

Supplementary Information

Figure S1. The chemical structures of the transition states in electrochemical degradation reactions with the bond lengths (Å).

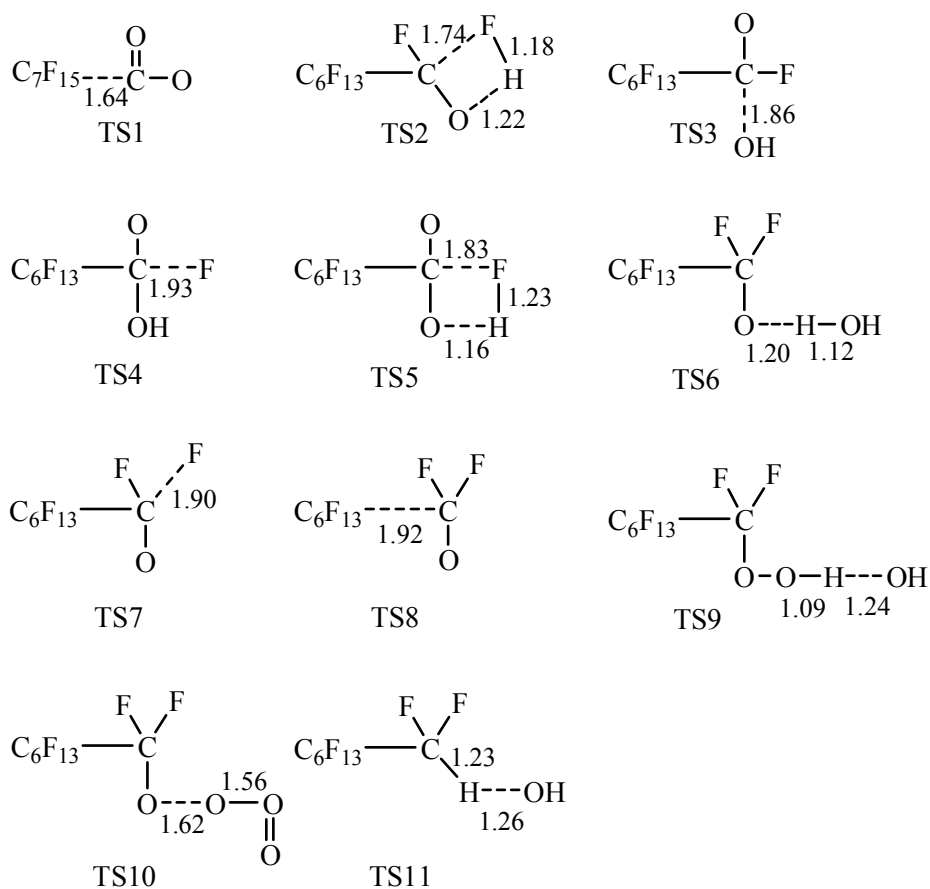


Figure S2. The comparison of actual values and predicted values ($T = 298.15$ K).

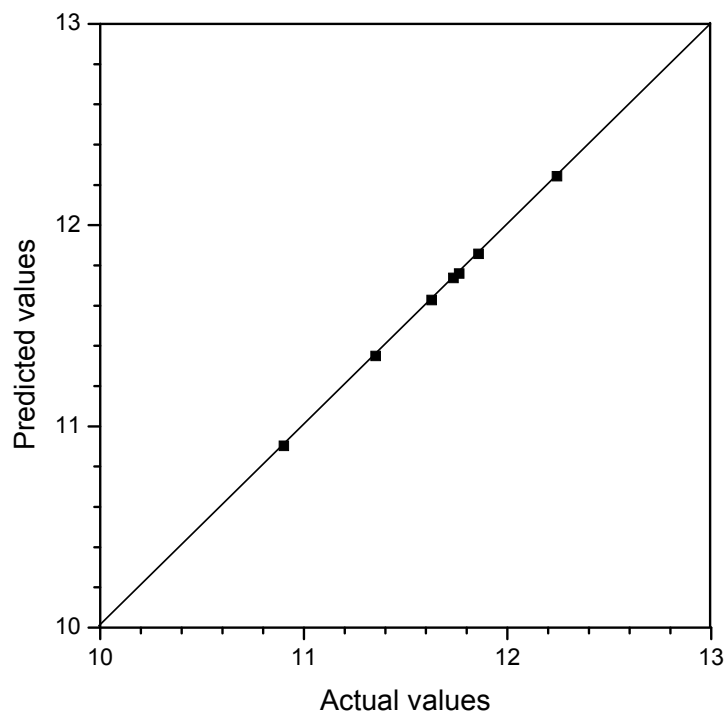


Table S1. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (2).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
200	3.10×10^{14}	1.09×10^{12}	1.13×10^{12}	1.13×10^{12}
220	2.65×10^{14}	1.23×10^{12}	1.26×10^{12}	1.26×10^{12}
240	2.34×10^{14}	1.36×10^{12}	1.39×10^{12}	1.39×10^{12}
260	2.12×10^{14}	1.49×10^{12}	1.52×10^{12}	1.52×10^{12}
280	1.95×10^{14}	1.62×10^{12}	1.64×10^{12}	1.64×10^{12}
298.15	1.83×10^{14}	1.72×10^{12}	1.75×10^{12}	1.75×10^{12}
320	1.72×10^{14}	1.85×10^{12}	1.87×10^{12}	1.87×10^{12}
340	1.64×10^{14}	1.95×10^{12}	1.97×10^{12}	1.97×10^{12}
360	1.57×10^{14}	2.06×10^{12}	2.08×10^{12}	2.08×10^{12}
380	1.52×10^{14}	2.15×10^{12}	2.17×10^{12}	2.17×10^{12}
400	1.47×10^{14}	2.25×10^{12}	2.27×10^{12}	2.27×10^{12}
450	1.38×10^{14}	2.47×10^{12}	2.48×10^{12}	2.48×10^{12}
500	1.33×10^{14}	2.66×10^{12}	2.68×10^{12}	2.68×10^{12}

^a The unit of the rate constant is s^{-1} .**Table S2.** The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (4).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
200	1.78×10^{-39}	7.14×10^{-42}	2.80×10^{-42}	2.80×10^{-42}
220	9.18×10^{-35}	4.69×10^{-37}	1.98×10^{-37}	1.98×10^{-37}
240	7.81×10^{-31}	4.84×10^{-33}	2.18×10^{-33}	2.18×10^{-33}
260	1.66×10^{-27}	1.20×10^{-29}	5.74×10^{-30}	5.74×10^{-30}
280	1.18×10^{-24}	9.78×10^{-27}	4.90×10^{-27}	4.90×10^{-27}
298.15	2.14×10^{-22}	1.96×10^{-24}	1.02×10^{-24}	1.02×10^{-24}
320	5.15×10^{-20}	5.23×10^{-22}	2.84×10^{-22}	2.84×10^{-22}
340	4.20×10^{-18}	1.45×10^{-19}	5.84×10^{-20}	5.84×10^{-20}
360	2.11×10^{-16}	7.67×10^{-18}	3.25×10^{-18}	3.25×10^{-18}
380	7.00×10^{-15}	2.67×10^{-16}	1.18×10^{-16}	1.18×10^{-16}
400	1.64×10^{-13}	6.53×10^{-15}	3.01×10^{-15}	3.01×10^{-15}
450	1.29×10^{-10}	5.55×10^{-12}	2.78×10^{-12}	2.79×10^{-12}
500	2.68×10^{-8}	1.22×10^{-9}	6.58×10^{-10}	6.58×10^{-10}

^a The unit of the rate constant is s^{-1} .**Table S3.** The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (5).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{b}}$
200	1.08×10^{-21}	1.48×10^{-22}	1.06×10^{-22}	1.06×10^{-22}
220	3.74×10^{-21}	5.06×10^{-22}	3.71×10^{-22}	3.71×10^{-22}
240	1.06×10^{-20}	1.42×10^{-21}	1.06×10^{-21}	1.06×10^{-21}
260	2.59×10^{-20}	3.41×10^{-21}	2.59×10^{-21}	2.59×10^{-21}
280	5.59×10^{-20}	7.28×10^{-21}	5.62×10^{-21}	5.62×10^{-21}
298.15	1.03×10^{-19}	1.33×10^{-20}	1.04×10^{-20}	1.04×10^{-20}
320	1.99×10^{-19}	2.54×10^{-20}	2.01×10^{-20}	2.01×10^{-20}
340	3.39×10^{-19}	4.29×10^{-20}	3.44×10^{-20}	3.44×10^{-20}
360	5.47×10^{-19}	6.86×10^{-20}	5.56×10^{-20}	5.56×10^{-20}

Table S3. *Cont.*

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{b}}$
380	8.43×10^{-19}	1.05×10^{-19}	8.59×10^{-20}	8.60×10^{-20}
400	1.25×10^{-18}	1.53×10^{-19}	1.05×10^{-19}	1.06×10^{-19}
450	2.93×10^{-18}	3.45×10^{-19}	2.44×10^{-19}	2.44×10^{-19}
500	5.92×10^{-18}	6.75×10^{-19}	4.89×10^{-19}	4.89×10^{-19}

^b The unit of the rate constant is $\text{cm}^3 \text{molecule}^{-1} \text{s}^{-1}$.

Table S4. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (6).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
200	1.14×10^{-19}	1.83×10^{-20}	1.64×10^{-20}	1.64×10^{-20}
220	7.42×10^{-17}	1.20×10^{-17}	4.83×10^{-18}	4.83×10^{-18}
240	1.65×10^{-14}	2.59×10^{-15}	1.12×10^{-15}	1.12×10^{-15}
260	1.60×10^{-12}	2.46×10^{-13}	1.13×10^{-13}	1.13×10^{-13}
280	8.06×10^{-11}	1.22×10^{-11}	5.89×10^{-12}	5.89×10^{-12}
298.15	1.80×10^{-9}	2.69×10^{-10}	1.35×10^{-10}	1.35×10^{-10}
320	4.74×10^{-8}	6.97×10^{-9}	3.63×10^{-9}	3.63×10^{-9}
340	6.56×10^{-7}	9.52×10^{-8}	5.12×10^{-8}	5.12×10^{-8}
360	6.79×10^{-6}	9.72×10^{-7}	5.37×10^{-7}	5.37×10^{-7}
380	5.49×10^{-5}	7.78×10^{-6}	4.40×10^{-6}	4.40×10^{-6}
400	3.61×10^{-4}	5.06×10^{-5}	2.93×10^{-5}	2.93×10^{-5}
450	1.92×10^{-2}	2.63×10^{-3}	1.59×10^{-3}	1.59×10^{-3}
500	4.63×10^{-1}	6.20×10^{-2}	3.87×10^{-2}	3.87×10^{-2}

^a The unit of the rate constant is s^{-1} .

Table S5. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (7).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
200	1.16×10^{-29}	1.44×10^{-32}	1.54×10^{-32}	1.54×10^{-32}
220	7.08×10^{-26}	1.12×10^{-28}	1.18×10^{-28}	1.18×10^{-28}
240	1.02×10^{-22}	1.96×10^{-25}	2.04×10^{-25}	2.04×10^{-25}
260	4.81×10^{-20}	1.08×10^{-22}	1.12×10^{-22}	1.12×10^{-22}
280	9.46×10^{-18}	2.42×10^{-20}	2.49×10^{-20}	2.49×10^{-20}
298.15	6.19×10^{-16}	1.75×10^{-18}	1.79×10^{-18}	1.79×10^{-18}
320	5.08×10^{-14}	1.59×10^{-16}	1.62×10^{-16}	1.62×10^{-16}
340	1.75×10^{-12}	5.91×10^{-15}	6.01×10^{-15}	6.01×10^{-15}
360	4.08×10^{-11}	1.47×10^{-13}	1.49×10^{-13}	1.49×10^{-13}
380	6.85×10^{-10}	2.61×10^{-12}	2.64×10^{-12}	2.64×10^{-12}
400	8.67×10^{-9}	3.46×10^{-11}	3.50×10^{-11}	3.50×10^{-11}
450	1.85×10^{-6}	8.14×10^{-9}	8.21×10^{-9}	8.21×10^{-9}
500	1.36×10^{-4}	6.41×10^{-7}	6.45×10^{-7}	6.45×10^{-7}

^a The unit of the rate constant is s^{-1} .

Table S6. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (8).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{b}}$
200	5.11×10^{-22}	3.42×10^{-25}	1.10×10^{-24}	1.15×10^{-24}
220	2.86×10^{-21}	2.41×10^{-24}	6.47×10^{-24}	6.70×10^{-24}
240	1.21×10^{-20}	1.24×10^{-23}	2.87×10^{-23}	2.96×10^{-23}
260	4.15×10^{-20}	4.95×10^{-23}	1.02×10^{-22}	1.05×10^{-22}
280	1.20×10^{-19}	1.63×10^{-22}	3.06×10^{-22}	3.14×10^{-22}
298.15	2.80×10^{-19}	4.20×10^{-22}	7.36×10^{-22}	7.52×10^{-22}
320	6.89×10^{-19}	1.15×10^{-21}	1.87×10^{-21}	1.91×10^{-21}
340	1.43×10^{-18}	2.57×10^{-21}	3.98×10^{-21}	4.05×10^{-21}
360	2.75×10^{-18}	5.30×10^{-21}	7.83×10^{-21}	7.95×10^{-21}
380	4.95×10^{-18}	1.02×10^{-20}	1.44×10^{-20}	1.46×10^{-20}
400	8.46×10^{-18}	1.83×10^{-20}	2.52×10^{-20}	2.55×10^{-20}
450	2.67×10^{-17}	6.44×10^{-20}	8.30×10^{-20}	8.39×10^{-20}
500	6.87×10^{-17}	1.80×10^{-19}	2.21×10^{-19}	2.23×10^{-19}

^b The unit of the rate constant is $\text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.**Table S7.** The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (9).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
200	5.30×10^{-23}	6.53×10^{-24}	4.21×10^{-24}	4.21×10^{-24}
220	9.65×10^{-20}	1.14×10^{-20}	7.50×10^{-21}	7.50×10^{-21}
240	5.09×10^{-17}	5.76×10^{-18}	3.86×10^{-18}	3.86×10^{-18}
260	1.03×10^{-14}	1.12×10^{-15}	7.59×10^{-16}	7.59×10^{-16}
280	9.84×10^{-13}	1.04×10^{-13}	7.02×10^{-14}	7.02×10^{-14}
298.15	3.65×10^{-11}	3.74×10^{-12}	2.52×10^{-12}	2.52×10^{-12}
320	1.65×10^{-9}	1.63×10^{-10}	1.09×10^{-10}	1.09×10^{-10}
340	3.52×10^{-8}	3.39×10^{-9}	2.24×10^{-9}	2.24×10^{-9}
360	5.37×10^{-7}	5.03×10^{-8}	3.29×10^{-8}	3.29×10^{-8}
380	6.17×10^{-6}	5.61×10^{-7}	3.62×10^{-7}	3.62×10^{-7}
400	5.55×10^{-5}	4.92×10^{-6}	3.14×10^{-6}	3.14×10^{-6}
450	5.79×10^{-3}	4.78×10^{-4}	2.95×10^{-4}	2.95×10^{-4}
500	2.40×10^{-1}	1.86×10^{-2}	1.15×10^{-2}	1.15×10^{-2}

^a The unit of the rate constant is s^{-1} .**Table S8.** The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (10).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
200	6.58×10^7	9.80×10^6	9.70×10^6	9.70×10^6
220	2.00×10^8	3.02×10^7	2.99×10^7	2.99×10^7
240	5.07×10^8	7.78×10^7	7.70×10^7	7.70×10^7
260	1.12×10^9	1.74×10^8	1.72×10^8	1.72×10^8
280	2.23×10^9	3.49×10^8	3.46×10^8	3.46×10^8
298.15	3.84×10^9	6.07×10^8	6.01×10^8	6.01×10^8
320	6.86×10^9	1.09×10^9	1.08×10^9	1.08×10^9
340	1.09×10^{10}	1.75×10^9	1.73×10^9	1.73×10^9

Table S8. *Cont.*

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{a}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{a}}$
360	1.66×10^{10}	2.67×10^9	2.65×10^9	2.65×10^9
380	2.41×10^{10}	3.90×10^9	3.87×10^9	3.87×10^9
400	3.39×10^{10}	5.50×10^9	5.45×10^9	5.45×10^9
450	6.97×10^{10}	1.14×10^{10}	1.13×10^{10}	1.13×10^{10}
500	1.25×10^{11}	2.05×10^{10}	2.03×10^{10}	2.03×10^{10}

^a The unit of the rate constant is s^{-1} .

Table S9. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (12).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{b}}$
200	3.16×10^{-45}	1.65×10^{-62}	1.14×10^{-59}	1.21×10^{-58}
220	1.54×10^{-42}	1.25×10^{-59}	4.16×10^{-57}	3.50×10^{-56}
240	2.69×10^{-40}	3.05×10^{-57}	5.59×10^{-55}	3.85×10^{-54}
260	2.14×10^{-38}	3.12×10^{-55}	3.48×10^{-53}	2.03×10^{-52}
280	9.20×10^{-37}	1.62×10^{-53}	1.19×10^{-51}	6.00×10^{-51}
298.15	1.82×10^{-35}	3.64×10^{-52}	1.92×10^{-50}	8.70×10^{-50}
320	4.25×10^{-34}	9.57×10^{-51}	3.58×10^{-49}	1.45×10^{-48}
340	5.37×10^{-33}	1.31×10^{-49}	3.73×10^{-48}	1.37×10^{-47}
360	5.16×10^{-32}	1.33×10^{-48}	2.98×10^{-47}	1.01×10^{-46}
380	3.93×10^{-31}	1.05×10^{-47}	1.91×10^{-46}	6.05×10^{-46}
400	2.46×10^{-30}	6.78×10^{-47}	1.02×10^{-45}	3.01×10^{-45}
450	1.21×10^{-28}	3.41×10^{-45}	3.44×10^{-44}	8.93×10^{-44}
500	2.80×10^{-27}	7.83×10^{-44}	5.76×10^{-43}	1.35×10^{-42}

^b The unit of the rate constant is $\text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Table S10. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (14).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{b}}$
200	3.69×10^{-69}	1.39×10^{-70}	2.60×10^{-70}	2.60×10^{-70}
220	2.63×10^{-64}	1.07×10^{-65}	1.80×10^{-65}	1.80×10^{-65}
240	2.95×10^{-60}	1.28×10^{-61}	1.98×10^{-61}	1.98×10^{-61}
260	7.95×10^{-57}	3.63×10^{-58}	5.26×10^{-58}	5.27×10^{-58}
280	7.01×10^{-54}	3.33×10^{-55}	4.59×10^{-55}	4.59×10^{-55}
298.15	1.51×10^{-51}	7.41×10^{-53}	9.84×10^{-53}	9.84×10^{-53}
320	4.39×10^{-49}	2.22×10^{-50}	2.84×10^{-50}	2.84×10^{-50}
340	4.20×10^{-47}	2.17×10^{-48}	2.70×10^{-48}	2.70×10^{-48}
360	2.44×10^{-45}	1.28×10^{-46}	1.56×10^{-46}	1.56×10^{-46}
380	9.28×10^{-44}	4.98×10^{-45}	5.93×10^{-45}	5.93×10^{-45}
400	2.47×10^{-42}	1.35×10^{-43}	1.57×10^{-43}	1.57×10^{-43}
450	2.59×10^{-39}	1.45×10^{-40}	1.64×10^{-40}	1.64×10^{-40}
500	6.93×10^{-37}	3.96×10^{-38}	4.37×10^{-38}	4.37×10^{-38}

^b The unit of the rate constant is $\text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Table S11. The TST, CVT with the ZCT or the SCT correction rate constants of reaction (15).

T (K)	$k_{\text{TST}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/ZCT}}^{\text{b}}$	$k_{\text{CVT/SCT}}^{\text{b}}$
200	4.84×10^{-36}	6.06×10^{-37}	3.38×10^{-38}	3.73×10^{-38}
220	3.97×10^{-34}	4.88×10^{-35}	3.32×10^{-36}	3.63×10^{-36}
240	1.58×10^{-32}	1.91×10^{-33}	1.54×10^{-34}	1.67×10^{-34}
260	3.60×10^{-31}	4.31×10^{-32}	4.04×10^{-33}	4.33×10^{-33}
280	5.31×10^{-30}	6.27×10^{-31}	6.70×10^{-32}	7.15×10^{-32}
298.15	4.50×10^{-29}	5.26×10^{-30}	6.26×10^{-31}	6.64×10^{-31}
320	4.30×10^{-28}	4.98×10^{-29}	6.66×10^{-30}	7.02×10^{-30}
340	2.66×10^{-27}	3.05×10^{-28}	4.49×10^{-29}	4.71×10^{-29}
360	1.35×10^{-26}	1.54×10^{-27}	2.47×10^{-28}	2.58×10^{-28}
380	5.82×10^{-26}	6.60×10^{-27}	1.15×10^{-27}	1.19×10^{-27}
400	2.18×10^{-25}	2.46×10^{-26}	4.59×10^{-27}	4.77×10^{-27}
450	3.63×10^{-24}	4.04×10^{-25}	8.84×10^{-26}	9.11×10^{-26}
500	3.55×10^{-23}	3.91×10^{-24}	9.75×10^{-25}	1.00×10^{-24}

^b The unit of the rate constant is $\text{cm}^3 \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.