

## Supporting Information

### How far away are the iron carbide clusters from the bulks?

Longyan Zheng,<sup>a,b,c</sup> Xingcheng Liu,<sup>a</sup> Yu Meng,<sup>a,b,c</sup> Yuwei Zhou,<sup>a,b</sup> Wenping Guo,<sup>b</sup> Qing Peng,<sup>d</sup>

Yong Yang,<sup>a,b</sup> Haijun Jiao,<sup>a,e</sup> Yong-Wang Li,<sup>a,b</sup> & Xiao-Dong Wen,<sup>a,b\*</sup>

*a. State Key Laboratory of Coal Conversion, Institute of Coal Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Taiyuan, 030001, P.R. China.*

*b. National Energy Center for Coal to Clean Fuels, Synfuels China Co., Ltd, Huairou District, Beijing, 101400, P.R. China.*

*c. University of Chinese Academy of Sciences, No.19A Yuquan Road, Beijing, 100049, P.R. China.*

*d. Department of Mechanical, Aerospace and Nuclear Engineering, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, NY 12180, USA.*

*e. Leibniz-Institut für Katalyse e.V. an der Universität Rostock, Albert-Einstein Strasse 29a, 18059 Rostock, Germany.*

**Table S1. The calculation methods used in the last 2 decades for neutral iron carbide clusters.**

Author-Year	Methods/bases	Code packages	Research objects
Cao-1996 <sup>1</sup>	HF/MIDI* and CISD+Q	GAMESS 90	FeC <sub>2</sub>
Nash-1996 <sup>2</sup>	HF-MP4, LDA, nonlocal/ (9s5p1d/3s2p1d) for C, (13s8p5d/5s3p3d) for Fe	Gaussian 94	FeC, FeC <sub>2</sub> , FeC <sub>3</sub>
Sosa-1997 <sup>3</sup>	LDA BP/STO-IV	ADF 2.0.1	FeC, Fe <sub>5</sub> C
Arbuznikov-1999 <sup>4</sup>	B3LYP/DZP for C, (14s11p6d3f)/[8s6p4d1f] for Fe; CASSCF, CASPT2/ (10s6p3d)/[4s3p2d] for C (17s12p9d4f)/[7s5p4d3f] for Fe	Gaussian 98 MOLCAS 4.1	FeC <sub>2</sub>
Tzeli-2002 <sup>5</sup>	MRCI/7s6p4d3f for Fe, cc-pVTZ for C; MRCI/7s6p4d3f2g for Fe, cc-pVQZ for C	MOLPRO 2000	FeC
Gutsev-2003 <sup>6</sup>	BPW91/6-311+G(d)	Gaussian 98	Fe <sub>x</sub> C (x = 1~6)
Noya-2003 <sup>7</sup>	PBE/split-valence triple- $\zeta$ bases with double- $\zeta$ polarization	SIESTA	FeC
Hendrickx-2004 <sup>8</sup>	CASSCF/ANO-S CASPT2/ANO-L B3LYP/6-31G**	MOLCAS 5.4 Gaussian 98	FeC <sub>2</sub> , FeC <sub>3</sub>
Ryzhkov-2005 <sup>9</sup>	P91m/DND	DMol3	FeC <sub>2</sub> , Fe <sub>2</sub> C, FeC <sub>3</sub> , Fe <sub>3</sub> C, Fe <sub>2</sub> C <sub>2</sub>
Rayon-2006 <sup>10</sup>	B3LYP, QCISD/6-311+G(3df) QCISD/6-311+G(d) CASSCF/6-311+G(d) BP86/TZ2P+	MOLPRO 2002.1 MORPHY	FeC <sub>2</sub>
Yuan-2006 <sup>11</sup>	B3LYP/LANL2DZ	Gaussian 03	FeC <sub>2</sub>
Harris-2007 <sup>12</sup>	BLYP/DND	DMol v2.36 and v960	Fe <sub>x</sub> C <sub>12</sub> (x = 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12)
Ma-2007 <sup>13</sup>	BLYP/DNP	DMol	FeC <sub>y</sub> (y = 1~8), Fe <sub>2</sub> C <sub>y</sub> (y = 1~6)
Ryzhkov-2007 <sup>14</sup>	PBE/DND	DMol3	Fe <sub>2</sub> C <sub>3</sub>
Sun-2008 <sup>15</sup>	PW91/DND	DMol3	Fe <sub>3</sub> C <sub>2</sub>

Zhang-2008 <sup>16</sup>	PBE/plane-wave and ultra-soft pseudo potentials	Quantum-ESPRESSO	Fe <sub>x</sub> C (x = 1~6)
Largo-2009 <sup>17</sup>	B3LYP/6-311+G(d)	Gaussian	FeC <sub>y</sub> (y = 1~8)
Zhu-2009 <sup>18</sup>	B3LYP/6-311+G(d)	Gaussian 03	FeC <sub>y</sub> (y = 1~10)
Ryzhkov-2012 <sup>19</sup>	PBE, BLYP/DND	DMol3	Fe <sub>3</sub> C <sub>5</sub> , Fe <sub>x</sub> C <sub>y</sub> (x = 1~3; y = 1~4) Fe <sub>x+1</sub> C <sub>y</sub> (x = 3~6)(y = x~8)
Gutsev-2012 <sup>20</sup>	BPW91/6-311+G(d)	Gaussian 03, 09	Fe <sub>13</sub> C <sub>y</sub> (y = 1~20)
Chang-2013 <sup>21</sup>	B3LYP/6-31G(d)	Gaussians 03	FeC <sub>2</sub> , FeC <sub>3</sub>
Ganji-2013 <sup>22</sup>	PBE /DZP	SIESTA TRANSIESTA	Fe <sub>8</sub> C <sub>12</sub>
Li-2013 <sup>23</sup> Fishtik-2013 <sup>24</sup>	M11-L, SOGGA11, M06-L etc./	Gaussian 09	FeC
Chen-2014 <sup>25</sup>	BLYP/DNP	DMol3	FeC <sub>y</sub> (y = 9~15)

**Table S2. The coordinates of predicted clusters (E for elements).**

Formula	The coordinates of clusters											
	E	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)	E	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)	E	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
Fe1C1	C	10.39	10.3	10.75	Fe	10.39	10.3	9.19				
Fe1C2	C	9.4	9.52	9.58	C	9.44	10.6	10.3	Fe	11.16	9.87	10.12
Fe1C3	C	10.06	10.17	8.78	C	10.08	10.76	10	C	9.98	10.18	11.22
	Fe	9.88	8.89	10								
Fe1C4	C	10.02	9.99	8.3	C	10.04	9.72	11.68	C	9.88	10.73	9.37
	C	9.89	10.62	10.74	Fe	10.18	8.93	9.91				
Fe1C5	C	10	10.06	10.57	C	10.01	9.92	9.3	C	10.02	9.77	8.01
	C	10.02	9.62	6.73	C	9.99	10.21	11.85	Fe	9.96	10.41	13.54
Fe1C6	C	10.06	10	10.04	C	11.03	9.93	10.85	C	12.02	9.85	11.7
	C	13	9.78	12.54	C	8.09	10.14	8.39	C	9.06	10.07	9.2
	Fe	6.74	10.23	7.28								
Fe1C7	C	10.04	11.13	11.37	C	10.21	9.86	11.67	C	10.31	8.59	11.44
	C	9.73	11.42	8.98	C	9.79	10.27	8.35	C	9.87	11.7	10.23
	C	9.89	8.98	8.23	Fe	10.16	8.04	9.74				
Fe1C8	C	10.05	11.76	9	C	10.21	8.2	10.13	C	10.4	10.72	8.26

	C	10.48	8.62	8.98	C	10.65	9.51	7.98	C	9.42	9.32	12.35
	C	9.67	12.06	10.18	C	9.8	8.67	11.33	Fe	9.33	11.14	11.79
Fe2C1	C	10.22	10.45	9.42	Fe	8.93	11.7	9.37	Fe	9.94	10.57	11.1
Fe2C2	C	10.31	10.33	8.7	C	10.66	10.38	9.96	Fe	10.09	9.82	11.59
	Fe	8.95	9.47	9.75								
Fe2C3	C	10.17	9.25	8.44	C	9.82	10.92	10.74	C	9.94	10.05	11.71
	Fe	10.17	8.97	10.21	Fe	9.89	10.81	8.9				
Fe2C4	C	11.22	9.46	10.31	C	11.78	9.93	9.24	C	8.22	10.07	10.76
	C	8.78	10.54	9.69	Fe	10.26	10.72	8.66	Fe	9.74	9.28	11.34
Fe2C5	C	10.57	9.55	11.65	C	11.17	9.85	7.85	C	9.11	10.45	9.15
	C	9.62	9.7	12.51	C	9.94	10.27	8.1	Fe	10.87	9.95	9.79
	Fe	8.71	10.23	10.95								
Fe2C6	C	11.21	10.06	11.89	C	11.34	9.98	8.03	C	11.52	10.04	10.66
	C	11.53	10.01	9.29	C	7.52	9.98	10.84	C	8.01	9.96	9.65
	Fe	9.39	10.01	11.19	Fe	9.48	9.97	8.44				
Fe2C7	C	11.03	9.88	8.1	C	11.65	9.88	9.25	C	12.11	9.9	10.47
	C	8.01	10.07	8.84	C	8.19	10.1	10.1	C	8.74	10.11	11.3
	C	9.58	10.1	12.27	Fe	11.37	9.99	12.09	Fe	9.32	9.96	7.6
Fe2C8	C	11.4	9.66	12.01	C	11.74	10.57	8.3	C	11.76	9.97	10.82
	C	11.87	10.29	9.55	C	8.13	9.71	10.45	C	8.24	10.03	9.18
	C	8.26	9.43	11.7	C	8.6	10.34	7.99	Fe	10.24	10.66	7.32
	Fe	9.76	9.34	12.68								
Fe3C1	C	11.9	10.24	10.89	Fe	10.07	9.9	10.77	Fe	11.36	11.81	10.18
	Fe	11.6	9.7	9.13								
Fe3C2	C	9.22	10.48	9.65	C	9.63	10.89	10.88	Fe	11.29	10.46	9.96
	Fe	9.91	9.21	8.61	Fe	9.94	8.97	10.9				
Fe3C3	C	10.02	11.55	10.49	C	10.93	10.56	10.56	C	9.79	8.69	8.7
	Fe	10.78	8.79	10.1	Fe	9.06	9.97	11.17	Fe	9.42	10.43	8.98
Fe3C4	C	10.01	8.48	10.98	C	10.35	11.01	8.55	C	10.68	9.61	11.29
	C	9.11	10.68	8.98	Fe	10.58	9.2	9.25	Fe	10.59	11.26	10.42
	Fe	8.67	9.76	10.53								
Fe3C5	C	10.95	10.15	8.43	C	11.72	10.14	9.55	C	8.53	9.84	11.18
	C	9.6	10.06	8.27	C	9.64	9.89	11.85	Fe	10.06	9.24	9.95
	Fe	11.4	10.41	11.38	Fe	8.1	10.28	9.38				
Fe3C6	C	10.72	8.22	9.35	C	10.8	11.72	9.31	C	11.29	9.27	8.82

	C	11.32	10.63	8.8	C	8.54	9.39	11.28	C	8.58	10.71	11.27
	Fe	9.47	7.85	10.71	Fe	9.57	12.19	10.66	Fe	9.71	10	9.79
Fe3C7	C	11.15	10.36	12.16	C	11.45	10.04	8.43	C	11.65	10.31	10.95
	C	11.9	10.22	9.64	C	7.96	9.71	9.71	C	8.19	9.86	11.02
	C	8.47	9.65	8.48	Fe	9.38	10.14	12.36	Fe	9.91	9.97	9.84
	Fe	9.94	9.74	7.41								
Fe3C8	C	10.21	11.02	11.85	C	10.27	7.31	10.91	C	10.29	8.49	11.46
	C	10.29	9.73	11.97	C	9.71	10.27	8.03	C	9.71	11.51	8.54
	C	9.73	12.69	9.08	C	9.79	8.98	8.15	Fe	10.02	7.46	9.15
	Fe	9.98	12.54	10.85	Fe	10	10	10				
Fe3C9	C	10.02	11.79	8.96	C	10.05	10.54	8.49	C	10.09	9.3	8.1
	C	10.11	8	7.74	C	10.11	6.81	8.26	C	9.86	11.02	12.55
	C	9.9	9.72	12.34	C	9.96	12.59	9.99	C	9.98	8.74	11.43
	Fe	10.09	8.14	9.73	Fe	9.86	12.72	11.83	Fe	9.97	10.62	10.59
Fe3C12	C	11.23	9.05	13.37	C	11.3	10.14	8.14	C	11.97	9.79	9.19
	C	12.3	8.98	12.7	C	12.6	9.44	10.3	C	12.82	9.14	11.51
	C	6.91	11.3	6.6	C	7.92	10.39	10.12	C	8.17	11.11	6.34
	C	8.44	10.05	11.25	C	9.03	9.69	12.39	C	9.96	9.34	13.16
	Fe	7.67	10.81	8.3	Fe	9.84	10.64	7.09	Fe	9.85	10.13	9.53
Fe4C1	C	9.76	10.71	11.67	Fe	11.12	11.06	10.56	Fe	8.51	11	10.42
	Fe	9.85	9.15	10.51	Fe	9.92	10.61	8.68				
Fe4C2	C	10	10.45	7.86	C	9.94	9.39	8.67	Fe	10.21	11.36	11.32
	Fe	11.23	10.92	9.33	Fe	8.98	11.11	9.41	Fe	9.99	9.26	10.51
Fe4C4	C	10.62	11.08	11.17	C	10.69	9.81	11.55	C	9.31	10.19	8.45
	C	9.38	8.92	8.83	Fe	10.1	8.23	10.53	Fe	11.17	9.9	9.47
	Fe	8.83	10.1	10.53	Fe	9.9	11.77	9.47				
Fe4C5	C	11.23	9.49	8.41	C	11.48	10.12	11.26	C	8.01	10.29	10.26
	C	8.57	10.48	11.42	C	9.99	9.55	8.02	Fe	10.15	10.51	12.34
	Fe	12.37	9.69	9.82	Fe	8.2	9.86	8.46	Fe	10	10	10
Fe4C6	C	11.78	11.28	9.86	C	11.78	10.76	11.03	C	8.63	9.83	8.3
	C	8.64	8.61	11.02	C	9.58	10.63	7.94	C	9.59	8.89	11.85
	Fe	11.12	11.57	8.18	Fe	11.13	9.71	12.38	Fe	7.74	8.71	9.44
	Fe	10	10	10								
Fe4C7	C	10.36	7.61	12.63	C	11.31	10.88	11.04	C	11.33	11.94	10.29
	C	8.69	9.34	8.61	C	8.98	10.4	7.86	C	9.47	7.51	11.69
	C	9.62	11.56	7.86	Fe	10.12	10.46	9.48	Fe	10.59	9.24	11.7
	Fe	10.7	12.75	8.74	Fe	8.84	8.31	10.11				
Fe4C8	C	10.13	7.41	12.9	C	10.32	12.45	9.89	C	10.33	8.66	13.11

	C	10.38	11.72	10.96	C	9.54	8.82	8.2	C	9.58	9.92	7.46
	C	9.65	8.28	9.37	C	9.74	11.19	7.3	Fe	10.09	12.77	8.12
	Fe	10.36	10.25	12.07	Fe	9.92	8.1	11.18	Fe	9.96	10.42	9.44
Fe4C12	C	10.26	9.09	12.02	C	10.48	10.12	7.07	C	10.82	8.51	11
	C	11.09	9.47	6.12	C	11.46	7.8	10.08	C	11.78	7.65	8.83
	C	8.13	12.44	11.05	C	8.63	12.02	9.93	C	8.9	10.74	13.35
	C	9.35	11.19	9.15	C	9.65	9.73	13.01	C	9.84	10.8	8
	Fe	10.61	9.34	9.12	Fe	11.79	8.13	7.06	Fe	7.95	12.23	12.86
	Fe	9.27	10.73	11.33								
Fe4C16	C	10.05	13.22	10.06	C	10.09	11.4	12.97	C	10.19	12.3	9.12
	C	10.24	10.21	12.45	C	10.34	11.32	8.35	C	10.39	9.14	11.78
	C	10.49	10.23	7.61	C	10.54	8.13	10.97	C	10.63	9.27	6.74
	C	10.69	7.1	10.21	C	10.82	6.45	9.06	C	10.89	6.44	7.76
	C	9.76	15.24	11.57	C	9.79	13.65	14.11	C	9.9	14.47	10.51
	C	9.94	12.38	13.86	Fe	10.63	8.4	8.57	Fe	10.84	7.52	6.29
	Fe	9.65	15.35	13.39	Fe	9.93	13.28	12.09				
Fe5C1	C	10.11	10.15	8.72	Fe	10.09	8.27	9.83	Fe	11.44	10.09	9.91
	Fe	8.6	9.96	9.65	Fe	9.86	9.8	11.65	Fe	9.9	11.72	10.23
Fe5C2	C	10.88	9.17	8.92	C	9.54	9.16	8.85	Fe	10.08	11.51	11.07
	Fe	10.11	9.21	10.83	Fe	10.2	11.11	8.8	Fe	12	10.33	10.05
	Fe	8.29	10.29	9.86								
Fe5C3	C	11.2	10.66	9.03	C	11.36	9.45	9.56	C	8.65	8.77	10.28
	Fe	10.32	8.58	10.91	Fe	10.85	10.82	11.09	Fe	8.6	10.44	11.04
	Fe	9.43	9.54	8.82	Fe	9.59	11.75	9.27				
Fe5C4	C	11.1	9.35	8.68	C	11.88	9.85	9.63	C	8.16	10.4	9.39
	C	8.26	11.22	10.4	Fe	10.15	10.99	9.65	Fe	10.39	8.55	10.52
	Fe	11.61	10.29	11.48	Fe	9.22	10.21	11.75	Fe	9.23	9.14	8.49
Fe5C5	C	10.65	11.45	10.98	C	11.89	9.05	9.8	C	8.27	9.13	9.63
	C	9.17	8.97	8.68	C	9.48	11.15	11.51	Fe	10.22	9.18	10.74
	Fe	10.97	9.27	8.28	Fe	11.92	10.84	9.74	Fe	7.98	10.06	11.24
	Fe	9.44	10.9	9.4								
Fe5C6	C	10.37	9.01	11.69	C	11.79	9.65	8.84	C	12.45	10.73	9.23
	C	7.81	10.65	9.41	C	8.72	11.52	9.08	C	9.16	8.59	11.41
	Fe	10.16	8.82	9.51	Fe	10.6	11.37	8.85	Fe	11.81	10.04	10.94
	Fe	7.75	8.95	10.22	Fe	9.39	10.66	10.83				
Fe5C7	C	10.54	11.04	8.2	C	10.65	8.76	11.36	C	10.68	9.89	12.04
	C	10.96	12.03	8.98	C	11.13	12.32	10.28	C	7.94	8.72	9.58
	C	8.3	7.92	8.61	Fe	10.64	11.72	11.94	Fe	11.04	10.31	10
	Fe	8.85	9.82	10.87	Fe	9.39	9.58	8.27	Fe	9.88	7.89	9.87

Fe5C8	C	10.38	11.37	11.41	C	10.93	11.84	10.29	C	10.99	7.96	10.38
	C	11.46	11.69	9.1	C	11.47	8.35	9.24	C	7.43	9.31	9.51
	C	7.99	10.26	8.82	C	9.96	10.47	12.25	Fe	10.1	8.62	11.88
	Fe	11.69	9.97	8.35	Fe	8.51	10.2	10.92	Fe	9.45	8.79	9.29
	Fe	9.63	11.16	8.55								
Fe5C10	C	10.55	11.75	11.62	C	10.64	9.93	7.4	C	10.66	12.19	10.39
	C	10.82	10.96	8.21	C	10.97	8.74	11.66	C	11.02	11.91	9.12
	C	11.28	8.26	10.46	C	7.62	9.85	10.53	C	7.75	9.49	9.26
	C	8.26	9.9	11.71	Fe	10.99	8.48	8.58	Fe	11.3	10.34	10.38
	Fe	8.92	9.2	7.86	Fe	9.3	8.83	10.35	Fe	9.91	10.17	12.47
Fe5C15	C	10.09	13.18	9.3	C	10.66	9.75	7.54	C	10.98	6.46	10.29
	C	12.11	7.08	10.03	C	12.93	7.98	9.71	C	13.24	9.21	9.29
	C	13.42	11.69	9.22	C	13.77	10.44	9.45	C	6.61	10.05	10
	C	6.9	8.8	10.14	C	7.55	7.66	10.35	C	8.47	6.81	10.46
	C	8.85	12.89	9.47	C	9.39	9.56	7.53	C	9.73	6.43	10.44
	Fe	11.91	12.78	9.13	Fe	12.19	10.47	8.26	Fe	7.38	11.73	9.6
	Fe	7.75	9.72	8.39	Fe	9.75	11.33	8.48				
Fe5C20	C	10.04	8.08	7.49	C	10.66	12.5	11.55	C	10.97	8.45	13.22
	C	11.01	7.39	8.03	C	11.81	10.22	10.36	C	11.86	7.17	9.03
	C	12.03	9.23	13.39	C	12.39	7.55	10.18	C	12.85	10.19	12.98
	C	6.88	11.69	7.68	C	6.9	12.65	8.52	C	7.38	10.56	7.24
	C	7.49	13.26	9.5	C	8.09	9.59	6.73	C	8.46	13.23	10.33
	C	9.05	9.41	10.36	C	9.06	8.71	6.89	C	9.14	8.76	11.51
	C	9.57	12.93	10.97	C	9.86	8.45	12.54	Fe	10.15	11.06	10.24
	Fe	10.87	8.82	9.48	Fe	12.11	11.39	11.75	Fe	12.5	8.92	11.42
	Fe	8.86	9.79	8.59								
Fe6C1	C	8.66	10.11	10.06	Fe	10.06	9.87	11.4	Fe	11.34	8.68	9.78
	Fe	11.55	11.08	10.12	Fe	9.06	8.35	9.99	Fe	9.35	11.78	10.05
	Fe	9.97	10.12	8.6								
Fe6C2	C	9.1	9.82	7.65	C	9.64	10.28	11.43	Fe	10.38	8.98	8.64
	Fe	10.88	10.64	10.14	Fe	7.86	9.47	8.94	Fe	8.36	11.13	10.44
	Fe	9.24	8.71	10.61	Fe	9.51	11.4	8.47				
Fe6C3	C	11.64	8.9	11.1	C	12.54	8.71	10.15	C	8.25	9.53	9.79
	Fe	10.91	7.77	9.5	Fe	11.37	10.17	9.47	Fe	8.49	7.72	9.66
	Fe	9.14	11.11	9.61	Fe	9.45	9.28	8.22	Fe	9.73	9.26	11.05
Fe6C5	C	10.96	11.44	11.18	C	11.02	8.48	9.01	C	11.29	8.66	10.28
	C	8.74	11.18	9.27	C	9.02	10.45	8.22	Fe	10.03	9.04	7.54
	Fe	10.85	10.64	9.43	Fe	10.97	9.77	11.76	Fe	8.74	9.65	12.31
	Fe	9.19	9.16	9.95	Fe	9.2	11.52	11.05				
Fe6C6	C	11.36	8.68	8.88	C	11.96	9	10.03	C	8.47	9.67	11.46
	C	9.3	11.89	9.27	C	9.3	11.12	8.18	C	9.59	9.65	12.18

	Fe	10.98	10.69	9.37	Fe	11.46	9.8	11.73	Fe	8.2	10.09	9.55
	Fe	9.65	11.42	11.15	Fe	9.83	9.29	7.84	Fe	9.9	8.69	10.34
Fe6C7	C	11.05	11.32	8.41	C	11.87	8.53	10.95	C	12.19	11	11.26
	C	12.39	9.68	11.45	C	8.3	10.01	10.51	C	8.79	8.78	10.41
	C	9.92	11.99	8.66	Fe	10.32	10.02	11.19	Fe	10.39	7.83	10.05
	Fe	11.1	12.24	10.31	Fe	11.96	10.01	9.46	Fe	8.76	11.8	10.14
	Fe	9.62	9.88	8.83								
Fe6C8	C	10.38	7.76	10.08	C	10.48	11.5	8.61	C	11.74	10.96	8.43
	C	12.4	9.98	9.11	C	7.64	10.34	10.97	C	8.51	11.12	11.68
	C	9.14	7.93	9.64	C	9.86	11.35	11.6	Fe	10.37	9.44	8.85
	Fe	11.27	11.13	10.43	Fe	12.03	8.58	10.31	Fe	7.73	9.15	9.52
	Fe	8.93	11.37	9.66	Fe	9.54	9.4	11.11				
Fe6C12	C	10	7.6	8.77	C	10.19	12.41	10.5	C	11.25	10.17	12.18
	C	11.26	7.78	9.13	C	11.84	10.64	8.79	C	12.21	9.65	11.43
	C	7.45	9.03	10.11	C	7.89	9.6	11.19	C	8.74	9.83	12.21
	C	8.94	12.27	10.15	C	8.97	10.27	7.98	C	9.95	9.99	12.49
	Fe	10.18	11.59	8.7	Fe	10.6	9.36	8.13	Fe	11.7	11.33	10.53
	Fe	12.39	9.13	9.69	Fe	8.05	10.81	9.45	Fe	8.41	8.55	8.57
Fe6C18	C	10.22	11.86	8.82	C	10.57	7.38	7.71	C	10.75	9.58	11.52
	C	11.4	11.5	9.22	C	11.63	7.32	8.5	C	11.94	9.85	10.92
	C	12.29	10.75	9.81	C	12.7	7.6	9.19	C	6.73	10.83	9.63
	C	7.1	8.35	10.9	C	7.66	9.68	7.14	C	8.18	7.63	10.56
	C	8.31	10.43	11.99	C	8.43	8.63	7.2	C	9	12.06	8.36
	C	9.46	7.38	10.66	C	9.49	7.84	7.27	C	9.58	10.21	11.78
	Fe	11.17	7.87	10.59	Fe	13.28	9.15	9.95	Fe	6.71	10.04	11.23
	Fe	7.39	9.07	9.08	Fe	7.4	11.29	7.99	Fe	8.57	11.21	10.13
Fe6C24	C	10.06	8.98	7.22	C	10.3	11.01	13.47	C	10.54	10.01	6.53
	C	10.65	11.49	12.33	C	10.92	11.82	11.12	C	11.17	12.11	9.86
	C	12.98	11.72	4.6	C	13.65	12.14	6.98	C	13.74	12.05	5.66
	C	7.69	4.96	12.81	C	7.71	5.33	14.03	C	7.88	5.03	11.53
	C	7.92	6.11	15.04	C	8.21	5.44	10.37	C	8.34	7.19	15.6
	C	8.63	6.13	9.37	C	8.85	8.36	15.68	C	9.09	6.99	8.53
	C	9.39	9.45	15.25	C	9.52	13.63	5.47	C	9.54	13.68	6.8
	C	9.57	7.95	7.82	C	9.89	10.35	14.49	C	9.97	12.86	4.47
	Fe	10.04	11.85	6.18	Fe	10.28	13.04	8.39	Fe	10.71	10.72	8.41
	Fe	11.28	11.7	3.95	Fe	12.13	11.05	6.27	Fe	12.55	12.19	8.49
Fe7C1	C	11.1	11.61	10.13	Fe	10.05	9.29	8.14	Fe	11.27	9.8	10.03
	Fe	8.51	9.61	9.93	Fe	9.62	11.38	11.19	Fe	9.69	11.51	8.97
	Fe	9.84	7.72	9.86	Fe	9.93	9.07	11.76				
Fe7C2	C	9.44	10.11	11.83	C	9.95	11.27	11.43	Fe	10.41	11.8	9.55
	Fe	10.69	7.92	9.14	Fe	11.04	9.72	10.53	Fe	11.7	10.18	8.37
	Fe	8.41	10.75	10.13	Fe	8.96	8.55	10.66	Fe	9.4	9.7	8.35



Fe7C3	C	11.78	9.38	9.64	C	11.82	10.08	10.78	C	9.38	10.47	8.37
	Fe	10.22	8.62	10.8	Fe	10.43	11.09	9.78	Fe	10.54	9.04	8.32
	Fe	10.73	10.37	12.29	Fe	8.07	11.43	9.24	Fe	8.41	9.07	9.44
	Fe	8.61	10.45	11.35								
Fe7C4	C	10.02	8.32	11.15	C	10.87	9.19	11.71	C	10.96	10.84	8.3
	C	11.56	11.24	9.45	Fe	10.95	9.31	9.65	Fe	11.48	10.93	11.28
	Fe	7.57	10.2	9.55	Fe	8.74	8.26	9.74	Fe	8.99	10.11	11.39
	Fe	9.3	9.99	7.97	Fe	9.56	11.61	9.8				
Fe7C5	C	10.7	11	9.47	C	7.42	10.35	8.4	C	7.85	9.94	11.3
	C	8.45	10.83	7.64	C	9.08	10.24	11.78	Fe	10.26	10.84	7.74
	Fe	10.79	10.36	11.14	Fe	10.99	9.02	9.15	Fe	6.94	9.4	9.85
	Fe	8.78	10.91	9.77	Fe	8.83	8.92	8.24	Fe	9.19	8.56	10.61
Fe7C6	C	10.3	10.34	7.36	C	10.46	8.72	11.94	C	11.38	8.54	10.98
	C	11.4	9.74	7.73	C	7.82	10.46	9.78	C	7.89	10.11	11.07
	Fe	11.03	11.3	9.04	Fe	11.25	10.6	11.29	Fe	11.99	8.98	9.3
	Fe	8.71	10.75	8.19	Fe	9.06	9.81	12.48	Fe	9.31	11.65	10.63
	Fe	9.39	9.02	10.23								
Fe7C7	C	10.24	7.98	11.19	C	10.81	10.73	11.73	C	10.94	10.75	8.02
	C	11.89	10.93	8.91	C	7.92	10.79	10.38	C	7.99	11.12	9.09
	C	9.24	7.94	10.33	Fe	10.69	9.14	9.39	Fe	11.53	9.03	11.97
	Fe	12.3	10.8	10.7	Fe	8.18	9.08	9.26	Fe	9.12	10.63	7.67
	Fe	9.16	9.77	11.49	Fe	9.99	11.31	9.88				
Fe7C8	C	10.15	11.12	12.19	C	10.16	10.57	7.09	C	11.7	8.59	11.08
	C	12.02	8.74	9.8	C	8.1	8.8	10.07	C	8.52	8.52	11.3
	C	9.52	11.6	7.54	C	9.99	12.04	11.24	Fe	10.03	8.19	9.92
	Fe	10.2	9.13	12.26	Fe	11.19	10.54	10.43	Fe	11.31	9.52	8.18
	Fe	8.58	10.56	10.96	Fe	8.86	9.91	8.6	Fe	9.68	12.17	9.34
Fe7C14	C	10.43	6.78	10.02	C	10.68	7.46	8.91	C	11.08	12.39	11.67
	C	11.43	8.24	8.11	C	11.87	9.42	7.74	C	12.04	12.29	10.75
	C	12.3	12.02	9.46	C	8.14	9.52	9.05	C	8.51	11.92	10.48
	C	8.96	9	12.57	C	9.05	10.29	12.82	C	9.11	7.95	11.75
	C	9.79	6.97	11.17	C	9.87	11.5	8.04	Fe	10.31	12.31	9.78
	Fe	11.63	11.19	8.03	Fe	8.28	11.28	8.83	Fe	8.37	10.04	10.93
	Fe	8.82	7.97	9.69	Fe	9.41	11.88	12.03	Fe	9.89	9.57	8.17
Fe7C21	C	10.11	10.47	7.06	C	10.37	10.4	11.07	C	11.19	10.36	6.39
	C	11.96	8.07	11.63	C	12.37	10.06	5.96	C	13.11	7.68	11.23
	C	13.56	9.6	5.86	C	14.14	7.45	10.48	C	14.58	8.95	6.31
	C	14.99	7.45	9.52	C	15.29	8.29	7.15	C	15.36	7.75	8.32
	C	6.06	8.75	12	C	6.12	9.51	13.08	C	7.21	10.3	9.61
	C	7.77	11.79	12.46	C	7.96	10.5	8.53	C	8.88	8.21	10.99
	C	8.91	9.85	14.3	C	9.14	10.42	7.94	C	9.82	9.17	13.62

	Fe	10.38	8.8	11.89	Fe	6.76	10.67	11.45	Fe	7.15	8.51	10.47
	Fe	7.3	10.76	13.87	Fe	8.05	8.71	12.7	Fe	9.14	9.78	9.94
	Fe	9.38	10.94	12.56								
Fe7C28	C	10.35	11.37	6.23	C	10.37	9.49	13	C	10.77	12.04	10.19
	C	10.85	10.88	9.42	C	11.54	10.83	6.28	C	11.76	9.33	12.91
	C	12.82	10.57	6.39	C	12.85	9.43	12.25	C	13.89	10.25	6.99
	C	13.97	9.41	11.53	C	14.66	9.94	8.01	C	14.67	9.49	10.49
	C	14.93	9.68	9.21	C	5.82	10.62	8.32	C	6.11	9.33	8.13
	C	6.41	11.76	8.61	C	7.1	12.61	9.38	C	7.59	8.62	10.83
	C	7.68	7.21	10.54	C	7.97	12.85	10.3	C	8.28	9.28	11.87
	C	8.43	6.73	11.53	C	8.62	10.66	12.01	C	8.94	8.99	8.31
	C	9.18	11.53	6.91	C	9.32	7.11	12.39	C	9.35	8.48	12.58
	C	9.83	10.83	12.72	Fe	10.21	10.19	7.83	Fe	11.2	10.51	11.34
	Fe	7.42	8.42	9.02	Fe	7.76	10.52	7.76	Fe	9.24	9.83	10.03
	Fe	9.28	12.25	8.86	Fe	9.33	12.27	11.4				
Fe8C1	C	11.33	10.31	11.19	Fe	10.84	8.66	11.81	Fe	11.13	11.46	9.7
	Fe	11.57	9.11	9.71	Fe	7.71	9.86	9.35	Fe	8.8	11.99	9.28
	Fe	9.38	10.35	10.9	Fe	9.45	8.18	9.78	Fe	9.78	10.08	8.28
Fe8C2	C	10.4	10.54	7.98	C	9.33	11.17	8.46	Fe	10.66	8.11	10.44
	Fe	10.79	10.68	10.09	Fe	11.29	9.7	12.08	Fe	11.54	9.15	8.45
	Fe	8.36	11.06	10.06	Fe	8.89	9.2	11.46	Fe	9.19	9.08	8.89
	Fe	9.56	11.29	12.09								
Fe8C3	C	10.82	8.53	9.06	C	8.54	11.29	9.32	C	9.34	10.97	8.3
	Fe	10.57	11.62	9.9	Fe	10.67	10.24	11.88	Fe	10.81	9.92	7.94
	Fe	10.81	8.09	10.92	Fe	12.07	9.82	9.87	Fe	8.54	11.21	11.21
	Fe	8.69	8.93	11.91	Fe	9.14	9.36	9.68				
Fe8C4	C	11.07	11.53	8.48	C	11.68	10.32	8.45	C	11.68	9.15	11.15
	C	8.27	11.2	9.33	Fe	10.74	9.98	12.51	Fe	11.29	10.96	10.46
	Fe	11.85	8.79	9.42	Fe	7.68	9.55	9.92	Fe	9.04	11.09	11.13
	Fe	9.6	12.37	9.15	Fe	9.67	9.93	8.75	Fe	9.82	8.68	10.73
Fe8C5	C	11.95	10.97	9.31	C	12.17	10.61	10.56	C	8	11.01	9.34
	C	8.92	11.26	8.42	C	9.96	7.88	9.44	Fe	10	10.96	10.31
	Fe	10.68	10.8	7.93	Fe	11.36	9.6	11.92	Fe	11.44	8.96	9.47
	Fe	7.78	9.95	10.88	Fe	8.92	9.21	8.73	Fe	9.3	10.43	12.55
	Fe	9.51	8.36	11.14								
Fe8C6	C	11.19	10.71	7.9	C	11.4	9.39	8.01	C	11.52	8.71	10.93
	C	8.13	9.89	11.71	C	8.48	11.29	9.06	C	9.25	10.01	12.42
	Fe	10.07	12.02	8.52	Fe	11.08	9.93	12.22	Fe	11.35	8.04	9.24
	Fe	11.53	10.4	9.96	Fe	7.53	10.02	9.97	Fe	9.39	9.64	8.59
	Fe	9.52	11.29	10.76	Fe	9.55	8.68	10.71				
Fe8C7	C	11.15	8.1	9.34	C	11.33	10.06	11.49	C	11.34	10.99	8.88

	C	8.24	11.6	10.56	C	8.85	9.63	8.41	C	8.85	8.71	10.99
	C	9.41	12.24	10.79	Fe	10.69	8.31	11.17	Fe	10.7	9.42	8.04
	Fe	11.16	11.68	10.59	Fe	12.2	9.6	9.86	Fe	7.88	9.9	9.96
	Fe	9.27	7.99	9.29	Fe	9.46	10.4	11.68	Fe	9.47	11.37	8.94
Fe8C8	C	11.05	8.79	11.21	C	11.09	11.57	10.62	C	11.67	8.92	8.26
	C	11.69	10.23	7.98	C	7.82	10.34	11.45	C	8.83	10.5	12.31
	C	8.91	8.44	9.38	C	8.95	11.21	8.79	Fe	10.69	10.42	12.04
	Fe	10.7	7.97	9.56	Fe	10.76	11.66	8.79	Fe	11.95	9.97	10.02
	Fe	7.85	9.95	9.61	Fe	9.15	8.76	11.24	Fe	9.19	11.66	10.63
	Fe	9.72	9.61	8.11								
Fe9C3	C	10.28	12.72	9.69	C	11.9	9.84	8.3	C	12.23	10.59	9.34
	Fe	10.44	9	7.43	Fe	10.56	9.48	9.91	Fe	10.58	11.47	8.32
	Fe	11.48	11.76	10.57	Fe	8.19	9.4	10.59	Fe	8.57	10.14	8.18
	Fe	8.91	11.61	10.19	Fe	9.03	7.92	8.98	Fe	9.93	10.53	11.93
Fe10C4	C	8.4	9.28	8.87	C	8.88	11.81	10.1	C	9.24	8.61	11.57
	C	9.49	9.8	12.15	Fe	10.17	9.44	8.11	Fe	10.63	11.6	9.25
	Fe	10.98	9.45	10.72	Fe	11.52	7.85	9.1	Fe	12.32	11.42	10.9
	Fe	12.41	10.11	8.85	Fe	8.29	10.07	10.57	Fe	8.47	11.12	8.42
	Fe	9.22	7.92	9.82	Fe	9.99	11.52	11.57				
Fe10C5	C	10.14	11.94	8.93	C	10.36	7.72	10.79	C	10.4	11.17	11.72
	C	12.09	9.85	9.66	C	9.55	8.32	11.68	Fe	10.89	10.31	8.23
	Fe	11.17	9.49	11.28	Fe	11.27	8.24	9.21	Fe	11.43	11.53	10.18
	Fe	7.4	10.61	10.28	Fe	8.67	10.99	8.29	Fe	8.94	10.08	12.04
	Fe	9.06	9.02	9.75	Fe	9.15	12.05	10.55	Fe	9.46	8.66	7.42
Fe12C3	C	10.21	11.8	11.19	C	12.05	10.15	9.71	C	9.14	8	9.67
	Fe	10.2	11.13	7.11	Fe	10.4	11.12	9.41	Fe	10.82	8.75	10.24
	Fe	10.98	8.67	12.55	Fe	11.71	10.73	11.42	Fe	11.75	9.58	8.01
	Fe	8.19	9.62	10.11	Fe	8.25	11.26	8.32	Fe	8.47	12.01	10.58
	Fe	9	7.86	11.52	Fe	9.36	10.31	12.05	Fe	9.48	9.01	8.13
Fe12C4	C	11.72	8.79	10.31	C	8.11	10.88	11.55	C	8.36	8.41	8.94
	C	9.51	7.95	8.41	Fe	10.44	12.24	8.4	Fe	11.15	9.84	11.87
	Fe	11.32	12.22	11.17	Fe	11.35	8.32	8.51	Fe	11.6	10.41	7.27
	Fe	11.65	10.51	9.59	Fe	7.67	9.6	10.25	Fe	8.94	9.38	12.41
	Fe	9.39	11.25	10.2	Fe	9.47	10.02	8.16	Fe	9.47	11.62	12.59
	Fe	9.84	8.55	10.35								
Fe12C6	C	10.58	11.7	7.86	C	10.68	8.17	11.48	C	12.06	9.93	9.73
	C	8.38	8.83	9.16	C	8.59	10.77	11.69	C	9.77	12.41	8.64
	Fe	10.36	11.5	12.08	Fe	11.34	9.98	8.03	Fe	11.36	11.71	9.85
	Fe	11.55	8.08	9.75	Fe	11.8	9.73	11.61	Fe	7.57	9.83	10.48
	Fe	8.84	12.03	10.25	Fe	8.86	10.52	8.26	Fe	9.14	7.63	10.46
	Fe	9.36	9.21	12.38	Fe	9.86	8.15	8.14	Fe	9.92	9.82	10.16

Fe14C7	C	10.37	12.43	9.85	C	10.61	7.8	8.9	C	11.47	8.27	11.61
	C	12.66	9.89	9.41	C	7.37	10.87	10.22	C	8.63	8.76	11.84
	C	9.4	10.09	7.46	Fe	10.26	9.29	12.57	Fe	10.57	11.87	11.65
	Fe	11.17	9.65	8.08	Fe	12.02	11.61	9.4	Fe	12.02	8.28	9.88
	Fe	12.19	10.12	11.37	Fe	7.66	9.02	10.27	Fe	7.86	10.7	8.4
	Fe	8.4	10.69	11.86	Fe	8.52	12.35	9.99	Fe	9.03	8.52	8.37
	Fe	9.82	7.78	10.7	Fe	9.98	10.19	10.11	Fe	10	11.79	8.07
Fe15C5	C	10.31	9.45	12.42	C	12.57	10.29	10.01	C	7.84	10.07	10.32
	C	9.93	12.5	10.82	C	9.96	10.93	7.7	Fe	10	9.11	8.01
	Fe	10.16	6.86	9	Fe	10.19	11.35	12.32	Fe	10.34	7.99	11.2
	Fe	11.72	10.8	8.45	Fe	11.74	11.96	10.53	Fe	11.87	8.58	9.46
	Fe	12.01	9.85	11.73	Fe	8.21	11.78	10.88	Fe	8.22	10.54	8.48
	Fe	8.32	8.31	9.81	Fe	8.39	7.65	7.61	Fe	8.48	9.56	12.07
	Fe	9.8	12.32	8.93	Fe	9.94	10.1	10.22				
Fe15C6	C	11.7	8.82	10.05	C	12.16	12.25	9.13	C	12.71	11.66	10.19
	C	8.8	11.1	8.31	C	8.97	8.95	12.19	C	9.14	11.88	11.66
	Fe	10.1	10.43	12.4	Fe	10.44	12.04	8.31	Fe	10.51	8.16	11.37
	Fe	10.79	12.16	10.74	Fe	10.89	7.86	8.69	Fe	11.98	10.25	8.8
	Fe	12.21	10.17	11.23	Fe	7.56	9.84	9.06	Fe	7.93	10.42	11.52
	Fe	8.06	8.08	10.79	Fe	8.45	7.77	8.32	Fe	8.51	12.11	9.87
	Fe	9.55	6.46	9.97	Fe	9.71	9.63	7.51	Fe	9.85	9.94	9.88
Fe16C4	C	10.18	12.98	9.84	C	10.96	8.18	11.25	C	11.12	11.63	12.26
	C	9.57	10.19	7.65	Fe	10.18	13.07	11.66	Fe	10.24	7.13	9.87
	Fe	11.35	11.42	10.28	Fe	11.44	9.8	12.05	Fe	11.44	9.99	7.96
	Fe	11.61	7.6	8.05	Fe	12.22	8.84	9.99	Fe	7.45	9.86	10.92
	Fe	7.9	10.26	8.57	Fe	8.03	7.91	9.49	Fe	8.56	11.97	10.25
	Fe	9.15	8.46	11.84	Fe	9.31	10.88	12.19	Fe	9.46	8.31	7.67
	Fe	9.83	9.64	9.86	Fe	10	11.88	8.34				
Fe18C6	C	10	7.26	10.45	C	10.02	12.42	8.71	C	11.97	8.09	8.43
	C	7.48	11.13	9.39	C	8.19	7.82	8.27	C	9.91	10.45	6.58
	Fe	10.01	9.83	9.47	Fe	10.1	11.18	11.8	Fe	10.11	7.5	8.49
	Fe	11.11	11.49	7.54	Fe	11.19	9.08	7.03	Fe	11.46	11.95	9.91
	Fe	11.69	7.91	10.24	Fe	12.09	9.92	11.37	Fe	12.49	9.86	8.89
	Fe	13.39	11.87	8.22	Fe	13.67	11.45	10.45	Fe	7.27	9.46	8.61
	Fe	7.94	9.99	10.9	Fe	8.29	7.7	10.07	Fe	8.72	11.25	7.86
Fe	8.83	8.98	6.94	Fe	8.84	12.14	10.08	Fe	9.83	8.76	11.7	
Fe20C5	C	10.72	10.37	13.1	C	11.01	7.57	10.85	C	12.19	11.08	10.22
	C	9.21	11.02	8.01	C	9.46	12.8	11.18	Fe	10.17	10.62	10.8
	Fe	10.2	12.12	12.76	Fe	10.33	10.27	6.52	Fe	10.62	7.08	9.07
	Fe	11.13	8.66	12.34	Fe	11.2	11.22	8.61	Fe	11.29	12.72	10.65
	Fe	11.86	8.74	7.49	Fe	11.91	9.1	10.05	Fe	12.23	10.81	12.05
	Fe	7.15	9.2	11.24	Fe	7.94	10.27	9.38	Fe	8	11.61	11.42
	Fe	8.05	7.76	8.82	Fe	8.19	9.43	7.05	Fe	8.94	9.82	12.75
Fe	9.21	12.42	9.33	Fe	9.26	8.32	10.77	Fe	9.83	7.67	6.86	

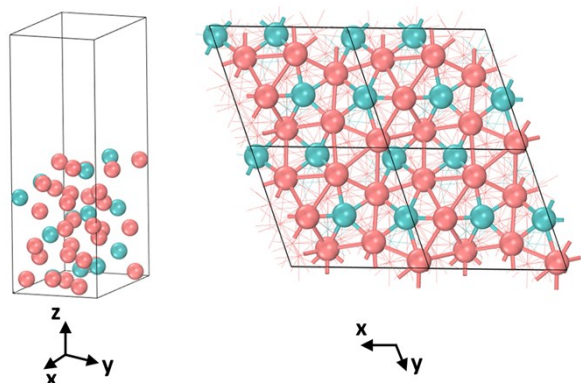
	Fe	9.91	9.3	8.67								
Fe20C8	C	10.12	10.88	6.62	C	10.14	11.3	13.25	C	11.29	12.9	8.33
	C	11.34	8.96	11.88	C	11.77	12.59	11.16	C	7.82	11.37	8.35
	C	8.56	9.56	11.51	C	9.02	13.14	11.27	Fe	10.07	11.13	10.51
	Fe	10.41	12.79	12.34	Fe	10.46	13.43	9.94	Fe	10.62	9.97	8.54
	Fe	11.07	9.19	6.42	Fe	11.44	7.8	8.41	Fe	11.74	11.6	7.13
	Fe	11.94	10.85	12.04	Fe	12.2	9.19	10.29	Fe	12.25	11.77	9.55
	Fe	13.03	9.84	8.13	Fe	14.01	10.64	10.44	Fe	7.96	12.51	9.83
	Fe	8.04	10	9.72	Fe	8.38	11.42	12.05	Fe	8.57	10.1	7.29
	Fe	9.03	8.06	8.33	Fe	9.54	12.2	7.95	Fe	9.91	9.62	12.73
	Fe	9.92	8.58	10.51								
Fe21C7	C	10.95	12.72	8.84	C	11.14	12.08	12.36	C	12.46	9.75	10.24
	C	7.35	12.87	8.91	C	8.73	10.71	12.99	C	9.2	13.66	10.94
	C	9.94	8.38	10.61	Fe	10.55	10.51	13.14	Fe	10.62	12.54	6.98
	Fe	10.98	13.02	10.71	Fe	11.04	9.07	9.17	Fe	11.42	8.93	11.55
	Fe	11.44	10.17	6.79	Fe	12.04	11.26	9.11	Fe	12.49	11.16	11.47
	Fe	7.36	10.93	11.72	Fe	7.42	13.1	10.76	Fe	7.61	11.09	9.4
	Fe	7.61	9.91	7.23	Fe	7.95	12.29	7.22	Fe	8.56	8.91	9.42
	Fe	8.89	9.03	12.03	Fe	9.19	13.22	9.13	Fe	9.27	12.48	12.41
	Fe	9.36	10.86	5.79	Fe	9.62	8.63	7.23	Fe	9.71	10.88	8.25
	Fe	9.82	10.81	10.68								
Fe25C10	C	10.47	7.05	11.96	C	10.64	10.22	6.46	C	11.9	12.34	10.38
	C	12.7	6.9	8.94	C	12.95	7.73	7.92	C	7.42	11.4	8.7
	C	8.09	9.04	7.23	C	8.37	9.77	13.1	C	9.62	12.8	7.48
	C	9.76	6.63	9.33	Fe	10.09	10.26	12.51	Fe	10.46	12.59	11.7
	Fe	10.46	12.76	9.23	Fe	10.55	10.02	8.51	Fe	10.91	7.4	8.03
	Fe	11.09	11.89	6.96	Fe	11.4	6.64	10.31	Fe	11.45	10.6	10.72
	Fe	11.7	8.49	11.99	Fe	12.28	9.29	7.08	Fe	12.49	8.83	9.63
	Fe	12.57	11.44	8.83	Fe	6.78	11.79	10.44	Fe	7.58	9.57	8.95
	Fe	7.75	9.2	11.37	Fe	8.11	11.5	12.41	Fe	8.15	13.03	8.54
	Fe	8.48	7.51	8.31	Fe	8.51	13.55	10.8	Fe	8.74	10.93	7.28
	Fe	8.85	6.62	11.01	Fe	9	11.08	10.2	Fe	9.26	8.08	12.95
	Fe	9.66	8.69	6.46	Fe	9.79	8.58	10.3				

**Table S3. The structural parameters of iron carbides crystals.**

Formula	Space group	Lattice constants		Atom, Site (x, y, z)
		Present work	Referenced data	
$\eta$ -Fe <sub>2</sub> C	Pnnm (58)	a = 4.71 Å	a = 4.70 Å <sup>26</sup>	C1, 2a (0, 0, 0) Fe1, 4g (0.6667, 0.25, 0)
		b = 4.26 Å	b = 4.32 Å	
		c = 2.81 Å	c = 2.83 Å	
		α = 90°	α = 90°	
		β = 90°	β = 90°	
		γ = 90°	γ = 90°	

$\chi$ -Fe <sub>5</sub> C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> /c (15)	a = 11.56 Å	a = 11.59 Å <sup>27</sup>	C1, 8f (0.107, 0.285, 0.149)
		b = 4.49 Å	b = 4.58 Å	Fe1, 8f (0.097, 0.078, 0.423)
		c = 4.98 Å	c = 5.06 Å	Fe2, 8f (0.215, 0.581, 0.306)
		$\alpha = 90^\circ$	$\alpha = 90^\circ$	Fe3, 4e (0, 0.561, 0.25)
		$\gamma = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$	
		$\beta = 97.6^\circ$	$\beta = 97.8^\circ$	
$\theta$ -Fe <sub>3</sub> C	Pnma (62)	a = 5.03 Å	a = 5.09 Å <sup>28</sup>	C1, 4c (0.890, 0.250, 0.450)
		b = 6.73 Å	b = 6.74 Å	Fe1, 8d (-0.186, 0.563, -0.328)
		c = 4.47 Å	c = 4.53 Å	Fe2, 4c (0.036, 0.250, 0.852)
		$\alpha = 90^\circ$	$\alpha = 90^\circ$	
		$\beta = 90^\circ$	$\beta = 90^\circ$	
		$\gamma = 90^\circ$	$\gamma = 90^\circ$	
$\gamma$ "-Fe <sub>4</sub> C	PM-3m (221)	a = 3.76 Å		C1, 1b (0.5 0.5 0.5)
		b = 3.76 Å		Fe1, 1a (0.0 0.0 0.0)
		c = 3.76 Å		Fe2, 3c (0.5 0.5 0.0)
		$\alpha = 90^\circ$		
		$\beta = 90^\circ$		
		$\gamma = 90^\circ$		

---



**Figure S1.** The Schematic side and top views of Fe<sub>5</sub>C<sub>2</sub>(111) surface (a = 6.71, b = 6.19, c = 19.19,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 109.552^\circ$ , cell-formula = Fe<sub>30</sub>C<sub>12</sub>)

## Reference

1. Z. X. Cao, *Comp. Theor. Chem.*, 1996, **365**, 211-214.
2. B. K. Nash, B. K. Rao and P. Jena, *J. Chem. Phys.*, 1996, **105**, 11020.
3. R. M. Sosa, P. Gardiol and G. Beltrame, *Int. J. Quantum Chem.*, 1997, **65**, 919-928.
4. A. V. Arbuznikov, M. Hendrickx and L. G. Vanquickenborne, *Chem. Phys. Lett.*, 1999, **310**, 515-522.
5. D. Tzeli and A. Mavridis, *J. Chem. Phys.*, 2002, **116**, 4901.
6. G. L. Gutsev and C. W. Bauschlicher, *Chem. Phys.*, 2003, **291**, 27-40.
7. E. G. Noya, R. C. Longo and L. J. Gallego, *J. Chem. Phys.*, 2003, **119**, 11130.
8. M. F. A. Hendrickx and S. Clima, *Chem. Phys. Lett.*, 2004, **388**, 290-296.
9. M. V. Ryzhkov, A. L. Ivanovskii and B. T. Delley, *Chem. Phys. Lett.*, 2005, **404**, 400-408.
10. V. M. Rayon, P. Redondo, C. Barrientos and A. Largo, *Chem. Eur. J.*, 2006, **12**, 6963-6975.
11. S. Yuan, J. Wang, Y.-B. Duan, Y.-W. Li and H. Jiao, *J. Mol. Catal. A: Chem.*, 2006, **256**, 130-137.
12. H. H. Harris and I. G. Dance, *Polyhedron*, 2007, **26**, 250-265.
13. Q.-M. Ma, Z. Xie, J. Wang, Y. Liu and Y.-C. Li, *Phys. Rev. B*, 2007, **76**, 035412.
14. M. V. Ryzhkov, A. L. Ivanovskii and B. Delley, *Theor. Chem. Acc.*, 2007, **119**, 313-318.
15. M.-Y. Sun, C.-L. Yang, M.-S. Wang, Y.-B. Gong, Y.-T. Zhu and W. Liu, *J. Phys. Chem. A*, 2008, **112**, 4556-4561.
16. Z. X. Zhang, B. B. Cao and H. M. Duan, *Comp. Theor. Chem.*, 2008, **863**, 22-27.
17. L. Largo, C. Barrientos and P. Redondo, *J. Chem. Phys.*, 2009, **130**, 134304.
18. W. Zhu and G. Li, *Int. J. Mass spectrom.*, 2009, **281**, 63-71.
19. M. V. Ryzhkov and B. Delley, *Theor. Chem. Acc.*, 2012, **131**, 1144.
20. G. L. Gutsev, C. A. Weatherford, P. Jena, E. Johnson and B. R. Ramachandran, *J. Phys. Chem. C*, 2012, **116**, 7050-7061.
21. C. Chang, A. B. C. Patzer, W. H. Kegel and S. Chandra, *Astrophys. Space Sci.*, 2013, **347**, 315-325.
22. M. D. Ganji, Z. Sohbatzadeh and A. Khosravi, *Struct. Chem.*, 2013, **25**, 551-559.
23. R. Li, R. Peverati, M. Isegawa and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem. A*, 2013, **117**, 169-173.
24. I. Fishtik, *J. Phys. Chem. A*, 2013, **117**, 4066-4071.
25. Z.-H. Chen and Z. Xie, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, 2014, **67**, 10403.
26. Y. Hirotsu and S. Nagakura, *Acta Metall.*, 1972, **20**, 645-655.
27. J. J. Retief, *Powder Diffr.*, 1999, **14**, 130-132.
28. E. J. Fasiska and G. A. Jeffrey, *Acta Crystallogr.*, 1965, **19**, 463-471.