

Supplementary Information

Surface phase diagrams of La-based perovskites towards the O-rich limit from first principles

Yang Li,^a Jie Yang,^a Yi-An Zhu,^{*a} Zhi-Jun Sui,^a Xing-Gui Zhou,^a De Chen,^b and Wei-Kang Yuan^a

^aUnited Chemical Reaction Engineering Research Institute (UNILAB), State Key Laboratory of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China

^bDepartment of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology, N-7491 Trondheim, Norway

* E-mail: yanzhu@ecust.edu.cn

TABLE S1. PAW potential, U_{eff} , and ΔE_M values for transition metals¹.

Transition metal	PAW potential	BEEF-vdW+U		PBE+U	
		U_{eff}	ΔE_M	U_{eff}	ΔE_M
La	La (5s ² 5p ⁶ 6s ² 5d ¹)	0	0	0	0
Sc	Sc_sv (3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ¹)	0	0	0	0
Ti	Ti_pv (3p ⁶ 3d ² 4s ²)	0.6	0.07	1.3	0.32
V	V_sv (3s ² 3p ⁶ 3d ³ 4s ²)	2.5	1.40	3.0	1.53
Cr	Cr_pv (3p ⁶ 3d ⁵ 4s ¹)	2.5	1.38	3.0	1.53
Mn	Mn_pv (3p ⁶ 3d ⁵ 4s ²)	3.5	1.27	4.7	1.72
Fe	Fe_pv (3p ⁶ 3d ⁶ 4s ²)	2.9	1.46	4.8	1.98
Co	Co (3d ⁷ 4s ²)	3.1	1.49	4.2	1.74
Ni	Ni_pv (3p ⁶ 3d ⁸ 4s ²)	5.6	2.37	7.0	2.70
Cu	Cu (3d ⁹ 4s ²)	2.8	0.79	4.5	1.12

2 Geometry of optimized structures

2.1 Cartesian coordinates

TABLE S2. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaScO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.292	1.741	2.398
La_2	4.318	4.669	2.398
La_3	1.439	1.259	6.567
La_4	4.172	4.188	6.567
La_5	1.310	1.784	10.654
La_6	4.300	4.713	10.654
La_7	1.457	1.302	14.824
La_8	4.153	4.231	14.824
Sc_9	4.175	1.552	0.500
Sc_10	1.436	4.480	0.500
Sc_11	4.239	1.512	4.525
Sc_12	1.371	4.440	4.525
Sc_13	4.236	1.522	8.611
Sc_14	1.375	4.450	8.611
Sc_15	4.232	1.532	12.697
Sc_16	1.378	4.460	12.697
Sc_17	4.297	1.492	16.722
Sc_18	1.314	4.420	16.722
O_19	2.603	2.795	0.216
O_20	3.008	5.724	0.216
O_21	0.084	0.190	0.908
O_22	5.526	3.119	0.908
O_23	3.694	1.367	2.483
O_24	1.916	4.296	2.483
O_25	0.205	0.320	4.080
O_26	5.406	3.248	4.080
O_27	2.550	2.727	4.974
O_28	3.060	5.655	4.974
O_29	4.813	1.725	6.567
O_30	0.797	4.653	6.567
O_31	2.536	2.711	8.174
O_32	3.075	5.640	8.174
O_33	0.214	0.332	9.048
O_34	5.397	3.261	9.048
O_35	3.658	1.319	10.654
O_36	1.952	4.247	10.654
O_37	0.199	0.317	12.247
O_38	5.411	3.245	12.247

O_39	2.544	2.724	13.142
O_40	3.066	5.652	13.142
O_41	4.777	1.676	14.739
O_42	0.833	4.604	14.739
O_43	2.665	2.853	16.314
O_44	2.946	5.782	16.314
O_45	0.146	0.248	17.005
O_46	5.464	3.177	17.005

TABLE S3. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaTiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.390	1.466	2.162
La_2	4.185	4.305	2.162
La_3	1.319	1.790	6.315
La_4	4.256	4.629	6.315
La_5	1.413	1.161	10.299
La_6	4.162	4.001	10.299
La_7	1.342	1.485	14.452
La_8	4.233	4.325	14.452
Ti_9	4.279	1.491	0.495
Ti_10	1.296	4.331	0.495
Ti_11	4.182	1.558	4.334
Ti_12	1.393	4.398	4.334
Ti_13	4.209	1.475	8.307
Ti_14	1.366	4.315	8.307
Ti_15	4.236	1.392	12.280
Ti_16	1.339	4.232	12.280
Ti_17	4.140	1.460	16.119
Ti_18	1.436	4.300	16.119
O_19	5.616	0.069	0.352
O_20	5.646	2.908	0.352
O_21	2.785	2.920	0.669
O_22	2.791	0.080	0.669
O_23	4.524	1.553	2.398
O_24	1.051	4.392	2.398
O_25	2.568	2.743	4.054
O_26	3.008	5.583	4.054
O_27	0.143	0.318	4.649
O_28	5.432	3.158	4.649
O_29	3.741	1.438	6.315
O_30	1.834	4.278	6.315
O_31	0.184	0.323	7.967
O_32	5.391	3.162	7.967

O_33	2.547	2.628	8.647
O_34	3.028	5.468	8.647
O_35	4.677	1.513	10.299
O_36	0.898	4.353	10.299
O_37	2.589	2.633	11.965
O_38	2.986	5.472	11.965
O_39	0.164	0.208	12.560
O_40	5.411	3.048	12.560
O_41	3.894	1.398	14.216
O_42	1.681	4.238	14.216
O_43	5.634	0.031	15.945
O_44	5.628	2.871	15.945
O_45	2.802	2.882	16.262
O_46	2.773	0.043	16.262

TABLE S4. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaVO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.388	1.438	2.176
La_2	4.104	4.288	2.176
La_3	1.285	1.735	6.313
La_4	4.207	4.585	6.313
La_5	1.406	1.227	10.290
La_6	4.086	4.077	10.290
La_7	1.303	1.524	14.426
La_8	4.189	4.374	14.426
V_9	4.224	1.453	0.473
V_10	1.268	4.303	0.473
V_11	4.124	1.499	4.324
V_12	1.368	4.349	4.324
V_13	4.146	1.481	8.301
V_14	1.346	4.331	8.301
V_15	4.169	1.463	12.279
V_16	1.323	4.313	12.279
V_17	4.069	1.509	16.130
V_18	1.423	4.359	16.130
O_19	5.584	5.662	0.280
O_20	5.510	2.811	0.280
O_21	2.708	2.924	0.693
O_22	2.784	0.074	0.693
O_23	4.555	1.438	2.362
O_24	0.937	4.288	2.362
O_25	2.535	2.688	3.989
O_26	2.957	5.538	3.989

O_27	0.146	0.275	4.725
O_28	5.346	3.125	4.725
O_29	3.670	1.382	6.313
O_30	1.822	4.232	6.313
O_31	0.195	0.269	7.953
O_32	5.297	3.119	7.953
O_33	2.496	2.693	8.649
O_34	2.996	5.543	8.649
O_35	4.623	1.580	10.290
O_36	0.869	4.431	10.290
O_37	2.545	2.687	11.878
O_38	2.947	5.537	11.878
O_39	0.156	0.274	12.614
O_40	5.336	3.125	12.614
O_41	3.738	1.524	14.241
O_42	1.754	4.374	14.241
O_43	5.585	0.038	15.910
O_44	5.509	2.888	15.910
O_45	2.709	3.001	16.323
O_46	2.783	0.150	16.323

TABLE S5. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaCrO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.375	1.374	2.208
La_2	4.096	4.172	2.208
La_3	1.304	1.634	6.239
La_4	4.167	4.433	6.239
La_5	1.377	1.274	10.186
La_6	4.094	4.073	10.186
La_7	1.306	1.535	14.217
La_8	4.166	4.333	14.217
Cr_9	4.201	1.421	0.430
Cr_10	1.270	4.220	0.430
Cr_11	4.118	1.467	4.280
Cr_12	1.353	4.266	4.280
Cr_13	4.131	1.454	8.213
Cr_14	1.340	4.253	8.213
Cr_15	4.143	1.441	12.145
Cr_16	1.328	4.240	12.145
Cr_17	4.060	1.487	15.995
Cr_18	1.411	4.286	15.995
O_19	5.528	0.039	0.246
O_20	5.523	2.838	0.246

O_21	2.717	2.818	0.652
O_22	2.754	0.019	0.652
O_23	4.501	1.501	2.311
O_24	0.970	4.299	2.311
O_25	2.530	2.658	3.962
O_26	2.941	5.456	3.962
O_27	0.144	0.264	4.579
O_28	5.327	3.063	4.579
O_29	3.705	1.368	6.239
O_30	1.766	4.167	6.239
O_31	0.143	0.253	7.892
O_32	5.328	3.051	7.892
O_33	2.538	2.656	8.533
O_34	2.933	5.454	8.533
O_35	4.556	1.540	10.186
O_36	0.915	4.339	10.186
O_37	2.537	2.644	11.846
O_38	2.934	5.443	11.846
O_39	0.151	0.251	12.464
O_40	5.320	3.049	12.464
O_41	3.760	1.408	14.114
O_42	1.711	4.206	14.114
O_43	5.544	0.091	15.773
O_44	5.507	2.889	15.773
O_45	2.733	2.869	16.180
O_46	2.738	0.070	16.180

TABLE S6. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaMnO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.336	1.366	2.083
La_2	4.165	4.326	2.083
La_3	1.289	1.885	6.171
La_4	4.211	4.845	6.171
La_5	1.406	1.192	10.059
La_6	4.094	4.152	10.059
La_7	1.360	1.711	14.146
La_8	4.140	4.671	14.146
Mn_9	4.173	1.425	0.333
Mn_10	1.327	4.386	0.333
Mn_11	4.118	1.577	4.255
Mn_12	1.382	4.538	4.255
Mn_13	4.152	1.538	8.115
Mn_14	1.348	4.499	8.115

Mn_15	4.187	1.499	11.975
Mn_16	1.313	4.460	11.975
Mn_17	4.132	1.651	15.896
Mn_18	1.368	4.612	15.896
O_19	5.540	5.903	0.414
O_20	5.570	2.943	0.414
O_21	2.728	2.924	0.629
O_22	2.772	5.885	0.629
O_23	4.517	1.684	2.453
O_24	0.983	4.645	2.453
O_25	2.508	2.791	3.964
O_26	2.992	5.751	3.964
O_27	0.142	0.316	4.619
O_28	5.358	3.277	4.619
O_29	3.671	1.417	6.171
O_30	1.829	4.378	6.171
O_31	0.117	0.437	7.776
O_32	5.383	3.397	7.776
O_33	2.578	2.640	8.453
O_34	2.922	5.600	8.453
O_35	4.634	1.659	10.059
O_36	0.866	4.620	10.059
O_37	2.553	2.760	11.611
O_38	2.947	5.720	11.611
O_39	0.187	0.286	12.265
O_40	5.313	3.246	12.265
O_41	3.788	1.392	13.776
O_42	1.712	4.353	13.776
O_43	5.577	0.152	15.600
O_44	5.533	3.113	15.600
O_45	2.765	3.094	15.816
O_46	2.735	0.134	15.816

TABLE S7. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaFeO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.365	1.394	2.186
La_2	4.137	4.226	2.185
La_3	1.300	1.697	6.295
La_4	4.188	4.532	6.295
La_5	1.389	1.250	10.266
La_6	4.098	4.086	10.266
La_7	1.324	1.552	14.375
La_8	4.149	4.392	14.376

Fe_9	4.206	1.428	0.454
Fe_10	1.285	4.256	0.441
Fe_11	4.121	1.492	4.325
Fe_12	1.376	4.330	4.324
Fe_13	4.143	1.473	8.281
Fe_14	1.345	4.309	8.281
Fe_15	4.166	1.455	12.237
Fe_16	1.313	4.288	12.237
Fe_17	4.080	1.519	16.108
Fe_18	1.404	4.362	16.120
O_19	5.506	0.008	0.371
O_20	5.551	2.821	0.341
O_21	2.758	2.839	0.673
O_22	2.761	0.035	0.680
O_23	4.505	1.526	2.412
O_24	1.021	4.319	2.391
O_25	2.536	2.630	4.028
O_26	2.986	5.483	4.019
O_27	0.139	0.278	4.657
O_28	5.341	3.097	4.670
O_29	3.692	1.360	6.295
O_30	1.796	4.196	6.295
O_31	0.166	0.283	7.941
O_32	5.322	3.118	7.941
O_33	2.523	2.664	8.620
O_34	2.965	5.499	8.620
O_35	4.595	1.586	10.266
O_36	0.893	4.422	10.266
O_37	2.550	2.668	11.904
O_38	2.945	5.521	11.891
O_39	0.153	0.317	12.533
O_40	5.301	3.135	12.542
O_41	3.782	1.421	14.149
O_42	1.668	4.298	14.170
O_43	5.528	0.108	15.888
O_44	5.525	2.912	15.881
O_45	2.781	2.938	16.190
O_46	2.735	0.126	16.221

TABLE S8. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaCoO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.259	2.713	2.163
La_2	1.513	5.540	2.163
La_3	4.134	2.733	6.117
La_4	1.388	5.520	6.117
La_5	4.051	2.733	10.030
La_6	1.305	5.520	10.030
La_7	3.926	2.752	13.984
La_8	1.180	5.501	13.984
Co_9	1.482	2.758	0.318
Co_10	4.229	5.495	0.318
Co_11	1.441	2.740	4.194
Co_12	4.187	5.514	4.194
Co_13	1.347	2.733	8.073
Co_14	4.093	5.520	8.073
Co_15	1.252	2.726	11.953
Co_16	3.999	5.527	11.953
Co_17	1.211	2.707	15.829
Co_18	3.957	5.546	15.829
O_19	2.992	4.240	0.178
O_20	0.246	4.014	0.178
O_21	2.767	1.453	0.559
O_22	0.021	1.225	0.559
O_23	1.460	3.099	2.318
O_24	4.206	5.154	2.318
O_25	0.222	1.175	3.916
O_26	2.968	1.503	3.916
O_27	5.417	3.977	4.468
O_28	2.670	4.277	4.468
O_29	4.134	0.300	6.117
O_30	1.388	2.378	6.117
O_31	2.900	3.949	7.824
O_32	0.153	4.304	7.824
O_33	2.540	1.162	8.322
O_34	5.286	1.517	8.322
O_35	1.305	3.088	10.030
O_36	4.051	5.166	10.030
O_37	0.023	1.189	11.679
O_38	2.769	1.489	11.679
O_39	5.218	3.963	12.230
O_40	2.471	4.291	12.230
O_41	3.980	0.312	13.829

O_42	1.233	2.367	13.829
O_43	2.672	4.240	15.588
O_44	5.418	4.013	15.588
O_45	2.447	1.452	15.968
O_46	5.193	1.226	15.968

TABLE S9. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaNiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.395	2.745	2.116
La_2	1.661	5.539	2.116
La_3	4.236	2.743	6.119
La_4	1.502	5.540	6.119
La_5	4.106	2.743	10.028
La_6	1.372	5.540	10.028
La_7	3.947	2.741	14.031
La_8	1.214	5.542	14.031
Ni_9	1.680	2.726	0.243
Ni_10	4.414	5.558	0.243
Ni_11	1.575	2.738	4.177
Ni_12	4.309	5.546	4.177
Ni_13	1.437	2.743	8.073
Ni_14	4.171	5.540	8.073
Ni_15	1.299	2.748	11.969
Ni_16	4.033	5.535	11.969
Ni_17	1.195	2.760	15.903
Ni_18	3.928	5.523	15.903
O_19	3.185	4.015	0.176
O_20	0.452	4.268	0.176
O_21	3.004	1.301	0.576
O_22	0.271	1.387	0.576
O_23	1.597	3.080	2.267
O_24	4.330	5.203	2.267
O_25	0.427	1.126	3.932
O_26	3.160	1.562	3.932
O_27	0.033	3.970	4.460
O_28	2.767	4.314	4.460
O_29	4.236	0.310	6.119
O_30	1.502	2.378	6.119
O_31	2.991	3.959	7.819
O_32	0.257	4.324	7.819
O_33	2.618	1.162	8.328
O_34	5.351	1.526	8.328
O_35	1.372	3.107	10.028

O_36	4.106	5.176	10.028
O_37	0.108	1.172	11.686
O_38	2.841	1.516	11.686
O_39	5.181	3.924	12.214
O_40	2.448	4.359	12.214
O_41	4.011	0.283	13.880
O_42	1.278	2.405	13.880
O_43	2.604	4.099	15.570
O_44	5.337	4.184	15.570
O_45	2.423	1.218	15.970
O_46	5.156	1.471	15.970

TABLE S10. Cartesian coordinates of MO₂-terminated surface of LaCuO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.379	2.762	1.998
La_2	1.640	5.523	1.998
La_3	4.218	2.743	6.107
La_4	1.479	5.541	6.107
La_5	4.098	2.743	10.020
La_6	1.359	5.541	10.020
La_7	3.937	2.725	14.129
La_8	1.199	5.560	14.129
Cu_9	1.639	2.736	0.107
Cu_10	4.377	5.548	0.107
Cu_11	1.554	2.735	4.175
Cu_12	4.292	5.549	4.175
Cu_13	1.419	2.743	8.063
Cu_14	4.158	5.541	8.063
Cu_15	1.285	2.751	11.952
Cu_16	4.024	5.533	11.952
Cu_17	1.200	2.750	16.020
Cu_18	3.939	5.534	16.020
O_19	3.039	4.106	0.320
O_20	0.300	4.178	0.320
O_21	2.989	1.331	0.468
O_22	0.250	1.357	0.468
O_23	1.572	2.998	2.311
O_24	4.311	5.287	2.311
O_25	0.409	1.121	3.968
O_26	3.148	1.567	3.968
O_27	0.022	3.989	4.462
O_28	2.761	4.295	4.462
O_29	4.218	0.284	6.107

O_30	1.479	2.405	6.107
O_31	2.962	3.973	7.827
O_32	0.223	4.311	7.827
O_33	2.616	1.175	8.300
O_34	5.354	1.513	8.300
O_35	1.359	3.082	10.020
O_36	4.098	5.203	10.020
O_37	0.078	1.191	11.665
O_38	2.817	1.497	11.665
O_39	5.168	3.919	12.158
O_40	2.429	4.365	12.158
O_41	4.005	0.200	13.816
O_42	1.266	2.489	13.816
O_43	2.589	4.129	15.659
O_44	5.327	4.155	15.659
O_45	2.539	1.308	15.807
O_46	5.277	1.380	15.807

TABLE S11. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaScO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.338	1.672	2.461
La_2	4.324	4.663	2.465
La_3	1.439	1.259	6.567
La_4	4.172	4.188	6.567
La_5	1.310	1.784	10.654
La_6	4.300	4.713	10.654
La_7	1.456	1.307	14.714
La_8	4.159	4.269	14.797
Sc_9	4.262	1.653	0.481
Sc_10	1.357	4.409	0.545
Sc_11	4.247	1.506	4.528
Sc_12	1.372	4.452	4.535
Sc_13	4.236	1.522	8.611
Sc_14	1.375	4.450	8.611
Sc_15	4.235	1.533	12.706
Sc_16	1.379	4.473	12.681
Sc_17	4.178	1.590	16.761
Sc_18	1.340	4.332	16.683
O_19	3.570	0.466	27.986
O_20	5.089	0.599	18.468
O_21	2.713	2.923	0.435
O_22	2.941	5.799	29.129
O_23	0.086	0.198	0.950

O_24	5.593	3.121	0.967
O_25	3.698	1.266	2.478
O_26	1.915	4.512	2.491
O_27	0.216	0.343	4.144
O_28	5.399	3.267	4.082
O_29	2.536	2.714	4.917
O_30	3.075	5.647	4.991
O_31	4.813	1.725	6.567
O_32	0.797	4.653	6.567
O_33	2.536	2.711	8.174
O_34	3.075	5.640	8.174
O_35	0.214	0.332	9.048
O_36	5.397	3.261	9.048
O_37	3.658	1.319	10.654
O_38	1.952	4.247	10.654
O_39	0.208	0.336	12.245
O_40	5.403	3.265	12.290
O_41	2.545	2.745	13.139
O_42	3.046	5.670	13.107
O_43	4.772	1.567	14.752
O_44	0.803	4.712	14.754
O_45	2.618	2.847	16.270
O_46	2.867	5.813	16.285
O_47	0.116	0.225	17.336
O_48	5.389	3.259	16.830

TABLE S12. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaTiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.345	1.559	2.059
La_2	4.179	4.410	2.063
La_3	1.319	1.790	6.315
La_4	4.256	4.629	6.315
La_5	1.413	1.161	10.299
La_6	4.162	4.001	10.299
La_7	1.379	1.402	14.556
La_8	4.233	4.235	14.544
Ti_9	4.174	1.569	28.583
Ti_10	1.258	4.408	0.455
Ti_11	4.177	1.590	4.280
Ti_12	1.405	4.429	4.344
Ti_13	4.209	1.475	8.307
Ti_14	1.366	4.315	8.307
Ti_15	4.237	1.362	12.336

Ti_16	1.322	4.203	12.272
Ti_17	4.238	1.395	16.645
Ti_18	1.467	4.233	16.160
O_19	3.953	1.587	26.952
O_20	4.461	1.385	18.275
O_21	5.649	0.098	0.363
O_22	5.668	2.985	0.400
O_23	2.762	3.015	0.714
O_24	2.771	0.134	0.696
O_25	4.619	1.570	2.498
O_26	1.047	4.450	2.387
O_27	2.577	2.767	4.068
O_28	3.017	5.605	4.075
O_29	0.148	0.293	4.733
O_30	5.450	3.149	4.721
O_31	3.741	1.438	6.315
O_32	1.834	4.278	6.315
O_33	0.184	0.323	7.967
O_34	5.391	3.162	7.967
O_35	2.547	2.628	8.647
O_36	3.028	5.468	8.647
O_37	4.677	1.513	10.299
O_38	0.898	4.353	10.299
O_39	2.580	2.655	11.886
O_40	2.969	5.478	11.896
O_41	0.153	0.186	12.546
O_42	5.397	3.027	12.544
O_43	3.796	1.372	14.118
O_44	1.678	4.192	14.228
O_45	5.649	5.623	15.904
O_46	5.639	2.827	15.915
O_47	2.761	2.860	16.246
O_48	2.739	5.655	16.220

TABLE S13. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaVO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.284	1.461	2.100
La_2	4.088	4.266	2.115
La_3	1.285	1.735	6.313
La_4	4.207	4.585	6.313
La_5	1.406	1.227	10.290
La_6	4.086	4.077	10.290
La_7	1.378	1.620	14.324

La_8	4.247	4.568	14.275
V_9	4.093	1.459	0.037
V_10	1.231	4.316	0.491
V_11	4.118	1.527	4.310
V_12	1.386	4.351	4.339
V_13	4.146	1.481	8.301
V_14	1.346	4.331	8.301
V_15	4.162	1.477	12.286
V_16	1.337	4.323	12.260
V_17	4.343	1.658	16.440
V_18	1.614	4.342	16.186
O_19	3.942	1.444	27.034
O_20	4.507	1.584	18.039
O_21	5.472	0.051	0.564
O_22	0.012	2.995	0.271
O_23	2.696	2.893	0.733
O_24	2.621	5.663	0.637
O_25	4.499	1.731	2.455
O_26	0.985	4.294	2.411
O_27	2.424	2.785	4.113
O_28	2.943	5.549	4.017
O_29	0.218	0.159	4.643
O_30	5.365	3.116	4.771
O_31	3.670	1.382	6.313
O_32	1.822	4.232	6.313
O_33	0.195	0.269	7.953
O_34	5.297	3.119	7.953
O_35	2.496	2.693	8.649
O_36	2.996	5.543	8.649
O_37	4.623	1.580	10.290
O_38	0.869	4.431	10.290
O_39	2.492	2.668	11.966
O_40	2.991	5.496	11.939
O_41	0.218	0.291	12.600
O_42	5.309	3.160	12.612
O_43	3.705	1.344	14.211
O_44	1.733	4.302	14.292
O_45	5.499	0.246	15.861
O_46	5.510	3.008	15.909
O_47	2.725	2.846	16.288
O_48	2.662	5.683	16.425

TABLE S14. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaCrO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.322	1.318	2.265
La_2	4.097	4.103	2.262
La_3	1.304	1.634	6.239
La_4	4.167	4.433	6.239
La_5	1.377	1.274	10.186
La_6	4.094	4.073	10.186
La_7	1.379	1.547	14.178
La_8	4.183	4.389	14.161
Cr_9	4.127	1.209	0.211
Cr_10	1.264	4.067	0.453
Cr_11	4.111	1.459	4.258
Cr_12	1.360	4.246	4.290
Cr_13	4.131	1.454	8.213
Cr_14	1.340	4.253	8.213
Cr_15	4.145	1.451	12.165
Cr_16	1.316	4.254	12.130
Cr_17	4.275	1.567	16.201
Cr_18	1.536	4.322	15.998
O_19	3.836	1.446	27.085
O_20	4.358	1.511	17.792
O_21	5.518	0.033	0.364
O_22	0.014	2.871	0.215
O_23	2.650	2.855	0.741
O_24	2.773	5.596	0.717
O_25	4.462	1.573	2.279
O_26	0.981	4.279	2.314
O_27	2.500	2.625	3.991
O_28	2.956	5.426	3.968
O_29	0.167	0.275	4.534
O_30	5.309	3.072	4.572
O_31	3.705	1.368	6.239
O_32	1.766	4.167	6.239
O_33	0.143	0.253	7.892
O_34	5.328	3.051	7.892
O_35	2.538	2.656	8.533
O_36	2.933	5.454	8.533
O_37	4.556	1.540	10.186
O_38	0.915	4.339	10.186
O_39	2.515	2.640	11.880
O_40	2.945	5.439	11.850
O_41	0.169	0.275	12.440

O_42	5.307	3.082	12.457
O_43	3.782	1.376	14.139
O_44	1.700	4.284	14.116
O_45	5.519	0.136	15.722
O_46	5.511	2.901	15.721
O_47	2.729	2.925	16.056
O_48	2.636	0.067	16.216

TABLE S15. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaMnO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.404	1.320	2.164
La_2	4.201	4.267	2.193
La_3	1.289	1.885	6.171
La_4	4.211	4.845	6.171
La_5	1.406	1.192	10.059
La_6	4.094	4.152	10.059
La_7	1.298	1.752	14.063
La_8	4.107	4.726	14.034
Mn_9	4.133	1.535	0.203
Mn_10	1.462	4.278	0.332
Mn_11	4.149	1.542	4.241
Mn_12	1.388	4.536	4.260
Mn_13	4.152	1.538	8.115
Mn_14	1.348	4.499	8.115
Mn_15	4.159	1.533	11.987
Mn_16	1.308	4.460	11.968
Mn_17	4.180	1.537	16.020
Mn_18	1.238	4.715	15.894
O_19	5.200	0.357	27.322
O_20	3.114	2.716	17.132
O_21	0.079	5.685	0.341
O_22	0.025	2.890	0.457
O_23	2.778	2.905	0.694
O_24	2.837	5.854	0.678
O_25	4.581	1.591	2.429
O_26	0.983	4.674	2.438
O_27	2.560	2.729	3.921
O_28	3.035	5.740	3.966
O_29	0.145	0.355	4.626
O_30	5.338	3.269	4.584
O_31	3.671	1.417	6.171
O_32	1.829	4.378	6.171
O_33	0.117	0.437	7.776

O_34	5.383	3.397	7.776
O_35	2.578	2.640	8.453
O_36	2.922	5.600	8.453
O_37	4.634	1.659	10.059
O_38	0.866	4.620	10.059
O_39	2.556	2.725	11.601
O_40	2.968	5.732	11.648
O_41	0.139	0.343	12.306
O_42	5.274	3.252	12.261
O_43	3.730	1.483	13.798
O_44	1.715	4.314	13.790
O_45	5.527	0.162	15.526
O_46	5.475	3.136	15.552
O_47	2.622	3.311	15.887
O_48	2.667	0.187	15.766

TABLE S16. Cartesian coordinates of $\text{MO}_2+0.5\text{O}$ -terminated surface of LaFeO_3

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.376	1.249	2.312
La_2	4.113	4.078	2.302
La_3	1.300	1.697	6.295
La_4	4.188	4.532	6.295
La_5	1.389	1.250	10.266
La_6	4.098	4.086	10.266
La_7	1.286	1.635	14.268
La_8	4.196	4.402	14.247
Fe_9	4.239	1.164	0.331
Fe_10	1.204	4.397	0.385
Fe_11	4.134	1.465	4.311
Fe_12	1.361	4.312	4.327
Fe_13	4.143	1.473	8.281
Fe_14	1.345	4.309	8.281
Fe_15	4.145	1.462	12.254
Fe_16	1.343	4.280	12.237
Fe_17	4.197	1.373	16.153
Fe_18	1.344	4.465	16.126
O_19	3.091	2.436	27.973
O_20	3.363	2.604	17.586
O_21	0.275	0.290	0.115
O_22	5.439	3.305	0.232
O_23	2.452	2.874	0.674
O_24	2.857	5.529	0.785
O_25	4.537	1.540	2.278

O_26	0.930	4.431	2.388
O_27	2.532	2.658	3.964
O_28	2.980	5.492	4.006
O_29	0.173	0.289	4.639
O_30	5.326	3.106	4.637
O_31	3.692	1.360	6.295
O_32	1.796	4.196	6.295
O_33	0.166	0.283	7.941
O_34	5.322	3.118	7.941
O_35	2.523	2.664	8.620
O_36	2.965	5.499	8.620
O_37	4.595	1.586	10.266
O_38	0.893	4.422	10.266
O_39	2.550	2.682	11.872
O_40	2.943	5.517	11.942
O_41	0.130	0.239	12.628
O_42	5.358	3.081	12.532
O_43	3.695	1.581	14.241
O_44	1.794	4.111	14.223
O_45	0.033	0.141	15.815
O_46	5.452	2.995	15.776
O_47	2.151	2.772	16.916
O_48	2.850	5.591	16.229

TABLE S17. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaCoO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.280	2.672	2.258
La_2	1.424	5.386	2.331
La_3	4.134	2.733	6.117
La_4	1.388	5.520	6.117
La_5	4.051	2.733	10.030
La_6	1.305	5.520	10.030
La_7	4.052	2.645	14.061
La_8	1.190	5.508	13.869
Co_9	1.385	2.682	0.202
Co_10	4.419	5.482	0.194
Co_11	1.480	2.699	4.164
Co_12	4.113	5.530	4.165
Co_13	1.347	2.733	8.073
Co_14	4.093	5.520	8.073
Co_15	1.305	2.748	11.998
Co_16	3.953	5.498	11.996
Co_17	1.164	2.726	16.061

Co_18	4.180	5.501	16.022
O_19	3.063	3.839	27.760
O_20	0.171	4.134	0.589
O_21	3.089	1.479	27.871
O_22	0.192	1.240	0.696
O_23	1.814	2.874	2.238
O_24	3.821	5.375	2.180
O_25	0.302	1.136	3.936
O_26	3.064	1.628	4.149
O_27	5.376	3.882	4.162
O_28	2.575	4.287	4.492
O_29	4.134	0.300	6.117
O_30	1.388	2.378	6.117
O_31	2.900	3.949	7.824
O_32	0.153	4.304	7.824
O_33	2.540	1.162	8.322
O_34	5.286	1.517	8.322
O_35	1.305	3.088	10.030
O_36	4.051	5.166	10.030
O_37	0.054	1.108	11.939
O_38	2.837	1.485	11.645
O_39	5.125	3.924	12.277
O_40	2.390	4.417	12.003
O_41	3.591	0.158	14.021
O_42	1.589	2.586	13.829
O_43	2.842	3.920	16.400
O_44	5.475	4.133	15.482
O_45	2.816	1.577	16.552
O_46	5.478	1.295	15.594
O_47	3.724	2.651	27.162
O_48	3.506	2.768	17.148

TABLE S18. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaNiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.262	2.895	2.200
La_2	1.674	0.039	2.265
La_3	4.236	2.743	6.119
La_4	1.502	5.540	6.119
La_5	4.106	2.743	10.028
La_6	1.372	5.540	10.028
La_7	3.927	2.894	13.932
La_8	1.343	0.117	13.878
Ni_9	1.688	2.791	0.152

Ni_10	4.183	0.006	0.109
Ni_11	1.513	2.754	4.122
Ni_12	4.334	5.589	4.118
Ni_13	1.437	2.743	8.073
Ni_14	4.171	5.540	8.073
Ni_15	1.281	2.800	12.015
Ni_16	4.102	5.568	12.029
Ni_17	1.352	2.819	15.979
Ni_18	3.848	0.027	16.027
O_19	4.834	2.737	27.041
O_20	4.490	2.804	17.229
O_21	2.894	4.243	0.573
O_22	0.078	3.912	27.518
O_23	2.934	1.389	0.643
O_24	0.088	1.576	27.571
O_25	1.159	2.862	2.096
O_26	4.771	5.439	2.037
O_27	0.439	1.109	4.149
O_28	3.135	1.591	3.865
O_29	5.447	3.965	4.434
O_30	2.738	4.376	4.132
O_31	4.236	0.310	6.119
O_32	1.502	2.378	6.119
O_33	2.991	3.959	7.819
O_34	0.257	4.324	7.819
O_35	2.618	1.162	8.328
O_36	5.351	1.526	8.328
O_37	1.372	3.107	10.028
O_38	4.106	5.176	10.028
O_39	0.168	1.175	11.693
O_40	2.888	1.599	12.040
O_41	5.174	3.915	12.005
O_42	2.498	4.386	12.259
O_43	4.479	0.040	14.115
O_44	0.864	2.673	14.027
O_45	2.547	4.277	15.506
O_46	5.194	3.960	16.664
O_47	2.597	1.411	15.543
O_48	5.211	1.627	16.772

TABLE S19. Cartesian coordinates of MO₂+0.5O-terminated surface of LaCuO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.453	2.673	2.181
La_2	1.691	5.579	2.264
La_3	4.218	2.743	6.107
La_4	1.479	5.541	6.107
La_5	4.098	2.743	10.020
La_6	1.359	5.541	10.020
La_7	4.016	2.727	13.961
La_8	1.305	5.587	13.871
Cu_9	1.644	2.491	0.062
Cu_10	4.348	0.045	0.144
Cu_11	1.553	2.767	4.134
Cu_12	4.287	5.518	4.150
Cu_13	1.419	2.743	8.063
Cu_14	4.158	5.541	8.063
Cu_15	1.337	2.799	12.020
Cu_16	4.083	5.478	11.998
Cu_17	1.324	2.507	16.098
Cu_18	4.099	0.084	15.998
O_19	4.168	3.330	26.986
O_20	4.332	3.382	17.309
O_21	2.927	3.854	27.530
O_22	5.270	3.934	27.771
O_23	3.042	1.288	0.644
O_24	0.342	1.241	0.607
O_25	1.552	3.183	2.137
O_26	4.300	5.097	2.209
O_27	0.343	1.228	3.888
O_28	3.086	1.478	3.884
O_29	0.024	4.019	4.441
O_30	2.750	4.266	4.454
O_31	4.218	0.284	6.107
O_32	1.479	2.405	6.107
O_33	2.962	3.973	7.827
O_34	0.223	4.311	7.827
O_35	2.616	1.175	8.300
O_36	5.354	1.513	8.300
O_37	1.359	3.082	10.020
O_38	4.098	5.203	10.020
O_39	0.187	1.099	11.962
O_40	2.904	1.592	12.013
O_41	5.203	3.824	12.012

O_42	2.471	4.428	11.991
O_43	4.100	5.238	13.978
O_44	1.369	3.117	14.073
O_45	3.250	3.941	16.456
O_46	0.111	3.882	16.790
O_47	2.593	1.252	15.543
O_48	5.373	1.338	15.504

TABLE S20. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaScO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.295	1.661	2.411
La_2	4.328	4.683	2.496
La_3	1.439	1.259	6.567
La_4	4.172	4.188	6.567
La_5	1.310	1.784	10.654
La_6	4.300	4.713	10.654
La_7	1.430	1.333	14.800
La_8	4.143	4.134	14.748
Sc_9	4.201	1.685	0.537
Sc_10	1.347	4.384	0.536
Sc_11	4.238	1.515	4.541
Sc_12	1.371	4.435	4.531
Sc_13	4.236	1.522	8.611
Sc_14	1.375	4.450	8.611
Sc_15	4.221	1.508	12.689
Sc_16	1.378	4.462	12.699
Sc_17	4.452	1.599	16.778
Sc_18	1.175	4.386	16.735
O_19	2.607	2.827	0.264
O_20	0.010	0.168	0.869
O_21	5.540	3.122	0.980
O_22	3.669	1.319	2.452
O_23	1.907	4.438	2.463
O_24	0.179	0.310	4.093
O_25	5.409	3.241	4.087
O_26	2.547	2.724	4.940
O_27	3.063	5.651	4.964
O_28	4.813	1.725	6.567
O_29	0.797	4.653	6.567
O_30	2.536	2.711	8.174
O_31	3.075	5.640	8.174
O_32	0.214	0.332	9.048
O_33	5.397	3.261	9.048

O_34	3.658	1.319	10.654
O_35	1.952	4.247	10.654
O_36	0.203	0.325	12.240
O_37	5.394	3.256	12.266
O_38	2.548	2.719	13.108
O_39	3.073	5.640	13.150
O_40	4.750	1.687	14.751
O_41	0.857	4.581	14.737
O_42	2.634	2.849	16.282
O_43	0.325	0.382	16.907
O_44	5.307	3.329	17.005

TABLE S21. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaTiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.422	1.283	2.279
La_2	4.173	4.132	2.298
La_3	1.319	1.790	6.315
La_4	4.256	4.629	6.315
La_5	1.413	1.161	10.299
La_6	4.162	4.001	10.299
La_7	1.284	1.775	14.272
La_8	4.248	4.541	14.313
Ti_9	4.220	1.431	0.416
Ti_10	1.351	4.122	0.430
Ti_11	4.201	1.492	4.325
Ti_12	1.359	4.354	4.323
Ti_13	4.209	1.475	8.307
Ti_14	1.366	4.315	8.307
Ti_15	4.193	1.449	12.289
Ti_16	1.349	4.309	12.301
Ti_17	4.084	1.602	16.216
Ti_18	1.686	4.329	16.276
O_19	5.619	2.810	0.223
O_20	2.764	2.779	0.789
O_21	2.843	5.620	0.666
O_22	4.655	1.398	2.379
O_23	0.920	4.423	2.350
O_24	2.536	2.695	3.990
O_25	3.000	5.525	3.994
O_26	0.179	0.296	4.706
O_27	5.394	3.149	4.648
O_28	3.741	1.438	6.315
O_29	1.834	4.278	6.315

O_30	0.184	0.323	7.967
O_31	5.391	3.162	7.967
O_32	2.547	2.628	8.647
O_33	3.028	5.468	8.647
O_34	4.677	1.513	10.299
O_35	0.898	4.353	10.299
O_36	2.541	2.626	11.989
O_37	3.009	5.449	11.968
O_38	0.158	0.294	12.618
O_39	5.381	3.136	12.608
O_40	3.761	1.386	14.255
O_41	1.687	4.354	14.316
O_42	5.437	2.965	15.849
O_43	2.502	2.674	16.481
O_44	3.101	5.561	16.464

TABLE S22. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaVO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.438	1.304	2.223
La_2	4.105	4.262	2.407
La_3	1.285	1.735	6.313
La_4	4.207	4.585	6.313
La_5	1.406	1.227	10.290
La_6	4.086	4.077	10.290
La_7	1.315	1.719	14.265
La_8	4.165	4.500	14.285
V_9	4.186	1.479	0.442
V_10	1.489	4.014	0.295
V_11	4.133	1.498	4.317
V_12	1.330	4.363	4.305
V_13	4.146	1.481	8.301
V_14	1.346	4.331	8.301
V_15	4.163	1.468	12.274
V_16	1.335	4.326	12.269
V_17	4.022	1.575	16.228
V_18	1.541	4.252	16.253
O_19	0.262	2.319	0.140
O_20	2.961	2.816	0.825
O_21	3.029	5.609	0.592
O_22	4.640	1.329	2.396
O_23	0.841	4.580	2.186
O_24	2.494	2.748	3.915
O_25	2.921	5.573	4.032

O_26	0.146	0.234	4.731
O_27	5.304	3.135	4.610
O_28	3.670	1.382	6.313
O_29	1.822	4.232	6.313
O_30	0.195	0.269	7.953
O_31	5.297	3.119	7.953
O_32	2.496	2.693	8.649
O_33	2.996	5.543	8.649
O_34	4.623	1.580	10.290
O_35	0.869	4.431	10.290
O_36	2.483	2.663	11.944
O_37	3.005	5.510	11.948
O_38	0.213	0.279	12.658
O_39	5.300	3.138	12.594
O_40	3.757	1.433	14.226
O_41	1.773	4.229	14.251
O_42	5.489	3.051	15.866
O_43	2.658	2.843	16.574
O_44	2.853	5.696	16.326

TABLE S23. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaCrO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.467	1.376	2.322
La_2	4.249	4.305	2.202
La_3	1.304	1.634	6.239
La_4	4.167	4.433	6.239
La_5	1.377	1.274	10.186
La_6	4.094	4.073	10.186
La_7	1.279	1.579	14.113
La_8	4.221	4.349	14.177
Cr_9	4.303	1.453	0.384
Cr_10	1.312	4.268	0.307
Cr_11	4.091	1.514	4.269
Cr_12	1.392	4.216	4.245
Cr_13	4.131	1.454	8.213
Cr_14	1.340	4.253	8.213
Cr_15	4.122	1.461	12.159
Cr_16	1.351	4.235	12.143
Cr_17	4.158	1.434	16.070
Cr_18	1.354	4.414	15.981
O_19	5.575	0.188	0.788
O_20	5.339	2.984	0.047
O_21	2.820	0.039	0.611

O_22	4.035	1.896	2.235
O_23	1.268	3.853	2.267
O_24	2.449	2.566	4.253
O_25	2.976	5.436	3.947
O_26	0.178	0.300	4.278
O_27	5.293	3.103	4.568
O_28	3.705	1.368	6.239
O_29	1.766	4.167	6.239
O_30	0.143	0.253	7.892
O_31	5.328	3.051	7.892
O_32	2.538	2.656	8.533
O_33	2.933	5.454	8.533
O_34	4.556	1.540	10.186
O_35	0.915	4.339	10.186
O_36	2.565	2.682	11.777
O_37	2.906	5.478	11.860
O_38	0.107	0.205	12.497
O_39	5.373	3.014	12.453
O_40	3.666	1.570	14.123
O_41	1.826	4.060	14.145
O_42	0.081	0.094	15.606
O_43	5.541	2.934	15.806
O_44	2.863	5.495	16.271

TABLE S24. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaMnO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.376	1.104	2.315
La_2	4.202	4.218	2.257
La_3	1.289	1.885	6.171
La_4	4.211	4.845	6.171
La_5	1.406	1.192	10.059
La_6	4.094	4.152	10.059
La_7	1.262	1.864	13.922
La_8	4.215	4.833	13.981
Mn_9	4.347	1.372	0.217
Mn_10	1.194	4.602	0.182
Mn_11	4.121	1.565	4.216
Mn_12	1.371	4.472	4.242
Mn_13	4.152	1.538	8.115
Mn_14	1.348	4.499	8.115
Mn_15	4.142	1.550	12.006
Mn_16	1.375	4.479	12.010
Mn_17	4.235	1.550	15.950

Mn_18	1.296	4.790	15.852
O_19	0.324	0.333	0.123
O_20	5.408	3.213	0.160
O_21	2.911	5.679	0.620
O_22	4.468	1.718	2.288
O_23	0.922	4.604	2.354
O_24	2.509	2.610	3.891
O_25	2.948	5.574	3.891
O_26	0.137	0.490	4.490
O_27	5.349	3.434	4.568
O_28	3.671	1.417	6.171
O_29	1.829	4.378	6.171
O_30	0.117	0.437	7.776
O_31	5.383	3.397	7.776
O_32	2.578	2.640	8.453
O_33	2.922	5.600	8.453
O_34	4.634	1.659	10.059
O_35	0.866	4.620	10.059
O_36	2.573	2.642	11.614
O_37	2.938	5.597	11.695
O_38	0.122	0.436	12.364
O_39	5.409	3.399	12.362
O_40	3.663	1.549	13.916
O_41	1.930	4.241	13.955
O_42	0.094	0.278	15.471
O_43	5.564	3.275	15.666
O_44	2.847	5.843	16.097

TABLE S25. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaFeO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.367	1.420	2.373
La_2	4.042	4.163	2.242
La_3	1.300	1.697	6.295
La_4	4.188	4.532	6.295
La_5	1.389	1.250	10.266
La_6	4.098	4.086	10.266
La_7	1.416	1.454	14.246
La_8	4.291	4.374	14.267
Fe_9	4.019	1.186	0.342
Fe_10	1.319	4.341	0.477
Fe_11	4.152	1.509	4.297
Fe_12	1.342	4.322	4.321
Fe_13	4.143	1.473	8.281

Fe_14	1.345	4.309	8.281
Fe_15	4.207	1.499	12.268
Fe_16	1.293	4.219	12.276
Fe_17	4.086	1.429	16.138
Fe_18	1.662	4.364	16.278
O_19	5.348	5.381	0.206
O_20	2.558	2.799	0.573
O_21	2.584	5.644	0.850
O_22	4.618	1.732	2.276
O_23	0.862	4.112	2.369
O_24	2.568	2.697	4.021
O_25	2.941	5.536	3.926
O_26	0.159	0.275	4.587
O_27	5.362	3.086	4.726
O_28	3.692	1.360	6.295
O_29	1.796	4.196	6.295
O_30	0.166	0.283	7.941
O_31	5.322	3.118	7.941
O_32	2.523	2.664	8.620
O_33	2.965	5.499	8.620
O_34	4.595	1.586	10.266
O_35	0.893	4.422	10.266
O_36	2.466	2.609	11.958
O_37	2.962	5.482	12.272
O_38	0.189	0.291	12.575
O_39	5.193	3.228	12.258
O_40	4.190	1.907	14.242
O_41	1.193	3.831	14.321
O_42	0.033	0.227	15.980
O_43	3.037	2.973	16.484
O_44	2.826	0.128	15.698

TABLE S26. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaCoO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.192	2.649	2.210
La_2	1.388	5.517	2.158
La_3	4.134	2.733	6.117
La_4	1.388	5.520	6.117
La_5	4.051	2.733	10.030
La_6	1.305	5.520	10.030
La_7	3.908	2.817	13.981
La_8	1.199	5.536	13.892
Co_9	1.299	2.892	0.139

Co_10	4.203	5.403	0.248
Co_11	1.429	2.691	4.106
Co_12	4.098	5.557	4.142
Co_13	1.347	2.733	8.073
Co_14	4.093	5.520	8.073
Co_15	1.279	2.717	12.025
Co_16	3.997	5.534	11.981
Co_17	1.037	2.902	15.984
Co_18	4.028	5.537	15.868
O_19	2.745	4.386	28.108
O_20	0.005	4.121	0.759
O_21	5.321	1.313	0.268
O_22	1.826	2.448	2.005
O_23	3.798	0.055	2.189
O_24	0.198	1.093	3.919
O_25	3.049	1.580	4.212
O_26	5.249	3.928	4.130
O_27	2.533	4.389	4.306
O_28	4.134	0.300	6.117
O_29	1.388	2.378	6.117
O_30	2.900	3.949	7.824
O_31	0.153	4.304	7.824
O_32	2.540	1.162	8.322
O_33	5.286	1.517	8.322
O_34	1.305	3.088	10.030
O_35	4.051	5.166	10.030
O_36	0.014	1.157	11.790
O_37	2.785	1.423	11.640
O_38	5.217	4.010	12.291
O_39	2.524	4.293	12.234
O_40	3.824	0.411	13.917
O_41	1.487	2.306	14.108
O_42	2.587	4.371	15.847
O_43	5.320	4.232	15.357
O_44	5.018	1.441	16.163

TABLE S27. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaNiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.415	2.654	2.141
La_2	1.648	5.546	2.269
La_3	4.236	2.743	6.119
La_4	1.502	5.540	6.119
La_5	4.106	2.743	10.028

La_6	1.372	5.540	10.028
La_7	3.913	2.923	14.006
La_8	1.285	0.070	13.898
Ni_9	1.805	2.589	0.234
Ni_10	4.296	5.519	0.260
Ni_11	1.556	2.755	4.134
Ni_12	4.309	5.523	4.155
Ni_13	1.437	2.743	8.073
Ni_14	4.171	5.540	8.073
Ni_15	1.288	2.817	12.006
Ni_16	4.081	5.570	12.025
Ni_17	1.271	2.780	15.934
Ni_18	3.854	0.233	15.957
O_19	3.281	3.917	0.031
O_20	2.993	1.206	0.713
O_21	0.288	1.249	0.453
O_22	1.425	3.174	2.094
O_23	4.478	5.076	2.195
O_24	0.359	1.173	3.915
O_25	3.103	1.497	3.845
O_26	0.046	4.007	4.493
O_27	2.767	4.318	4.406
O_28	4.236	0.310	6.119
O_29	1.502	2.378	6.119
O_30	2.991	3.959	7.819
O_31	0.257	4.324	7.819
O_32	2.618	1.162	8.328
O_33	5.351	1.526	8.328
O_34	1.372	3.107	10.028
O_35	4.106	5.176	10.028
O_36	0.201	1.158	11.763
O_37	2.908	1.636	12.072
O_38	5.158	3.909	11.986
O_39	2.449	4.430	12.221
O_40	4.393	5.463	14.096
O_41	0.901	2.916	13.994
O_42	2.551	4.272	15.739
O_43	2.495	1.437	15.457
O_44	5.148	1.740	16.141

TABLE S28. Cartesian coordinates of MO₂-0.5O-terminated surface of LaCuO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.399	2.717	2.193
La_2	1.629	5.577	2.143
La_3	4.218	2.743	6.107
La_4	1.479	5.541	6.107
La_5	4.098	2.743	10.020
La_6	1.359	5.541	10.020
La_7	4.061	2.574	13.945
La_8	1.237	5.415	13.989
Cu_9	1.540	2.694	0.218
Cu_10	4.465	0.047	0.220
Cu_11	1.567	2.751	4.154
Cu_12	4.261	5.522	4.146
Cu_13	1.419	2.743	8.063
Cu_14	4.158	5.541	8.063
Cu_15	1.358	2.738	11.994
Cu_16	4.034	5.456	11.984
Cu_17	1.194	2.525	15.946
Cu_18	4.086	5.520	15.952
O_19	0.312	4.200	0.265
O_20	3.001	1.373	0.462
O_21	0.256	1.376	0.617
O_22	1.734	3.100	2.231
O_23	4.130	5.156	2.192
O_24	0.335	1.183	3.865
O_25	3.091	1.500	3.953
O_26	0.011	3.984	4.374
O_27	2.763	4.274	4.483
O_28	4.218	0.284	6.107
O_29	1.479	2.405	6.107
O_30	2.962	3.973	7.827
O_31	0.223	4.311	7.827
O_32	2.616	1.175	8.300
O_33	5.354	1.513	8.300
O_34	1.359	3.082	10.020
O_35	4.098	5.203	10.020
O_36	0.166	1.076	12.030
O_37	2.915	1.549	11.777
O_38	5.214	3.830	12.166
O_39	2.428	4.390	11.969
O_40	3.802	5.421	13.911
O_41	1.601	2.793	13.973

O_42	5.374	4.030	15.700
O_43	2.586	1.143	15.882
O_44	5.355	1.245	15.546

TABLE S29. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaScO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.431	1.877	0.034
La_2	4.180	4.806	0.034
La_3	1.447	1.252	4.101
La_4	4.164	4.181	4.101
La_5	1.310	1.784	8.174
La_6	4.300	4.713	8.174
La_7	1.447	1.252	12.246
La_8	4.164	4.181	12.246
La_9	1.431	1.877	16.313
La_10	4.180	4.806	16.313
Sc_11	4.250	1.540	2.032
Sc_12	1.360	4.468	2.032
Sc_13	4.236	1.522	6.130
Sc_14	1.375	4.450	6.130
Sc_15	4.236	1.522	10.217
Sc_16	1.375	4.450	10.217
Sc_17	4.250	1.540	14.315
Sc_18	1.360	4.468	14.315
O_19	3.577	1.200	0.045
O_20	2.033	4.129	0.045
O_21	0.254	0.375	1.531
O_22	5.356	3.304	1.531
O_23	2.502	2.677	2.476
O_24	3.109	5.606	2.476
O_25	4.816	1.726	4.073
O_26	0.794	4.655	4.073
O_27	2.536	2.711	5.693
O_28	3.075	5.640	5.693
O_29	0.214	0.332	6.567
O_30	5.397	3.261	6.567
O_31	3.658	1.319	8.174
O_32	1.952	4.247	8.174
O_33	0.214	0.332	9.780
O_34	5.397	3.261	9.780
O_35	2.536	2.711	10.654
O_36	3.075	5.640	10.654
O_37	4.816	1.726	12.275

O_38	0.794	4.655	12.275
O_39	2.502	2.677	13.871
O_40	3.109	5.606	13.871
O_41	0.254	0.375	14.816
O_42	5.356	3.304	14.816
O_43	3.577	1.200	16.302
O_44	2.033	4.129	16.302

TABLE S30. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaTiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.272	1.084	0.140
La_2	4.303	3.924	0.140
La_3	1.321	1.804	4.024
La_4	4.254	4.644	4.024
La_5	1.413	1.161	7.967
La_6	4.162	4.001	7.967
La_7	1.321	1.804	11.910
La_8	4.254	4.644	11.910
La_9	1.272	1.084	15.794
La_10	4.303	3.924	15.794
Ti_11	4.185	1.465	1.977
Ti_12	1.390	4.305	1.977
Ti_13	4.209	1.475	5.975
Ti_14	1.366	4.315	5.975
Ti_15	4.209	1.475	9.959
Ti_16	1.366	4.315	9.959
Ti_17	4.185	1.465	13.957
Ti_18	1.390	4.305	13.957
O_19	4.709	1.592	27.890
O_20	0.867	4.432	27.890
O_21	2.490	2.597	1.593
O_22	3.085	5.436	1.593
O_23	0.229	0.346	2.296
O_24	5.346	3.186	2.296
O_25	3.753	1.440	3.963
O_26	1.822	4.280	3.963
O_27	0.184	0.323	5.636
O_28	5.391	3.162	5.636
O_29	2.547	2.628	6.315
O_30	3.028	5.468	6.315
O_31	4.677	1.513	7.967
O_32	0.898	4.353	7.967
O_33	2.547	2.628	9.619

O_34	3.028	5.468	9.619
O_35	0.184	0.323	10.299
O_36	5.391	3.162	10.299
O_37	3.753	1.440	11.971
O_38	1.822	4.280	11.971
O_39	0.229	0.346	13.638
O_40	5.346	3.186	13.638
O_41	2.490	2.597	14.341
O_42	3.085	5.436	14.341
O_43	4.709	1.592	15.979
O_44	0.867	4.432	15.979

TABLE S31. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaVO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.241	1.153	0.171
La_2	4.251	4.003	0.171
La_3	1.304	1.751	4.008
La_4	4.188	4.602	4.008
La_5	1.406	1.227	7.953
La_6	4.086	4.077	7.953
La_7	1.304	1.751	11.899
La_8	4.188	4.602	11.899
La_9	1.241	1.153	15.736
La_10	4.251	4.003	15.736
V_11	4.124	1.466	1.957
V_12	1.368	4.316	1.957
V_13	4.146	1.481	5.965
V_14	1.346	4.331	5.965
V_15	4.146	1.481	9.942
V_16	1.346	4.331	9.942
V_17	4.124	1.466	13.949
V_18	1.368	4.316	13.949
O_19	4.584	1.673	27.751
O_20	0.908	4.523	27.751
O_21	2.431	2.592	1.606
O_22	3.061	5.442	1.606
O_23	0.256	0.360	2.248
O_24	5.236	3.210	2.248
O_25	3.666	1.362	3.998
O_26	1.826	4.212	3.998
O_27	0.195	0.269	5.617
O_28	5.297	3.119	5.617
O_29	2.496	2.693	6.313

O_30	2.996	5.543	6.313
O_31	4.623	1.580	7.953
O_32	0.869	4.431	7.953
O_33	2.496	2.693	9.594
O_34	2.996	5.543	9.594
O_35	0.195	0.269	10.290
O_36	5.297	3.119	10.290
O_37	3.666	1.362	11.909
O_38	1.826	4.212	11.909
O_39	0.256	0.360	13.659
O_40	5.236	3.210	13.659
O_41	2.431	2.592	14.300
O_42	3.061	5.442	14.300
O_43	4.584	1.673	16.063
O_44	0.908	4.523	16.063

TABLE S32. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaCrO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.244	1.190	0.070
La_2	4.227	3.989	0.070
La_3	1.317	1.659	3.966
La_4	4.154	4.458	3.966
La_5	1.377	1.274	7.892
La_6	4.094	4.073	7.892
La_7	1.317	1.659	11.819
La_8	4.154	4.458	11.819
La_9	1.244	1.190	15.715
La_10	4.227	3.989	15.715
Cr_11	4.113	1.449	1.904
Cr_12	1.358	4.247	1.904
Cr_13	4.131	1.454	5.919
Cr_14	1.340	4.253	5.919
Cr_15	4.131	1.454	9.866
Cr_16	1.340	4.253	9.866
Cr_17	4.113	1.449	13.880
Cr_18	1.358	4.247	13.880
O_19	4.537	1.632	27.583
O_20	0.934	4.430	27.583
O_21	2.449	2.567	1.568
O_22	3.022	5.365	1.568
O_23	0.239	0.355	2.166
O_24	5.233	3.154	2.166
O_25	3.696	1.343	3.954

O_26	1.775	4.142	3.954
O_27	0.143	0.253	5.599
O_28	5.328	3.051	5.599
O_29	2.538	2.656	6.239
O_30	2.933	5.454	6.239
O_31	4.556	1.540	7.892
O_32	0.915	4.339	7.892
O_33	2.538	2.656	9.545
O_34	2.933	5.454	9.545
O_35	0.143	0.253	10.186
O_36	5.328	3.051	10.186
O_37	3.696	1.343	11.831
O_38	1.775	4.142	11.831
O_39	0.239	0.355	13.619
O_40	5.233	3.154	13.619
O_41	2.449	2.567	14.217
O_42	3.022	5.365	14.217
O_43	4.537	1.632	15.987
O_44	0.934	4.430	15.987

TABLE S33. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaMnO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.222	1.166	0.053
La_2	4.278	4.126	0.053
La_3	1.302	1.892	3.912
La_4	4.198	4.853	3.912
La_5	1.406	1.192	7.776
La_6	4.094	4.152	7.776
La_7	1.302	1.892	11.640
La_8	4.198	4.853	11.640
La_9	1.222	1.166	15.499
La_10	4.278	4.126	15.499
Mn_11	4.111	1.530	1.845
Mn_12	1.389	4.490	1.845
Mn_13	4.153	1.538	5.832
Mn_14	1.348	4.499	5.832
Mn_15	4.153	1.538	9.720
Mn_16	1.348	4.499	9.720
Mn_17	4.111	1.530	13.707
Mn_18	1.389	4.490	13.707
O_19	4.665	1.854	27.209
O_20	0.835	4.814	27.209
O_21	2.460	2.701	1.458

O_22	3.040	5.661	1.458
O_23	0.235	0.417	2.135
O_24	5.265	3.378	2.135
O_25	3.639	1.364	3.926
O_26	1.861	4.325	3.926
O_27	0.117	0.437	5.493
O_28	5.383	3.397	5.493
O_29	2.578	2.640	6.171
O_30	2.922	5.600	6.171
O_31	4.634	1.659	7.776
O_32	0.866	4.620	7.776
O_33	2.578	2.640	9.381
O_34	2.922	5.600	9.381
O_35	0.117	0.437	10.059
O_36	5.383	3.397	10.059
O_37	3.639	1.364	11.626
O_38	1.861	4.325	11.626
O_39	0.235	0.417	13.417
O_40	5.265	3.378	13.417
O_41	2.460	2.701	14.094
O_42	3.040	5.661	14.094
O_43	4.665	1.854	15.895
O_44	0.835	4.814	15.895

TABLE S34. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaFeO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.275	1.097	0.141
La_2	4.315	3.994	0.162
La_3	1.280	1.742	3.965
La_4	4.157	4.535	3.991
La_5	1.389	1.250	7.941
La_6	4.098	4.086	7.941
La_7	1.331	1.699	11.892
La_8	4.207	4.577	11.917
La_9	1.173	1.158	15.720
La_10	4.213	3.932	15.742
Fe_11	4.095	1.437	1.956
Fe_12	1.388	4.266	1.940
Fe_13	4.143	1.473	5.956
Fe_14	1.345	4.309	5.956
Fe_15	4.143	1.473	9.926
Fe_16	1.345	4.309	9.926
Fe_17	4.100	1.431	13.942

Fe_18	1.392	4.273	13.927
O_19	4.599	1.648	27.725
O_20	0.932	4.499	27.583
O_21	2.459	2.551	1.576
O_22	3.105	5.437	1.574
O_23	0.236	0.356	2.200
O_24	5.185	3.155	2.244
O_25	3.689	1.341	3.949
O_26	1.809	4.169	4.006
O_27	0.166	0.283	5.616
O_28	5.322	3.118	5.616
O_29	2.523	2.664	6.295
O_30	2.965	5.499	6.295
O_31	4.595	1.586	7.941
O_32	0.893	4.422	7.941
O_33	2.523	2.664	9.587
O_34	2.965	5.499	9.587
O_35	0.166	0.283	10.266
O_36	5.322	3.118	10.266
O_37	3.679	1.333	11.876
O_38	1.799	4.177	11.934
O_39	0.303	0.320	13.638
O_40	5.252	3.191	13.682
O_41	2.382	2.601	14.308
O_42	3.029	5.387	14.306
O_43	4.556	1.663	16.181
O_44	0.888	4.484	16.040

TABLE S35. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaCoO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.400	2.843	0.142
La_2	1.653	5.410	0.142
La_3	4.147	2.722	3.971
La_4	1.401	5.531	3.971
La_5	4.051	2.733	7.824
La_6	1.305	5.520	7.824
La_7	3.968	2.733	11.737
La_8	1.222	5.520	11.737
La_9	3.679	2.847	15.556
La_10	0.933	5.406	15.556
Co_11	1.444	2.708	1.906
Co_12	4.190	5.545	1.906
Co_13	1.347	2.733	5.868

Co_14	4.093	5.520	5.868
Co_15	1.263	2.733	9.781
Co_16	4.010	5.520	9.781
Co_17	1.154	2.703	13.767
Co_18	3.900	5.550	13.767
O_19	1.312	3.091	27.397
O_20	4.058	5.162	27.397
O_21	0.336	1.070	1.652
O_22	3.082	1.608	1.652
O_23	5.279	3.862	2.096
O_24	2.532	4.391	2.096
O_25	4.149	0.283	3.914
O_26	1.403	2.395	3.914
O_27	2.900	3.949	5.619
O_28	0.153	4.304	5.619
O_29	2.540	1.162	6.117
O_30	5.286	1.517	6.117
O_31	1.305	3.088	7.824
O_32	4.051	5.166	7.824
O_33	0.070	1.162	9.532
O_34	2.817	1.517	9.532
O_35	5.203	3.949	10.030
O_36	2.457	4.304	10.030
O_37	3.968	0.300	11.737
O_38	1.222	2.378	11.737
O_39	2.810	3.863	13.579
O_40	0.063	4.390	13.579
O_41	2.249	1.055	14.025
O_42	4.996	1.624	14.025
O_43	1.297	3.092	15.958
O_44	4.043	5.161	15.958

TABLE S36. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaNiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.513	2.858	0.158
La_2	1.780	5.425	0.158
La_3	4.259	2.728	3.955
La_4	1.525	5.555	3.955
La_5	4.126	2.743	7.819
La_6	1.393	5.540	7.819
La_7	3.994	2.728	11.682
La_8	1.261	5.555	11.682
La_9	3.740	2.858	15.479

La_10	1.006	5.425	15.479
Ni_11	1.588	2.727	1.903
Ni_12	4.321	5.556	1.903
Ni_13	1.458	2.743	5.864
Ni_14	4.191	5.540	5.864
Ni_15	1.328	2.743	9.773
Ni_16	4.062	5.540	9.773
Ni_17	1.198	2.727	13.735
Ni_18	3.932	5.556	13.735
O_19	1.469	3.092	27.398
O_20	4.202	5.192	27.398
O_21	0.475	1.081	1.647
O_22	3.208	1.607	1.647
O_23	5.422	3.886	2.108
O_24	2.688	4.397	2.108
O_25	4.262	0.305	3.908
O_26	1.529	2.383	3.908
O_27	3.011	3.959	5.609
O_28	0.277	4.324	5.609
O_29	2.638	1.162	6.119
O_30	5.372	1.526	6.119
O_31	1.393	3.107	7.819
O_32	4.126	5.176	7.819
O_33	0.148	1.162	9.519
O_34	2.881	1.526	9.519
O_35	5.242	3.959	10.028
O_36	2.508	4.324	10.028
O_37	3.991	0.305	11.729
O_38	1.257	2.383	11.729
O_39	2.831	3.886	13.529
O_40	0.098	4.397	13.529
O_41	2.311	1.081	13.991
O_42	5.045	1.607	13.991
O_43	1.317	3.092	15.876
O_44	4.051	5.192	15.876

TABLE S37. Cartesian coordinates of LaO-terminated surface of LaCuO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.491	2.875	0.161
La_2	1.752	5.409	0.161
La_3	4.233	2.736	3.968
La_4	1.495	5.548	3.968
La_5	4.114	2.743	7.827

La_6	1.376	5.541	7.827
La_7	3.995	2.736	11.686
La_8	1.256	5.548	11.686
La_9	3.737	2.875	15.493
La_10	0.999	5.409	15.493
Cu_11	1.560	2.718	1.904
Cu_12	4.298	5.567	1.904
Cu_13	1.436	2.743	5.870
Cu_14	4.174	5.541	5.870
Cu_15	1.316	2.743	9.783
Cu_16	4.054	5.541	9.783
Cu_17	1.191	2.718	13.749
Cu_18	3.930	5.567	13.749
O_19	1.397	3.114	27.355
O_20	4.135	5.170	27.355
O_21	0.414	1.113	1.657
O_22	3.153	1.575	1.657
O_23	5.444	3.937	2.108
O_24	2.705	4.348	2.108
O_25	4.238	0.280	3.919
O_26	1.500	2.408	3.919
O_27	2.978	3.973	5.633
O_28	0.239	4.311	5.633
O_29	2.632	1.175	6.107
O_30	5.371	1.513	6.107
O_31	1.376	3.082	7.827
O_32	4.114	5.203	7.827
O_33	0.119	1.175	9.547
O_34	2.858	1.513	9.547
O_35	5.251	3.973	10.020
O_36	2.512	4.311	10.020
O_37	3.990	0.280	11.735
O_38	1.251	2.408	11.735
O_39	2.785	3.937	13.545
O_40	0.046	4.348	13.545
O_41	2.337	1.113	13.996
O_42	5.075	1.575	13.996
O_43	1.355	3.114	15.952
O_44	4.093	5.170	15.952

TABLE S38. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaScO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.335	1.714	28.320
La_2	4.343	4.894	28.308
La_3	1.440	1.247	4.084
La_4	4.175	4.208	4.095
La_5	1.310	1.784	8.174
La_6	4.300	4.713	8.174
La_7	1.444	1.242	12.265
La_8	4.178	4.203	12.252
La_9	1.342	1.700	16.373
La_10	4.349	4.878	16.393
Sc_11	4.246	1.573	2.053
Sc_12	1.397	4.438	2.012
Sc_13	4.236	1.522	6.130
Sc_14	1.375	4.450	6.130
Sc_15	4.236	1.522	10.217
Sc_16	1.375	4.450	10.217
Sc_17	4.251	1.561	14.298
Sc_18	1.403	4.429	14.339
O_19	0.153	0.202	27.046
O_20	0.156	0.196	17.652
O_21	3.570	1.243	0.085
O_22	2.024	4.166	0.004
O_23	0.248	0.375	1.652
O_24	5.389	3.291	1.516
O_25	2.543	2.731	2.518
O_26	3.090	5.649	2.491
O_27	4.824	1.748	4.089
O_28	0.801	4.650	4.080
O_29	2.536	2.711	5.693
O_30	3.075	5.640	5.693
O_31	0.214	0.332	6.567
O_32	5.397	3.261	6.567
O_33	3.658	1.319	8.174
O_34	1.952	4.247	8.174
O_35	0.214	0.332	9.780
O_36	5.397	3.261	9.780
O_37	2.536	2.711	10.654
O_38	3.075	5.640	10.654
O_39	4.824	1.744	12.259
O_40	0.803	4.642	12.269
O_41	2.547	2.719	13.838

O_42	3.092	5.641	13.854
O_43	0.251	0.363	14.697
O_44	5.394	3.278	14.839
O_45	3.578	1.225	16.265
O_46	2.030	4.155	16.347

TABLE S39. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaTiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.471	1.434	27.846
La_2	4.037	3.934	27.816
La_3	1.324	1.782	3.993
La_4	4.239	4.582	3.979
La_5	1.413	1.161	7.967
La_6	4.162	4.001	7.967
La_7	1.322	1.781	11.943
La_8	4.236	4.583	11.950
La_9	1.472	1.435	16.022
La_10	4.038	3.935	16.054
Ti_11	4.247	1.484	1.979
Ti_12	1.303	4.414	1.915
Ti_13	4.209	1.475	5.975
Ti_14	1.366	4.315	5.975
Ti_15	4.209	1.475	9.959
Ti_16	1.366	4.315	9.959
Ti_17	4.246	1.484	13.955
Ti_18	1.299	4.414	14.018
O_19	2.679	2.744	26.597
O_20	2.679	2.740	17.272
O_21	4.826	1.651	0.163
O_22	0.791	4.527	0.126
O_23	2.574	2.752	1.653
O_24	2.959	5.570	1.585
O_25	0.137	0.264	2.472
O_26	5.474	3.144	2.430
O_27	3.739	1.439	3.969
O_28	1.850	4.274	3.981
O_29	0.184	0.323	5.636
O_30	5.391	3.162	5.636
O_31	2.547	2.628	6.315
O_32	3.028	5.468	6.315
O_33	4.677	1.513	7.967
O_34	0.898	4.353	7.967
O_35	2.547	2.628	9.619

O_36	3.028	5.468	9.619
O_37	0.184	0.323	10.299
O_38	5.391	3.162	10.299
O_39	3.739	1.439	11.964
O_40	1.847	4.274	11.950
O_41	0.135	0.262	13.463
O_42	5.474	3.144	13.502
O_43	2.574	2.754	14.280
O_44	2.956	5.572	14.347
O_45	4.827	1.653	15.770
O_46	0.787	4.525	15.809

TABLE S40. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaVO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.449	1.369	27.860
La_2	3.968	3.876	27.814
La_3	1.305	1.735	3.998
La_4	4.212	4.571	3.959
La_5	1.406	1.227	7.953
La_6	4.086	4.077	7.953
La_7	1.306	1.735	11.907
La_8	4.213	4.571	11.942
La_9	1.450	1.368	15.946
La_10	3.969	3.876	15.989
V_11	4.195	1.452	1.997
V_12	1.321	4.367	1.943
V_13	4.146	1.481	5.965
V_14	1.346	4.331	5.965
V_15	4.146	1.481	9.942
V_16	1.346	4.331	9.942
V_17	4.195	1.452	13.904
V_18	1.321	4.368	13.958
O_19	2.560	2.758	26.592
O_20	2.562	2.761	17.211
O_21	4.756	1.621	0.128
O_22	0.848	4.503	0.222
O_23	2.523	2.704	1.669
O_24	2.976	5.501	1.631
O_25	0.205	0.250	2.459
O_26	5.387	3.133	2.408
O_27	3.701	1.385	3.981
O_28	1.808	4.241	3.925
O_29	0.195	0.269	5.617

O_30	5.297	3.119	5.617
O_31	2.496	2.693	6.313
O_32	2.996	5.543	6.313
O_33	4.623	1.580	7.953
O_34	0.869	4.431	7.953
O_35	2.496	2.693	9.594
O_36	2.996	5.543	9.594
O_37	0.195	0.269	10.290
O_38	5.297	3.119	10.290
O_39	3.702	1.384	11.922
O_40	1.808	4.242	11.977
O_41	0.204	0.250	13.442
O_42	5.387	3.134	13.494
O_43	2.523	2.703	14.229
O_44	2.975	5.501	14.268
O_45	4.756	1.622	15.772
O_46	0.848	4.504	15.677

TABLE S41. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaCrO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.409	1.280	0.002
La_2	4.120	3.956	0.012
La_3	1.318	1.649	3.955
La_4	4.165	4.439	3.943
La_5	1.377	1.274	7.892
La_6	4.094	4.073	7.892
La_7	1.315	1.649	11.829
La_8	4.166	4.438	11.842
La_9	1.404	1.275	15.782
La_10	4.120	3.951	15.776
Cr_11	4.148	1.426	1.944
Cr_12	1.328	4.264	1.930
Cr_13	4.131	1.454	5.919
Cr_14	1.340	4.253	5.919
Cr_15	4.131	1.454	9.866
Cr_16	1.340	4.253	9.866
Cr_17	4.144	1.425	13.840
Cr_18	1.328	4.262	13.854
O_19	2.892	2.488	26.460
O_20	2.895	2.477	17.115
O_21	4.608	1.461	0.051
O_22	0.912	4.414	27.759
O_23	2.519	2.604	1.667

O_24	2.973	5.412	1.618
O_25	0.171	0.272	2.330
O_26	5.286	3.079	2.229
O_27	3.710	1.351	3.938
O_28	1.774	4.147	3.940
O_29	0.143	0.253	5.599
O_30	5.328	3.051	5.599
O_31	2.538	2.656	6.239
O_32	2.933	5.454	6.239
O_33	4.556	1.540	7.892
O_34	0.915	4.339	7.892
O_35	2.538	2.656	9.545
O_36	2.933	5.454	9.545
O_37	0.143	0.253	10.186
O_38	5.328	3.051	10.186
O_39	3.719	1.358	11.848
O_40	1.762	4.153	11.846
O_41	0.175	0.277	13.459
O_42	5.280	3.083	13.558
O_43	2.514	2.599	14.119
O_44	2.974	5.407	14.168
O_45	4.608	1.465	15.735
O_46	0.908	4.410	15.814

TABLE S42. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaMnO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.452	1.321	27.517
La_2	3.941	3.949	27.449
La_3	1.300	1.889	3.901
La_4	4.192	4.819	3.881
La_5	1.406	1.192	7.776
La_6	4.094	4.152	7.776
La_7	1.299	1.891	11.653
La_8	4.192	4.820	11.673
La_9	1.450	1.324	15.589
La_10	3.939	3.952	15.658
Mn_11	4.202	1.520	1.961
Mn_12	1.289	4.574	1.917
Mn_13	4.153	1.538	5.832
Mn_14	1.348	4.499	5.832
Mn_15	4.153	1.538	9.720
Mn_16	1.348	4.499	9.720
Mn_17	4.202	1.523	13.595

Mn_18	1.290	4.576	13.638
O_19	2.579	2.724	26.234
O_20	2.578	2.724	16.872
O_21	4.727	1.683	0.163
O_22	0.875	4.715	0.103
O_23	2.598	2.705	1.639
O_24	3.028	5.752	1.564
O_25	0.133	0.356	2.385
O_26	5.319	3.229	2.331
O_27	3.669	1.392	3.880
O_28	1.805	4.390	3.864
O_29	0.117	0.437	5.493
O_30	5.383	3.397	5.493
O_31	2.578	2.640	6.171
O_32	2.922	5.600	6.171
O_33	4.634	1.659	7.776
O_34	0.866	4.620	7.776
O_35	2.578	2.640	9.381
O_36	2.922	5.600	9.381
O_37	0.117	0.437	10.059
O_38	5.383	3.397	10.059
O_39	3.669	1.392	11.675
O_40	1.804	4.392	11.689
O_41	0.133	0.358	13.172
O_42	5.319	3.229	13.223
O_43	2.597	2.711	13.915
O_44	3.029	5.756	13.996
O_45	4.727	1.687	15.391
O_46	0.877	4.715	15.452

TABLE S43. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaFeO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.348	1.181	0.116
La_2	4.176	3.985	0.091
La_3	1.337	1.695	3.983
La_4	4.206	4.565	3.971
La_5	1.389	1.250	7.941
La_6	4.098	4.086	7.941
La_7	1.320	1.692	11.906
La_8	4.183	4.568	11.909
La_9	1.468	1.103	15.811
La_10	4.249	4.145	15.768
Fe_11	4.131	1.441	1.973

Fe_12	1.356	4.289	1.936
Fe_13	4.143	1.473	5.956
Fe_14	1.345	4.309	5.956
Fe_15	4.143	1.473	9.926
Fe_16	1.345	4.309	9.926
Fe_17	4.166	1.487	13.920
Fe_18	1.388	4.267	13.926
O_19	3.380	2.006	26.714
O_20	3.616	0.617	16.994
O_21	4.527	1.487	27.590
O_22	0.874	4.506	27.754
O_23	2.407	2.628	1.602
O_24	3.020	5.438	1.529
O_25	0.313	0.332	2.255
O_26	5.233	3.190	2.167
O_27	3.682	1.315	4.012
O_28	1.798	4.183	3.942
O_29	0.166	0.283	5.616
O_30	5.322	3.118	5.616
O_31	2.523	2.664	6.295
O_32	2.965	5.499	6.295
O_33	4.595	1.586	7.941
O_34	0.893	4.422	7.941
O_35	2.523	2.664	9.587
O_36	2.965	5.499	9.587
O_37	0.166	0.283	10.266
O_38	5.322	3.118	10.266
O_39	3.679	1.345	11.872
O_40	1.786	4.185	11.933
O_41	0.289	0.387	13.716
O_42	5.273	3.282	13.682
O_43	2.463	2.598	14.301
O_44	3.021	5.392	14.252
O_45	4.527	1.572	16.194
O_46	0.949	4.473	16.018

TABLE S44. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaCoO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.228	2.855	0.140
La_2	1.645	0.047	0.143
La_3	4.160	2.730	3.948
La_4	1.379	5.548	3.941
La_5	4.051	2.733	7.824

La_6	1.305	5.520	7.824
La_7	3.968	2.733	11.737
La_8	1.222	5.520	11.737
La_9	3.758	2.838	15.444
La_10	1.025	0.019	15.460
Co_11	1.432	2.769	1.971
Co_12	4.179	5.554	1.901
Co_13	1.347	2.733	5.868
Co_14	4.093	5.520	5.868
Co_15	1.263	2.733	9.781
Co_16	4.010	5.520	9.781
Co_17	1.177	2.716	13.651
Co_18	3.942	5.527	13.712
O_19	2.173	2.116	26.510
O_20	1.760	2.083	16.721
O_21	1.383	3.096	27.386
O_22	4.105	5.239	27.565
O_23	0.263	1.102	1.656
O_24	3.074	1.596	1.691
O_25	5.238	3.933	2.101
O_26	2.562	4.469	2.099
O_27	4.184	0.309	3.850
O_28	1.360	2.388	3.960
O_29	2.900	3.949	5.619
O_30	0.153	4.304	5.619
O_31	2.540	1.162	6.117
O_32	5.286	1.517	6.117
O_33	1.305	3.088	7.824
O_34	4.051	5.166	7.824
O_35	0.070	1.162	9.532
O_36	2.817	1.517	9.532
O_37	5.203	3.949	10.030
O_38	2.457	4.304	10.030
O_39	3.968	0.300	11.737
O_40	1.222	2.378	11.737
O_41	2.782	3.923	13.553
O_42	0.021	4.359	13.558
O_43	2.371	1.126	13.936
O_44	5.092	1.539	13.975
O_45	1.081	3.062	15.757
O_46	4.016	5.234	15.707

TABLE S45. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaNiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.447	2.795	0.117
La_2	1.683	5.406	0.090
La_3	4.249	2.698	3.970
La_4	1.543	5.532	3.924
La_5	4.126	2.743	7.819
La_6	1.393	5.540	7.819
La_7	3.968	2.754	11.712
La_8	1.264	5.583	11.666
La_9	3.801	2.878	15.552
La_10	1.043	5.489	15.514
Ni_11	1.541	2.679	1.881
Ni_12	4.293	5.526	1.948
Ni_13	1.458	2.743	5.864
Ni_14	4.191	5.540	5.864
Ni_15	1.328	2.743	9.773
Ni_16	4.062	5.540	9.773
Ni_17	1.203	2.756	13.685
Ni_18	3.957	0.007	13.752
O_19	3.667	4.701	26.394
O_20	1.816	3.584	16.885
O_21	1.325	2.944	27.466
O_22	4.568	5.507	27.333
O_23	0.433	1.000	1.746
O_24	3.163	1.518	1.602
O_25	5.370	3.864	2.112
O_26	2.694	4.368	1.940
O_27	4.161	0.286	3.928
O_28	1.571	2.388	3.880
O_29	3.011	3.959	5.609
O_30	0.277	4.324	5.609
O_31	2.638	1.162	6.119
O_32	5.372	1.526	6.119
O_33	1.393	3.107	7.819
O_34	4.126	5.176	7.819
O_35	0.148	1.162	9.519
O_36	2.881	1.526	9.519
O_37	5.242	3.959	10.028
O_38	2.508	4.324	10.028
O_39	3.937	0.304	11.755
O_40	1.346	2.403	11.708
O_41	2.802	3.917	13.693

O_42	0.130	4.420	13.516
O_43	2.335	1.171	14.036
O_44	5.062	1.688	13.897
O_45	0.922	2.782	15.937
O_46	4.162	5.334	15.805

TABLE S46. Cartesian coordinates of LaO+0.5O-terminated surface of LaCuO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.421	2.761	0.146
La_2	1.752	5.461	0.074
La_3	4.228	2.725	3.979
La_4	1.512	5.533	3.931
La_5	4.114	2.743	7.827
La_6	1.376	5.541	7.827
La_7	4.000	2.718	11.675
La_8	1.230	5.523	11.722
La_9	3.788	2.718	15.514
La_10	0.984	5.426	15.580
Cu_11	1.531	2.708	1.880
Cu_12	4.300	5.524	1.951
Cu_13	1.436	2.743	5.870
Cu_14	4.174	5.541	5.870
Cu_15	1.316	2.743	9.783
Cu_16	4.054	5.541	9.783
Cu_17	1.206	2.683	13.774
Cu_18	3.917	5.496	13.704
O_19	3.690	0.740	26.487
O_20	4.518	0.697	16.826
O_21	1.428	3.056	27.534
O_22	4.290	5.061	27.023
O_23	0.352	1.026	1.587
O_24	3.161	1.474	1.672
O_25	5.390	3.933	2.142
O_26	2.747	4.382	2.035
O_27	4.203	0.283	3.987
O_28	1.510	2.399	3.834
O_29	2.978	3.973	5.633
O_30	0.239	4.311	5.633
O_31	2.632	1.175	6.107
O_32	5.371	1.513	6.107
O_33	1.376	3.082	7.827
O_34	4.114	5.203	7.827
O_35	0.119	1.175	9.547

O_36	2.858	1.513	9.547
O_37	5.251	3.973	10.020
O_38	2.512	4.311	10.020
O_39	4.024	0.274	11.667
O_40	1.228	2.390	11.818
O_41	2.829	3.906	13.517
O_42	5.473	4.359	13.612
O_43	2.387	1.000	14.071
O_44	5.056	1.444	13.985
O_45	1.297	3.024	15.776
O_46	3.909	5.026	16.279

TABLE S47. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaScO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.337	1.896	0.056
La_2	4.175	4.645	0.075
La_3	1.439	1.262	4.095
La_4	4.183	4.172	4.086
La_5	1.310	1.784	8.174
La_6	4.300	4.713	8.174
La_7	1.439	1.262	12.252
La_8	4.183	4.172	12.261
La_9	1.337	1.896	16.291
La_10	4.175	4.645	16.272
Sc_11	4.250	1.510	2.036
Sc_12	1.362	4.469	2.029
Sc_13	4.236	1.522	6.130
Sc_14	1.375	4.450	6.130
Sc_15	4.236	1.522	10.217
Sc_16	1.375	4.450	10.217
Sc_17	4.250	1.510	14.311
Sc_18	1.362	4.469	14.318
O_19	1.957	4.143	0.014
O_20	0.261	0.394	1.534
O_21	5.351	3.320	1.657
O_22	2.491	2.656	2.438
O_23	3.155	5.576	2.392
O_24	4.801	1.719	4.081
O_25	0.812	4.677	4.080
O_26	2.536	2.711	5.693
O_27	3.075	5.640	5.693
O_28	0.214	0.332	6.567
O_29	5.397	3.261	6.567

O_30	3.658	1.319	8.174
O_31	1.952	4.247	8.174
O_32	0.214	0.332	9.780
O_33	5.397	3.261	9.780
O_34	2.536	2.711	10.654
O_35	3.075	5.640	10.654
O_36	4.801	1.719	12.266
O_37	0.812	4.677	12.267
O_38	2.491	2.656	13.909
O_39	3.155	5.576	13.955
O_40	0.261	0.394	14.813
O_41	5.351	3.320	14.690
O_42	1.957	4.143	16.333

TABLE S48. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaTiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.298	1.179	0.139
La_2	4.235	3.903	0.155
La_3	1.325	1.813	4.013
La_4	4.233	4.633	4.006
La_5	1.413	1.161	7.967
La_6	4.162	4.001	7.967
La_7	1.325	1.813	11.921
La_8	4.233	4.633	11.928
La_9	1.298	1.179	15.795
La_10	4.235	3.903	15.780
Ti_11	4.196	1.465	1.964
Ti_12	1.368	4.322	1.895
Ti_13	4.209	1.475	5.975
Ti_14	1.366	4.315	5.975
Ti_15	4.209	1.475	9.959
Ti_16	1.366	4.315	9.959
Ti_17	4.196	1.465	13.970
Ti_18	1.368	4.322	14.040
O_19	4.697	1.571	27.879
O_20	2.503	2.584	1.656
O_21	3.104	5.449	1.609
O_22	0.254	0.388	2.263
O_23	5.339	3.187	2.283
O_24	3.755	1.424	3.973
O_25	1.837	4.262	3.999
O_26	0.184	0.323	5.636
O_27	5.391	3.162	5.636

O_28	2.547	2.628	6.315
O_29	3.028	5.468	6.315
O_30	4.677	1.513	7.967
O_31	0.898	4.353	7.967
O_32	2.547	2.628	9.619
O_33	3.028	5.468	9.619
O_34	0.184	0.323	10.299
O_35	5.391	3.162	10.299
O_36	3.755	1.424	11.961
O_37	1.837	4.262	11.936
O_38	0.254	0.388	13.671
O_39	5.339	3.187	13.651
O_40	2.503	2.584	14.278
O_41	3.104	5.449	14.325
O_42	4.697	1.571	15.990

TABLE S49. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaVO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.343	1.135	0.154
La_2	4.219	4.106	0.165
La_3	1.312	1.733	4.007
La_4	4.180	4.607	4.007
La_5	1.406	1.227	7.953
La_6	4.086	4.077	7.953
La_7	1.312	1.733	11.900
La_8	4.180	4.607	11.900
La_9	1.343	1.135	15.753
La_10	4.219	4.106	15.742
V_11	4.142	1.472	1.893
V_12	1.353	4.308	1.951
V_13	4.146	1.481	5.965
V_14	1.346	4.331	5.965
V_15	4.146	1.481	9.942
V_16	1.346	4.331	9.942
V_17	4.142	1.472	14.014
V_18	1.353	4.308	13.956
O_19	0.884	4.531	27.797
O_20	2.401	2.630	1.541
O_21	3.008	5.413	1.613
O_22	0.317	0.359	2.258
O_23	5.226	3.288	2.206
O_24	3.675	1.350	3.993
O_25	1.803	4.186	3.968

O_26	0.195	0.269	5.617
O_27	5.297	3.119	5.617
O_28	2.496	2.693	6.313
O_29	2.996	5.543	6.313
O_30	4.623	1.580	7.953
O_31	0.869	4.431	7.953
O_32	2.496	2.693	9.594
O_33	2.996	5.543	9.594
O_34	0.195	0.269	10.290
O_35	5.297	3.119	10.290
O_36	3.675	1.350	11.914
O_37	1.803	4.186	11.939
O_38	0.317	0.359	13.649
O_39	5.226	3.288	13.701
O_40	2.401	2.630	14.366
O_41	3.008	5.413	14.293
O_42	0.884	4.531	16.016

TABLE S50. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaCrO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.344	1.188	0.057
La_2	4.193	4.073	0.053
La_3	1.334	1.644	3.966
La_4	4.161	4.469	3.957
La_5	1.377	1.274	7.892
La_6	4.094	4.073	7.892
La_7	1.334	1.644	11.819
La_8	4.161	4.469	11.828
La_9	1.344	1.188	15.728
La_10	4.193	4.073	15.731
Cr_11	1.458	0.375	0.000
Cr_12	4.238	0.381	0.000
Cr_13	1.450	1.192	0.000
Cr_14	4.240	1.192	0.000
Cr_15	1.450	1.987	0.000
Cr_16	4.240	1.987	0.000
Cr_17	1.458	2.805	0.000
Cr_18	4.238	2.799	0.000
O_19	0.928	4.426	27.681
O_20	2.454	2.599	1.532
O_21	2.997	5.369	1.577
O_22	0.275	0.354	2.161
O_23	5.236	3.181	2.121

O_24	3.678	1.332	4.002
O_25	1.758	4.145	3.907
O_26	0.143	0.253	5.599
O_27	5.328	3.051	5.599
O_28	2.538	2.656	6.239
O_29	2.933	5.454	6.239
O_30	4.556	1.540	7.892
O_31	0.915	4.339	7.892
O_32	2.538	2.656	9.545
O_33	2.933	5.454	9.545
O_34	0.143	0.253	10.186
O_35	5.328	3.051	10.186
O_36	3.678	1.332	11.783
O_37	1.758	4.145	11.878
O_38	0.275	0.354	13.624
O_39	5.236	3.181	13.664
O_40	2.454	2.599	14.253
O_41	2.997	5.369	14.208
O_42	0.928	4.426	15.889

TABLE S51. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaMnO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.241	1.254	27.530
La_2	4.165	4.337	27.400
La_3	1.302	1.883	3.981
La_4	4.204	4.836	3.949
La_5	1.406	1.192	7.776
La_6	4.094	4.152	7.776
La_7	1.302	1.883	11.571
La_8	4.204	4.836	11.603
La_9	1.241	1.254	15.574
La_10	4.165	4.337	15.703
Mn_11	4.088	1.700	1.875
Mn_12	1.375	4.559	1.710
Mn_13	4.153	1.538	5.832
Mn_14	1.348	4.499	5.832
Mn_15	4.153	1.538	9.720
Mn_16	1.348	4.499	9.720
Mn_17	4.088	1.700	13.677
Mn_18	1.375	4.559	13.842
O_19	0.648	5.051	26.917
O_20	2.550	2.916	0.847
O_21	3.112	0.113	0.800

O_22	0.390	0.653	2.014
O_23	5.110	3.573	1.883
O_24	3.574	1.298	3.797
O_25	1.948	4.254	3.709
O_26	0.117	0.437	5.493
O_27	5.383	3.397	5.493
O_28	2.578	2.640	6.171
O_29	2.922	5.600	6.171
O_30	4.634	1.659	7.776
O_31	0.866	4.620	7.776
O_32	2.578	2.640	9.381
O_33	2.922	5.600	9.381
O_34	0.117	0.437	10.059
O_35	5.383	3.397	10.059
O_36	3.574	1.298	11.755
O_37	1.948	4.254	11.843
O_38	0.390	0.653	13.538
O_39	5.110	3.573	13.669
O_40	2.550	2.916	14.705
O_41	3.112	0.113	14.752
O_42	0.648	5.051	16.186

TABLE S52. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaFeO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	1.257	1.059	0.205
La_2	4.177	4.016	0.097
La_3	1.322	1.721	4.002
La_4	4.192	4.567	3.969
La_5	1.389	1.250	7.941
La_6	4.098	4.086	7.941
La_7	1.317	1.720	11.878
La_8	4.198	4.596	11.916
La_9	1.304	1.020	15.647
La_10	4.191	3.973	15.704
Fe_11	4.106	1.464	1.942
Fe_12	1.356	4.247	1.909
Fe_13	4.143	1.473	5.956
Fe_14	1.345	4.309	5.956
Fe_15	4.143	1.473	9.926
Fe_16	1.345	4.309	9.926
Fe_17	4.135	1.454	13.980
Fe_18	1.373	4.226	13.938
O_19	0.741	4.558	27.511

O_20	2.440	2.648	1.337
O_21	3.092	5.516	1.377
O_22	0.322	0.345	2.247
O_23	5.140	3.170	2.097
O_24	3.656	1.304	3.995
O_25	1.852	4.139	3.978
O_26	0.166	0.283	5.616
O_27	5.322	3.118	5.616
O_28	2.523	2.664	6.295
O_29	2.965	5.499	6.295
O_30	4.595	1.586	7.941
O_31	0.893	4.422	7.941
O_32	2.523	2.664	9.587
O_33	2.965	5.499	9.587
O_34	0.166	0.283	10.266
O_35	5.322	3.118	10.266
O_36	3.643	1.311	11.863
O_37	1.820	4.179	11.941
O_38	0.223	0.402	13.640
O_39	5.166	3.132	13.747
O_40	2.543	2.524	14.472
O_41	3.107	5.477	14.407
O_42	0.843	4.448	16.077

TABLE S53. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaCoO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.023	2.773	27.480
La_2	1.382	5.412	27.584
La_3	4.201	2.707	4.168
La_4	1.461	5.560	4.157
La_5	4.051	2.733	7.824
La_6	1.305	5.520	7.824
La_7	3.968	2.733	11.737
La_8	1.222	5.520	11.737
La_9	3.788	2.874	15.510
La_10	0.926	5.505	15.506
Co_11	1.075	2.656	1.824
Co_12	4.044	5.424	1.944
Co_13	1.347	2.733	5.868
Co_14	4.093	5.520	5.868
Co_15	1.263	2.733	9.781
Co_16	4.010	5.520	9.781
Co_17	1.191	2.748	13.860

Co_18	3.898	5.560	13.795
O_19	3.642	4.986	26.927
O_20	5.310	1.098	1.138
O_21	1.773	2.510	27.543
O_22	4.809	3.622	1.831
O_23	2.120	4.837	1.914
O_24	4.094	0.322	3.871
O_25	1.413	2.393	3.752
O_26	2.900	3.949	5.619
O_27	0.153	4.304	5.619
O_28	2.540	1.162	6.117
O_29	5.286	1.517	6.117
O_30	1.305	3.088	7.824
O_31	4.051	5.166	7.824
O_32	0.070	1.162	9.532
O_33	2.817	1.517	9.532
O_34	5.203	3.949	10.030
O_35	2.457	4.304	10.030
O_36	3.968	0.300	11.737
O_37	1.222	2.378	11.737
O_38	2.786	3.861	13.688
O_39	0.101	4.367	13.666
O_40	2.309	1.192	14.214
O_41	5.126	1.620	14.165
O_42	4.141	5.108	16.068

TABLE S54. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaNiO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.165	2.952	0.098
La_2	1.621	5.411	0.068
La_3	4.328	2.724	4.098
La_4	1.622	5.544	4.081
La_5	4.126	2.743	7.819
La_6	1.393	5.540	7.819
La_7	3.925	2.724	11.539
La_8	1.163	5.544	11.556
La_9	4.088	2.952	15.539
La_10	1.165	5.411	15.569
Ni_11	1.463	2.670	1.897
Ni_12	4.276	0.067	1.809
Ni_13	1.458	2.743	5.864
Ni_14	4.191	5.540	5.864
Ni_15	1.328	2.743	9.773

Ni_16	4.062	5.540	9.773
Ni_17	1.323	2.670	13.740
Ni_18	3.977	0.067	13.829
O_19	3.519	4.798	26.608
O_20	0.178	1.389	0.956
O_21	2.849	1.389	1.199
O_22	0.136	4.155	1.549
O_23	2.843	4.164	1.808
O_24	4.182	0.385	3.772
O_25	1.351	2.291	3.812
O_26	3.011	3.959	5.609
O_27	0.277	4.324	5.609
O_28	2.638	1.162	6.119
O_29	5.372	1.526	6.119
O_30	1.393	3.107	7.819
O_31	4.126	5.176	7.819
O_32	0.148	1.162	9.519
O_33	2.881	1.526	9.519
O_34	5.242	3.959	10.028
O_35	2.508	4.324	10.028
O_36	4.071	0.385	11.866
O_37	1.435	2.291	11.825
O_38	2.650	4.155	14.088
O_39	5.410	4.164	13.829
O_40	2.608	1.389	14.681
O_41	5.404	1.389	14.438
O_42	4.734	4.798	16.667

TABLE S55. Cartesian coordinates of LaO-0.5O-terminated surface of LaCuO₃

Ion	x-coordinate (Å)	y-coordinate (Å)	z-coordinate (Å)
La_1	4.174	2.995	0.158
La_2	1.608	5.375	0.108
La_3	4.338	2.739	4.055
La_4	1.614	5.556	4.040
La_5	4.114	2.743	7.827
La_6	1.376	5.541	7.827
La_7	3.891	2.739	11.598
La_8	1.137	5.556	11.614
La_9	4.054	2.995	15.496
La_10	1.143	5.375	15.545
Cu_11	1.477	2.692	1.778
Cu_12	4.306	0.091	1.803
Cu_13	1.436	2.743	5.870

Cu_14	4.174	5.541	5.870
Cu_15	1.316	2.743	9.783
Cu_16	4.054	5.541	9.783
Cu_17	1.274	2.692	13.875
Cu_18	3.923	0.091	13.851
O_19	3.231	4.525	26.503
O_20	0.177	1.392	0.946
O_21	2.872	1.377	1.200
O_22	0.138	4.177	1.747
O_23	2.859	4.159	1.867
O_24	4.129	0.390	3.846
O_25	1.333	2.295	3.837
O_26	2.978	3.973	5.633
O_27	0.239	4.311	5.633
O_28	2.632	1.175	6.107
O_29	5.371	1.513	6.107
O_30	1.376	3.082	7.827
O_31	4.114	5.203	7.827
O_32	0.119	1.175	9.547
O_33	2.858	1.513	9.547
O_34	5.251	3.973	10.020
O_35	2.512	4.311	10.020
O_36	4.100	0.390	11.807
O_37	1.418	2.295	11.817
O_38	2.613	4.177	13.906
O_39	5.370	4.159	13.786
O_40	2.574	1.392	14.707
O_41	5.357	1.377	14.453
O_42	4.997	4.525	16.804

2.2 Total energy

TABLE. S56 Total energy of MO₂- and LaO-type surfaces of LaMO₃ (M = Sc - Cu) calculated by BEEF-vdW+U

Perovskite	Total energy (eV)					
	MO ₂	MO ₂ +0.5O	MO ₂ -0.5O	LaO	LaO+0.5O	LaO-0.5O
LaScO₃	-308.77	-315.44	-295.51	-295.24	-306.33	-276.26
LaTiO₃	-309.34	-323.32	-290.68	-291.32	-307.55	-273.17
LaVO₃	-284.79	-297.48	-271.78	-277.08	-290.00	-259.49
LaCrO₃	-285.07	-292.66	-272.65	-277.01	-288.50	-259.99
LaMnO₃	-268.80	-274.54	-258.56	-265.99	-274.49	-251.02
LaFeO₃	-251.67	-257.58	-242.02	-251.94	-259.17	-235.19

LaCoO₃	-233.58	-239.04	-225.02	-239.49	-245.73	-225.28
LaNiO₃	-189.39	-196.11	-182.60	-206.06	-213.02	-194.58
LaCuO₃	-191.31	-196.62	-184.11	-206.04	-213.46	-194.87

2.3 Magnetic moment of metal cations

TABLE. S57 Magnetic moment on M cations on MO₂- and LaO-type surfaces of LaMO₃ (M = Sc - Cu) calculated by BEEF-vdW+U

Perovskite	Magnetic moment (μ_B)					
	MO ₂	MO ₂ +0.5O	MO ₂ -0.5O	LaO	LaO+0.5O	LaO-0.5O
LaScO₃	-	-	-	-	-	-
LaTiO₃	0.2	0.3	0.6	0.6	0.5	0.7
LaVO₃	1.7	1.3	1.9	2.0	1.5	2.0
LaCrO₃	2.0	2.4	3.0	3.0	2.8	3.0
LaMnO₃	3.8	3.8	4.0	4.1	3.8	4.3
LaFeO₃	3.9	3.9	3.9	4.0	4.0	3.8
LaCoO₃	2.5	2.4	2.4	2.3	2.0	2.5
LaNiO₃	1.4	1.5	1.5	1.5	1.5	1.7
LaCuO₃	-	-	-	-	-	-

3 Surface phase diagram calculated by PBE+U

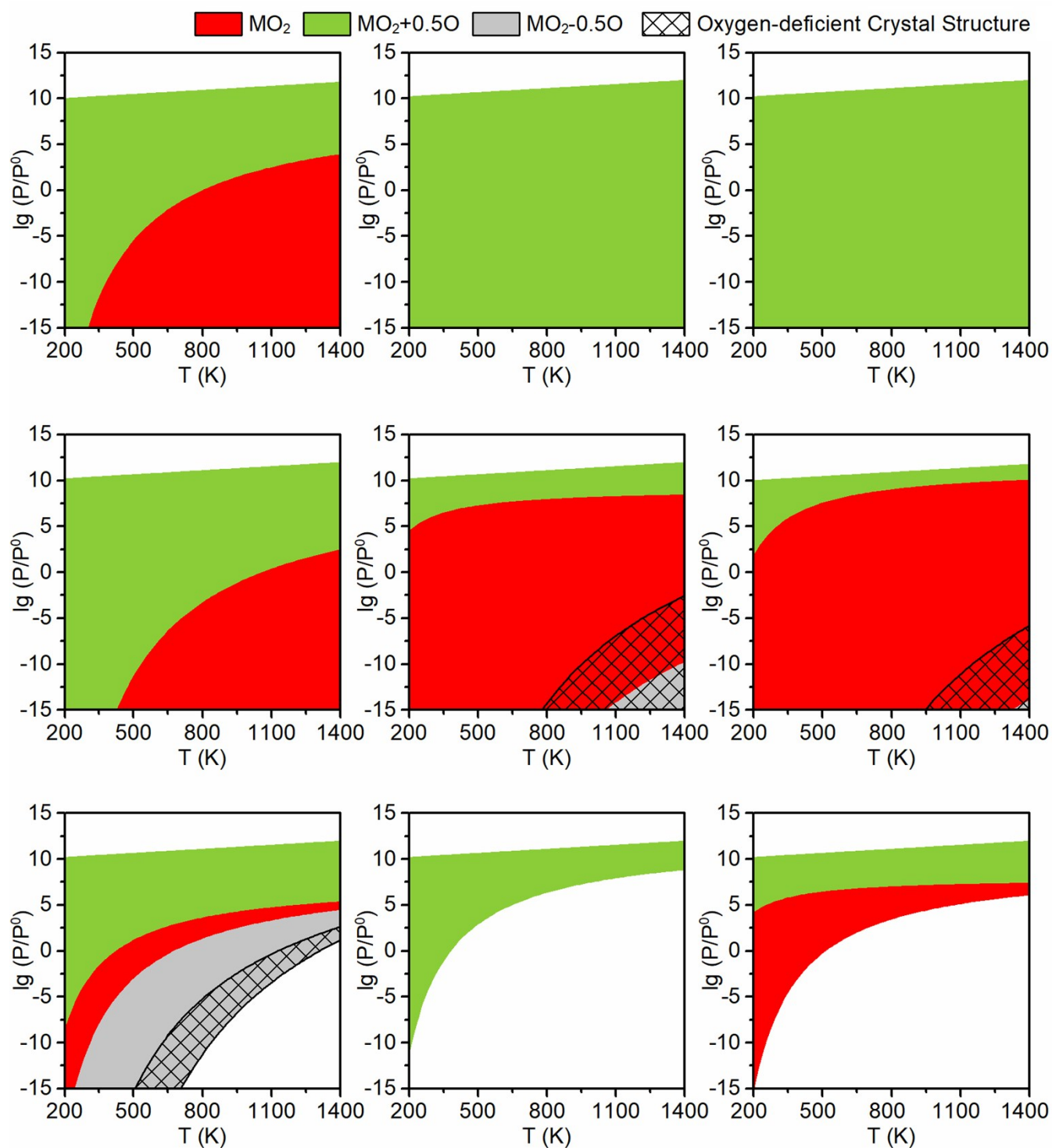


Fig. S1 Surface phase diagrams of MO_2 -type surfaces of LaMO_3 ($M = \text{Sc} - \text{Cu}$) calculated by PBE+U.

Reference

1. Li, Y.; Zheng, Y.-S.; Zhu, Y.-A.; Sui, Z.-J.; Zhou, X.-G.; Chen, D.; Yuan, W.-K., Beef-Vdw+U Method Applied to Perovskites: Thermodynamic, Structural, Electronic, and Magnetic Properties. *J. Phys.: Condens. Matter* **2019**, *31*, 145901.