

Supporting information

Table S1 Atomic coordinates of the PD1 derived by strong-reflections approach

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
CO1/NI1	0.2705	0.0201	0.25	AL1	0.8022	0.3871	0.75	AL32	0.5869	0.2687	0.75
CO2/NI2	0.3103	0.0768	0.25	AL2	0.9727	0.5773	0.75	AL33	0.6859	0.6153	0.75
CO3/NI3	0.2688	0.1325	0.25	AL3	0.5272	0.5773	0.25	AL34	0.8140	0.6153	0.25
CO4/NI4	0.1977	0.1128	0.25	AL4	0.8355	0.1728	0.25	AL35	0.4087	0.1131	0.25
CO5/NI5	0.2003	0.0431	0.25	AL5	0.8355	0.6728	0.25	AL36	0.5912	0.3868	0.75
CO6/NI6	0.8035	0.5773	0.75	AL6	0.0268	0.2321	0.25	AL37	0.7996	0.4568	0.75
CO7/NI7	0.8883	0.5179	0.25	AL7	0.9731	0.2678	0.75	AL38	0.9221	0.5407	0.75
CO8/NI8	0.9202	0.4228	0.75	AL8	0.2194	0.1727	0.25	AL39	0.5779	0.5407	0.25
CO9/NI9	0.3882	0.1726	0.25	AL9	0.7805	0.3273	0.75	AL40	0.6451	0.2297	0.25
CO10/NI10	0.8031	0.2679	0.75	AL10	0.3355	0.0183	0.25	AL41	0.8549	0.2297	0.75
CO11/NI11	0.1968	0.2320	0.25	AL11	0.6644	0.4816	0.75	AL42	0.3338	0.2072	0.25
CO12/NI12	0.6117	0.3273	0.75	AL12	0.0207	0.0455	0.25	AL43	0.6661	0.2927	0.75
CO13/NI13	0.0797	0.0771	0.25	AL13	0.9792	0.4544	0.75	AL44	0.8531	0.6179	0.75
CO14/NI14	0.6117	0.5179	0.75	AL14	0.7840	0.6378	0.75	AL45	0.6468	0.6179	0.25
CO15/NI15	0.6964	0.5773	0.25	AL15	0.7159	0.6378	0.25	AL46	0.7080	0.2033	0.25
CO16/NI16	0.8884	0.6369	0.25	AL16	0.0256	0.1124	0.25	AL47	0.7919	0.2033	0.75
CO17/NI17	0.9210	0.6141	0.75	AL17	0.9743	0.3875	0.75	AL48	0.6122	0.1733	0.25
CO18/NI18	0.5050	0.0183	0.25	AL18	0.7812	0.5179	0.75	AL49	0.6122	0.6733	0.25
CO19/NI19	0.5068	0.1365	0.25	AL19	0.7187	0.5179	0.25	AL50	0.5115	0.2070	0.25
CO20/NI20	0.9956	0.3271	0.75	AL20	0.7294	0.4798	0.75	AL51	0.4884	0.2929	0.75
CO21/NI21	0.9204	0.2314	0.75	AL21	0.8112	0.2305	0.25	AL52	0.3936	0.0481	0.25
CO22/NI22	0.8891	0.2073	0.25	AL22	0.6887	0.2305	0.75	AL53	0.6063	0.4518	0.75
CO23/NI23	0.7712	0.1733	0.25	AL23	0.7311	0.3674	0.75	AL54	0.8480	0.5306	0.75
CO24/NI24	0.7287	0.1733	0.75	AL24	0.5861	0.5770	0.75	AL55	0.6519	0.5306	0.25
CO25/NI25	0.6108	0.2073	0.75	AL25	0.9139	0.5770	0.25	AL56	0.4535	0.1750	0.25
CO26/NI26	0.5795	0.2314	0.25	AL26	0.6896	0.4231	0.75	AL57	0.5464	0.3250	0.75
CO27/NI27	0.0043	0.1728	0.25	AL27	0.3353	0.1364	0.25	AL58	0.6790	0.5409	0.75
CO28/NI28	0.4931	0.3634	0.75	AL28	0.6646	0.3635	0.75	AL59	0.8209	0.5409	0.25
CO29/NI29	0.5050	0.5183	0.25	AL29	0.1445	0.0766	0.25	AL60	0.5446	0.5252	0.75
CO30/NI30	0.5789	0.6141	0.25	AL30	0.8554	0.4233	0.75	AL61	0.9553	0.5252	0.25
CO31/NI31	0.6115	0.6369	0.75	AL31	0.4130	0.2312	0.25	AL62	0.9585	0.1243	0.25

Atom	x	y	z
AL63	0.5415	0.1243	0.75
AL64	0.1127	0.0202	0.25
AL65	0.8872	0.4797	0.75
AL66	0.0759	0.1971	0.25
AL67	0.9241	0.3028	0.75
AL68	0.9618	0.2260	0.25
AL69	0.5381	0.2260	0.75
AL70	0.4636	0.0755	0.25
AL71	0.5363	0.4244	0.75
AL72	0.1150	0.1322	0.25
AL73	0.8849	0.3677	0.75
AL74	0.2658	0.2157	0.25
AL75	0.7341	0.2842	0.75
AL76	0.7376	0.5674	0.75
AL77	0.7623	0.5674	0.25
AL78	0.1583	0.1762	0.25
AL79	0.8416	0.3237	0.75
AL80	0.5559	0.1728	0.25
AL81	0.4440	0.3271	0.75
AL82	0.2488	0.0770	0.25
AL83	0.1256	0.2177	0.25
AL84	0.8743	0.2822	0.75

Table S2 Atomic coordinates of the PD1 quasicrystal approximant structure using RED data

Atom	x	y	z	U(Å ²)	Atom	x	y	z	U(Å ²)
CO1/NI1	0.2708	0.0179	0.25	0.002	AL1	0.7818	0.6357	0.75	0.031
CO2/NI2	0.3090	0.0746	0.25	0.022	AL2	0.8598	0.4247	0.75	0.182
CO3/NI3	0.2746	0.1331	0.25	0.026	AL3	0.8194	0.5941	0.25	0.250
CO4/NI4	0.1917	0.1096	0.25	0.065	AL4	0.8350	0.6619	0.25	0.065
CO5/NI5	0.1959	0.0440	0.25	0.018	AL5	0.8549	0.6132	0.75	0.017
CO6/NI6	0.8040	0.5770	0.75	0.033	AL6	0.3415	0.0118	0.25	0.075
CO7/NI7	0.8904	0.5174	0.25	0.024	AL7	0.8997	0.5699	0.25	0.102
CO8/NI8	0.9149	0.4246	0.75	0.011	AL8	0.9303	0.5474	0.75	0.065
CO9/NI9	0.3914	0.1687	0.25	0.038	AL9	0.9535	0.5171	0.25	0.079
CO10/NI10	0.8008	0.2709	0.75	0.000	AL10	0.9739	0.4573	0.75	0.133
CO11/NI11	0.1972	0.2299	0.25	0.026	AL11	0.7203	0.5190	0.25	0.103
CO12/NI12	0.6086	0.3279	0.75	0.009	AL12	0.7952	0.3857	0.75	0.094
CO13/NI13	0.0806	0.0723	0.25	0.019	AL13	0.9721	0.3875	0.75	0.035
CO14/NI14	0.6094	0.5173	0.75	0.000	AL14	0.7484	0.4219	0.25	0.095
CO15/NI15	0.6952	0.5713	0.25	0.050	AL15	0.9510	0.3298	0.25	0.038
CO16/NI16	0.8887	0.6378	0.25	0.045	AL16	0.9310	0.2987	0.75	0.151
CO17/NI17	0.9238	0.6112	0.75	0.012	AL17	0.1385	0.0780	0.25	0.009
CO18/NI18	0.5074	0.0284	0.25	0.035	AL18	0.9050	0.2707	0.25	0.089
CO19/NI19	0.5076	0.1355	0.25	0.049	AL19	0.8576	0.2294	0.75	0.060
CO20/NI20	0.9932	0.3240	0.75	0.048	AL20	0.8073	0.2253	0.25	0.144
CO21/NI21	0.9280	0.2334	0.75	0.046	AL21	0.2157	0.1690	0.25	0.050
CO22/NI22	0.8829	0.2190	0.25	0.040	AL22	0.7265	0.4684	0.75	0.110
CO23/NI23	0.7754	0.1722	0.25	0.010	AL23	0.5310	0.5785	0.25	0.039
CO24/NI24	0.7261	0.1716	0.75	0.003	AL24	0.7861	0.2094	0.75	0.158
CO25/NI25	0.6147	0.2031	0.75	0.000	AL25	0.8387	0.1757	0.25	0.034
CO26/NI26	0.5803	0.2369	0.25	0.028	AL26	0.7199	0.2016	0.25	0.103
CO27/NI27	0.0103	0.1700	0.25	0.023	AL27	0.6852	0.2199	0.75	0.010
CO28/NI28	0.4984	0.3687	0.75	0.035	AL28	0.5131	0.0807	0.25	0.159
CO29/NI29	0.5082	0.5191	0.25	0.001	AL29	0.7918	0.4654	0.75	0.107
CO30/NI30	0.5747	0.6086	0.25	0.005	AL30	0.6569	0.4874	0.75	0.054
CO31/NI31	0.6128	0.6263	0.75	0.042	AL31	0.7312	0.3725	0.75	0.030

Atom	x	y	z	U(Å ²)	Atom	x	y	z	U(Å ²)
AL32	0.6887	0.4272	0.75	0.048	AL63	5905	0.4551	0.75	0.063
AL33	0.6446	0.2394	0.25	0.149	AL64	6063	0.4744	0.25	0.316
AL34	0.3418	0.1345	0.25	0.089	AL65	6288	0.5364	0.25	0.083
AL35	0.7829	0.3186	0.75	0.067	AL66	6718	0.5467	0.75	0.188
AL36	0.6240	0.3088	0.25	0.090	AL67	4574	0.3310	0.75	0.090
AL37	0.6610	0.3603	0.75	0.084	AL68	5165	0.2008	0.25	0.196
AL38	0.5905	0.2767	0.75	0.049	AL69	5472	0.2158	0.75	0.052
AL39	0.5444	0.3199	0.75	0.053	AL70	9737	0.2078	0.25	0.266
AL40	0.7894	0.5244	0.75	0.095	AL71	9796	0.2611	0.75	0.066
AL41	0.5315	0.3916	0.25	0.099	AL72	0283	0.2321	0.25	0.033
AL42	0.5246	0.4249	0.75	0.041	AL73	3995	0.3259	0.75	0.052
AL43	0.5257	0.4661	0.25	0.103	AL74	9568	0.1303	0.25	0.046
AL44	0.5458	0.5162	0.75	0.024	AL75	5430	0.1353	0.75	0.069
AL45	0.5904	0.5716	0.75	0.064	AL76	6029	0.1720	0.25	0.030
AL46	0.6468	0.6183	0.25	0.124	AL77	5584	0.5323	0.25	0.154
AL47	0.6913	0.6168	0.75	0.051					
AL48	0.7126	0.6305	0.25	0.132					
AL49	0.7390	0.5781	0.75	0.084					
AL50	0.7736	0.5583	0.25	0.230					
AL51	0.8542	0.5427	0.75	0.054					
AL52	0.8958	0.4848	0.75	0.034					
AL53	0.3939	0.0484	0.25	0.411					
AL54	0.9309	0.3943	0.25	0.190					
AL55	0.8927	0.3671	0.75	0.078					
AL56	0.8600	0.3123	0.75	0.129					
AL57	0.8268	0.2841	0.25	0.090					
AL58	0.7559	0.2671	0.25	0.170					
AL59	0.7385	0.2655	0.75	0.059					
AL60	0.6814	0.2956	0.75	0.094					
AL61	0.5893	0.3571	0.25	0.157					
AL62	0.5953	0.3903	0.75	0.044					

Table S3 Deviation of the Co/Ni atoms obtained from the strong-reflections approach (SRA) and those obtained after the RED refinement

Co/Ni Atoms	Deviation (Å)	Co/Ni Atoms	Deviation (Å)
1	0.042	26	0.200
2	0.051	27	0.241
3	0.275	28	0.244
4	0.201	29	0.133
5	0.163	30	0.187
6	0.037	31	0.373
7	0.043		
8	0.174		
9	0.265		
10	0.190		
11	0.159		
12	0.062		
13	0.109		
14	0.083		
15	0.151		
16	0.192		
17	0.158		
18	0.267		
19	0.200		
20	0.170		
21	0.264		
22	0.520		
23	0.068		
24	0.113		
25	0.209		