Supporting information

Prediction of planar B_xP Monolayer with inherent metallicity and its potential as an anode material for Na and K-Ion Batteries: A First-Principles Study

Fang Liu[b], Xianfei Chen[a,b*], Yi Huang[a*], Chaozhu Shu[a,b], Na Li[c], Beibei Xiao[d], Lianli Wang[e]

[a] State Key Laboratory of Geohazard Prevention and Geoenvironment Protection, Chengdu University of Technology, Chengdu 610059, China

[b] College of Materials and Chemistry & Chemical Engineering, Chengdu University of Technology, Chengdu 610059, China

[c] College of Energy resources, state key laboratory of Oil and Gas Reservoir Geology and Exploitation, Chengdu University of Technology, Chengdu 610059, China

[d] School of Energy and Power Engineering, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang 212003, China

[e] School of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Science and Technology, Xi'an 710054, China

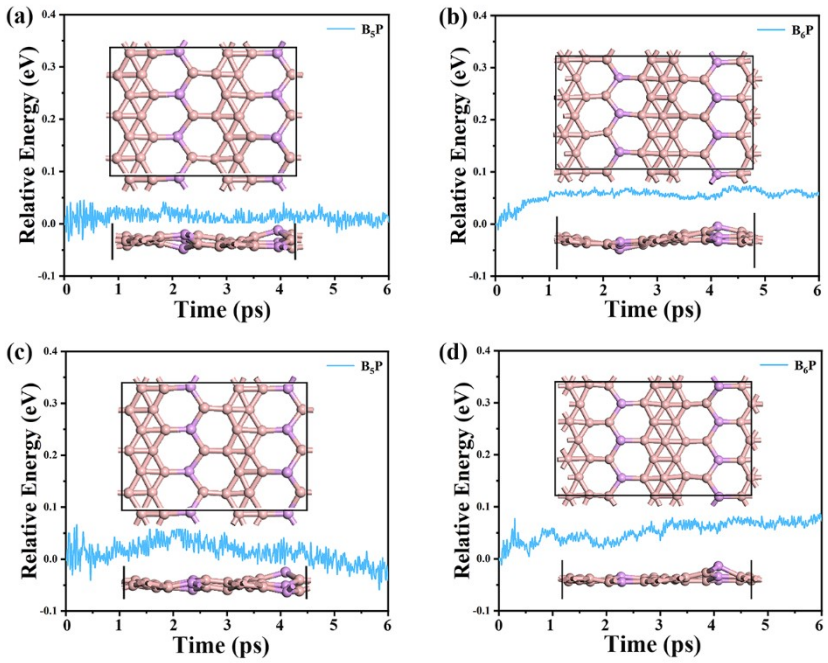

Figure S1. The energy evolution of (a) B_5P and (b) B_6P during the AIMD simulations at 300 K, as well as the energy variation of (c) B_5P and (d) B_6P simulated at 600 K. The energy of the initial configuration at 0 ps was set to be zero. The inset gives the configuration at the end of the simulation.

* Corresponding author. Email: chenxianfei2014@cdut.edu.cn; huangyi@cdut.cn

Table S1 The calculated adsorption energies (E_{ad} in eV) for all considered adsorption sites of Na/K ion. The final adsorption sites of the Na/K ions after geometric optimization are shown in parentheses.

Site	B_5P		B_6P	
	Na	K	Na	K
B1	-1.40 （H1）	-1.83 （H1）	-1.37 （H2）	-1.94 （H1）
B2	-1.38 （H1）	-1.57 （H1）	-1.39 （H2）	-1.90 （H2）
B3	-1.08 （H2）	-1.82 （H1）	-1.50 （H1）	-1.98 （H1）
B4	-1.37（H1）	-1.83 （H1）	-1.47 （H1）	-1.94 （H1）
B5	-1.37 （H1）	-1.57 （H1）	-1.39 （H2）	-1.89 （H2）
B6	-1.14 （H1）	-1.62 （H1）	-1.39 （H2）	-1.89 （H2）
B7	-1.39 （H2）	-1.81 （H2）	-1.48 （H1）	-1.94 （H1）
B8	-1.25 （H1）	-1.55 （H1）	-1.52 （H1）	-1.95 （H1）
B9			-1.43 （H1）	-1.90 （H1）
B10			-1.53 （H1）	-1.98 （H1）
H1	-1.07 （H1）	-1.84 （H1）	-1.49 （H1）	-1.96 （H1）
H2	-1.14 （H2）	-1.78 （H2）	-1.40 （H2）	-1.90 （H2）
H3	-1.24 （H1）	-1.82 （H1）	-1.41（H2）	-1.91 （T1）
H4	-1.08 （H1）	-1.80 （H1）	-1.50 （H1）	-1.97 （H1）
H5			-1.49 （H2）	-1.98 （H1）
T1	-1.39 （H1）	-1.81 （H1）	-1.49 （H1）	-1.97 （H1）
T2	-1.39 （H1）	-1.56 （H1）	-1.35（H2）	-1.87 （H2）
T3	-1.38 （H1）	-1.84 （H1）	-1.49 （H1）	-1.66 （T3）
T4	-1.25 （H2）	1.56 （H2）	-1.50 （H1）	-1.93 （H1）
T5	-1.14 （H1）	-1.53 （H1）	-1.51 （H1）	-1.97 （H1）
T6	-1.27 （H2）	-1.79 （H2）	-1.40 （H2）	-1.89 （H2）
T7			-1.50 （H1）	-1.97 （H1）