

Supplementary Information for “Theoretical Insights into Designing β -M@Ni(OH)₂ Electrocatalysts for Efficient Urea Oxidation”

Jingwen Zhou and Leanne D. Chen*

*Electrochemical Technology Centre, Department of Chemistry, University of Guelph,
Guelph, Ontario N1G 2W1, Canada*

E-mail: leanne.chen@uoguelph.ca

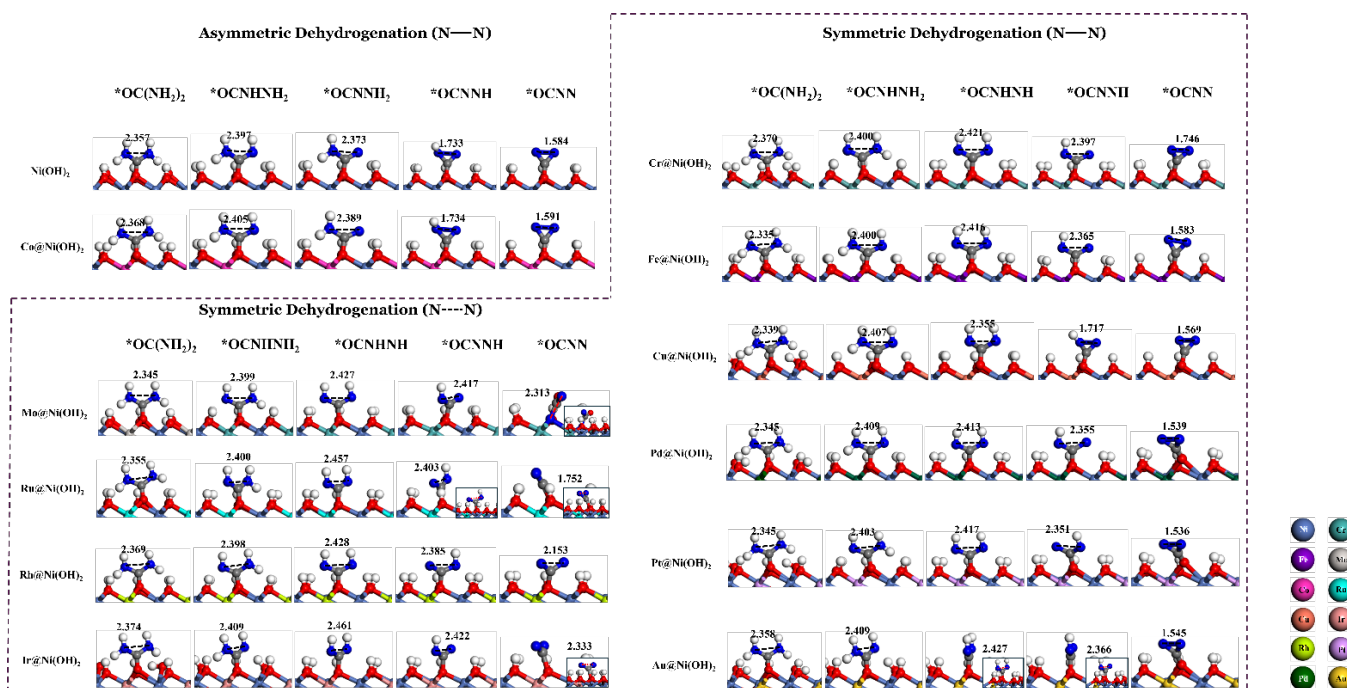


Fig. S1 Four dehydrogenation reaction steps on β -M@Ni(OH)₂. The inset shows structures rotated by 30° clockwise. The numbers indicate the N—N bond distances (Å).

Optimized fractional coordinates for key intermediates on β -Ni(OH)₂ and β -M@Ni(OH)₂

(1) *OCNNH adsorbed on β -Ni(OH)₂

Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Ni H O C N

16 32 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F

0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F

0.0811723178368863 0.0778753853743908 0.5614662652988849 T T T

0.0776352693868776 0.0667470848551583 0.6892099707249698 T T T

0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F

0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F

0.0809424432799499 0.5779440214576766 0.5614248246123620 T T T

0.0775632916603513 0.5773851039171877 0.6872314452563829 T T T

0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F

0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F

0.5812135189275175 0.0779363738935172 0.5613421273993356 T T T

0.5820934747141326 0.0743303789444675 0.6899205095558226 T T T

0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F

0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F

0.5805295099000566 0.5774833734067268 0.5612600925345572 T T T
0.5895591630972253 0.5789752090789165 0.6881700058687391 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4136886744688945 0.2452107237526177 0.5027453234071161 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.4098860648040850 0.2394834457583564 0.6314164662002753 T T T
0.2528925978793493 0.4137088220661636 0.6199812419551856 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4140591639331269 0.7473455650937062 0.5027461235344718 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4129209779220676 0.7414616813326025 0.6302765400109069 T T T
0.2482039314018892 0.9093921346079125 0.6199488960349199 T T T
0.2393055926965164 0.8888172575237814 0.7465539483721737 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9160276067754615 0.2470053561054265 0.5028509771471974 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9219200828625894 0.2412029738607758 0.6310266393541371 T T T
0.7482966951683792 0.4098181205722954 0.6198646600066893 T T T
0.7775207426907547 0.4283739420356006 0.7461193985945348 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F

0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9168055231807054 0.7479976524452675 0.5028509448659307 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.9151950502834636 0.7474853130379319 0.6286251858304116 T T T
0.7447528327961949 0.9103231540187189 0.6198981486344731 T T T
0.7283373271317922 0.8893558064234230 0.7464677603696561 T T T
0.0776198104717500 0.3133954685951295 0.8052138848810606 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4139581151684856 0.2446852991886896 0.5312404384444215 T T T
0.2482824259199261 0.4108698870861326 0.5915070743537898 T T T
0.4120127173288394 0.2403693886154964 0.6598989291904933 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4139086278234125 0.7449632579237105 0.5312371361218816 T T T
0.2481268407132033 0.9108569331441855 0.5914735898478294 T T T
0.4131163327709886 0.7400679441710498 0.6587761993084605 T T T
0.2459488317572488 0.9040948603942995 0.7182590521389901 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F

0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9151873024255174	0.2453415813131858	0.5313398084223824	T	T	T
0.7474341421343219	0.4102979399399023	0.5913989588975186	T	T	T
0.9185135605171582	0.2407969668078638	0.6595160418264205	T	T	T
0.7540049401443610	0.4117156941562519	0.7179278286192290	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9143877520932278	0.7451315439009404	0.5313420730174061	T	T	T
0.7471016926102242	0.9103544391181952	0.5914231192409335	T	T	T
0.9159759446944092	0.7442037171867641	0.6570941502803445	T	T	T
0.7493735187878227	0.9084269719488438	0.7182479299452600	T	T	T
0.2577296380828660	0.4125934582738449	0.7219182147003497	T	T	T
0.2771766128760807	0.4776013825759537	0.7581045084906860	T	T	T
0.1183583699984572	0.4619958579214690	0.7880667710936375	T	T	T
0.4299682931118607	0.6078145644135534	0.7840522384162847	T	T	T

(2) *OCNN adsorbed on β -Cr@Ni(OH)₂

Cr Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Cr Ni H O C N

1 15 31 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0756206629542384	0.0827544615750180	0.6882436322290445	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0790443668874645	0.0849305106169070	0.5611743129470090	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.0791520867358547	0.5848331158057203	0.5610194200727817	T	T	T
0.0731248815757317	0.5894766126718917	0.6906306561694989	T	T	T
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.5792257413495052	0.0847550561674985	0.5610388072866811	T	T	T
0.5750562022924480	0.0861934751356431	0.6905799186238881	T	T	T
0.5833332505730411	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.5790591001772258	0.5851419831345500	0.5609934685143267	T	T	T
0.5832717569414297	0.5881920409202926	0.6874589714846093	T	T	T
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.2412107666657235	F	F	F
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.3739663535723068	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.3605224726145337	F	F	F
0.4141359519710494	0.2512127463226614	0.5026855509360529	T	T	T
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.4932780595211170	F	F	F
0.4017969559646834	0.2462160086890030	0.6292970886975940	T	T	T
0.2508937328903087	0.4246637472838818	0.6198636742132247	T	T	T
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.2412107666657235	F	F	F

0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4137119263425827 0.7509276151318288 0.5025057290792587 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4007131656823353 0.7537653915741056 0.6315077156249235 T T T
0.2428437910005860 0.9180768614349505 0.6196961028648622 T T T
0.2325507985953102 0.9610319814721583 0.7463696447905562 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9150659566507343 0.2512534723075830 0.5026764801015217 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9195772167191213 0.2522401816426021 0.6311138493874101 T T T
0.7435361920561607 0.4160480000623532 0.6198384952708996 T T T
0.7119164834995413 0.4328381622901779 0.7452119140055979 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9144095675004806 0.7511563954258300 0.5026214308046286 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.9111708250442545 0.7462420732360543 0.6278077475824889 T T T
0.7385481360317832 0.9125897062426108 0.6196829020511958 T T T
0.7555824263106654 0.9088771889225763 0.7465155514051430 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F

0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4125753589479889 0.2518564740080622 0.5311993648199116 T T T
0.2459434540673717 0.4193294079789611 0.5914020253702882 T T T
0.4003374846033333 0.2467358282887201 0.6578424129757481 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4124800828810675 0.7511073008715126 0.5310186496955283 T T T
0.2454101476620145 0.9182417262312170 0.5912267403678929 T T T
0.4060678734120969 0.7522759683057335 0.6599853406939765 T T T
0.2356656828738550 0.9250301336075546 0.7180788356101714 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.9136857134413704 0.2515572181474541 0.5311865345904231 T T T
0.7450259605564957 0.4170807439162054 0.5913640911621644 T T T
0.9163549253865113 0.2493141906828233 0.6596515736635254 T T T
0.7442600110491487 0.4179941375425301 0.7172118716003600 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.9128518326611755 0.7516367171432384 0.5311424200484242 T T T
0.7443894714941814 0.9177395633366017 0.5912299518765912 T T T

0.9120498874484232	0.7512170356765477	0.6563107729383308	T	T	T
0.7536910298337436	0.9219740184510113	0.7181018432751977	T	T	T
0.2502648843871021	0.4183274670864042	0.7211903452108422	T	T	T
0.3083588240593204	0.3753446560479103	0.7563856016699385	T	T	T
0.2274974974820803	0.1947525170029493	0.7811364238513455	T	T	T
0.4968678892131785	0.4707337021123336	0.7796276883086745	T	T	T

(3) *OCNHNH adsorbed on β -Fe@Ni(OH)₂

Fe Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Fe Ni H O C N

1 15 33 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0814796660396708	0.0719174946388313	0.6918855137780422	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0825189277266858	0.0776462411835625	0.5615523849977945	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.0820758722563699	0.5776219716738270	0.5615100912207357	T	T	T
0.0823270879715813	0.5735819108988528	0.6873821183221686	T	T	T
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F

0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.5823887775820121 0.0782975925303906 0.5614864815732393 T T T
0.5880680827334560 0.0730963501148403 0.6896671499776105 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.5820932355675696 0.5779987906268002 0.5614786391980993 T T T
0.5908391310891749 0.5759217474451866 0.6899360620777891 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4158934628079938 0.2476073677005911 0.5029490228445934 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.4082018070837514 0.2441240207988120 0.6319333627885723 T T T
0.2534914867587623 0.4193117164211130 0.6200372694738264 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4151157540260313 0.7467730546701165 0.5028026791175113 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4119507716656269 0.7435627613837775 0.6306764475723377 T T T
0.2488779783639295 0.9126630732306352 0.6200049519226307 T T T
0.2493375291165469 0.8926082289048779 0.7471884088972499 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9166274885589529 0.2464113637380046 0.5029713770083859 T T T

0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4932780595211170	F	F	F
0.9284997727900844	0.2267131083156032	0.6299957060648587	T	T	T
0.7535124294329353	0.4057053906950602	0.6202118873215889	T	T	T
0.8083491289308491	0.3943714368761094	0.7434474789970636	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2412107666657235	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.3739663535723068	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3605224726145337	F	F	F
0.9158911186055989	0.7469055148117467	0.5030177264251990	T	T	T
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4932780595211170	F	F	F
0.9190880835088882	0.7473081852725593	0.6294249829778957	T	T	T
0.7404578958026554	0.9021094058036890	0.6199679243804820	T	T	T
0.6996821426920259	0.8467882739302018	0.7451699355106303	T	T	T
0.0549613350052347	0.4143192928014857	0.8059678842170837	T	T	T
0.4493060847630924	0.6309461102194636	0.8056821744685069	T	T	T
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.4154999053024746	0.2455189490933296	0.5314499181709792	T	T	T
0.2498873670114235	0.4114048769578723	0.5915782038755469	T	T	T
0.4081961315501322	0.2381328371171218	0.6604003940498143	T	T	T
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.4148608651481778	0.7452187663110906	0.5313005487875488	T	T	T

0.2496852070317031	0.9112150161096975	0.5915257147366892	T	T	T
0.4150081912539891	0.7385782064729015	0.6591172577881476	T	T	T
0.2502859815004167	0.9092488531710364	0.7189696228073645	T	T	T
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9162791631587773	0.2449056960652889	0.5314740454221515	T	T	T
0.7493774354941388	0.4100572841450173	0.5917686684661262	T	T	T
0.9255441516694188	0.2331035631066790	0.6584441351548661	T	T	T
0.7598690646974064	0.4047536032410930	0.7163044906499371	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9156261409632726	0.7451432166478573	0.5315190423887408	T	T	T
0.7477343703694024	0.9096428780971619	0.5915170446480403	T	T	T
0.9222410831490204	0.7490304848943310	0.6579084634823429	T	T	T
0.7556506555562661	0.9068534617541206	0.7180982100286607	T	T	T
0.2572845539921961	0.4126267158253066	0.7216208429344008	T	T	T
0.2541832609376147	0.4642132943988643	0.7603070037371329	T	T	T
0.0349370908540418	0.3743139831973349	0.7766220533518289	T	T	T
0.4703240550599027	0.6125434426978199	0.7763344329199537	T	T	T

(4) *OCNN adsorbed on β -Co@Ni(OH)₂

Co Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Co Ni H O C N

1 15 31 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0776035716727948 0.0752845310806540 0.6871231380011632 T T T
0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.0826442405208822 0.0837003377180208 0.5606599656188983 T T T
0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.0827327113621353 0.5833772874148150 0.5607093998576234 T T T
0.0778755461284330 0.5855503877510477 0.6864439301361804 T T T
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.5824575274597680 0.0834038162927183 0.5605628322881882 T T T
0.5826010094688400 0.0824273129493794 0.6887229984519335 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.5823127460405002 0.5834290565405021 0.5606599143134309 T T T
0.5897509165799510 0.5863718691008709 0.6870188938168600 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F

0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4160065924677881 0.2504185683008569 0.5020500503813802 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.4190578048570678 0.2489592888023102 0.6294546203914388 T T T
0.2497414435661829 0.4142927908611369 0.6192485317140024 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4157701054898035 0.7493011108051630 0.5020242210956812 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4126573268387295 0.7472921685341235 0.6295437217875076 T T T
0.2503621456346571 0.9180067599151023 0.6191534443873739 T T T
0.2383562936129481 0.9050379114514063 0.7455630875695949 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9169244995642579 0.2505553353224887 0.5020647564683735 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9173458754550654 0.2525958159587153 0.6294182203873928 T T T
0.7477813267139258 0.4157995458515696 0.6192745632272267 T T T
0.7578604916424202 0.4247247233106571 0.7453835962174052 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9162760673454228 0.7501655000261994 0.5021692964998000 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F

0.9150440552650388	0.7484393127604914	0.6274646423467849	T	T	T
0.7483416596981524	0.9175427534017152	0.6191308266788790	T	T	T
0.7430157112340049	0.9080374905095919	0.7457672981265215	T	T	T
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.4158750355790177	0.2502952077480644	0.5305501630049733	T	T	T
0.2492896692149807	0.4166807816425929	0.5907738239881501	T	T	T
0.4154943064822187	0.2488501114707834	0.6579262518644331	T	T	T
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.4156698954303734	0.7496425965266630	0.5305263269408804	T	T	T
0.2496406869180860	0.9169551036342086	0.5906794610684428	T	T	T
0.4138755757120046	0.7482232206086067	0.6580223011273268	T	T	T
0.2449578463253189	0.9139573214346673	0.7172122179939414	T	T	T
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9163855759676304	0.2504127523486598	0.5305661307688183	T	T	T
0.7489274663136073	0.4163684923097275	0.5907972261658109	T	T	T
0.9186971760638626	0.2495407823365206	0.6579006642534541	T	T	T
0.7518329800027712	0.4171551203588444	0.7169943645501174	T	T	T

0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9160107731289499	0.7500496245281822	0.5306703030986678	T	T	T
0.7487446998334187	0.9169247647074282	0.5906666668856612	T	T	T
0.9170061142435810	0.7503025996449491	0.6559520807698360	T	T	T
0.7483587711321554	0.9153730697157318	0.7173712509962458	T	T	T
0.2537551125809749	0.4141978921056398	0.7191171434242087	T	T	T
0.2610989204811310	0.4264348686495678	0.7568266194330054	T	T	T
0.1253073598792698	0.3516079118038320	0.7887214940981789	T	T	T
0.4100696937521851	0.5236877288162424	0.7868642677903959	T	T	T

(5) *OCNHNH adsorbed on β -Cu@Ni(OH)₂

Cu Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Cu Ni H O C N

1 15 33 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0869182990721575 0.0855703535611179 0.6897639561244239 T T T

0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F

0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.0829310104386810 0.0754288041268566 0.5612504129158540 T T T
0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.0854479121422226 0.5781459298774139 0.5613265727640447 T T T
0.0842841952285918 0.5936655044908153 0.6871010818469673 T T T
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.5844530988698828 0.0788101998864750 0.5613801460761657 T T T
0.5879379612304501 0.0861835745832105 0.6907992065594326 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.5828888109195217 0.5782301354251322 0.5612881947316551 T T T
0.5981326551849225 0.5946620485052476 0.6879466230886995 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4157968461245692 0.2473294283637681 0.5029035523434402 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.3890401908334306 0.2437613405265835 0.6330214892412622 T T T
0.2691694826012842 0.4499735370411846 0.6197332424433513 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4182942776721292 0.7500336749038190 0.5027339331653214 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F

0.4431948938818461 0.7911318341222535 0.6310176837580560 T T T
0.2185530965364276 0.8996948075444844 0.6193188551360383 T T T
0.2080557186196232 0.8800864146794737 0.7448278106974489 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9192857691653962 0.2473047788178420 0.5029356610656949 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9429571067799367 0.2376897160856236 0.6326349645761095 T T T
0.7329591172769988 0.3715019448402972 0.6197101592082952 T T T
0.7813449812118424 0.4438027804898659 0.7452109816888319 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9154094894530767 0.7423091129739525 0.5027805867272875 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.8841565996915016 0.6807447573760990 0.6271593156810845 T T T
0.7734359107228074 0.8978096958997582 0.6192984170213780 T T T
0.7548606476208976 0.8805796133643512 0.7451306619330371 T T T
0.1275990029195060 0.5321281739513837 0.8086268065348399 T T T
0.4764305093287213 0.5522431909426390 0.8097938628198801 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4156701796536563 0.2454794793768076 0.5314066428122922 T T T

0.2534446837830130 0.4159713275204951 0.5917761427669430 T T T
0.4059801018629376 0.2488564110596824 0.6614092229490933 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4185593105682749 0.7473232226507984 0.5312279435378227 T T T
0.2488426936904884 0.9112592120226102 0.5912166061752077 T T T
0.4260423741777569 0.7624182117769419 0.6591587000164542 T T T
0.2435933530124406 0.9280672164427628 0.7174639690174160 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.9193995445773980 0.2452924184981040 0.5314329304256363 T T T
0.7482754256960720 0.4058247382070161 0.5917793933048784 T T T
0.9315850076159683 0.2471379158114753 0.6609588684936949 T T T
0.7547688670124750 0.4191425349970933 0.7171295909079028 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.9153517661538740 0.7409700002758344 0.5312811070743055 T T T
0.7528055159920801 0.9110838015538713 0.5912851455869277 T T T
0.9121348437114165 0.7375782603479133 0.6541949255907661 T T T
0.7725850537220991 0.9289293776136596 0.7176835914381722 T T T

0.2795377345253692	0.4737947346236367	0.7237785959553221	T	T	T
0.2977540261336865	0.5211458744505147	0.7611939474773466	T	T	T
0.1279093371750409	0.5564395895105657	0.7788877368376765	T	T	T
0.5055875129919722	0.5765778944995348	0.7800957041374683	T	T	T

(6) *OCNN adsorbed on β -Mo@Ni(OH)₂

Mo Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Mo Ni H O C N

1 15 31 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0877191060487309	0.0777588381327238	0.6936429203371628	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0808156195213976	0.0713693249114953	0.5615294499373631	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.0809061888841449	0.5717447834906940	0.5610275665433567	T	T	T
0.0870818797723183	0.5632114999568322	0.6929178745784674	T	T	T
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.5816067947803938	0.0724394117389036	0.5613210590295550	T	T	T

0.5787211500791131 0.0633078869779807 0.6891989124334331 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.5812257392922482 0.5721115870240464 0.5613609382987230 T T T
0.5798326667744048 0.5630543416603251 0.6884102328376370 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4139941658596815 0.2432194293513683 0.5029670240634252 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.3856754065816683 0.2126116541515099 0.6293201139766407 T T T
0.2511905125487222 0.4184505733998777 0.6202217585454933 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4169338368593231 0.7436961421531775 0.5025873928676022 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4204138772506230 0.7423866771159249 0.6296416143436854 T T T
0.2442660663203421 0.8889696267722662 0.6195946369643327 T T T
0.2755745337159464 0.8714901759323255 0.7472535091616344 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9163417311796966 0.2422898635513876 0.5027943174466670 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9175812492933945 0.2164117355911807 0.6303764567069711 T T T

0.7482066421726431	0.4006117676063195	0.6198305758230047	T	T	T
0.6867668132138869	0.3721355254961142	0.7450901982287871	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2412107666657235	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.3739663535723068	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3605224726145337	F	F	F
0.9151248972515558	0.7445729570517212	0.5026127149434808	T	T	T
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4932780595211170	F	F	F
0.9182680524910667	0.7471418468383441	0.6300222914131690	T	T	T
0.7393447850363539	0.8960114541963304	0.6197691937832055	T	T	T
0.7150074856632970	0.8829575069607374	0.7481794603511317	T	T	T
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.4140751532540006	0.2401443274255092	0.5314732879135481	T	T	T
0.2471779266972309	0.4047455670921065	0.5918194397415458	T	T	T
0.4035398342040021	0.2143900229956087	0.6576789142426278	T	T	T
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.4154712044783065	0.7402470050492479	0.5310900674118375	T	T	T
0.2476042471707203	0.9023885340867205	0.5911664425478309	T	T	T
0.4236772100602158	0.7420521189501929	0.6580811807675978	T	T	T
0.2586588085317601	0.9077478027945112	0.7196896834658960	T	T	T
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F

0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9151109151756688	0.2395760797252569	0.5313025659033935	T	T	T
0.7476811822347363	0.4044732568047135	0.5913523793172619	T	T	T
0.9044559749149187	0.2190294803970627	0.6587608785969792	T	T	T
0.7335072451702158	0.3856588400418945	0.7173732441709636	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9145278882226119	0.7403110177744141	0.5311034042191118	T	T	T
0.7478306945849283	0.9037923440531076	0.5912846433450549	T	T	T
0.9244697325757093	0.7467849345478955	0.6585065231826508	T	T	T
0.7497054853831493	0.9084580474129470	0.7201285569452217	T	T	T
0.3554140753128173	0.6596340934925895	0.7747915389678245	T	T	T
0.3274784411864788	0.4652253708855053	0.7595652062342607	T	T	T
0.2327963188815493	0.3910614329120782	0.7216182187058082	T	T	T
0.4033697586439024	0.3254385437325316	0.7766328560812265	T	T	T

(7) *OCNNH adsorbed on β -Ru@Ni(OH)₂

Ru Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Ru Ni H O C N

1 15 32 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0849232107723257	0.0825689648057230	0.6871957517175024	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0856709686399904	0.0845630353283947	0.5617582981151052	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.0854488222878119	0.5842570165830067	0.5614097968322703	T	T	T
0.0870369605259901	0.5865672290899403	0.6902277228063809	T	T	T
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.5853685456149640	0.0837775390442058	0.5614516540599849	T	T	T
0.5867216636370485	0.0861069806357169	0.6906449170108567	T	T	T
0.5833332505730411	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.5853854780554395	0.5841037670050940	0.5614185990633742	T	T	T
0.5875080226622333	0.5863703892376274	0.6902605546725156	T	T	T
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.2412107666657235	F	F	F
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.3739663535723068	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.3605224726145337	F	F	F
0.4174583589213208	0.2497940238482419	0.5029613960087470	T	T	T
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.4932780595211170	F	F	F

0.4135748335933672	0.2427117783053390	0.6296265217435111	T	T	T
0.2552862659837257	0.4190057068284169	0.6200508564188256	T	T	T
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.2412107666657235	F	F	F
0.4166667494269589	0.7499997517191233	0.3739663535723068	F	F	F
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.3605224726145337	F	F	F
0.4177884101787060	0.7503375479121783	0.5027782146543477	T	T	T
0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.4932780595211170	F	F	F
0.4170638871736470	0.7480904230737730	0.6304882218354840	T	T	T
0.2526148016505800	0.9116598809977159	0.6201514136809952	T	T	T
0.2281673618767206	0.9542198469739350	0.7453155221889176	T	T	T
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.2412107666657235	F	F	F
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.3739663535723068	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.3605224726145337	F	F	F
0.9181277505428501	0.2501557430488162	0.5029531996075608	T	T	T
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4932780595211170	F	F	F
0.9212112749683655	0.2466122136421008	0.6295851970972232	T	T	T
0.7549099960555504	0.4218791879260139	0.6199501316428995	T	T	T
0.7596775337247255	0.4277311753756869	0.7476901622015549	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2412107666657235	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.3739663535723068	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3605224726145337	F	F	F
0.9178786933438837	0.7511470428683635	0.5029786220890143	T	T	T
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4932780595211170	F	F	F
0.9210891837977434	0.7601280261613748	0.6288111672445051	T	T	T
0.7454039659652092	0.9156922154854537	0.6201503430228081	T	T	T
0.8120319565499451	-0.0470721609099332	0.7452743824961052	T	T	T

0.3025393984358306 0.5269853111697717 0.8095663116282518 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4183921839046031 0.2501923110555380 0.5314553444505936 T T T
0.2528774498776686 0.4181910998523684 0.5915422035897070 T T T
0.4174868250792665 0.2516906629209767 0.6581252004422242 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4183559668537952 0.7503302662455558 0.5312732357728310 T T T
0.2525546983003457 0.9173578754532157 0.5916553783654490 T T T
0.4199781424115151 0.7524534968177692 0.6589441149009044 T T T
0.2464810850662720 0.9242782039693843 0.7172982834261409 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.9187545204168608 0.2505966115580344 0.5314455230564007 T T T
0.7525182080563931 0.4178268728180514 0.5914871235927485 T T T
0.9218630335791821 0.2518430899972077 0.6580968872042950 T T T
0.7544383197273254 0.4198220565042752 0.7192872975552524 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F

0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9187277990367090	0.7514969667680089	0.5314703009984083	T	T	T
0.7518208826168163	0.9177984057083063	0.5916536045655129	T	T	T
0.9191076368492636	0.7512611137381664	0.6572737057610352	T	T	T
0.7646915676662427	0.9236796085410638	0.7172665194480672	T	T	T
0.2450549738080819	0.4020216589409059	0.7184459924499257	T	T	T
0.2268423280380385	0.3680130237912239	0.7595082584819539	T	T	T
0.1130945854416681	0.1383187032546733	0.7702386088366912	T	T	T
0.3239278791326488	0.5675310726491414	0.7802098928489696	T	T	T

(8) *OCNN adsorbed on β -Rh@Ni(OH)₂

Rh Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Rh Ni H O C N

1 15 31 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0759974717081476	0.0835030596437960	0.6865604120676627	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0789870385836337	0.0864088735557338	0.5620498911078173	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F

0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.0792218460255205 0.5864041472323701 0.5617048232394187 T T T
0.0727005273013528 0.5863027913184924 0.6914755148904270 T T T
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.5795121836276876 0.0861376585970683 0.5617188323896074 T T T
0.5740542385077522 0.0866435945873390 0.6909887859828772 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.5787966486444925 0.5859832662809465 0.5617410162458436 T T T
0.5781040685650459 0.5855542936065085 0.6886134568158050 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4128090457302175 0.2505169565419594 0.5033028145409525 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.3932937774237920 0.2393078345714561 0.6293536042789055 T T T
0.2529291672179753 0.4280938711343181 0.6203547375329030 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4146692225121777 0.7517274250565650 0.5031244110345056 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4102647160093089 0.7533653362036893 0.6317926897365781 T T T
0.2439089803425085 0.9101403958339055 0.6205570782556792 T T T
0.2127252097607635 0.9742994389590728 0.7449003938653947 T T T

0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9154928247240725 0.2516141067660523 0.5031840077526880 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9207174902689100 0.2546934618108971 0.6304656514307876 T T T
0.7425080589514144 0.4192316884961442 0.6201579677934353 T T T
0.7050217526210901 0.4343940724462433 0.7449443514088908 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9146143877949982 0.7530333957963403 0.5033150136421725 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.9117197310142067 0.7646237982454903 0.6292232484212901 T T T
0.7383396096893219 0.9210809183394357 0.6203786003409664 T T T
0.7915648670972486 0.9300269719058855 0.7449526830547379 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4120449779779999 0.2518469414198316 0.5318045744482826 T T T
0.2454984431940521 0.4204983846415060 0.5918856000359276 T T T
0.4065051699212123 0.2544836301453582 0.6577587602174536 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F

0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.4132284013277976	0.7527113430365957	0.5316144742685086	T	T	T
0.2452797014327311	0.9187644030586793	0.5921024508393986	T	T	T
0.4111527423784020	0.7501530947403287	0.6602256357870305	T	T	T
0.2337154625876205	0.9233493638513272	0.7169130564236401	T	T	T
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9135991344479606	0.2529038123850527	0.5316821869666759	T	T	T
0.7449443533479007	0.4192000223151354	0.5917122346363398	T	T	T
0.9108956271724203	0.2533741758431244	0.6589264080492920	T	T	T
0.7377196188714983	0.4207036329129138	0.7170566833048718	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9128695997829412	0.7533503510798897	0.5318155992249198	T	T	T
0.7450972154087983	0.9201812831346837	0.5919111194749225	T	T	T
0.9050738671705392	0.7524642698667785	0.6576928918391532	T	T	T
0.7569436504816817	0.9191153909450173	0.7167216664273416	T	T	T
0.2428574832890316	0.4022970701586354	0.7169807966316746	T	T	T
0.2838141041955074	0.3507413532642395	0.7561027147469047	T	T	T
0.1534228005689274	0.1428633526910582	0.7731827551002343	T	T	T
0.4730760524538186	0.4932121069457469	0.7762434289489766	T	T	T

(9) *OCNHNH adsorbed on β -Pd@Ni(OH)₂

Pd Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000
-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Pd Ni H O C N

1 15 33 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0719470629539033 0.0744692696601118 0.6873908057053211 T T T
0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.0746207086138802 0.0748531597377960 0.5619478386408576 T T T
0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.0749597754033616 0.5755810910622299 0.5615468987063821 T T T
0.0694232390075900 0.5729536165245587 0.6914657991152116 T T T
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.5753373210272328 0.0749592505976218 0.5616905288056617 T T T
0.5751837511107689 0.0770157343088457 0.6912380358862399 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F

0.5744379915946610 0.5747544459863028 0.5615415211946947 T T T
0.5796374102098595 0.5772656477442696 0.6907304408868165 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4091071097848349 0.2434394968396102 0.5030944686421264 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.3972744928346009 0.2267845308057698 0.6299029253613151 T T T
0.2535869492544024 0.4161675937607768 0.6203498210020946 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4119038296288681 0.7454823345900520 0.5030748008015666 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4047408013954159 0.7397158975813334 0.6325151700354109 T T T
0.2326676031491644 0.8957310290634375 0.6203978272466463 T T T
0.2081291493054244 0.9194167049329144 0.7474856639761571 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9131936022190693 0.2451405758695451 0.5031287404870233 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9227426299148619 0.2583695802358926 0.6298485136911210 T T T
0.7364199886125053 0.4056380760794566 0.6197317125162218 T T T
0.7020245657189239 0.4235479518750094 0.7467446913106511 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F

0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9116609302685261 0.7464407304181800 0.5031182609633668 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.8983112668169823 0.7312285005576346 0.6281812659218508 T T T
0.7421417281174996 0.9128774508727143 0.6204414341957286 T T T
0.8190317891917764 0.9818072826625530 0.7452653788144925 T T T
0.0581049164243173 0.1480173195646938 0.8058098821798260 T T T
0.4461847327917126 0.4054168820239784 0.8092775779572620 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4076021715482029 0.2413125072795589 0.5315910353574452 T T T
0.2420187222934170 0.4089351785670321 0.5919226789031442 T T T
0.4098799625898712 0.2409144486252373 0.6583457874856842 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4090425324235774 0.7426734002654680 0.5315689699774994 T T T
0.2407054973957338 0.9070997045796436 0.5919538286046380 T T T
0.4025699847084701 0.7367656329300002 0.6609760107349453 T T T
0.2350843324908931 0.9041655429175153 0.7198819800514553 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F

0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9104041322797467	0.2430044225079445	0.5316313028609517	T	T	T
0.7397828123481843	0.4065166968497096	0.5912164753648153	T	T	T
0.9071065255375577	0.2514849485163327	0.6582789167121794	T	T	T
0.7412032613107052	0.4093740406008513	0.7193001187544419	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9087454286437391	0.7430483853455520	0.5316069969421852	T	T	T
0.7413704200669100	0.9084658949409785	0.5919600607502249	T	T	T
0.8987033024298834	0.7222821958387274	0.6566390922153128	T	T	T
0.7477471723965673	0.9174816302122456	0.7185069836052559	T	T	T
0.2542872211165290	0.4119835968827357	0.7244853927804672	T	T	T
0.2545545049891919	0.3487177376028763	0.7623749670310775	T	T	T
0.0419221309432532	0.1745709739835416	0.7766331170542987	T	T	T
0.4706274378370023	0.4522559437987499	0.7801766288981759	T	T	T

(10) *OCNHNH adsorbed on β -Ir@Ni(OH)₂

Ir Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Ir Ni H O C N

1 15 33 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0773400588013167	0.0740356208906695	0.6851939216865709	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0781266675314249	0.0756654617260662	0.5622950599791547	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.0786201899789373	0.5758486175405850	0.5620425946671701	T	T	T
0.0778628645087300	0.5783938285089861	0.6913995621301647	T	T	T
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.5783319039898754	0.0755489882049778	0.5619360580578839	T	T	T
0.5757715523254253	0.0750973709850525	0.6914216811939239	T	T	T
0.5833332505730411	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.5833332505730411	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.5780682543888752	0.5757773567067707	0.5620535612699225	T	T	T
0.5787340545919596	0.5783767807807425	0.6907805918057319	T	T	T
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.2412107666657235	F	F	F
0.4166667494269589	0.2499997482808780	0.3739663535723068	F	F	F
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.3605224726145337	F	F	F
0.4132500613222356	0.2452283648870496	0.5034823426058359	T	T	T
0.2499997482808780	0.4166667494269589	0.4932780595211170	F	F	F
0.4060985882377681	0.2396496071387096	0.6291232237839010	T	T	T
0.2445059533285633	0.4093400796257423	0.6208393648994659	T	T	T

0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4135174655082296 0.7455136159974799 0.5034300006870340 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4091705670029488 0.7390719157554917 0.6317746038972055 T T T
0.2453454870348447 0.9054792467087898 0.6205920447863084 T T T
0.2028077195235334 0.9709366153459732 0.7439820346497965 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9144444380780591 0.2464717922953271 0.5035046799356286 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9133487757171367 0.2458440282742160 0.6297779290398515 T T T
0.7411815676724651 0.4055508648798502 0.6203507454789577 T T T
0.7390148033165829 0.4191495999092193 0.7475335077687959 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9134835727261473 0.7452165490668677 0.5034541012380347 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.9120463880697288 0.7452863896842200 0.6286139624062629 T T T
0.7431344315446031 0.9102823395706202 0.6207111838974433 T T T
0.8300556293324938 0.9543944025948975 0.7440505280432195 T T T
0.1363100297096476 0.1163523268040386 0.8005598361414098 T T T
0.3699508878258079 0.5440103713325212 0.8058911046347303 T T T

0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4115819255906237 0.2429606368024288 0.5319813418286299 T T T
0.2449767703861988 0.4084042736668206 0.5923268350396106 T T T
0.4154780072871305 0.2447224602846194 0.6576119736713472 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4122093888968620 0.7430114073290145 0.5319337811732834 T T T
0.2443841205241384 0.9078983666240260 0.5920790242466399 T T T
0.4095020391983002 0.7409375544368909 0.6602055124662245 T T T
0.2343332182047275 0.9168919401214826 0.7167430966031927 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.9132019680429128 0.2439628540544411 0.5320087666916457 T T T
0.7444132934682860 0.4082398069128957 0.5918937463998045 T T T
0.9095618064471495 0.2470608181231418 0.6582981265804170 T T T
0.7436779849705495 0.4110979439480772 0.7191777151189368 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F

0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9115394696134437	0.7433618155288166	0.5319491214988283	T	T	T
0.7444027346149947	0.9090402718751749	0.5921998786934561	T	T	T
0.9098702088327046	0.7396755877344736	0.6571362613626354	T	T	T
0.7638684043700855	0.9191009178974486	0.7166673648251797	T	T	T
0.2325072513958593	0.3825600034323970	0.7177792719474593	T	T	T
0.2418715563142023	0.3579208381560355	0.7593046478309771	T	T	T
0.1217374628377045	0.1250012048379679	0.7708803870228106	T	T	T
0.3674222911548380	0.5670525325914885	0.7762223845856919	T	T	T

(11) *OCNHNH adsorbed on β -Pt@Ni(OH)₂

Pt Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Pt Ni H O C N

1 15 33 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0658141001638736	0.0885570225973990	0.6864044263683652	T	T	T
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.0833332471348029	0.4336222065467084	F	F	F
0.0751697300175487	0.0819010044155842	0.5617219524580468	T	T	T
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.3008666196401251	F	F	F
0.0833332471348029	0.5833332505730411	0.4336222065467084	F	F	F
0.0757315585807624	0.5829658689992765	0.5611837563557528	T	T	T

0.0631339040621481 0.5834873615705778 0.6903965429237833 T T T
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F
0.5759764767566323 0.0820090564326390 0.5614621786133680 T T T
0.5685586555724014 0.0883623143308138 0.6900443924174079 T T T
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F
0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F
0.5752084769626056 0.5818139776486904 0.5612197717446761 T T T
0.5730466150991652 0.5902905657457514 0.6909112563396236 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4096710468760997 0.2473515762805721 0.5028685402403033 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.3921261867324868 0.2355247729837759 0.6294136978981932 T T T
0.2553568410325643 0.4282261972772077 0.6200584569565584 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4131562415230322 0.7505782785419562 0.5029308881223811 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.4045911754827514 0.7528262052769248 0.6321823065081931 T T T
0.2299252917114737 0.9022825584452558 0.6202415798739511 T T T
0.2039224308232407 0.9250740058912523 0.7463791953577088 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F

0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9140737828839354 0.2490677451182112 0.5029310888809103 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9272822466730245 0.2753637486632032 0.6291158647809867 T T T
0.7341882475050320 0.4126280177129745 0.6192661531254526 T T T
0.7008731407510279 0.4238794156535764 0.7459184463710379 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.9115407887765180 0.7504718198492236 0.5028691570018684 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.8932490867741472 0.7347560121912015 0.6282828805877200 T T T
0.7465796365282040 0.9235729763890480 0.6204774581872985 T T T
0.8084789203564051 0.0197563260673816 0.7442924346128427 T T T
0.0087539736704682 0.2045539336855184 0.8044422648846036 T T T
0.4043809953109731 0.3986820548493522 0.8085849698031319 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4081052407861549 0.2476971639512507 0.5313687505807060 T T T
0.2422995429866027 0.4171580939877189 0.5916797126173527 T T T
0.4058085782179115 0.2529278841783467 0.6578327347615487 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F

0.2499997482808780	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.4102257485878891	0.7494865665223295	0.5314375116475789	T	T	T
0.2404395878743161	0.9149078338068680	0.5918398899732683	T	T	T
0.3929998859931171	0.7460744255746062	0.6606014664899408	T	T	T
0.2205747779206396	0.9095842722351638	0.7184007122679157	T	T	T
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.2499997482808780	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.4166667494269589	0.4642933005885368	F	F	F
0.9112580997112399	0.2493759359039490	0.5314417612150734	T	T	T
0.7392108808322569	0.4134736882090340	0.5907771160684467	T	T	T
0.9088839023412842	0.2720590054252022	0.6575168743746813	T	T	T
0.7362147361386691	0.4221856298273462	0.7180118856753523	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9096640526913542	0.7495284776329030	0.5313828907413868	T	T	T
0.7420787220252195	0.9162816973151767	0.5920282045414044	T	T	T
0.8921389902595883	0.7219065955559018	0.6567072626911511	T	T	T
0.7418115506658181	0.9362432037414604	0.7180492351731751	T	T	T
0.2447164718550581	0.4439045929156313	0.7231888526926664	T	T	T
0.2289232260086650	0.3770842483019680	0.7612982260816188	T	T	T
0.0036498607149115	0.2315009877848564	0.7749405834141925	T	T	T
0.4389341681887445	0.4484411016831262	0.7796382660906678	T	T	T

(12) *OCNNH adsorbed on β -Au@Ni(OH)₂

Au Ni H O C N

1.0000000000000000

6.3986245000000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000

-3.1993122500000006 5.5413713662775024 0.0000000000000000

0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.1167642999999998

Au Ni H O C N

1 15 32 32 1 2

Selective dynamics

Direct

0.0654456974812326 0.0766492768992123 0.6883459282564761 T T T

0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F

0.0833332471348029 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F

0.0823739462183575 0.0855497741915469 0.5616642303097382 T T T

0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F

0.0833332471348029 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F

0.0829470404225005 0.5855402080735275 0.5616108998824614 T T T

0.0658443482474539 0.5821015144455561 0.6909801530545782 T T T

0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.3008666196401251 F F F

0.5833332505730411 0.0833332471348029 0.4336222065467084 F F F

0.5839378792892141 0.0883474724683723 0.5607117274250684 T T T

0.5649092871598149 0.0789511440005001 0.6919633088638372 T T T

0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.3008666196401251 F F F

0.5833332505730411 0.5833332505730411 0.4336222065467084 F F F

0.5840724708660439 0.5832599138982807 0.5608377043813891 T T T

0.5693765241692227 0.5834464386799684 0.6907947640683826 T T T

0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.4119289288259440 0.2493473071214345 0.5023105838632984 T T T
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.3718072805143974 0.2312649124085570 0.6355596210906209 T T T
0.2549610260809174 0.4236695518861781 0.6201315942407060 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F
0.4147803580579865 0.7497873377794612 0.5030734360752435 T T T
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.3846282241087844 0.7327873564775407 0.6314029389171517 T T T
0.2609000611651521 0.9195275785207663 0.6200705361425772 T T T
0.2206599929590470 0.9765947651491131 0.7457564482462619 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3605224726145337 F F F
0.9194443187602670 0.2502142577973695 0.5027523116949497 T T T
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4932780595211170 F F F
0.9060850549193933 0.2530878837255490 0.6321729977282412 T T T
0.6910978411608194 0.3908489529783465 0.6177310160389450 T T T
0.7576631681964862 0.4347861002803582 0.7486919174128017 T T T
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.2412107666657235 F F F
0.9166667528651971 0.7499997517191233 0.3739663535723068 F F F
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.3605224726145337 F F F

0.9192691649912104 0.7554649487935949 0.5028573835186747 T T T
0.7499997517191233 0.9166667528651971 0.4932780595211170 F F F
0.9093513419232337 0.7492259017079039 0.6303119732209773 T T T
0.7252357130390022 0.9089943681429273 0.6202237143634334 T T T
0.5723509814578249 0.8282157613370303 0.7506851452635762 T T T
0.2052267436930401 0.1812242427763155 0.8058224738272766 T T T
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.4134403374600283 0.2507272754579561 0.5308181104757138 T T T
0.2499128372326178 0.4176406776472771 0.5917319592547828 T T T
0.5048609903241885 0.2993934839257176 0.6540314603632584 T T T
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.2701955255983037 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.3315377136819535 F F F
0.4166667494269589 0.7499997517191233 0.4029511125048870 F F F
0.2499997482808780 0.9166667528651971 0.4642933005885368 F F F
0.4167011405943420 0.7515865660036222 0.5315662627579627 T T T
0.2506807513820914 0.9210311404339242 0.5917179751902537 T T T
0.3877366363899533 0.7374356638743028 0.6599099850772447 T T T
0.2243823280773705 0.9122027549431920 0.7186701901740739 T T T
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.2701955255983037 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.3315377136819535 F F F
0.9166667528651971 0.2499997482808780 0.4029511125048870 F F F
0.7499997517191233 0.4166667494269589 0.4642933005885368 F F F
0.9176931966869013 0.2512336844089492 0.5312492390159582 T T T

0.7524496033352728	0.4198012574406408	0.5901940432523858	T	T	T
0.9103560733616248	0.2568032207689575	0.6608548272361324	T	T	T
0.7469151448080905	0.4239814773970640	0.7203631057707337	T	T	T
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.2701955255983037	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.3315377136819535	F	F	F
0.9166667528651971	0.7499997517191233	0.4029511125048870	F	F	F
0.7499997517191233	0.9166667528651971	0.4642933005885368	F	F	F
0.9176651590952505	0.7543926553779173	0.5313578748596339	T	T	T
0.7454144202870168	0.9170441659529284	0.5919998401686893	T	T	T
0.9098488230149911	0.7445444598488373	0.6590069973143109	T	T	T
0.6607511201640982	0.8763839560264783	0.7258848559118461	T	T	T
0.2191272217109767	0.4017637895860031	0.7211797161196326	T	T	T
0.2244664974517652	0.3806851224612968	0.7614084942367831	T	T	T
0.2122180975423951	0.1820569183647570	0.7758388456192123	T	T	T
0.2531747102628950	0.5692377015771020	0.7818168602033717	T	T	T