SUPPORTING INFORMATION

First-principles insights into sulfur and nitrogen co-doped Ti_2CO_2 MXene as an advanced anchoring material for sodium polysulfides in sodium–sulfur batteries

Nguyen Van Nghia[1], Trinh Thu Bien[2], Nguyen Truong Long[2], and Minh Triet Dang[2]✉

[1]Open training Institute, Hanoi Architectural University, Km10, Nguyen Trai Street, Hanoi, Vietnam

[2]Can Tho University, 3-2 Road, Can Tho City 900000, Vietnam

✉Corresponding author: E-mail: dmtriet@ctu.edu.vn

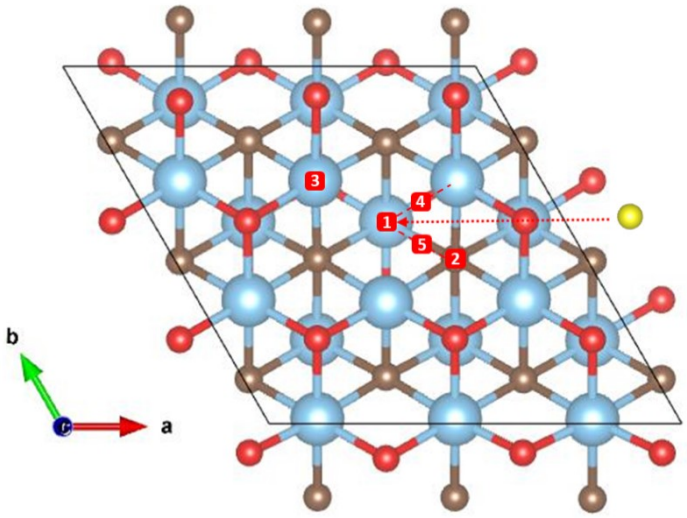


Figure S1. Potential substitutional sites where S or N atoms replace O atoms on the termination surface. Site (1) marks the original position of the substituted O atom.

To define the most energetically favorable configurations for the doped systems, we define the formation energy (E^f) of each doped system in the equation (2):

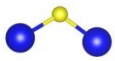
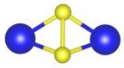
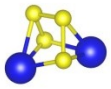
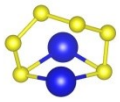
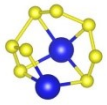
$$E^f = E_{tot}[Doped\ Ti_2CO_2] - E_{tot}[Ti_2CO_2] + n_i\mu_O - n_i\mu_{Doped\ atom} \quad (2)$$

where $E_{tot}[Doped\ Ti_2CO_2]$ and $E_{tot}[Ti_2CO_2]$ are the total energies of the doped Ti_2CO_2(S) or Ti_2CO_2(N) and pristine supercell Ti_2CO_2, respectively. μ_O and $\mu_{Doped\ atom}(\mu_S\ or\ \mu_N)$ are basic elemental chemical potentials of O, S, and N atoms. These chemical potentials can be calculated as total energies per atom using DFT calculations. For details, the total energies per atom for μ_O, μ_S, and μ_N are obtained via DFT calculation of O_2 and N_2 molecules, as well as S_8 rings, isolated in a cubic cell. The results of doped sites for Ti_2CO_2(S) or Ti_2CO_2(N) are presented in Table S1.

Table S1. Formation energies of each potential substitutional site for S- and N-doped systems, as illustrated in Fig. S1.

Doped site	1	2	3	4	5
S-doped formation energy E^f (eV)	**2.49**	4.49	5.56	4.55	4.24
N-doped formation energy E^f (eV)	**3.43**	6.48	8.39	6.36	6.20

Table S2. Molecular structure of Na_2S_x clusters and their difference formation energy ΔE_f on doped and co-doped MXene in eV/atom. The blue and yellow balls illustrate Na and S atoms, respectively.

Cluster	Na_2S	Na_2S_2	Na_2S_4	Na_2S_6	Na_2S_8
Na S					
ΔE_f on Ti_2CO_2(S)	0.057	0.088	0.126	0.066	0.080
ΔE_f on Ti_2CO_2(NS)	0.068	0.110	0.078	0.009	0.018

Na_2S_x cluster absorbed on pristine MXene Ti_2CO_2

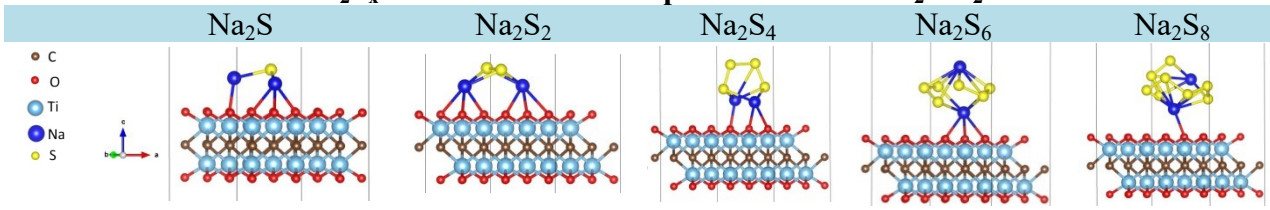


Figure S2. Optimized configurations of Na_2S_x adsorbed on the pristine Ti_2CO_2 surface. The light blue, red, brown, yellow, and blue spheres illustrate Ti, O, C, S, and Na atoms, respectively.

Structure data in CIF format for pristine Ti_2CO_2 MXene, S-doped $Ti_2CO_2(S)$, and co-doped $Ti_2CO_2(NS)$

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_TI2CO2

_chemical_name_common                  'Ti2CO2 (n=1)'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         24.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1694.244749
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233203     0.233200     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233203     0.566533     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233203     0.899867     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566536     0.233200     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566536     0.566533     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566536     0.899867     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899869     0.233200     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899869     0.566533     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899869     0.899867     0.108753    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122260     0.011114     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122260     0.344447     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122260     0.677780     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455593     0.011114     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.455593     0.344447     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.455593     0.677780     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788926     0.011114     0.215742    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788926     0.344447     0.215742    Uiso  ? Ti
```

Ti18	1.0	0.788926	0.677780	0.215742	Uiso	?	Ti
C1	1.0	0.011099	0.122206	0.162252	Uiso	?	C
C2	1.0	0.011099	0.455540	0.162252	Uiso	?	C
C3	1.0	0.011099	0.788873	0.162252	Uiso	?	C
C4	1.0	0.344432	0.122206	0.162252	Uiso	?	C
C5	1.0	0.344432	0.455540	0.162252	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344432	0.788873	0.162252	Uiso	?	C
C7	1.0	0.677766	0.122206	0.162252	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677766	0.455540	0.162252	Uiso	?	C
C9	1.0	0.677766	0.788873	0.162252	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122037	0.010989	0.070790	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122037	0.344322	0.070790	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122037	0.677655	0.070790	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455370	0.010989	0.070790	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455370	0.344322	0.070790	Uiso	?	O
O6	1.0	0.455370	0.677655	0.070790	Uiso	?	O
O7	1.0	0.788704	0.010989	0.070790	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788704	0.344322	0.070790	Uiso	?	O
O9	1.0	0.788704	0.677655	0.070790	Uiso	?	O
O10	1.0	0.233624	0.233602	0.253688	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233624	0.566936	0.253688	Uiso	?	O
O12	1.0	0.233624	0.900269	0.253688	Uiso	?	O
O13	1.0	0.566958	0.233602	0.253688	Uiso	?	O
O14	1.0	0.566958	0.566936	0.253688	Uiso	?	O
O15	1.0	0.566958	0.900269	0.253688	Uiso	?	O
O16	1.0	0.900291	0.233602	0.253688	Uiso	?	O
O17	1.0	0.900291	0.566936	0.253688	Uiso	?	O
O18	1.0	0.900291	0.900269	0.253688	Uiso	?	O

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_S-doped Ti2CO2

_chemical_name_common                  'S-doped Ti2CO2 (n=1)'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         34.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           2385.773218
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233185     0.233661     0.076716    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233186     0.566194     0.076716    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233337     0.900004     0.076918    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.567147     0.233660     0.076716    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566669     0.566667     0.077855    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.567147     0.900157     0.076716    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.900005     0.233337     0.077598    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899682     0.566194     0.076715    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899682     0.900156     0.076715    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122305     0.011023     0.152309    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122511     0.344589     0.152815    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122305     0.677948     0.152309    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455381     0.011023     0.152309    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.452629     0.338597     0.152593    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.452630     0.680698     0.152593    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788740     0.010815     0.152815    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788739     0.344590     0.152815    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.794732     0.680698     0.152592    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.010881     0.122449     0.114287    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.010881     0.455098     0.114287    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.010099     0.788383     0.114768    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344952	0.123238	0.114768	Uiso	?	C
C5	1.0	0.346721	0.456693	0.115529	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344951	0.788381	0.114768	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678234	0.122450	0.114287	Uiso	?	C
C8	1.0	0.676639	0.456695	0.115530	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676639	0.786608	0.115530	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122557	0.010752	0.050398	Uiso	?	O
O2	1.0	0.123977	0.345318	0.050283	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122557	0.678465	0.050397	Uiso	?	O
O4	1.0	0.454848	0.010754	0.050398	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455852	0.677457	0.050389	Uiso	?	O
O6	1.0	0.787993	0.009331	0.050283	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787995	0.345322	0.050283	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788258	0.677458	0.050389	Uiso	?	O
O9	1.0	0.228262	0.230091	0.179140	Uiso	?	O
O10	1.0	0.228261	0.564846	0.179139	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233344	0.900011	0.178867	Uiso	?	O
O12	1.0	0.568509	0.230091	0.179140	Uiso	?	O
O13	1.0	0.568507	0.905090	0.179139	Uiso	?	O
O14	1.0	0.900013	0.233344	0.179132	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903264	0.564847	0.179140	Uiso	?	O
O16	1.0	0.903263	0.905090	0.179139	Uiso	?	O
O17	1.0	0.455852	0.345051	0.050389	Uiso	?	O
S1	1.0	0.566680	0.566677	0.199170	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_NS-codoped Ti2CO2

_chemical_name_common                  'NS-doped Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233686     0.233771     0.099873    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.232884     0.565860     0.098709    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233682     0.900205     0.099635    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566797     0.233299     0.099714    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566340     0.566150     0.101026    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566830     0.900207     0.099787    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899743     0.233585     0.100806    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899461     0.565515     0.099751    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899621     0.900040     0.098920    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122992     0.011941     0.199169    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122614     0.344819     0.199095    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122402     0.677304     0.198719    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.458180     0.014982     0.200609    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.454968     0.336056     0.200099    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.451886     0.680515     0.197925    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788626     0.011291     0.199703    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.784911     0.342428     0.200951    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.796420     0.681163     0.198496    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011238     0.122747     0.149015    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.012039     0.455781     0.148610    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011232     0.788740     0.149140    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.343527	0.121539	0.149069	Uiso	?	C
C5	1.0	0.345173	0.456831	0.149660	Uiso	?	C
C6	1.0	0.343625	0.787805	0.148853	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678160	0.121904	0.149078	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677480	0.457067	0.150153	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676655	0.787151	0.150074	Uiso	?	C
O1	1.0	0.121139	0.010360	0.064694	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122582	0.343948	0.064651	Uiso	?	O
O3	1.0	0.121666	0.678198	0.064598	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455483	0.011069	0.064951	Uiso	?	O
O5	1.0	0.456462	0.678011	0.064766	Uiso	?	O
O6	1.0	0.788490	0.009493	0.064825	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787976	0.344628	0.064990	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788778	0.678311	0.064850	Uiso	?	O
O9	1.0	0.227539	0.229558	0.233910	Uiso	?	O
O10	1.0	0.229464	0.565844	0.233633	Uiso	?	O
O11	1.0	0.230561	0.898359	0.233632	Uiso	?	O
O12	1.0	0.569094	0.902972	0.233884	Uiso	?	O
O13	1.0	0.901492	0.232269	0.233999	Uiso	?	O
O14	1.0	0.904266	0.568218	0.233943	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903489	0.904326	0.233661	Uiso	?	O
O16	1.0	0.455791	0.344699	0.065102	Uiso	?	O
S1	1.0	0.567546	0.569987	0.259028	Uiso	?	S
N1	1.0	0.567012	0.231053	0.234242	Uiso	?	N

Structure data in CIF format for Na-S clusters absorbed on Ti_2CO_2 MXene, S-doped Ti_2CO_2(S), and co-doped Ti_2CO_2(NS)

1. Na-S clusters absorbed on Ti_2CO_2 MXene

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S@Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S@Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936407
_cell_length_b                         8.935331
_cell_length_c                         26.499987
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998756
_cell_volume                           1832.547900
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233203     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233203     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233202     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566536     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566536     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566536     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899869     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899869     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899869     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122260     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122260     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122260     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455593     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.455593     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.455593     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788927     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
```

Ti17	1.0	0.788927	0.344447	0.199460	Uiso	?	Ti
Ti18	1.0	0.788927	0.677781	0.199460	Uiso	?	Ti
C1	1.0	0.011099	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C2	1.0	0.011099	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C3	1.0	0.011099	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
C4	1.0	0.344432	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C5	1.0	0.344432	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344432	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
C7	1.0	0.677766	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677766	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C9	1.0	0.677766	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122037	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122037	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122037	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455370	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455370	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O6	1.0	0.455370	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O7	1.0	0.788704	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788704	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O9	1.0	0.788704	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O10	1.0	0.233624	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233624	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O12	1.0	0.233624	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O13	1.0	0.566958	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O14	1.0	0.566958	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O15	1.0	0.566958	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O16	1.0	0.900291	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O17	1.0	0.900291	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O18	1.0	0.900291	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
Na1	1.0	0.368266	0.154193	0.308244	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.247919	0.523726	0.321421	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.498108	0.467896	0.342949	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S2@Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S@Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936407
_cell_length_b                         8.935331
_cell_length_c                         26.499987
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998756
_cell_volume                           1832.547900
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233203     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233203     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233202     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566536     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566536     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566536     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899869     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899869     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899869     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122260     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122260     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122260     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455593     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.455593     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.455593     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788927     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788927     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.788927     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011099     0.122207     0.150007    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.011099     0.455540     0.150007    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011099     0.788873     0.150007    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344432	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C5	1.0	0.344432	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344432	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
C7	1.0	0.677766	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677766	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C9	1.0	0.677766	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122037	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122037	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122037	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455370	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455370	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O6	1.0	0.455370	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O7	1.0	0.788704	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788704	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O9	1.0	0.788704	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O10	1.0	0.233624	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233624	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O12	1.0	0.233624	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O13	1.0	0.566958	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O14	1.0	0.566958	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O15	1.0	0.566958	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O16	1.0	0.900291	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O17	1.0	0.900291	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O18	1.0	0.900291	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
Na1	1.0	0.370398	0.433152	0.309296	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.663783	0.134161	0.308183	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.408608	0.176901	0.355179	Uiso	?	S
S2	1.0	0.640774	0.402849	0.351039	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S4@Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S4@Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936407
_cell_length_b                         8.935331
_cell_length_c                         26.499987
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998756
_cell_volume                           1832.547900
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233203     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233203     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233202     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566536     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566536     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566536     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899869     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899869     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899869     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122260     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122260     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122260     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455593     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.455593     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.455593     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788927     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788927     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.788927     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011099     0.122207     0.150007    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.011099     0.455540     0.150007    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011099     0.788873     0.150007    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344432	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C5	1.0	0.344432	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344432	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
C7	1.0	0.677766	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677766	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C9	1.0	0.677766	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122037	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122037	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122037	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455370	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455370	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O6	1.0	0.455370	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O7	1.0	0.788704	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788704	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O9	1.0	0.788704	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O10	1.0	0.233624	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233624	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O12	1.0	0.233624	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O13	1.0	0.566958	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O14	1.0	0.566958	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O15	1.0	0.566958	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O16	1.0	0.900291	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O17	1.0	0.900291	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O18	1.0	0.900291	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
Na1	1.0	0.258592	0.290545	0.319707	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.699794	0.683425	0.314221	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.579286	0.348427	0.352786	Uiso	?	S
S2	1.0	0.545787	0.393979	0.424892	Uiso	?	S
S3	1.0	0.389087	0.618324	0.358341	Uiso	?	S
S4	1.0	0.417402	0.548670	0.428192	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S6@Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S6@Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936407
_cell_length_b                         8.935331
_cell_length_c                         26.499987
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998756
_cell_volume                           1832.547900
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233203     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233203     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233202     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566536     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566536     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566536     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899869     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899869     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899869     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122260     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122260     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122260     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455593     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.455593     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.455593     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788927     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788927     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.788927     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011099     0.122207     0.150007    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.011099     0.455540     0.150007    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011099     0.788873     0.150007    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344432	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C5	1.0	0.344432	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344432	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
C7	1.0	0.677766	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677766	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C9	1.0	0.677766	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122037	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122037	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122037	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455370	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455370	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O6	1.0	0.455370	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O7	1.0	0.788704	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788704	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O9	1.0	0.788704	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O10	1.0	0.233624	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233624	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O12	1.0	0.233624	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O13	1.0	0.566958	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O14	1.0	0.566958	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O15	1.0	0.566958	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O16	1.0	0.900291	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O17	1.0	0.900291	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O18	1.0	0.900291	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
Na1	1.0	0.458757	0.469974	0.437874	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.343258	0.446217	0.309274	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.785044	0.621007	0.385053	Uiso	?	S
S2	1.0	0.713928	0.790508	0.354810	Uiso	?	S
S3	1.0	0.659538	0.386365	0.338097	Uiso	?	S
S4	1.0	0.244927	0.184010	0.382671	Uiso	?	S
S5	1.0	0.473321	0.179846	0.378765	Uiso	?	S
S6	1.0	0.468674	0.723490	0.377290	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_'Na2S8@Ti2CO2'

_chemical_name_common                  'Na2S8@Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936407
_cell_length_b                         8.935331
_cell_length_c                         26.499987
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998756
_cell_volume                           1832.547900
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233203     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233203     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233202     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566536     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566536     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566536     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899869     0.233200     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899869     0.566534     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899869     0.899867     0.100545    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122260     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122260     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122260     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455593     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.455593     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.455593     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788927     0.011114     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788927     0.344447     0.199460    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.788927     0.677781     0.199460    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011099     0.122207     0.150007    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.011099     0.455540     0.150007    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011099     0.788873     0.150007    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344432	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C5	1.0	0.344432	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344432	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
C7	1.0	0.677766	0.122207	0.150007	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677766	0.455540	0.150007	Uiso	?	C
C9	1.0	0.677766	0.788873	0.150007	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122037	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122037	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122037	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455370	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455370	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O6	1.0	0.455370	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O7	1.0	0.788704	0.010989	0.065448	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788704	0.344322	0.065448	Uiso	?	O
O9	1.0	0.788704	0.677656	0.065448	Uiso	?	O
O10	1.0	0.233624	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233624	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O12	1.0	0.233624	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O13	1.0	0.566958	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O14	1.0	0.566958	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O15	1.0	0.566958	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
O16	1.0	0.900291	0.233602	0.234541	Uiso	?	O
O17	1.0	0.900291	0.566936	0.234541	Uiso	?	O
O18	1.0	0.900291	0.900269	0.234541	Uiso	?	O
Na1	1.0	0.518041	0.450470	0.317262	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.204561	0.447966	0.405091	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.676774	0.287255	0.373404	Uiso	?	S
S2	1.0	0.445291	0.384229	0.460450	Uiso	?	S
S3	1.0	0.801031	0.513594	0.409453	Uiso	?	S
S4	1.0	0.370917	0.180557	0.415736	Uiso	?	S
S5	1.0	0.832080	0.726364	0.360784	Uiso	?	S
S6	1.0	0.677858	0.825703	0.385108	Uiso	?	S
S7	1.0	0.449278	0.718495	0.346532	Uiso	?	S
S8	1.0	0.219419	0.175006	0.357442	Uiso	?	S

2. Na-S clusters absorbed on S-doped Ti_2CO_2(S)

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S@Sdope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S@Sdope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233185     0.233661     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233186     0.566194     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233337     0.900004     0.100139    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.567147     0.233660     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566669     0.566667     0.101359    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.567147     0.900157     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.900005     0.233337     0.101024    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899682     0.566194     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899682     0.900156     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122305     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122511     0.344589     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122305     0.677948     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455381     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.452629     0.338597     0.198659    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.452630     0.680698     0.198658    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788740     0.010815     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788739     0.344590     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.794732     0.680698     0.198657    Uiso  ? Ti
```

C1	1.0	0.010881	0.122449	0.148789	Uiso	?	C
C2	1.0	0.010881	0.455098	0.148789	Uiso	?	C
C3	1.0	0.010099	0.788383	0.149415	Uiso	?	C
C4	1.0	0.344952	0.123238	0.149415	Uiso	?	C
C5	1.0	0.346721	0.456693	0.150406	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344951	0.788381	0.149415	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678234	0.122450	0.148788	Uiso	?	C
C8	1.0	0.676639	0.456695	0.150407	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676639	0.786608	0.150407	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122557	0.010752	0.065612	Uiso	?	O
O2	1.0	0.123977	0.345318	0.065463	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122557	0.678465	0.065612	Uiso	?	O
O4	1.0	0.454848	0.010754	0.065612	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455852	0.677457	0.065600	Uiso	?	O
O6	1.0	0.787993	0.009331	0.065463	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787995	0.345322	0.065463	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788258	0.677458	0.065600	Uiso	?	O
O9	1.0	0.228262	0.230091	0.233220	Uiso	?	O
O10	1.0	0.228261	0.564846	0.233219	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233344	0.900011	0.232864	Uiso	?	O
O12	1.0	0.568509	0.230091	0.233219	Uiso	?	O
O13	1.0	0.568507	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O14	1.0	0.900013	0.233344	0.233210	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903264	0.564847	0.233219	Uiso	?	O
O16	1.0	0.903263	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O17	1.0	0.455852	0.345051	0.065600	Uiso	?	O
S1	1.0	0.565224	0.563381	0.263062	Uiso	?	S
Na1	1.0	0.520689	0.262737	0.301930	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.274635	0.492904	0.298049	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.501287	0.485823	0.342202	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S2@Sdope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S2@Sdope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233185     0.233661     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233186     0.566194     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233337     0.900004     0.100139    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.567147     0.233660     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566669     0.566667     0.101359    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.567147     0.900157     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.900005     0.233337     0.101024    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899682     0.566194     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899682     0.900156     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122305     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122511     0.344589     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122305     0.677948     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455381     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.452629     0.338597     0.198659    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.452630     0.680698     0.198658    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788740     0.010815     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788739     0.344590     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.794732     0.680698     0.198657    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.010881     0.122449     0.148789    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.010881     0.455098     0.148789    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.010099     0.788383     0.149415    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344952	0.123238	0.149415	Uiso	?	C
C5	1.0	0.346721	0.456693	0.150406	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344951	0.788381	0.149415	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678234	0.122450	0.148788	Uiso	?	C
C8	1.0	0.676639	0.456695	0.150407	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676639	0.786608	0.150407	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122557	0.010752	0.065612	Uiso	?	O
O2	1.0	0.123977	0.345318	0.065463	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122557	0.678465	0.065612	Uiso	?	O
O4	1.0	0.454848	0.010754	0.065612	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455852	0.677457	0.065600	Uiso	?	O
O6	1.0	0.787993	0.009331	0.065463	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787995	0.345322	0.065463	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788258	0.677458	0.065600	Uiso	?	O
O9	1.0	0.228262	0.230091	0.233220	Uiso	?	O
O10	1.0	0.228261	0.564846	0.233219	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233344	0.900011	0.232864	Uiso	?	O
O12	1.0	0.568509	0.230091	0.233219	Uiso	?	O
O13	1.0	0.568507	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O14	1.0	0.900013	0.233344	0.233210	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903264	0.564847	0.233219	Uiso	?	O
O16	1.0	0.903263	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O17	1.0	0.455852	0.345051	0.065600	Uiso	?	O
S1	1.0	0.560040	0.560794	0.262057	Uiso	?	S
Na1	1.0	0.584538	0.759291	0.328910	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.689154	0.435694	0.309321	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.608418	0.553385	0.381066	Uiso	?	S
S2	1.0	0.826412	0.785884	0.368834	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S4@Sdope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S4@Sdope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233185     0.233661     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233186     0.566194     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233337     0.900004     0.100139    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.567147     0.233660     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566669     0.566667     0.101359    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.567147     0.900157     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.900005     0.233337     0.101024    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899682     0.566194     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899682     0.900156     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122305     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122511     0.344589     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122305     0.677948     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455381     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.452629     0.338597     0.198659    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.452630     0.680698     0.198658    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788740     0.010815     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788739     0.344590     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.794732     0.680698     0.198657    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.010881     0.122449     0.148789    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.010881     0.455098     0.148789    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.010099     0.788383     0.149415    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344952	0.123238	0.149415	Uiso	?	C
C5	1.0	0.346721	0.456693	0.150406	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344951	0.788381	0.149415	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678234	0.122450	0.148788	Uiso	?	C
C8	1.0	0.676639	0.456695	0.150407	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676639	0.786608	0.150407	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122557	0.010752	0.065612	Uiso	?	O
O2	1.0	0.123977	0.345318	0.065463	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122557	0.678465	0.065612	Uiso	?	O
O4	1.0	0.454848	0.010754	0.065612	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455852	0.677457	0.065600	Uiso	?	O
O6	1.0	0.787993	0.009331	0.065463	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787995	0.345322	0.065463	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788258	0.677458	0.065600	Uiso	?	O
O9	1.0	0.228262	0.230091	0.233220	Uiso	?	O
O10	1.0	0.228261	0.564846	0.233219	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233344	0.900011	0.232864	Uiso	?	O
O12	1.0	0.568509	0.230091	0.233219	Uiso	?	O
O13	1.0	0.568507	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O14	1.0	0.900013	0.233344	0.233210	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903264	0.564847	0.233219	Uiso	?	O
O16	1.0	0.903263	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O17	1.0	0.455852	0.345051	0.065600	Uiso	?	O
S1	1.0	0.567264	0.567188	0.261619	Uiso	?	S
Na1	1.0	0.176547	0.180407	0.303911	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.503648	0.459091	0.346670	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.417757	0.156885	0.343201	Uiso	?	S
S2	1.0	0.277229	0.078623	0.407491	Uiso	?	S
S3	1.0	0.212668	0.400880	0.362836	Uiso	?	S
S4	1.0	0.112091	0.192059	0.409301	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S6@Sdope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S6@Sdope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233185     0.233661     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233186     0.566194     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233337     0.900004     0.100139    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.567147     0.233660     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566669     0.566667     0.101359    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.567147     0.900157     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.900005     0.233337     0.101024    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899682     0.566194     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899682     0.900156     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122305     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122511     0.344589     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122305     0.677948     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455381     0.011023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.452629     0.338597     0.198659    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.452630     0.680698     0.198658    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788740     0.010815     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788739     0.344590     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.794732     0.680698     0.198657    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.010881     0.122449     0.148789    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.010881     0.455098     0.148789    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.010099     0.788383     0.149415    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344952	0.123238	0.149415	Uiso	?	C
C5	1.0	0.346721	0.456693	0.150406	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344951	0.788381	0.149415	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678234	0.122450	0.148788	Uiso	?	C
C8	1.0	0.676639	0.456695	0.150407	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676639	0.786608	0.150407	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122557	0.010752	0.065612	Uiso	?	O
O2	1.0	0.123977	0.345318	0.065463	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122557	0.678465	0.065612	Uiso	?	O
O4	1.0	0.454848	0.010754	0.065612	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455852	0.677457	0.065600	Uiso	?	O
O6	1.0	0.787993	0.009331	0.065463	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787995	0.345322	0.065463	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788258	0.677458	0.065600	Uiso	?	O
O9	1.0	0.228262	0.230091	0.233220	Uiso	?	O
O10	1.0	0.228261	0.564846	0.233219	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233344	0.900011	0.232864	Uiso	?	O
O12	1.0	0.568509	0.230091	0.233219	Uiso	?	O
O13	1.0	0.568507	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O14	1.0	0.900013	0.233344	0.233210	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903264	0.564847	0.233219	Uiso	?	O
O16	1.0	0.903263	0.905090	0.233219	Uiso	?	O
O17	1.0	0.455852	0.345051	0.065600	Uiso	?	O
S1	1.0	0.567262	0.567386	0.260300	Uiso	?	S
Na1	1.0	0.316844	0.518739	0.412704	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.305667	0.560653	0.302949	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.621924	0.563337	0.408942	Uiso	?	S
S2	1.0	0.654303	0.779930	0.369675	Uiso	?	S
S3	1.0	0.552540	0.348909	0.357001	Uiso	?	S
S4	1.0	0.150165	0.296373	0.353022	Uiso	?	S
S5	1.0	0.293793	0.177924	0.366669	Uiso	?	S
S6	1.0	0.425338	0.784535	0.367930	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S8@Sdope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S8@Sdope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233185     0.313661     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.233186     0.646194     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233337     0.980004     0.100139    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.567147     0.313660     0.099876    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566669     0.646667     0.101359    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.567147     0.980157     0.099875    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.900005     0.313337     0.101024    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899682     0.646194     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899682     0.980156     0.099874    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122305     0.091023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122511     0.424589     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122305     0.757948     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.455381     0.091023     0.198289    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.452629     0.418597     0.198659    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.452630     0.760698     0.198658    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788740     0.090815     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.788739     0.424590     0.198948    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.794732     0.760698     0.198657    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.010881     0.202449     0.148789    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.010881     0.535098     0.148789    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.010099     0.868383     0.149415    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.344952	0.203238	0.149415	Uiso	?	C
C5	1.0	0.346721	0.536693	0.150406	Uiso	?	C
C6	1.0	0.344951	0.868381	0.149415	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678234	0.202450	0.148788	Uiso	?	C
C8	1.0	0.676639	0.536695	0.150407	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676639	0.866608	0.150407	Uiso	?	C
O1	1.0	0.122557	0.090752	0.065612	Uiso	?	O
O2	1.0	0.123977	0.425318	0.065463	Uiso	?	O
O3	1.0	0.122557	0.758465	0.065612	Uiso	?	O
O4	1.0	0.454848	0.090754	0.065612	Uiso	?	O
O5	1.0	0.455852	0.757457	0.065600	Uiso	?	O
O6	1.0	0.787993	0.089331	0.065463	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787995	0.425322	0.065463	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788258	0.757458	0.065600	Uiso	?	O
O9	1.0	0.228262	0.310091	0.233220	Uiso	?	O
O10	1.0	0.228261	0.644846	0.233219	Uiso	?	O
O11	1.0	0.233344	0.980011	0.232864	Uiso	?	O
O12	1.0	0.568509	0.310091	0.233219	Uiso	?	O
O13	1.0	0.568507	0.985090	0.233219	Uiso	?	O
O14	1.0	0.900013	0.313344	0.233210	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903264	0.644847	0.233219	Uiso	?	O
O16	1.0	0.903263	0.985090	0.233219	Uiso	?	O
O17	1.0	0.455852	0.425051	0.065600	Uiso	?	O
S1	1.0	0.563930	0.645041	0.260127	Uiso	?	S
Na1	1.0	0.577855	0.344798	0.307426	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.350133	0.357735	0.401782	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.729909	0.206119	0.356727	Uiso	?	S
S2	1.0	0.499911	0.246632	0.454664	Uiso	?	S
S3	1.0	0.839199	0.415926	0.399443	Uiso	?	S
S4	1.0	0.427353	0.075464	0.398843	Uiso	?	S
S5	1.0	0.832157	0.620925	0.353274	Uiso	?	S
S6	1.0	0.723909	0.749575	0.388713	Uiso	?	S
S7	1.0	0.469154	0.646885	0.371116	Uiso	?	S
S8	1.0	0.299547	0.133182	0.344058	Uiso	?	S

3. Na-S clusters absorbed on NS-codoped Ti_2CO_2(NS)

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S@NScodope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S@NScodope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233686     0.233771     0.099873    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.232884     0.565860     0.098709    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233682     0.900205     0.099635    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566797     0.233299     0.099714    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566340     0.566150     0.101026    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566830     0.900207     0.099787    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899743     0.233585     0.100806    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899461     0.565515     0.099751    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899621     0.900040     0.098920    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122992     0.011941     0.199169    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122614     0.344819     0.199095    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122402     0.677304     0.198719    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.458179     0.014982     0.200609    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.454968     0.336056     0.200099    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.451886     0.680516     0.197925    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788626     0.011291     0.199703    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.784911     0.342428     0.200951    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.796420     0.681163     0.198496    Uiso  ? Ti
```

C1	1.0	0.011238	0.122747	0.149015	Uiso	?	C
C2	1.0	0.012039	0.455781	0.148610	Uiso	?	C
C3	1.0	0.011232	0.788740	0.149140	Uiso	?	C
C4	1.0	0.343527	0.121539	0.149069	Uiso	?	C
C5	1.0	0.345173	0.456831	0.149660	Uiso	?	C
C6	1.0	0.343625	0.787805	0.148853	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678160	0.121904	0.149078	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677480	0.457067	0.150153	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676655	0.787150	0.150074	Uiso	?	C
O1	1.0	0.121139	0.010360	0.064694	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122582	0.343948	0.064651	Uiso	?	O
O3	1.0	0.121666	0.678198	0.064598	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455483	0.011069	0.064951	Uiso	?	O
O5	1.0	0.456462	0.678011	0.064766	Uiso	?	O
O6	1.0	0.788490	0.009493	0.064825	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787976	0.344628	0.064990	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788778	0.678311	0.064850	Uiso	?	O
O9	1.0	0.227539	0.229558	0.233910	Uiso	?	O
O10	1.0	0.229464	0.565844	0.233633	Uiso	?	O
O11	1.0	0.230561	0.898359	0.233632	Uiso	?	O
O12	1.0	0.569094	0.902972	0.233884	Uiso	?	O
O13	1.0	0.901492	0.232269	0.233999	Uiso	?	O
O14	1.0	0.904266	0.568218	0.233943	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903489	0.904326	0.233661	Uiso	?	O
O16	1.0	0.455791	0.344699	0.065102	Uiso	?	O
S1	1.0	0.567129	0.570775	0.262646	Uiso	?	S
N1	1.0	0.568395	0.232088	0.236853	Uiso	?	N
Na1	1.0	0.608940	0.273601	0.320538	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.212233	0.380522	0.306857	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.537112	0.525867	0.341631	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S2@NScodope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S@NScodope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233686     0.233771     0.099873    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.232884     0.565860     0.098709    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233682     0.900205     0.099635    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566797     0.233299     0.099714    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566340     0.566150     0.101026    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566830     0.900207     0.099787    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899743     0.233585     0.100806    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899461     0.565515     0.099751    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899621     0.900040     0.098920    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122992     0.011941     0.199169    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122614     0.344819     0.199095    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122402     0.677304     0.198719    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.458179     0.014982     0.200609    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.454968     0.336056     0.200099    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.451886     0.680516     0.197925    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788626     0.011291     0.199703    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.784911     0.342428     0.200951    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.796420     0.681163     0.198496    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011238     0.122747     0.149015    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.012039     0.455781     0.148610    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011232     0.788740     0.149140    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.343527	0.121539	0.149069	Uiso	?	C
C5	1.0	0.345173	0.456831	0.149660	Uiso	?	C
C6	1.0	0.343625	0.787805	0.148853	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678160	0.121904	0.149078	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677480	0.457067	0.150153	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676655	0.787150	0.150074	Uiso	?	C
O1	1.0	0.121139	0.010360	0.064694	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122582	0.343948	0.064651	Uiso	?	O
O3	1.0	0.121666	0.678198	0.064598	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455483	0.011069	0.064951	Uiso	?	O
O5	1.0	0.456462	0.678011	0.064766	Uiso	?	O
O6	1.0	0.788490	0.009493	0.064825	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787976	0.344628	0.064990	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788778	0.678311	0.064850	Uiso	?	O
O9	1.0	0.227539	0.229558	0.233910	Uiso	?	O
O10	1.0	0.229464	0.565844	0.233633	Uiso	?	O
O11	1.0	0.230561	0.898359	0.233632	Uiso	?	O
O12	1.0	0.569094	0.902972	0.233884	Uiso	?	O
O13	1.0	0.901492	0.232269	0.233999	Uiso	?	O
O14	1.0	0.904266	0.568218	0.233943	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903489	0.904326	0.233661	Uiso	?	O
O16	1.0	0.455791	0.344699	0.065102	Uiso	?	O
S1	1.0	0.575063	0.573783	0.260897	Uiso	?	S
N1	1.0	0.568720	0.230991	0.236840	Uiso	?	N
Na1	1.0	0.278424	0.497609	0.314556	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.617127	0.234360	0.323131	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.341381	0.254675	0.357711	Uiso	?	S
S2	1.0	0.561865	0.490338	0.358426	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S4@NScodope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S4@NScodope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233686     0.233771     0.099873    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.232884     0.565860     0.098709    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233682     0.900205     0.099635    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566797     0.233299     0.099714    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566340     0.566150     0.101026    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566830     0.900207     0.099787    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899743     0.233585     0.100806    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899461     0.565515     0.099751    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899621     0.900040     0.098920    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122992     0.011941     0.199169    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122614     0.344819     0.199095    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122402     0.677304     0.198719    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.458179     0.014982     0.200609    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.454968     0.336056     0.200099    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.451886     0.680516     0.197925    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788626     0.011291     0.199703    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.784911     0.342428     0.200951    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.796420     0.681163     0.198496    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011238     0.122747     0.149015    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.012039     0.455781     0.148610    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011232     0.788740     0.149140    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.343527	0.121539	0.149069	Uiso	?	C
C5	1.0	0.345173	0.456831	0.149660	Uiso	?	C
C6	1.0	0.343625	0.787805	0.148853	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678160	0.121904	0.149078	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677480	0.457067	0.150153	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676655	0.787150	0.150074	Uiso	?	C
O1	1.0	0.121139	0.010360	0.064694	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122582	0.343948	0.064651	Uiso	?	O
O3	1.0	0.121666	0.678198	0.064598	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455483	0.011069	0.064951	Uiso	?	O
O5	1.0	0.456462	0.678011	0.064766	Uiso	?	O
O6	1.0	0.788490	0.009493	0.064825	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787976	0.344628	0.064990	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788778	0.678311	0.064850	Uiso	?	O
O9	1.0	0.227539	0.229558	0.233910	Uiso	?	O
O10	1.0	0.229464	0.565844	0.233633	Uiso	?	O
O11	1.0	0.230561	0.898359	0.233632	Uiso	?	O
O12	1.0	0.569094	0.902972	0.233884	Uiso	?	O
O13	1.0	0.901492	0.232269	0.233999	Uiso	?	O
O14	1.0	0.904266	0.568218	0.233943	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903489	0.904326	0.233661	Uiso	?	O
O16	1.0	0.455791	0.344699	0.065102	Uiso	?	O
S1	1.0	0.568814	0.575121	0.261351	Uiso	?	S
N1	1.0	0.568790	0.232381	0.237127	Uiso	?	N
Na1	1.0	0.260416	0.406645	0.313864	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.634679	0.350980	0.320861	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.304095	0.154820	0.363678	Uiso	?	S
S2	1.0	0.293985	0.198645	0.436640	Uiso	?	S
S3	1.0	0.551649	0.585160	0.384618	Uiso	?	S
S4	1.0	0.449017	0.476816	0.449967	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S6@NScodope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S6@NScodope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233686     0.233771     0.099873    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.232884     0.565860     0.098709    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233682     0.900205     0.099635    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566797     0.233299     0.099714    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566340     0.566150     0.101026    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566830     0.900207     0.099787    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899743     0.233585     0.100806    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899461     0.565515     0.099751    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899621     0.900040     0.098920    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122992     0.011941     0.199169    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122614     0.344819     0.199095    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122402     0.677304     0.198719    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.458179     0.014982     0.200609    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.454968     0.336056     0.200099    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.451886     0.680516     0.197925    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788626     0.011291     0.199703    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.784911     0.342428     0.200951    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.796420     0.681163     0.198496    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011238     0.122747     0.149015    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.012039     0.455781     0.148610    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011232     0.788740     0.149140    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.343527	0.121539	0.149069	Uiso	?	C
C5	1.0	0.345173	0.456831	0.149660	Uiso	?	C
C6	1.0	0.343625	0.787805	0.148853	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678160	0.121904	0.149078	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677480	0.457067	0.150153	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676655	0.787150	0.150074	Uiso	?	C
O1	1.0	0.121139	0.010360	0.064694	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122582	0.343948	0.064651	Uiso	?	O
O3	1.0	0.121666	0.678198	0.064598	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455483	0.011069	0.064951	Uiso	?	O
O5	1.0	0.456462	0.678011	0.064766	Uiso	?	O
O6	1.0	0.788490	0.009493	0.064825	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787976	0.344628	0.064990	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788778	0.678311	0.064850	Uiso	?	O
O9	1.0	0.227539	0.229558	0.233910	Uiso	?	O
O10	1.0	0.229464	0.565844	0.233633	Uiso	?	O
O11	1.0	0.230561	0.898359	0.233632	Uiso	?	O
O12	1.0	0.569094	0.902972	0.233884	Uiso	?	O
O13	1.0	0.901492	0.232269	0.233999	Uiso	?	O
O14	1.0	0.904266	0.568218	0.233943	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903489	0.904326	0.233661	Uiso	?	O
O16	1.0	0.455791	0.344699	0.065102	Uiso	?	O
S1	1.0	0.565165	0.569407	0.261262	Uiso	?	S
N1	1.0	0.566023	0.229602	0.236108	Uiso	?	N
Na1	1.0	0.854644	0.739333	0.327044	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.487441	0.260910	0.323885	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.781298	0.634642	0.442874	Uiso	?	S
S2	1.0	0.808562	0.423904	0.421994	Uiso	?	S
S3	1.0	0.519121	0.547610	0.458803	Uiso	?	S
S4	1.0	0.241905	0.340532	0.362711	Uiso	?	S
S5	1.0	0.408066	0.570939	0.391791	Uiso	?	S
S6	1.0	0.840869	0.425477	0.345879	Uiso	?	S

```
#======================================================================
=
# CRYSTAL DATA
#----------------------------------------------------------------------
-
data_Na2S8@NScodope-Ti2CO2

_chemical_name_common                  'Na2S8@NScodope-Ti2CO2'
_cell_length_a                         8.936411
_cell_length_b                         8.935336
_cell_length_c                         26.500000
_cell_angle_alpha                      90.000000
_cell_angle_beta                       90.000000
_cell_angle_gamma                      119.998764
_cell_volume                           1832.550443
_space_group_name_H-M_alt              'P 1'
_space_group_IT_number                 1

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
   'x, y, z'

loop_
   _atom_site_label
   _atom_site_occupancy
   _atom_site_fract_x
   _atom_site_fract_y
   _atom_site_fract_z
   _atom_site_adp_type
   _atom_site_U_iso_or_equiv
   _atom_site_type_symbol
   Ti1        1.0     0.233686     0.233771     0.099873    Uiso  ? Ti
   Ti2        1.0     0.232884     0.565860     0.098709    Uiso  ? Ti
   Ti3        1.0     0.233682     0.900205     0.099635    Uiso  ? Ti
   Ti4        1.0     0.566797     0.233299     0.099714    Uiso  ? Ti
   Ti5        1.0     0.566340     0.566150     0.101026    Uiso  ? Ti
   Ti6        1.0     0.566830     0.900207     0.099787    Uiso  ? Ti
   Ti7        1.0     0.899743     0.233585     0.100806    Uiso  ? Ti
   Ti8        1.0     0.899461     0.565515     0.099751    Uiso  ? Ti
   Ti9        1.0     0.899621     0.900040     0.098920    Uiso  ? Ti
   Ti10       1.0     0.122992     0.011941     0.199169    Uiso  ? Ti
   Ti11       1.0     0.122614     0.344819     0.199095    Uiso  ? Ti
   Ti12       1.0     0.122402     0.677304     0.198719    Uiso  ? Ti
   Ti13       1.0     0.458179     0.014982     0.200609    Uiso  ? Ti
   Ti14       1.0     0.454968     0.336056     0.200099    Uiso  ? Ti
   Ti15       1.0     0.451886     0.680516     0.197925    Uiso  ? Ti
   Ti16       1.0     0.788626     0.011291     0.199703    Uiso  ? Ti
   Ti17       1.0     0.784911     0.342428     0.200951    Uiso  ? Ti
   Ti18       1.0     0.796420     0.681163     0.198496    Uiso  ? Ti
   C1         1.0     0.011238     0.122747     0.149015    Uiso  ? C
   C2         1.0     0.012039     0.455781     0.148610    Uiso  ? C
   C3         1.0     0.011232     0.788740     0.149140    Uiso  ? C
```

C4	1.0	0.343527	0.121539	0.149069	Uiso	?	C
C5	1.0	0.345173	0.456831	0.149660	Uiso	?	C
C6	1.0	0.343625	0.787805	0.148853	Uiso	?	C
C7	1.0	0.678160	0.121904	0.149078	Uiso	?	C
C8	1.0	0.677480	0.457067	0.150153	Uiso	?	C
C9	1.0	0.676655	0.787150	0.150074	Uiso	?	C
O1	1.0	0.121139	0.010360	0.064694	Uiso	?	O
O2	1.0	0.122582	0.343948	0.064651	Uiso	?	O
O3	1.0	0.121666	0.678198	0.064598	Uiso	?	O
O4	1.0	0.455483	0.011069	0.064951	Uiso	?	O
O5	1.0	0.456462	0.678011	0.064766	Uiso	?	O
O6	1.0	0.788490	0.009493	0.064825	Uiso	?	O
O7	1.0	0.787976	0.344628	0.064990	Uiso	?	O
O8	1.0	0.788778	0.678311	0.064850	Uiso	?	O
O9	1.0	0.227539	0.229558	0.233910	Uiso	?	O
O10	1.0	0.229464	0.565844	0.233633	Uiso	?	O
O11	1.0	0.230561	0.898359	0.233632	Uiso	?	O
O12	1.0	0.569094	0.902972	0.233884	Uiso	?	O
O13	1.0	0.901492	0.232269	0.233999	Uiso	?	O
O14	1.0	0.904266	0.568218	0.233943	Uiso	?	O
O15	1.0	0.903489	0.904326	0.233661	Uiso	?	O
O16	1.0	0.455791	0.344699	0.065102	Uiso	?	O
S1	1.0	0.564493	0.570049	0.260184	Uiso	?	S
N1	1.0	0.565446	0.230108	0.236105	Uiso	?	N
Na1	1.0	0.418514	0.151839	0.319745	Uiso	?	Na
Na2	1.0	0.792805	0.630159	0.337672	Uiso	?	Na
S1	1.0	0.259263	0.157486	0.455606	Uiso	?	S
S2	1.0	0.571554	0.571677	0.421191	Uiso	?	S
S3	1.0	0.481706	0.215520	0.487691	Uiso	?	S
S4	1.0	0.317798	0.422843	0.411016	Uiso	?	S
S5	1.0	0.606452	0.092663	0.449832	Uiso	?	S
S6	1.0	0.822064	0.284856	0.413901	Uiso	?	S
S7	1.0	0.771614	0.308568	0.341012	Uiso	?	S
S8	1.0	0.236830	0.315707	0.342285	Uiso	?	S