

A Complex pseudo-decagonal quasicrystal approximant $\text{Al}_{37}(\text{Co},\text{Ni})_{15.5}$ solved by the rotation electron diffraction (RED) method

Authors

Devinder Singh^{ab}, Yifeng Yun^{ab}, Wei Wan^{ab}, Benjamin Grushko^c, Xiaodong Zou^{ab} and Sven Hovmöller^{ab*}

^aDepartment of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University, SE 10691, Stockholm, Sweden

^bBerzelii Center EXSELENT on Porous Materials, Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University, SE 10691, Stockholm, Sweden

^cPGI-5, Forschungszentrum, Jülich, Germany

Correspondence email: sven.hovmoller@mmk.su.se

Supplementary Information

Table S1 Atomic coordinates of the PD2 quasicrystal approximant structure in Al-Co-Ni

Atom	x	y	z	Occupancy	U (Å ²)
CO1/NI1	0.5322	0.3655	0.75	0.50	0.011
CO2/NI2	0.1625	0.5570	0.25	0.50	0.000
CO3/NI3	0.1506	0.3217	0.25	0.50	0.036
CO4/NI4	0.4826	0.2500	0.25	0.25	0.108
CO5/NI5	0.0231	0.2500	0.75	0.25	0.014
CO6/NI6	0.8568	0.2500	0.25	0.25	0.036
CO7/NI7	0.3368	0.3177	0.75	0.50	0.007
CO8/NI8	0.3365	0.5580	0.75	0.50	0.007
CO9/NI9	0.6654	0.2968	0.25	0.50	0.009
CO10/NI10	0.2866	0.4383	0.25	0.50	0.019
CO11/NI11	0.0316	0.4842	0.75	0.50	0.007
CO12/NI12	0.9710	0.3673	0.25	0.50	0.003
CO13/NI13	0.4693	0.4855	0.25	0.50	0.000
CO14/NI14	0.2149	0.4374	0.75	0.50	0.024

CO15/NI15	0.7823	0.3225	0.25	0.50	0.007
CO16/NI16	0.3489	0.3730	0.25	0.50	0.042
CO17/NI17	0.1461	0.3701	0.75	0.50	0.018
AL18	0.1242	0.4487	0.75	0.50	0.070
AL19	0.3562	0.5114	0.25	0.50	0.009
AL20	0.1804	0.2500	0.25	0.25	0.062
AL21	0.4087	0.3674	0.75	0.50	0.068
AL22	0.6006	0.3254	0.75	0.50	0.124
AL23	0.1072	0.2947	0.75	0.50	0.046
AL24	0.0260	0.3993	0.75	0.50	0.026
AL25	0.6350	0.2500	0.75	0.25	0.084
AL26	0.8343	0.2914	0.75	0.50	0.006
AL27	0.7078	0.3135	0.75	0.50	0.101
AL28	0.5056	0.2895	0.75	0.50	0.022
AL29	0.0891	0.5142	0.25	0.50	0.121
AL30	0.4997	0.3206	0.25	0.50	0.067
AL31	0.0029	0.4357	0.25	0.50	0.030
AL32	0.1978	0.4841	0.25	0.50	0.013
AL33	0.2614	0.5582	0.25	0.50	0.045
AL34	0.7553	0.2500	0.25	0.25	0.066
AL35	0.0787	0.6043	0.25	0.50	0.067
AL36	0.3006	0.2500	0.75	0.25	0.120
AL37	0.4247	0.5191	0.75	0.50	0.121
AL38	0.2435	0.3192	0.25	0.50	0.177
AL39	0.4982	0.4398	0.75	0.50	0.046
AL40	0.3023	0.6248	0.75	0.50	0.048
AL41	0.2956	0.3892	0.75	0.50	0.042
AL42	0.1994	0.3981	0.25	0.50	0.025
AL43	0.9291	0.2500	0.75	0.25	0.027
AL44	0.6113	0.4137	0.75	0.50	0.070
AL45	0.1761	0.5398	0.75	0.50	0.247
AL46	0.2935	0.4836	0.75	0.50	0.094
AL47	0.9919	0.3227	0.75	0.50	0.055

AL48	0.5859	0.2500	0.25	0.25	0.130
AL49	0.8985	0.3330	0.25	0.50	0.053
AL50	0.0764	0.3650	0.25	0.50	0.061
AL51	0.4074	0.4230	0.25	0.50	0.160
AL52	0.0267	0.2876	0.25	0.50	0.124
AL53	0.1959	0.6177	0.25	0.50	0.100
AL54	0.3811	0.2500	0.75	0.25	0.146
AL55	0.4007	0.2906	0.25	0.50	0.164
