-21}	8.68×10^{-23}	9.48×10^{-23}	3.59×10^{-21}
330	5.16×10^{-21}	1.56×10^{-22}	1.35×10^{-22}	5.45×10^{-21}
350	1.10×10^{-20}	4.60×10^{-22}	2.62×10^{-22}	1.18×10^{-20}
375	2.57×10^{-20}	1.52×10^{-21}	5.48×10^{-22}	2.78×10^{-20}
400	5.43×10^{-20}	4.37×10^{-21}	1.06×10^{-21}	5.97×10^{-20}
425	1.06×10^{-19}	1.11×10^{-20}	1.91×10^{-21}	1.19×10^{-19}
450	1.93×10^{-19}	2.58×10^{-20}	3.25×10^{-21}	2.22×10^{-19}
475	3.32×10^{-19}	5.49×10^{-20}	5.30×10^{-21}	3.92×10^{-19}
500	5.44×10^{-19}	1.09×10^{-19}	8.28×10^{-21}	6.61×10^{-19}
550	1.30×10^{-18}	3.62×10^{-19}	1.83×10^{-20}	1.68×10^{-18}
600	2.74×10^{-18}	9.98×10^{-19}	3.65×10^{-20}	3.77×10^{-18}
650	5.23×10^{-18}	2.39×10^{-18}	6.67×10^{-20}	7.69×10^{-18}
700	9.23×10^{-18}	5.12×10^{-18}	1.14×10^{-19}	1.45×10^{-17}
750	1.53×10^{-17}	1.00×10^{-17}	1.85×10^{-19}	2.55×10^{-17}
800	2.41×10^{-17}	1.82×10^{-17}	2.87×10^{-19}	4.26×10^{-17}
850	3.63×10^{-17}	3.11×10^{-17}	4.29×10^{-19}	6.78×10^{-17}
900	5.29×10^{-17}	5.04×10^{-17}	6.21×10^{-19}	1.04×10^{-16}
950	7.46×10^{-17}	7.83×10^{-17}	8.73×10^{-19}	1.54×10^{-16}
1000	1.02×10^{-16}	1.17×10^{-16}	1.20×10^{-18}	2.21×10^{-16}

Table S5: Bimolecular rate constant k_b in (cm^3 molecule^1 sec^1) for AM catalyzed channel corresponds to TS2′, within temperature range 213-1000 K

Temp (K)	path A	path B	path C	total
213	4.32×10^{-17}	6.05×10^{-20}	3.34×10^{-18}	4.66×10^{-17}
216	4.29×10^{-17}	6.77×10^{-20}	3.17×10^{-18}	4.61×10^{-17}
219	4.26×10^{-17}	7.56×10^{-20}	3.02×10^{-18}	4.57×10^{-17}
224	4.21×10^{-17}	9.02×10^{-20}	2.78×10^{-18}	4.50×10^{-17}
235	4.10×10^{-17}	1.29×10^{-19}	2.35×10^{-18}	4.35×10^{-17}
250	3.95×10^{-17}	2.00×10^{-19}	1.92×10^{-18}	4.17×10^{-17}
259	3.87×10^{-17}	2.52×10^{-19}	1.71×10^{-18}	4.06×10^{-17}
265	3.81×10^{-17}	2.92×10^{-19}	1.59×10^{-18}	4.00×10^{-17}
278	3.69×10^{-17}	3.93×10^{-19}	1.38×10^{-18}	3.87×10^{-17}
280	3.68×10^{-17}	4.10×10^{-19}	1.35×10^{-18}	3.85×10^{-17}
290	3.59×10^{-17}	5.02×10^{-19}	1.22×10^{-18}	3.76×10^{-17}
298	3.52×10^{-17}	5.85×10^{-19}	1.13×10^{-18}	3.69×10^{-17}
300	3.51×10^{-17}	6.07×10^{-19}	1.11×10^{-18}	3.68×10^{-17}
310	3.43×10^{-17}	7.24×10^{-19}	1.01×10^{-18}	3.60×10^{-17}
320	3.35×10^{-17}	8.53×10^{-19}	9.33×10^{-19}	3.53×10^{-17}
330	3.28×10^{-17}	9.94×10^{-19}	8.62×10^{-19}	3.47×10^{-17}
350	3.15×10^{-17}	1.31×10^{-18}	7.48×10^{-19}	3.36×10^{-17}
375	3.01×10^{-17}	1.78×10^{-18}	6.41×10^{-19}	3.25×10^{-17}
400	2.89×10^{-17}	2.32×10^{-18}	5.62×10^{-19}	3.17×10^{-17}
425	2.78×10^{-17}	2.93×10^{-18}	5.01×10^{-19}	3.13×10^{-17}
450	2.69×10^{-17}	3.60×10^{-18}	4.55×10^{-19}	3.10×10^{-17}
475	2.62×10^{-17}	4.34×10^{-18}	4.18×10^{-19}	3.10×10^{-17}
500	2.56×10^{-17}	5.13×10^{-18}	3.90×10^{-19}	3.11×10^{-17}
550	2.47×10^{-17}	6.87×10^{-18}	3.48×10^{-19}	3.20×10^{-17}
600	2.42×10^{-17}	8.82×10^{-18}	3.22×10^{-19}	3.34×10^{-17}
650	2.40×10^{-17}	1.10×10^{-17}	3.06×10^{-19}	3.53×10^{-17}
700	2.31×10^{-17}	1.28×10^{-17}	2.86×10^{-19}	3.62×10^{-17}
750	2.42×10^{-17}	1.58×10^{-17}	2.93×10^{-19}	4.03×10^{-17}
800	2.46×10^{-17}	1.85×10^{-17}	2.93×10^{-19}	4.34×10^{-17}
850	2.51×10^{-17}	2.14×10^{-17}	2.96×10^{-19}	4.68×10^{-17}
900	2.58×10^{-17}	2.45×10^{-17}	3.02×10^{-19}	5.06×10^{-17}
950	2.65×10^{-17}	2.79×10^{-17}	3.11×10^{-19}	5.47×10^{-17}
1000	2.75×10^{-17}	3.14×10^{-17}	3.22×10^{-19}	5.92×10^{-17}

Table S6: Relative energies (ΔE) including ZPE in kcal mol^1 for all the species with respect to the isolated reactants at the CCSD(T)/aug-cc-pVTZ level of theory in the presence of AM as a catalyst.

Species	ΔE
CI-CO	-1.48
PC$_{uncat}$	-121.43
RC$_{cat}$	-6.98
TS1$_{cat}$	4.69
TS2$_{cat}$	4.99
TS3$_{cat}$	7.42
PC$_{cat}$	-123.25
Product	-119.22
CI-AM	-4.94
AM-CO	-0.41

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 AM catalyzed channel

Temp (K)	k$_{eq1}^{pathA}$	k$_{eq1}^{pathB}$	k$_{eq1}^{pathC}$	[CI]	[CO]	[AM]	[CI-CO]	[CI-AM]	[AM-CO]
280	1.29×10^{-24}	1.16×10^{-22}	3.52×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.62×10^{11}	6.46×10^{-7}	1.52×10^{-6}	9.22×10^{1}
290	1.21×10^{-24}	8.63×10^{-23}	3.56×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.53×10^{11}	6.04×10^{-7}	1.09×10^{-6}	9.00×10^{1}
298	1.15×10^{-24}	6.93×10^{-23}	3.59×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.46×10^{11}	5.76×10^{-7}	8.52×10^{-7}	8.83×10^{1}
300	1.14×10^{-24}	6.57×10^{-23}	3.60×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.44×10^{11}	5.69×10^{-7}	8.02×10^{-7}	8.78×10^{1}
310	1.08×10^{-24}	5.11×10^{-23}	3.65×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.36×10^{11}	5.39×10^{-7}	6.03×10^{-7}	8.60×10^{1}
320	1.03×10^{-24}	4.04×10^{-23}	3.70×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.29×10^{11}	5.14×10^{-7}	4.63×10^{-7}	8.46×10^{1}

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 FA catalyzed channel

Temp (K)	k$_{eq1}^{pathA}$	k$_{eq1}^{pathB}$	k$_{eq1}^{pathC}$	[CI]	[CO]	[FA]	[CI-CO]	[CI-FA]	[FA-CO]
280	1.29×10^{-24}	7.25×10^{-22}	1.97×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.62×10^{11}	6.46×10^{-7}	9.49×10^{-6}	5.16×10^{1}
290	1.21×10^{-24}	5.28×10^{-22}	1.91×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.53×10^{11}	6.04×10^{-7}	6.68×10^{-6}	4.84×10^{1}
298	1.15×10^{-24}	4.17×10^{-22}	1.88×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.46×10^{11}	5.76×10^{-7}	5.13×10^{-6}	4.62×10^{1}
300	1.14×10^{-24}	3.94×10^{-22}	1.87×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.44×10^{11}	5.69×10^{-7}	4.81×10^{-6}	4.56×10^{1}
310	1.08×10^{-24}	3.01×10^{-22}	1.83×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.36×10^{11}	5.39×10^{-7}	3.55×10^{-6}	4.33×10^{1}
320	1.03×10^{-24}	2.34×10^{-22}	1.80×10^{-23}	5.00×10^{4}	1.00×10^{13}	2.29×10^{11}	5.14×10^{-7}	2.68×10^{-6}	4.13×10^{1}

Table S9: Termolecular rate constant k_t in (cm^6 molecule^{-2} sec^{-1}) for AM catalyzed channel corresponds to TS1 within the temperature range of 213-1000K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kumi	kt	keq1	keq2	kumi	kt	keq1	keq2	kumi	kt
213	2.64×10^{-24}	3.48×10^{-21}	1.01	1.00×10^{-44}	1.88×10^{-21}	4.88×10^{-24}	1.01	1.00×10^{-44}	3.41×10^{-23}	2.69×10^{-22}	1.01	1.00×10^{-44}
216	2.52×10^{-24}	2.93×10^{-21}	1.45	1.15×10^{-44}	1.60×10^{-21}	4.62×10^{-24}	1.45	1.15×10^{-44}	3.41×10^{-23}	2.17×10^{-22}	1.45	1.15×10^{-44}
219	2.41×10^{-24}	2.47×10^{-21}	2.07	1.32×10^{-44}	1.36×10^{-21}	4.39×10^{-24}	2.07	1.32×10^{-44}	3.41×10^{-23}	1.75×10^{-22}	2.07	1.32×10^{-44}
224	2.25×10^{-24}	1.89×10^{-21}	3.65	1.66×10^{-44}	1.05×10^{-21}	4.05×10^{-24}	3.65	1.66×10^{-44}	3.40×10^{-23}	1.25×10^{-22}	3.65	1.66×10^{-44}
235	1.96×10^{-24}	1.09×10^{-21}	1.17×10^{1}	2.65×10^{-44}	6.21×10^{-22}	3.44×10^{-24}	1.17×10^{1}	2.65×10^{-44}	3.41×10^{-23}	6.26×10^{-23}	1.17×10^{1}	2.65×10^{-44}
250	1.66×10^{-24}	5.61×10^{-22}	4.86×10^{1}	4.78×10^{-44}	3.29×10^{-22}	2.83×10^{-24}	4.86×10^{1}	4.78×10^{-44}	3.43×10^{-23}	2.72×10^{-23}	4.86×10^{1}	4.78×10^{-44}
259	1.53×10^{-24}	3.92×10^{-22}	1.05×10^{2}	6.62×10^{-44}	2.34×10^{-22}	2.56×10^{-24}	1.05×10^{2}	6.62×10^{-44}	3.45×10^{-23}	1.74×10^{-23}	1.05×10^{2}	6.62×10^{-44}
265	1.45×10^{-24}	3.14×10^{-22}	1.71×10^{2}	8.17×10^{-44}	1.89×10^{-22}	2.41×10^{-24}	1.71×10^{2}	8.17×10^{-44}	3.47×10^{-23}	1.31×10^{-23}	1.71×10^{2}	8.17×10^{-44}
278	1.31×10^{-24}	2.01×10^{-22}	4.56×10^{2}	1.26×10^{-43}	1.23×10^{-22}	2.13×10^{-24}	4.56×10^{2}	1.26×10^{-43}	3.51×10^{-23}	7.48×10^{-24}	4.56×10^{2}	1.26×10^{-43}
280	1.29×10^{-24}	1.88×10^{-22}	5.26×10^{2}	1.34×10^{-43}	1.16×10^{-22}	2.10×10^{-24}	5.26×10^{2}	1.34×10^{-43}	3.52×10^{-23}	6.90×10^{-24}	5.26×10^{2}	1.34×10^{-43}
290	1.21×10^{-24}	1.38×10^{-22}	1.04×10^{3}	1.82×10^{-43}	8.63×10^{-23}	1.93×10^{-24}	1.04×10^{3}	1.82×10^{-43}	3.56×10^{-23}	4.69×10^{-24}	1.04×10^{3}	1.82×10^{-43}
298	1.15×10^{-24}	1.10×10^{-22}	1.74×10^{3}	2.30×10^{-43}	6.93×10^{-23}	1.82×10^{-24}	1.74×10^{3}	2.30×10^{-43}	3.59×10^{-23}	3.52×10^{-24}	1.74×10^{3}	2.30×10^{-43}
300	1.14×10^{-24}	1.04×10^{-22}	1.97×10^{3}	2.44×10^{-43}	6.57×10^{-23}	1.80×10^{-24}	1.97×10^{3}	2.44×10^{-43}	3.60×10^{-23}	3.28×10^{-24}	1.97×10^{3}	2.44×10^{-43}
310	1.08×10^{-24}	7.97×10^{-23}	3.57×10^{3}	3.22×10^{-43}	5.11×10^{-23}	1.68×10^{-24}	3.57×10^{3}	3.22×10^{-43}	3.65×10^{-23}	2.36×10^{-24}	3.57×10^{3}	3.22×10^{-43}
320	1.03×10^{-24}	6.23×10^{-23}	6.24×10^{3}	4.21×10^{-43}	4.04×10^{-23}	1.59×10^{-24}	6.24×10^{3}	4.21×10^{-43}	3.70×10^{-23}	1.73×10^{-24}	6.24×10^{3}	4.21×10^{-43}
330	9.85×10^{-25}	4.96×10^{-23}	1.05×10^{4}	5.44×10^{-43}	3.25×10^{-23}	1.50×10^{-24}	1.05×10^{4}	5.44×10^{-43}	3.75×10^{-23}	1.30×10^{-24}	1.05×10^{4}	5.44×10^{-43}
350	9.16×10^{-25}	3.29×10^{-23}	2.74×10^{4}	8.79×10^{-43}	2.20×10^{-23}	1.37×10^{-24}	2.74×10^{4}	8.79×10^{-43}	3.86×10^{-23}	7.81×10^{-25}	2.74×10^{4}	8.79×10^{-43}
375	8.55×10^{-25}	2.12×10^{-23}	7.81×10^{4}	1.53×10^{-42}	1.44×10^{-23}	1.25×10^{-24}	7.81×10^{4}	1.53×10^{-42}	4.01×10^{-23}	4.51×10^{-25}	7.81×10^{4}	1.53×10^{-42}
400	8.13×10^{-25}	1.45×10^{-23}	1.95×10^{5}	2.54×10^{-42}	1.01×10^{-23}	1.17×10^{-24}	1.95×10^{5}	2.54×10^{-42}	4.18×10^{-23}	2.83×10^{-25}	1.95×10^{5}	2.54×10^{-42}
425	7.84×10^{-25}	1.05×10^{-23}	4.38×10^{5}	4.06×10^{-42}	7.44×10^{-24}	1.11×10^{-24}	4.38×10^{5}	4.06×10^{-42}	4.35×10^{-23}	1.90×10^{-25}	4.38×10^{5}	4.06×10^{-42}
450	7.65×10^{-25}	7.98×10^{-24}	8.95×10^{5}	6.28×10^{-42}	5.72×10^{-24}	1.07×10^{-24}	8.95×10^{5}	6.28×10^{-42}	4.53×10^{-23}	1.35×10^{-25}	8.95×10^{5}	6.28×10^{-42}
475	7.54×10^{-25}	6.27×10^{-24}	1.70×10^{6}	9.46×10^{-42}	4.56×10^{-24}	1.04×10^{-24}	1.70×10^{6}	9.46×10^{-42}	4.72×10^{-23}	1.00×10^{-25}	1.70×10^{6}	9.46×10^{-42}
500	7.48×10^{-25}	5.08×10^{-24}	3.01×10^{6}	1.39×10^{-41}	3.74×10^{-24}	1.02×10^{-24}	3.01×10^{6}	1.39×10^{-41}	4.92×10^{-23}	7.73×10^{-26}	3.01×10^{6}	1.39×10^{-41}
550	7.52×10^{-25}	3.60×10^{-24}	8.11×10^{6}	2.84×10^{-41}	2.70×10^{-24}	1.00×10^{-24}	8.11×10^{6}	2.84×10^{-41}	5.34×10^{-23}	5.07×10^{-26}	8.11×10^{6}	2.84×10^{-41}
600	7.68×10^{-25}	2.76×10^{-24}	1.85×10^{7}	5.39×10^{-41}	2.11×10^{-24}	1.01×10^{-24}	1.85×10^{7}	5.39×10^{-41}	5.77×10^{-23}	3.67×10^{-26}	1.85×10^{7}	5.39×10^{-41}
650	7.95×10^{-25}	2.24×10^{-24}	3.70×10^{7}	9.70×10^{-41}	1.74×10^{-24}	1.03×10^{-24}	3.70×10^{7}	9.70×10^{-41}	6.23×10^{-23}	2.86×10^{-26}	3.70×10^{7}	9.70×10^{-41}
700	8.30×10^{-25}	1.90×10^{-24}	6.71×10^{7}	1.66×10^{-40}	1.50×10^{-24}	1.06×10^{-24}	6.71×10^{7}	1.66×10^{-40}	6.71×10^{-23}	2.36×10^{-26}	6.71×10^{7}	1.66×10^{-40}
750	8.72×10^{-25}	1.68×10^{-24}	1.12×10^{8}	2.73×10^{-40}	1.33×10^{-24}	1.10×10^{-24}	1.12×10^{8}	2.73×10^{-40}	7.20×10^{-23}	2.03×10^{-26}	1.12×10^{8}	2.73×10^{-40}
800	9.19×10^{-25}	1.52×10^{-24}	1.76×10^{8}	4.34×10^{-40}	1.22×10^{-24}	1.14×10^{-24}	1.76×10^{8}	4.34×10^{-40}	7.71×10^{-23}	1.81×10^{-26}	1.76×10^{8}	4.34×10^{-40}
850	9.72×10^{-25}	1.40×10^{-24}	2.62×10^{8}	6.66×10^{-40}	1.14×10^{-24}	1.20×10^{-24}	2.62×10^{8}	6.66×10^{-40}	8.23×10^{-23}	1.66×10^{-26}	2.62×10^{8}	6.66×10^{-40}
900	1.03×10^{-24}	1.32×10^{-24}	3.73×10^{8}	9.97×10^{-40}	1.08×10^{-24}	1.26×10^{-24}	3.73×10^{8}	9.97×10^{-40}	8.77×10^{-23}	1.55×10^{-26}	3.73×10^{8}	9.97×10^{-40}
950	1.09×10^{-24}	1.26×10^{-24}	5.10×10^{8}	1.45×10^{-39}	1.04×10^{-24}	1.33×10^{-24}	5.10×10^{8}	1.45×10^{-39}	9.32×10^{-23}	1.48×10^{-26}	5.10×10^{8}	1.45×10^{-39}
1000	1.16×10^{-24}	1.22×10^{-24}	6.78×10^{8}	2.07×10^{-39}	1.01×10^{-24}	1.40×10^{-24}	6.78×10^{8}	2.07×10^{-39}	9.89×10^{-23}	1.43×10^{-26}	6.78×10^{8}	2.07×10^{-39}

Table S10: Termolecular rate constant k_t in (cm^6 molecule^{-2} sec^{-1}) for AM catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1000K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	2.64×10^{-24}	3.48×10^{-21}	7.60	7.53×10^{-44}	1.88×10^{-21}	4.88×10^{-24}	7.60	7.53×10^{-44}	3.41×10^{-23}	2.69×10^{-22}	7.60	7.53×10^{-44}
216	2.52×10^{-24}	2.93×10^{-21}	1.09×10^{1}	8.63×10^{-44}	1.60×10^{-21}	4.62×10^{-24}	1.09×10^{1}	8.63×10^{-44}	3.41×10^{-23}	2.17×10^{-22}	1.09×10^{1}	8.63×10^{-44}
219	2.41×10^{-24}	2.47×10^{-21}	1.55×10^{1}	9.89×10^{-44}	1.36×10^{-21}	4.39×10^{-24}	1.55×10^{1}	9.89×10^{-44}	3.41×10^{-23}	1.75×10^{-22}	1.55×10^{1}	9.89×10^{-44}
224	2.25×10^{-24}	1.89×10^{-21}	2.72×10^{1}	1.24×10^{-43}	1.05×10^{-21}	4.05×10^{-24}	2.72×10^{1}	1.24×10^{-43}	3.40×10^{-23}	1.25×10^{-22}	2.72×10^{1}	1.24×10^{-43}
235	1.96×10^{-24}	1.09×10^{-21}	8.75×10^{1}	1.98×10^{-43}	6.21×10^{-22}	3.44×10^{-24}	8.75×10^{1}	1.98×10^{-43}	3.41×10^{-23}	6.26×10^{-23}	8.75×10^{1}	1.98×10^{-43}
250	1.66×10^{-24}	5.61×10^{-22}	3.69×10^{2}	3.63×10^{-43}	3.29×10^{-22}	2.83×10^{-24}	3.69×10^{2}	3.63×10^{-43}	3.43×10^{-23}	2.72×10^{-23}	3.69×10^{2}	3.63×10^{-43}
259	1.53×10^{-24}	3.92×10^{-22}	8.12×10^{2}	5.11×10^{-43}	2.34×10^{-22}	2.56×10^{-24}	8.12×10^{2}	5.11×10^{-43}	3.45×10^{-23}	1.74×10^{-23}	8.12×10^{2}	5.11×10^{-43}
265	1.45×10^{-24}	3.14×10^{-22}	1.34×10^{3}	6.38×10^{-43}	1.89×10^{-22}	2.41×10^{-24}	1.34×10^{3}	6.38×10^{-43}	3.47×10^{-23}	1.31×10^{-23}	1.34×10^{3}	6.38×10^{-43}
278	1.31×10^{-24}	2.01×10^{-22}	3.67×10^{3}	1.01×10^{-42}	1.23×10^{-22}	2.13×10^{-24}	3.67×10^{3}	1.01×10^{-42}	3.51×10^{-23}	7.48×10^{-24}	3.67×10^{3}	1.01×10^{-42}
280	1.29×10^{-24}	1.88×10^{-22}	4.25×10^{3}	1.08×10^{-42}	1.16×10^{-22}	2.10×10^{-24}	4.25×10^{3}	1.08×10^{-42}	3.52×10^{-23}	6.90×10^{-24}	4.25×10^{3}	1.08×10^{-42}
290	1.21×10^{-24}	1.38×10^{-22}	8.63×10^{3}	1.51×10^{-42}	8.63×10^{-23}	1.93×10^{-24}	8.63×10^{3}	1.51×10^{-42}	3.56×10^{-23}	4.69×10^{-24}	8.63×10^{3}	1.51×10^{-42}
298	1.15×10^{-24}	1.10×10^{-22}	1.47×10^{4}	1.95×10^{-42}	6.93×10^{-23}	1.82×10^{-24}	1.47×10^{4}	1.95×10^{-42}	3.59×10^{-23}	3.52×10^{-24}	1.47×10^{4}	1.95×10^{-42}
300	1.14×10^{-24}	1.04×10^{-22}	1.67×10^{4}	2.07×10^{-42}	6.57×10^{-23}	1.80×10^{-24}	1.67×10^{4}	2.07×10^{-42}	3.60×10^{-23}	3.28×10^{-24}	1.67×10^{4}	2.07×10^{-42}
310	1.08×10^{-24}	7.97×10^{-23}	3.12×10^{4}	2.81×10^{-42}	5.11×10^{-23}	1.68×10^{-24}	3.12×10^{4}	2.81×10^{-42}	3.65×10^{-23}	2.36×10^{-24}	3.12×10^{4}	2.81×10^{-42}
320	1.03×10^{-24}	6.23×10^{-23}	5.59×10^{4}	3.78×10^{-42}	4.04×10^{-23}	1.59×10^{-24}	5.59×10^{4}	3.78×10^{-42}	3.70×10^{-23}	1.73×10^{-24}	5.59×10^{4}	3.78×10^{-42}
330	9.85×10^{-25}	4.96×10^{-23}	9.70×10^{4}	5.01×10^{-42}	3.25×10^{-23}	1.50×10^{-24}	9.70×10^{4}	5.01×10^{-42}	3.75×10^{-23}	1.30×10^{-24}	9.70×10^{4}	5.01×10^{-42}
350	9.16×10^{-25}	3.29×10^{-23}	2.66×10^{5}	8.55×10^{-42}	2.20×10^{-23}	1.37×10^{-24}	2.66×10^{5}	8.55×10^{-42}	3.86×10^{-23}	7.81×10^{-25}	2.66×10^{5}	8.55×10^{-42}
375	8.55×10^{-25}	2.12×10^{-23}	8.12×10^{5}	1.59×10^{-41}	1.44×10^{-23}	1.25×10^{-24}	8.12×10^{5}	1.59×10^{-41}	4.01×10^{-23}	4.51×10^{-25}	8.12×10^{5}	1.59×10^{-41}
400	8.13×10^{-25}	1.45×10^{-23}	2.16×10^{6}	2.81×10^{-41}	1.01×10^{-23}	1.17×10^{-24}	2.16×10^{6}	2.81×10^{-41}	4.18×10^{-23}	2.83×10^{-25}	2.16×10^{6}	2.81×10^{-41}
425	7.84×10^{-25}	1.05×10^{-23}	5.15×10^{6}	4.77×10^{-41}	7.44×10^{-24}	1.11×10^{-24}	5.15×10^{6}	4.77×10^{-41}	4.35×10^{-23}	1.90×10^{-25}	5.15×10^{6}	4.77×10^{-41}
450	7.65×10^{-25}	7.98×10^{-24}	1.12×10^{7}	7.82×10^{-41}	5.72×10^{-24}	1.07×10^{-24}	1.12×10^{7}	7.82×10^{-41}	4.53×10^{-23}	1.35×10^{-25}	1.12×10^{7}	7.82×10^{-41}
475	7.54×10^{-25}	6.27×10^{-24}	2.23×10^{7}	1.24×10^{-40}	4.56×10^{-24}	1.04×10^{-24}	2.23×10^{7}	1.24×10^{-40}	4.72×10^{-23}	1.00×10^{-25}	2.23×10^{7}	1.24×10^{-40}
500	7.48×10^{-25}	5.08×10^{-24}	4.17×10^{7}	1.93×10^{-40}	3.74×10^{-24}	1.02×10^{-24}	4.17×10^{7}	1.93×10^{-40}	4.92×10^{-23}	7.73×10^{-26}	4.17×10^{7}	1.93×10^{-40}
550	7.52×10^{-25}	3.60×10^{-24}	1.23×10^{8}	4.30×10^{-40}	2.70×10^{-24}	1.00×10^{-24}	1.23×10^{8}	4.30×10^{-40}	5.34×10^{-23}	5.07×10^{-26}	1.23×10^{8}	4.30×10^{-40}
600	7.68×10^{-25}	2.76×10^{-24}	3.04×10^{8}	8.89×10^{-40}	2.11×10^{-24}	1.01×10^{-24}	3.04×10^{8}	8.89×10^{-40}	5.77×10^{-23}	3.67×10^{-26}	3.04×10^{8}	8.89×10^{-40}
650	7.95×10^{-25}	2.24×10^{-24}	6.56×10^{8}	1.72×10^{-39}	1.74×10^{-24}	1.03×10^{-24}	6.56×10^{8}	1.72×10^{-39}	6.23×10^{-23}	2.86×10^{-26}	6.56×10^{8}	1.72×10^{-39}
700	8.30×10^{-25}	1.90×10^{-24}	1.27×10^{9}	3.14×10^{-39}	1.50×10^{-24}	1.06×10^{-24}	1.27×10^{9}	3.14×10^{-39}	6.71×10^{-23}	2.36×10^{-26}	1.27×10^{9}	3.14×10^{-39}
750	8.72×10^{-25}	1.68×10^{-24}	2.25×10^{9}	5.47×10^{-39}	1.33×10^{-24}	1.10×10^{-24}	2.25×10^{9}	5.47×10^{-39}	7.20×10^{-23}	2.03×10^{-26}	2.25×10^{9}	5.47×10^{-39}
800	9.19×10^{-25}	1.52×10^{-24}	3.71×10^{9}	9.13×10^{-39}	1.22×10^{-24}	1.14×10^{-24}	3.71×10^{9}	9.13×10^{-39}	7.71×10^{-23}	1.81×10^{-26}	3.71×10^{9}	9.13×10^{-39}
850	9.72×10^{-25}	1.40×10^{-24}	5.78×10^{9}	1.47×10^{-38}	1.14×10^{-24}	1.20×10^{-24}	5.78×10^{9}	1.47×10^{-38}	8.23×10^{-23}	1.66×10^{-26}	5.78×10^{9}	1.47×10^{-38}
900	1.03×10^{-24}	1.32×10^{-24}	8.57×10^{9}	2.29×10^{-38}	1.08×10^{-24}	1.26×10^{-24}	8.57×10^{9}	2.29×10^{-38}	8.77×10^{-23}	1.55×10^{-26}	8.57×10^{9}	2.29×10^{-38}
950	1.09×10^{-24}	1.26×10^{-24}	1.22×10^{10}	3.47×10^{-38}	1.04×10^{-24}	1.33×10^{-24}	1.22×10^{10}	3.47×10^{-38}	9.32×10^{-23}	1.48×10^{-26}	1.22×10^{10}	3.47×10^{-38}
1000	1.16×10^{-24}	1.22×10^{-24}	1.68×10^{10}	5.12×10^{-38}	1.01×10^{-24}	1.40×10^{-24}	1.68×10^{10}	5.12×10^{-38}	9.89×10^{-23}	1.43×10^{-26}	1.68×10^{10}	5.12×10^{-38}

Table S11: Termolecular rate constant k_t in (cm^6 molecule^{-2} sec^{-1}) for AM catalyzed channel corresponds to TS3 within the temperature range of 213-1000K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	2.64×10^{-24}	3.48×10^{-21}	1.23×10^{-3}	1.21×10^{-47}	1.88×10^{-21}	4.88×10^{-24}	1.23×10^{-3}	1.21×10^{-47}	3.41×10^{-23}	2.69×10^{-22}	1.23×10^{-3}	1.21×10^{-47}
216	2.52×10^{-24}	2.93×10^{-21}	1.91×10^{-3}	1.52×10^{-47}	1.60×10^{-21}	4.62×10^{-24}	1.91×10^{-3}	1.52×10^{-47}	3.41×10^{-23}	2.17×10^{-22}	1.91×10^{-3}	1.52×10^{-47}
219	2.41×10^{-24}	2.47×10^{-21}	2.95×10^{-3}	1.89×10^{-47}	1.36×10^{-21}	4.39×10^{-24}	2.95×10^{-3}	1.89×10^{-47}	3.41×10^{-23}	1.75×10^{-22}	2.95×10^{-3}	1.89×10^{-47}
224	2.25×10^{-24}	1.89×10^{-21}	5.93×10^{-3}	2.69×10^{-47}	1.05×10^{-21}	4.05×10^{-24}	5.93×10^{-3}	2.69×10^{-47}	3.40×10^{-23}	1.25×10^{-22}	5.93×10^{-3}	2.69×10^{-47}
235	1.96×10^{-24}	1.09×10^{-21}	2.48×10^{-2}	5.61×10^{-47}	6.21×10^{-22}	3.44×10^{-24}	2.48×10^{-2}	5.61×10^{-47}	3.41×10^{-23}	6.26×10^{-23}	2.48×10^{-2}	5.61×10^{-47}
250	1.66×10^{-24}	5.61×10^{-22}	1.42×10^{-1}	1.39×10^{-46}	3.29×10^{-22}	2.83×10^{-24}	1.42×10^{-1}	1.39×10^{-46}	3.43×10^{-23}	2.72×10^{-23}	1.42×10^{-1}	1.39×10^{-46}
259	1.53×10^{-24}	3.92×10^{-22}	3.66×10^{-1}	2.30×10^{-46}	2.34×10^{-22}	2.56×10^{-24}	3.66×10^{-1}	2.30×10^{-46}	3.45×10^{-23}	1.74×10^{-23}	3.66×10^{-1}	2.30×10^{-46}
265	1.45×10^{-24}	3.14×10^{-22}	6.65×10^{-1}	3.17×10^{-46}	1.89×10^{-22}	2.41×10^{-24}	6.65×10^{-1}	3.17×10^{-46}	3.47×10^{-23}	1.31×10^{-23}	6.65×10^{-1}	3.17×10^{-46}
278	1.31×10^{-24}	2.01×10^{-22}	2.21	6.09×10^{-46}	1.23×10^{-22}	2.13×10^{-24}	2.21	6.09×10^{-46}	3.51×10^{-23}	7.48×10^{-24}	2.21	6.09×10^{-46}
280	1.29×10^{-24}	1.88×10^{-22}	2.63	6.70×10^{-46}	1.16×10^{-22}	2.10×10^{-24}	2.63	6.70×10^{-46}	3.52×10^{-23}	6.90×10^{-24}	2.63	6.70×10^{-46}
290	1.21×10^{-24}	1.38×10^{-22}	6.09	1.06×10^{-45}	8.63×10^{-23}	1.93×10^{-24}	6.09	1.06×10^{-45}	3.56×10^{-23}	4.69×10^{-24}	6.09	1.06×10^{-45}
298	1.15×10^{-24}	1.10×10^{-22}	1.14×10^{1}	1.51×10^{-45}	6.93×10^{-23}	1.82×10^{-24}	1.14×10^{1}	1.51×10^{-45}	3.59×10^{-23}	3.52×10^{-24}	1.14×10^{1}	1.51×10^{-45}
300	1.14×10^{-24}	1.04×10^{-22}	1.33×10^{1}	1.65×10^{-45}	6.57×10^{-23}	1.80×10^{-24}	1.33×10^{1}	1.65×10^{-45}	3.60×10^{-23}	3.28×10^{-24}	1.33×10^{1}	1.65×10^{-45}
310	1.08×10^{-24}	7.97×10^{-23}	2.76×10^{1}	2.49×10^{-45}	5.11×10^{-23}	1.68×10^{-24}	2.76×10^{1}	2.49×10^{-45}	3.65×10^{-23}	2.36×10^{-24}	2.76×10^{1}	2.49×10^{-45}
320	1.03×10^{-24}	6.23×10^{-23}	5.47×10^{1}	3.69×10^{-45}	4.04×10^{-23}	1.59×10^{-24}	5.47×10^{1}	3.69×10^{-45}	3.70×10^{-23}	1.73×10^{-24}	5.47×10^{1}	3.69×10^{-45}
330	9.85×10^{-25}	4.96×10^{-23}	1.04×10^{2}	5.36×10^{-45}	3.25×10^{-23}	1.50×10^{-24}	1.04×10^{2}	5.36×10^{-45}	3.75×10^{-23}	1.30×10^{-24}	1.04×10^{2}	5.36×10^{-45}
350	9.16×10^{-25}	3.29×10^{-23}	3.36×10^{2}	1.08×10^{-44}	2.20×10^{-23}	1.37×10^{-24}	3.36×10^{2}	1.08×10^{-44}	3.86×10^{-23}	7.81×10^{-25}	3.36×10^{2}	1.08×10^{-44}
375	8.55×10^{-25}	2.12×10^{-23}	1.22×10^{3}	2.37×10^{-44}	1.44×10^{-23}	1.25×10^{-24}	1.22×10^{3}	2.37×10^{-44}	4.01×10^{-23}	4.51×10^{-25}	1.22×10^{3}	2.37×10^{-44}
400	8.13×10^{-25}	1.45×10^{-23}	3.74×10^{3}	4.85×10^{-44}	1.01×10^{-23}	1.17×10^{-24}	3.74×10^{3}	4.85×10^{-44}	4.18×10^{-23}	2.83×10^{-25}	3.74×10^{3}	4.85×10^{-44}
425	7.84×10^{-25}	1.05×10^{-23}	1.01×10^{4}	9.32×10^{-44}	7.44×10^{-24}	1.11×10^{-24}	1.01×10^{4}	9.32×10^{-44}	4.35×10^{-23}	1.90×10^{-25}	1.01×10^{4}	9.32×10^{-44}
450	7.65×10^{-25}	7.98×10^{-24}	2.42×10^{4}	1.70×10^{-43}	5.72×10^{-24}	1.07×10^{-24}	2.42×10^{4}	1.70×10^{-43}	4.53×10^{-23}	1.35×10^{-25}	2.42×10^{4}	1.70×10^{-43}
475	7.54×10^{-25}	6.27×10^{-24}	5.30×10^{4}	2.95×10^{-43}	4.56×10^{-24}	1.04×10^{-24}	5.30×10^{4}	2.95×10^{-43}	4.72×10^{-23}	1.00×10^{-25}	5.30×10^{4}	2.95×10^{-43}
500	7.48×10^{-25}	5.08×10^{-24}	1.07×10^{5}	4.95×10^{-43}	3.74×10^{-24}	1.02×10^{-24}	1.07×10^{5}	4.95×10^{-43}	4.92×10^{-23}	7.73×10^{-26}	1.07×10^{5}	4.95×10^{-43}
550	7.52×10^{-25}	3.60×10^{-24}	3.61×10^{5}	1.26×10^{-42}	2.70×10^{-24}	1.00×10^{-24}	3.61×10^{5}	1.26×10^{-42}	5.34×10^{-23}	5.07×10^{-26}	3.61×10^{5}	1.26×10^{-42}
600	7.68×10^{-25}	2.76×10^{-24}	9.93×10^{5}	2.90×10^{-42}	2.11×10^{-24}	1.01×10^{-24}	9.93×10^{5}	2.90×10^{-42}	5.77×10^{-23}	3.67×10^{-26}	9.93×10^{5}	2.90×10^{-42}
650	7.95×10^{-25}	2.24×10^{-24}	2.33×10^{6}	6.11×10^{-42}	1.74×10^{-24}	1.03×10^{-24}	2.33×10^{6}	6.11×10^{-42}	6.23×10^{-23}	2.86×10^{-26}	2.33×10^{6}	6.11×10^{-42}
700	8.30×10^{-25}	1.90×10^{-24}	4.85×10^{6}	1.20×10^{-41}	1.50×10^{-24}	1.06×10^{-24}	4.85×10^{6}	1.20×10^{-41}	6.71×10^{-23}	2.36×10^{-26}	4.85×10^{6}	1.20×10^{-41}
750	8.72×10^{-25}	1.68×10^{-24}	9.13×10^{6}	2.22×10^{-41}	1.33×10^{-24}	1.10×10^{-24}	9.13×10^{6}	2.22×10^{-41}	7.20×10^{-23}	2.03×10^{-26}	9.13×10^{6}	2.22×10^{-41}
800	9.19×10^{-25}	1.52×10^{-24}	1.59×10^{7}	3.91×10^{-41}	1.22×10^{-24}	1.14×10^{-24}	1.59×10^{7}	3.91×10^{-41}	7.71×10^{-23}	1.81×10^{-26}	1.59×10^{7}	3.91×10^{-41}
850	9.72×10^{-25}	1.40×10^{-24}	2.59×10^{7}	6.59×10^{-41}	1.14×10^{-24}	1.20×10^{-24}	2.59×10^{7}	6.59×10^{-41}	8.23×10^{-23}	1.66×10^{-26}	2.59×10^{7}	6.59×10^{-41}
900	1.03×10^{-24}	1.32×10^{-24}	4.00×10^{7}	1.07×10^{-40}	1.08×10^{-24}	1.26×10^{-24}	4.00×10^{7}	1.07×10^{-40}	8.77×10^{-23}	1.55×10^{-26}	4.00×10^{7}	1.07×10^{-40}
950	1.09×10^{-24}	1.26×10^{-24}	5.90×10^{7}	1.68×10^{-40}	1.04×10^{-24}	1.33×10^{-24}	5.90×10^{7}	1.68×10^{-40}	9.32×10^{-23}	1.48×10^{-26}	5.90×10^{7}	1.68×10^{-40}
1000	1.16×10^{-24}	1.22×10^{-24}	8.37×10^{7}	2.56×10^{-40}	1.01×10^{-24}	1.40×10^{-24}	8.37×10^{7}	2.56×10^{-40}	9.89×10^{-23}	1.43×10^{-26}	8.37×10^{7}	2.56×10^{-40}

Table S12: Termolecular rate constant k_t in (cm^6 molecule^{-2} sec^{-1}) for AM catalyzed channel corresponds to TS2′ within the temperature range of 213-1000K

| Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	2.64×10^{-24}	3.48×10^{-21}	1.24×10^{4}	1.23×10^{-40}	1.88×10^{-21}	4.88×10^{-24}	1.24×10^{4}	1.23×10^{-40}	3.41×10^{-23}	2.69×10^{-22}	1.24×10^{4}	1.23×10^{-40}
216	2.52×10^{-24}	2.93×10^{-21}	1.47×10^{4}	1.16×10^{-40}	1.60×10^{-21}	4.62×10^{-24}	1.47×10^{4}	1.16×10^{-40}	3.41×10^{-23}	2.17×10^{-22}	1.47×10^{4}	1.16×10^{-40}
219	2.41×10^{-24}	2.47×10^{-21}	1.72×10^{4}	1.10×10^{-40}	1.36×10^{-21}	4.39×10^{-24}	1.72×10^{4}	1.10×10^{-40}	3.41×10^{-23}	1.75×10^{-22}	1.72×10^{4}	1.10×10^{-40}
224	2.25×10^{-24}	1.89×10^{-21}	2.23×10^{4}	1.01×10^{-40}	1.05×10^{-21}	4.05×10^{-24}	2.23×10^{4}	1.01×10^{-40}	3.40×10^{-23}	1.25×10^{-22}	2.23×10^{4}	1.01×10^{-40}
235	1.96×10^{-24}	1.09×10^{-21}	3.76×10^{4}	8.52×10^{-41}	6.21×10^{-22}	3.44×10^{-24}	3.76×10^{4}	8.52×10^{-41}	3.41×10^{-23}	6.26×10^{-23}	3.76×10^{4}	8.52×10^{-41}
250	1.66×10^{-24}	5.61×10^{-22}	7.05×10^{4}	6.93×10^{-41}	3.29×10^{-22}	2.83×10^{-24}	7.05×10^{4}	6.93×10^{-41}	3.43×10^{-23}	2.72×10^{-23}	7.05×10^{4}	6.93×10^{-41}
259	1.53×10^{-24}	3.92×10^{-22}	9.86×10^{4}	6.21×10^{-41}	2.34×10^{-22}	2.56×10^{-24}	9.86×10^{4}	6.21×10^{-41}	3.45×10^{-23}	1.74×10^{-23}	9.86×10^{4}	6.21×10^{-41}
265	1.45×10^{-24}	3.14×10^{-22}	1.22×10^{5}	5.80×10^{-41}	1.89×10^{-22}	2.41×10^{-24}	1.22×10^{5}	5.80×10^{-41}	3.47×10^{-23}	1.31×10^{-23}	1.22×10^{5}	5.80×10^{-41}
278	1.31×10^{-24}	2.01×10^{-22}	1.84×10^{5}	5.07×10^{-41}	1.23×10^{-22}	2.13×10^{-24}	1.84×10^{5}	5.07×10^{-41}	3.51×10^{-23}	7.48×10^{-24}	1.84×10^{5}	5.07×10^{-41}
280	1.29×10^{-24}	1.88×10^{-22}	1.96×10^{5}	4.97×10^{-41}	1.16×10^{-22}	2.10×10^{-24}	1.96×10^{5}	4.97×10^{-41}	3.52×10^{-23}	6.90×10^{-24}	1.96×10^{5}	4.97×10^{-41}
290	1.21×10^{-24}	1.38×10^{-22}	2.60×10^{5}	4.55×10^{-41}	8.63×10^{-23}	1.93×10^{-24}	2.60×10^{5}	4.55×10^{-41}	3.56×10^{-23}	4.69×10^{-24}	2.60×10^{5}	4.55×10^{-41}
298	1.15×10^{-24}	1.10×10^{-22}	3.21×10^{5}	4.25×10^{-41}	6.93×10^{-23}	1.82×10^{-24}	3.21×10^{5}	4.25×10^{-41}	3.59×10^{-23}	3.52×10^{-24}	3.21×10^{5}	4.25×10^{-41}
300	1.14×10^{-24}	1.04×10^{-22}	3.38×10^{5}	4.19×10^{-41}	6.57×10^{-23}	1.80×10^{-24}	3.38×10^{5}	4.19×10^{-41}	3.60×10^{-23}	3.28×10^{-24}	3.38×10^{5}	4.19×10^{-41}
310	1.08×10^{-24}	7.97×10^{-23}	4.30×10^{5}	3.88×10^{-41}	5.11×10^{-23}	1.68×10^{-24}	4.30×10^{5}	3.88×10^{-41}	3.65×10^{-23}	2.36×10^{-24}	4.30×10^{5}	3.88×10^{-41}
320	1.03×10^{-24}	6.23×10^{-23}	5.38×10^{5}	3.63×10^{-41}	4.04×10^{-23}	1.59×10^{-24}	5.38×10^{5}	3.63×10^{-41}	3.70×10^{-23}	1.73×10^{-24}	5.38×10^{5}	3.63×10^{-41}
330	9.85×10^{-25}	4.96×10^{-23}	6.61×10^{5}	3.42×10^{-41}	3.25×10^{-23}	1.50×10^{-24}	6.61×10^{5}	3.42×10^{-41}	3.75×10^{-23}	1.30×10^{-24}	6.61×10^{5}	3.42×10^{-41}
350	9.16×10^{-25}	3.29×10^{-23}	9.58×10^{5}	3.08×10^{-41}	2.20×10^{-23}	1.37×10^{-24}	9.58×10^{5}	3.08×10^{-41}	3.86×10^{-23}	7.81×10^{-25}	9.58×10^{5}	3.08×10^{-41}
375	8.55×10^{-25}	2.12×10^{-23}	1.42×10^{6}	2.78×10^{-41}	1.44×10^{-23}	1.25×10^{-24}	1.42×10^{6}	2.78×10^{-41}	4.01×10^{-23}	4.51×10^{-25}	1.42×10^{6}	2.78×10^{-41}
400	8.13×10^{-25}	1.45×10^{-23}	1.99×10^{6}	2.58×10^{-41}	1.01×10^{-23}	1.17×10^{-24}	1.99×10^{6}	2.58×10^{-41}	4.18×10^{-23}	2.83×10^{-25}	1.99×10^{6}	2.58×10^{-41}
425	7.84×10^{-25}	1.05×10^{-23}	2.64×10^{6}	2.45×10^{-41}	7.44×10^{-24}	1.11×10^{-24}	2.64×10^{6}	2.45×10^{-41}	4.35×10^{-23}	1.90×10^{-25}	2.64×10^{6}	2.45×10^{-41}
450	7.65×10^{-25}	7.98×10^{-24}	3.38×10^{6}	2.37×10^{-41}	5.72×10^{-24}	1.07×10^{-24}	3.38×10^{6}	2.37×10^{-41}	4.53×10^{-23}	1.35×10^{-25}	3.38×10^{6}	2.37×10^{-41}
475	7.54×10^{-25}	6.27×10^{-24}	4.18×10^{6}	2.33×10^{-41}	4.56×10^{-24}	1.04×10^{-24}	4.18×10^{6}	2.33×10^{-41}	4.72×10^{-23}	1.00×10^{-25}	4.18×10^{6}	2.33×10^{-41}
500	7.48×10^{-25}	5.08×10^{-24}	5.04×10^{6}	2.33×10^{-41}	3.74×10^{-24}	1.02×10^{-24}	5.04×10^{6}	2.33×10^{-41}	4.92×10^{-23}	7.73×10^{-26}	5.04×10^{6}	2.33×10^{-41}
550	7.52×10^{-25}	3.60×10^{-24}	6.87×10^{6}	2.40×10^{-41}	2.70×10^{-24}	1.00×10^{-24}	6.87×10^{6}	2.40×10^{-41}	5.34×10^{-23}	5.07×10^{-26}	6.87×10^{6}	2.40×10^{-41}
600	7.68×10^{-25}	2.76×10^{-24}	8.78×10^{6}	2.56×10^{-41}	2.11×10^{-24}	1.01×10^{-24}	8.78×10^{6}	2.56×10^{-41}	5.77×10^{-23}	3.67×10^{-26}	8.78×10^{6}	2.56×10^{-41}
650	7.95×10^{-25}	2.24×10^{-24}	1.07×10^{7}	2.80×10^{-41}	1.74×10^{-24}	1.03×10^{-24}	1.07×10^{7}	2.80×10^{-41}	6.23×10^{-23}	2.86×10^{-26}	1.07×10^{7}	2.80×10^{-41}
700	8.30×10^{-25}	1.90×10^{-24}	1.21×10^{7}	3.00×10^{-41}	1.50×10^{-24}	1.06×10^{-24}	1.21×10^{7}	3.00×10^{-41}	6.71×10^{-23}	2.36×10^{-26}	1.21×10^{7}	3.00×10^{-41}
750	8.72×10^{-25}	1.68×10^{-24}	1.44×10^{7}	3.51×10^{-41}	1.33×10^{-24}	1.10×10^{-24}	1.44×10^{7}	3.51×10^{-41}	7.20×10^{-23}	2.03×10^{-26}	1.44×10^{7}	3.51×10^{-41}
800	9.19×10^{-25}	1.52×10^{-24}	1.62×10^{7}	3.99×10^{-41}	1.22×10^{-24}	1.14×10^{-24}	1.62×10^{7}	3.99×10^{-41}	7.71×10^{-23}	1.81×10^{-26}	1.62×10^{7}	3.99×10^{-41}
850	9.72×10^{-25}	1.40×10^{-24}	1.79×10^{7}	4.55×10^{-41}	1.14×10^{-24}	1.20×10^{-24}	1.79×10^{7}	4.55×10^{-41}	8.23×10^{-23}	1.66×10^{-26}	1.79×10^{7}	4.55×10^{-41}
900	1.03×10^{-24}	1.32×10^{-24}	1.95×10^{7}	5.21×10^{-41}	1.08×10^{-24}	1.26×10^{-24}	1.95×10^{7}	5.21×10^{-41}	8.77×10^{-23}	1.55×10^{-26}	1.95×10^{7}	5.21×10^{-41}
950	1.09×10^{-24}	1.26×10^{-24}	2.10×10^{7}	5.98×10^{-41}	1.04×10^{-24}	1.33×10^{-24}	2.10×10^{7}	5.98×10^{-41}	9.32×10^{-23}	1.48×10^{-26}	2.10×10^{7}	5.98×10^{-41}
1000	1.16×10^{-24}	1.22×10^{-24}	2.25×10^{7}	6.86×10^{-41}	1.01×10^{-24}	1.40×10^{-24}	2.25×10^{7}	6.86×10^{-41}	9.89×10^{-23}	1.43×10^{-26}	2.25×10^{7}	6.86×10^{-41}
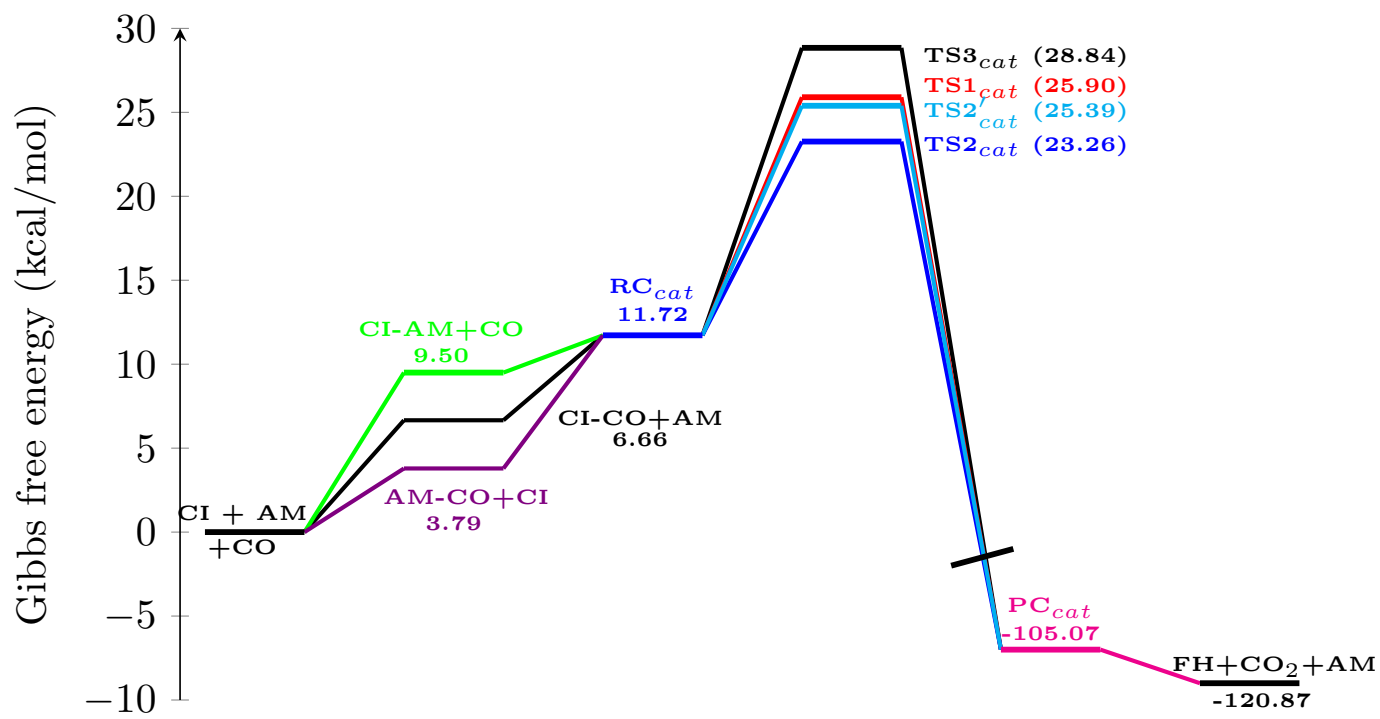
Figure S1: Gibbs free energy profile for CH₂OO + CO reaction in presence of AM calculated at CCSD(T)/aug-cc-pVTZ//M06-2X/aug-cc-pVTZ level of theory.

Table S13: Bimolecular rate constant k_b in (cm^3 molecule^1 sec^1) for FA catalyzed channel corresponds to TS2 within temperature range 213-1000 K

Temp (K)	path A	path B	path C	total
213	1.79×10^{-21}	3.20×10^{-25}	1.66×10^{-22}	1.96×10^{-21}
216	2.24×10^{-21}	4.57×10^{-25}	2.03×10^{-22}	2.44×10^{-21}
219	2.78×10^{-21}	6.47×10^{-25}	2.48×10^{-22}	3.03×10^{-21}
224	3.96×10^{-21}	1.14×10^{-24}	3.42×10^{-22}	4.30×10^{-21}
235	8.23×10^{-21}	3.63×10^{-24}	6.67×10^{-22}	8.90×10^{-21}
250	2.06×10^{-20}	1.53×10^{-23}	1.54×10^{-21}	2.22×10^{-20}
259	3.43×10^{-20}	3.39×10^{-23}	2.46×10^{-21}	3.68×10^{-20}
265	4.74×10^{-20}	5.60×10^{-23}	3.31×10^{-21}	5.08×10^{-20}
278	9.19×10^{-20}	1.55×10^{-22}	6.08×10^{-21}	9.82×10^{-20}
280	1.01×10^{-19}	1.81×10^{-22}	6.64×10^{-21}	1.08×10^{-19}
290	1.62×10^{-19}	3.71×10^{-22}	1.02×10^{-20}	1.73×10^{-19}
298	2.32×10^{-19}	6.39×10^{-22}	1.42×10^{-20}	2.47×10^{-19}
300	2.53×10^{-19}	7.29×10^{-22}	1.54×10^{-20}	2.69×10^{-19}
310	3.85×10^{-19}	1.38×10^{-21}	2.27×10^{-20}	4.09×10^{-19}
320	5.74×10^{-19}	2.52×10^{-21}	3.27×10^{-20}	6.09×10^{-19}
330	8.37×10^{-19}	4.44×10^{-21}	4.63×10^{-20}	8.88×10^{-19}
350	1.69×10^{-18}	1.27×10^{-20}	8.85×10^{-20}	1.79×10^{-18}
375	3.72×10^{-18}	4.07×10^{-20}	1.83×10^{-19}	3.95×10^{-18}
400	7.55×10^{-18}	1.15×10^{-19}	3.52×10^{-19}	8.01×10^{-18}
425	1.43×10^{-17}	2.89×10^{-19}	6.35×10^{-19}	1.52×10^{-17}
450	2.54×10^{-17}	6.65×10^{-19}	1.08×10^{-18}	2.72×10^{-17}
475	4.31×10^{-17}	1.41×10^{-18}	1.77×10^{-18}	4.62×10^{-17}
500	6.98×10^{-17}	2.81×10^{-18}	2.77×10^{-18}	7.54×10^{-17}
550	1.65×10^{-16}	9.35×10^{-18}	6.15×10^{-18}	1.80×10^{-16}
600	3.45×10^{-16}	2.61×10^{-17}	1.23×10^{-17}	3.83×10^{-16}
650	6.58×10^{-16}	6.32×10^{-17}	2.25×10^{-17}	7.44×10^{-16}
700	1.17×10^{-15}	1.37×10^{-16}	3.84×10^{-17}	1.34×10^{-15}
750	1.94×10^{-15}	2.71×10^{-16}	6.20×10^{-17}	2.27×10^{-15}
800	3.08×10^{-15}	4.98×10^{-16}	9.55×10^{-17}	3.67×10^{-15}
850	4.67×10^{-15}	8.61×10^{-16}	1.42×10^{-16}	5.67×10^{-15}
900	6.83×10^{-15}	1.41×10^{-15}	2.03×10^{-16}	8.45×10^{-15}
950	9.70×10^{-15}	2.21×10^{-15}	2.82×10^{-16}	1.22×10^{-14}
1000	1.34×10^{-14}	3.34×10^{-15}	3.83×10^{-16}	1.71×10^{-14}

Table S14: Bimolecular rate constant k_b in (cm^3 molecule^1 sec^1) for FA catalyzed channel corresponds to TS3 within temperature range 213-1000 K

Temp (K)	path A	path B	path C	total
213	1.17×10^{-20}	2.10×10^{-24}	1.09×10^{-21}	1.28×10^{-20}
216	1.33×10^{-20}	2.72×10^{-24}	1.21×10^{-21}	1.45×10^{-20}
219	1.51×10^{-20}	3.52×10^{-24}	1.35×10^{-21}	1.65×10^{-20}
224	1.85×10^{-20}	5.31×10^{-24}	1.60×10^{-21}	2.01×10^{-20}
235	2.80×10^{-20}	1.23×10^{-23}	2.27×10^{-21}	3.02×10^{-20}
250	4.67×10^{-20}	3.47×10^{-23}	3.50×10^{-21}	5.02×10^{-20}
259	6.18×10^{-20}	6.11×10^{-23}	4.44×10^{-21}	6.63×10^{-20}
265	7.38×10^{-20}	8.73×10^{-23}	5.16×10^{-21}	7.91×10^{-20}
278	1.06×10^{-19}	1.79×10^{-22}	7.01×10^{-21}	1.13×10^{-19}
280	1.12×10^{-19}	1.99×10^{-22}	7.33×10^{-21}	1.19×10^{-19}
290	1.44×10^{-19}	3.30×10^{-22}	9.10×10^{-21}	1.54×10^{-19}
298	1.75×10^{-19}	4.82×10^{-22}	1.07×10^{-20}	1.86×10^{-19}
300	1.83×10^{-19}	5.29×10^{-22}	1.12×10^{-20}	1.95×10^{-19}
310	2.30×10^{-19}	8.23×10^{-22}	1.35×10^{-20}	2.44×10^{-19}
320	2.84×10^{-19}	1.25×10^{-21}	1.62×10^{-20}	3.02×10^{-19}
330	3.48×10^{-19}	1.85×10^{-21}	1.93×10^{-20}	3.69×10^{-19}
350	5.06×10^{-19}	3.79×10^{-21}	2.65×10^{-20}	5.36×10^{-19}
375	7.68×10^{-19}	8.40×10^{-21}	3.78×10^{-20}	8.15×10^{-19}
400	1.12×10^{-18}	1.70×10^{-20}	5.21×10^{-20}	1.19×10^{-18}
425	1.56×10^{-18}	3.17×10^{-20}	6.95×10^{-20}	1.66×10^{-18}
450	2.12×10^{-18}	5.55×10^{-20}	9.04×10^{-20}	2.27×10^{-18}
475	2.80×10^{-18}	9.20×10^{-20}	1.15×10^{-19}	3.01×10^{-18}
500	3.62×10^{-18}	1.46×10^{-19}	1.44×10^{-19}	3.91×10^{-18}
550	5.73×10^{-18}	3.25×10^{-19}	2.14×10^{-19}	6.27×10^{-18}
600	8.53×10^{-18}	6.46×10^{-19}	3.04×10^{-19}	9.48×10^{-18}
650	1.21×10^{-17}	1.17×10^{-18}	4.15×10^{-19}	1.37×10^{-17}
700	1.67×10^{-17}	1.96×10^{-18}	5.49×10^{-19}	1.92×10^{-17}
750	2.22×10^{-17}	3.10×10^{-18}	7.08×10^{-19}	2.60×10^{-17}
800	2.89×10^{-17}	4.67×10^{-18}	8.96×10^{-19}	3.44×10^{-17}
850	3.67×10^{-17}	6.77×10^{-18}	1.11×10^{-18}	4.46×10^{-17}
900	4.59×10^{-17}	9.49×10^{-18}	1.36×10^{-18}	5.68×10^{-17}
950	5.66×10^{-17}	1.29×10^{-17}	1.65×10^{-18}	7.11×10^{-17}
1000	6.87×10^{-17}	1.72×10^{-17}	1.97×10^{-18}	8.78×10^{-17}

Table S15: Relative energies (ΔE) including ZPE in kcal mol^1 for all the species with respect to the isolated reactants at the CCSD(T)/aug-cc-pVTZ level of theory in the presence of FA as a catalyst.

Species	ΔE
CI-CO	-1.48
PC_{uncat}	-121.43
RC_{cat}	-6.32
$TS2_{cat}$	5.54
$TS3_{cat}$	2.84
PC_{cat}	-128.84
Product	-119.22
CI-FA	-6.0
FA-CO	-1.41

Table S16: Termolecular rate constant k_t in (cm^6 molecule^{-2} sec^{-1}) for (H$_2$O)$_2$ catalyzed channel corresponds to TS2 within the temperature range of 213-1000K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	2.64×10^{-24}	5.77×10^{-23}	3.11×10^{1}	5.17×10^{-45}	1.48×10^{-20}	1.03×10^{-26}	3.11×10^{1}	5.17×10^{-45}	2.85×10^{-23}	5.35×10^{-24}	3.11×10^{1}	5.17×10^{-45}
216	2.52×10^{-24}	5.00×10^{-23}	4.48×10^{1}	6.16×10^{-45}	1.23×10^{-20}	1.02×10^{-26}	4.48×10^{1}	6.16×10^{-45}	2.78×10^{-23}	4.54×10^{-24}	4.48×10^{1}	6.16×10^{-45}
219	2.41×10^{-24}	4.35×10^{-23}	6.39×10^{1}	7.31×10^{-45}	1.04×10^{-20}	1.01×10^{-26}	6.39×10^{1}	7.31×10^{-45}	2.71×10^{-23}	3.88×10^{-24}	6.39×10^{1}	7.31×10^{-45}
224	2.25×10^{-24}	3.49×10^{-23}	1.14×10^{2}	9.67×10^{-45}	7.83×10^{-21}	1.00×10^{-26}	1.14×10^{2}	9.67×10^{-45}	2.61×10^{-23}	3.01×10^{-24}	1.14×10^{2}	9.67×10^{-45}
235	1.96×10^{-24}	2.22×10^{-23}	3.71×10^{2}	1.74×10^{-44}	4.44×10^{-21}	9.79×10^{-27}	3.71×10^{2}	1.74×10^{-44}	2.42×10^{-23}	1.80×10^{-24}	3.71×10^{2}	1.74×10^{-44}
250	1.66×10^{-24}	1.29×10^{-23}	1.60×10^{3}	3.69×10^{-44}	2.23×10^{-21}	9.60×10^{-27}	1.60×10^{3}	3.69×10^{-44}	2.22×10^{-23}	9.66×10^{-25}	1.60×10^{3}	3.69×10^{-44}
259	1.53×10^{-24}	9.63×10^{-24}	3.56×10^{3}	5.62×10^{-44}	1.54×10^{-21}	9.52×10^{-27}	3.56×10^{3}	5.62×10^{-44}	2.13×10^{-23}	6.91×10^{-25}	3.56×10^{3}	5.62×10^{-44}
265	1.45×10^{-24}	8.03×10^{-24}	5.90×10^{3}	7.36×10^{-44}	1.23×10^{-21}	9.49×10^{-27}	5.90×10^{3}	7.36×10^{-44}	2.08×10^{-23}	5.61×10^{-25}	5.90×10^{3}	7.36×10^{-44}
278	1.31×10^{-24}	5.60×10^{-24}	1.64×10^{4}	1.29×10^{-43}	7.74×10^{-22}	9.46×10^{-27}	1.64×10^{4}	1.29×10^{-43}	1.98×10^{-23}	3.70×10^{-25}	1.64×10^{4}	1.29×10^{-43}
280	1.29×10^{-24}	5.31×10^{-24}	1.91×10^{4}	1.40×10^{-43}	7.25×10^{-22}	9.46×10^{-27}	1.91×10^{4}	1.40×10^{-43}	1.97×10^{-23}	3.48×10^{-25}	1.91×10^{4}	1.40×10^{-43}
290	1.21×10^{-24}	4.14×10^{-24}	3.91×10^{4}	2.09×10^{-43}	5.28×10^{-22}	9.48×10^{-27}	3.91×10^{4}	2.09×10^{-43}	1.91×10^{-23}	2.62×10^{-25}	3.91×10^{4}	2.09×10^{-43}
298	1.15×10^{-24}	3.45×10^{-24}	6.72×10^{4}	2.84×10^{-43}	4.17×10^{-22}	9.51×10^{-27}	6.72×10^{4}	2.84×10^{-43}	1.88×10^{-23}	2.11×10^{-25}	6.72×10^{4}	2.84×10^{-43}
300	1.14×10^{-24}	3.30×10^{-24}	7.67×10^{4}	3.06×10^{-43}	3.94×10^{-22}	9.52×10^{-27}	7.67×10^{4}	3.06×10^{-43}	1.87×10^{-23}	2.01×10^{-25}	7.67×10^{4}	3.06×10^{-43}
310	1.08×10^{-24}	2.67×10^{-24}	1.44×10^{5}	4.41×10^{-43}	3.01×10^{-22}	9.57×10^{-27}	1.44×10^{5}	4.41×10^{-43}	1.83×10^{-23}	1.57×10^{-25}	1.44×10^{5}	4.41×10^{-43}
320	1.03×10^{-24}	2.20×10^{-24}	2.61×10^{5}	6.26×10^{-43}	2.34×10^{-22}	9.65×10^{-27}	2.61×10^{5}	6.26×10^{-43}	1.80×10^{-23}	1.25×10^{-25}	2.61×10^{5}	6.26×10^{-43}
330	9.85×10^{-25}	1.84×10^{-24}	4.56×10^{5}	8.75×10^{-43}	1.86×10^{-22}	9.74×10^{-27}	4.56×10^{5}	8.75×10^{-43}	1.78×10^{-23}	1.02×10^{-25}	4.56×10^{5}	8.75×10^{-43}
350	9.16×10^{-25}	1.33×10^{-24}	1.27×10^{6}	1.64×10^{-42}	1.22×10^{-22}	9.98×10^{-27}	1.27×10^{6}	1.64×10^{-42}	1.75×10^{-23}	6.97×10^{-26}	1.27×10^{6}	1.64×10^{-42}
375	8.55×10^{-25}	9.46×10^{-25}	3.94×10^{6}	3.37×10^{-42}	7.81×10^{-23}	1.03×10^{-26}	3.94×10^{6}	3.37×10^{-42}	1.74×10^{-23}	4.65×10^{-26}	3.94×10^{6}	3.37×10^{-42}
400	8.13×10^{-25}	7.09×10^{-25}	1.06×10^{7}	6.51×10^{-42}	5.34×10^{-23}	1.08×10^{-26}	1.06×10^{7}	6.51×10^{-42}	1.74×10^{-23}	3.31×10^{-26}	1.06×10^{7}	6.51×10^{-42}
425	7.84×10^{-25}	5.56×10^{-25}	2.56×10^{7}	1.19×10^{-41}	3.86×10^{-23}	1.13×10^{-26}	2.56×10^{7}	1.19×10^{-41}	1.76×10^{-23}	2.48×10^{-26}	2.56×10^{7}	1.19×10^{-41}
450	7.65×10^{-25}	4.53×10^{-25}	5.62×10^{7}	2.08×10^{-41}	2.92×10^{-23}	1.18×10^{-26}	5.62×10^{7}	2.08×10^{-41}	1.79×10^{-23}	1.93×10^{-26}	5.62×10^{7}	2.08×10^{-41}
475	7.54×10^{-25}	3.79×10^{-25}	1.14×10^{8}	3.48×10^{-41}	2.30×10^{-23}	1.25×10^{-26}	1.14×10^{8}	3.48×10^{-41}	1.84×10^{-23}	1.56×10^{-26}	1.14×10^{8}	3.48×10^{-41}
500	7.48×10^{-25}	3.26×10^{-25}	2.14×10^{8}	5.64×10^{-41}	1.86×10^{-23}	1.31×10^{-26}	2.14×10^{8}	5.64×10^{-41}	1.89×10^{-23}	1.29×10^{-26}	2.14×10^{8}	5.64×10^{-41}
550	7.52×10^{-25}	2.56×10^{-25}	6.42×10^{8}	1.35×10^{-40}	1.32×10^{-23}	1.46×10^{-26}	6.42×10^{8}	1.35×10^{-40}	2.01×10^{-23}	9.59×10^{-27}	6.42×10^{8}	1.35×10^{-40}
600	7.68×10^{-25}	2.14×10^{-25}	1.61×10^{9}	2.94×10^{-40}	1.02×10^{-23}	1.62×10^{-26}	1.61×10^{9}	2.94×10^{-40}	2.16×10^{-23}	7.63×10^{-27}	1.61×10^{9}	2.94×10^{-40}
650	7.95×10^{-25}	1.88×10^{-25}	3.50×10^{9}	5.91×10^{-40}	8.29×10^{-24}	1.80×10^{-26}	3.50×10^{9}	5.91×10^{-40}	2.33×10^{-23}	6.41×10^{-27}	3.50×10^{9}	5.91×10^{-40}
700	8.30×10^{-25}	1.71×10^{-25}	6.84×10^{9}	1.11×10^{-39}	7.07×10^{-24}	2.00×10^{-26}	6.84×10^{9}	1.11×10^{-39}	2.52×10^{-23}	5.62×10^{-27}	6.84×10^{9}	1.11×10^{-39}
750	8.72×10^{-25}	1.59×10^{-25}	1.22×10^{10}	1.98×10^{-39}	6.25×10^{-24}	2.22×10^{-26}	1.22×10^{10}	1.98×10^{-39}	2.73×10^{-23}	5.08×10^{-27}	1.22×10^{10}	1.98×10^{-39}
800	9.19×10^{-25}	1.52×10^{-25}	2.03×10^{10}	3.37×10^{-39}	5.68×10^{-24}	2.45×10^{-26}	2.03×10^{10}	3.37×10^{-39}	2.96×10^{-23}	4.70×10^{-27}	2.03×10^{10}	3.37×10^{-39}
850	9.72×10^{-25}	1.47×10^{-25}	3.18×10^{10}	5.51×10^{-39}	5.27×10^{-24}	2.71×10^{-26}	3.18×10^{10}	5.51×10^{-39}	3.21×10^{-23}	4.45×10^{-27}	3.18×10^{10}	5.51×10^{-39}
900	1.03×10^{-24}	1.44×10^{-25}	4.75×10^{10}	8.70×10^{-39}	4.98×10^{-24}	2.97×10^{-26}	4.75×10^{10}	8.70×10^{-39}	3.47×10^{-23}	4.27×10^{-27}	4.75×10^{10}	8.70×10^{-39}
950	1.09×10^{-24}	1.43×10^{-25}	6.79×10^{10}	1.33×10^{-38}	4.78×10^{-24}	3.26×10^{-26}	6.79×10^{10}	1.33×10^{-38}	3.75×10^{-23}	4.16×10^{-27}	6.79×10^{10}	1.33×10^{-38}
1000	1.16×10^{-24}	1.43×10^{-25}	9.38×10^{10}	1.98×10^{-38}	4.64×10^{-24}	3.57×10^{-26}	9.38×10^{10}	1.98×10^{-38}	4.05×10^{-23}	4.09×10^{-27}	9.38×10^{10}	1.98×10^{-38}

Table S17: Termolecular rate constant k_t in (cm^6 molecule^{-2} sec^{-1}) for FA catalyzed channel corresponds to TS3 within the temperature range of 213-1000K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	2.64×10^{-24}	5.77×10^{-23}	2.03×10^{2}	3.38×10^{-44}	1.48×10^{-20}	1.03×10^{-26}	2.03×10^{2}	3.38×10^{-44}	2.85×10^{-23}	5.35×10^{-24}	2.03×10^{2}	3.38×10^{-44}
216	2.52×10^{-24}	5.00×10^{-23}	2.67×10^{2}	3.67×10^{-44}	1.23×10^{-20}	1.02×10^{-26}	2.67×10^{2}	3.67×10^{-44}	2.78×10^{-23}	4.54×10^{-24}	2.67×10^{2}	3.67×10^{-44}
219	2.41×10^{-24}	4.35×10^{-23}	3.47×10^{2}	3.97×10^{-44}	1.04×10^{-20}	1.01×10^{-26}	3.47×10^{2}	3.97×10^{-44}	2.71×10^{-23}	3.88×10^{-24}	3.47×10^{2}	3.97×10^{-44}
224	2.25×10^{-24}	3.49×10^{-23}	5.30×10^{2}	4.52×10^{-44}	7.83×10^{-21}	1.00×10^{-26}	5.30×10^{2}	4.52×10^{-44}	2.61×10^{-23}	3.01×10^{-24}	5.30×10^{2}	4.52×10^{-44}
235	1.96×10^{-24}	2.22×10^{-23}	1.26×10^{3}	5.92×10^{-44}	4.44×10^{-21}	9.79×10^{-27}	1.26×10^{3}	5.92×10^{-44}	2.42×10^{-23}	1.80×10^{-24}	1.26×10^{3}	5.92×10^{-44}
250	1.66×10^{-24}	1.29×10^{-23}	3.62×10^{3}	8.35×10^{-44}	2.23×10^{-21}	9.60×10^{-27}	3.62×10^{3}	8.35×10^{-44}	2.22×10^{-23}	9.66×10^{-25}	3.62×10^{3}	8.35×10^{-44}
259	1.53×10^{-24}	9.63×10^{-24}	6.42×10^{3}	1.01×10^{-43}	1.54×10^{-21}	9.52×10^{-27}	6.42×10^{3}	1.01×10^{-43}	2.13×10^{-23}	6.91×10^{-25}	6.42×10^{3}	1.01×10^{-43}
265	1.45×10^{-24}	8.03×10^{-24}	9.19×10^{3}	1.15×10^{-43}	1.23×10^{-21}	9.49×10^{-27}	9.19×10^{3}	1.15×10^{-43}	2.08×10^{-23}	5.61×10^{-25}	9.19×10^{3}	1.15×10^{-43}
278	1.31×10^{-24}	5.60×10^{-24}	1.90×10^{4}	1.48×10^{-43}	7.74×10^{-22}	9.46×10^{-27}	1.90×10^{4}	1.48×10^{-43}	1.98×10^{-23}	3.70×10^{-25}	1.90×10^{4}	1.48×10^{-43}
280	1.29×10^{-24}	5.31×10^{-24}	2.11×10^{4}	1.54×10^{-43}	7.25×10^{-22}	9.46×10^{-27}	2.11×10^{4}	1.54×10^{-43}	1.97×10^{-23}	3.48×10^{-25}	2.11×10^{4}	1.54×10^{-43}
290	1.21×10^{-24}	4.14×10^{-24}	3.48×10^{4}	1.86×10^{-43}	5.28×10^{-22}	9.48×10^{-27}	3.48×10^{4}	1.86×10^{-43}	1.91×10^{-23}	2.62×10^{-25}	3.48×10^{4}	1.86×10^{-43}
298	1.15×10^{-24}	3.45×10^{-24}	5.08×10^{4}	2.14×10^{-43}	4.17×10^{-22}	9.51×10^{-27}	5.08×10^{4}	2.14×10^{-43}	1.88×10^{-23}	2.11×10^{-25}	5.08×10^{4}	2.14×10^{-43}
300	1.14×10^{-24}	3.30×10^{-24}	5.56×10^{4}	2.22×10^{-43}	3.94×10^{-22}	9.52×10^{-27}	5.56×10^{4}	2.22×10^{-43}	1.87×10^{-23}	2.01×10^{-25}	5.56×10^{4}	2.22×10^{-43}
310	1.08×10^{-24}	2.67×10^{-24}	8.60×10^{4}	2.63×10^{-43}	3.01×10^{-22}	9.57×10^{-27}	8.60×10^{4}	2.63×10^{-43}	1.83×10^{-23}	1.57×10^{-25}	8.60×10^{4}	2.63×10^{-43}
320	1.03×10^{-24}	2.20×10^{-24}	1.29×10^{5}	3.10×10^{-43}	2.34×10^{-22}	9.65×10^{-27}	1.29×10^{5}	3.10×10^{-43}	1.80×10^{-23}	1.25×10^{-25}	1.29×10^{5}	3.10×10^{-43}
330	9.85×10^{-25}	1.84×10^{-24}	1.90×10^{5}	3.64×10^{-43}	1.86×10^{-22}	9.74×10^{-27}	1.90×10^{5}	3.64×10^{-43}	1.78×10^{-23}	1.02×10^{-25}	1.90×10^{5}	3.64×10^{-43}
350	9.16×10^{-25}	1.33×10^{-24}	3.80×10^{5}	4.91×10^{-43}	1.22×10^{-22}	9.98×10^{-27}	3.80×10^{5}	4.91×10^{-43}	1.75×10^{-23}	6.97×10^{-26}	3.80×10^{5}	4.91×10^{-43}
375	8.55×10^{-25}	9.46×10^{-25}	8.13×10^{5}	6.96×10^{-43}	7.81×10^{-23}	1.03×10^{-26}	8.13×10^{5}	6.96×10^{-43}	1.74×10^{-23}	4.65×10^{-26}	8.13×10^{5}	6.96×10^{-43}
400	8.13×10^{-25}	7.09×10^{-25}	1.57×10^{6}	9.63×10^{-43}	5.34×10^{-23}	1.08×10^{-26}	1.57×10^{6}	9.63×10^{-43}	1.74×10^{-23}	3.31×10^{-26}	1.57×10^{6}	9.63×10^{-43}
425	7.84×10^{-25}	5.56×10^{-25}	2.81×10^{6}	1.30×10^{-42}	3.86×10^{-23}	1.13×10^{-26}	2.81×10^{6}	1.30×10^{-42}	1.76×10^{-23}	2.48×10^{-26}	2.81×10^{6}	1.30×10^{-42}
450	7.65×10^{-25}	4.53×10^{-25}	4.69×10^{6}	1.73×10^{-42}	2.92×10^{-23}	1.18×10^{-26}	4.69×10^{6}	1.73×10^{-42}	1.79×10^{-23}	1.93×10^{-26}	4.69×10^{6}	1.73×10^{-42}
475	7.54×10^{-25}	3.79×10^{-25}	7.39×10^{6}	2.27×10^{-42}	2.30×10^{-23}	1.25×10^{-26}	7.39×10^{6}	2.27×10^{-42}	1.84×10^{-23}	1.56×10^{-26}	7.39×10^{6}	2.27×10^{-42}
500	7.48×10^{-25}	3.26×10^{-25}	1.11×10^{7}	2.93×10^{-42}	1.86×10^{-23}	1.31×10^{-26}	1.11×10^{7}	2.93×10^{-42}	1.89×10^{-23}	1.29×10^{-26}	1.11×10^{7}	2.93×10^{-42}
550	7.52×10^{-25}	2.56×10^{-25}	2.23×10^{7}	4.71×10^{-42}	1.32×10^{-23}	1.46×10^{-26}	2.23×10^{7}	4.71×10^{-42}	2.01×10^{-23}	9.59×10^{-27}	2.23×10^{7}	4.71×10^{-42}
600	7.68×10^{-25}	2.14×10^{-25}	3.98×10^{7}	7.29×10^{-42}	1.02×10^{-23}	1.62×10^{-26}	3.98×10^{7}	7.29×10^{-42}	2.16×10^{-23}	7.63×10^{-27}	3.98×10^{7}	7.29×10^{-42}
650	7.95×10^{-25}	1.88×10^{-25}	6.47×10^{7}	1.09×10^{-41}	8.29×10^{-24}	1.80×10^{-26}	6.47×10^{7}	1.09×10^{-41}	2.33×10^{-23}	6.41×10^{-27}	6.47×10^{7}	1.09×10^{-41}
700	8.30×10^{-25}	1.71×10^{-25}	9.78×10^{7}	1.59×10^{-41}	7.07×10^{-24}	2.00×10^{-26}	9.78×10^{7}	1.59×10^{-41}	2.52×10^{-23}	5.62×10^{-27}	9.78×10^{7}	1.59×10^{-41}
750	8.72×10^{-25}	1.59×10^{-25}	1.40×10^{8}	2.27×10^{-41}	6.25×10^{-24}	2.22×10^{-26}	1.40×10^{8}	2.27×10^{-41}	2.73×10^{-23}	5.08×10^{-27}	1.40×10^{8}	2.27×10^{-41}
800	9.19×10^{-25}	1.52×10^{-25}	1.91×10^{8}	3.16×10^{-41}	5.68×10^{-24}	2.45×10^{-26}	1.91×10^{8}	3.16×10^{-41}	2.96×10^{-23}	4.70×10^{-27}	1.91×10^{8}	3.16×10^{-41}
850	9.72×10^{-25}	1.47×10^{-25}	2.50×10^{8}	4.34×10^{-41}	5.27×10^{-24}	2.71×10^{-26}	2.50×10^{8}	4.34×10^{-41}	3.21×10^{-23}	4.45×10^{-27}	2.50×10^{8}	4.34×10^{-41}
900	1.03×10^{-24}	1.44×10^{-25}	3.19×10^{8}	5.85×10^{-41}	4.98×10^{-24}	2.97×10^{-26}	3.19×10^{8}	5.85×10^{-41}	3.47×10^{-23}	4.27×10^{-27}	3.19×10^{8}	5.85×10^{-41}
950	1.09×10^{-24}	1.43×10^{-25}	3.96×10^{8}	7.77×10^{-41}	4.78×10^{-24}	3.26×10^{-26}	3.96×10^{8}	7.77×10^{-41}	3.75×10^{-23}	4.16×10^{-27}	3.96×10^{8}	7.77×10^{-41}
1000	1.16×10^{-24}	1.43×10^{-25}	4.81×10^{8}	1.02×10^{-40}	4.64×10^{-24}	3.57×10^{-26}	4.81×10^{8}	1.02×10^{-40}	4.05×10^{-23}	4.09×10^{-27}	4.81×10^{8}	1.02×10^{-40}

Table S18: Concentrations of AM and FA in molecules cm^{-3}, k_t in cm^6 molecule^{-2} sec^{-1} and k_{eff} in cm^3 molecule^{-1} sec^{-1} at higher altitude.

Altitude (km)	Temp (K)	[AM]	[FA]	k_t^{AM}	k_t^{FA}	k_{eff}^{AM}	k_{eff}^{FA}
5	259	7.60×10^9	2.00×10^{10}	1.73×10^{-42}	4.72×10^{-43}	1.32×10^{-32}	9.45×10^{-33}
10	230	8.50×10^8	8.30×10^9	6.74×10^{-43}	2.30×10^{-43}	5.73×10^{-34}	1.91×10^{-33}
15	213	1.20×10^8	3.20×10^9	2.56×10^{-43}	2.56×10^{-43}	3.07×10^{-35}	8.19×10^{-34}

Table S19: Concentrations of AD and AW in molecules cm^{-3}, k_t in cm^6 molecule^{-2} sec^{-1} and k_{eff} in cm^3 molecule^{-1} sec^{-1} at higher altitude.

Altitude (km)	Temp (K)	[AD]	[AW]	k_t^{AD}	k_t^{AW}	k_{eff}^{AD}	k_{eff}^{AW}
5	259	4.00×10^{-3}	6.10×10^6	1.45×10^{-42}	3.83×10^{-42}	5.78×10^{-45}	2.34×10^{-35}
10	230	7.30×10^{-5}	4.20×10^5	1.21×10^{-42}	3.12×10^{-42}	8.81×10^{-47}	1.31×10^{-36}
15	213	2.10×10^{-6}	5.40×10^2	1.04×10^{-42}	2.57×10^{-42}	7.60×10^{-47}	1.39×10^{-39}

Table S20: T1 diagnostic values for the different TSs calculated at CCSD(T)/aug-cc-pVTZ level of theory.

Species	T1-diag
TS1-uncat	0.03565
TS2-uncat	0.02913
TS3-uncat	0.03354
TS1-AM	0.02964
TS2-AM	0.02458
TS3-AM	0.02894
TS2'-AM	0.01884
TS2-FA	0.02378
TS3-FA	0.02609
TS1-AD	0.02673
TS2-AD	0.02271
TS3-AD	0.02607
TS1-AW	0.02680
TS2-AW	0.02274
TS3-AW	0.02579

Table S21: Energy barrier of uncatalyzed reaction obtained at different methods from our earlier works.

Methods	Energy barrier (kcal mol^{-1})
CCSDT(Q)/cc-pVDZ	7.50
CCSD(T)/aug-cc-pVQZ	8.10
CCSD(T)-F12/cc-pVTZ	8.20
CCSD(T)/aug-cc-pVTZ	7.82

Table S22: Concentrations of all the catalysts (in molecule cm^{-3}) within 280K to 320K temperature range at 0 km altitude.

| Catalysts		280	290	298	300	310	320
AM	0.1 ppbv	2.60×10^9	2.50×10^9	2.50×10^9	2.40×10^9	2.40×10^9	2.30×10^9
	10 ppbv	2.60×10^{11}	2.50×10^{11}	2.50×10^{11}	2.40×10^{11}	2.40×10^{11}	2.30×10^{11}
	2900 ppbv	7.60×10^{13}	7.30×10^{13}	7.10×10^{13}	7.10×10^{13}	6.90×10^{13}	6.70×10^{13}
FA	high	2.60×10^{11}	2.50×10^{11}	2.40×10^{11}	2.40×10^{11}	2.40×10^{11}	2.30×10^{11}
	average	2.00×10^{10}	1.90×10^{10}	1.90×10^{10}	1.90×10^{10}	1.80×10^{10}	1.80×10^{10}
	low	2.60×10^8	2.50×10^8	2.40×10^8	2.40×10^8	2.40×10^8	2.30×10^8
AD	0.1 ppbv	3.90×10^{-4}	3.40×10^{-4}	3.00×10^{-4}	2.90×10^{-4}	2.60×10^{-4}	2.30×10^{-4}
	10 ppbv	3.93	3.38	3.02	2.93	2.57	2.28
	2900 ppbv	3.30×10^5	2.80×10^5	2.50×10^5	2.50×10^5	2.20×10^5	1.90×10^5
20% RH	0.1 ppbv	2.40×10^6	3.30×10^6	4.20×10^6	4.40×10^6	5.80×10^6	7.30×10^6
	10 ppbv	2.40×10^8	3.30×10^8	4.20×10^8	4.40×10^8	5.80×10^8	7.30×10^8
AW	2900 ppbv	6.90×10^{10}	9.50×10^{10}	1.20×10^{11}	1.30×10^{11}	1.70×10^{11}	2.10×10^{11}
100%RH	0.1 ppbv	1.20×10^7	1.60×10^7	2.10×10^7	2.20×10^7	2.90×10^7	3.60×10^7
	10 ppbv	1.20×10^9	1.60×10^9	2.10×10^9	2.20×10^9	2.90×10^9	3.60×10^9
	2900 ppbv	3.50×10^{11}	4.80×10^{11}	6.10×10^{11}	6.40×10^{11}	8.40×10^{11}	1.10×10^{12}
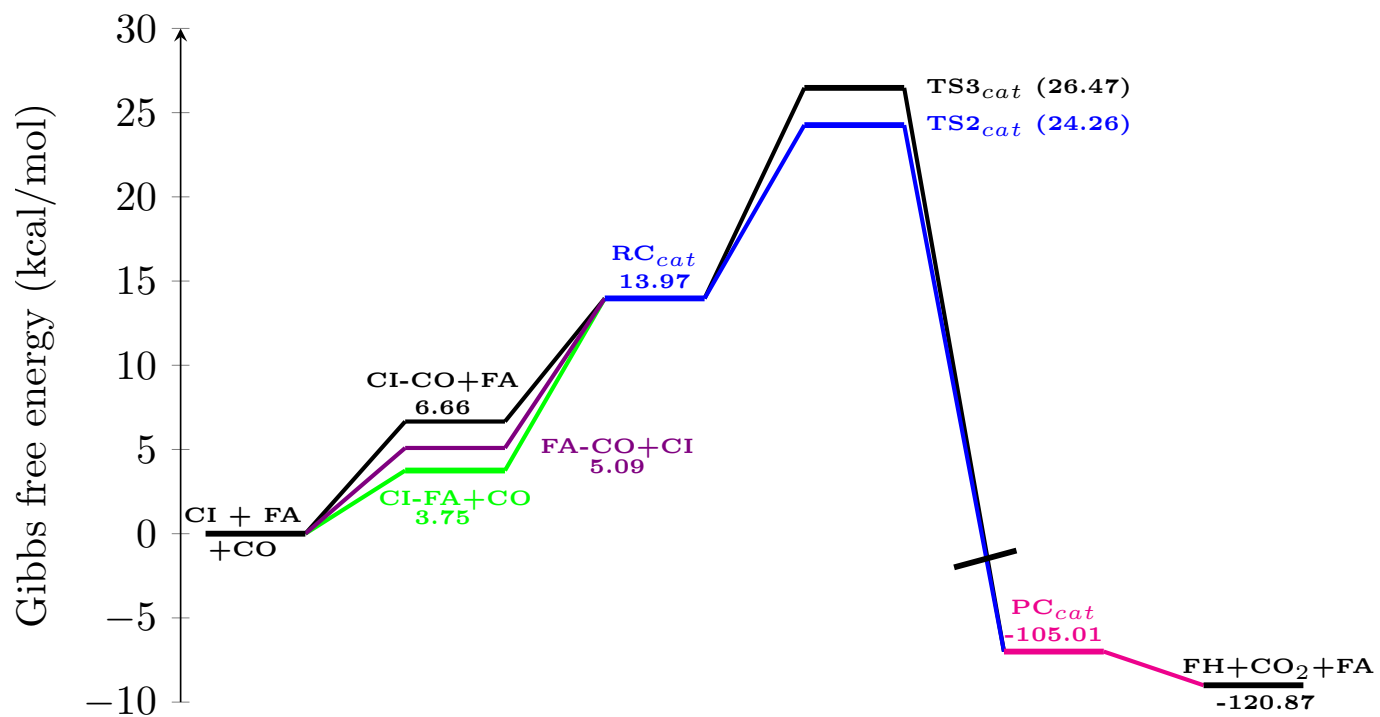
Figure S2: Gibbs free energy profile for CH_2OO + CO reaction in presence of FA calculated at CCSD(T)/aug-cc-pVTZ//M06-2X/aug-cc-pVTZ level of theory.