

Supporting Information

Effect of the second-shell coordination environment on performance of p-block metal single-atom catalysts for electrosynthesis of hydrogen peroxide

Yidi Wu ¹, YuXiang Zhang ¹, and Sen Lin^{1,*}

¹ State Key Laboratory of Photocatalysis on Energy and Environment, College of Chemistry, Fuzhou University, Fuzhou 350002, China

* Correspondence: slin@fzu.edu.cn (S.L.)

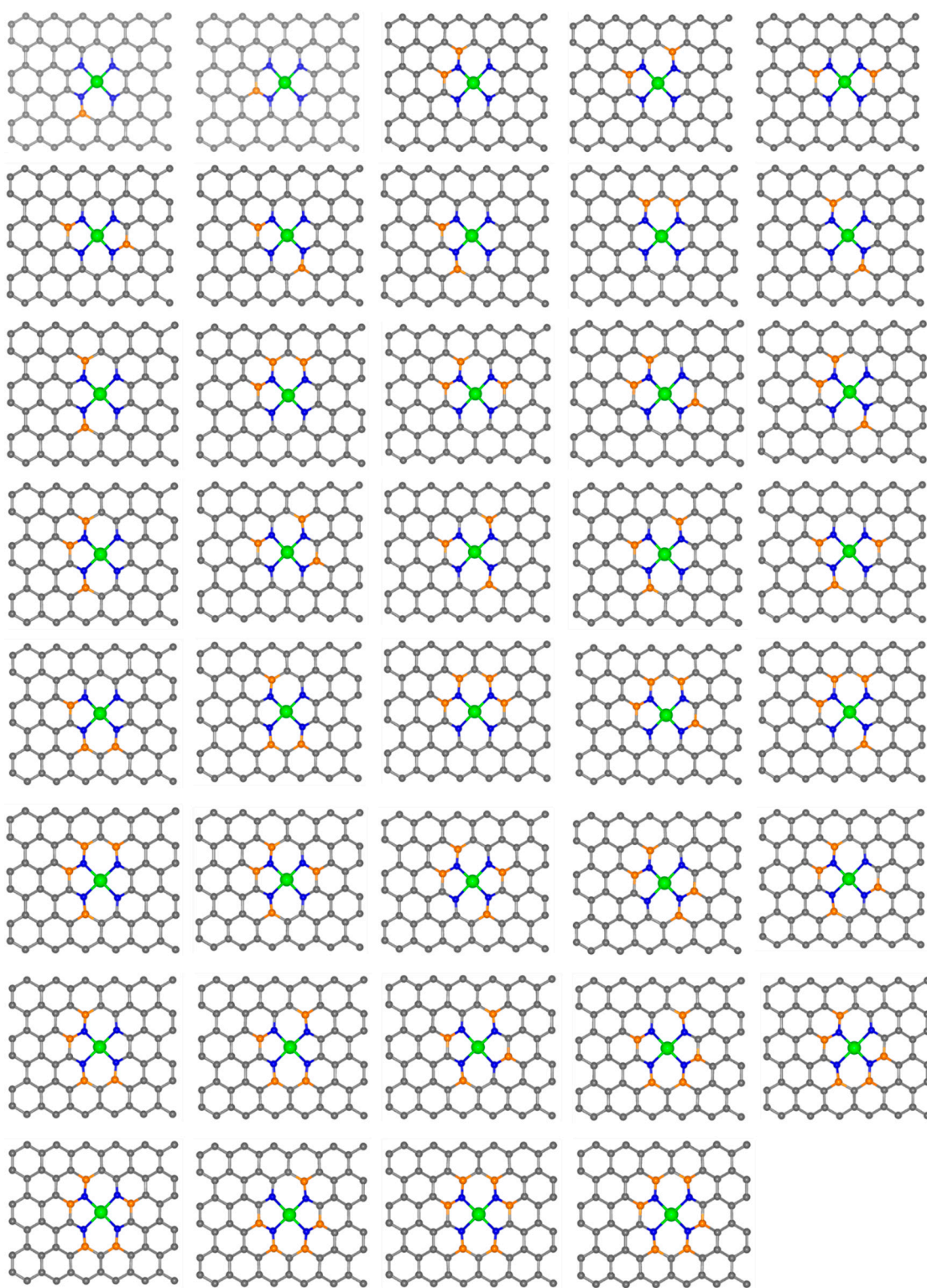


Figure. S1 All of the possible M-N₄B_x (X=1-6) structures doped by different amounts of B at different sites models

Table S1. The G of OOH* on M-N₄, G means G_{OOH*}

M-N ₄	G/eV
Al-N ₄	2.36
Ga-N ₄	2.71
Sb-N ₄	3.79

Table S2. The G of OOH* on Al-N₄B_x, G means G_{OOH*}

M-N ₄ B _x	G/e V	M-N ₄ B _x	G/e V	M-N ₄ B _x	G/eV
Al-N ₄ B ₁ -1	2.92	Al-N ₄ B ₃ -3	3.15	Al-N ₄ B ₄ -5	3.34
Al-N ₄ B ₁ -2	2.76	Al-N ₄ B ₃ -4	3.19	Al-N ₄ B ₄ -6	3.46
Al-N ₄ B ₂ -1	2.82	Al-N ₄ B ₃ -5	3.09	Al-N ₄ B ₄ -7	3.50
Al-N ₄ B ₂ -2	2.76	Al-N ₄ B ₃ -6	3.21	Al-N ₄ B ₄ -8	3.38
Al-N ₄ B ₂ -3	2.59	Al-N ₄ B ₃ -7	3.22	Al-N ₄ B ₄ -9	3.38
Al-N ₄ B ₂ -4	2.58	Al-N ₄ B ₃ -8	3.20	Al-N ₄ B ₄ -10	3.63
Al-N ₄ B ₂ -5	2.74	Al-N ₄ B ₃ -9	3.09	Al-N ₄ B ₄ -11	3.54
Al-N ₄ B ₂ -6	2.81	Al-N ₄ B ₃ -10	3.13	Al-N ₄ B ₅ -1	3.65
Al-N ₄ B ₂ -7	2.77	Al-N ₄ B ₃ -11	3.20	Al-N ₄ B ₅ -2	3.66
Al-N ₄ B ₂ -8	2.91	Al-N ₄ B ₄ -1	3.35	Al-N ₄ B ₅ -3	3.63
Al-N ₄ B ₂ -9	2.96	Al-N ₄ B ₄ -2	3.49	Al-N ₄ B ₅ -4	3.64
Al-N ₄ B ₃ -1	3.14	Al-N ₄ B ₄ -3	3.52	Al-N ₄ B ₆ -1	3.84
Al-N ₄ B ₃ -2	3.07	Al-N ₄ B ₄ -4	3.35	Al-N ₄ B ₆ -2	3.86

Table S3. The G of OOH* on Ga-N₄B_x, G means G_{OOH*}

M-N ₄ B _x	G/e V	M-N ₄ B _x	G/e V	M-N ₄ B _x	G/e V
Ga-N ₄ B ₁ -1	3.27	Ga-N ₄ B ₃ -3	3.49	Ga-N ₄ B ₄ -5	3.69
Ga-N ₄ B ₁ -2	3.07	Ga-N ₄ B ₃ -4	3.50	Ga-N ₄ B ₄ -6	3.87
Ga-N ₄ B ₂ -1	3.12	Ga-N ₄ B ₃ -5	3.39	Ga-N ₄ B ₄ -7	3.91
Ga-N ₄ B ₂ -2	2.99	Ga-N ₄ B ₃ -6	3.54	Ga-N ₄ B ₄ -8	3.76
Ga-N ₄ B ₂ -3	2.84	Ga-N ₄ B ₃ -7	3.57	Ga-N ₄ B ₄ -9	3.74
Ga-N ₄ B ₂ -4	2.88	Ga-N ₄ B ₃ -8	3.57	Ga-N ₄ B ₄ -10	4.03
Ga-N ₄ B ₂ -5	3.06	Ga-N ₄ B ₃ -9	3.51	Ga-N ₄ B ₄ -11	3.89
Ga-N ₄ B ₂ -6	3.06	Ga-N ₄ B ₃ -10	3.49	Ga-N ₄ B ₅ -1	4.03
Ga-N ₄ B ₂ -7	3.06	Ga-N ₄ B ₃ -11	3.51	Ga-N ₄ B ₅ -2	4.00

Ga-N ₄ B ₂ -8	3.18	Ga-N ₄ B ₄ -1	3.71	Ga-N ₄ B ₅ -3	4.00
Ga-N ₄ B ₂ -9	3.20	Ga-N ₄ B ₄ -2	3.82	Ga-N ₄ B ₅ -4	4.02
Ga-N ₄ B ₃ -1	3.46	Ga-N ₄ B ₄ -3	3.89	Ga-N ₄ B ₆ -1	4.23
Ga-N ₄ B ₃ -2	3.41	Ga-N ₄ B ₄ -4	3.71	Ga-N ₄ B ₆ -2	4.19

Table S4. The G of OOH* on Sb-N₄B_x, G means G_{OOH*}

M-N ₄ B _x	G/e V	M-N ₄ B _x	G/e V	M-N ₄ B _x	G/e V
Sb-N ₄ B ₁ -1	4.15	Sb-N ₄ B ₃ -3	4.81	Sb-N ₄ B ₄ -5	5.07
Sb-N ₄ B ₁ -2	4.11	Sb-N ₄ B ₃ -4	4.93	Sb-N ₄ B ₄ -6	5.03
Sb-N ₄ B ₂ -1	4.13	Sb-N ₄ B ₃ -5	4.48	Sb-N ₄ B ₄ -7	5.03
Sb-N ₄ B ₂ -2	4.13	Sb-N ₄ B ₃ -6	4.84	Sb-N ₄ B ₄ -8	5.04
Sb-N ₄ B ₂ -3	4.03	Sb-N ₄ B ₃ -7	4.87	Sb-N ₄ B ₄ -9	4.98
Sb-N ₄ B ₂ -4	4.15	Sb-N ₄ B ₃ -8	4.96	Sb-N ₄ B ₄ -10	4.87
Sb-N ₄ B ₂ -5	4.43	Sb-N ₄ B ₃ -9	5.02	Sb-N ₄ B ₄ -11	4.93
Sb-N ₄ B ₂ -6	4.14	Sb-N ₄ B ₃ -10	4.89	Sb-N ₄ B ₅ -1	4.53
Sb-N ₄ B ₂ -7	4.31	Sb-N ₄ B ₃ -11	4.89	Sb-N ₄ B ₅ -2	4.57
Sb-N ₄ B ₂ -8	4.49	Sb-N ₄ B ₄ -1	5.10	Sb-N ₄ B ₅ -3	4.55
Sb-N ₄ B ₂ -9	4.25	Sb-N ₄ B ₄ -2	5.00	Sb-N ₄ B ₅ -4	4.66
Sb-N ₄ B ₃ -1	4.69	Sb-N ₄ B ₄ -3	4.91	Sb-N ₄ B ₆ -1	4.24
Sb-N ₄ B ₃ -2	4.57	Sb-N ₄ B ₄ -4	4.97	Sb-N ₄ B ₆ -2	4.22