Supplementary material (ESI) for Journal of Materials Chemistry

Supplementary information

Corrugated Layered Heptazine-based Carbon Nitride: The Lowest Energy Modifications of C_3N_4 Ground State

J. Gracia*, P. Kroll

Department of Chemistry and Biochemistry, The University of Texas at Arlington, Arlington, TX 76019-0065, USA.

* Institut fur Anorganische Chemie, Rheinisch-Westfalische Technische Hochschule (RWTH), Aachen, Professor-Pirlet-Strasse 1, 52056, Aachen, Germany.

*corresponding author: Eindhoven University of Technology, Schuit Institute of Catalysis. Department of Inorganic Chemistry and Catalysis. P.O. Box 513 5600 MB Eindhoven, The Netherlands; (email) j.m.graciabudria@tue.nl; (phone) +31 40 247 4924; (fax) +31 40 247 3481

Supplementary material (ESI) for Journal of Materials Chemistry

Crystallographic information as extracted from computation

g-h-Heptazine.aiMD

Crystal data

*P*1	1
a = 13.30701 Å	α = 90.00003°
b = 23.74339 Å	β = 90.00008°
c = 7.91702 Å	γ = 89.99989°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.16719	0.11776	0.00828	1.000*
C2	0.66719	0.11776	0.99171	1.000*
C3	0.16719	0.61776	0.00828	1.000*
C4	0.66719	0.61776	0.99171	1.000*
C5	0.42443	0.36274	0.86122	1.000*
C6	0.92443	0.36274	0.13877	1.000*
C7	0.42443	0.86274	0.86122	1.000*
C8	0.92443	0.86274	0.13877	1.000*
C9	0.32561	0.11275	0.86125	1.000*
C10	0.82561	0.11275	0.13875	1.000*
C11	0.32561	0.61275	0.86125	1.000*
C12	0.82561	0.61275	0.13875	1.000*
C13	0.08283	0.36776	0.99168	1.000*
C14	0.58283	0.36776	0.00832	1.000*
C15	0.08283	0.86776	0.99168	1.000*
C16	0.58283	0.86776	0.00832	1.000*
C17	0.16720	0.38224	0.50833	1.000*
C18	0.66720	0.38224	0.49167	1.000*

C19	0.16720	0.88224	0.50833	1.000*
C20	0.66720	0.88224	0.49167	1.000*
C21	0.42441	0.13725	0.36130	1.000*
C22	0.92441	0.13725	0.63870	1.000*
C23	0.42441	0.63725	0.36130	1.000*
C24	0.92441	0.63725	0.63870	1.000*
C25	0.32563	0.38725	0.36132	1.000*
C26	0.82563	0.38725	0.63868	1.000*
C27	0.32563	0.88725	0.36132	1.000*
C28	0.82563	0.88725	0.63868	1.000*
C29	0.08282	0.13224	0.49164	1.000*
C30	0.58282	0.13224	0.50836	1.000*
C31	0.08282	0.63224	0.49164	1.000*
C32	0.58282	0.63224	0.50836	1.000*
C33	0.09995	0.03558	0.09878	1.000*
C34	0.59995	0.03558	0.90122	1.000*
C35	0.09995	0.53558	0.09878	1.000*
C36	0.59995	0.53558	0.90122	1.000*
C37	0.33429	0.28304	0.89537	1.000*
C38	0.83429	0.28304	0.10463	1.000*
C39	0.33429	0.78304	0.89537	1.000*
C40	0.83429	0.78304	0.10463	1.000*
C41	0.41574	0.03304	0.89537	1.000*
C42	0.91574	0.03304	0.10462	1.000*
C43	0.41574	0.53304	0.89537	1.000*
C44	0.91574	0.53304	0.10462	1.000*
C45	0.15007	0.28558	0.90119	1.000*
C46	0.65007	0.28558	0.09881	1.000*
C47	0.15007	0.78558	0.90119	1.000*
C48	0.65007	0.78558	0.09881	1.000*
C49	0.09997	0.46442	0.59882	1.000*

C50	0.59997	0.46442	0.40118	1.000*
C51	0.09997	0.96442	0.59882	1.000*
C52	0.59997	0.96442	0.40118	1.000*
C53	0.33427	0.21695	0.39543	1.000*
C54	0.83427	0.21695	0.60457	1.000*
C55	0.33427	0.71695	0.39543	1.000*
C56	0.83427	0.71695	0.60457	1.000*
C57	0.41575	0.46696	0.39544	1.000*
C58	0.91575	0.46696	0.60456	1.000*
C59	0.41575	0.96696	0.39544	1.000*
C60	0.91575	0.96696	0.60456	1.000*
C61	0.15005	0.21442	0.40115	1.000*
C62	0.65005	0.21442	0.59884	1.000*
C63	0.15005	0.71442	0.40115	1.000*
C64	0.65005	0.71442	0.59884	1.000*
C65	0.26427	0.03291	0.02688	1.000*
C66	0.76427	0.03291	0.97311	1.000*
C67	0.26427	0.53291	0.02689	1.000*
C68	0.76427	0.53291	0.97311	1.000*
C69	0.98574	0.28291	0.97309	1.000*
C70	0.48574	0.28291	0.02691	1.000*
C71	0.98574	0.78291	0.97309	1.000*
C72	0.48574	0.78291	0.02691	1.000*
C73	0.26430	0.46708	0.52698	1.000*
C74	0.76430	0.46708	0.47301	1.000*
C75	0.26430	0.96708	0.52698	1.000*
C76	0.76430	0.96708	0.47301	1.000*
C77	0.98572	0.21708	0.47300	1.000*
C78	0.48572	0.21708	0.52699	1.000*
C79	0.98572	0.71708	0.47300	1.000*
C80	0.48572	0.71708	0.52699	1.000*

C81	0.24051	0.19474	0.89571	1.000*
C82	0.74051	0.19474	0.10428	1.000*
C83	0.24051	0.69474	0.89571	1.000*
C84	0.74051	0.69474	0.10428	1.000*
C85	0.00951	0.44474	0.10428	1.000*
C86	0.50951	0.44474	0.89572	1.000*
C87	0.00951	0.94474	0.10428	1.000*
C88	0.50951	0.94474	0.89572	1.000*
C89	0.24051	0.30526	0.39574	1.000*
C90	0.74051	0.30526	0.60426	1.000*
C91	0.24051	0.80526	0.39574	1.000*
C92	0.74051	0.80526	0.60426	1.000*
C93	0.00952	0.05526	0.60425	1.000*
C94	0.50952	0.05526	0.39575	1.000*
C95	0.00952	0.55526	0.60425	1.000*
C96	0.50952	0.55526	0.39575	1.000*
N1	0.08759	0.08987	0.06253	1.000*
N2	0.58759	0.08987	0.93747	1.000*
N3	0.08759	0.58987	0.06253	1.000*
N4	0.58759	0.58987	0.93747	1.000*
N5	0.34581	0.33171	0.81382	1.000*
N6	0.84581	0.33171	0.18618	1.000*
N7	0.34581	0.83171	0.81382	1.000*
N8	0.84581	0.83171	0.18618	1.000*
N9	0.40423	0.08172	0.81385	1.000*
N10	0.90423	0.08172	0.18614	1.000*
N11	0.40423	0.58172	0.81385	1.000*
N12	0.90423	0.58172	0.18614	1.000*
N13	0.16242	0.33987	0.93741	1.000*
N14	0.66242	0.33987	0.06258	1.000*
N15	0.16242	0.83987	0.93741	1.000*

N16	0.66242	0.83987	0.06258	1.000*
N17	0.08761	0.41013	0.56256	1.000*
N18	0.58761	0.41013	0.43744	1.000*
N19	0.08761	0.91013	0.56256	1.000*
N20	0.58761	0.91013	0.43744	1.000*
N21	0.34580	0.16828	0.31388	1.000*
N22	0.84580	0.16828	0.68611	1.000*
N23	0.34580	0.66828	0.31388	1.000*
N24	0.84580	0.66828	0.68611	1.000*
N25	0.40424	0.41828	0.31391	1.000*
N26	0.90424	0.41828	0.68608	1.000*
N27	0.40424	0.91828	0.31391	1.000*
N28	0.90424	0.91828	0.68608	1.000*
N29	0.16241	0.16013	0.43739	1.000*
N30	0.66241	0.16013	0.56261	1.000*
N31	0.16241	0.66013	0.43739	1.000*
N32	0.66241	0.66013	0.56261	1.000*
N33	0.16759	0.17334	0.98967	1.000*
N34	0.66760	0.17334	0.01033	1.000*
N35	0.16760	0.67334	0.98967	1.000*
N36	0.66760	0.67334	0.01033	1.000*
N37	0.43583	0.41674	0.81642	1.000*
N38	0.93583	0.41674	0.18358	1.000*
N39	0.43583	0.91674	0.81642	1.000*
N40	0.93583	0.91674	0.18358	1.000*
N41	0.31420	0.16674	0.81644	1.000*
N42	0.81421	0.16674	0.18355	1.000*
N43	0.31420	0.66674	0.81644	1.000*
N44	0.81420	0.66674	0.18355	1.000*
N45	0.08241	0.42334	0.01028	1.000*
N46	0.58241	0.42334	0.98971	1.000*

N47	0.08241	0.92334	0.01029	1.000*
N48	0.58241	0.92334	0.98971	1.000*
N49	0.16759	0.32666	0.48968	1.000*
N50	0.66759	0.32666	0.51031	1.000*
N51	0.16759	0.82666	0.48968	1.000*
N52	0.66759	0.82666	0.51031	1.000*
N53	0.43582	0.08326	0.31648	1.000*
N54	0.93582	0.08326	0.68352	1.000*
N55	0.43582	0.58326	0.31648	1.000*
N56	0.93582	0.58326	0.68352	1.000*
N57	0.31421	0.33326	0.31650	1.000*
N58	0.81422	0.33326	0.68350	1.000*
N59	0.31421	0.83326	0.31650	1.000*
N60	0.81422	0.83326	0.68350	1.000*
N61	0.08242	0.07666	0.51028	1.000*
N62	0.58242	0.07666	0.48972	1.000*
N63	0.08242	0.57666	0.51028	1.000*
N64	0.58242	0.57666	0.48972	1.000*
N65	0.06166	0.25875	0.89061	1.000*
N66	0.56166	0.25875	0.10938	1.000*
N67	0.06166	0.75875	0.89061	1.000*
N68	0.56166	0.75875	0.10938	1.000*
N69	0.35210	0.50739	0.99994	1.000*
N70	0.85211	0.50739	0.00005	1.000*
N71	0.35210	0.00739	0.99994	1.000*
N72	0.85210	0.00739	0.00005	1.000*
N73	0.39791	0.25740	0.99997	1.000*
N74	0.89791	0.25740	0.00003	1.000*
N75	0.39791	0.75740	0.99997	1.000*
N76	0.89791	0.75740	0.00003	1.000*
N77	0.18836	0.50875	0.10935	1.000*

N78	0.68836	0.50875	0.89064	1.000*
N79	0.18836	0.00875	0.10935	1.000*
N80	0.68836	0.00875	0.89064	1.000*
N81	0.06164	0.24125	0.39055	1.000*
N82	0.56164	0.24125	0.60945	1.000*
N83	0.06164	0.74125	0.39055	1.000*
N84	0.56164	0.74125	0.60945	1.000*
N85	0.35213	0.99260	0.50003	1.000*
N86	0.85213	0.99260	0.49996	1.000*
N87	0.35213	0.49260	0.50003	1.000*
N88	0.85213	0.49260	0.49996	1.000*
N89	0.39789	0.24259	0.50005	1.000*
N90	0.89788	0.24259	0.49995	1.000*
N91	0.39789	0.74259	0.50005	1.000*
N92	0.89788	0.74259	0.49995	1.000*
N93	0.18838	0.99125	0.60943	1.000*
N94	0.68838	0.99125	0.39056	1.000*
N95	0.18838	0.49125	0.60943	1.000*
N96	0.68838	0.49125	0.39056	1.000*
N97	0.23960	0.25450	0.87676	1.000*
N98	0.73960	0.25450	0.12323	1.000*
N99	0.23960	0.75450	0.87676	1.000*
N100	0.73960	0.75450	0.12323	1.000*
N101	0.01042	0.50450	0.12322	1.000*
N102	0.51042	0.50450	0.87677	1.000*
N103	0.01042	0.00450	0.12322	1.000*
N104	0.51042	0.00450	0.87677	1.000*
N105	0.23959	0.24550	0.37678	1.000*
N106	0.73959	0.24550	0.62322	1.000*
N107	0.23959	0.74550	0.37678	1.000*
N108	0.73959	0.74550	0.62322	1.000*

N109	0.01043	0.99550	0.62321	1.000*
N110	0.51043	0.99550	0.37679	1.000*
N111	0.01043	0.49550	0.62321	1.000*
N112	0.51043	0.49550	0.37679	1.000*
N113	0.25276	0.08769	0.96426	1.000*
N114	0.75276	0.08769	0.03574	1.000*
N115	0.25276	0.58769	0.96426	1.000*
N116	0.75276	0.58769	0.03574	1.000*
N117	0.99727	0.33769	0.03573	1.000*
N118	0.49727	0.33769	0.96427	1.000*
N119	0.99727	0.83769	0.03573	1.000*
N120	0.49727	0.83769	0.96427	1.000*
N121	0.25278	0.41231	0.46435	1.000*
N122	0.75278	0.41231	0.53565	1.000*
N123	0.25278	0.91231	0.46435	1.000*
N124	0.75278	0.91231	0.53565	1.000*
N125	0.99725	0.16231	0.53565	1.000*
N126	0.49725	0.16231	0.46435	1.000*
N127	0.99725	0.66231	0.53565	1.000*
N128	0.49725	0.66231	0.46435	1.000*

g-m-Heptazine.aiMD

Crystal data

P1	1
a = 13.94903 Å	α = 90.67235°
b = 24.34680 Å	β = 90.03527°
c = 7.31303 Å	γ = 90.05043°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	y	z	B_{iso}*/B_{eq}

C1	0.00175	0.99479	0.02721	1.000*
C2	0.00168	0.49478	0.02660	1.000*
C3	0.50175	0.99479	0.02721	1.000*
C4	0.50168	0.49478	0.02661	1.000*
C5	0.50095	0.16439	0.93849	1.000*
C6	0.50097	0.66439	0.93836	1.000*
C7	0.00095	0.16439	0.93849	1.000*
C8	0.00097	0.66439	0.93836	1.000*
C9	0.16627	0.49297	0.96275	1.000*
C10	0.16634	0.99295	0.96325	1.000*
C11	0.66627	0.49297	0.96275	1.000*
C12	0.66634	0.99295	0.96325	1.000*
C13	0.33412	0.33701	0.00570	1.000*
C14	0.33427	0.83702	0.00617	1.000*
C15	0.83412	0.33701	0.00569	1.000*
C16	0.83427	0.83702	0.00617	1.000*
C17	0.32822	0.00065	0.99752	1.000*
C18	0.32814	0.50065	0.99704	1.000*
C19	0.82822	0.00065	0.99752	1.000*
C20	0.82814	0.50065	0.99703	1.000*
C21	0.34058	0.16592	0.06757	1.000*
C22	0.34061	0.66591	0.06748	1.000*
C23	0.84058	0.16592	0.06757	1.000*
C24	0.84061	0.66591	0.06748	1.000*
C25	0.99911	0.41283	0.56292	1.000*
C26	0.99914	0.91281	0.56340	1.000*
C27	0.49911	0.41283	0.56292	1.000*
C28	0.49914	0.91281	0.56340	1.000*
C29	0.49841	0.08239	0.47769	1.000*
C30	0.49838	0.58240	0.47693	1.000*
C31	0.99841	0.08239	0.47769	1.000*

C32	0.99838	0.58240	0.47693	1.000*
C33	0.15940	0.41149	0.43353	1.000*
C34	0.15941	0.91151	0.43392	1.000*
C35	0.65940	0.41149	0.43353	1.000*
C36	0.65941	0.91151	0.43392	1.000*
C37	0.17197	0.07663	0.50761	1.000*
C38	0.17194	0.57663	0.50656	1.000*
C39	0.67197	0.07663	0.50761	1.000*
C40	0.67194	0.57663	0.50656	1.000*
C41	0.16590	0.24027	0.49465	1.000*
C42	0.16591	0.74028	0.49462	1.000*
C43	0.66590	0.24027	0.49465	1.000*
C44	0.66591	0.74028	0.49462	1.000*
C45	0.33389	0.08433	0.54113	1.000*
C46	0.33384	0.58432	0.54021	1.000*
C47	0.83389	0.08433	0.54113	1.000*
C48	0.83384	0.58432	0.54021	1.000*
C49	0.07474	0.32654	0.50038	1.000*
C50	0.07475	0.82655	0.50052	1.000*
C51	0.57474	0.32654	0.50038	1.000*
C52	0.57475	0.82655	0.50052	1.000*
C53	0.08118	0.49024	0.49822	1.000*
C54	0.08122	0.99024	0.49907	1.000*
C55	0.58118	0.49024	0.49823	1.000*
C56	0.58122	0.99024	0.49907	1.000*
C57	0.08722	0.16111	0.43631	1.000*
C58	0.08718	0.66115	0.43604	1.000*
C59	0.58722	0.16111	0.43631	1.000*
C60	0.58718	0.66115	0.43604	1.000*
C61	0.24814	0.33259	0.46936	1.000*
C62	0.24816	0.83261	0.46949	1.000*

C63	0.74814	0.33259	0.46936	1.000*
C64	0.74816	0.83261	0.46949	1.000*
C65	0.24787	0.16329	0.56429	1.000*
C66	0.24783	0.66326	0.56401	1.000*
C67	0.74787	0.16329	0.56429	1.000*
C68	0.74784	0.66326	0.56401	1.000*
C69	0.41275	0.33413	0.53318	1.000*
C70	0.41276	0.83413	0.53334	1.000*
C71	0.91275	0.33413	0.53318	1.000*
C72	0.91276	0.83413	0.53334	1.000*
C73	0.08720	0.24322	0.96665	1.000*
C74	0.08726	0.74321	0.96662	1.000*
C75	0.58720	0.24322	0.96665	1.000*
C76	0.58726	0.74321	0.96662	1.000*
C77	0.25180	0.24474	0.03040	1.000*
C78	0.25186	0.74475	0.03044	1.000*
C79	0.75180	0.24474	0.03039	1.000*
C80	0.75186	0.74475	0.03044	1.000*
C81	0.25238	0.41411	0.93695	1.000*
C82	0.25250	0.91411	0.93743	1.000*
C83	0.75238	0.41411	0.93695	1.000*
C84	0.75250	0.91411	0.93743	1.000*
C85	0.42523	0.25076	0.99947	1.000*
C86	0.42530	0.75075	0.99955	1.000*
C87	0.92523	0.25076	0.99947	1.000*
C88	0.92530	0.75075	0.99955	1.000*
C89	0.41278	0.41602	0.06616	1.000*
C90	0.41288	0.91602	0.06683	1.000*
C91	0.91278	0.41602	0.06615	1.000*
C92	0.91288	0.91602	0.06683	1.000*
C93	0.41904	0.08705	0.00509	1.000*

C94	0.41900	0.58705	0.00477	1.000*
C95	0.91904	0.08705	0.00509	1.000*
C96	0.91900	0.58705	0.00476	1.000*
N1	0.08344	0.01878	0.99307	1.000*
N2	0.08338	0.51880	0.99261	1.000*
N3	0.58344	0.01878	0.99307	1.000*
N4	0.58338	0.51880	0.99261	1.000*
N5	0.08287	0.18984	0.91029	1.000*
N6	0.08290	0.68983	0.91023	1.000*
N7	0.58287	0.18984	0.91028	1.000*
N8	0.58290	0.68983	0.91023	1.000*
N9	0.26247	0.35953	0.91476	1.000*
N10	0.26262	0.85953	0.91523	1.000*
N11	0.76247	0.35953	0.91476	1.000*
N12	0.76262	0.85953	0.91523	1.000*
N13	0.24666	0.02519	0.97903	1.000*
N14	0.24659	0.52521	0.97856	1.000*
N15	0.74666	0.02519	0.97903	1.000*
N16	0.74659	0.52521	0.97856	1.000*
N17	0.25983	0.19323	0.09084	1.000*
N18	0.25987	0.69323	0.09083	1.000*
N19	0.75983	0.19323	0.09084	1.000*
N20	0.75987	0.69323	0.09083	1.000*
N21	0.40513	0.36228	0.09550	1.000*
N22	0.40526	0.86228	0.09612	1.000*
N23	0.90513	0.36228	0.09550	1.000*
N24	0.90526	0.86228	0.09612	1.000*
N25	0.41629	0.02777	0.00828	1.000*
N26	0.41622	0.52776	0.00784	1.000*
N27	0.91629	0.02777	0.00828	1.000*
N28	0.91622	0.52776	0.00784	1.000*

N29	0.42089	0.19391	0.00279	1.000*
N30	0.42094	0.69390	0.00275	1.000*
N31	0.92089	0.19391	0.00279	1.000*
N32	0.92094	0.69390	0.00275	1.000*
N33	0.00678	0.27538	0.98158	1.000*
N34	0.00685	0.77538	0.98161	1.000*
N35	0.50678	0.27538	0.98158	1.000*
N36	0.50685	0.77538	0.98161	1.000*
N37	0.49371	0.44331	0.08802	1.000*
N38	0.49377	0.94334	0.08886	1.000*
N39	0.99371	0.44331	0.08801	1.000*
N40	0.99377	0.94334	0.08886	1.000*
N41	0.49070	0.10984	0.91493	1.000*
N42	0.49068	0.60984	0.91465	1.000*
N43	0.99070	0.10984	0.91493	1.000*
N44	0.99068	0.60984	0.91464	1.000*
N45	0.16994	0.26893	0.99867	1.000*
N46	0.17001	0.76893	0.99860	1.000*
N47	0.66994	0.26893	0.99867	1.000*
N48	0.67001	0.76893	0.99860	1.000*
N49	0.17054	0.43950	0.90780	1.000*
N50	0.17064	0.93948	0.90831	1.000*
N51	0.67054	0.43950	0.90780	1.000*
N52	0.67064	0.93948	0.90831	1.000*
N53	0.33710	0.27774	0.00979	1.000*
N54	0.33720	0.77774	0.01003	1.000*
N55	0.83710	0.27774	0.00979	1.000*
N56	0.83720	0.77774	0.01003	1.000*
N57	0.33242	0.44383	0.00092	1.000*
N58	0.33254	0.94382	0.00142	1.000*
N59	0.83242	0.44383	0.00091	1.000*

N60	0.83254	0.94382	0.00142	1.000*
N61	0.34798	0.11211	0.09510	1.000*
N62	0.34797	0.61210	0.09488	1.000*
N63	0.84798	0.11211	0.09510	1.000*
N64	0.84797	0.61210	0.09488	1.000*
N65	0.49316	0.30196	0.51790	1.000*
N66	0.49317	0.80196	0.51800	1.000*
N67	0.99316	0.30196	0.51790	1.000*
N68	0.99317	0.80196	0.51800	1.000*
N69	0.00955	0.46730	0.58796	1.000*
N70	0.00962	0.96727	0.58882	1.000*
N71	0.50955	0.46730	0.58796	1.000*
N72	0.50962	0.96727	0.58882	1.000*
N73	0.00628	0.13376	0.41543	1.000*
N74	0.00625	0.63381	0.41496	1.000*
N75	0.50628	0.13376	0.41543	1.000*
N76	0.50625	0.63381	0.41497	1.000*
N77	0.16288	0.29956	0.48985	1.000*
N78	0.16290	0.79956	0.48995	1.000*
N79	0.66288	0.29956	0.48985	1.000*
N80	0.66290	0.79956	0.48995	1.000*
N81	0.15208	0.46536	0.40717	1.000*
N82	0.15208	0.96540	0.40781	1.000*
N83	0.65208	0.46536	0.40718	1.000*
N84	0.65208	0.96540	0.40781	1.000*
N85	0.16773	0.13344	0.50154	1.000*
N86	0.16767	0.63344	0.50117	1.000*
N87	0.66773	0.13344	0.50154	1.000*
N88	0.66767	0.63344	0.50117	1.000*
N89	0.33005	0.30845	0.50076	1.000*
N90	0.33006	0.80846	0.50083	1.000*

N91	0.83005	0.30845	0.50076	1.000*
N92	0.83006	0.80846	0.50083	1.000*
N93	0.32973	0.13799	0.59379	1.000*
N94	0.32969	0.63793	0.59343	1.000*
N95	0.82973	0.13799	0.59379	1.000*
N96	0.82969	0.63793	0.59342	1.000*
N97	0.07912	0.38340	0.49792	1.000*
N98	0.07912	0.88341	0.49819	1.000*
N99	0.57912	0.38340	0.49792	1.000*
N100	0.57913	0.88341	0.49819	1.000*
N101	0.08393	0.04952	0.49742	1.000*
N102	0.08389	0.54952	0.49638	1.000*
N103	0.58393	0.04952	0.49742	1.000*
N104	0.58389	0.54952	0.49638	1.000*
N105	0.09462	0.21481	0.40613	1.000*
N106	0.09461	0.71486	0.40604	1.000*
N107	0.59462	0.21481	0.40613	1.000*
N108	0.59461	0.71486	0.40604	1.000*
N109	0.24010	0.38418	0.40947	1.000*
N110	0.24011	0.88421	0.40973	1.000*
N111	0.74010	0.38418	0.40947	1.000*
N112	0.74011	0.88421	0.40973	1.000*
N113	0.25347	0.05210	0.52726	1.000*
N114	0.25346	0.55209	0.52565	1.000*
N115	0.75347	0.05210	0.52726	1.000*
N116	0.75346	0.55209	0.52565	1.000*
N117	0.23784	0.21791	0.58518	1.000*
N118	0.23785	0.71788	0.58507	1.000*
N119	0.73784	0.21791	0.58518	1.000*
N120	0.73785	0.71788	0.58507	1.000*
N121	0.41709	0.38744	0.59040	1.000*

N122	0.41711	0.88742	0.59072	1.000*
N123	0.91709	0.38744	0.59040	1.000*
N124	0.91711	0.88742	0.59072	1.000*
N125	0.41671	0.05838	0.51195	1.000*
N126	0.41669	0.55838	0.51103	1.000*
N127	0.91671	0.05838	0.51195	1.000*
N128	0.91669	0.55838	0.51103	1.000*

h-ThSi$_2$.Heptazine

Crystal data

P1	1
a = 6.95009 Å	α = 89.90069°
b = 6.95009 Å	β = 89.90069°
c = 23.83541 Å	γ = 132.75687°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.03946	0.85181	0.62161	1.000*
C2	0.46376	0.65190	0.12171	1.000*
C3	0.15190	0.46376	0.87171	1.000*
C4	0.35181	0.03946	0.37161	1.000*
C5	0.96376	0.15190	0.62171	1.000*
C6	0.53946	0.35181	0.12161	1.000*
C7	0.65190	0.96376	0.37171	1.000*
C8	0.85181	0.53946	0.87161	1.000*
C9	0.50216	0.00143	0.28371	1.000*
C10	0.00216	0.50143	0.78371	1.000*
C11	0.00143	0.00216	0.53371	1.000*
C12	0.50143	0.50216	0.03371	1.000*
C13	0.28590	0.43133	0.95436	1.000*

C14	0.21751	0.07283	0.45418	1.000*
C15	0.43133	0.78590	0.20436	1.000*
C16	0.07283	0.71751	0.70418	1.000*
C17	0.57283	0.21751	0.20418	1.000*
C18	0.93133	0.28590	0.70436	1.000*
C19	0.78590	0.93133	0.45436	1.000*
C20	0.71751	0.57283	0.95418	1.000*
C21	0.00168	0.50193	0.61632	1.000*
C22	0.50168	0.00193	0.11632	1.000*
C23	0.50193	0.50168	0.86632	1.000*
C24	0.00193	0.00168	0.36632	1.000*
N1	0.11247	0.90552	0.67541	1.000*
N2	0.39132	0.59797	0.17568	1.000*
N3	0.09797	0.39132	0.92568	1.000*
N4	0.40552	0.11247	0.42541	1.000*
N5	0.89132	0.09797	0.67568	1.000*
N6	0.61247	0.40552	0.17541	1.000*
N7	0.59797	0.89132	0.42568	1.000*
N8	0.90552	0.61247	0.92541	1.000*
N9	0.00189	0.50174	0.67526	1.000*
N10	0.50190	0.00174	0.17526	1.000*
N11	0.50174	0.50190	0.92526	1.000*
N12	0.00174	0.00189	0.42526	1.000*
N13	0.59326	0.22289	0.26001	1.000*
N14	0.91118	0.28016	0.76023	1.000*
N15	0.78017	0.91118	0.51023	1.000*
N16	0.72290	0.59326	0.01001	1.000*
N17	0.41118	0.78017	0.26023	1.000*
N18	0.09326	0.72290	0.76001	1.000*
N19	0.28016	0.41118	0.01023	1.000*
N20	0.22289	0.09326	0.51001	1.000*

N21	0.50171	0.00120	0.34418	1.000*
N22	0.00171	0.50120	0.84418	1.000*
N23	0.00120	0.00171	0.59418	1.000*
N24	0.50120	0.50171	0.09418	1.000*
N25	0.49834	0.16829	0.08993	1.000*
N26	0.00471	0.33565	0.58993	1.000*
N27	0.83565	0.00471	0.33993	1.000*
N28	0.66829	0.49834	0.83993	1.000*
N29	0.50472	0.83565	0.08993	1.000*
N30	0.99834	0.66829	0.58993	1.000*
N31	0.33565	0.50472	0.83993	1.000*
N32	0.16829	0.99834	0.33993	1.000*

m-ThSi$_2$.Heptazine

Crystal data

P1	1
a = 6.64598 Å	α = 88.13824°
b = 6.95706 Å	β = 75.93665°
c = 23.53377 Å	γ = 120.53762°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.83434	0.93127	0.63650	1.000*
C2	0.30216	0.17891	0.10511	1.000*
C3	0.90559	0.65011	0.88000	1.000*
C4	0.33157	0.40998	0.37214	1.000*
C5	0.90162	0.29250	0.63331	1.000*
C6	0.23486	0.81783	0.11168	1.000*
C7	0.57808	0.28872	0.38680	1.000*
C8	0.62770	0.73450	0.82499	1.000*

C9	0.23241	0.44611	0.27516	1.000*
C10	0.98477	0.66217	0.79315	1.000*
C11	0.88857	0.45056	0.54077	1.000*
C12	0.24430	0.65701	0.01768	1.000*
C13	0.00526	0.54597	0.95606	1.000*
C14	0.14723	0.50050	0.45186	1.000*
C15	0.32833	0.34251	0.18774	1.000*
C16	0.82501	0.75272	0.72137	1.000*
C17	0.20788	0.62417	0.19728	1.000*
C18	0.96620	0.48897	0.71036	1.000*
C19	0.70354	0.33035	0.46969	1.000*
C20	0.44837	0.70709	0.92183	1.000*
C21	0.86307	0.62088	0.63017	1.000*
C22	0.26118	0.48415	0.10497	1.000*
C23	0.25211	0.69777	0.84732	1.000*
C24	0.95908	0.36928	0.37319	1.000*
N1	0.79409	0.90065	0.69696	1.000*
N2	0.37371	0.21116	0.15524	1.000*
N3	0.88814	0.61407	0.93150	1.000*
N4	0.34778	0.52134	0.41875	1.000*
N5	0.97853	0.33470	0.68103	1.000*
N6	0.17947	0.77423	0.17121	1.000*
N7	0.52174	0.26872	0.44657	1.000*
N8	0.64737	0.74819	0.87904	1.000*
N9	0.88076	0.61635	0.68781	1.000*
N10	0.26899	0.48774	0.16311	1.000*
N11	0.23080	0.64830	0.90775	1.000*
N12	0.93733	0.39909	0.43166	1.000*
N13	0.18515	0.59551	0.25528	1.000*
N14	0.03220	0.53273	0.75849	1.000*
N15	0.67967	0.34128	0.52759	1.000*

N16	0.45441	0.71433	0.97764	1.000*
N17	0.31664	0.33062	0.24584	1.000*
N18	0.81338	0.72266	0.78153	1.000*
N19	0.02740	0.57848	0.01123	1.000*
N20	0.11866	0.54903	0.50694	1.000*
N21	0.43509	0.29872	0.35624	1.000*
N23	0.86915	0.45165	0.60367	1.000*
N24	0.77866	0.30187	0.35092	1.000*
N25	0.44709	0.72562	0.80641	1.000*
N26	0.84257	0.77523	0.60373	1.000*
N27	0.07871	0.72887	0.83658	1.000*
N28	0.17926	0.41082	0.33925	1.000*
N29	0.85925	0.11436	0.60762	1.000*
N30	0.26147	0.32527	0.07710	1.000*
N31	0.27031	0.99779	0.08001	1.000*
N32	0.25024	0.65663	0.07895	1.000*

h-ThSi2.Heptazine.Coplanar

Crystal data

*I*4$_1$*md*	109
a = 7.07994 Å	α = 90°
b = 7.07994 Å	β = 90°
c = 23.99344 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0	0.82341	0.62142	1.000*
C9	0.50000	0	0.28383	1.000*
C13	0.32999	0.50000	0.95445	1.000*
C21	0	0.50000	0.61578	1.000*

N1	0	0.82851	0.67653	1.000*
N9	0	0.50000	0.67502	1.000*
N13	0.50000	0.16889	0.26034	1.000*
N21	0.50000	0	0.34411	1.000*
N25	0.50000	0.16695	0.08915	1.000*

h-ThSi2.Triazine

Crystal data

*P*1	1
a = 4.70183 Å	α = 90.07663°
b = 4.69615 Å	β = 89.98283°
c = 16.07047 Å	γ = 102.36142°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.02853	0.74713	0.62395	1.000*
C2	0.47891	0.76012	0.12365	1.000*
C3	0.26334	0.48151	0.87380	1.000*
C4	0.23387	0.98037	0.37343	1.000*
C5	0.97734	0.25936	0.62401	1.000*
C6	0.52960	0.24765	0.12379	1.000*
C7	0.76692	0.02477	0.37355	1.000*
C8	0.75010	0.52795	0.87392	1.000*
C9	0.50160	0.00372	0.24260	1.000*
C10	0.00606	0.50455	0.74289	1.000*
C11	0.00044	0.00188	0.49268	1.000*
C12	0.50621	0.50372	0.99283	1.000*
N1	0.50058	0.00308	0.33247	1.000*
N2	0.00674	0.50503	0.83278	1.000*
N3	0.00152	0.00265	0.58243	1.000*

N4	0.50517	0.50379	0.08274	1.000*
N5	0.50534	0.00388	0.07809	1.000*
N6	0.00112	0.50270	0.57882	1.000*
N7	0.00051	0.00314	0.32765	1.000*
N8	0.50687	0.50524	0.82822	1.000*
N9	0.24996	0.43558	0.95603	1.000*
N10	0.22887	0.93695	0.45563	1.000*
N11	0.42949	0.74707	0.20574	1.000*
N12	0.07739	0.76147	0.70611	1.000*
N13	0.57520	0.26067	0.20608	1.000*
N14	0.93366	0.24714	0.70639	1.000*
N15	0.77169	0.06661	0.45588	1.000*
N16	0.76297	0.57230	0.95628	1.000*

h-ThSi$_2$.Triazine.Coplanar

Crystal data

*I*4$_1$*md*	109
a = 4.76682 Å	α = 90°
b = 4.76682 Å	β = 90°
c = 16.11116 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0	0.73812	0.62363	1.000*
C3	0.50000	0	0.24265	1.000*
C4	0.50000	0.23812	0.12363	1.000*
C9	0	0.50000	0.74265	1.000*
N1	0.50000	0	0.33256	1.000*
N3	0.50000	0	0.07782	1.000*
N4	0	0	0.58256	1.000*

N5	0.25487	0.50000	0.95641	1.000*
N8	0	0.50000	0.57782	1.000*
N9	0	0.74514	0.70641	1.000*

g-h-Heptazine

Crystal data

*P*1	1
a = 6.94430 Å	α = 89.97365°
b = 12.05933 Å	β = 89.98096°
c = 7.35214 Å	γ = 90.27502°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.30951	0.21176	0.95109	1.000*
C2	0.80951	0.71176	0.95109	1.000*
C3	0.64940	0.21679	0.01031	1.000*
C4	0.14940	0.71679	0.01031	1.000*
C5	0.35060	0.78321	0.51026	1.000*
C6	0.85060	0.28321	0.51026	1.000*
C7	0.69053	0.78828	0.45096	1.000*
C8	0.19053	0.28828	0.45096	1.000*
C9	0.47169	0.04926	0.06874	1.000*
C10	0.97169	0.54926	0.06874	1.000*
C11	0.52827	0.95070	0.56864	1.000*
C12	0.02827	0.45070	0.56864	1.000*
C13	0.47381	0.37365	0.98236	1.000*
C14	0.97381	0.87365	0.98236	1.000*
C15	0.52621	0.62637	0.48225	1.000*
C16	0.02621	0.12637	0.48225	1.000*
C17	0.15301	0.05145	0.01006	1.000*

C18	0.65301	0.55145	0.01006	1.000*
C19	0.79668	0.05042	0.03771	1.000*
C20	0.29668	0.55042	0.03771	1.000*
C21	0.20330	0.94956	0.53764	1.000*
C22	0.70330	0.44956	0.53764	1.000*
C23	0.84700	0.94855	0.50997	1.000*
C24	0.34700	0.44855	0.50997	1.000*
N1	0.15592	0.14707	0.91901	1.000*
N2	0.65592	0.64707	0.91901	1.000*
N3	0.81087	0.15991	0.02371	1.000*
N4	0.31087	0.65991	0.02371	1.000*
N5	0.18912	0.84008	0.52369	1.000*
N6	0.68912	0.34008	0.52369	1.000*
N7	0.84415	0.85298	0.41892	1.000*
N8	0.34415	0.35298	0.41892	1.000*
N9	0.13676	0.49415	0.08566	1.000*
N10	0.63676	0.99415	0.08566	1.000*
N11	0.79780	0.50501	0.10099	1.000*
N12	0.29780	0.00501	0.10099	1.000*
N13	0.20214	0.49494	0.60089	1.000*
N14	0.70214	0.99494	0.60089	1.000*
N15	0.86319	0.50581	0.58554	1.000*
N16	0.36319	0.00581	0.58554	1.000*
N17	0.47083	0.49066	0.01002	1.000*
N18	0.97083	0.99066	0.01002	1.000*
N19	0.52918	0.50934	0.50993	1.000*
N20	0.02918	0.00934	0.50993	1.000*
N21	0.47588	0.15895	0.01006	1.000*
N22	0.97588	0.65895	0.01006	1.000*
N23	0.52412	0.84105	0.50997	1.000*
N24	0.02412	0.34105	0.50997	1.000*

N25	0.30984	0.32182	0.93373	1.000*
N26	0.80984	0.82182	0.93373	1.000*
N27	0.64496	0.32600	0.99719	1.000*
N28	0.14496	0.82600	0.99719	1.000*
N29	0.35506	0.67401	0.49716	1.000*
N30	0.85506	0.17401	0.49716	1.000*
N31	0.69019	0.67823	0.43354	1.000*
N32	0.19019	0.17823	0.43354	1.000*

g-h-Heptazine.Coplanar

Crystal data

*Cmc*2$_1$	36
a = 7.12950 Å	α = 90°
b = 12.34966 Å	β = 90°
c = 6.91674 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	y	z	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.33123	0.17672	0	1.000*
C9	0.17868	0.01343	0	1.000*
C17	0.50000	0.00814	0	1.000*
C21	0.50000	0.33416	0	1.000*
N1	0.17153	0.12092	0	1.000*
N9	0.33478	0.28404	0	1.000*
N17	0.16295	0.45584	0	1.000*
N25	0.50000	0.45358	0	1.000*
N29	0.50000	0.12052	0	1.000*

g-m-Heptazine

Crystal data

*P*1	1
a = 6.97572 Å	α = 91.12994°
b = 12.17594 Å	β = 90°
c = 7.29916 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.00048	0.00037	0.02889	1.000*
C2	0.99810	0.33879	0.93871	1.000*
C3	0.32959	0.99652	0.96552	1.000*
C4	0.66560	0.68476	0.00614	1.000*
C5	0.65349	0.01192	0.99917	1.000*
C6	0.67694	0.34283	0.06738	1.000*
C7	0.00190	0.82787	0.56505	1.000*
C8	0.99953	0.16630	0.47487	1.000*
C9	0.32306	0.82384	0.43638	1.000*
C10	0.34651	0.15475	0.50460	1.000*
C11	0.33440	0.48191	0.49762	1.000*
C12	0.67041	0.17015	0.53824	1.000*
C13	0.15349	0.65475	0.50460	1.000*
C14	0.16560	0.98191	0.49762	1.000*
C15	0.17694	0.32384	0.43638	1.000*
C16	0.50047	0.66629	0.47487	1.000*
C17	0.49810	0.32787	0.56505	1.000*
C18	0.82959	0.67015	0.53824	1.000*
C19	0.17041	0.49652	0.96552	1.000*
C20	0.49953	0.50037	0.02889	1.000*
C21	0.50190	0.83879	0.93871	1.000*
C22	0.84651	0.51192	0.99917	1.000*
C23	0.82306	0.84283	0.06738	1.000*

C24	0.83440	0.18476	0.00614	1.000*
N1	0.16402	0.04848	0.99595	1.000*
N2	0.16195	0.38936	0.91029	1.000*
N3	0.52224	0.72965	0.91564	1.000*
N4	0.49032	0.06094	0.98090	1.000*
N5	0.51529	0.39761	0.08948	1.000*
N6	0.80814	0.73541	0.09578	1.000*
N7	0.82946	0.06622	0.00969	1.000*
N8	0.83787	0.39832	0.00282	1.000*
N9	0.00968	0.56094	0.98090	1.000*
N10	0.98471	0.89761	0.08948	1.000*
N11	0.97776	0.22965	0.91564	1.000*
N12	0.33598	0.54848	0.99595	1.000*
N13	0.33805	0.88936	0.91029	1.000*
N14	0.67054	0.56622	0.00969	1.000*
N15	0.66213	0.89832	0.00282	1.000*
N16	0.69186	0.23541	0.09578	1.000*
N17	0.99032	0.60573	0.52286	1.000*
N18	0.02224	0.93701	0.58812	1.000*
N19	0.01529	0.26906	0.41428	1.000*
N20	0.32946	0.60045	0.49407	1.000*
N21	0.30814	0.93126	0.40798	1.000*
N22	0.33787	0.26835	0.50094	1.000*
N23	0.66402	0.61818	0.50781	1.000*
N24	0.66195	0.27730	0.59347	1.000*
N25	0.16213	0.76835	0.50094	1.000*
N26	0.17054	0.10045	0.49407	1.000*
N27	0.19186	0.43126	0.40798	1.000*
N28	0.48471	0.76906	0.41428	1.000*
N29	0.50968	0.10573	0.52286	1.000*
N30	0.47776	0.43701	0.58812	1.000*

N31	0.83805	0.77730	0.59347	1.000*
N32	0.83598	0.11818	0.50781	1.000*

g-h-Triazine

Crystal data

P1	1
a = 4.6957 Å	α = 91.3042°
b = 4.6957 Å	β = 88.6958°
c = 7.6691 Å	γ = 119.3897°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.3415	0.1869	0.9917	
C2	0.8145	0.1855	0.0204	
C3	0.8131	0.6585	0.9917	
C4	0.0293	0.5000	0.5180	
C5	0.5029	0.4971	0.4903	
C6	0.5000	0.9707	0.5180	
N7	0.9886	0.0114	0.9997	
N8	0.6764	0.3236	0.5104	
N9	0.1814	0.3335	0.4766	
N10	0.6665	0.8186	0.4766	
N11	0.1840	0.8160	0.5685	
N12	0.4995	0.5005	0.9407	
N13	0.4919	0.0229	0.0338	
N14	0.9771	0.5081	0.0338	

g-h-Triazine.Coplanar

Crystal data

P-6*m*2	187
a = 4.77992 Å	α = 90°
b = 4.77992 Å	β = 90°
c = 7.50100 Å	γ = 120°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.35217	0.17608	0	1.000*
C4	0.01938	0.50969	0.50000	1.000*
N1	0	0	0	1.000*
N2	0.66667	0.33333	0.50000	1.000*
N3	0.17058	0.34116	0.50000	1.000*
N6	0.50387	0.49613	0	1.000*

g-o-Triazine

Crystal data

*P*1	1
a = 8.50113 Å	α = 90°
b = 8.02656 Å	β = 97.43527°
c = 4.67090 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.06564	0.32835	0.01575	1.000*
C2	0.93437	0.82835	0.48425	1.000*
C3	0.56674	0.50981	0.51630	1.000*
C4	0.43327	0.00981	0.98370	1.000*
C5	0.00397	0.05493	0.76186	1.000*
C6	0.99603	0.55493	0.73814	1.000*
C7	0.50587	0.23580	0.26231	1.000*

C8	0.49413	0.73580	0.23769	1.000*
C9	0.03315	0.31815	0.49644	1.000*
C10	0.96685	0.81815	0.00356	1.000*
C11	0.53537	0.49954	0.99704	1.000*
C12	0.46463	0.99954	0.50296	1.000*
N1	0.08563	0.24946	0.27308	1.000*
N2	0.91437	0.74946	0.22692	1.000*
N3	0.58837	0.43109	0.77367	1.000*
N4	0.41163	0.93109	0.72633	1.000*
N5	0.03135	0.97069	0.00165	1.000*
N6	0.96865	0.47069	0.49835	1.000*
N7	0.53080	0.15131	0.50204	1.000*
N8	0.46920	0.65131	0.99796	1.000*
N9	0.06634	0.49261	0.99023	1.000*
N10	0.93366	0.99261	0.50977	1.000*
N11	0.56415	0.67416	0.49046	1.000*
N12	0.43585	0.17416	0.00954	1.000*
N13	0.04305	0.22806	0.76225	1.000*
N14	0.95695	0.72806	0.73775	1.000*
N15	0.54564	0.40915	0.26290	1.000*
N16	0.45436	0.90915	0.23710	1.000*

g-o-Triazine.Coplanar

Crystal data

*P*222$_1$	17
a = 4.17117 Å	α = 90°
b = 4.79852 Å	β = 90°
c = 8.04096 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.23842	0.50000	0	1.000*
C3	0.70536	0.75719	0	1.000*
N1	0.85764	0	0	1.000*
N3	0.89277	0.50000	0	1.000*
N5	0.38800	0.25923	0	1.000*

h-(12,0).Tube.Heptazine

Crystal data

*P*1	1
a = 13.83277 Å	α = 90°
b = 13.86688 Å	β = 90°
c = 11.39540 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.61579	0.43301	0.11489	1.000*
C2	0.52758	0.43301	0.44574	1.000*
C3	0.59419	0.52101	0.27950	1.000*
C4	0.56695	0.51898	0.93971	1.000*
C5	0.53526	0.59609	0.44018	1.000*
C6	0.55615	0.61413	0.77949	1.000*
C7	0.50958	0.69201	0.61511	1.000*
C8	0.44618	0.62902	0.94516	1.000*
C9	0.41350	0.71753	0.44012	1.000*
C10	0.43158	0.73874	0.77944	1.000*
C11	0.33823	0.77627	0.27937	1.000*
C12	0.33615	0.74975	0.93959	1.000*
C13	0.25000	0.79821	0.11483	1.000*
C14	0.25000	0.71009	0.44575	1.000*

C15	0.16177	0.77627	0.27937	1.000*
C16	0.16386	0.74975	0.93959	1.000*
C17	0.08650	0.71753	0.44012	1.000*
C18	0.06842	0.73874	0.77944	1.000*
C19	0.99042	0.69201	0.61511	1.000*
C20	0.05381	0.62902	0.94516	1.000*
C21	0.96474	0.59609	0.44018	1.000*
C22	0.94385	0.61413	0.77949	1.000*
C23	0.90581	0.52101	0.27950	1.000*
C24	0.93305	0.51898	0.93971	1.000*
C25	0.88421	0.43301	0.11489	1.000*
C26	0.97242	0.43301	0.44574	1.000*
C27	0.90581	0.34501	0.27950	1.000*
C28	0.93305	0.34705	0.93971	1.000*
C29	0.96474	0.26993	0.44018	1.000*
C30	0.94385	0.25190	0.77949	1.000*
C31	0.56695	0.34705	0.93971	1.000*
C32	0.99042	0.17402	0.61511	1.000*
C33	0.05381	0.23701	0.94516	1.000*
C34	0.08650	0.14850	0.44012	1.000*
C35	0.06842	0.12728	0.77944	1.000*
C36	0.16177	0.08975	0.27937	1.000*
C37	0.16386	0.11628	0.93959	1.000*
C38	0.25000	0.06782	0.11483	1.000*
C39	0.25000	0.15593	0.44575	1.000*
C40	0.33823	0.08975	0.27937	1.000*
C41	0.33615	0.11628	0.93959	1.000*
C42	0.41350	0.14850	0.44012	1.000*
C43	0.43158	0.12728	0.77944	1.000*
C44	0.59419	0.34501	0.27950	1.000*
C45	0.50958	0.17402	0.61511	1.000*

C46	0.44618	0.23701	0.94516	1.000*
C47	0.53526	0.26993	0.44018	1.000*
C48	0.55615	0.25190	0.77949	1.000*
N1	0.42143	0.10273	0.33887	1.000*
N2	0.45105	0.11008	0.66795	1.000*
N3	0.37051	0.19405	0.99438	1.000*
N4	0.33670	0.06405	0.16785	1.000*
N5	0.33398	0.17873	0.49514	1.000*
N6	0.36332	0.07797	0.83877	1.000*
N7	0.61979	0.34654	0.16793	1.000*
N8	0.50465	0.34923	0.49504	1.000*
N9	0.60538	0.32010	0.83886	1.000*
N10	0.57294	0.43301	0.33597	1.000*
N11	0.60628	0.43301	0.99465	1.000*
N12	0.58142	0.26202	0.33911	1.000*
N13	0.57349	0.23253	0.66802	1.000*
N14	0.48908	0.31257	0.99449	1.000*
N15	0.50239	0.18126	0.49481	1.000*
N16	0.47868	0.20468	0.83576	1.000*
N17	0.25000	0.11088	0.33586	1.000*
N18	0.25000	0.07694	0.99451	1.000*
N19	0.16330	0.06405	0.16785	1.000*
N20	0.16602	0.17873	0.49514	1.000*
N21	0.07857	0.10273	0.33887	1.000*
N22	0.04895	0.11008	0.66795	1.000*
N23	0.12949	0.19405	0.99438	1.000*
N24	0.99761	0.18126	0.49481	1.000*
N25	0.02132	0.20468	0.83576	1.000*
N26	0.01092	0.31257	0.99449	1.000*
N27	0.91858	0.26202	0.33911	1.000*
N28	0.88021	0.34654	0.16793	1.000*

N29	0.99535	0.34923	0.49504	1.000*
N30	0.89462	0.32010	0.83886	1.000*
N31	0.92706	0.43301	0.33597	1.000*
N32	0.89373	0.43301	0.99465	1.000*
N33	0.88021	0.51949	0.16793	1.000*
N34	0.99535	0.51680	0.49504	1.000*
N35	0.89462	0.54593	0.83886	1.000*
N36	0.91858	0.60401	0.33911	1.000*
N37	0.92651	0.63349	0.66802	1.000*
N38	0.01092	0.55346	0.99449	1.000*
N39	0.33670	0.80198	0.16785	1.000*
N40	0.33398	0.68730	0.49514	1.000*
N41	0.36332	0.78805	0.83877	1.000*
N42	0.99761	0.68477	0.49481	1.000*
N43	0.02132	0.66134	0.83576	1.000*
N44	0.07857	0.76330	0.33887	1.000*
N45	0.04895	0.75595	0.66795	1.000*
N46	0.12949	0.67198	0.99438	1.000*
N47	0.16330	0.80198	0.16785	1.000*
N48	0.16602	0.68730	0.49514	1.000*
N49	0.13668	0.78805	0.83877	1.000*
N50	0.42143	0.76330	0.33887	1.000*
N51	0.45105	0.75595	0.66795	1.000*
N52	0.37051	0.67198	0.99438	1.000*
N53	0.50239	0.68477	0.49481	1.000*
N54	0.47868	0.66134	0.83576	1.000*
N55	0.61979	0.51949	0.16793	1.000*
N56	0.50465	0.51680	0.49504	1.000*
N57	0.60538	0.54593	0.83886	1.000*
N58	0.58142	0.60401	0.33911	1.000*
N59	0.57349	0.63349	0.66802	1.000*

N60	0.48908	0.55346	0.99449	1.000*
N61	0.25000	0.75515	0.33586	1.000*
N62	0.25000	0.78909	0.99451	1.000*
N63	0.92651	0.23253	0.66802	1.000*
N64	0.13668	0.07797	0.83877	1.000*

m-(12,0).Tube.Heptazine

Crystal data

*P*1	1
a = 12.92377 Å	α = 90.52356°
b = 13.01344 Å	β = 89.63815°
c = 12.00537 Å	γ = 89.35868°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.57441	0.33428	0.94780	1.000*
C2	0.60643	0.42203	0.43265	1.000*
C3	0.61892	0.41867	0.77771	1.000*
C4	0.60966	0.32189	0.27337	1.000*
C5	0.61003	0.32589	0.61778	1.000*
C6	0.58163	0.50920	0.93602	1.000*
C7	0.57255	0.23169	0.11704	1.000*
C8	0.54092	0.25311	0.44647	1.000*
C9	0.57221	0.23608	0.77338	1.000*
C10	0.55186	0.59684	0.43598	1.000*
C11	0.51239	0.16020	0.27575	1.000*
C12	0.49766	0.17099	0.93184	1.000*
C13	0.52178	0.69222	0.28151	1.000*
C14	0.51127	0.67807	0.93733	1.000*
C15	0.24308	0.07596	0.43158	1.000*

C16	0.23885	0.06358	0.77694	1.000*
C17	0.44987	0.75370	0.12364	1.000*
C18	0.42782	0.72222	0.45232	1.000*
C19	0.44535	0.75340	0.77983	1.000*
C20	0.32922	0.10080	0.93355	1.000*
C21	0.35822	0.79144	0.28013	1.000*
C22	0.35466	0.79265	0.62458	1.000*
C23	0.34668	0.75754	0.95407	1.000*
C24	0.41779	0.12956	0.43214	1.000*
C25	0.25767	0.78978	0.43925	1.000*
C26	0.26124	0.80314	0.78445	1.000*
C27	0.14229	0.07528	0.27378	1.000*
C28	0.14586	0.07385	0.61828	1.000*
C29	0.15309	0.10993	0.94816	1.000*
C30	0.17051	0.76584	0.94134	1.000*
C31	0.05029	0.11336	0.11943	1.000*
C32	0.07307	0.14437	0.44852	1.000*
C33	0.05479	0.11354	0.77514	1.000*
C34	0.08328	0.73480	0.44048	1.000*
C35	0.97883	0.17455	0.27994	1.000*
C36	0.98802	0.18823	0.93502	1.000*
C37	0.91652	0.35671	0.93867	1.000*
C38	0.98828	0.70469	0.28486	1.000*
C39	0.00242	0.69478	0.94012	1.000*
C40	0.94867	0.26936	0.43719	1.000*
C41	0.92786	0.63364	0.12542	1.000*
C42	0.95943	0.61191	0.45400	1.000*
C43	0.92770	0.62955	0.78136	1.000*
C44	0.89328	0.44354	0.43811	1.000*
C45	0.87897	0.44744	0.78300	1.000*
C46	0.89071	0.54317	0.28042	1.000*

C47	0.88899	0.53998	0.62471	1.000*
C48	0.92516	0.53151	0.95388	1.000*
N1	0.87646	0.55656	0.17231	1.000*
N2	0.90008	0.53739	0.50743	1.000*
N3	0.91250	0.53691	0.83956	1.000*
N4	0.86916	0.45661	0.33172	1.000*
N5	0.86517	0.45219	0.67362	1.000*
N6	0.93206	0.44321	0.00213	1.000*
N7	0.97282	0.71299	0.17555	1.000*
N8	0.02909	0.66599	0.50339	1.000*
N9	0.97453	0.70547	0.83414	1.000*
N10	0.94554	0.61892	0.34006	1.000*
N11	0.90698	0.63098	0.67321	1.000*
N12	0.93797	0.62618	0.00819	1.000*
N13	0.91538	0.23761	0.33628	1.000*
N14	0.95673	0.27179	0.98576	1.000*
N15	0.05085	0.76744	0.34001	1.000*
N16	0.08601	0.72553	0.98945	1.000*
N17	0.97024	0.15925	0.17038	1.000*
N18	0.01833	0.21440	0.49921	1.000*
N19	0.97761	0.16066	0.82846	1.000*
N20	0.92390	0.35959	0.48653	1.000*
N21	0.87179	0.35909	0.83750	1.000*
N22	0.06579	0.13090	0.33433	1.000*
N23	0.05393	0.09287	0.66664	1.000*
N24	0.05743	0.12305	0.00229	1.000*
N25	0.17357	0.75945	0.48845	1.000*
N26	0.17200	0.81004	0.84019	1.000*
N27	0.12849	0.06121	0.16545	1.000*
N28	0.14850	0.08426	0.50104	1.000*
N29	0.14816	0.09764	0.83356	1.000*

N30	0.43481	0.73564	0.33825	1.000*
N31	0.44642	0.77359	0.67159	1.000*
N32	0.44231	0.74376	0.00665	1.000*
N33	0.22976	0.05252	0.32468	1.000*
N34	0.23443	0.04949	0.66733	1.000*
N35	0.24180	0.11632	0.99700	1.000*
N36	0.37174	0.80571	0.17194	1.000*
N37	0.35236	0.78244	0.50717	1.000*
N38	0.35203	0.77029	0.83971	1.000*
N39	0.32750	0.10472	0.48073	1.000*
N40	0.32780	0.05610	0.83177	1.000*
N41	0.27082	0.81408	0.33288	1.000*
N42	0.26579	0.81666	0.67498	1.000*
N43	0.25786	0.75088	0.00372	1.000*
N44	0.45016	0.09711	0.33051	1.000*
N45	0.41373	0.14088	0.98150	1.000*
N46	0.53031	0.70812	0.17226	1.000*
N47	0.48282	0.65221	0.50055	1.000*
N48	0.52215	0.70578	0.83127	1.000*
N49	0.52762	0.15226	0.16605	1.000*
N50	0.47163	0.19852	0.49574	1.000*
N51	0.52584	0.15994	0.82539	1.000*
N52	0.58519	0.62879	0.33533	1.000*
N53	0.54175	0.59408	0.98582	1.000*
N54	0.55494	0.24603	0.33223	1.000*
N55	0.59295	0.23476	0.66489	1.000*
N56	0.56217	0.23948	0.00028	1.000*
N57	0.57595	0.50621	0.48268	1.000*
N58	0.62524	0.50712	0.83370	1.000*
N59	0.62416	0.30853	0.16483	1.000*
N60	0.59947	0.32823	0.50057	1.000*

N61	0.58677	0.32888	0.83316	1.000*
N62	0.63087	0.40863	0.32584	1.000*
N63	0.63253	0.41401	0.66803	1.000*
N64	0.56709	0.42252	0.99812	1.000*

Alpha

Crystal data

*P*31*c*	159
a = 6.50562 Å	α = 90°
b = 6.50562 Å	β = 90°
c = 4.73707 Å	γ = 120°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.51707	0.08106	0.20401	1.000*
C7	0.16577	0.25479	0.99303	1.000*
N1	0	0	0.99377	1.000*
N3	0.33333	0.66667	0.63003	1.000*
N5	0.34683	0.95055	0.97319	1.000*
N11	0.31492	0.31899	0.24471	1.000*

Beta

Crystal data

*P*6$_3$/*m*	176
a = 6.44157 Å	α = 90°
b = 6.44157 Å	β = 90°
c = 2.42069 Å	γ = 120°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.17839	0.77331	0.25000	1.000*
N1	0.32984	0.03335	0.25000	1.000*
N7	0.33333	0.66667	0.25000	1.000*

Will-II

Crystal data

I-43*d*	220
a = 5.44378 Å	α = 90°
b = 5.44378 Å	β = 90°
c = 5.44378 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.87500	0	0.25000	1.000*
N1	0.28407	0.28407	0.28407	1.000*

Dsph

Crystal data

P-43*m*	215
a = 3.45311 Å	α = 90°
b = 3.45311 Å	β = 90°
c = 3.45311 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0.50000	0.50000	0	1.000*
N1	0.25502	0.25502	0.25502	1.000*

Spinel

Crystal data

Fd-3m	56
a = 6.78149 Å	α = 90°
b = 6.78149 Å	β = 90°
c = 6.78149 Å	γ = 90°

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å^2)

	x	*y*	*z*	B_{iso}*/B_{eq}
C1	0	0	0	1.000*
C9	0.62500	0.62500	0.62500	1.000*
N1	0.38078	0.38078	0.38078	1.000*