

Table 7: Table for atomic parameters for the refined structure. *s.o.f.* gives the site occupation factor for each atomic species. *U* is the IADP. Δ gives the distance between the refined atomic position and the ideal position.

atom	Wyckoff	<i>s.o.f.</i>	x/a_{lat}	y/a_{lat}	z/a_{lat}	<i>U</i>	site class	Δ/a_{lat}
Pd1	8 <i>c</i>	1.00	0.09485(8)	0.09485(8)	0.09485(8)	0.003	$\langle B_0^{(1)} \rangle$	0.001
Al2	24 <i>d</i>	1.00	0.1308(3)	0.0944(3)	0.0381(3)	0.005	$\langle B_5^{(1)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al3	24 <i>d</i>	1.00	0.0585(4)	0.0946(4)	0.0386(3)	0.005	$\langle B_5^{(1)}, M_2^{(1)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al4	24 <i>d</i>	1.00	0.1516(4)	0.1300(3)	0.0949(4)	0.005	$\langle B_5^{(1)}, M_2^{(5)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.004
Al5	24 <i>d</i>	1.00	0.0948(4)	0.1515(4)	0.0597(4)	0.005	$\langle B_5^{(1)}, M_2^{(3)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Pd6	8 <i>c</i>	1.00	0.40400(9)	0.40400(9)	0.40400(9)	0.008	$\langle B_0^{(2)} \rangle$	0.001
Al7	24 <i>d</i>	1.00	0.4612(4)	0.4387(4)	0.4051(4)	0.012	$\langle B_5^{(2)}, M_2^{(2)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al8	24 <i>d</i>	1.00	0.4043(4)	0.4619(3)	0.3680(3)	0.002	$\langle B_5^{(2)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.002
Al9	24 <i>d</i>	1.00	0.3698(4)	0.4025(4)	0.3458(4)	0.012	$\langle B_5^{(2)}, M_2^{(7)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al10	24 <i>d</i>	1.00	0.4389(4)	0.4046(4)	0.3487(4)	0.012	$\langle B_5^{(2)}, M_2^{(4)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.004
Pd11	24 <i>d</i>	1.00	0.25036(9)	0.3449(1)	0.19066(9)	0.006	$\langle B_0^{(3)} \rangle$	0.001
Al12	24 <i>d</i>	1.00	0.2868(4)	0.3453(4)	0.1326(4)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(3)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.001
Al13	24 <i>d</i>	1.00	0.3459(4)	0.2472(4)	0.2142(5)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al14	24 <i>d</i>	1.00	0.2503(3)	0.4026(4)	0.2255(4)	0.010	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al15	24 <i>d</i>	1.00	0.1915(4)	0.3809(4)	0.1905(4)	0.010	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.001
Al16	24 <i>d</i>	1.00	0.3074(4)	0.3101(4)	0.1894(4)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al17	24 <i>d</i>	1.00	0.2508(3)	0.2898(4)	0.2264(3)	0.006	$\langle B_5^{(3)} \rangle$	0.004
Al18	24 <i>d</i>	1.00	0.3074(4)	0.3804(4)	0.1899(4)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(3)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.002
Al19	24 <i>d</i>	1.00	0.2160(4)	0.3474(4)	0.1333(4)	0.010	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Al20	24 <i>d</i>	1.00	0.2490(4)	0.4013(4)	0.1564(4)	0.010	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.004
Al21	24 <i>d</i>	1.00	0.2861(4)	0.3468(4)	0.2471(4)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(7)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al22	24 <i>d</i>	1.00	0.1935(4)	0.3102(4)	0.1902(4)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.003
Al23	24 <i>d</i>	1.00	0.2492(4)	0.2876(5)	0.1557(4)	0.015	$\langle B_5^{(3)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Pd24	24 <i>d</i>	1.00	0.34558(9)	0.49947(11)	0.2496(1)	0.008	$\langle B_0^{(4)} \rangle$	0.001
Al25	24 <i>d</i>	1.00	0.2514(4)	0.2123(4)	0.0366(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Al26	24 <i>d</i>	1.00	0.4019(5)	0.4640(4)	0.2491(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(4)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al27	24 <i>d</i>	1.00	0.3793(4)	0.4985(4)	0.3065(4)	0.012	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.004
Al28	24 <i>d</i>	1.00	0.2881(4)	0.4654(4)	0.2491(4)	0.012	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al29	24 <i>d</i>	1.00	0.1930(4)	0.1181(4)	-0.0004(4)	0.012	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al30	24 <i>d</i>	1.00	0.3461(4)	0.4437(4)	0.2840(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(7)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.004
Al31	24 <i>d</i>	1.00	0.3457(4)	0.4426(4)	0.2158(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(3)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al32	24 <i>d</i>	1.00	0.2834(4)	0.1540(4)	0.0569(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.004
Al33	24 <i>d</i>	1.00	0.2132(4)	0.1562(4)	0.0572(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(5)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Al34	24 <i>d</i>	1.00	0.1921(4)	0.1897(4)	0.0007(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(3)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.002
Al35	24 <i>d</i>	1.00	0.3056(4)	0.1904(4)	-0.0001(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al36	24 <i>d</i>	1.00	0.2489(4)	0.0980(5)	0.0352(4)	0.010	$\langle B_5^{(4)}, M_2^{(4)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Pd37	24 <i>d</i>	1.00	0.40403(9)	0.09507(9)	0.09482(9)	0.006	$\langle B_0^{(5)} \rangle$	0.001
Al38	24 <i>d</i>	1.00	0.4391(4)	0.0940(4)	0.0384(4)	0.007	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(2)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al39	24 <i>d</i>	1.00	0.1299(4)	0.4040(4)	0.0383(4)	0.008	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al40	24 <i>d</i>	1.00	0.3692(4)	0.0969(4)	0.0380(3)	0.008	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.002
Al41	24 <i>d</i>	1.00	0.0595(4)	0.4051(4)	0.0375(4)	0.007	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(2)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.001
Al42	24 <i>d</i>	1.00	0.0944(4)	0.4614(4)	0.0600(4)	0.007	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(2)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al43	24 <i>d</i>	1.00	0.4616(4)	0.1302(4)	0.0957(4)	0.008	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al44	24 <i>d</i>	1.00	0.4043(4)	0.1518(4)	0.0607(4)	0.007	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(4)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.003
Al45	24 <i>d</i>	1.00	0.1523(4)	0.3699(4)	0.0951(4)	0.008	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Al46	24 <i>d</i>	1.00	0.3477(4)	0.1309(4)	0.0954(4)	0.007	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Al47	24 <i>d</i>	1.00	0.4047(4)	0.1521(4)	0.1314(4)	0.008	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Al48	24 <i>d</i>	1.00	0.1520(4)	0.4391(4)	0.0946(4)	0.008	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003

(continue to next page)

(continued from the previous page)

atom	Wyckoff	<i>s.o.f.</i>	x/a_{lat}	y/a_{lat}	z/a_{lat}	<i>U</i>	site class	Δ/a_{lat}
Al49	24 <i>d</i>	1.00	0.0951(4)	0.3472(4)	0.0605(4)	0.007	$\langle B_5^{(5)}, M_2^{(4)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.002
Pd50	24 <i>d</i>	1.00	0.5000(1)	0.25064(9)	0.15386(9)	0.004	$\langle B_0^{(6)} \rangle$	0.001
Al51	24 <i>d</i>	1.00	0.3062(4)	0.3107(4)	0.0003(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al52	24 <i>d</i>	1.00	0.4989(4)	0.1934(4)	0.1882(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.004
Al53	24 <i>d</i>	1.00	0.4638(4)	0.2495(4)	0.0970(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(4)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Al54	24 <i>d</i>	1.00	0.4985(4)	0.3065(4)	0.1190(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.003
Al55	24 <i>d</i>	1.00	0.5359(4)	0.2490(4)	0.2103(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.003
Al56	24 <i>d</i>	1.00	0.4998(4)	0.1930(4)	0.1203(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al57	24 <i>d</i>	1.00	0.4436(4)	0.2836(4)	0.1542(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.004
Al58	24 <i>d</i>	1.00	0.4417(4)	0.2141(4)	0.1543(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.001
Al59	24 <i>d</i>	1.00	0.2151(4)	0.3465(4)	0.0582(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.002
Al60	24 <i>d</i>	1.00	0.2841(4)	0.3448(4)	0.0568(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(3)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.003
Al61	24 <i>d</i>	1.00	0.2502(4)	0.4030(4)	0.0342(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(3)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al62	24 <i>d</i>	1.00	0.4650(4)	0.2496(4)	0.2105(4)	0.009	$\langle B_5^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Pd63	24 <i>d</i>	1.00	0.49994(9)	0.44058(9)	0.15447(8)	0.007	$\langle B_0^{(7)} \rangle$	0.000
Al64	24 <i>d</i>	1.00	0.3822(4)	0.3091(4)	0.0010(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.001
Al65	24 <i>d</i>	1.00	0.4633(4)	0.4390(4)	0.2120(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(4)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al66	24 <i>d</i>	1.00	0.5340(4)	0.4421(4)	0.2129(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(4)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.003
Al67	24 <i>d</i>	1.00	0.4425(4)	0.4024(4)	0.0353(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(1)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.003
Al68	24 <i>d</i>	1.00	0.4756(3)	0.3449(3)	0.0579(4)	0.008	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al69	24 <i>d</i>	1.00	0.4431(4)	0.4768(3)	0.1556(3)	0.008	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al70	24 <i>d</i>	1.00	0.4986(4)	0.3836(3)	0.1198(3)	0.008	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.003
Al71	24 <i>d</i>	1.00	0.5003(4)	0.4976(4)	0.1184(3)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(1)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al72	24 <i>d</i>	1.00	0.4974(4)	0.3108(3)	0.0004(5)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(3)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al73	24 <i>d</i>	1.00	0.4439(4)	0.4055(4)	0.1546(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(3)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.003
Al74	24 <i>d</i>	1.00	0.4051(5)	0.3453(4)	0.0567(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(3)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Al75	24 <i>d</i>	1.00	0.4653(4)	0.4400(4)	0.0964(4)	0.012	$\langle B_5^{(7)}, M_2^{(1)}, M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Cr/Al76	4 <i>a</i>	0.76/0.24	0	0	0	0.015	$\langle M_0^{(1)} \rangle$	0.000
Cr/Al77	24 <i>d</i>	0.88/0.12	0.47737(18)	0.44032(18)	-0.0002(2)	0.007	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(1)} \rangle$	0.001
Cr/Al78	8 <i>c</i>	0.96/0.04	0.03635(18)	0.03635(18)	0.03635(18)	0.006	$\langle B_3^{(1)}, M_3^{(1)} \rangle$	0.000
Cr/Al79	4 <i>b</i>	0.54/0.46	0.50000	0	0	0.007	$\langle M_0^{(2)} \rangle$	0.000
Fe/Pd80	8 <i>c</i>	0.75/0.25	0.46330(13)	0.46330(13)	0.46330(13)	0.002	$\langle B_3^{(2)}, M_3^{(2)} \rangle$	0.000
Fe/Pd81	24 <i>d</i>	0.76/0.24	0.46332(15)	0.03661(15)	0.03672(15)	0.013	$\langle B_3^{(5)}, M_3^{(2)} \rangle$	0.000
Fe/Pd82	24 <i>d</i>	0.89/0.11	0.34520(19)	0.44053(19)	0.0954(2)	0.017	$\langle M_0^{(3)} \rangle$	0.001
Al83	24 <i>d</i>	1.00	0.3114(5)	0.4078(6)	0.0598(5)	0.048	$\langle B_3^{(6)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.004
Al84	24 <i>d</i>	1.00	0.3817(6)	0.4086(7)	0.0601(7)	0.081	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.004
Al85	24 <i>d</i>	1.00	0.3458(5)	0.4624(5)	0.0387(5)	0.045	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.003
Al86	24 <i>d</i>	0.45	0.3078(8)	0.4079(8)	0.1284(8)	0.008	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.005
Al86'	24 <i>d</i>	0.55	0.2911(6)	0.4358(6)	0.1186(6)	0.008	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.038
Al87	24 <i>d</i>	1.00	0.3447(5)	0.4619(5)	0.1520(5)	0.025	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.003
Al88	24 <i>d</i>	1.00	0.4008(6)	0.4398(6)	0.1181(6)	0.077	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.004
Al89	24 <i>d</i>	1.00	0.3692(6)	0.4957(6)	0.0937(6)	0.075	$\langle B_3^{(1)}, M_3^{(3)} \rangle$	0.005
Fe/Pd90	24 <i>d</i>	0.91/0.09	0.4990(2)	0.19166(13)	0.0003(2)	0.012	$\langle M_0^{(4)} \rangle$	0.001
Al91	24 <i>d</i>	1.00	0.2894(5)	0.0563(5)	0.0003(5)	0.041	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.004
Al92	24 <i>d</i>	1.00	0.2136(5)	0.4439(6)	0.0026(6)	0.054	$\langle B_3^{(6)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.004
Al93	24 <i>d</i>	1.00	0.3446(4)	0.0345(4)	0.0338(4)	0.007	$\langle B_3^{(5)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.003
Al94	24 <i>d</i>	1.00	0.1584(6)	0.4661(6)	0.0348(6)	0.065	$\langle B_3^{(5)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.005
Al95	24 <i>d</i>	1.00	0.4991(6)	0.4817(5)	0.2521(5)	0.048	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.005
Al96	24 <i>d</i>	1.00	0.4670(8)	0.4680(8)	0.3470(8)	0.105	$\langle B_3^{(2)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.006
Al97	24 <i>d</i>	1.00	0.469(1)	0.153(1)	0.032(1)	0.152	$\langle B_3^{(5)}, M_3^{(4)} \rangle$	0.007
Cr/Al98	24 <i>d</i>	0.80/0.20	0.1531(2)	0.2497(2)	0.0947(2)	0.001	$\langle M_0^{(5)} \rangle$	0.002
Cr/Al99	24 <i>d</i>	0.72/0.28	0.1918(2)	0.2162(2)	0.0607(2)	0.015	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(5)} \rangle$	0.003

(continue to next page)

(continued from the previous page)

atom	Wyckoff	<i>s.o.f.</i>	x/a_{lat}	y/a_{lat}	z/a_{lat}	U	site class	Δ/a_{lat}
Al100	24d	1.00	0.1748(8)	0.2803(8)	0.0502(8)	0.132	$\langle B_3^{(6)}, M_3^{(5)} \rangle$	0.019
Cr/Al101	24d	0.85/0.15	0.13310(19)	0.1906(2)	0.0953(2)	0.007	$\langle B_3^{(1)}, M_3^{(5)} \rangle$	0.001
Cr/Al102	24d	0.79/0.21	0.13219(19)	0.3076(2)	0.0952(2)	0.004	$\langle B_3^{(5)}, M_3^{(5)} \rangle$	0.001
Cr/Al103	24d	0.77/0.23	0.2480(2)	0.1194(2)	0.0962(2)	0.008	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(5)} \rangle$	0.003
Al/Cr104	24d	0.38/0.27	0.191(1)	0.290(1)	0.116(1)	0.160	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(5)} \rangle$	0.016
Fe/Pd105	24d	0.98/0.02	0.1555(2)	0.75056(19)	0.0956(3)	0.021	$\langle M_0^{(6)} \rangle$	0.001
Al106	24d	1.00	0.3088(4)	0.2842(4)	0.1317(4)	0.014	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.002
Al/Cr107	24d	0.77/0.23	0.3087(4)	0.2844(4)	0.0586(4)	0.025	$\langle B_3^{(6)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.002
Al/Cr108	24d	0.83/0.17	0.3837(4)	0.2834(4)	0.0608(4)	0.025	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.004
Al/Cr109	24d	0.89/0.11	0.4034(4)	0.2477(4)	0.1180(4)	0.023	$\langle B_3^{(6)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.003
Al110	24d	1.00	0.3087(5)	0.2128(5)	0.0597(5)	0.034	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.001
Al111	24d	1.00	0.3446(5)	0.2258(5)	0.1524(4)	0.034	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.003
Al112	24d	1.00	0.3672(6)	0.1931(6)	0.0976(6)	0.067	$\langle B_3^{(5)}, M_3^{(6)} \rangle$	0.003
Fe113	24d	1.00	0.4047(3)	0.3455(2)	0.2498(2)	0.024	$\langle M_0^{(7)} \rangle$	0.000
Al114	24d	1.00	0.4421(4)	0.3802(4)	0.2141(4)	0.018	$\langle B_3^{(7)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.002
Al115	24d	1.00	0.4054(4)	0.3663(4)	0.3083(4)	0.013	$\langle B_3^{(2)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.002
Al116	24d	1.00	0.3846(4)	0.4039(4)	0.2495(4)	0.019	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.003
Al117	24d	1.00	0.3464(4)	0.3445(4)	0.2263(4)	0.016	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.002
Al118	24d	1.00	0.4392(4)	0.3104(4)	0.2143(4)	0.012	$\langle B_3^{(6)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.002
Al119	24d	1.00	0.4388(5)	0.3102(5)	0.2841(5)	0.038	$\langle B_3^{(4)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.003
Al120	24d	1.00	0.3823(4)	0.2882(4)	0.2501(4)	0.023	$\langle B_3^{(3)}, M_3^{(7)} \rangle$	0.002
Pd121	24d	1.00	0.0379(1)	0.1538(1)	0.0334(1)	0.011	$\langle B_3^{(1)}, B_3^{(7)}, M_5^{(3)} \rangle$	0.003
Pd122	24d	1.00	0.15498(9)	0.34383(9)	0.0383(1)	0.001	$\langle B_3^{(5)}, B_3^{(6)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.003
Pd123	24d	1.00	0.4998(1)	0.40696(9)	0.36725(9)	0.007	$\langle B_3^{(2)}, B_3^{(5)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.003
Pd124	24d	1.00	0.46348(11)	0.15417(11)	0.1535(1)	0.012	$\langle B_3^{(5)}, B_3^{(6)} \rangle$	0.001
Pd125	24d	1.00	0.4431(1)	0.49909(11)	0.2163(1)	0.013	$\langle B_3^{(4)}, B_3^{(7)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.004
Pd126	24d	1.00	0.43854(9)	0.38408(9)	0.0950(1)	0.009	$\langle B_3^{(7)}, B_3^{(7)}, M_5^{(3)} \rangle$	0.003
Pd127	24d	1.00	0.4613(1)	0.3446(1)	0.3433(1)	0.009	$\langle B_3^{(2)}, B_3^{(4)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.003
Pd128	24d	1.00	0.25334(9)	0.38382(9)	0.0950(1)	0.006	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(6)}, M_5^{(3)} \rangle$	0.004
Pd129	24d	1.00	0.34485(11)	0.15618(11)	0.03799(11)	0.016	$\langle B_3^{(4)}, B_3^{(5)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.002
Pd130	24d	1.00	0.21331(9)	0.44028(9)	0.19174(9)	0.007	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(6)} \rangle$	0.001
Pd131	24d	1.00	0.09127(9)	0.36632(9)	0.00029(11)	0.011	$\langle B_3^{(5)}, B_3^{(5)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.005
Pd132	24d	1.00	0.28893(9)	0.4407(1)	0.18784(9)	0.009	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(4)}, M_5^{(3)} \rangle$	0.004
Pd133	24d	1.00	0.1904(1)	0.40743(11)	0.0554(1)	0.012	$\langle B_3^{(5)}, B_3^{(6)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.005
Pd134	24d	1.00	0.19072(9)	0.40400(9)	0.13116(9)	0.005	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(5)} \rangle$	0.001
Pd135	24d	1.00	0.31200(11)	0.28740(11)	0.2495(1)	0.016	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(3)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.003
Pd136	24d	1.00	0.3089(1)	0.09278(11)	0.0566(1)	0.010	$\langle B_3^{(4)}, B_3^{(5)}, M_5^{(4)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.004
Pd137	24d	1.00	0.1526(1)	0.1546(1)	0.03373(11)	0.013	$\langle B_3^{(1)}, B_3^{(4)}, M_5^{(3)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.003
Pd138	24d	1.00	0.2123(1)	0.25038(9)	0.00257(11)	0.009	$\langle B_3^{(4)}, B_3^{(6)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.003
Pd139	24d	1.00	0.4390(1)	0.3074(1)	0.09494(11)	0.010	$\langle B_3^{(6)}, B_3^{(7)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.003
Pd140	24d	1.00	0.1913(1)	0.0961(1)	0.0599(1)	0.009	$\langle B_3^{(1)}, B_3^{(4)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.001
Pd141	24d	1.00	0.46242(11)	0.3452(1)	0.1567(1)	0.011	$\langle B_3^{(6)}, B_3^{(7)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Pd/Fe142	24d	0.74/0.26	0.28543(11)	0.24948(11)	0.19141(12)	0.010	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(3)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.001
Fe/Pd143	24d	0.51/0.49	0.50141(13)	0.28711(12)	0.05893(12)	0.008	$\langle B_3^{(6)}, B_3^{(7)}, M_5^{(3)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.002
Pd/Fe144	24d	0.63/0.37	0.44322(12)	0.49968(13)	0.40016(12)	0.013	$\langle B_3^{(2)}, B_3^{(5)}, M_5^{(2)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.005
Pd/Fe145	24d	0.78/0.22	0.49849(14)	0.28713(13)	0.24931(11)	0.019	$\langle B_3^{(4)}, B_3^{(6)}, M_5^{(6)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Pd/Fe146	24d	0.84/0.16	0.34478(11)	0.34920(11)	0.03828(11)	0.008	$\langle B_3^{(6)}, B_3^{(7)}, M_5^{(3)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.004
Pd/Fe147	24d	0.68/0.32	0.49981(12)	0.09886(11)	0.05776(11)	0.007	$\langle B_3^{(5)}, B_3^{(5)}, M_5^{(2)}, M_5^{(4)} \rangle$	0.004
Pd/Fe148	24d	0.55/0.45	0.15417(14)	0.34369(13)	0.15351(14)	0.009	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(5)}, M_5^{(5)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.002
Pd/Fe149	24d	0.55/0.45	0.40154(13)	0.44069(12)	0.00331(13)	0.009	$\langle B_3^{(7)}, B_3^{(7)}, M_5^{(1)}, M_5^{(3)} \rangle$	0.004
Pd/Fe150	24d	0.57/0.43	0.44148(12)	0.19141(12)	0.09361(13)	0.005	$\langle B_3^{(5)}, B_3^{(6)}, M_5^{(4)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.002
Pd/Fe151	24d	0.64/0.36	0.40261(13)	0.44054(13)	0.18868(12)	0.014	$\langle B_3^{(4)}, B_3^{(7)}, M_5^{(3)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.003

(continue to next page)

(continued from the previous page)

atom	Wyckoff	<i>s.o.f.</i>	x/a_{lat}	y/a_{lat}	z/a_{lat}	<i>U</i>	site class	Δ/a_{lat}
Pd/Fe152	24 <i>d</i>	0.53/0.47	0.43821(12)	0.49800(13)	0.09582(13)	0.010	$\langle B_3^{(1)}, B_3^{(7)}, M_5^{(1)}, M_5^{(3)} \rangle$	0.003
Pd/Fe153	24 <i>d</i>	0.55/0.45	0.40714(14)	0.44205(13)	0.30777(13)	0.012	$\langle B_3^{(2)}, B_3^{(4)}, M_5^{(4)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.003
Fe/Pd154	8 <i>c</i>	0.72/0.28	0.15344(17)	0.15344(17)	0.15344(17)	0.011	$\langle B_3^{(1)}, M_5^{(5)}, M_5^{(5)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.002
Fe/Pd155	24 <i>d</i>	0.58/0.42	0.24809(13)	0.30790(15)	0.09506(16)	0.009	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(6)}, M_5^{(5)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.002
Pd/Fe156	24 <i>d</i>	0.64/0.36	0.30852(14)	0.40455(14)	0.25214(13)	0.015	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(4)}, M_5^{(7)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Pd157	24 <i>d</i>	0.66	0.21000(14)	0.24990(14)	0.18636(15)	0.006	$\langle B_3^{(3)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.006
Pd157'	24 <i>d</i>	0.34	0.1911(3)	0.2491(3)	0.1549(3)	0.009	$\langle B_3^{(3)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.042
Pd/Fe158	24 <i>d</i>	0.55/0.45	0.40290(15)	0.25131(13)	0.19141(15)	0.015	$\langle B_3^{(3)}, B_3^{(6)}, M_5^{(6)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Cr/Al159	24 <i>d</i>	0.99/0.01	0.0963(2)	0.24942(19)	0.0002(2)	0.008	$\langle M_5^{(3)}, M_5^{(4)}, M_5^{(5)} \rangle$	0.001
Cr/Fe160	24 <i>d</i>	0.60/0.40	0.4035(3)	0.2486(2)	0.0013(2)	0.019	$\langle B_3^{(7)}, M_5^{(4)}, M_5^{(6)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Fe/Pd161	8 <i>c</i>	0.91/0.09	0.3445(3)	0.3445(3)	0.3445(3)	0.057	$\langle B_3^{(2)}, M_5^{(7)}, M_5^{(7)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Fe/Cr162	24 <i>d</i>	0.80/0.20	0.3470(2)	0.3444(2)	0.1534(2)	0.021	$\langle B_3^{(3)}, M_5^{(3)}, M_5^{(6)}, M_5^{(7)} \rangle$	0.002
Fe/Cr163	24 <i>d</i>	0.70/0.30	0.24888(18)	0.1904(2)	0.0955(2)	0.002	$\langle B_3^{(4)}, M_5^{(5)}, M_5^{(5)}, M_5^{(6)} \rangle$	0.001
Al164	24 <i>d</i>	1.00	0.0602(4)	0.2148(4)	0.0364(4)	0.009	$\langle M_2^{(3)}, M_2^{(4)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.002
Al165	24 <i>d</i>	1.00	0.4990(4)	0.3805(4)	0.3086(4)	0.016	$\langle M_2^{(4)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.002
Al166	24 <i>d</i>	1.00	0.2270(3)	0.4421(4)	0.0947(4)	0.010	$\langle M_2^{(3)}, M_2^{(4)} \rangle$	0.001
Al167	24 <i>d</i>	1.00	0.1915(4)	0.5005(4)	0.1184(4)	0.013	$\langle M_2^{(4)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.001
Al168	24 <i>d</i>	1.00	0.2488(4)	0.4763(4)	0.1540(4)	0.008	$\langle M_2^{(3)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.002
Al169	24 <i>d</i>	1.00	0.4037(4)	0.3463(4)	0.1326(4)	0.014	$\langle M_2^{(3)}, M_2^{(6)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.001
Al170	8 <i>c</i>	1.00	0.1900(4)	0.1900(4)	0.1900(4)	0.000	$\langle M_2^{(5)}, M_2^{(5)}, M_2^{(5)} \rangle$	0.002
Al171	24 <i>d</i>	1.00	0.2497(4)	0.2140(5)	0.1531(5)	0.022	$\langle M_2^{(5)}, M_2^{(5)}, M_2^{(6)} \rangle$	0.002
Al172	8 <i>c</i>	1.00	0.3092(5)	0.3092(5)	0.3092(5)	0.029	$\langle M_2^{(7)}, M_2^{(7)}, M_2^{(7)} \rangle$	0.000
Al173	24 <i>d</i>	0.53	0.2086(8)	0.1610(8)	0.1295(8)	0.029	$\langle M_2^{(5)} \rangle$	0.009
Al173'	24 <i>d</i>	0.47	0.190(1)	0.1909(9)	0.1204(9)	0.029	$\langle M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Al174	24 <i>d</i>	0.72	0.0964(5)	0.2698(5)	0.0594(5)	0.011	$\langle M_2^{(4)} \rangle$	0.003
Al174'	24 <i>d</i>	0.54	0.0515(6)	0.2840(6)	0.0041(6)	0.011	$\langle M_2^{(5)} \rangle$	0.033
Al175	24 <i>d</i>	0.61	0.2834(6)	0.5380(6)	0.1334(6)	0.017	$\langle M_2^{(3)} \rangle$	0.004
Al175'	24 <i>d</i>	0.39	0.3139(9)	0.4941(9)	0.1078(9)	0.017	$\langle M_2^{(5)} \rangle$	0.013
Al176	24 <i>d</i>	0.69	0.2869(7)	0.1605(7)	0.1314(7)	0.038	$\langle M_2^{(6)} \rangle$	0.006
Al176'	24 <i>d</i>	0.31	0.1151(15)	0.3102(16)	0.1911(16)	0.038	$\langle M_2^{(5)} \rangle$	0.003
Al177	24 <i>d</i>	0.45	0.2306(11)	0.250(1)	0.0973(12)	0.036	$\langle M_2^{(6)} \rangle$	0.004
Al177'	24 <i>d</i>	0.55	0.2659(9)	0.2487(8)	0.0952(9)	0.036	$\langle M_2^{(5)} \rangle$	0.007
Al178	24 <i>d</i>	0.52	0.3678(11)	0.2852(11)	0.1503(11)	0.057	$\langle M_2^{(7)} \rangle$	0.004
Al178'	24 <i>d</i>	0.48	0.3790(11)	0.3079(12)	0.1827(11)	0.057	$\langle M_2^{(6)} \rangle$	0.009
Al179	24 <i>d</i>	0.64	0.0964(7)	0.3458(7)	0.3218(6)	0.029	$\langle M_2^{(3)} \rangle$	0.001
Al179'	24 <i>d</i>	0.36	0.0996(12)	0.3508(12)	0.3774(11)	0.029	$\langle M_2^{(6)} \rangle$	0.012
Al180	24 <i>d</i>	0.62	0.5259(8)	0.3437(8)	0.2504(7)	0.031	$\langle M_2^{(7)} \rangle$	0.004
Al180'	24 <i>d</i>	0.38	0.3484(12)	0.2503(11)	-0.0147(12)	0.031	$\langle M_2^{(6)} \rangle$	0.008
Al181	24 <i>d</i>	0.48	0.3824(12)	0.3813(12)	0.1876(12)	0.059	$\langle M_2^{(3)} \rangle$	0.003
Al181'	24 <i>d</i>	0.52	0.3683(11)	0.4001(11)	0.1561(11)	0.059	$\langle M_2^{(7)} \rangle$	0.005
Al182	24 <i>d</i>	0.57	0.347(1)	0.367(1)	0.286(1)	0.058	$\langle M_2^{(7)} \rangle$	0.002
Al182'	24 <i>d</i>	0.43	0.3129(13)	0.3786(13)	0.3085(13)	0.058	$\langle M_2^{(7)} \rangle$	0.005
Al183	24 <i>d</i>	0.23	0.5371(17)	0.2480(16)	0.0218(17)	0.015	$\langle M_2^{(3)} \rangle$	0.002
Al183'	24 <i>d</i>	0.51	0.5538(7)	0.2776(7)	0.0321(7)	0.015	$\langle M_2^{(4)} \rangle$	0.011
Al184	24 <i>d</i>	0.76	0.4253(4)	0.0003(5)	0.0002(5)	0.009	$\langle M_2^{(4)} \rangle$	0.002
Al184'	24 <i>d</i>	0.24	-0.0014(14)	0.4007(12)	-0.0007(15)	0.009	$\langle M_2^{(2)} \rangle$	0.019
Al185	24 <i>d</i>	0.66	0.4365(9)	0.2128(9)	0.0366(9)	0.067	$\langle M_2^{(6)} \rangle$	0.005
Al185'	24 <i>d</i>	0.34	0.3913(17)	0.2214(17)	0.0618(17)	0.067	$\langle M_2^{(4)} \rangle$	0.015
Al186	24 <i>d</i>	0.61	0.4403(6)	0.4773(5)	0.0363(6)	0.007	$\langle M_2^{(3)} \rangle$	0.001
Al186'	24 <i>d</i>	0.39	0.4193(9)	0.4689(8)	0.0510(9)	0.007	$\langle M_2^{(1)} \rangle$	0.018
Al187	24 <i>d</i>	0.59	0.4658(9)	0.4381(9)	0.2866(9)	0.050	$\langle M_2^{(7)} \rangle$	0.004
Al187'	24 <i>d</i>	0.41	0.4423(13)	0.4010(13)	0.2735(12)	0.050	$\langle M_2^{(4)} \rangle$	0.004

(end of table)