

Supporting Information

Surface Segregation in AgAuCuPdPt High Entropy Alloy: Insights From Molecular Simulations

Chinmay Dahale, Sriram Goverapet Srinivasan*, Shashank Mishra, Soumyadipta Maiti and Beena Rai

TCS Research, Tata Research Development and Design Center, 54-B Hadapsar Industrial Estate, Hadapsar, Pune – 411013, Maharashtra, India

* Corresponding author e-mail: s.goverapet@tcs.com

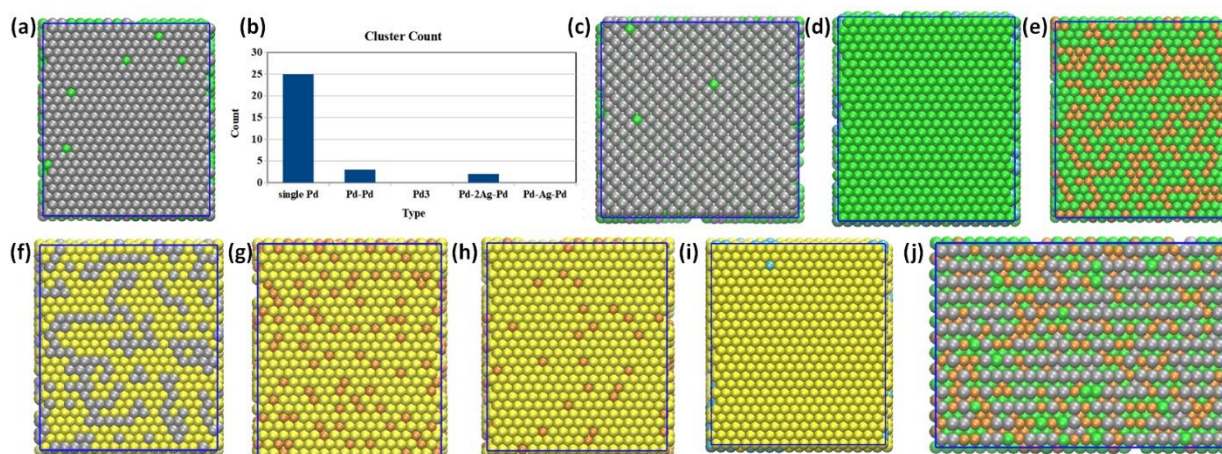


Figure S1: Segregated surface structures for various binary and ternary alloys. (a) Ag_{0.33}Pd_{0.67} – (111) surface, (b) Distribution of Pd atom clusters on the Ag_{0.33}Pd_{0.67} – (111) surface, (c) Ag_{0.33}Pd_{0.67} – (100) surface, (d) Pd_{0.75}Pt_{0.25} – (111) surface, (e) Pd_{0.75}Cu_{0.25} – (111) surface, (f) Ag_{0.3}Au_{0.7} – (111) surface, (g) Au_{0.59}Cu_{0.41} – (111) surface, (h) Au_{0.71}Cu_{0.29} – (111) surface, (i) Au_{0.71}Cu_{0.29} – (111) surface and (j) Ag_{0.091}Cu_{0.303}Pd_{0.606} – (110) surface. Gray, Yellow, Brown, Green and Blue color spheres represent Ag, Au, Cu, Pd and Pt atoms respectively.

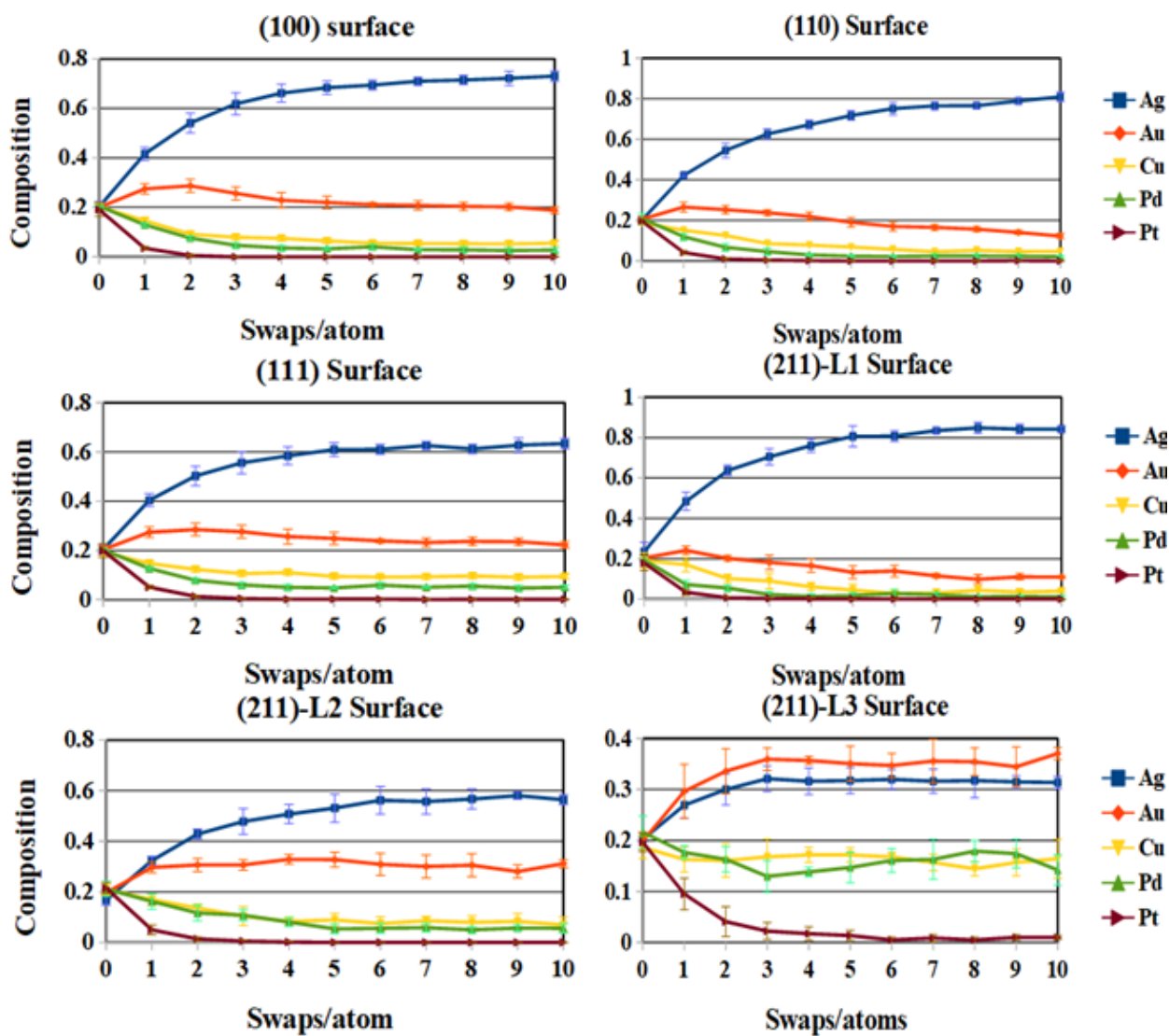


Figure S2: Evolution of the surface composition as a function of the number of swaps in our MC/MM simulations.

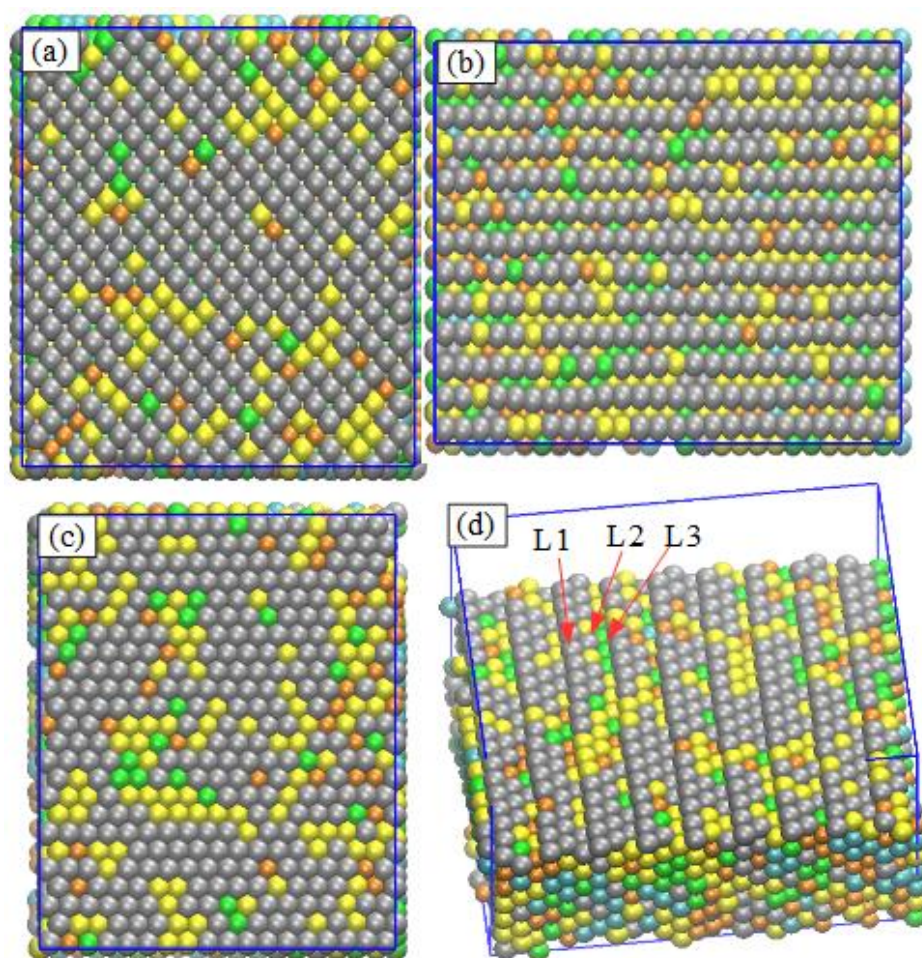


Figure S3: Structures of segregated (a) 100 (b) 110 (c) 111 (d) 211 surfaces after 10 MC/MM swaps/atom. Gray, Yellow, Brown, Green and Blue color spheres represent Ag, Au, Cu, Pd and Pt atoms respectively.

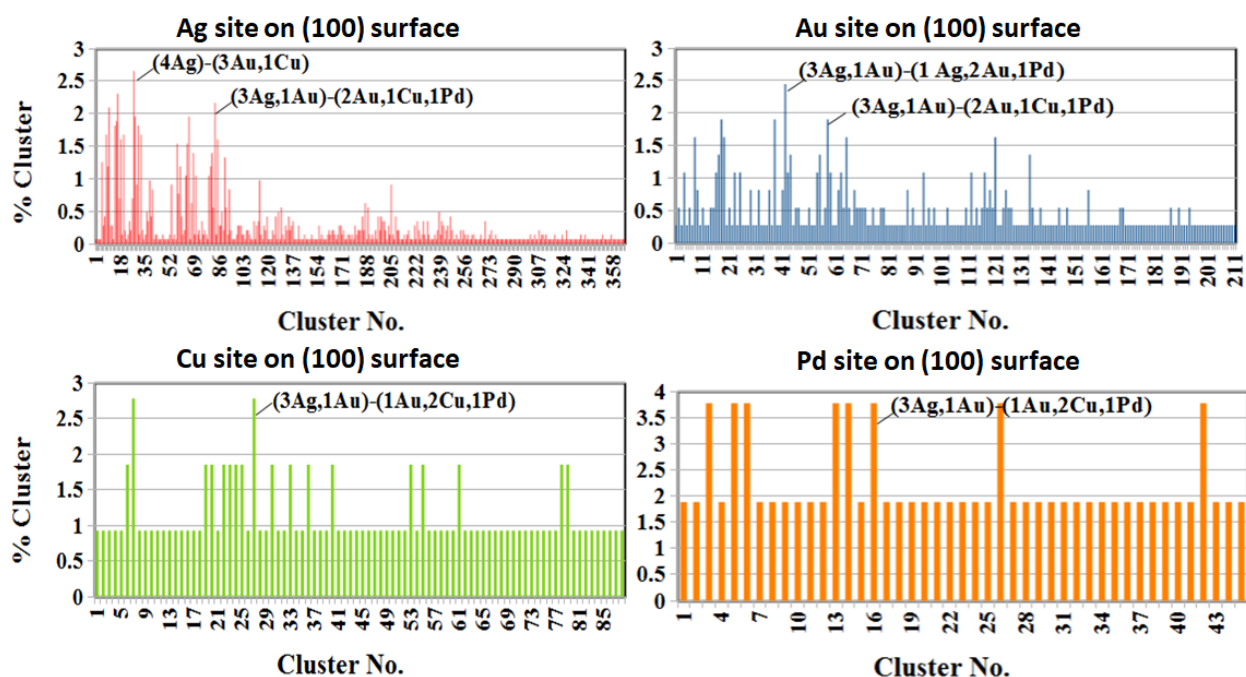


Figure S4: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the (100) surface.

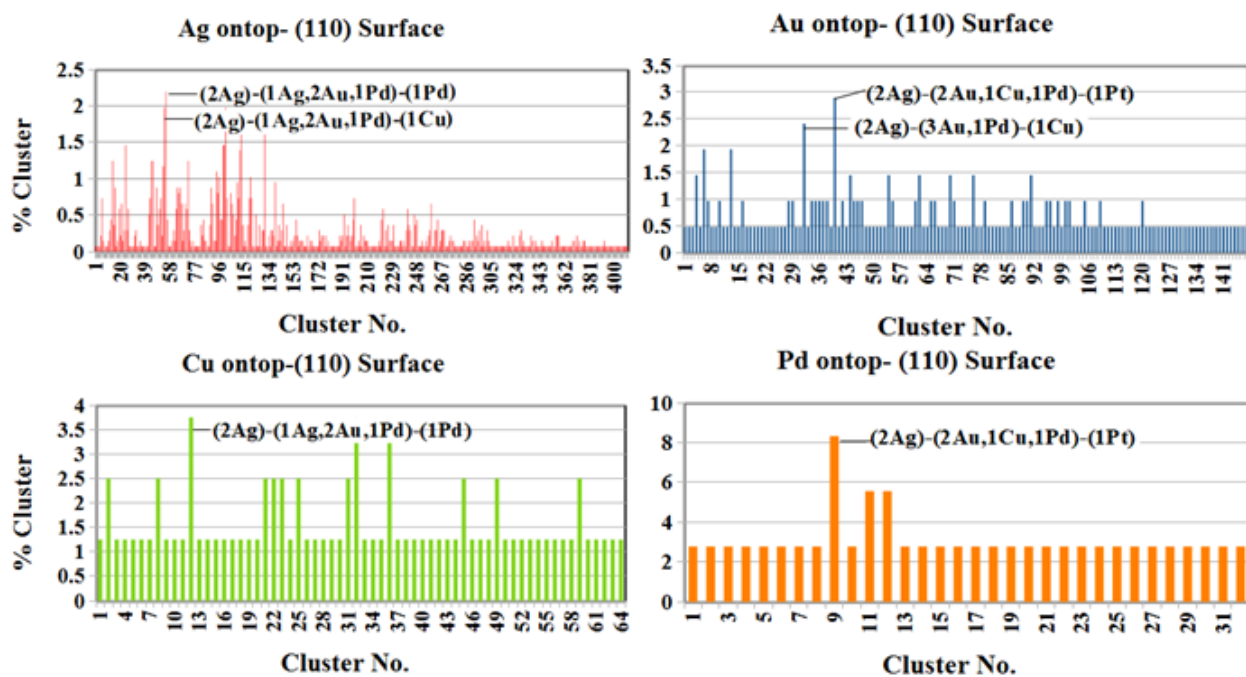


Figure S5: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the (110) surface.

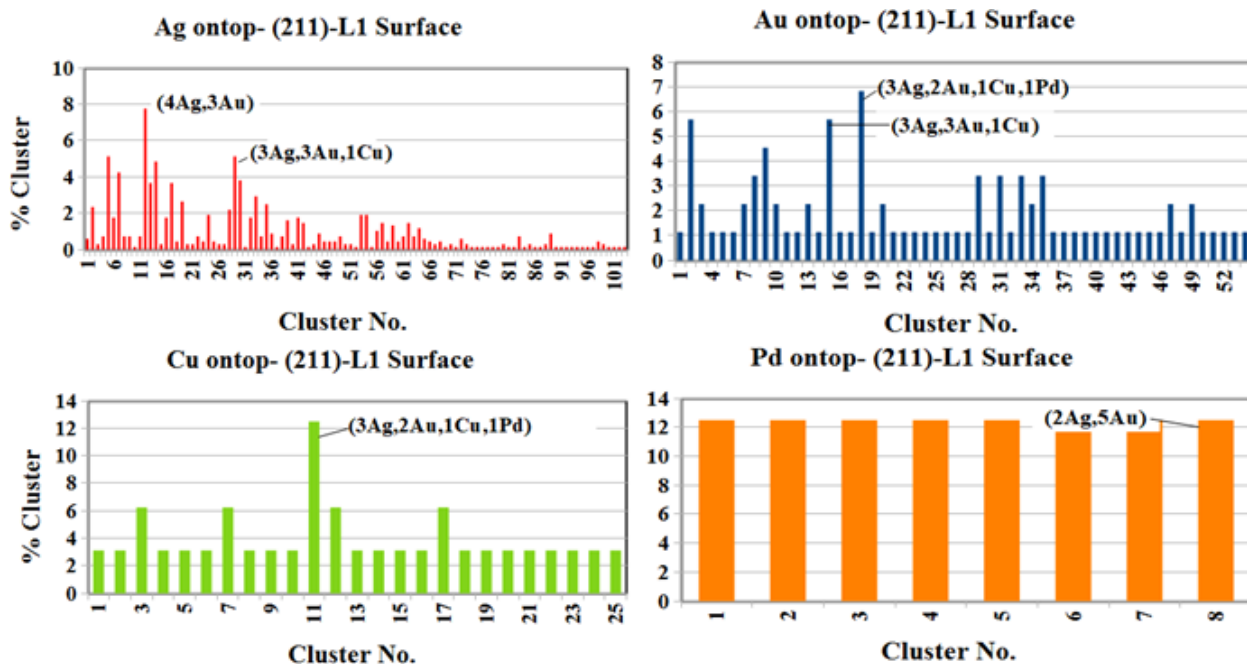


Figure S6: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the (211)-L1 surface.

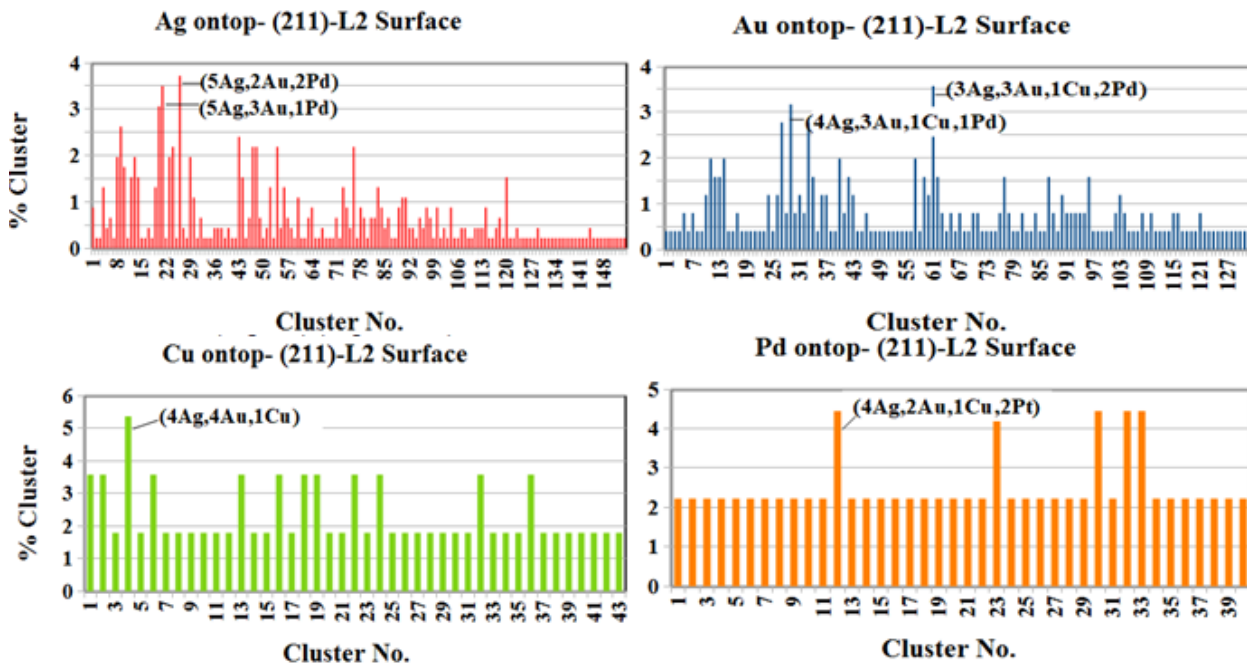


Figure S7: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the (211)-L2 surface.

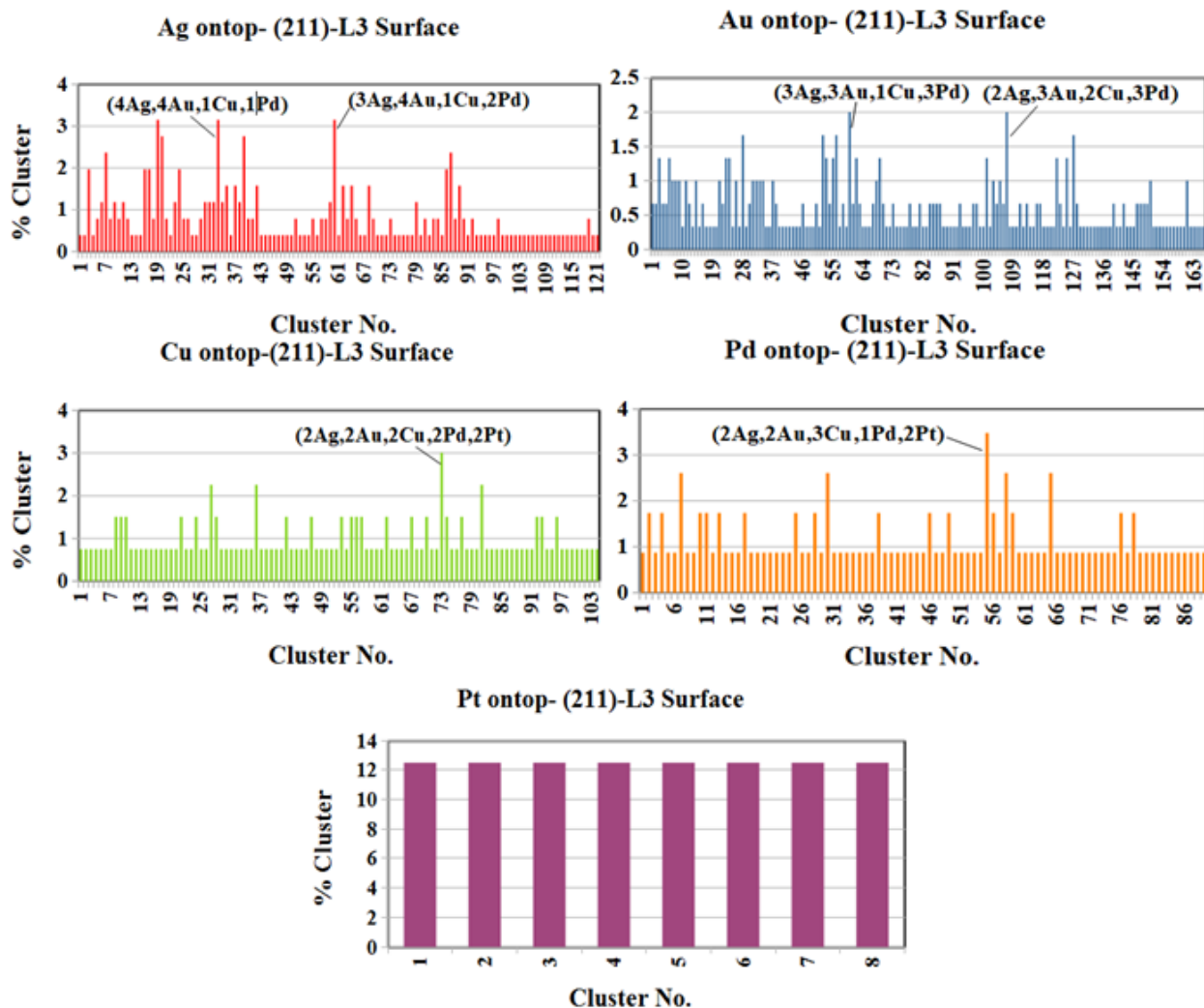


Figure S8: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the (211)-L3 surface.

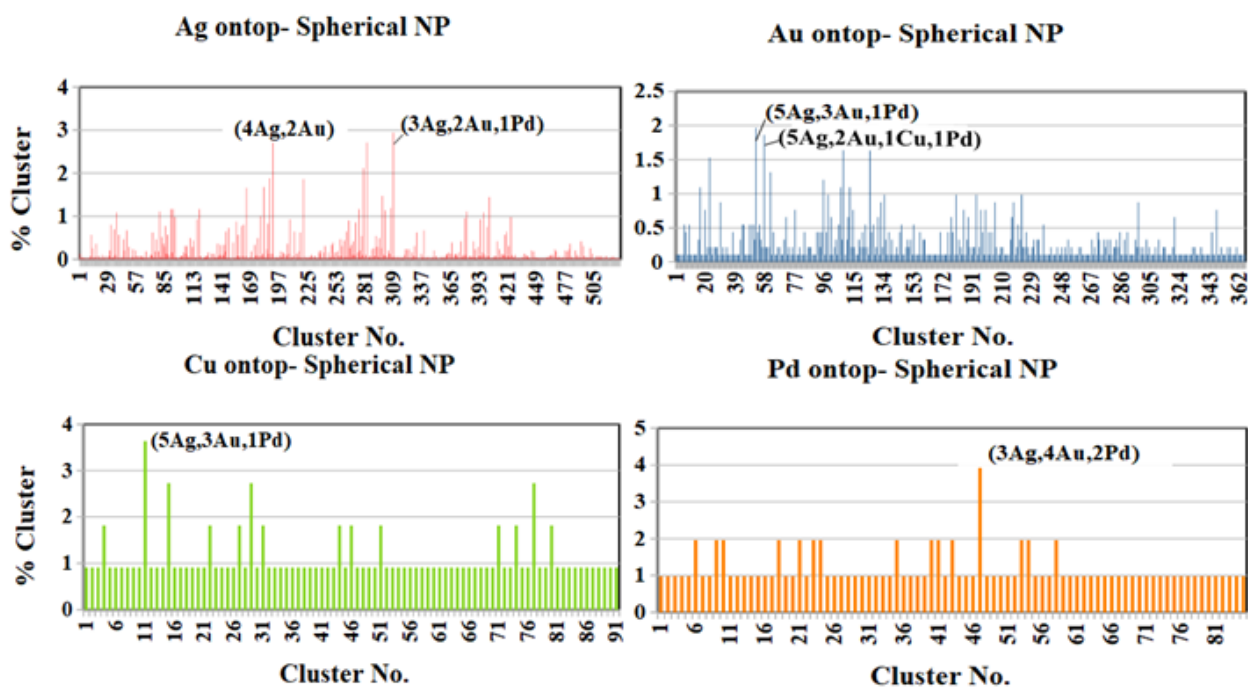


Figure S9: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the spherical NP.

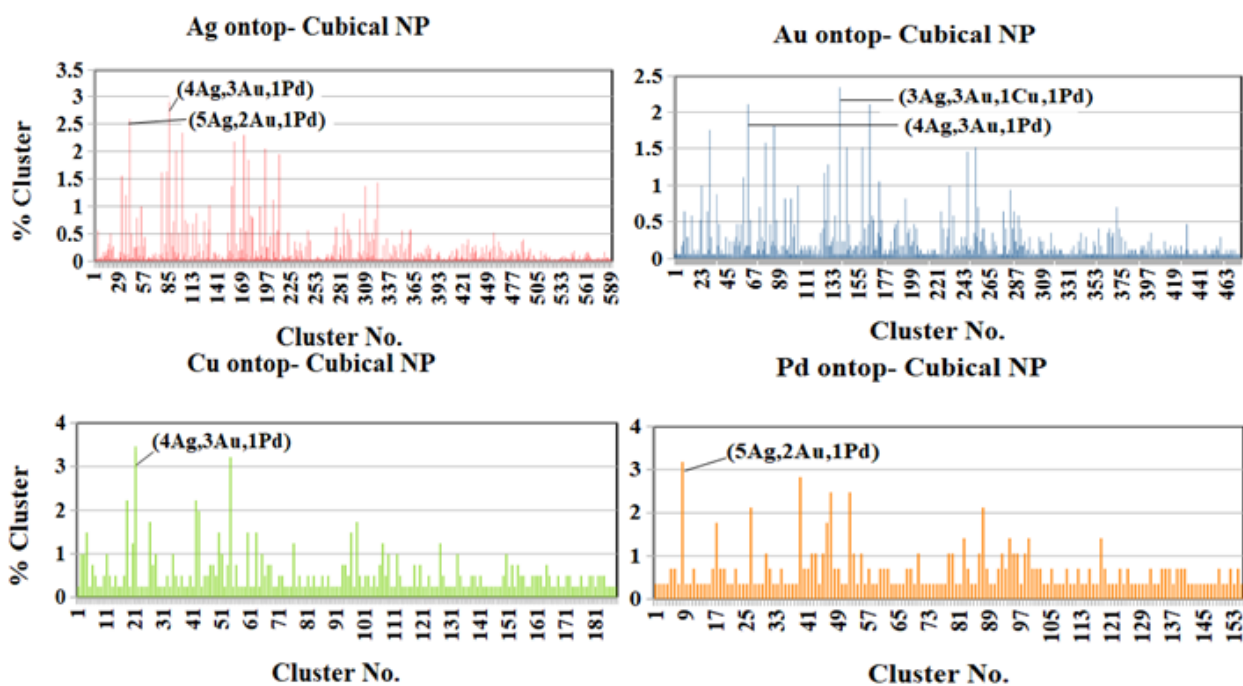


Figure S10: Percentage distribution of various unique chemical neighborhoods for each elemental site on the cubical NP.

Cluster analysis on (100) Surface (Table-S1-S4):

Table S1: Ag site

Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster
1	5000031000	0.07	184	2200012100	0.21
2	5000011110	0.07	185	2200012010	0.42
3	4100002020	0.07	186	2200011200	0.21
4	4000040000	0.07	187	2200011110	0.63
5	4000031000	1.26	188	2200011101	0.07
6	4000030100	0.28	189	2200011020	0.56
7	4000030010	0.42	190	2200011011	0.14
8	4000022000	1.68	191	2200011002	0.07
9	4000021100	1.19	192	2200010210	0.14
10	4000021010	2.1	193	2200010120	0.07
11	4000020110	0.28	194	2200010030	0.21
12	4000020020	0.28	195	2200010012	0.07
13	4000020011	0.07	196	2200003100	0.42
14	4000013000	1.82	197	2200003010	0.21
15	4000012100	1.89	198	2200002200	0.42
16	4000012010	2.31	199	2200002110	0.35
17	4000011200	0.7	200	2200002020	0.35
18	4000011110	1.61	201	2200002011	0.21
19	4000011101	0.14	202	2200001300	0.07
20	4000011020	1.68	203	2200001210	0.28
21	4000011011	0.21	204	2200001201	0.14
22	4000010210	0.07	205	2200001120	0.91
23	4000010120	0.14	206	2200001111	0.14
24	4000010030	0.35	207	2200001102	0.07
25	4000010021	0.21	208	2200001030	0.42
26	4000004000	0.7	209	2200001021	0.21
27	4000003100	2.66	210	2200001012	0.21
28	4000003010	1.96	211	2200000310	0.07
29	4000002200	0.91	212	2200000301	0.07
30	4000002110	1.82	213	2200000220	0.07

31	4000002101	0.14	214	2200000211	0.14
32	4000002020	1.68	215	2200000202	0.07
33	4000002011	0.21	216	2200000130	0.14
34	4000002002	0.07	217	2200000121	0.21
35	4000001300	0.14	218	2200000112	0.07
36	4000001210	0.49	219	2200000103	0.07
37	4000001201	0.35	220	2200000040	0.07
38	4000001120	0.98	221	2200000031	0.28
39	4000001111	0.42	222	2200000022	0.07
40	4000001030	0.84	223	2110022000	0.35
41	4000001021	0.07	224	2110021010	0.21
42	4000000400	0.14	225	2110020020	0.07
43	4000000220	0.14	226	2110013000	0.14
44	4000000211	0.07	227	2110012100	0.35
45	4000000202	0.07	228	2110012010	0.14
46	4000000130	0.07	229	2110011110	0.07
47	4000000121	0.14	230	2110011020	0.35
48	4000000112	0.07	231	2110011011	0.14
49	4000000103	0.07	232	2110010111	0.07
50	4000000031	0.07	233	2110010030	0.07
51	3200001012	0.07	234	2110004000	0.07
52	3100040000	0.14	235	2110003100	0.14
53	3100031000	0.91	236	2110003010	0.07
54	3100030100	0.07	237	2110002200	0.21
55	3100030010	0.14	238	2110002110	0.49
56	3100030001	0.07	239	2110002101	0.14
57	3100022000	1.54	240	2110002020	0.35
58	3100021100	0.77	241	2110002011	0.28
59	3100021010	1.19	242	2110001210	0.07
60	3100020110	0.42	243	2110001120	0.21
61	3100020020	0.14	244	2110001111	0.28
62	3100020011	0.21	245	2110001102	0.07
63	3100013000	1.05	246	2110001030	0.42

64	3100012100	1.54	247	2110001021	0.21
65	3100012010	1.96	248	2110001012	0.07
66	3100012001	0.07	249	2110000310	0.07
67	3100011200	0.63	250	2110000301	0.14
68	3100011110	1.4	251	2110000211	0.07
69	3100011101	0.14	252	2110000202	0.07
70	3100011020	1.05	253	2110000130	0.21
71	3100011011	0.14	254	2110000121	0.07
72	3100010210	0.21	255	2110000112	0.21
73	3100010201	0.07	256	2110000040	0.14
74	3100010120	0.35	257	2110000022	0.07
75	3100010111	0.14	258	2101022000	0.14
76	3100010030	0.21	259	2101021100	0.07
77	3100010021	0.14	260	2101021010	0.07
78	3100010012	0.07	261	2101012100	0.14
79	3100004000	1.05	262	2101012010	0.14
80	3100003100	1.19	263	2101011110	0.07
81	3100003010	1.4	264	2101011020	0.07
82	3100002200	0.56	265	2101010021	0.07
83	3100002110	2.17	266	2101003100	0.07
84	3100002101	0.14	267	2101003010	0.14
85	3100002020	1.61	268	2101002200	0.07
86	3100002011	0.28	269	2101002110	0.07
87	3100001300	0.28	270	2101002020	0.35
88	3100001210	0.49	271	2101001300	0.07
89	3100001201	0.21	272	2101001210	0.07
90	3100001120	1.33	273	2101001120	0.14
91	3100001111	0.56	274	2101001111	0.21
92	3100001102	0.14	275	2101000220	0.07
93	3100001030	0.84	276	2101000211	0.07
94	3100001021	0.21	277	2101000112	0.14
95	3100001012	0.07	278	2020010120	0.07
96	3100000400	0.07	279	2020002110	0.07

97	3100000310	0.07	280	2020002101	0.07
98	3100000301	0.14	281	2020002011	0.07
99	3100000220	0.28	282	2020001210	0.07
100	3100000211	0.28	283	2020001120	0.07
101	3100000130	0.28	284	2020000220	0.07
102	3100000121	0.14	285	2020000121	0.07
103	3100000112	0.14	286	2011012010	0.07
104	3100000103	0.07	287	2011011200	0.07
105	3100000040	0.21	288	2011011110	0.07
106	3100000031	0.21	289	2011002110	0.07
107	3100000022	0.14	290	2011002020	0.07
108	3100000004	0.07	291	2011002011	0.07
109	3010031000	0.07	292	2011000220	0.07
110	3010022000	0.35	293	2011000121	0.07
111	3010021100	0.07	294	2011000040	0.07
112	3010021010	0.28	295	2011000013	0.07
113	3010012100	0.35	296	2002010021	0.07
114	3010012010	0.98	297	2002002110	0.07
115	3010012001	0.14	298	2002002020	0.07
116	3010011200	0.07	299	2002001030	0.07
117	3010011110	0.28	300	1300021100	0.07
118	3010011101	0.21	301	1300012100	0.14
119	3010011020	0.42	302	1300011110	0.07
120	3010010210	0.07	303	1300011020	0.07
121	3010010111	0.07	304	1300010120	0.14
122	3010010030	0.07	305	1300003100	0.07
123	3010004000	0.21	306	1300003010	0.07
124	3010003100	0.14	307	1300002110	0.21
125	3010003010	0.42	308	1300002020	0.07
126	3010002200	0.07	309	1300002011	0.14
127	3010002110	0.49	310	1300001210	0.14
128	3010002101	0.07	311	1300001120	0.07
129	3010002020	0.56	312	1300001102	0.14

130	3010002011	0.14	313	1300001030	0.07
131	3010001300	0.07	314	1300000211	0.07
132	3010001210	0.28	315	1300000022	0.07
133	3010001201	0.21	316	1300000013	0.07
134	3010001120	0.42	317	1210021100	0.07
135	3010001111	0.21	318	1210013000	0.14
136	3010001030	0.28	319	1210010210	0.07
137	3010001021	0.35	320	1210002020	0.07
138	3010001012	0.07	321	1210001300	0.07
139	3010000400	0.07	322	1210001210	0.07
140	3010000301	0.07	323	1210001120	0.14
141	3010000220	0.28	324	1210001021	0.07
142	3010000202	0.07	325	1210001012	0.07
143	3010000130	0.07	326	1210000220	0.21
144	3010000121	0.07	327	1210000211	0.07
145	3010000103	0.14	328	1210000202	0.07
146	3010000040	0.07	329	1210000121	0.07
147	3010000031	0.07	330	1210000103	0.07
148	3001031000	0.07	331	1210000013	0.07
149	3001030010	0.07	332	1210000004	0.07
150	3001022000	0.14	333	1201012010	0.07
151	3001021100	0.07	334	1201011020	0.07
152	3001021010	0.07	335	1201003010	0.07
153	3001020110	0.07	336	1201002200	0.14
154	3001020101	0.07	337	1201002110	0.07
155	3001013000	0.28	338	1201002011	0.07
156	3001012100	0.07	339	1201001120	0.14
157	3001012010	0.14	340	1201001111	0.07
158	3001012001	0.07	341	1201001030	0.07
159	3001011200	0.07	342	1201000211	0.07
160	3001011110	0.07	343	1201000130	0.07
161	3001011020	0.14	344	1201000040	0.07
162	3001003100	0.21	345	1120012100	0.07

163	3001003010	0.14	346	1120010120	0.07
164	3001002200	0.21	347	1120002002	0.07
165	3001002110	0.21	348	1120000121	0.07
166	3001002101	0.14	349	1111011011	0.07
167	3001002020	0.07	350	1111002110	0.07
168	3001002011	0.14	351	1111002101	0.14
169	3001001210	0.28	352	1111002020	0.07
170	3001001120	0.28	353	1111001210	0.07
171	3001001111	0.14	354	1111001120	0.07
172	3001001030	0.21	355	1111001030	0.07
173	3001001021	0.07	356	1111001012	0.07
174	3001000202	0.07	357	1111000220	0.14
175	3001000130	0.14	358	1102001012	0.07
176	3001000112	0.14	359	1012002200	0.07
177	3001000022	0.07	360	1012001102	0.07
178	2200022000	0.14	361	0400000121	0.07
179	2200021100	0.07	362	0310022000	0.07
180	2200021010	0.28	363	0310000130	0.07
181	2200020110	0.14	364	0310000112	0.07
182	2200020020	0.21	365	0310000103	0.07
183	2200013000	0.21	366	0202000022	0.07

Table S2: Au sites

Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster
1	4000031000	0.27	107	2200021100	0.27
2	4000022000	0.54	108	2200021010	0.27
3	4000021100	0.27	109	2200020110	0.27
4	4000021010	1.09	110	2200012010	0.54
5	4000020110	0.27	111	2200012001	0.27
6	4000020020	0.54	112	2200011110	1.09
7	4000013000	0.27	113	2200011020	0.27
8	4000012100	1.63	114	2200010120	0.54
9	4000012010	0.82	115	2200010111	0.27

10	4000011200	0.27	116	2200003010	0.54
11	4000011110	0.54	117	2200002200	1.09
12	4000011101	0.27	118	2200002110	0.54
13	4000011011	0.27	119	2200002020	0.82
14	4000010030	0.54	120	2200001210	0.54
15	4000004000	0.54	121	2200001120	1.63
16	4000003100	1.09	122	2200001111	0.27
17	4000003010	1.36	123	2200001030	0.27
18	4000002110	1.9	124	2200001021	0.54
19	4000002020	1.63	125	2200000220	0.82
20	4000002011	0.27	126	2200000130	0.54
21	4000001300	0.54	127	2200000121	0.54
22	4000001210	0.27	128	2200000031	0.27
23	4000001120	1.09	129	2200000022	0.27
24	4000001102	0.27	130	2110013000	0.27
25	4000001030	1.09	131	2110012100	0.27
26	4000001021	0.27	132	2110012010	0.27
27	4000000301	0.27	133	2110011110	0.27
28	4000000220	0.27	134	2110011020	1.36
29	4000000130	0.82	135	2110002110	0.54
30	4000000121	0.27	136	2110002020	0.27
31	4000000112	0.27	137	2110001300	0.27
32	4000000040	0.82	138	2110001120	0.54
33	4000000022	0.27	139	2110001102	0.27
34	3200001120	0.27	140	2110001030	0.27
35	3100031000	0.27	141	2110001021	0.27
36	3100022000	0.82	142	2110001012	0.27
37	3100021100	0.27	143	2110000310	0.27
38	3100021010	1.9	144	2110000211	0.27
39	3100020110	0.27	145	2110000202	0.54
40	3100013000	0.27	146	2110000130	0.27
41	3100012100	0.82	147	2110000103	0.27
42	3100012010	2.45	148	2110000022	0.54

43	3100011200	1.09	149	2101012100	0.27
44	3100011110	1.36	150	2101012001	0.27
45	3100011101	0.27	151	2101011020	0.27
46	3100011020	0.54	152	2101003010	0.27
47	3100011011	0.54	153	2101003001	0.27
48	3100011002	0.27	154	2101002200	0.27
49	3100010201	0.27	155	2101002110	0.27
50	3100010120	0.27	156	2101002020	0.82
51	3100010111	0.54	157	2101001111	0.27
52	3100010021	0.27	158	2101000211	0.27
53	3100010003	0.27	159	2101000130	0.27
54	3100003100	1.09	160	2101000112	0.27
55	3100003010	1.36	161	2101000022	0.27
56	3100003001	0.27	162	2101000013	0.27
57	3100002200	0.54	163	2020002110	0.27
58	3100002110	1.9	164	2020001300	0.27
59	3100002101	1.09	165	2020000004	0.27
60	3100002020	0.27	166	2011021010	0.27
61	3100002011	0.27	167	2011001201	0.27
62	3100001300	0.82	168	2011001120	0.54
63	3100001210	1.09	169	2011001111	0.54
64	3100001201	0.54	170	2011000022	0.27
65	3100001120	1.63	171	2002001012	0.27
66	3100001111	0.54	172	2002000031	0.27
67	3100001102	0.27	173	1300012010	0.27
68	3100001030	0.82	174	1300003100	0.27
69	3100001021	0.54	175	1300002110	0.27
70	3100000220	0.54	176	1300002020	0.27
71	3100000211	0.54	177	1300001210	0.27
72	3100000130	0.54	178	1300001111	0.27
73	3100000121	0.27	179	1300000121	0.27
74	3100000103	0.27	180	1300000040	0.27
75	3100000040	0.54	181	1300000031	0.27

76	3100000031	0.27	182	1210011101	0.27
77	3100000022	0.27	183	1210011020	0.27
78	3010013000	0.54	184	1210002011	0.27
79	3010011110	0.54	185	1210001120	0.27
80	3010010111	0.27	186	1210001102	0.27
81	3010004000	0.27	187	1210001012	0.54
82	3010003100	0.27	188	1210000211	0.27
83	3010003010	0.27	189	1210000202	0.27
84	3010002110	0.27	190	1210000121	0.54
85	3010002020	0.27	191	1210000103	0.27
86	3010002011	0.27	192	1201021010	0.27
87	3010001201	0.27	193	1201011020	0.27
88	3010001120	0.82	194	1201001210	0.54
89	3010001111	0.27	195	1201000013	0.27
90	3010001021	0.54	196	1120010021	0.27
91	3010000400	0.27	197	1120001111	0.27
92	3010000220	0.27	198	1120000202	0.27
93	3010000202	0.27	199	1120000112	0.27
94	3010000112	1.09	200	1120000013	0.27
95	3010000031	0.27	201	1120000004	0.27
96	3001012100	0.54	202	1111002200	0.27
97	3001002110	0.27	203	1111001210	0.27
98	3001001210	0.54	204	1111001201	0.27
99	3001001201	0.27	205	1111000112	0.27
100	3001001120	0.27	206	1012000211	0.27
101	3001001111	0.27	207	0310000112	0.27
102	3001001012	0.27	208	0211001300	0.27
103	3001000211	0.54	209	0211001120	0.27
104	3001000040	0.27	210	0121010111	0.27
105	2210000220	0.27	211	0121000211	0.27
106	2210000130	0.27			

Table S3: Cu site

Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster
1	4000040000	0.93	46	2200011011	0.93
2	4000022000	0.93	47	2200002200	0.93
3	4000012010	0.93	48	2200002110	0.93
4	4000011020	0.93	49	2200002101	0.93
5	4000003100	0.93	50	2200002020	0.93
6	4000003010	1.85	51	2200001210	0.93
7	4000002020	2.78	52	2200001111	0.93
8	4000001300	0.93	53	2200001021	1.85
9	4000001201	0.93	54	2200000301	0.93
10	4000001120	0.93	55	2200000211	1.85
11	4000001111	0.93	56	2200000121	0.93
12	4000001030	0.93	57	2200000112	0.93
13	4000001021	0.93	58	2110012100	0.93
14	4000000130	0.93	59	2110002020	0.93
15	4000000121	0.93	60	2110002002	0.93
16	4000000013	0.93	61	2110001120	1.85
17	3100022000	0.93	62	2110001030	0.93
18	3100013000	0.93	63	2110000130	0.93
19	3100012100	1.85	64	2110000121	0.93
20	3100012010	1.85	65	2110000112	0.93
21	3100011110	0.93	66	2110000103	0.93
22	3100003010	1.85	67	2110000022	0.93
23	3100002200	1.85	68	2101001030	0.93
24	3100002110	1.85	69	2020002200	0.93
25	3100002020	1.85	70	2020001111	0.93
26	3100002002	0.93	71	2020000004	0.93
27	3100001210	2.78	72	2011020101	0.93
28	3100001120	0.93	73	2011001012	0.93
29	3100001111	0.93	74	2011000130	0.93
30	3100000310	1.85	75	1300002200	0.93
31	3100000301	0.93	76	1300001201	0.93
32	3100000013	0.93	77	1300000220	0.93

33	3010012010	1.85	78	1300000121	1.85
34	3010002110	0.93	79	1300000112	1.85
35	3010001201	0.93	80	1300000022	0.93
36	3010001111	1.85	81	1201000022	0.93
37	3010001012	0.93	82	1120011011	0.93
38	3010000013	0.93	83	1111001012	0.93
39	3001013000	0.93	84	1021002002	0.93
40	3001012010	1.85	85	1012000202	0.93
41	3001004000	0.93	86	0400010003	0.93
42	3001000121	0.93	87	0310000022	0.93
43	3001000022	0.93	88	0040001102	0.93
44	2200012010	0.93			
45	2200011020	0.93			

Table S4: Pd sites

Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster
1	4000022000	1.89	24	2200001300	1.89
2	4000020020	1.89	25	2200001210	1.89
3	4000003010	3.77	26	2200001111	3.77
4	4000002200	1.89	27	2200001030	1.89
5	4000002110	3.77	28	2200001012	1.89
6	4000001210	3.77	29	2200000130	1.89
7	4000001030	1.89	30	2200000112	1.89
8	4000001021	1.89	31	2200000031	1.89
9	3100021010	1.89	32	2110003100	1.89
10	3100012010	1.89	33	2110003010	1.89
11	3100011020	1.89	34	2110001102	1.89
12	3100003100	1.89	35	2110000112	1.89
13	3100003010	3.77	36	2110000013	1.89
14	3100002110	3.77	37	2101021010	1.89
15	3100002011	1.89	38	2101000121	1.89
16	3100001210	3.77	39	2020010012	1.89
17	3100001120	1.89	40	2011002020	1.89

18	3100000103	1.89	41	1300001102	1.89
19	3100000022	1.89	42	1210000121	3.77
20	3010004000	1.89	43	1210000103	1.89
21	3010000004	1.89	44	1201001021	1.89
22	3001000220	1.89	45	0220001030	1.89
23	2200013000	1.89			

Cluster analysis on (110) Surface (Table S5-S8):

Table S5: Ag site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	200004000010000	0.07	206	110001111000100	0.07
2	200004000001000	0.07	207	110001111000010	0.22
3	200004000000100	0.07	208	110001111000001	0.15
4	200004000000010	0.07	209	110001102001000	0.15
5	200003100010000	0.22	210	110001102000100	0.15
6	200003100001000	0.73	211	110001102000010	0.07
7	200003100000100	0.15	212	110001102000001	0.07
8	200003010001000	0.07	213	110001101100010	0.07
9	200003010000100	0.07	214	110001100200001	0.07
10	200003010000010	0.07	215	110001030000001	0.07
11	200003001001000	0.15	216	110001021000010	0.07
12	200003001000010	0.29	217	110001012010000	0.07
13	200002200010000	0.44	218	110001012001000	0.07
14	200002200001000	1.24	219	110000400010000	0.15
15	200002200000100	0.37	220	110000400001000	0.07
16	200002200000010	0.88	221	110000400000100	0.44
17	200002200000001	0.07	222	110000400000010	0.59
18	200002110010000	0.15	223	110000400000001	0.07
19	200002110001000	0.59	224	110000310001000	0.29
20	200002110000100	0.22	225	110000310000100	0.07
21	200002110000010	0.66	226	110000310000010	0.37
22	200002110000001	0.15	227	110000310000001	0.15
23	200002101010000	0.29	228	110000301001000	0.15

24	200002101001000	1.46	229	110000301000100	0.15
25	200002101000100	0.29	230	110000301000010	0.37
26	200002101000010	0.59	231	110000301000001	0.07
27	200002101000001	0.07	232	110000300100100	0.07
28	200002100100100	0.07	233	110000300100001	0.07
29	200002020000010	0.07	234	110000220010000	0.07
30	200002011010000	0.07	235	110000220001000	0.15
31	200002011001000	0.22	236	110000220000100	0.15
32	200002011000100	0.29	237	110000220000010	0.07
33	200002011000010	0.07	238	110000220000001	0.15
34	200002011000001	0.07	239	110000211010000	0.07
35	200002002001000	0.15	240	110000211001000	0.29
36	200002002000100	0.07	241	110000211000100	0.59
37	200002002000010	0.07	242	110000211000010	0.37
38	200002002000001	0.07	243	110000211000001	0.29
39	200002001101000	0.07	244	110000210100010	0.07
40	200002001100100	0.07	245	110000202010000	0.07
41	200002001100010	0.07	246	110000202001000	0.51
42	200001300010000	0.51	247	110000202000100	0.37
43	200001300001000	0.73	248	110000202000010	0.44
44	200001300000100	1.24	249	110000202000001	0.07
45	200001300000010	1.24	250	110000201110000	0.07
46	200001300000001	0.07	251	110000201100100	0.07
47	200001210010000	0.07	252	110000201100001	0.15
48	200001210001000	0.88	253	110000130001000	0.07
49	200001210000100	0.37	254	110000130000010	0.07
50	200001210000010	0.59	255	110000130000001	0.15
51	200001210000001	0.73	256	110000121001000	0.07
52	200001201010000	0.22	257	110000121000100	0.22
53	200001201001000	1.17	258	110000121000010	0.29
54	200001201000100	1.98	259	110000121000001	0.66
55	200001201000010	2.19	260	110000120100001	0.07
56	200001201000001	0.44	261	110000112001000	0.07

57	200001200101000	0.07	262	110000112000100	0.29
58	200001200100010	0.07	263	110000112000010	0.29
59	200001120010000	0.07	264	110000112000001	0.44
60	200001120001000	0.15	265	110000111100100	0.07
61	200001120000010	0.29	266	110000111100001	0.15
62	200001120000001	0.15	267	110000103000100	0.29
63	200001111010000	0.59	268	110000103000010	0.29
64	200001111001000	0.88	269	110000103000001	0.29
65	200001111000100	0.8	270	110000102100100	0.07
66	200001111000010	0.88	271	110000101200001	0.07
67	200001111000001	0.66	272	110000040000001	0.07
68	200001110100100	0.15	273	110000031000100	0.15
69	200001102010000	0.29	274	110000031000001	0.22
70	200001102001000	0.66	275	110000022000001	0.15
71	200001102000100	0.59	276	110000021100001	0.15
72	200001102000010	1.24	277	110000013000001	0.07
73	200001102000001	0.29	278	110000012100001	0.07
74	200001101100100	0.15	279	110000004000100	0.07
75	200001030000010	0.07	280	110000004000010	0.07
76	200001021001000	0.15	281	110000004000001	0.07
77	200001021000100	0.07	282	101003100001000	0.07
78	200001021000001	0.07	283	101003100000010	0.07
79	200001012010000	0.07	284	101002200001000	0.15
80	200001012001000	0.07	285	101002200000010	0.15
81	200001012000100	0.07	286	101002110000100	0.07
82	200001012000010	0.37	287	101002110000010	0.07
83	200001012000001	0.22	288	101002101000010	0.15
84	200001003010000	0.44	289	101002002000010	0.07
85	200001003000100	0.15	290	101001300001000	0.15
86	200001003000010	0.15	291	101001300000100	0.15
87	200001002100001	0.07	292	101001300000010	0.44
88	200000400010000	0.07	293	101001210010000	0.07
89	200000400001000	0.37	294	101001210001000	0.22

90	200000400000100	0.88	295	101001210000100	0.15
91	200000400000010	0.66	296	101001210000010	0.29
92	200000400000001	0.15	297	101001201001000	0.07
93	200000310010000	0.15	298	101001201000100	0.37
94	200000310001000	1.1	299	101001201000010	0.07
95	200000310000100	0.8	300	101001201000001	0.15
96	200000310000010	1.02	301	101001111000100	0.07
97	200000310000001	0.44	302	101001111000010	0.29
98	200000301010000	0.44	303	101001111000001	0.15
99	200000301001000	1.46	304	101001102000010	0.07
100	200000301000100	1.46	305	101001102000001	0.07
101	200000301000010	1.98	306	101001101100010	0.07
102	200000301000001	0.73	307	101001101100001	0.07
103	200000300100010	0.07	308	101001021001000	0.07
104	200000300100001	0.07	309	101001021000010	0.07
105	200000220001000	0.8	310	101001021000001	0.07
106	200000220000100	0.66	311	101001003000010	0.07
107	200000220000010	0.51	312	101000400010000	0.07
108	200000220000001	0.22	313	101000400001000	0.07
109	200000211010000	0.44	314	101000400000100	0.07
110	200000211001000	0.95	315	101000400000010	0.07
111	200000211000100	0.73	316	101000400000001	0.07
112	200000211000010	1.39	317	101000310001000	0.07
113	200000211000001	1.61	318	101000310000010	0.15
114	200000210100100	0.37	319	101000310000001	0.07
115	200000210100010	0.07	320	101000301010000	0.07
116	200000210100001	0.15	321	101000301001000	0.07
117	200000202010000	0.07	322	101000301000100	0.22
118	200000202001000	0.37	323	101000301000001	0.07
119	200000202000100	0.73	324	101000300100100	0.07
120	200000202000010	1.02	325	101000220000001	0.07
121	200000202000001	0.73	326	101000211001000	0.07
122	200000201101000	0.07	327	101000211000100	0.22

123	200000201100100	0.07	328	101000211000001	0.29
124	200000201100001	0.51	329	101000210100010	0.07
125	200000130000100	0.07	330	101000202000100	0.15
126	200000130000010	0.07	331	101000202000010	0.07
127	200000130000001	0.37	332	101000202000001	0.07
128	200000121001000	0.07	333	101000201100100	0.07
129	200000121000100	0.29	334	101000200200100	0.07
130	200000121000010	0.29	335	101000121000100	0.07
131	200000121000001	1.61	336	101000121000001	0.22
132	200000120100100	0.07	337	101000112000100	0.15
133	200000120100010	0.07	338	101000112000010	0.07
134	200000120100001	0.22	339	101000112000001	0.15
135	200000112010000	0.07	340	101000111100010	0.07
136	200000112001000	0.29	341	101000111100001	0.07
137	200000112000100	0.29	342	101000103010000	0.07
138	200000112000010	0.22	343	101000103001000	0.07
139	200000112000001	0.95	344	101000103000100	0.15
140	200000111100010	0.07	345	101000103000001	0.07
141	200000111100001	0.15	346	101000022000001	0.07
142	200000103001000	0.37	347	101000013000001	0.07
143	200000103000100	0.15	348	100103001001000	0.07
144	200000103000010	0.29	349	100102200001000	0.07
145	200000103000001	0.66	350	100102101001000	0.07
146	200000102101000	0.07	351	100102101000010	0.07
147	200000102100100	0.07	352	100101300000100	0.15
148	200000102100001	0.37	353	100101210000100	0.07
149	200000040000001	0.07	354	100101201010000	0.07
150	200000031000010	0.07	355	100101201001000	0.22
151	200000031000001	0.15	356	100101201000100	0.22
152	200000022001000	0.07	357	100101201000010	0.22
153	200000022000100	0.15	358	100101120000100	0.07
154	200000022000010	0.22	359	100101120000010	0.07
155	200000022000001	0.44	360	100101120000001	0.07

156	200000021100001	0.22	361	100101002100010	0.07
157	200000013001000	0.07	362	100100310001000	0.07
158	200000013000100	0.15	363	100100310000100	0.07
159	200000013000010	0.15	364	100100310000010	0.07
160	200000013000001	0.15	365	100100301001000	0.07
161	200000012100100	0.07	366	100100301000100	0.07
162	200000012100001	0.07	367	100100301000001	0.07
163	200000004000100	0.07	368	100100211000100	0.15
164	200000004000001	0.22	369	100100211000010	0.15
165	200000003100001	0.07	370	100100211000001	0.07
166	110003100001000	0.15	371	100100202000100	0.22
167	110003100000100	0.15	372	100100202000010	0.07
168	110003100000001	0.07	373	100100121000010	0.15
169	110003010010000	0.07	374	100100120100001	0.07
170	110003010001000	0.07	375	100100112000100	0.07
171	110003001000100	0.07	376	100100112000010	0.15
172	110003001000010	0.07	377	100100112000001	0.15
173	110002200010000	0.29	378	100100111100001	0.07
174	110002200001000	0.15	379	100100103000010	0.07
175	110002200000100	0.22	380	100100101200100	0.07
176	110002200000010	0.22	381	100100022000010	0.07
177	110002110001000	0.07	382	100100004000001	0.07
178	110002110000010	0.22	383	020002200010000	0.07
179	110002101000100	0.07	384	020002011010000	0.07
180	110002101000001	0.15	385	020001111001000	0.07
181	110002020001000	0.07	386	020000400010000	0.07
182	110002020000010	0.07	387	020000400001000	0.07
183	110002020000001	0.07	388	020000400000010	0.07
184	110002011000100	0.07	389	020000301000010	0.07
185	110002011000010	0.07	390	020000031000001	0.07
186	110002010101000	0.07	391	011002101010000	0.07
187	110002010100010	0.07	392	011000310000100	0.15
188	110002002001000	0.07	393	011000211001000	0.07

189	110001300010000	0.22	394	011000211000010	0.07
190	110001300001000	0.15	395	011000202000100	0.07
191	110001300000100	0.22	396	011000112000100	0.07
192	110001300000010	0.51	397	011000103000100	0.07
193	110001300000001	0.07	398	010101021000100	0.07
194	110001210010000	0.22	399	010100211000100	0.07
195	110001210001000	0.37	400	002001201000001	0.07
196	110001210000100	0.22	401	002000400001000	0.07
197	110001201010000	0.15	402	002000301000001	0.07
198	110001201001000	0.22	403	002000211000010	0.07
199	110001201000100	0.44	404	002000202000001	0.07
200	110001201000010	0.73	405	002000004000001	0.07
201	110001120010000	0.07	406	001100400000010	0.07
202	110001120001000	0.07	407	001100210100100	0.07
203	110001120000100	0.15	408	001100130000100	0.07
204	110001120000001	0.07	409	001100103000100	0.07
205	110001111001000	0.37	410	000201201001000	0.07

Table S6: Au site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	200003100001000	0.48	75	110001300000010	0.48
2	200002200000100	0.48	76	110001210001000	1.45
3	200002110000100	0.48	77	110001210000100	0.48
4	200002101001000	1.45	78	110001210000010	0.48
5	200002101000100	0.48	79	110001201001000	0.97
6	200001300001000	1.93	80	110001120000010	0.48
7	200001300000100	0.97	81	110001111001000	0.48
8	200001300000010	0.48	82	110001111000010	0.48
9	200001210001000	0.48	83	110001110100010	0.48
10	200001210000010	0.97	84	110001101100001	0.48
11	200001201001000	0.48	85	110001020100001	0.48
12	200001201000100	0.48	86	110000400000100	0.97
13	200001201000010	1.93	87	110000400000010	0.48
14	200001120000001	0.48	88	110000310000100	0.48

15	200001111000100	0.48	89	110000310000010	0.97
16	200001111000010	0.97	90	110000310000001	0.97
17	200001111000001	0.48	91	110000301000100	1.45
18	200001102001000	0.48	92	110000300100010	0.48
19	200001102000010	0.48	93	110000220000001	0.48
20	200001021000001	0.48	94	110000211000100	0.48
21	200001012000001	0.48	95	110000211000010	0.97
22	200001002100001	0.48	96	110000211000001	0.97
23	200000400010000	0.48	97	110000202001000	0.48
24	200000400001000	0.48	98	110000202000100	0.97
25	200000400000100	0.48	99	110000201100100	0.48
26	200000400000001	0.48	100	110000121000100	0.97
27	200000310010000	0.48	101	110000121000010	0.97
28	200000310001000	0.97	102	110000121000001	0.48
29	200000310000100	0.97	103	110000112000100	0.48
30	200000310000010	0.48	104	110000112000010	0.48
31	200000301010000	0.48	105	110000112000001	0.97
32	200000301000100	2.42	106	110000101200001	0.48
33	200000301000010	0.48	107	110000040000001	0.48
34	200000301000001	0.97	108	110000031000001	0.48
35	200000220000100	0.97	109	110000022000100	0.97
36	200000220000010	0.97	110	110000022000001	0.48
37	200000220000001	0.97	111	110000012100100	0.48
38	200000211000100	0.97	112	101002200001000	0.48
39	200000211000010	0.48	113	101002110000100	0.48
40	200000211000001	2.9	114	101001300000100	0.48
41	200000210100010	0.48	115	101001210000010	0.48
42	200000202001000	0.97	116	101001021000010	0.48
43	200000202000100	0.48	117	101001002100001	0.48
44	200000202000010	1.45	118	101000310000010	0.48
45	200000202000001	0.97	119	101000301000100	0.48
46	200000130000100	0.97	120	101000220000010	0.97
47	200000130000001	0.97	121	101000211000010	0.48

48	200000121001000	0.48	122	101000202000100	0.48
49	200000121000100	0.48	123	101000030100100	0.48
50	200000121000010	0.48	124	101000021100001	0.48
51	200000121000001	0.48	125	101000004000001	0.48
52	200000112000100	0.48	126	100101300000010	0.48
53	200000112000010	0.48	127	100101210000001	0.48
54	200000112000001	1.45	128	100101102001000	0.48
55	200000111100001	0.97	129	100101003000100	0.48
56	200000103000100	0.48	130	100100211000010	0.48
57	200000103000010	0.48	131	100100202000100	0.48
58	200000103000001	0.48	132	100100130000001	0.48
59	200000102100100	0.48	133	100100121001000	0.48
60	200000101200100	0.48	134	100100112000001	0.48
61	200000040000001	0.97	135	100100031001000	0.48
62	200000031000001	1.45	136	020001012000010	0.48
63	200000022000100	0.48	137	020000301000001	0.48
64	200000022000010	0.48	138	020000202000100	0.48
65	200000013000001	0.97	139	020000202000010	0.48
66	200000012100001	0.97	140	011002011000001	0.48
67	110003100000010	0.48	141	011001201001000	0.48
68	110002200010000	0.48	142	011000301010000	0.48
69	110002200000100	0.48	143	011000211000100	0.48
70	110002200000010	1.45	144	011000121001000	0.48
71	110002110000010	0.97	145	011000121000100	0.48
72	110002110000001	0.48	146	011000022000001	0.48
73	110002000200001	0.48	147	001100112001000	0.48
74	110001300001000	0.48			

Table S7: Cu site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	200002200001000	1.25	33	200000112000001	1.25
2	200002200000010	2.5	34	200000111100001	1.25
3	200002200000001	1.25	35	200000103000100	1.25

4	200002101010000	1.25	36	200000103000001	3.75
5	200002002000010	1.25	37	200000013000100	1.25
6	200001300001000	1.25	38	200000012100001	1.25
7	200001300000100	1.25	39	110002200000100	1.25
8	200001210001000	2.5	40	110001300010000	1.25
9	200001210000001	1.25	41	110001300001000	1.25
10	200001201001000	1.25	42	110001300000100	1.25
11	200001201000100	1.25	43	110001300000001	1.25
12	200001201000010	3.75	44	110001210001000	1.25
13	200001201000001	1.25	45	110001102000010	2.5
14	200001111000001	1.25	46	110000301000100	1.25
15	200001102000100	1.25	47	110000301000010	1.25
16	200001102000001	1.25	48	110000220000001	1.25
17	200001012001000	1.25	49	110000211001000	2.5
18	200000400001000	1.25	50	110000211000010	1.25
19	200000400000100	1.25	51	110000211000001	1.25
20	200000310000010	1.25	52	110000202000010	1.25
21	200000310000001	2.5	53	110000121000010	1.25
22	200000301001000	2.5	54	110000112000001	1.25
23	200000301000100	2.5	55	110000111100001	1.25
24	200000301000010	1.25	56	110000022000100	1.25
25	200000301000001	2.5	57	110000012100001	1.25
26	200000220000010	1.25	58	101001300000001	1.25
27	200000220000001	1.25	59	101000211000100	2.5
28	200000211000100	1.25	60	100100211000001	1.25
29	200000210100100	1.25	61	100100102100100	1.25
30	200000210100001	1.25	62	100100022000100	1.25
31	200000202000001	2.5	63	011001201000100	1.25
32	200000121000001	3.75	64	010100301000010	1.25

Table S8: Pd site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	200002200001000	2.78	17	200000111100001	2.78

2	200002101010000	2.78	18	200000003100001	2.78
3	200001300001000	2.78	19	110001201010000	2.78
4	200001201001000	2.78	20	110001201001000	2.78
5	200001201000100	2.78	21	110001111000010	2.78
6	200000301000010	2.78	22	110001102000001	2.78
7	200000300100100	2.78	23	110000400010000	2.78
8	200000211000100	2.78	24	110000220000100	2.78
9	200000211000001	8.33	25	110000211000010	2.78
10	200000202000100	2.78	26	110000120100001	2.78
11	200000202000010	5.56	27	110000112001000	2.78
12	200000202000001	5.56	28	101000202000100	2.78
13	200000130000001	2.78	29	101000121000001	2.78
14	200000121000010	2.78	30	101000112000001	2.78
15	200000121000001	2.78	31	101000103000001	2.78
16	200000112000001	2.78	32	020000112000001	2.78

Cluster analysis on (111) surface (Table S9-S12):

Table S9: Ag sites

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	6000030000	0.58	225	3210011001	0.15
2	6000021000	0.8	226	3210010101	0.07
3	6000020100	0.22	227	3210010020	0.22
4	6000020010	0.8	228	3210010011	0.07
5	6000012000	1.09	229	3210003000	0.07
6	6000011100	1.31	230	3210002100	0.36
7	6000011010	1.75	231	3210002010	0.58
8	6000010110	0.44	232	3210001200	0.15
9	6000010020	0.36	233	3210001110	0.73
10	6000010011	0.15	234	3210001101	0.07
11	6000003000	0.66	235	3210001020	0.15
12	6000002100	1.31	236	3210001011	0.22
13	6000002010	1.53	237	3210001002	0.07
14	6000002001	0.07	238	3210000210	0.15

15	6000001200	0.22	239	3210000201	0.07
16	6000001110	1.09	240	3210000120	0.22
17	6000001101	0.07	241	3210000111	0.15
18	6000001020	1.17	242	3210000102	0.07
19	6000001011	0.15	243	3210000030	0.07
20	6000000210	0.07	244	3210000012	0.15
21	6000000120	0.36	245	3210000003	0.22
22	6000000111	0.07	246	3201021000	0.07
23	6000000102	0.15	247	3201012000	0.07
24	6000000030	0.29	248	3201011100	0.15
25	5100030000	0.51	249	3201011010	0.29
26	5100021000	0.95	250	3201010110	0.15
27	5100020100	0.29	251	3201010101	0.15
28	5100020010	0.88	252	3201010011	0.07
29	5100012000	1.61	253	3201003000	0.15
30	5100011100	0.8	254	3201002100	0.07
31	5100011010	2.48	255	3201002010	0.15
32	5100011001	0.07	256	3201001200	0.07
33	5100010200	0.07	257	3201001110	0.29
34	5100010110	0.51	258	3201001101	0.07
35	5100010101	0.15	259	3201001020	0.15
36	5100010020	0.73	260	3201000120	0.22
37	5100010011	0.22	261	3201000111	0.07
38	5100010002	0.07	262	3201000102	0.07
39	5100003000	0.44	263	3201000030	0.15
40	5100002100	0.88	264	3201000021	0.07
41	5100002010	2.7	265	3201000012	0.07
42	5100001200	0.58	266	3201000003	0.07
43	5100001110	1.68	267	3200112000	0.07
44	5100001101	0.36	268	3200111010	0.07
45	5100001020	1.39	269	3120020100	0.07
46	5100001011	0.07	270	3120011100	0.22
47	5100000210	0.07	271	3120010110	0.07

48	5100000120	0.58	272	3120010020	0.07
49	5100000111	0.44	273	3120010002	0.07
50	5100000030	0.66	274	3120003000	0.07
51	5100000021	0.15	275	3120001200	0.07
52	5010030000	0.07	276	3120001110	0.22
53	5010021000	0.22	277	3120001101	0.15
54	5010020010	0.22	278	3120001020	0.15
55	5010012000	0.36	279	3120001011	0.07
56	5010011100	0.07	280	3120000201	0.07
57	5010011010	0.66	281	3120000120	0.07
58	5010010200	0.07	282	3120000102	0.22
59	5010010110	0.15	283	3120000012	0.15
60	5010010020	0.29	284	3111021000	0.07
61	5010003000	0.15	285	3111011100	0.15
62	5010002100	0.22	286	3111011010	0.22
63	5010002010	0.66	287	3111010110	0.15
64	5010001200	0.22	288	3111003000	0.07
65	5010001110	0.36	289	3111002100	0.07
66	5010001101	0.22	290	3111002010	0.07
67	5010001020	0.44	291	3111001200	0.22
68	5010001011	0.07	292	3111001110	0.29
69	5010000210	0.07	293	3111001020	0.07
70	5010000120	0.44	294	3111000210	0.07
71	5010000111	0.07	295	3111000120	0.29
72	5010000030	0.15	296	3111000111	0.07
73	5001021000	0.15	297	3111000102	0.07
74	5001020010	0.07	298	3111000021	0.07
75	5001012000	0.15	299	3111000012	0.29
76	5001011100	0.15	300	3111000003	0.29
77	5001011010	0.44	301	3110101110	0.07
78	5001010110	0.15	302	3102010110	0.07
79	5001010020	0.07	303	3102010101	0.07
80	5001002010	0.07	304	3102010011	0.07

81	5001001110	0.29	305	3102001110	0.07
82	5001001020	0.07	306	3102001101	0.22
83	5001001011	0.15	307	3102001011	0.07
84	5001001002	0.15	308	3102000030	0.07
85	5001000111	0.07	309	3030000003	0.07
86	5001000030	0.07	310	3021010011	0.07
87	4200030000	0.07	311	3021001020	0.07
88	4200021000	0.51	312	3021000201	0.07
89	4200020100	0.22	313	3021000102	0.07
90	4200020010	0.22	314	3021000003	0.22
91	4200012000	0.95	315	3012002010	0.07
92	4200011100	0.8	316	3003000210	0.07
93	4200011010	1.09	317	2400021000	0.15
94	4200011001	0.07	318	2400020010	0.07
95	4200010200	0.15	319	2400011100	0.07
96	4200010110	0.58	320	2400011010	0.07
97	4200010020	0.58	321	2400010200	0.07
98	4200003000	0.22	322	2400010020	0.07
99	4200002100	0.51	323	2400001110	0.07
100	4200002010	0.95	324	2400001020	0.07
101	4200001200	0.36	325	2400000120	0.07
102	4200001110	1.53	326	2400000102	0.07
103	4200001101	0.15	327	2400000021	0.07
104	4200001020	1.02	328	2310030000	0.15
105	4200001011	0.66	329	2310021000	0.07
106	4200001002	0.07	330	2310011010	0.22
107	4200000300	0.22	331	2310010020	0.07
108	4200000210	0.15	332	2310010011	0.07
109	4200000120	0.22	333	2310003000	0.07
110	4200000111	0.29	334	2310002100	0.07
111	4200000030	0.44	335	2310002010	0.29
112	4200000021	0.22	336	2310001200	0.07
113	4200000012	0.15	337	2310001110	0.15

114	4200000003	0.07	338	2310001020	0.07
115	4110030000	0.07	339	2310000300	0.07
116	4110021000	0.29	340	2310000201	0.07
117	4110020100	0.15	341	2310000111	0.22
118	4110012000	0.44	342	2310000102	0.07
119	4110011100	0.44	343	2310000030	0.07
120	4110011010	0.58	344	2310000021	0.22
121	4110011001	0.07	345	2310000012	0.07
122	4110010110	0.29	346	2310000003	0.15
123	4110010101	0.15	347	2301011001	0.07
124	4110010020	0.44	348	2301010110	0.15
125	4110010011	0.07	349	2301001101	0.07
126	4110003000	0.22	350	2301001020	0.07
127	4110002100	0.58	351	2301001002	0.07
128	4110002010	0.88	352	2301000210	0.07
129	4110002001	0.15	353	2220011010	0.15
130	4110001200	0.22	354	2220010101	0.07
131	4110001110	1.31	355	2220010011	0.07
132	4110001101	0.07	356	2220002010	0.07
133	4110001020	0.8	357	2220001200	0.07
134	4110001011	0.22	358	2220001110	0.22
135	4110001002	0.29	359	2220000210	0.07
136	4110000210	0.22	360	2220000201	0.15
137	4110000120	0.29	361	2220000111	0.07
138	4110000111	0.29	362	2220000102	0.15
139	4110000102	0.29	363	2220000030	0.07
140	4110000021	0.15	364	2220000012	0.22
141	4110000012	0.15	365	2220000003	0.07
142	4101021000	0.15	366	2211011100	0.07
143	4101020010	0.15	367	2211011010	0.07
144	4101012000	0.07	368	2211011001	0.07
145	4101011100	0.22	369	2211010110	0.07
146	4101011010	0.36	370	2211002100	0.07

147	4101010200	0.07	371	2211002010	0.29
148	4101010110	0.07	372	2211001110	0.07
149	4101010101	0.22	373	2211001101	0.07
150	4101010020	0.07	374	2211001011	0.15
151	4101010011	0.07	375	2211000111	0.07
152	4101002100	0.07	376	2211000102	0.36
153	4101002010	0.22	377	2211000030	0.07
154	4101001200	0.07	378	2211000012	0.07
155	4101001110	0.29	379	2202010011	0.07
156	4101001101	0.07	380	2202000120	0.07
157	4101001020	0.22	381	2130002100	0.07
158	4101001011	0.15	382	2130001020	0.07
159	4101001002	0.15	383	2130001002	0.07
160	4101000201	0.07	384	2130000111	0.07
161	4101000120	0.36	385	2130000003	0.22
162	4101000111	0.07	386	2121011001	0.07
163	4101000102	0.15	387	2121010101	0.07
164	4101000030	0.22	388	2121001110	0.07
165	4020020100	0.07	389	2121000300	0.07
166	4020012000	0.22	390	2121000210	0.07
167	4020011010	0.22	391	2121000201	0.07
168	4020003000	0.07	392	2121000120	0.07
169	4020002100	0.15	393	2121000102	0.15
170	4020002010	0.07	394	2121000021	0.07
171	4020001020	0.15	395	2121000012	0.07
172	4020001011	0.22	396	2121000003	0.07
173	4020000102	0.07	397	2112011001	0.07
174	4020000012	0.07	398	2112010020	0.07
175	4011020100	0.07	399	2112003000	0.07
176	4011012000	0.15	400	2112001110	0.07
177	4011011010	0.07	401	2112000201	0.07
178	4011002010	0.29	402	2112000102	0.15
179	4011001200	0.15	403	2112000012	0.07

180	4011001110	0.07	404	2112000003	0.07
181	4011001101	0.07	405	2031002010	0.07
182	4011001020	0.07	406	2031000021	0.07
183	4011001011	0.07	407	2031000003	0.07
184	4011000030	0.07	408	2022000102	0.07
185	4011000021	0.07	409	1500000300	0.07
186	4010111010	0.07	410	1410000111	0.07
187	4002021000	0.07	411	1401021000	0.07
188	4002012000	0.07	412	1320011010	0.07
189	4002011100	0.07	413	1320002010	0.07
190	4002003000	0.07	414	1320001011	0.07
191	4002001011	0.07	415	1320000111	0.07
192	4002000030	0.07	416	1320000021	0.07
193	3300030000	0.07	417	1311001110	0.15
194	3300021000	0.15	418	1311001101	0.15
195	3300020100	0.07	419	1311001011	0.07
196	3300020010	0.15	420	1311000300	0.07
197	3300011100	0.15	421	1311000111	0.15
198	3300011010	0.36	422	1311000102	0.22
199	3300011001	0.07	423	1311000003	0.07
200	3300010110	0.51	424	1302000012	0.07
201	3300010101	0.07	425	1230002001	0.07
202	3300010020	0.07	426	1221001011	0.07
203	3300010011	0.07	427	1221000201	0.07
204	3300003000	0.07	428	1221000111	0.07
205	3300002100	0.15	429	1221000102	0.07
206	3300002010	0.15	430	1221000012	0.07
207	3300002001	0.07	431	1212000102	0.07
208	3300001200	0.15	432	1140000111	0.07
209	3300001110	0.44	433	1131001101	0.07
210	3300001020	0.22	434	1131000030	0.07
211	3300001011	0.22	435	1122001011	0.07
212	3300001002	0.07	436	1122000102	0.07

213	3300000210	0.07	437	1104000111	0.07
214	3300000201	0.07	438	0501000111	0.07
215	3300000120	0.07	439	0420000012	0.07
216	3300000111	0.15	440	0411001011	0.07
217	3300000012	0.07	441	0411000021	0.07
218	3300000003	0.07	442	0330000201	0.07
219	3210021000	0.07	443	0312011010	0.07
220	3210020100	0.07	444	0312000012	0.07
221	3210020010	0.29	445	0312000003	0.07
222	3210012000	0.44	446	0240000111	0.07
223	3210011100	0.22	447	0231000102	0.07
224	3210011010	0.73			

Table S10: Au sites

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	6000030000	0.21	155	3210000120	0.63
2	6000021000	0.21	156	3210000111	0.21
3	6000020100	0.21	157	3210000102	1.04
4	6000012000	0.42	158	3210000030	0.42
5	6000011100	0.21	159	3210000012	0.21
6	6000010110	0.21	160	3201011100	0.42
7	6000010020	0.21	161	3201010200	0.21
8	6000003000	0.21	162	3201010110	0.42
9	6000002100	0.21	163	3201002001	0.21
10	6000002010	0.42	164	3201000120	0.21
11	6000001200	0.21	165	3201000111	0.21
12	6000001110	0.63	166	3201000102	0.63
13	6000001101	0.21	167	3201000021	0.83
14	6000001020	0.63	168	3201000003	0.21
15	6000000120	0.83	169	3120011100	0.21
16	5100030000	0.21	170	3120011001	0.21
17	5100021000	0.21	171	3120010002	0.21
18	5100020010	0.63	172	3120001110	0.21

19	5100012000	1.04	173	3120001101	0.21
20	5100011100	0.42	174	3120001011	0.42
21	5100011010	0.83	175	3120000201	0.42
22	5100010200	0.21	176	3120000120	0.21
23	5100010110	0.42	177	3120000102	0.63
24	5100010011	0.42	178	3120000021	0.21
25	5100003000	0.83	179	3120000012	0.21
26	5100002100	0.63	180	3120000003	0.21
27	5100002010	1.25	181	3111011100	0.21
28	5100001110	2.08	182	3111011010	0.21
29	5100001020	0.42	183	3111010020	0.21
30	5100000300	0.21	184	3111001110	0.21
31	5100000210	0.21	185	3111001101	0.21
32	5100000120	0.21	186	3111001020	0.42
33	5100000111	0.21	187	3111000210	0.42
34	5100000030	0.42	188	3111000201	0.21
35	5100000021	0.21	189	3111000102	0.63
36	5100000012	0.63	190	3111000030	0.21
37	5010012000	0.21	191	3111000021	0.42
38	5010011100	0.42	192	3111000003	0.21
39	5010011010	0.42	193	3110010110	0.21
40	5010010020	0.21	194	3102011010	0.21
41	5010010002	0.21	195	3102001110	0.21
42	5010002100	0.42	196	3102000120	0.21
43	5010002010	0.63	197	3030002010	0.21
44	5010002001	0.42	198	3030000102	0.21
45	5010001110	0.21	199	3021001101	0.21
46	5010001011	0.21	200	3021000201	0.21
47	5010000300	0.21	201	3021000120	0.21
48	5010000210	0.21	202	3021000102	0.83
49	5010000012	0.21	203	3003010101	0.42
50	5001012000	0.21	204	2400020010	0.21
51	5001011010	0.21	205	2400010101	0.42

52	5001011001	0.21	206	2400002010	0.21
53	5001002010	0.21	207	2400001110	0.21
54	5001001101	0.21	208	2400000111	0.21
55	5001000111	0.21	209	2400000030	0.21
56	5001000030	0.21	210	2400000021	0.21
57	4200012000	0.21	211	2311000003	0.21
58	4200011100	0.63	212	2310020010	0.21
59	4200011010	0.83	213	2310011010	0.63
60	4200010011	0.42	214	2310001011	0.21
61	4200002100	0.63	215	2310000300	0.21
62	4200002010	0.63	216	2310000111	0.21
63	4200001110	1.25	217	2310000012	0.21
64	4200001101	0.42	218	2310000003	0.21
65	4200001020	1.04	219	2301011100	0.21
66	4200001011	0.21	220	2301011010	0.21
67	4200000210	0.42	221	2301010011	0.21
68	4200000201	0.42	222	2301001110	0.21
69	4200000120	0.63	223	2301001020	0.42
70	4200000111	0.83	224	2301000210	0.21
71	4200000021	0.21	225	2301000111	0.21
72	4200000012	0.21	226	2301000102	0.21
73	4110030000	0.63	227	2301000030	0.21
74	4110011010	0.83	228	2301000021	0.21
75	4110010020	0.21	229	2301000012	0.42
76	4110003000	0.42	230	2220011100	0.21
77	4110002100	0.21	231	2220011010	0.42
78	4110002010	1.46	232	2220010110	0.42
79	4110001200	0.42	233	2220001200	0.42
80	4110001110	1.67	234	2220001020	0.42
81	4110001101	0.21	235	2220001011	0.21
82	4110001020	0.42	236	2220000120	0.21
83	4110001011	0.63	237	2220000111	0.21
84	4110000210	0.21	238	2220000021	0.21

85	4110000201	0.63	239	2220000012	0.21
86	4110000111	0.21	240	2211010020	0.21
87	4110000102	0.42	241	2211002010	0.21
88	4110000030	0.42	242	2211001110	0.21
89	4110000012	0.83	243	2211001101	0.21
90	4110000003	0.21	244	2211001020	0.21
91	4101011100	0.21	245	2211001011	0.42
92	4101011010	0.21	246	2211000111	0.21
93	4101010110	0.21	247	2211000102	0.63
94	4101010020	0.21	248	2211000030	0.42
95	4101001110	0.63	249	2202011010	0.21
96	4101001020	0.21	250	2202002010	0.21
97	4101000120	0.42	251	2202000102	0.21
98	4101000111	0.42	252	2202000021	0.21
99	4100120010	0.21	253	2130000201	0.21
100	4100101110	0.21	254	2130000003	0.21
101	4020011100	0.42	255	2121001101	0.21
102	4020010110	0.21	256	2121001020	0.21
103	4020001110	0.42	257	2121000300	0.21
104	4020001101	0.21	258	2121000201	0.21
105	4020001020	0.21	259	2121000111	0.21
106	4020000120	0.21	260	2112002010	0.21
107	4020000102	0.42	261	2112001002	0.21
108	4020000012	0.21	262	2112000003	0.21
109	4011010110	0.21	263	2103001020	0.21
110	4011002100	0.21	264	2103000201	0.21
111	4011001110	0.21	265	2103000102	0.21
112	4011001101	0.21	266	2031000012	0.21
113	4011001020	0.21	267	1410011100	0.21
114	4011001011	0.21	268	1410002100	0.42
115	4011000210	0.21	269	1410000210	0.21
116	4011000201	0.21	270	1410000201	0.21
117	4011000111	0.21	271	1410000102	0.21

118	4011000012	0.21	272	1410000003	0.21
119	4011000003	0.21	273	1401000102	0.21
120	4002011010	0.21	274	1321000012	0.21
121	4002001101	0.21	275	1311000201	0.42
122	4002001020	0.21	276	1311000111	0.21
123	4002001011	0.21	277	1311000102	0.21
124	4002000012	0.21	278	1311000021	0.21
125	3300030000	0.21	279	1302001101	0.21
126	3300012000	0.42	280	1302000201	0.21
127	3300011100	0.21	281	1302000021	0.21
128	3300011010	0.42	282	1230010200	0.21
129	3300010110	0.21	283	1230000111	0.21
130	3300010101	0.21	284	1230000102	0.21
131	3300003000	0.21	285	1221001101	0.21
132	3300002100	0.21	286	1221000111	0.21
133	3300002010	0.42	287	1221000102	0.42
134	3300002001	0.21	288	1221000021	0.21
135	3300001110	0.42	289	1221000003	0.42
136	3300001101	0.21	290	1212001011	0.21
137	3300001020	0.42	291	1212000111	0.21
138	3300001002	0.21	292	1212000030	0.21
139	3300000201	0.63	293	1212000012	0.21
140	3300000111	0.21	294	1140000102	0.21
141	3210012000	0.21	295	1131002100	0.21
142	3210011100	0.83	296	1131000021	0.21
143	3210011010	0.21	297	1122000012	0.21
144	3210010101	0.42	298	1113000012	0.21
145	3210010020	0.21	299	1113000003	0.21
146	3210003000	0.21	300	1050000102	0.21
147	3210002100	0.21	301	1041001002	0.21
148	3210002010	0.21	302	0600010101	0.21
149	3210001200	0.42	303	0420000111	0.21
150	3210001110	0.42	304	0411000021	0.21

151	3210001101	0.21	305	0402000120	0.21
152	3210001020	0.21	306	0402000012	0.21
153	3210001011	0.63	307	0303000120	0.21
154	3210000201	0.21			

Table S11: Cu sites

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	6000020100	0.5	82	3210010110	0.5
2	6000012000	0.5	83	3210003000	0.5
3	6000011010	0.99	84	3210002100	0.5
4	6000003000	0.5	85	3210002010	1.49
5	6000001110	0.99	86	3210001110	0.99
6	6000000210	0.5	87	3210001020	0.5
7	6000000102	0.5	88	3210001011	0.5
8	6000000030	0.5	89	3210001002	0.5
9	5100012000	0.5	90	3210000201	0.5
10	5100011100	0.5	91	3210000120	0.5
11	5100011010	0.5	92	3210000111	0.99
12	5100010110	0.5	93	3210000102	0.99
13	5100002010	0.5	94	3210000012	0.99
14	5100001110	1.49	95	3210000003	0.5
15	5100001020	0.99	96	3201002100	0.5
16	5100000102	0.5	97	3201001110	0.5
17	5010021000	0.5	98	3201001020	0.5
18	5010020010	0.5	99	3201001011	0.5
19	5010011010	0.5	100	3201000201	0.5
20	5010010011	0.5	101	3201000111	1.98
21	5001002010	0.5	102	3201000102	0.5
22	5001000111	0.5	103	3201000012	0.5
23	5001000021	0.5	104	3120001011	0.5
24	4200012000	0.5	105	3120000102	0.99
25	4200011010	0.5	106	3120000012	0.5
26	4200010020	0.5	107	3120000003	0.5

27	4200010002	0.5	108	3111001020	0.5
28	4200003000	0.99	109	3111001002	0.99
29	4200002100	0.99	110	3111000030	0.5
30	4200002010	0.5	111	3111000003	0.99
31	4200001200	0.5	112	3030000003	0.5
32	4200001110	1.98	113	3021000003	0.5
33	4200001101	1.49	114	2400011010	0.5
34	4200001020	0.5	115	2400002010	0.5
35	4200001002	0.5	116	2400001101	0.5
36	4200000300	0.5	117	2400000111	0.5
37	4200000210	0.5	118	2310011001	0.5
38	4200000201	0.5	119	2310001101	0.5
39	4200000120	0.5	120	2310001020	0.5
40	4200000111	0.99	121	2310000201	0.5
41	4200000102	0.5	122	2310000021	0.5
42	4110021000	0.5	123	2301002010	0.5
43	4110002100	0.5	124	2301000111	0.5
44	4110001110	0.5	125	2301000003	0.5
45	4110001011	0.5	126	2300010002	0.5
46	4110001002	0.5	127	2220002100	0.5
47	4110000111	1.98	128	2220001200	0.5
48	4110000012	0.99	129	2220000201	0.5
49	4110000003	0.5	130	2220000003	0.5
50	4101012000	0.5	131	2211001011	0.5
51	4101011010	0.5	132	2211000210	0.5
52	4101002100	1.49	133	2211000120	0.5
53	4101002010	0.5	134	2211000102	0.5
54	4101002001	0.5	135	2211000021	0.5
55	4101001110	1.49	136	2211000012	1.49
56	4101001020	0.5	137	2211000003	0.5
57	4101000111	0.5	138	2202000111	0.5
58	4101000102	0.5	139	2202000021	0.5
59	4101000012	0.5	140	2202000012	0.99

60	4020001101	0.5	141	2130001101	0.5
61	4011010200	0.5	142	2130000012	0.5
62	4011002001	0.5	143	2121001002	0.5
63	3300021000	0.5	144	2121000111	0.5
64	3300011100	0.5	145	2121000102	0.99
65	3300011001	0.5	146	2112000012	0.5
66	3300010011	0.5	147	2112000003	0.5
67	3300010002	0.5	148	2040000003	0.5
68	3300001101	0.5	149	2031000003	0.5
69	3300001020	1.49	150	1410002010	0.5
70	3300001011	0.5	151	1401002100	0.5
71	3300001002	0.5	152	1320000111	0.5
72	3300000300	0.5	153	1311000201	0.5
73	3300000210	0.5	154	1311000030	0.5
74	3300000201	0.5	155	1311000003	0.5
75	3300000120	0.5	156	1230000111	0.5
76	3300000102	0.5	157	1203000201	0.5
77	3300000021	0.5	158	1131000003	0.5
78	3300000012	0.99	159	1041000003	0.5
79	3210021000	0.5	160	0330000102	0.5
80	3210020100	0.5	161	0321000111	0.5
81	3210010200	0.5	162	0222000102	0.5

Table S12: Pd sites

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	6000011100	0.93	50	3201002100	0.93
2	6000001020	0.93	51	3120001200	0.93
3	5100020010	0.93	52	3120000102	0.93
4	5100010110	0.93	53	3120000012	0.93
5	5100010101	0.93	54	3111002010	0.93
6	5100002001	0.93	55	3111000102	0.93
7	5100001110	1.87	56	3111000030	0.93
8	5100000003	1.87	57	3111000021	1.87
9	5010020100	0.93	58	3102002001	0.93

10	5001002100	0.93	59	3102000102	0.93
11	5001000102	0.93	60	3021001110	0.93
12	5001000003	0.93	61	2400011001	0.93
13	4200010101	0.93	62	2400001020	0.93
14	4200000111	0.93	63	2310001110	0.93
15	4200000030	0.93	64	2310000003	0.93
16	4200000021	0.93	65	2301010011	0.93
17	4200000012	0.93	66	2301002010	1.87
18	4110002001	0.93	67	2301001110	0.93
19	4110001011	0.93	68	2301001011	0.93
20	4110000111	0.93	69	2301000021	0.93
21	4110000102	0.93	70	2220001020	0.93
22	4110000021	0.93	71	2220000111	0.93
23	4101012000	1.87	72	2220000102	0.93
24	4101011100	0.93	73	2220000003	1.87
25	4101002010	0.93	74	2211002100	0.93
26	4101001101	0.93	75	2211001110	0.93
27	4101000111	0.93	76	2211000012	1.87
28	4020002010	0.93	77	2211000003	0.93
29	4020000030	0.93	78	2130001002	0.93
30	4020000021	0.93	79	2130000111	0.93
31	4020000003	0.93	80	2121001200	0.93
32	4011000201	0.93	81	2121000102	1.87
33	3300010101	0.93	82	2121000012	0.93
34	3300010020	0.93	83	2112000003	0.93
35	3300001110	0.93	84	2031000003	0.93
36	3300001020	0.93	85	1500000003	0.93
37	3300000210	0.93	86	1410000111	1.87
38	3300000120	0.93	87	1410000102	0.93
39	3300000111	0.93	88	1410000003	0.93
40	3300000102	0.93	89	1401010110	0.93
41	3300000030	0.93	90	1401000003	0.93
42	3300000021	0.93	91	1311000012	0.93

43	3300000012	0.93	92	1302001110	0.93
44	3210001200	0.93	93	1302000111	0.93
45	3210001020	1.87	94	1302000012	0.93
46	3210000210	0.93	95	1212000111	0.93
47	3210000201	0.93	96	1122000021	0.93
48	3210000111	0.93	97	0402000021	0.93
49	3210000102	0.93			

Cluster analysis on (211)-L1 surface (Table S13-S16):

Table S13: Ag site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster		Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	70000	0.59	36	32011	0.88		71	21202	0.15
2	61000	2.35	37	32002	0.15		72	21130	0.59
3	60100	0.29	38	31300	0.73		73	21121	0.29
4	60010	0.73	39	31210	1.61		74	21112	0.15
5	52000	5.13	40	31201	0.29		75	21031	0.15
6	51100	1.76	41	31120	1.76		76	20410	0.15
7	51010	4.25	42	31111	1.47		77	20401	0.15
8	50200	0.73	43	31102	0.15		78	20311	0.15
9	50110	0.73	44	31030	0.29		79	20140	0.15
10	50101	0.15	45	31021	0.88		80	20131	0.29
11	50020	0.73	46	30310	0.44		81	15010	0.15
12	43000	7.77	47	30220	0.44		82	14200	0.15
13	42100	3.67	48	30211	0.44		83	14110	0.73
14	42010	4.84	49	30130	0.73		84	14020	0.15
15	42001	0.29	50	30121	0.29		85	13300	0.29
16	41200	1.76	51	30112	0.29		86	13210	0.15
17	41110	3.67	52	30022	0.15		87	13201	0.15
18	41101	0.44	53	24100	1.91		88	13120	0.29
19	41020	2.64	54	24010	1.91		89	13111	0.88
20	41011	0.29	55	24001	0.15		90	12310	0.15
21	40300	0.29	56	23200	1.03		91	12301	0.15
22	40210	0.73	57	23110	1.47		92	12220	0.15

23	40201	0.44	58	23101	0.44		93	12202	0.15
24	40120	1.91	59	23020	1.32		94	12130	0.15
25	40111	0.44	60	23011	0.44		95	12121	0.15
26	40030	0.29	61	22300	0.73		96	12040	0.15
27	40021	0.29	62	22210	1.47		97	11410	0.15
28	34000	2.2	63	22201	0.73		98	11311	0.44
29	33100	5.13	64	22120	1.17		99	11230	0.29
30	33010	3.81	65	22111	0.59		100	11212	0.15
31	33001	0.15	66	22030	0.44		101	05101	0.15
32	32200	1.76	67	22021	0.29		102	04210	0.15
33	32110	2.93	68	21301	0.44		103	02221	0.15
34	32101	0.73	69	21220	0.15				
35	32020	2.49	70	21211	0.29				

Table S14: Au site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	70000	1.14	19	32101	1.14	37	22111	1.14
2	60010	5.68	20	32020	2.27	38	22102	1.14
3	52000	2.27	21	32011	1.14	39	21220	1.14
4	51100	1.14	22	32002	1.14	40	21130	1.14
5	51001	1.14	23	31300	1.14	41	20221	1.14
6	50101	1.14	24	31210	1.14	42	14200	1.14
7	43000	2.27	25	31120	1.14	43	14011	1.14
8	42100	3.41	26	31111	1.14	44	13300	1.14
9	42010	4.55	27	31030	1.14	45	13210	1.14
10	41200	2.27	28	30121	1.14	46	13201	1.14
11	41110	1.14	29	24100	3.41	47	13111	2.27
12	41020	1.14	30	24010	1.14	48	13021	1.14
13	41011	2.27	31	23200	3.41	49	12220	2.27
14	40210	1.14	32	23101	1.14	50	12211	1.14
15	33100	5.68	33	23020	3.41	51	12130	1.14
16	33010	1.14	34	22300	2.27	52	11311	1.14
17	32200	1.14	35	22210	3.41	53	11302	1.14

18	32110	6.82	36	22120	1.14	54	03310	1.14
----	-------	------	----	-------	------	----	-------	------

Table S15: Cu site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	61000	3.13	10	32200	3.13	19	23002	3.13
2	52000	3.13	11	32110	12.5	20	22111	3.13
3	43000	6.25	12	32101	6.25	21	21220	3.13
4	42100	3.13	13	32020	3.13	22	21112	3.13
5	42010	3.13	14	32002	3.13	23	13030	3.13
6	41110	3.13	15	31120	3.13	24	13012	3.13
7	34000	6.25	16	24010	3.13	25	05101	3.13
8	33100	3.13	17	23101	6.25			
9	33010	3.13	18	23011	3.13			

Table S16: Pd site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	40012	12.5	4	23200	12.5	7	21220	12.5
2	32101	12.5	5	23101	12.5	8	25000	12.5
3	31021	12.5	6	21310	12.5			

Cluster analysis on (211)-L2 surface (Table S17-S20):

Table S17: Ag site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	81000	0.88	53	42201	0.22	105	31050	0.22
2	80100	0.22	54	42120	2.19	106	30411	0.22
3	80010	0.22	55	42111	0.44	107	30312	0.44
4	72000	1.31	56	42030	1.31	108	26100	0.44
5	71100	0.44	57	42021	0.66	109	26010	0.22
6	71010	0.66	58	41310	0.44	110	25200	0.22
7	70110	0.22	59	41301	0.22	111	25110	0.44
8	63000	1.97	60	41220	1.09	112	25020	0.44
9	62100	2.63	61	41211	0.22	113	24210	0.44

10	62010	1.75	62	41202	0.22	114	24120	0.88
11	62001	0.22	63	41130	0.66	115	24111	0.22
12	61200	1.53	64	41121	0.88	116	24030	0.22
13	61110	1.97	65	41112	0.22	117	24021	0.44
14	61020	1.53	66	41031	0.22	118	23310	0.66
15	61011	0.22	67	40311	0.44	119	23301	0.22
16	60210	0.22	68	40230	0.22	120	23220	1.53
17	60120	0.44	69	40221	0.22	121	23202	0.22
18	60030	0.22	70	40140	0.22	122	23130	0.22
19	54000	1.31	71	40131	0.66	123	23112	0.44
20	53100	3.06	72	40104	0.22	124	23031	0.22
21	53010	3.5	73	35100	1.31	125	23022	0.22
22	53001	0.22	74	35010	0.88	126	22410	0.22
23	52200	1.97	75	34200	0.44	127	22311	0.22
24	52110	2.19	76	34110	2.19	128	22302	0.22
25	52101	0.22	77	34101	0.22	129	22221	0.44
26	52020	3.72	78	34020	0.88	130	22212	0.22
27	52011	0.44	79	34011	0.66	131	22122	0.22
28	51300	0.22	80	33300	0.22	132	22041	0.22
29	51210	1.97	81	33210	0.66	133	21420	0.22
30	51120	1.09	82	33201	0.66	134	21330	0.22

31	51111	0.22	83	33120	1.31	135	21321	0.22
32	51030	0.66	84	33111	0.88	136	21240	0.22
33	51021	0.22	85	33102	0.44	137	21231	0.22
34	51012	0.22	86	33030	0.66	138	21222	0.22
35	50310	0.22	87	33021	0.22	139	21132	0.22
36	50220	0.44	88	33003	0.22	140	21033	0.22
37	50211	0.44	89	32301	0.88	141	17100	0.22
38	50130	0.44	90	32220	1.09	142	17010	0.22
39	50121	0.22	91	32211	1.09	143	15300	0.22
40	50031	0.44	92	32202	0.44	144	15021	0.44
41	50022	0.22	93	32130	0.44	145	14310	0.22

42	45000	0.22	94	32031	0.22	146	14211	0.22
43	44100	2.41	95	32022	0.66	147	14121	0.22
44	44010	1.53	96	31320	0.44	148	14112	0.22
45	44001	0.22	97	31311	0.88	149	13302	0.22
46	43200	0.66	98	31230	0.66	150	13230	0.22
47	43110	2.19	99	31221	0.22	151	13221	0.22
48	43020	2.19	100	31212	0.88	152	12420	0.22
49	43011	0.66	101	31203	0.22	153	05400	0.22
50	43002	0.22	102	31140	0.44	154	05112	0.22
51	42300	0.44	103	31131	0.22			
52	42210	1.31	104	31122	0.88			

Table S18: Au site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	81000	0.4	45	41040	0.4	89	24012	0.4
2	80100	0.4	46	41031	0.79	90	23310	1.19
3	72000	0.4	47	40302	0.4	91	23301	0.79
4	71100	0.4	48	40212	0.4	92	23220	0.79
5	71010	0.79	49	40203	0.4	93	23211	0.79
6	63000	0.4	50	40131	0.4	94	23202	0.79
7	62010	0.79	51	40122	0.4	95	23130	0.79

8	61011	0.4	52	40041	0.4	96	23121	1.59
9	60120	0.4	53	35100	0.4	97	23112	0.4
10	54000	1.19	54	35010	0.4	98	23040	0.4
11	53100	1.98	55	34200	0.4	99	23022	0.4
12	53010	1.59	56	34101	0.4	100	22320	0.4
13	52200	1.59	57	34020	1.98	101	22311	0.4
14	52110	1.98	58	34011	0.4	102	22302	0.79
15	52020	0.4	59	33210	1.59	103	22221	1.19
16	51300	0.4	60	33201	1.19	104	22212	0.79
17	51210	0.79	61	33120	3.57	105	22140	0.4

18	51201	0.4	62	33111	1.59	106	21501	0.4
19	51111	0.4	63	33102	0.79	107	21411	0.4
20	51102	0.4	64	33030	0.4	108	21321	0.79
21	50211	0.4	65	32310	0.79	109	21240	0.4
22	50121	0.4	66	32301	0.4	110	21222	0.79
23	50112	0.4	67	32220	0.79	111	21213	0.4
24	45000	1.19	68	32202	0.4	112	21141	0.4
25	44010	0.4	69	32130	0.4	113	21123	0.4
26	43200	1.19	70	32121	0.79	114	20331	0.4
27	43110	2.78	71	32112	0.79	115	16110	0.79
28	43101	0.79	72	32031	0.4	116	14220	0.79
29	43020	3.17	73	31311	0.4	117	14130	0.4
30	42300	0.79	74	31302	0.4	118	13320	0.4
31	42210	1.19	75	31230	0.4	119	13302	0.4
32	42201	0.79	76	31221	0.79	120	13230	0.4
33	42120	2.78	77	31212	1.59	121	13221	0.79
34	42111	1.59	78	31131	0.79	122	13212	0.4
35	42102	0.4	79	31113	0.4	123	13131	0.4
36	42030	1.19	80	30321	0.4	124	13122	0.4
37	42021	1.19	81	30312	0.79	125	13113	0.4
38	42012	0.4	82	30222	0.4	126	12402	0.4
39	41310	0.4	83	30132	0.4	127	12330	0.4
40	41220	1.98	84	25200	0.79	128	12321	0.4

41	41211	0.79	85	24300	0.4	129	04410	0.4
42	41130	1.59	86	24210	0.4	130	04320	0.4
43	41121	1.19	87	24120	1.59	131	03312	0.4
44	41112	0.4	88	24111	0.79	132	03222	0.4

Table S19: Cu site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	52020	3.57	16	33030	3.57	31	23310	1.79

2	51111	3.57	17	32220	1.79	32	23202	3.57
3	51012	1.79	18	32211	3.57	33	23121	1.79
4	44100	5.36	19	32202	3.57	34	23112	1.79
5	43011	1.79	20	32112	1.79	35	22221	1.79
6	42210	3.57	21	32013	1.79	36	22212	3.57
7	42111	1.79	22	31311	3.57	37	21303	1.79
8	41220	1.79	23	31212	1.79	38	21213	1.79
9	41103	1.79	24	31203	3.57	39	20214	1.79
10	40221	1.79	25	31023	1.79	40	16110	1.79
11	34200	1.79	26	25101	1.79	41	14400	1.79
12	34110	1.79	27	24210	1.79	42	13311	1.79
13	34020	3.57	28	24111	1.79	43	13230	1.79
14	34011	1.79	29	24021	1.79			
15	33210	1.79	30	24003	1.79			

Table S20: Pd site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	53100	2.22	15	41211	2.22	29	30321	2.22
2	52110	2.22	16	41121	2.22	30	24201	4.44
3	52020	2.22	17	35100	2.22	31	23301	2.22
4	51111	2.22	18	33210	2.22	32	23220	4.44
5	51030	2.22	19	33120	2.22	33	23211	4.44
6	43110	2.22	20	33021	2.22	34	23013	2.22
7	43101	2.22	21	32301	2.22	35	22401	2.22

8	43020	2.22	22	32112	2.22	36	22302	2.22
9	42210	2.22	23	31302	4.44	37	22221	2.22
10	42120	2.22	24	31221	2.22	38	22104	2.22
11	42111	2.22	25	31212	2.22	39	13311	2.22
12	42102	4.44	26	31203	2.22	40	13113	2.22
13	42021	2.22	27	31122	2.22			
14	41220	2.22	28	31032	2.22			

Cluster analysis on (211)-L3 surface (Table S21-S25):

Table S21: Ag site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	91000	0.39	43	42130	0.39	85	25021	0.39
2	81100	0.39	44	42121	0.39	86	24310	1.97
3	73000	1.97	45	42112	0.39	87	24220	2.36
4	72100	0.39	46	42103	0.39	88	24211	0.79
5	71110	0.79	47	42040	0.39	89	24130	1.57
6	64000	1.18	48	41230	0.39	90	24112	0.79
7	63100	2.36	49	41221	0.39	91	24040	0.39
8	63010	0.79	50	41140	0.39	92	23320	0.79
9	62200	1.18	51	41131	0.79	93	23230	0.39
10	62110	0.79	52	41050	0.39	94	23131	0.39
11	62020	1.18	53	40231	0.39	95	23122	0.39
12	61300	0.79	54	40222	0.39	96	23032	0.39
13	61210	0.39	55	36010	0.79	97	22411	0.39
14	61021	0.39	56	35110	0.39	98	22330	0.79
15	55000	0.39	57	35020	0.79	99	22240	0.39
16	54100	1.97	58	34300	0.79	100	22222	0.39
17	54010	1.97	59	34210	1.18	101	22213	0.39
18	53200	0.79	60	34120	3.15	102	22150	0.39
19	53110	3.15	61	34030	0.39	103	22132	0.39
20	53020	2.76	62	33220	1.57	104	21223	0.39
21	53011	0.79	63	33211	0.79	105	21214	0.39
22	52300	0.39	64	33130	1.57	106	21151	0.39
23	52210	1.18	65	33121	0.79	107	15220	0.39
24	52120	1.97	66	33112	0.39	108	15211	0.39
25	52111	0.79	67	32401	0.39	109	14221	0.39
26	52030	0.79	68	32320	1.57	110	14212	0.39
27	51121	0.39	69	32221	0.79	111	14131	0.39
28	51040	0.39	70	32212	0.39	112	13411	0.39
29	46000	0.79	71	32140	0.39	113	13213	0.39
30	45100	1.18	72	31411	0.39	114	13132	0.39

31	45010	1.18	73	31321	0.79	115	12430	0.39
32	44200	1.18	74	31312	0.39	116	12322	0.39
33	44110	3.15	75	31222	0.39	117	12223	0.39
34	44020	1.18	76	31213	0.39	118	11440	0.39
35	43210	1.57	77	31123	0.39	119	11332	0.79
36	43201	0.39	78	26200	0.39	120	100000	0.39
37	43120	1.57	79	26110	1.18	121	01414	0.39
38	43111	1.18	80	25201	0.39			
39	43030	2.76	81	25120	0.79			
40	43021	0.79	82	25111	0.39			
41	42310	0.79	83	25102	0.79			
42	42220	1.57	84	25030	0.79			

Table S22: Au site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	73000	0.67	57	33301	0.33	113	23113	0.67
2	72100	0.67	58	33220	0.67	114	23050	0.33
3	63100	1.33	59	33211	0.33	115	23023	0.33
4	63010	0.67	60	33130	2	116	22420	0.67
5	62020	0.67	61	33121	0.67	117	22321	0.67
6	54100	1.33	62	33112	1.33	118	22312	0.33
7	54010	1	63	33040	0.67	119	22303	0.33
8	53200	1	64	33031	0.33	120	22231	0.33
9	53110	1	65	33022	0.33	121	22222	0.33
10	53101	0.33	66	32401	0.33	122	22141	1.33
11	53020	1	67	32311	0.67	123	22123	0.67
12	52210	0.67	68	32221	1	124	22051	0.33
13	52201	0.33	69	32212	1.33	125	21412	1.33
14	52120	1	70	32203	0.67	126	21331	0.33
15	52030	0.33	71	32140	0.33	127	21322	1.67
16	51220	0.67	72	32131	0.33	128	21241	0.67
17	51211	0.33	73	32122	0.67	129	21232	0.33

18	51130	0.33	74	32104	0.33	130	20404	0.33
19	51112	0.33	75	32050	0.33	131	20341	0.33
20	51031	0.33	76	32032	0.33	132	20332	0.33
21	45100	1	77	32023	0.33	133	20314	0.33
22	44200	0.67	78	31420	0.67	134	20044	0.33
23	44110	1.33	79	31330	0.33	135	16210	0.33
24	44020	1.33	80	31321	0.33	136	15301	0.33
25	43300	0.33	81	31303	0.67	137	15220	0.33
26	43210	1	82	31240	0.33	138	15130	0.33
27	43201	0.33	83	31222	0.33	139	15112	0.67
28	43120	1.67	84	31213	0.67	140	14311	0.33
29	43111	0.33	85	31150	0.67	141	14230	0.33
30	43030	0.67	86	31141	0.67	142	14212	0.67
31	42220	1	87	31123	0.67	143	14140	0.33
32	42211	1	88	31114	0.33	144	14113	0.33
33	42202	1	89	31042	0.33	145	13420	0.33
34	42130	1	90	31033	0.33	146	13411	0.67
35	42121	0.33	91	30331	0.33	147	13330	0.67
36	42112	0.33	92	30322	0.33	148	13321	0.67
37	42040	1	93	30142	0.67	149	13312	0.67
38	42031	0.67	94	25300	0.33	150	13240	1
39	42022	0.33	95	25120	0.33	151	13213	0.33
40	41230	0.33	96	25030	0.33	152	13132	0.33
41	41212	0.33	97	24310	0.67	153	13123	0.33
42	41140	0.33	98	24220	0.67	154	13114	0.33
43	41104	0.33	99	24211	0.33	155	12520	0.33
44	40321	0.33	100	24130	0.33	156	12511	0.33
45	40231	0.33	101	24121	1.33	157	12430	0.33
46	40213	0.67	102	24040	0.33	158	12421	0.33
47	36100	0.33	103	23410	1	159	12412	0.33
48	36010	0.33	104	23401	0.67	160	12403	0.33
49	35200	0.33	105	23311	1	161	12331	1
50	35110	0.67	106	23302	0.67	162	11323	0.33

51	35020	0.33	107	23230	2	163	06130	0.33
52	34210	1.67	108	23221	0.33	164	02512	0.33
53	34120	1.33	109	23212	0.33	165	02251	0.33
54	34111	0.67	110	23203	0.33	166	01423	0.33
55	34030	1.33	111	23140	0.67			
56	33310	1.67	112	23131	0.33			

Table S23: Cu site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	63010	0.75	36	32140	2.26	71	22312	0.75
2	54010	0.75	37	32131	0.75	72	22231	0.75
3	53011	0.75	38	32122	0.75	73	22222	3.01
4	52030	0.75	39	32023	0.75	74	22213	1.5
5	51202	0.75	40	31312	0.75	75	22132	0.75
6	51040	0.75	41	31231	0.75	76	22123	0.75
7	50140	0.75	42	31222	1.5	77	22114	1.5
8	44020	1.5	43	31213	0.75	78	22033	0.75
9	43111	1.5	44	31141	0.75	79	22024	0.75
10	43021	1.5	45	31114	0.75	80	21412	0.75
11	43012	0.75	46	30403	0.75	81	21322	2.26
12	42112	0.75	47	30322	1.5	82	21313	0.75
13	42022	0.75	48	30304	0.75	83	21232	0.75
14	41230	0.75	49	30232	0.75	84	21115	0.75
15	41113	0.75	50	30223	0.75	85	21043	0.75
16	40303	0.75	51	30034	0.75	86	21034	0.75
17	40231	0.75	52	26200	0.75	87	20431	0.75
18	40132	0.75	53	26110	1.5	88	20323	0.75
19	40114	0.75	54	26020	0.75	89	20314	0.75
20	34300	0.75	55	25210	1.5	90	15121	0.75
21	34210	1.5	56	24310	1.5	91	15103	0.75
22	34120	0.75	57	24220	1.5	92	15031	1.5
23	34111	0.75	58	24211	0.75	93	14131	1.5
24	34030	1.5	59	24121	0.75	94	14032	0.75

25	33310	0.75	60	23401	0.75	95	13213	0.75
26	33301	0.75	61	23320	0.75	96	13132	1.5
27	33220	2.26	62	23302	1.5	97	12430	0.75
28	33211	1.5	63	23230	0.75	98	12421	0.75
29	33202	0.75	64	23221	0.75	99	12412	0.75
30	32320	0.75	65	23203	0.75	100	12331	0.75
31	32311	0.75	66	23122	0.75	101	12250	0.75
32	32302	0.75	67	23032	1.5	102	12133	0.75
33	32230	0.75	68	23023	0.75	103	02233	0.75
34	32221	0.75	69	22510	0.75	104	01324	0.75
35	32212	0.75	70	22321	1.5			

Table S24: Pd site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	82000	0.87	31	32230	0.87	61	22051	0.87
2	54100	1.74	32	32212	0.87	62	21511	0.87
3	52210	0.87	33	32131	0.87	63	21322	0.87
4	52201	1.74	34	32122	0.87	64	21313	0.87
5	52120	0.87	35	32032	0.87	65	21223	2.61
6	46000	0.87	36	31330	0.87	66	21214	0.87
7	44110	2.61	37	31312	0.87	67	21205	0.87
8	44020	0.87	38	31213	1.74	68	20422	0.87
9	43120	0.87	39	31051	0.87	69	16021	0.87
10	43111	1.74	40	31042	0.87	70	15112	0.87
11	42220	1.74	41	30322	0.87	71	15103	0.87
12	42112	0.87	42	30025	0.87	72	14311	0.87
13	42103	1.74	43	26110	0.87	73	14230	0.87
14	42013	0.87	44	25111	0.87	74	14212	0.87
15	41230	0.87	45	25012	0.87	75	14203	0.87
16	41221	0.87	46	24220	1.74	76	14140	1.74
17	41140	1.74	47	24211	0.87	77	13411	0.87

18	41113	0.87	48	24202	0.87	78	13321	1.74
----	-------	------	----	-------	------	----	-------	------

19	40330	0.87	49	24130	1.74	79	13312	0.87
20	40321	0.87	50	24040	0.87	80	13303	0.87
21	35110	0.87	51	23410	0.87	81	12340	0.87
22	35020	0.87	52	23140	0.87	82	12322	0.87
23	34030	0.87	53	23122	0.87	83	12205	0.87
24	34021	0.87	54	23032	0.87	84	11341	0.87
25	33220	1.74	55	22312	3.48	85	11323	0.87
26	33211	0.87	56	22303	1.74	86	06121	0.87
27	33202	0.87	57	22231	0.87	87	05113	0.87
28	33130	1.74	58	22213	2.61	88	04312	0.87
29	33121	0.87	59	22123	1.74	89	04132	0.87
30	32311	2.61	60	22105	0.87			

Table S25: Pt site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	31312	12.5	4	14230	12.5	7	02413	12.5
2	23131	12.5	5	11512	12.5	8	01234	12.5
3	21223	12.5	6	11413	12.5			

Cluster analysis on Spherical nanoparticles (Table S26-S29):

Table S26: Ag site

Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster
1	90000	0.03	178	42111	0.08	355	26110	0.05
2	81000	0.13	179	42110	1.01	356	26100	0.03
3	80100	0.03	180	42102	0.08	357	26010	0.05
4	80020	0.03	181	42101	0.13	358	25210	0.03
5	80010	0.05	182	42100	1.68	359	25200	0.05
6	80000	0.03	183	42040	0.05	360	25120	0.03
7	74000	0.03	184	42031	0.03	361	25110	0.1

8	73010	0.03	185	42030	0.23	362	25100	0.13
9	73000	0.03	186	42020	0.83	363	25020	0.15
10	72100	0.03	187	42011	0.13	364	25011	0.03
11	72020	0.03	188	42010	1.89	365	25010	0.13
12	72010	0.08	189	42002	0.03	366	25000	0.39
13	72000	0.57	190	42001	0.13	367	24320	0.03
14	71200	0.03	191	42000	2.71	368	24310	0.03
15	71100	0.26	192	41311	0.03	369	24210	0.1
16	71030	0.03	193	41310	0.05	370	24200	0.13
17	71020	0.05	194	41301	0.03	371	24120	0.1
18	71010	0.36	195	41300	0.05	372	24111	0.05
19	71001	0.03	196	41221	0.03	373	24110	0.15
20	71000	0.08	197	41220	0.03	374	24101	0.03
21	70200	0.03	198	41211	0.08	375	24100	0.41
22	70110	0.03	199	41210	0.18	376	24030	0.05
23	70030	0.03	200	41201	0.05	377	24020	0.1
24	70020	0.1	201	41200	0.15	378	24011	0.05
25	70000	0.03	202	41130	0.13	379	24010	0.96
26	64100	0.03	203	41122	0.03	380	24001	0.1
27	64000	0.08	204	41121	0.1	381	24000	1.11
28	63110	0.03	205	41120	0.36	382	23330	0.03

29	63101	0.03	206	41112	0.03	383	23310	0.05
30	63100	0.08	207	41111	0.13	384	23300	0.08
31	63010	0.21	208	41110	0.93	385	23220	0.05
32	63000	0.8	209	41103	0.03	386	23211	0.05
33	62120	0.03	210	41102	0.05	387	23210	0.41
34	62110	0.05	211	41101	0.08	388	23201	0.05
35	62101	0.03	212	41100	0.65	389	23200	0.23
36	62100	0.7	213	41050	0.03	390	23140	0.03
37	62020	0.1	214	41040	0.13	391	23121	0.03
38	62010	1.08	215	41031	0.03	392	23120	0.28
39	62001	0.03	216	41030	0.18	393	23111	0.08
40	62000	0.57	217	41021	0.05	394	23110	0.93

41	61220	0.03	218	41020	0.62	395	23102	0.08
42	61210	0.03	219	41012	0.03	396	23101	0.15
43	61200	0.05	220	41011	0.03	397	23100	1.08
44	61120	0.03	221	41010	1.86	398	23030	0.1
45	61110	0.46	222	41002	0.05	399	23022	0.03
46	61100	0.21	223	40402	0.03	400	23021	0.03
47	61030	0.03	224	40310	0.05	401	23020	0.75
48	61020	0.67	225	40302	0.03	402	23011	0.08
49	61011	0.03	226	40301	0.03	403	23010	1.45
50	61010	0.28	227	40300	0.05	404	23002	0.03
51	61003	0.03	228	40221	0.05	405	23001	0.03
52	61002	0.03	229	40220	0.1	406	23000	0.05
53	61001	0.05	230	40212	0.03	407	22311	0.03
54	61000	0.23	231	40211	0.05	408	22301	0.08
55	60210	0.05	232	40210	0.08	409	22300	0.08
56	60200	0.03	233	40141	0.03	410	22230	0.03
57	60120	0.21	234	40130	0.03	411	22220	0.41
58	60111	0.08	235	40121	0.03	412	22211	0.03
59	60102	0.03	236	40120	0.18	413	22210	0.23
60	60100	0.08	237	40111	0.13	414	22201	0.05

61	60030	0.05	238	40110	0.21	415	22200	0.13
62	60020	0.08	239	40101	0.03	416	22130	0.1
63	60012	0.05	240	40041	0.03	417	22121	0.1
64	60011	0.03	241	40030	0.15	418	22120	0.57
65	60010	0.05	242	40020	0.31	419	22111	0.03
66	60001	0.03	243	40000	0.03	420	22110	0.65
67	60000	0.18	244	36100	0.03	421	22101	0.08
68	55100	0.03	245	36000	0.15	422	22030	0.31
69	55000	0.05	246	35300	0.05	423	22021	0.05
70	54110	0.03	247	35200	0.03	424	22020	0.98
71	54100	0.1	248	35110	0.05	425	22011	0.1
72	54010	0.1	249	35100	0.34	426	22010	0.05
73	54000	0.62	250	35010	0.39	427	22001	0.03

74	53200	0.05	251	35001	0.05	428	22000	0.1
75	53120	0.03	252	35000	0.15	429	21401	0.03
76	53110	0.18	253	34300	0.03	430	21320	0.03
77	53100	0.46	254	34200	0.18	431	21311	0.03
78	53030	0.03	255	34120	0.08	432	21310	0.03
79	53020	0.18	256	34111	0.03	433	21301	0.03
80	53010	1.11	257	34110	0.46	434	21221	0.03
81	53001	0.05	258	34101	0.08	435	21220	0.05
82	53000	0.52	259	34100	0.31	436	21211	0.03
83	52210	0.03	260	34030	0.03	437	21210	0.13
84	52200	0.36	261	34020	0.44	438	21201	0.03
85	52120	0.28	262	34011	0.05	439	21140	0.1
86	52110	0.77	263	34010	0.65	440	21131	0.08
87	52101	0.13	264	34001	0.05	441	21130	0.05
88	52100	0.57	265	34000	0.9	442	21122	0.03
89	52030	0.1	266	33210	0.26	443	21121	0.03
90	52021	0.03	267	33201	0.03	444	21120	0.21
91	52020	1.16	268	33200	0.34	445	21040	0.03
92	52011	0.15	269	33130	0.1	446	21030	0.18

93	52010	1.16	270	33120	0.41	447	21022	0.03
94	52001	0.03	271	33111	0.1	448	21021	0.05
95	52000	0.98	272	33110	0.85	449	21020	0.03
96	51310	0.05	273	33102	0.03	450	20230	0.03
97	51301	0.03	274	33101	0.15	451	20221	0.03
98	51300	0.03	275	33100	1.16	452	20220	0.03
99	51220	0.03	276	33030	0.21	453	20141	0.03
100	51211	0.05	277	33021	0.05	454	20140	0.03
101	51210	0.08	278	33020	0.54	455	20131	0.03
102	51201	0.08	279	33011	0.1	456	20110	0.03
103	51200	0.15	280	33010	2.12	457	20040	0.03
104	51121	0.03	281	33002	0.03	458	18000	0.03
105	51120	0.31	282	33001	0.1	459	16200	0.05
106	51111	0.13	283	33000	2.71	460	16110	0.03

107	51110	0.31	284	32400	0.03	461	16011	0.03
108	51102	0.05	285	32310	0.05	462	16000	0.08
109	51101	0.05	286	32300	0.08	463	15110	0.1
110	51100	0.49	287	32221	0.03	464	15101	0.03
111	51040	0.03	288	32220	0.23	465	15100	0.1
112	51030	0.28	289	32211	0.05	466	15030	0.03
113	51020	0.44	290	32210	0.26	467	15010	0.23
114	51013	0.03	291	32201	0.08	468	15000	0.18
115	51012	0.03	292	32200	0.54	469	14310	0.03
116	51011	0.05	293	32130	0.28	470	14300	0.03
117	51010	0.93	294	32121	0.05	471	14210	0.05
118	51001	0.03	295	32120	0.49	472	14200	0.05
119	51000	1.16	296	32112	0.03	473	14130	0.03
120	50220	0.08	297	32111	0.26	474	14120	0.03
121	50210	0.03	298	32110	1.47	475	14112	0.05
122	50201	0.03	299	32102	0.03	476	14111	0.03
123	50200	0.03	300	32101	0.1	477	14110	0.21
124	50130	0.05	301	32100	1.14	478	14101	0.03

125	50121	0.05	302	32040	0.08	479	14100	0.18
126	50120	0.08	303	32031	0.03	480	14021	0.03
127	50111	0.08	304	32030	0.21	481	14020	0.23
128	50110	0.15	305	32021	0.13	482	14010	0.36
129	50102	0.03	306	32020	1.19	483	13310	0.03
130	50101	0.03	307	32012	0.03	484	13300	0.05
131	50100	0.13	308	32011	0.05	485	13220	0.03
132	50040	0.03	309	32010	2.94	486	13211	0.03
133	50030	0.13	310	32001	0.05	487	13210	0.21
134	50021	0.03	311	31401	0.03	488	13201	0.03
135	50020	0.05	312	31320	0.05	489	13200	0.1
136	50011	0.03	313	31311	0.03	490	13140	0.03
137	50010	0.36	314	31310	0.05	491	13130	0.05
138	45100	0.05	315	31301	0.03	492	13121	0.03
139	45010	0.1	316	31300	0.03	493	13120	0.41

140	45000	0.34	317	31230	0.05	494	13111	0.03
141	44200	0.05	318	31222	0.03	495	13110	0.31
142	44110	0.1	319	31221	0.03	496	13101	0.08
143	44100	0.34	320	31220	0.1	497	13100	0.03
144	44020	0.18	321	31211	0.23	498	13040	0.03
145	44010	0.65	322	31210	0.23	499	13030	0.05
146	44002	0.03	323	31201	0.03	500	13022	0.03
147	44001	0.03	324	31200	0.23	501	13021	0.03
148	44000	0.72	325	31140	0.03	502	13020	0.26
149	43211	0.03	326	31131	0.03	503	13011	0.03
150	43210	0.03	327	31130	0.15	504	13000	0.13
151	43201	0.03	328	31122	0.03	505	12303	0.03
152	43200	0.39	329	31121	0.08	506	12220	0.03
153	43120	0.03	330	31120	0.31	507	12211	0.03
154	43111	0.03	331	31111	0.05	508	12210	0.08
155	43110	0.88	332	31110	0.62	509	12130	0.03
156	43101	0.08	333	31101	0.03	510	12122	0.05

157	43100	0.57	334	31100	0.03	511	12120	0.03
158	43030	0.08	335	31031	0.03	512	12030	0.08
159	43021	0.03	336	31030	0.13	513	12022	0.03
160	43020	0.77	337	31022	0.03	514	12010	0.05
161	43011	0.08	338	31021	0.05	515	11410	0.03
162	43010	0.8	339	31020	0.67	516	11221	0.03
163	43002	0.03	340	31012	0.03	517	11220	0.08
164	43001	0.08	341	31011	0.03	518	11131	0.03
165	43000	1.65	342	31010	0.05	519	11130	0.03
166	42410	0.03	343	31000	0.03	520	11121	0.03
167	42310	0.03	344	30320	0.05	521	11050	0.03
168	42301	0.03	345	30210	0.03	522	05200	0.03
169	42300	0.05	346	30132	0.03	523	05100	0.05
170	42210	0.18	347	30130	0.05	524	05010	0.05
171	42202	0.03	348	30121	0.03	525	04210	0.05
172	42201	0.03	349	30120	0.21	526	04200	0.03

173	42200	0.34	350	30111	0.03	527	03230	0.03
174	42130	0.08	351	30030	0.08	528	03040	0.03
175	42121	0.1	352	30021	0.03	529	02121	0.03
176	42120	0.49	353	27200	0.03			
177	42112	0.03	354	27000	0.03			

Table S27: Au site

Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster	Cluster No	Cluster	% Cluster
1	83000	0.11	123	42130	0.22	245	31211	0.22
2	82100	0.11	124	42121	0.11	246	31210	0.11
3	82010	0.11	125	42120	1.75	247	31200	0.11
4	81000	0.11	126	42111	0.44	248	31130	0.22
5	73100	0.11	127	42110	0.55	249	31121	0.11
6	72000	0.55	128	42103	0.11	250	31120	0.22
7	71100	0.44	129	42101	0.22	251	31110	0.11

8	71030	0.11	130	42100	0.66	252	31030	0.33
9	71010	0.55	131	42040	0.11	253	31020	0.11
10	71000	0.11	132	42030	0.88	254	31011	0.22
11	70121	0.11	133	42021	0.22	255	30401	0.11
12	70030	0.11	134	42020	0.98	256	30311	0.11
13	64000	0.11	135	42012	0.33	257	30230	0.11
14	63100	0.11	136	42011	0.11	258	30223	0.11
15	63010	0.33	137	42010	0.44	259	30221	0.22
16	63000	1.09	138	42001	0.11	260	30220	0.22
17	62110	0.11	139	42000	0.33	261	30142	0.11
18	62101	0.11	140	41400	0.11	262	30123	0.11
19	62100	0.77	141	41320	0.11	263	26010	0.11
20	62030	0.11	142	41310	0.22	264	25300	0.11
21	62020	0.22	143	41230	0.11	265	25200	0.11
22	62010	1.53	144	41220	0.44	266	25120	0.11
23	62000	0.22	145	41211	0.55	267	25110	0.33
24	61130	0.11	146	41210	0.11	268	25101	0.11

25	61120	0.22	147	41201	0.11	269	25100	0.22
26	61110	0.22	148	41131	0.22	270	25000	0.11
27	61100	0.22	149	41130	0.33	271	24300	0.44
28	61030	0.11	150	41121	0.22	272	24210	0.33
29	61020	0.88	151	41120	0.33	273	24201	0.11
30	61012	0.11	152	41111	0.11	274	24200	0.11
31	61011	0.22	153	41110	0.55	275	24120	0.33
32	60130	0.11	154	41100	0.11	276	24111	0.22
33	60120	0.22	155	41040	0.11	277	24110	0.33
34	60111	0.11	156	41031	0.11	278	24100	0.11
35	60110	0.11	157	41030	0.44	279	24030	0.33
36	60103	0.11	158	41022	0.11	280	24021	0.11
37	60030	0.44	159	41020	0.33	281	24020	0.22
38	60021	0.11	160	41010	0.33	282	24012	0.22
39	60020	0.11	161	41002	0.11	283	24010	0.33

40	55010	0.11	162	40212	0.11	284	24001	0.22
41	55000	0.11	163	40140	0.11	285	24000	0.44
42	54100	0.33	164	40120	0.11	286	23320	0.11
43	54010	0.55	165	40111	0.11	287	23221	0.11
44	54000	0.55	166	40040	0.11	288	23220	0.33
45	53210	0.11	167	40020	0.11	289	23211	0.11
46	53200	0.11	168	36010	0.11	290	23210	0.44
47	53120	0.11	169	35200	0.11	291	23202	0.11
48	53110	0.55	170	35110	0.44	292	23200	0.11
49	53101	0.11	171	35100	0.11	293	23140	0.11
50	53100	0.55	172	35020	0.11	294	23130	0.11
51	53020	0.33	173	35000	0.11	295	23120	0.33
52	53010	1.97	174	34300	0.11	296	23111	0.22
53	53000	0.44	175	34210	0.44	297	23110	0.88
54	52210	0.55	176	34201	0.11	298	23100	0.22
55	52200	0.33	177	34200	0.66	299	23031	0.11
56	52120	0.22	178	34120	0.44	300	23030	0.22
57	52110	1.86	179	34111	0.11	301	23021	0.11

58	52101	0.22	180	34110	0.98	302	23020	0.33
59	52100	0.22	181	34101	0.11	303	23012	0.11
60	52030	0.22	182	34100	0.33	304	23011	0.22
61	52020	1.31	183	34030	0.22	305	23010	0.11
62	52011	0.11	184	34021	0.11	306	23001	0.11
63	52010	0.44	185	34020	0.77	307	22320	0.11
64	52001	0.11	186	34011	0.11	308	22310	0.22
65	52000	0.11	187	34010	0.33	309	22300	0.11
66	51211	0.22	188	34000	0.66	310	22230	0.33
67	51210	0.22	189	33300	0.22	311	22221	0.11
68	51201	0.11	190	33221	0.11	312	22220	0.11
69	51200	0.11	191	33220	0.22	313	22211	0.22
70	51130	0.33	192	33211	0.22	314	22210	0.22
71	51120	0.66	193	33210	0.98	315	22200	0.11

72	51111	0.11	194	33201	0.11	316	22140	0.11
73	51110	0.22	195	33130	0.22	317	22130	0.11
74	51102	0.11	196	33120	0.77	318	22122	0.11
75	51100	0.22	197	33110	0.44	319	22121	0.22
76	51040	0.11	198	33102	0.11	320	22120	0.66
77	51030	0.77	199	33100	0.77	321	22112	0.11
78	51020	0.11	200	33040	0.11	322	22111	0.11
79	51011	0.11	201	33030	0.44	323	22110	0.11
80	51010	0.22	202	33021	0.11	324	22031	0.11
81	50400	0.11	203	33020	0.44	325	22030	0.11
82	50230	0.11	204	33011	0.11	326	22020	0.11
83	50220	0.44	205	33010	0.88	327	22012	0.11
84	50211	0.11	206	33000	0.22	328	22011	0.11
85	50210	0.22	207	32320	0.11	329	21320	0.11
86	50130	0.22	208	32311	0.11	330	21221	0.11
87	50022	0.22	209	32310	0.22	331	21212	0.11
88	50020	0.11	210	32302	0.22	332	21210	0.22
89	46010	0.11	211	32301	0.11	333	21130	0.22
90	45100	0.11	212	32300	0.11	334	21122	0.11

91	45010	0.44	213	32230	0.11	335	21113	0.11
92	45000	0.44	214	32221	0.11	336	21110	0.11
93	44200	0.22	215	32220	0.33	337	21031	0.22
94	44110	0.44	216	32211	0.66	338	16110	0.11
95	44100	1.2	217	32210	0.88	339	15210	0.11
96	44030	0.11	218	32201	0.11	340	15021	0.11
97	44020	0.44	219	32140	0.22	341	15010	0.11
98	44010	0.98	220	32130	0.55	342	14220	0.11
99	44001	0.11	221	32121	0.33	343	14202	0.11
100	44000	0.66	222	32120	0.98	344	14200	0.44
101	43300	0.11	223	32112	0.22	345	14112	0.11
102	43220	0.22	224	32111	0.22	346	14111	0.11
103	43210	0.33	225	32110	0.44	347	14110	0.77

104	43201	0.11	226	32100	0.22	348	14101	0.11
105	43200	0.55	227	32050	0.11	349	14100	0.11
106	43120	1.09	228	32040	0.11	350	14020	0.22
107	43111	0.33	229	32031	0.22	351	14010	0.11
108	43110	1.75	230	32030	0.33	352	13320	0.11
109	43101	0.11	231	32022	0.11	353	13310	0.11
110	43100	0.33	232	32021	0.33	354	13220	0.22
111	43030	0.66	233	32020	0.33	355	13202	0.11
112	43020	1.09	234	32013	0.11	356	13201	0.22
113	43011	0.22	235	32012	0.11	357	13140	0.11
114	43010	0.77	236	32010	0.55	358	13120	0.11
115	43000	0.22	237	31410	0.11	359	13110	0.11
116	42312	0.11	238	31400	0.11	360	13020	0.22
117	42310	0.11	239	31310	0.11	361	12211	0.11
118	42220	0.33	240	31301	0.11	362	12120	0.11
119	42211	0.22	241	31231	0.22	363	04110	0.11
120	42210	0.44	242	31230	0.11	364	04012	0.11
121	42201	0.22	243	31221	0.11	365	03121	0.11
122	42200	0.55	244	31220	0.11			

Table S28: Cu site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	81000	0.91	32	42120	0.91	63	31200	0.91
2	63010	0.91	33	42030	0.91	64	31120	0.91
3	62100	0.91	34	42020	0.91	65	31110	0.91
4	62010	1.82	35	41110	0.91	66	30500	0.91
5	62010	0.91	36	41101	0.91	67	26110	0.91
6	61020	0.91	37	40311	0.91	68	25201	0.91
7	61002	0.91	38	36020	0.91	69	25110	0.91
8	54010	0.91	39	35010	0.91	70	25031	0.91
9	54000	0.91	40	34200	0.91	71	25000	1.82
10	53100	0.91	41	34110	0.91	72	24300	0.91
11	53010	3.64	42	34110	0.91	73	24200	0.91
12	53000	0.91	43	34001	0.91	74	24101	1.82
13	52210	0.91	44	34000	1.82	75	24031	0.91
14	52120	0.91	45	33210	0.91	76	24020	0.91
15	52110	2.73	46	33110	1.82	77	24010	2.73
16	52100	0.91	47	33102	0.91	78	23320	0.91
17	52002	0.91	48	33101	0.91	79	23101	0.91
18	51121	0.91	49	33100	0.91	80	23020	1.82
19	51012	0.91	50	33030	0.91	81	23010	0.91
20	50112	0.91	51	33021	1.82	82	23001	0.91
21	50100	0.91	52	33011	0.91	83	22120	0.91
22	45010	1.82	53	33010	0.91	84	22040	0.91
23	44101	0.91	54	33000	0.91	85	21031	0.91
24	44100	0.91	55	32220	0.91	86	16120	0.91
25	44010	0.91	56	32210	0.91	87	16020	0.91
26	43200	0.91	57	32111	0.91	88	14110	0.91
27	43110	1.82	58	32101	0.91	89	14010	0.91
28	43100	0.91	59	32100	0.91	90	13220	0.91
29	43020	2.73	60	32030	0.91	91	13210	0.91
30	43010	0.91	61	32010	0.91			

31	42210	1.82	62	31220	0.91			
----	-------	------	----	-------	------	--	--	--

Table S29: Pd site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	70200	0.98	30	42211	0.98	59	32120	0.98
2	61110	0.98	31	42121	0.98	60	32111	0.98
3	61021	0.98	32	42120	0.98	61	32110	0.98
4	60202	0.98	33	42110	0.98	62	32030	0.98
5	54110	0.98	34	42030	0.98	63	32012	0.98
6	54010	1.96	35	41121	1.96	64	31220	0.98
7	54000	0.98	36	41110	0.98	65	31032	0.98
8	53120	0.98	37	40033	0.98	66	31030	0.98
9	53110	1.96	38	36100	0.98	67	31024	0.98
10	53010	1.96	39	36010	0.98	68	31020	0.98
11	52130	0.98	40	35110	1.96	69	25100	0.98
12	52110	0.98	41	35100	1.96	70	24220	0.98
13	52102	0.98	42	35010	0.98	71	24210	0.98
14	52100	0.98	43	35000	1.96	72	24120	0.98
15	52030	0.98	44	34200	0.98	73	24110	0.98
16	52020	0.98	45	34120	0.98	74	24100	0.98
17	52011	0.98	46	34110	0.98	75	23230	0.98
18	52010	1.96	47	34020	3.92	76	23220	0.98
19	51111	0.98	48	34012	0.98	77	23121	0.98
20	50130	0.98	49	34011	0.98	78	23021	0.98
21	45100	1.96	50	34010	0.98	79	22221	0.98
22	44200	0.98	51	34000	0.98	80	22130	0.98
23	44100	1.96	52	33300	0.98	81	21113	0.98
24	44020	1.96	53	33110	1.96	82	15100	0.98
25	44010	0.98	54	33101	1.96	83	14230	0.98
26	44000	0.98	55	32220	0.98	84	14130	0.98
27	43110	0.98	56	32210	0.98	85	2110	0.98
28	43020	0.98	57	32122	0.98			

29	43011	0.98	58	32121	1.96			
----	-------	------	----	-------	------	--	--	--

Cluster analysis on Cubical nanoparticles (Table S30-S33):

Table S30: Ag site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	80000	0.02	198	32110	0.25	395	20322	0.02
2	73000	0.02	199	32102	0.04	396	20320	0.02
3	72100	0.04	200	32101	0.04	397	20230	0.02
4	71010	0.02	201	32100	0.46	398	20130	0.04
5	71000	0.56	202	32040	0.02	399	20110	0.04

6	70111	0.04	203	32031	0.02	400	20030	0.02
7	70100	0.04	204	32030	1.12	401	20020	0.02
8	70010	0.08	205	32021	0.17	402	20010	0.02
9	64000	0.04	206	32020	0.48	403	16110	0.02
10	63010	0.02	207	32012	0.06	404	16100	0.06
11	63000	0.17	208	32011	0.06	405	16010	0.1
12	62100	0.08	209	32010	0.56	406	16000	0.02
13	62010	0.17	210	32001	0.02	407	15200	0.02
14	62001	0.02	211	32000	1.95	408	15110	0.19
15	62000	0.1	212	31420	0.02	409	15102	0.02
16	61110	0.21	213	31410	0.02	410	15101	0.04
17	61100	0.31	214	31320	0.04	411	15100	0.08
18	61020	0.04	215	31310	0.1	412	15021	0.04
19	61010	0.5	216	31302	0.06	413	15020	0.23
20	61000	0.21	217	31301	0.04	414	15010	0.19
21	60120	0.02	218	31300	0.04	415	15000	0.04
22	60110	0.27	219	31230	0.06	416	14310	0.02
23	60020	0.04	220	31221	0.04	417	14300	0.04
24	60011	0.02	221	31220	0.52	418	14220	0.1
25	60010	0.04	222	31211	0.08	419	14211	0.06
26	60000	0.06	223	31210	0.08	420	14210	0.31

27	54000	0.02	224	31203	0.02	421	14200	0.04
28	53110	0.02	225	31200	0.1	422	14130	0.02
29	53100	0.06	226	31141	0.02	423	14121	0.04
30	53010	0.17	227	31140	0.02	424	14120	0.29
31	53001	0.06	228	31131	0.04	425	14111	0.04
32	53000	1.56	229	31130	0.35	426	14110	0.39
33	52210	0.02	230	31121	0.21	427	14102	0.02
34	52200	0.15	231	31120	0.08	428	14101	0.02
35	52111	0.04	232	31111	0.04	429	14100	0.15
36	52110	0.1	233	31110	0.19	430	14040	0.02
37	52100	1.21	234	31103	0.02	431	14030	0.25
38	52030	0.02	235	31100	0.33	432	14021	0.04

39	52020	0.12	236	31040	0.19	433	14020	0.15
40	52011	0.04	237	31031	0.04	434	14010	0.29
41	52010	2.6	238	31030	0.1	435	14000	0.19
42	52001	0.04	239	31022	0.02	436	13400	0.02
43	52000	0.5	240	31021	0.04	437	13320	0.04
44	51210	0.06	241	31020	0.27	438	13310	0.06
45	51201	0.04	242	31012	0.02	439	13301	0.02
46	51200	0.25	243	31011	0.02	440	13300	0.1
47	51121	0.02	244	31010	0.56	441	13221	0.04
48	51120	0.25	245	31001	0.02	442	13220	0.25
49	51110	0.79	246	31000	0.37	443	13211	0.06
50	51101	0.04	247	30320	0.04	444	13210	0.15
51	51100	0.27	248	30312	0.02	445	13203	0.04
52	51030	0.1	249	30311	0.02	446	13202	0.02
53	51021	0.02	250	30230	0.02	447	13200	0.29
54	51020	1	251	30222	0.04	448	13140	0.04
55	51012	0.02	252	30221	0.02	449	13131	0.02
56	51011	0.08	253	30220	0.06	450	13130	0.17
57	51010	0.27	254	30212	0.02	451	13121	0.17
58	51000	0.44	255	30140	0.08	452	13120	0.23

59	50300	0.02	256	30131	0.06	453	13113	0.02
60	50220	0.02	257	30122	0.02	454	13111	0.06
61	50210	0.06	258	30110	0.04	455	13110	0.52
62	50130	0.04	259	30100	0.02	456	13100	0.27
63	50120	0.08	260	30050	0.02	457	13040	0.04
64	50110	0.04	261	30032	0.02	458	13031	0.02
65	50100	0.06	262	30031	0.02	459	13030	0.08
66	50040	0.04	263	30030	0.02	460	13021	0.02
67	50030	0.12	264	30021	0.06	461	13020	0.35
68	50020	0.02	265	30020	0.06	462	13011	0.02
69	50010	0.08	266	30010	0.12	463	13010	0.25
70	50000	0.15	267	30000	0.06	464	13001	0.04
71	45100	0.04	268	26100	0.02	465	13000	0.19

72	45000	0.04	269	26010	0.02	466	12412	0.02
73	44110	0.02	270	26000	0.08	467	12410	0.04
74	44100	0.12	271	25200	0.15	468	12402	0.02
75	44020	0.02	272	25110	0.08	469	12320	0.15
76	44010	0.1	273	25100	0.29	470	12311	0.04
77	44000	1.62	274	25030	0.02	471	12310	0.06
78	43200	0.15	275	25020	0.04	472	12300	0.02
79	43120	0.06	276	25010	0.62	473	12230	0.1
80	43111	0.04	277	25001	0.02	474	12222	0.08
81	43110	0.31	278	25000	0.02	475	12221	0.19
82	43101	0.04	279	24400	0.02	476	12220	0.15
83	43100	1.64	280	24210	0.12	477	12213	0.02
84	43020	0.17	281	24200	0.25	478	12212	0.02
85	43011	0.04	282	24120	0.08	479	12210	0.08
86	43010	3.01	283	24111	0.02	480	12201	0.02
87	43001	0.02	284	24110	0.87	481	12200	0.21
88	43000	0.52	285	24101	0.02	482	12150	0.04
89	42300	0.04	286	24100	0.29	483	12140	0.12
90	42210	0.27	287	24030	0.06	484	12130	0.15

91	42200	0.73	288	24021	0.02	485	12122	0.08
92	42120	0.17	289	24020	0.58	486	12121	0.02
93	42111	0.06	290	24011	0.04	487	12120	0.35
94	42110	2.02	291	24010	0.48	488	12111	0.02
95	42102	0.08	292	24001	0.02	489	12110	0.39
96	42101	0.15	293	24000	0.39	490	12100	0.17
97	42100	0.52	294	23400	0.04	491	12050	0.02
98	42030	0.02	295	23311	0.06	492	12040	0.06
99	42022	0.02	296	23310	0.02	493	12032	0.04
100	42021	0.02	297	23301	0.02	494	12031	0.08
101	42020	2.37	298	23300	0.06	495	12030	0.17
102	42012	0.08	299	23230	0.04	496	12020	0.23
103	42011	0.15	300	23221	0.02	497	12013	0.02
104	42010	0.75	301	23220	0.17	498	12012	0.02

105	42002	0.02	302	23211	0.04	499	12011	0.02
106	42001	0.02	303	23210	0.77	500	12010	0.1
107	42000	0.69	304	23201	0.12	501	12000	0.1
108	41310	0.02	305	23200	0.08	502	11520	0.04
109	41301	0.02	306	23131	0.04	503	11412	0.04
110	41300	0.08	307	23130	0.19	504	11401	0.02
111	41220	0.08	308	23121	0.02	505	11313	0.02
112	41211	0.02	309	23120	1.37	506	11310	0.02
113	41210	0.69	310	23112	0.06	507	11222	0.04
114	41200	0.08	311	23111	0.15	508	11221	0.02
115	41130	0.02	312	23110	0.52	509	11220	0.19
116	41121	0.1	313	23101	0.06	510	11212	0.04
117	41120	0.87	314	23100	0.35	511	11210	0.02
118	41112	0.02	315	23040	0.08	512	11130	0.1
119	41111	0.17	316	23030	0.52	513	11122	0.02
120	41110	0.31	317	23022	0.04	514	11120	0.15
121	41103	0.02	318	23021	0.1	515	11110	0.08
122	41102	0.02	319	23020	0.39	516	11040	0.06

123	41101	0.06	320	23010	0.77	517	11030	0.02
124	41100	0.19	321	23002	0.04	518	11021	0.06
125	41031	0.02	322	23001	0.04	519	11020	0.08
126	41030	0.73	323	23000	1.43	520	10302	0.02
127	41022	0.02	324	22411	0.02	521	10221	0.02
128	41021	0.06	325	22401	0.04	522	10150	0.02
129	41020	0.31	326	22400	0.04	523	10130	0.02
130	41012	0.06	327	22320	0.04	524	10121	0.04
131	41010	0.58	328	22312	0.02	525	10113	0.02
132	41000	1.02	329	22311	0.04	526	10031	0.02
133	40312	0.02	330	22310	0.29	527	06200	0.02
134	40301	0.04	331	22301	0.02	528	06010	0.02
135	40221	0.04	332	22300	0.02	529	05310	0.04
136	40220	0.15	333	22230	0.04	530	05300	0.02
137	40200	0.02	334	22220	0.42	531	05120	0.04

138	40130	0.17	335	22212	0.02	532	05111	0.06
139	40121	0.12	336	22211	0.04	533	05110	0.08
140	40120	0.08	337	22210	0.15	534	05100	0.02
141	40110	0.02	338	22203	0.02	535	05030	0.02
142	40100	0.02	339	22200	0.1	536	05020	0.08
143	40040	0.12	340	22140	0.06	537	05010	0.04
144	40031	0.02	341	22130	0.29	538	05000	0.04
145	40020	0.04	342	22122	0.02	539	04310	0.04
146	40010	0.08	343	22121	0.27	540	04220	0.04
147	40001	0.04	344	22120	0.19	541	04211	0.04
148	40000	0.04	345	22113	0.02	542	04113	0.02
149	36000	0.02	346	22112	0.06	543	04110	0.04
150	35200	0.04	347	22111	0.04	544	04100	0.15
151	35100	0.02	348	22110	0.31	545	04021	0.04
152	35010	0.1	349	22103	0.02	546	04020	0.08
153	35000	0.52	350	22101	0.02	547	04010	0.19
154	34200	0.04	351	22100	0.56	548	03501	0.02

155	34110	0.19	352	22050	0.02	549	03410	0.02
156	34101	0.04	353	22040	0.17	550	03320	0.04
157	34100	1.37	354	22031	0.04	551	03240	0.02
158	34020	0.12	355	22030	0.23	552	03231	0.02
159	34011	0.02	356	22023	0.02	553	03221	0.1
160	34010	2.18	357	22021	0.04	554	03210	0.02
161	34001	0.04	358	22020	0.31	555	03200	0.02
162	34000	0.31	359	22011	0.02	556	03140	0.02
163	33300	0.04	360	22010	0.56	557	03131	0.06
164	33220	0.02	361	22000	0.58	558	03121	0.02
165	33210	0.19	362	21411	0.02	559	03120	0.12
166	33201	0.06	363	21330	0.02	560	03111	0.06
167	33200	0.6	364	21321	0.04	561	03110	0.15
168	33121	0.04	365	21320	0.1	562	03100	0.17
169	33120	0.21	366	21311	0.04	563	03031	0.02
170	33111	0.06	367	21302	0.06	564	03030	0.1

171	33110	2.31	368	21231	0.04	565	03020	0.06
172	33101	0.04	369	21230	0.15	566	03010	0.04
173	33100	0.54	370	21221	0.06	567	02511	0.02
174	33030	0.12	371	21220	0.04	568	02321	0.02
175	33021	0.02	372	21212	0.02	569	02230	0.02
176	33020	1.85	373	21210	0.15	570	02221	0.04
177	33012	0.02	374	21200	0.04	571	02220	0.02
178	33011	0.08	375	21140	0.1	572	02212	0.02
179	33010	0.83	376	21132	0.06	573	02210	0.06
180	33002	0.02	377	21131	0.02	574	02131	0.04
181	33000	0.79	378	21130	0.23	575	02130	0.06
182	32400	0.04	379	21122	0.02	576	02122	0.02
183	32311	0.04	380	21120	0.29	577	02121	0.02
184	32310	0.1	381	21111	0.02	578	02110	0.06
185	32300	0.19	382	21110	0.12	579	02041	0.02
186	32221	0.06	383	21100	0.23	580	02031	0.04

187	32220	0.08	384	21051	0.02	581	02030	0.17
188	32211	0.04	385	21050	0.04	582	02022	0.02
189	32210	1	386	21041	0.02	583	02021	0.06
190	32202	0.02	387	21040	0.02	584	02020	0.06
191	32201	0.1	388	21032	0.02	585	01121	0.06
192	32200	0.27	389	21031	0.04	586	01040	0.04
193	32130	0.04	390	21030	0.12	587	01030	0.02
194	32121	0.04	391	21021	0.02	588	01021	0.04
195	32120	2.06	392	21020	0.1	589	00321	0.02
196	32112	0.06	393	21010	0.17			
197	32111	0.25	394	21000	0.08			

Table S31: Au site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	82100	0.06	160	32200	0.41	319	21121	0.18
2	80010	0.12	161	32140	0.06	320	21120	0.12

3	71101	0.06	162	32130	0.18	321	21111	0.06
4	71010	0.06	163	32121	0.47	322	21110	0.06
5	65000	0.06	164	32120	2.11	323	21050	0.12
6	64010	0.06	165	32112	0.06	324	21040	0.12
7	63000	0.18	166	32111	0.59	325	21030	0.12
8	62010	0.23	167	32110	0.53	326	21020	0.06
9	62000	0.64	168	32101	0.12	327	20330	0.06
10	61210	0.06	169	32100	0.18	328	20322	0.06
11	61110	0.29	170	32040	0.12	329	20302	0.06
12	61100	0.29	171	32031	0.35	330	20221	0.06
13	61020	0.06	172	32030	1.05	331	20220	0.06
14	61011	0.06	173	32021	0.29	332	20141	0.06
15	61010	0.59	174	32020	0.53	333	20122	0.12
16	61000	0.06	175	32001	0.06	334	20103	0.06
17	60020	0.12	176	31402	0.06	335	16110	0.18

18	54100	0.06	177	31401	0.12	336	16010	0.06
19	54000	0.06	178	31400	0.06	337	15310	0.06
20	53100	0.12	179	31321	0.06	338	15210	0.06
21	53020	0.06	180	31320	0.06	339	15200	0.23
22	53010	0.53	181	31311	0.12	340	15111	0.12
23	53000	1	182	31310	0.23	341	15110	0.35
24	52300	0.06	183	31301	0.06	342	15102	0.06
25	52201	0.06	184	31240	0.12	343	15030	0.12
26	52111	0.06	185	31230	0.41	344	15021	0.06
27	52110	0.06	186	31220	0.47	345	15020	0.29
28	52100	0.64	187	31213	0.12	346	15000	0.06
29	52020	0.12	188	31211	0.53	347	14400	0.06
30	52010	1.76	189	31210	0.18	348	14310	0.06
31	52000	0.29	190	31202	0.06	349	14300	0.06
32	51400	0.06	191	31200	0.18	350	14210	0.06
33	51220	0.06	192	31140	0.18	351	14201	0.06
34	51210	0.06	193	31131	0.06	352	14120	0.23
35	51120	0.06	194	31130	0.82	353	14112	0.18

36	51110	0.88	195	31122	0.06	354	14110	0.06
37	51100	0.18	196	31121	0.35	355	14040	0.06
38	51020	0.47	197	31120	0.41	356	14030	0.41
39	51011	0.06	198	31112	0.18	357	14012	0.06
40	51010	0.12	199	31111	0.18	358	14010	0.18
41	50312	0.06	200	31110	0.23	359	14000	0.06
42	50300	0.06	201	31040	0.47	360	13500	0.06
43	50130	0.06	202	31031	0.06	361	13411	0.06
44	50120	0.29	203	31030	0.41	362	13400	0.06
45	50030	0.06	204	31020	0.18	363	13311	0.06
46	50020	0.06	205	31011	0.06	364	13310	0.35
47	45000	0.23	206	31010	0.12	365	13220	0.41
48	44110	0.06	207	31000	0.12	366	13212	0.06
49	44101	0.06	208	30412	0.06	367	13211	0.29

50	44100	0.23	209	30321	0.06	368	13210	0.35
51	44020	0.18	210	30320	0.06	369	13201	0.06
52	44010	0.29	211	30311	0.06	370	13140	0.06
53	44000	0.47	212	30231	0.06	371	13130	0.7
54	43300	0.18	213	30230	0.12	372	13122	0.06
55	43200	0.23	214	30222	0.06	373	13121	0.41
56	43110	0.47	215	30140	0.06	374	13120	0.06
57	43101	0.06	216	30122	0.12	375	13112	0.29
58	43100	1.11	217	30120	0.06	376	13103	0.06
59	43030	0.12	218	30040	0.12	377	13100	0.06
60	43020	0.18	219	30031	0.12	378	13040	0.23
61	43011	0.18	220	30010	0.06	379	13031	0.06
62	43010	2.11	221	26000	0.06	380	13030	0.06
63	43001	0.18	222	25110	0.06	381	13020	0.12
64	43000	0.53	223	25101	0.06	382	13010	0.06
65	42311	0.06	224	25100	0.64	383	12510	0.12
66	42300	0.06	225	25020	0.06	384	12420	0.12
67	42222	0.06	226	25010	0.41	385	12411	0.06
68	42221	0.06	227	24230	0.06	386	12402	0.12

69	42220	0.06	228	24210	0.12	387	12401	0.12
70	42210	0.23	229	24200	0.29	388	12400	0.06
71	42201	0.12	230	24120	0.41	389	12330	0.06
72	42200	0.7	231	24110	1	390	12321	0.06
73	42130	0.06	232	24102	0.06	391	12312	0.12
74	42120	0.29	233	24100	0.06	392	12311	0.18
75	42112	0.12	234	24020	0.59	393	12303	0.12
76	42111	0.23	235	24011	0.12	394	12240	0.18
77	42110	1.58	236	24010	0.18	395	12231	0.06
78	42103	0.06	237	24003	0.06	396	12230	0.12
79	42102	0.06	238	24000	0.18	397	12221	0.06
80	42101	0.06	239	23401	0.12	398	12220	0.23
81	42100	0.47	240	23320	0.06	399	12213	0.06

82	42030	0.18	241	23310	0.29	400	12212	0.35
83	42021	0.23	242	23301	0.18	401	12211	0.12
84	42020	1.81	243	23300	0.06	402	12210	0.06
85	42011	0.18	244	23220	0.29	403	12202	0.06
86	42010	0.53	245	23211	0.18	404	12140	0.12
87	42001	0.12	246	23210	1.46	405	12122	0.06
88	41310	0.06	247	23203	0.12	406	12121	0.12
89	41301	0.06	248	23202	0.12	407	12120	0.12
90	41220	0.18	249	23201	0.18	408	12110	0.06
91	41212	0.06	250	23200	0.06	409	12040	0.06
92	41211	0.18	251	23140	0.12	410	12031	0.06
93	41210	0.82	252	23130	0.35	411	12030	0.23
94	41202	0.12	253	23120	1.52	412	12020	0.12
95	41201	0.12	254	23111	0.29	413	12014	0.06
96	41200	0.18	255	23110	0.7	414	11501	0.12
97	41130	0.06	256	23103	0.06	415	11431	0.06
98	41120	0.82	257	23102	0.23	416	11421	0.18
99	41112	0.06	258	23100	0.23	417	11402	0.06
100	41111	0.29	259	23030	0.41	418	11322	0.06
101	41110	0.47	260	23020	0.41	419	11321	0.12

102	41102	0.06	261	23010	0.18	420	11312	0.18
103	41100	0.06	262	23000	0.12	421	11311	0.06
104	41030	1.0	263	22410	0.06	422	11310	0.12
105	41022	0.06	264	22401	0.06	423	11302	0.06
106	41021	0.12	265	22321	0.12	424	11240	0.06
107	41020	0.18	266	22312	0.06	425	11222	0.18
108	41012	0.12	267	22310	0.35	426	11220	0.06
109	40311	0.06	268	22303	0.12	427	11212	0.06
110	40221	0.18	269	22302	0.23	428	11132	0.06
111	40220	0.12	270	22301	0.18	429	11131	0.12
112	40210	0.06	271	22300	0.06	430	11130	0.47
113	40140	0.18	272	22231	0.06	431	11120	0.12

114	40130	0.12	273	22230	0.06	432	11111	0.06
115	40122	0.18	274	22222	0.06	433	11030	0.06
116	40121	0.06	275	22221	0.06	434	11021	0.06
117	40120	0.12	276	22220	0.64	435	10421	0.06
118	40032	0.06	277	22211	0.18	436	10311	0.12
119	40030	0.18	278	22210	0.41	437	10220	0.06
120	40010	0.06	279	22202	0.06	438	10211	0.12
121	35100	0.06	280	22201	0.06	439	10202	0.06
122	35010	0.12	281	22131	0.12	440	10113	0.06
123	35000	0.35	282	22130	0.94	441	06201	0.06
124	34200	0.06	283	22122	0.06	442	06110	0.06
125	34110	0.41	284	22121	0.41	443	05212	0.06
126	34100	1.17	285	22120	0.64	444	05130	0.12
127	34020	0.53	286	22112	0.23	445	05120	0.18
128	34011	0.18	287	22111	0.23	446	05030	0.12
129	34010	1.29	288	22050	0.12	447	04420	0.06
130	34000	0.18	289	22040	0.59	448	04320	0.06
131	33300	0.18	290	22031	0.18	449	04301	0.06
132	33211	0.23	291	22030	0.41	450	04220	0.12
133	33210	0.29	292	22022	0.18	451	04210	0.06
134	33201	0.06	293	22021	0.18	452	04121	0.12

135	33200	0.59	294	22020	0.23	453	04120	0.06
136	33121	0.06	295	22000	0.06	454	04020	0.12
137	33120	0.23	296	21511	0.12	455	03221	0.18
138	33111	0.06	297	21321	0.12	456	03212	0.12
139	33110	2.34	298	21320	0.29	457	03210	0.06
140	33101	0.06	299	21312	0.06	458	03140	0.29
141	33100	0.23	300	21311	0.06	459	03132	0.06
142	33040	0.06	301	21300	0.12	460	03104	0.06
143	33030	0.23	302	21241	0.06	461	03040	0.06
144	33021	0.06	303	21232	0.06	462	02502	0.06
145	33020	1.52	304	21231	0.06	463	02310	0.12

146	33011	0.12	305	21230	0.06	464	02303	0.06
147	33010	0.47	306	21221	0.29	465	02231	0.06
148	33001	0.18	307	21220	0.23	466	02130	0.12
149	33000	0.06	308	21212	0.12	467	02120	0.06
150	32400	0.12	309	21210	0.23	468	02112	0.12
151	32311	0.12	310	21203	0.06	469	02040	0.06
152	32301	0.18	311	21202	0.06	470	01322	0.12
153	32300	0.18	312	21150	0.06	471	01311	0.06
154	32230	0.18	313	21141	0.12	472	01230	0.06
155	32221	0.06	314	21140	0.06	473	01212	0.06
156	32220	0.23	315	21131	0.12	474	01040	0.06
157	32211	0.12	316	21130	0.35	475	00131	0.06
158	32210	1.52	317	21123	0.12			
159	32201	0.18	318	21122	0.06			

Table S32: Cu site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	63011	0.25	64	32112	0.25	127	22120	1.24
2	61100	0.99	65	32111	0.99	128	22112	0.5
3	53100	0.99	66	32040	0.5	129	22110	0.25
4	53000	1.49	67	32030	0.74	130	22104	0.25

5	52111	0.25	68	32020	0.74	131	22103	0.25
6	52100	0.74	69	32012	0.25	132	22040	0.25
7	52011	0.5	70	32003	0.25	133	22031	0.99
8	52010	0.25	71	31311	0.5	134	22013	0.5
9	52000	0.25	72	31310	0.5	135	21402	0.25
10	51110	0.5	73	31230	0.25	136	21321	0.25
11	51020	0.99	74	31212	0.25	137	21320	0.25
12	51002	0.5	75	31203	0.25	138	21311	0.5
13	50210	0.25	76	31130	1.24	139	21131	0.5
14	45110	0.5	77	31121	0.25	140	20222	0.25

15	45000	0.25	78	31040	0.5	141	20123	0.5
16	44110	0.25	79	31030	0.25	142	16200	0.25
17	44100	0.5	80	31022	0.25	143	16100	0.25
18	44000	2.23	81	31013	0.5	144	15021	0.25
19	43110	0.25	82	30320	0.25	145	15020	0.25
20	43100	1.24	83	30312	0.5	146	14401	0.25
21	43010	3.47	84	30132	0.25	147	14300	0.25
22	43000	0.25	85	30032	0.25	148	14221	0.25
23	42210	0.25	86	30030	0.5	149	14220	0.5
24	42200	0.25	87	30014	0.25	150	14202	0.99
25	42111	0.25	88	25110	0.5	151	14120	0.25
26	42110	1.73	89	25100	0.25	152	14112	0.74
27	42100	0.74	90	25010	0.25	153	14111	0.25
28	42020	0.99	91	25001	0.25	154	14030	0.74
29	42011	0.25	92	24201	0.25	155	14012	0.5
30	41300	0.25	93	24200	0.74	156	13400	0.5
31	41211	0.25	94	24120	0.74	157	13320	0.25
32	41210	0.5	95	24111	0.5	158	13311	0.25
33	41120	0.25	96	24110	1.49	159	13310	0.5
34	41040	0.99	97	24101	0.25	160	13220	0.5
35	41030	0.5	98	24020	1.73	161	13212	0.5
36	41020	0.25	99	24010	0.5	162	13211	0.5
37	40220	0.5	100	24000	0.25	163	13130	0.25

38	40122	0.25	101	23310	0.5	164	13120	0.74
39	40121	0.25	102	23300	0.5	165	13113	0.5
40	40040	0.5	103	23220	0.25	166	13112	0.25
41	34200	0.25	104	23210	0.5	167	13111	0.25
42	34100	2.23	105	23201	0.25	168	13110	0.5
43	34010	1.98	106	23130	0.74	169	13032	0.25
44	34000	0.25	107	23120	1.24	170	13013	0.25
45	33300	0.5	108	23111	0.5	171	13010	0.5
46	33210	0.5	109	23110	0.99	172	12401	0.5

47	33201	0.74	110	23102	0.25	173	12302	0.25
48	33200	0.74	111	23101	0.25	174	12222	0.25
49	33120	0.5	112	23030	0.99	175	12221	0.25
50	33110	1.49	113	23021	0.5	176	12122	0.5
51	33103	0.99	114	23014	0.25	177	12032	0.25
52	33101	0.25	115	23012	0.25	178	12004	0.25
53	33100	0.74	116	23011	0.25	179	11411	0.5
54	33020	3.22	117	22320	0.25	180	11402	0.5
55	33011	0.25	118	22301	0.74	181	11213	0.25
56	33010	0.74	119	22221	0.25	182	05030	0.5
57	33002	0.25	120	22220	0.74	183	05012	0.5
58	33001	0.25	121	22211	0.25	184	04112	0.5
59	32211	0.25	122	22204	0.25	185	03312	0.25
60	32210	1.49	123	22202	0.5	186	03222	0.25
61	32201	0.25	124	22140	0.25	187	03212	0.25
62	32121	0.25	125	22122	0.25	188	02411	0.25
63	32120	1.49	126	22121	0.25			

Table S33: Pd site

Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster	Cluster No.	Cluster	% Cluster
1	61020	0.35	53	32130	1.06	105	22130	0.71
2	54120	0.35	54	32121	0.35	106	22121	0.35
3	54110	0.35	55	32120	1.06	107	22120	0.35

4	53010	0.35	56	32111	0.35	108	22111	0.35
5	53000	0.71	57	32102	0.71	109	22110	0.71
6	52110	0.71	58	32101	0.35	110	22031	0.35
7	52100	0.35	59	32030	0.35	111	22030	0.35
8	52010	3.18	60	32022	0.71	112	22020	0.71
9	52000	0.35	61	32021	0.71	113	22013	0.35
10	51111	0.35	62	32020	0.71	114	21302	0.35
11	51110	0.71	63	31310	0.35	115	21230	0.71
12	50220	0.35	64	31302	0.35	116	21212	0.35

13	50101	0.35	65	31220	0.35	117	21130	0.35
14	50030	0.35	66	31212	0.35	118	21122	1.41
15	50021	0.35	67	31200	0.71	119	14210	0.71
16	44000	0.71	68	31130	0.71	120	14202	0.35
17	43100	1.77	69	31121	0.35	121	14130	0.35
18	43011	0.71	70	31112	1.06	122	13410	0.35
19	43010	0.71	71	31104	0.35	123	13320	0.71
20	43000	0.35	72	31103	0.35	124	13310	0.35
21	42300	0.35	73	31041	0.35	125	13220	0.71
22	42200	0.71	74	31030	0.35	126	13211	0.35
23	42121	0.35	75	31020	0.35	127	13121	0.35
24	42110	0.35	76	30041	0.35	128	13120	0.35
25	42022	0.35	77	26000	0.35	129	13111	0.35
26	42020	2.12	78	25110	1.06	130	13040	0.35
27	41401	0.35	79	25010	1.06	131	13011	0.71
28	41212	0.35	80	24211	0.35	132	12511	0.35
29	41211	0.35	81	24210	0.35	133	12321	0.35
30	41210	1.06	82	24200	1.41	134	12230	0.71
31	41202	0.71	83	24110	0.71	135	12211	0.71
32	41120	0.35	84	24101	0.35	136	12210	0.71
33	41111	0.35	85	24100	0.35	137	12120	0.35
34	41030	0.71	86	24030	1.06	138	12112	0.71
35	41013	0.35	87	24020	2.12	139	12111	0.71
36	40130	0.35	88	24011	0.71	140	11222	0.71

37	35100	0.35	89	24010	0.35	141	11211	0.35
38	35000	0.35	90	23220	0.35	142	11122	0.35
39	34100	2.83	91	23211	0.71	143	11121	0.35
40	34010	0.71	92	23210	1.06	144	11104	0.35
41	34001	0.71	93	23201	0.71	145	04410	0.35
42	33210	1.06	94	23130	1.41	146	04211	0.35
43	33201	1.06	95	23120	1.06	147	03403	0.35
44	33200	0.35	96	23110	1.06	148	03302	0.35
45	33120	1.06	97	23103	0.35	149	02301	0.71
46	33110	1.77	98	23030	1.06	150	02222	0.35
47	33020	2.47	99	23020	1.41	151	02221	0.35
48	33011	0.71	100	23012	0.71	152	02220	0.71
49	32300	0.71	101	22310	0.71	153	02203	0.35
50	32221	0.35	102	22302	0.71	154	02114	0.71
51	32220	0.35	103	22220	0.35	155	01121	0.35
52	32210	2.47	104	22150	0.35			

Table S34: Atomic strain computed as the difference in the atomic radius between the pure element and the HEA. $\Delta r = \frac{a_{\text{pure}} - a_{\text{HEA}}}{2\sqrt{2}}$ where a_{pure} and a_{HEA} are the lattice parameters of the pure element and the HEA computed with our EAM potential.

Element	Computed atomic radius difference (nm)
Ag	0.005
Au	0.004
Cu	-0.012
Pd	-0.011
Pt	-0.017

Table S35: Mixing enthalpies calculated by the Miedema model [1-3].

Element Pair	Mixing Enthalpy (kJ/mol)
Ag-Au	-5.533
Ag-Cu	2.132
Ag-Pd	-7.361
Ag-Pt	-0.938
Au-Cu	-8.803
Au-Pd	0.116
Au-Pt	4.380
Cu-Pd	-13.697
Cu-Pt	-12.264

Pd-Pt	1.923
-------	-------

References:

- [1] Miedema, A.R., 1973. Simple model for alloys. Philips Tech. Rev, 33(6), pp.149-160.
- [2] Miedema, A.R., 1973. Simple Model for Alloys. Pt. 2. Influence of Ionicity on the Stability and Other Physical Properties of Alloys. Philips Tech. Rev., 33(7), pp.196-202.
- [3] Dębski, A., Dębski, R. and Gąsior, W., 2014. New features of Entall database: comparison of experimental and model formation enthalpies. Archives of Metallurgy and Materials, 59.