

Electronic Supplementary Information

Surface-dependent band structure variations and bond deviations of GaN

Chih-Shan Tan^{*a} and Michael H. Huang^{*b}

^aInstitute of Electronics, National Yang Ming Chiao Tung University, Hsinchu 300093, Taiwan

^bDepartment of Chemistry, National Tsing Hua University, Hsinchu 300044, Taiwan

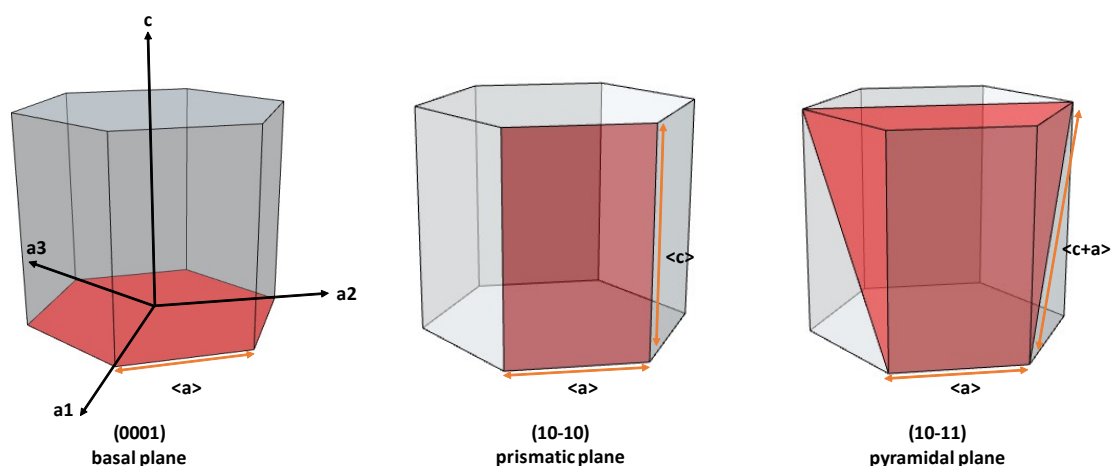


Fig. S1 Crystal model of GaN showing different lattice planes.

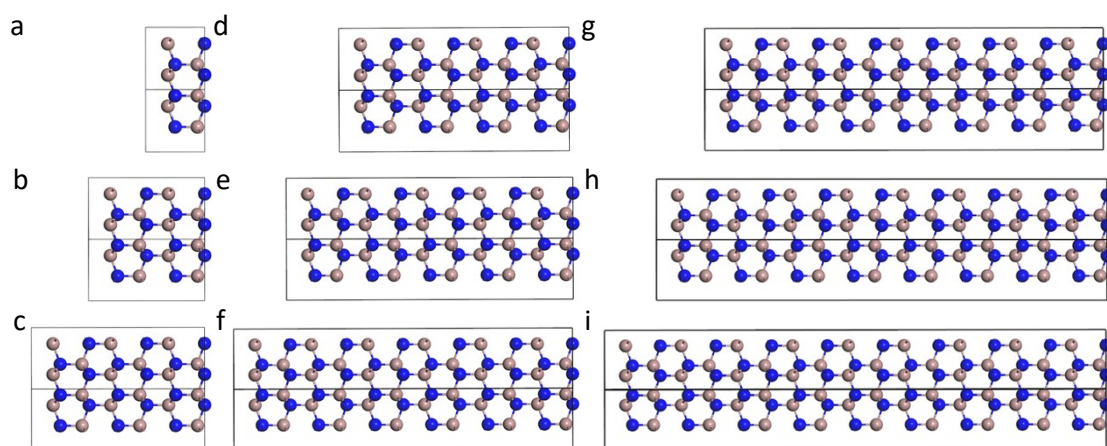


Fig. S2 Atomic slab structures of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, (g) 7, (h) 8, and (i) 9 layers of (0001) basic plane of GaN. The right side of each structure represents the crystal surface.

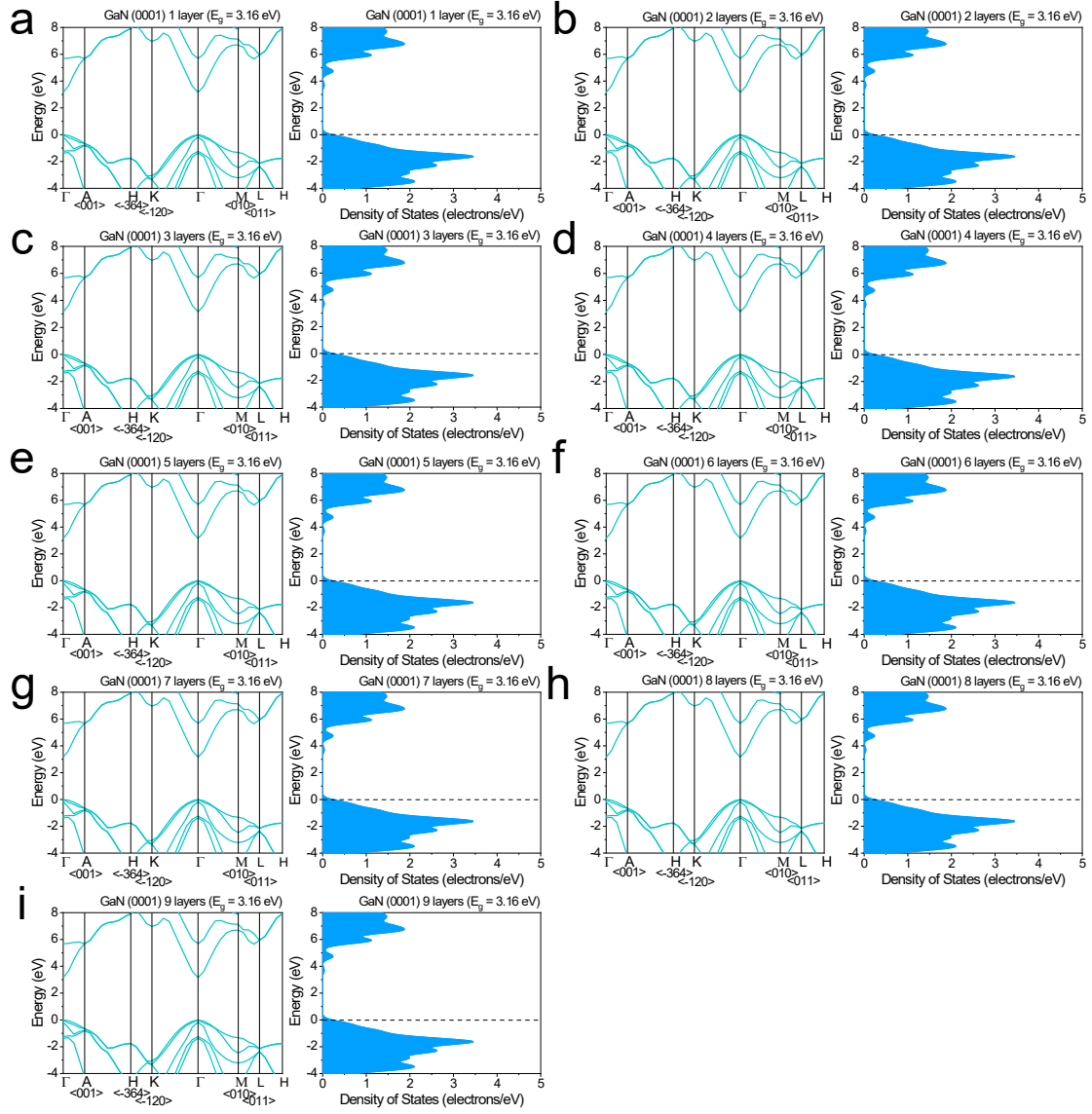


Fig. S3 Band structures and density of states (DOSs) of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, (g) 7, (h) 8, and (i) 9 layers of (0001) basic plane of GaN.

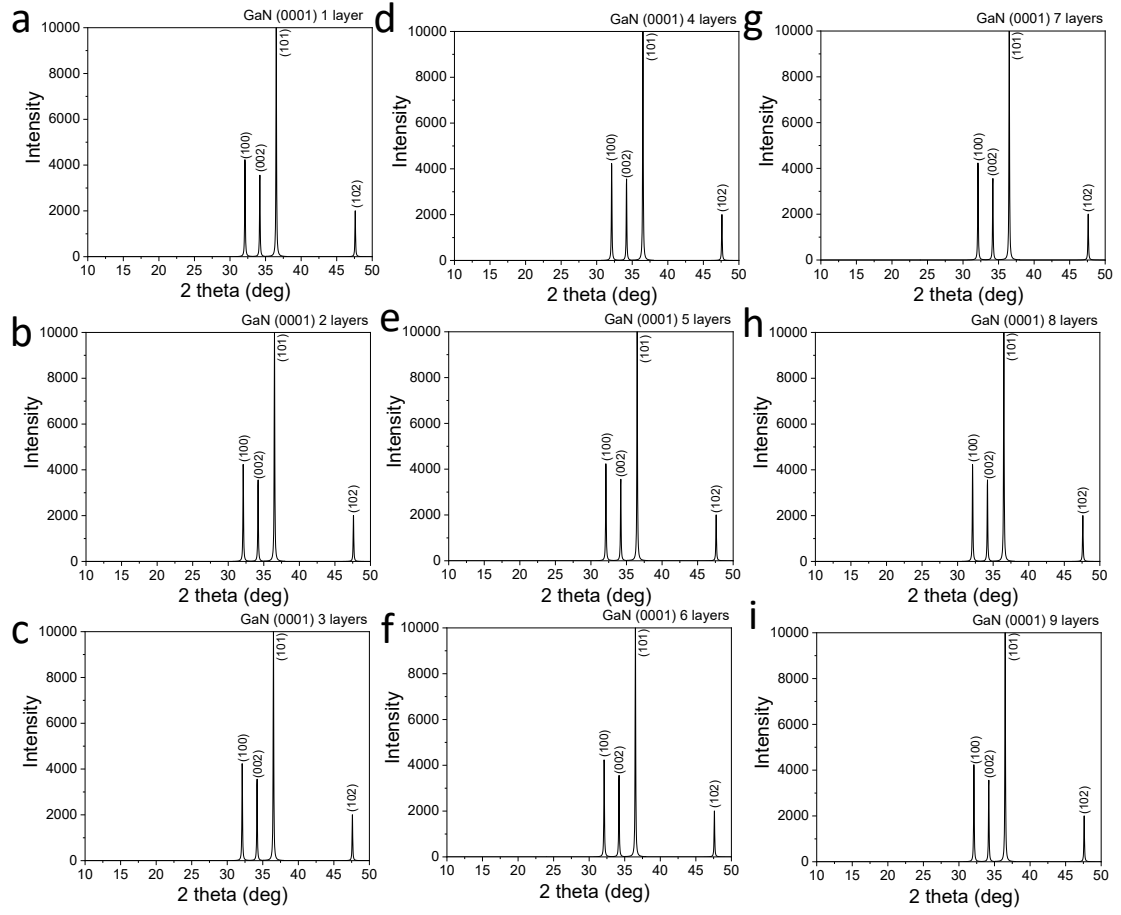


Fig. S4 The calculated powder XRD patterns of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, (g) 7, (h) 8, and (i) 9 layers of (0001) basic plane of GaN ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$).

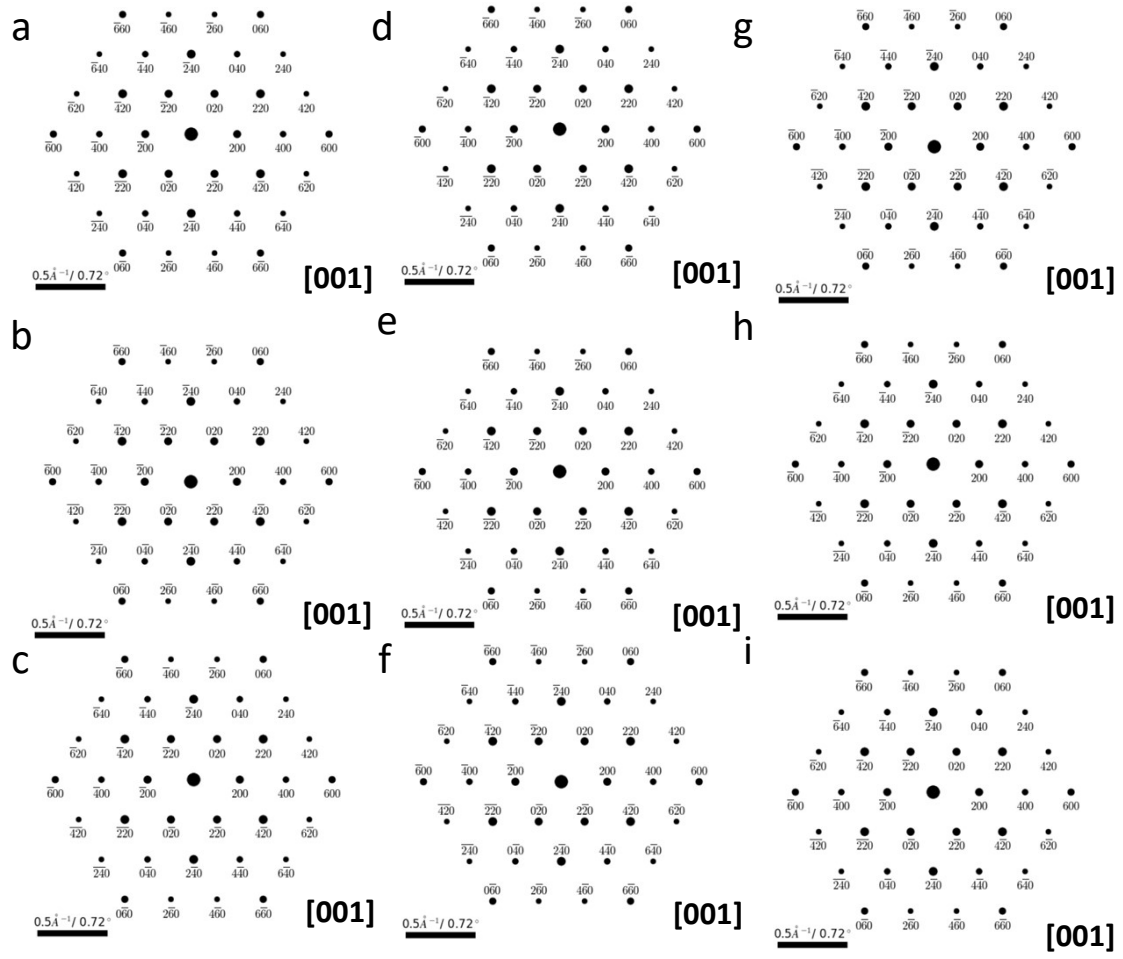


Fig. S5 The calculated electron diffraction patterns of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, (g) 7, (h) 8, and (i) 9 layers of (0001) basic plane of GaN ($\lambda = 0.00251 \text{ \AA}$, 200 keV).

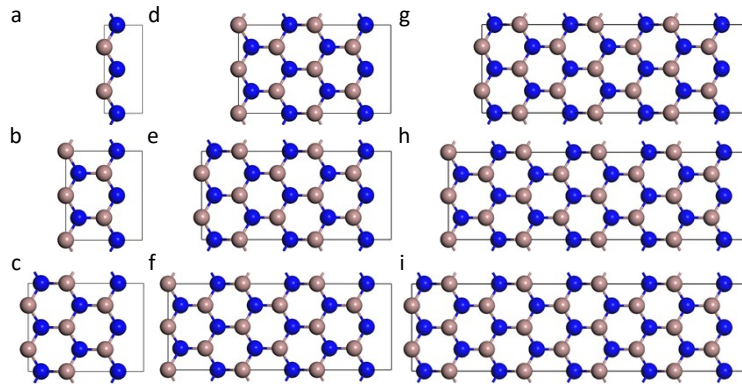


Fig. S6 Atomic slab structures of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, (g) 7, (h) 8, and (i) 9 layers of (10-10) prismatic plane of GaN.

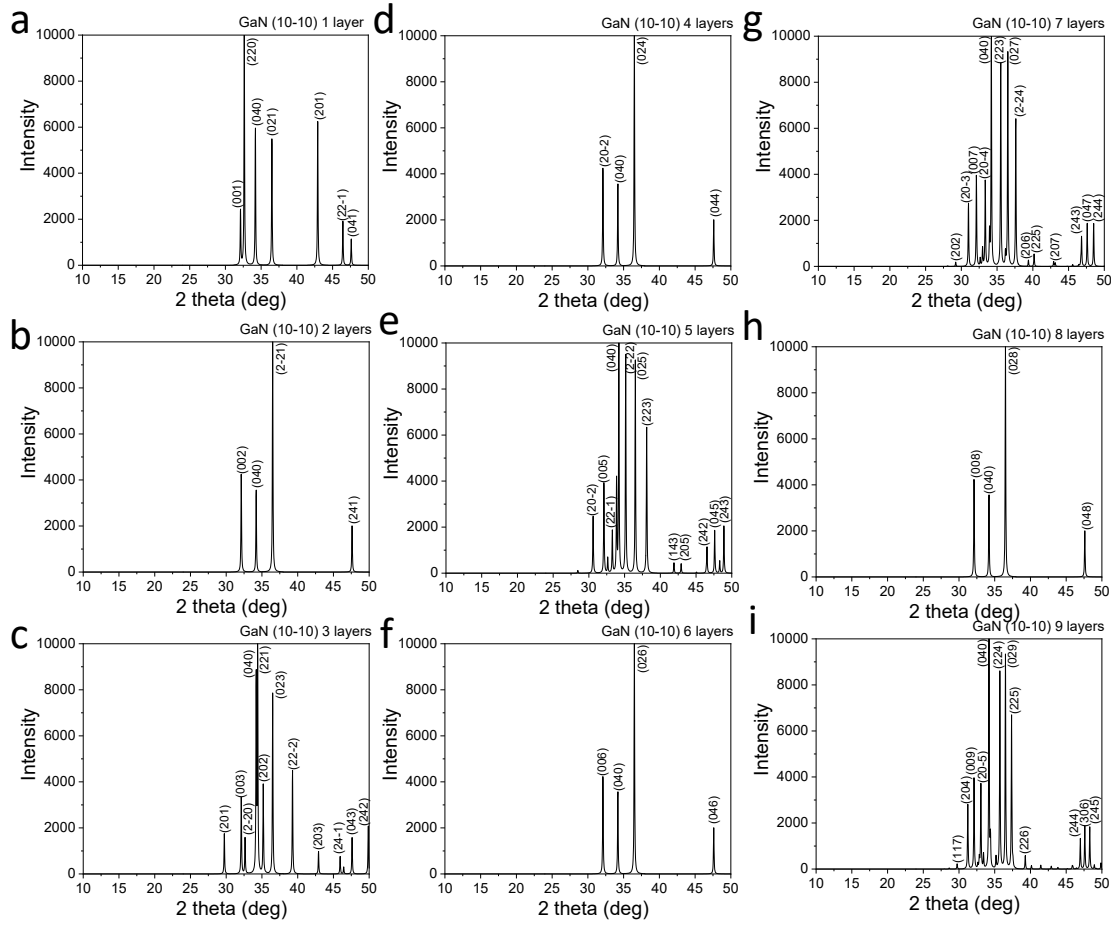


Fig. S7 The calculated powder XRD patterns of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, (e) 5, (f) 6, (g) 7, (h) 8, and (i) 9 layers of (10-10) prismatic plane of GaN ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$). The peak labels are generated from the calculation program and can differ due to ultrasmall bond length variations beyond three digits after the decimal point for bond length. That is, peaks in panels b, d, f and h should be the same.

pyramidal plane of GaN.

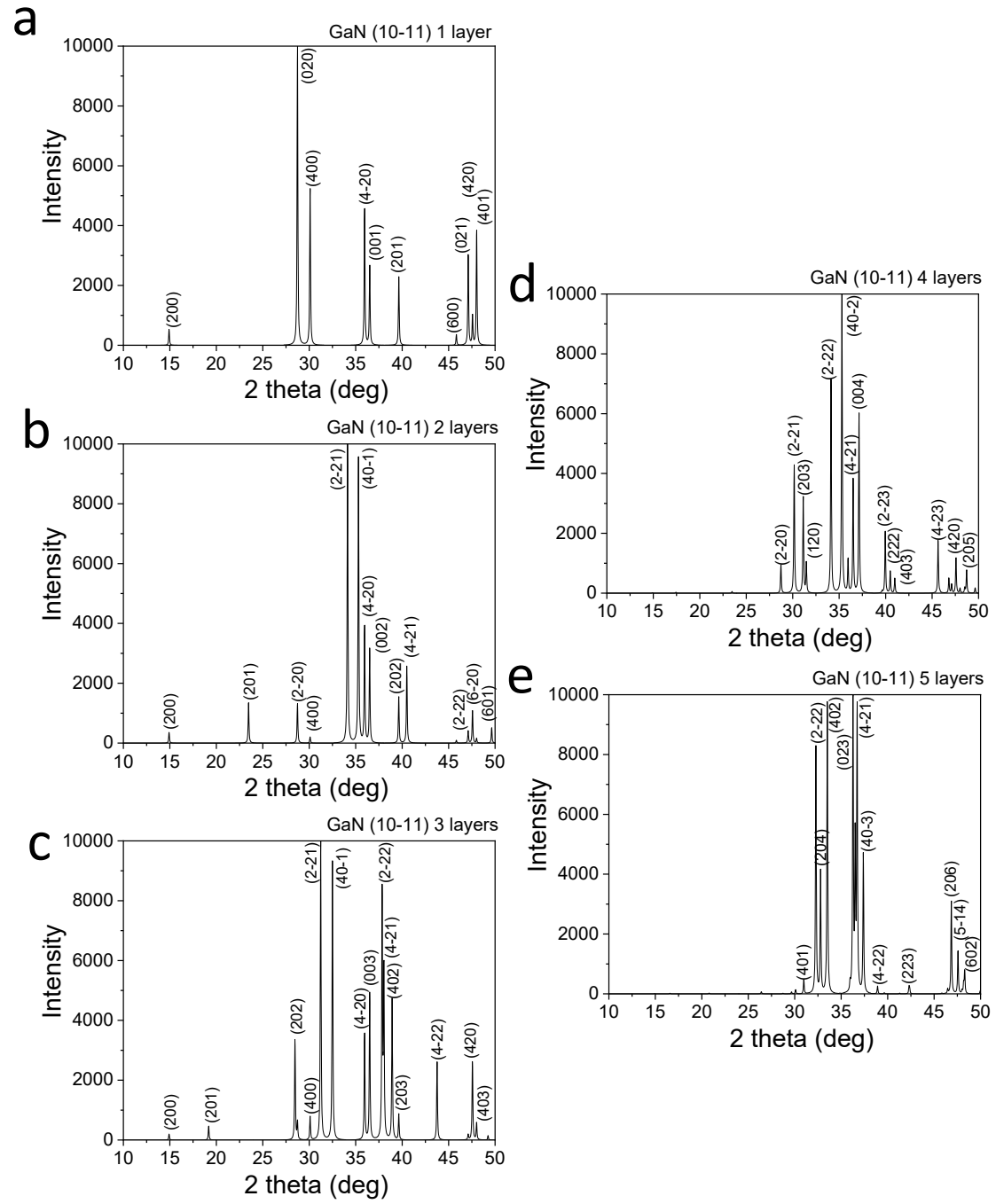


Fig. S10 The calculated powder XRD patterns of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, and (e) 5 layers of (10-11) pyramidal plane of GaN ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$).

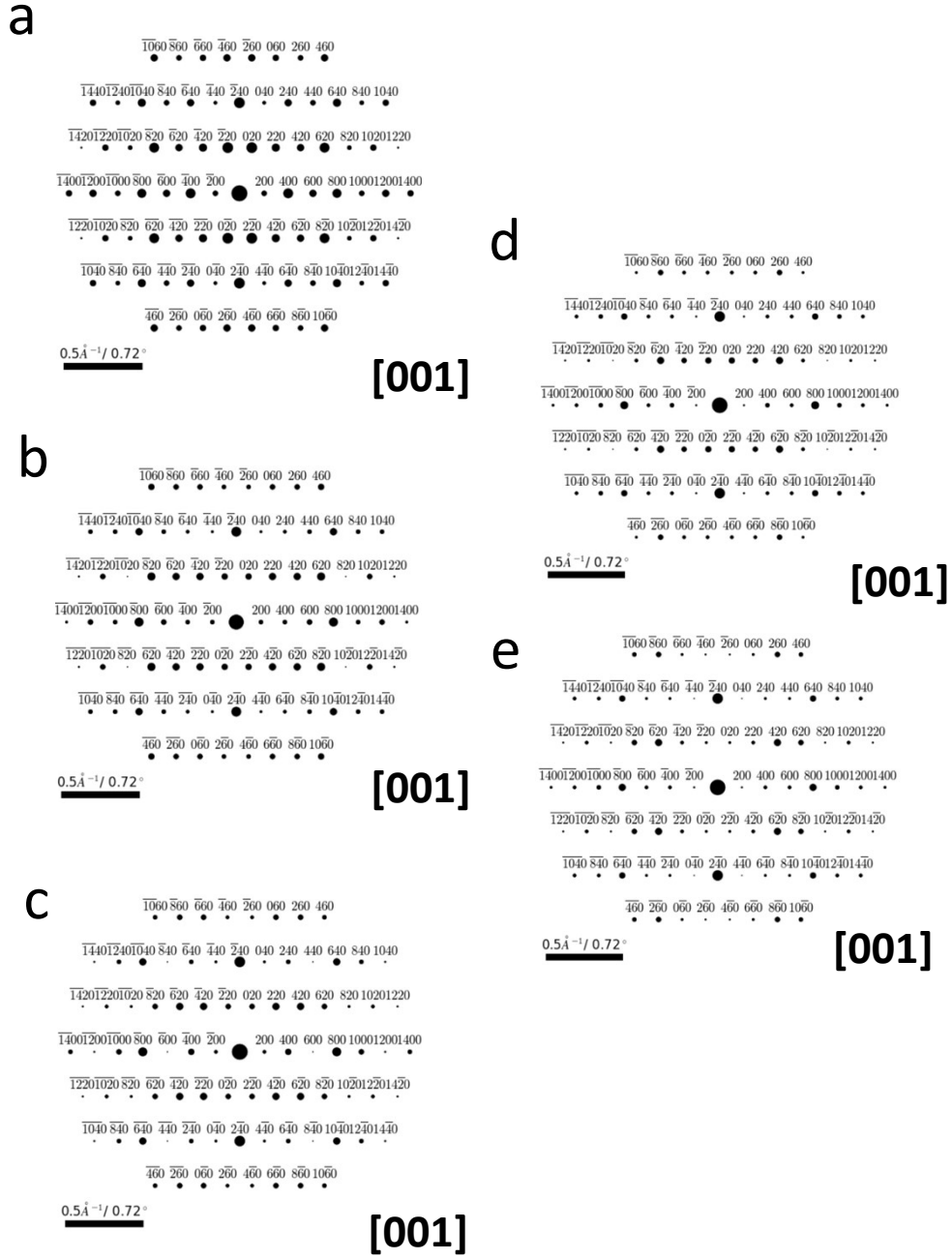


Fig. S11 The calculated electron diffraction patterns of (a) 1, (b) 2, (c) 3, (d) 4, and (e) 5 layers of (10-11) pyramidal plane of GaN ($\lambda = 0.00251 \text{ \AA}$, 200 keV).

Table S1 Band gap variations for different numbers of GaN (10-11), (10-10), and (0001) planes.

Band gap (eV)	1 layer	2 layers	3 layers	4 layers	5 layers	6 layers	7 layers	8 layers	9 layers
(10-11) Slabs	1.50	1.85	0.99	1.51	3.16	N/A	N/A	N/A	N/A
(10-10) Slabs	1.63	3.16	2.52	3.16	2.73	3.16	2.82	3.16	2.87
(0001) Slabs	3.16	3.16	3.16	3.16	3.16	3.16	3.16	3.16	3.16

Table S2 GaN (10-11), (10-10), and (0001) plane layer thicknesses.

GaN layer thickness (Å)	1 layer	2 layers	3 layers	4 layers	5 layers	6 layers	7 layers	8 layers	9 layers
(101) = (10-11)	2.46	4.92	7.38	9.84	12.30	14.76	17.22	19.68	22.14
(100) = (10-10)	2.79	5.58	8.37	11.16	13.95	16.74	19.53	22.32	25.11
(001) = (0001)	5.24	10.48	15.72	20.96	26.20	31.44	36.68	41.92	47.12

Table S3 Ga–N bond length variations with respect to different numbers of GaN (10-11), (10-10), and (0001) planes.

Ga–N average bond length (Å)	1 layer	2 layers	3 layers	4 layers	5 layers	6 layers	7 layers	8 layers	9 layers
(10-11) Slabs	1.940	1.957	1.947	1.961	1.990	N/A	N/A	N/A	N/A
(10-10) Slabs	2.063	1.990	2.042	1.990	2.024	1.990	2.014	1.990	2.010
(0001) Slabs	1.990	1.990	1.990	1.990	1.990	1.990	1.990	1.990	1.990

Table S4 Ga–N bond distortions with respect to different numbers of GaN (10-11), (10-10), and (0001) planes.

Ga–N bond distortion (%)	1 layer	2 layers	3 layers	4 layers	5 layers	6 layers	7 layers	8 layers	9 layers
(10-11) Slabs	-2.51	-1.66	-2.16	-1.46	0	N/A	N/A	N/A	N/A
(10-10) Slabs	3.67	0	2.61	0	1.71	0	1.21	0	1.01
(0001) Slabs	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Lattice parameters of the geometry-optimized atomic structures of GaN facets

GaN (10-11) 1 layer

Lattice type P

Space group name P_1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
12.29660	6.43260	2.45900	90.0000	90.0000	105.1626

Unit-cell volume = 187.733518 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 N	N1	0.81640	0.15820	0.54355	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.46328	0.23164	0.16670	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.69492	0.09746	0.00000	1.000	1.000
4 N	N4	0.54804	0.02402	0.37684	1.000	1.000
5 N	N5	0.81640	0.65820	0.54355	1.000	1.000

6 Ga	Ga6	0.46328	0.73164	0.16670	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.69492	0.59746	0.00000	1.000	1.000
8 N	N8	0.54804	0.52402	0.37684	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.96328	0.23164	0.16670	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.19492	0.09746	-0.00000	1.000	1.000
11 N	N11	0.04804	0.02402	0.37684	1.000	1.000
12 N	N12	0.31640	0.15820	0.54355	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.96328	0.73164	0.16670	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.19492	0.59746	-0.00000	1.000	1.000
15 N	N15	0.04804	0.52402	0.37684	1.000	1.000
16 N	N16	0.31640	0.65820	0.54355	1.000	1.000

GaN (10-11) 2 layers

Lattice type P

Space group name P 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
12.29660	6.43260	4.91900	90.0000	90.0000	105.1626

Unit-cell volume = 375.543375 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.35313	0.42656	0.08333	1.000	1.000
2 N	N2	0.81640	0.15820	0.77172	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.58477	0.29238	-0.00000	1.000	1.000
4 N	N4	0.43789	0.21894	0.18838	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.46328	0.23164	0.58334	1.000	1.000
6 N	N6	0.70625	0.35312	0.27172	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.69492	0.09746	0.50000	1.000	1.000
8 N	N8	0.54804	0.02402	0.68839	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.35313	0.92656	0.08333	1.000	1.000
10 N	N10	0.81640	0.65820	0.77172	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.58477	0.79238	-0.00000	1.000	1.000
12 N	N12	0.43789	0.71894	0.18838	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.46328	0.73164	0.58334	1.000	1.000
14 N	N14	0.70625	0.85312	0.27172	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.69492	0.59746	0.50000	1.000	1.000
16 N	N16	0.54804	0.52402	0.68839	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.96328	0.23164	0.58334	1.000	1.000

18 N	N18	0.20625	0.35312	0.27172	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.19492	0.09746	0.50000	1.000	1.000
20 N	N20	0.04804	0.02402	0.68839	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.85313	0.42656	0.08333	1.000	1.000
22 N	N22	0.31640	0.15820	0.77172	1.000	1.000
23 Ga	Ga23	0.08477	0.29238	0.00000	1.000	1.000
24 N	N24	0.93789	0.21894	0.18838	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.96328	0.73164	0.58334	1.000	1.000
26 N	N26	0.20625	0.85312	0.27172	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.19492	0.59746	0.50000	1.000	1.000
28 N	N28	0.04804	0.52402	0.68839	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.85313	0.92656	0.08333	1.000	1.000
30 N	N30	0.31640	0.65820	0.77172	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.08477	0.79238	0.00000	1.000	1.000
32 N	N32	0.93789	0.71894	0.18838	1.000	1.000

GaN (10-11) 3 layers

Lattice type P

Space group name P_1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
12.29660	6.43260	7.37800	90.0000	90.0000	105.1626

Unit-cell volume = 563.276857 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.35313	0.42656	0.38892	1.000	1.000
2 N	N2	0.59609	0.54805	0.18116	1.000	1.000
3 N	N3	0.81640	0.15820	0.84787	1.000	1.000
4 Ga	Ga4	0.58477	0.29238	0.33336	1.000	1.000
5 N	N5	0.43789	0.21894	0.45895	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.24297	0.62149	0.05556	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.46328	0.23164	0.72228	1.000	1.000
8 N	N8	0.70625	0.35312	0.51451	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.47461	0.48731	0.00000	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.69492	0.09746	0.66672	1.000	1.000
11 N	N11	0.32773	0.41387	0.12560	1.000	1.000
12 N	N12	0.54804	0.02402	0.79231	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.35313	0.92656	0.38892	1.000	1.000

14 N	N14	0.59609	0.04805	0.18116	1.000	1.000
15 N	N15	0.81640	0.65820	0.84787	1.000	1.000
16 Ga	Ga16	0.58477	0.79238	0.33336	1.000	1.000
17 N	N17	0.43789	0.71894	0.45895	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.24297	0.12149	0.05556	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.46328	0.73164	0.72228	1.000	1.000
20 N	N20	0.70625	0.85312	0.51451	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.47461	0.98731	0.00000	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.69492	0.59746	0.66672	1.000	1.000
23 N	N23	0.32773	0.91387	0.12560	1.000	1.000
24 N	N24	0.54804	0.52402	0.79231	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.74297	0.62149	0.05556	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.96328	0.23164	0.72228	1.000	1.000
27 N	N27	0.20625	0.35312	0.51451	1.000	1.000
28 Ga	Ga28	0.97461	0.48731	0.00000	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.19492	0.09746	0.66672	1.000	1.000
30 N	N30	0.82773	0.41387	0.12560	1.000	1.000
31 N	N31	0.04804	0.02402	0.79231	1.000	1.000
32 Ga	Ga32	0.85313	0.42656	0.38892	1.000	1.000
33 N	N33	0.09609	0.54805	0.18116	1.000	1.000
34 N	N34	0.31640	0.15820	0.84787	1.000	1.000
35 Ga	Ga35	0.08477	0.29238	0.33336	1.000	1.000
36 N	N36	0.93789	0.21894	0.45895	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.74297	0.12149	0.05556	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.96328	0.73164	0.72228	1.000	1.000
39 N	N39	0.20625	0.85312	0.51451	1.000	1.000
40 Ga	Ga40	0.97461	0.98731	0.00000	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.19492	0.59746	0.66672	1.000	1.000
42 N	N42	0.82773	0.91387	0.12560	1.000	1.000
43 N	N43	0.04804	0.52402	0.79231	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.85313	0.92656	0.38892	1.000	1.000
45 N	N45	0.09609	0.04805	0.18116	1.000	1.000
46 N	N46	0.31640	0.65820	0.84787	1.000	1.000
47 Ga	Ga47	0.08477	0.79238	0.33336	1.000	1.000
48 N	N48	0.93789	0.71894	0.45895	1.000	1.000

=====

GaN (10-11) 4 layer4

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
12.29660	6.43260	9.83800	90.0000	90.0000	105.1626

Unit-cell volume = 751.086751 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.13281	0.81641	0.04167	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.35313	0.42656	0.54167	1.000	1.000
3 N	N3	0.59609	0.54805	0.38586	1.000	1.000
4 N	N4	0.81640	0.15820	0.88586	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.36446	0.68223	0.00000	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.58477	0.29238	0.50000	1.000	1.000
7 N	N7	0.21758	0.60879	0.09419	1.000	1.000
8 N	N8	0.43789	0.21894	0.59419	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.24297	0.62149	0.29167	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.46328	0.23164	0.79167	1.000	1.000
11 N	N11	0.48594	0.74297	0.13586	1.000	1.000
12 N	N12	0.70625	0.35312	0.63586	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.47461	0.48731	0.25000	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.69492	0.09746	0.75000	1.000	1.000
15 N	N15	0.32773	0.41387	0.34419	1.000	1.000
16 N	N16	0.54804	0.02402	0.84419	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.13281	0.31641	0.04167	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.35313	0.92656	0.54167	1.000	1.000
19 N	N19	0.59609	0.04805	0.38586	1.000	1.000
20 N	N20	0.81640	0.65820	0.88586	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.36446	0.18223	0.00000	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.58477	0.79238	0.50000	1.000	1.000
23 N	N23	0.21758	0.10879	0.09419	1.000	1.000
24 N	N24	0.43789	0.71894	0.59419	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.24297	0.12149	0.29167	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.46328	0.73164	0.79167	1.000	1.000
27 N	N27	0.48594	0.24297	0.13586	1.000	1.000
28 N	N28	0.70625	0.85312	0.63586	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.47461	0.98731	0.25000	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.69492	0.59746	0.75000	1.000	1.000
31 N	N31	0.32773	0.91387	0.34419	1.000	1.000

32 N	N32	0.54804	0.52402	0.84419	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.74297	0.62149	0.29167	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.96328	0.23164	0.79167	1.000	1.000
35 N	N35	0.98594	0.74297	0.13586	1.000	1.000
36 N	N36	0.20625	0.35312	0.63586	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.97461	0.48731	0.25000	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.19492	0.09746	0.75000	1.000	1.000
39 N	N39	0.82773	0.41387	0.34419	1.000	1.000
40 N	N40	0.04804	0.02402	0.84419	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.63281	0.81641	0.04167	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.85313	0.42656	0.54167	1.000	1.000
43 N	N43	0.09609	0.54805	0.38586	1.000	1.000
44 N	N44	0.31640	0.15820	0.88586	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.86446	0.68223	0.00000	1.000	1.000
46 Ga	Ga46	0.08477	0.29238	0.50000	1.000	1.000
47 N	N47	0.71758	0.60879	0.09419	1.000	1.000
48 N	N48	0.93789	0.21894	0.59419	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.74297	0.12149	0.29167	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.96328	0.73164	0.79167	1.000	1.000
51 N	N51	0.98594	0.24297	0.13586	1.000	1.000
52 N	N52	0.20625	0.85312	0.63586	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.97461	0.98731	0.25000	1.000	1.000
54 Ga	Ga54	0.19492	0.59746	0.75000	1.000	1.000
55 N	N55	0.82773	0.91387	0.34419	1.000	1.000
56 N	N56	0.04804	0.52402	0.84419	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.63281	0.31641	0.04167	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.85313	0.92656	0.54167	1.000	1.000
59 N	N59	0.09609	0.04805	0.38586	1.000	1.000
60 N	N60	0.31640	0.65820	0.88586	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.86446	0.18223	0.00000	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.08477	0.79238	0.50000	1.000	1.000
63 N	N63	0.71758	0.10879	0.09419	1.000	1.000
64 N	N64	0.93789	0.71894	0.59419	1.000	1.000

=====

GaN (10-11) 5 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
12.29660	6.43260	12.29700	90.0000	90.0000	105.1626

Unit-cell volume = 938.820232 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.13281	0.81641	0.23334	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.35313	0.42656	0.63336	1.000	1.000
3 N	N3	0.37578	0.93789	0.10869	1.000	1.000
4 N	N4	0.59609	0.54805	0.50870	1.000	1.000
5 N	N5	0.81640	0.15820	0.90872	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.36446	0.68223	0.20001	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.58477	0.29238	0.60002	1.000	1.000
8 N	N8	0.21758	0.60879	0.27536	1.000	1.000
9 N	N9	0.43789	0.21894	0.67538	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.02266	0.01133	0.03333	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.24297	0.62149	0.43335	1.000	1.000
12 Ga	Ga12	0.46328	0.23164	0.83336	1.000	1.000
13 N	N13	0.48594	0.74297	0.30870	1.000	1.000
14 N	N14	0.70625	0.35312	0.70871	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.25430	0.87715	0.00000	1.000	1.000
16 Ga	Ga16	0.47461	0.48731	0.40001	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.69492	0.09746	0.80003	1.000	1.000
18 N	N18	0.10742	0.80371	0.07535	1.000	1.000
19 N	N19	0.32773	0.41387	0.47537	1.000	1.000
20 N	N20	0.54804	0.02402	0.87538	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.13281	0.31641	0.23334	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.35313	0.92656	0.63336	1.000	1.000
23 N	N23	0.37578	0.43789	0.10869	1.000	1.000
24 N	N24	0.59609	0.04805	0.50870	1.000	1.000
25 N	N25	0.81640	0.65820	0.90872	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.36446	0.18223	0.20001	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.58477	0.79238	0.60002	1.000	1.000
28 N	N28	0.21758	0.10879	0.27536	1.000	1.000
29 N	N29	0.43789	0.71894	0.67538	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.02266	0.51133	0.03333	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.24297	0.12149	0.43335	1.000	1.000
32 Ga	Ga32	0.46328	0.73164	0.83336	1.000	1.000
33 N	N33	0.48594	0.24297	0.30870	1.000	1.000

34 N	N34	0.70625	0.85312	0.70871	1.000	1.000
35 Ga	Ga35	0.25430	0.37715	0.00000	1.000	1.000
36 Ga	Ga36	0.47461	0.98731	0.40001	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.69492	0.59746	0.80003	1.000	1.000
38 N	N38	0.10742	0.30371	0.07535	1.000	1.000
39 N	N39	0.32773	0.91387	0.47537	1.000	1.000
40 N	N40	0.54804	0.52402	0.87538	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.52266	0.01133	0.03333	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.74297	0.62149	0.43335	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.96328	0.23164	0.83336	1.000	1.000
44 N	N44	0.98594	0.74297	0.30870	1.000	1.000
45 N	N45	0.20625	0.35312	0.70871	1.000	1.000
46 Ga	Ga46	0.75430	0.87715	-0.00000	1.000	1.000
47 Ga	Ga47	0.97461	0.48731	0.40001	1.000	1.000
48 Ga	Ga48	0.19492	0.09746	0.80003	1.000	1.000
49 N	N49	0.60742	0.80371	0.07535	1.000	1.000
50 N	N50	0.82773	0.41387	0.47537	1.000	1.000
51 N	N51	0.04804	0.02402	0.87538	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.63281	0.81641	0.23334	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.85313	0.42656	0.63336	1.000	1.000
54 N	N54	0.87578	0.93789	0.10869	1.000	1.000
55 N	N55	0.09609	0.54805	0.50870	1.000	1.000
56 N	N56	0.31640	0.15820	0.90872	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.86446	0.68223	0.20001	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.08477	0.29238	0.60002	1.000	1.000
59 N	N59	0.71758	0.60879	0.27536	1.000	1.000
60 N	N60	0.93789	0.21894	0.67538	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.52266	0.51133	0.03333	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.74297	0.12149	0.43335	1.000	1.000
63 Ga	Ga63	0.96328	0.73164	0.83336	1.000	1.000
64 N	N64	0.98594	0.24297	0.30870	1.000	1.000
65 N	N65	0.20625	0.85312	0.70871	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.75430	0.37715	-0.00000	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.97461	0.98731	0.40001	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.19492	0.59746	0.80003	1.000	1.000
69 N	N69	0.60742	0.30371	0.07535	1.000	1.000
70 N	N70	0.82773	0.91387	0.47537	1.000	1.000
71 N	N71	0.04804	0.52402	0.87538	1.000	1.000

72 Ga	Ga72	0.63281	0.31641	0.23334	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.85313	0.92656	0.63336	1.000	1.000
74 N	N74	0.87578	0.43789	0.10869	1.000	1.000
75 N	N75	0.09609	0.04805	0.50870	1.000	1.000
76 N	N76	0.31640	0.65820	0.90872	1.000	1.000
77 Ga	Ga77	0.86446	0.18223	0.20001	1.000	1.000
78 Ga	Ga78	0.08477	0.79238	0.60002	1.000	1.000
79 N	N79	0.71758	0.10879	0.27536	1.000	1.000
80 N	N80	0.93789	0.71894	0.67538	1.000	1.000

GaN (10-10) 1 layer

Lattice type P

Space group name P_1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	2.78500	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 187.745231 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.25000	0.50000	-0.00000	1.000	1.000
2 N	N2	0.25000	0.18838	-0.00000	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.00000	0.25000	0.33338	1.000	1.000
4 N	N4	0.00000	0.43838	0.33338	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.75000	0.50000	-0.00000	1.000	1.000
6 N	N6	0.75000	0.18838	-0.00000	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.50000	0.25000	0.33338	1.000	1.000
8 N	N8	0.50000	0.43838	0.33338	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.25000	0.00000	-0.00000	1.000	1.000
10 N	N10	0.25000	0.68838	-0.00000	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.00000	0.75000	0.33338	1.000	1.000
12 N	N12	0.00000	0.93838	0.33338	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.75000	0.00000	-0.00000	1.000	1.000
14 N	N14	0.75000	0.68838	-0.00000	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.50000	0.75000	0.33338	1.000	1.000
16 N	N16	0.50000	0.93838	0.33338	1.000	1.000

GaN (10-10) 2 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	5.57100	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 375.557870 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.25000	0.50000	0.49998	1.000	1.000
2 N	N2	0.25000	0.18838	0.49998	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.00000	0.25000	0.66665	1.000	1.000
4 N	N4	0.00000	0.43838	0.66665	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.50000	0.50000	-0.00000	1.000	1.000
6 N	N6	0.50000	0.18838	-0.00000	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.25000	0.25000	0.16666	1.000	1.000
8 N	N8	0.25000	0.43838	0.16666	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.75000	0.50000	0.49998	1.000	1.000
10 N	N10	0.75000	0.18838	0.49998	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.50000	0.25000	0.66665	1.000	1.000
12 N	N12	0.50000	0.43838	0.66665	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.00000	0.50000	-0.00000	1.000	1.000
14 N	N14	0.00000	0.18838	-0.00000	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.75000	0.25000	0.16666	1.000	1.000
16 N	N16	0.75000	0.43838	0.16666	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.25000	0.00000	0.49998	1.000	1.000
18 N	N18	0.25000	0.68838	0.49998	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.00000	0.75000	0.66665	1.000	1.000
20 N	N20	0.00000	0.93838	0.66665	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.50000	0.00000	-0.00000	1.000	1.000
22 N	N22	0.50000	0.68838	-0.00000	1.000	1.000
23 Ga	Ga23	0.25000	0.75000	0.16666	1.000	1.000
24 N	N24	0.25000	0.93838	0.16666	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.75000	0.00000	0.49998	1.000	1.000
26 N	N26	0.75000	0.68838	0.49998	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.50000	0.75000	0.66665	1.000	1.000
28 N	N28	0.50000	0.93838	0.66665	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.00000	0.00000	-0.00000	1.000	1.000
30 N	N30	0.00000	0.68838	-0.00000	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.75000	0.75000	0.16666	1.000	1.000

32 N	N32	0.75000	0.93838	0.16666	1.000	1.000
=====						
GaN (10-10) 3 layers						
Lattice type		P				
Space group name		P ₁				
Lattice parameters						
a	b	c	alpha	beta	gamma	
6.43260	10.47990	8.35600	90.0000	90.0000	90.0000	
Unit-cell volume = 563.303085 Å ³						
Structure parameters						
		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.75000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.25000	0.50000	0.66668	1.000	1.000
3 N	N3	0.75000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
4 N	N4	0.25000	0.18838	0.66668	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.50000	0.25000	0.11111	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.00000	0.25000	0.77779	1.000	1.000
7 N	N7	0.50000	0.43838	0.11111	1.000	1.000
8 N	N8	0.00000	0.43838	0.77779	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.50000	0.50000	0.33334	1.000	1.000
10 N	N10	0.50000	0.18838	0.33334	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.25000	0.25000	0.44445	1.000	1.000
12 N	N12	0.25000	0.43838	0.44445	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.25000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.75000	0.50000	0.66668	1.000	1.000
15 N	N15	0.25000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
16 N	N16	0.75000	0.18838	0.66668	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.00000	0.25000	0.11111	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.50000	0.25000	0.77779	1.000	1.000
19 N	N19	0.00000	0.43838	0.11111	1.000	1.000
20 N	N20	0.50000	0.43838	0.77779	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.00000	0.50000	0.33334	1.000	1.000
22 N	N22	0.00000	0.18838	0.33334	1.000	1.000
23 Ga	Ga23	0.75000	0.25000	0.44445	1.000	1.000
24 N	N24	0.75000	0.43838	0.44445	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.75000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.25000	0.00000	0.66668	1.000	1.000
27 N	N27	0.75000	0.68838	0.00000	1.000	1.000

28 N	N28	0.25000	0.68838	0.66668	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.50000	0.75000	0.11111	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.00000	0.75000	0.77779	1.000	1.000
31 N	N31	0.50000	0.93838	0.11111	1.000	1.000
32 N	N32	0.00000	0.93838	0.77779	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.50000	0.00000	0.33334	1.000	1.000
34 N	N34	0.50000	0.68838	0.33334	1.000	1.000
35 Ga	Ga35	0.25000	0.75000	0.44445	1.000	1.000
36 N	N36	0.25000	0.93838	0.44445	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.25000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.75000	0.00000	0.66668	1.000	1.000
39 N	N39	0.25000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
40 N	N40	0.75000	0.68838	0.66668	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.00000	0.75000	0.11111	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.50000	0.75000	0.77779	1.000	1.000
43 N	N43	0.00000	0.93838	0.11111	1.000	1.000
44 N	N44	0.50000	0.93838	0.77779	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.00000	0.00000	0.33334	1.000	1.000
46 N	N46	0.00000	0.68838	0.33334	1.000	1.000
47 Ga	Ga47	0.75000	0.75000	0.44445	1.000	1.000
48 N	N48	0.75000	0.93838	0.44445	1.000	1.000

=====

GaN (10-10) 4 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	11.14200	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 751.115740 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.75000	0.50000	0.24999	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.25000	0.50000	0.74997	1.000	1.000
3 N	N3	0.75000	0.18838	0.24999	1.000	1.000
4 N	N4	0.25000	0.18838	0.74997	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.50000	0.25000	0.33332	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.00000	0.25000	0.83330	1.000	1.000
7 N	N7	0.50000	0.43838	0.33332	1.000	1.000

8 N	N8	0.00000	0.43838	0.83330	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.00000	0.50000	-0.00000	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.50000	0.50000	0.49998	1.000	1.000
11 N	N11	0.00000	0.18838	-0.00000	1.000	1.000
12 N	N12	0.50000	0.18838	0.49998	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.75000	0.25000	0.08333	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.25000	0.25000	0.58331	1.000	1.000
15 N	N15	0.75000	0.43838	0.08333	1.000	1.000
16 N	N16	0.25000	0.43838	0.58331	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.25000	0.50000	0.24999	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.75000	0.50000	0.74997	1.000	1.000
19 N	N19	0.25000	0.18838	0.24999	1.000	1.000
20 N	N20	0.75000	0.18838	0.74997	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.00000	0.25000	0.33332	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.50000	0.25000	0.83330	1.000	1.000
23 N	N23	0.00000	0.43838	0.33332	1.000	1.000
24 N	N24	0.50000	0.43838	0.83330	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.50000	0.50000	-0.00000	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.00000	0.50000	0.49998	1.000	1.000
27 N	N27	0.50000	0.18838	-0.00000	1.000	1.000
28 N	N28	0.00000	0.18838	0.49998	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.25000	0.25000	0.08333	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.75000	0.25000	0.58331	1.000	1.000
31 N	N31	0.25000	0.43838	0.08333	1.000	1.000
32 N	N32	0.75000	0.43838	0.58331	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.75000	0.00000	0.24999	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.25000	0.00000	0.74997	1.000	1.000
35 N	N35	0.75000	0.68838	0.24999	1.000	1.000
36 N	N36	0.25000	0.68838	0.74997	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.50000	0.75000	0.33332	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.00000	0.75000	0.83330	1.000	1.000
39 N	N39	0.50000	0.93838	0.33332	1.000	1.000
40 N	N40	0.00000	0.93838	0.83330	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.00000	0.00000	-0.00000	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.50000	0.00000	0.49998	1.000	1.000
43 N	N43	0.00000	0.68838	-0.00000	1.000	1.000
44 N	N44	0.50000	0.68838	0.49998	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.75000	0.75000	0.08333	1.000	1.000

46 Ga	Ga46	0.25000	0.75000	0.58331	1.000	1.000
47 N	N47	0.75000	0.93838	0.08333	1.000	1.000
48 N	N48	0.25000	0.93838	0.58331	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.25000	0.00000	0.24999	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.75000	0.00000	0.74997	1.000	1.000
51 N	N51	0.25000	0.68838	0.24999	1.000	1.000
52 N	N52	0.75000	0.68838	0.74997	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.00000	0.75000	0.33332	1.000	1.000
54 Ga	Ga54	0.50000	0.75000	0.83330	1.000	1.000
55 N	N55	0.00000	0.93838	0.33332	1.000	1.000
56 N	N56	0.50000	0.93838	0.83330	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.50000	0.00000	-0.00000	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.00000	0.00000	0.49998	1.000	1.000
59 N	N59	0.50000	0.68838	-0.00000	1.000	1.000
60 N	N60	0.00000	0.68838	0.49998	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.25000	0.75000	0.08333	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.75000	0.75000	0.58331	1.000	1.000
63 N	N63	0.25000	0.93838	0.08333	1.000	1.000
64 N	N64	0.75000	0.93838	0.58331	1.000	1.000

GaN (10-10) 5 layers

Lattice type P

Space group name P_1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	13.92700	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 938.860955 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.25000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.75000	0.50000	0.40000	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.25000	0.50000	0.80000	1.000	1.000
4 N	N4	0.25000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
5 N	N5	0.75000	0.18838	0.40000	1.000	1.000
6 N	N6	0.25000	0.18838	0.80000	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.00000	0.25000	0.06667	1.000	1.000
8 Ga	Ga8	0.50000	0.25000	0.46666	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.00000	0.25000	0.86666	1.000	1.000

10 N	N10	0.00000	0.43838	0.06667	1.000	1.000
11 N	N11	0.50000	0.43838	0.46666	1.000	1.000
12 N	N12	0.00000	0.43838	0.86666	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.00000	0.50000	0.20000	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.50000	0.50000	0.60000	1.000	1.000
15 N	N15	0.00000	0.18838	0.20000	1.000	1.000
16 N	N16	0.50000	0.18838	0.60000	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.75000	0.25000	0.26667	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.25000	0.25000	0.66666	1.000	1.000
19 N	N19	0.75000	0.43838	0.26667	1.000	1.000
20 N	N20	0.25000	0.43838	0.66666	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.75000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.25000	0.50000	0.40000	1.000	1.000
23 Ga	Ga23	0.75000	0.50000	0.80000	1.000	1.000
24 N	N24	0.75000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
25 N	N25	0.25000	0.18838	0.40000	1.000	1.000
26 N	N26	0.75000	0.18838	0.80000	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.50000	0.25000	0.06667	1.000	1.000
28 Ga	Ga28	0.00000	0.25000	0.46666	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.50000	0.25000	0.86666	1.000	1.000
30 N	N30	0.50000	0.43838	0.06667	1.000	1.000
31 N	N31	0.00000	0.43838	0.46666	1.000	1.000
32 N	N32	0.50000	0.43838	0.86666	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.50000	0.50000	0.20000	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.00000	0.50000	0.60000	1.000	1.000
35 N	N35	0.50000	0.18838	0.20000	1.000	1.000
36 N	N36	0.00000	0.18838	0.60000	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.25000	0.25000	0.26667	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.75000	0.25000	0.66666	1.000	1.000
39 N	N39	0.25000	0.43838	0.26667	1.000	1.000
40 N	N40	0.75000	0.43838	0.66666	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.25000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.75000	0.00000	0.40000	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.25000	0.00000	0.80000	1.000	1.000
44 N	N44	0.25000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
45 N	N45	0.75000	0.68838	0.40000	1.000	1.000
46 N	N46	0.25000	0.68838	0.80000	1.000	1.000
47 Ga	Ga47	0.00000	0.75000	0.06667	1.000	1.000

48 Ga	Ga48	0.50000	0.75000	0.46666	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.00000	0.75000	0.86666	1.000	1.000
50 N	N50	0.00000	0.93838	0.06667	1.000	1.000
51 N	N51	0.50000	0.93838	0.46666	1.000	1.000
52 N	N52	0.00000	0.93838	0.86666	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.00000	0.00000	0.20000	1.000	1.000
54 Ga	Ga54	0.50000	0.00000	0.60000	1.000	1.000
55 N	N55	0.00000	0.68838	0.20000	1.000	1.000
56 N	N56	0.50000	0.68838	0.60000	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.75000	0.75000	0.26667	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.25000	0.75000	0.66666	1.000	1.000
59 N	N59	0.75000	0.93838	0.26667	1.000	1.000
60 N	N60	0.25000	0.93838	0.66666	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.75000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.25000	0.00000	0.40000	1.000	1.000
63 Ga	Ga63	0.75000	0.00000	0.80000	1.000	1.000
64 N	N64	0.75000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
65 N	N65	0.25000	0.68838	0.40000	1.000	1.000
66 N	N66	0.75000	0.68838	0.80000	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.50000	0.75000	0.06667	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.00000	0.75000	0.46666	1.000	1.000
69 Ga	Ga69	0.50000	0.75000	0.86666	1.000	1.000
70 N	N70	0.50000	0.93838	0.06667	1.000	1.000
71 N	N71	0.00000	0.93838	0.46666	1.000	1.000
72 N	N72	0.50000	0.93838	0.86666	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.50000	0.00000	0.20000	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.00000	0.00000	0.60000	1.000	1.000
75 N	N75	0.50000	0.68838	0.20000	1.000	1.000
76 N	N76	0.00000	0.68838	0.60000	1.000	1.000
77 Ga	Ga77	0.25000	0.75000	0.26667	1.000	1.000
78 Ga	Ga78	0.75000	0.75000	0.66666	1.000	1.000
79 N	N79	0.25000	0.93838	0.26667	1.000	1.000
80 N	N80	0.75000	0.93838	0.66666	1.000	1.000

=====

GaN (10-10) 6 layers

Lattice type P

Space group name P 1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	16.71200	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 1126.606170 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.25000	0.50000	0.16667	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.75000	0.50000	0.50001	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.25000	0.50000	0.83335	1.000	1.000
4 N	N4	0.25000	0.18838	0.16667	1.000	1.000
5 N	N5	0.75000	0.18838	0.50001	1.000	1.000
6 N	N6	0.25000	0.18838	0.83335	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.00000	0.25000	0.22223	1.000	1.000
8 Ga	Ga8	0.50000	0.25000	0.55557	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.00000	0.25000	0.88891	1.000	1.000
10 N	N10	0.00000	0.43838	0.22223	1.000	1.000
11 N	N11	0.50000	0.43838	0.55557	1.000	1.000
12 N	N12	0.00000	0.43838	0.88891	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.50000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.00000	0.50000	0.33334	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.50000	0.50000	0.66668	1.000	1.000
16 N	N16	0.50000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
17 N	N17	0.00000	0.18838	0.33334	1.000	1.000
18 N	N18	0.50000	0.18838	0.66668	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.25000	0.25000	0.05556	1.000	1.000
20 Ga	Ga20	0.75000	0.25000	0.38890	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.25000	0.25000	0.72224	1.000	1.000
22 N	N22	0.25000	0.43838	0.05556	1.000	1.000
23 N	N23	0.75000	0.43838	0.38890	1.000	1.000
24 N	N24	0.25000	0.43838	0.72224	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.75000	0.50000	0.16667	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.25000	0.50000	0.50001	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.75000	0.50000	0.83335	1.000	1.000
28 N	N28	0.75000	0.18838	0.16667	1.000	1.000
29 N	N29	0.25000	0.18838	0.50001	1.000	1.000
30 N	N30	0.75000	0.18838	0.83335	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.50000	0.25000	0.22223	1.000	1.000
32 Ga	Ga32	0.00000	0.25000	0.55557	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.50000	0.25000	0.88891	1.000	1.000

34 N	N34	0.50000	0.43838	0.22223	1.000	1.000
35 N	N35	0.00000	0.43838	0.55557	1.000	1.000
36 N	N36	0.50000	0.43838	0.88891	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.00000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.50000	0.50000	0.33334	1.000	1.000
39 Ga	Ga39	0.00000	0.50000	0.66668	1.000	1.000
40 N	N40	0.00000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
41 N	N41	0.50000	0.18838	0.33334	1.000	1.000
42 N	N42	0.00000	0.18838	0.66668	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.75000	0.25000	0.05556	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.25000	0.25000	0.38890	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.75000	0.25000	0.72224	1.000	1.000
46 N	N46	0.75000	0.43838	0.05556	1.000	1.000
47 N	N47	0.25000	0.43838	0.38890	1.000	1.000
48 N	N48	0.75000	0.43838	0.72224	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.25000	0.00000	0.16667	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.75000	0.00000	0.50001	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.25000	0.00000	0.83335	1.000	1.000
52 N	N52	0.25000	0.68838	0.16667	1.000	1.000
53 N	N53	0.75000	0.68838	0.50001	1.000	1.000
54 N	N54	0.25000	0.68838	0.83335	1.000	1.000
55 Ga	Ga55	0.00000	0.75000	0.22223	1.000	1.000
56 Ga	Ga56	0.50000	0.75000	0.55557	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.00000	0.75000	0.88891	1.000	1.000
58 N	N58	0.00000	0.93838	0.22223	1.000	1.000
59 N	N59	0.50000	0.93838	0.55557	1.000	1.000
60 N	N60	0.00000	0.93838	0.88891	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.50000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.00000	0.00000	0.33334	1.000	1.000
63 Ga	Ga63	0.50000	0.00000	0.66668	1.000	1.000
64 N	N64	0.50000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
65 N	N65	0.00000	0.68838	0.33334	1.000	1.000
66 N	N66	0.50000	0.68838	0.66668	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.25000	0.75000	0.05556	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.75000	0.75000	0.38890	1.000	1.000
69 Ga	Ga69	0.25000	0.75000	0.72224	1.000	1.000
70 N	N70	0.25000	0.93838	0.05556	1.000	1.000
71 N	N71	0.75000	0.93838	0.38890	1.000	1.000

72 N	N72	0.25000	0.93838	0.72224	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.75000	0.00000	0.16667	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.25000	0.00000	0.50001	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.75000	0.00000	0.83335	1.000	1.000
76 N	N76	0.75000	0.68838	0.16667	1.000	1.000
77 N	N77	0.25000	0.68838	0.50001	1.000	1.000
78 N	N78	0.75000	0.68838	0.83335	1.000	1.000
79 Ga	Ga79	0.50000	0.75000	0.22223	1.000	1.000
80 Ga	Ga80	0.00000	0.75000	0.55557	1.000	1.000
81 Ga	Ga81	0.50000	0.75000	0.88891	1.000	1.000
82 N	N82	0.50000	0.93838	0.22223	1.000	1.000
83 N	N83	0.00000	0.93838	0.55557	1.000	1.000
84 N	N84	0.50000	0.93838	0.88891	1.000	1.000
85 Ga	Ga85	0.00000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
86 Ga	Ga86	0.50000	0.00000	0.33334	1.000	1.000
87 Ga	Ga87	0.00000	0.00000	0.66668	1.000	1.000
88 N	N88	0.00000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
89 N	N89	0.50000	0.68838	0.33334	1.000	1.000
90 N	N90	0.00000	0.68838	0.66668	1.000	1.000
91 Ga	Ga91	0.75000	0.75000	0.05556	1.000	1.000
92 Ga	Ga92	0.25000	0.75000	0.38890	1.000	1.000
93 Ga	Ga93	0.75000	0.75000	0.72224	1.000	1.000
94 N	N94	0.75000	0.93838	0.05556	1.000	1.000
95 N	N95	0.25000	0.93838	0.38890	1.000	1.000
96 N	N96	0.75000	0.93838	0.72224	1.000	1.000

=====

GaN (10-10) 7 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	19.49800	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 1314.418761 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.75000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.25000	0.50000	0.28571	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.75000	0.50000	0.57142	1.000	1.000

4 Ga	Ga4	0.25000	0.50000	0.85713	1.000	1.000
5 N	N5	0.75000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
6 N	N6	0.25000	0.18838	0.28571	1.000	1.000
7 N	N7	0.75000	0.18838	0.57142	1.000	1.000
8 N	N8	0.25000	0.18838	0.85713	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.50000	0.25000	0.04762	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.00000	0.25000	0.33333	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.50000	0.25000	0.61904	1.000	1.000
12 Ga	Ga12	0.00000	0.25000	0.90475	1.000	1.000
13 N	N13	0.50000	0.43838	0.04762	1.000	1.000
14 N	N14	0.00000	0.43838	0.33333	1.000	1.000
15 N	N15	0.50000	0.43838	0.61904	1.000	1.000
16 N	N16	0.00000	0.43838	0.90475	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.50000	0.50000	0.14286	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.00000	0.50000	0.42857	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.50000	0.50000	0.71428	1.000	1.000
20 N	N20	0.50000	0.18838	0.14286	1.000	1.000
21 N	N21	0.00000	0.18838	0.42857	1.000	1.000
22 N	N22	0.50000	0.18838	0.71428	1.000	1.000
23 Ga	Ga23	0.25000	0.25000	0.19047	1.000	1.000
24 Ga	Ga24	0.75000	0.25000	0.47618	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.25000	0.25000	0.76189	1.000	1.000
26 N	N26	0.25000	0.43838	0.19047	1.000	1.000
27 N	N27	0.75000	0.43838	0.47618	1.000	1.000
28 N	N28	0.25000	0.43838	0.76189	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.25000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.75000	0.50000	0.28571	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.25000	0.50000	0.57142	1.000	1.000
32 Ga	Ga32	0.75000	0.50000	0.85713	1.000	1.000
33 N	N33	0.25000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
34 N	N34	0.75000	0.18838	0.28571	1.000	1.000
35 N	N35	0.25000	0.18838	0.57142	1.000	1.000
36 N	N36	0.75000	0.18838	0.85713	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.00000	0.25000	0.04762	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.50000	0.25000	0.33333	1.000	1.000
39 Ga	Ga39	0.00000	0.25000	0.61904	1.000	1.000
40 Ga	Ga40	0.50000	0.25000	0.90475	1.000	1.000
41 N	N41	0.00000	0.43838	0.04762	1.000	1.000

42 N	N42	0.50000	0.43838	0.33333	1.000	1.000
43 N	N43	0.00000	0.43838	0.61904	1.000	1.000
44 N	N44	0.50000	0.43838	0.90475	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.00000	0.50000	0.14286	1.000	1.000
46 Ga	Ga46	0.50000	0.50000	0.42857	1.000	1.000
47 Ga	Ga47	0.00000	0.50000	0.71428	1.000	1.000
48 N	N48	0.00000	0.18838	0.14286	1.000	1.000
49 N	N49	0.50000	0.18838	0.42857	1.000	1.000
50 N	N50	0.00000	0.18838	0.71428	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.75000	0.25000	0.19047	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.25000	0.25000	0.47618	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.75000	0.25000	0.76189	1.000	1.000
54 N	N54	0.75000	0.43838	0.19047	1.000	1.000
55 N	N55	0.25000	0.43838	0.47618	1.000	1.000
56 N	N56	0.75000	0.43838	0.76189	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.75000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.25000	0.00000	0.28571	1.000	1.000
59 Ga	Ga59	0.75000	0.00000	0.57142	1.000	1.000
60 Ga	Ga60	0.25000	0.00000	0.85713	1.000	1.000
61 N	N61	0.75000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
62 N	N62	0.25000	0.68838	0.28571	1.000	1.000
63 N	N63	0.75000	0.68838	0.57142	1.000	1.000
64 N	N64	0.25000	0.68838	0.85713	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.50000	0.75000	0.04762	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.00000	0.75000	0.33333	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.50000	0.75000	0.61904	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.00000	0.75000	0.90475	1.000	1.000
69 N	N69	0.50000	0.93838	0.04762	1.000	1.000
70 N	N70	0.00000	0.93838	0.33333	1.000	1.000
71 N	N71	0.50000	0.93838	0.61904	1.000	1.000
72 N	N72	0.00000	0.93838	0.90475	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.50000	0.00000	0.14286	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.00000	0.00000	0.42857	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.50000	0.00000	0.71428	1.000	1.000
76 N	N76	0.50000	0.68838	0.14286	1.000	1.000
77 N	N77	0.00000	0.68838	0.42857	1.000	1.000
78 N	N78	0.50000	0.68838	0.71428	1.000	1.000
79 Ga	Ga79	0.25000	0.75000	0.19047	1.000	1.000

80 Ga	Ga80	0.75000	0.75000	0.47618	1.000	1.000
81 Ga	Ga81	0.25000	0.75000	0.76189	1.000	1.000
82 N	N82	0.25000	0.93838	0.19047	1.000	1.000
83 N	N83	0.75000	0.93838	0.47618	1.000	1.000
84 N	N84	0.25000	0.93838	0.76189	1.000	1.000
85 Ga	Ga85	0.25000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
86 Ga	Ga86	0.75000	0.00000	0.28571	1.000	1.000
87 Ga	Ga87	0.25000	0.00000	0.57142	1.000	1.000
88 Ga	Ga88	0.75000	0.00000	0.85713	1.000	1.000
89 N	N89	0.25000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
90 N	N90	0.75000	0.68838	0.28571	1.000	1.000
91 N	N91	0.25000	0.68838	0.57142	1.000	1.000
92 N	N92	0.75000	0.68838	0.85713	1.000	1.000
93 Ga	Ga93	0.00000	0.75000	0.04762	1.000	1.000
94 Ga	Ga94	0.50000	0.75000	0.33333	1.000	1.000
95 Ga	Ga95	0.00000	0.75000	0.61904	1.000	1.000
96 Ga	Ga96	0.50000	0.75000	0.90475	1.000	1.000
97 N	N97	0.00000	0.93838	0.04762	1.000	1.000
98 N	N98	0.50000	0.93838	0.33333	1.000	1.000
99 N	N99	0.00000	0.93838	0.61904	1.000	1.000
100 N	N100	0.50000	0.93838	0.90475	1.000	1.000
101 Ga	Ga101	0.00000	0.00000	0.14286	1.000	1.000
102 Ga	Ga102	0.50000	0.00000	0.42857	1.000	1.000
103 Ga	Ga103	0.00000	0.00000	0.71428	1.000	1.000
104 N	N104	0.00000	0.68838	0.14286	1.000	1.000
105 N	N105	0.50000	0.68838	0.42857	1.000	1.000
106 N	N106	0.00000	0.68838	0.71428	1.000	1.000
107 Ga	Ga107	0.75000	0.75000	0.19047	1.000	1.000
108 Ga	Ga108	0.25000	0.75000	0.47618	1.000	1.000
109 Ga	Ga109	0.75000	0.75000	0.76189	1.000	1.000
110 N	N110	0.75000	0.93838	0.19047	1.000	1.000
111 N	N111	0.25000	0.93838	0.47618	1.000	1.000
112 N	N112	0.75000	0.93838	0.76189	1.000	1.000

=====

GaN (10-10) 8 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	22.28300	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 1502.164105 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.75000	0.50000	0.12500	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.25000	0.50000	0.37500	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.75000	0.50000	0.62500	1.000	1.000
4 Ga	Ga4	0.25000	0.50000	0.87500	1.000	1.000
5 N	N5	0.75000	0.18838	0.12500	1.000	1.000
6 N	N6	0.25000	0.18838	0.37500	1.000	1.000
7 N	N7	0.75000	0.18838	0.62500	1.000	1.000
8 N	N8	0.25000	0.18838	0.87500	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.50000	0.25000	0.16667	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.00000	0.25000	0.41667	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.50000	0.25000	0.66667	1.000	1.000
12 Ga	Ga12	0.00000	0.25000	0.91667	1.000	1.000
13 N	N13	0.50000	0.43838	0.16667	1.000	1.000
14 N	N14	0.00000	0.43838	0.41667	1.000	1.000
15 N	N15	0.50000	0.43838	0.66667	1.000	1.000
16 N	N16	0.00000	0.43838	0.91667	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.00000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.50000	0.50000	0.25000	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.00000	0.50000	0.50000	1.000	1.000
20 Ga	Ga20	0.50000	0.50000	0.75000	1.000	1.000
21 N	N21	0.00000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
22 N	N22	0.50000	0.18838	0.25000	1.000	1.000
23 N	N23	0.00000	0.18838	0.50000	1.000	1.000
24 N	N24	0.50000	0.18838	0.75000	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.75000	0.25000	0.04167	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.25000	0.25000	0.29167	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.75000	0.25000	0.54167	1.000	1.000
28 Ga	Ga28	0.25000	0.25000	0.79167	1.000	1.000
29 N	N29	0.75000	0.43838	0.04167	1.000	1.000
30 N	N30	0.25000	0.43838	0.29167	1.000	1.000
31 N	N31	0.75000	0.43838	0.54167	1.000	1.000
32 N	N32	0.25000	0.43838	0.79167	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.25000	0.50000	0.12500	1.000	1.000

34 Ga	Ga34	0.75000	0.50000	0.37500	1.000	1.000
35 Ga	Ga35	0.25000	0.50000	0.62500	1.000	1.000
36 Ga	Ga36	0.75000	0.50000	0.87500	1.000	1.000
37 N	N37	0.25000	0.18838	0.12500	1.000	1.000
38 N	N38	0.75000	0.18838	0.37500	1.000	1.000
39 N	N39	0.25000	0.18838	0.62500	1.000	1.000
40 N	N40	0.75000	0.18838	0.87500	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.00000	0.25000	0.16667	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.50000	0.25000	0.41667	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.00000	0.25000	0.66667	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.50000	0.25000	0.91667	1.000	1.000
45 N	N45	0.00000	0.43838	0.16667	1.000	1.000
46 N	N46	0.50000	0.43838	0.41667	1.000	1.000
47 N	N47	0.00000	0.43838	0.66667	1.000	1.000
48 N	N48	0.50000	0.43838	0.91667	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.50000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.00000	0.50000	0.25000	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.50000	0.50000	0.50000	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.00000	0.50000	0.75000	1.000	1.000
53 N	N53	0.50000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
54 N	N54	0.00000	0.18838	0.25000	1.000	1.000
55 N	N55	0.50000	0.18838	0.50000	1.000	1.000
56 N	N56	0.00000	0.18838	0.75000	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.25000	0.25000	0.04167	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.75000	0.25000	0.29167	1.000	1.000
59 Ga	Ga59	0.25000	0.25000	0.54167	1.000	1.000
60 Ga	Ga60	0.75000	0.25000	0.79167	1.000	1.000
61 N	N61	0.25000	0.43838	0.04167	1.000	1.000
62 N	N62	0.75000	0.43838	0.29167	1.000	1.000
63 N	N63	0.25000	0.43838	0.54167	1.000	1.000
64 N	N64	0.75000	0.43838	0.79167	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.75000	0.00000	0.12500	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.25000	0.00000	0.37500	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.75000	0.00000	0.62500	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.25000	0.00000	0.87500	1.000	1.000
69 N	N69	0.75000	0.68838	0.12500	1.000	1.000
70 N	N70	0.25000	0.68838	0.37500	1.000	1.000
71 N	N71	0.75000	0.68838	0.62500	1.000	1.000

72 N	N72	0.25000	0.68838	0.87500	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.50000	0.75000	0.16667	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.00000	0.75000	0.41667	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.50000	0.75000	0.66667	1.000	1.000
76 Ga	Ga76	0.00000	0.75000	0.91667	1.000	1.000
77 N	N77	0.50000	0.93838	0.16667	1.000	1.000
78 N	N78	0.00000	0.93838	0.41667	1.000	1.000
79 N	N79	0.50000	0.93838	0.66667	1.000	1.000
80 N	N80	0.00000	0.93838	0.91667	1.000	1.000
81 Ga	Ga81	0.00000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
82 Ga	Ga82	0.50000	0.00000	0.25000	1.000	1.000
83 Ga	Ga83	0.00000	0.00000	0.50000	1.000	1.000
84 Ga	Ga84	0.50000	0.00000	0.75000	1.000	1.000
85 N	N85	0.00000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
87 N	N87	0.00000	0.68838	0.50000	1.000	1.000
88 N	N88	0.50000	0.68838	0.75000	1.000	1.000
89 Ga	Ga89	0.75000	0.75000	0.04167	1.000	1.000
90 Ga	Ga90	0.25000	0.75000	0.29167	1.000	1.000
91 Ga	Ga91	0.75000	0.75000	0.54167	1.000	1.000
92 Ga	Ga92	0.25000	0.75000	0.79167	1.000	1.000
93 N	N93	0.75000	0.93838	0.04167	1.000	1.000
94 N	N94	0.25000	0.93838	0.29167	1.000	1.000
95 N	N95	0.75000	0.93838	0.54167	1.000	1.000
96 N	N96	0.25000	0.93838	0.79167	1.000	1.000
97 Ga	Ga97	0.25000	0.00000	0.12500	1.000	1.000
98 Ga	Ga98	0.75000	0.00000	0.37500	1.000	1.000
99 Ga	Ga99	0.25000	0.00000	0.62500	1.000	1.000
100 Ga	Ga100	0.75000	0.00000	0.87500	1.000	1.000
101 N	N101	0.25000	0.68838	0.12500	1.000	1.000
102 N	N102	0.75000	0.68838	0.37500	1.000	1.000
103 N	N103	0.25000	0.68838	0.62500	1.000	1.000
104 N	N104	0.75000	0.68838	0.87500	1.000	1.000
105 Ga	Ga105	0.00000	0.75000	0.16667	1.000	1.000
106 Ga	Ga106	0.50000	0.75000	0.41667	1.000	1.000
107 Ga	Ga107	0.00000	0.75000	0.66667	1.000	1.000
108 Ga	Ga108	0.50000	0.75000	0.91667	1.000	1.000
109 N	N109	0.00000	0.93838	0.16667	1.000	1.000
110 N	N110	0.50000	0.93838	0.41667	1.000	1.000

111 N	N111	0.00000	0.93838	0.66667	1.000	1.000
112 N	N112	0.50000	0.93838	0.91667	1.000	1.000
113 Ga	Ga113	0.50000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
114 Ga	Ga114	0.00000	0.00000	0.25000	1.000	1.000
115 Ga	Ga115	0.50000	0.00000	0.50000	1.000	1.000
116 Ga	Ga116	0.00000	0.00000	0.75000	1.000	1.000
117 N	N117	0.50000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
118 N	N118	0.00000	0.68838	0.25000	1.000	1.000
119 N	N119	0.50000	0.68838	0.50000	1.000	1.000
120 N	N120	0.00000	0.68838	0.75000	1.000	1.000
121 Ga	Ga121	0.25000	0.75000	0.04167	1.000	1.000
122 Ga	Ga122	0.75000	0.75000	0.29167	1.000	1.000
123 Ga	Ga123	0.25000	0.75000	0.54167	1.000	1.000
124 Ga	Ga124	0.75000	0.75000	0.79167	1.000	1.000
125 N	N125	0.25000	0.93838	0.04167	1.000	1.000
126 N	N126	0.75000	0.93838	0.29167	1.000	1.000
127 N	N127	0.25000	0.93838	0.54167	1.000	1.000
128 N	N128	0.75000	0.93838	0.79167	1.000	1.000

=====

GaN (10-10) 9 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	10.47990	25.06900	90.0000	90.0000	90.0000

Unit-cell volume = 1689.976696 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.25000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.75000	0.50000	0.22222	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.25000	0.50000	0.44444	1.000	1.000
4 Ga	Ga4	0.75000	0.50000	0.66665	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.25000	0.50000	0.88887	1.000	1.000
6 N	N6	0.25000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
7 N	N7	0.75000	0.18838	0.22222	1.000	1.000
8 N	N8	0.25000	0.18838	0.44444	1.000	1.000
9 N	N9	0.75000	0.18838	0.66665	1.000	1.000
10 N	N10	0.25000	0.18838	0.88887	1.000	1.000

11	Ga	Ga11	0.00000	0.25000	0.03704	1.000	1.000
12	Ga	Ga12	0.50000	0.25000	0.25925	1.000	1.000
13	Ga	Ga13	0.00000	0.25000	0.48147	1.000	1.000
14	Ga	Ga14	0.50000	0.25000	0.70369	1.000	1.000
15	Ga	Ga15	0.00000	0.25000	0.92591	1.000	1.000
16	N	N16	0.00000	0.43838	0.03704	1.000	1.000
17	N	N17	0.50000	0.43838	0.25925	1.000	1.000
18	N	N18	0.00000	0.43838	0.48147	1.000	1.000
19	N	N19	0.50000	0.43838	0.70369	1.000	1.000
20	N	N20	0.00000	0.43838	0.92591	1.000	1.000
21	Ga	Ga21	0.00000	0.50000	0.11111	1.000	1.000
22	Ga	Ga22	0.50000	0.50000	0.33333	1.000	1.000
23	Ga	Ga23	0.00000	0.50000	0.55555	1.000	1.000
24	Ga	Ga24	0.50000	0.50000	0.77776	1.000	1.000
25	N	N25	0.00000	0.18838	0.11111	1.000	1.000
26	N	N26	0.50000	0.18838	0.33333	1.000	1.000
27	N	N27	0.00000	0.18838	0.55555	1.000	1.000
28	N	N28	0.50000	0.18838	0.77776	1.000	1.000
29	Ga	Ga29	0.75000	0.25000	0.14815	1.000	1.000
30	Ga	Ga30	0.25000	0.25000	0.37036	1.000	1.000
31	Ga	Ga31	0.75000	0.25000	0.59258	1.000	1.000
32	Ga	Ga32	0.25000	0.25000	0.81480	1.000	1.000
33	N	N33	0.75000	0.43838	0.14815	1.000	1.000
34	N	N34	0.25000	0.43838	0.37036	1.000	1.000
35	N	N35	0.75000	0.43838	0.59258	1.000	1.000
36	N	N36	0.25000	0.43838	0.81480	1.000	1.000
37	Ga	Ga37	0.75000	0.50000	0.00000	1.000	1.000
38	Ga	Ga38	0.25000	0.50000	0.22222	1.000	1.000
39	Ga	Ga39	0.75000	0.50000	0.44444	1.000	1.000
40	Ga	Ga40	0.25000	0.50000	0.66665	1.000	1.000
41	Ga	Ga41	0.75000	0.50000	0.88887	1.000	1.000
42	N	N42	0.75000	0.18838	0.00000	1.000	1.000
43	N	N43	0.25000	0.18838	0.22222	1.000	1.000
44	N	N44	0.75000	0.18838	0.44444	1.000	1.000
45	N	N45	0.25000	0.18838	0.66665	1.000	1.000
46	N	N46	0.75000	0.18838	0.88887	1.000	1.000
47	Ga	Ga47	0.50000	0.25000	0.03704	1.000	1.000
48	Ga	Ga48	0.00000	0.25000	0.25925	1.000	1.000

49 Ga	Ga49	0.50000	0.25000	0.48147	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.00000	0.25000	0.70369	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.50000	0.25000	0.92591	1.000	1.000
52 N	N52	0.50000	0.43838	0.03704	1.000	1.000
53 N	N53	0.00000	0.43838	0.25925	1.000	1.000
54 N	N54	0.50000	0.43838	0.48147	1.000	1.000
55 N	N55	0.00000	0.43838	0.70369	1.000	1.000
56 N	N56	0.50000	0.43838	0.92591	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.50000	0.50000	0.11111	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.00000	0.50000	0.33333	1.000	1.000
59 Ga	Ga59	0.50000	0.50000	0.55555	1.000	1.000
60 Ga	Ga60	0.00000	0.50000	0.77776	1.000	1.000
61 N	N61	0.50000	0.18838	0.11111	1.000	1.000
62 N	N62	0.00000	0.18838	0.33333	1.000	1.000
63 N	N63	0.50000	0.18838	0.55555	1.000	1.000
64 N	N64	0.00000	0.18838	0.77776	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.25000	0.25000	0.14815	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.75000	0.25000	0.37036	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.25000	0.25000	0.59258	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.75000	0.25000	0.81480	1.000	1.000
69 N	N69	0.25000	0.43838	0.14815	1.000	1.000
70 N	N70	0.75000	0.43838	0.37036	1.000	1.000
71 N	N71	0.25000	0.43838	0.59258	1.000	1.000
72 N	N72	0.75000	0.43838	0.81480	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.25000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.75000	0.00000	0.22222	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.25000	0.00000	0.44444	1.000	1.000
76 Ga	Ga76	0.75000	0.00000	0.66665	1.000	1.000
77 Ga	Ga77	0.25000	0.00000	0.88887	1.000	1.000
78 N	N78	0.25000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
79 N	N79	0.75000	0.68838	0.22222	1.000	1.000
80 N	N80	0.25000	0.68838	0.44444	1.000	1.000
81 N	N81	0.75000	0.68838	0.66665	1.000	1.000
82 N	N82	0.25000	0.68838	0.88887	1.000	1.000
83 Ga	Ga83	0.00000	0.75000	0.03704	1.000	1.000
84 Ga	Ga84	0.50000	0.75000	0.25925	1.000	1.000
85 Ga	Ga85	0.00000	0.75000	0.48147	1.000	1.000
86 Ga	Ga86	0.50000	0.75000	0.70369	1.000	1.000

87 Ga	Ga87	0.00000	0.75000	0.92591	1.000	1.000
88 N	N88	0.00000	0.93838	0.03704	1.000	1.000
89 N	N89	0.50000	0.93838	0.25925	1.000	1.000
90 N	N90	0.00000	0.93838	0.48147	1.000	1.000
91 N	N91	0.50000	0.93838	0.70369	1.000	1.000
92 N	N92	0.00000	0.93838	0.92591	1.000	1.000
93 Ga	Ga93	0.00000	0.00000	0.11111	1.000	1.000
94 Ga	Ga94	0.50000	0.00000	0.33333	1.000	1.000
95 Ga	Ga95	0.00000	0.00000	0.55555	1.000	1.000
96 Ga	Ga96	0.50000	0.00000	0.77776	1.000	1.000
97 N	N97	0.00000	0.68838	0.11111	1.000	1.000
98 N	N98	0.50000	0.68838	0.33333	1.000	1.000
99 N	N99	0.00000	0.68838	0.55555	1.000	1.000
100 N	N100	0.50000	0.68838	0.77776	1.000	1.000
101 Ga	Ga101	0.75000	0.75000	0.14815	1.000	1.000
102 Ga	Ga102	0.25000	0.75000	0.37036	1.000	1.000
103 Ga	Ga103	0.75000	0.75000	0.59258	1.000	1.000
104 Ga	Ga104	0.25000	0.75000	0.81480	1.000	1.000
105 N	N105	0.75000	0.93838	0.14815	1.000	1.000
106 N	N106	0.25000	0.93838	0.37036	1.000	1.000
107 N	N107	0.75000	0.93838	0.59258	1.000	1.000
108 N	N108	0.25000	0.93838	0.81480	1.000	1.000
109 Ga	Ga109	0.75000	0.00000	0.00000	1.000	1.000
110 Ga	Ga110	0.25000	0.00000	0.22222	1.000	1.000
111 Ga	Ga111	0.75000	0.00000	0.44444	1.000	1.000
112 Ga	Ga112	0.25000	0.00000	0.66665	1.000	1.000
113 Ga	Ga113	0.75000	0.00000	0.88887	1.000	1.000
114 N	N114	0.75000	0.68838	0.00000	1.000	1.000
115 N	N115	0.25000	0.68838	0.22222	1.000	1.000
116 N	N116	0.75000	0.68838	0.44444	1.000	1.000
117 N	N117	0.25000	0.68838	0.66665	1.000	1.000
118 N	N118	0.75000	0.68838	0.88887	1.000	1.000
119 Ga	Ga119	0.50000	0.75000	0.03704	1.000	1.000
120 Ga	Ga120	0.00000	0.75000	0.25925	1.000	1.000
121 Ga	Ga121	0.50000	0.75000	0.48147	1.000	1.000
122 Ga	Ga122	0.00000	0.75000	0.70369	1.000	1.000
123 Ga	Ga123	0.50000	0.75000	0.92591	1.000	1.000
124 N	N124	0.50000	0.93838	0.03704	1.000	1.000

125 N	N125	0.00000	0.93838	0.25925	1.000	1.000
126 N	N126	0.50000	0.93838	0.48147	1.000	1.000
127 N	N127	0.00000	0.93838	0.70369	1.000	1.000
128 N	N128	0.50000	0.93838	0.92591	1.000	1.000
129 Ga	Ga129	0.50000	0.00000	0.11111	1.000	1.000
130 Ga	Ga130	0.00000	0.00000	0.33333	1.000	1.000
131 Ga	Ga131	0.50000	0.00000	0.55555	1.000	1.000
132 Ga	Ga132	0.00000	0.00000	0.77776	1.000	1.000
133 N	N133	0.50000	0.68838	0.11111	1.000	1.000
134 N	N134	0.00000	0.68838	0.33333	1.000	1.000
135 N	N135	0.50000	0.68838	0.55555	1.000	1.000
136 N	N136	0.00000	0.68838	0.77776	1.000	1.000
137 Ga	Ga137	0.25000	0.75000	0.14815	1.000	1.000
138 Ga	Ga138	0.75000	0.75000	0.37036	1.000	1.000
139 Ga	Ga139	0.25000	0.75000	0.59258	1.000	1.000
140 Ga	Ga140	0.75000	0.75000	0.81480	1.000	1.000
141 N	N141	0.25000	0.93838	0.14815	1.000	1.000
142 N	N142	0.75000	0.93838	0.37036	1.000	1.000
143 N	N143	0.25000	0.93838	0.59258	1.000	1.000
144 N	N144	0.75000	0.93838	0.81480	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 1 layer

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	5.24000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 187.773800 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.62324	1.000	1.000
2 N	N2	0.02860	0.26430	-0.00000	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.19527	0.09763	0.12324	1.000	1.000
4 N	N4	0.19527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.52860	0.26430	0.62324	1.000	1.000
6 N	N6	0.52860	0.26430	-0.00000	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.69527	0.09763	0.12324	1.000	1.000
8 N	N8	0.69527	0.09763	0.50000	1.000	1.000

9 Ga	Ga9	0.02860	0.76430	0.62324	1.000	1.000
10 N	N10	0.02860	0.76430	-0.00000	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.19527	0.59763	0.12324	1.000	1.000
12 N	N12	0.19527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.52860	0.76430	0.62324	1.000	1.000
14 N	N14	0.52860	0.76430	-0.00000	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.69527	0.59763	0.12324	1.000	1.000
16 N	N16	0.69527	0.59763	0.50000	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 2 layers

Lattice type P

Space group name P_1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	10.48000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 375.547600 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.31162	1.000	1.000
2 N	N2	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.19527	0.09763	0.06162	1.000	1.000
4 N	N4	0.19527	0.09763	0.25000	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.52860	0.26430	0.31162	1.000	1.000
6 N	N6	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.69527	0.09763	0.06162	1.000	1.000
8 N	N8	0.69527	0.09763	0.25000	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.02860	0.76430	0.31162	1.000	1.000
10 N	N10	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.19527	0.59763	0.06162	1.000	1.000
12 N	N12	0.19527	0.59763	0.25000	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.52860	0.76430	0.31162	1.000	1.000
14 N	N14	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.69527	0.59763	0.06162	1.000	1.000
16 N	N16	0.69527	0.59763	0.25000	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.02860	0.26430	0.81161	1.000	1.000
18 N	N18	0.02860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.19527	0.09763	0.56162	1.000	1.000

20 N	N20	0.19527	0.09763	0.74999	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.52860	0.26430	0.81161	1.000	1.000
22 N	N22	0.52860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
23 Ga	Ga23	0.69527	0.09763	0.56162	1.000	1.000
24 N	N24	0.69527	0.09763	0.74999	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.02860	0.76430	0.81161	1.000	1.000
26 N	N26	0.02860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.19527	0.59763	0.56162	1.000	1.000
28 N	N28	0.19527	0.59763	0.74999	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.52860	0.76430	0.81161	1.000	1.000
30 N	N30	0.52860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.69527	0.59763	0.56162	1.000	1.000
32 N	N32	0.69527	0.59763	0.74999	1.000	1.000

GaN (10-10) 3 layers

Lattice type P

Space group name P_1

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	15.72000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 563.321434 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.54108	1.000	1.000
2 N	N2	0.02860	0.26430	0.33333	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.19527	0.09763	0.37441	1.000	1.000
4 N	N4	0.19527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.52860	0.26430	0.54108	1.000	1.000
6 N	N6	0.52860	0.26430	0.33333	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.69527	0.09763	0.37441	1.000	1.000
8 N	N8	0.69527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.02860	0.76430	0.54108	1.000	1.000
10 N	N10	0.02860	0.76430	0.33333	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.19527	0.59763	0.37441	1.000	1.000
12 N	N12	0.19527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.52860	0.76430	0.54108	1.000	1.000
14 N	N14	0.52860	0.76430	0.33333	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.69527	0.59763	0.37441	1.000	1.000

16 N	N16	0.69527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.02860	0.26430	0.20775	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.02860	0.26430	0.87441	1.000	1.000
19 N	N19	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
20 N	N20	0.02860	0.26430	0.66666	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.19527	0.09763	0.04108	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.19527	0.09763	0.70774	1.000	1.000
23 N	N23	0.19527	0.09763	0.16667	1.000	1.000
24 N	N24	0.19527	0.09763	0.83333	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.52860	0.26430	0.20775	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.52860	0.26430	0.87441	1.000	1.000
27 N	N27	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
28 N	N28	0.52860	0.26430	0.66666	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.69527	0.09763	0.04108	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.69527	0.09763	0.70774	1.000	1.000
31 N	N31	0.69527	0.09763	0.16667	1.000	1.000
32 N	N32	0.69527	0.09763	0.83333	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.02860	0.76430	0.20775	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.02860	0.76430	0.87441	1.000	1.000
35 N	N35	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
36 N	N36	0.02860	0.76430	0.66666	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.19527	0.59763	0.04108	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.19527	0.59763	0.70774	1.000	1.000
39 N	N39	0.19527	0.59763	0.16667	1.000	1.000
40 N	N40	0.19527	0.59763	0.83333	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.52860	0.76430	0.20775	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.52860	0.76430	0.87441	1.000	1.000
43 N	N43	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
44 N	N44	0.52860	0.76430	0.66666	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.69527	0.59763	0.04108	1.000	1.000
46 Ga	Ga46	0.69527	0.59763	0.70774	1.000	1.000
47 N	N47	0.69527	0.59763	0.16667	1.000	1.000
48 N	N48	0.69527	0.59763	0.83333	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 4 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a b c alpha beta gamma
 6.43260 6.43260 20.96000 90.0000 90.0000 120.0000

Unit-cell volume = 751.095200 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.15581	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.02860	0.26430	0.65580	1.000	1.000
3 N	N3	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
4 N	N4	0.02860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.19527	0.09763	0.03081	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.19527	0.09763	0.53081	1.000	1.000
7 N	N7	0.19527	0.09763	0.12500	1.000	1.000
8 N	N8	0.19527	0.09763	0.62499	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.52860	0.26430	0.15581	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.52860	0.26430	0.65580	1.000	1.000
11 N	N11	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
12 N	N12	0.52860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.69527	0.09763	0.03081	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.69527	0.09763	0.53081	1.000	1.000
15 N	N15	0.69527	0.09763	0.12500	1.000	1.000
16 N	N16	0.69527	0.09763	0.62499	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.02860	0.76430	0.15581	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.02860	0.76430	0.65580	1.000	1.000
19 N	N19	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
20 N	N20	0.02860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.19527	0.59763	0.03081	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.19527	0.59763	0.53081	1.000	1.000
23 N	N23	0.19527	0.59763	0.12500	1.000	1.000
24 N	N24	0.19527	0.59763	0.62499	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.52860	0.76430	0.15581	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.52860	0.76430	0.65580	1.000	1.000
27 N	N27	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
28 N	N28	0.52860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.69527	0.59763	0.03081	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.69527	0.59763	0.53081	1.000	1.000
31 N	N31	0.69527	0.59763	0.12500	1.000	1.000
32 N	N32	0.69527	0.59763	0.62499	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.02860	0.26430	0.40581	1.000	1.000

34 Ga	Ga34	0.02860	0.26430	0.90580	1.000	1.000
35 N	N35	0.02860	0.26430	0.25000	1.000	1.000
36 N	N36	0.02860	0.26430	0.74999	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.19527	0.09763	0.28081	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.19527	0.09763	0.78080	1.000	1.000
39 N	N39	0.19527	0.09763	0.37500	1.000	1.000
40 N	N40	0.19527	0.09763	0.87499	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.52860	0.26430	0.40581	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.52860	0.26430	0.90580	1.000	1.000
43 N	N43	0.52860	0.26430	0.25000	1.000	1.000
44 N	N44	0.52860	0.26430	0.74999	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.69527	0.09763	0.28081	1.000	1.000
46 Ga	Ga46	0.69527	0.09763	0.78080	1.000	1.000
47 N	N47	0.69527	0.09763	0.37500	1.000	1.000
48 N	N48	0.69527	0.09763	0.87499	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.02860	0.76430	0.40581	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.02860	0.76430	0.90580	1.000	1.000
51 N	N51	0.02860	0.76430	0.25000	1.000	1.000
52 N	N52	0.02860	0.76430	0.74999	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.19527	0.59763	0.28081	1.000	1.000
54 Ga	Ga54	0.19527	0.59763	0.78080	1.000	1.000
55 N	N55	0.19527	0.59763	0.37500	1.000	1.000
56 N	N56	0.19527	0.59763	0.87499	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.52860	0.76430	0.40581	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.52860	0.76430	0.90580	1.000	1.000
59 N	N59	0.52860	0.76430	0.25000	1.000	1.000
60 N	N60	0.52860	0.76430	0.74999	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.69527	0.59763	0.28081	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.69527	0.59763	0.78080	1.000	1.000
63 N	N63	0.69527	0.59763	0.37500	1.000	1.000
64 N	N64	0.69527	0.59763	0.87499	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 5 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	26.20000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 938.869069 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.32465	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.02860	0.26430	0.72464	1.000	1.000
3 N	N3	0.02860	0.26430	0.20000	1.000	1.000
4 N	N4	0.02860	0.26430	0.60000	1.000	1.000
5 Ga	Ga5	0.19527	0.09763	0.22465	1.000	1.000
6 Ga	Ga6	0.19527	0.09763	0.62464	1.000	1.000
7 N	N7	0.19527	0.09763	0.30000	1.000	1.000
8 N	N8	0.19527	0.09763	0.69999	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.52860	0.26430	0.32465	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.52860	0.26430	0.72464	1.000	1.000
11 N	N11	0.52860	0.26430	0.20000	1.000	1.000
12 N	N12	0.52860	0.26430	0.60000	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.69527	0.09763	0.22465	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.69527	0.09763	0.62464	1.000	1.000
15 N	N15	0.69527	0.09763	0.30000	1.000	1.000
16 N	N16	0.69527	0.09763	0.69999	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.02860	0.76430	0.32465	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.02860	0.76430	0.72464	1.000	1.000
19 N	N19	0.02860	0.76430	0.20000	1.000	1.000
20 N	N20	0.02860	0.76430	0.60000	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.19527	0.59763	0.22465	1.000	1.000
22 Ga	Ga22	0.19527	0.59763	0.62464	1.000	1.000
23 N	N23	0.19527	0.59763	0.30000	1.000	1.000
24 N	N24	0.19527	0.59763	0.69999	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.52860	0.76430	0.32465	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.52860	0.76430	0.72464	1.000	1.000
27 N	N27	0.52860	0.76430	0.20000	1.000	1.000
28 N	N28	0.52860	0.76430	0.60000	1.000	1.000
29 Ga	Ga29	0.69527	0.59763	0.22465	1.000	1.000
30 Ga	Ga30	0.69527	0.59763	0.62464	1.000	1.000
31 N	N31	0.69527	0.59763	0.30000	1.000	1.000
32 N	N32	0.69527	0.59763	0.69999	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.02860	0.26430	0.12465	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.02860	0.26430	0.52464	1.000	1.000
35 Ga	Ga35	0.02860	0.26430	0.92464	1.000	1.000

36 N	N36	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
37 N	N37	0.02860	0.26430	0.40000	1.000	1.000
38 N	N38	0.02860	0.26430	0.79999	1.000	1.000
39 Ga	Ga39	0.19527	0.09763	0.02465	1.000	1.000
40 Ga	Ga40	0.19527	0.09763	0.42464	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.19527	0.09763	0.82464	1.000	1.000
42 N	N42	0.19527	0.09763	0.10000	1.000	1.000
43 N	N43	0.19527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
44 N	N44	0.19527	0.09763	0.89999	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.52860	0.26430	0.12465	1.000	1.000
46 Ga	Ga46	0.52860	0.26430	0.52464	1.000	1.000
47 Ga	Ga47	0.52860	0.26430	0.92464	1.000	1.000
48 N	N48	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
49 N	N49	0.52860	0.26430	0.40000	1.000	1.000
50 N	N50	0.52860	0.26430	0.79999	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.69527	0.09763	0.02465	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.69527	0.09763	0.42464	1.000	1.000
53 Ga	Ga53	0.69527	0.09763	0.82464	1.000	1.000
54 N	N54	0.69527	0.09763	0.10000	1.000	1.000
55 N	N55	0.69527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
56 N	N56	0.69527	0.09763	0.89999	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.02860	0.76430	0.12465	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.02860	0.76430	0.52464	1.000	1.000
59 Ga	Ga59	0.02860	0.76430	0.92464	1.000	1.000
60 N	N60	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
61 N	N61	0.02860	0.76430	0.40000	1.000	1.000
62 N	N62	0.02860	0.76430	0.79999	1.000	1.000
63 Ga	Ga63	0.19527	0.59763	0.02465	1.000	1.000
64 Ga	Ga64	0.19527	0.59763	0.42464	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.19527	0.59763	0.82464	1.000	1.000
66 N	N66	0.19527	0.59763	0.10000	1.000	1.000
67 N	N67	0.19527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
68 N	N68	0.19527	0.59763	0.89999	1.000	1.000
69 Ga	Ga69	0.52860	0.76430	0.12465	1.000	1.000
70 Ga	Ga70	0.52860	0.76430	0.52464	1.000	1.000
71 Ga	Ga71	0.52860	0.76430	0.92464	1.000	1.000
72 N	N72	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
73 N	N73	0.52860	0.76430	0.40000	1.000	1.000

74 N	N74	0.52860	0.76430	0.79999	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.69527	0.59763	0.02465	1.000	1.000
76 Ga	Ga76	0.69527	0.59763	0.42464	1.000	1.000
77 Ga	Ga77	0.69527	0.59763	0.82464	1.000	1.000
78 N	N78	0.69527	0.59763	0.10000	1.000	1.000
79 N	N79	0.69527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
80 N	N80	0.69527	0.59763	0.89999	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 6 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	31.44000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 1126.642869 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.10387	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.02860	0.26430	0.43720	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.02860	0.26430	0.77054	1.000	1.000
4 N	N4	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
5 N	N5	0.02860	0.26430	0.33333	1.000	1.000
6 N	N6	0.02860	0.26430	0.66666	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.19527	0.09763	0.02054	1.000	1.000
8 Ga	Ga8	0.19527	0.09763	0.35387	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.19527	0.09763	0.68720	1.000	1.000
10 N	N10	0.19527	0.09763	0.08333	1.000	1.000
11 N	N11	0.19527	0.09763	0.41666	1.000	1.000
12 N	N12	0.19527	0.09763	0.75000	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.52860	0.26430	0.10387	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.52860	0.26430	0.43720	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.52860	0.26430	0.77054	1.000	1.000
16 N	N16	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
17 N	N17	0.52860	0.26430	0.33333	1.000	1.000
18 N	N18	0.52860	0.26430	0.66666	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.69527	0.09763	0.02054	1.000	1.000
20 Ga	Ga20	0.69527	0.09763	0.35387	1.000	1.000

21 Ga	Ga21	0.69527	0.09763	0.68720	1.000	1.000
22 N	N22	0.69527	0.09763	0.08333	1.000	1.000
23 N	N23	0.69527	0.09763	0.41666	1.000	1.000
24 N	N24	0.69527	0.09763	0.75000	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.02860	0.76430	0.10387	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.02860	0.76430	0.43720	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.02860	0.76430	0.77054	1.000	1.000
28 N	N28	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
29 N	N29	0.02860	0.76430	0.33333	1.000	1.000
30 N	N30	0.02860	0.76430	0.66666	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.19527	0.59763	0.02054	1.000	1.000
32 Ga	Ga32	0.19527	0.59763	0.35387	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.19527	0.59763	0.68720	1.000	1.000
34 N	N34	0.19527	0.59763	0.08333	1.000	1.000
35 N	N35	0.19527	0.59763	0.41666	1.000	1.000
36 N	N36	0.19527	0.59763	0.75000	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.52860	0.76430	0.10387	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.52860	0.76430	0.43720	1.000	1.000
39 Ga	Ga39	0.52860	0.76430	0.77054	1.000	1.000
40 N	N40	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
41 N	N41	0.52860	0.76430	0.33333	1.000	1.000
42 N	N42	0.52860	0.76430	0.66666	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.69527	0.59763	0.02054	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.69527	0.59763	0.35387	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.69527	0.59763	0.68720	1.000	1.000
46 N	N46	0.69527	0.59763	0.08333	1.000	1.000
47 N	N47	0.69527	0.59763	0.41666	1.000	1.000
48 N	N48	0.69527	0.59763	0.75000	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.02860	0.26430	0.27054	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.02860	0.26430	0.60387	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.02860	0.26430	0.93720	1.000	1.000
52 N	N52	0.02860	0.26430	0.16667	1.000	1.000
53 N	N53	0.02860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
54 N	N54	0.02860	0.26430	0.83333	1.000	1.000
55 Ga	Ga55	0.19527	0.09763	0.18721	1.000	1.000
56 Ga	Ga56	0.19527	0.09763	0.52054	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.19527	0.09763	0.85387	1.000	1.000
58 N	N58	0.19527	0.09763	0.25000	1.000	1.000

59 N	N59	0.19527	0.09763	0.58333	1.000	1.000
60 N	N60	0.19527	0.09763	0.91666	1.000	1.000
61 Ga	Ga61	0.52860	0.26430	0.27054	1.000	1.000
62 Ga	Ga62	0.52860	0.26430	0.60387	1.000	1.000
63 Ga	Ga63	0.52860	0.26430	0.93720	1.000	1.000
64 N	N64	0.52860	0.26430	0.16667	1.000	1.000
65 N	N65	0.52860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
66 N	N66	0.52860	0.26430	0.83333	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.69527	0.09763	0.18721	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.69527	0.09763	0.52054	1.000	1.000
69 Ga	Ga69	0.69527	0.09763	0.85387	1.000	1.000
70 N	N70	0.69527	0.09763	0.25000	1.000	1.000
71 N	N71	0.69527	0.09763	0.58333	1.000	1.000
72 N	N72	0.69527	0.09763	0.91666	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.02860	0.76430	0.27054	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.02860	0.76430	0.60387	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.02860	0.76430	0.93720	1.000	1.000
76 N	N76	0.02860	0.76430	0.16667	1.000	1.000
77 N	N77	0.02860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
78 N	N78	0.02860	0.76430	0.83333	1.000	1.000
79 Ga	Ga79	0.19527	0.59763	0.18721	1.000	1.000
80 Ga	Ga80	0.19527	0.59763	0.52054	1.000	1.000
81 Ga	Ga81	0.19527	0.59763	0.85387	1.000	1.000
82 N	N82	0.19527	0.59763	0.25000	1.000	1.000
83 N	N83	0.19527	0.59763	0.58333	1.000	1.000
84 N	N84	0.19527	0.59763	0.91666	1.000	1.000
85 Ga	Ga85	0.52860	0.76430	0.27054	1.000	1.000
86 Ga	Ga86	0.52860	0.76430	0.60387	1.000	1.000
87 Ga	Ga87	0.52860	0.76430	0.93720	1.000	1.000
88 N	N88	0.52860	0.76430	0.16667	1.000	1.000
89 N	N89	0.52860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
90 N	N90	0.52860	0.76430	0.83333	1.000	1.000
91 Ga	Ga91	0.69527	0.59763	0.18721	1.000	1.000
92 Ga	Ga92	0.69527	0.59763	0.52054	1.000	1.000
93 Ga	Ga93	0.69527	0.59763	0.85387	1.000	1.000
94 N	N94	0.69527	0.59763	0.25000	1.000	1.000
95 N	N95	0.69527	0.59763	0.58333	1.000	1.000
96 N	N96	0.69527	0.59763	0.91666	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 7 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	36.68000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 1314.416669 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.23189	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.02860	0.26430	0.51760	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.02860	0.26430	0.80331	1.000	1.000
4 N	N4	0.02860	0.26430	0.14286	1.000	1.000
5 N	N5	0.02860	0.26430	0.42857	1.000	1.000
6 N	N6	0.02860	0.26430	0.71428	1.000	1.000
7 Ga	Ga7	0.19527	0.09763	0.16046	1.000	1.000
8 Ga	Ga8	0.19527	0.09763	0.44617	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.19527	0.09763	0.73189	1.000	1.000
10 N	N10	0.19527	0.09763	0.21428	1.000	1.000
11 N	N11	0.19527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
12 N	N12	0.19527	0.09763	0.78571	1.000	1.000
13 Ga	Ga13	0.52860	0.26430	0.23189	1.000	1.000
14 Ga	Ga14	0.52860	0.26430	0.51760	1.000	1.000
15 Ga	Ga15	0.52860	0.26430	0.80331	1.000	1.000
16 N	N16	0.52860	0.26430	0.14286	1.000	1.000
17 N	N17	0.52860	0.26430	0.42857	1.000	1.000
18 N	N18	0.52860	0.26430	0.71428	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.69527	0.09763	0.16046	1.000	1.000
20 Ga	Ga20	0.69527	0.09763	0.44617	1.000	1.000
21 Ga	Ga21	0.69527	0.09763	0.73189	1.000	1.000
22 N	N22	0.69527	0.09763	0.21428	1.000	1.000
23 N	N23	0.69527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
24 N	N24	0.69527	0.09763	0.78571	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.02860	0.76430	0.23189	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.02860	0.76430	0.51760	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.02860	0.76430	0.80331	1.000	1.000
28 N	N28	0.02860	0.76430	0.14286	1.000	1.000

29 N	N29	0.02860	0.76430	0.42857	1.000	1.000
30 N	N30	0.02860	0.76430	0.71428	1.000	1.000
31 Ga	Ga31	0.19527	0.59763	0.16046	1.000	1.000
32 Ga	Ga32	0.19527	0.59763	0.44617	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.19527	0.59763	0.73189	1.000	1.000
34 N	N34	0.19527	0.59763	0.21428	1.000	1.000
35 N	N35	0.19527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
36 N	N36	0.19527	0.59763	0.78571	1.000	1.000
37 Ga	Ga37	0.52860	0.76430	0.23189	1.000	1.000
38 Ga	Ga38	0.52860	0.76430	0.51760	1.000	1.000
39 Ga	Ga39	0.52860	0.76430	0.80331	1.000	1.000
40 N	N40	0.52860	0.76430	0.14286	1.000	1.000
41 N	N41	0.52860	0.76430	0.42857	1.000	1.000
42 N	N42	0.52860	0.76430	0.71428	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.69527	0.59763	0.16046	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.69527	0.59763	0.44617	1.000	1.000
45 Ga	Ga45	0.69527	0.59763	0.73189	1.000	1.000
46 N	N46	0.69527	0.59763	0.21428	1.000	1.000
47 N	N47	0.69527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
48 N	N48	0.69527	0.59763	0.78571	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.02860	0.26430	0.08903	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.02860	0.26430	0.37475	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.02860	0.26430	0.66046	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.02860	0.26430	0.94617	1.000	1.000
53 N	N53	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
54 N	N54	0.02860	0.26430	0.28571	1.000	1.000
55 N	N55	0.02860	0.26430	0.57142	1.000	1.000
56 N	N56	0.02860	0.26430	0.85714	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.19527	0.09763	0.01761	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.19527	0.09763	0.30332	1.000	1.000
59 Ga	Ga59	0.19527	0.09763	0.58903	1.000	1.000
60 Ga	Ga60	0.19527	0.09763	0.87474	1.000	1.000
61 N	N61	0.19527	0.09763	0.07143	1.000	1.000
62 N	N62	0.19527	0.09763	0.35714	1.000	1.000
63 N	N63	0.19527	0.09763	0.64285	1.000	1.000
64 N	N64	0.19527	0.09763	0.92856	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.52860	0.26430	0.08903	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.52860	0.26430	0.37475	1.000	1.000

67 Ga	Ga67	0.52860	0.26430	0.66046	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.52860	0.26430	0.94617	1.000	1.000
69 N	N69	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
70 N	N70	0.52860	0.26430	0.28571	1.000	1.000
71 N	N71	0.52860	0.26430	0.57142	1.000	1.000
72 N	N72	0.52860	0.26430	0.85714	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.69527	0.09763	0.01761	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.69527	0.09763	0.30332	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.69527	0.09763	0.58903	1.000	1.000
76 Ga	Ga76	0.69527	0.09763	0.87474	1.000	1.000
77 N	N77	0.69527	0.09763	0.07143	1.000	1.000
78 N	N78	0.69527	0.09763	0.35714	1.000	1.000
79 N	N79	0.69527	0.09763	0.64285	1.000	1.000
80 N	N80	0.69527	0.09763	0.92856	1.000	1.000
81 Ga	Ga81	0.02860	0.76430	0.08903	1.000	1.000
82 Ga	Ga82	0.02860	0.76430	0.37475	1.000	1.000
83 Ga	Ga83	0.02860	0.76430	0.66046	1.000	1.000
84 Ga	Ga84	0.02860	0.76430	0.94617	1.000	1.000
85 N	N85	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
86 N	N86	0.02860	0.76430	0.28571	1.000	1.000
87 N	N87	0.02860	0.76430	0.57142	1.000	1.000
88 N	N88	0.02860	0.76430	0.85714	1.000	1.000
89 Ga	Ga89	0.19527	0.59763	0.01761	1.000	1.000
90 Ga	Ga90	0.19527	0.59763	0.30332	1.000	1.000
91 Ga	Ga91	0.19527	0.59763	0.58903	1.000	1.000
92 Ga	Ga92	0.19527	0.59763	0.87474	1.000	1.000
93 N	N93	0.19527	0.59763	0.07143	1.000	1.000
94 N	N94	0.19527	0.59763	0.35714	1.000	1.000
95 N	N95	0.19527	0.59763	0.64285	1.000	1.000
96 N	N96	0.19527	0.59763	0.92856	1.000	1.000
97 Ga	Ga97	0.52860	0.76430	0.08903	1.000	1.000
98 Ga	Ga98	0.52860	0.76430	0.37475	1.000	1.000
99 Ga	Ga99	0.52860	0.76430	0.66046	1.000	1.000
100 Ga	Ga100	0.52860	0.76430	0.94617	1.000	1.000
101 N	N101	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
102 N	N102	0.52860	0.76430	0.28571	1.000	1.000
103 N	N103	0.52860	0.76430	0.57142	1.000	1.000
104 N	N104	0.52860	0.76430	0.85714	1.000	1.000

105 Ga	Ga105	0.69527	0.59763	0.01761	1.000	1.000
106 Ga	Ga106	0.69527	0.59763	0.30332	1.000	1.000
107 Ga	Ga107	0.69527	0.59763	0.58903	1.000	1.000
108 Ga	Ga108	0.69527	0.59763	0.87474	1.000	1.000
109 N	N109	0.69527	0.59763	0.07143	1.000	1.000
110 N	N110	0.69527	0.59763	0.35714	1.000	1.000
111 N	N111	0.69527	0.59763	0.64285	1.000	1.000
112 N	N112	0.69527	0.59763	0.92856	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 8 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

a	b	c	alpha	beta	gamma
6.43260	6.43260	41.92000	90.0000	90.0000	120.0000

Unit-cell volume = 1502.190401 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.07790	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.02860	0.26430	0.32790	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.02860	0.26430	0.57790	1.000	1.000
4 Ga	Ga4	0.02860	0.26430	0.82790	1.000	1.000
5 N	N5	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
6 N	N6	0.02860	0.26430	0.25000	1.000	1.000
7 N	N7	0.02860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
8 N	N8	0.02860	0.26430	0.74999	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.19527	0.09763	0.01540	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.19527	0.09763	0.26540	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.19527	0.09763	0.51540	1.000	1.000
12 Ga	Ga12	0.19527	0.09763	0.76540	1.000	1.000
13 N	N13	0.19527	0.09763	0.06250	1.000	1.000
14 N	N14	0.19527	0.09763	0.31250	1.000	1.000
15 N	N15	0.19527	0.09763	0.56250	1.000	1.000
16 N	N16	0.19527	0.09763	0.81249	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.52860	0.26430	0.07790	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.52860	0.26430	0.32790	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.52860	0.26430	0.57790	1.000	1.000
20 Ga	Ga20	0.52860	0.26430	0.82790	1.000	1.000

21 N	N21	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
22 N	N22	0.52860	0.26430	0.25000	1.000	1.000
23 N	N23	0.52860	0.26430	0.50000	1.000	1.000
24 N	N24	0.52860	0.26430	0.74999	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.69527	0.09763	0.01540	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.69527	0.09763	0.26540	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.69527	0.09763	0.51540	1.000	1.000
28 Ga	Ga28	0.69527	0.09763	0.76540	1.000	1.000
29 N	N29	0.69527	0.09763	0.06250	1.000	1.000
30 N	N30	0.69527	0.09763	0.31250	1.000	1.000
31 N	N31	0.69527	0.09763	0.56250	1.000	1.000
32 N	N32	0.69527	0.09763	0.81249	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.02860	0.76430	0.07790	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.02860	0.76430	0.32790	1.000	1.000
35 Ga	Ga35	0.02860	0.76430	0.57790	1.000	1.000
36 Ga	Ga36	0.02860	0.76430	0.82790	1.000	1.000
37 N	N37	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
38 N	N38	0.02860	0.76430	0.25000	1.000	1.000
39 N	N39	0.02860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
40 N	N40	0.02860	0.76430	0.74999	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.19527	0.59763	0.01540	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.19527	0.59763	0.26540	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.19527	0.59763	0.51540	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.19527	0.59763	0.76540	1.000	1.000
45 N	N45	0.19527	0.59763	0.06250	1.000	1.000
46 N	N46	0.19527	0.59763	0.31250	1.000	1.000
47 N	N47	0.19527	0.59763	0.56250	1.000	1.000
48 N	N48	0.19527	0.59763	0.81249	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.52860	0.76430	0.07790	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.52860	0.76430	0.32790	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.52860	0.76430	0.57790	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.52860	0.76430	0.82790	1.000	1.000
53 N	N53	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
54 N	N54	0.52860	0.76430	0.25000	1.000	1.000
55 N	N55	0.52860	0.76430	0.50000	1.000	1.000
56 N	N56	0.52860	0.76430	0.74999	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.69527	0.59763	0.01540	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.69527	0.59763	0.26540	1.000	1.000

59 Ga	Ga59	0.69527	0.59763	0.51540	1.000	1.000
60 Ga	Ga60	0.69527	0.59763	0.76540	1.000	1.000
61 N	N61	0.69527	0.59763	0.06250	1.000	1.000
62 N	N62	0.69527	0.59763	0.31250	1.000	1.000
63 N	N63	0.69527	0.59763	0.56250	1.000	1.000
64 N	N64	0.69527	0.59763	0.81249	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.02860	0.26430	0.20290	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.02860	0.26430	0.45290	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.02860	0.26430	0.70290	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.02860	0.26430	0.95290	1.000	1.000
69 N	N69	0.02860	0.26430	0.12500	1.000	1.000
70 N	N70	0.02860	0.26430	0.37500	1.000	1.000
71 N	N71	0.02860	0.26430	0.62500	1.000	1.000
72 N	N72	0.02860	0.26430	0.87499	1.000	1.000
73 Ga	Ga73	0.19527	0.09763	0.14040	1.000	1.000
74 Ga	Ga74	0.19527	0.09763	0.39040	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.19527	0.09763	0.64040	1.000	1.000
76 Ga	Ga76	0.19527	0.09763	0.89040	1.000	1.000
77 N	N77	0.19527	0.09763	0.18750	1.000	1.000
78 N	N78	0.19527	0.09763	0.43750	1.000	1.000
79 N	N79	0.19527	0.09763	0.68750	1.000	1.000
80 N	N80	0.19527	0.09763	0.93749	1.000	1.000
81 Ga	Ga81	0.52860	0.26430	0.20290	1.000	1.000
82 Ga	Ga82	0.52860	0.26430	0.45290	1.000	1.000
83 Ga	Ga83	0.52860	0.26430	0.70290	1.000	1.000
84 Ga	Ga84	0.52860	0.26430	0.95290	1.000	1.000
85 N	N85	0.52860	0.26430	0.12500	1.000	1.000
86 N	N86	0.52860	0.26430	0.37500	1.000	1.000
87 N	N87	0.52860	0.26430	0.62500	1.000	1.000
88 N	N88	0.52860	0.26430	0.87499	1.000	1.000
89 Ga	Ga89	0.69527	0.09763	0.14040	1.000	1.000
90 Ga	Ga90	0.69527	0.09763	0.39040	1.000	1.000
91 Ga	Ga91	0.69527	0.09763	0.64040	1.000	1.000
92 Ga	Ga92	0.69527	0.09763	0.89040	1.000	1.000
93 N	N93	0.69527	0.09763	0.18750	1.000	1.000
94 N	N94	0.69527	0.09763	0.43750	1.000	1.000
95 N	N95	0.69527	0.09763	0.68750	1.000	1.000
96 N	N96	0.69527	0.09763	0.93749	1.000	1.000

97 Ga	Ga97	0.02860	0.76430	0.20290	1.000	1.000
98 Ga	Ga98	0.02860	0.76430	0.45290	1.000	1.000
99 Ga	Ga99	0.02860	0.76430	0.70290	1.000	1.000
100 Ga	Ga100	0.02860	0.76430	0.95290	1.000	1.000
101 N	N101	0.02860	0.76430	0.12500	1.000	1.000
102 N	N102	0.02860	0.76430	0.37500	1.000	1.000
103 N	N103	0.02860	0.76430	0.62500	1.000	1.000
104 N	N104	0.02860	0.76430	0.87499	1.000	1.000
105 Ga	Ga105	0.19527	0.59763	0.14040	1.000	1.000
106 Ga	Ga106	0.19527	0.59763	0.39040	1.000	1.000
107 Ga	Ga107	0.19527	0.59763	0.64040	1.000	1.000
108 Ga	Ga108	0.19527	0.59763	0.89040	1.000	1.000
109 N	N109	0.19527	0.59763	0.18750	1.000	1.000
110 N	N110	0.19527	0.59763	0.43750	1.000	1.000
111 N	N111	0.19527	0.59763	0.68750	1.000	1.000
112 N	N112	0.19527	0.59763	0.93749	1.000	1.000
113 Ga	Ga113	0.52860	0.76430	0.20290	1.000	1.000
114 Ga	Ga114	0.52860	0.76430	0.45290	1.000	1.000
115 Ga	Ga115	0.52860	0.76430	0.70290	1.000	1.000
116 Ga	Ga116	0.52860	0.76430	0.95290	1.000	1.000
117 N	N117	0.52860	0.76430	0.12500	1.000	1.000
118 N	N118	0.52860	0.76430	0.37500	1.000	1.000
119 N	N119	0.52860	0.76430	0.62500	1.000	1.000
120 N	N120	0.52860	0.76430	0.87499	1.000	1.000
121 Ga	Ga121	0.69527	0.59763	0.14040	1.000	1.000
122 Ga	Ga122	0.69527	0.59763	0.39040	1.000	1.000
123 Ga	Ga123	0.69527	0.59763	0.64040	1.000	1.000
124 Ga	Ga124	0.69527	0.59763	0.89040	1.000	1.000
125 N	N125	0.69527	0.59763	0.18750	1.000	1.000
126 N	N126	0.69527	0.59763	0.43750	1.000	1.000
127 N	N127	0.69527	0.59763	0.68750	1.000	1.000
128 N	N128	0.69527	0.59763	0.93749	1.000	1.000

=====

GaN (0001) 9 layers

Lattice type P

Space group name P₁

Lattice parameters

 a b c alpha beta gamma

6.43260 6.43260 47.16000 90.0000 90.0000 120.0000

Unit-cell volume = 1689.964269 Å³

Structure parameters

		x	y	z	Occ.	U
1 Ga	Ga1	0.02860	0.26430	0.18036	1.000	1.000
2 Ga	Ga2	0.02860	0.26430	0.40258	1.000	1.000
3 Ga	Ga3	0.02860	0.26430	0.62480	1.000	1.000
4 Ga	Ga4	0.02860	0.26430	0.84702	1.000	1.000
5 N	N5	0.02860	0.26430	0.11111	1.000	1.000
6 N	N6	0.02860	0.26430	0.33333	1.000	1.000
7 N	N7	0.02860	0.26430	0.55555	1.000	1.000
8 N	N8	0.02860	0.26430	0.77777	1.000	1.000
9 Ga	Ga9	0.19527	0.09763	0.12480	1.000	1.000
10 Ga	Ga10	0.19527	0.09763	0.34702	1.000	1.000
11 Ga	Ga11	0.19527	0.09763	0.56924	1.000	1.000
12 Ga	Ga12	0.19527	0.09763	0.79146	1.000	1.000
13 N	N13	0.19527	0.09763	0.16667	1.000	1.000
14 N	N14	0.19527	0.09763	0.38889	1.000	1.000
15 N	N15	0.19527	0.09763	0.61111	1.000	1.000
16 N	N16	0.19527	0.09763	0.83333	1.000	1.000
17 Ga	Ga17	0.52860	0.26430	0.18036	1.000	1.000
18 Ga	Ga18	0.52860	0.26430	0.40258	1.000	1.000
19 Ga	Ga19	0.52860	0.26430	0.62480	1.000	1.000
20 Ga	Ga20	0.52860	0.26430	0.84702	1.000	1.000
21 N	N21	0.52860	0.26430	0.11111	1.000	1.000
22 N	N22	0.52860	0.26430	0.33333	1.000	1.000
23 N	N23	0.52860	0.26430	0.55555	1.000	1.000
24 N	N24	0.52860	0.26430	0.77777	1.000	1.000
25 Ga	Ga25	0.69527	0.09763	0.12480	1.000	1.000
26 Ga	Ga26	0.69527	0.09763	0.34702	1.000	1.000
27 Ga	Ga27	0.69527	0.09763	0.56924	1.000	1.000
28 Ga	Ga28	0.69527	0.09763	0.79146	1.000	1.000
29 N	N29	0.69527	0.09763	0.16667	1.000	1.000
30 N	N30	0.69527	0.09763	0.38889	1.000	1.000
31 N	N31	0.69527	0.09763	0.61111	1.000	1.000
32 N	N32	0.69527	0.09763	0.83333	1.000	1.000
33 Ga	Ga33	0.02860	0.76430	0.18036	1.000	1.000
34 Ga	Ga34	0.02860	0.76430	0.40258	1.000	1.000

35 Ga	Ga35	0.02860	0.76430	0.62480	1.000	1.000
36 Ga	Ga36	0.02860	0.76430	0.84702	1.000	1.000
37 N	N37	0.02860	0.76430	0.11111	1.000	1.000
38 N	N38	0.02860	0.76430	0.33333	1.000	1.000
39 N	N39	0.02860	0.76430	0.55555	1.000	1.000
40 N	N40	0.02860	0.76430	0.77777	1.000	1.000
41 Ga	Ga41	0.19527	0.59763	0.12480	1.000	1.000
42 Ga	Ga42	0.19527	0.59763	0.34702	1.000	1.000
43 Ga	Ga43	0.19527	0.59763	0.56924	1.000	1.000
44 Ga	Ga44	0.19527	0.59763	0.79146	1.000	1.000
45 N	N45	0.19527	0.59763	0.16667	1.000	1.000
46 N	N46	0.19527	0.59763	0.38889	1.000	1.000
47 N	N47	0.19527	0.59763	0.61111	1.000	1.000
48 N	N48	0.19527	0.59763	0.83333	1.000	1.000
49 Ga	Ga49	0.52860	0.76430	0.18036	1.000	1.000
50 Ga	Ga50	0.52860	0.76430	0.40258	1.000	1.000
51 Ga	Ga51	0.52860	0.76430	0.62480	1.000	1.000
52 Ga	Ga52	0.52860	0.76430	0.84702	1.000	1.000
53 N	N53	0.52860	0.76430	0.11111	1.000	1.000
54 N	N54	0.52860	0.76430	0.33333	1.000	1.000
55 N	N55	0.52860	0.76430	0.55555	1.000	1.000
56 N	N56	0.52860	0.76430	0.77777	1.000	1.000
57 Ga	Ga57	0.69527	0.59763	0.12480	1.000	1.000
58 Ga	Ga58	0.69527	0.59763	0.34702	1.000	1.000
59 Ga	Ga59	0.69527	0.59763	0.56924	1.000	1.000
60 Ga	Ga60	0.69527	0.59763	0.79146	1.000	1.000
61 N	N61	0.69527	0.59763	0.16667	1.000	1.000
62 N	N62	0.69527	0.59763	0.38889	1.000	1.000
63 N	N63	0.69527	0.59763	0.61111	1.000	1.000
64 N	N64	0.69527	0.59763	0.83333	1.000	1.000
65 Ga	Ga65	0.02860	0.26430	0.06925	1.000	1.000
66 Ga	Ga66	0.02860	0.26430	0.29147	1.000	1.000
67 Ga	Ga67	0.02860	0.26430	0.51369	1.000	1.000
68 Ga	Ga68	0.02860	0.26430	0.73591	1.000	1.000
69 Ga	Ga69	0.02860	0.26430	0.95813	1.000	1.000
70 N	N70	0.02860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
71 N	N71	0.02860	0.26430	0.22222	1.000	1.000
72 N	N72	0.02860	0.26430	0.44444	1.000	1.000

73 N	N73	0.02860	0.26430	0.66666	1.000	1.000
74 N	N74	0.02860	0.26430	0.88888	1.000	1.000
75 Ga	Ga75	0.19527	0.09763	0.01369	1.000	1.000
76 Ga	Ga76	0.19527	0.09763	0.23591	1.000	1.000
77 Ga	Ga77	0.19527	0.09763	0.45813	1.000	1.000
78 Ga	Ga78	0.19527	0.09763	0.68035	1.000	1.000
79 Ga	Ga79	0.19527	0.09763	0.90257	1.000	1.000
80 N	N80	0.19527	0.09763	0.05556	1.000	1.000
81 N	N81	0.19527	0.09763	0.27778	1.000	1.000
82 N	N82	0.19527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
83 N	N83	0.19527	0.09763	0.72222	1.000	1.000
84 N	N84	0.19527	0.09763	0.94444	1.000	1.000
85 Ga	Ga85	0.52860	0.26430	0.06925	1.000	1.000
86 Ga	Ga86	0.52860	0.26430	0.29147	1.000	1.000
87 Ga	Ga87	0.52860	0.26430	0.51369	1.000	1.000
88 Ga	Ga88	0.52860	0.26430	0.73591	1.000	1.000
89 Ga	Ga89	0.52860	0.26430	0.95813	1.000	1.000
90 N	N90	0.52860	0.26430	0.00000	1.000	1.000
91 N	N91	0.52860	0.26430	0.22222	1.000	1.000
92 N	N92	0.52860	0.26430	0.44444	1.000	1.000
93 N	N93	0.52860	0.26430	0.66666	1.000	1.000
94 N	N94	0.52860	0.26430	0.88888	1.000	1.000
95 Ga	Ga95	0.69527	0.09763	0.01369	1.000	1.000
96 Ga	Ga96	0.69527	0.09763	0.23591	1.000	1.000
97 Ga	Ga97	0.69527	0.09763	0.45813	1.000	1.000
98 Ga	Ga98	0.69527	0.09763	0.68035	1.000	1.000
99 Ga	Ga99	0.69527	0.09763	0.90257	1.000	1.000
100 N	N100	0.69527	0.09763	0.05556	1.000	1.000
101 N	N101	0.69527	0.09763	0.27778	1.000	1.000
102 N	N102	0.69527	0.09763	0.50000	1.000	1.000
103 N	N103	0.69527	0.09763	0.72222	1.000	1.000
104 N	N104	0.69527	0.09763	0.94444	1.000	1.000
105 Ga	Ga105	0.02860	0.76430	0.06925	1.000	1.000
106 Ga	Ga106	0.02860	0.76430	0.29147	1.000	1.000
107 Ga	Ga107	0.02860	0.76430	0.51369	1.000	1.000
108 Ga	Ga108	0.02860	0.76430	0.73591	1.000	1.000
109 Ga	Ga109	0.02860	0.76430	0.95813	1.000	1.000
110 N	N110	0.02860	0.76430	0.00000	1.000	1.000

111 N	N111	0.02860	0.76430	0.22222	1.000	1.000
112 N	N112	0.02860	0.76430	0.44444	1.000	1.000
113 N	N113	0.02860	0.76430	0.66666	1.000	1.000
114 N	N114	0.02860	0.76430	0.88888	1.000	1.000
115 Ga	Ga115	0.19527	0.59763	0.01369	1.000	1.000
116 Ga	Ga116	0.19527	0.59763	0.23591	1.000	1.000
117 Ga	Ga117	0.19527	0.59763	0.45813	1.000	1.000
118 Ga	Ga118	0.19527	0.59763	0.68035	1.000	1.000
119 Ga	Ga119	0.19527	0.59763	0.90257	1.000	1.000
120 N	N120	0.19527	0.59763	0.05556	1.000	1.000
121 N	N121	0.19527	0.59763	0.27778	1.000	1.000
122 N	N122	0.19527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
123 N	N123	0.19527	0.59763	0.72222	1.000	1.000
124 N	N124	0.19527	0.59763	0.94444	1.000	1.000
125 Ga	Ga125	0.52860	0.76430	0.06925	1.000	1.000
126 Ga	Ga126	0.52860	0.76430	0.29147	1.000	1.000
127 Ga	Ga127	0.52860	0.76430	0.51369	1.000	1.000
128 Ga	Ga128	0.52860	0.76430	0.73591	1.000	1.000
129 Ga	Ga129	0.52860	0.76430	0.95813	1.000	1.000
130 N	N130	0.52860	0.76430	0.00000	1.000	1.000
131 N	N131	0.52860	0.76430	0.22222	1.000	1.000
132 N	N132	0.52860	0.76430	0.44444	1.000	1.000
133 N	N133	0.52860	0.76430	0.66666	1.000	1.000
134 N	N134	0.52860	0.76430	0.88888	1.000	1.000
135 Ga	Ga135	0.69527	0.59763	0.01369	1.000	1.000
136 Ga	Ga136	0.69527	0.59763	0.23591	1.000	1.000
137 Ga	Ga137	0.69527	0.59763	0.45813	1.000	1.000
138 Ga	Ga138	0.69527	0.59763	0.68035	1.000	1.000
139 Ga	Ga139	0.69527	0.59763	0.90257	1.000	1.000
140 N	N140	0.69527	0.59763	0.05556	1.000	1.000
141 N	N141	0.69527	0.59763	0.27778	1.000	1.000
142 N	N142	0.69527	0.59763	0.50000	1.000	1.000
143 N	N143	0.69527	0.59763	0.72222	1.000	1.000
144 N	N144	0.69527	0.59763	0.94444	1.000	1.000