

Supplementary Information

Understanding the facet-dependent catalytic performance of hematite microcrystals on CO oxidation reaction

Liming Sun,^a Wenwen Zhan,^{a,*} Yan-An Li,^b Fan Wang,^a Xueliang Zhang,^a and Xiguang Han^{a,*}

^aJiangsu Key Laboratory of Green Synthetic Chemistry for Functional Materials, Department of Chemistry, School of Chemistry and Materials Science, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, P. R. China.

^b College of Chemistry, Chemical Engineering and Materials Science, Shandong Normal University, Jinan 250014, People's Republic of China

* Corresponding author, E-mail: wwzhan@jsnu.edu.cn; xghan@jsnu.edu.cn

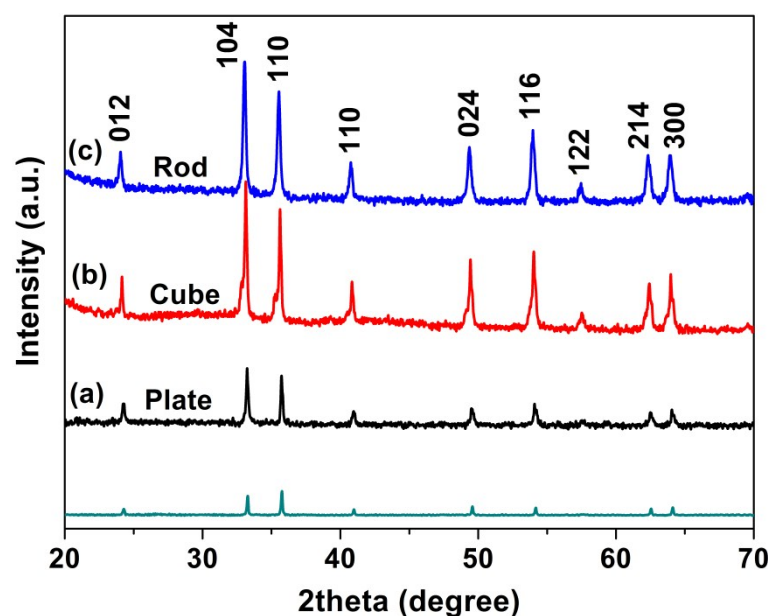


Fig. S1. Typical XRD pattern of as prepared three different morphologies of α -Fe₂O₃ products.

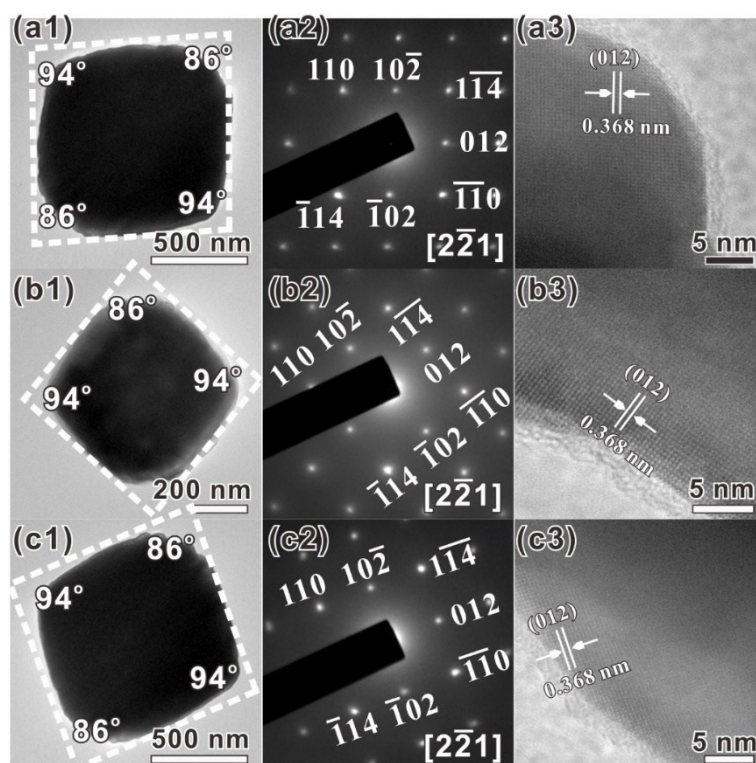


Fig. S2. TEM images (a), their corresponding SAED patterns (b) and HRTEM images (c) of various α -Fe₂O₃ microcubes.

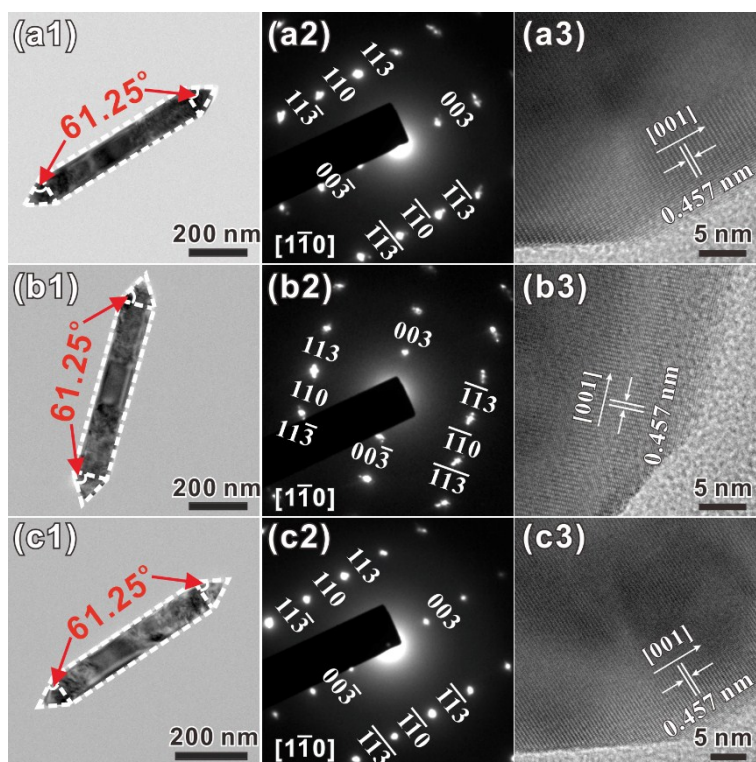


Fig. S3. TEM images (a), their corresponding SAED patterns (b) and HRTEM images

(c) of various α -Fe₂O₃ nanorods.

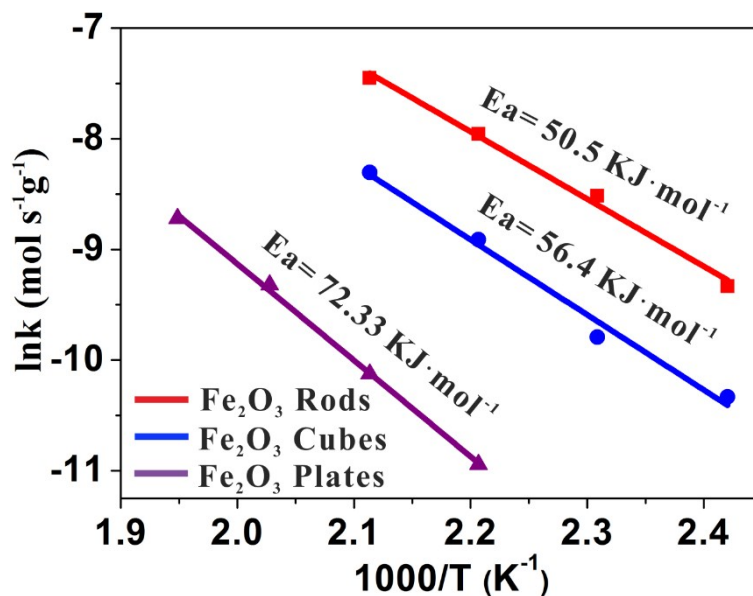


Fig. S4. Arrhenius plots of the three different α -Fe₂O₃ samples for the reaction activation energy E_a .

The specific reaction rate K used in Figure S4 and Table 1 can be calculated assuming the ideal gas behaviour as follows:

$$K \text{ (mol g}^{-1} \text{ s}^{-1}\text{)} = \text{GHSV (mL h}^{-1} \text{ g}^{-1}\text{)} \times 1/3600 \text{ (h s}^{-1}\text{)} \times 1/1000 \text{ (L mL}^{-1}\text{)} \times \text{CO vol.\%} \times \text{conversion\%} \times 1/22.4 \text{ (mol L}^{-1}\text{)} \quad (1)$$

**The specific reaction rate could be expressed by the Arrhenius equation:

$$K = A \exp(-E_a/RT) \quad (2)$$

where K is the reaction rate of CO (mol CO g⁻¹ s⁻¹), A is the pre-exponential factor (s⁻¹), E_a is the apparent activation energy (KJ mol⁻¹), R is the gas constant, and T is the absolute temperature (K). Taking the natural log of both sides of the equation (1), we get:

$$\ln K = -E_a/T + \ln A \quad (3)$$

By plotting $\ln K$ versus $1000/T$, the apparent activation energy E_a can be calculated from the slope as shown in Figure 4b.

In addition, $K \text{ (mol s}^{-1} \text{ m}^{-2}\text{)} = K \text{ (mol g}^{-1} \text{ s}^{-1}\text{)}/\text{BET surface area (m}^2 \text{ g}^{-1}\text{)}$

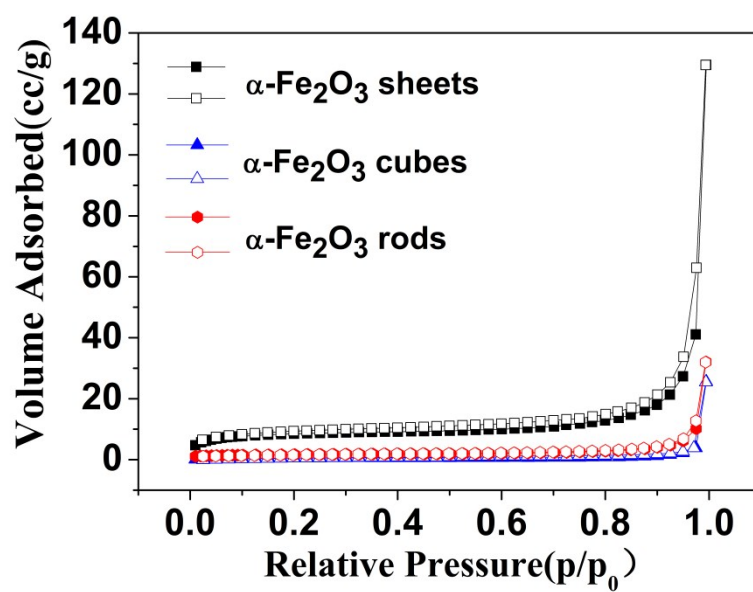


Fig. S5. Nitrogen sorption isotherms of the three $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ samples.

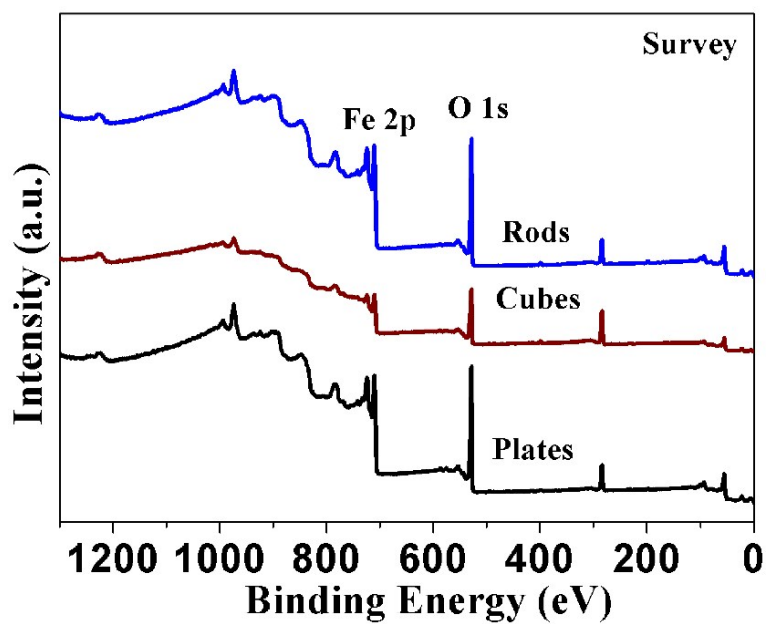


Fig. S6. XPS survey spectrum of three Fe_2O_3 samples.

Table S1. Calculated α -Fe₂O₃ Surface Energies

Surface plane	Layers	Surface energy (J/m ²)
α -Fe ₂ O ₃ (110)	6	0.69
	9	0.90
	12	0.91
	15	0.89
α -Fe ₂ O ₃ (012)	5	0.83
	10	1.09
	15	1.12
α -Fe ₂ O ₃ (001)	6	0.78
	12	1.14
	18	1.09

Table S2. The coordinates of α -Fe₂O₃ (110) surface.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
O	1	0.453488	0.078488	0.087957
O	2	0.460671	0.067459	0.341311
O	3	0.203488	0.328488	0.216166
O	4	0.296512	0.421511	0.087957
O	5	0.046512	0.171512	0.216166
O	6	0.288275	0.426011	0.341138
O	7	0.375000	0.000000	0.223619
O	8	0.125000	0.250000	0.095411
O	9	0.123989	0.243931	0.350917
O	10	0.046512	0.421511	0.007454
O	11	0.045420	0.422641	0.264650
O	12	0.296512	0.171512	0.135662
O	13	0.203488	0.078488	0.007454
O	14	0.453488	0.328488	0.135662
O	15	0.206657	0.074585	0.264109
O	16	0.125000	0.000000	0.128209
O	17	0.375000	0.250000	0.000000
O	18	0.375213	0.252173	0.256515
O	19	0.953488	0.078488	0.087957
O	20	0.960665	0.067476	0.341307
O	21	0.703488	0.328488	0.216166
O	22	0.796512	0.421511	0.087957
O	23	0.546512	0.171512	0.216166
O	24	0.788260	0.426024	0.341146
O	25	0.875000	0.000000	0.223619
O	26	0.625000	0.250000	0.095411

O	27	0.623981	0.243921	0.350917
O	28	0.546512	0.421511	0.007454
O	29	0.545430	0.422640	0.264652
O	30	0.796512	0.171512	0.135662
O	31	0.703488	0.078488	0.007454
O	32	0.953488	0.328488	0.135662
O	33	0.706652	0.074558	0.264106
O	34	0.625000	0.000000	0.128209
O	35	0.875000	0.250000	0.000000
O	36	0.875205	0.252182	0.256518
O	37	0.453488	0.578488	0.087957
O	38	0.461734	0.573977	0.341139
O	39	0.203488	0.828488	0.216166
O	40	0.296512	0.921511	0.087957
O	41	0.046512	0.671512	0.216166
O	42	0.289329	0.932530	0.341312
O	43	0.375000	0.500000	0.223619
O	44	0.125000	0.750000	0.095411
O	45	0.126013	0.756064	0.350916
O	46	0.046512	0.921511	0.007454
O	47	0.043357	0.925448	0.264108
O	48	0.296512	0.671512	0.135662
O	49	0.203488	0.578488	0.007454
O	50	0.453488	0.828488	0.135662
O	51	0.204577	0.577357	0.264652
O	52	0.125000	0.500000	0.128209
O	53	0.375000	0.750000	0.000000
O	54	0.374786	0.747821	0.256515
O	55	0.953488	0.578488	0.087957
O	56	0.961736	0.573966	0.341144
O	57	0.703488	0.828488	0.216166
O	58	0.796512	0.921511	0.087957
O	59	0.546512	0.671512	0.216166
O	60	0.789340	0.932524	0.341304
O	61	0.875000	0.500000	0.223619
O	62	0.625000	0.750000	0.095411
O	63	0.626019	0.756069	0.350916
O	64	0.546512	0.921511	0.007454
O	65	0.543334	0.925391	0.264110
O	66	0.796512	0.671512	0.135662
O	67	0.703488	0.578488	0.007454
O	68	0.953488	0.828488	0.135662
O	69	0.704575	0.577357	0.264650

O	70	0.625000	0.500000	0.128209
O	71	0.875000	0.750000	0.000000
O	72	0.874792	0.747816	0.256516
Fe	1	0.423447	0.403106	0.047705
Fe	2	0.173447	0.153106	0.175914
Fe	3	0.419712	0.417958	0.300055
Fe	4	0.326553	0.096894	0.047705
Fe	5	0.336370	0.089631	0.300292
Fe	6	0.076553	0.346894	0.175914
Fe	7	0.076553	0.096894	0.047705
Fe	8	0.326553	0.346894	0.175914
Fe	9	0.079796	0.105127	0.301406
Fe	10	0.173447	0.403106	0.047705
Fe	11	0.169857	0.380363	0.302614
Fe	12	0.423447	0.153106	0.175914
Fe	13	0.923447	0.403106	0.047705
Fe	14	0.673447	0.153106	0.175914
Fe	15	0.919711	0.417958	0.300057
Fe	16	0.826553	0.096894	0.047705
Fe	17	0.836375	0.089636	0.300288
Fe	18	0.576553	0.346894	0.175914
Fe	19	0.576553	0.096894	0.047705
Fe	20	0.826553	0.346894	0.175914
Fe	21	0.579795	0.105113	0.301406
Fe	22	0.673447	0.403106	0.047705
Fe	23	0.669850	0.380347	0.302619
Fe	24	0.923447	0.153106	0.175914
Fe	25	0.423447	0.903106	0.047705
Fe	26	0.173447	0.653106	0.175914
Fe	27	0.413625	0.910363	0.300292
Fe	28	0.326553	0.596894	0.047705
Fe	29	0.330290	0.582039	0.300057
Fe	30	0.076553	0.846894	0.175914
Fe	31	0.076553	0.596894	0.047705
Fe	32	0.326553	0.846894	0.175914
Fe	33	0.080147	0.619635	0.302615
Fe	34	0.173447	0.903106	0.047705
Fe	35	0.170205	0.894870	0.301409
Fe	36	0.423447	0.653106	0.175914
Fe	37	0.923447	0.903106	0.047705
Fe	38	0.673447	0.653106	0.175914
Fe	39	0.913629	0.910363	0.300288
Fe	40	0.826553	0.596894	0.047705

Fe	41	0.830283	0.582035	0.300056
Fe	42	0.576553	0.846894	0.175914
Fe	43	0.576553	0.596894	0.047705
Fe	44	0.826553	0.846894	0.175914
Fe	45	0.580151	0.619640	0.302614
Fe	46	0.673447	0.903106	0.047705
Fe	47	0.670204	0.894879	0.301407
Fe	48	0.923447	0.653106	0.175914

Table S3. The coordinates of CO adsorbed on α -Fe₂O₃ (110) surface.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
C	1	0.476608	-0.411425	0.443938
O	1	0.453488	0.078488	0.087957
O	2	0.460241	0.068102	0.341052
O	3	0.203488	0.328488	0.216166
O	4	0.296512	0.421511	0.087957
O	5	0.046512	0.171512	0.216166
O	6	0.298061	0.419691	0.341305
O	7	0.375000	0.000000	0.223619
O	8	0.125000	0.250000	0.095411
O	9	0.124877	0.245082	0.350613
O	10	0.046512	0.421511	0.007454
O	11	0.044427	0.421907	0.264742
O	12	0.296512	0.171512	0.135662
O	13	0.203488	0.078488	0.007454
O	14	0.453488	0.328488	0.135662
O	15	0.206117	0.074606	0.264222
O	16	0.125000	0.000000	0.128209
O	17	0.375000	0.250000	0.000000
O	18	0.371662	0.250150	0.254327
O	19	0.953488	0.078488	0.087957
O	20	0.960164	0.068487	0.341228
O	21	0.703488	0.328488	0.216166
O	22	0.796512	0.421511	0.087957
O	23	0.546512	0.171512	0.216166
O	24	0.789638	0.425377	0.341413
O	25	0.875000	0.000000	0.223619
O	26	0.625000	0.250000	0.095411
O	27	0.625290	0.245871	0.351230
O	28	0.546512	0.421511	0.007454
O	29	0.543448	0.423748	0.264914
O	30	0.796512	0.171512	0.135662

O	31	0.703488	0.078488	0.007454
O	32	0.953488	0.328488	0.135662
O	33	0.705141	0.073517	0.264211
O	34	0.625000	0.000000	0.128209
O	35	0.875000	0.250000	0.000000
O	36	0.874064	0.251573	0.256075
O	37	0.453488	0.578488	0.087957
O	38	0.484328	0.560296	0.381863
O	39	0.203488	0.828488	0.216166
O	40	0.296512	0.921511	0.087957
O	41	0.046512	0.671512	0.216166
O	42	0.288767	0.932914	0.341390
O	43	0.375000	0.500000	0.223619
O	44	0.125000	0.750000	0.095411
O	45	0.125349	0.756079	0.351040
O	46	0.046512	0.921511	0.007454
O	47	0.043690	0.926249	0.264061
O	48	0.296512	0.671512	0.135662
O	49	0.203488	0.578488	0.007454
O	50	0.453488	0.828488	0.135662
O	51	0.195338	0.578476	0.263749
O	52	0.125000	0.500000	0.128209
O	53	0.375000	0.750000	0.000000
O	54	0.376434	0.736888	0.263885
O	55	0.953488	0.578488	0.087957
O	56	0.957669	0.575892	0.341435
O	57	0.703488	0.828488	0.216166
O	58	0.796512	0.921511	0.087957
O	59	0.546512	0.671512	0.216166
O	60	0.788989	0.931516	0.341628
O	61	0.875000	0.500000	0.223619
O	62	0.625000	0.750000	0.095411
O	63	0.629143	0.747088	0.349787
O	64	0.546512	0.921511	0.007454
O	65	0.543192	0.925797	0.264451
O	66	0.796512	0.671512	0.135662
O	67	0.703488	0.578488	0.007454
O	68	0.953488	0.828488	0.135662
O	69	0.710486	0.575775	0.262075
O	70	0.625000	0.500000	0.128209
O	71	0.875000	0.750000	0.000000
O	72	0.875802	0.748507	0.256509
O	73	0.468228	-0.387088	0.504897

Fe	1	0.423447	0.403106	0.047705
Fe	2	0.173447	0.153106	0.175914
Fe	3	0.419560	0.397727	0.301181
Fe	4	0.326553	0.096894	0.047705
Fe	5	0.335377	0.089844	0.300690
Fe	6	0.076553	0.346894	0.175914
Fe	7	0.076553	0.096894	0.047705
Fe	8	0.326553	0.346894	0.175914
Fe	9	0.079125	0.106148	0.301466
Fe	10	0.173447	0.403106	0.047705
Fe	11	0.174262	0.382465	0.303420
Fe	12	0.423447	0.153106	0.175914
Fe	13	0.923447	0.403106	0.047705
Fe	14	0.673447	0.153106	0.175914
Fe	15	0.919876	0.416029	0.299957
Fe	16	0.826553	0.096894	0.047705
Fe	17	0.834575	0.089151	0.300111
Fe	18	0.576553	0.346894	0.175914
Fe	19	0.576553	0.096894	0.047705
Fe	20	0.826553	0.346894	0.175914
Fe	21	0.579503	0.109581	0.301442
Fe	22	0.673447	0.403106	0.047705
Fe	23	0.670194	0.382991	0.302363
Fe	24	0.923447	0.153106	0.175914
Fe	25	0.423447	0.903106	0.047705
Fe	26	0.173447	0.653106	0.175914
Fe	27	0.413163	0.911268	0.300389
Fe	28	0.326553	0.596894	0.047705
Fe	29	0.312656	0.578506	0.298249
Fe	30	0.076553	0.846894	0.175914
Fe	31	0.076553	0.596894	0.047705
Fe	32	0.326553	0.846894	0.175914
Fe	33	0.075689	0.620379	0.303859
Fe	34	0.173447	0.903106	0.047705
Fe	35	0.169940	0.895495	0.301382
Fe	36	0.423447	0.653106	0.175914
Fe	37	0.923447	0.903106	0.047705
Fe	38	0.673447	0.653106	0.175914
Fe	39	0.913662	0.911187	0.300185
Fe	40	0.826553	0.596894	0.047705
Fe	41	0.832953	0.582186	0.300726
Fe	42	0.576553	0.846894	0.175914
Fe	43	0.576553	0.596894	0.047705

Fe	44	0.826553	0.846894	0.175914
Fe	45	0.597200	0.603070	0.300740
Fe	46	0.673447	0.903106	0.047705
Fe	47	0.670429	0.890877	0.301559
Fe	48	0.923447	0.653106	0.175914

Table S4. The coordinates of O₂ adsorbed on α -Fe₂O₃ (110) surface with an oxygen vacancy.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
O	1	0.453488	0.078488	0.087957
O	2	0.460710	0.066709	0.341253
O	3	0.203488	0.328488	0.216166
O	4	0.296512	0.421511	0.087957
O	5	0.046512	0.171512	0.216166
O	6	0.288431	0.424626	0.340899
O	7	0.375000	0.000000	0.223619
O	8	0.125000	0.250000	0.095411
O	9	0.123166	0.243886	0.350930
O	10	0.046512	0.421511	0.007454
O	11	0.045535	0.422474	0.264554
O	12	0.296512	0.171512	0.135662
O	13	0.203488	0.078488	0.007454
O	14	0.453488	0.328488	0.135662
O	15	0.206898	0.075023	0.264149
O	16	0.125000	0.000000	0.128209
O	17	0.375000	0.250000	0.000000
O	18	0.375638	0.252817	0.255868
O	19	0.953488	0.078488	0.087957
O	20	0.960422	0.067115	0.341286
O	21	0.703488	0.328488	0.216166
O	22	0.796512	0.421511	0.087957
O	23	0.546512	0.171512	0.216166
O	24	0.788253	0.425429	0.341124
O	25	0.875000	0.000000	0.223619
O	26	0.625000	0.250000	0.095411
O	27	0.623533	0.243889	0.350908
O	28	0.546512	0.421511	0.007454
O	29	0.544420	0.423744	0.264993
O	30	0.796512	0.171512	0.135662
O	31	0.703488	0.078488	0.007454
O	32	0.953488	0.328488	0.135662
O	33	0.707213	0.076796	0.264082

O	34	0.625000	0.000000	0.128209
O	35	0.875000	0.250000	0.000000
O	36	0.875832	0.252223	0.256250
O	37	0.453488	0.578488	0.087957
O	38	0.203488	0.828488	0.216166
O	39	0.296512	0.921511	0.087957
O	40	0.046512	0.671512	0.216166
O	41	0.289420	0.932440	0.341189
O	42	0.375000	0.500000	0.223619
O	43	0.125000	0.750000	0.095411
O	44	0.126690	0.756154	0.350994
O	45	0.046512	0.921511	0.007454
O	46	0.043207	0.925636	0.264118
O	47	0.296512	0.671512	0.135662
O	48	0.203488	0.578488	0.007454
O	49	0.453488	0.828488	0.135662
O	50	0.203705	0.576797	0.264521
O	51	0.125000	0.500000	0.128209
O	52	0.375000	0.750000	0.000000
O	53	0.374549	0.746958	0.256916
O	54	0.953488	0.578488	0.087957
O	55	0.962266	0.573185	0.341081
O	56	0.703488	0.828488	0.216166
O	57	0.796512	0.921511	0.087957
O	58	0.546512	0.671512	0.216166
O	59	0.789471	0.932764	0.341400
O	60	0.875000	0.500000	0.223619
O	61	0.625000	0.750000	0.095411
O	62	0.627567	0.756901	0.351054
O	63	0.546512	0.921511	0.007454
O	64	0.543400	0.925609	0.264095
O	65	0.796512	0.671512	0.135662
O	66	0.703488	0.578488	0.007454
O	67	0.953488	0.828488	0.135662
O	68	0.704778	0.576623	0.264178
O	69	0.625000	0.500000	0.128209
O	70	0.875000	0.750000	0.000000
O	71	0.874345	0.747337	0.256597
O	72	0.454690	-0.413696	0.423345
O	73	0.463153	-0.423712	0.348921
Fe	1	0.423447	0.403106	0.047705
Fe	2	0.173447	0.153106	0.175914
Fe	3	0.419095	0.417372	0.301130

Fe	4	0.326553	0.096894	0.047705
Fe	5	0.336414	0.090021	0.300435
Fe	6	0.076553	0.346894	0.175914
Fe	7	0.076553	0.096894	0.047705
Fe	8	0.326553	0.346894	0.175914
Fe	9	0.079530	0.104793	0.301389
Fe	10	0.173447	0.403106	0.047705
Fe	11	0.169812	0.379859	0.302777
Fe	12	0.423447	0.153106	0.175914
Fe	13	0.923447	0.403106	0.047705
Fe	14	0.673447	0.153106	0.175914
Fe	15	0.920017	0.417881	0.299930
Fe	16	0.826553	0.096894	0.047705
Fe	17	0.836364	0.089939	0.300271
Fe	18	0.576553	0.346894	0.175914
Fe	19	0.576553	0.096894	0.047705
Fe	20	0.826553	0.346894	0.175914
Fe	21	0.579798	0.104885	0.301449
Fe	22	0.673447	0.403106	0.047705
Fe	23	0.669460	0.380304	0.302635
Fe	24	0.923447	0.153106	0.175914
Fe	25	0.423447	0.903106	0.047705
Fe	26	0.173447	0.653106	0.175914
Fe	27	0.412974	0.910326	0.300399
Fe	28	0.326553	0.596894	0.047705
Fe	29	0.328213	0.581636	0.300159
Fe	30	0.076553	0.846894	0.175914
Fe	31	0.076553	0.596894	0.047705
Fe	32	0.326553	0.846894	0.175914
Fe	33	0.081069	0.619971	0.302694
Fe	34	0.173447	0.903106	0.047705
Fe	35	0.170349	0.895092	0.301422
Fe	36	0.423447	0.653106	0.175914
Fe	37	0.923447	0.903106	0.047705
Fe	38	0.673447	0.653106	0.175914
Fe	39	0.912937	0.910180	0.300322
Fe	40	0.826553	0.596894	0.047705
Fe	41	0.829981	0.581652	0.300217
Fe	42	0.576553	0.846894	0.175914
Fe	43	0.576553	0.596894	0.047705
Fe	44	0.826553	0.846894	0.175914
Fe	45	0.586274	0.619510	0.302034
Fe	46	0.673447	0.903106	0.047705

Fe	47	0.670323	0.895277	0.301358
Fe	48	0.923447	0.653106	0.175914

Table S5. The coordinates of CO₂ adsorbed on α -Fe₂O₃ (110) surface.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
C	1	0.486384	-0.515236	0.591347
O	1	0.453488	0.078488	0.087957
O	2	0.460485	0.067294	0.341327
O	3	0.203488	0.328488	0.216166
O	4	0.296512	0.421511	0.087957
O	5	0.046512	0.171512	0.216166
O	6	0.288460	0.425639	0.341016
O	7	0.375000	0.000000	0.223619
O	8	0.125000	0.250000	0.095411
O	9	0.123678	0.243908	0.350987
O	10	0.046512	0.421511	0.007454
O	11	0.045597	0.422634	0.264693
O	12	0.296512	0.171512	0.135662
O	13	0.203488	0.078488	0.007454
O	14	0.453488	0.328488	0.135662
O	15	0.206773	0.074488	0.264143
O	16	0.125000	0.000000	0.128209
O	17	0.375000	0.250000	0.000000
O	18	0.375447	0.252094	0.256440
O	19	0.953488	0.078488	0.087957
O	20	0.960573	0.067317	0.341348
O	21	0.703488	0.328488	0.216166
O	22	0.796512	0.421511	0.087957
O	23	0.546512	0.171512	0.216166
O	24	0.788462	0.425600	0.341110
O	25	0.875000	0.000000	0.223619
O	26	0.625000	0.250000	0.095411
O	27	0.623695	0.243778	0.351002
O	28	0.546512	0.421511	0.007454
O	29	0.545721	0.422214	0.264535
O	30	0.796512	0.171512	0.135662
O	31	0.703488	0.078488	0.007454
O	32	0.953488	0.328488	0.135662
O	33	0.706809	0.074414	0.264137
O	34	0.625000	0.000000	0.128209
O	35	0.875000	0.250000	0.000000
O	36	0.875436	0.252338	0.256516

O	37	0.453488	0.578488	0.087957
O	38	0.462532	0.573179	0.341195
O	39	0.203488	0.828488	0.216166
O	40	0.296512	0.921511	0.087957
O	41	0.046512	0.671512	0.216166
O	42	0.289383	0.932536	0.341347
O	43	0.375000	0.500000	0.223619
O	44	0.125000	0.750000	0.095411
O	45	0.126299	0.756062	0.350995
O	46	0.046512	0.921511	0.007454
O	47	0.043179	0.925470	0.264141
O	48	0.296512	0.671512	0.135662
O	49	0.203488	0.578488	0.007454
O	50	0.453488	0.828488	0.135662
O	51	0.204362	0.577332	0.264685
O	52	0.125000	0.500000	0.128209
O	53	0.375000	0.750000	0.000000
O	54	0.374552	0.747536	0.256616
O	55	0.953488	0.578488	0.087957
O	56	0.961571	0.574381	0.341104
O	57	0.703488	0.828488	0.216166
O	58	0.796512	0.921511	0.087957
O	59	0.546512	0.671512	0.216166
O	60	0.789433	0.932581	0.341354
O	61	0.875000	0.500000	0.223619
O	62	0.625000	0.750000	0.095411
O	63	0.626346	0.756088	0.351001
O	64	0.546512	0.921511	0.007454
O	65	0.543172	0.925564	0.264129
O	66	0.796512	0.671512	0.135662
O	67	0.703488	0.578488	0.007454
O	68	0.953488	0.828488	0.135662
O	69	0.704494	0.577361	0.264692
O	70	0.625000	0.500000	0.128209
O	71	0.875000	0.750000	0.000000
O	72	0.874545	0.747642	0.256506
O	73	0.539129	-0.591611	0.588547
O	74	0.435356	-0.436373	0.593173
Fe	1	0.423447	0.403106	0.047705
Fe	2	0.173447	0.153106	0.175914
Fe	3	0.420069	0.417894	0.299621
Fe	4	0.326553	0.096894	0.047705
Fe	5	0.336507	0.089709	0.300356

Fe	6	0.076553	0.346894	0.175914
Fe	7	0.076553	0.096894	0.047705
Fe	8	0.326553	0.346894	0.175914
Fe	9	0.079713	0.104982	0.301412
Fe	10	0.173447	0.403106	0.047705
Fe	11	0.169891	0.380084	0.302685
Fe	12	0.423447	0.153106	0.175914
Fe	13	0.923447	0.403106	0.047705
Fe	14	0.673447	0.153106	0.175914
Fe	15	0.919976	0.418155	0.300090
Fe	16	0.826553	0.096894	0.047705
Fe	17	0.836591	0.089760	0.300352
Fe	18	0.576553	0.346894	0.175914
Fe	19	0.576553	0.096894	0.047705
Fe	20	0.826553	0.346894	0.175914
Fe	21	0.579693	0.104899	0.301402
Fe	22	0.673447	0.403106	0.047705
Fe	23	0.670026	0.379925	0.302844
Fe	24	0.923447	0.153106	0.175914
Fe	25	0.423447	0.903106	0.047705
Fe	26	0.173447	0.653106	0.175914
Fe	27	0.413268	0.910218	0.300328
Fe	28	0.326553	0.596894	0.047705
Fe	29	0.329965	0.581814	0.299883
Fe	30	0.076553	0.846894	0.175914
Fe	31	0.076553	0.596894	0.047705
Fe	32	0.326553	0.846894	0.175914
Fe	33	0.080113	0.619902	0.302704
Fe	34	0.173447	0.903106	0.047705
Fe	35	0.170241	0.894942	0.301412
Fe	36	0.423447	0.653106	0.175914
Fe	37	0.923447	0.903106	0.047705
Fe	38	0.673447	0.653106	0.175914
Fe	39	0.913347	0.910205	0.300333
Fe	40	0.826553	0.596894	0.047705
Fe	41	0.830096	0.581849	0.300082
Fe	42	0.576553	0.846894	0.175914
Fe	43	0.576553	0.596894	0.047705
Fe	44	0.826553	0.846894	0.175914
Fe	45	0.580642	0.619859	0.302527
Fe	46	0.673447	0.903106	0.047705
Fe	47	0.670270	0.895004	0.301406
Fe	48	0.923447	0.653106	0.175914

Table S6. The coordinates of α -Fe₂O₃ (012) surface.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
O	1	0.161822	0.391424	0.062265
O	2	0.330568	0.097396	0.264600
O	3	0.004845	0.454807	0.124529
O	4	0.172198	0.152590	0.325992
O	5	0.004845	0.328042	0.000000
O	6	0.171512	0.029926	0.198324
O	7	0.119186	0.141424	0.062265
O	8	0.283681	0.339966	0.265332
O	9	0.276163	0.078042	0.000000
O	10	0.109496	0.279926	0.198324
O	11	0.276163	0.204807	0.124529
O	12	0.112998	0.403310	0.325311
O	13	0.495155	0.391424	0.062265
O	14	0.658825	0.093243	0.265368
O	15	0.338178	0.454807	0.124529
O	16	0.498955	0.153996	0.326563
O	17	0.338178	0.328042	0.000000
O	18	0.504845	0.029926	0.198324
O	19	0.452519	0.141424	0.062265
O	20	0.617943	0.343172	0.265092
O	21	0.609496	0.078042	0.000000
O	22	0.442829	0.279926	0.198324
O	23	0.609496	0.204807	0.124529
O	24	0.440626	0.400189	0.327252
O	25	0.828488	0.391424	0.062265
O	26	0.996311	0.095611	0.264956
O	27	0.671512	0.454807	0.124529
O	28	0.834669	0.152952	0.325775
O	29	0.671512	0.328042	0.000000
O	30	0.838178	0.029926	0.198324
O	31	0.785853	0.141424	0.062265
O	32	0.953610	0.342098	0.265371
O	33	0.942829	0.078042	0.000000
O	34	0.776163	0.279926	0.198324
O	35	0.942829	0.204807	0.124529
O	36	0.780386	0.400278	0.326425
O	37	0.161822	0.891424	0.062265
O	38	0.329788	0.595976	0.264580
O	39	0.004845	0.954807	0.124529

O	40	0.171999	0.644536	0.326979
O	41	0.004845	0.828042	0.000000
O	42	0.171512	0.529926	0.198324
O	43	0.119186	0.641424	0.062265
O	44	0.289488	0.840460	0.265737
O	45	0.276163	0.578042	0.000000
O	46	0.109496	0.779926	0.198324
O	47	0.276163	0.704807	0.124529
O	48	0.116702	0.901952	0.315781
O	49	0.495155	0.891424	0.062265
O	50	0.661475	0.589602	0.264811
O	51	0.338178	0.954807	0.124529
O	52	0.503835	0.641405	0.327450
O	53	0.338178	0.828042	0.000000
O	54	0.504845	0.529926	0.198324
O	55	0.452519	0.641424	0.062265
O	56	0.622184	0.841015	0.265055
O	57	0.609496	0.578042	0.000000
O	58	0.442829	0.779926	0.198324
O	59	0.609496	0.704807	0.124529
O	60	0.451957	0.892835	0.326781
O	61	0.828488	0.891424	0.062265
O	62	0.997637	0.592920	0.264759
O	63	0.671512	0.954807	0.124529
O	64	0.837006	0.646444	0.325730
O	65	0.671512	0.828042	0.000000
O	66	0.838178	0.529926	0.198324
O	67	0.785853	0.641424	0.062265
O	68	0.955415	0.841720	0.265696
O	69	0.942829	0.578042	0.000000
O	70	0.776163	0.779926	0.198324
O	71	0.942829	0.704807	0.124529
O	72	0.780017	0.899072	0.316610
Fe	1	0.057171	0.285207	0.100697
Fe	2	0.222709	0.489659	0.295361
Fe	3	0.057171	0.497642	0.023832
Fe	4	0.219845	0.200214	0.225568
Fe	5	0.223837	0.247642	0.023832
Fe	6	0.060524	0.443353	0.225931
Fe	7	0.223837	0.035207	0.100697
Fe	8	0.068262	0.247307	0.295179
Fe	9	0.390504	0.285207	0.100697
Fe	10	0.543320	0.486863	0.295986

Fe	11	0.390504	0.497642	0.023832
Fe	12	0.555800	0.201189	0.224090
Fe	13	0.557171	0.247642	0.023832
Fe	14	0.389195	0.444289	0.225711
Fe	15	0.557171	0.035207	0.100697
Fe	16	0.396656	0.247717	0.294683
Fe	17	0.723837	0.285207	0.100697
Fe	18	0.883107	0.489206	0.295433
Fe	19	0.723837	0.497642	0.023832
Fe	20	0.889845	0.201836	0.224603
Fe	21	0.890504	0.247642	0.023832
Fe	22	0.724771	0.443182	0.225528
Fe	23	0.890504	0.035207	0.100697
Fe	24	0.731055	0.248161	0.294832
Fe	25	0.057171	0.785207	0.100697
Fe	26	0.225244	0.996316	0.290644
Fe	27	0.057171	0.997642	0.023832
Fe	28	0.219944	0.691680	0.227815
Fe	29	0.223837	0.747642	0.023832
Fe	30	0.058825	0.955104	0.223851
Fe	31	0.223837	0.535207	0.100697
Fe	32	0.071290	0.735990	0.294351
Fe	33	0.390504	0.785207	0.100697
Fe	34	0.543027	1.001018	0.295275
Fe	35	0.390504	0.997642	0.023832
Fe	36	0.554378	0.693546	0.226403
Fe	37	0.557171	0.747642	0.023832
Fe	38	0.391286	0.954859	0.223989
Fe	39	0.557171	0.535207	0.100697
Fe	40	0.409041	0.738165	0.295007
Fe	41	0.723837	0.785207	0.100697
Fe	42	0.884197	0.999396	0.294276
Fe	43	0.723837	0.997642	0.023832
Fe	44	0.889564	0.691265	0.227275
Fe	45	0.890504	0.747642	0.023832
Fe	46	0.723745	0.955668	0.224291
Fe	47	0.890504	0.535207	0.100697
Fe	48	0.731701	0.734632	0.293297

Table S7. The coordinates of CO adsorbed on α -Fe₂O₃ (012) surface

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
C	1	0.429630	-0.589187	0.497711

O	1	0.161822	0.391424	0.062265
O	2	0.324728	0.073633	0.264946
O	3	0.004845	0.454807	0.124529
O	4	0.171058	0.144748	0.325803
O	5	0.004845	0.328042	0.000000
O	6	0.171512	0.029926	0.198324
O	7	0.119186	0.141424	0.062265
O	8	0.291230	0.347339	0.264666
O	9	0.276163	0.078042	0.000000
O	10	0.109496	0.279926	0.198324
O	11	0.276163	0.204807	0.124529
O	12	0.119215	0.401661	0.325552
O	13	0.495155	0.391424	0.062265
O	14	0.661658	0.095268	0.265311
O	15	0.338178	0.454807	0.124529
O	16	0.493231	0.157427	0.316910
O	17	0.338178	0.328042	0.000000
O	18	0.504845	0.029926	0.198324
O	19	0.452519	0.141424	0.062265
O	20	0.616317	0.342932	0.265756
O	21	0.609496	0.078042	0.000000
O	22	0.442829	0.279926	0.198324
O	23	0.609496	0.204807	0.124529
O	24	0.421247	0.408963	0.431263
O	25	0.828488	0.391424	0.062265
O	26	1.000378	0.100177	0.264562
O	27	0.671512	0.454807	0.124529
O	28	0.839494	0.154720	0.325604
O	29	0.671512	0.328042	0.000000
O	30	0.838178	0.029926	0.198324
O	31	0.785853	0.141424	0.062265
O	32	0.954474	0.342379	0.265560
O	33	0.942829	0.078042	0.000000
O	34	0.776163	0.279926	0.198324
O	35	0.942829	0.204807	0.124529
O	36	0.775278	0.398240	0.326442
O	37	0.161822	0.891424	0.062265
O	38	0.332868	0.597117	0.264137
O	39	0.004845	0.954807	0.124529
O	40	0.171963	0.646787	0.326634
O	41	0.004845	0.828042	0.000000
O	42	0.171512	0.529926	0.198324
O	43	0.119186	0.641424	0.062265

O	44	0.285530	0.838879	0.265125
O	45	0.276163	0.578042	0.000000
O	46	0.109496	0.779926	0.198324
O	47	0.276163	0.704807	0.124529
O	48	0.108866	0.888215	0.326203
O	49	0.495155	0.891424	0.062265
O	50	0.671056	0.607808	0.263421
O	51	0.338178	0.954807	0.124529
O	52	0.498698	0.626869	0.330282
O	53	0.338178	0.828042	0.000000
O	54	0.504845	0.529926	0.198324
O	55	0.452519	0.641424	0.062265
O	56	0.621935	0.846757	0.265424
O	57	0.609496	0.578042	0.000000
O	58	0.442829	0.779926	0.198324
O	59	0.609496	0.704807	0.124529
O	60	0.451749	0.892959	0.325716
O	61	0.828488	0.891424	0.062265
O	62	0.995501	0.585530	0.265579
O	63	0.671512	0.954807	0.124529
O	64	0.839650	0.647196	0.326060
O	65	0.671512	0.828042	0.000000
O	66	0.838178	0.529926	0.198324
O	67	0.785853	0.641424	0.062265
O	68	0.954585	0.844051	0.265141
O	69	0.942829	0.578042	0.000000
O	70	0.776163	0.779926	0.198324
O	71	0.942829	0.704807	0.124529
O	72	0.784007	0.912245	0.317773
O	73	0.437932	-0.587418	0.563992
Fe	1	0.057171	0.285207	0.100697
Fe	2	0.223608	0.495212	0.295186
Fe	3	0.057171	0.497642	0.023832
Fe	4	0.224777	0.201000	0.225918
Fe	5	0.223837	0.247642	0.023832
Fe	6	0.060462	0.442995	0.225369
Fe	7	0.223837	0.035207	0.100697
Fe	8	0.070963	0.247718	0.295286
Fe	9	0.390504	0.285207	0.100697
Fe	10	0.570646	0.509062	0.285862
Fe	11	0.390504	0.497642	0.023832
Fe	12	0.553807	0.195665	0.224543
Fe	13	0.557171	0.247642	0.023832

Fe	14	0.390216	0.457507	0.219895
Fe	15	0.557171	0.035207	0.100697
Fe	16	0.381854	0.221068	0.285361
Fe	17	0.723837	0.285207	0.100697
Fe	18	0.880964	0.488607	0.295342
Fe	19	0.723837	0.497642	0.023832
Fe	20	0.890139	0.196005	0.226337
Fe	21	0.890504	0.247642	0.023832
Fe	22	0.724224	0.446949	0.227898
Fe	23	0.890504	0.035207	0.100697
Fe	24	0.731144	0.240451	0.295815
Fe	25	0.057171	0.785207	0.100697
Fe	26	0.207909	0.981531	0.295320
Fe	27	0.057171	0.997642	0.023832
Fe	28	0.221706	0.691024	0.227596
Fe	29	0.223837	0.747642	0.023832
Fe	30	0.060446	0.954927	0.225400
Fe	31	0.223837	0.535207	0.100697
Fe	32	0.065671	0.732398	0.295375
Fe	33	0.390504	0.785207	0.100697
Fe	34	0.551364	0.994539	0.294105
Fe	35	0.390504	0.997642	0.023832
Fe	36	0.558409	0.708474	0.222179
Fe	37	0.557171	0.747642	0.023832
Fe	38	0.390606	0.937871	0.223383
Fe	39	0.557171	0.535207	0.100697
Fe	40	0.410013	0.735387	0.296235
Fe	41	0.723837	0.785207	0.100697
Fe	42	0.893421	1.001021	0.290857
Fe	43	0.723837	0.997642	0.023832
Fe	44	0.888503	0.708464	0.225028
Fe	45	0.890504	0.747642	0.023832
Fe	46	0.723236	0.956468	0.222771
Fe	47	0.890504	0.535207	0.100697
Fe	48	0.744085	0.753770	0.296274

Table S8. The coordinates of O₂ adsorbed on α -Fe₂O₃ (012) surface with an oxygen vacancy.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
O	1	0.161822	0.391424	0.062265
O	2	0.332783	0.103192	0.264376
O	3	0.004845	0.454807	0.124529

O	4	0.172211	0.152569	0.326669
O	5	0.004845	0.328042	0.000000
O	6	0.171512	0.029926	0.198324
O	7	0.119186	0.141424	0.062265
O	8	0.291155	0.341846	0.265707
O	9	0.276163	0.078042	0.000000
O	10	0.109496	0.279926	0.198324
O	11	0.276163	0.204807	0.124529
O	12	0.113321	0.397506	0.327644
O	13	0.495155	0.391424	0.062265
O	14	0.658192	0.089774	0.264990
O	15	0.338178	0.454807	0.124529
O	16	0.503267	0.138026	0.326417
O	17	0.338178	0.328042	0.000000
O	18	0.504845	0.029926	0.198324
O	19	0.452519	0.141424	0.062265
O	20	0.622404	0.340884	0.263055
O	21	0.609496	0.078042	0.000000
O	22	0.442829	0.279926	0.198324
O	23	0.609496	0.204807	0.124529
O	24	0.828488	0.391424	0.062265
O	25	0.998038	0.099646	0.264577
O	26	0.671512	0.454807	0.124529
O	27	0.838964	0.153012	0.325534
O	28	0.671512	0.328042	0.000000
O	29	0.838178	0.029926	0.198324
O	30	0.785853	0.141424	0.062265
O	31	0.952128	0.348954	0.265057
O	32	0.942829	0.078042	0.000000
O	33	0.776163	0.279926	0.198324
O	34	0.942829	0.204807	0.124529
O	35	0.774679	0.391239	0.327380
O	36	0.161822	0.891424	0.062265
O	37	0.328121	0.581553	0.264955
O	38	0.004845	0.954807	0.124529
O	39	0.172485	0.644187	0.325976
O	40	0.004845	0.828042	0.000000
O	41	0.171512	0.529926	0.198324
O	42	0.119186	0.641424	0.062265
O	43	0.286242	0.843588	0.265368
O	44	0.276163	0.578042	0.000000
O	45	0.109496	0.779926	0.198324
O	46	0.276163	0.704807	0.124529

O	47	0.115271	0.905318	0.316298
O	48	0.495155	0.891424	0.062265
O	49	0.661511	0.594271	0.265563
O	50	0.338178	0.954807	0.124529
O	51	0.500753	0.645547	0.326799
O	52	0.338178	0.828042	0.000000
O	53	0.504845	0.529926	0.198324
O	54	0.452519	0.641424	0.062265
O	55	0.618868	0.839508	0.265622
O	56	0.609496	0.578042	0.000000
O	57	0.442829	0.779926	0.198324
O	58	0.609496	0.704807	0.124529
O	59	0.439037	0.888710	0.326190
O	60	0.828488	0.891424	0.062265
O	61	0.997298	0.595036	0.265260
O	62	0.671512	0.954807	0.124529
O	63	0.830370	0.646223	0.326730
O	64	0.671512	0.828042	0.000000
O	65	0.838178	0.529926	0.198324
O	66	0.785853	0.641424	0.062265
O	67	0.954783	0.840551	0.266048
O	68	0.942829	0.578042	0.000000
O	69	0.776163	0.779926	0.198324
O	70	0.942829	0.704807	0.124529
O	71	0.780211	0.910710	0.317590
O	72	0.456956	0.383775	0.352830
O	73	0.548265	0.395047	0.388827
Fe	1	0.057171	0.285207	0.100697
Fe	2	0.212968	0.488291	0.295420
Fe	3	0.057171	0.497642	0.023832
Fe	4	0.222000	0.195198	0.227299
Fe	5	0.223837	0.247642	0.023832
Fe	6	0.062465	0.444512	0.227802
Fe	7	0.223837	0.035207	0.100697
Fe	8	0.068127	0.245541	0.295775
Fe	9	0.390504	0.285207	0.100697
Fe	10	0.553639	0.492157	0.301941
Fe	11	0.390504	0.497642	0.023832
Fe	12	0.554900	0.200902	0.225341
Fe	13	0.557171	0.247642	0.023832
Fe	14	0.388859	0.444334	0.217193
Fe	15	0.557171	0.035207	0.100697
Fe	16	0.410077	0.244834	0.296715

Fe	17	0.723837	0.285207	0.100697
Fe	18	0.870514	0.488664	0.295962
Fe	19	0.723837	0.497642	0.023832
Fe	20	0.890346	0.201939	0.226064
Fe	21	0.890504	0.247642	0.023832
Fe	22	0.726028	0.444549	0.226411
Fe	23	0.890504	0.035207	0.100697
Fe	24	0.728655	0.234701	0.295301
Fe	25	0.057171	0.785207	0.100697
Fe	26	0.225389	0.999084	0.292334
Fe	27	0.057171	0.997642	0.023832
Fe	28	0.221022	0.707984	0.224370
Fe	29	0.223837	0.747642	0.023832
Fe	30	0.056212	0.955640	0.223657
Fe	31	0.223837	0.535207	0.100697
Fe	32	0.074289	0.739239	0.294550
Fe	33	0.390504	0.785207	0.100697
Fe	34	0.540033	0.979223	0.295700
Fe	35	0.390504	0.997642	0.023832
Fe	36	0.553015	0.687802	0.228637
Fe	37	0.557171	0.747642	0.023832
Fe	38	0.392359	0.954646	0.226189
Fe	39	0.557171	0.535207	0.100697
Fe	40	0.396084	0.731775	0.294081
Fe	41	0.723837	0.785207	0.100697
Fe	42	0.888293	0.999731	0.290804
Fe	43	0.723837	0.997642	0.023832
Fe	44	0.888924	0.692290	0.226626
Fe	45	0.890504	0.747642	0.023832
Fe	46	0.721880	0.954874	0.222426
Fe	47	0.890504	0.535207	0.100697
Fe	48	0.735366	0.752221	0.294352

Table S9. The coordinates of CO₂ adsorbed on α -Fe₂O₃ (012) surface

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
C	1	0.492570	0.365600	0.541296
O	1	0.161822	0.391424	0.062265
O	2	0.331969	0.101319	0.264559
O	3	0.004845	0.454807	0.124529
O	4	0.172288	0.152318	0.326740
O	5	0.004845	0.328042	0.000000
O	6	0.171512	0.029926	0.198324

O	7	0.119186	0.141424	0.062265
O	8	0.287119	0.340982	0.265441
O	9	0.276163	0.078042	0.000000
O	10	0.109496	0.279926	0.198324
O	11	0.276163	0.204807	0.124529
O	12	0.113526	0.397438	0.327726
O	13	0.495155	0.391424	0.062265
O	14	0.657493	0.089789	0.265172
O	15	0.338178	0.454807	0.124529
O	16	0.500499	0.137834	0.326841
O	17	0.338178	0.328042	0.000000
O	18	0.504845	0.029926	0.198324
O	19	0.452519	0.141424	0.062265
O	20	0.620467	0.340094	0.265051
O	21	0.609496	0.078042	0.000000
O	22	0.442829	0.279926	0.198324
O	23	0.609496	0.204807	0.124529
O	24	0.828488	0.391424	0.062265
O	25	0.997889	0.099618	0.264585
O	26	0.671512	0.454807	0.124529
O	27	0.838183	0.152710	0.325629
O	28	0.671512	0.328042	0.000000
O	29	0.838178	0.029926	0.198324
O	30	0.785853	0.141424	0.062265
O	31	0.952542	0.348671	0.265103
O	32	0.942829	0.078042	0.000000
O	33	0.776163	0.279926	0.198324
O	34	0.942829	0.204807	0.124529
O	35	0.774703	0.392237	0.327376
O	36	0.161822	0.891424	0.062265
O	37	0.326484	0.584952	0.265272
O	38	0.004845	0.954807	0.124529
O	39	0.171943	0.644704	0.326099
O	40	0.004845	0.828042	0.000000
O	41	0.171512	0.529926	0.198324
O	42	0.119186	0.641424	0.062265
O	43	0.286055	0.843736	0.265283
O	44	0.276163	0.578042	0.000000
O	45	0.109496	0.779926	0.198324
O	46	0.276163	0.704807	0.124529
O	47	0.114299	0.905873	0.316650
O	48	0.495155	0.891424	0.062265
O	49	0.664416	0.597066	0.264879

O	50	0.338178	0.954807	0.124529
O	51	0.501331	0.645523	0.326381
O	52	0.338178	0.828042	0.000000
O	53	0.504845	0.529926	0.198324
O	54	0.452519	0.641424	0.062265
O	55	0.619194	0.840560	0.265706
O	56	0.609496	0.578042	0.000000
O	57	0.442829	0.779926	0.198324
O	58	0.609496	0.704807	0.124529
O	59	0.439244	0.888674	0.326057
O	60	0.828488	0.891424	0.062265
O	61	0.997504	0.595030	0.265262
O	62	0.671512	0.954807	0.124529
O	63	0.831246	0.646213	0.326786
O	64	0.671512	0.828042	0.000000
O	65	0.838178	0.529926	0.198324
O	66	0.785853	0.641424	0.062265
O	67	0.954770	0.840194	0.266023
O	68	0.942829	0.578042	0.000000
O	69	0.776163	0.779926	0.198324
O	70	0.942829	0.704807	0.124529
O	71	0.780558	0.910622	0.317577
O	72	0.453365	0.401037	0.323556
O	73	0.436428	0.365299	0.590373
O	74	0.548463	0.365492	0.492038
Fe	1	0.057171	0.285207	0.100697
Fe	2	0.213036	0.488546	0.295367
Fe	3	0.057171	0.497642	0.023832
Fe	4	0.221291	0.194971	0.227241
Fe	5	0.223837	0.247642	0.023832
Fe	6	0.062409	0.444731	0.227784
Fe	7	0.223837	0.035207	0.100697
Fe	8	0.068280	0.245371	0.295785
Fe	9	0.390504	0.285207	0.100697
Fe	10	0.556114	0.494547	0.292651
Fe	11	0.390504	0.497642	0.023832
Fe	12	0.554560	0.201095	0.224493
Fe	13	0.557171	0.247642	0.023832
Fe	14	0.389352	0.443302	0.222677
Fe	15	0.557171	0.035207	0.100697
Fe	16	0.409716	0.246339	0.295454
Fe	17	0.723837	0.285207	0.100697
Fe	18	0.871199	0.488818	0.295935

Fe	19	0.723837	0.497642	0.023832
Fe	20	0.890461	0.202254	0.225778
Fe	21	0.890504	0.247642	0.023832
Fe	22	0.726367	0.444844	0.226546
Fe	23	0.890504	0.035207	0.100697
Fe	24	0.729396	0.234169	0.295287
Fe	25	0.057171	0.785207	0.100697
Fe	26	0.225231	0.999016	0.291573
Fe	27	0.057171	0.997642	0.023832
Fe	28	0.220659	0.707632	0.224668
Fe	29	0.223837	0.747642	0.023832
Fe	30	0.056264	0.955588	0.223514
Fe	31	0.223837	0.535207	0.100697
Fe	32	0.074233	0.740449	0.294607
Fe	33	0.390504	0.785207	0.100697
Fe	34	0.540505	0.980360	0.295719
Fe	35	0.390504	0.997642	0.023832
Fe	36	0.554869	0.689488	0.228127
Fe	37	0.557171	0.747642	0.023832
Fe	38	0.392630	0.954537	0.225877
Fe	39	0.557171	0.535207	0.100697
Fe	40	0.397079	0.731838	0.295124
Fe	41	0.723837	0.785207	0.100697
Fe	42	0.888328	0.999940	0.290890
Fe	43	0.723837	0.997642	0.023832
Fe	44	0.889330	0.692273	0.226654
Fe	45	0.890504	0.747642	0.023832
Fe	46	0.721754	0.955136	0.222455
Fe	47	0.890504	0.535207	0.100697
Fe	48	0.736184	0.752182	0.294536

Table S10. The coordinates of α -Fe₂O₃ (001) surface.

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
O	1	0.123772	0.114150	0.045745
O	2	0.234501	0.280809	0.266796
O	3	0.247802	0.271127	0.045745
O	4	0.025108	0.437907	0.267135
O	5	0.019120	0.457174	0.045745
O	6	0.129631	0.123979	0.266780
O	7	0.245355	0.117794	0.378799
O	8	0.136691	0.447484	0.155015
O	9	0.122613	0.454326	0.378638

O	10	0.012661	0.290507	0.155015
O	11	0.022429	0.271048	0.378912
O	12	0.241343	0.104461	0.155015
O	13	0.457105	0.114150	0.045745
O	14	0.567591	0.281295	0.266828
O	15	0.581136	0.271127	0.045745
O	16	0.358552	0.437848	0.267149
O	17	0.352454	0.457174	0.045745
O	18	0.463294	0.124066	0.266793
O	19	0.578047	0.118159	0.378875
O	20	0.470025	0.447484	0.155015
O	21	0.456022	0.454453	0.378731
O	22	0.345994	0.290507	0.155015
O	23	0.355949	0.271710	0.378887
O	24	0.574676	0.104461	0.155015
O	25	0.790438	0.114150	0.045745
O	26	0.901219	0.281065	0.266835
O	27	0.914469	0.271127	0.045745
O	28	0.691745	0.437866	0.267123
O	29	0.685787	0.457174	0.045745
O	30	0.796440	0.124323	0.266797
O	31	0.911329	0.117976	0.378885
O	32	0.803358	0.447484	0.155015
O	33	0.789176	0.454507	0.378668
O	34	0.679327	0.290507	0.155015
O	35	0.689278	0.271532	0.378904
O	36	0.908009	0.104461	0.155015
O	37	0.123772	0.614150	0.045745
O	38	0.234475	0.781074	0.266834
O	39	0.247802	0.771127	0.045745
O	40	0.025170	0.937899	0.267096
O	41	0.019120	0.957174	0.045745
O	42	0.129811	0.624365	0.266815
O	43	0.245078	0.617628	0.378845
O	44	0.136691	0.947484	0.155015
O	45	0.122828	0.954465	0.378662
O	46	0.012661	0.790507	0.155015
O	47	0.022826	0.771235	0.378850
O	48	0.241343	0.604461	0.155015
O	49	0.457105	0.614150	0.045745
O	50	0.567700	0.781070	0.266809
O	51	0.581136	0.771127	0.045745
O	52	0.358357	0.937845	0.267153

O	53	0.352454	0.957174	0.045745
O	54	0.463233	0.623932	0.266775
O	55	0.578167	0.617842	0.378804
O	56	0.470025	0.947484	0.155015
O	57	0.456021	0.954153	0.378648
O	58	0.345994	0.790507	0.155015
O	59	0.355852	0.770777	0.378904
O	60	0.574676	0.604461	0.155015
O	61	0.790438	0.614150	0.045745
O	62	0.901153	0.781247	0.266868
O	63	0.914469	0.771127	0.045745
O	64	0.691808	0.938217	0.267122
O	65	0.685787	0.957174	0.045745
O	66	0.796363	0.624167	0.266778
O	67	0.911571	0.618125	0.378836
O	68	0.803358	0.947484	0.155015
O	69	0.789356	0.954566	0.378726
O	70	0.679327	0.790507	0.155015
O	71	0.689085	0.771172	0.378844
O	72	0.908009	0.604461	0.155015
Fe	1	0.019120	0.114150	0.109270
Fe	2	0.130702	0.279833	0.333440
Fe	3	0.130231	0.280817	0.200760
Fe	4	0.240969	0.446719	0.402366
Fe	5	0.019169	0.114141	0.312829
Fe	6	0.241343	0.447484	0.091489
Fe	7	0.130231	0.280817	0.000000
Fe	8	0.241343	0.447484	0.218541
Fe	9	0.352454	0.114150	0.109270
Fe	10	0.464068	0.280251	0.333433
Fe	11	0.463565	0.280817	0.200760
Fe	12	0.574475	0.446643	0.402373
Fe	13	0.352597	0.114089	0.312830
Fe	14	0.574676	0.447484	0.091489
Fe	15	0.463565	0.280817	0.000000
Fe	16	0.574676	0.447484	0.218541
Fe	17	0.685787	0.114150	0.109270
Fe	18	0.797322	0.280040	0.333417
Fe	19	0.796898	0.280817	0.200760
Fe	20	0.907720	0.446772	0.402337
Fe	21	0.685767	0.114362	0.312825
Fe	22	0.908009	0.447484	0.091489
Fe	23	0.796898	0.280817	0.000000

Fe	24	0.908009	0.447484	0.218541
Fe	25	0.019120	0.614150	0.109270
Fe	26	0.130945	0.780200	0.333444
Fe	27	0.130231	0.780817	0.200760
Fe	28	0.241335	0.946670	0.402350
Fe	29	0.019020	0.614317	0.312831
Fe	30	0.241343	0.947484	0.091489
Fe	31	0.130231	0.780817	0.000000
Fe	32	0.241343	0.947484	0.218541
Fe	33	0.352454	0.614150	0.109270
Fe	34	0.463896	0.779891	0.333434
Fe	35	0.463565	0.780817	0.200760
Fe	36	0.574342	0.946764	0.402348
Fe	37	0.352566	0.614081	0.312825
Fe	38	0.574676	0.947484	0.091489
Fe	39	0.463565	0.780817	0.000000
Fe	40	0.574676	0.947484	0.218541
Fe	41	0.685787	0.614150	0.109270
Fe	42	0.797270	0.780416	0.333442
Fe	43	0.796898	0.780817	0.200760
Fe	44	0.907927	0.946429	0.402361
Fe	45	0.685917	0.614164	0.312832
Fe	46	0.908009	0.947484	0.091489
Fe	47	0.796898	0.780817	0.000000
Fe	48	0.908009	0.947484	0.218541

Table S11. The coordinates of CO and O₂ co-adsorbed on α -Fe₂O₃ (001) surface

Element	Atom number	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
C	1	-0.535273	0.442714	0.443470
O	1	0.123772	0.114150	0.045745
O	2	0.235480	0.279702	0.267083
O	3	0.247802	0.271127	0.045745
O	4	0.025225	0.438202	0.267119
O	5	0.019120	0.457174	0.045745
O	6	0.129385	0.124978	0.266940
O	7	0.244384	0.115863	0.378899
O	8	0.136691	0.447484	0.155015
O	9	0.129951	0.453139	0.378900
O	10	0.012661	0.290507	0.155015
O	11	0.024259	0.272107	0.378992
O	12	0.241343	0.104461	0.155015
O	13	0.457105	0.114150	0.045745

O	14	0.565406	0.281917	0.265908
O	15	0.581136	0.271127	0.045745
O	16	0.358643	0.438479	0.267626
O	17	0.352454	0.457174	0.045745
O	18	0.463191	0.121875	0.266934
O	19	0.578558	0.112593	0.379402
O	20	0.470025	0.447484	0.155015
O	21	0.465553	0.447643	0.378966
O	22	0.345994	0.290507	0.155015
O	23	0.357945	0.262837	0.378570
O	24	0.574676	0.104461	0.155015
O	25	0.790438	0.114150	0.045745
O	26	0.900842	0.281101	0.266580
O	27	0.914469	0.271127	0.045745
O	28	0.691633	0.437424	0.265486
O	29	0.685787	0.457174	0.045745
O	30	0.795735	0.124772	0.267134
O	31	0.912826	0.114727	0.378856
O	32	0.803358	0.447484	0.155015
O	33	0.790295	0.453896	0.376775
O	34	0.679327	0.290507	0.155015
O	35	0.686101	0.275904	0.372120
O	36	0.908009	0.104461	0.155015
O	37	0.123772	0.614150	0.045745
O	38	0.232874	0.782700	0.266641
O	39	0.247802	0.771127	0.045745
O	40	0.024566	0.938321	0.267161
O	41	0.019120	0.957174	0.045745
O	42	0.130436	0.623800	0.266853
O	43	0.246250	0.620611	0.378846
O	44	0.136691	0.947484	0.155015
O	45	0.122031	0.954166	0.378338
O	46	0.012661	0.790507	0.155015
O	47	0.022734	0.771508	0.379090
O	48	0.241343	0.604461	0.155015
O	49	0.457105	0.614150	0.045745
O	50	0.567612	0.779911	0.266789
O	51	0.581136	0.771127	0.045745
O	52	0.357846	0.935911	0.267373
O	53	0.352454	0.957174	0.045745
O	54	0.462177	0.625048	0.266527
O	55	0.578707	0.618602	0.377961
O	56	0.470025	0.947484	0.155015

O	57	0.456921	0.949823	0.378820
O	58	0.345994	0.790507	0.155015
O	59	0.355572	0.768515	0.378880
O	60	0.574676	0.604461	0.155015
O	61	0.790438	0.614150	0.045745
O	62	0.902437	0.780006	0.267178
O	63	0.914469	0.771127	0.045745
O	64	0.692577	0.938920	0.267225
O	65	0.685787	0.957174	0.045745
O	66	0.795402	0.625210	0.266995
O	67	0.913397	0.615642	0.378837
O	68	0.803358	0.947484	0.155015
O	69	0.787321	0.955881	0.378973
O	70	0.679327	0.790507	0.155015
O	71	0.691749	0.768284	0.378593
O	72	0.908009	0.604461	0.155015
O	73	-0.597479	0.434530	0.481194
O	74	0.599423	0.479515	0.507471
O	75	0.701010	0.439713	0.482755
Fe	1	0.019120	0.114150	0.109270
Fe	2	0.132561	0.283644	0.333573
Fe	3	0.130231	0.280817	0.200760
Fe	4	0.249013	0.444760	0.403309
Fe	5	0.018364	0.114899	0.312956
Fe	6	0.241343	0.447484	0.091489
Fe	7	0.130231	0.280817	0.000000
Fe	8	0.241343	0.447484	0.218541
Fe	9	0.352454	0.114150	0.109270
Fe	10	0.466072	0.267760	0.332182
Fe	11	0.463565	0.280817	0.200760
Fe	12	0.595529	0.442944	0.424018
Fe	13	0.353109	0.109725	0.312831
Fe	14	0.574676	0.447484	0.091489
Fe	15	0.463565	0.280817	0.000000
Fe	16	0.574676	0.447484	0.218541
Fe	17	0.685787	0.114150	0.109270
Fe	18	0.800700	0.276291	0.333355
Fe	19	0.796898	0.280817	0.200760
Fe	20	0.907829	0.445337	0.402347
Fe	21	0.680735	0.121904	0.312963
Fe	22	0.908009	0.447484	0.091489
Fe	23	0.796898	0.280817	0.000000
Fe	24	0.908009	0.447484	0.218541

Fe	25	0.019120	0.614150	0.109270
Fe	26	0.130766	0.777962	0.333477
Fe	27	0.130231	0.780817	0.200760
Fe	28	0.240708	0.944821	0.402480
Fe	29	0.020919	0.611167	0.313004
Fe	30	0.241343	0.947484	0.091489
Fe	31	0.130231	0.780817	0.000000
Fe	32	0.241343	0.947484	0.218541
Fe	33	0.352454	0.614150	0.109270
Fe	34	0.464706	0.776357	0.333596
Fe	35	0.463565	0.780817	0.200760
Fe	36	0.575528	0.940800	0.402523
Fe	37	0.348365	0.622424	0.312065
Fe	38	0.574676	0.947484	0.091489
Fe	39	0.463565	0.780817	0.000000
Fe	40	0.574676	0.947484	0.218541
Fe	41	0.685787	0.614150	0.109270
Fe	42	0.799068	0.780000	0.333501
Fe	43	0.796898	0.780817	0.200760
Fe	44	0.906668	0.945141	0.402409
Fe	45	0.685285	0.609113	0.312687
Fe	46	0.908009	0.947484	0.091489
Fe	47	0.796898	0.780817	0.000000
Fe	48	0.908009	0.947484	0.218541

Table S12. The coordinates of CO₂ and α -Fe₂O₃ (001) surface with an active oxygen

Element	Atom	Fractional coordinates of atoms		
		u	v	w
C	1	-0.572609	0.465153	0.548283
O	1	0.123772	0.114150	0.045745
O	2	0.234293	0.280882	0.267122
O	3	0.247802	0.271127	0.045745
O	4	0.024944	0.437733	0.267121
O	5	0.019120	0.457174	0.045745
O	6	0.129056	0.123964	0.266899
O	7	0.243256	0.119762	0.378656
O	8	0.136691	0.447484	0.155015
O	9	0.126582	0.451775	0.378530
O	10	0.012661	0.290507	0.155015
O	11	0.019704	0.274560	0.379294
O	12	0.241343	0.104461	0.155015
O	13	0.457105	0.114150	0.045745
O	14	0.567639	0.278952	0.265070

O	15	0.581136	0.271127	0.045745
O	16	0.359926	0.437937	0.266933
O	17	0.352454	0.457174	0.045745
O	18	0.463761	0.122868	0.266384
O	19	0.579702	0.115129	0.379002
O	20	0.470025	0.447484	0.155015
O	21	0.466575	0.452865	0.366983
O	22	0.345994	0.290507	0.155015
O	23	0.357634	0.270294	0.378524
O	24	0.574676	0.104461	0.155015
O	25	0.790438	0.114150	0.045745
O	26	0.902439	0.280250	0.266141
O	27	0.914469	0.271127	0.045745
O	28	0.693540	0.435698	0.264839
O	29	0.685787	0.457174	0.045745
O	30	0.798114	0.122634	0.267040
O	31	0.914547	0.106632	0.379326
O	32	0.803358	0.447484	0.155015
O	33	0.785902	0.455185	0.378874
O	34	0.679327	0.290507	0.155015
O	35	0.690510	0.271475	0.367705
O	36	0.908009	0.104461	0.155015
O	37	0.123772	0.614150	0.045745
O	38	0.236047	0.780205	0.266890
O	39	0.247802	0.771127	0.045745
O	40	0.025759	0.937338	0.267187
O	41	0.019120	0.957174	0.045745
O	42	0.131033	0.623897	0.266945
O	43	0.248494	0.618193	0.379005
O	44	0.136691	0.947484	0.155015
O	45	0.123599	0.954656	0.378369
O	46	0.012661	0.790507	0.155015
O	47	0.027862	0.766278	0.378923
O	48	0.241343	0.604461	0.155015
O	49	0.457105	0.614150	0.045745
O	50	0.566006	0.783219	0.267046
O	51	0.581136	0.771127	0.045745
O	52	0.356970	0.939320	0.266804
O	53	0.352454	0.957174	0.045745
O	54	0.464193	0.626481	0.264010
O	55	0.577277	0.617077	0.367836
O	56	0.470025	0.947484	0.155015
O	57	0.455734	0.958148	0.379344

O	58	0.345994	0.790507	0.155015
O	59	0.356184	0.769859	0.379603
O	60	0.574676	0.604461	0.155015
O	61	0.790438	0.614150	0.045745
O	62	0.902261	0.779581	0.267015
O	63	0.914469	0.771127	0.045745
O	64	0.692721	0.936968	0.266711
O	65	0.685787	0.957174	0.045745
O	66	0.795408	0.625448	0.266904
O	67	0.913126	0.616003	0.378632
O	68	0.803358	0.947484	0.155015
O	69	0.786652	0.957371	0.378667
O	70	0.679327	0.790507	0.155015
O	71	0.691505	0.768097	0.378792
O	72	0.908009	0.604461	0.155015
O	73	0.587678	0.442078	0.481723
O	74	-0.553298	0.545889	0.582898
O	75	-0.597269	0.386997	0.515256
Fe	1	0.019120	0.114150	0.109270
Fe	2	0.127203	0.281279	0.333508
Fe	3	0.130231	0.280817	0.200760
Fe	4	0.244337	0.447248	0.402368
Fe	5	0.018362	0.114722	0.313027
Fe	6	0.241343	0.447484	0.091489
Fe	7	0.130231	0.280817	0.000000
Fe	8	0.241343	0.447484	0.218541
Fe	9	0.352454	0.114150	0.109270
Fe	10	0.466166	0.275223	0.332758
Fe	11	0.463565	0.280817	0.200760
Fe	12	0.582356	0.444819	0.403442
Fe	13	0.353424	0.112600	0.312887
Fe	14	0.574676	0.447484	0.091489
Fe	15	0.463565	0.280817	0.000000
Fe	16	0.574676	0.447484	0.218541
Fe	17	0.685787	0.114150	0.109270
Fe	18	0.808433	0.272164	0.333584
Fe	19	0.796898	0.280817	0.200760
Fe	20	0.903634	0.449130	0.402432
Fe	21	0.683412	0.116302	0.312772
Fe	22	0.908009	0.447484	0.091489
Fe	23	0.796898	0.280817	0.000000
Fe	24	0.908009	0.447484	0.218541
Fe	25	0.019120	0.614150	0.109270

Fe	26	0.134804	0.778196	0.333510
Fe	27	0.130231	0.780817	0.200760
Fe	28	0.241811	0.946867	0.402426
Fe	29	0.020995	0.611190	0.312993
Fe	30	0.241343	0.947484	0.091489
Fe	31	0.130231	0.780817	0.000000
Fe	32	0.241343	0.947484	0.218541
Fe	33	0.352454	0.614150	0.109270
Fe	34	0.457834	0.791900	0.333354
Fe	35	0.463565	0.780817	0.200760
Fe	36	0.576648	0.943212	0.402477
Fe	37	0.359347	0.616139	0.312391
Fe	38	0.574676	0.947484	0.091489
Fe	39	0.463565	0.780817	0.000000
Fe	40	0.574676	0.947484	0.218541
Fe	41	0.685787	0.614150	0.109270
Fe	42	0.798581	0.779585	0.333565
Fe	43	0.796898	0.780817	0.200760
Fe	44	0.909224	0.936011	0.402276
Fe	45	0.683665	0.607398	0.312614
Fe	46	0.908009	0.947484	0.091489
Fe	47	0.796898	0.780817	0.000000
Fe	48	0.908009	0.947484	0.218541

Table S13. The coordinates of CO₂ adsorbed on α -Fe₂O₃ (001) surface

Element	Atom number	Fractional coordinates of atom		
		u	v	w
C	1	-0.430653	0.455791	0.573821
O	1	0.123772	0.114150	0.045745
O	2	0.234291	0.280666	0.266864
O	3	0.247802	0.271127	0.045745
O	4	0.025128	0.437830	0.267134
O	5	0.019120	0.457174	0.045745
O	6	0.129323	0.124117	0.266873
O	7	0.244842	0.117419	0.378776
O	8	0.136691	0.447484	0.155015
O	9	0.121789	0.454778	0.378685
O	10	0.012661	0.290507	0.155015
O	11	0.022155	0.271511	0.379046
O	12	0.241343	0.104461	0.155015
O	13	0.457105	0.114150	0.045745
O	14	0.567585	0.280740	0.266652
O	15	0.581136	0.271127	0.045745

O	16	0.358569	0.437836	0.267141
O	17	0.352454	0.457174	0.045745
O	18	0.462949	0.124176	0.266887
O	19	0.577974	0.116990	0.378942
O	20	0.470025	0.447484	0.155015
O	21	0.455479	0.454765	0.377831
O	22	0.345994	0.290507	0.155015
O	23	0.356309	0.271071	0.378978
O	24	0.574676	0.104461	0.155015
O	25	0.790438	0.114150	0.045745
O	26	0.901185	0.280918	0.266879
O	27	0.914469	0.271127	0.045745
O	28	0.692006	0.437828	0.266817
O	29	0.685787	0.457174	0.045745
O	30	0.796318	0.124465	0.266900
O	31	0.911206	0.116601	0.378843
O	32	0.803358	0.447484	0.155015
O	33	0.787923	0.455471	0.378689
O	34	0.679327	0.290507	0.155015
O	35	0.689894	0.270003	0.378310
O	36	0.908009	0.104461	0.155015
O	37	0.123772	0.614150	0.045745
O	38	0.234266	0.781295	0.266798
O	39	0.247802	0.771127	0.045745
O	40	0.025222	0.937837	0.267080
O	41	0.019120	0.957174	0.045745
O	42	0.129692	0.624581	0.266938
O	43	0.245014	0.616282	0.378887
O	44	0.136691	0.947484	0.155015
O	45	0.122234	0.955171	0.378752
O	46	0.012661	0.790507	0.155015
O	47	0.023595	0.770629	0.378921
O	48	0.241343	0.604461	0.155015
O	49	0.457105	0.614150	0.045745
O	50	0.567444	0.781167	0.266878
O	51	0.581136	0.771127	0.045745
O	52	0.358267	0.937716	0.267125
O	53	0.352454	0.957174	0.045745
O	54	0.462772	0.624461	0.266604
O	55	0.577331	0.617315	0.378444
O	56	0.470025	0.947484	0.155015
O	57	0.455182	0.954794	0.378753
O	58	0.345994	0.790507	0.155015

O	59	0.355861	0.770514	0.379009
O	60	0.574676	0.604461	0.155015
O	61	0.790438	0.614150	0.045745
O	62	0.901088	0.781133	0.266906
O	63	0.914469	0.771127	0.045745
O	64	0.691964	0.937906	0.267076
O	65	0.685787	0.957174	0.045745
O	66	0.796122	0.624408	0.266861
O	67	0.911336	0.617186	0.378828
O	68	0.803358	0.947484	0.155015
O	69	0.788844	0.954853	0.378810
O	70	0.679327	0.790507	0.155015
O	71	0.689381	0.770760	0.378895
O	72	0.908009	0.604461	0.155015
O	73	-0.517198	0.484979	0.591845
O	74	-0.343026	0.426890	0.558198
Fe	1	0.019120	0.114150	0.109270
Fe	2	0.130364	0.279682	0.333479
Fe	3	0.130231	0.280817	0.200760
Fe	4	0.240783	0.445312	0.402400
Fe	5	0.018847	0.113846	0.312852
Fe	6	0.241343	0.447484	0.091489
Fe	7	0.130231	0.280817	0.000000
Fe	8	0.241343	0.447484	0.218541
Fe	9	0.352454	0.114150	0.109270
Fe	10	0.464424	0.279030	0.333434
Fe	11	0.463565	0.280817	0.200760
Fe	12	0.574582	0.444985	0.401321
Fe	13	0.352090	0.113560	0.312847
Fe	14	0.574676	0.447484	0.091489
Fe	15	0.463565	0.280817	0.000000
Fe	16	0.574676	0.447484	0.218541
Fe	17	0.685787	0.114150	0.109270
Fe	18	0.798083	0.279781	0.333382
Fe	19	0.796898	0.280817	0.200760
Fe	20	0.906846	0.446367	0.402389
Fe	21	0.685481	0.114002	0.312832
Fe	22	0.908009	0.447484	0.091489
Fe	23	0.796898	0.280817	0.000000
Fe	24	0.908009	0.447484	0.218541
Fe	25	0.019120	0.614150	0.109270
Fe	26	0.131665	0.779934	0.333494
Fe	27	0.130231	0.780817	0.200760

Fe	28	0.241105	0.946182	0.402410
Fe	29	0.018727	0.614176	0.312857
Fe	30	0.241343	0.947484	0.091489
Fe	31	0.130231	0.780817	0.000000
Fe	32	0.241343	0.947484	0.218541
Fe	33	0.352454	0.614150	0.109270
Fe	34	0.463470	0.780290	0.333447
Fe	35	0.463565	0.780817	0.200760
Fe	36	0.574110	0.945623	0.402387
Fe	37	0.351869	0.614742	0.312776
Fe	38	0.574676	0.947484	0.091489
Fe	39	0.463565	0.780817	0.000000
Fe	40	0.574676	0.947484	0.218541
Fe	41	0.685787	0.614150	0.109270
Fe	42	0.797538	0.780058	0.333491
Fe	43	0.796898	0.780817	0.200760
Fe	44	0.908028	0.944900	0.402388
Fe	45	0.685596	0.614047	0.312816
Fe	46	0.908009	0.947484	0.091489
Fe	47	0.796898	0.780817	0.000000
Fe	48	0.908009	0.947484	0.218541