

## Electronic Supplementary Information

### Enhancing photocatalytic efficiency of two-dimensional aluminum nitride materials through strategic rare earth doping

Weiyin Yan<sup>#a,b,d</sup>, Yayu Yan<sup>#a,b,d</sup>, Zirui Wang<sup>a,c,d</sup>, Qiao-Hong Li<sup>\*a,d</sup>, and Jian Zhang<sup>\*a,d</sup>

*<sup>a</sup> State Key Laboratory of Structural Chemistry, Fujian Institute of Research on the Structure of Matter, Chinese Academy of Sciences, Fuzhou, Fujian 350002, China*

*<sup>b</sup> College of Chemistry, Fuzhou University, Fuzhou, Fujian 350108, China*

*<sup>c</sup> School of Physical Science and Technology, Shanghai Tech University, Shanghai 201210, China*

*<sup>d</sup> Fujian College, University of Chinese Academy of Sciences, Fuzhou 350002, China*

*\*Corresponding authors: lqh2382@fjirsm.ac.cn; zhj@fjirsm.ac.cn*

Table S1 The structures of doping systems.

Al <sub>25</sub> N <sub>25</sub>			Al <sub>24</sub> N <sub>24</sub>		
1.00000000000000			1.00000000000000		
15.6429996490000001	0.0000000000000000	0.0000000000000000	15.3509274969442764	0.0004301380355467	0.0000000000000000
-7.8214998245000000	13.5472350875000007	0.0000000000000000	-7.6750782299719527	13.6509676965208406	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000
Al	N		Al	N	
25	25		24	24	
Direct			Direct		
0.0666625997390143	0.1333374032609853	0.1469102488972139	0.0719887070434726	0.1369814970201687	0.1469243295015535
0.2666625877390161	0.1333374032609853	0.1469102488972139	0.2679301949245360	0.1271299907764459	0.1469192519748289
0.4666626057390134	0.1333374032609853	0.1469102488972139	0.4592482646929667	0.1271644884980828	0.1469255523119739
0.6666626227390140	0.1333374032609853	0.1469102488972139	0.6650526957702748	0.1369919486542300	0.1469241215779863
0.8666626107390158	0.1333374032609853	0.1469102488972139	0.8688109572353416	0.1375706155380753	0.1468583942444446
0.0666625997390143	0.3333374062609848	0.1469102488972139	0.0707518489975523	0.3344658924505967	0.1468497578401493
0.2666625877390161	0.3333374062609848	0.1469102488972139	0.2793456204038036	0.3365436047286482	0.1468725996164818
0.4666626057390134	0.3333374062609848	0.1469102488972139	0.6571064315139078	0.3365073210362647	0.1468646567204986
0.6666626227390140	0.3333374062609848	0.1469102488972139	0.8636581376021101	0.3344361325992622	0.1468483338837455
0.8666626107390158	0.3333374062609848	0.1469102488972139	0.0651461607420633	0.5302968931078422	0.1469141011548732
0.0666625997390143	0.5333374242609821	0.1469102488972139	0.2727256581313397	0.5321318978409533	0.1468730990356701
0.2666625877390161	0.5333374242609821	0.1469102488972139	0.4815671199443251	0.5389159125314881	0.1469076939787399
0.4666626057390134	0.5333374242609821	0.1469102488972139	0.6573377689799058	0.5388809311102977	0.1469075825759683
0.6666626227390140	0.5333374242609821	0.1469102488972139	0.8593702912726161	0.5321075996805232	0.1468663272525347
0.8666626107390158	0.5333374242609821	0.1469102488972139	0.0632385394763549	0.7285344609152998	0.1469151575499812
0.0666625997390143	0.7333374122609839	0.1469102488972139	0.2652720391331686	0.7285272785794262	0.1469127564334708
0.2666625877390161	0.7333374122609839	0.1469102488972139	0.4683941568460848	0.7360462684111506	0.1468844391699832
0.4666626057390134	0.7333374122609839	0.1469102488972139	0.6705523739945828	0.7410666187451919	0.1468730671701769
0.6666626227390140	0.7333374122609839	0.1469102488972139	0.8676361166085963	0.7360431456815523	0.1468838506284889
0.8666626107390158	0.7333374122609839	0.1469102488972139	0.0671701202624982	0.9325566446320380	0.1468926854864639
0.0666625997390143	0.9333374002609858	0.1469102488972139	0.2622270954579772	0.9244385219746374	0.1468935602054476
0.2666625877390161	0.9333374002609858	0.1469102488972139	0.4653938822889815	0.9325953872568404	0.1468900370331463
0.4666626057390134	0.9333374002609858	0.1469102488972139	0.6686305460420403	0.9390012322510389	0.1468748707715488
0.6666626227390140	0.9333374002609858	0.1469102488972139	0.8703940347026639	0.9390131438041323	0.1468778734912043
0.8666626107390158	0.9333374002609858	0.1469102488972139	0.1333309494294599	0.0645887009492195	0.1468782369403767
0.1333374032609853	0.0666625997390143	0.1468497531027923	0.3272905693042391	0.0545509703363253	0.1469323959701757
0.3333374062609848	0.0666625997390143	0.1468497531027923	0.5313478167769009	0.0646277114524485	0.1468737979112927
0.5333374242609821	0.0666625997390143	0.1468497531027923	0.7343078559100810	0.0713896134481882	0.1468721808410987
0.7333374122609839	0.0666625997390143	0.1468497531027923	0.9371343407387047	0.0713801247964492	0.1468711289021732
0.9333374002609858	0.0666625997390143	0.1468497531027923	0.1420145178557276	0.2697608317603024	0.1468734342311437
0.1333374032609853	0.2666625877390161	0.1468497531027923	0.3340022623299455	0.2577254736652299	0.1468260253664097
0.3333374062609848	0.2666625877390161	0.1468497531027923	0.5236080527880466	0.2578075055060863	0.1468262755535646
0.5333374242609821	0.2666625877390161	0.1468497531027923	0.7276946391178598	0.2697516449048813	0.1468697464393585

0.7333374122609839	0.2666625877390161	0.1468497531027923	0.9349740061932542	0.2699546166917946	0.1468613681622531
0.9333374002609858	0.2666625877390161	0.1468497531027923	0.1370034677363424	0.4664845948803272	0.1468824240806237
0.1333374032609853	0.4666626057390134	0.1468497531027923	0.3458717793978848	0.4686584177822619	0.1468848797706902
0.3333374062609848	0.4666626057390134	0.1468497531027923	0.7227923747961283	0.4686536431327492	0.1468755527167340
0.5333374242609821	0.4666626057390134	0.1468497531027923	0.9294751921439086	0.4664672363149675	0.1468790791493506
0.7333374122609839	0.4666626057390134	0.1468497531027923	0.1310373269485611	0.6620759020303945	0.1468895070078246
0.9333374002609858	0.4666626057390134	0.1468497531027923	0.3346699316676856	0.6638754356111881	0.1468657891713410
0.1333374032609853	0.6666626227390140	0.1468497531027923	0.5368866628216786	0.6707649619051151	0.1468559695841888
0.3333374062609848	0.6666626227390140	0.1468497531027923	0.7338750759502508	0.6707079800741200	0.1468530264450768
0.5333374242609821	0.6666626227390140	0.1468497531027923	0.9291916826128119	0.6638523731243243	0.1468638281774518
0.7333374122609839	0.6666626227390140	0.1468497531027923	0.1286181517092057	0.8601904838280661	0.1468883386980597
0.9333374002609858	0.6666626227390140	0.1468497531027923	0.3315996681306887	0.8601814217233301	0.1468807217363782
0.1333374032609853	0.8666626107390158	0.1468497531027923	0.5346625673885981	0.8679884626090998	0.1468581567701731
0.3333374062609848	0.8666626107390158	0.1468497531027923	0.7363442258702459	0.8726389378012785	0.1468654720710033
0.5333374242609821	0.8666626107390158	0.1468497531027923	0.9333182253145818	0.8679756208476154	0.1468586126938745
0.7333374122609839	0.8666626107390158	0.1468497531027923			
0.9333374002609858	0.8666626107390158	0.1468497531027923			

Al <sub>24</sub> N <sub>24</sub> Dy			Al <sub>24</sub> N <sub>23</sub> DyC		
1.0000000000000000			1.0000000000000000		
15.5819931481207270	-0.0148948286717782	0.0000000000000000	15.5272802273841712	-0.0495264585898367	0.0000000000000000
-7.8037946130653930	13.5316016223718485	0.0000000000000000	-7.8064955888873051	13.5932927150323959	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000
Al	N	Dy	Al	N	C
24	24	1	24	23	1
			Dy		
			1		
Direct			Direct		
0.0679527464614976	0.1350281779875231	0.1391533226139000	0.0714064774712136	0.1370550619959546	0.1387058491358844
0.2659202276233457	0.1334314264381559	0.1532378019439609	0.2697677855976807	0.1342672903064429	0.1435735842570130
0.4677503626512878	0.1332434377289362	0.1559980276065517	0.4661842901696894	0.1315381548245165	0.1614620121303835
0.6672798229365670	0.1348109282584506	0.1404286361818098	0.6668331256109319	0.1349034329673446	0.1435810540354829
0.8678702635641561	0.1353426385353741	0.1385562529579975	0.8691044157553434	0.1364014710733696	0.1396800314029244
0.0679721383807435	0.3354495010559033	0.1397064521712876	0.0681677254335362	0.3354754137776961	0.1420980558870892
0.2663641006753025	0.3345233619031043	0.1545798482100470	0.2702957000477744	0.3358629326187483	0.1472720237629450
0.6677760769384650	0.3333738829398751	0.1538751745380373	0.6651068489402230	0.3309698688919623	0.1643764292778331
0.8680055337003552	0.3352380577931720	0.1403838054581677	0.8666216327928086	0.3347176960962165	0.1431757699131868
0.0673034498725727	0.5345576266823218	0.1450188879285426	0.0648864589132990	0.5334732249322781	0.1481492193450030
0.2692115761376276	0.5343156851259078	0.1467257866640470	0.2681563930379492	0.5351872850931032	0.1486052939394466
0.4717283508997544	0.5391394598054470	0.1745147943237793	0.4721673622509844	0.5373034301860654	0.1436124092462582
0.6599944526318871	0.5323364649674754	0.1362113462915573	0.6611320500918694	0.5372348563460835	0.1518625990602666
0.8648729081826192	0.5339033661386486	0.1469529908382248	0.8609947106037502	0.5323258146133844	0.1496463979365697
0.0661604513073863	0.7337870164455665	0.1430609145882827	0.0644805861436600	0.7323682542376422	0.1439982870024180
0.2669336446916392	0.7339296324813509	0.1451266199279374	0.2654932005438900	0.7328954872965204	0.1445249237385516

0.4675914549052014	0.7353682793827321	0.1458219388897220	0.4670011865216982	0.7353265855871599	0.1377323246223696
0.6676192727116189	0.7356068320757400	0.1424223959167311	0.6689990131159853	0.7386201175039409	0.1385430094852938
0.8654100915848165	0.7334053200130993	0.1373985052565120	0.8669563762285479	0.7353986853725011	0.1428993900593522
0.0663101685309313	0.9335779066350532	0.1383170003892209	0.0676518786922296	0.9345821440323976	0.1385064401639666
0.2669334108580367	0.9343220828651023	0.1443402039613821	0.2657301218582641	0.9318234748840897	0.1431499120405012
0.4669499206239527	0.9341029830476633	0.1407106276304725	0.4663475802793969	0.9336835201159167	0.1397072518522682
0.6675928806989336	0.9351672984520526	0.1411091713226630	0.6680330653478388	0.9367676166577273	0.1378628749106043
0.8677215954185240	0.9351641239154712	0.138400377324805	0.8697215550009725	0.9376607490162233	0.1402585187027054
0.1332431167793447	0.0668673501805176	0.1398281033111149	0.1344679914379010	0.0667176911977314	0.1368193940947116
0.3338760567863036	0.0677418230616379	0.1518883787868118	0.3328952881689401	0.0634382367715527	0.1508709944898770
0.5337137827290371	0.0670876116312508	0.1411179457466120	0.5331385432889512	0.0659844864571096	0.1450442657816274
0.7343123124290789	0.0684798313223251	0.1401717276388696	0.7348411425673330	0.0694674667806907	0.1396132679856293
0.9344335407783055	0.0684205473654555	0.1380712157679623	0.9364506382809999	0.0702824667744661	0.1403693051278312
0.1340724655983830	0.2684028724572999	0.1404033284666786	0.1354419928531718	0.2702516554711417	0.1397460611418336
0.3283641137880122	0.2647476144928834	0.1729052194390349	0.5368127790871386	0.2591929392173145	0.1933275703640768
0.5377814933382397	0.2636282000014649	0.1782941914881571	0.7331701931544696	0.2680119679720434	0.1451248474682720
0.7347650734506838	0.2681919762362958	0.1399055376310964	0.9341780791639366	0.2693514482554972	0.1394173967222024
0.9346583707027577	0.2687058645588579	0.1377286757517807	0.1336875650882819	0.4684599510634139	0.1479718963618158
0.1351663392050972	0.4686391766282125	0.1430761347436411	0.3382696076641323	0.4711042580438142	0.1511238521338623
0.3374290329435773	0.4682368795669191	0.1544787916881356	0.7240586332692344	0.4654128187155995	0.1562471084603776
0.7298277721413404	0.4673828154417610	0.1512163518501209	0.9299944507748034	0.4675913848403803	0.1479391575464527
0.9332139843094216	0.4683807847994095	0.1452301836885254	0.1314358277758041	0.6661338572126809	0.1477653492633312
0.133352540429416	0.6676772749694989	0.1463683359246960	0.3336277319451975	0.6676610119897903	0.1448139101947150
0.3341153626080600	0.6676423724516085	0.1462500727084635	0.5351901232554952	0.6693579307487324	0.1350937202156545
0.5350444174460962	0.6700365002989725	0.1523668095691058	0.7323872769081524	0.6688285568726103	0.1429744982277604
0.7315287864673964	0.6664384900333477	0.1340244659177280	0.9297236285628899	0.6652003895483448	0.1457837604354635
0.9323334095912712	0.6670788356276145	0.1425372430049853	0.1313953704723860	0.8648736338002756	0.1393726242258523
0.1333248566314689	0.8672274088350829	0.1405346943649166	0.3324835682897778	0.8651966741288051	0.1413508599879697
0.3334100699141689	0.8674063254079302	0.1431833892516748	0.5340335451944341	0.8677969934965070	0.1355058851982254
0.5341572729401182	0.8682614563176081	0.1405826687939924	0.7354539648635366	0.8706938062323852	0.1393038925046061
0.7345101794348272	0.8687698266943014	0.1412654558986995	0.9331480639913726	0.8677704862301601	0.1402525211188516
0.9327314793681616	0.8668879819166080	0.1367743313837974	0.3445584592522045	0.2720881358699845	0.1513452920413038
0.4740966565886406	0.3486947970289593	0.2188759158400636	0.4706060962398736	0.3434492918816293	0.228968959993589

Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub>			Al <sub>24</sub> N <sub>23</sub> C		
1.0000000000000000			1.0000000000000000		
15.5957778890232657	-0.0003669493407181	0.0000000000000000	15.0705605980628121	-0.0129723062779636	0.0000000000000000
-7.7982041808563309	13.7303035640334397	0.0000000000000000	-7.5447661668192998	13.6942744428920928	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000
Al	N	C	Al	N	C
24	22	2	24	23	1
Dy					
1					
Direct			Direct		

0.0696991231338061	0.1358138071106933	0.1468409871047981	0.0783159264268802	0.1400357786966677	0.1467861406854561
0.2629425665720327	0.1235768628374273	0.1467092115327695	0.2717348761878483	0.1266859969691994	0.1467843303198479
0.4603204320222954	0.1235315191034507	0.1467109536741474	0.4543374167398489	0.1281600109224100	0.1468883951223477
0.6658453863067445	0.1358658773101531	0.1468583873621344	0.6623051005562333	0.1395344035460541	0.1468375077942917
0.8680987043715075	0.1365744236415691	0.1468502039367635	0.8707839227490970	0.1407524836434856	0.1468750644971928
0.0667488715582485	0.3351722160053215	0.1468228075547111	0.0777200269049270	0.3317464438020180	0.1468641777523596
0.2657617419532079	0.3375299388249406	0.1469074119801910	0.3048345631995606	0.3365952436998897	0.1468448675002026
0.6713793891712700	0.3375135346392454	0.1469194513874364	0.6341769322680119	0.3338628814401365	0.1468626711628756
0.8680808192932914	0.3352046311486621	0.1468334372856899	0.8558782944647497	0.3316176683773996	0.1469078037363582
0.0665735968755282	0.5334443096669985	0.1467841705316622	0.0615189800729734	0.5243333259249940	0.1468894290099714
0.2680306655892293	0.5355648189520414	0.1469091253453671	0.2747673828219342	0.5290355119494520	0.1469683910981269
0.4719680039105023	0.5442301492508997	0.1465276494735217	0.4863617346913086	0.5446457379644359	0.1469589335887891
0.6719720682865560	0.5442592284029307	0.1465485354698276	0.6548343785940542	0.5434384263436642	0.1468736492937017
0.8672035125684439	0.5355179303192427	0.1469242995299828	0.8513885795485272	0.5274197694237540	0.1468887688190965
0.0654759913577089	0.7315646565520780	0.1468632601122573	0.0591434236437465	0.7228547236438226	0.1469124529109672
0.2658029411322954	0.7315765072355455	0.1468573258279939	0.2625665245414912	0.7235356139791501	0.1468935666899905
0.4675809820204406	0.7373513007895521	0.1468595895005171	0.4683356018028952	0.7392969879610702	0.1468705060167162
0.6709034572508629	0.7420934382114651	0.1467776752456320	0.6731322243200422	0.7468607624499591	0.1468872730060182
0.8695358714689047	0.7372975582439346	0.1468751793944553	0.8689127094957616	0.7378983492652610	0.1468958621050640
0.0655962626753107	0.9316573170071519	0.1468970701115679	0.0693687008874625	0.9327800709791781	0.1468204268157613
0.2628969313388274	0.9260893263115749	0.1470098031531768	0.2587599199811597	0.9178728459484181	0.1470037853385311
0.4658403119031631	0.9316824840027470	0.1469104618099023	0.4632939103424907	0.9344996622594958	0.1468906049085705
0.6684860288882595	0.9386505983446776	0.1469197665538437	0.6695923633597963	0.9436371324832636	0.1468924741840523
0.8698948891154570	0.9386111385284702	0.1469172560755664	0.8742784979714009	0.9435971900117870	0.1469009668184240
0.1291719191240843	0.0622260580082981	0.1468140618670320	0.1364695829313886	0.0644011526776830	0.1467223887337143
0.3275280612658907	0.0554005993549638	0.1471320227967273	0.3235052092896509	0.0465614427710317	0.1470152685479912
0.5327841897872485	0.0622321821495837	0.1468398834862155	0.5280001516867866	0.0668867197991940	0.1468434388313932
0.7345076973046440	0.0703842413284399	0.1468743707529634	0.7346116370112447	0.0758954080567304	0.1468866114594942
0.9355291402381182	0.0703948532310945	0.1468665056654888	0.9416842993122366	0.0758844044559697	0.1468735591536896
0.1323033986852159	0.2684863993948040	0.1468726187450888	0.1594260912130604	0.2718201367879792	0.1468264141916219
0.7358590601996856	0.2685331461228795	0.1469083759095685	0.4851734736700177	0.2611331220707914	0.1467748291837771
0.9341591771436979	0.2687076179148065	0.1468036265572009	0.7139425452680624	0.2711951803139372	0.1468639561411674
0.1345603329194302	0.4676777598498096	0.1468609420568251	0.9368016572768429	0.2724343116822636	0.1468604607335324
0.3385688717494429	0.4715166867624931	0.1469252584804709	0.1375403836415820	0.4629311711622465	0.1469202429453175
0.7326199363933270	0.4714987722671726	0.1469811859728994	0.3509035669613874	0.4673871522976876	0.1469705228435606
0.9328090067714642	0.4676745904240204	0.1468371269755176	0.7122799148947704	0.4649762672197995	0.1468894949241349
0.1324277411402247	0.6651620236584284	0.1467946747603218	0.9237248943899866	0.4626912382081563	0.1468876252737419
0.3344767805933842	0.6669456510625824	0.1468744286744889	0.1272514763879308	0.6558858401057659	0.1468847036367291
0.5377833221689180	0.6741272980803765	0.1467344093821749	0.3341971074132960	0.6604926407524836	0.1469183869111291
0.7360948181964551	0.6741288046625638	0.1467591936121405	0.5387058802319106	0.6755434167027925	0.1469053369418043
0.9321803249313102	0.6668804933633241	0.1468881820899749	0.7347337677849387	0.6741154587709296	0.1468756616905458
0.1298257778171057	0.8624118706032360	0.1469072523506572	0.9239529011323225	0.6589157568385373	0.1469036268124578
0.3323339849347027	0.8624427001609479	0.1469137654392504	0.1244071477868823	0.8539921505534227	0.1469461608010061
0.5351236789826729	0.8679734280428821	0.1469337032308915	0.3295338654256580	0.8546022455390504	0.1469365486824574

0.7363043440363212	0.8729051346201085	0.1469551326778448	0.5347502898084106	0.8711769415423338	0.1468594900969735
0.9326143125484354	0.8679524791625548	0.1469405132148222	0.7390638417135169	0.8781936297053963	0.1469072000406460
0.3246095983681584	0.2593829386782159	0.1462327294397876	0.9345925451745913	0.8693918440038294	0.146845533868406
0.5343474366679047	0.2593491811081662	0.1461173090410653	0.3884058830212781	0.2627954392969721	0.1467245908615387
0.4775286412682179	0.3553916255474229	0.1513287588666460			
$Al_{24}N_{22}C_2$					
1.00000000000000					
15.1092630627754243	0.0002974167644580	0.0000000000000000			
-7.5544133388370813	13.7314112002227002	0.0000000000000000			
0.0000000000000000	0.0000000000000000	16.0000000000000000			
Al	N	C			
24	22	2			
Direct					
0.0772151586872350	0.1393859043971559	0.1468574792674078			
0.2712617146547387	0.1249224735555025	0.1467818118133447			
0.4536665685370411	0.1249245809594744	0.1467781240399324			
0.6621778770626566	0.1393877721863985	0.1468581111987638			
0.8700326933666955	0.1400595282680879	0.1468849098631521			
0.0758297062348483	0.3320406983099599	0.1469101536205874			
0.2995330050609623	0.3380563835026945	0.1468207658664276			
0.6385210746335154	0.3380544331478570	0.1468178910582850			
0.8562111090404214	0.3320408942713718	0.1469110184688063			
0.0625129521191291	0.5250201136475749	0.1469121714058914			
0.2744241635242209	0.5300058250152421	0.1469330288783817			
0.4866746042726182	0.5434835032797728	0.1468967971460971			
0.6568097082888417	0.5434833852465178	0.1468973950115988			
0.8555842938147392	0.5300057542666018	0.1469338887351105			
0.0606270886419786	0.7237243466109301	0.1468959467924141			
0.2631043885762601	0.7237256761508859	0.1468978875829346			
0.4687876000380535	0.7380395006165280	0.1469408410860041			
0.6731849507381898	0.7463679901748786	0.1468944385853265			
0.8692564275907965	0.7380403345549442	0.1469422479979973			
0.0692225354615445	0.9325782303054215	0.1468722664439705			
0.2585458384798767	0.9170811362127448	0.1469738058059079			
0.4633618475670946	0.9325785553129333	0.1468752920717325			
0.6693802500121714	0.9430447196930246	0.1468768786213696			
0.8736674305496337	0.9430439755405038	0.1468762242907840			
0.1362722593367957	0.0644039006709437	0.1468324521226007			
0.3224159833991637	0.0448381212575658	0.1469245962842375			
0.5281279149021432	0.0644039671003613	0.1468338174361047			
0.7342289477496128	0.0751619709537019	0.1468961769770189			
0.9409319743763152	0.0751612867247951	0.1468960209112174			
0.1564027822129500	0.2714143169134426	0.1468595979652745			

0.7150097454142672	0.2714157805682809	0.1468591991764908
0.9357930707616877	0.2715871269507143	0.1469063404634061
0.1376400524491470	0.4629976168793958	0.1469198704522814
0.3504452731318452	0.4684557532997680	0.1469102020549068
0.7180078605991242	0.4684552428459158	0.1469114786210423
0.9253542161917300	0.4629988318465775	0.1469209312041918
0.1281354516666298	0.6562778931654596	0.1469041545715950
0.3346017279737039	0.6608139204325719	0.1469131153914632
0.5389775835617507	0.6742796437900164	0.1469048983385131
0.7352994884335233	0.6742833914794433	0.1469047164025172
0.9262044673921955	0.6608148176258529	0.1469132198083531
0.1247216474440644	0.8542454954139616	0.1469395535109540
0.3295173585196441	0.8542457673854764	0.1469423849220982
0.5348520945937588	0.8694625847508299	0.1468942849054817
0.7387604949873483	0.8775252789826530	0.1468344206365871
0.9346068496558537	0.8694636660340992	0.1468930645935629
0.3852393694065773	0.2640980278085600	0.1466437950019669
0.4788605038868606	0.2640999748925572	0.1466423805958856

Table S2 The different sites of hydrogen adsorption free energy.

Adsorption site	$\Delta G_{H^*}$ (eV)
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -1	-
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -2	-0.54
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -3	-0.55
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -4	-0.46
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -5	-0.46

Table S3 The different sites of intermediate energy(eV) and rate decision steps of free energy  $E_{(RDS)}$ (eV).

	*	OH*/eV	O*/eV	OOH*/eV	*+O <sub>2</sub> /eV	$E_{(RDS)}$ /eV
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -1	U=0 V	0	-1.55	-4.53	1.76	4.92
	U=1.23 V	0	-2.78	-6.99	-1.93	0
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -6	U=0 V	0	-1.43	-4.55	-4.61	4.92
	U=1.23 V	0	-2.66	-7.01	-8.30	0
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -7	U=0 V	0	-1.42	-0.42	-4.49	4.92
	U=1.23 V	0	-2.65	-2.88	-8.18	0
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -8	U=0 V	0	-1.08	-1.33	-3.59	4.92
	U=1.23 V	0	-2.31	-3.79	-7.28	0
Al <sub>24</sub> N <sub>22</sub> DyC <sub>2</sub> -9	U=0 V	0	-1.67	-1.36	-3.59	4.92
	U=1.23 V	0	-2.90	-3.82	-7.28	0

