

Table S1 Reaction constants of path 2 at 300~1500 K

T (K)	IA	IB	IC	ID	IIA	IIB	IIC	IID
300	2.45×10^{-49}	1.42×10^{-49}	1.00×10^{-48}	2.68×10^{-49}	3.03×10^{-52}	7.31×10^{-50}	1.72×10^{-50}	2.56×10^{-51}
400	1.19×10^{-33}	4.56×10^{-34}	3.22×10^{-33}	1.28×10^{-33}	5.02×10^{-36}	4.75×10^{-34}	1.34×10^{-34}	4.29×10^{-35}
500	3.23×10^{-24}	1.73×10^{-24}	6.80×10^{-24}	3.46×10^{-24}	2.85×10^{-26}	1.54×10^{-24}	4.83×10^{-25}	2.47×10^{-25}
800	5.06×10^{-10}	2.59×10^{-10}	7.21×10^{-10}	5.36×10^{-10}	1.35×10^{-11}	3.16×10^{-10}	1.18×10^{-10}	1.20×10^{-10}
1000	2.82×10^{-5}	1.43×10^{-5}	3.51×10^{-5}	2.97×10^{-5}	1.09×10^{-6}	1.93×10^{-5}	7.68×10^{-6}	9.79×10^{-6}
1500	6.15×10	3.06×10	6.40×10	6.47×10	3.92×10	4.84×10	2.07×10	3.58×10
	IVA	IVB	IVC	IVD	PyN ₅	PhN ₅		
300	1.20×10^{-48}	2.48×10^{-49}	4.29×10^{-50}	4.12×10^{-49}	9.02×10^{-52}	3.53×10^{-53}		
400	7.89×10^{-33}	1.43×10^{-33}	2.94×10^{-34}	1.11×10^{-33}	1.48×10^{-35}	1.24×10^{-36}		
500	2.58×10^{-23}	4.31×10^{-24}	9.85×10^{-25}	2.13×10^{-24}	8.35×10^{-26}	1.11×10^{-26}		
800	5.39×10^{-9}	7.99×10^{-10}	2.12×10^{-10}	1.97×10^{-10}	3.94×10^{-11}	1.05×10^{-11}		
1000	3.31×10^{-4}	4.72×10^{-5}	1.32×10^{-5}	9.22×10^{-6}	3.19×10^{-6}	1.07×10^{-6}		
1500	8.19×10^2	1.11×10^2	3.33×10	1.59×10	1.86×10	5.27		

Table S2 Reaction constants of path 3 at 300~1500 K

T (K)	IA	IB	IC	ID	IIA	IIB	IIC	IID
300	3.47×10^{-2}	1.10×10^{-1}	2.51×10^{-2}	5.16×10^{-2}	8.92×10^{-4}	2.57×10^{-3}	9.62×10^{-4}	2.73×10^{-3}
400	2.65×10^2	6.32×10^2	2.28×10^2	4.40×10^2	1.33×10	4.48×10^1	1.77×10^1	4.83×10
500	6.13×10^5	1.23×10^5	5.87×10^{-4}	1.09×10^5	4.61×10^3	1.71×10^4	6.96×10^3	1.86×10^4
800	2.48×10^8	3.83×10^8	2.77×10^8	4.84×10^8	3.41×10^7	1.46×10^8	6.26×10^7	1.61×10^8
1000	4.10×10^9	5.80×10^9	4.82×10^9	8.25×10^9	6.89×10^8	3.10×10^9	1.35×10^9	3.44×10^9
1500	1.78×10^{11}	2.23×10^{11}	2.22×10^{11}	3.71×10^{11}	3.89×10^{10}	1.87×10^{11}	8.38×10^{11}	2.09×10^{11}
	IIIA	IIIB	IIIC	IIID	IVA	IVB	IVC	IVD
300	3.04×10^{-1}	1.47	1.69×10^{-1}	6.99×10^{-1}	7.59×10^{-2}	2.36×10^{-2}	9.16×10^{-3}	4.01×10^{-3}
400	1.28×10^3	3.90×10^3	8.46×10^2	2.38×10^3	5.89×10^2	2.51×10^2	1.15×10^2	4.43×10^1
500	2.07×10^5	4.77×10^5	1.53×10^5	3.39×10^5	1.38×10^5	7.07×10^4	3.59×10^4	1.28×10^4
800	4.85×10^8	7.37×10^8	4.27×10^8	6.65×10^8	5.66×10^8	3.84×10^8	2.28×10^8	7.23×10^7
1000	6.68×10^9	8.83×10^9	6.26×10^9	8.66×10^9	9.40×10^9	7.01×10^9	4.39×10^9	1.34×10^9
1500	2.26×10^{11}	2.49×10^{11}	2.32×10^{11}	2.72×10^{11}	4.09×10^{11}	3.46×10^{11}	2.33×10^{11}	6.71×10^{10}

k s of PyN₅ are 4.90×10^{-4} , 1.34×10 , 6.66×10^3 , 8.60×10^7 , 2.10×10^9 and 1.54×10^{10} , respectively.

k s of PhN₅ are 2.23×10^{-5} , 1.18, 8.75×10^2 , 2.05×10^7 , 6.10×10^8 and 5.79×10^{10} , respectively.