

Supplementary Information

Study of Wetting on Chemically Soften Interfaces by Using Combined Solution Thermodynamics and DFT Calculations: Forecasting Effective Softening Elements

Guo Gang Shu[†], Qiang Xu[‡], and Ping Wu^{*‡}

[†]Nuclear Materials Joint Lab, Tsinghua University Graduate School, Tsinghua University City Park, Shenzhen 518055, China

[‡] Entropic Interface Group, Engineering Product Development, Singapore University of Technology and Design, 8 Somapah Road, Singapore 487372.

[*wuping@sutd.edu.sg](mailto:wuping@sutd.edu.sg)

Table S1 The optimized coordinates of B₃Si unit cell.

	x	y	z
B	0.0027	0.3893	0.3876
B	0.6548	0.1751	0.4984
B	0.5027	0.8893	0.8876
B	0.1548	0.6751	0.9984
B	0.0027	0.6107	0.1124
B	0.6548	0.8249	0.0016
B	0.5027	0.1107	0.6124
B	0.1548	0.3249	0.5016
B	0.9973	0.6107	0.8876
B	0.3452	0.8249	0.9984
B	0.4973	0.1107	0.3876
B	0.8452	0.3249	0.4984
B	0.9973	0.3893	0.6124
B	0.3452	0.1751	0.5016
B	0.4973	0.8893	0.1124
B	0.8452	0.6751	0.0016
B	0.9973	0.6107	0.6124
B	0.3452	0.8249	0.5016
B	0.4973	0.1107	0.1124
B	0.8452	0.3249	0.0016
B	0.9973	0.3893	0.8876
B	0.3452	0.1751	0.9984
B	0.4973	0.8893	0.3876
B	0.8452	0.6751	0.4984
B	0.0027	0.3893	0.1124
B	0.6548	0.1751	0.0016
B	0.5027	0.8893	0.6124
B	0.1548	0.6751	0.5016
B	0.0027	0.6107	0.3876
B	0.6548	0.8249	0.4984
B	0.5027	0.1107	0.8876
B	0.1548	0.3249	0.9984
B	0.2717	1.0000	0.4309
B	0.7235	1.0000	0.4258
B	0.7717	0.5000	0.9309
B	0.2235	0.5000	0.9258
B	0.2717	0.0000	0.0691
B	0.7235	0.0000	0.0742
B	0.7717	0.5000	0.5691
B	0.2235	0.5000	0.5742
B	0.7283	1.0000	0.9309
B	0.2765	1.0000	0.9258

B	0.2283	0.5000	0.4309
B	0.7765	0.5000	0.4258
B	0.7283	0.0000	0.5691
B	0.2765	0.0000	0.5742
B	0.2283	0.5000	0.0691
B	0.7765	0.5000	0.0742
Si	0.0639	0.2692	0.2500
Si	0.5639	0.7692	0.7500
Si	0.0639	0.7308	0.2500
Si	0.5639	0.2308	0.7500
Si	0.9361	0.7308	0.7500
Si	0.4361	0.2308	0.2500
Si	0.9361	0.2692	0.7500
Si	0.4361	0.7692	0.2500
Si	0.9978	1.0000	0.3456
Si	0.4978	0.5000	0.8456
Si	0.9978	1.0000	0.1544
Si	0.4978	0.5000	0.6544
Si	0.0022	1.0000	0.8456
Si	0.5022	0.5000	0.3456
Si	0.0022	1.0000	0.6544
Si	0.5022	0.5000	0.1544

Table S2 The optimized coordinates of B₆Si unit cell.

	x	y	z
B	0.2002	0.5000	0.5000
B	0.7998	0.5000	0.5000
B	0.5000	0.2002	0.5000
B	0.5000	0.7998	0.5000
B	0.5000	0.5000	0.2002
B	0.5000	0.5000	0.7998
Si	0.0000	0.0000	0.0000

Table S3 The optimized coordinates of B₃Si (1 x 1 x 2)/Al (2 x 3 x 3) superlattice.

	x	y	z
Si	0.5000	0.3458	0.1285
Si	0.0000	0.8499	0.2494
Si	0.5000	0.1530	0.1239

Si	0.0000	0.6578	0.2519
Si	0.5000	0.8489	0.1235
Si	0.0000	0.3679	0.9960
Si	0.5000	0.6574	0.1283
Si	0.0000	0.1678	0.0012
Si	0.2305	0.2523	0.1103
Si	0.7321	0.7537	0.2330
Si	0.7695	0.2523	0.1103
Si	0.2680	0.7537	0.2330
Si	0.7691	0.7523	0.1421
Si	0.2737	0.2524	0.0193
Si	0.2309	0.7523	0.1421
Si	0.7263	0.2524	0.0193
Si	0.5000	0.3509	0.3739
Si	0.0000	0.8368	0.0016
Si	0.5000	0.1601	0.3710
Si	0.0000	0.6432	0.0020
Si	0.5000	0.8462	0.3722
Si	0.0000	0.3509	0.2491
Si	0.5000	0.6559	0.3760
Si	0.0000	0.1572	0.2458
Si	0.2337	0.2552	0.3528
Si	0.7292	0.7398	0.9881
Si	0.7663	0.2552	0.3528
Si	0.2708	0.7398	0.9881
Si	0.7714	0.7568	0.3975
Si	0.2704	0.2541	0.2628
Si	0.2287	0.7568	0.3975
Si	0.7297	0.2541	0.2628
B	0.1099	0.3895	0.1260
B	0.3247	0.5027	0.2124
B	0.6106	0.8905	0.2474
B	0.8241	0.9986	0.0851
B	0.8891	0.1133	0.1222
B	0.6756	0.0042	0.2096
B	0.3889	0.6172	0.2500
B	0.1755	0.5036	0.0903
B	0.8891	0.8892	0.1251
B	0.6745	-0.0028	0.0375
B	0.3941	0.3922	0.0053
B	0.1752	0.5009	0.1654
B	0.1101	0.6149	0.1282
B	0.3278	0.5023	0.0459
B	0.6095	0.1169	0.0009
B	0.8245	0.0038	0.1622

B	0.8899	0.6149	0.1282
B	0.6722	0.5023	0.0459
B	0.3905	0.1169	0.0009
B	0.1755	0.0038	0.1622
B	0.1109	0.8892	0.1251
B	0.3255	-0.0028	0.0375
B	0.6059	0.3922	0.0053
B	0.8248	0.5009	0.1654
B	0.1110	0.1133	0.1222
B	0.3245	0.0042	0.2096
B	0.6111	0.6172	0.2500
B	0.8245	0.5036	0.0903
B	0.8901	0.3895	0.1260
B	0.6754	0.5027	0.2124
B	0.3894	0.8905	0.2474
B	0.1759	0.9986	0.0851
B	0.5000	0.4291	0.0620
B	0.5000	0.4300	0.1957
B	0.0000	0.9337	0.1805
B	0.0000	0.9277	0.3180
B	0.5000	0.0690	0.0546
B	0.5000	0.0764	0.1927
B	0.0000	0.5715	0.1837
B	0.0000	0.5836	0.3216
B	0.5000	0.9334	0.1917
B	0.5000	0.9237	0.0536
B	0.0000	0.4349	0.0705
B	0.0000	0.4159	0.4275
B	0.5000	0.5738	0.1953
B	0.5000	0.5727	0.0638
B	0.0000	0.0694	0.0670
B	0.0000	0.0922	0.4238
B	0.1102	0.3895	0.3700
B	0.3310	0.4927	0.4500
B	0.6098	0.8816	-0.0012
B	0.8251	0.0022	0.3326
B	0.8897	0.1208	0.3670
B	0.6703	0.0138	0.4491
B	0.3989	0.6125	0.0093
B	0.1744	0.5081	0.3359
B	0.8904	0.8945	0.3754
B	0.6753	0.0012	0.2860
B	0.3898	0.3929	0.2511
B	0.1717	0.4951	0.4104
B	0.1097	0.6159	0.3797

B	0.3244	0.5073	0.2890
B	0.6105	0.1152	0.2483
B	0.8264	0.0144	0.4065
B	0.8903	0.6159	0.3797
B	0.6756	0.5073	0.2890
B	0.3895	0.1152	0.2483
B	0.1736	0.0144	0.4065
B	0.1097	0.8945	0.3754
B	0.3247	0.0012	0.2860
B	0.6103	0.3929	0.2511
B	0.8283	0.4951	0.4104
B	0.1104	0.1208	0.3670
B	0.3297	0.0138	0.4491
B	0.6011	0.6125	0.0093
B	0.8256	0.5081	0.3359
B	0.8899	0.3895	0.3700
B	0.6691	0.4927	0.4500
B	0.3902	0.8816	-0.0012
B	0.1749	0.0022	0.3326
B	0.5000	0.4367	0.3065
B	0.5000	0.4234	0.4420
B	0.0000	0.9512	0.4289
B	0.0000	0.9257	0.0688
B	0.5000	0.0719	0.3038
B	0.5000	0.0781	0.4370
B	0.0000	0.5610	0.4340
B	0.0000	0.5756	0.0730
B	0.5000	0.9385	0.4373
B	0.5000	0.9279	0.3032
B	0.0000	0.4389	0.3162
B	0.0000	0.4276	0.1814
B	0.5000	0.5631	0.4403
B	0.5000	0.5803	0.3059
B	0.0000	0.0717	0.3131
B	0.0000	0.0773	0.1779
Al	0.2354	-0.0186	0.5894
Al	0.0000	0.1504	0.5824
Al	0.2678	0.1483	0.5084
Al	0.0000	-0.0515	0.5132
Al	0.7646	-0.0186	0.5894
Al	0.5000	0.1584	0.5952
Al	0.7322	0.1483	0.5084
Al	0.5000	-0.0043	0.5231
Al	0.2505	0.3141	0.5992
Al	0.0000	0.4833	0.6018

Al	0.2365	0.4725	0.5284
Al	0.0000	0.2559	0.4731
Al	0.7494	0.3141	0.5992
Al	0.4999	0.4843	0.6016
Al	0.7633	0.4726	0.5284
Al	0.4999	0.3204	0.5127
Al	0.2527	0.6512	0.5951
Al	0.0000	0.8010	0.5898
Al	0.3009	0.8352	0.4870
Al	-0.0001	0.6346	0.5149
Al	0.7472	0.6513	0.5951
Al	0.5000	0.8135	0.5819
Al	0.6991	0.8352	0.4870
Al	0.4999	0.6336	0.5164
Al	0.2633	0.0015	0.7504
Al	0.0000	0.1694	0.7522
Al	0.2519	0.1610	0.6759
Al	0.0000	0.0027	0.6721
Al	0.7367	0.0015	0.7504
Al	0.5000	0.1646	0.7586
Al	0.7480	0.1610	0.6759
Al	0.5000	-0.0081	0.6690
Al	0.2497	0.3308	0.7624
Al	0.0000	0.4951	0.7590
Al	0.2511	0.4895	0.6798
Al	0.0000	0.3271	0.6783
Al	0.7502	0.3308	0.7624
Al	0.5000	0.4957	0.7581
Al	0.7488	0.4895	0.6798
Al	0.5000	0.3255	0.6814
Al	0.2500	0.6663	0.7501
Al	0.0000	0.8305	0.7438
Al	0.2507	0.8250	0.6682
Al	0.0000	0.6518	0.6754
Al	0.7499	0.6663	0.7501
Al	0.5000	0.8311	0.7485
Al	0.7493	0.8250	0.6682
Al	0.5000	0.6585	0.6743
Al	0.2676	0.0027	0.9474
Al	0.0000	0.1173	0.9078
Al	0.2487	0.1710	0.8404
Al	0.0000	0.0029	0.8168
Al	0.7324	0.0027	0.9474
Al	0.5000	0.1532	0.9218
Al	0.7513	0.1710	0.8404

Al	0.5000	0.0062	0.8397
Al	0.2447	0.3706	0.9274
Al	0.0000	0.5233	0.9191
Al	0.2538	0.5063	0.8391
Al	0.0000	0.3364	0.8440
Al	0.7553	0.3706	0.9274
Al	0.5000	0.5049	0.9422
Al	0.7462	0.5063	0.8391
Al	0.5000	0.3354	0.8504
Al	0.2462	0.6904	0.8955
Al	0.0000	0.8950	0.9076
Al	0.2483	0.8486	0.8261
Al	0.0000	0.6751	0.8255
Al	0.7537	0.6904	0.8955
Al	0.5000	0.8554	0.9170
Al	0.7516	0.8486	0.8261
Al	0.5000	0.6801	0.8300

Table S4 The optimized coordinates of B₆Si (1 x 1 x 4)/Al (1 x 1 x 4) superlattice.

	x	y	z
Si	0.7255	0.7441	0.0011
Si	0.0745	0.0409	0.1346
Si	0.8043	0.7694	0.2599
Si	0.7757	0.0534	0.3853
B	0.1294	0.3990	0.0495
B	0.7307	0.3947	0.0513
B	0.4346	0.0995	0.0493
B	0.4226	0.6978	0.0518
B	0.4126	0.3865	0.0122
B	0.4298	0.3960	0.0873
B	0.1498	0.4148	0.1782
B	0.7460	0.4054	0.1752
B	0.4513	0.1127	0.1782
B	0.4425	0.7091	0.1753
B	0.4526	0.4162	0.1384
B	0.4538	0.4164	0.2139
B	0.1382	0.4024	0.3020
B	0.7350	0.3972	0.3044
B	0.4378	0.1006	0.3018
B	0.4338	0.6974	0.3047
B	0.4326	0.3936	0.2651
B	0.4320	0.3943	0.3404

B	0.1052	0.4138	0.4281
B	0.7026	0.4175	0.4309
B	0.4028	0.1157	0.4308
B	0.4046	0.7139	0.4283
B	0.4005	0.4196	0.3916
B	0.4002	0.4176	0.4668
Al	0.6331	0.6526	0.5216
Al	0.1455	0.6606	0.5825
Al	0.1568	0.1780	0.5211
Al	0.6422	0.1641	0.5825
Al	0.6436	0.6623	0.6433
Al	0.1436	0.6630	0.7049
Al	0.1448	0.1637	0.6430
Al	0.6443	0.1629	0.7049
Al	0.6449	0.6662	0.7671
Al	0.1493	0.6684	0.8282
Al	0.1433	0.1639	0.7668
Al	0.6480	0.1692	0.8282
Al	0.6500	0.6697	0.8889
Al	0.1754	0.6611	0.9506
Al	0.1412	0.1635	0.8903
Al	0.6328	0.1912	0.9497

Table S5 The optimized coordinates of B₆Si (2 x 2 x 4)/Al (2 x 2 x 4)superlattice.

	x	y	z
Si	0.3628	0.3720	0.0011
Si	0.0372	0.0204	0.1346
Si	0.4021	0.3847	0.2599
Si	0.3879	0.0267	0.3853
Si	0.8628	0.3720	0.0011
Si	0.5372	0.0204	0.1346
Si	0.9021	0.3847	0.2599
Si	0.8879	0.0267	0.3853
Si	0.3628	0.8720	0.0011
Si	0.0372	0.5204	0.1346
Si	0.4021	0.8847	0.2599
Si	0.3879	0.5267	0.3853
Si	0.8628	0.8720	0.0011
Si	0.5372	0.5204	0.1346
Si	0.9021	0.8847	0.2599
Si	0.8879	0.5267	0.3853
B	0.0647	0.1995	0.0495

B	0.3654	0.1974	0.0513
B	0.2173	0.0497	0.0493
B	0.2113	0.3489	0.0518
B	0.2063	0.1932	0.0122
B	0.2149	0.1980	0.0873
B	0.0749	0.2074	0.1782
B	0.3730	0.2027	0.1752
B	0.2257	0.0563	0.1782
B	0.2212	0.3546	0.1753
B	0.2263	0.2081	0.1384
B	0.2269	0.2082	0.2139
B	0.0691	0.2012	0.3020
B	0.3675	0.1986	0.3044
B	0.2189	0.0503	0.3018
B	0.2169	0.3487	0.3047
B	0.2163	0.1968	0.2651
B	0.2160	0.1972	0.3404
B	0.0526	0.2069	0.4281
B	0.3513	0.2087	0.4309
B	0.2014	0.0579	0.4308
B	0.2023	0.3570	0.4283
B	0.2002	0.2098	0.3916
B	0.2001	0.2088	0.4668
B	0.5647	0.1995	0.0495
B	0.8654	0.1974	0.0513
B	0.7173	0.0497	0.0493
B	0.7113	0.3489	0.0518
B	0.7063	0.1932	0.0122
B	0.7149	0.1980	0.0873
B	0.5749	0.2074	0.1782
B	0.8730	0.2027	0.1752
B	0.7257	0.0563	0.1782
B	0.7212	0.3546	0.1753
B	0.7263	0.2081	0.1384
B	0.7269	0.2082	0.2139
B	0.5691	0.2012	0.3020
B	0.8675	0.1986	0.3044
B	0.7189	0.0503	0.3018
B	0.7169	0.3487	0.3047
B	0.7163	0.1968	0.2651
B	0.7160	0.1972	0.3404
B	0.5526	0.2069	0.4281
B	0.8513	0.2087	0.4309
B	0.7014	0.0579	0.4308
B	0.7023	0.3570	0.4283

B	0.7002	0.2098	0.3916
B	0.7001	0.2088	0.4668
B	0.0647	0.6995	0.0495
B	0.3654	0.6974	0.0513
B	0.2173	0.5497	0.0493
B	0.2113	0.8489	0.0518
B	0.2063	0.6932	0.0122
B	0.2149	0.6980	0.0873
B	0.0749	0.7074	0.1782
B	0.3730	0.7027	0.1752
B	0.2257	0.5563	0.1782
B	0.2212	0.8546	0.1753
B	0.2263	0.7081	0.1384
B	0.2269	0.7082	0.2139
B	0.0691	0.7012	0.3020
B	0.3675	0.6986	0.3044
B	0.2189	0.5503	0.3018
B	0.2169	0.8487	0.3047
B	0.2163	0.6968	0.2651
B	0.2160	0.6972	0.3404
B	0.0526	0.7069	0.4281
B	0.3513	0.7087	0.4309
B	0.2014	0.5579	0.4308
B	0.2023	0.8570	0.4283
B	0.2002	0.7098	0.3916
B	0.2001	0.7088	0.4668
B	0.5647	0.6995	0.0495
B	0.8654	0.6974	0.0513
B	0.7173	0.5497	0.0493
B	0.7113	0.8489	0.0518
B	0.7063	0.6932	0.0122
B	0.7149	0.6980	0.0873
B	0.5749	0.7074	0.1782
B	0.8730	0.7027	0.1752
B	0.7257	0.5563	0.1782
B	0.7212	0.8546	0.1753
B	0.7263	0.7081	0.1384
B	0.7269	0.7082	0.2139
B	0.5691	0.7012	0.3020
B	0.8675	0.6986	0.3044
B	0.7189	0.5503	0.3018
B	0.7169	0.8487	0.3047
B	0.7163	0.6968	0.2651
B	0.7160	0.6972	0.3404
B	0.5526	0.7069	0.4281

B	0.8513	0.7087	0.4309
B	0.7014	0.5579	0.4308
B	0.7023	0.8570	0.4283
B	0.7002	0.7098	0.3916
B	0.7001	0.7088	0.4668
Al	0.3165	0.3263	0.5216
Al	0.0728	0.3303	0.5825
Al	0.0784	0.0890	0.5211
Al	0.3211	0.0821	0.5825
Al	0.3218	0.3311	0.6433
Al	0.0718	0.3315	0.7049
Al	0.0724	0.0818	0.6430
Al	0.3222	0.0815	0.7049
Al	0.3225	0.3331	0.7671
Al	0.0747	0.3342	0.8282
Al	0.0716	0.0820	0.7668
Al	0.3240	0.0846	0.8282
Al	0.3250	0.3348	0.8889
Al	0.0877	0.3306	0.9506
Al	0.0706	0.0818	0.8903
Al	0.3164	0.0956	0.9497
Al	0.8165	0.3263	0.5216
Al	0.5728	0.3303	0.5825
Al	0.5784	0.0890	0.5211
Al	0.8211	0.0821	0.5825
Al	0.8218	0.3311	0.6433
Al	0.5718	0.3315	0.7049
Al	0.5724	0.0818	0.6430
Al	0.8222	0.0815	0.7049
Al	0.8225	0.3331	0.7671
Al	0.5747	0.3342	0.8282
Al	0.5716	0.0820	0.7668
Al	0.8240	0.0846	0.8282
Al	0.8250	0.3348	0.8889
Al	0.5877	0.3306	0.9506
Al	0.5706	0.0818	0.8903
Al	0.8164	0.0956	0.9497
Al	0.3165	0.8263	0.5216
Al	0.0728	0.8303	0.5825
Al	0.0784	0.5890	0.5211
Al	0.3211	0.5821	0.5825
Al	0.3218	0.8311	0.6433
Al	0.0718	0.8315	0.7049
Al	0.0724	0.5818	0.6430
Al	0.3222	0.5815	0.7049

Al	0.3225	0.8331	0.7671
Al	0.0747	0.8342	0.8282
Al	0.0716	0.5820	0.7668
Al	0.3240	0.5846	0.8282
Al	0.3250	0.8348	0.8889
Al	0.0877	0.8306	0.9506
Al	0.0706	0.5818	0.8903
Al	0.3164	0.5956	0.9497
Al	0.8165	0.8263	0.5216
Al	0.5728	0.8303	0.5825
Al	0.5784	0.5890	0.5211
Al	0.8211	0.5821	0.5825
Al	0.8218	0.8311	0.6433
Al	0.5718	0.8315	0.7049
Al	0.5724	0.5818	0.6430
Al	0.8222	0.5815	0.7049
Al	0.8225	0.8331	0.7671
Al	0.5747	0.8342	0.8282
Al	0.5716	0.5820	0.7668
Al	0.8240	0.5846	0.8282
Al	0.8250	0.8348	0.8889
Al	0.5877	0.8306	0.9506
Al	0.5706	0.5818	0.8903
Al	0.8164	0.5956	0.9497