

Supplementary Information for
CO₂ as an auto-catalyst for the oxidation of
CO by Criegee intermediate (CH₂OO)

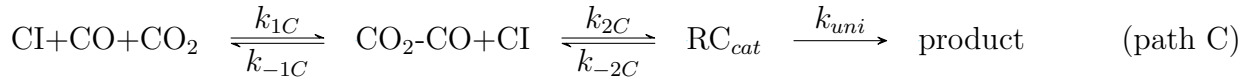
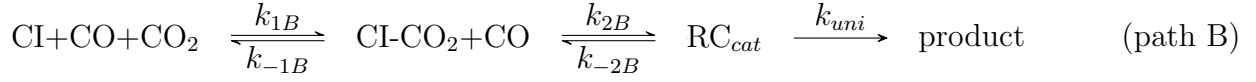
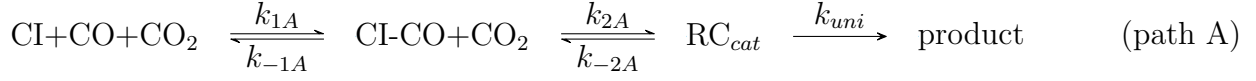
Amit Kumar and Pradeep Kumar*

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

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

Sl. No.	Contents
1	Formal proof for same value of termolecular rate constant for path A, B and C.
2.	Table S1: Optimized geometries in Cartesian coordinates and all normal mode frequencies calculated at the M062X/aug-cc-pVTZ level of theory.
3.	Table S2: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel for TS1 path within the temperature range of 213-1400 K.
4.	Table S3: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel for TS2 path within the temperature range of 213-1400 K.
5.	Table S4: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel for TS3 path within the temperature range of 213-1400 K.
6.	Table S5: The total bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel within the temperature range of 213-1400 K
7.	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)/CBS level.
8.	Table S7: Concentration of different bimolecular species in in molecules cm^{-3} , calculated using the k_{eq1} values of path A, B, and C.
9.	Table S8: Absolute energies in (Hartree) for the relevant species at post CCSD(T) level of theory.
10.	Table S9: Contribution of post-CCSD(T) corrections (kcal mol^{-1}) to the energy barrier for uncatalyzed channel
11.	Figure S1: Gibbs free energy profile for $\text{CH}_2\text{OO} + \text{CO}$ uncatalyzed reaction calculated at M062x/aug-cc-pVTZ level of theory.
12.	Figure S2: Gibbs free energy profile for $\text{CH}_2\text{OO} + \text{CO}$ reaction in the presence of CO_2 calculated at M062x/aug-cc-pVTZ level of theory.
13.	Table S10: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed channels for TS1 path within temperature range 213-1400K.
14.	Table S11: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed channels for TS2 path within temperature range 213-1400K.
15.	Table S12: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed channels for TS3 path within temperature range 213-1400K.

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



For path A,

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

and

$$K_{eq2} = \frac{[\text{RC}_{cat}]}{[\text{CI} - \text{CO}][\text{CO}_2]} \quad (2)$$

Therefore,

$$K_{eq1} \times K_{eq2} = \frac{[\text{RC}_{cat}]}{[\text{CI}][\text{CO}][\text{CO}_2]} \quad (3)$$

Similarly, for path B,

$$K_{eq1} \times K_{eq2} = \frac{[\text{CI} - \text{CO}_2]}{[\text{CI}][\text{CO}_2]} \times \frac{[\text{RC}_{cat}]}{[\text{CI} - \text{CO}_2][\text{CO}]} \quad (4)$$

$$K_{eq1} \times K_{eq2} = \frac{[RC_{cat}]}{[CI][CO][CO_2]} \quad (5)$$

and similarly, for path C,

$$K_{eq1} \times K_{eq2} = \frac{[CO_2 - CO]}{[CO_2][CO]} \times \frac{[RC_{cat}]}{[CO_2 - CO][CI]} \quad (6)$$

$$K_{eq1} \times K_{eq2} = \frac{[RC_{cat}]}{[CI][CO][CO_2]} \quad (7)$$

From the equation 3, 5 and 7, it is clear that, the product of K_{eq1} and K_{eq2} is same for path A, B and C. As the k_{uni} for path A, B and C are also same, it gives same trimolecular rate k_t .

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			
CO ₂	C	0.00	0.00	0.00	694.1376	694.1376	1410.9715
	O	0.00	0.00	1.155191	2443.6758		
	O	0.00	0.00	-1.155191			
Cl-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			
Cl-CO ₂	O	0.618277	-1.179661	0.137396	54.8979	117.6433	130.7351
	O	1.611075	-0.409286	-0.368578	170.1559	209.4792	539.3033
	C	1.93135	0.608678	0.255156	659.8885	697.473	698.0387
	H	1.422775	0.840319	1.183312	913.8022	1057.761	1261.9773
	H	2.718566	1.203811	-0.188553	1402.0726	1442.3072	1650.2237
	O	-0.825244	1.234831	-0.126969	2431.0902	3143.6099	3290.2232
	C	-1.502725	0.296551	-0.030052			
	O	-2.243245	-0.580323	0.064978			
CO ₂ -CO	O	1.622749	-0.000117	0.001484	25.2446	38.6732	67.7225
	C	2.744681	0.000028	-0.001435	74.0184	693.3825	694.9237
	O	-1.339405	1.155213	-0.00015	1410.8603	2267.599	2443.2377
	C	-1.336297	0.000035	-0.000143			
	O	-1.339632	-1.155143	-0.00015			
TS3 _{uncat}	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 _{uncat}	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			

compound	Cartesian coordinate(Å)			frequency(cm ⁻¹)			
RC _{cat}	O	-2.76911	0.286726	0.266417	24.7892	42.4198	65.3089
	O	-2.184863	-0.70568	-0.439254	76.9583	83.4465	99.2086
	C	-1.249064	-1.323516	0.086312	123.275	154.7541	177.8139
	H	-0.9483	-1.065664	1.094772	203.5277	543.1147	691.6996
	H	-0.795785	-2.099684	-0.514564	693.6456	708.4053	923.1785
	O	0.015833	1.259922	-0.072992	1050.5731	1259.3252	1411.5373
	C	-0.743354	2.084396	0.052562	1437.716	1638.8873	2216.1424
	C	2.41645	-0.365199	0.024011	2444.4648	3147.2915	3297.1771
	O	3.126472	0.530993	-0.115954			
	O	1.711654	-1.273053	0.167093			
TS3 _{cat}	O	2.498513	-0.447951	0.330908	-452.4319	31.6339	47.8002
	O	2.158993	0.682192	-0.390277	59.3641	91.1371	119.4072
	C	1.049108	1.142654	0.000447	266.972	340.6201	453.2873
	H	0.756972	1.051627	1.037304	572.0915	687.8958	695.1608
	H	0.568654	1.834575	-0.679187	706.9525	773.2047	974.3558
	O	0.229767	-0.793309	-0.194914	1101.3048	1238.2471	1410.1209
	C	1.123136	-1.498072	0.115219	1414.2476	1574.5627	1823.2202
	C	-2.424297	0.162896	0.043366	2442.9561	3159.9739	3297.7269
	O	-2.977818	-0.828139	-0.148755			
	O	-1.886118	1.170824	0.239			
PC _{cat}	O	-1.013443	0.192422	1.303138	53.6883	64.6489	78.6183
	O	0.178265	-1.449138	-0.815928	89.441	100.3751	102.0477
	C	0.644727	-2.16247	0.028951	126.8752	138.0546	165.5925
	H	0.713003	-1.839046	1.079371	187.0998	679.802	691.009
	H	1.022841	-3.167484	-0.216113	692.0876	696.8352	1227.6859
	O	-2.371944	0.327058	-0.561634	1279.8722	1407.3552	1409.055
	C	-1.68198	0.255686	0.357694	1539.4153	1852.9266	2432.498
	C	1.365235	1.079128	-0.118653	2445.8029	2968.6631	3051.1519
	O	0.612216	1.696574	-0.739598			
	O	2.13194	0.479642	0.505121			
TS1 _{cat}	C	1.073675	-1.438136	0.298154	-410.4753	25.859	42.8726
	O	0.608962	-1.131617	-0.848031	102.0859	115.4529	147.5538
	O	0.318348	0.212666	-0.836338	153.1559	186.4851	462.7562
	C	2.042266	0.454835	0.182156	515.193	621.5423	671.1911
	H	0.619817	-1.024456	1.189289	696.8284	831.6582	1003.803
	H	1.620177	-2.374418	0.338094	1123.2368	1229.878	1396.4992
	O	2.43028	1.47594	0.46978	1406.9346	1562.4796	2190.5561
	C	-2.154299	0.222465	0.229193	2437.8542	3138.954	3262.7436
	O	-1.841485	-0.71112	0.841806			
	O	-2.517336	1.149617	-0.350267			

compound	Cartesian coordinate(Å)				frequency(cm ⁻¹)		
TS2 _{cat}	C	-1.898893	-1.568351	0.219623	-711.0438	19.4943	39.9595
	O	-0.979535	-1.532262	-0.569037	87.5217	104.0573	124.7727
	O	0.311537	-0.840371	0.089039	144.5642	157.0629	248.8927
	H	-1.764068	-1.176478	1.227426	331.7142	507.3473	517.9883
	H	-2.845617	-2.000342	-0.110612	575.2013	666.2175	696.4641
	C	2.071746	-0.314444	0.427762	1193.137	1244.3591	1406.3509
	O	3.053165	-0.526172	-0.084533	1471.5371	1780.3348	2206.2465
	C	-0.690158	1.687874	-0.021036	2434.8089	3068.8492	3194.589
	O	-1.737305	1.248385	0.216353			
	O	0.316328	2.193713	-0.261186			
TS1 _{uncat}	C	1.072901	0.919128	0.160624	-403.49	145.4072	171.6239
	O	1.333182	-0.245999	-0.280892	473.8105	514.145	623.6801
	O	0.38266	-1.10809	0.194637	817.872	1007.2597	1098.924
	C	-0.974192	0.289982	-0.17767	1227.8118	1397.6813	1562.3822
	H	0.723385	1.042935	1.177305	2177.161	3140.7386	3265.4281
	H	1.56312	1.731806	-0.363654			
	O	-2.075686	0.100413	-0.002666			
TS2 _{uncat}	C	-2.381716	0.242198	0.000188	-714.2827	21.6783	99.4981
	O	-1.478746	-0.564794	-0.000003	246.4731	307.6861	501.9696
	O	-0.05696	0.161961	0.000014	513.673	573.6916	1187.6013
	H	-2.148263	1.307843	0.000337	1241.0192	1465.0324	1781.1559
	H	-3.408407	-0.12856	0.000203	2200.9724	3063.7516	3186.7355
	C	1.792988	0.446061	-0.000046			
	O	2.671835	-0.260771	-0.000184			

Table S2: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel for TS1 path within the temperature range of 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	2.62×10^{-22}	2.06×10^{-24}	3.80×10^{-24}	3.71×10^{-24}
216	3.38×10^{-22}	2.88×10^{-24}	4.77×10^{-24}	5.08×10^{-24}
219	4.33×10^{-22}	4.00×10^{-24}	5.95×10^{-24}	6.89×10^{-24}
224	6.44×10^{-22}	6.80×10^{-24}	8.45×10^{-24}	1.13×10^{-23}
235	1.46×10^{-21}	2.00×10^{-23}	1.76×10^{-23}	3.09×10^{-23}
250	3.96×10^{-21}	7.57×10^{-23}	4.33×10^{-23}	1.07×10^{-22}
259	6.85×10^{-21}	1.56×10^{-22}	7.07×10^{-23}	2.09×10^{-22}
265	9.67×10^{-21}	2.47×10^{-22}	9.65×10^{-23}	3.20×10^{-22}
278	1.95×10^{-20}	6.23×10^{-22}	1.81×10^{-22}	7.58×10^{-22}
280	2.15×10^{-20}	7.14×10^{-22}	1.98×10^{-22}	8.59×10^{-22}
290	3.52×10^{-20}	1.36×10^{-21}	3.08×10^{-22}	1.57×10^{-21}
298	5.09×10^{-20}	2.22×10^{-21}	4.30×10^{-22}	2.48×10^{-21}
300	5.57×10^{-20}	2.50×10^{-21}	4.66×10^{-22}	2.76×10^{-21}
310	8.57×10^{-20}	4.42×10^{-21}	6.88×10^{-22}	4.69×10^{-21}
320	1.29×10^{-19}	7.55×10^{-21}	9.93×10^{-22}	7.72×10^{-21}
330	1.89×10^{-19}	1.25×10^{-20}	1.40×10^{-21}	1.23×10^{-20}
350	3.81×10^{-19}	3.16×10^{-20}	2.66×10^{-21}	2.92×10^{-20}
375	8.34×10^{-19}	8.80×10^{-20}	5.41×10^{-21}	7.60×10^{-20}
400	1.67×10^{-18}	2.18×10^{-19}	1.02×10^{-20}	1.77×10^{-19}
425	3.09×10^{-18}	4.87×10^{-19}	1.79×10^{-20}	3.74×10^{-19}
450	5.38×10^{-18}	1.00×10^{-18}	2.97×10^{-20}	7.33×10^{-19}
475	8.88×10^{-18}	1.92×10^{-18}	4.72×10^{-20}	1.35×10^{-18}
500	1.40×10^{-17}	3.47×10^{-18}	7.19×10^{-20}	2.34×10^{-18}
550	3.13×10^{-17}	9.78×10^{-18}	1.51×10^{-19}	6.15×10^{-18}
600	6.22×10^{-17}	2.36×10^{-17}	2.87×10^{-19}	1.40×10^{-17}
650	1.13×10^{-16}	5.03×10^{-17}	5.00×10^{-19}	2.84×10^{-17}
700	1.90×10^{-16}	9.74×10^{-17}	8.18×10^{-19}	5.29×10^{-17}
750	3.02×10^{-16}	1.75×10^{-16}	1.27×10^{-18}	9.14×10^{-17}
800	4.57×10^{-16}	2.94×10^{-16}	1.88×10^{-18}	1.49×10^{-16}
850	6.64×10^{-16}	4.70×10^{-16}	2.69×10^{-18}	2.32×10^{-16}
900	9.33×10^{-16}	7.17×10^{-16}	3.74×10^{-18}	3.45×10^{-16}
950	1.27×10^{-15}	1.05×10^{-15}	5.05×10^{-18}	4.97×10^{-16}
1000	1.70×10^{-15}	1.50×10^{-15}	6.67×10^{-18}	6.93×10^{-16}
1100	2.83×10^{-15}	2.81×10^{-15}	1.10×10^{-17}	1.25×10^{-15}
1200	4.41×10^{-15}	4.83×10^{-15}	1.70×10^{-17}	2.09×10^{-15}
1300	6.53×10^{-15}	7.74×10^{-15}	2.52×10^{-17}	3.28×10^{-15}
1400	9.25×10^{-15}	1.18×10^{-14}	3.57×10^{-17}	4.88×10^{-15}

Table S3: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel for TS2 path within the temperature range of 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	4.26×10^{-23}	3.34×10^{-25}	6.18×10^{-25}	5.63×10^{-26}
216	5.79×10^{-23}	4.93×10^{-25}	8.17×10^{-25}	8.57×10^{-26}
219	7.81×10^{-23}	7.22×10^{-25}	1.07×10^{-24}	1.29×10^{-25}
224	1.26×10^{-22}	1.33×10^{-24}	1.66×10^{-24}	2.48×10^{-25}
235	3.40×10^{-22}	4.69×10^{-24}	4.12×10^{-24}	9.60×10^{-25}
250	1.15×10^{-21}	2.20×10^{-23}	1.26×10^{-23}	5.04×10^{-24}
259	2.25×10^{-21}	5.13×10^{-23}	2.32×10^{-23}	1.25×10^{-23}
265	3.43×10^{-21}	8.76×10^{-23}	3.42×10^{-23}	2.21×10^{-23}
278	8.07×10^{-21}	2.59×10^{-22}	7.50×10^{-23}	7.07×10^{-23}
280	9.15×10^{-21}	3.03×10^{-22}	8.42×10^{-23}	8.37×10^{-23}
290	1.67×10^{-20}	6.48×10^{-22}	1.46×10^{-22}	1.89×10^{-22}
298	2.63×10^{-20}	1.15×10^{-21}	2.22×10^{-22}	3.49×10^{-22}
300	2.94×10^{-20}	1.32×10^{-21}	2.46×10^{-22}	4.05×10^{-22}
310	5.00×10^{-20}	2.58×10^{-21}	4.02×10^{-22}	8.30×10^{-22}
320	8.26×10^{-20}	4.84×10^{-21}	6.38×10^{-22}	1.63×10^{-21}
330	1.33×10^{-19}	8.78×10^{-21}	9.87×10^{-22}	3.08×10^{-21}
350	3.17×10^{-19}	2.62×10^{-20}	2.21×10^{-21}	9.91×10^{-21}
375	8.38×10^{-19}	8.85×10^{-20}	5.44×10^{-21}	3.63×10^{-20}
400	1.98×10^{-18}	2.59×10^{-19}	1.21×10^{-20}	1.14×10^{-19}
425	4.29×10^{-18}	6.76×10^{-19}	2.48×10^{-20}	3.18×10^{-19}
450	8.57×10^{-18}	1.60×10^{-18}	4.74×10^{-20}	7.96×10^{-19}
475	1.61×10^{-17}	3.48×10^{-18}	8.53×10^{-20}	1.82×10^{-18}
500	2.85×10^{-17}	7.05×10^{-18}	1.46×10^{-19}	3.87×10^{-18}
550	7.80×10^{-17}	2.43×10^{-17}	3.76×10^{-19}	1.44×10^{-17}
600	1.84×10^{-16}	6.97×10^{-17}	8.48×10^{-19}	4.42×10^{-17}
650	3.87×10^{-16}	1.73×10^{-16}	1.72×10^{-18}	1.16×10^{-16}
700	7.42×10^{-16}	3.81×10^{-16}	3.20×10^{-18}	2.68×10^{-16}
750	1.32×10^{-15}	7.65×10^{-16}	5.55×10^{-18}	5.60×10^{-16}
800	2.21×10^{-15}	1.42×10^{-15}	9.12×10^{-18}	1.08×10^{-15}
850	3.52×10^{-15}	2.49×10^{-15}	1.43×10^{-17}	1.95×10^{-15}
900	5.36×10^{-15}	4.12×10^{-15}	2.15×10^{-17}	3.32×10^{-15}
950	7.86×10^{-15}	6.51×10^{-15}	3.12×10^{-17}	5.39×10^{-15}
1000	1.12×10^{-14}	9.90×10^{-15}	4.40×10^{-17}	8.38×10^{-15}
1100	2.09×10^{-14}	2.08×10^{-14}	8.13×10^{-17}	1.83×10^{-14}
1200	3.59×10^{-14}	3.93×10^{-14}	1.39×10^{-16}	3.58×10^{-14}
1300	5.77×10^{-14}	6.84×10^{-14}	2.22×10^{-16}	6.41×10^{-14}
1400	8.77×10^{-14}	1.12×10^{-13}	3.38×10^{-16}	1.07×10^{-13}

Table S4: Bimolecular rate constant k_b in ($\text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel for TS3 path within the temperature range of 213-1400 K

Temp (K)	path A	path B	path C	uncat
213	1.85×10^{-26}	1.45×10^{-28}	2.68×10^{-28}	1.14×10^{-27}
216	2.71×10^{-26}	2.31×10^{-28}	3.82×10^{-28}	1.71×10^{-27}
219	3.92×10^{-26}	3.62×10^{-28}	5.39×10^{-28}	2.55×10^{-27}
224	7.10×10^{-26}	7.50×10^{-28}	9.32×10^{-28}	4.81×10^{-27}
235	2.41×10^{-25}	3.32×10^{-27}	2.92×10^{-27}	1.77×10^{-26}
250	1.08×10^{-24}	2.06×10^{-26}	1.17×10^{-26}	8.76×10^{-26}
259	2.43×10^{-24}	5.55×10^{-26}	2.51×10^{-26}	2.09×10^{-25}
265	4.06×10^{-24}	1.04×10^{-25}	4.05×10^{-26}	3.62×10^{-25}
278	1.15×10^{-23}	3.68×10^{-25}	1.07×10^{-25}	1.10×10^{-24}
280	1.34×10^{-23}	4.43×10^{-25}	1.23×10^{-25}	1.29×10^{-24}
290	2.77×10^{-23}	1.07×10^{-24}	2.42×10^{-25}	2.80×10^{-24}
298	4.78×10^{-23}	2.09×10^{-24}	4.04×10^{-25}	5.02×10^{-24}
300	5.46×10^{-23}	2.45×10^{-24}	4.57×10^{-25}	5.78×10^{-24}
310	1.03×10^{-22}	5.33×10^{-24}	8.29×10^{-25}	1.14×10^{-23}
320	1.88×10^{-22}	1.10×10^{-23}	1.45×10^{-24}	2.15×10^{-23}
330	3.30×10^{-22}	2.19×10^{-23}	2.46×10^{-24}	3.93×10^{-23}
350	9.30×10^{-22}	7.69×10^{-23}	6.48×10^{-24}	1.18×10^{-22}
375	2.92×10^{-21}	3.09×10^{-22}	1.90×10^{-23}	3.99×10^{-22}
400	8.01×10^{-21}	1.05×10^{-21}	4.89×10^{-23}	1.16×10^{-21}
425	1.96×10^{-20}	3.10×10^{-21}	1.14×10^{-22}	3.01×10^{-21}
450	4.38×10^{-20}	8.16×10^{-21}	2.42×10^{-22}	7.06×10^{-21}
475	9.03×10^{-20}	1.95×10^{-20}	4.80×10^{-22}	1.52×10^{-20}
500	1.74×10^{-19}	4.31×10^{-20}	8.92×10^{-22}	3.04×10^{-20}
550	5.49×10^{-19}	1.71×10^{-19}	2.65×10^{-21}	1.02×10^{-19}
600	1.45×10^{-18}	5.49×10^{-19}	6.68×10^{-21}	2.86×10^{-19}
650	3.35×10^{-18}	1.49×10^{-18}	1.49×10^{-20}	6.90×10^{-19}
700	6.94×10^{-18}	3.56×10^{-18}	2.99×10^{-20}	1.49×10^{-18}
750	1.32×10^{-17}	7.65×10^{-18}	5.55×10^{-20}	2.93×10^{-18}
800	2.34×10^{-17}	1.51×10^{-17}	9.66×10^{-20}	5.35×10^{-18}
850	3.92×10^{-17}	2.77×10^{-17}	1.59×10^{-19}	9.17×10^{-18}
900	6.23×10^{-17}	4.79×10^{-17}	2.50×10^{-19}	1.49×10^{-17}
950	9.52×10^{-17}	7.88×10^{-17}	3.78×10^{-19}	2.33×10^{-17}
1000	1.40×10^{-16}	1.24×10^{-16}	5.51×10^{-19}	3.49×10^{-17}
1100	2.78×10^{-16}	2.77×10^{-16}	1.08×10^{-18}	7.15×10^{-17}
1200	5.02×10^{-16}	5.49×10^{-16}	1.94×10^{-18}	1.32×10^{-16}
1300	8.41×10^{-16}	9.98×10^{-16}	3.24×10^{-18}	2.27×10^{-16}
1400	1.33×10^{-15}	1.69×10^{-15}	5.11×10^{-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 CO_2 catalyzed and uncatalyzed channel within the temperature range of 213-1400 K

Temp (K)	k_{tot}^{cat}	k_{tot}^{uncat}	k_{tot}
213	3.12×10^{-22}	3.77×10^{-24}	3.16×10^{-22}
216	4.05×10^{-22}	5.17×10^{-24}	4.10×10^{-22}
219	5.23×10^{-22}	7.03×10^{-24}	5.30×10^{-22}
224	7.88×10^{-22}	1.15×10^{-23}	8.00×10^{-22}
235	1.84×10^{-21}	3.19×10^{-23}	1.87×10^{-21}
250	5.27×10^{-21}	1.12×10^{-22}	5.38×10^{-21}
259	9.40×10^{-21}	2.22×10^{-22}	9.62×10^{-21}
265	1.36×10^{-20}	3.43×10^{-22}	1.39×10^{-20}
278	2.87×10^{-20}	8.30×10^{-22}	2.95×10^{-20}
280	3.20×10^{-20}	9.44×10^{-22}	3.29×10^{-20}
290	5.44×10^{-20}	1.76×10^{-21}	5.61×10^{-20}
298	8.13×10^{-20}	2.83×10^{-21}	8.42×10^{-20}
300	8.97×10^{-20}	3.17×10^{-21}	9.28×10^{-20}
310	1.44×10^{-19}	5.53×10^{-21}	1.49×10^{-19}
320	2.25×10^{-19}	9.37×10^{-21}	2.35×10^{-19}
330	3.45×10^{-19}	1.55×10^{-20}	3.61×10^{-19}
350	7.62×10^{-19}	3.93×10^{-20}	8.02×10^{-19}
375	1.86×10^{-18}	1.13×10^{-19}	1.98×10^{-18}
400	4.16×10^{-18}	2.92×10^{-19}	4.45×10^{-18}
425	8.60×10^{-18}	6.95×10^{-19}	9.30×10^{-18}
450	1.67×10^{-17}	1.54×10^{-18}	1.82×10^{-17}
475	3.06×10^{-17}	3.18×10^{-18}	3.38×10^{-17}
500	5.35×10^{-17}	6.24×10^{-18}	5.97×10^{-17}
550	1.45×10^{-16}	2.07×10^{-17}	1.65×10^{-16}
600	3.42×10^{-16}	5.84×10^{-17}	4.01×10^{-16}
650	7.29×10^{-16}	1.45×10^{-16}	8.74×10^{-16}
700	1.42×10^{-15}	3.22×10^{-16}	1.75×10^{-15}
750	2.59×10^{-15}	6.55×10^{-16}	3.24×10^{-15}
800	4.44×10^{-15}	1.24×10^{-15}	5.67×10^{-15}
850	7.22×10^{-15}	2.19×10^{-15}	9.41×10^{-15}
900	1.13×10^{-14}	3.68×10^{-15}	1.49×10^{-14}
950	1.69×10^{-14}	5.91×10^{-15}	2.28×10^{-14}
1000	2.46×10^{-14}	9.11×10^{-15}	3.37×10^{-14}
1100	4.80×10^{-14}	1.96×10^{-14}	6.76×10^{-14}
1200	8.56×10^{-14}	3.80×10^{-14}	1.24×10^{-13}
1300	1.42×10^{-13}	6.76×10^{-14}	2.10×10^{-13}
1400	2.24×10^{-13}	1.12×10^{-13}	3.36×10^{-13}

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)/CBS level.

Species	ΔE
RC _{uncat}	-1.48
TS1 _{uncat}	9.64
TS2 _{uncat}	12.36
TS3 _{uncat}	12.71
PC _{uncat}	-121.43
RC _{cat}	-3.47
TS1 _{cat}	6.07
TS2 _{cat}	7.33
TS3 _{cat}	10.05
PC _{cat}	-123.75
Product	-119.22
CI-CO ₂	-3.96
CO ₂ -CO	-0.65

Table S7: Concentration of different bimolecular species in molecules cm⁻³, calculated using the k_{eq1} values of path A, B, and C

Temp (K)	[CI]	[CO]	[CO ₂]	k_{eq1}^{pathA}	k_{eq1}^{pathB}	k_{eq1}^{pathC}	[CI-CO]	[CI-CO ₂]	[CO ₂ -CO]
280	5.00×10 ⁴	1.00×10 ¹³	1.00×10 ¹⁷	9.67×10 ⁻²⁵	1.22×10 ⁻²³	4.38×10 ⁻²³	4.83×10 ⁻⁷	6.09×10 ⁻²	4.38×10 ⁷
290	5.00×10 ⁴	1.00×10 ¹³	1.00×10 ¹⁷	9.13×10 ⁻²⁵	1.01×10 ⁻²³	4.46×10 ⁻²³	4.57×10 ⁻⁷	5.05×10 ⁻²	4.46×10 ⁷
298	5.00×10 ⁴	1.00×10 ¹³	1.00×10 ¹⁷	8.76×10 ⁻²⁵	8.78×10 ⁻²⁴	4.54×10 ⁻²³	4.38×10 ⁻⁷	4.39×10 ⁻²	4.54×10 ⁷
300	5.00×10 ⁴	1.00×10 ¹³	1.00×10 ¹⁷	8.68×10 ⁻²⁵	8.49×10 ⁻²⁴	4.55×10 ⁻²³	4.34×10 ⁻⁷	4.24×10 ⁻²	4.55×10 ⁷
310	5.00×10 ⁴	1.00×10 ¹³	1.00×10 ¹⁷	8.30×10 ⁻²⁵	7.24×10 ⁻²⁴	4.65×10 ⁻²³	4.15×10 ⁻⁷	3.62×10 ⁻²	4.65×10 ⁷
320	5.00×10 ⁴	1.00×10 ¹³	1.00×10 ¹⁷	7.98×10 ⁻²⁵	6.26×10 ⁻²⁴	4.75×10 ⁻²³	3.99×10 ⁻⁷	3.13×10 ⁻²	4.75×10 ⁷

2 Post CCSD(T) calculation

To check the accuracy of CCSD(T)/CBS method we have calculate the post CCSD(T) calculation for the TS of uncatalyzed chanel. The post CCSD(T) calculation contains the following corrections.

1. The contribution accounted for the full triple excitation (ΔE_T) at CCSDT/cc-PVDZ level of theory calculated using MRCC¹ code can be expressed as follows.

$$\Delta E_T = E_{CCSDT} - E_{CCSD(T)}$$

2. The contribution accounted for partial quadratic excitation (ΔE_Q) at CCSDT(Q)/cc-pVDZ level of theory calculated using MRCC¹ code can be expressed as follows.

$$\Delta E_{(Q)} = E_{CCSDT(Q)} - E_{CCSDT}$$

Table S8: Absolute energies in (Hartree) for the relevant species at post CCSD(T) level of theory.

Species	CCSD(T)/cc-pVDZ	CCSDT/cc-pVDZ	CCSDT(Q)/cc-pVDZ
CI	-189.1175961304	-189.1184696288	-189.1219351598
CO	-113.0537580673	-113.0542080256	-113.0552763453
TS1 _{uncat}	-302.1563240324	-302.1572189837	-302.1618598707
TS2 _{uncat}	-302.1520315958	-302.1535867506	-302.1572677511
TS3 _{uncat}	-302.1516393468	-302.1520605201	-302.156714676

Table S9: Contribution of post-CCSD(T) corrections (kcal mol⁻¹) to the energy barrier for uncatalyzed channel.

complexes	$\Delta E_{CCSD(T)/CBS}$	ΔE_T	$\Delta E_{(Q)}$	Final barrier
CI+CO	0.00	0.00	0.00	0.00
TS1 _{uncat}	6.07	0.26	-0.67	6.27
TS2 _{uncat}	12.36	-0.14	0.53	12.74
TS3 _{uncat}	12.70	0.56	-0.07	13.19

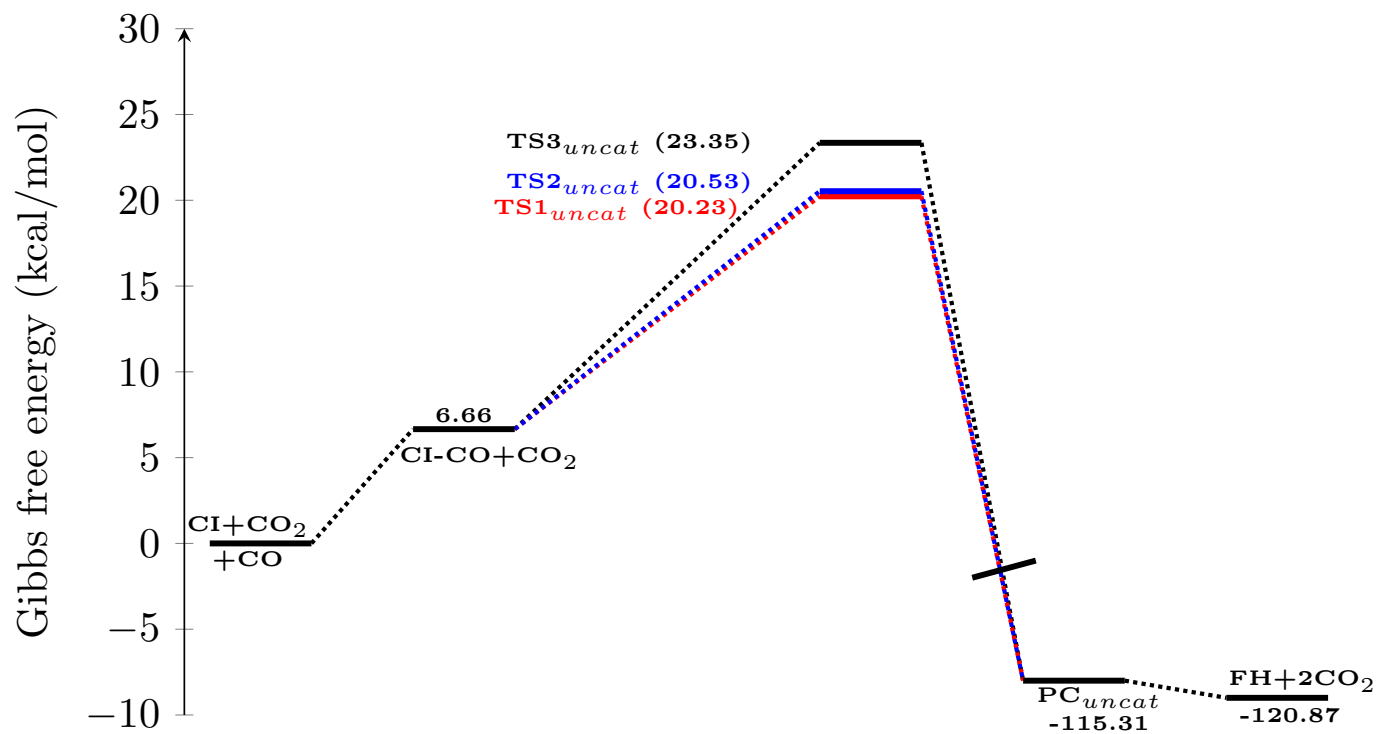


Figure S1: Gibbs free energy profile for $\text{CH}_2\text{OO} + \text{CO}$ uncatalyzed reaction calculated at CCSD(T)/CBS//M062X/aug-cc-pVTZ level of theory, where $\text{CI}=\text{CH}_2\text{OO}$, $\text{FH}=\text{CH}_2\text{O}$

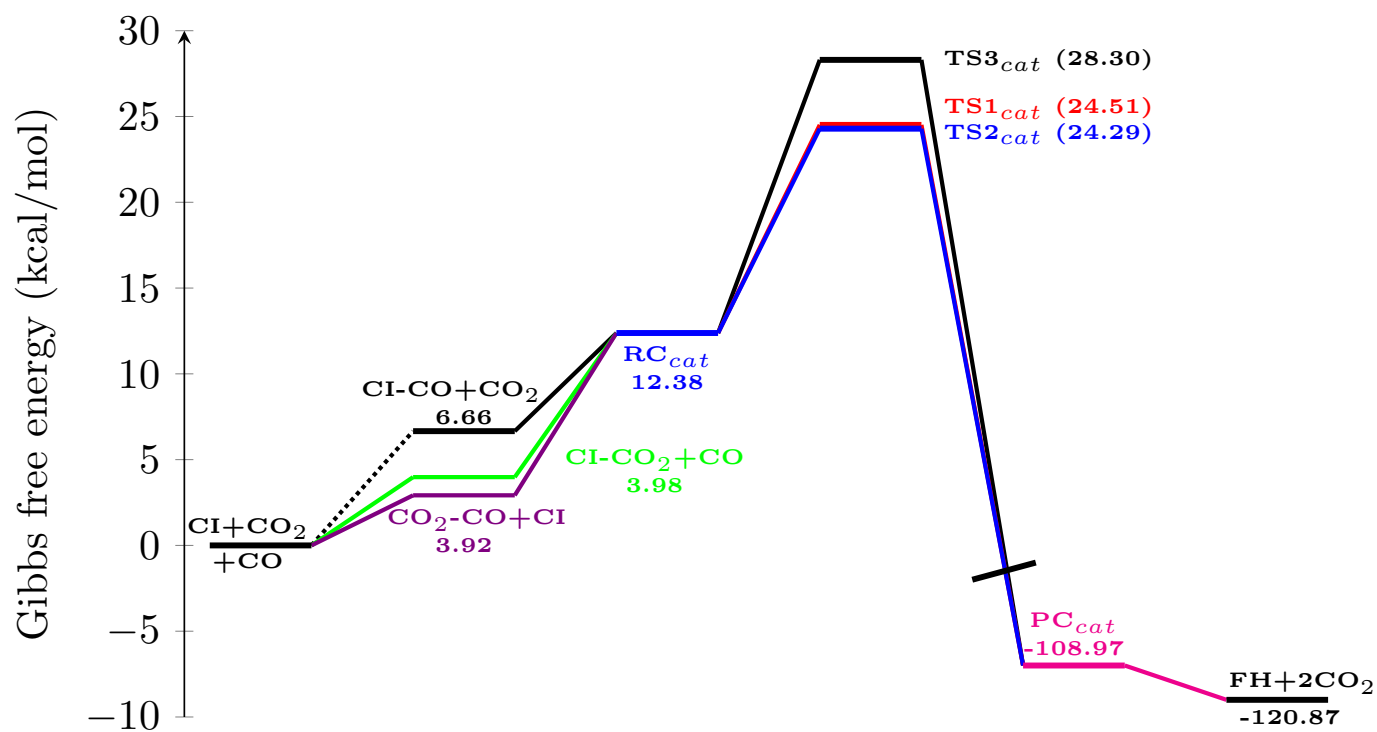


Figure S2: Gibbs free energy profile for $\text{CH}_2\text{OO} + \text{CO}$ reaction in presence of CO_2 , calculated at CCSD(T)/CBS//M062X/aug-cc-pVTZ level of theory, where $\text{CI}=\text{CH}_2\text{OO}$, $\text{FH}=\text{CH}_2\text{O}$. CI-CO , CI-CO_2 and $\text{CO}_2\text{-CO}$ are pre-reactive complexes.

Table S10: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed channel for TS1 path within temperature range 213-1400K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	1.80×10^{-24}	5.79×10^{-24}	4.53×10^1	4.73×10^{-46}	7.45×10^{-23}	4.53×10^{-26}	4.53×10^1	4.73×10^{-46}	4.03×10^{-23}	8.39×10^{-26}	4.53×10^1	4.73×10^{-46}
216	1.73×10^{-24}	5.53×10^{-24}	6.12×10^1	5.86×10^{-46}	6.68×10^{-23}	4.71×10^{-26}	6.12×10^1	5.86×10^{-46}	4.03×10^{-23}	7.80×10^{-26}	6.12×10^1	5.86×10^{-46}
219	1.67×10^{-24}	5.29×10^{-24}	8.18×10^1	7.21×10^{-46}	6.01×10^{-23}	4.89×10^{-26}	8.18×10^1	7.21×10^{-46}	4.04×10^{-23}	7.28×10^{-26}	8.18×10^1	7.21×10^{-46}
224	1.57×10^{-24}	4.94×10^{-24}	1.30×10^2	1.01×10^{-45}	5.04×10^{-23}	5.21×10^{-26}	1.30×10^2	1.01×10^{-45}	4.05×10^{-23}	6.48×10^{-26}	1.30×10^2	1.01×10^{-45}
235	1.39×10^{-24}	4.30×10^{-24}	3.39×10^2	2.02×10^{-45}	3.60×10^{-23}	5.92×10^{-26}	3.39×10^2	2.02×10^{-45}	4.09×10^{-23}	5.20×10^{-26}	3.39×10^2	2.02×10^{-45}
250	1.20×10^{-24}	3.65×10^{-24}	1.08×10^3	4.76×10^{-45}	2.38×10^{-23}	6.98×10^{-26}	1.08×10^3	4.76×10^{-45}	4.17×10^{-23}	3.99×10^{-26}	1.08×10^3	4.76×10^{-45}
259	1.12×10^{-24}	3.36×10^{-24}	2.04×10^3	7.64×10^{-45}	1.91×10^{-23}	7.67×10^{-26}	2.04×10^3	7.64×10^{-45}	4.22×10^{-23}	3.47×10^{-26}	2.04×10^3	7.64×10^{-45}
265	1.07×10^{-24}	3.19×10^{-24}	3.03×10^3	1.03×10^{-44}	1.66×10^{-23}	8.15×10^{-26}	3.03×10^3	1.03×10^{-44}	4.26×10^{-23}	3.18×10^{-26}	3.03×10^3	1.03×10^{-44}
278	9.78×10^{-25}	2.89×10^{-24}	6.74×10^3	1.90×10^{-44}	1.27×10^{-23}	9.25×10^{-26}	6.74×10^3	1.90×10^{-44}	4.36×10^{-23}	2.68×10^{-26}	6.74×10^3	1.90×10^{-44}
280	9.67×10^{-25}	2.85×10^{-24}	7.57×10^3	2.08×10^{-44}	1.22×10^{-23}	9.43×10^{-26}	7.57×10^3	2.08×10^{-44}	4.38×10^{-23}	2.62×10^{-26}	7.57×10^3	2.08×10^{-44}
290	9.13×10^{-25}	2.67×10^{-24}	1.32×10^4	3.21×10^{-44}	1.01×10^{-23}	1.03×10^{-25}	1.32×10^4	3.21×10^{-44}	4.46×10^{-23}	2.34×10^{-26}	1.32×10^4	3.21×10^{-44}
298	8.76×10^{-25}	2.54×10^{-24}	2.00×10^4	4.46×10^{-44}	8.78×10^{-24}	1.11×10^{-25}	2.00×10^4	4.46×10^{-44}	4.54×10^{-23}	2.15×10^{-26}	2.00×10^4	4.46×10^{-44}
300	8.68×10^{-25}	2.51×10^{-24}	2.21×10^4	4.83×10^{-44}	8.49×10^{-24}	1.13×10^{-25}	2.21×10^4	4.83×10^{-44}	4.55×10^{-23}	2.11×10^{-26}	2.21×10^4	4.83×10^{-44}
310	8.30×10^{-25}	2.39×10^{-24}	3.59×10^4	7.11×10^{-44}	7.24×10^{-24}	1.23×10^{-25}	3.59×10^4	7.11×10^{-44}	4.65×10^{-23}	1.92×10^{-26}	3.59×10^4	7.11×10^{-44}
320	7.98×10^{-25}	2.28×10^{-24}	5.64×10^4	1.03×10^{-43}	6.26×10^{-24}	1.34×10^{-25}	5.64×10^4	1.03×10^{-43}	4.75×10^{-23}	1.76×10^{-26}	5.64×10^4	1.03×10^{-43}
330	7.70×10^{-25}	2.19×10^{-24}	8.63×10^4	1.45×10^{-43}	5.46×10^{-24}	1.45×10^{-25}	8.63×10^4	1.45×10^{-43}	4.86×10^{-23}	1.63×10^{-26}	8.63×10^4	1.45×10^{-43}
350	7.27×10^{-25}	2.04×10^{-24}	1.87×10^5	2.77×10^{-43}	4.29×10^{-24}	1.69×10^{-25}	1.87×10^5	2.77×10^{-43}	5.09×10^{-23}	1.42×10^{-26}	1.87×10^5	2.77×10^{-43}
375	6.89×10^{-25}	1.91×10^{-24}	4.36×10^5	5.74×10^{-43}	3.32×10^{-24}	2.02×10^{-25}	4.36×10^5	5.74×10^{-43}	5.40×10^{-23}	1.24×10^{-26}	4.36×10^5	5.74×10^{-43}
400	6.63×10^{-25}	1.82×10^{-24}	9.14×10^5	1.10×10^{-42}	2.68×10^{-24}	2.38×10^{-25}	9.14×10^5	1.10×10^{-42}	5.73×10^{-23}	1.11×10^{-26}	9.14×10^5	1.10×10^{-42}
425	6.48×10^{-25}	1.76×10^{-24}	1.75×10^6	2.00×10^{-42}	2.23×10^{-24}	2.78×10^{-25}	1.75×10^6	2.00×10^{-42}	6.08×10^{-23}	1.02×10^{-26}	1.75×10^6	2.00×10^{-42}
450	6.39×10^{-25}	1.73×10^{-24}	3.11×10^6	3.43×10^{-42}	1.92×10^{-24}	3.22×10^{-25}	3.11×10^6	3.43×10^{-42}	6.46×10^{-23}	9.55×10^{-27}	3.11×10^6	3.43×10^{-42}
475	6.35×10^{-25}	1.71×10^{-24}	5.20×10^6	5.64×10^{-42}	1.68×10^{-24}	3.69×10^{-25}	5.20×10^6	5.64×10^{-42}	6.85×10^{-23}	9.06×10^{-27}	5.20×10^6	5.64×10^{-42}
500	6.36×10^{-25}	1.70×10^{-24}	8.25×10^6	8.93×10^{-42}	1.50×10^{-24}	4.21×10^{-25}	8.25×10^6	8.93×10^{-42}	7.27×10^{-23}	8.71×10^{-27}	8.25×10^6	8.93×10^{-42}
550	6.49×10^{-25}	1.72×10^{-24}	1.83×10^7	2.03×10^{-41}	1.26×10^{-24}	5.36×10^{-25}	1.83×10^7	2.03×10^{-41}	8.15×10^{-23}	8.29×10^{-27}	1.83×10^7	2.03×10^{-41}
600	6.71×10^{-25}	1.76×10^{-24}	3.53×10^7	4.17×10^{-41}	1.11×10^{-24}	6.68×10^{-25}	3.53×10^7	4.17×10^{-41}	9.10×10^{-23}	8.13×10^{-27}	3.53×10^7	4.17×10^{-41}
650	7.02×10^{-25}	1.83×10^{-24}	6.15×10^7	7.91×10^{-41}	1.01×10^{-24}	8.18×10^{-25}	6.15×10^7	7.91×10^{-41}	1.01×10^{-22}	8.14×10^{-27}	6.15×10^7	7.91×10^{-41}
700	7.39×10^{-25}	1.92×10^{-24}	9.88×10^7	1.40×10^{-40}	9.41×10^{-25}	9.86×10^{-25}	9.88×10^7	1.40×10^{-40}	1.12×10^{-22}	8.27×10^{-27}	9.88×10^7	1.40×10^{-40}
750	7.82×10^{-25}	2.02×10^{-24}	1.49×10^8	2.36×10^{-40}	8.97×10^{-25}	1.17×10^{-24}	1.49×10^8	2.36×10^{-40}	1.24×10^{-22}	8.51×10^{-27}	1.49×10^8	2.36×10^{-40}
800	8.30×10^{-25}	2.14×10^{-24}	2.13×10^8	3.79×10^{-40}	8.69×10^{-25}	1.38×10^{-24}	2.13×10^8	3.79×10^{-40}	1.36×10^{-22}	8.83×10^{-27}	2.13×10^8	3.79×10^{-40}
850	8.83×10^{-25}	2.27×10^{-24}	2.92×10^8	5.86×10^{-40}	8.52×10^{-25}	1.61×10^{-24}	2.92×10^8	5.86×10^{-40}	1.49×10^{-22}	9.21×10^{-27}	2.92×10^8	5.86×10^{-40}
900	9.41×10^{-25}	2.41×10^{-24}	3.87×10^8	8.78×10^{-40}	8.44×10^{-25}	1.85×10^{-24}	3.87×10^8	8.78×10^{-40}	1.62×10^{-22}	9.66×10^{-27}	3.87×10^8	8.78×10^{-40}
950	1.00×10^{-24}	2.56×10^{-24}	4.97×10^8	1.28×10^{-39}	8.43×10^{-25}	2.12×10^{-24}	4.97×10^8	1.28×10^{-39}	1.76×10^{-22}	1.02×10^{-26}	4.97×10^8	1.28×10^{-39}
1000	1.07×10^{-24}	2.73×10^{-24}	6.22×10^8	1.81×10^{-39}	8.48×10^{-25}	2.41×10^{-24}	6.22×10^8	1.81×10^{-39}	1.91×10^{-22}	1.07×10^{-26}	6.22×10^8	1.81×10^{-39}
1100	1.21×10^{-24}	3.08×10^{-24}	9.17×10^8	3.43×10^{-39}	8.69×10^{-25}	3.07×10^{-24}	9.17×10^8	3.43×10^{-39}	2.22×10^{-22}	1.20×10^{-26}	9.17×10^8	3.43×10^{-39}
1200	1.38×10^{-24}	3.48×10^{-24}	1.27×10^9	6.07×10^{-39}	9.04×10^{-25}	3.81×10^{-24}	1.27×10^9	6.07×10^{-39}	2.56×10^{-22}	1.35×10^{-26}	1.27×10^9	6.07×10^{-39}
1300	1.55×10^{-24}	3.92×10^{-24}	1.66×10^9	1.01×10^{-38}	9.49×10^{-25}	4.66×10^{-24}	1.66×10^9	1.01×10^{-38}	2.92×10^{-22}	1.51×10^{-26}	1.66×10^9	1.01×10^{-38}
1400	1.75×10^{-24}	4.40×10^{-24}	2.10×10^9	1.62×10^{-38}	1.00×10^{-24}	5.60×10^{-24}	2.10×10^9	1.62×10^{-38}	3.31×10^{-22}	1.70×10^{-26}	2.10×10^9	1.62×10^{-38}

Table S11: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed channel for TS2 path within temperature range 213-1400K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	1.80×10^{-24}	5.79×10^{-24}	7.36	2.49×10^{-47}	7.45×10^{-23}	4.53×10^{-26}	7.36	2.49×10^{-47}	4.03×10^{-23}	8.39×10^{-26}	7.36	2.49×10^{-47}
216	1.73×10^{-24}	5.53×10^{-24}	1.05×10^1	3.30×10^{-47}	6.68×10^{-23}	4.71×10^{-26}	1.05×10^1	3.30×10^{-47}	4.03×10^{-23}	7.80×10^{-26}	1.05×10^1	3.30×10^{-47}
219	1.67×10^{-24}	5.29×10^{-24}	1.48×10^1	4.34×10^{-47}	6.01×10^{-23}	4.89×10^{-26}	1.48×10^1	4.34×10^{-47}	4.04×10^{-23}	7.28×10^{-26}	1.48×10^1	4.34×10^{-47}
224	1.57×10^{-24}	4.94×10^{-24}	2.56×10^1	6.72×10^{-47}	5.04×10^{-23}	5.21×10^{-26}	2.56×10^1	6.72×10^{-47}	4.05×10^{-23}	6.48×10^{-26}	2.56×10^1	6.72×10^{-47}
235	1.39×10^{-24}	4.30×10^{-24}	7.93×10^1	1.69×10^{-46}	3.60×10^{-23}	5.92×10^{-26}	7.93×10^1	1.69×10^{-46}	4.09×10^{-23}	5.20×10^{-26}	7.93×10^1	1.69×10^{-46}
250	1.20×10^{-24}	3.65×10^{-24}	3.15×10^2	5.24×10^{-46}	2.38×10^{-23}	6.98×10^{-26}	3.15×10^2	5.24×10^{-46}	4.17×10^{-23}	3.99×10^{-26}	3.15×10^2	5.24×10^{-46}
259	1.12×10^{-24}	3.36×10^{-24}	6.69×10^2	9.81×10^{-46}	1.91×10^{-23}	7.67×10^{-26}	6.69×10^2	9.81×10^{-46}	4.22×10^{-23}	3.47×10^{-26}	6.69×10^2	9.81×10^{-46}
265	1.07×10^{-24}	3.19×10^{-24}	1.07×10^3	1.46×10^{-45}	1.66×10^{-23}	8.15×10^{-26}	1.07×10^3	1.46×10^{-45}	4.26×10^{-23}	3.18×10^{-26}	1.07×10^3	1.46×10^{-45}
278	9.78×10^{-25}	2.89×10^{-24}	2.80×10^3	3.27×10^{-45}	1.27×10^{-23}	9.25×10^{-26}	2.80×10^3	3.27×10^{-45}	4.36×10^{-23}	2.68×10^{-26}	2.80×10^3	3.27×10^{-45}
280	9.67×10^{-25}	2.85×10^{-24}	3.21×10^3	3.69×10^{-45}	1.22×10^{-23}	9.43×10^{-26}	3.21×10^3	3.69×10^{-45}	4.38×10^{-23}	2.62×10^{-26}	3.21×10^3	3.69×10^{-45}
290	9.13×10^{-25}	2.67×10^{-24}	6.27×10^3	6.54×10^{-45}	1.01×10^{-23}	1.03×10^{-25}	6.27×10^3	6.54×10^{-45}	4.46×10^{-23}	2.34×10^{-26}	6.27×10^3	6.54×10^{-45}
298	8.76×10^{-25}	2.54×10^{-24}	1.04×10^4	1.01×10^{-44}	8.78×10^{-24}	1.11×10^{-25}	1.04×10^4	1.01×10^{-44}	4.54×10^{-23}	2.15×10^{-26}	1.04×10^4	1.01×10^{-44}
300	8.68×10^{-25}	2.51×10^{-24}	1.17×10^4	1.12×10^{-44}	8.49×10^{-24}	1.13×10^{-25}	1.17×10^4	1.12×10^{-44}	4.55×10^{-23}	2.11×10^{-26}	1.17×10^4	1.12×10^{-44}
310	8.30×10^{-25}	2.39×10^{-24}	2.10×10^4	1.87×10^{-44}	7.24×10^{-24}	1.23×10^{-25}	2.10×10^4	1.87×10^{-44}	4.65×10^{-23}	1.92×10^{-26}	2.10×10^4	1.87×10^{-44}
320	7.98×10^{-25}	2.28×10^{-24}	3.62×10^4	3.03×10^{-44}	6.26×10^{-24}	1.34×10^{-25}	3.62×10^4	3.03×10^{-44}	4.75×10^{-23}	1.76×10^{-26}	3.62×10^4	3.03×10^{-44}
330	7.70×10^{-25}	2.19×10^{-24}	6.06×10^4	4.80×10^{-44}	5.46×10^{-24}	1.45×10^{-25}	6.06×10^4	4.80×10^{-44}	4.86×10^{-23}	1.63×10^{-26}	6.06×10^4	4.80×10^{-44}
350	7.27×10^{-25}	2.04×10^{-24}	1.55×10^5	1.13×10^{-43}	4.29×10^{-24}	1.69×10^{-25}	1.55×10^5	1.13×10^{-43}	5.09×10^{-23}	1.42×10^{-26}	1.55×10^5	1.13×10^{-43}
375	6.89×10^{-25}	1.91×10^{-24}	4.39×10^5	2.94×10^{-43}	3.32×10^{-24}	2.02×10^{-25}	4.39×10^5	2.94×10^{-43}	5.49×10^{-23}	1.24×10^{-26}	4.39×10^5	2.94×10^{-43}
400	6.63×10^{-25}	1.82×10^{-24}	1.09×10^6	6.94×10^{-43}	2.68×10^{-24}	2.38×10^{-25}	1.09×10^6	6.94×10^{-43}	5.73×10^{-23}	1.11×10^{-26}	1.09×10^6	6.94×10^{-43}
425	6.48×10^{-25}	1.76×10^{-24}	2.43×10^6	1.51×10^{-42}	2.23×10^{-24}	2.78×10^{-25}	2.43×10^6	1.51×10^{-42}	6.08×10^{-23}	1.02×10^{-26}	2.43×10^6	1.51×10^{-42}
450	6.39×10^{-25}	1.73×10^{-24}	4.96×10^6	3.06×10^{-42}	1.92×10^{-24}	3.22×10^{-25}	4.96×10^6	3.06×10^{-42}	6.46×10^{-23}	9.55×10^{-27}	4.96×10^6	3.06×10^{-42}
475	6.35×10^{-25}	1.71×10^{-24}	9.41×10^6	5.85×10^{-42}	1.68×10^{-24}	3.69×10^{-25}	9.41×10^6	5.85×10^{-42}	6.85×10^{-23}	9.06×10^{-27}	9.41×10^6	5.85×10^{-42}
500	6.36×10^{-25}	1.70×10^{-24}	1.68×10^7	1.06×10^{-41}	1.50×10^{-24}	4.21×10^{-25}	1.68×10^7	1.06×10^{-41}	7.27×10^{-23}	8.71×10^{-27}	1.68×10^7	1.06×10^{-41}
550	6.49×10^{-25}	1.72×10^{-24}	4.54×10^7	3.07×10^{-41}	1.26×10^{-24}	5.36×10^{-25}	4.54×10^7	3.07×10^{-41}	8.15×10^{-23}	8.29×10^{-27}	4.54×10^7	3.07×10^{-41}
600	6.71×10^{-25}	1.76×10^{-24}	1.04×10^8	7.71×10^{-41}	1.11×10^{-24}	6.68×10^{-25}	1.04×10^8	7.71×10^{-41}	9.10×10^{-23}	8.13×10^{-27}	1.04×10^8	7.71×10^{-41}
650	7.02×10^{-25}	1.83×10^{-24}	2.11×10^8	1.74×10^{-40}	1.01×10^{-24}	8.18×10^{-25}	2.11×10^8	1.74×10^{-40}	1.01×10^{-22}	8.14×10^{-27}	2.11×10^8	1.74×10^{-40}
700	7.39×10^{-25}	1.92×10^{-24}	3.86×10^8	3.58×10^{-40}	9.41×10^{-25}	9.86×10^{-25}	3.86×10^8	3.58×10^{-40}	1.12×10^{-22}	8.27×10^{-27}	3.86×10^8	3.58×10^{-40}
750	7.82×10^{-25}	2.02×10^{-24}	6.53×10^8	6.86×10^{-40}	8.97×10^{-25}	1.17×10^{-24}	6.53×10^8	6.86×10^{-40}	1.24×10^{-22}	8.51×10^{-27}	6.53×10^8	6.86×10^{-40}
800	8.30×10^{-25}	2.14×10^{-24}	1.03×10^9	1.24×10^{-39}	8.69×10^{-25}	1.38×10^{-24}	1.03×10^9	1.24×10^{-39}	1.36×10^{-22}	8.83×10^{-27}	1.03×10^9	1.24×10^{-39}
850	8.83×10^{-25}	2.27×10^{-24}	1.55×10^9	2.12×10^{-39}	8.52×10^{-25}	1.61×10^{-24}	1.55×10^9	2.12×10^{-39}	1.49×10^{-22}	9.21×10^{-27}	1.55×10^9	2.12×10^{-39}
900	9.41×10^{-25}	2.41×10^{-24}	2.22×10^9	3.48×10^{-39}	8.44×10^{-25}	1.85×10^{-24}	2.22×10^9	3.48×10^{-39}	1.62×10^{-22}	9.66×10^{-27}	2.22×10^9	3.48×10^{-39}
950	1.00×10^{-24}	2.56×10^{-24}	3.07×10^9	5.49×10^{-39}	8.43×10^{-25}	2.12×10^{-24}	3.07×10^9	5.49×10^{-39}	1.76×10^{-22}	1.02×10^{-26}	3.07×10^9	5.49×10^{-39}
1000	1.07×10^{-24}	2.73×10^{-24}	4.10×10^9	8.39×10^{-39}	8.48×10^{-25}	2.41×10^{-24}	4.10×10^9	8.39×10^{-39}	1.91×10^{-22}	1.07×10^{-26}	4.10×10^9	8.39×10^{-39}
1100	1.21×10^{-24}	3.08×10^{-24}	6.78×10^9	1.81×10^{-38}	8.69×10^{-25}	3.07×10^{-24}	6.78×10^9	1.81×10^{-38}	2.22×10^{-22}	1.20×10^{-26}	6.78×10^9	1.81×10^{-38}
1200	1.38×10^{-24}	3.48×10^{-24}	1.03×10^{10}	3.55×10^{-38}	9.04×10^{-25}	3.81×10^{-24}	1.03×10^{10}	3.55×10^{-38}	2.56×10^{-22}	1.35×10^{-26}	1.03×10^{10}	3.55×10^{-38}
1300	1.55×10^{-24}	3.92×10^{-24}	1.47×10^{10}	6.49×10^{-38}	9.49×10^{-25}	4.66×10^{-24}	1.47×10^{10}	6.49×10^{-38}	2.92×10^{-22}	1.51×10^{-26}	1.47×10^{10}	6.49×10^{-38}
1400	1.75×10^{-24}	4.40×10^{-24}	1.99×10^{10}	1.12×10^{-37}	1.00×10^{-24}	5.60×10^{-24}	1.99×10^{10}	1.12×10^{-37}	3.31×10^{-22}	1.70×10^{-26}	1.99×10^{10}	1.12×10^{-37}

Table S12: Termolecular rate constant k_t in ($\text{cm}^6 \text{ molecule}^{-2} \text{ sec}^{-1}$) for CO_2 catalyzed channel for TS3 path within temperature range 213-1400K

Temp (K)	PATH A				PATH B				PATH C			
	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt	keq1	keq2	kuni	kt
213	1.80×10 ⁻²⁴	5.79×10 ⁻²⁴	5.48×10 ⁻³	1.85×10 ⁻⁵⁰	7.45×10 ⁻²³	4.53×10 ⁻²⁶	5.48×10 ⁻³	1.85×10 ⁻⁵⁰	4.03×10 ⁻²³	8.39×10 ⁻²⁶	5.48×10 ⁻³	1.85×10 ⁻⁵⁰
216	1.73×10 ⁻²⁴	5.53×10 ⁻²⁴	8.30×10 ⁻³	2.61×10 ⁻⁵⁰	6.68×10 ⁻²³	4.71×10 ⁻²⁶	8.30×10 ⁻³	2.61×10 ⁻⁵⁰	4.03×10 ⁻²³	7.80×10 ⁻²⁶	8.30×10 ⁻³	2.61×10 ⁻⁵⁰
219	1.67×10 ⁻²⁴	5.29×10 ⁻²⁴	1.24×10 ⁻²	3.65×10 ⁻⁵⁰	6.01×10 ⁻²³	4.89×10 ⁻²⁶	1.24×10 ⁻²	3.65×10 ⁻⁵⁰	4.04×10 ⁻²³	7.28×10 ⁻²⁶	1.24×10 ⁻²	3.65×10 ⁻⁵⁰
224	1.57×10 ⁻²⁴	4.94×10 ⁻²⁴	2.37×10 ⁻²	6.22×10 ⁻⁵⁰	5.04×10 ⁻²³	5.21×10 ⁻²⁶	2.37×10 ⁻²	6.22×10 ⁻⁵⁰	4.05×10 ⁻²³	6.48×10 ⁻²⁶	2.37×10 ⁻²	6.22×10 ⁻⁵⁰
235	1.39×10 ⁻²⁴	4.30×10 ⁻²⁴	8.92×10 ⁻²	1.90×10 ⁻⁴⁹	3.60×10 ⁻²³	5.92×10 ⁻²⁶	8.92×10 ⁻²	1.90×10 ⁻⁴⁹	4.09×10 ⁻²³	5.20×10 ⁻²⁶	8.92×10 ⁻²	1.90×10 ⁻⁴⁹
250	1.20×10 ⁻²⁴	3.65×10 ⁻²⁴	4.49×10 ⁻¹	7.47×10 ⁻⁴⁹	2.38×10 ⁻²³	6.98×10 ⁻²⁶	4.49×10 ⁻¹	7.47×10 ⁻⁴⁹	4.17×10 ⁻²³	3.99×10 ⁻²⁶	4.49×10 ⁻¹	7.47×10 ⁻⁴⁹
259	1.12×10 ⁻²⁴	3.36×10 ⁻²⁴	1.08	1.58×10 ⁻⁴⁸	1.91×10 ⁻²³	7.67×10 ⁻²⁶	1.08	1.58×10 ⁻⁴⁸	4.22×10 ⁻²³	3.47×10 ⁻²⁶	1.08	1.58×10 ⁻⁴⁸
265	1.07×10 ⁻²⁴	3.19×10 ⁻²⁴	1.88	2.55×10 ⁻⁴⁸	1.66×10 ⁻²³	8.15×10 ⁻²⁶	1.88	2.55×10 ⁻⁴⁸	4.26×10 ⁻²³	3.18×10 ⁻²⁶	1.88	2.55×10 ⁻⁴⁸
278	9.78×10 ⁻²⁵	2.89×10 ⁻²⁴	5.72	6.69×10 ⁻⁴⁸	1.27×10 ⁻²³	9.25×10 ⁻²⁶	5.72	6.69×10 ⁻⁴⁸	4.36×10 ⁻²³	2.68×10 ⁻²⁶	5.72	6.69×10 ⁻⁴⁸
280	9.67×10 ⁻²⁵	2.85×10 ⁻²⁴	6.72	7.71×10 ⁻⁴⁸	1.22×10 ⁻²³	9.43×10 ⁻²⁶	6.72	7.71×10 ⁻⁴⁸	4.38×10 ⁻²³	2.62×10 ⁻²⁶	6.72	7.71×10 ⁻⁴⁸
290	9.13×10 ⁻²⁵	2.67×10 ⁻²⁴	1.46×10 ¹	1.52×10 ⁻⁴⁷	1.01×10 ⁻²³	1.03×10 ⁻²⁵	1.46×10 ¹	1.52×10 ⁻⁴⁷	4.46×10 ⁻²³	2.34×10 ⁻²⁶	1.46×10 ¹	1.52×10 ⁻⁴⁷
298	8.76×10 ⁻²⁵	2.54×10 ⁻²⁴	2.61×10 ¹	2.55×10 ⁻⁴⁷	8.78×10 ⁻²⁴	1.11×10 ⁻²⁵	2.61×10 ¹	2.55×10 ⁻⁴⁷	4.54×10 ⁻²³	2.15×10 ⁻²⁶	2.61×10 ¹	2.55×10 ⁻⁴⁷
300	8.68×10 ⁻²⁵	2.51×10 ⁻²⁴	3.01×10 ¹	2.88×10 ⁻⁴⁷	8.49×10 ⁻²⁴	1.13×10 ⁻²⁵	3.01×10 ¹	2.88×10 ⁻⁴⁷	4.55×10 ⁻²³	2.11×10 ⁻²⁶	3.01×10 ¹	2.88×10 ⁻⁴⁷
310	8.30×10 ⁻²⁵	2.39×10 ⁻²⁴	5.91×10 ¹	5.27×10 ⁻⁴⁷	7.24×10 ⁻²⁴	1.23×10 ⁻²⁵	5.91×10 ¹	5.27×10 ⁻⁴⁷	4.65×10 ⁻²³	1.92×10 ⁻²⁶	5.91×10 ¹	5.27×10 ⁻⁴⁷
320	7.98×10 ⁻²⁵	2.28×10 ⁻²⁴	1.11×10 ²	9.30×10 ⁻⁴⁷	6.26×10 ⁻²⁴	1.34×10 ⁻²⁵	1.11×10 ²	9.30×10 ⁻⁴⁷	4.75×10 ⁻²³	1.76×10 ⁻²⁶	1.11×10 ²	9.30×10 ⁻⁴⁷
330	7.70×10 ⁻²⁵	2.19×10 ⁻²⁴	2.01×10 ²	1.59×10 ⁻⁴⁶	5.46×10 ⁻²⁴	1.45×10 ⁻²⁵	2.01×10 ²	1.59×10 ⁻⁴⁶	4.86×10 ⁻²³	1.63×10 ⁻²⁶	2.01×10 ²	1.59×10 ⁻⁴⁶
350	7.27×10 ⁻²⁵	2.04×10 ⁻²⁴	5.94×10 ²	4.30×10 ⁻⁴⁶	4.29×10 ⁻²⁴	1.69×10 ⁻²⁵	5.94×10 ²	4.30×10 ⁻⁴⁶	5.09×10 ⁻²³	1.42×10 ⁻²⁶	5.94×10 ²	4.30×10 ⁻⁴⁶
375	6.89×10 ⁻²⁵	1.91×10 ⁻²⁴	1.95×10 ³	1.30×10 ⁻⁴⁵	3.32×10 ⁻²⁴	2.02×10 ⁻²⁵	1.95×10 ³	1.30×10 ⁻⁴⁵	5.40×10 ⁻²³	1.24×10 ⁻²⁶	1.95×10 ³	1.30×10 ⁻⁴⁵
400	6.63×10 ⁻²⁵	1.82×10 ⁻²⁴	5.50×10 ³	3.50×10 ⁻⁴⁵	2.68×10 ⁻²⁴	2.38×10 ⁻²⁵	5.50×10 ³	3.50×10 ⁻⁴⁵	5.73×10 ⁻²³	1.11×10 ⁻²⁶	5.50×10 ³	3.50×10 ⁻⁴⁵
425	6.48×10 ⁻²⁵	1.76×10 ⁻²⁴	1.37×10 ⁴	8.50×10 ⁻⁴⁵	2.23×10 ⁻²⁴	2.78×10 ⁻²⁵	1.37×10 ⁴	8.50×10 ⁻⁴⁵	6.08×10 ⁻²³	1.02×10 ⁻²⁶	1.37×10 ⁴	8.50×10 ⁻⁴⁵
450	6.39×10 ⁻²⁵	1.73×10 ⁻²⁴	3.08×10 ⁴	1.90×10 ⁻⁴⁴	1.92×10 ⁻²⁴	3.22×10 ⁻²⁵	3.08×10 ⁴	1.90×10 ⁻⁴⁴	6.46×10 ⁻²³	9.55×10 ⁻²⁷	3.08×10 ⁴	1.90×10 ⁻⁴⁴
475	6.35×10 ⁻²⁵	1.71×10 ⁻²⁴	6.34×10 ⁴	3.94×10 ⁻⁴⁴	1.68×10 ⁻²⁴	3.69×10 ⁻²⁵	6.34×10 ⁴	3.94×10 ⁻⁴⁴	6.85×10 ⁻²³	9.06×10 ⁻²⁷	6.34×10 ⁴	3.94×10 ⁻⁴⁴
500	6.36×10 ⁻²⁵	1.70×10 ⁻²⁴	1.21×10 ⁵	7.68×10 ⁻⁴⁴	1.50×10 ⁻²⁴	4.21×10 ⁻²⁵	1.21×10 ⁵	7.68×10 ⁻⁴⁴	7.27×10 ⁻²³	8.71×10 ⁻²⁷	1.21×10 ⁵	7.68×10 ⁻⁴⁴
550	6.49×10 ⁻²⁵	1.72×10 ⁻²⁴	3.72×10 ⁵	2.51×10 ⁻⁴³	1.26×10 ⁻²⁴	5.36×10 ⁻²⁵	3.72×10 ⁵	2.51×10 ⁻⁴³	8.15×10 ⁻²³	8.29×10 ⁻²⁷	3.72×10 ⁵	2.51×10 ⁻⁴³
600	6.71×10 ⁻²⁵	1.76×10 ⁻²⁴	9.43×10 ⁵	6.97×10 ⁻⁴³	1.11×10 ⁻²⁴	6.68×10 ⁻²⁵	9.43×10 ⁵	6.97×10 ⁻⁴³	9.10×10 ⁻²³	8.13×10 ⁻²⁷	9.43×10 ⁵	6.97×10 ⁻⁴³
650	7.02×10 ⁻²⁵	1.83×10 ⁻²⁴	2.07×10 ⁶	1.70×10 ⁻⁴²	1.01×10 ⁻²⁴	8.18×10 ⁻²⁵	2.07×10 ⁶	1.70×10 ⁻⁴²	1.01×10 ⁻²²	8.14×10 ⁻²⁷	2.07×10 ⁶	1.70×10 ⁻⁴²
700	7.39×10 ⁻²⁵	1.92×10 ⁻²⁴	4.05×10 ⁶	3.76×10 ⁻⁴²	9.41×10 ⁻²⁵	9.86×10 ⁻²⁵	4.05×10 ⁶	3.76×10 ⁻⁴²	1.12×10 ⁻²²	8.27×10 ⁻²⁷	4.05×10 ⁶	3.76×10 ⁻⁴²
750	7.82×10 ⁻²⁵	2.02×10 ⁻²⁴	7.26×10 ⁶	7.63×10 ⁻⁴²	8.97×10 ⁻²⁵	1.17×10 ⁻²⁴	7.26×10 ⁶	7.63×10 ⁻⁴²	1.24×10 ⁻²²	8.51×10 ⁻²⁷	7.26×10 ⁶	7.63×10 ⁻⁴²
800	8.30×10 ⁻²⁵	2.14×10 ⁻²⁴	1.21×10 ⁷	1.45×10 ⁻⁴¹	8.69×10 ⁻²⁵	1.38×10 ⁻²⁴	1.21×10 ⁷	1.45×10 ⁻⁴¹	1.36×10 ⁻²²	8.83×10 ⁻²⁷	1.21×10 ⁷	1.45×10 ⁻⁴¹
850	8.83×10 ⁻²⁵	2.27×10 ⁻²⁴	1.89×10 ⁷	2.59×10 ⁻⁴¹	8.52×10 ⁻²⁵	1.61×10 ⁻²⁴	1.89×10 ⁷	2.59×10 ⁻⁴¹	1.49×10 ⁻²²	9.21×10 ⁻²⁷	1.89×10 ⁷	2.59×10 ⁻⁴¹
900	9.41×10 ⁻²⁵	2.41×10 ⁻²⁴	2.82×10 ⁷	4.41×10 ⁻⁴¹	8.44×10 ⁻²⁵	1.85×10 ⁻²⁴	2.82×10 ⁷	4.41×10 ⁻⁴¹	1.62×10 ⁻²²	9.66×10 ⁻²⁷	2.82×10 ⁷	4.41×10 ⁻⁴¹
950	1.00×10 ⁻²⁴	2.56×10 ⁻²⁴	4.03×10 ⁷	7.21×10 ⁻⁴¹	8.43×10 ⁻²⁵	2.12×10 ⁻²⁴	4.03×10 ⁷	7.21×10 ⁻⁴¹	1.76×10 ⁻²²	1.02×10 ⁻²⁶	4.03×10 ⁷	7.21×10 ⁻⁴¹
1000	1.07×10 ⁻²⁴	2.73×10 ⁻²⁴	5.55×10 ⁷	1.14×10 ⁻⁴⁰	8.48×10 ⁻²⁵	2.41×10 ⁻²⁴	5.55×10 ⁷	1.14×10 ⁻⁴⁰	1.91×10 ⁻²²	1.07×10 ⁻²⁶	5.55×10 ⁷	1.14×10 ⁻⁴⁰
1100	1.21×10 ⁻²⁴	3.08×10 ⁻²⁴	9.67×10 ⁷	2.57×10 ⁻⁴⁰	8.69×10 ⁻²⁵	3.07×10 ⁻²⁴	9.67×10 ⁷	2.57×10 ⁻⁴⁰	2.22×10 ⁻²²	1.20×10 ⁻²⁶	9.67×10 ⁷	2.57×10 ⁻⁴⁰
1200	1.38×10 ⁻²⁴	3.48×10 ⁻²⁴	1.54×10 ⁸	5.29×10 ⁻⁴⁰	9.04×10 ⁻²⁵	3.81×10 ⁻²⁴	1.54×10 ⁸	5.29×10 ⁻⁴⁰	2.56×10 ⁻²²	1.35×10 ⁻²⁶	1.54×10 ⁸	5.29×10 ⁻⁴⁰
1300	1.55×10 ⁻²⁴	3.92×10 ⁻²⁴	2.27×10 ⁸	1.00×10 ⁻³⁹	9.49×10 ⁻²⁵	4.66×10 ⁻²⁴	2.27×10 ⁸	1.00×10 ⁻³⁹	2.92×10 ⁻²²	1.51×10 ⁻²⁶	2.27×10 ⁸	1.00×10 ⁻³⁹
1400	1.75×10 ⁻²⁴	4.40×10 ⁻²⁴	3.18×10 ⁸	1.78×10 ⁻³⁹	1.00×10 ⁻²⁴	5.60×10 ⁻²⁴	3.18×10 ⁸	1.78×10 ⁻³⁹	3.31×10 ⁻²²	1.70×10 ⁻²⁶	3.18×10 ⁸	1.78×10 ⁻³⁹

References

- (1) Kállay, M.; Rolik, Z.; Csontos, J.; Ladjánszki, I.; Szegedy, L.; Ladóczy, B.; Samu, G.; Petrov, K.; Farkas, M.; Nagy, *URL: <http://www.mrcc.hu>, accessed August 26th 2016*,