

**Zur Strukturchemie
von Approximanten ikosaedrischer
Quasikristalle vom Mackay Ikosaeder Typ**

Melanie Schäpers

Referent:	Priv.-Doz. Dr. G. Kreiner
Koreferent:	Prof. Dr. H.-L. Keller
Tag der mündlichen Prüfung:	7. Februar 2002

Danksagung

Mein Dank gebührt vor allem "dem Chef" *Herrn Priv.-Doz. Dr. Guido Kreiner*. Ohne die Freiheiten in der Bearbeitung des Themas, die zahllosen Diskussionen und seiner unkonventionellen Art wäre diese Arbeit sicherlich nicht möglich gewesen.

Herrn Prof. Dr. H.-L. Keller danke ich dafür, daß er es auf sich nahm das Korreferat zu übernehmen.

Herrn Prof. Dr. H. Jacobs danke ich für seine stete Unterstützung und fruchtbaren Diskussionen. An seinem Lehrstuhl entstand diese Arbeit.

Ohne die Angehörigen des Fachbereich wäre diese Arbeit jedoch ebensowenig möglich gewesen. Ich bedanke mich besonders für ihre Unterstützung bei *Britta Knie* und *Charlotte Zweig* (Rasterelektronenmikroskop und EDX), *Sven Birke* (Unterstützung bei den CCD-Messungen), *Annette Schlächter* (DTA-Messungen), sowie den Angehörigen der *Institutswerkstätten*.

Außerdem danke ich den Angehörigen der *Arbeitskreise* von Prof. Dr. H. Jacobs und Herrn Prof. Dr. H.-L. Keller für ihre Unterstützung und ihre Geduld in den oft "schwierigen" Mitarbeiterseminaren. Insbesondere bin ich meinen Kollegen *Stefan Spiekermann*, *Frank Haarmann* und *Frank Flacke* für ihre Unterstützung und ihre Diskussionsbereitschaft dankbar. Ohne sie hätte es nur halb soviel Freude gemacht.

Meinen Eltern *Helmut* und *Gerda-Marie Schäpers*, meiner Schwester *Andrea Abstoß* und allen übrigen Freunden und Freundinnen außerhalb des Fachbereichs Chemie danke ich für ihre Geduld und ihre rückhaltlose Unterstützung ohne die diese Arbeit nicht zu realisieren gewesen wäre.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung.....	5
2 Quasikristalle und Approximanten.....	10
2.1 Quasiperiodizität.....	10
2.2 Quasikristalle.....	12
2.3 Raumparkettierungen.....	14
2.3.1 Die Rhomboederparkettierung.....	16
2.3.2 Die kanonische Zellparkettierung.....	17
2.3.3 Die Raumparkettierung von Socolar und Steinhardt.....	21
3 Intermetallische Verbindungen mit ikosaedrigen Clustern.....	24
3.1 Einleitung.....	24
3.2 Tetraedrisch dicht gepackte Strukturen.....	25
3.3 Das I ₃ -Clusterkonzept.....	26
3.4 Ikosaedrische Cluster.....	31
3.4.1 Der Bergman Cluster.....	32
3.4.2 Das Mackay Ikosaeder.....	35
3.4.3 Gegenüberstellung von Bergman Cluster und Mackay Ikosaeder.....	38
3.5 Das Jellium Modell.....	39
4 Experimentelle Methoden.....	40
4.1 Ausgangssubstanzen.....	40
4.2 Präparationsmethoden.....	40
4.3 Untersuchungsmethoden.....	41
4.3.1 Röntgenographische Untersuchungen am Pulver.....	41
4.3.2 Einkristalluntersuchungen.....	41
4.4 Computerprogramme.....	43
4.4.1 Strukturbestimmung.....	43
4.4.2 Analyse und Darstellung der Strukturen.....	44

5 Approximanten mit Mackay Ikosaedern.....	45
5.1 Einleitung.....	45
5.2 Modell des kubischen 1/1-Approximanten vom MI-Typ.....	46
5.3 Der 1/1-Approximant im System Al-Mg-Pd.....	49
5.3.1 Darstellung und Charakterisierung.....	52
5.3.2 Strukturbeschreibung.....	55
5.4 Der 1/1-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd.....	59
5.4.1 Darstellung und Charakterisierung.....	59
5.4.2 Strukturbeschreibung.....	62
5.5 Der kubisch-flächenzentrierte Approximant im System Ga-Mg-Pd.....	63
5.5.1 Darstellung und Charakterisierung.....	64
5.5.2 Strukturbeschreibung.....	67
5.6 Der kubisch-flächenzentrierte Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd.....	70
5.7 Der rhomboedrische 1/1-Approximant im System Al-Mg-Pd.....	70
5.7.1 Darstellung und Charakterisierung.....	71
5.7.2 Strukturbeschreibung.....	75
5.8 Der rhomboedrische 1/1-Approximant im System Ga-Mg-Pd.....	77
5.8.1 Darstellung und Charakterisierung.....	78
5.8.2 Strukturbeschreibung.....	82
5.9 Der rhomboedrische 1/1-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd.....	83
5.9.1 Darstellung und Charakterisierung	83
5.9.2 Strukturbeschreibung.....	87
5.10 Diskussion.....	87
Anhang.....	93
Anhang A.....	94
Anhang B.....	96
Anhang C.....	98
Anhang D.....	102
Anhang E.....	103
ShelX cif Dateien.....	105
Literatur.....	251

1 Einleitung

Metalle spielten schon in der Frühzeit der menschlichen Geschichte eine wichtige Rolle. Das Wort Metall stammt von dem griechischen Wort *μεταλλον* (*metallon*) für Bergwerk oder Grube. Metalle haben die Geschichte der Menschen in so entscheidendem Maße geprägt, daß ganze Epochen nach ihnen benannt wurden. So kennt man ab etwa 2500 v. Chr. die Verarbeitung von Bronze, Cu-Sn Legierungen, die circa 1000 Jahre später durch Eisen abgelöst wurden [1]. Ein entscheidender Schritt in Richtung des Metallzeitalters war die Entdeckung, daß Metalle durch gießen oder schmieden in jede beliebige Form gebracht werden können. Das früheste bekannte Beispiel für eine Schmiedearbeit ist eine Kupferaxt aus dem vierten Jahrtausend vor Christus [1]. Das mittelhochdeutsche Wort *gesmide* oder *gesmeide*, in der Bedeutung von Metall oder Schmiedearbeit [2] spiegelt diesen Zusammenhang wider. Unser heutiges Wort Geschmeide leitet sich davon ab.

Trotz der frühen Verwendung von metallischen Gebrauchsgegenständen kam es erst sehr spät zu systematischen Untersuchungen. Die beiden ersten Abhandlungen über die damals bekannten Begriffe der Metallurgie stammen von dem Italiener *Vannoccio Biringuccio* (1480-1538) „*De la pirotechnia*“ [3] und dem deutschen Arzt *Georgius Agricola* (1490-1555) „*De re metallica*“ [4]. 1751 veröffentlichte *Gellert* [5] eine erste Monographie, in der er über Dichteuntersuchungen zahlreicher binärer Systeme, wie z.B. Au-Zn oder Cu-Zn, berichtet. Diese Untersuchungen legten letztlich den Schluß nahe, daß bestimmte Legierungen mehr als nur einfache Mischungen sein müssen.

Man unterscheidet drei verschiedene Grenzfälle von Legierungsstrukturen: (a) Phasen mit Verbindungscharakter (*intermetallische Verbindungen*), (b) feste Lösungen mit vollständiger und begrenzter Mischbarkeit der Komponenten (*Substitutions- und Einlagerungsmischkristalle*) sowie (c) Gemenge aus reinen Komponenten [6]. Die erste korrekte Identifizierung einer intermetallischen Verbindung, dem β -Messing, erfolgte erst 1839 durch *Karsten* [7].

Auf Grundlagen der Arbeiten von *Laue* (1912) [8], *Debye* und *Scherrer* (1917) [9] sowie *Hull* (1917) [10] entwickelten sich zu Beginn des 20. Jahrhunderts die Röntgenbeugungstechniken, die es nun ermöglichten Kenntnisse über den atomaren Aufbau kristalliner Materie zu erlangen. 1921 veröffentlichte *Mary Andrews* [11], eine

Mitarbeiterin *Hulls*, die ersten Röntgenbeugungsuntersuchungen an Legierungen vom Typ Fe-Ni, Fe-Co und Cu-Zn. Die erste konkrete Kristallstrukturbestimmung erfolgte 1923 an der intermetallischen Verbindung Mg_2Sn durch *Pauling* [12].

Kristallisiert auf der einen Seite der größte Teil der heute bekannten intermetallischen Verbindungen nach dem Motiv kubisch- und hexagonal dichtester bzw. kubisch-innenzentrierter Kugelpackungen mit nur wenigen Atomen in der Elementarzelle, so existieren jedoch auf der anderen Seite in diesem Bereich auch hochkomplizierte Strukturen, deren atomarer Aufbau zum Teil bis heute nicht geklärt ist. Bereits *Pauling* stieß während seiner Arbeit an Mg_2Sn auf einen viel komplizierteren Strukturtyp im System Na-Cd. In seiner Veröffentlichung zu Mg_2Sn erwähnt er $NaCd_2$, eine Verbindung die 1962 durch *Samson* [13] gelöst wurde, und die mit 1132 Atomen in der Elementarzelle bis heute zu den kompliziertesten intermetallischen Phasen zählt. Mittlerweile kennen wir mehr als 40000 einzelne binäre, ternäre und multinäre intermetallische Phasen, und obwohl diese Verbindungen seit Jahrzehnten Gegenstand intensiver Forschung sind, eröffnete sich 1984 ein vollkommen neues Kapitel.

Shechtman et al. [14] fanden in schnell abgekühlten Aluminium-Mangan Legierungen eine Phase, deren Elektronenbeugungsaufnahmen eine fünfzählige Rotationsymmetrie zeigen. Daß diese sich nicht mit der Translationsperiodizität eines dreidimensionalen Gitters vereinbaren läßt, bewies bereits 1691 *Johannes Kepler* [15]. Und doch waren auf den von *Shechtman* angefertigten Beugungsaufnahmen scharfe Bragg-Reflexe zu erkennen, so daß davon ausgegangen werden mußte, daß das sogenannte *i-AlMn* trotz der ikosaedrischen Rotationssymmetrie eine langreichweitige Ordnung besitzt und es sich hierbei, neben kristallinen und amorphen Stoffen, um einen dritten Typ fester Materie handelt.

Bereits zehn Jahre vor der Entdeckung von Kristallen mit fünfzähliger Rotationssymmetrie hatte der britische Physiker *Sir Roger Penrose* einen Weg gefunden eine Ebene mit Hilfe zweier unterschiedlicher Polygone aperiodisch zu pflastern [16]. Lange Zeit blieb diese Entdeckung ohne praktischen Bezug, jedoch stellte *Alan Mackay* [17] auf Grundlage der Arbeit von *Penrose* als einer der Ersten ein theoretisches Konzept vor, daß es ermöglichte feste Materie auch in nichtklassischer kristallographischer Weise anzuordnen.

1986 veröffentlichten *Henley* und *Elser* [18] mit Hilfe einer mit Atomen dekorierten dreidimensionalen Penrose Parkettierung simulierte Beugungsmuster, die eine große Ähnlichkeit mit denen des i-ALMn zeigen.

Zwei Jahre zuvor hatten *Levine* und *Steinhardt* [19] ihr Konzept einer neuen Klasse geordneter Strukturen, die sie Quasikristalle nannten, vorgestellt. Ihre Untersuchungen zeigen, daß die von ihnen zugrunde gelegten quasiperiodischen Gitter, die ebenfalls auf der von *Penrose* entwickelten aperiodischen Parkettierung beruhen, trotz „verbotener“ dekadogaler Rotationssymmetrie, perfekte Orientierungsfernordnung aufweisen, und daß die von ihnen simulierten Beugungsmuster ebenfalls denen des i-ALMn stark ähneln.

Mittlerweile sind zahlreiche Quasikristalle mit ein-, zwei- und dreidimensionaler Quasiperiodizität bekannt, wobei die zweidimensionalen Quasikristalle, die aus periodisch gestapelten, aperiodischen Schichten mit pentagonaler, oktagonaler, dekadogaler und dodekadogaler Rotationssymmetrie bestehen, besonders hervorzuheben sind.

Dreidimensionale quasiperiodische Strukturen können als dreidimensionale irrationale Schnitte von Objekten definiert und konstruiert werden, die im n -dimensionalen Raum ($n > 3$) periodisch sind. Ikosaedrische Quasikristalle können dabei grundsätzlich anhand bestimmter Baueinheiten in zwei Typen von Quasikristallen bzw. Approximanten unterteilt werden. Die Verbindungen, die den sogenannten Bergman Cluster oder Pauling Triakontaeder enthalten werden als Frank-Kasper-Typ (FK-Typ) bezeichnet, während der andere Typ aufgrund der in den Strukturen vorkommenden Mackay Ikosaeder, Mackay-Ikosaeder-Typ (MI-Typ) genannt wird.

Obwohl man mittlerweile in der Lage ist viele quasikristalline Verbindungen quasi-einkristallin und in ausreichender Qualität und Größe mit Hilfe standardisierter Verfahren wie der Czochralski- oder Bridgman-Stockberger Methode herzustellen [27], ist es nachwievor nicht möglich eine Strukturbestimmung wie bei periodischen Verbindungen durchzuführen. Da ihre Orientierungssymmetrie sich nicht mit dem dreidimensionalen Raum vereinbaren läßt, sind für die Bestimmung von Quasikristallen deshalb höherdimensionale Methoden notwendig. Arbeiten zum Thema Quasikristallographie, wie z. B. die Entwicklung höherdimensionaler Patterson Methoden, wurden von *Cahn* et al. [20],[21],[22] und *Steurer* [23] durchgeführt. Die Erarbeitung höherdimensionaler kristallographischer Methoden befindet sich jedoch noch in der Entwicklung, so daß die

Untersuchung von verwandten, kristallinen Verbindungen, den sogenannten Approximanten, sehr wichtig ist. Die Verwandtschaft der Approximanten mit den Quasikristallen äußert sich u. a. in der ähnlichen Zusammensetzung, durch Phasenübergänge von quasikristallinen in kristalline Phasen und umgekehrt, sowie durch ähnliche lokale Baueinheiten. Einen Überblick über die bislang bekannten Verbindungen mit Ikosaedern gibt die Tabelle in Anhang C. In ihr sind alle bisher in *Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases* vorgestellten Verbindungen aufgelistet, die mindestens einen Ikosaeder als Koordinationspolyeder enthalten.

Es handelt sich auch hierbei häufig um außerordentlich komplizierte Strukturen mit sehr großen Elementarzellen, die nur sehr schwer über die üblichen Strukturlösungsmethoden zugänglich sind. Für das Verständnis dieser komplexen Verbindungen ist deshalb das Studium der einfacheren intermetallischen Legierungen notwendig, um so einen Einblick in die grundlegenden Strukturprinzipien der Approximanten von Quasikristallen zu gewinnen.

Die bisher untersuchten quasikristallinen Verbindungen sind binärer und ternärer Natur, und lassen sich oft nur in engen Konzentrations- und Temperaturbereichen synthetisieren. Da eine systematische Analyse sämtlicher potentieller Phasendiagramme aus Zeit- und Kostengründen nicht möglich ist, erscheint es sinnvoll sich spezielle Syntheseprinzipien der Metallurgie zunutze zu machen, um die möglichen Ausgangszusammensetzungen der gewünschten Legierung schon im Vorhinein einzugrenzen. Die bereits zuvor durchgeführten Untersuchungen [74-77] haben gezeigt, daß nur wenige Faktoren die Bildung bestimmter Kristallstrukturen begünstigen. Aus theoretischen und experimentellen Arbeiten ist schon lange bekannt, daß sich neben der Größe, auch bestimmte Valenzelektronen zu Atom Verhältnisse (e/a) auf die Bildung von Quasikristallen bzw. Approximanten bestimmend auswirken [101-104].

Ziel der Untersuchung ist die Darstellung neuer Approximanten, deren zentrale Baueinheit das Mackay Ikosaeder bzw. der I13-Cluster ist. Es gilt herauszufinden, unter welchen Bedingungen, insbesondere im Hinblick auf bestimmte Zusammensetzungen und definierte e/a -Verhältnisse, die unterschiedlichen Approximanten gebildet werden. Daneben soll auch der Einfluß verschiedener Atomsorten, wie z.B. Aluminium und Gallium, auf die Bildung und Struktur der Approximanten untersucht werden.

Als besonders erfolgreich erscheinen hier die Untersuchungen im System Al-Mg-Pd. Röntgenbeugungsuntersuchungen durch *Koshikawa* et al. [112] haben ergeben, daß in diesem System Quasikristalle und Approximanten vom FK- und MI-Typ sowie dekagonale Verbindungen und deren Approximanten enthalten sind. Desweiteren existieren mit Mg_4Pd [54] und Mg_6Pd [99] zwei binäre Randphasen, deren komplexe Strukturen auf Mackay Ikosaedern basieren.

Zu Beginn werden in Kapitel 2 kurz die Begriffe Quasikristall und Approximant erläutert. Kapitel 3 behandelt die Strukturprinzipien intermetallischer Verbindungen, die sich insbesondere durch ikosaedrische Cluster auszeichnen. Es werden Konzepte zur Beschreibung solcher Strukturen erklärt. Nach der Erläuterung der experimentellen Methoden in Kapitel 4, werden im abschließenden fünften Kapitel die dargestellten Verbindungen vorgestellt und mit Hilfe der zuvor erläuterten Konzepte beschrieben.

Die Summenformel intermetallischer Phasen werden häufig aus Gründen der Vergleichbarkeit nicht als Formeleinheit sondern als Zusammensetzung in Atomprozent angegeben. In dieser Form bezieht sich die Summenformel in der Regel auf die Einwaage oder auf eine experimentell bestimmte Zusammensetzung. Innerhalb des Textes geben Summenformeln, soweit nicht anders angegeben, in dieser Arbeit stets eine Formeleinheit der Verbindung an.

Im überwiegenden Teil der Strukturzeichnungen gilt die Konvention, daß Magnesium mittels offener Kreise, Aluminium/Gallium grün und Palladium schwarz dargestellt ist.

2 Quasikristalle und Approximanten

2.1 Quasiperiodizität

Das Phänomen der Quasiperiodizität ist Mathematikern seit Jahrhunderten vertraut. So wurde ein einfaches Beispiel für eine eindimensionale, quasiperiodische Kette, bereits im 12. Jahrhundert durch den italienischen Mathematiker *Leonardo Fibonacci* entwickelt. Sie wird deshalb auch Fibonacci-Kette genannt (Abbildung 2.1). Die quasiperiodische Kette kann wie folgt erzeugt werden: Man wählt zwei unterschiedlich lange Abstände L und S zwischen zwei Punkten. Das Verhältnis zwischen dem langen Abstand L und dem kurzen Abstand S muß eine irrationale Zahl sein. Man startet mit zwei Punkten im Abstand L und setzt die Kette fort, indem man die Substitutionsregeln $L \rightarrow LS$ und $S \rightarrow L$ befolgt. Ist $L/S = \tau$, wobei τ den Goldenen Schnitt mit $\tau = \frac{(1+\sqrt{5})}{2} \approx 1,618034$ bezeichnet, so erhält man die Fibonacci-Kette.

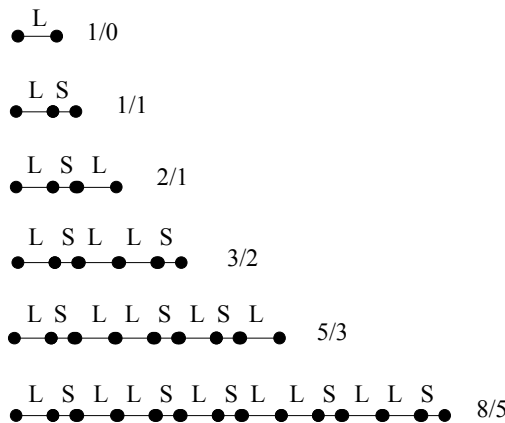


Abb. 2.1: Ketten aus einem langen Segment L und einem kurzen Segment S . Durch Substitution von $L \rightarrow LS$ und $S \rightarrow L$ können beliebig lange Ausschnitte der quasiperiodischen Ketten erzeugt werden.

Mittlerweile existieren verschiedene Methoden, um ein-, zwei- oder auch dreidimensionale quasiperiodische Abfolgen von Punkten, Flächen oder Polygonen zu

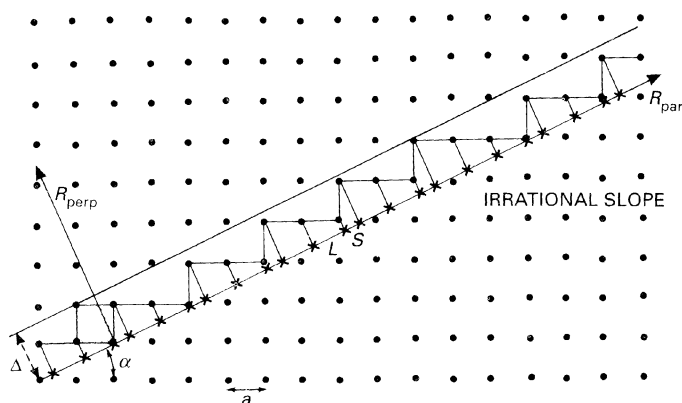


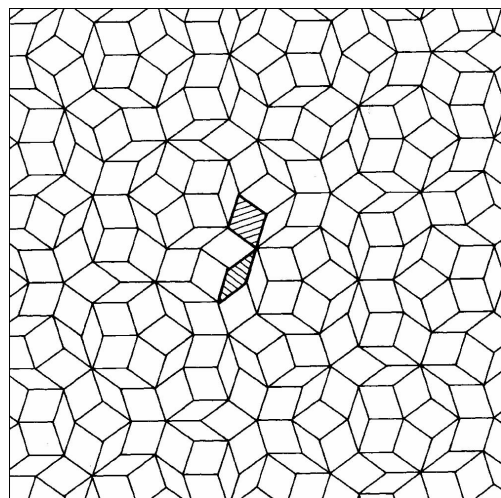
Abb. 2.2: Eine eindimensionale Illustration der Streifen-Projektions-Methode. Die Steigung von R_{par} ist irrational. Entspricht sie τ , so ergibt die Projektion auf R_{par} die Fibonacci-Kette.

erzeugen. Die wichtigsten sind die Grid- [24], die generalisierte duale Grid- [25] und die Streifen-Projektions-Methode [26], wobei die letztere, die am häufigsten verwendete Methode ist. In Abbildung 2.2 (entnommen [27]) wird anhand eines Beispiels verdeutlicht, wie durch Projektion eines zweidimensionalen,

periodischen Punktgitters eine eindimensionale, quasiperiodische Abfolge von Punkten generiert werden kann. Die Punkte eines zweidimensionalen kubischen Gitters können auf jeden beliebigen eindimensionalen Subraum \mathbf{R}_{par} projiziert werden, wobei \mathbf{R}_{par} eine Gerade ist, die im Winkel α zu den Punktreihen des Gitters steht. Senkrecht zu \mathbf{R}_{par} verläuft der komplementäre Raum \mathbf{R}_{perp} . Legt man nun einen Streifen in der Breite a parallel zu \mathbf{R}_{par} durch das Punktgitter und projiziert, wie in Abbildung 2.2 gezeigt, alle in dem Streifen befindlichen Gitterpunkte auf \mathbf{R}_{par} , so erhält man eine Abfolge von langen und kurzen Segmenten L und S . Hierbei gilt für $L = a \cdot \cos\alpha$ und $S = a \cdot \sin\alpha$. Daraus folgt für die Breite des Streifen $\Delta = a \cdot (\cos\alpha + \sin\alpha)$. Ist die Steigung von \mathbf{R}_{par} eine irrationale Zahl, z. B. $\frac{\cos\alpha}{\sin\alpha} = \tau$, so wird die Abfolge von L und S quasiperiodisch und entspricht der Fibonacci-Kette. 1974 entdeckte *Penrose* [16] eine faszinierende neue Klasse von quasiperiodischen Parkettierungen der Ebene, zwei regelmäßige Polygone, der „dicke“ und der „dünne“ Rhombus. Versucht man eine Penrose Parkettierung durch bloßes Aneinanderfügen von Kopien der beiden Rhomben zu erzeugen kommt es zu Fehlern. Unter anderem besteht die Möglichkeit, daß anstelle der quasiperiodischen eine periodische Parkettierung erzeugt wird. Durch einen Satz von Anlegeregeln, den sogenannten *matching rules*, wird jedoch eine periodische Lösung in jedem Fall verhindert. Diese Anlegeregeln reichen jedoch nicht aus, um unendlich große quasiperiodische Parkettierungen der Ebene zu erzeugen, da irgendwann entweder ein „toter Punkt“ erreicht wird, an dem ein Weiterbau nicht möglich ist, oder aber Eckkonfigurationen erhalten werden, die in einer Penrose Parkettierung verboten sind. In Abbildung 2.3 ist ein Beispiel für eine

zweidimensionale Penrose Parkettierung abgebildet. Die beiden Rhomben, in der Abbildung schraffiert dargestellt, haben einen Winkel von 144° und 36° bzw. 108° und 72° .

1982 greift *Mackay* *Penroses* Arbeit auf, und stellt als einer der Ersten ein theoretisches Konzept vor, daß es ermöglicht feste Materie auch in nichtklassischer kristallographischer Weise anzuordnen. Er verallgemeinerte das Konzept von



Penrose und verwendet, anstelle von fünf Vektoren die vom Zentrum eines Fünfecks zu

Abb. 2.3: Ein Ausschnitt aus einer zweidimensionalen Penrose Parkettierung.

dessen Ecken zeigen, einen Satz von sechs Vektoren, die parallel zu den fünfzähligen Drehachsen eines Ikosaeders liegen [17]. Der Begriff der Quasiperiodizität wurde 1984 von *Levine* und *Steinhardt* [28] eingeführt. Aufgrund von Modellrechnungen schlugen sie die dreidimensionale Penrose Parkettierung als mögliches Quasigitter für ikosaedrische Quasikristalle vor, eine Idee, die 1985 von *Duneau* und *Katz* [19] bestätigt wurde.

2.2 Quasikristalle

Schon lange beschäftigt man sich mit dem Ordnungszustand fester Materie. 1611 stellte *Johannes Kepler* in seinem Werk „*Strena Sev De Nive Sexangula*“ [15] den Zusammenhang zwischen sichtbarer Form, fester Materie und der räumlichen Anordnung ihrer Bestandteile fest. So begründete er z. B. die hexagonale Symmetrie von Schneeflocken mit Hilfe einer dichtesten Packung kugelförmiger Atome.

Die Idee, daß es neben den bekannten Ordnungszuständen fester Materie auch noch andere Ordnungsmöglichkeiten gibt, ist nicht so neu, wie es auf den ersten Blick scheint. Bereits Ende der zwanziger Jahre eröffnete *Dehlinger* mit seiner Arbeit über den Einfluß periodischer Gitterverzerrungen auf das Beugungsmuster, den „Gittergeistern“ [29], die Diskussion über Strukturen mit periodischen Gitterdeformationen, von denen 1936 der erste Vertreter im System Cu-Au durch *Johansson* und *Linde* [30] entdeckt wurde. Die formale Beschreibung, dieser inkommensurablen modulierten Strukturen mit Hilfe höherdimensionaler Raumgruppen, erfolgte Ende der siebziger Jahre durch *Janner* und *Janssen* [31],[32],[33],[34].

Insgesamt existieren drei verschiedene Typen von quasiperiodischen Strukturen, die modulierten Strukturen, die Komposit Kristalle und die Quasikristalle. Komposit Kristalle sind Verbindungen, die aus zwei oder mehreren dreidimensionalen Gittern bestehen, die zueinander inkommensurabel sind. Sowohl den modulierten Strukturen als auch den Komposit Kristallen ist gemeinsam, daß ihre Beugungsmuster dreidimensionale periodische Strukturen und kristallographische Punktsymmetrien aufweisen. Im Gegensatz dazu gibt es in den Beugungsmustern der Quasikristalle keine dreidimensionalen periodischen Strukturen. Sie weisen zudem nichtkristallographische Punktsymmetrien auf, zwei Merkmale, die sie von den modulierten Strukturen und den Komposit Kristallen unterscheiden. Die Annahme, daß auch in der Natur Verbindungen mit ikosaedrischer

Symmetrie existieren, wurde 1984 von *Shechtman* et al. [14] durch die Entdeckung einer ikosaedrischen Phase (i-Phasen) in schnell abgekühlten Aluminium-Mangan Legierungen bestätigt.

1986 zeigten *Henley* und *Elser* [18], daß die meisten i-Phasen anhand ihrer Beugungsmuster in zwei große Klassen eingeteilt werden können. Sie unterscheiden die i-AlMnSi und die i-(Al,Zn)Mg Klasse. Aufgrund ihrer Untersuchungen an den verwandten kristallinen Verbindungen α -AlMnSi [35] und $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ [36], schlugen *Mukhopadhyay* et al. [37] 1988 ein Strukturmodell für Quasikristalle dieser beiden Klassen vor. Danach sollen die Quasikristalle vom i-AlMnSi-Typ aus einem mit Mackay Ikosaedern dekorierten dreidimensionalen Penrose Tiling aufgebaut sein. Anstelle der Mackay Ikosaeder enthalten Quasikristalle vom i-(Al,Zn)Mg-Typ den sogenannten Bergman Cluster. Analog zu den Frank-Kasper Phasen können Quasikristalle vom i-(Al,Zn)Mg-Typ auch als Netzwerk von Tetraedern beschrieben werden, während das Netzwerk der Verbindungen vom i-AlMnSi-Typ sowohl Tetraeder als auch Oktaeder enthält und demnach nicht zu den Frank-Kasper Phasen gehört. Mittlerweile ist es üblich diese beiden Klassen als Frank-Kasper- (FK-Typ) oder Mackay-Ikosaeder-Typ (MI-Typ) zu bezeichnen.

Die meisten bekannten Quasikristalle sind metastabil und lediglich aus schnell abgekühlten Schmelzen zu erhalten. Das bekannteste Beispiel sind hierfür die ersten je entdeckten quasikristallinen Verbindungen i-AlMn bzw. i-AlMnSi [38],[39],[40]. Die wichtigste Herstellungsmethode für Quasikristalle dieser Art ist die sogenannte Schmelz-Spin Methode. Dabei wird eine flüssige Schmelze auf gekühlten, rotierenden Rädern abgeschreckt. Allerdings können auf diese Weise nur mikrokristalline Proben und keinerlei Quasi-Einkristalle erzeugt werden.

Die Entdeckung thermodynamisch stabiler ikosaedrischer Quasikristalle im System Al-Cu-Li [41],[42],[43],[44] ermöglichte zwar erste Röntgen- bzw. Neutronenbeugungsexperimente an Einkristallen, jedoch war die Qualität und Größe jener Quasi-Einkristalle aufgrund zahlreicher intermediärer Phasen und einer großen Al/Li-Unordnung nachwievor ungenügend. Sie konnten erst in ausreichender Qualität und Größe in den Systemen Al-Cu-M (M = Fe, Ru, Os) [45],[46] und Al-M-Pd (M = Mg, Mn, Re) [47],[48] gewonnen werden, so daß nun das Material für eine umfassendere Datensammlung zur Verfügung steht. Anhand der Beugungsmuster ist es möglich weitere

Informationen über die Art der Struktur der Quasikristalle zu erlangen. Mit Hilfe der systematischen Auslöschungen können Aussagen über die Zentrierung des höherdimensionalen Gitters getroffen werden, und so können primitiv-ikosaedrische ($Pm\bar{3}5$) und flächenzentriert-ikosaedrische Phasen ($Fm\bar{3}5$) voneinander unterschieden werden. Für beide Formen der Zentrierung existieren Verbindungen vom Mackay-Ikosaeder- und Frank-Kasper-Typ.

Tabelle 2.1:
Höherdimensionale Raumgruppen und Strukturtypen ikosaedrischer Quasikristalle [49], [50]

Ikosaedrische Raumgruppe	Strukturtyp	Beispiele
$Pm\bar{3}5$	MI-Typ	i-Al-Mn, i-Al-Mn-Si, i-Al-Mg-Pd
$Pm\bar{3}5$	FK-Typ	i-Al-Cu-Li, i-Ga-Mg-Zn, i-Al-Mg-Pd
$Fm\bar{3}5$	MI-Typ	i-Al-Cu-Fe, i-Al-Pd-Mn
$Fm\bar{3}5$	FK-Typ	i-Al-Mg-Li, i-Zn-Mg-Y

2.3 Raumparkettierungen

Als Beispiel für eine quasiperiodische Raumparkettierung wurde in Kapitel 2.1 bereits die zweidimensionale Penrose Parkettierung vorgestellt. Unter einer Raumparkettierung bzw. einem dreidimensionalen *Tiling* versteht man die lückenlose und überschneidungsfreie Zerlegung des Raumes in geometrische Körper. Diese werden *Tiles* genannt. *Tiles* mit identischen Größen und Formen sind Kopien eines ursprünglichen Körpers, dem sogenannten *Prototile* [51]. Demnach stellt die Zerlegung der Struktur eines periodischen Kristalls in Elementarzellen eine Raumparkettierung mit einem einzigen *Prototile* mit nur einer einzigen Orientierung dar. In Anlehnung an die herkömmliche Kristallographie kann man *Prototiles* daher auch als Elementarzellen einer Raumparkettierung verstehen.

Von besonderem Interesse für die Beschreibung sowohl periodischer als auch quasiperiodischer Strukturen sind Raumparkettierungen mit einer möglichst geringen Anzahl unterschiedlicher *Prototiles*. Ein Problem bei der vollständigen Analyse quasikristalliner Verbindungen ist die Tatsache, daß bei einer vorgegebenen Anzahl von *Prototiles* unendlich viele geometrisch unterscheidbare quasiperiodische Parkettierungen

existieren, die sich jedoch zu einer *lokalen Isomorphismus Klasse (LI)* zusammenfassen lassen [52]. Zwei zweidimensionale Raumparkettierungen sind dann *lokal isomorph*, wenn innerhalb eines Kreises vom Radius r beide Parkettierungen gleiche finite Strukturformen aufweisen, wobei sich die sogenannten *r-maps* in Orientierung und Skalierung voneinander unterscheiden dürfen. Besitzen zwei Parkettierungen identische Orientierungssymmetrie und Quasiperiodizität, gehören jedoch nicht der gleichen *lokalen Isomorphismusklasse* an, so weisen ihre Beugungsmuster eine unterschiedliche Intensitätsverteilung auf. Art, Form und die Zugehörigkeit der *Tiles* zu identischen *LI* allein reichen nicht aus, um eine quasiperiodische Parkettierung zu generieren. Erst durch speziellen Anlegeregeln, den *matching rules*, ist die Quasiperiodizität der Raumparkettierung gewährleistet. Die Existenz solcher Regeln wurden zuerst von *Penrose* [16],[53] sowie *Conway* [53] und *Ammann* [33] bewiesen. Weitere Details zum Thema *matching rules* finden sich in [24].

Um aus Modellen reale Strukturen zu erzeugen, werden die einzelnen Atompositionen in den *Prototiles*, die atomare Dekoration, benötigt. Bei einer quasiperiodischen Raumparkettierung ist es nicht so ohne weiteres möglich vollständige Informationen über, die aus den atomaren Dekorationen resultierenden lokalen Eigenschaften, wie Koordinationspolyeder und Atomabstände, zu erlangen. Kennt man jedoch die Zahl der Anordnungsmöglichkeiten der *Tiles* um einen Eckpunkt herum, können auch die lokalen Umgebungen analysiert werden. Diese Anordnungsmöglichkeiten werden auch Eckkonfigurationen genannt. Unter ihnen versteht man in einer dreidimensionalen Parkettierung eine spezielle Anordnung von Polyedern, die alle an einem Punkt zusammentreffen und den vollen Raumwinkel einschließen. Dabei sind drei Fälle zu unterscheiden: (i) die geometrisch möglichen Eckkonfigurationen unter Mißachtung der *matching rules*, (ii) die nach den *matching rules* erlaubten Eckkonfigurationen und (iii) die in quasiperiodischen Raumparkettierungen tatsächlich vorkommenden Eckkonfigurationen. Dabei sind die in einer quasiperiodischen Parkettierung nicht vorkommenden Konfigurationen ebenfalls von Interesse, weil sie Defekten in Quasikristallen bzw. tatsächlichen lokalen Umgebungen von Approximanten entsprechen. Eine eingehendere Analyse der Eckkonfigurationen ist in [54] vorgestellt.

Bereits 1982 hat Mackay gezeigt, daß die dekorierte zweidimensionale Penrose Parkettierung ein Beugungsmuster mit fünfzähliger Symmetrie ergibt [55]. Aus diesem Grund wurde dieser Typ Raumparkettierung schnell mit den Quasikristallen in Verbindung

gebracht, und zudem zahlreiche neue Parkettierungen zur Beschreibung und Modellierung von Quasikristallen und Approximanten entwickelt. Die Rhomboeder Parkettierung, die kanonische Zellparkettierung und die Raumparkettierung von *Socolar* und *Steinhardt* sollen im folgenden kurz vorgestellt werden.

2.3.1 Die Rhomboeder Parkettierung

Als einfachsten Satz von zwei unterschiedlichen „Elementarzellen“ zur Beschreibung dreidimensionaler ikosaedrischer Quasigitter nennen *Levine* und *Steinhardt* [19] das „spitze“ und das „flache“ Rhomboeder, im englischen Sprachgebrauch *oblate* (OR) und *prolate Rhombohedron* (PR) genannt. Beide besitzen identische Rhomben als Flächen und das Verhältnis der kurzen zur langen Diagonalen ist gleich dem Goldenen Schnitt τ .

Kowalewski [56] wies 1938 darauf hin, daß zehn PR und zehn OR so angeordnet werden können, daß sie ein sogenanntes Rhomben-Triakontaeder bilden. Die Kanten des Rhomboeders sind entlang eines Vektorsterns orientiert, dessen Spitzen auf die Eckpunkte eines regulären Ikosaeders zeigen, so daß das Triakontaeder vollständige ikosaedrische Symmetrie besitzt. In einer allgemeinen, dreidimensionalen ikosaedrischen Packung von OR und PR besteht ein Verhältnis zwischen der Anzahl von OR zu PR von $1:\tau$ [19].

Die Kantenlänge der rhombischen Flächen a_r entspricht der aus den Beugungsmustern ikosaedrischer Quasikristallen bestimmten Quasigitterkonstante und wird von *Elser* mit $a_r = 4,6 \text{ \AA}$ für i-AlMn angegeben [57].

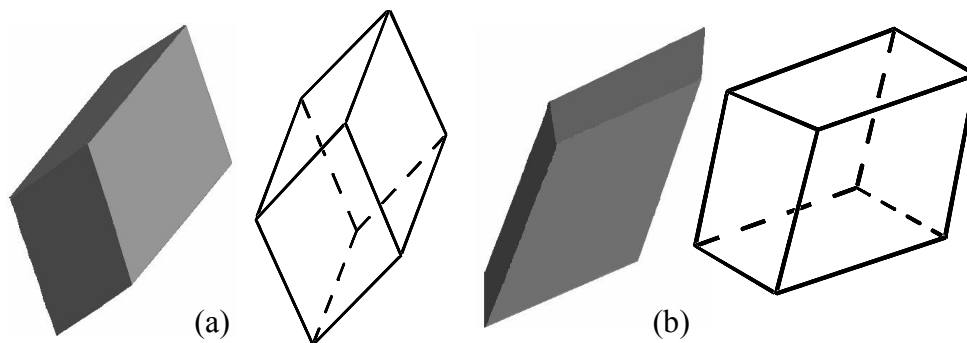


Abb. 2.5: „Elementarzellen“ des Rhomboeder Tilings: (a) spitzes Rhomboeder (PR), (b) flaches Rhomboeder (OR)

2.3.2 Die kanonische Zellparkettierung

Henley [58] versteht die von ihm entwickelte kanonische Zellparkettierung als eine Kombination aus Dekorationsmodell und ikosaedrischem Netzwerk. Zahlreiche Analysen haben gezeigt, daß die strukturelle Beschreibung von quasikristallinen Verbindungen über Dekorationsmodelle, wie z. B. die Rhomboeder Parkettierung (vgl. Abschnitt 2.3.1), am einfachsten zugänglich sind. Jedoch existiert bislang noch kein atomares Strukturmodell für Quasikristalle, das (i) mögliche Besetzungsunordnungen oder statistische Verteilungen auf bestimmten Atompositionen berücksichtigt, (ii) weitgehende Übereinstimmung mit experimentell gefundenen Beugungsmustern aufweist, (iii) variable Parameter zur Angleichung des Modells an experimentelle Daten und (iv) chemisch sinnvolle lokale Umgebungen (Atomabstände, Koordinationspolyeder, etc.) besitzt.

Tabelle 2.2: Geometrische Daten zu den kanonischen Zellen

	Symbol	Identifikation	Symmetrie	Abmessung
Bindungen	b	2-zählige Bindung	2/mm	b
	c	3-zählige Bindung	$\bar{3}m$	$(3^{1/2}/2) \cdot b$
Flächen	X	gleichschenkliges Dreieck	2m	$(2^{1/2} \cdot 2)^{-1} \cdot b^2$
	Y	gleichseitiges Dreieck	3m	$(3^{1/2}/4) \cdot b^2$
	Z	Rechteck	2/m	$(3^{1/2}/2) \cdot b^2$
Zellen	A	bcc Tetraeder	2m	$(1/12) \cdot b^3 \approx 0,083 \cdot b^3$
	B	Halboktaeder	m	$(5^{1/2}/12) \cdot b^3 \approx 0,186 \cdot b^3$
	C	triangulierte Pyramide	3m	$(5^{1/2}/24) \cdot b^3 \approx 0,093 \cdot b^3$
	D	trigonales Prisma	3m	$(3/8) \cdot b^3 \approx 0,375 \cdot b^3$

Untersuchungen ikosaedrischer Quasikristalle haben ergeben, daß diese aus einem Netzwerk aus ikosaedrischen Clustern aufgebaut sind [74]. Auch in Modellstrukturen gewährleistet die Anordnung ikosaedrischer Baueinheiten in einem vorgegebenen Netzwerk Quasiperiodizität. Es ist jedoch außerordentlich schwierig eine Struktur auf diese Weise vollständig zu determinieren, da die verbindenden Atome zwischen den ikosaedrischen Clustern, die sogenannten „Glueatoms“, undefiniert bleiben. Die von *Henley* entwickelte kanonische Zellparkettierung verwendet vier unterschiedliche Polyeder A, B, C und D, die auch Zellen genannt werden. Sie sind in Abbildung 2.6 dargestellt. Die

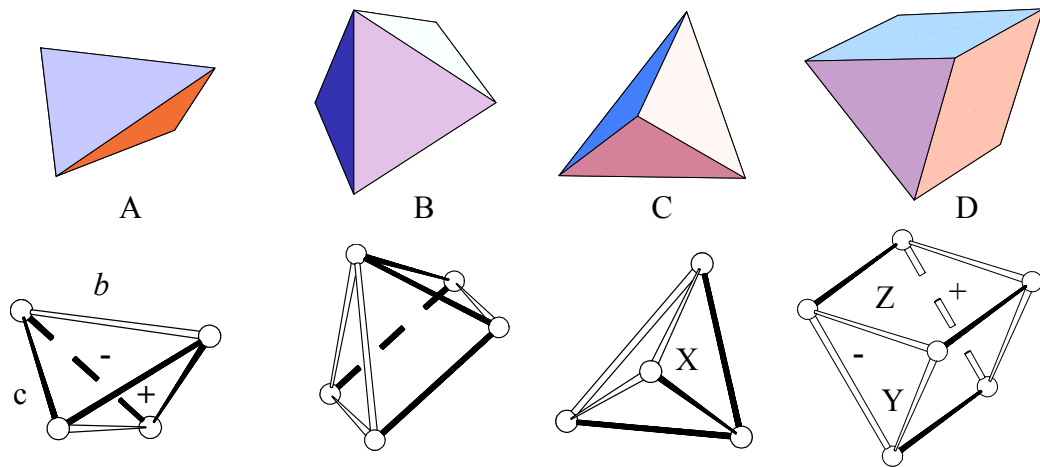


Abb. 2.6: Die vier kanonischen Zellen (die zweizählige Verbindung b ist weiß, die dreizählige Verbindung c schwarz dargestellt): (a) A-Zelle, (b) B-Zelle, (c) C-Zelle, (d) D-Zelle. Die drei unterschiedlichen Flächen X , Y und Z sind in (c) und (d) markiert.

wesentlichen Unterschiede zur Rhomboeder Parkettierung liegen in der anderen Orientierung der Zellkanten sowie deren unterschiedliche Länge zueinander. Letzteres führt außerdem zu unterschiedlich großen Flächen der Zellen (vgl. Tabelle 2.2). Die kanonische Zellparkettierung besitzt zwei voneinander verschiedene Bindungen b und c . Bindung b (in Abbildung 2.6 weiß) ist entlang der zweizähligen Drehachse eines regulären Ikosaeders orientiert und es gilt $b = 2 \cdot \sqrt{\left(\frac{\tau^3}{\sqrt{5}}\right)} \cdot a_r$. Entlang der dreizähligen Achse verläuft Bindung c (in Abbildung 2.6 schwarz) mit der Länge $c = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot b$. Aus b und c setzen sich die drei in der kanonischen Zellparkettierung vorkommenden Typen von Flächen zusammen. Das gleichschenklige Dreieck X mit einer b - und zwei c -Bindungen (Abbildung 2.6 (c)), das gleichseitige Dreieck Y bestehend aus drei b -Bindungen sowie die rechteckige Fläche Z , die sich aus je zwei b - und c -Bindungen zusammensetzt, die sich jeweils gegenüberliegen (Abbildung 2.6 (d)).

Tabelle 2.3: Aufbau einiger Approximanten mit kanonischer Zellparkettierung

p/q	Raumgruppe	Gitterparameter	Zerlegung		
			A	BC	D
1/1	$\text{Im}\bar{3}$	$a_{\text{cub}} = b$	12	0	0
1/1-R	$\text{R}\bar{3}\text{m}$	$a_{\text{rh}} = c$	0	2	0
2/1-1/1-2/1	Pnma	$a_o = c_o = \tau b$ $b_o = b$	0	4	4
2/1	$\text{Pa}\bar{3}$	$a_{\text{cub}} = \tau b$	24	8	0
3/2-2/1-2/1	$\text{Cmc}2_1$	$a_o = \tau^2 b$ $b_o = c_o = \tau b$	24	12	4
3/2-2/1-2/1	$\text{P}2_1/\text{c}$	$a_o = \tau^2 b$ $b_o = c_o = \tau b$ $\beta = 90^\circ$	24	12	4
3/2-OR	$\text{R}3\text{m}$	$a_{\text{rh}} = \tau^3 a_{\text{R}}$ $\alpha_{\text{rh}} = 116,57^\circ$	6	3	1
3/2	$\text{Pa}\bar{3}$	$a_{\text{cub}} = \tau^2 b$	72	32	8

In der kanonischen Zellparkettierung existieren insgesamt 32 unterschiedliche Eckkonfigurationen [59],[40] jedoch gibt es bis heute keine direkten Regeln, um mit Hilfe der kanonischen Zellen eine quasiperiodisches Raumparkettierung zu erzeugen. Es wurde allerdings schon die Konstruktion sehr großer Approximanten beschrieben [54]. Einige Daten zu den 1/1-, 2/1-, 3/2-2/1-2/1- und 3/2 Approximanten finden sich in Tabelle 2.3.

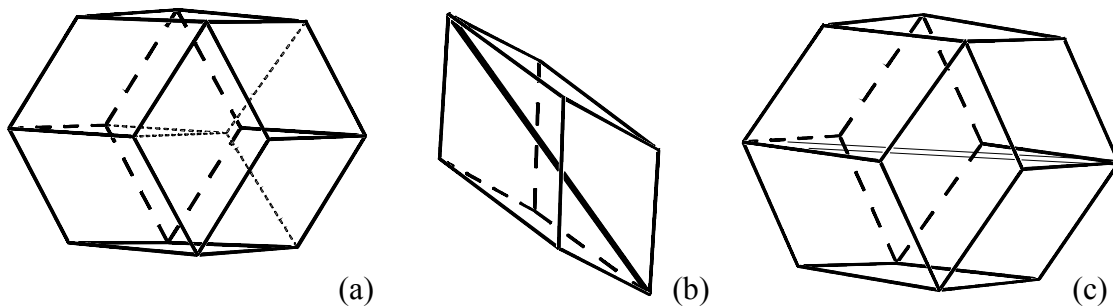


Abb. 2.7: Dekoration der kanonischen Zellen: (a) Zerlegung des RD in zwei OR und zwei PR. (b) PR entlang der dreizähligen Verbindung. (c) RD entlang der zweizähligen Verbindung.

Tabelle 2.4: Daten zu PR und RD

	Rhomboeder (PR)	Rhombischer Dodekaeder (RD)
Anzahl Ecken, Kanten, Flächen	8, 12, 6	14, 24, 12
Anzahl der Vektoren im Stern	3	4
mögliche Orientierungen	20	30
Volumen	$V_R = \sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{8}} \cdot a_R^3$	$V_{RD} = 2 \cdot \tau \cdot V_R$
kurze Diagonale	$2 \cdot \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \cdot a_R$	-
lange Diagonale	$2 \cdot \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \cdot \tau \cdot a_R$	-
Diagonale d_2	-	$2 \cdot \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \cdot \tau \cdot a_R$
Zerlegung in OR und PR	1 + 0	2 + 2

Die Eckpunkte der kanonischen Zellen werden auch Knoten und die Eckkonfigurationen dementsprechend Knotenumgebungen genannt. Jeder Knoten repräsentiert das Zentrum eines Mackay Icosaeders oder Bergman Clusters. Eine sogenannte Standarddekoration [74] ermöglicht es, jedes Netzwerk aus kanonischen Zellen in eine Anordnung aus drei rhomboedrigen Baueinheiten zu überführen. In Abbildung 2.7 sind die entsprechenden Polyeder dargestellt.

Das „spitze“ (OR) und das „flache“ Rhomboeder (PR) sind bereits aus dem Rhomboeder Tiling bekannt (Abbildung 2.5). Als dritte Baueinheit wird das Rhombendodekaeder (RD) verwendet, ein Zonoeder, das wiederum aus zwei OR und zwei PR aufgebaut ist, jedoch im Folgenden als Ganzes verwendet wird (Abbildung 2.7 (a)).

Jede c -Bindung innerhalb der kanonischen Zellparkettierung wird nun durch ein PR

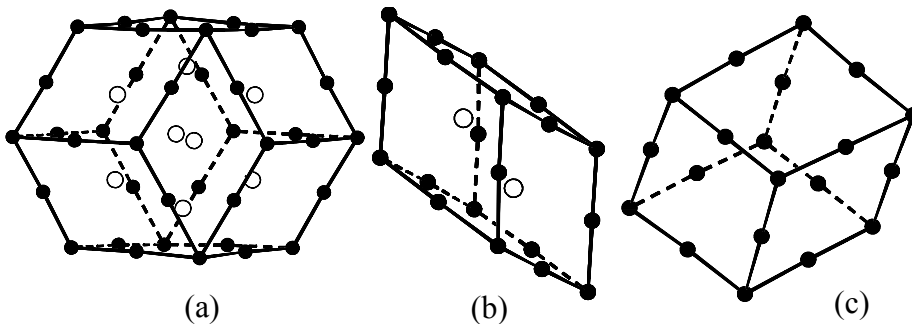


Abb. 2.8: Atomare Dekoration des: (a) RD, (b) PR und (c) OR.

ersetzt, wobei c die beiden „Spitzen“ des PR miteinander verknüpft. Auf die gleiche Weise werden alle b -Bindungen durch RD ersetzt. Die Polyeder entlang der Kanten der kanonischen Zellen füllen den dreidimensionalen Raum nicht vollständig aus, sondern es werden aufgrund ihrer Anordnung weitere OR und PR erzeugt [74]. Es wurden verschiedene atomare Dekorationen der drei Polyeder für unterschiedliche ikosaedrische Quasikristalle abgeleitet [42],[44],[46]. In Abbildung 2.8 ist das Modell für i -AlMgZn von *Henley* und *Elser* [60] dargestellt. Alle Ecken und Kantenmitten des PR und des RD weisen eine Mischbesetzung mit Aluminium und Zink auf. Magnesium befindet sich im Innern der Polyeder.

Die Knoten, d. h. die Endpunkte der zwei- bzw. dreizähligen Verbindungen sind Zentren von Bergman Clustern, die nach dem Henley-Elser Modell besetzt, nach neueren Ergebnissen jedoch unbesetzt sein sollen [54].

2.3.3 Die Raumparkettierung von Socolar und Steinhardt

Mit Hilfe der generalisierten dualen Grid-Methode [25] erhielten *Socolar* und *Steinhardt* eine Raumparkettierung aus vier unterschiedlichen Zonoedern [61]. Zonoeder sind konvexe Polyeder, die von Parallelogrammen begrenzt sind. Wenn n die Zahl der Basisvektoren ist, durch die ein Zonoeder aufgespannt wird, so ist $n(n-1)$ die Anzahl seiner Flächen. Auch die Zonoeder Parkettierung von *Socolar* und *Steinhardt* basiert auf einem Vektorstern, dessen Spitzen auf die Eckpunkte eines regulären Ikosaeders zeigen. In Abbildung 2.9 sind die vier Elementarzellen der Raumparkettierung dargestellt.

Gleichzeitig mit den vier Elementarzellen erzeugt die generalisierte duale Grid-Methode auch *matching rules*, die in Form von Linien, Pfeilen und Doppelpfeilen im unteren Teil der Abbildung 2.9 zu sehen sind. Die Flächen des RT sind ausschließlich mit einer Linie gekennzeichnet, während die in der Abbildung nicht sichtbaren Flächen des RD, aufgrund der Spiegelebene senkrecht zur Blickrichtung, ebenso markiert sind wie die sichtbaren. Das gleiche gilt auch für die Flächen des PR, wobei jedoch das PR anstelle der Spiegelebene eine dreizählige Drehachse entlang der Raumdiagonalen besitzt.

Zwischen der in Kapitel 2.3.1 beschriebenen Rhomboeder Parkettierung und der Raumparkettierung von *Socolar* und *Steinhardt* besteht eine große Ähnlichkeit, da sie identische Basisvektoren verwenden. Sowohl die Kanten als auch die Rhomboederflächen

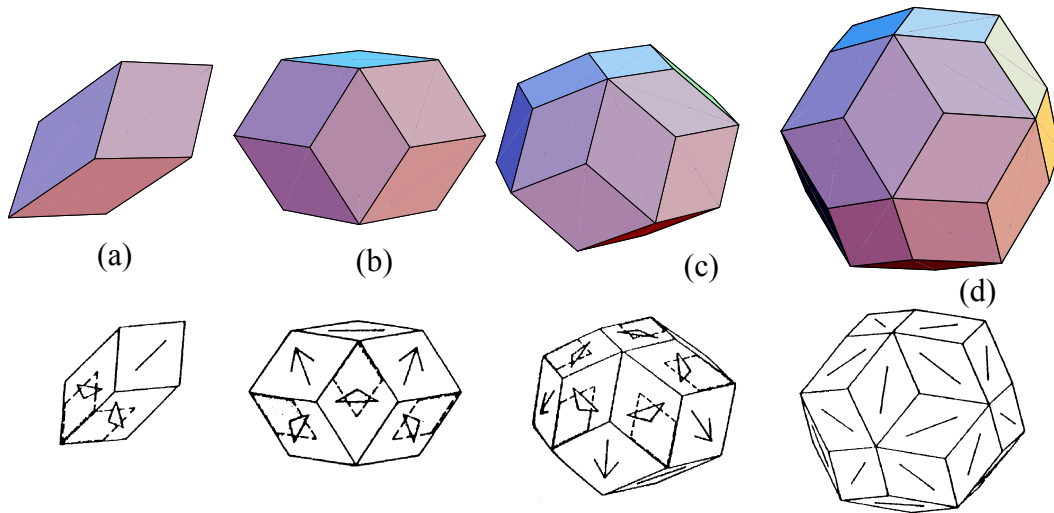


Abb. 2.9: Die vier Elementarzellen der Raumparkettierung von Socolar und Steinhardt: (a) Rhomboeder (PR), (b) Rhombendodekaeder (RD), (c) Rhombenikosaeder (RI) und (d) Triakontaeder (RT). Der untere Teil der Abbildung wurde [54] entnommen.

sind identisch. Zudem können RD, RI und RT in die beiden Polyeder der Rhomboeder Parkettierung zerlegt werden, wobei jedoch der Vorteil der Zonoeder Parkettierung darin besteht, daß die größeren Elementarzellen auch komplette atomare Cluster beinhalten können und die *matching rules* eindeutiger sind.

Ein naher Verwandter der Raumparkettierung von Socolar und Steinhardt ist die 1988 von Danzer entdeckte {ABCK}-Parkettierung [62], die aus vier Tetraedern A, B, C und K besteht. Die τ -Skalierungsinvarianz der {ABCK}-Parkettierung deutet auf eine strukturelle Verwandtschaft mit Quasikristallen der ikosaedrischen Raumgruppe $Fm\bar{3}5$ hin, deren experimentell gefundene Beugungsmuster ebenfalls τ skaliert sind. Tatsächlich war die {ABCK}-Parkettierung die erste sinnvolle τ -skalierte Raumparkettierung.

Später entdeckten Danzer et al. [63] und Roth [64] unabhängig voneinander, daß beide Raumparkettierungen gegenseitig ineinander überführbar sind. Die Eckpunkte des {ABCK}-Tilings sind eine spezielle Dekoration der Raumparkettierung von Socolar und Steinhardt, welche die für primitiv ikosaedrische Quasikristalle typische τ^3 -Skalierung der Zonoeder Parkettierung auf τ reduziert. Eine Zerlegung der Zonoeder in A-, B-, C- und K-Tetraeder ist immer eindeutig bestimmt. Auf der anderen Seite gehören die Eckpunkte der Zonoeder Parkettierung zu einer Subklasse der Ecken der {ABCK}-Parkettierung. In dem Versuch das {ABCK}-Tiling zu dekorieren entdeckte Danzer eine von i-AlCuLi inspirierte Anordnung mit τ^3 -Skalierung [65]. Um von einer Zonoeder-Anordnung zu

atomaren Strukturmodellen zu gelangen, ist eine Dekoration der Zonoeder notwendig. Eine spezielle Dekoration muß zu physikalisch akzeptablen Atomabständen, strukturell sinnvollen Koordinationspolyedern kommen, sowie eine mit experimentell gefundenen Werten vergleichbare Dichte und chemische Zusammensetzung ergeben. Für Atome, deren Koordinationssphären vollständig innerhalb eines Zonoeders liegen, können Atomabstände und Koordinationspolyeder einfach bestimmt werden, dagegen müssen bei Atomen, deren Koordinationspolyeder teilweise durch Atome anderer Zonoeder gebildet werden, vollständige Eckkonfigurationen betrachtet werden [54].

Für das ternäre System Ag-Al-Mg wurde von *Spiekermann* eine Dekoration der Zonoeder entwickelt [54]. In dem System existieren über einen großen Zusammensetzungsbereich metastabile Quasikristalle sowie der 1/1-Approximant vom FK-Typ. Es existieren bereits ähnliche Dekorationen für i-CdCu [76] und i-AlMnSi [74].

3 Intermetallische Verbindungen mit ikosaedrigen Clustern

3.1 Einleitung

Etwa 25000 gut charakterisierte intermetallische Verbindungen kristallisieren in über 2000 unterschiedlichen Strukturtypen [66]. Etwa 200 davon enthalten Ikosaeder als Koordinationspolyeder (siehe Tabelle der Strukturtypen, die Ikosaeder als Koordinationspolyeder enthalten in Anhang C). *Laves* erkannte, daß unter der Voraussetzung bestimmter Radienverhältnisse sowie eines bestimmten Zusammensetzungsbereichs, die Packung verzerrter Ikosaeder optimale Raumerfüllung ermöglicht [67],[68]. In Kristallstrukturen, die aus Atomen unterschiedlicher Größe bestehen, sind deshalb besonders häufig Ikosaeder als Koordinationspolyeder anzutreffen. Dabei wird davon ausgegangen, daß die kleineren Atome die Zentren der Ikosaeder bilden.

Shoemaker und *Shoemaker* geben in [69] eine Übersicht über die unterschiedlichen Verknüpfungsmöglichkeiten von Ikosaedern untereinander sowie deren unterschiedliche Orientierungen im kristallinen Raum. In den Strukturen der Quasikristalle und ihrer Approximanten, sowohl vom MI- als auch vom FK-Typ, spielen spitzenverknüpfte und sich gegenseitig durchdringende Ikosaeder eine besondere Rolle.

Abbildung 3.1 zeigt zwei unterschiedliche Arten der Spitzenverknüpfung, wobei (a) eine ekliptische und (b) eine gestaffelte Anordnung zeigt. Daraus resultieren zwei unterschiedliche Koordinationspolyeder für das jeweils verknüpfende Atom. In der für die MI-Typ Quasikristalle und Approximanten typischen ekliptischen Anordnung ist das

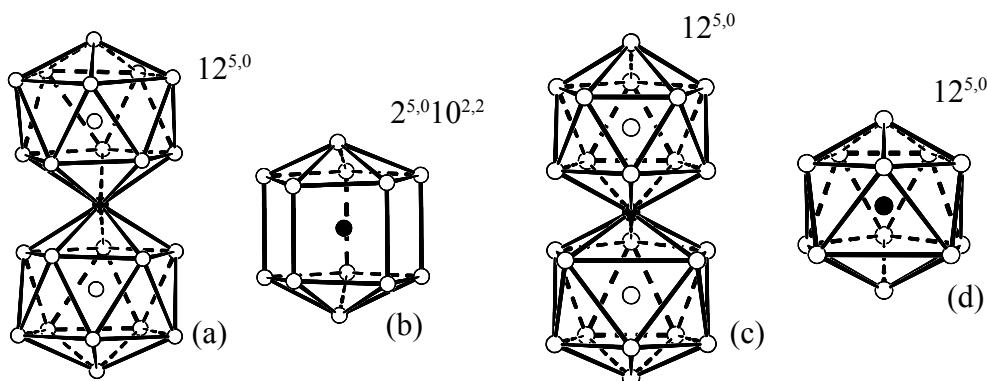


Abb. 3.1: Spitzenverknüpfte Ikosaeder. In (a) ist eine ekliptische Anordnung von spitzenverknüpften Ikosaedern mit dem pentagonal prismatisch koordinierten Brückenatom (b) dargestellt. Die gestaffelte Anordnung in (c) mit dem ebenfalls ikosaedrisch koordinierten Brückenatom in (d). Der Übersicht halber wurde das verknüpfende Atom schwarz, alle übrigen Atome weiß gezeichnet.

verknüpfende Atom zweifach überdacht pentagonal prismatisch koordiniert, während in der für den FK-Typ charakteristischen gestaffelten Orientierung das verknüpfende Atom erneut ikosaedrisch umgeben ist. Der letztgenannte Verknüpfungstyp ist charakteristisch für viele tetraedrisch dicht gepackte (t.c.p.) Strukturen, zu denen auch die Frank-Kasper-Phasen gehören.

3.2 Tetraedrisch dicht gepackte Strukturen

Tetraedrisch dicht gepackte Strukturen enthalten laut Definition von *Shoemaker* und *Shoemaker* [70] (i) nur Tetraeder und (ii) triangulierte Koordinationspolyeder mit den Koordinationszahlen 12, 14, 15 und 16. Bereits 1958 haben *Frank* und *Kasper* [71],[72] gezeigt, daß Strukturen ausschließlich mit Tetraederlücken aufgebaut werden können, wenn sie lediglich triangulierte Koordinationspolyeder enthalten, an deren Eckpunkten jeweils fünf oder sechs Dreiecksflächen zusammentreffen. Mit Hilfe des Eulerschen Polyedersatzes bewiesen sie, daß es nur drei mögliche Polyeder mit triangulierter Oberfläche, nämlich die bereits erwähnten CN14-, CN15- und CN16-Polyeder, gibt, die gleichzeitig eine fünf- bzw. sechsfache Oberflächenkoordination der Atome auf den Eckpunkten aufweisen [73]. Weder existiert ein CN13-Polyeder, noch ein Koordinationspolyeder mit einer Koordinationszahl $CN > 16$, daß den genannten Bedingungen entspricht. In Abbildung 3.2 sind neben dem Ikosaeder (CN12), die für die FK-Phasen charakteristischen Koordinationspolyeder dargestellt. Jedes Polyeder hat 12 fünfzählige und $N-12$ sechszählige Ecken, wobei N die Koordinationszahl ist. Das Frank-Kasper CN16-Polyeder wird häufig als abgeschnittenes Tetraeder dargestellt, das auch Friauf Polyeder genannt wird. Dabei werden die vier sechszähligen Ecken abgeschnitten und zurück bleibt ein Tetraederstumpf wie er in Abb. 3.2 (e) dargestellt ist.

Die sogenannten FK-Phasen unterscheiden sich in einem Punkt von den oben genannten t.c.p. Strukturen. Nach der ursprünglichen Definition von *Frank* und *Kasper*, können FK-Phasen zusätzlich zu den Punkten (i) und (ii) noch aus ebenen Schichten und Zwischenschichten aufgebaut werden. Allerdings stellten selbst *Frank* und *Kasper* die strikte Planarität jener Schichten in Frage, so daß beide Begriffe, t.c.p.- oder FK-Phasen, heutzutage synonym verwendet werden.

Die mittlere Koordinationszahl der FK-Phasen befindet sich in einem Bereich zwischen

12,9 und 13,5 bei durchschnittlich 13,35 und ist, wie bereits erwähnt, abhängig vom Radienverhältnis der Atome. Ein größerer Quotient bedeutet höhere Koordinationszahlen der nicht ikosaedrisch umgebenen Atome sowie eine gleichzeitige Erhöhung der Anzahldichte der Ikosaeder. In Verbindungen deren Komponenten näher an einem Radienverhältnis von 1,11 liegen wird die mittlere Koordinationszahl demnach kleiner 13.

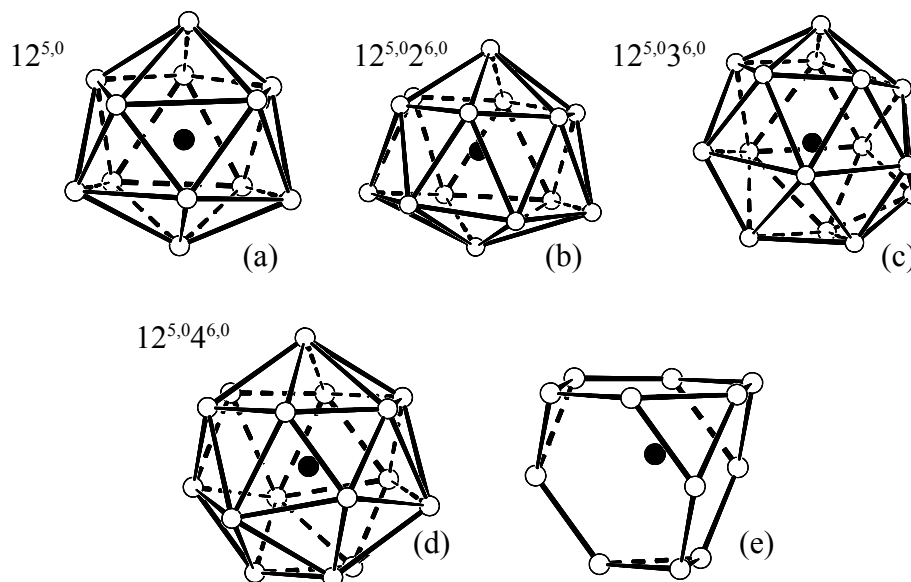


Abb. 3.2: Die Frank-Kasper Polyeder: (a) Ikosaeder, (b) FK-CN14, (c) FK-CN15 und (d) FK-CN16. Das Friauf-Polyeder (e) entsteht durch Entfernen der Atome über den Sechsecksflächen.

3.3 Das I3-Clusterkonzept

Kreiner und Franzen stellten 1995 das I3-Clusterkonzept vor, mit dessen Hilfe es möglich ist mehrere hundert intermetallische Verbindungen zu beschreiben [74]. Zentrale Baueinheit dieser Verbindungen ist ein Fragment aus 36 Atomen, der I3-Cluster. Er besteht aus drei spitzenverknüpften Ikosaedern in ekliptischer Anordnung, so daß das jeweils verknüpfende Atom pentagonal prismatisch koordiniert ist. In Abbildung 3.3 ist eine Übersicht über den Aufbau und die Darstellungsweisen des I3-Clusters gegeben.

Betrachtet man ein Ikosaeder entlang einer zweizähligen Achse und verbindet die Atome auf der Spiegelebene senkrecht zu dieser Achse (dicke schwarze Linien), so erhält man zwei verknüpfte Dreiecke, deren gemeinsame Spitze das Zentrum des Ikosaeders bestimmen. Die fünf Atome bilden im Idealfall eine ebene Schicht, die deshalb auch *flat*

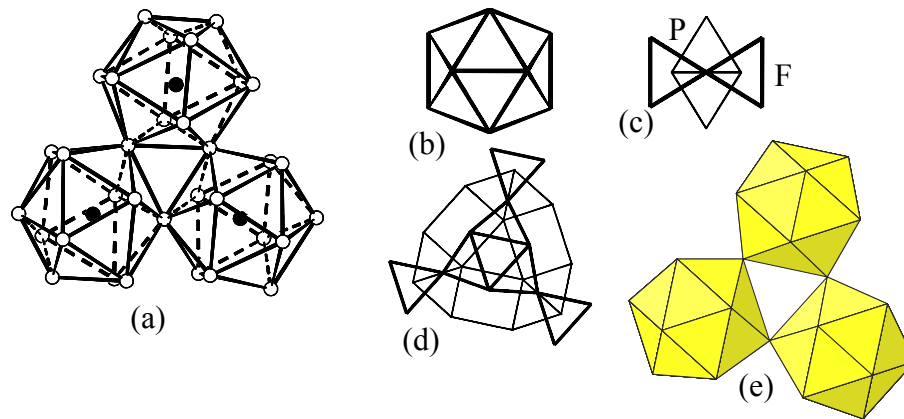


Abb. 3.3: (a) Der I₃-Cluster, ein Fragment aus drei spitzenverknüpften Ikosaedern. (b) Ikosaeder entlang einer zweizähligen Achse, (c) vereinfachte Darstellung von (b) mittels P- und F-Schichten, (d) „Schichtendarstellung“ eines I₃-Clusters, (e) Polyederdarstellung.

layer oder F-Schicht genannt wird. Die übrigen acht Atome des Ikosaeders, ober- und unterhalb der F-Schicht, bilden gewellte Schichten, *puckered layers* oder P-Schichten genannt. In der Abbildung sind sie mit dünnen Linien verbunden. In dieser Projektion fallen die beiden P-Schichten zusammen, so daß jeweils nur die untere Schicht dargestellt ist. Jedes Ikosaeder des I₃-Clusters kann in 20 leicht verzerrte Tetraeder zerlegt werden. Jedes zweifach polar überdachte pentagonale Prisma enthält 10 Tetraederlücken und 5 Halboktaeder. Aufgrund der Verknüpfungen, kann daher jede I₃-Einheit in 60 Tetraeder, 9 Halboktaeder und 2 Oktaeder zerlegt werden. Abbildung 3.4 zeigt die zwei Oktaederlücken und drei der 9 Halboktaedern. Die beiden Oktaeder sind flächenverknüpft und entlang der lokalen dreizähligen Achse ausgerichtet. Die I₃-Phasen enthalten also neben Tetraeder- auch Oktaederlücken, was den wesentlichen Unterschied zu den FK-Phasen ausmacht.

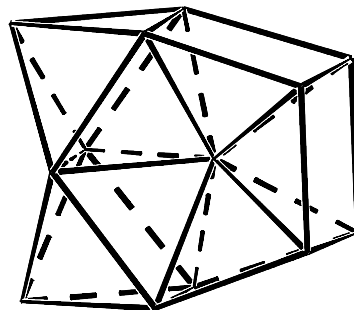


Abb. 3.4: Zwei Oktaederlücken plus neun Halboktaeder im I₃-Cluster.

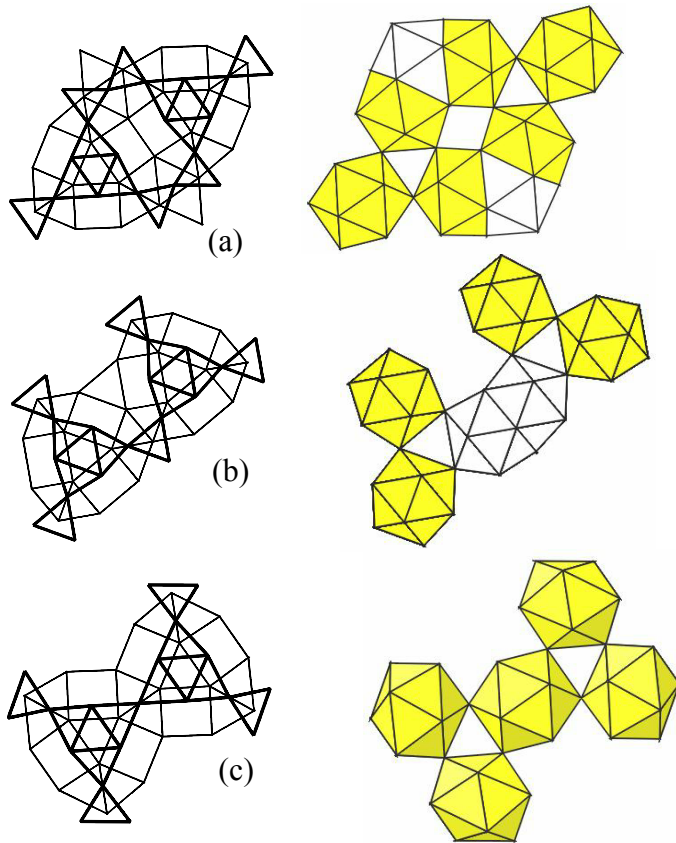


Abb. 3.5: Zweidimensionale Verknüpfungstypen des I3-Clusters: (a) B-Typ, (b) I-Typ und (c) S-Typ.

Für die I3-Cluster existieren vier Verknüpfungsregeln, die es ermöglichen die I3-Phasen anhand ihrer Verknüpfungsmuster zu unterscheiden. Die pseudozweidimensionalen Verknüpfungstypen B, I und S sind in Abbildung 3.5 dargestellt.

Die B-Typ Verknüpfung ist dadurch charakterisiert, daß zwei I3-Cluster über einen sogenannten Brückenikosaeder (*bridge icosahedra*) miteinander verbunden sind. In Abbildung 3.5 (b) ist der sichtbare Teil weiß dargestellt. Beim I-Typ durchdringen sich zwei Ikosaeder (ebenfalls weiß dargestellt) der verknüpfenden I3-Cluster gegenseitig (*interpenetrating*), während die S-Typ Verknüpfung dadurch gekennzeichnete ist, daß sich zwei I3-Cluster ein Ikosaeder teilen (*sharing*). In realen Strukturen sind zumeist Kombinationen dieser drei Typen zu finden, und es ist möglich diese Strukturen als Stapelung dieser Netze zu beschreiben. Abbildung 3.6 zeigt Ausschnitte aus

Abb. 3.6 zeigt Ausschnitte aus

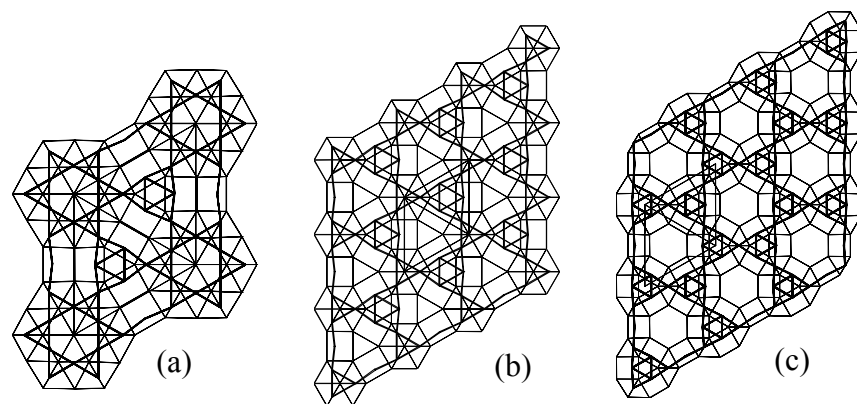


Abb. 3.6: Einige theoretisch abgeleitete zweidimensionale Netze [74]: (a) B-Netz im rhomboedrischen I/I-Approximanten (vgl. Abschnitt 5.7), (b) I-Netz in $Al_{10}Mn_3$, (c) S-Netz in $Al_{10}V$.

möglichen zweidimensionalen Netzen. In (a) erkennt man ein Netz aus ausschließlich B-Typ verknüpften I3-Clustern, während sie in (b) ausschließlich I-Typ und in (c) ausschließlich S-Typ verknüpft sind. Reale Vertreter für ausschliessliche I-Typ bzw. S-Typ Verknüpfung sind $\text{Al}_{10}\text{Mn}_3$ und Al_{10}V [74]. Sehr lange Zeit existierte kein Beispiel für eine Kristallstruktur, die ein reines B-Netz enthält, jedoch wurde mit dem rhomboedrischen 1/1-Approximanten (siehe Abschnitt 5.7) ein Vertreter hierfür gefunden.

Auf ganz ähnliche Weise lassen sich auch kompliziertere zweidimensionale Netze erzeugen. Vorausgesetzt, daß nur zwei unterschiedliche Verknüpfungstypen erlaubt sind, finden sich folgende Kombinationen in realen Kristallstrukturen: B/I-Typ in $\mu\text{-Al}_{4,12}\text{Mn}$ (Abbildung 3.7 (a)) [74], B/S-Typ in $\varepsilon\text{-Ag}_{17}\text{Mg}_{54}$ (Abb. 3.7 (b)) [75] und der S/I-Typ in Cd_3Cu_4 (Abb. 3.7 (c)) [76].

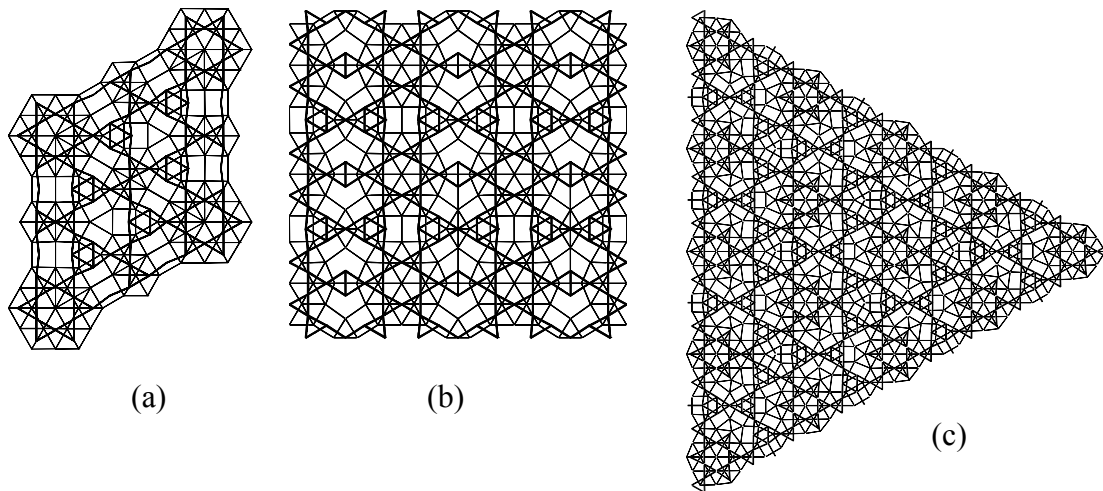


Abb. 3.7: (a) B/I-Typ Netz in $\mu\text{-Al}_{4,12}\text{Mn}$, (b) B/S-Typ Netz in $\varepsilon\text{-Ag}_{17}\text{Mg}_{54}$, (c) S/I-Typ Netz Cd_3Cu_4 .

Neben den zweidimensionalen Verknüpfungstypen existiert auch die Möglichkeit der dreidimensionalen Verknüpfung von I3-Cluster. Ihr wichtigster Vertreter ist die L-Typ Verknüpfung. In Abbildung 3.8 (a) sind zwei F-Schichten dargestellt, die dreidimensional verknüpft, die Form eines „L“ wiedergeben. Dieses Fragment entspricht vier Ikosaedern, die allesamt spitzenverknüpft sind. In der Polyederdarstellung 3.8 (b) erkennt man, daß diese vier Ikosaeder auf den Eckpunkten eines verzerrten Tetraeders vom Typ A_4B_6 liegen, das in Anlehnung an den Verknüpfungstyp L-Tetraeder genannt wird. Das Gerüst eines L-Tetraeders mit den Zentralatomen M der Ikosaeder (schwarz) sowie der verknüpfenden Atome X (weiß) ist in Abbildung 3.8 (c) zu sehen.

Neben den für die I3-Phasen charakteristischen zweifach polar überdachten

pentagonalen Prismen existieren weitere Koordinationspolyeder, die sich von einem Prisma dadurch ableiten lassen, daß weitere Vierecksflächen durch zusätzliche Atome überdacht werden (vergl. Abbildung 5.6 (f)).

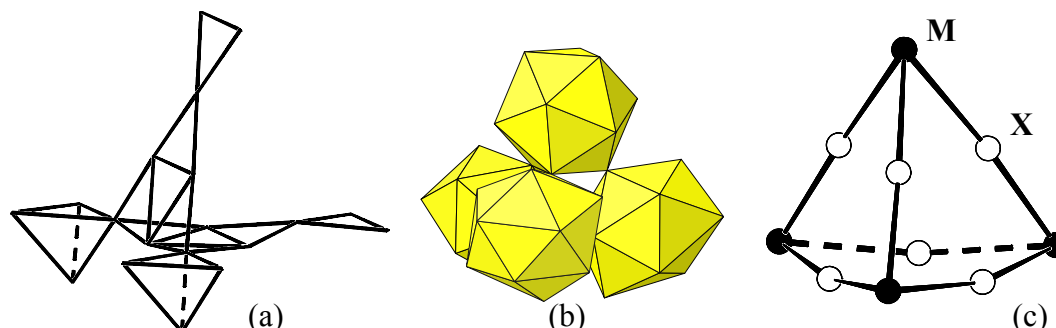


Abb. 3.8: (a) L-Typ Verknüpfung zweier I3-Cluster dargestellt mittels der F-Schichten, (b) L-Tetraeder aus vier spitzenverknüpften Ikosaedern, (c) Gerüst eines L-Tetraeders.

Eine Unterteilung der I3-Phasen in drei Untergruppen wurde 1997 von *Kreiner* und *Franzen* vorgestellt [77]. Anhand der unterschiedlichen Ikosaederkonzentrationen sowie der mittleren Koordinationszahl der Atome in Abhängigkeit zum jeweiligen Verhältnis der Atomradien, unterscheiden sie die Al-, die Mg- oder Ti- und die Cd-Gruppe. Das I3-Clusterkonzept setzt voraus, daß die ikosaederinduzierenden Atome 3d-Elemente, wie z. B. TM = V, Cr, Mn, Co, sind. Analysiert man die bekannten I3-Phasen, so ergibt sich für die drei Gruppen folgendes Bild:

Tabelle 3.1: Vergleich der drei Untergruppen der I3-Phasen

Gruppe	Ikosaederkonzentration	mittlere Koordinationszahl	Radienverhältnis
Al-TM	9 - 24 %	~ 12,4	1,05 - 1,11
Mg-TM/Ti-TM	20 - 35 %	~ 12,8	1,1 - 1,2
Cd-TM	58 %	~ 13,1	1,28

Die Zentren der I3-Ikosaeder werden mit der kleineren Atomsorte, den Übergangsmetallatomen, besetzt, während die spitzenverknüpfenden, pentagonal prismatisch koordinierten Positionen mit den größeren Atomsorten, wie z. B. Al, Mg, Ti, Cd, belegt werden. Neben den oben genannten primären Koordinationspolyedern existiert eine weitere Gruppe von Ikosaedern, die sogenannten Brückenikosaeder oder sekundären Koordinationspolyedern, die aufgrund der Verknüpfung entstehen. Ihre Zentren werden, im Gegensatz zu den I3-Ikosaedern, ebenfalls mit den größeren Atomsorten besetzt und es

kommt häufig zu Mischbesetzungen. So sind diese Positionen in Cd_3Cu_4 teils mit Cd teils mit Cu besetzt, und im System Al-Mn weisen sie eine Mischbesetzung mit Mn von bis zu 15 % auf.

3.4 Ikosaedrische Cluster

Bei der Beschreibung von Quasikristallen und ihren Approximanten spielen ikosaedrische Cluster die Hauptrolle. Mittlerweile ist bewiesen, daß zwischen den lokalen ikosaedrischen Gruppierungen und Quasikristallen ein struktureller Zusammenhang besteht [38]. Die zuvor vorgestellten Konzepte zur Beschreibung lokaler ikosaedrischer Baueinheiten sowie ihrer Anordnung und Verknüpfung im Raum basieren auf topologischen Modellen, die es ermöglichen hochkomplexe Strukturen auf ein einfaches Grundgerüst zu reduzieren. Die in diesen Modellen am häufigsten für die Beschreibung ikosaedrischer Cluster verwendeten Polyeder sollen im Folgenden kurz vorgestellt werden.

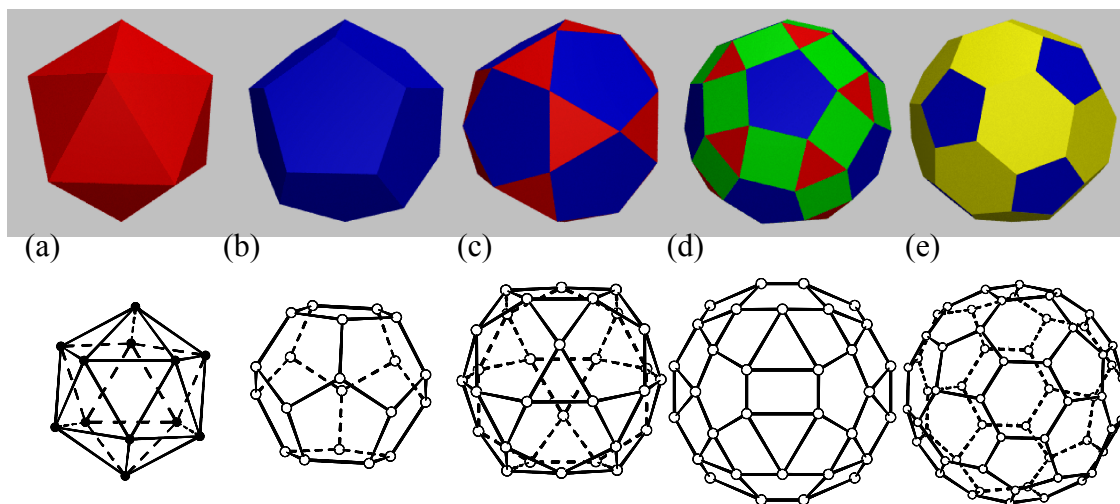


Abb. 3.9: (a) Ikosaeder, (b) Pentagondodekaeder, (c) Ikosidodekaeder, (d) Rhombenikosidodekaeder, (e) abgeschnittenes Ikosaeder ("Soccerball")

Tabelle 3.2: Geometrische Eigenschaften einiger Polyeder ikosaedrischer Symmetrie

	Flächen	Kanten	Ecken	Ecken/Fläche (Flächenzahl)	Eckkonfiguration
Ikosaeder	20	30	12	3 (20)	{3,3,3,3,3}
Pentagon- dodekaeder	12	30	20	5 (12)	{5,5,5}
Ikosidodekaeder	32	60	30	3 (20) 5 (12)	{3,5,3,5}
abgeschnittenes Ikosaeder („Soccerball“)	32	90	60	5 (12) 6 (20)	{6,6,5}
Rhombenikosi- dodekaeder	62	120	60	3 (20) 4 (30) 5 (12)	{4,3,4,5}

3.4.1 Der Bergman Clustern

Eine wichtige Verbindung, die zu den t.c.p.-Phasen gehört, wurde 1957 von *Bergman*, *Waugh* und *Pauling* [36] entdeckt. $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$ enthält einen ikosaedrischen Cluster, der bei der Dekoration dreidimensionaler Raumparkettierungen eine große Rolle spielt, den Bergman Cluster. In Abbildung 3.10 ist der Aufbau dieses Clusters dargestellt.

Das Zentrum des Bergman Clusters ist in der Regel unbesetzt und wird von einem zentralen Ikosaeder umgeben, das üblicherweise aus der kleineren Atomsorte aufgebaut ist. Die Atome der nächsten Schale werden jeweils so angeordnet, daß erneut Tetraederlücken entstehen. Die 20 Atome über den Dreiecksflächen des zentralen Ikosaeders sitzen auf den Eckpunkten eines Pentagondodekaeders, dessen Fünfecksflächen von den 12 Atomen eines großen Ikosaeders überkappt werden. Zentrales Ikosaeder, Dodekaeder und großes Ikosaeder bilden zusammen einen Cluster aus 44 bzw. 45 Atomen, der auch Pauling Triakontaeder oder kleiner Bergman Cluster genannt wird.

In der nächsten Sphäre werden alle 60 Dreiecksflächen des Pauling Triakontaeders durch Atome überkappt, und es entsteht der Bergman Cluster. Seine äußere Hülle enthält 12 Fünfecke und 20 Sechsecke und entspricht topologisch einem abgeschnittenen Ikosaeder, auch „Soccerball“ genannt.

Alternativ kann man sich diesen Cluster auch aus zwei unterschiedlichen Polyedern

aufgebaut denken. Um ein zentrales Ikosaeder werden 20 Friauf Polyeder angeordnet, die über eine Dreiecksfläche mit dem Ikosaeder verknüpft sind. Insgesamt beinhaltet der Bergman Cluster 104 Atome. Fügt man 12 zusätzliche Atome oberhalb der Fünfecksflächen des Bergman Cluster hinzu, so sind alle Atome des großen Ikosaeders ikosaedrisch koordiniert und man erhält ein Aggregat aus insgesamt 13 Ikosaedern, wobei die 12 äußeren Ikosaeder allesamt mit dem zentralen Ikosaeder spitzenverknüpft sind. Untereinander sind sie jedoch, als Folge der gestaffelten Anordnung, im Unterschied zum I13-Cluster, kantenverknüpft. In Tabelle 3.3 ist der Aufbau des Bergman Clusters nocheinmal zusammengefaßt. Ikosaedrisch koordinierte Positionen sind hier durch ein M gekennzeichnet. Durch die Verknüpfung der ikosaedrischen (primären) Koordinationspolyeder innerhalb des Bergman Clusters entstehen weitere charakteristische (sekundäre) Koordinationspolyeder, deren Zentren mit X bezeichnet werden. Unter Beibehaltung der ikosaedrischen Symmetrie sind sämtliche Atome auf der Oberfläche des abgeschnittenen Ikosaeders erneut Zentren von Ikosaedern.

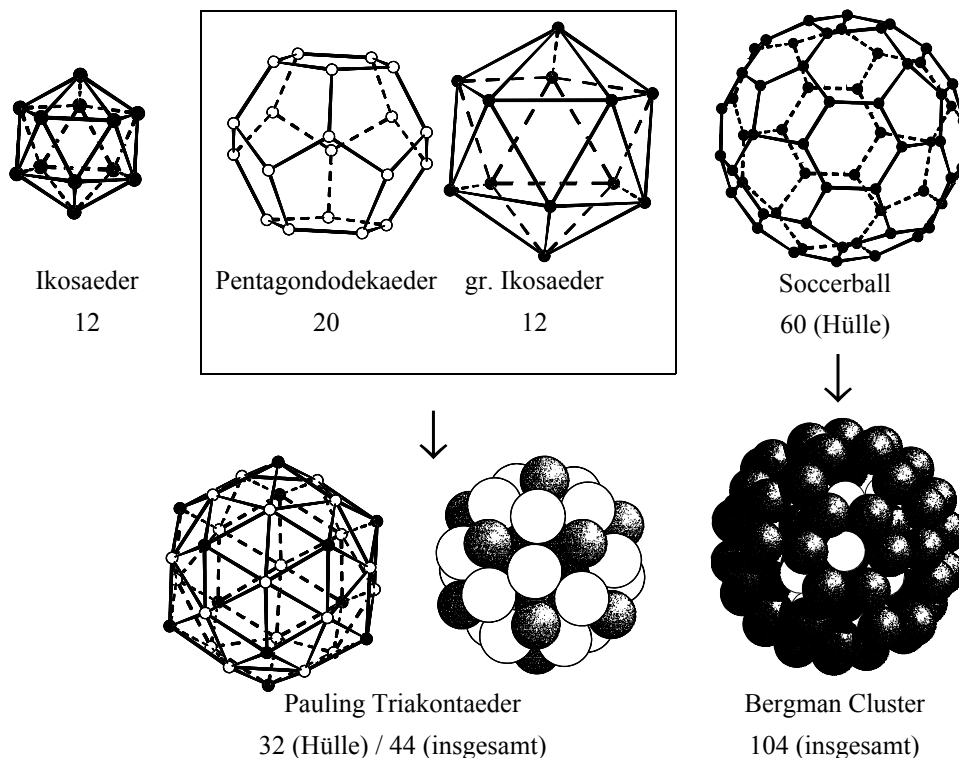


Abb. 3.10: Aufbau des Bergman Clusters in aufeinander folgenden Koordinationschalen. Die Ziffern geben die jeweilige Anzahl der Atome der äußeren Hülle bzw. des gesamten Clusters an. Ikosaedrisch koordinierte Atome sind schwarz, alle übrigen Atome weiß gezeichnet.

Tabelle 3.3: Aufbau des Bergman Clusters

Polyedertyp	Anzahl	Atomtyp	In den bislang bekannten
Zentrum	0		Approximanten mit Bergman Clustern
Ikosaeder	12	M	unterscheidet man drei verschiedene
Pentagondodekaeder	20	X	Gruppen: (i) Strukturen mit isolierten
Ikosaeder	12	M	Bergman Clustern, (ii) Strukturen mit
abgeschnittenes Ikosaeder	60	M	flächen- und kantenverknüpften Bergman
Summe	104	$M_{84}X_{20}$	Clustern sowie (iii) Strukturen mit sich

durchdringenden Bergman Clustern.

Isolierte Bergman Cluster wurden bislang nur im 2/1-Approximanten im System Al-Pd-Mn-Si [78] gefunden, wobei jedoch die übrige Struktur nicht tetraedrisch dicht gepackt ist. Flächen- und kantenverknüpfte Bergman Clustern befinden sich in der Bergman Phase [36] sowie in 2/1-AlMgZn [54], während die Kristallstrukturen von $Ga_{29}In_{12}Na_7$ [79], $Ga_{243}Mg_{164}Pd_{57}$ [54] und $Ag_{88}Ga_{215}Mg_{159}$ [54] durch sich durchdringende Bergman Cluster gekennzeichnete sind.

Die Bergman Cluster in Verbindungstyp (ii) sind entlang lokal zwei- bzw. dreizähliger Achsen über gemeinsame Kanten bzw. Sechsecksflächen miteinander verknüpft. Aufgrund der Verknüpfung kommt es zu einem Bruch der ikosaedrischen Symmetrie, so daß die beiden kantenverknüpfenden Atome nun eine CN14-Koordination aufweisen. Zwei weitere CN15-Koordinationspolyeder entstehen jeweils oberhalb und unterhalb des CN14. Auf der Oberfläche des abgeschnittenen Ikosaeders befinden sich nun nicht mehr nur ausschließlich ikosaedrisch koordinierte Atome M, sondern auch solche vom Typ X.

3.4.2 Das Mackay Ikosaeder

Eine zentrale Eigenschaft des I3-Clusterkonzepts ist die Möglichkeit aus dem I3-Cluster bzw. dem L-Tetraeder größere Fragmente zu bilden, die wiederum als Grundbausteine für bestimmte Strukturen genutzt werden können. Da ein Ikosaeder aus 20 leicht verzerrten Tetraedern besteht, können diese durch L-Tetraeder ersetzt werden und man erhält so ein Aggregat aus 54 Atomen plus dem Zentralatom (Abbildung 3.11). Dieser 55-Atomcluster wird nach seinem Entdecker Mackay Ikosaeder genannt [80].

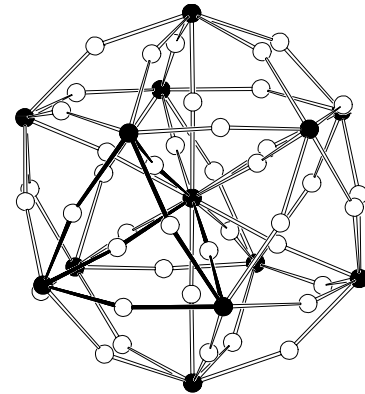


Abb. 3.11: Aufbau eines Mackay Ikosaeders aus L-Tetraedern. Ein L-Tetraeder ist durch schwarze Bindungslinien hervorgehoben.

Das Mackay Ikosaeder besitzt, wie in Abbildung 3.12 dargestellt, ein zentrales Ikosaeder, das von einem Ikosidodekaeder und einem großen Ikosaeder umgeben ist. Das Ikosidodekaeder besteht aus 30 Ecken, 60 Kanten, 20 Dreiecks- und 12 Fünfecksflächen. Insgesamt befinden sich auf der äußeren Schale des Mackay Ikosaeders 42 Atome. Die

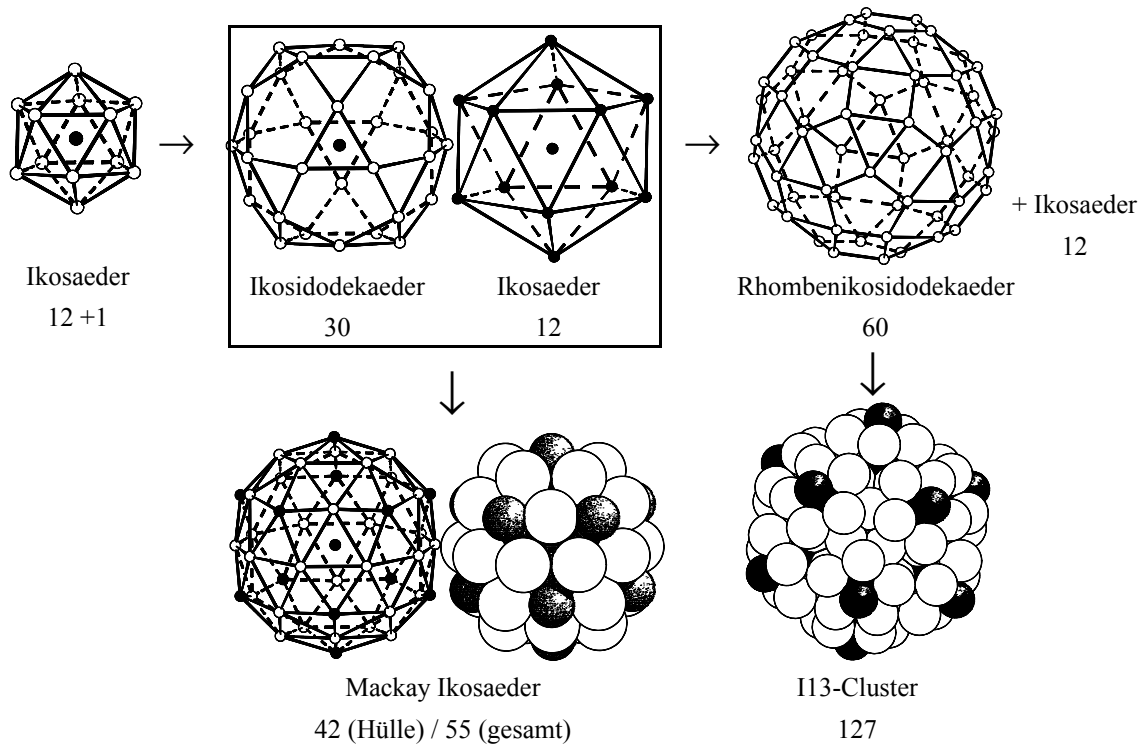


Abb. 3.12: Darstellung der aufeinander folgenden Schalen eines I13-Clusters. Die Zahlen geben jeweils die Anzahl der Atome auf der äußeren Schale bzw. des gesamten Clusters an.

Atome auf den Eckpunkten des großen Ikosaeders (schwarz) können ebenfalls ikosaedrisch koordiniert sein. Expandiert man diese Koordinationssphäre, so erhält man im Idealfall ein Fragment aus insgesamt 127 Atomen.

Im Gegensatz zum Bergman Cluster liegen jedoch im I13-Cluster alle Ikosaeder in der für die I3-Phasen charakteristischen ekliptischen Orientierung vor. Aus diesem Grund sind die Ikosaeder im I13-Cluster allesamt spitzenverknüpft, während sie im Bergman Cluster nur mit dem Zentralikosaeder spitzen- und untereinander kantenverknüpft sind. Die 72 Atome der äußeren Schale des I13-Clusters lassen sich topologisch den 60 Ecken eines Rhombenikosidodekaeders zuordnen (vgl. 3.9 (d)), dessen Fünfecksflächen durch 12 weitere Atome überkappt sind. Sie bilden zusammen, im Vergleich zum „großen Ikosaeder“ des Mackay Ikosaeders, ein nochmals größeres Ikosaeder. In Tabelle 3.4 ist der Aufbau des Mackay Ikosaeders zusammengefaßt. M bezeichnet die Zentren der primären und X die der sekundären Koordinationspolyeder. Sie sind gleichzeitig den topologisch unterschiedlichen Positionen zugeordnet, wobei α , α' und α'' die ikosaedrisch koordinierten Positionen der jeweiligen Schalen kennzeichnen, während sich β , β' und β'' auf die verschiedenen pentagonalen Prismen beziehen.

Tabelle 3.4: Aufbau des aufgefüllten I13-Clusters

Polyedertyp	Anzahl	Atomtyp	Position
Zentrum	1	M	α
Ikosaeder	12	X	β
Ikosidodekaeder	30	X	β'
Ikosaeder	12	M	α'
Rhombenikosidodekaeder	60	X	β''
Ikosaeder	12	M	α''
zusätzl. Atome	max. 20	M	γ
Summe	127 - 146	$M_{25}X_{102} - M_{45}X_{102}$	

Aufgrund von Verknüpfungen kommt es jedoch bei den I13-Clustern ebenfalls zu einem Bruch der ikosaedrischen Symmetrie. Dabei erhalten die β'' -Positionen eine Erweiterung der Koordinationszahl zu CN14 und CN15. Die I13 sind entlang der zweizähligen Achsen über gemeinsame Vierecks- oder Sechsecksflächen bzw. die Mackay Ikosaeder über die diametralen Ecken eines Oktaeders bzw. eines sechszähligen Sektors miteinander

verknüpft. Entlang der dreizähligen Achse durchdringen sich die Hüllen des I13 leicht, so daß die entsprechenden Mackay Ikosaeder über diametrale Flächen eines gemeinsamen Oktaeders verknüpft sind.

Da das zentrale Ikosaeder eines idealen I13-Clusters mit den 12 äußeren Polyedern identisch ist, erleidet diese Baueinheit zwangsläufig eine Verzerrung. Hält man den Abstand zwischen Zentral- und Eckatom eines jeden Ikosaeders konstant kommt es bei den äußeren Ikosaedern zu charakteristischen Verzerrungen. Die 12 innenliegenden Fünfecke verkleinern sich im Idealfall um den Faktor 0,93, während die außen liegenden fünfzähligen Sektoren sich um das 1,083-fache aufweiten. Aufgrund dieser Vergrößerung kommt es auf der Oberfläche von I13-Clustern auch im Realfall zu verlängerten

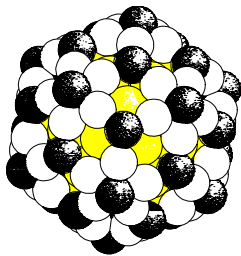


Abb. 3.13: Ein aufgefüllter I13-Cluster. Die zusätzlichen Atome auf den Positionen lokaler dreizähliger Symmetrie sind hier schwarz dargestellt, während die übrigen diesmal weiß und die darunterliegenden Atome gelb gezeichnet sind.

Atomabständen, die letztlich zu einer Art Lückenbildung auf den Positionen lokaler dreizähliger Symmetrie führen. Um diese zu verhindern, werden auf diesen Positionen zusätzliche Atome eingelagert. Man findet dies häufig in

der Ti-/Mg- und Cd-Gruppe der I3-Phasen, während eine Auffüllung in der Al-Gruppe nur unter der Erniedrigung der Koordinationszahl anderer Atome möglich ist. Theoretisch können so maximal 20 zusätzliche Atome eingefügt werden, wobei bei vollständiger Auffüllung die ikosaedrische Symmetrie des I13-Clusters erhalten bleibt. In realen Strukturen sind jedoch bislang maximal 12 zusätzliche Atome gefunden worden. In Abbildung 3.13 ist so ein vollständig aufgefüllter Cluster dargestellt. Typischerweise sind diese in Realstrukturen wiederum Zentren von verzerrten Ikosaedern.

3.4.3 Gegenüberstellung Bergman Cluster und Mackay Ikosaeder

Bergman Cluster	Mackay Ikosaeder
<ul style="list-style-type: none"> wichtigste bislang untersuchte Klassen: M-Li und M-Mg 	<ul style="list-style-type: none"> wichtigste bislang untersuchte Klassen: M-Al, M-Ga, M-Mg, M-Zn, M-Cd, M-Sc und M-Ti
<ul style="list-style-type: none"> die bisher gefundenen Verbindungen sind ternär, wie z. B. (Al,Cu)-Li, (Al,Zn)-Li, (Al,Cu)-Mg und (Al,Zn)-Mg 	<ul style="list-style-type: none"> die bisher gefundenen Verbindungen sind binär (nur Approximanten) und ternär, wie z. B. (Mn,Si)-Al, Ag-Mg, Cu-Cd, Rh-Sc
<ul style="list-style-type: none"> die dritte Komponente M' ist ein Metall mit $r(M') \approx r(M)$ aber unterschiedlicher Valenzelektronenzahl 	<ul style="list-style-type: none"> die dritte Komponente X' ist ein Metall mit $r(X') \approx r(M)$. X' besetzt bevorzugt die sekundären Koordinationspolyeder niedriger Koordinationszahl 12, 13 und 14. X besetzt meist die Lagen der Koordinationszahl 14, 15 und 16
<ul style="list-style-type: none"> der Aufbau des Clusters zusammen mit der Topologie erlaubt eine Aussage über die Konzentration der unterschiedlichen Lagen: X: 37 - 42 mol-% M, M': 58 - 63 mol-% 	<ul style="list-style-type: none"> der Aufbau des Clusters zusammen mit der Topologie erlaubt eine Aussage über die Konzentration der unterschiedlichen Lagen: X,X': 70 - 90 mol-% M: 10 - 30 mol-%
<ul style="list-style-type: none"> e/a des Pauling Triakontaeders (vgl. Kap 3.5): $92/44(45) \approx 2,0 - 2,1$ 	<ul style="list-style-type: none"> e/a des Mackay Ikosaeders (vgl. Kap 3.5): $92/55 \approx 1,67$

3.5 Das Jellium Modell

Neben der relativen Größe der Atome spielen weitere Faktoren bei der Favorisierung bestimmter Cluster eine wichtige Rolle. Computersimulationen eines einfachen Lennard-Jones Potentials bestätigen die besondere Stabilität kurzreichweitiger ikosaedrischer Anordnungen [81]. Bereits in den vierziger Jahren erkannten Kernphysiker die besondere Stabilität von Clustern, die aus einer bestimmten Anzahl von Atomen bestanden [82],[83]. Diese spezifische Anzahl an Atomen werden seither auch „magische Zahlen“ genannt. Eine „semiquantitative“ Analyse dieser „magischen Zahlen“ führte zu einem einfachen Modell [84],[85], das neben der Erklärung der Bevorzugung bestimmter Clustertypen auch dazu verwendet werden kann das Wachstum von Quasikristallen näher zu betrachten [86]. Bei diesem Modell, dem sogenannten Jellium-Modell stellt man sich die positiven Ladungen eines Clusters sphärisch über dessen gesamte Oberfläche verteilt vor, so daß sich die Elektronen frei im „Jellium“ bewegen können. Ausgehend von der kugelförmigen Gestalt der Cluster, werden diese analog wie einzelne Atomen behandelt. Betrachtet man die „magischen Cluster“ mit einer Anzahl von 2, 8, 20, 34, 40, 58, 92 ... Elektronen, so erkennt man, daß die Elektronenkonfigurationen $1s^2$, $1s^2 1p^6$, $1s^2 1p^6 1d^{10}$, $2s^2$, ... den „magischen Zahlen“ entsprechen. Das ist auch die Begründung dafür, daß sich Cluster mit einer derartigen Elektronenkonfiguration chemisch inert wie Edelgasatome verhalten [87] und, daß es möglich sein sollte stabile Cluster dadurch zu erzeugen, daß man einzelne Elemente des Periodensystems imitiert [88].

Sowohl das Pauling Triakontaeder als auch das Mackay Ikosaeder sind nahezu kugelförmige Cluster von 44(45) bzw. 55 Atomen. Gemäß dem Jellium-Modell führt die Anzahl von 92 Elektronen zum idealgasartigen Zustand, woraus sich für die beiden Cluster eine Valenzelektronenkonzentration von $e/a = \frac{92}{44(45)} \approx 2,0(2,1)$ bzw. $e/a = \frac{92}{55} \approx 1,67$ ergibt. Diese Werte bestätigen die theoretischen und experimentellen Überlegungen anderer [103] - [105], die davon ausgehen, daß die Bildung von Quasikristallen einer Art Hume-Rothery Regel folgt (vgl. auch Kapitel 5.1).

4 Experimentelle Methoden

4.1 Ausgangssubstanzen

Aluminium	Aluminiumfolie, 0,25 mm, 99,9995 % Johnson Matthey Catalog Company, Ward Hill, USA
Gallium	Galliumstücke, < 8 mm, 99,9999 % Chempur, Feinchemikalien und Forschungsbedarf GmbH, Karlsruhe
Magnesium	Magnesiumspäne, 99,98 % Aldrich Chemical Company, Inc. Milwaukee, USA
Palladium	Palladiumpulver, < 60 mesh, 99,9 % Johnson Matthey GmbH, Karlsruhe

Zudem wurden folgende Betriebsmittel verwendet: Argon 4.8 und 4.5 der Firma Messer-Griesheim, Düsseldorf im Argon-Handschuhkasten sowie als Schutzgas innerhalb des Lichtbogenofens. Als Reaktionscontainer diente Tantal- (Außendurchmesser 8 mm, Wandstärke 0,3 mm) bzw. Niob-Rohr (Außendurchmesser 10 mm, Wandstärke 0,5 mm) der Firma Plansee GmbH, Bad Urach.

4.2 Präparationsmethoden

Die Darstellung der Legierungen erfolgt durch Zusammenschmelzen der Elemente. Aufgrund des niedrigen Dampfdrucks von Magnesium geschieht dies in möglichst kleinen, geschlossenen Reaktionsgefäßen unter Argonatmosphäre. Als Reaktionsgefäße haben sich passend zugeschnittene, auf beiden Seiten mittels Lichtbogenofen zugeschweißte Tantal- bzw. Niobampullen als günstig erwiesen.

Edukte in Folien- oder Granulatform wurden zunächst in etwa 1 mm große Stückchen zerkleinert und dann einzeln abgewogen. Unter einer Auflagekraft von etwa 20 kN werden die Edukte (Gesamtmasse 200 - 350 mg) zu einer Tablette mit 6 mm Durchmesser gepresst. Durch Rückwiegen der Tablette werden eventuell auftretende Massenverluste pulverförmiger Edukte Rechnung getragen. Der Pressling wird innerhalb eines

Argon-Handschuhkastens in die zuvor einseitig zugeschweißte Tantal- oder Niobampulle gefüllt. Das andere Ende der 5 bis 6 cm langen Ampulle wird nun zugekniffen und die Ampulle in ein Schraubgefäß gelegt, um den Kontakt mit dem Luftsauerstoff beim Transport zum Lichtbogenofen zu vermeiden. Das Zuschweißen der zugekniffenen Seite erfolgt im mit Argon gespülten Lichtbogenofen (Eigenbau der Universität Dortmund). Die so verschlossene Ampulle wird in ein Quarzglasrohr (Länge 20 cm, Durchmesser 15 mm) gebracht. Über einen Zwei-Wege-Hahn wird das Quarzglasrohr mit Hilfe einer Vakuumpumpe evakuiert und danach durch Abschmelzen verschlossen. Die so erhaltene Quarzampulle wird in einem Klappofen (N7, Firma Nabertherm, Lilienthal) dem entsprechenden Temperaturprogramm (vgl. Kapitel 5) unterworfen. Dabei wird die Ampulle jeweils so gelagert, daß sich die Metallschmelze im unteren Teil der Metallampulle sammelt. Nach dem langsamen Abkühlen innerhalb des Ofens werden sowohl Quarz als auch Tantal- bzw. Niobampulle an der Luft geöffnet und die Proben weiteren Untersuchungen zugeführt.

4.3 Untersuchungsmethoden

4.3.1 Röntgenographische Untersuchungen am Pulver

Für die Phasenanalyse der anfallenden Produkte werden von den im Mörser pulverisierten Proben Guinier-Filmaufnahmen mit einer Kamera vom Typ FR552 (Flachpräparatetechnik) der Firma Enraf-Nonius, Delft (NL) gemacht. Die verwendete Strahlung ist $\text{CuK}\alpha_1$ -Strahlung.

Die Beugungsdiagramme werden mit Hilfe des NRCVAX Softwarepakets [89] simulierten Diagrammen bekannter Phasen verglichen.

4.3.2 Einkristalluntersuchungen

Die sehr spröden, hell-silbrigen Proben werden im Mörser zerschlagen und von den anfallenden „Splintern“ einige isoliert. Die „Splinter“ werden in Markröhrchen (0,1 mm Durchmesser) abgefüllt, fixiert und die Röhrchen abgeschmolzen. Zur Überprüfung der Qualität des Kristalls werden Präzessionsaufnahmen mit einer Kamera der Firma Seifert

(Buerger-Präzessionsgoniometer 200) gemacht. Alternativ wurden aber auch Kristalle direkt auf dem Einkristalldiffraktometer untersucht, mit dem auch die spätere Intensitätssammlung erfolgte.

Bei dem Einkristalldiffraktometer handelt es sich um ein Gerät vom Typ KappaCCD der Firma Nonius, Delft (NL). Der Goniometerkopf kann bei diesem Gerät, ganz wie bei den Modellen MACH3 oder CAD4, mit Hilfe dreier Kreise ω , κ und ϕ bewegt werden. Über einen vierten Kreis, θ , kann der Detektor ebenfalls bewegt werden. Dabei handelt es sich um einen phosphorbeschichteten Flächendetektor, der durch ein Berylliumfenster geschützt ist. Die Intensitätswerte von 0 bis 65536 werden in Quadraten von 2x2 Pixeln gelesen was die Auflösung der insgesamt 1152x1242 Pixel auf 576x621 Punkte reduziert. Der minimale Detektorabstand lag vor dem Umbau der Kühlvorrichtung bei 25 mm, danach bei 30 mm. Das Gerät ist komplett computergesteuert. Lediglich die Zentrierung des Kristalls erfolgt von Hand mittels Stellschrauben und kann anhand einer Videokamera überwacht werden.

Zur Bestimmung der Metrik wurden zunächst 10 Aufnahmen, *Frames* genannt, erstellt, wobei der ϕ -Kreis um jeweils um 1° weitergedreht wird. Für jedes *Frame* wird der Detektor zweimal belichtet, um zufällig auftretende Intensitäten, wie z. B. Höhenstrahlung, ausschließen zu können. Der vollständige Datensatz besteht in der Regel aus 360 *Frames*, d. h. der ϕ -Kreis wird einmal vollständig durchlaufen. Die in der Gerätesoftware angebotene Möglichkeit einer berechneten Meßstrategie zur optimalen Intensitätssammlung wurde nicht genutzt, da sie zum gegebenen Zeitpunkt nicht fehlerfrei funktionierte. Es besteht jedoch die Möglichkeit Datensätze, die bei unterschiedlichen θ aufgenommen wurden, aufeinander zu skalieren.

Zur Indizierung der Reflexe, Integration der Intensitäten und Skalierung der Datensätze wurden die KappaCCD Analysesoftware DENZO und SCALEPACK [90] verwendet, dabei werden die Datensätze zunächst triklin herausgegeben. Die in den Tabellen angegebenen minimalen und maximalen h, k, und l-Werte beziehen sich jedoch auf die transformierte Zelle. Eine Absorptionskorrektur konnte zum Zeitpunkt der Messungen ebenfalls nicht durchgeführt werden.

4.4 Computerprogramme

4.4.1 Strukturbestimmung

Die Strukturlösungen aus Einkristalldaten erfolgten über direkte Methoden. Dafür wurden die Programme SHELXS-86 [91] und SIR97 [92] verwendet. Verfeinert wurden die Ausgangsdatensätze mit dem Programm SHELXL-93 [93]. Die in den Tabellen aufgeführten Gütefaktoren entsprechen den unten Angegebenen, dabei entspricht F_o den beobachteten und F_c den berechneten Struktur Faktoren der Reflexe, n der Zahl der Reflexe, p der Anzahl der verfeinerten Parameter und w den Gewichtungsfaktoren.

$$\text{Interner R-Wert:} \quad R_{int} = \frac{\sum |F_o^2 - F_o^2(\text{mittel})|}{\sum F_o^2}$$

$$\text{Ungewichteter R-Wert:} \quad R1 = \frac{\sum |F_o| - |F_c|}{\sum |F_o|}$$

$$\text{Gewichteter R-Wert:} \quad wR2 = \sqrt{\frac{\sum w(F_o^2 - F_c^2)^2}{\sum w(F_o^2)^2}}$$

In dem Programm SHELX-93 wird folgendes Gewichtungsschema verwendet:

$$w = 1 / [s^2(F_o^2) + (aP)^2 + bP], \quad \text{mit } P = [2F_c^2 + \text{Max}(F_o^2, 0)] / 3$$

Die isotrope Bewegung wird durch isotrope Temperaturfaktoren U_{iso} für jedes Atom berücksichtigt:

$$f_{iso} = f_o \cdot \exp\left[-8\pi^2 U_{iso} \frac{\sin^2\theta}{\lambda^2}\right]$$

Eine anisotrope Bewegung wird durch ein Schwingungsellipsoid beschrieben, dessen Form und Lage durch sechs unterschiedliche Parameter U_{ij} angegeben werden. Verkürzt werden sie *anisotrope Auslenkungsparameter* genannt. Sie sind wie folgt definiert:

$$f_{anis} = f_o \cdot \exp[-2\pi^2 \cdot (U_{11} h^2 a^{*2} + U_{22} k^2 b^{*2} + U_{33} l^2 c^{*2} + 2U_{12} hka^*b^* + 2U_{13} hla^*c^* + 2U_{23} klb^*c^*)],$$

mit f_o : Atomfaktor für starre Atome,
 h, k, l : Miller'sche Indizes und
 a^*, b^*, c^* : reziproke Gitterparameter.

4.4.2 Analyse und Darstellung der Strukturen

Die Strukturzeichnungen wurden zum überwiegenden Teil mit Hilfe des Programms SCHAKAL97 [94] angefertigt. Polyederdarstellungen entstammen den Programmen Mathematica [95] und ATOMS für Windows [96].

Abstände und Koordinationssphären der einzelnen Atome wurden mit Hilfe des Programms DISPOW aus dem Softwarepaket NRCVAX [94] berechnet. Dabei wird die Koordinationssphäre über die Konstruktion der Voronoi-Zellen um das entsprechende Atom ermittelt. Bindungsstriche werden üblicherweise dann eingezeichnet, wenn zwei Atome benachbart sind, d.h., wenn das eine Atom zur ersten Koordinationsschale des anderen Atoms zählt.

Die Aufstellung der Atomlisten erfolgt über das Programm STIDY [97] und orientiert sich an den jeweiligen Wyckoff-Positionen und der Größe der Atomparameter der Atome.

5 Approximanten mit Mackay Ikosaedern

5.1 Einleitung

Die Analyse von Approximantenstrukturen von Quasikristallen ist für das Verständnis von Aufbau und Bildung der Quasikristalle unerlässlich, da ihre Strukturaufklärung bis heute sehr schwierig ist. Erst die umfangreiche Kenntnis der strukturellen Prinzipien von Approximanten erlaubt es, die Zusammenhänge zwischen den unterschiedlichen Verbindungsklassen herauszuarbeiten.

Die bisherigen Untersuchungen haben ergeben, daß sich binäre Quasikristalle nur sehr selten und zudem in nur schlechter Qualität bilden. Jedoch wurde bereits in den ersten Veröffentlichungen zu diesem Thema erwähnt, daß sich das Hinzufügen einer dritten Komponente stabilisierend auf die Bildung möglicher Approximanten sowie positiv auf deren Kristallinität auswirkt [98]. Aus diesem Grund konzentrieren sich die meisten Arbeiten auf ternäre Systeme, wobei das System Al-Mg-Pd besonders hervorzuheben ist. In diesem System wurde eine bislang einzigartige Kombination aus Approximanten und Quasikristallen vom FK- und MI-Typ sowie dekadonale Strukturen gefunden [99]. Ein weiterer Grund sich auf Al-Mg-Pd Legierungen zu konzentrieren sind komplexe binäre Verbindungen im System Mg-Pd. So gehört beispielsweise Mg_6Pd (cF396, $F\bar{4}3m$, $a = 20,108 \text{ \AA}$ [100]) genau wie das 1998 von *Spiekermann* gelöste Mg_4Pd (oC1532, $Cmma$, $a = 28,054 \text{ \AA}$, $b = 28,062 \text{ \AA}$, $c = 38,387 \text{ \AA}$ [54]) zu den I3-Phasen. Mg_4Pd besitzt eine sehr komplexe auf Mackay Ikosaedern basierende Struktur, in der etwa 58% aller Atome Bestandteil der 16 Mackay Ikosaeder innerhalb der Elementarzelle sind.

Systematische Untersuchungen der letzten 50 Jahre haben gezeigt, daß nur wenige Faktoren die Bildung bestimmter Verbindungen beeinflussen. Dabei spielen u. a. die Größenverhältnisse der hinzugefügten Atome sowie elektrochemische und Valenzelektronen-Faktoren eine große Rolle [101]. Aus experimentellen und theoretischen Arbeiten [102],[103],[104],[105] ist schon länger bekannt, daß die Bildung von Quasikristallen einer Art Hume-Rothery Regel folgt und häufig durch bestimmte Valenzelektronen zu Atom Verhältnisse (e/a) begünstigt wird. Für Quasikristalle vom FK-Typ und deren Approximanten liegt e/a etwa in einem Bereich von $2,1 \leq e/a \leq 2,5$ [104]. Für diejenigen vom MI-Typ legen *Koshikawa* et al. e/a zwischen $1,6 \leq e/a \leq 1,8$ fest

[48]. Werte die durch Überlegungen anhand des Jellium-Modells (vgl. Abschn. 3.5) bestätigt werden.

Das Ziel dieser Untersuchungen ist, neben der Suche nach neuen Approximanten, auch die Erforschung des Einflusses anderer Elemente als das zunächst eingesetzte Aluminium auf Struktur und Bildung der Approximanten. Um weder das gewünschte e/a- noch das eingestellte Mg/Pd-Verhältnis zu verändern, wurde Gallium als zusätzliches Element gewählt. In einem weiteren Teil der Untersuchungen wurde Aluminium vollständig durch Gallium ersetzt, um auf diese Weise dem Problem der Zuordnung der Atomsorten zu den einzelnen Positionen zu begegnen. Im Gegensatz zu Aluminium ist der Röntgenkontrast zwischen Gallium und Magnesium ausreichend, so daß eine problemlose Bestimmung der Elemente möglich ist.

5.2 Modell des kubischen 1/1-Approximanten vom MI-Typ

Um eine kubisch-raumzentrierte Packung von Mackay Ikosaedern bzw. I13-Clustern zu erzeugen, müssen Triakontaeder auf die Eckpunkte und das Zentrum einer kubischen Elementarzelle plziert werden. Der Gitterparameter $a_{1/1}$ ist dabei von der Quasigitterkonstante a_r abhängig. Für $a_{1/1}$ gilt: $a_{1/1} = 2a_r(\tau^3/\sqrt{5})^{1/2}$. Bei einer Quasigitterkonstante von $a_r = 5,267 \text{ \AA}$, wie sie von *Wheeler* et al. [106] für das System Ag-Al-Mg angegeben wird, durchdringen sich die Triakontaeder in einer kubisch-raumzentrierten Anordnung demnach zwangsläufig. Es kommt deshalb in dem von *Kreiner* und *Spiekermann* für das System Ag-Al-Mg entwickelten Modell ($\text{Ag}_{26,0}\text{Al}_{52,9}\text{Mg}_{41,1}$, $a_{1/1} = 14,50 \text{ \AA}$), im Vergleich zum Modell von *Socular* und *Steinhardt* zu einer abweichenden Dekoration der Triakontaeder [107],[54].

Zur Modellierung des 1/1-Approximanten wird damit begonnen vollständig dekorierte und über gemeinsame Rhomboederflächen verknüpfte Triakontaeder auf die Ecken einer kubischen Elementarzelle zu legen. In der Ag-Al-Mg-Dekoration werden die drei (γ -Position) und fünfzähligen (α'' -Position) Ecken des Triakontaeders durch Silber- und die Kantenmitten (β'' -Position) durch Aluminiumatome besetzt. Zusammen bilden sie die äußere Hülle eines mit insgesamt 147 Atomen vollständig aufgefüllten I13-Clusters (vgl. Abbildung 3.13). Im Innern des Triakontaeders befindet sich ein komplettes Mackay

Ikosaeder, dessen zentrales (α -Position) Silberatom von zwölf Magnesiumatomen ikosaedrisch (β -Position) umgeben ist. In der nächsten Schale befinden sich dreißig Magnesiumatome auf den Ecken des Ikosidodekaeders (β' -Position) dessen Fünfecksflächen durch zwölf Silberatome (α' -Position) überkappt werden.

Auf $(1/2, 1/2, 1/2)$ wird nun ein weiteres Mackay Ikosaeder generiert, das wiederum durch ein Silberatom zentriert wird. Dabei müssen die acht, das Zentralatom würfelförmig umgebenden Silberatome entfernt werden, da sie nicht zum Mackay Ikosaeder passen. Sie gehören zur äußeren Hülle der aufgefüllten I13-Cluster um $(0,0,0)$. Anders als bei einer echten Raumparkettierung, wo das dekorierte Triakontaeder lediglich Ikosaeder, zweifach polar überdachte pentagonale Prismen und das CN15-Koordinationspolyeder enthält (Abbildung 5.1 (a)-(c)), ergeben sich damit aufgrund der fehlenden Atome für die Atome des Ikosidodekaeders (β') sowohl eine CN15- als auch eine CN14-Koordination (Abbildung 5.1 (d)).

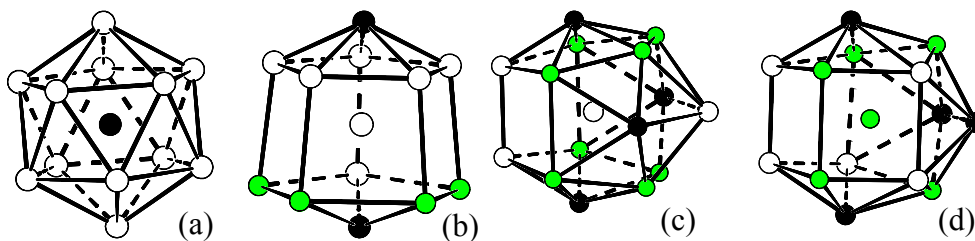


Abb. 5.1: Koordinationspolyedertypen im Modell für den 1/1-Approximanten vom MI-Typ. (a) Ikosaeder um die Position α , (b) zweifach polar überdachtes pentagonales Prisma um die Position β , (c) CN15 und (d) CN14 um die Positionen β' . (Ag: schwarz, Mg: weiß, Al: grün).

Einige bereits bekannte Strukturbeispiele für 1/1-Approximanten vom MI-Typ sind in Tabelle 5.1 aufgeführt. Sie alle weisen den gleichen Grundaufbau mit einer kubisch-innenzentrierten Anordnung von I13-Clustern auf, jedoch unterscheiden sie sich bzgl. der Zahl der Atome, der Raumgruppe und der I13-Topologie. In Abbildung 5.2 sind die I13-Cluster des Modells sowie die der Strukturbeispiele vorgestellt. Die Abbildung 5.2 (a) zeigt die I13-Cluster des Modells um $(0,0,0)$ bzw. $(1/2, 1/2, 1/2)$. Hier gilt, daß die fünfzähligen Spitzen (α' -Position) des einen I13 den zusätzlichen dreizähligen Positionen (γ -Position) des anderen I13 entsprechen und umgekehrt. Die lokal dreizähligen Positionen (γ -Position) entlang der $[111]$ -Richtung bleiben hingegen unbesetzt. Topologisch sind die beiden I13-Cluster des Modells äquivalent, sie unterscheiden sich jedoch in der Besetzung

der einzelnen Positionen. Eine reale Verbindungen diesen Typs wurde bislang noch nicht gefunden, jedoch existiert mit α -TiCrSi [108] ein Strukturtyp, indem alle I13-Cluster sowohl topologisch als auch chemisch äquivalent sind (vgl. Abbildung 5.2 (b)).

Tabelle 5.1: 1/1-Approximanten vom MI-Typ

Name	Pearson Symbol	Raumgruppe	Gitterparameter
Ag _{26,0} Al _{52,9} Mg _{41,1} (Modell 1/1-MI) [54]	cP146	$Pm\bar{3}$	a = 14,50 Å
α -TiCrSi	cI146	$Im\bar{3}$	a = 13,139 Å
ϵ' -Ag ₁₇ Mg ₅₄	oI142	$Immm$	a = 14,240 Å, b = 14,209 Å, c = 14,663 Å
Hf ₅₄ Os ₁₇	oI142	$Immm$	a = 13,856 Å, b = 14,104 Å, c = 14,570 Å
Rh ₁₃ Sc ₅₇	cP140	$Pm\bar{3}$	a = 14,405 Å
α -AlMnSi	cP138	$Pm\bar{3}$	a = 12,680 Å

In ϵ' -Ag₁₇Mg₅₄ [109] und dem isotypen Hf₅₄Os₁₇ [110] liegen ebenfalls innenzentrierte Anordnungen von I13-Clustern vor (vgl. Abbildung 5.2 (c)), allerdings sind hier die Cluster derart verzerrt, daß die Strukturen in der orthorhombischen Raumgruppe $Immm$ kristallisieren. Die geringere Anzahl von Atomen in der Elementarzelle kommt dadurch zustande, daß hier nur acht der lokal dreizähligen Positionen besetzt sind, was dazu führt, daß vier der fünfzähligen Spitzen fehlen. Die I13-Cluster um $(1/2, 1/2, 1/2)$ in Rh₁₃Sc₅₇ [111], dargestellt in Abbildung 5.2 (d), sind nicht äquivalent. Da der I13 um $(0,0,0)$

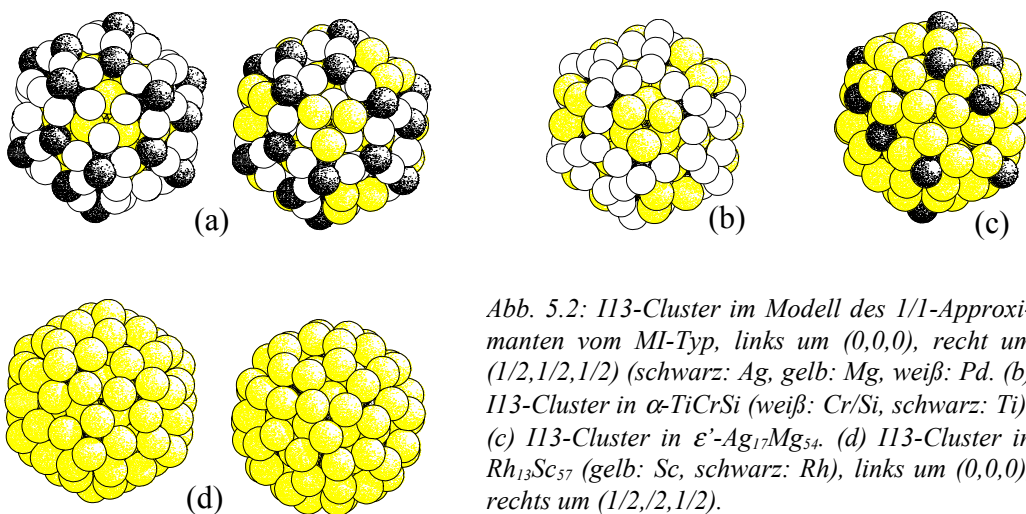


Abb. 5.2: I13-Cluster im Modell des 1/1-Approximanten vom MI-Typ, links um $(0,0,0)$, recht um $(1/2, 1/2, 1/2)$ (schwarz: Ag, gelb: Mg, weiß: Pd). (b) I13-Cluster in α -TiCrSi (weiß: Cr/Si, schwarz: Ti). (c) I13-Cluster in ϵ' -Ag₁₇Mg₅₄. (d) I13-Cluster in Rh₁₃Sc₅₇ (gelb: Sc, schwarz: Rh), links um $(0,0,0)$, rechts um $(1/2, 1/2, 1/2)$.

keinerlei zusätzliche Atome auf den lokal dreizähligen Positionen besitzt, fehlen dem I13 um $(1/2, 1/2, 1/2)$ sämtliche fünfzähligen Spitzen, jedoch weist er im Gegenzug zwölf zusätzliche Atome auf den dreizähligen Positionen auf. Die gleiche Topologie liegt auch in α -AlMnSi [35] vor, wobei in dieser Verbindung die Zentren der I13-Cluster unbesetzt bleiben.

Die hier vorgestellten Strukturen gehören allesamt zu den 1/1-Approximanten primitiv-ikosaedrischer Quasikristalle. Der einzige bislang bekannte 1/1-Approximant der Quasikristalle vom F-Typ, 1/1-AlCuFeSi [112], weist andere Strukturelemente auf. So enthält diese Verbindung sogenannte Pseudo-Mackay Ikosaeder, wie sie ähnlich auch in λ -Al₄Mn gefunden wurden, und Teile des Bergman Clusters in Form von Pentagondodekaedern [77].

5.3 Der 1/1-Approximant im System Al-Mg-Pd

Al-Mg-Pd ist bislang das einzige bekannte System in dem Quasikristalle und Approximanten vom MI- als auch FK-Typ sowie dekadagonale Quasikristalle und deren Approximanten zusammen vorliegen [104]. In Abbildung 5.3 ist das von *Koshikawa et al.*

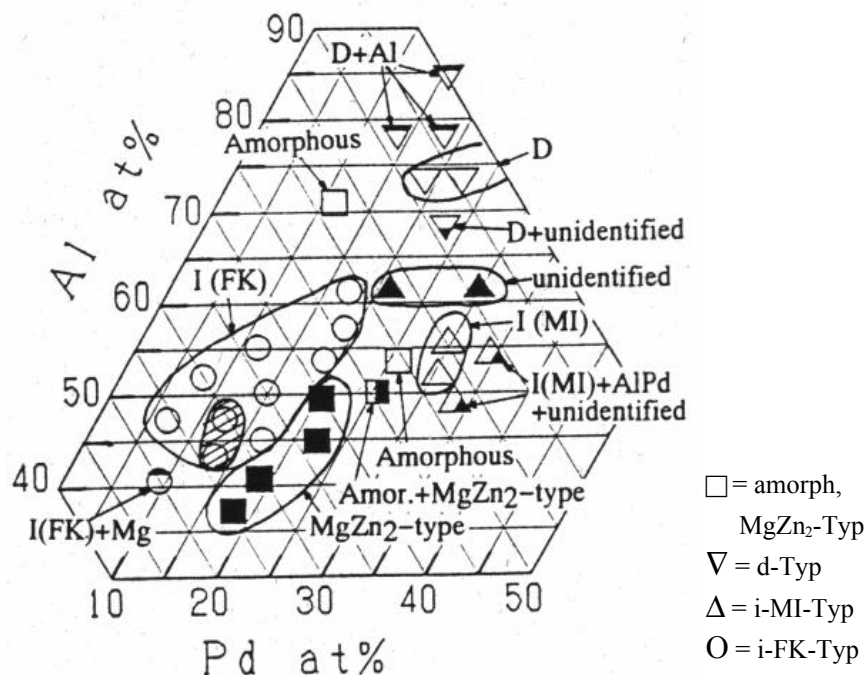


Abb. 5.3: Existenzbereiche verschiedener Phasen im System Al-Mg-Pd bei 780 K. [112]

aufgenommene Phasendiagramm dargestellt. Der Existenzbereich ikosaedrischer Quasikristalle vom MI-Typ wird hier mit 52 bis 55 mol-% Aluminium und 30 bis 31 mol-% Palladium angegeben [113].

Die hier aufgeführten Untersuchungen von Legierungen dieser Zusammensetzung führten jedoch nicht zur Darstellung kristalliner Approximanten mit Mackay Ikosaedern, sondern es konnte lediglich eine tetragonale Verbindung der ungefähren Zusammensetzung $\text{Al}_{17}\text{Mg}_4\text{Pd}_8$ ($\text{Al}_{58,6}\text{Mg}_{13,8}\text{Pd}_{27,6}$) (tI116, $I4_1/a$, $a = 13,177(1) \text{ \AA}$, $c = 10,656(3) \text{ \AA}$) anhand einer Einkristallröntgenstrukturanalyse charakterisiert werden. In dieser Verbindung sind die jeweiligen Atome ungewöhnlich koordiniert. $\text{Al}_{17}\text{Mg}_4\text{Pd}_8$ gehört nicht zu den I3-Phasen und kann als eine Abfolge von „dünnen“ und „dicken“ Schichten beschrieben werden. In Abbildung 5.4 ist diese Abfolge dargestellt. Alle weiteren Angaben zur Datensammlung und Strukturlösung finden sich in Anhang A.

Untersuchungen bei einem wesentlich geringeren Palladiumgehalt von 20 mol-% und Aluminiumgehalten zwischen 5 bis 20 mol-%, im Zusammensetzungsbereich von Mg_4Pd ,

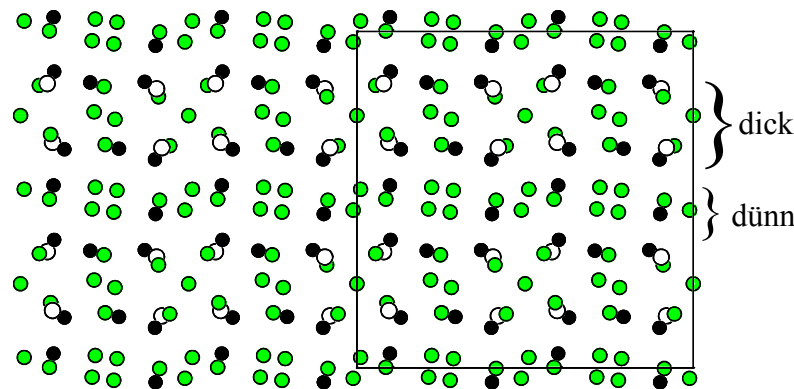


Abb. 5.4: Aufbau von $\text{Al}_{17}\text{Mg}_4\text{Pd}_8$. Man erkennt die Abfolge von „dicken“ und „dünnen“ Schichten in der a-b Ebene (Al: grün, Mg: weiß und Pd: schwarz).

erwiesen sich als erfolgreicher. Die Präparationen in diesem Zusammensetzungsbereich, (siehe Anhang D) ergaben jeweils komplizierte Phasengemenge, so daß es letztendlich nicht möglich war aufgrund der eingewogenen Mengenanteile Rückschlüsse auf die Zusammensetzung des Produkts zu ziehen. Von allen Proben wurden Guinier-Aufnahmen angefertigt, die aufgrund der zahlreichen unterschiedlichen Phasen in hohem Maße sich überlagernde Reflexe aufwiesen, so daß die Aufnahmen lediglich mit simulierten Pulveraufnahmen abgeglichen und nicht detailliert ausgemessen wurden.

In allen aluminiumhaltigen Ansätzen, wurde, neben weiteren Phasen, eine Verbindung der Zusammensetzung AlMg_3Pd_2 ($\text{Al}_{16,7}\text{Mg}_{53,0}\text{Pd}_{33,0}$) ($cF96$, $Fd\bar{3}m$, $a = 11,8140(1)$ Å) gefunden. Sie gehört zu den I3-Phasen und kristallisiert in dem für diese Verbindungsklasse häufigsten Strukturtyp, dem NiTi_2 -Typ. Die in AlMg_3Pd_2 auftretenden Koordinationspolyeder sind in Abbildung 5.5 (b-d) dargestellt. Palladium befindet sich in den Zentren der Ikosaeder, die die I3-Cluster bilden, während Aluminiumatome den sogenannten Brückenikosaedern und Magnesiumatome den CN14-Polyedern zugeordnet werden. Letztere können von dem für die I3-Phasen typischen zweifach polar überdachten pentagonalen Prisma abgeleitet werden (vgl. Kapitel 5.4). Die Zuordnung von Aluminium und Magnesium erfolgte, aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Elemente im

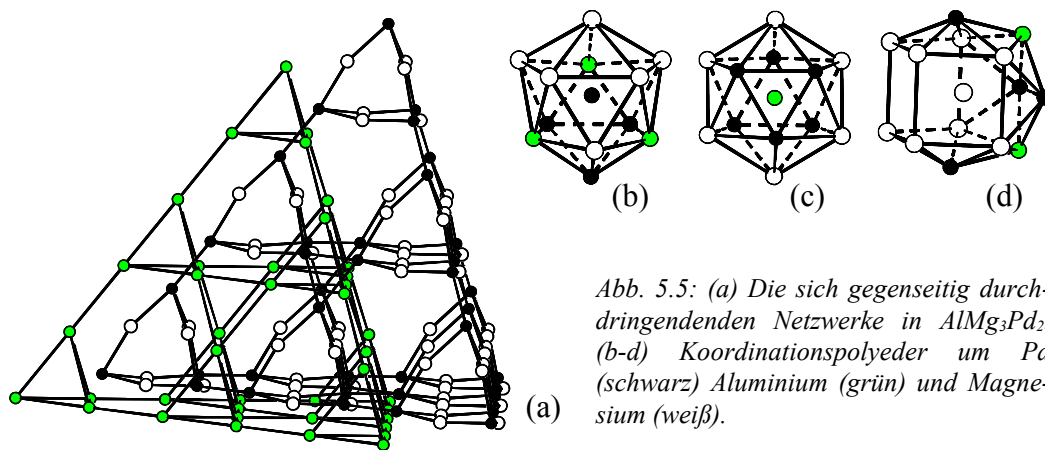


Abb. 5.5: (a) Die sich gegenseitig durchdringenden Netzwerke in AlMg_3Pd_2 . (b-d) Koordinationspolyeder um Pd (schwarz), Aluminium (grün) und Magnesium (weiß).

Röntgenlicht, anhand der Vorgabe, daß das größere Atom, in diesem Fall Magnesium, das Zentrum des voluminöseren Koordinationspolyeders besetzt. Eine Al/Mg-Mischbesetzung wurde dabei ebenso wie bei allen übrigen Ansätzen mit Aluminium nicht berücksichtigt. Die Ikosaeder um Aluminium bzw. Palladium bilden zwei sich gegenseitig durchdringende tetraedrische Netzwerke, wobei die I3-Cluster L-Typ verknüpft sind und zusammen ein $I(\infty)$ -Tetraeder [74] bilden, in dessen Zwischenräumen sich die tetraedrisch angeordneten und über Dreiecksflächen verknüpften Ikosaeder um Aluminium befinden (vgl. Abbildung 5.5 (a)). Dieser Strukturtyp scheint jedoch nur in Gegenwart von Aluminium stabilisiert zu sein, da im System Ga-Mg-Pd bislang keine Verbindung vom NiTi_2 -Strukturtyp gefunden werden konnte.

5.3.1 Darstellung und Charakterisierung

Tabelle 5.2: Details zur Präparation von $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$

Einwaage:	Temperaturprogramm:
0,0129 g Al (9,8 %)	Aufheizen bis 1000°C mit 17°C/min
0,0848 g Mg (69,1 %)	1h bei 1000°C
0,1095 g Pd (21,1 %)	100h bei 800°C
	Abkühlen im Ofen mit ca. 4°C/min

Es wurde eine Legierung der Zusammensetzung $Al_{9,8}Mg_{69,1}Pd_{21,1}$ analog der in Kapitel 4 beschriebenen Präparationsmethode dargestellt. Die genauen Angaben zur Einwaage sowie die Einzelheiten des Temperaturprogramms können der obenstehenden Tabelle entnommen werden. Der annähernd kugelförmige Schmelzling hatte eine glatte, silbrig glänzende Oberfläche. Das sehr spröde Material ließ sich einfach im Mörser zerkleinern und die resultierenden „Splitter“ zeigten unter dem Lichtmikroskop stark reflektierende, glatte Flächen. Die EDX-Analyse einer Probe ergab keinerlei Verunreinigungen durch Nb aus der als Probencontainer verwendeten Niobampulle. Auf dem CCD-Diffraktometer wurden mehrere Kristalle getestet, indem zunächst mit Hilfe von zehn Aufnahmen die Metrik bestimmt wurde. Der Kristall mit der höchsten Qualität wurde nachfolgend einem φ -Scan unterworfen. Als Startmodell für die Verfeinerung wurde das Modell des kubischen 1/1-Approximanten vom MI-Typ [54] verwendet. Eine eventuell auftretende Mischbesetzung von Al/Mg wurde nicht berücksichtigt und der dadurch auftretende Fehler in der Zusammensetzung in Kauf genommen. Einzelheiten zur Datensammlung und Strukturbestimmungen können Tabelle 5.3 entnommen werden.

Tabelle 5.3: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$

Kristallgröße / mm ³	0,2 · 0,2 · 0,35
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\phi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2 · 30s pro Aufnahme, d = 30 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	11,953 11,953 11,952
$\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	109,496 109,472 109,484
Transformierte Zellparameter a/Å	13,801(2)
Meßbereich h_{\min} , h_{\max} k_{\min} , k_{\max} l_{\min} , l_{\max}	-17, 16 -17, 17 -15, 15
$2\theta_{\min}$ / $2\theta_{\max}$	8,4 / 55,04
Volumen / Å ³	2628,6
Raumgruppentyp	Im $\bar{3}$
Gemessene Reflexe	8394
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	560 / 450
R_{int} : alle	8,76
Strukturlösung	Modell des kubischen 1/1-Approximanten [54]
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	37
Summenformel (röntg.)	$Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ ($z=2$); ($Al_{16,4}Mg_{57,6}Pd_{26}$)
Röntg. Dichte $\rho_{\text{rö}}$ / gcm ⁻³	4,294
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	7,1
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	1,62 / -3,11
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,0771 \cdot P)^2 + (73,88 \cdot P)$
$R1$: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	6,86 / 4,83
wR2: alle %	14,97
Completeness	98,2
Redundancy	14,99

Tabelle 5.4: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren und Positionen nach Tabelle 3.4 für $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{Å}^2$	occ.	Position
Mg1	48(h)	0,1133(3)	0,3086(2)	0,1816(3)	2,19(8)	1	β' , β''
Mg2	24(g)	0	0,1076(4)	0,1774(4)	2,36(5)	1	β
Pd1	24(g)	0	0,21092(9)	0,3342(8)	2,15(4)	1	α'
Al1	24(g)	0	0,4017(3)	0,3347(3)	2,22(9)	1	β''
Pd2	12(e)	0,1715(1)	0	1/2	2,46(5)	1	α'' , γ
Mg3	12(d)	0,3870(5)	0	0	1,9(2)	1	β'
Pd3	2(a)	0	0	0	2,00(8)	1	α

Tabelle 5.5: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij}/10^{-2}$ für $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	48(h)	2,2(2)	2,5(2)	1,9(2)	-0,1(1)	0,2(1)	-0,2(2)
Mg2	24(g)	2,1(3)	2,5(3)	1,9(2)	-0,3(2)	0	0
Pd1	24(g)	2,28(7)	2,06(7)	2,13(7)	-0,3(4)	0	0
Al1	24(g)	2,3(2)	2,0(4)	2,2(2)	-0,3(5)	0	0
Pd2	12(e)	2,31(9)	2,27(9)	2,83(1)	0	0	0
Mg3	12(e)	2,3(4)	1,6(3)	1,8(3)	0	0	0
Pd3	2(a)	2,00(8)	2,00(8)	2,00(8)	0	0	0

Tabelle 5.6: Abstände (in Å) zwischen benachbarten Atomen in $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$

<u>Mg1</u>	2 Mg1	3,351(4)	<u>Al1</u>	2 Mg1	2,925(5)	
	2 Mg1	3,029(6)		2 Mg1	2,968(4)	
	1 Mg1	3,129(7)		1 Pd1	2,634(4)	
	1 Mg2	3,184(6)		2 Pd1	2,730(3)	
	1 Mg2	3,094(5)		1 Al1	2,712(9)	
	1 Pd1	2,953(4)		1 Pd2	2,629(5)	
	1 Pd1	2,868(2)		1 Pd2	2,495(4)	
	1 Pd1	3,112(4)		2 Mg3	3,077(5)	
	1 Al1	2,925(5)		<u>Pd2</u>	4 Mg1	3,072(4)
	1 Al1	2,968(4)			2 Pd1	2,801(2)
	1 Pd2	3,072(4)			2 Al1	2,495(4)
1 Mg3	3,147(4)	2 Al1	2,629(5)			
<u>Mg2</u>	2 Mg1	3,184(6)	2 Mg3	2,834(4)		
	2 Mg1	3,094(5)	<u>Mg3</u>	4 Mg1	3,147(4)	
	4 Mg2	3,022(6)		2 Mg2	3,253(2)	
	1 Mg2	2,978(1)		2 Pd1	3,000(1)	
	1 Pd1	2,594(5)		4 Al1	3,077(5)	
	1 Mg3	3,255(8)		2 Pd2	2,834(4)	
	1 Pd3	2,865(5)		1 Mg3	3,12(14)	
<u>Pd1</u>	2 Mg1	2,953(4)		<u>Pd3</u>	12 Mg2	2,865(5)
	2 Mg1	2,868(4)				
	2 Mg1	3,112(4)				
	1 Mg2	2,594(5)				
	1 Al1	2,634(5)				
	2 Al1	2,730(3)				
	1 Pd2	2,801(1)				
	1 Mg3	3,000(2)				

5.3.2 Strukturbeschreibung

$\text{Al}_{12}\text{Mg}_{42}\text{Pd}_{19}$ kann, wie in Abbildung 5.6 dargestellt, als kubisch innenzentrierte Anordnung von Mackay Ikosaedern bzw. I13-Clustern beschrieben werden. Im Gegensatz zum Modell sind hier alle I13-Cluster aufgrund der Zusammensetzung und infolge der Translationsymmetrie völlig identisch aufgebaut, so daß die Verbindung in der kubischen Raumgruppe $\text{Im}\bar{3}$ kristallisiert. Sie ist isotyp zu $\alpha\text{-TiCrSi}$ und enthält 146 Atome in der Elementarzelle. Die Zuordnung der einzelnen Atomsorten ist in Systemen, die Aluminium und Magnesium enthalten, aufgrund des

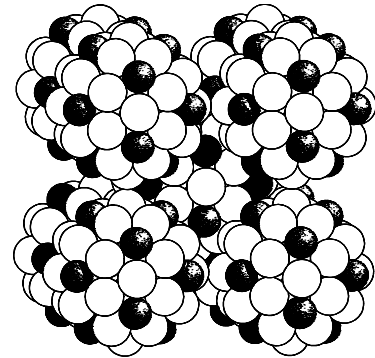


Abb. 5.6: Kubisch-raumzentrierte Anordnung von Mackay Ikosaedern in $\text{Al}_{12}\text{Mg}_{42}\text{Pd}_{19}$. (Mg: weiß, Pd: schwarz.)

schlechten Röntgenkontrastes zwischen diesen Elementen, eines der Hauptprobleme. Um zu einer sinnvollen Zuordnung zu kommen, geht man von den Grundannahmen aus, daß Magnesium, ausgehend von den Kovalenzradien, als das nominell größere Atom zunächst die Zentren der größeren Koordinationspolyeder (CN14 und CN15) besetzt, Palladium primär die Zentren der I3-Ikosaeder bildet, während Aluminium die Brückenikosaeder zentriert. Diese Annahmen sind, zumindest was die Verbindungen vom FK-Typ anbelangen, gut belegt [54] und werden zudem im I3-Clusterkonzept vorausgesetzt (vgl. Kapitel 3.3). In Abbildung 5.7 sind die einzelnen Koordinationspolyeder dargestellt. Die Anordnung entspricht dabei der in Tabelle 5.4 gewählten Reihenfolge.

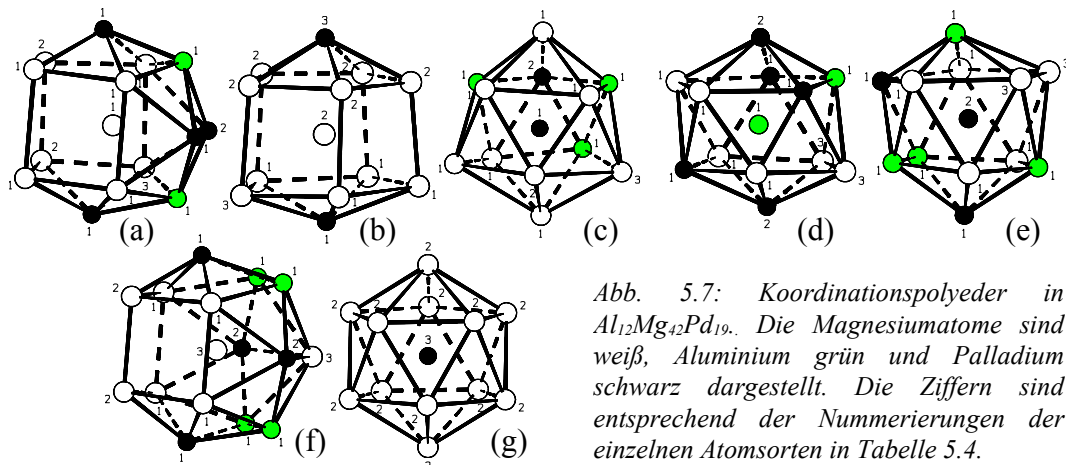


Abb. 5.7: Koordinationspolyeder in $\text{Al}_{12}\text{Mg}_{42}\text{Pd}_{19}$. Die Magnesiumatome sind weiß, Aluminium grün und Palladium schwarz dargestellt. Die Ziffern sind entsprechend der Nummerierungen der einzelnen Atomsorten in Tabelle 5.4.

Vergleicht man die Besetzung der unterschiedlichen Lagen in $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ miteinander so erkennt man, daß Mg2, Al1 und Pd2 Lagen mit einer möglichen Al- bzw. Mg-Mischbesetzung sind. Mg2 ist zweifach polar überdacht pentagonal prismatisch koordiniert, während Al1 und Pd2 jeweils die Zentren von Brückenikosaedern bilden. Pd2 ist zwar Zentrum eines Brückenikosaeders, jedoch ist hier aufgrund der gleichzeitigen Besetzung der γ -Position keinerlei Fehlordnung nachzuweisen. Die Besetzung von Al1 durch Magnesium ergab keinen nennenswerten Unterschied in den Gütefaktoren der Verfeinerung, so daß im Weiteren von einer Besetzung mit Aluminium ausgegangen wird, während man für Mg2 von einer etwa 30%ige Belegung mit Aluminium ausgehen kann. Ersetzt man die beiden Elemente auf dieser Lage jeweils vollständig ergeben sich daraus folgende möglichen Grenzfälle der Zusammensetzungen:

Tabelle 5.7: Besetzungsmöglichkeiten

CN	Wy.	Position	1. Möglichkeit	2. Möglichkeit	3. Möglichkeit
14	48(h)	β', β''	Mg	Mg	Mg
12	24(g)	β	Mg	Mg	Al
12	24(g)	α'	Pd	Pd	Pd
12	24(g)	β''	Mg	Al	Al
12	12(e)	α'', γ	Pd	Pd	Pd
15	12(d)	β'	Mg	Mg	Mg
12	2(a)	α	Pd	Pd	Pd
			$Mg_{108}Pd_{38}$ e/a = 1,48	$Al_{24}Mg_{84}Pd_{38}$ e/a = 1,64	$Al_{48}Mg_{60}Pd_{38}$ e/a = 1,81

Im Folgenden wird die zweite Möglichkeit als Modellstruktur verwendet. Einen weiteren Hinweis auf die Besetzung der Zentren der einzelnen Koordinationspolyeder gibt das jeweilige Volumen der einzelnen Polyeder, das mit Hilfe des Programms DISPOW aus dem NRCVAX Programmpaket [94] berechnet wurde.

Bei dem CN12-Polyeder um Mg2 handelt es sich um ein zweifach polar überdachtes pentagonales Prisma (Abbildung 5.7 (b)), das im Vergleich zu den Ikosaedern um Pd1, Pd2, Pd3 und Al1 ein um etwa 12,2 % vergrößertes Volumen aufweist (ausgehend von einem durchschnittlichen

Tabelle 5.8: Koordinationspolyeder und Polyedervolumina in $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$

Atom	Wy.	CN	V / \AA^3
Mg1	48(h)	14	77,45
Mg2	24(g)	12	65,79
Pd1	24(g)	12	58,73
Al1	24(g)	12	56,59
Pd2	12(e)	12	56,12
Mg3	12(d)	15	80,66
Pd3	2(a)	12	59,56

Ikosaedervolumen von $57,75 \text{ \AA}^3$). Der Trend, daß die größeren Atome die Zentren der voluminöseren Koordinationspolyeder besetzen, konnte auch bei den ternären Galliumverbindungen, die in den folgenden Kapiteln noch näher vorgestellt werden, bestätigt werden.

Ein auffallend kurzer Al-Pd Abstand ist typisch für diese Art von Verbindungen. *Takeuchi* et al. [114] haben Neutronenbeugungsuntersuchungen an AlMgPd-Legierungen durchgeführt und berichten von bemerkenswert kurzen Abständen zwischen Aluminium und Palladium sowohl innerhalb des kubischen 1/1-Approximanten vom FK-Typ als auch für die quasikristalline Verbindung diesen Typs. Für MI-Typ Strukturen soll dieser Abstand sogar noch weiter verkürzt sein. Generell scheint es bei intermetallischen Verbindungen mit Palladium zur kürzeren Pd-M Abständen zu kommen. Auch in allen übrigen der hier vorgestellten Verbindungen treten vergleichsweise kurze Metall-Metall Abstände auf.

Die Verknüpfung der Mackay Ikosaeder ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Man erkennt, daß die Mackay Ikosaeder auf den Eckpunkten der Elementarzelle jeweils über einen sogenannten sechszähligen Sektor, der durch aufgefüllte γ -Positionen erzeugt wird. Er bestehend aus je zwei Mg3-, Al1- und Pd2-Atomen, wobei Al1 und Pd2 ebenfalls zur Oberfläche des I13-Clusters gehören (vgl. Abbildung 5.9). Das zentrale Mackay Ikosaeder ist über Mg1-Oktaeder mit den übrigen Clustern verbunden. Entlang der Raumdiagonalen

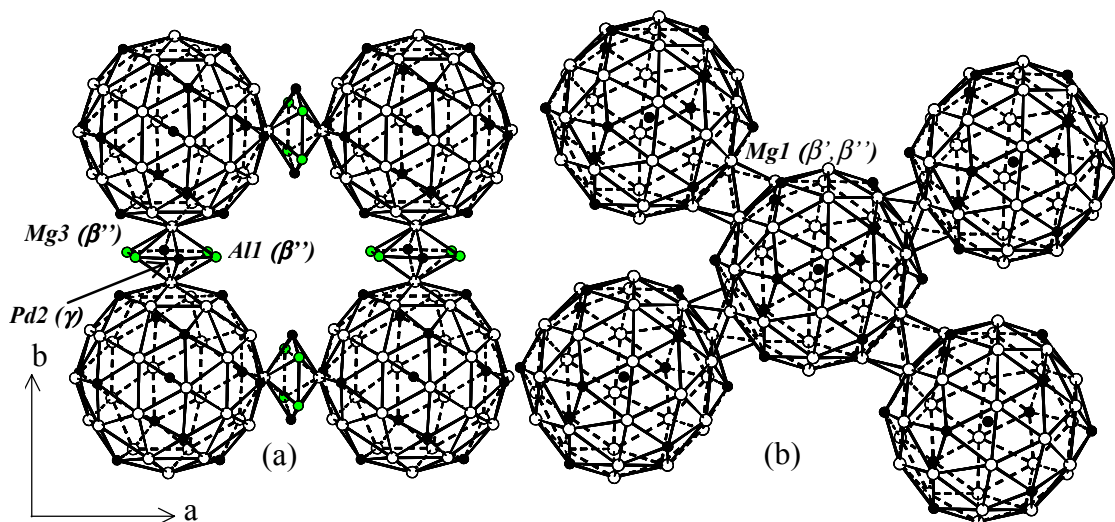


Abb. 5.8: Verknüpfungsarten der Mackay Ikosaeder: (a) Verknüpfung in der a-b-Ebene über sechszählige Sektoren, die aus Al1 und Pd2 bestehen und durch je ein Mg3 aus dem Mackay Ikosaeder überkappt werden. (b) Verknüpfung des zentralen Mackay Ikosaeders über Mg1-Oktaeder entlang der Raumdiagonalen. (Mg: weiß, Al: grün, Pd: schwarz)

kommt es zu einer leichten Durchdringung der I13-Cluster, so daß die Mg1-Atome des jeweils gegenüberliegenden Mackay Iksosaeders zur Oberfläche des I13-Clusters gehören. Insgesamt enthält der I13-Cluster 139 Atome, von denen 55 zum zentralen Mackay Iksosaeder gehören. 60 Atome (Al1 und Mg1) befinden sich auf den Eckpunkten eines Rhombenikosidodekaeders (β'' -Position), dessen Fünfecksflächen von 12 weiteren Atomen (Pd2) überkapt sind (α'' -Position). Zusätzlich enthält die Oberfläche weitere 12 Pd2-Atome auf lokal dreizähligen Positionen (γ -Position). Sie erzeugen zusammen mit Al1 und Mg3 die verknüpfenden Sechsecksflächen auf der Oberfläche des I13 (vgl. Abbildung 5.9 (d)).

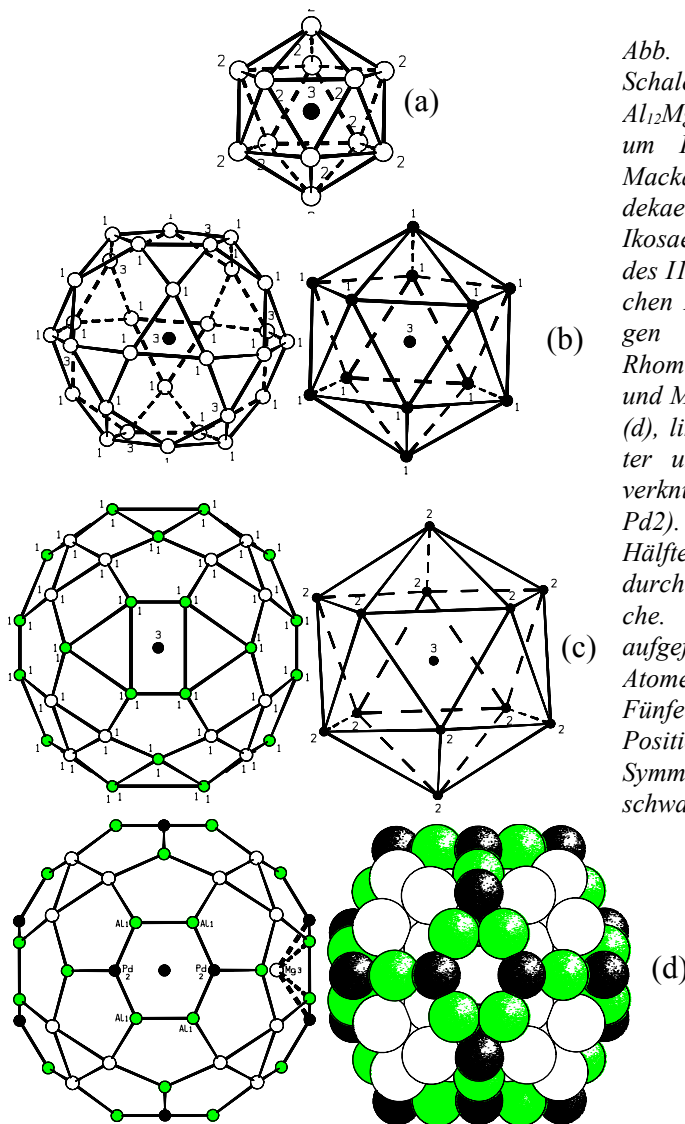


Abb. 5.9: Aufbau der einzelnen Schalen des I13 Clusters in $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$. (a) Zentrales Iksosaeder um Pd3. (b) Äußere Hülle des Mackay Iksosaeders: (links) Iksidodekaeder aus Mg1 und Mg3, (rechts) Iksosaeder aus Pd1. (c) Äußere Hülle des I13-Clusters ohne die 12 zusätzlichen Atome auf den lokal dreizähligen Positionen: (links) Rhombenikosidodekaeder aus Al1 und Mg1, (rechts) Iksosaeder aus Pd2. (d), links äußere Hülle des I13-Cluster um Pd3. In der Aufsicht die verknüpfende Sechsecksfläche (Al1, Pd2). Auf der rechten Seite eine Hälfte des sechszähligen Sektors, die durch Mg3 überkaptete Sechsecksfläche. (d), rechts Cup-Modell des aufgefüllten I13-Clusters aus 139 Atomen. Pd-Atome überkappen die Fünfecksflächen und besetzen die Positionen lokaler dreizähliger Symmetrie. (Mg: weiß, Al: grün, Pd: schwarz)

5.4 Der 1/1-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd

Es existieren unterschiedliche Möglichkeiten, um strukturelle Veränderungen in Approximanten oder Quasikristallen zu erzielen [98]. Eine dieser Möglichkeiten ist die Addition neuer Elemente, um so die Stabilisierung einer Phase zu erreichen.

Die Wahl von Gallium als zusätzliches Element wurde u. a. deshalb getroffen, weil sich durch Hinzufügen von Gallium das e/a-Verhältnis in den untersuchten Legierungen nicht ändert, da sowohl für Aluminium als auch für Gallium eine identische Zahl von Valenzelektronen angenommen wird.

5.4.1 Darstellung und Charakterisierung

Tabelle 5.9: Details zur Präparation von $Al_{22}Ga_7Mg_{79}Pd_{38}$

Einwaage	Temperaturprogramm
0,0281 g Al (10,3 %)	Aufheizen bis 1000 °C mit 17 °C/min
0,0728 g Ga (10,2 %)	1 h bei 1000 °C
0,1463 g Mg (59,3 %)	48 h bei 800 °C
0,2176 g Pd (20,2 %)	Abkühlen im Ofen mit ca. 4 °C/min

Die Legierung der Zusammensetzung $Al_{10,3}Ga_{10,2}Mg_{59,3}Pd_{20,2}$ wurde ebenso wie $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ dargestellt. Das Temperaturprogramm wurde jedoch verkürzt, da längeres Tempern bei 800°C zu keinerlei meßbaren Veränderungen führte.

Der tropfenförmige Schmelzling hatte eine metallisch glänzende Oberfläche und ließ sich mit Hilfe eines Mörsers problemlos in kleinere Bruchstückchen zerkleinern. Unter dem Lichtmikroskop zeigten einige Bruchstückchen stark reflektierende Flächen. Es wurden mehrere dieser „Splitter“ isoliert und auf dem CCD-Einkristalldiffraktometer getestet. Der qualitativ hochwertigste Kristall wurde einem ϕ -Scan unterworfen. Als Startmodell für die Verfeinerung wurde das Strukturmodell für $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ verwendet. Auch in diesem Fall wurde einer eventuell vorhandenen Al/Mg-Mischbesetzung nicht Rechnung getragen und die Besetzung der Zentren der Koordinationspolyeder erfolgte wie zuvor bereits beschrieben. Die Einzelheiten zur Datensammlung und Strukturlösung sind in Tabelle 5.10 aufgelistet.

Tabelle 5.10: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Al_{22}Ga_7Mg_{79}Pd_{38}$

Kristallgröße / mm ³	0,3 · 0,3 · 0,3
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\phi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 35 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	11,902 11,901 11,901
$\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	109,468 109,467 109,471
Transformierte Zellparameter a/Å	13,743(2)
Meßbereich h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max}	-17, 17 -17, 17 -17, 17
$2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}$	5,9 / 54,16
Volumen / Å ³	2595,6
Raumgruppentyp	Im $\bar{3}$
Gemessene Reflexe	10292
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	543 / 496
R_{int} : alle	5,2
Strukturlösung	Al ₁₂ Mg ₄₂ Pd ₁₉ (Kap. 5.3)
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	39
Summenformel (röntg.)	Al _{21,9} Ga _{7,4} Mg _{78,7} Pd ₃₈ (Al _{15,1} Ga _{4,8} Mg _{54,1} Pd ₂₆)
Röntg. Dichte $\rho_{\text{rö}}$ / gcm ⁻³	4,37
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	9,56
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	1,08 / -2,74
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,0633 \cdot P)^2 + (8,42 \cdot P))]$
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	3,34 / 2,71
wR2: alle %	11,78
Completeness	100
Redundancy	18,95

Tabelle 5.11: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren und Positionen nach Tab. 3.4 für $Al_{22}Ga_7Mg_{79}Pd_{38}$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.	Position
Mg1	48(h)	0,1130(2)	0,3069(2)	0,1813(2)	1,81(6)	1	β' , β''
M1	24(g)	0	0,1076(2)	0,1764(2)	1,96(9)	0,777 Mg/ 0,223 Ga	β
Pd1	24(g)	0	0,20985(5)	0,33261(5)	1,64(3)	1	α'
M2	24(g)	0	0,4009(2)	0,3341(2)	1,57(9)	0,913 Al/ 0,087 Ga	β''
Pd2	12(e)	0,17236(8)	0	1/2	1,70(4)	1	α'' , γ
Mg2	12(d)	0,38635(4)	0	0	1,57(9)	1	β'
Pd3	2(a)	0	0	0	1,70(6)	1	α

Tabelle 5.12: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $\text{Al}_{22}\text{Ga}_7\text{Mg}_{79}\text{Pd}_{38}$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	48(h)	1,7(1)	2,1(1)	1,6(1)	0,04(9)	0,12(9)	-0,02(9)
M1	24(g)	1,9(1)	1,8(1)	1,5(1)	-0,36(8)	0	0
Pd1	24(g)	1,77(4)	1,60(4)	1,59(5)	-0,11(3)	0	0
M2	24(g)	1,8(1)	1,5(1)	1,5(1)	-0,5(9)	0	0
Pd2	12(e)	1,49(6)	1,51(6)	2,16(6)	0	0	0
Mg2	12(d)	1,9(2)	1,4(2)	1,5(2)	0	0	0
Pd3	2(a)	1,72(6)	1,72(6)	1,72(6)	0	0	0

Tabelle 5.13: Abstände (in \AA) zwischen benachbarten Atomen in $\text{Al}_{22}\text{Ga}_7\text{Mg}_{79}\text{Pd}_{38}$

<u>Mg1</u>	2 Mg1	3,315(2)	<u>M2</u>	2 Mg1	2,914(3)
	2 Mg1	3,038(4)		2 Mg1	2,974(3)
	1 Mg1	3,106(5)		2 Pd1	2,741(1)
	1 M1	3,149(2)		1 Pd1	2,625(3)
	1 M1	3,071(3)		1 M2	2,724(5)
	1 Pd1	2,918(3)		1 Pd2	2,607(3)
	1 Pd1	2,847(2)		1 Pd2	2,492(2)
	1 Pd1	3,139(9)		2 Mg2	3,080(3)
	1 M2	2,914(3)			
	1 M2	2,974(3)	<u>Pd2</u>	4 Mg1	3,075(2)
	1 Pd2	3,077(2)		2 Pd1	2,813(1)
	1 Mg2	3,128(3)		2 M2	2,492(2)
				2 M2	2,607(3)
				2 Mg2	2,836(3)
<u>M1</u>	2 Mg1	3,149(2)			
	2 Mg1	3,068(1)			
	4 M1	2,992(3)	<u>Mg2</u>	4 Mg1	3,128(3)
	1 M1	2,958(5)		2 M1	3,239(4)
	1 Pd1	2,566(2)		2 Pd1	2,978(1)
	1 Mg2	3,239(4)		4 M2	3,080(3)
	1 Pd3	2,839(2)		2 Pd2	2,836(3)
			1 Mg2	3,124(1)	
<u>Pd1</u>	2 Mg1	2,918(3)			
	2 Mg1	3,139(9)	<u>Pd3</u>	12 M1	2,839(2)
	2 Mg1	2,831(1)			
	1 M1	2,566(2)			
	1 M2	2,625(3)			
	2 M2	2,741(1)			
	2 Pd2	2,813(1)			

5.4.2 Strukturbeschreibung

Tabelle 5.14: Koordinationspolyeder und Polyedervolumina in $Al_{22}Ga_7Mg_{79}Pd_{38}$

Atom	Wy.	CN	$V / \text{\AA}^3$
Mg1	48(h)	14	76,45
M1	24(g)	12	64,03
Pd1	24(g)	12	58,23
M2	24(g)	12	56,54
Pd2	12(e)	12	56,04
Mg2	12(e)	15	80,01
Pd3	2(a)	12	57,99

Auch in $Al_{22}Ga_7Mg_{79}Pd_{38}$ weist das zweifach polar überdachte pentagonale Prisma um M1 ein um etwa 11 % vergrößertes Polyedervolumen, im Vergleich zu einem durchschnittlichen Ikosaedervolumen von $57,2 \text{\AA}^3$ auf. Die Zuordnung der Atomsorten zu den unterschiedlichen Positionen stützt sich auf das Strukturmodell von $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ und läßt eine Al/Mg-Mischbesetzung ebenfalls unberücksichtigt. Lediglich für die zwei Positionen (M1 und M2), die bereits zuvor für eine potentielle Mischbesetzung mit Al/Mg in Betracht gezogen worden sind, konnte eine 20,8%ige bzw. 8,5%ige Belegung mit Gallium festgestellt werden. Das erhöht die Wahrscheinlichkeit, daß auch im zuvor besprochenen $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ auf diesen beiden Positionen eine Al/Mg-Mischbesetzung vorliegt. Es kann jedoch nachwievor keine Aussage über das mögliche Ausmaß einer Mischbesetzung gemacht werden, da, wie das Beispiel $AlMg_3Pd_2$ (vgl. Kapitel 5.3) zeigt, die Austauschbarkeit von Aluminium und Gallium begrenzt sein kann und eine Teilbesetzung mit Gallium nicht notwendigerweise eine Besetzung mit Aluminium bestätigt, aus diesem Grund bleibt eine Al/Mg-Mischbesetzung in dem Strukturmodell für $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ unberücksichtigt.

Der quarternäre 1/1-Approximant besitzt im Vergleich zu $Al_{12}Mg_{42}Pd_{19}$ leicht verkürzte Gitterparameter und ein dementsprechend verkleinertes Volumen der Elementarzelle, was auf den Galliumgehalt von etwa 4,8 mol-%, gemäß der röntgenographischen Zusammensetzung, zurückzuführen ist. Dies wird durch ternäre Phasen vom Typ M-Mg-Pd belegt, in denen es gelang Aluminium vollständig durch Gallium zu ersetzen. Diese zeigen eine signifikante Verkleinerung der Elementarzellenparameter (s. u.). Eine EDX-Analyse bestätigt diese Zusammensetzung. Der Trend zur Verkleinerung setzt sich auch in den einzelnen Koordinationspolyedervolumina fort. Auch im quarternären 1/1-Approximanten treten die bereits erwähnten kurzen Pd-M Abstände auf.

5.5 Der kubisch-flächenzentrierte Approximant im System Ga-Mg-Pd

Neben dem zusätzlichen Einbringen von Gallium wurde im zweiten Abschnitt Aluminium vollständig durch Gallium ersetzt. Auf diese Weise sollte versucht werden, dem bereits erläuterten Problem der Zuordnung der Atomsorten bei der Strukturanalyse im System Al-Mg-Pd zu begegnen. Der Röntgenkontrast zwischen Gallium und Magnesium ist ausreichend, und bereits 1875 erkannte *Mendeleev* die Ähnlichkeit zwischen Aluminium und Gallium, welches er „eka-aluminium“ nannte [115]. Die Verwendung von Gallium anstelle des Aluminiums sollte eine problemlose Unterscheidung aller Elemente in der Röntgenstrukturanalyse ermöglichen. Als ein weiterer positiver Nebeneffekt erwies sich die Tatsache, daß das bei allen aluminiumhaltigen Ansätzen auftretende AlMg_3Pd_2 als galliumhaltige Verbindung nicht zu existieren scheint. Die ternären Galliumverbindungen konnten ohne störende Nebenprodukte dargestellt werden.

Neben der kubisch-raumzentrierten Anordnung, existieren auch Strukturen mit einem kubisch-flächenzentrierten Arrangement der Mackay Ikosaeder. 1985 berichteten *Prokof'ev* et al. [116], daß AgMg_3 aus einer Hochtemperatur (HT) ϵ' - und einer Tieftemperatur (TT) ϵ -Phase bestehe. Die später von *Arakcheeva* et al. [108] gelöste HT-Phase ϵ' - $\text{Ag}_{17}\text{Mg}_{54}$ gehört zu den 1/1-Approximanten vom MI-Typ. Jedoch liegen in dieser Struktur die I13-Cluster derartig verzerrt vor, daß die Verbindung lediglich „pseudokubisch“ in der orthorhombischen Raumgruppe *Immm* kristallisiert (vgl. Tabelle 5.1). *Spiekermann* hat in seinen Untersuchungen gezeigt [54], daß Proben der ϵ' -Phase in einem Zusammensetzungsbereich zwischen 23,84 at.-% und 27,04 at.-% Silber durch Tempern bei Temperaturen zwischen 390 °C und 420 °C teilweise in die kubisch-flächenzentrierte ϵ -Phase der Zusammensetzung $\text{Ag}_8\text{Mg}_{25}$ überführt werden können. Durch das Hinzufügen einer dritten Komponente, in diesem Fall Aluminium, wird die Transformation von ϵ' zu ϵ auch nach längerem Tempern nicht mehr beobachtet. Sowohl im System Ga-Mg-Pd als auch im System Al-Ga-Mg-Pd gelang es in dieser Arbeit einen Approximanten mit kubisch-flächenzentrierter Anordnung von Mackay Ikosaedern darzustellen. Beide Verbindungen sind isotyp zu ϵ - $\text{Ag}_8\text{Mg}_{25}$ und können aber nicht über eine Gleichgewichtsreaktion in den entsprechenden kubisch-innenzentrierten 1/1-Approximanten überführt werden.

5.5.1 Darstellung und Charakterisierung

Tabelle 5.15: Details zur Präparation von $Ga_{34,5}Mg_{176,5}Pd_{53}$

Einwaage	Temperaturprogramm
0,05150 g Ga (14,2 %)	Aufheizen bis 800 °C mit 15 °C/min
0,11510 g Mg (65,0 %)	4 d bei 800 °C
0,08190 g Pd (20,8 %)	Abkühlen auf 600 °C mit ca. 4 °C/min 7 h bei 600 °C Abkühlen im Ofen mit ca. 4 °C/min

Es wurde eine Legierung der Zusammensetzung $Ga_{14,2}Mg_{65,0}Pd_{20,8}$ dargestellt. Die Elemente wurden wie in Tabelle 5.15 angegeben eingewogen und zu einer Tablette verpreßt. Diese wurde im Handschuhkasten unter Argon-Atmosphäre in ein Niobrohr verbracht, welches mit Hilfe eines Lichtbogenofens unter Schutzgas zugeschweißt wurde. Die so gewonnene Niobampulle wurde in einen über einen Younghahn mit einer Ölpumpe verbundenen Quarzfinger gelegt, der während des Aufschmelzens im Röhrenofen beständig evakuiert wurde. Nach Beendigung des Aufschmelzvorgangs wurde der Younghahn geschlossen und der Ansatz dem verbliebenen Teil des Temperaturprogramms unterworfen.

Der ebenfalls annähernd kugelförmige Schmelzling hat eine glatte, silbrig glänzende Oberfläche und ließ sich mit Hilfe eines Mörsers leicht zerkleinern. Einige „Splitter“ der Probe zeigten unter dem Lichtmikroskop stark reflektierende, glatte Flächen. Es wurden wiederum einige Bruchstückchen isoliert und auf dem CCD-Diffraktometer getestet. Der hochwertigste Kristall wurde einem ϕ -Scan unterworfen. Die Auflistung der Informationen zur Datensammlung und Strukturlösung finden sich in den nachfolgenden Tabellen.

Tabelle 5.16: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Ga_{13}Mg_{67}Pd_{20}$

Kristallgröße / mm ³	0,2 · 0,2 · 0,3
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\varphi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 35 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	12,062 12,061 12,062
$\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	59,998 59,998 59,997
Transformierte Zellparameter a/Å	17,057(5)
Meßbereich h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max}	-19,19 -20, 20 -20, 20
$2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}$	8,3 / 51,3
Volumen / Å ³	4962,6
Raumgruppentyp	Fm $\bar{3}$
Gemessene Reflexe	6216
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	433 / 410
R_{int} : alle	4,03
Strukturlösung	SHELXS-86, ϵ -Ag ₈ Mg ₂₅ [54]
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	35
Summenformel (röntg.)	Ga _{34,5} Mg _{176,5} Pd ₅₃ (Ga _{13,1} Mg _{66,9} Pd ₂₀)
Röntg. Dichte $\rho_{\text{röntg}}$ / gcm ⁻³	4,49
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	13,05
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	0,86 / -0,72
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,0321 \cdot P)^2 + (15,7386 \cdot P)]$
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	2,48 / 2,15
wR2: alle %	5,44
Completeness	98,2
Redundancy	14,36

Tabelle 5.17: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren und Positionen nach Tabelle 3.4 für $Ga_{34,5}Mg_{176,5}Pd_{53}$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.	Position
Mg1	96(i)	0,09463(7)	0,25849(7)	0,15825(7)	1,85(3)	1	β', β''
M1	48(h)	0	0,08814(5)	0,36276(5)	2,11(4)	0,510 Mg/ 0,490 Ga	β
Pd1	48(h)	0	0,15460(2)	0,22887(2)	1,59(2)	1	α', α''
Mg2	32(f)	0,09452(6)	0,09452(6)	0,09452(6)	1,76(4)	1	β''
Mg3	24(e)	0,2144(1)	0	0	2,07(5)	1	β'
Ga1	8(c)	1/4	1/4	1/4	1,88(3)	1	γ
Pd2	4(b)	1/2	1/2	1/2	1,56(3)	1	α
M2	4(a)	0	0	0	1,69(7)	0,74 Ga/ 0,26 Pd	-

Tabelle 5.18: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $\text{Ga}_{34,5}\text{Mg}_{176,5}\text{Pd}_{53}$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	96(i)	1,85(6)	1,78(6)	1,93(6)	-0,11(5)	0,17(4)	-0,32(5)
M1	48(h)	2,57(5)	2,10(5)	1,68(5)	0,32(4)	0	0
Pd1	48(h)	1,56(3)	1,48(3)	1,73(3)	0,11(1)	0	0
Mg2	32(f)	1,76(4)	1,76(4)	1,76(4)	-0,12(5)	-0,12(5)	-0,12(5)
Mg3	24(e)	2,3(1)	2,7(1)	1,2(1)	0	0	0
Ga1	8(c)	1,88(3)	1,88(3)	1,88(3)	0	0	0
Pd2	4(b)	1,56(3)	1,56(3)	1,56(3)	0	0	0
M2	4(a)	1,69(7)	1,69(7)	1,69(7)	0	0	0

Tabelle 5.19: Abstände (in Å) zwischen benachbarten Atomen in $\text{Ga}_{34,5}\text{Mg}_{176,5}\text{Pd}_{53}$

<u>Mg1</u>	2 Mg1	3,451(2)	<u>Pd1</u>	2 Mg1	2,681(1)	
	2 Mg1	3,078(2)		2 Mg1	2,917(1)	
	1 Mg1	3,143(2)		2 Mg1	2,931(1)	
	1 Mg1	3,228(3)		1 M1	2,550(1)	
	1 M1	3,095(2)		2 Mg2	2,983(3)	
	1 M1	3,234(2)		1 Mg3	2,649(1)	
	1 Pd1	2,682(1)		1 Pd1	3,332(1)	
	1 Pd1	2,917(1)	<u>Mg2</u>	3 Mg1	3,001(2)	
	1 Pd1	2,931(1)		3 Pd1	2,983(1)	
	1 Mg2	3,001(2)		3 Mg2	3,224(2)	
	1 Mg3	3,234(1)		3 Mg3	3,062(2)	
	1 Ga1	3,081(1)		1 M2	2,792(2)	
	<u>M1</u>	2 Mg1	3,096(4)	<u>Mg3</u>	4 Mg1	3,234(2)
2 Mg1		3,234(3)	2 M1		2,944(2)	
4 M1		2,905(1)	2 Pd1		2,649(1)	
1 M1		3,007(2)	4 Mg2		3,062(2)	
1 Pd1		2,550(1)	<u>Ga1</u>	12 Mg1	3,081(1)	
1 Mg3		2,944(5)		<u>Pd2</u>	12 M1	2,782(1)
1 Pd2		2,782(1)			<u>M2</u>	8 Mg2

5.5.2 Strukturbeschreibung

$\text{Ga}_{34,5}\text{Mg}_{176,5}\text{Pd}_{53}$ kann als eine kubisch- flächenzentrierte Anordnung von Mackay Ikosaedern bzw. I13-Clustern beschrieben werden (vgl. Abbildung 5.10). Die zu $\epsilon\text{-Ag}_8\text{Mg}_{25}$ isotype Verbindung kristallisiert in der kubischen Raumgruppe $Fm\bar{3}$ und enthält 264 Atome in der Elementarzelle.

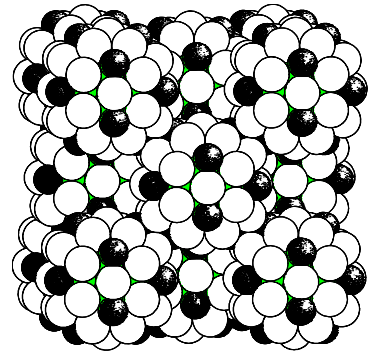


Abb. 5.10: Kubisch-flächenzentrierte Anordnung von Mackay Ikosaedern in $\text{Ga}_{34,5}\text{Mg}_{176,5}\text{Pd}_{53,0}$.

Auch in dieser Verbindung bestätigt sich die Tendenz, daß große Atome die Zentren größerer Koordinationspolyeder besetzen (vgl. Tabelle 5.20). Lediglich die Positionen M1 und Ga1 bilden eine Ausnahme. M1 befindet sich im Zentrum eines zweifach überdachten pentagonalen Prismas, während Ga1 ikosaedrisch koordiniert ist und die Positionen lokal dreizähliger Symmetrie (γ -Position) auf der Oberfläche des I13-Clusters besetzen. Beide Koordinationspolyeder weisen im Vergleich ein verhältnismäßig großes Volumen auf. Im

Tabelle 5.20:
*Koordinationspolyeder und Polyeder-
volumina in $\text{Ga}_{13}\text{Mg}_{67}\text{Pd}_{20}$*

Atom	Wy.	CN	V / Å ³
Mg1	96(i)	14	79,33
M1	48(h)	12	61,86
Pd1	48(h)	11	47,52
Mg2	32(f)	13	70,41
Mg3	24(e)	12	65,46
Ga1	8(c)	12	73,69
Pd2	4(b)	12	54,64
M2	4(a)	8	33,55

Fall von M1 begründet sich die leichte Aufweitung des Volumens gegenüber vergleichbarer Polyeder des 1/1-Approximanten damit, daß diese Position eine Mg/Ga-Mischbesetzung mit 51% Magnesium aufweist. Ga1 hingegen wird ausschließlich von Mg-Atomen koordiniert, die sich aufgrund ihrer Größe in einem Abstand von 3,081(2) Å um das Galliumatom gruppieren. In Abbildung 5.11 sind alle Koordinationspolyeder entsprechend der Tabelle 5.17 dargestellt.

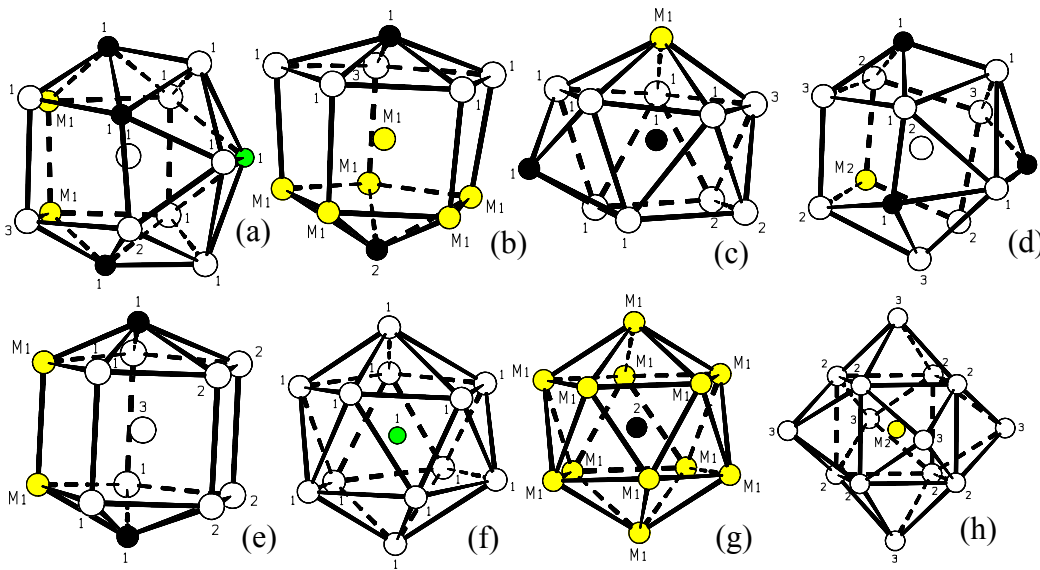


Abb. 5.11: Koordinationspolyeder in $Ga_{34,5}Mg_{176,5}Pd_{53,0}$. Die Magnesiumatome sind weiß, Palladium schwarz, Gallium grün und die mischbesetzten Positionen M1 und M2 gelb dargestellt. Zur besseren Übersicht sind die Atome hier entsprechend Tabelle 5.14 beschriftet.

Die Mackay Ikosaeder sind, wie in Abbildung 5.12 dargestellt, entlang der a-b Ebene über CsCl-artige Einheiten verknüpft, deren Vierecksflächen durch Mg_3 -Atome überkappt werden, die zur Oberfläche des Mackay Ikosaeders gehören. Entlang der Raumdiagonalen erfolgt die Verknüpfung der Mackay Ikosaeder über Oktaeder. Die auf der Oberfläche des Mackay Ikosaeder liegende Dreiecksfläche, bestehend aus zwei Mg_1 - und einem Pd_1 -Atom, gehört dabei zum jeweils gegenüberliegenden I13-Cluster, da sich die

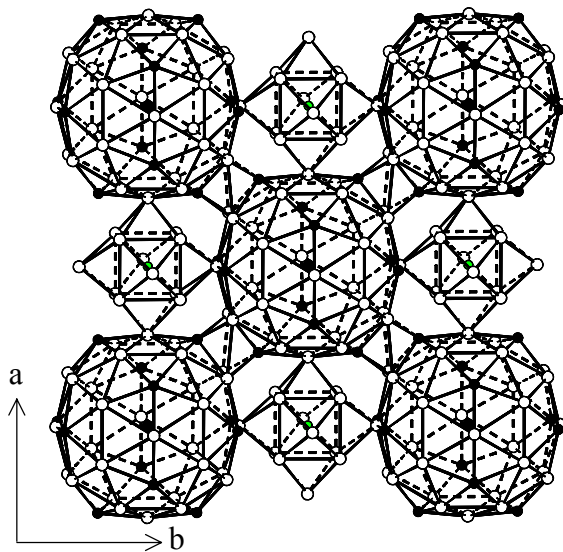


Abb. 5.12: Verknüpfung der Mackay Ikosaeder entlang der a-b Ebene innerhalb der kubisch-flächenzentrierten Anordnung.

I13-Cluster entlang der Raumdiagonalen leicht durchdringen.

Abbildung 5.13 gibt einen Überblick über den Aufbau des Mackay Ikosaeders und des I13-Clusters. Die Oberfläche des Mackay Ikosaeders wird durch Mg_1 , Mg_3 und Pd_1 gebildet, wobei die Magnesiumatome auf den Eckpunkten eines Ikosidodekaeders liegen, dessen Fünfecksflächen durch Pd_1 überkappt werden. Normalerweise sind diese überkappenden Atome ikosaedrisch koordiniert und bilden so die 12

spitzenverknüpften Iksosaeder, die zusammen mit einem zentralen Iksosaeder das I13-Cluster bilden. Im Fall von Pd1 handelt es sich jedoch um ein abgeschnittenes Iksosaeder der Koordinationszahl 11, so daß in der Hülle des hier vorliegenden I13-Clusters um Pd2 12 Atome (β'' -Position) fehlen und anstelle der 72 (60 (β'' -Position) + 12 (α'' -Position)) Oberflächenatome lediglich 60 vorhanden sind. Acht Ga1 besetzten lokal dreizählige Positionen (γ -Position), so daß der I13-Cluster insgesamt 123 Atome enthält. Aufgrund der fehlenden Atome kommt es zu einer Verzerrung der Oberfläche. Anstelle von Fünfecksflächen finden sich dort drei aufeinanderfolgende Vierecksflächen. Die aus Mg2 gebildete Vierecksfläche bildet zusammen mit Mg3 aus dem Mackay Iksosaeder die CsCl-artige Verknüpfungseinheit (vgl. Abbildung 5.13). Diese Anordnung der Atome auf der Oberfläche des I13-Clusters erlaubt eine Optimierung der Packungsdichte bei einer flächenzentrierten Anordnung der I13-Cluster.

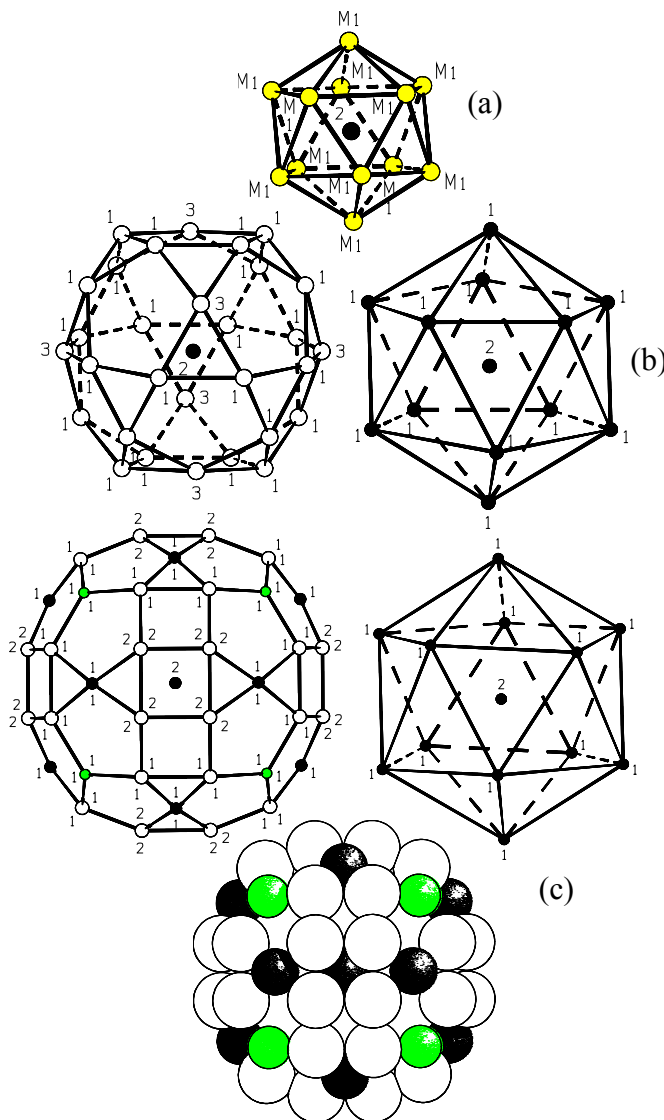


Abb. 5.13: Aufbau der einzelnen Schalen des I13-Clusters in $Ga_{34,5}Mg_{176,5}Pd_{53,0}$.
 (a) Zentrales Iksosaeder um Pd2.
 (b) Äußere Hülle des Mackay Iksosaeders: (links) Iksidodekaeder aus Mg1 und Mg3, (rechts) Iksosaeder aus Pd1.
 (c) Äußere Hülle des I13-Clusters: (links) aufgrund der der CN11 Koordination von Pd1 degenerieren die Fünfecke auf der Oberfläche des I13-Cluster zu Vierecken, bestehend aus Mg1 und Mg2, (rechts) Iksosaeder bestehend aus Pd1, (unten) Cup-Modell des I13. Die zusätzlichen acht Ga1-Atome sind grün gezeichnet.

5.6 Der kubisch-flächenzentrierte Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd

Im quarternären System Al-Ga-Mg-Pd existiert wahrscheinlich neben dem bereits in Kapitel 5.4 vorgestellten kubisch-innenzentrierten Strukturtyp auch die kubisch-flächenzentrierte Verbindung. Ein Phasenübergang analog zu dem zwischen ε' -Ag₁₇Mg₅₄ und ε -Ag₈Mg₂₅ bei diesen beiden Legierungen konnte jedoch nicht festgestellt werden. Ein Vergleich der Gitterparameter und Koordinationspolyedervolumina zeigt, daß sich die Strukturen der kubisch-flächenzentrierten Approximanten in Ga-Mg-Pd und Al-Ga-Mg-Pd sich nicht signifikant unterscheiden. Der mittels EDX-Analyse bestätigte Aluminiumanteil ist scheinbar zu gering, um einen nennenswerten Einfluß auf die Struktur auszuüben. Er wurde deshalb bei der Verfeinerung nicht berücksichtigt. Die Details zur Strukturanalyse sind in Anhang E aufgeführt.

5.7 Der rhomboedrische 1/1-Approximant im System Al-Mg-Pd

Das System Al-Mg-Pd ist das einzige bislang bekannte System, in dem Approximanten und Quasikristalle vom MI- und FK-Typ sowie dekadagonale Strukturen gefunden wurden. [104]. Neben diesen drei unterschiedlichen Strukturtypen existiert mit der hier vorgestellten Verbindung nun auch der erste Vertreter eines rhomboedrischen, rationalen Fibonacci Approximanten. Der rhomboedrische 1/1-Approximant ist bislang der einzige Strukturtyp,

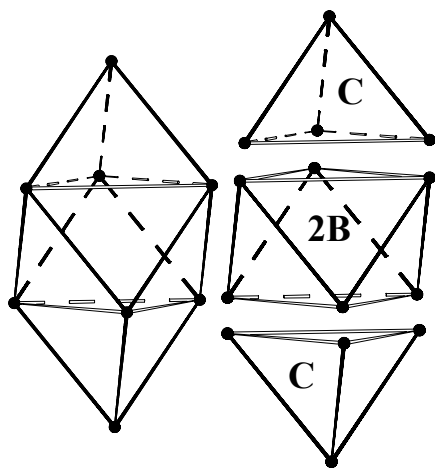


Abb. 5.14: Zerlegung des spitzen Rhomboeder (PR) in kanonische Zellen.

der in allen drei untersuchten Systemen, Al-Mg-Pd, Ga-Mg-Pd und Al-Ga-Mg-Pd, dargestellt werden konnte. Auch diese Struktur kann, genau wie die kubischen innenzentrierten oder orthorhombischen Verbindungen, mit Hilfe der kanonischen Zellparkettierung von Henley [60] beschrieben werden (vgl. Kapitel 2.3.2). Der einfachste Fall eines rhomboedrischen Approximanten besitzt eine primitive Elementarzelle, die aus je zwei B- und zwei C-Zellen gebildet wird (vgl. Tabelle 2.3). In Abbildung 5.14 ist der Aufbau dieser primitiven Elementarzelle illustriert.

5.7.1 Darstellung und Charakterisierung

Tabelle 5.21: Details zur Präparation von $Al_6Mg_{14,7}Pd_7$

Einwaage	Temperaturprogramm
0,0209 g Al (15,2 %)	Aufheizen bis 1000 °C mit 15 °C/min
0,0805 g Mg (64,8 %)	120 min bei 1000 °C
0,1090 g Pd (20,0 %)	3 d bei 600 °C
	Abkühlen im Ofen mit ca. 4 °C/min

Eine Legierung der Zusammensetzung $Al_{15,2}Mg_{64,8}Pd_{20}$ wurde mit Hilfe der in Kapitel 4 beschriebenen Präparationsmethode dargestellt. Die Angaben zur Einwaage und zum Temperaturprogramm sind in Tabelle 5.21 aufgeführt.

Der tropfenförmige Schmelzling hatte eine glatte, silbrig glänzende Oberfläche. Aufgrund seiner Sprödigkeit konnte das Material leicht mit einem Mörser zerkleinert werden. Auch hier zeigten einzelne Bruchstückchen unter dem Lichtmikroskop stark reflektierende Flächen. Einige dieser Stücke wurden isoliert und auf dem CCD-Diffraktometer getestet. Der Kristall mit der besten Qualität wurde einem ϕ -Scan unterworfen. Die Einzelheiten zur Datensammlung und Strukturbestimmung sind in Tabelle 5.22 aufgeführt.

Das Startmodell wurde mit Hilfe *Direkter Methoden* ermittelt. Aufgrund des schlechten Röntgenkontrastes zwischen Aluminium und Magnesium wird auch hier eine Al/Mg Mischbesetzung nicht berücksichtigt.

Tabelle 5.22: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Al_6Mg_{14,7}Pd_7$

Kristallgröße / mm ³	0,25 · 0,25 · 0,25
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\phi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 25 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å $\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	12,000 11,998 11,998 70,023 70,023 70,023
Transformierte Zellparameter a/Å, c/Å hexagonale Aufstellung	13,767(2), 26,964(5)
Meßbereich h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max} $2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}$	-14, 17 -17, 17 -21, 34 4,5 / 54,12
Volumen / Å ³	4313,68
Raumgruppentyp	$R\bar{3}m$
Gemessene Reflexe	5899
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	1225 / 1027
R_{int} : alle	5,31
Strukturlösung	SHELXS-86
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	82
Summenformel (röntg.)	$Al_6Mg_{14,7}Pd_7$ (z = 9) ($Al_{21,7}Mg_{53}Pd_{25,3}$)
Röntg. Dichte $\rho_{\text{röntg}}$ / gcm ⁻³	4,398
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	7,19
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	1,71 / -6,03
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,1017 \cdot P)^2 + (222,06 \cdot P)]$
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	6,05 / 4,53
wR2: alle %	18,08
Completeness	100
Redundancy	1,59

Tabelle 5.23: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren und Positionen nach Tabelle 3.4 für $Al_6Mg_{14,7}Pd_7$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.	Position
Mg1	36(i)	0,3260(3)	0,0417(4)	0,1086(1)	1,78(9)	1	β' , β''
Al1	18(h)	0,3986(2)	0,6014(2)	0,0109(2)	1,32(9)	1	β''
Pd1	18(h)	0,44308(5)	0,55692(5)	0,37510(4)	1,67(4)	1	α'
Pd2	18(h)	0,45444(6)	0,54556(6)	0,08690(4)	1,65(4)	1	α'' , γ
Mg2	18(h)	0,4583(2)	0,5417(2)	0,2656(2)	1,5(1)	1	β'
Pd3	18(h)	0,52710(5)	0,47290(5)	0,17445(4)	1,53(4)	1	α'
Mg3	18(h)	0,5482(2)	0,4518(2)	0,3521(2)	1,69(1)	1	β
Al2	18(h)	0,5602(2)	0,4398(2)	0,0833(2)	1,58(1)	1	β''
Mg4	18(h)	0,5934(2)	0,4066(2)	0,2503(2)	1,56(1)	1	β
Mg5	18(h)	0,7427(2)	0,2573(2)	0,1549(2)	1,60(2)	1	β' , β''
Al3	18(h)	0,20144	0	1/2	1,56(1)	1	β''
Mg6	18(h)	0,3829(4)	0	0	1,59(2)	1	β'
Pd4	6(c)	0	0	0,2608(1)	2,43(6)	1	α''
Mg7	6(c)	0	0	0,4406(4)	1,51(2)	1	-
Pd5	3(a)	0	0	0	1,64(7)	1	α

Tabelle 5.24: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $Al_6Mg_{14,7}Pd_7$

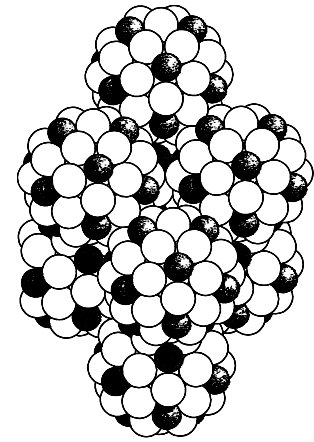
Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	36(i)	1,9(2)	1,6(2)	1,5(2)	0,2(2)	0,3(2)	0,8(2)
Al1	18(h)	1,3(2)	1,3(2)	1,2(2)	0,00(9)	-0,00(9)	0,7(2)
Pd1	18(h)	1,64(5)	1,64(5)	1,66(7)	0,1(2)	-0,09(2)	0,84(5)
Pd2	18(h)	1,89(5)	1,89(5)	1,35(6)	0,07(2)	-0,07(2)	1,16(5)
Mg2	18(h)	1,5(2)	1,5(2)	1,5(3)	-0,00(1)	0,00(1)	0,7(2)
Pd3	18(h)	1,65(5)	1,7(5)	1,37(6)	0,03(2)	-0,03(2)	0,95(5)
Mg3	18(h)	1,7(2)	1,7(2)	1,8(3)	-0,05(1)	0,01(1)	1,1(2)
Al2	18(h)	1,6(2)	1,6(2)	1,5(2)	-0,00(1)	0,04(9)	0,8(2)
Mg4	18(h)	1,5(2)	1,5(2)	1,3(3)	0,1(1)	-0,1(1)	0,6(2)
Mg5	18(h)	1,5(2)	1,5(2)	1,4(3)	0,1(1)	-0,1(1)	0,6(2)
Al3	18(h)	1,5(2)	1,3(2)	1,7(2)	0,1(2)	-0,1(1)	0,6(1)
Mg6	18(h)	1,7(2)	1,6(3)	1,4(3)	0,00(2)	0,00(1)	0,8(1)
Pd4	6(c)	2,34(8)	2,34(8)	2,5(1)	0	0	1,17(4)
Mg7	6(c)	1,5(3)	1,5(3)	1,4(4)	0	0	0,7(1)
Pd5	3(a)	1,54(9)	1,54(9)	1,7(2)	0	0	0,77(5)

Tabelle 5.25: Abstände (in Å) zwischen benachbarten Atomen in $Al_6Mg_{14,7}Pd_7$

<u>Mg1</u>	1 Mg1	3,112(8)	<u>Mg2</u>	2 Mg1	3,153(5)	<u>Mg5</u>	2 Mg1	3,040(6)					
	1 Mg1	3,340(8)		2 Al1	2,975(5)		2 Mg1	3,261(4)					
	1 Pd1	2,826(4)		1 Pd1	2,949(6)		1 Pd1	3,128(6)					
	1 Pd2	3,144(4)		2 Pd2	2,954(3)		2 Pd3	2,909(2)					
	1 Mg2	3,153(5)		1 Pd3	2,932(6)		2 Al2	2,951(5)					
	1 Pd3	3,193(4)		1 Mg3	3,140(8)		2 Mg4	3,103(7)					
	1 Pd3	2,848(4)		1 Mg4	3,221(8)		2 Mg5	3,11(1)					
	1 Mg3	3,102(6)		2 Al3	3,037(5)		1 Pd4	2,842(6)					
	1 Al2	2,847(4)		2 Mg6	3,231(9)		<u>Al3</u>	2 Mg1	2,876(6)				
	1 Mg4	3,068(5)		1 Mg7	3,137(7)			2 Pd2	2,583(1)				
	1 Mg5	3,040(6)		<u>Pd3</u>	2 Mg1			3,193(4)	2 Mg2	3,037(5)			
	1 Mg5	3,261(1)			2 Mg1			2,848(4)	2 Pd3	2,602(3)			
	1 Al3	2,877(6)			1 Pd2			2,904(2)	2 Al3	2,749(5)			
	1 Mg6	3,131(4)			1 Mg2			2,932(6)	2 Mg7	3,175(6)			
	<u>Al1</u>	2 Al1			2,671(8)			1 Al2	2,561(5)	<u>Mg6</u>	2 Mg1	3,131(4)	
2 Pd1		2,663(3)	1 Mg4		2,563(6)	2 Al1		2,896(5)					
1 Pd2		2,423(5)	2 Mg5		2,909(2)	2 Pd1		2,941(1)					
2 Mg2		2,975(5)	2 Al3		2,602(2)	2 Pd2		3,019(3)					
1 Al2		2,702(6)	<u>Mg3</u>		2 Mg1	3,102(6)		2 Mg2	3,231(9)				
2 Mg6		2,896(5)			1 Pd1	2,559(6)		2 Mg3	3,170(6)				
1 Pd4		2,714(5)			1 Mg2	3,140(8)		2 Al2	3,088(5)				
1 Mg7		3,002(9)			2 Mg3	2,975(7)		1 Mg6	3,224(2)				
<u>Pd1</u>		2 Mg1			2,826(4)	1 Mg4		2,925(8)	<u>Pd4</u>		3 Al1	2,714(5)	
		2 Al1			2,664(3)	2 Mg4	2,993(6)	3 Pd1			2,722(2)		
		1 Mg2			2,949(6)	2 Mg6	3,170(6)	3 Al2			2,534(5)		
		1 Mg3		2,559(6)	1 Pd5	2,845(6)	3 Mg5	2,842(6)					
		2 Al2		2,787(3)	<u>Al2</u>	2 Mg1	2,897(4)	<u>Mg7</u>			3 Al1	3,002(9)	
		1 Mg5		3,128(6)		1 Al1	2,702(6)				3 Pd2	2,914(2)	
		2 Mg6		2,941(1)		2 Pd1	2,787(3)				3 Mg2	3,137(7)	
	1 Pd4	2,721(2)		1 Pd2		2,501(5)	6 Al3			3,175(6)			
	<u>Pd2</u>	2 Mg1		3,142(4)		1 Pd3	2,561(5)			1 Mg7	3,203(3)		
		1 Al1		2,423(5)		2 Mg5	2,915(5)			<u>Pd5</u>	6 Mg3	2,845(6)	
		2 Mg2		2,954(3)		2 Mg6	3,088(5)				6 Mg4	2,817(5)	
		1 Pd3	2,904(2)	1 Pd4		2,534(5)	<u>Mg4</u>				1 Mg1	3,068(5)	
		1 Al2	2,501(5)	<u>Mg4</u>		1 Mg1					3,068(5)	1 Mg2	3,221(8)
		2 Al3	2,583(1)			1 Mg2					3,221(8)	1 Pd3	2,563(6)
		2 Mg6	3,019(3)			1 Pd3					2,563(6)	1 Mg3	2,925(8)
1 Mg7		2,914(2)	1 Mg3			2,925(8)			2 Mg3		2,993(6)		
			2 Mg3			2,993(6)			2 Mg4		3,00(1)		
			2 Mg4			3,00(1)			2 Mg5		3,103(7)		
			2 Mg5			3,103(7)			1 Pd5		2,817(5)		
			1 Pd5		2,817(5)								

5.7.2 Strukturbeschreibung

$\text{Al}_6\text{Mg}_{14,7}\text{Pd}_7$ kann als rhomboedrische Anordnung von Mackay Ikosaedern bzw. I13- Clustern beschrieben werden. Ein Ausschnitt der Struktur, mit Mackay Ikosaedern auf den Eckpunkten des Rhomboeders, ist in Abbildung 5.15 dargestellt. Die Verbindung enthält 249 Atome in der hexagonal aufgestellten Elementarzelle, von denen sich 15 in der asymmetrischen Einheit befinden.



In der ternären Aluminiumverbindung des rhomboedrischen 1/1-Approximanten erfolgt die Zuordnung der einzelnen Atomsorten wiederum nach der Größe der Atome und der Koordinationspolyedervolumina. Die Verfeinerung bestätigt die

Abb. 5.15: Anordnung der Mackay Ikosaeder auf den Eckpunkten der Elementarzelle des rhomboedrischen 1/1-Approximanten.

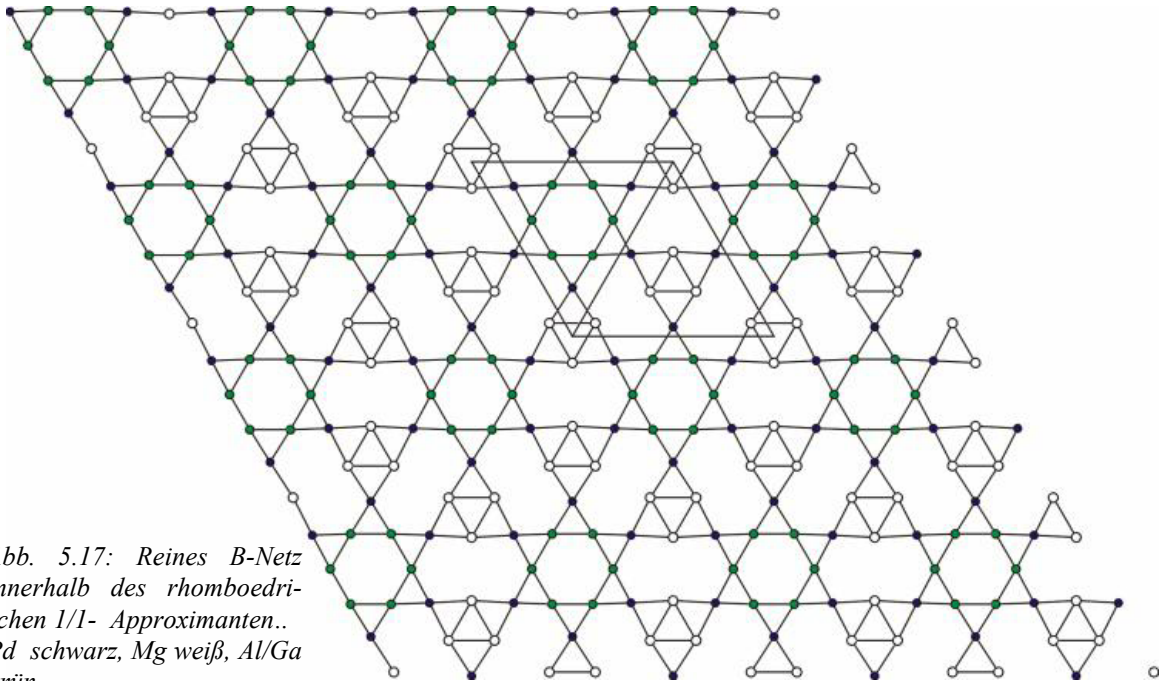
Besetzung der ikosaedrischen α - und γ -Positionen mit Palladium. Die β -Positionen wurden mit Hilfe des Volumenkriteriums besetzt. Eine Mischbesetzung insbesondere der β -Positionen ist wahrscheinlich, jedoch bleibt aufgrund der Ununterscheidbarkeit von

Tabelle 5.26 Koordinationspolyeder und Polyedervolumina in $\text{Al}_6\text{Mg}_{14,7}\text{Pd}_7$

Atom	Wy.	CN	$V / \text{\AA}^3$
Mg1	36(i)	14	77,83
Al1	18(h)	12	55,07
Pd1	18(h)	12	57,46
Pd2	18(h)	12	59,02
Mg2	18(h)	15	82,05
Pd3	18(h)	12	58,47
Mg3	18(h)	12	65,23
Al2	18(h)	12	57,12
Mg4	18(h)	12	64,91
Mg5	18(h)	14	76,36
Al3	18(h)	12	58,8
Mg6	18(h)	15	82,43
Pd4	6(c)	12	51,08
Mg7	6(c)	16	87,35
Pd5	3(a)	12	59,08

Aluminium und Magnesium eine potentielle Al/Mg-Mischbesetzung unberücksichtigt. Ein Vergleich der Polyedervolumina (vgl. Tabelle 5.26) mit denen der ternären Galliumverbindung bestätigt die Annahme, daß der Größenunterschied zwischen Aluminium und Gallium sich sowohl in den Volumina als auch in den Gitterparametern niederschlägt. In Abbildung 5.16 sind die Koordinationspolyeder entsprechend Tabelle 5.20 dargestellt. Für Verbindungen mit I3-Clustern existieren vier unterschiedliche Verknüpfungsregeln, die es ermöglichen die I3-Phasen anhand ihrer Verknüpfungsmuster zu unterscheiden. Die Einzelheiten hierzu wurden bereits in Kapitel 3.3 erläutert. Neben den in realen Strukturen

vornehmlich vorkommenden kombinierten Verknüpfungsarten, existieren auch „reine“ Verknüpfungstypen (vgl. Abbildung 3.6). Lediglich für den B-Typ war lange Zeit kein realer Vertreter bekannt. Mit dem rhomboedrischen 1/1-Approximanten wurde nun ein



Vertreter für ein ein reines B-Netz gefunden. Ein Ausschnitt dieses Netzes, aus Übersichtgründen wurde lediglich die F-Schicht herausgezeichnet, ist in Abbildung 5.17 dargestellt.

Die Verknüpfung der Mackay Ikosaeder ist in Abbildung 5.18 dargestellt. Die Cluster befinden sich auf den Eckpunkten einer Rhomboederfläche. Das Verknüpfungsprinzip ist ganz analog zum kubischen 1/1-Approximanten. Entlang der Kanten sind die Mackay Ikosaeder über die Flächen eines Oktaeders verknüpft. Dabei gehört die jeweils gegenüberliegende Dreiecksfläche, die aus zwei Mg1 und einem Mg5 gebildet wird, zum I13-Cluster. D. h., daß sich die I13-Cluster entlang dieser Kante leicht durchdringen, während sie entlang der kurzen Diagonalen

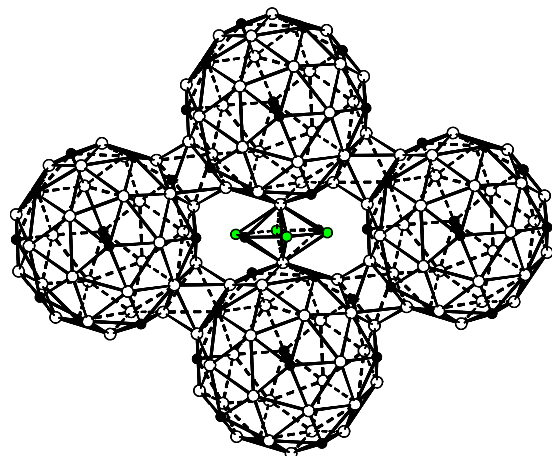


Abb. 5.18: Verknüpfung der Mackay Ikosaeder in $Al_6Mg_{14,7}Pd_7$ entlang einer Rhomboederfläche.

der Rhomboederfläche über Sechsecksflächen verbunden sind. Diese Sechsecksflächen (2 Al1, 2 Al2 und 2 Pd2) bilden zusammen mit zwei Mg2 den sogenannten sechszähligen Sektor, der ebenfalls die Mackay Iksaeder des kubischen 1/1-Approximanten verknüpft (vgl. Abb. 5.8).

In Abbildung 5.18 ist der Aufbau der einzelnen Schalen des I13-Cluster dargestellt. Dieser Cluster enthält insgesamt 141 Atome. Auf der äußeren Schale (vgl. Abbildung 5.19 (c)) befinden sich neben 72 regulären 14 zusätzliche Atome auf lokal dreizähligen Positionen. Sie erzeugen zusammen mit Al1 und Al2 die verknüpfenden Sechsecksflächen. In Abbildung 5.20 (c), (rechts unten) ist deutlich zuerkennen, daß die lokal dreizähligen Positionen, die aus Magnesium (weiß) gebildet werden, unbesetzt sind, während die aus Aluminium (oder Gallium) bestehenden Dreiecke jeweils durch ein Palladiumatom zentriert werden.

5.8 Der rhomboedrische 1/1-Approximant im System Ga-Mg-Pd

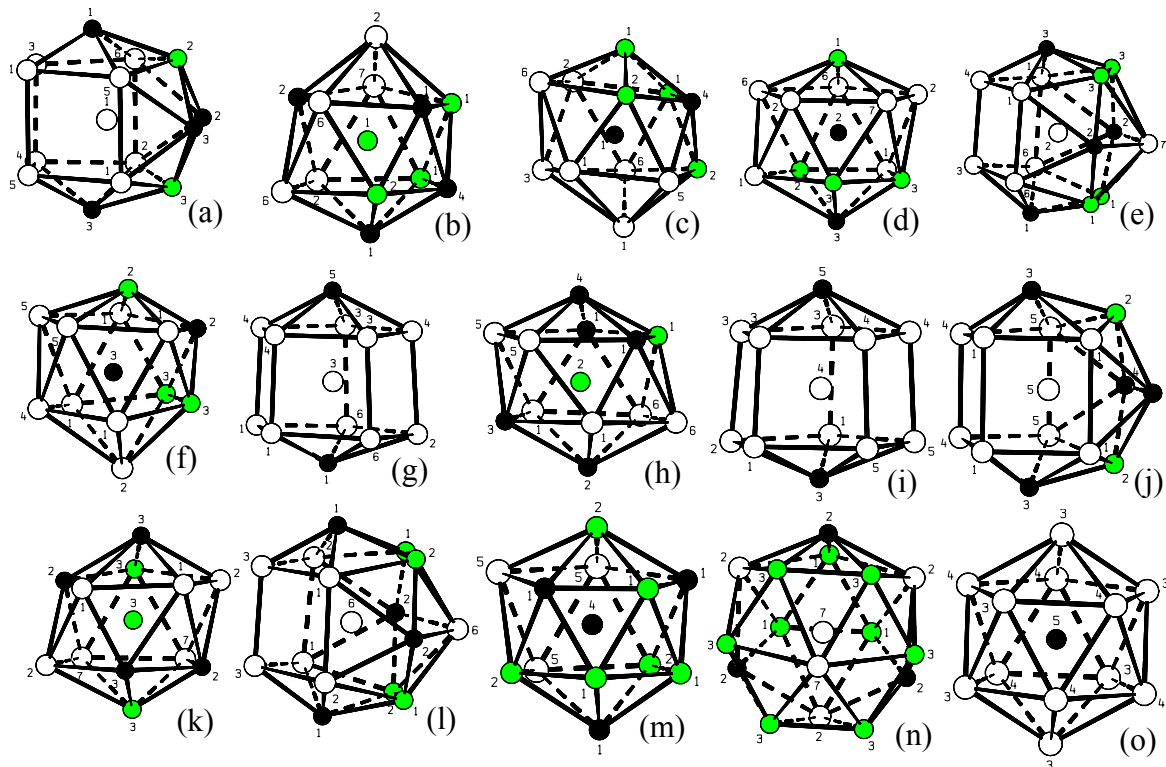


Abb. 5.19: Koordinationspolyeder in $Al_6Mg_{14.7}Pd_7$. Die Magnesiumatome sind weiß, Palladium schwarz und Aluminium ist grün dargestellt. Sie sind entsprechend Tabelle 5.20 beschriftet.

Im System Ga-Mg-Pd wurde ebenfalls der rhomboedrische Fibonacci-Approximant gefunden. Es ist bislang die einzige der hier vorgestellten Approximantenstruktur, die ternär sowohl mit Aluminium als auch Gallium dargestellt werden konnte.

5.8.1 Darstellung und Charakterisierung

Tabelle 5.27: Details zur Präparation von $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$

Einwaage	Temperaturprogramm
0,12238 g Ga (34,8 %)	Aufheizen bis 1000 °C mit 15 °C/min
0,05437 g Mg (44,3 %)	120 min bei 1000 °C
0,11258 g Pd (20,9 %)	3 d bei 750 °C
	Abkühlen im Ofen mit ca. 4 °C/min

Eine Legierung der Zusammensetzung $Ga_{34,8}Mg_{44,3}Pd_{20,9}$ wurde gemäß der in Kapitel 4 beschriebenen Präparationsmethode dargestellt. Der hellsilbrig glänzende Schmelzling hatte eine annähernd runde Form und konnte leicht mit Hilfe eines Mörsers zerkleinert werden. Einige Bruchstückchen, die unter dem Lichtmikroskop stark reflektierende Flächen zeigten, wurden isoliert und auf dem CCD-Diffraktometer getestet. Der Kristall mit der besten Qualität wurde einem φ -Scan unterzogen. Als Ausgangsmodell wurde das Strukturmodell von $Al_9Mg_{14}Pd_7$ verwendet. Die Einzelheiten zur Datensammlung und Strukturanalyse sind in Tabelle 5.28 aufgeführt.

Tabelle 5.28: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$

Kristallgröße / mm ³	0,2 · 0,2 · 0,25
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\phi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 35 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	11,897 11,899 11,898
$\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	69,995 69,993 69,991
Transformierte Zellparameter a/Å c/Å hexagonale Aufstellung	13,647(2) 26,745(5)
Meßbereich h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max} $2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}$	-13, 13 -16, 16 -31, 30 8,4 / 51,17
Volumen / Å ³	4313,68
Raumgruppentyp	R $\bar{3}m$
Gemessene Reflexe	7247
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	889 / 780
R_{int} : alle	4,63
Strukturlösung	Al ₅₄ Mg ₁₂₆ Pd ₆₃ (vgl. Kap. 5.7)
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	86
Summenformel (röntg.)	Ga _{7,3} Mg _{13,4} Pd ₇ (z = 9) (Ga _{26,4} Mg _{48,3} Pd _{25,2})
Röntg. Dichte ρ_{ro} / gcm ⁻³	5,628
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	18,23
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	1,07 / -1,90
Gewichtungsschema	1/[$(\sigma^2(F_o^2) + (0,0402 \cdot P)^2 + (38,4903 \cdot P)$)]
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	3,44 / 2,73
wR2: alle %	6,79
Completeness	99,3
Redundancy	2,26

Tabelle 5.29: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren und Positionen nach Tabelle 3.4 für $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.	Position
Mg1	36(i)	0,3250(2)	0,0418(2)	0,10851(8)	2,01(6)	1	β' , β''
Ga1	18(h)	0,39830(4)	0,60170(4)	0,01004(4)	1,46(3)	1	β''
Pd1	18(h)	0,44673(3)	0,55327(3)	0,37473(3)	1,66(3)	1	α'
Pd2	18(h)	0,45540(3)	0,54460(3)	0,08655(3)	1,55(3)	1	α'' , γ
Mg2	18(h)	0,4590(1)	0,5410(1)	0,2659(1)	1,81(8)	1	β'
Pd3	18(h)	0,52943(3)	0,47057(3)	0,17604(3)	1,54(3)	1	α'
M1	18(h)	0,55075(6)	0,44925(6)	0,35183(6)	2,13(7)	0,55 Ga/ 0,45 Mg	β
Ga2	18(h)	0,56177(4)	0,43823(4)	0,08302(4)	1,73(3)	1	β''
M2	18(h)	0,59520(6)	0,40480(6)	0,25156(5)	2,08(7)	0,59 Ga/ 0,41 Mg	β
Mg3	18(h)	0,7429(1)	0,2571(1)	0,1558(1)	1,0(8)	1	β' , β''
M3	18(h)	0,20076(9)	0	1/2	1,59(5)	0,50 Mg/ 0,50 Ga	β''
Mg4	18(h)	0,38248(3)	0	0	1,66(7)	1	β'
Pd4	6(c)	0	0	0,25879(5)	2,11(4)	1	α''
Mg5	6(c)	0	0	0,4407(2)	1,6(1)	1	-
Pd5	3(a)	0	0	0	2,67(5)	1	α

Tabelle 5.30: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	36(i)	2,3(1)	1,7(1)	1,8(1)	0,20(9)	0,4(1)	0,7(1)
Ga1	18(h)	1,59(4)	1,59(4)	1,18(6)	0,06(2)	-0,06(2)	0,8(5)
Pd1	18(h)	1,70(3)	1,70(3)	1,62(4)	0,08(2)	-0,08(2)	0,90(3)
Pd2	18(h)	1,88(3)	1,88(3)	1,20(4)	0,03(1)	-0,03(1)	1,20(3)
Mg2	18(h)	1,9(1)	1,9(1)	1,4(2)	-0,14(7)	0,14(7)	0,8(1)
Pd3	18(h)	1,68(3)	1,68(3)	1,39(4)	-0,01(2)	0,01(2)	0,94(3)
M1	18(h)	2,23(8)	2,23(8)	2,3(1)	-0,12(3)	0,12(3)	1,43(8)
Ga2	18(h)	2,04(4)	2,04(4)	1,43(6)	-0,05(2)	0,05(2)	1,26(5)
M2	18(h)	2,24(7)	2,24(7)	1,7(1)	0,28(3)	-0,28(3)	1,14(7)
Mg3	18(h)	1,5(1)	1,5(1)	2,1(2)	0,07(7)	-0,07(7)	0,7(1)
M3	18(h)	1,74(6)	1,31(7)	1,39(7)	-0,15(5)	-0,08(2)	0,66(3)
Mg4	18(h)	1,8(1)	1,6(2)	1,5(2)	0,0(1)	-0,00(6)	0,78(8)
Pd4	6(c)	2,06(5)	2,06(5)	2,34(8)	0	0	1,03(2)
Mg5	6(c)	1,8(2)	1,8(2)	1,3(3)	0	0	0,91(9)
Pd5	3(a)	2,67(7)	2,67(7)	2,8(1)	0	0	1,33(3)

Tabelle 5.31: Abstände (in Å) zwischen benachbarten Atomen in $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$

<u>Mg1</u>	1 Mg1	3,296(3)	<u>Mg2</u>	2 Mg1	3,147(2)	<u>Mg3</u>	2 Mg1	3,052(3)
	1 Mg1	3,117(4)		2 Ga1	2,997(3)		2 Mg1	3,207(1)
	1 Pd1	2,789(2)		1 Pd1	2,927(3)		1 Pd1	3,182(1)
	1 Pd2	3,144(3)		2 Pd2	2,973(2)		2 Pd3	2,867(1)
	1 Mg2	3,146(2)		1 Pd3	2,922(3)		2 Ga2	2,951(2)
	1 Pd3	2,824(2)		1 M1	3,160(3)		2 M2	3,102(3)
	1 Pd3	3,233(1)		1 M2	3,240(1)		2 Mg3	3,121(5)
	1 M1	3,119(4)		2 M3	3,045(3)		1 Pd4	2,822(3)
	1 Ga2	2,923(2)		2 Mg4	3,197(3)			
	1 M2	3,087(2)		1 Mg5	3,157(3)	<u>M3</u>	2 Mg1	2,891(2)
	1 Mg3	3,052(3)					2 Pd2	2,594(1)
	1 Mg3	3,207(1)	<u>Pd3</u>	2 Mg1	2,824(2)		2 Mg2	3,045(3)
	1 M3	2,891(2)		2 Mg1	3,233(1)		2 Pd3	2,657(1)
	1 Mg4	3,132(2)		1 Pd2	2,965(1)		2 M3	2,740(1)
				1 Mg2	2,922(3)		2 Mg5	3,166(1)
				1 Ga2	2,603(1)			
<u>Ga1</u>	2 Ga1	2,660(2)		1 M2	2,549(2)	<u>Mg4</u>	2 Mg1	3,132(2)
	2 Pd1	2,705(1)		2 Mg3	2,867(1)		2 Ga1	2,902(2)
	1 Pd2	2,451(1)		2 M3	2,657(1)		2 Pd1	2,915(1)
	2 Mg2	2,997(3)					2 Pd2	3,007(2)
	1 Ga2	2,661(1)	<u>M1</u>	2 Mg1	3,118(4)		2 Mg2	3,197(3)
	2 Mg4	2,902(2)		1 Pd1	2,534(2)		2 M1	3,198(2)
	1 Pd4	2,734(1)		1 Mg2	3,160(3)		2 Ga2	3,104(2)
	1 Mg5	3,022(5)		2 M1	2,913(2)		1 Mg4	3,208(2)
				1 M2	2,880(2)			
<u>Pd1</u>	2 Mg1	2,789(2)		2 M2	2,932(2)	<u>Pd4</u>	3 Ga1	2,734(1)
	2 Ga1	2,705(1)		2 Mg4	3,198(2)		3 Pd1	2,823(1)
	1 Mg2	2,927(3)		1 Pd5	2,784(2)		3 Ga2	2,490(1)
	1 M1	2,534(2)					3 Mg3	2,822(3)
	2 Ga2	2,815(1)	<u>Ga2</u>	2 Mg1	2,923(2)			
	1 Mg3	3,182(1)		1 Ga1	2,662(1)	<u>Mg5</u>	3 Ga1	3,022(5)
	2 Mg4	2,915(1)		1 Pd1	2,815(1)		3 Pd1	2,939(1)
	1 Pd4	2,823(1)		1 Pd2	2,516(1)		3 Mg2	3,157(4)
				1 Pd3	2,603(1)		6 M3	3,166(3)
<u>Pd2</u>	2 Mg1	3,144(3)		2 Mg3	2,951(2)		1 Mg5	3,174(2)
	1 Ga1	2,451(1)		2 Mg4	3,104(2)			
	2 Mg2	2,973(2)		1 Pd4	2,490(1)	<u>Pd5</u>	6 M1	2,785(1)
	1 Pd3	2,965(1)					6 M2	2,763(1)
	1 Ga2	2,516(1)	<u>M2</u>	1 Mg1	3,086(2)			
	2 M3	2,594(1)		1 Mg2	3,240(1)			
	2 Mg4	3,007(2)		1 Pd3	2,549(2)			
	1 Mg5	2,939(1)		1 M1	2,880(2)			
				2 M1	2,932(2)			
				2 M2	2,926(1)			
				2 Mg3	3,102(2)			
				1 Pd5	2,763(1)			

5.8.2 Strukturbeschreibung

Tabelle 5.32 Koordinationspolyeder und Polyedervolumina in $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$

Atom	Wy.	CN	V / Å ³
Mg1	36(i)	14	75,94
Ga1	18(h)	12	54,37
Pd1	18(h)	12	56,15
Pd2	18(h)	12	58,45
Mg2	18(h)	15	80,52
Pd3	18(h)	12	57,47
M1	18(h)	12	62,01
Ga2	18(h)	12	56,17
M2	18(h)	12	61,46
Mg3	18(h)	14	74,07
M3	18(h)	12	58,09
Mg4	18(h)	15	80,51
Pd4	6(c)	12	50,37
Mg5	6(c)	16	85,88
Pd5	3(a)	12	54,14

Die Koordinationspolyedervolumina in $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$ weisen gegenüber der ternären Aluminiumverbindung eine leichte Verkleinerung auf. Da dieser Trend nicht nur auf diejenigen Koordinationspolyeder beschränkt ist, die durch Gallium zentriert werden, handelt es sich vermutlich um einen generellen „Packungseffekt“. Das bestätigt auch ein erneuter Vergleich der Gitterparameter der Verbindungen. Die Verfeinerung des rhomboedrischen Ga-Mg-Pd Approximanten bestätigt, daß die aluminiumzentrierten Brückenikosaeder des Approximanten im System Al-Mg-Pd durch Gallium belegt bzw. Mischbesetzt werden. Ebenso bestätigt wird die Annahme einer Mischbesetzung der β -Positionen mit Al/Mg bzw. Ga/Mg.

5.9 Der rhomboedrische 1/1-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd

Im quaternären System Al-Ga-Mg-Pd konnte ebenfalls der rhomboedrische 1/1-Approximant dargestellt werden. Der aufgenommene Datensatz wurde aufgrund der Schwierigkeiten bei der Zuordnung von Al/Mg lediglich ternär als Ga-Mg-Pd verfeinert. Die bisherigen Ergebnisse lassen sowohl eine Ga/Al, Mg/Al als auch eine Ga/Al/Mg Mischbesetzung offen. Eine EDX-Analyse und die verkleinerten Gitterparameter bestätigen jedoch den Aluminiumgehalt.

5.9.1 Darstellung und Charakterisierung

Tabelle 5.34: Details zur Präparation von $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5} [(Al,Ga,Mg)_{21,1}Pd_{6,5}]$

Einwaage	Temperaturprogramm
0,0420g Al (15,3 %)	Aufheizen bis 1000 °C mit 15 °C/min
0,0375g Ga (5,3 %)	120 min bei 1000 °C
0,1471 g Mg (59,5 %)	3 d bei 750 °C
0,2163 g Pd (19,9 %)	Abkühlen im Ofen mit ca. 4 °C/min

Die Legierung der Zusammensetzung $Al_{15,3}Ga_{5,3}Mg_{59,5}Pd_{19,9}$ wurde entsprechend der in Kapitel 4 vorgestellten Präparationsmethode dargestellt. Das silbrig glänzende, annähernd runde Produkt konnte im Mörser problemlos zerkleinert werden. Einige Bruchstückchen, die unter dem Lichtmikroskop stark reflektierende Flächen aufwiesen, wurden isoliert und auf dem CCD-Diffraktometer gestestet. Der Kristall mit der besten Qualität wurde einem ϕ -Scan unterzogen. Die Einzelheiten zur Datensammlung und Strukturlösung sind in Tabelle 5.35 aufgeführt. Als Ausgangsmodell zur Verfeinerung der Daten dienen die zuvor bereits bestimmten Strukturmodelle von $Al_7Mg_{14}Pd_7$ und $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$.

Tabelle 5.35: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5} [(Al,Ga,Mg)_{21,1}Pd_{6,5}]$

Kristallgröße / mm ³	0,25 · 0,25 · 0,25
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\varphi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 25 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å $\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	11,892 11,979 11,981 69,659 69,663 69,655
Transformierte Zellparameter a/Å c/Å hexagonale Aufstellung	13,684(2) 27,018(3)
Meßbereich h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max} $2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}$	-17, 17 -17, 17 -34, 34 6,0 / 53,95
Volumen / Å ³	4381,37
Raumgruppentyp	R $\bar{3}m$
Gemessene Reflexe	11435
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	1205 / 890
R_{int} : alle	6,61
Strukturlösung	vgl. Kap. 5.7 und 5.8
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	88
Summenformel (röntg.)	$Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5}$ (z = 9) ($Ga_{12,2}Mg_{64,2}Pd_{23,6}$) $[Al,Ga,Mg]_{21,1}Pd_{6,5}$ ($[Al,Ga,Mg]_{76,4}Pd_{23,6}$)
Röntg. Dichte $\rho_{\text{rö}}$ / gcm ⁻³	4,7
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	10,21
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	2,94 / -2,86
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,1041 \cdot P)^2)]$
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	4,19 / 6,62
wR2: alle %	16,31
Completeness	100
Redundancy	3,14

Tabelle 5.36: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren und Positionen nach Tabelle 3.4 für $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5} [(Al,Ga,Mg)_{21,1}Pd_{6,5}]$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.	Position
Mg1	36(i)	0,3281(3)	0,0427(3)	0,1086(1)	2,02(8)	1	β' , β''
M1	18(h)	0,3985(1)	0,6015(1)	0,01185(9)	1,60(8)	0,59 Ga/ 0,41 Mg	β''
Pd1	18(h)	0,44413(5)	0,55587(5)	0,37452(5)	1,99(4)	1	α'
Pd2	18(h)	0,45648(1)	0,54352(6)	0,08666(5)	2,06(4)	1	α'' , γ
Mg2	18(h)	0,4592(2)	0,5408(2)	0,2655(2)	1,8(2)	1	β'
Pd3	18(h)	0,52946(5)	0,47054(5)	0,17481(4)	1,70(4)	1	α'
M2	18(h)	0,5491(2)	0,4509(2)	0,3524(3)	2,0(1)	0,68 Mg/ 0,32 Ga	β
M3	18(h)	0,5644(2)	0,4356(2)	0,0829(1)	1,5(2)	0,84 Mg/ 0,16 Ga	β''
M4	18(h)	0,5931(1)	0,4069(1)	0,2514(1)	1,8(1)	0,68 Mg/ 0,32 Ga	β
Mg3	18(h)	0,7439(2)	0,2561(2)	0,1584(2)	2,01(1)	1	β' , β''
M5	18(h)	0,2009(2)	0	1/2	1,3(1)	0,70 Mg/ 0,30 Ga	β''
Mg4	18(h)	0,3833(4)	0	0	1,5(1)	1	β'
M6	6(c)	0	0	0,2599(2)	0,46(1)	0,72 Mg 0,28 Pd	α''
Mg5	6(c)	0	0	0,4409(3)	1,40(2)	1	-
Pd4	3(a)	0	0	0	1,69(7)	1	α

Tabelle 5.37: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2}$ für $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5} [(Al,Ga,Mg)_{21,1}Pd_{6,5}]$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	36(i)	2,1(2)	1,8(2)	1,7(2)	0,1(2)	0,31(2)	0,7(2)
M1	18(h)	1,7(1)	1,7(1)	1,382(1)	-0,04(5)	0,04(5)	0,8(1)
Pd1	18(h)	1,92(6)	1,92(6)	2,15(7)	0,11(3)	-0,11(3)	0,97(6)
Pd2	18(h)	2,34(6)	2,34(6)	1,66(7)	0,04(3)	-0,04(3)	1,29(6)
Mg2	18(h)	1,9(2)	1,9(2)	1,6(3)	-0,05(1)	0,05(1)	1,1(2)
Pd3	18(h)	1,80(5)	1,80(5)	1,55(7)	0,02(2)	-0,02(3)	0,95(5)
M2	18(h)	2,0(2)	2,0(2)	2,2(2)	-0,04(7)	0,04(7)	1,2(2)
M3	18(h)	1,5(2)	1,5(2)	0,8(2)	-0,04(8)	0,04(8)	0,16(2)
M4	18(h)	1,8(2)	1,8(2)	1,5(2)	0,18(7)	-0,18(7)	0,8(2)
Mg3	18(h)	1,5(2)	1,5(2)	2,7(3)	-0,1(2)	0,1(1)	0,5(2)
M5	18(h)	1,4(2)	1,1(2)	1,2(2)	0,02(1)	0,01(6)	0,57(9)
Mg4	18(h)	1,6(2)	1,3(3)	1,3(3)	-0,2(2)	-0,14(9)	0,6(1)
M4	6(c)	0,4(2)	0,4(2)	0,4(2)	0	0	0,24(8)
Mg5	6(c)	1,5(3)	1,5(3)	1,1(5)	0	0	0,7(1)
Pd4	3(a)	1,65(9)	1,65(9)	1,7(2)	0	0	0,82(5)

Tabelle 5.38: Abstände (in Å) zwischen benachbarten Atomen in $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5} [(Al,Ga,Mg)_{21,1}Pd_{6,5}]$

<u>Mg1</u>	1 Mg1	3,322(3)	<u>Mg2</u>	2 Mg1	3,162(4)	<u>Mg3</u>	2 Mg1	3,054(6)
	1 Mg1	3,140(4)		2 M1	2,995(5)		2 Mg1	3,195(3)
	1 Pd1	2,828(4)		1 Pd1	2,970(6)		1 Pd1	3,184(2)
	1 Pd2	3,116(4)		2 Pd2	2,994(3)		2 Pd3	2,859(1)
	1 Mg2	3,162(4)		1 Pd3	2,961(6)		2 M3	2,991(5)
	1 Pd3	2,876(4)		1 M2	3,173(2)		2 M4	3,086(2)
	1 Pd3	3,198(4)		1 M4	3,196(2)		2 Mg3	3,170(2)
	1 M2	3,134(5)		2 M5	3,061(5)		1 M6	2,935(6)
	1 M3	2,919(4)		2 Mg4	3,223(1)			
	1 M4	3,105(4)		1 Mg5	3,168(6)	<u>M5</u>	2 Mg1	2,894(5)
	1 Mg3	3,054(6)					2 Pd2	2,618(1)
	1 Mg3	3,195(3)	<u>Pd3</u>	2 Mg1	2,876(4)		2 Mg2	3,061(5)
	1 M5	2,894(5)		2 Mg1	3,198(3)		2 Pd3	2,661(2)
	1 Mg4	3,156(4)		1 Pd2	3,944(2)		2 M5	2,749(3)
				1 Mg2	2,961(6)		2 Mg5	3,181(2)
				1 M3	2,618(4)			
<u>M1</u>	2 M1	2,676(4)		1 M4	2,561(4)	<u>Mg4</u>	2 Mg1	3,156(4)
	2 Pd1	2,698(2)		2 Mg3	2,859(1)		2 M1	2,905(4)
	1 Pd2	2,444(3)		2 M5	2,661(2)		2 Pd1	2,941(2)
	2 Mg2	2,995(5)					2 Pd2	3,016(3)
	1 M3	2,707(4)	<u>M2</u>	2 Mg1	3,134(5)		2 Mg2	3,223(1)
	2 Mg4	2,905(4)		1 Pd1	2,559(4)		2 M2	3,198(4)
	1 M6	2,774(4)		1 Mg2	3,173(2)		2 M3	3,146(5)
	1 Mg5	3,010(8)		2 M2	2,971(4)		1 Mg4	3,194(1)
				1 M4	2,921(5)			
<u>Pd1</u>	2 Mg1	2,828(4)		2 M4	2,972(3)	<u>M6</u>	3 M1	2,774(4)
	2 M1	2,698(2)		2 Mg4	3,198(4)		3 Pd1	2,767(2)
	1 Mg2	2,970(6)		1 Pd4	2,834(3)		3 M3	2,438(4)
	1 M2	2,559(4)					3 Mg3	2,935(6)
	2 M3	2,771(2)	<u>M3</u>	2 Mg1	2,918(4)			
	1 Mg3	3,184(2)		1 M1	2,707(4)	<u>Mg5</u>	3 M1	3,010(8)
	2 Mg4	2,941(2)		1 Pd1	2,771(2)		3 Pd1	2,972(2)
	1 M6	2,767(2)		1 Pd2	2,559(4)		3 Mg2	3,168(6)
				1 Pd3	2,618(4)		6 M5	3,181(2)
<u>Pd2</u>	2 Mg1	3,116(4)		2 Mg3	2,991(5)		1 Mg5	3,199(5)
	1 M1	2,444(3)		2 Mg4	3,146(5)			
	2 Mg2	2,994(3)		1 M6	2,438(4)	<u>Pd4</u>	6 M2	2,834(3)
	1 Pd3	2,944(2)					6 M4	2,817(3)
	1 M3	2,559(4)	<u>M4</u>	1 Mg1	3,105(4)			
	2 M5	2,618(1)		1 Mg2	3,196(2)			
	2 Mg4	3,016(3)		1 Pd3	2,561(4)			
	1 Mg5	2,972(2)		1 M2	2,921(5)			
				2 M2	2,972(4)			
				2 M4	3,021(6)			
				2 Mg3	3,086(2)			
				1 Pd4	3,818(3)			

5.9.2 Strukturbeschreibung

Tabelle 5.39: Koordinationspolyeder und Polyedervolumina in $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5} [(Al,Ga,Mg)_{21,1}Pd_{6,5}]$

Atom	Wy.	CN	V / Å ³
Mg1	36(i)	14	76,84
M1	18(h)	12	54,73
Pd1	18(h)	12	56,89
Pd2	18(h)	12	59,06
Mg2	18(h)	15	81,59
Pd3	18(h)	12	58,05
M2	18(h)	12	63,92
M3	18(h)	12	56,79
M4	18(h)	12	63,17
Mg3	18(h)	14	75,25
M5	18(h)	12	58,9
Mg4	18(h)	15	81,72
M6	6(c)	12	50,95
Mg5	6(c)	16	87,02
Pd4	3(a)	12	57,21

teilweise durch Aluminium belegt sind.

Wie bei allen vorangehenden quaternären Verbindungen wurde auch bei $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5}$ eine Al/Mg-Mischbesetzung nicht berücksichtigt. Im Gegensatz zum ternären $Ga_{7,3}Mg_{13,4}Pd_7$, wo lediglich auf drei Positionen eine Mg/Ga-Mischbesetzung zwischen 50 % bis 60 % besteht, liegt in $Ga_{3,4}Mg_{17,7}Pd_{6,5}$ ein höheres Maß an Unordnung vor. Fünf von 15 Positionen, allesamt zur Gruppe der β -Positionen gehörend, sind sowohl mit Gallium als auch mit Magnesium besetzt, während Pd4 (α'' -Position) eine Mischbesetzung mit Magnesium bzw. Aluminium aufweist. Auch bei allen übrigen Positionen, ist nicht auszuschließen, daß diese ganz oder

5.10 Diskussion

Ziel der Untersuchung war die Darstellung von Approximanten vom MI-Typ, um durch die Analyse der verbindungs- und strukturbildenden Faktoren, wie z.B. die Valenzelektronenkonzentration und der Austausch bestimmter Atomsorten, zu einer Ableitung von Existenzfeldern für Quasikristalle und Approximanten diesen Typs zu kommen. Bisherige Untersuchungen haben ergeben, daß sich binäre Quasikristalle nur sehr selten und in schlechter Qualität bilden. Es wurde bereits früh herausgefunden, daß sich das Hinzufügen einer weiteren Komponente positiv auf die Bildung und die Kristallinität von Quasikristallen und Approximanten auswirkt [97]. Aus diesem Grund konzentrieren sich

die meisten Arbeiten auf ternäre Systeme, wobei das System Al-Mg-Pd besonders hervorzuheben ist. Dieses System ist das einzige bislang bekannte System, in dem dekadonale Strukturen sowie Quasikristalle und Approximanten vom FK- und MI-Typ gefunden wurden [99]. Zudem deutet die Existenz von zwei zu den I3-Phasen zählenden binären Randphasen, Mg_4Pd und Mg_6Pd , darauf hin, daß im Bereich dieser Zusammensetzung weitere Verbindungen existieren, deren vornehmliches Strukturmerkmal das Mackay Ikosaeder bzw. der I13-Cluster ist.

Eines der Hauptprobleme in diesem System besteht allerdings in dem mangelndem Röntgenkontrast zwischen Aluminium und Magnesium, so daß es bei der Verfeinerung der Datensätze zu systematischen Fehlern kommt, da eine mit hoher Wahrscheinlichkeit vorliegenden Al/Mg-Mischbesetzung unberücksichtigt bleibt. Als ein Lösungsansatz bietet sich der Einsatz von Gallium anstelle des Aluminiums an. Der Röntgenkontrast zwischen Magnesium und Gallium ist ausreichend und bereits 1875 erkannte *Mendeleev* die große chemische Ähnlichkeit zwischen Aluminium und Gallium, so daß ein Austausch dieser beiden Elemente sinnvoll erschien. Untersuchungen an Quasikristallen und Approximanten vom FK-Typ geben ebenfalls Hinweise darauf, daß eine gewisse Austauschbarkeit zwischen bestimmten Elementen besteht [54].

In diesem Kapitel wurde über die Darstellung und Einkristallstrukturanalyse von sieben Approximanten vom MI-Typ in den Systemen Al-Mg-Pd, Ga-Mg-Pd und Al-Ga-Mg-Pd berichtet. In Tabelle 5.40 sind die dargestellten Verbindungen aufgeführt, mit der Angabe der Zusammensetzung in Mol-%.

Tabelle 5.40:

Übersicht über die Zusammensetzung (in Atom-%) dargestellten Verbindungen vom MI-Typ

kub. 1/1-Approximant (cI)	kub. Approximant (cF)	rhomb. 1/1-Approximant (R)
$Al_{16,4}Mg_{57,6}Pd_{26}$	---	$Al_{22,2}Mg_{51,9}Pd_{25,9}$
---	$Ga_{13,1}Mg_{66,9}Pd_{20}$	$Ga_{26,4}Mg_{48,3}Pd_{25,2}$
$Al_{15,1}Ga_{4,8}Mg_{54,1}Pd_{26}$	$(Al,Ga,Mg)_{80}Pd_{20}$	$Ga_{12,2}Mg_{64,2}Pd_{23,6}$ [[Al,Ga,Mg] _{76,4} Pd _{23,6}]

Vergleicht man die röntgenographisch ermittelten Zusammensetzungen aller Verbindungen, so wird deutlich, daß der vollständige Austausch der Elemente Aluminium und Gallium offenbar nicht in allen Strukturtypen möglich ist. Ein weiteres Indiz für die

begrenzte Austauschbarkeit dieser beiden Elemente ist AlMg_3Pd_2 . Diese Verbindung kristallisiert in dem für die I3-Phasen häufigsten NiTi_2 -Strukturtyp und wurde in allen Ansätzen mit Aluminium gefunden, wohingegen im System Ga-Mg-Pd kein Vertreter diesen Typs existiert.

Die Größenverhältnisse der Atome spielen in der Strukturbildung der Quasikristalle und ihrer Approximanten eine entscheidende Rolle. Wie die Analyse der sieben hier vorgestellten Verbindungen zeigt, handelt es sich bei den bevorzugt mischbesetzten Positionen um die α' -, β -, und die β'' -Positionen. Es bestätigt sich die im I3-Clusterkonzept gemachte Annahme, daß die kleineren Atome die Zentren der I3-Ikosaeder belegen, die größeren Atome vornehmlich die CN14- und CN15-Koordinationspolyeder zentrieren, während es sowohl bei den pentagonalen Prismen als auch bei den sogenannten Brückenikosaedern häufig zu Mischbesetzungen kommt. Die Belegung der einzelnen Positionen mit den bevorzugt auftretenden Atomsorten ist in Tabelle 5.41 aufgeführt.

Tabelle 5.41: Belegung der Positionen im MI bzw. I13-Cluster

Position	Atomsorte	Zentrum von
α	Palladium	I3-Ikosaeder
β	Magnesium (Aluminium, Gallium)	pentagonales
α'	Palladium	I3-Ikosaeder
β'	Magnesium	CN14 und CN15
α''	Palladium (Aluminium, Gallium)	Brückenikosaeder
β''	Gallium (Aluminium)	Brückenikosaeder
γ	Palladium	-

Auf die Bedeutung bestimmter Valenzelektronenkonzentrationen für die Synthese von Quasikristallen und Approximanten wurde bereits mehrfach hingewiesen. Aus experimentellen und theoretischen Arbeiten [101 - 104] ist schon länger bekannt, daß die Bildung von Quasikristallen einer Hume-Rothery-Regel folgt und häufig durch bestimmte Valenzelektron zu Atom Verhältnisse begünstigt wird. Für Quasikristalle vom FK-Typ und deren Approximanten liegt e/a in einem Bereich von $2,1 \leq e/a \leq 2,5$ [104], während sich e/a für Quasikristalle und Approximanten vom MI-Typ zwischen 1,6 und 1,8 bewegt [48]. Diese auch den Überlegungen des Jellium-Modells entsprechenden Werte, konnten ebenfalls experimentell bestätigt werden (vgl. Tabelle 5.42).

Tabelle 5.42: Zusammensetzungen und e/a -Verhältnisse (Aufgrund der besseren Vergleichbarkeit der Verbindungen untereinander sind hier die Zusammensetzungen in Atomprozent angegeben.)

FK-Typ			MI-Typ		
Verbindung	Typ	e/a	Verbindung	Typ	e/a
$\text{Al}_{53}\text{Cu}_7\text{Mg}_{40}$	1/1	2,45	$\text{Pd}_{20}\text{Mg}_{80}$	-	1,60
$\text{Al}_{52}\text{Ag}_8\text{Mg}_{40}$	1/1	2,44	$\text{Pd}_{14}\text{Mg}_{86}$	-	1,72
$\text{Al}_{47}\text{Pd}_{13}\text{Mg}_{40}$	1/1	2,21	$\text{Ag}_{24}\text{Mg}_{76}$	1/1	1,76
$\text{Al}_{23}\text{Zn}_{37}\text{Mg}_{40}$	1/1	2,23	$\text{Al}_{16,4}\text{Mg}_{57,6}\text{Pd}_{26}$	1/1	1,64
$\text{Al}_{15}\text{Zn}_{42}\text{Mg}_{43}$	2/1	2,14	$\text{Al}_{15,1}\text{Ga}_{4,8}\text{Mg}_{54,1}\text{Pd}_{26}$	1/1	1,68
$(\text{Al,Ga})_{20}\text{Zn}_{40}\text{Mg}_{40}$	3/2-2/1-2/1	2,20	$\text{Ag}_{25}\text{Mg}_{75}$	cF	1,75
$\text{Al}_{15}\text{Zn}_{41}\text{Mg}_{44}$	qc	2,15	$\text{Ga}_{13,1}\text{Mg}_{66,9}\text{Pd}_{20}$	cF	1,73
$\text{Ga}_{20}\text{Zn}_{40}\text{Mg}_{40}$	qc	2,20	$\text{Al}_{22,2}\text{Mg}_{51,9}\text{Pd}_{25,9}$	1/1-R	1,7
$\text{Ga}_{53}\text{Pd}_{12}\text{Mg}_{35}$	-	2,28	$\text{Ga}_{26,4}\text{Mg}_{48,3}\text{Pd}_{25,3}$	1/1-R	1,76
$\text{Ag}_{19}\text{Ga}_{47}\text{Mg}_{34}$	-	2,28	$(\text{Al,Ga,Mg})_{76,4}\text{Pd}_{23,6}$	1/1-R	1,65

Trägt man die hier vorgestellten Verbindungen in ein Dreiecksdiagramm ein, so lassen sich die bisher gefundenen Zusammenhänge gut darstellen. Approximanten vom FK-Typ kristallisieren auf bzw. nahe der mit einem durchgehenden Strich eingezeichneten *Bergman Linie* mit $x_{\text{Mg}} = 40$ %. Einen höheren Magnesiumanteil findet man im 2/1-Approximanten und vermutlich auch im Quasikristall. Die beiden Markierungen etwas oberhalb der *Bergman Linie* kennzeichnen die Verbindungen $\text{Ga}_{53}\text{Mg}_{35}\text{Pd}_{12}$ und $\text{Ag}_{19}\text{Ga}_{47}\text{Mg}_{34}$. In ihnen durchdringen sich die Bergman Cluster, so daß der Magnesiumgehalt zu niedrigeren Werten hin verschoben ist. Approximanten vom MI-Typ, die Palladium enthalten,

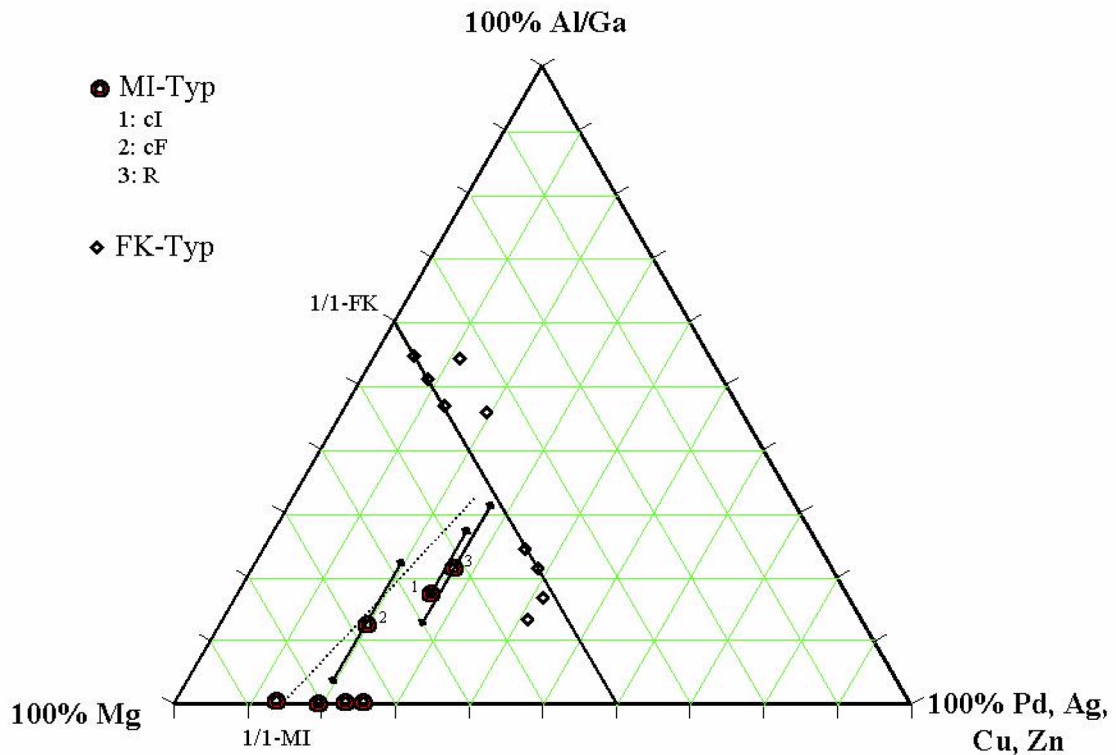


Abb. 5.21: Existenzbereiche der Quasikristalle und Approximanten sowohl vom FK- als auch vom MI-Typ. Die Bergman Linie ist als schwarze durchgezogener Strich eingezeichnet. Die rautenförmigen Markierungen entsprechen den Verbindungen vom FK-Typ, während die Verbindungen vom MI-Typ mit Kreisen gekennzeichnet sind. Die gepunktete Linie markiert den Verlauf der Zusammensetzung für $e/a = 1,73$.

existieren bei einem Palladiumgehalt zwischen 10 % und 30 %, ein Gehalt, der in etwa dem phänomenologisch erhaltenen Konzentrationsbereich entspricht, wie er für Verbindungen der I3-Strukturfamilie gefunden wird. Als ein weiterer Parameter zur Eingrenzung des Existenzbereichs von Approximanten vom MI-Typ, hat sich ein Wert für e/a von 1,73 als günstig erwiesen. Die gestrichelte Linie im Dreiecksdiagramm gibt diesen Zusammenhang wieder.

Die insbesondere bei den α -, β - und β' -Positionen auftretende Besetzungsunordnung sowie die Ununterscheidbarkeit der Elemente Aluminium und Magnesium im Röntgenlicht führt zu Ungenauigkeiten in den röntgenographisch bestimmten Zusammensetzungen. In Tabelle 5.43 sind deshalb die möglichen Besetzungsextreme aufgeführt, die gleichzeitig als Fehlerbalken in Abbildung 5.21 eingezeichnet sind.

Tabelle 5.43: Besetzungsextreme der ternären Approximanten

Bezeichnung	Zusammensetzung in Mol-%					
	verfeinert	e/a	nur Magnesium	e/a	nur Gallium oder Aluminium	e/a
1/1 (cI)	Al _{16,4} Mg _{57,6} Pd ₂₆	1,64	Al _{16,4} Mg _{57,5} Pd ₂₆	1,64	Al _{32,9} Mg _{41,1} Pd ₂₆	1,81
1/1 (cF)	Ga ₁₃ Mg ₆₇ Pd ₂₀	1,73	Ga ₃ Pd _{75,8} Pd _{21,1}	1,61	Ga _{22,7} Mg _{57,6} Pd _{19,7}	1,83
1/1 (R)	Al _{22,2} Mg _{51,9} Pd _{25,9}	1,7	Al _{14,5} Mg _{60,2} Pd _{25,3}	1,64	Al ₃₆ Mg _{38,6} Pd _{25,3}	1,86
	Ga _{26,4} Mg _{48,3} Pd _{25,3}	1,76	Ga _{14,5} Mg _{60,2} Pd _{25,3}	1,64	Ga _{36,1} Mg _{38,6} Pd _{25,3}	1,86

Die gleiche Unordnung spiegelt sich natürlich auch im Aufbau der ikosaedrischen Cluster, wie z. B. das Mackay Ikosaeder, wider. Das eine dritte Komponente für die Stabilisierung dieser Cluster nicht notwendig ist, wird bereits durch die Verbindungen Mg₆Pd and Mg₄Pd deutlich, deren Struktur stark durch Mackay Ikosaeder dominiert wird.

Tabelle 5.44:**Besetzungsextreme der Mackay Ikosaeder der ternären Approximanten**

Bezeichnung	Zusammensetzung in Mol-%			
	nur Magnesium	e/a	nur Gallium oder Aluminium	e/a
1/1 (cI)	Mg ₄₂ Pd ₁₃	1,53	Al ₁₂ Mg ₃₀ Pd ₁₃	1,75
1/1 (cF)	Mg ₄₂ Pd ₁₃	1,53	Ga ₁₂ Mg ₃₀ Pd ₁₃	1,75
1/1 (R)	Mg ₄₂ Pd ₁₃	1,53	Al ₁₂ Mg ₃₀ Pd ₁₃	1,75
			Ga ₁₂ Mg ₃₀ Pd ₁₃	1,75

In Tabelle 5.44 sind die verschiedenen Zusammensetzungen der Mackay Ikosaeder für die ternären Verbindungen der hier vorgestellten Approximanten aufgeführt. Da es sich bei der für die Mischbesetzung infrage kommende Position immer um die β -Position handelt, sind die „Extreme“ für alle Strukturtypen identisch.

Anhang

In Ansätzen mit Aluminium wurde immer die Verbindung vom NiTi₂-Typ gefunden. Sie wurde als AlMg₃Pd₂ (Al_{16,7}Mg_{53,0}Pd_{33,0}) oder auch (Al,Mg)₂Pd verfeinert. Im Anhang A befinden sich die Angaben zur Einkristallstrukturanalyse.

Ein weitere Verbindung, die in ternären Ansätzen mit Aluminium gefunden wurde ist eine tetragonale Verbindung der Zusammensetzung Al₁₇Mg₄Pd₈ (Al_{58,6}Mg_{13,8}Pd_{27,6}). Diese Verbindung gehört nicht zu den I3-Phasen und enthält keine Ikosaeder als Koordinationspolyeder. Die Angaben zu dieser Verbindung befinden sich in Anhang B.

Die Tabelle mit den bekannten Strukturtypen, die den Ikosaeder als Koordinationspolyeder enthalten ist in Anhang C und eine Übersicht der untersuchten Ansätze in Anhang D aufgeführt.

Anhang E enthält die Details zur Strukturanalyse des kubisch-flächenzentrierten Approximanten im System Al-Ga-Mg-Pd. Der mittels EDX-Analyse bestätigte Aluminiumanteil bleibt unberücksichtigt (vgl. Kapitel 5.6).

Anhang A

Tabelle A.1: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Al_{17}Mg_4Pd_8$

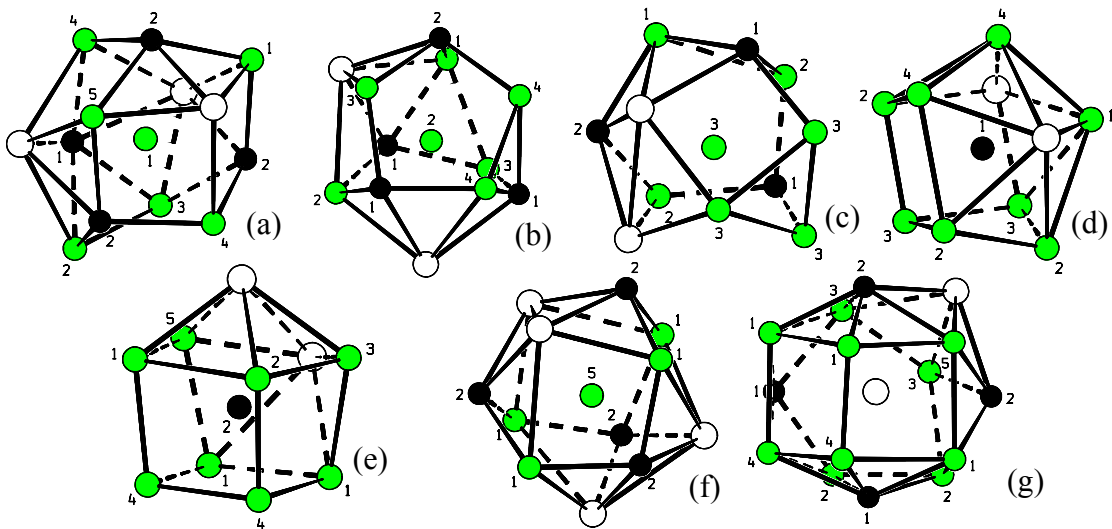
Kristallgröße / mm ³	0,2 · 0,2 · 0,2
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\phi = 1^\circ$, θ -Offset = 10° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 25 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	10,656 10,737 10,732
$\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	75,728 60,244 60,238
Transformierte Zellparameter a/Å c/Å	13,177 10,656
Meßbereich h_{\min} , h_{\max} k_{\min} , k_{\max} l_{\min} , l_{\max} $2\theta_{\min}$, $2\theta_{\max}$	-18,18 -18,18 -14,14 8,8 / 60,99
Volumen / Å ³	1850,25
Raumgruppentyp	I4 ₁ /a
Gemessene Reflexe	9813
F _o asym. Einheit / davon F _o ² > 2 σ (F _o ²)	1410 / 1228
R _{int} : alle	6,45
Strukturlösung	SHELXS-86
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F ² , anisotrope U _{ij})
Anzahl der Variablen	66
Summenformel (röntg.)	Al ₆₈ Mg ₁₆ Pd ₃₂ (Al _{58,6} Mg _{13,8} Pd _{27,6})
Röntg. Dichte $\rho_{\text{rö}}$ / gcm ⁻³	5,051
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	8,52
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	0,89 / -1,60
Gewichtungsschema	1/[$(\sigma^2(F_o^2) + (0,03103 \cdot P)^2$]
R1: alle / Reflexe mit F _o ² > 2 σ (F _o ²) %	3,42 / 2,78
wR2: alle %	6,4
Completeness	99,8
Redundancy	6,63

Tabelle A.2: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter und Besetzungsfaktoren für $Al_{17}Mg_4Pd_8$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.
Al1	16(f)	0,01109(9)	0,03103(8)	0,1408(1)	1,17(2)	1
Al2	16(f)	0,08614(9)	0,00168(8)	0,4270(1)	1,21(2)	1
Al3	16(f)	0,08967(8)	0,19389(8)	0,5241(1)	1,20(2)	1
Pd1	16(f)	0,09835(2)	0,54270(2)	0,32588(2)	1,09(1)	1
Pd2	16(f)	0,13070(2)	0,14968(2)	0,27764(2)	1,22(1)	1
Al4	16(f)	0,22246(8)	0,03688(9)	0,0998(1)	1,12(2)	1
Mg	16(f)	0,4205(1)	0,1547(1)	0,1527(1)	1,28(3)	1
Al5	4(a)	0	1/4	1/8	1,23(4)	1

Tabelle A.3: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $Al_{17}Mg_4Pd_8$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Al1	16(f)	1,16(5)	1,13(5)	1,22(5)	0,01(4)	0,10(4)	0,01(4)
Al2	16(f)	1,29(5)	1,08(5)	1,26(5)	-0,02(4)	0,19(4)	-0,03(4)
Al3	16(f)	1,30(5)	1,13(5)	1,16(5)	0,02(4)	-0,13(4)	0,03(4)
Pd1	16(f)	1,01(2)	1,25(2)	1,03(2)	-0,20(1)	-0,03(1)	0,04(1)
Pd2	16(f)	1,23(2)	1,25(2)	1,12(2)	0,03(1)	-0,05(1)	-0,05(1)
Al4	16(f)	1,31(5)	1,23(5)	1,03(5)	0,08(4)	-0,02(4)	-0,04(4)
Mg	16(f)	1,78(6)	1,03(6)	1,35(6)	0,04(5)	-0,23(5)	0,10(5)
Al5	4(a)	1,35(6)	1,35(6)	1,0(1)	0	0	0

Abb. A.1: Koordinationspolyeder in $Al_{17}Mg_4Pd_8$. Die Reihenfolge entspricht der in Tabelle A.2.

Anhang B

Tabelle B.1: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $(Al,Mg)_2Pd$

Kristallgröße / mm ³	0,2 · 0,2 · 0,25
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\phi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen, 2·30s pro Aufnahme, d = 35 mm
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	8,355 8,354 8,353
$\alpha/^\circ$ $\beta/^\circ$ $\gamma/^\circ$	89,986 120,015 108,416
Transformierte Zellparameter a/Å	11,814
Meßbereich h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max}	-14,13 -13,14 -13,12
$2\theta_{\min}, 2\theta_{\max}$	9,8 / 50,88
Volumen / Å ³	1648,89
Raumgruppentyp	Fd $\bar{3}m$
Gemessene Reflexe	2010
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	95 / 94
R_{int} : alle	4,49
Strukturlösung	SHELXS-86
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	11
Summenformel (röntg.)	AlMg ₃ Pd ₂ (Al _{16,7} Mg _{53,0} Pd _{33,0})
Röntg. Dichte $\rho_{\text{rö}}$ / gcm ⁻³	4,996
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	8,73
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	1,88 / -1,53
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,0350 \cdot P)^2 + (21,8800 \cdot P)]$
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	5,19 / 2,23
wR2: alle %	5,45
Completeness	96,1
Redundancy	13,58

Tabelle B.2: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter und Besetzungsfaktoren für $(Al,Mg)_2Pd$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$	occ.
Mg	48(f)	0,43093(3)	1/8	1/8	1,38(5)	1
Pd	32(e)	0,2140(2)	0,2140(2)	0,2140(2)	1,07(6)	1
Al	16(c)	0	0	0	1,17(8)	1

Tabelle B.3: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $(Al,Mg)_2Pd$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg	48(f)	1,38(5)	1,38(5)	1,38(5)	-0,02(1)	0,02(1)	-0,02(1)
Pd	32(e)	1,2(1)	0,97(7)	0,97(7)	0,13(8)	0	0
Al	16(c)	1,17(8)	1,17(8)	1,17(8)	0,15(9)	-0,15(9)	-0,15(9)

Anhang C:

Tabelle C.1 Bekannte Strukturtypen mit dem Ikosaeder als Koordinationspolyeder [117]

Name	Raumgruppe	Typ	Ikosaederzentrum
Al ₁₁ Mn ₄	P $\bar{1}$		Al, Mn
Al ₂ Fe	P1		Al
Hf ₃ Ni ₇	P $\bar{1}$		Ni
Ca ₈ In ₃	P $\bar{1}$		In
Tl ₃ Yb ₈	P $\bar{1}$		Tl
Hf ₈ Ni ₂₁	P $\bar{1}$		Ni
Al ₉ Co ₂	P2 ₁ /c		Al
Cu ₄ La	P2 ₁ /c		Cu
Cr ₁₁ Fe ₁₃ Mo ₃ Ni ₃	P2	FK	M
AsPd ₅	C2		Pd
CoZn ₁₃	C2/m		Co, Zn
CrSTa ₅	C2/c		Cr/Ta
Al ₄ W	Cm		Al, W
Ge ₃ Ni ₅	C2		Ni
Pu	C2/m		Pu
Ni ₇ Zr ₂	C2/m		Ni
Fe ₃ Ga ₄	C2/m		Fe
Fe ₆ Ge ₅	C2/m		Fe
In ₉ Pt ₁₃	C2/m		Pt
Fe ₆ Ge ₅ Li	C2/m		Fe
Co ₁₇ Si ₁₃ V ₂₀	C2/m	FK	Co/Si
NiZn ₈	C2/m		Ni, Zn
STa ₆	C2/c		Ta
Pb ₉ Pd ₁₃	C2/c		Pd
Al ₄₅ V ₇	C2/m	I3	Al, V
Al ₇ Th ₂	Pbam		Al
Ga ₆ Hf ₃ Mn ₂	Pmmm		Mn, Ga
Cd ₇ Th ₆	Pbam	FK	Cd
FeSiW ₂	Pbam	FK	M
Co ₃ Hf ₂ Si ₄	Pbcn		Co
STa ₂	Pbcm		Ta
Ru ₂ Si ₃	Pbcn		Ru
Cu ₈ Hf ₃	Pnma		Cu
CrSi ₂ Zr	Pbam		Si
FeGa ₂ Hf	Pnma		Fe, Ga
MnSi ₂ Ti	Pbam		Si
Al ₃ Nb ₁₀ Ni ₉	Pnma	FK	M
OsPu ₁₉	Pnna		M
Ce ₂ Cu ₉ In ₃	Pnnm		Cu/In, Cu
Cr ₉ Mo ₂₁ Ni ₂₀	Pnma	FK	M
MoNi	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	FK	Ni
Ga ₄ V ₂ Zr ₃	Pnma		Ga, Zr
Co ₈ Mn ₉ Si ₃	Pnnm	FK	Si, M
AgAsK ₂	C222 ₁		Ag
AlCe	Cmcm		Al

Fortsetzung:

Name	Raumgruppe	Typ	Iksaederzentrum
Al ₅ Fe ₂	Cmcm	I3	Al, Fe
CdK ₂ Pb	Ama2		Cd
Pd ₂ S	Ama2		Pd
Re ₂ U	Cmcm		Re
Na ₂ Tl	C222 ₁		Na, Tl
CMn ₅ Si	Cmc2 ₁		Si
TiZn ₁₆	Cmcm		Zn
Ni ₃ Si ₂	Cmc2 ₁		Ni
FeScSi ₂	Cmca		Si, Fe
Re ₂ ScSi ₃	Amm2		Re
Al ₁₁ Mn ₃ Zn ₂	Cmcm	I3	Al, M
Al ₃₁ Mn ₆ Ni ₂	Cmcm	I3	Al, Ni
Mn ₂ U	Imma		Mn
Sn ₅ Ti ₆	Immm		Ti
MnSi ₂ Zr	Immm		Si, Mn
Ni ₁₈ Sc ₆ Si ₁₁	Immm		Si, Ni
Ag ₁₇ Mg ₅₄	Immm	I3	Mg, Ag
GaMnSc ₉	Immm	I3	Mn, Ga, Sc
Hf ₅₄ Os ₁₇	Immm	I3	Os, Hf
CeMn ₆ Ni ₅	P4/mbm		Mn/Ni
CrFe	P4 ₂ /mnm	FK	M
U	P4 ₂ nm		U
Al ₁₀ CaCr ₂	P4/nmm		Al, Cr
Mn ₅ Si ₂	P4 ₁ 2 ₁ 2		Mn, Si
BFe ₁₄ Nd ₂	P4 ₂ /mnm		Fe
Ga ₆ Nb ₁₀ Sn ₃	P4 ₂ /mnm		Sn
Mn ₁₂ Th	I4/mmm		Mn
La ₇ Ni ₁₆	I $\bar{4}$ 2m		Ni
Ce ₂ Ni ₁₇ Si ₉	I4/mcm		Ni/Si
Co ₄ GeNb ₉	I4/mcm		Co
CoMo ₃ Si	I $\bar{4}$ c2		Co/Si
Co ₄ Ge ₇ Zr ₄	I4/mmm		Ge
Co ₁₁ Ga ₃ La ₆	I4/mcm		Co/Ga, Co
Ce ₅ Mg ₄₁	I4/m		Mg
Cu ₄ La	I $\bar{4}$ m2		Cu
Pu ₂₈ Zr	I4 ₁ /a		Pu(Zr)
MgZn ₂	P6 ₃ /mmc	FK	Zn
Al ₅ Ba ₄	P6 ₃ /mmc		Al
B ₂ Nd ₃ Ni ₃	P6/mmm		Ni
AlMg ₄ Zn ₁₁	P $\bar{6}$ m2	FK	Zn
Be ₇ Rh	P $\bar{6}$ m2	FK	Be
Al ₁₃ Ba ₇	P $\bar{3}$ m1		Al
Fe ₁₃ Ge ₈	P6 ₃ /mmc		Fe
Pd ₁₃ Te ₉	P $\bar{3}$ m1		Pd
Sn ₅ Ti ₆	P6 ₃ /mmc		Ti
AsCu ₃	P $\bar{3}$ 1c	FK	As, Cu
CeNi ₃	P6 ₃ /mmc		Ni
Cu ₃ P	P6 ₃ cm		Cu

Fortsetzung:

Name	Raumgruppe	Typ	Ikosaederzentrum
MgNi ₂	P6 ₃ /mmc	FK	Ni
Al ₁₀ Mn ₃	P6 ₃ /mmc	I3	Al, Mn
Cu ₁₀ Sn ₃	P6 ₃ /m		Cu
Al ₅ Co ₂	P6 ₃ /mmc	I3	Al, Co
BHf ₉ Mo ₄	P6 ₃ /mmc	I3	Mo
BaLi ₄	P6 ₃ /mmc		Li
Ge ₉ Pd ₂₅	P $\bar{3}$		Ge, Pd
AlCuMg	P $\bar{6}m2$	FK	Al/Cu
CeNi ₇	P6 ₃ /mmc		Ni
ErZn ₅	P6 ₃ /mmc		Zn
Ni ₁₁ Sc ₃ Si ₄	P6 ₃ /mmc		Si, Ni
Ge ₄ Ni ₁₁ Sc ₃	P6 ₃ /mmc		Ge, Ni
Ni ₁₇ Th ₂	P6 ₃ /mmc		Ni
Fe ₆ Ge ₆ Li	P6/mmm		Fe
Ni ₃₁ Si ₁₂	P321		Si
LuNu ₄	P3 ₁ 2		Ni
AgMg ₁₆ Zn ₃₁	P6 ₃ /mmc	FK	Zn/Ag
Ce ₂ Co ₇ Cu ₃	P6 ₃ /mmc		Cu o. Co
Ge ₆ Ni ₆ Sc	P6/mmm		Ni
Al ₂₃ V ₄	P6 ₃ /mmc	I3	V
Ag ₂ Mg ₁₂ Zn ₂₅	P6 ₃ /mmc	FK	Zn/Ag
Au ₇ In ₃	P $\bar{3}$		Au
GaGe ₂ Ni ₄	P3 ₁ 21		Ni
LiMg ₇ Zn ₁₃	P6 ₃ /mmc	FK	Li/Zn, Zn
Mg ₄ Sr	P6 ₃ /mmc		Mg
Al ₇ Ca ₇ Cu ₆	P6/mmm		Cu, Al, Al/Cu
Mg ₃₈ Sr ₉	P6 ₃ /mmc		Mg
AlCuMg	P6 ₃ /mmc	FK	Al/Cu
EuMg ₁₃ Sr ₂	P6 ₃ /mmc		Mg
LiMg ₂ Zn ₃	P6 ₃ /mmc	FK	Li, Zn, Li/Zn
Cd ₅₈ Gd ₁₃	P6 ₃ /mmc		Cd
Pd ₄₀ Sn ₃₁ Y ₁₃	P6/mmm		Pd, Sn
Au ₅ Sn	R3		Au, Sn
Fe ₂ Tb	R $\bar{3}m$	FK	Fe
Ni ₃ Pb ₂ S ₂	R $\bar{3}m$		Pb
Cu ₃ K ₃ P ₂	R $\bar{3}m$		Cu
Be ₃ Nb	R $\bar{3}m$		Be
Fe ₇ W ₆	R $\bar{3}m$	FK	Fe
Al ₉ Sr ₅	R $\bar{3}m$		Al
As ₅ Fe ₁₀ Ru ₂	R3		Fe
P ₂ Pd ₁₅	R $\bar{3}$		Pd
Co ₇ Er ₂	R $\bar{3}m$		Co
Be ₁₇ Nb ₂	R $\bar{3}m$		Be
Th ₂ Zn ₁₇	R $\bar{3}m$		Zn
Ce ₅ Co ₁₉	R $\bar{3}m$		Co
Al ₈ Cr ₅	R3m		Cr, Al/Cr
Cu ₇ Hg ₆	R3m		Cu
Pd ₂₀ Sb ₇	R $\bar{3}$		Sb

Fortsetzung:

Name	Raumgruppe	Typ	Iksaederzentrum
AgMg ₅ Zn ₉	R $\bar{3}m$	FK	Zn/Ag
Al ₃ Au ₈	R $\bar{3}c$		Al
In ₃ Yb ₈	R $\bar{3}c$		In
Ga ₄₁ V ₈	R $\bar{3}$		Ga
Co ₅ Cr ₂ Mo ₃	R $\bar{3}$	FK	M
Re ₂₅ Zr ₂₁	R $\bar{3}c$	FK	Re, Zn
Al ₁₁ Ge ₂ W ₃	P $\bar{3}m$	FK	W, Ge
Cr ₃ Si	Pm $\bar{3}n$	FK	Si
AlAu ₄	P2 ₁ 3	FK	Al, Au
Mn	P4 ₁ 32		Mn
H ₃ U	Pm $\bar{3}n$		U
Mg ₂ Zn ₁₁	Pm $\bar{3}$		Zn
Pr ₃ Rh ₄ Sn ₁₃	Pm $\bar{3}n$		Sn
Cd ₅ Ni	P $\bar{4}3m$		Cd
Ga ₅ Ni ₈ Zn ₃₆	P $\bar{4}3m$		Ni, Ga
Al ₄ Cu ₉	P $\bar{4}3m$		Al, Cu
Al ₉ Mn ₂ Si	Pm $\bar{3}$	I3	Mn, Al/Si
Rh ₁₃ Sc ₅₇	Pm $\bar{3}$	I3	Rh, Sc
RuZn ₆	P4 ₁ 32	I3	Ru, Zn
Al ₁₂ W	Im $\bar{3}$	I3	W
Ag ₈ Ca ₃	Im $\bar{3}m$		Ag
Cu ₅ Zn ₈	I $\bar{4}3m$	I3	Zn, Cu
Mn	I $\bar{4}3m$		Mn
Gd ₃ Ni ₈ Sn ₁₆	Im $\bar{3}$		Gd/Sn
B ₁₄ Fe ₆₂ Y ₃	Im $\bar{3}m$		Fe
B ₁₇ Ru ₃	Im $\bar{3}$		Be
CuLiSi	Im $\bar{3}$		Cu/Si
Al ₆ Mg ₁₁ Zn ₁₁	Im $\bar{3}$	FK	Al, Zn/Al
Cd ₆ Yb	Im $\bar{3}$		Cd
Cd ₅ Pt	I $\bar{4}3m$		Pt, Cd
AuBe ₅	F $\bar{4}3m$	FK	Be
Cu ₂ Mg	Fd $\bar{3}m$	FK	Cu
Al ₁₃ Cr ₄ Si ₄	F $\bar{4}3m$	I3	Cr
Bi ₄ Mn ₅ Ni ₂	F $\bar{4}3m$		Mn
NiTi ₂	Fd $\bar{3}m$	I3	Ni, Ti
CMo ₆ Ni ₆	Fd $\bar{3}m$		Ni
CFe ₃ W ₃	Fd $\bar{3}m$	I3	Fe, W
NaZn ₁₃	Fm $\bar{3}c$		Zn
Mn ₂₃ Th ₆	Fm $\bar{3}m$		Mn
Ir ₄ Sc ₁₁	Fm $\bar{3}m$		Ir
Al ₁₀ V	Fd $\bar{3}m$	I3	V
Al ₁₈ Cr ₂ Mg ₃	Fd $\bar{3}m$	I3	Cr
Ni ₂ Tm	F $\bar{4}3m$	FK	Ni
Pt ₃ Zn ₁₀	F $\bar{4}3m$		Pt/Zn, Pt, Zn
Fe ₁₁ Zn ₃₉	F $\bar{4}3m$	I3	Fe, Fe/Zn
Mg ₄₄ Rh ₇	F $\bar{4}3m$	I3	Rh, Mg
Na ₆ Tl	F $\bar{4}3m$	I3	Tl, Na
Cu ₄₁ Sn ₁₁	F $\bar{4}3m$		Cu, Sn
Cd ₄₅ Sm ₁₁	F $\bar{4}3m$	FK	Cd

Anhang D

Tabelle D.1: Ausgewählte Ansätze im System Al-Mg-Pd

Film-nummer	Ansatz	Zusammensetzung/mol-%	Einwaage/mg			Temp.- Progr.	Ergebnis
			Al	Mg	Pd		
9	APM11	Al ₁₀ Mg ₇₀ Pd ₂₀	12,90	84,80	109,50	T1	Mg ₆ Pd + NiTi ₂ -Typ + 1/1
10	APM12	Al ₁₅ Mg ₆₅ Pd ₂₀	20,90	80,50	109,00	T2	Mg ₆ Pd + NiTi ₂ -Typ + 1/1-R
10	APM13	Al ₂₀ Mg ₆₀ Pd ₂₀	30,50	75,50	107,40	T2	NiTi ₂ -Typ + 1/1-R
11	APM14	Al ₃₈ Mg ₅₀ Pd ₁₂	105,01	122,50	128,64	T1	1/1-R
12	APM17	Al ₂₅ Mg ₄₅ Pd ₃₀	33,73	54,84	164,77	T1	NiTi ₂ -Typ
12	APM18	Al ₃₀ Mg ₄₅ Pd ₂₅	41,43	54,61	137,10	T1	NiTi ₂ -Typ + 1/1-R

Tabelle D.2: Ausgewählte Ansätze im System Ga-Mg-Pd

Film-nummer	Ansatz	Zusammensetzung/mol-%	Einwaage/mg			Temp.- Progr.	Ergebnis
			Ga	Mg	Pd		
13	GPM1	Ga ₂₀ Mg ₆₀ Pd ₂₀	65,60	73,67	106,85	T3	fcc Struktur
13	GPM2	Ga ₁₅ Mg ₆₅ Pd ₂₀	51,50	81,90	115,10	T3	fcc Struktur
13	GPM3	Ga ₁₀ Mg ₇₀ Pd ₂₀	49,59	85,56	107,19	T3	fcc Struktur
14	GPM4	Ga ₂₅ Mg ₄₅ Pd ₃₀	87,79	54,18	160,93	T1	1/1-R
14	GPM5	Ga ₃₀ Mg ₄₅ Pd ₂₅	106,55	56,61	131,53	T1	1/1-R
14	GPM6	Ga ₃₅ Mg ₄₅ Pd ₂₀	122,38	54,37	112,58	T1	1/1-R

Tabelle D.3: Ansätze im System (Al,Ga)-Mg-Pd

Film-nr.	Ansatz	Zusammensetzung/mol-%	Einwaage/mg				Temp.- Progr.	Ergebnis
			Al	Ga	Mg	Pd		
15	GAPM1	Al ₁₅ Ga ₅ Mg ₆₀ Pd ₂₀	42,00	37,50	147,10	216,30	T1	1/1-R
15	GAPM2	Al ₁₀ Ga ₁₀ Mg ₆₀ Pd ₂₀	28,10	72,80	146,30	217,60	T1	1/1
15	GAPM3	Al ₅ Ga ₁₅ Mg ₆₀ Pd ₂₀	13,90	111,00	147,90	216,40	T1	fcc + unb. Verb.

T1: 1000°C aufschmelzen -> 800°C tempern

T2: 1000°C aufschmelzen -> 600°C tempern

T3: 800°C aufschmelzen -> 600°C tempern

Anhang E

Tabelle E.1: Daten zur Einkristallstrukturanalyse von $Ga_{36,6}Mg_{175,4}Pd_{52,0} [(Al,Ga,Mg)_{53}Pd_{52}]$

Kristallgröße / mm ³	0,2 · 0,2 · 0,3
Diffraktometer	Kappa-CCD
Strahlung, Monochromator	MoK α , Graphit
Scanmodus	$\Delta\varphi = 1^\circ$, θ -Offset = 0° , 360 Aufnahmen,
Zellparameter a/Å b/Å c/Å	12,059 12,059 12,058
Transformierte Zellparameter a/Å	17,053(4)
Meßbereich $h_{\min}, h_{\max} k_{\min}, k_{\max} l_{\min}, l_{\max}$	-21, 21 -21, 21 -21, 21
Volumen /Å ³	4959,09
Raumgruppentyp	Fm $\bar{3}$
Gemessene Reflexe	9837
F_o asym. Einheit / davon $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$	512 / 406
R_{int} : alle	9,67
Strukturlösung	SHELXS-86
Strukturverfeinerung	SHELX-93 (F^2 , anisotrope U_{ij})
Anzahl der Variablen	34
Summenformel (röntg.)	$Ga_{36,6}Mg_{175,4}Pd_{52,0} (Ga_{13,9}Mg_{66,4}Pd_{19,7}) [(Al,Ga,Mg)_{53}Pd_{52}]$
Röntg. Dichte $\rho_{\text{rö}}$ / gcm ⁻³	3,932
Linearer Absorptionskoeffizient μ / mm ⁻¹	9,65
Max. / min. Restelektronendichte / e Å ⁻³	0,72 / -2,01
Gewichtungsschema	$1/[(\sigma^2(F_o^2) + (0,0288 \cdot P)^2]$
R1: alle / Reflexe mit $F_o^2 > 2\sigma(F_o^2)$ %	3,96 / 2,67
wR2: alle %	5,39
Completeness	100 %
Redundancy	1

Tabelle E.2: Atomparameter, isotrope Auslenkungsparameter, Besetzungsfaktoren für $Ga_{36,6}Mg_{175,4}Pd_{52,0} [(Al,Ga,Mg)_{53}Pd_{52}]$

Atom	Wy.	x	y	z	$U_{eq} / 10^{-2} \text{Å}^2$	occ.	Position
Mg1	96(i)	0,09464(8)	0,25898(9)	0,15802(8)	1,93(4)	1	β', β''
M1	48(h)	0	0,08825(6)	0,36315(6)	2,31(4)	0,54 Ga/ 0,46 Mg	β
Pd1	48(h)	0	0,15466(3)	0,22935(3)	1,81(2)	1	α', α''
Mg2	32(f)	0,09486(8)	0,09486(8)	0,09486(8)	1,83(6)	1	β''
Mg3	24(e)	0,2153(2)	0	0	2,10(7)	1	β'
Ga2	8(c)	1/4	1/4	1/4	1,92(4)	1	γ
Pd2	4(b)	1/2	1/2	1/2	2,13(4)	1	α
M2	4(a)	0	0	0	1,93(9)	0,87 Ga/ 0,13 Pd	-

Tabelle E.3: Anisotrope Auslenkungsparameter $U_{ij} / 10^{-2} \text{ \AA}^2$ für $\text{Ga}_{36,6}\text{Mg}_{175,4}\text{Pd}_{52,0}$ $[(\text{Al}, \text{Ga}, \text{Mg})_{53}\text{Pd}_{52}]$

Atom	Wy.	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Mg1	96(i)	1,97(8)	1,84(8)	1,97(8)	-0,13(6)	0,23(7)	-0,31(7)
M1	48(h)	2,71(7)	2,36(7)	1,88(6)	0,28(5)	0	0
Pd1	48(h)	1,71(3)	1,76(3)	1,95(3)	0,13(2)	0	0
Mg2	32(f)	1,82(6)	1,82(6)	1,82(6)	-0,06(6)	-0,06(6)	-0,06(6)
Mg3	24(e)	2,4(2)	2,7(2)	1,2(2)	0	0	0
Ga1	8(c)	1,92(4)	1,92(4)	1,92(4)	0	0	0
Pd2	4(b)	2,12(4)	2,12(4)	2,12(4)	0	0	0
M2	4(a)	1,93(9)	1,93(9)	1,93(9)	0	0	0

Tabelle E.4: Abstände (in Å) zwischen benachbarten Atomen in $\text{Ga}_{36,6}\text{Mg}_{175,4}\text{Pd}_{52,0}$ $[(\text{Al}, \text{Ga}, \text{Mg})_{53}\text{Pd}_{52}]$

<u>Mg1</u>	2 Mg1	3,462(2)	<u>Pd1</u>	2 Mg1	2,692(2)	
	2 Mg1	3,066(3)		2 Mg1	2,909(2)	
	1 Mg1	3,152(3)		2 Mg1	2,927(1)	
	1 Mg1	3,228(3)		1 M1	2,547(1)	
	1 M1	3,086(2)		2 Mg2	2,986(1)	
	1 M1	3,229(4)		1 Mg3	2,648(1)	
	1 Pd1	2,692(2)		1 Pd1		
	1 Pd1	2,909(2)				
	1 Pd1	2,927(1)		<u>Mg2</u>	3 Mg1	2,999(2)
	1 Mg2	2,999(2)			3 Pd1	2,986(1)
	1 Mg3	3,228(2)			3 Mg2	3,235(3)
	1 Ga2	3,083(1)			3 Mg3	3,074(2)
					1 M2	2,802(3)
<u>M1</u>	2 Mg1	3,086(2)	<u>Mg3</u>	4 Mg1	3,228(2)	
	2 Mg1	3,229(4)		2 M1	2,936(3)	
	4 M1	2,898(1)		2 Pd1	2,648(1)	
	1 M1	3,010(1)		4 Mg2	3,074(2)	
	1 Pd1	2,547(1)				
	1 Mg3	2,936(3)		<u>Ga2</u>	12 Mg1	3,083(1)
	1 Pd2	2,777(1)				
		<u>Pd2</u>	12 M1	2,777(1)		
		<u>M2</u>	8 Mg2	2,802(3)		

ShelX cif Dateien

data_850

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\"apers

FB Chemie Uni Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaepers@web.de'

=====

2. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\"at Dortmund

Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle

vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\"apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\"at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

=====

3. TEXT

_publ_section_abstract

;

1/1-Approximant im System Al-Mg-Pd, Kapitel 5.3

Datensatz Nummer: 850

;

=====

4. Results

_chemical_name_systematic

```

;
?
;
_chemical_name_common      ?
_chemical_formula_moiety   ?
_chemical_formula_structural ?
_chemical_formula_analytical ?
_chemical_formula_sum      'Al24 Mg84 Pd38'
_chemical_formula_weight    6796.84
_chemical_melting_point     ?
_chemical_compound_source   ?

loop_
  _atom_type_symbol
  _atom_type_description
  _atom_type_scatter_dispersion_real
  _atom_type_scatter_dispersion_imag
  _atom_type_scatter_source
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting     'cubic'
_symmetry_space_group_name_H-M 'Im-3'

loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'
'-x, y, -z'
'x, -y, -z'
'z, x, y'
'z, -x, -y'
'-z, -x, y'
'-z, x, -y'
'y, z, x'
'-y, z, -x'
'y, -z, -x'
'-y, -z, x'
'x+1/2, y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, -y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
'x+1/2, -y+1/2, -z+1/2'
'z+1/2, x+1/2, y+1/2'
'z+1/2, -x+1/2, -y+1/2'
'-z+1/2, -x+1/2, y+1/2'
'-z+1/2, x+1/2, -y+1/2'
'y+1/2, z+1/2, x+1/2'
'-y+1/2, z+1/2, -x+1/2'
'y+1/2, -z+1/2, -x+1/2'
'-y+1/2, -z+1/2, x+1/2'
'-x, -y, -z'
'x, y, -z'
'x, -y, z'

```

```

'-x, y, z'
'-z, -x, -y'
'-z, x, y'
'z, x, -y'
'z, -x, y'
'-y, -z, -x'
'y, -z, x'
'-y, z, x'
'y, z, -x'
'-x+1/2, -y+1/2, -z+1/2'
'x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
'x+1/2, -y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, y+1/2, z+1/2'
'-z+1/2, -x+1/2, -y+1/2'
'-z+1/2, x+1/2, y+1/2'
'z+1/2, x+1/2, -y+1/2'
'z+1/2, -x+1/2, y+1/2'
'-y+1/2, -z+1/2, -x+1/2'
'y+1/2, -z+1/2, x+1/2'
'-y+1/2, z+1/2, x+1/2'
'y+1/2, z+1/2, -x+1/2'

_cell_length_a      13.801(2)
_cell_length_b      13.801(2)
_cell_length_c      13.801(2)
_cell_angle_alpha    90.00
_cell_angle_beta     90.00
_cell_angle_gamma    90.00
_cell_volume         2628.6(7)
_cell_formula_units_Z 1
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used 57
_cell_measurement_theta_min 8.4
_cell_measurement_theta_max 55.04

_exptl_crystal_description 'irregular'
_exptl_crystal_colour 'silver'
_exptl_crystal_size_max 0.35
_exptl_crystal_size_mid 0.2
_exptl_crystal_size_min 0.2
_exptl_crystal_density_meas 'not measured'
_exptl_crystal_density_diffn 4.294
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000 3092
_exptl_absorpt_coefficient_mu 7.098
_exptl_absorpt_correction_type 'none'
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
;
'none'
;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
_diffn_radiation_wavelength 0.71069
_diffn_radiation_type MoKalpha

```

```

_diffrn_radiation_source      'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator graphite
_diffrn_measurement_device    Kappa-CCD
_diffrn_measurement_method    'phi-scan'
_diffrn_standards_number      ?
_diffrn_standards_interval_count ?
_diffrn_standards_interval_time ?
_diffrn_standards_decay_%     ?
_diffrn_reflns_number         8394
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0876
_diffrn_reflns_av_sigma/netI  0.0419
_diffrn_reflns_limit_h_min    -17
_diffrn_reflns_limit_h_max    16
_diffrn_reflns_limit_k_min    -17
_diffrn_reflns_limit_k_max    17
_diffrn_reflns_limit_l_min    -15
_diffrn_reflns_limit_l_max    15
_diffrn_reflns_theta_min      4.18
_diffrn_reflns_theta_max      27.52
_reflns_number_total          560
_reflns_number_observed       450
_reflns_observed_criterion    >2sigma(I)

_computing_data_collection    'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement    'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction     'NRCVAX software'
_computing_structure_solution 'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics 'Schakal 97'
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F^2 for ALL reflections except for 0 with very negative F^2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F^2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F^2. The observed criterion
of F^2 > 2sigma(F^2) is used only for calculating _R_factor_obs etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F^2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type         full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s^2*(Fo^2)+( 0.0771P)^2+73.8847P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary   direct
_atom_sites_solution_secondary difmap
_atom_sites_solution_hydrogens geom
_refine_ls_hydrogen_treatment  none
_refine_ls_extinction_method    none
_refine_ls_extinction_coef     none
_refine_ls_number_reflns       560
_refine_ls_number_parameters    37
_refine_ls_number_restraints    0
_refine_ls_R_factor_all        0.0686

```

```

_refine_ls_R_factor_obs      0.0483
_refine_ls_wR_factor_all     0.1497
_refine_ls_wR_factor_obs     0.1431
_refine_ls_goodness_of_fit_all 1.174
_refine_ls_goodness_of_fit_obs 1.261
_refine_ls_restrained_S_all  1.174
_refine_ls_restrained_S_obs  1.261
_refine_ls_shift/esd_max     0.000
_refine_ls_shift/esd_mean    0.000

```

```
loop_
```

```

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Mg1 Mg 0.1134(3) 0.3087(3) 0.1817(3) 0.0219(8) Uani 1 d . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1078(4) 0.1774(4) 0.0217(11) Uani 1 d S .
Pd1 Pd 0.0000 0.21092(9) 0.33452(8) 0.0216(4) Uani 1 d S .
Al1 Al 0.0000 0.4017(3) 0.3347(3) 0.0218(10) Uani 1 d S .
Pd2 Pd 0.17155(12) 0.0000 0.5000 0.0247(5) Uani 1 d S .
Mg3 Mg 0.3872(5) 0.0000 0.0000 0.0188(14) Uani 1 d S .
Pd3 Pd 0.0000 0.0000 0.0000 0.0200(8) Uani 1 d S .

```

```
loop_
```

```

_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Mg1 0.022(2) 0.025(2) 0.019(2) -0.0005(14) 0.0023(14) -0.0017(15)
Mg2 0.021(2) 0.025(3) 0.019(2) -0.003(2) 0.000 0.000
Pd1 0.0228(7) 0.0206(7) 0.0213(7) -0.0003(4) 0.000 0.000
Al1 0.023(2) 0.020(2) 0.022(2) -0.003(2) 0.000 0.000
Pd2 0.0231(9) 0.0227(9) 0.0283(10) 0.000 0.000 0.000
Mg3 0.023(4) 0.016(3) 0.018(3) 0.000 0.000 0.000
Pd3 0.0200(8) 0.0200(8) 0.0200(8) 0.000 0.000 0.000

```

```
_geom_special_details
```

```
;
```

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

```
;
```

```
loop_
```

_geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
 Mg1 Pd1 2.868(4) 9 ?
 Mg1 Al1 2.925(5) . ?
 Mg1 Pd1 2.953(4) . ?
 Mg1 Al1 2.968(4) 41 ?
 Mg1 Mg1 3.029(6) 41 ?
 Mg1 Mg1 3.029(6) 45 ?
 Mg1 Pd2 3.072(4) 9 ?
 Mg1 Mg2 3.094(5) 9 ?
 Mg1 Pd1 3.112(4) 41 ?
 Mg1 Mg1 3.129(7) 28 ?
 Mg1 Mg3 3.147(4) 5 ?
 Mg1 Mg2 3.184(6) . ?
 Mg2 Pd1 2.594(5) . ?
 Mg2 Pd3 2.865(5) . ?
 Mg2 Mg2 2.976(10) 2 ?
 Mg2 Mg2 3.022(6) 30 ?
 Mg2 Mg2 3.022(6) 5 ?
 Mg2 Mg2 3.022(6) 10 ?
 Mg2 Mg2 3.022(6) 9 ?
 Mg2 Mg1 3.094(5) 5 ?
 Mg2 Mg1 3.094(5) 30 ?
 Mg2 Mg1 3.184(6) 28 ?
 Mg2 Mg3 3.255(8) 9 ?
 Pd1 Al1 2.634(5) . ?
 Pd1 Al1 2.730(3) 45 ?
 Pd1 Al1 2.730(3) 46_455 ?
 Pd1 Pd2 2.8013(15) 41 ?
 Pd1 Mg1 2.868(4) 30 ?
 Pd1 Mg1 2.868(4) 5 ?
 Pd1 Mg1 2.953(4) 28 ?
 Pd1 Mg3 3.000(2) 9 ?
 Pd1 Mg1 3.112(4) 45 ?
 Pd1 Mg1 3.112(4) 23_455 ?
 Al1 Pd2 2.495(4) 41 ?
 Al1 Pd2 2.629(5) 9 ?
 Al1 Al1 2.712(9) 2_565 ?
 Al1 Pd1 2.730(3) 41 ?
 Al1 Pd1 2.730(3) 18_455 ?
 Al1 Mg1 2.925(5) 28 ?
 Al1 Mg1 2.968(4) 23_455 ?
 Al1 Mg1 2.968(4) 45 ?
 Al1 Mg3 3.077(5) 37 ?
 Al1 Mg3 3.077(5) 13_455 ?
 Pd2 Al1 2.495(4) 22_545 ?
 Pd2 Al1 2.495(4) 45 ?
 Pd2 Al1 2.629(5) 6_556 ?
 Pd2 Al1 2.629(5) 5 ?
 Pd2 Pd1 2.8013(15) 45 ?
 Pd2 Pd1 2.8013(15) 22_545 ?
 Pd2 Mg3 2.834(4) 9 ?
 Pd2 Mg3 2.834(4) 33_556 ?
 Pd2 Mg1 3.072(4) 31_556 ?

Pd2 Mg1 3.072(4) 32 ?
 Pd2 Mg1 3.072(3) 6_556 ?
 Pd2 Mg1 3.072(4) 5 ?
 Mg3 Pd2 2.834(4) 5 ?
 Mg3 Pd2 2.834(4) 29_655 ?
 Mg3 Pd1 3.000(2) 6 ?
 Mg3 Pd1 3.000(2) 5 ?
 Mg3 Al1 3.077(5) 37 ?
 Mg3 Al1 3.077(5) 38_545 ?
 Mg3 Al1 3.077(5) 13_544 ?
 Mg3 Al1 3.077(5) 14_554 ?
 Mg3 Mg3 3.115(14) 25_655 ?
 Mg3 Mg1 3.147(4) 11 ?
 Mg3 Mg1 3.147(4) 9 ?
 Mg3 Mg1 3.147(4) 34 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 33 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 9 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 25 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 29 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 5 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 34 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 26 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 6 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 30 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 2 ?
 Pd3 Mg2 2.865(5) 10 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
 Pd1 Mg1 Al1 145.9(2) 9 . ?
 Pd1 Mg1 Pd1 158.44(14) 9 . ?
 Al1 Mg1 Pd1 53.23(11) . . ?
 Pd1 Mg1 Al1 55.75(10) 9 41 ?
 Al1 Mg1 Al1 91.08(10) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Al1 144.3(2) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 63.63(8) 9 41 ?
 Al1 Mg1 Mg1 108.2(2) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 128.73(13) . 41 ?
 Al1 Mg1 Mg1 58.38(14) 41 41 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 130.11(14) 9 45 ?
 Al1 Mg1 Mg1 59.76(12) . 45 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 62.68(8) . 45 ?
 Al1 Mg1 Mg1 103.7(2) 41 45 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 67.2(2) 41 45 ?
 Pd1 Mg1 Pd2 95.32(10) 9 9 ?
 Al1 Mg1 Pd2 51.92(11) . 9 ?
 Pd1 Mg1 Pd2 98.94(10) . 9 ?
 Al1 Mg1 Pd2 48.77(10) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Pd2 99.94(14) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Pd2 100.69(14) 45 9 ?
 Pd1 Mg1 Mg2 51.40(10) 9 9 ?

All Mg1 Mg2 146.0(2) . 9 ?
 Pd1 Mg1 Mg2 107.34(14) . 9 ?
 All Mg1 Mg2 102.3(2) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Mg2 105.46(13) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Mg2 142.29(13) 45 9 ?
 Pd2 Mg1 Mg2 116.99(14) 9 9 ?
 Pd1 Mg1 Pd1 101.69(11) 9 41 ?
 All Mg1 Pd1 53.65(9) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Pd1 99.78(10) . 41 ?
 All Mg1 Pd1 51.27(10) 41 41 ?
 Mg1 Mg1 Pd1 57.46(13) 41 41 ?
 Mg1 Mg1 Pd1 55.66(12) 45 41 ?
 Pd2 Mg1 Pd1 53.87(6) 9 41 ?
 Mg2 Mg1 Pd1 152.69(15) 9 41 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 118.00(8) 9 28 ?
 All Mg1 Mg1 57.67(8) . 28 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 58.01(7) . 28 ?
 All Mg1 Mg1 103.97(11) 41 28 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 159.04(8) 41 28 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 110.79(8) 45 28 ?
 Pd2 Mg1 Mg1 59.38(7) 9 28 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 88.58(11) 9 28 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 103.36(7) 41 28 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 59.62(7) 9 5 ?
 All Mg1 Mg3 99.11(14) . 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 117.57(13) . 5 ?
 All Mg1 Mg3 60.34(15) 41 5 ?
 Mg1 Mg1 Mg3 112.15(13) 41 5 ?
 Mg1 Mg1 Mg3 154.9(2) 45 5 ?
 Pd2 Mg1 Mg3 54.20(12) 9 5 ?
 Mg2 Mg1 Mg3 62.85(15) 9 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 101.7(2) 41 5 ?
 Mg1 Mg1 Mg3 60.19(7) 28 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg2 108.82(14) 9 . ?
 All Mg1 Mg2 97.62(14) . . ?
 Pd1 Mg1 Mg2 49.82(10) . . ?
 All Mg1 Mg2 152.4(2) 41 . ?
 Mg1 Mg1 Mg2 140.24(11) 41 . ?
 Mg1 Mg1 Mg2 103.29(13) 45 . ?
 Pd2 Mg1 Mg2 119.82(13) 9 . ?
 Mg2 Mg1 Mg2 57.5(2) 9 . ?
 Pd1 Mg1 Mg2 149.43(15) 41 . ?
 Mg1 Mg1 Mg2 60.57(8) 28 . ?
 Mg3 Mg1 Mg2 92.3(2) 5 . ?
 Pd1 Mg2 Pd3 178.0(2) . . ?
 Pd1 Mg2 Mg2 123.28(12) . 2 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 58.71(10) . 2 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 122.41(8) . 30 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 58.17(3) . 30 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 60.50(12) 2 30 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 122.41(8) . 5 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 58.17(3) . 5 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 60.50(12) 2 5 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 108.24(5) 30 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 120.2(2) . 10 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 58.17(3) . 10 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 108.53(13) 2 10 ?

Mg2 Mg2 Mg2 60.0 30 10 ?
Mg2 Mg2 Mg2 107.3(2) 5 10 ?
Pd1 Mg2 Mg2 120.2(2) . 9 ?
Pd3 Mg2 Mg2 58.17(3) . 9 ?
Mg2 Mg2 Mg2 108.53(13) 2 9 ?
Mg2 Mg2 Mg2 107.3(2) 30 9 ?
Mg2 Mg2 Mg2 60.0 5 9 ?
Mg2 Mg2 Mg2 59.0(2) 10 9 ?
Pd1 Mg2 Mg1 59.79(11) . 5 ?
Pd3 Mg2 Mg1 120.89(11) . 5 ?
Mg2 Mg2 Mg1 91.42(11) 2 5 ?
Mg2 Mg2 Mg1 148.7(2) 30 5 ?
Mg2 Mg2 Mg1 62.74(13) 5 5 ?
Mg2 Mg2 Mg1 149.9(2) 10 5 ?
Mg2 Mg2 Mg1 93.88(9) 9 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 59.79(11) . 30 ?
Pd3 Mg2 Mg1 120.89(11) . 30 ?
Mg2 Mg2 Mg1 91.42(11) 2 30 ?
Mg2 Mg2 Mg1 62.74(13) 30 30 ?
Mg2 Mg2 Mg1 148.7(2) 5 30 ?
Mg2 Mg2 Mg1 93.88(9) 10 30 ?
Mg2 Mg2 Mg1 149.9(2) 9 30 ?
Mg1 Mg2 Mg1 108.2(2) 5 30 ?
Pd1 Mg2 Mg1 60.45(12) . 28 ?
Pd3 Mg2 Mg1 117.9(2) . 28 ?
Mg2 Mg2 Mg1 150.55(8) 2 28 ?
Mg2 Mg2 Mg1 92.09(10) 30 28 ?
Mg2 Mg2 Mg1 146.4(2) 5 28 ?
Mg2 Mg2 Mg1 59.75(14) 10 28 ?
Mg2 Mg2 Mg1 88.9(2) 9 28 ?
Mg1 Mg2 Mg1 111.5(2) 5 28 ?
Mg1 Mg2 Mg1 64.50(13) 30 28 ?
Pd1 Mg2 Mg1 60.45(12) . . ?
Pd3 Mg2 Mg1 117.9(2) . . ?
Mg2 Mg2 Mg1 150.55(8) 2 . ?
Mg2 Mg2 Mg1 146.4(2) 30 . ?
Mg2 Mg2 Mg1 92.09(10) 5 . ?
Mg2 Mg2 Mg1 88.9(2) 10 . ?
Mg2 Mg2 Mg1 59.75(14) 9 . ?
Mg1 Mg2 Mg1 64.50(13) 5 . ?
Mg1 Mg2 Mg1 111.5(2) 30 . ?
Mg1 Mg2 Mg1 58.9(2) 28 . ?
Pd1 Mg2 Mg3 60.48(12) . 9 ?
Pd3 Mg2 Mg3 121.5(2) . 9 ?
Mg2 Mg2 Mg3 62.80(11) 2 9 ?
Mg2 Mg2 Mg3 93.3(2) 30 9 ?
Mg2 Mg2 Mg3 93.3(2) 5 9 ?
Mg2 Mg2 Mg3 149.99(15) 10 9 ?
Mg2 Mg2 Mg3 149.99(15) 9 9 ?
Mg1 Mg2 Mg3 59.37(10) 5 9 ?
Mg1 Mg2 Mg3 59.37(10) 30 9 ?
Mg1 Mg2 Mg3 112.4(2) 28 9 ?
Mg1 Mg2 Mg3 112.4(2) . 9 ?
Mg2 Pd1 Al1 123.3(2) . . ?
Mg2 Pd1 Al1 124.96(13) . 45 ?
Al1 Pd1 Al1 103.29(4) . 45 ?
Mg2 Pd1 Al1 124.96(13) . 46_455 ?

All Pd1 All 103.29(4) . 46_455 ?
 All Pd1 All 59.6(2) 45 46_455 ?
 Mg2 Pd1 Pd2 177.89(13) . 41 ?
 All Pd1 Pd2 54.56(10) . 41 ?
 All Pd1 Pd2 56.73(9) 45 41 ?
 All Pd1 Pd2 56.73(9) 46_455 41 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 68.82(9) . 30 ?
 All Pd1 Mg1 118.00(8) . 30 ?
 All Pd1 Mg1 115.46(12) 45 30 ?
 All Pd1 Mg1 63.98(10) 46_455 30 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 111.91(8) 41 30 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 68.82(9) . 5 ?
 All Pd1 Mg1 118.00(8) . 5 ?
 All Pd1 Mg1 63.98(10) 45 5 ?
 All Pd1 Mg1 115.46(12) 46_455 5 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 111.91(8) 41 5 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 121.9(2) 30 5 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 69.73(12) . 28 ?
 All Pd1 Mg1 62.85(11) . 28 ?
 All Pd1 Mg1 165.09(12) 45 28 ?
 All Pd1 Mg1 116.10(11) 46_455 28 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 108.53(8) 41 28 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 70.28(14) 30 28 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 126.09(11) 5 28 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 69.73(12) . . ?
 All Pd1 Mg1 62.85(11) . . ?
 All Pd1 Mg1 116.10(11) 45 . ?
 All Pd1 Mg1 165.09(12) 46_455 . ?
 Pd2 Pd1 Mg1 108.53(8) 41 . ?
 Mg1 Pd1 Mg1 126.09(11) 30 . ?
 Mg1 Pd1 Mg1 70.28(14) 5 . ?
 Mg1 Pd1 Mg1 63.99(14) 28 . ?
 Mg2 Pd1 Mg3 70.7(2) . 9 ?
 All Pd1 Mg3 165.9(2) . 9 ?
 All Pd1 Mg3 64.76(14) 45 9 ?
 All Pd1 Mg3 64.76(14) 46_455 9 ?
 Pd2 Pd1 Mg3 111.37(14) 41 9 ?
 Mg1 Pd1 Mg3 64.83(8) 30 9 ?
 Mg1 Pd1 Mg3 64.83(8) 5 9 ?
 Mg1 Pd1 Mg3 128.06(12) 28 9 ?
 Mg1 Pd1 Mg3 128.06(12) . 9 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 117.04(8) . 45 ?
 All Pd1 Mg1 61.54(7) . 45 ?
 All Pd1 Mg1 59.68(11) 45 45 ?
 All Pd1 Mg1 109.75(11) 46_455 45 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 62.34(7) 41 45 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 173.68(11) 30 45 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 60.71(12) 5 45 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 113.38(9) 28 45 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 59.86(12) . 45 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 113.97(8) 9 45 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 117.04(8) . 23_455 ?
 All Pd1 Mg1 61.54(7) . 23_455 ?
 All Pd1 Mg1 109.75(10) 45 23_455 ?
 All Pd1 Mg1 59.68(11) 46_455 23_455 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 62.34(7) 41 23_455 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 60.71(12) 30 23_455 ?

Mg1 Pd1 Mg1 173.68(11) 5 23_455 ?
Mg1 Pd1 Mg1 59.86(12) 28 23_455 ?
Mg1 Pd1 Mg1 113.38(9) . 23_455 ?
Mg3 Pd1 Mg1 113.97(8) 9 23_455 ?
Mg1 Pd1 Mg1 116.06(13) 45 23_455 ?
Pd2 Al1 Pd2 172.9(2) 41 9 ?
Pd2 Al1 Pd1 66.14(12) 41 . ?
Pd2 Al1 Pd1 121.0(2) 9 . ?
Pd2 Al1 Al1 113.91(11) 41 2_565 ?
Pd2 Al1 Al1 58.94(10) 9 2_565 ?
Pd1 Al1 Al1 179.95(14) . 2_565 ?
Pd2 Al1 Pd1 114.34(10) 41 41 ?
Pd2 Al1 Pd1 63.01(9) 9 41 ?
Pd1 Al1 Pd1 119.77(9) . 41 ?
Al1 Al1 Pd1 60.21(8) 2_565 41 ?
Pd2 Al1 Pd1 114.34(10) 41 18_455 ?
Pd2 Al1 Pd1 63.01(9) 9 18_455 ?
Pd1 Al1 Pd1 119.77(9) . 18_455 ?
Al1 Al1 Pd1 60.21(8) 2_565 18_455 ?
Pd1 Al1 Pd1 113.6(2) 41 18_455 ?
Pd2 Al1 Mg1 118.8(2) 41 28 ?
Pd2 Al1 Mg1 66.91(11) 9 28 ?
Pd1 Al1 Mg1 63.92(12) . 28 ?
Al1 Al1 Mg1 116.03(11) 2_565 28 ?
Pd1 Al1 Mg1 119.9(2) 41 28 ?
Pd1 Al1 Mg1 66.67(9) 18_455 28 ?
Pd2 Al1 Mg1 118.8(2) 41 . ?
Pd2 Al1 Mg1 66.91(11) 9 . ?
Pd1 Al1 Mg1 63.92(12) . . ?
Al1 Al1 Mg1 116.03(11) 2_565 . ?
Pd1 Al1 Mg1 66.67(9) 41 . ?
Pd1 Al1 Mg1 119.9(2) 18_455 . ?
Mg1 Al1 Mg1 64.7(2) 28 . ?
Pd2 Al1 Mg1 67.79(11) 41 23_455 ?
Pd2 Al1 Mg1 114.01(11) 9 23_455 ?
Pd1 Al1 Mg1 67.19(11) . 23_455 ?
Al1 Al1 Mg1 112.82(11) 2_565 23_455 ?
Pd1 Al1 Mg1 173.0(2) 41 23_455 ?
Pd1 Al1 Mg1 60.27(7) 18_455 23_455 ?
Mg1 Al1 Mg1 61.86(15) 28 23_455 ?
Mg1 Al1 Mg1 118.68(15) . 23_455 ?
Pd2 Al1 Mg1 67.79(11) 41 45 ?
Pd2 Al1 Mg1 114.01(11) 9 45 ?
Pd1 Al1 Mg1 67.19(11) . 45 ?
Al1 Al1 Mg1 112.82(11) 2_565 45 ?
Pd1 Al1 Mg1 60.27(7) 41 45 ?
Pd1 Al1 Mg1 173.0(2) 18_455 45 ?
Mg1 Al1 Mg1 118.68(15) 28 45 ?
Mg1 Al1 Mg1 61.86(15) . 45 ?
Mg1 Al1 Mg1 125.6(2) 23_455 45 ?
Pd2 Al1 Mg3 60.06(10) 41 37 ?
Pd2 Al1 Mg3 114.06(13) 9 37 ?
Pd1 Al1 Mg3 116.19(14) . 37 ?
Al1 Al1 Mg3 63.85(9) 2_565 37 ?
Pd1 Al1 Mg3 61.88(11) 41 37 ?
Pd1 Al1 Mg3 112.1(2) 18_455 37 ?
Mg1 Al1 Mg3 178.0(2) 28 37 ?

Mg1 All Mg3 117.26(14) . 37 ?
Mg1 All Mg3 116.2(2) 23_455 37 ?
Mg1 All Mg3 62.72(13) 45 37 ?
Pd2 All Mg3 60.06(10) 41 13_455 ?
Pd2 All Mg3 114.06(13) 9 13_455 ?
Pd1 All Mg3 116.19(14) . 13_455 ?
All All Mg3 63.85(9) 2_565 13_455 ?
Pd1 All Mg3 112.1(2) 41 13_455 ?
Pd1 All Mg3 61.88(11) 18_455 13_455 ?
Mg1 All Mg3 117.26(14) 28 13_455 ?
Mg1 All Mg3 178.0(2) . 13_455 ?
Mg1 All Mg3 62.72(13) 23_455 13_455 ?
Mg1 All Mg3 116.2(2) 45 13_455 ?
Mg3 All Mg3 60.8(2) 37 13_455 ?
All Pd2 All 132.2(2) 22_545 45 ?
All Pd2 All 110.32(11) 22_545 6_556 ?
All Pd2 All 110.32(11) 45 6_556 ?
All Pd2 All 110.32(11) 22_545 5 ?
All Pd2 All 110.32(11) 45 5 ?
All Pd2 All 62.1(2) 6_556 5 ?
All Pd2 Pd1 168.53(12) 22_545 45 ?
All Pd2 Pd1 59.30(10) 45 45 ?
All Pd2 Pd1 60.26(5) 6_556 45 ?
All Pd2 Pd1 60.26(5) 5 45 ?
All Pd2 Pd1 59.30(10) 22_545 22_545 ?
All Pd2 Pd1 168.53(12) 45 22_545 ?
All Pd2 Pd1 60.26(5) 6_556 22_545 ?
All Pd2 Pd1 60.26(5) 5 22_545 ?
Pd1 Pd2 Pd1 109.23(7) 45 22_545 ?
All Pd2 Mg3 70.21(9) 22_545 9 ?
All Pd2 Mg3 70.21(9) 45 9 ?
All Pd2 Mg3 177.7(2) 6_556 9 ?
All Pd2 Mg3 115.61(15) 5 9 ?
Pd1 Pd2 Mg3 118.93(5) 45 9 ?
Pd1 Pd2 Mg3 118.93(5) 22_545 9 ?
All Pd2 Mg3 70.21(9) 22_545 33_556 ?
All Pd2 Mg3 70.21(9) 45 33_556 ?
All Pd2 Mg3 115.61(15) 6_556 33_556 ?
All Pd2 Mg3 177.7(2) 5 33_556 ?
Pd1 Pd2 Mg3 118.93(5) 45 33_556 ?
Pd1 Pd2 Mg3 118.93(5) 22_545 33_556 ?
Mg3 Pd2 Mg3 66.7(2) 9 33_556 ?
All Pd2 Mg1 118.95(7) 22_545 31_556 ?
All Pd2 Mg1 63.44(7) 45 31_556 ?
All Pd2 Mg1 61.17(10) 6_556 31_556 ?
All Pd2 Mg1 113.85(11) 5 31_556 ?
Pd1 Pd2 Mg1 63.80(7) 45 31_556 ?
Pd1 Pd2 Mg1 112.89(7) 22_545 31_556 ?
Mg3 Pd2 Mg1 120.68(12) 9 31_556 ?
Mg3 Pd2 Mg1 64.26(12) 33_556 31_556 ?
All Pd2 Mg1 63.44(7) 22_545 32 ?
All Pd2 Mg1 118.95(7) 45 32 ?
All Pd2 Mg1 113.85(11) 6_556 32 ?
All Pd2 Mg1 61.17(10) 5 32 ?
Pd1 Pd2 Mg1 112.89(7) 45 32 ?
Pd1 Pd2 Mg1 63.80(7) 22_545 32 ?
Mg3 Pd2 Mg1 64.26(12) 9 32 ?

Mg3 Pd2 Mg1 120.68(12) 33_556 32 ?
Mg1 Pd2 Mg1 174.79(14) 31_556 32 ?
Al1 Pd2 Mg1 63.44(7) 22_545 6_556 ?
Al1 Pd2 Mg1 118.95(7) 45 6_556 ?
Al1 Pd2 Mg1 61.17(10) 6_556 6_556 ?
Al1 Pd2 Mg1 113.85(11) 5 6_556 ?
Pd1 Pd2 Mg1 112.89(7) 45 6_556 ?
Pd1 Pd2 Mg1 63.80(7) 22_545 6_556 ?
Mg3 Pd2 Mg1 120.68(12) 9 6_556 ?
Mg3 Pd2 Mg1 64.26(12) 33_556 6_556 ?
Mg1 Pd2 Mg1 61.24(14) 31_556 6_556 ?
Mg1 Pd2 Mg1 118.49(14) 32 6_556 ?
Al1 Pd2 Mg1 118.95(7) 22_545 5 ?
Al1 Pd2 Mg1 63.44(7) 45 5 ?
Al1 Pd2 Mg1 113.85(11) 6_556 5 ?
Al1 Pd2 Mg1 61.17(10) 5 5 ?
Pd1 Pd2 Mg1 63.80(7) 45 5 ?
Pd1 Pd2 Mg1 112.89(7) 22_545 5 ?
Mg3 Pd2 Mg1 64.26(12) 9 5 ?
Mg3 Pd2 Mg1 120.68(12) 33_556 5 ?
Mg1 Pd2 Mg1 118.49(14) 31_556 5 ?
Mg1 Pd2 Mg1 61.24(14) 32 5 ?
Mg1 Pd2 Mg1 174.79(14) 6_556 5 ?
Pd2 Mg3 Pd2 113.3(2) 5 29_655 ?
Pd2 Mg3 Pd1 97.65(5) 5 6 ?
Pd2 Mg3 Pd1 97.65(5) 29_655 6 ?
Pd2 Mg3 Pd1 97.65(5) 5 5 ?
Pd2 Mg3 Pd1 97.65(5) 29_655 5 ?
Pd1 Mg3 Pd1 152.0(3) 6 5 ?
Pd2 Mg3 Al1 49.74(10) 5 37 ?
Pd2 Mg3 Al1 95.2(2) 29_655 37 ?
Pd1 Mg3 Al1 147.34(14) 6 37 ?
Pd1 Mg3 Al1 53.36(7) 5 37 ?
Pd2 Mg3 Al1 95.2(2) 5 38_545 ?
Pd2 Mg3 Al1 49.74(10) 29_655 38_545 ?
Pd1 Mg3 Al1 147.34(14) 6 38_545 ?
Pd1 Mg3 Al1 53.36(7) 5 38_545 ?
Al1 Mg3 Al1 52.3(2) 37 38_545 ?
Pd2 Mg3 Al1 95.2(2) 5 13_544 ?
Pd2 Mg3 Al1 49.74(10) 29_655 13_544 ?
Pd1 Mg3 Al1 53.36(7) 6 13_544 ?
Pd1 Mg3 Al1 147.34(14) 5 13_544 ?
Al1 Mg3 Al1 119.2(2) 37 13_544 ?
Al1 Mg3 Al1 95.7(2) 38_545 13_544 ?
Pd2 Mg3 Al1 49.74(10) 5 14_554 ?
Pd2 Mg3 Al1 95.2(2) 29_655 14_554 ?
Pd1 Mg3 Al1 53.36(7) 6 14_554 ?
Pd1 Mg3 Al1 147.34(14) 5 14_554 ?
Al1 Mg3 Al1 95.7(2) 37 14_554 ?
Al1 Mg3 Al1 119.2(2) 38_545 14_554 ?
Al1 Mg3 Al1 52.3(2) 13_544 14_554 ?
Pd2 Mg3 Mg3 56.66(12) 5 25_655 ?
Pd2 Mg3 Mg3 56.66(12) 29_655 25_655 ?
Pd1 Mg3 Mg3 104.01(13) 6 25_655 ?
Pd1 Mg3 Mg3 104.01(13) 5 25_655 ?
Al1 Mg3 Mg3 59.59(12) 37 25_655 ?
Al1 Mg3 Mg3 59.59(12) 38_545 25_655 ?

All Mg3 Mg3 59.59(12) 13_544 25_655 ?
 All Mg3 Mg3 59.59(12) 14_554 25_655 ?
 Pd2 Mg3 Mg1 148.71(12) 5 11 ?
 Pd2 Mg3 Mg1 61.55(7) 29_655 11 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 55.55(8) 6 11 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 113.52(14) 5 11 ?
 All Mg3 Mg1 153.34(14) 37 11 ?
 All Mg3 Mg1 101.05(10) 38_545 11 ?
 All Mg3 Mg1 56.94(8) 13_544 11 ?
 All Mg3 Mg1 99.01(11) 14_554 11 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 110.12(14) 25_655 11 ?
 Pd2 Mg3 Mg1 61.55(7) 5 9 ?
 Pd2 Mg3 Mg1 148.71(12) 29_655 9 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 113.52(14) 6 9 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 55.55(8) 5 9 ?
 All Mg3 Mg1 56.94(8) 37 9 ?
 All Mg3 Mg1 99.01(11) 38_545 9 ?
 All Mg3 Mg1 153.34(14) 13_544 9 ?
 All Mg3 Mg1 101.05(10) 14_554 9 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 110.12(14) 25_655 9 ?
 Mg1 Mg3 Mg1 139.8(3) 11 9 ?
 Pd2 Mg3 Mg1 148.71(12) 5 34 ?
 Pd2 Mg3 Mg1 61.55(7) 29_655 34 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 113.52(14) 6 34 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 55.55(8) 5 34 ?
 All Mg3 Mg1 99.01(11) 37 34 ?
 All Mg3 Mg1 56.94(8) 38_545 34 ?
 All Mg3 Mg1 101.05(10) 13_544 34 ?
 All Mg3 Mg1 153.34(14) 14_554 34 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 110.12(14) 25_655 34 ?
 Mg1 Mg3 Mg1 59.62(14) 11 34 ?
 Mg1 Mg3 Mg1 105.6(2) 9 34 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 180.0 33 9 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 33 25 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 9 25 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 33 29 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 9 29 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 25 29 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 33 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 9 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 25 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 180.0 29 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 62.6(2) 33 34 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 117.4(2) 9 34 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 25 34 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 29 34 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 5 34 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 33 26 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 9 26 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 62.6(2) 25 26 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 29 26 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 5 26 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 34 26 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 33 6 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 9 6 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 25 6 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 117.4(2) 29 6 ?

Mg2 Pd3 Mg2 62.6(2) 5 6 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 34 6 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 26 6 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 33 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 9 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 25 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 62.6(2) 29 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 117.4(2) 5 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 34 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 26 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 6 30 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 33 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 9 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 117.4(2) 25 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 29 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 5 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 34 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 26 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 6 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 30 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 117.4(2) 33 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 62.6(2) 9 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 25 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 29 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 5 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 34 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 26 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 6 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 30 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 2 10 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 33 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 9 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 25 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 29 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 5 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 34 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 117.4(2) 26 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.35(5) 6 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 30 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 62.6(2) 2 . ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.65(5) 10 . ?

_refine_diff_density_max 1.624
_refine_diff_density_min -3.098
_refine_diff_density_rms 0.384

data_667

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\"apers

FB Chemie Uni Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaepers@web.de'

#=====

2. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\"at Dortmund

Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle

vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\"apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\"at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

#=====

3. TEXT

_publ_section_abstract

;

1/1-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd, Kapitel 5.4

Datensatz Nummer: 667

;

#=====

4. Results

_chemical_name_systematic

;

?

;


```

_chemical_name_common      ?
_chemical_formula_moiety   ?
_chemical_formula_structural ?
_chemical_formula_analytical ?
_chemical_formula_sum      'Al21.91 Ga7.44 Mg78.65 Pd38'
_chemical_formula_weight   7064.67
_chemical_melting_point    ?
_chemical_compound_source  ?

```

```

loop_
  _atom_type_symbol
  _atom_type_description
  _atom_type_scatter_dispersion_real
  _atom_type_scatter_dispersion_imag
  _atom_type_scatter_source
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Ga' 'Ga' 0.2307 1.6083
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

```

```

_symmetry_cell_setting      'cubic'
_symmetry_space_group_name_H-M 'Im-3'

```

```

loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'
'-x, y, -z'
'x, -y, -z'
'z, x, y'
'z, -x, -y'
'-z, -x, y'
'-z, x, -y'
'y, z, x'
'-y, z, -x'
'y, -z, -x'
'-y, -z, x'
'x+1/2, y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, -y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
'x+1/2, -y+1/2, -z+1/2'
'z+1/2, x+1/2, y+1/2'
'z+1/2, -x+1/2, -y+1/2'
'-z+1/2, -x+1/2, y+1/2'
'-z+1/2, x+1/2, -y+1/2'
'y+1/2, z+1/2, x+1/2'
'-y+1/2, z+1/2, -x+1/2'
'y+1/2, -z+1/2, -x+1/2'
'-y+1/2, -z+1/2, x+1/2'
'-x, -y, -z'
'x, y, -z'
'x, -y, z'
'-x, y, z'

```

```

'-z, -x, -y'
'-z, x, y'
'z, x, -y'
'z, -x, y'
'-y, -z, -x'
'y, -z, x'
'-y, z, x'
'y, z, -x'
'-x+1/2, -y+1/2, -z+1/2'
'x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
'x+1/2, -y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, y+1/2, z+1/2'
'-z+1/2, -x+1/2, -y+1/2'
'-z+1/2, x+1/2, y+1/2'
'z+1/2, x+1/2, -y+1/2'
'z+1/2, -x+1/2, y+1/2'
'-y+1/2, -z+1/2, -x+1/2'
'y+1/2, -z+1/2, x+1/2'
'-y+1/2, z+1/2, x+1/2'
'y+1/2, z+1/2, -x+1/2'

_cell_length_a      13.743(2)
_cell_length_b      13.743(2)
_cell_length_c      13.743(2)
_cell_angle_alpha   90.00
_cell_angle_beta    90.00
_cell_angle_gamma   90.00
_cell_volume        2595.6(7)
_cell_formula_units_Z  1
_cell_measurement_temperature  293(2)
_cell_measurement_reflns_used  189
_cell_measurement_theta_min    5.9
_cell_measurement_theta_max    54.16

_exptl_crystal_description  'irregular'
_exptl_crystal_colour       'silver'
_exptl_crystal_size_max     0.3
_exptl_crystal_size_mid    0.3
_exptl_crystal_size_min    0.3
_exptl_crystal_density_meas 'none'
_exptl_crystal_density_diffn  4.370
_exptl_crystal_density_method 'none'
_exptl_crystal_F_000       3120
_exptl_absorpt_coefficient_mu  9.558
_exptl_absorpt_correction_type 'none'
_exptl_absorpt_correction_T_min  ?
_exptl_absorpt_correction_T_max  ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature  293(2)
_diffn_radiation_wavelength  0.71069
_diffn_radiation_type       MoK\alpha
_diffn_radiation_source     'fine-focus sealed tube'

```

```

_diffrn_radiation_monochromator graphite
_diffrn_measurement_device 'Kappa-CCD'
_diffrn_measurement_method 'phi-scan'
_diffrn_standards_number ?
_diffrn_standards_interval_count ?
_diffrn_standards_interval_time ?
_diffrn_standards_decay_% ?
_diffrn_reflns_number 10292
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0520
_diffrn_reflns_av_sigmal/netI 0.0171
_diffrn_reflns_limit_h_min -17
_diffrn_reflns_limit_h_max 17
_diffrn_reflns_limit_k_min -17
_diffrn_reflns_limit_k_max 17
_diffrn_reflns_limit_l_min -17
_diffrn_reflns_limit_l_max 17
_diffrn_reflns_theta_min 2.96
_diffrn_reflns_theta_max 27.08
_reflns_number_total 543
_reflns_number_observed 496
_reflns_observed_criterion >2sigma(I)

_computing_data_collection 'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement 'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction 'NRCVAX Software'
_computing_structure_solution 'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics 'Schakal97'
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F^2 for ALL reflections except for 0 with very negative F^2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F^2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F^2. The observed criterion
of F^2 > 2sigma(F^2) is used only for calculating _R_factor_obs etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F^2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s^2(Fo^2)+(0.0633P)^2+8.4215P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary direct
_atom_sites_solution_secondary difmap
_atom_sites_solution_hydrogens geom
_refine_ls_hydrogen_treatment none
_refine_ls_extinction_method none
_refine_ls_extinction_coef none
_refine_ls_number_reflns 543
_refine_ls_number_parameters 39
_refine_ls_number_restraints 0
_refine_ls_R_factor_all 0.0334
_refine_ls_R_factor_obs 0.0271

```

```

_refine_ls_wR_factor_all      0.1178
_refine_ls_wR_factor_obs      0.0837
_refine_ls_goodness_of_fit_all 1.486
_refine_ls_goodness_of_fit_obs 1.109
_refine_ls_restrained_S_all    1.486
_refine_ls_restrained_S_obs    1.109
_refine_ls_shift/esd_max      0.000
_refine_ls_shift/esd_mean     0.000

```

```
loop_
```

```

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Mg1 Mg 0.1130(2) 0.3069(2) 0.1813(2) 0.0181(5) Uani 1 d . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1076(2) 0.1764(2) 0.0175(9) Uani 0.777(9) d SP .
Ga1 Ga 0.0000 0.1076(2) 0.1764(2) 0.0175(9) Uani 0.223(9) d SP .
Pd1 Pd 0.0000 0.20985(5) 0.33261(5) 0.0165(3) Uani 1 d S .
Al1 Al 0.0000 0.4009(2) 0.3341(2) 0.0162(9) Uani 0.913(9) d SP .
Ga2 Ga 0.0000 0.4009(2) 0.3341(2) 0.0162(9) Uani 0.087(9) d SP .
Pd2 Pd 0.17236(8) 0.0000 0.5000 0.0172(4) Uani 1 d S .
Mg3 Mg 0.3865(3) 0.0000 0.0000 0.0158(9) Uani 1 d S .
Pd3 Pd 0.0000 0.0000 0.0000 0.0172(6) Uani 1 d S .

```

```
loop_
```

```

_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Mg1 0.0166(12) 0.0214(12) 0.0163(11) 0.0004(9) 0.0012(9) -0.0002(9)
Mg2 0.0192(14) 0.0183(13) 0.0149(13) -0.0036(8) 0.000 0.000
Ga1 0.0192(14) 0.0183(13) 0.0149(13) -0.0036(8) 0.000 0.000
Pd1 0.0177(4) 0.0160(4) 0.0159(4) -0.0011(3) 0.000 0.000
Al1 0.0179(14) 0.0153(14) 0.0153(14) -0.0005(9) 0.000 0.000
Ga2 0.0179(14) 0.0153(14) 0.0153(14) -0.0005(9) 0.000 0.000
Pd2 0.0149(5) 0.0151(6) 0.0216(6) 0.000 0.000 0.000
Mg3 0.019(2) 0.014(2) 0.015(2) 0.000 0.000 0.000
Pd3 0.0172(6) 0.0172(6) 0.0172(6) 0.000 0.000 0.000

```

```
_geom_special_details
```

```
;
```

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

;

```

loop_
  _geom_bond_atom_site_label_1
  _geom_bond_atom_site_label_2
  _geom_bond_distance
  _geom_bond_site_symmetry_2
  _geom_bond_publ_flag
Mg1 Pd1 2.847(2) 9 ?
Mg1 Ga2 2.914(3) . ?
Mg1 Al1 2.914(3) . ?
Mg1 Pd1 2.918(3) . ?
Mg1 Ga2 2.974(3) 41 ?
Mg1 Al1 2.974(3) 41 ?
Mg1 Mg1 3.038(4) 45 ?
Mg1 Mg1 3.038(4) 41 ?
Mg1 Ga1 3.071(3) 9 ?
Mg1 Mg2 3.071(3) 9 ?
Mg1 Pd2 3.077(2) 9 ?
Mg1 Mg1 3.106(5) 28 ?
Mg2 Pd1 2.566(2) . ?
Mg2 Pd3 2.839(2) . ?
Mg2 Ga1 2.958(5) 2 ?
Mg2 Mg2 2.958(5) 2 ?
Mg2 Ga1 2.992(3) 30 ?
Mg2 Mg2 2.992(3) 30 ?
Mg2 Ga1 2.992(3) 10 ?
Mg2 Mg2 2.992(3) 10 ?
Mg2 Ga1 2.992(3) 9 ?
Mg2 Ga1 2.992(3) 5 ?
Mg2 Mg2 2.992(3) 9 ?
Mg2 Mg2 2.992(3) 5 ?
Ga1 Pd1 2.566(2) . ?
Ga1 Pd3 2.839(2) . ?
Ga1 Ga1 2.958(5) 2 ?
Ga1 Mg2 2.958(5) 2 ?
Ga1 Ga1 2.992(3) 30 ?
Ga1 Mg2 2.992(3) 30 ?
Ga1 Ga1 2.992(3) 10 ?
Ga1 Mg2 2.992(3) 10 ?
Ga1 Ga1 2.992(3) 9 ?
Ga1 Ga1 2.992(3) 5 ?
Ga1 Mg2 2.992(3) 9 ?
Ga1 Mg2 2.992(3) 5 ?
Pd1 Ga2 2.625(3) . ?
Pd1 Al1 2.625(3) . ?
Pd1 Ga2 2.7408(15) 45 ?
Pd1 Al1 2.7408(15) 45 ?
Pd1 Ga2 2.7408(15) 46_455 ?
Pd1 Al1 2.7408(15) 46_455 ?
Pd1 Pd2 2.8129(9) 41 ?
Pd1 Mg1 2.847(2) 30 ?
Pd1 Mg1 2.847(2) 5 ?
Pd1 Mg1 2.918(3) 28 ?
Al1 Pd2 2.492(2) 41 ?
Al1 Pd2 2.607(3) 9 ?
Al1 Ga2 2.724(5) 2_565 ?

```

Al1 Al1 2.724(5) 2_565 ?
 Al1 Pd1 2.7408(15) 18_455 ?
 Al1 Pd1 2.7408(15) 41 ?
 Al1 Mg1 2.914(3) 28 ?
 Al1 Mg1 2.974(3) 23_455 ?
 Al1 Mg1 2.974(3) 45 ?
 Al1 Mg3 3.080(3) 37 ?
 Ga2 Pd2 2.492(2) 41 ?
 Ga2 Pd2 2.607(3) 9 ?
 Ga2 Ga2 2.724(5) 2_565 ?
 Ga2 Al1 2.724(5) 2_565 ?
 Ga2 Pd1 2.7408(15) 18_455 ?
 Ga2 Pd1 2.7408(15) 41 ?
 Ga2 Mg1 2.914(3) 28 ?
 Ga2 Mg1 2.974(3) 23_455 ?
 Ga2 Mg1 2.974(3) 45 ?
 Ga2 Mg3 3.080(3) 37 ?
 Pd2 Ga2 2.492(2) 22_545 ?
 Pd2 Al1 2.492(2) 22_545 ?
 Pd2 Ga2 2.492(2) 45 ?
 Pd2 Al1 2.492(2) 45 ?
 Pd2 Ga2 2.607(3) 6_556 ?
 Pd2 Al1 2.607(3) 6_556 ?
 Pd2 Ga2 2.607(3) 5 ?
 Pd2 Al1 2.607(3) 5 ?
 Pd2 Pd1 2.8129(9) 45 ?
 Pd2 Pd1 2.8129(9) 22_545 ?
 Pd2 Mg3 2.836(3) 9 ?
 Pd2 Mg3 2.836(3) 33_556 ?
 Mg3 Pd2 2.836(3) 5 ?
 Mg3 Pd2 2.836(3) 29_655 ?
 Mg3 Pd1 2.9776(14) 5 ?
 Mg3 Pd1 2.9776(14) 6 ?
 Mg3 Ga2 3.080(3) 37 ?
 Mg3 Al1 3.080(3) 37 ?
 Mg3 Ga2 3.080(3) 38_545 ?
 Mg3 Al1 3.080(3) 38_545 ?
 Mg3 Ga2 3.080(3) 13_544 ?
 Mg3 Al1 3.080(3) 13_544 ?
 Mg3 Ga2 3.080(3) 14_554 ?
 Mg3 Al1 3.080(3) 14_554 ?
 Pd3 Ga1 2.839(2) 33 ?
 Pd3 Ga1 2.839(2) 29 ?
 Pd3 Ga1 2.839(2) 25 ?
 Pd3 Mg2 2.839(2) 25 ?
 Pd3 Mg2 2.839(2) 33 ?
 Pd3 Mg2 2.839(2) 29 ?
 Pd3 Mg2 2.839(2) 5 ?
 Pd3 Ga1 2.839(2) 9 ?
 Pd3 Mg2 2.839(2) 9 ?
 Pd3 Ga1 2.839(2) 5 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle

_geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
 Pd1 Mg1 Ga2 145.59(10) 9 . ?
 Pd1 Mg1 Al1 145.59(10) 9 . ?
 Ga2 Mg1 Al1 0.00(10) . . ?
 Pd1 Mg1 Pd1 158.32(9) 9 . ?
 Ga2 Mg1 Pd1 53.51(6) . . ?
 Al1 Mg1 Pd1 53.51(6) . . ?
 Pd1 Mg1 Ga2 56.13(6) 9 41 ?
 Ga2 Mg1 Ga2 90.49(6) . 41 ?
 Al1 Mg1 Ga2 90.49(6) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Ga2 143.95(10) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Al1 56.13(6) 9 41 ?
 Ga2 Mg1 Al1 90.49(6) . 41 ?
 Al1 Mg1 Al1 90.49(6) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Al1 143.95(10) . 41 ?
 Ga2 Mg1 Al1 0.00(12) 41 41 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 129.67(9) 9 45 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 59.91(8) . 45 ?
 Al1 Mg1 Mg1 59.91(8) . 45 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 63.51(5) . 45 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 102.53(11) 41 45 ?
 Al1 Mg1 Mg1 102.53(11) 41 45 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 64.32(6) 9 41 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 107.27(11) . 41 ?
 Al1 Mg1 Mg1 107.27(11) . 41 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 128.51(9) . 41 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 57.96(9) 41 41 ?
 Al1 Mg1 Mg1 57.96(9) 41 41 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 66.04(10) 45 41 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 51.23(5) 9 9 ?
 Ga2 Mg1 Ga1 146.19(10) . 9 ?
 Al1 Mg1 Ga1 146.19(10) . 9 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 107.36(8) . 9 ?
 Ga2 Mg1 Ga1 102.66(9) 41 9 ?
 Al1 Mg1 Ga1 102.66(9) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Ga1 142.64(8) 45 9 ?
 Mg1 Mg1 Ga1 106.10(8) 41 9 ?
 Pd1 Mg1 Mg2 51.23(5) 9 9 ?
 Ga2 Mg1 Mg2 146.19(10) . 9 ?
 Al1 Mg1 Mg2 146.19(10) . 9 ?
 Pd1 Mg1 Mg2 107.36(8) . 9 ?
 Ga2 Mg1 Mg2 102.66(9) 41 9 ?
 Al1 Mg1 Mg2 102.66(9) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Mg2 142.64(8) 45 9 ?
 Mg1 Mg1 Mg2 106.10(8) 41 9 ?
 Ga1 Mg1 Mg2 0.00(11) 9 9 ?
 Pd1 Mg1 Pd2 95.40(7) 9 9 ?
 Ga2 Mg1 Pd2 51.50(6) . 9 ?
 Al1 Mg1 Pd2 51.50(6) . 9 ?
 Pd1 Mg1 Pd2 98.86(7) . 9 ?
 Ga2 Mg1 Pd2 48.61(6) 41 9 ?
 Al1 Mg1 Pd2 48.61(6) 41 9 ?
 Mg1 Mg1 Pd2 100.01(9) 45 9 ?
 Mg1 Mg1 Pd2 99.17(9) 41 9 ?
 Ga1 Mg1 Pd2 117.35(9) 9 9 ?

Mg2 Mg1 Pd2 117.35(9) 9 9 ?
Pd1 Mg1 Mg1 117.88(5) 9 28 ?
Ga2 Mg1 Mg1 57.79(5) . 28 ?
Al1 Mg1 Mg1 57.79(5) . 28 ?
Pd1 Mg1 Mg1 57.85(5) . 28 ?
Ga2 Mg1 Mg1 104.15(6) 41 28 ?
Al1 Mg1 Mg1 104.15(6) 41 28 ?
Mg1 Mg1 Mg1 111.24(5) 45 28 ?
Mg1 Mg1 Mg1 158.52(5) 41 28 ?
Ga1 Mg1 Mg1 88.62(6) 9 28 ?
Mg2 Mg1 Mg1 88.62(6) 9 28 ?
Pd2 Mg1 Mg1 59.69(5) 9 28 ?
Pd1 Mg2 Pd3 178.20(10) . . ?
Pd1 Mg2 Ga1 123.19(6) . 2 ?
Pd3 Mg2 Ga1 58.61(5) . 2 ?
Pd1 Mg2 Mg2 123.19(6) . 2 ?
Pd3 Mg2 Mg2 58.61(5) . 2 ?
Ga1 Mg2 Mg2 0.00(9) 2 2 ?
Pd1 Mg2 Ga1 122.33(4) . 30 ?
Pd3 Mg2 Ga1 58.201(12) . 30 ?
Ga1 Mg2 Ga1 60.38(6) 2 30 ?
Mg2 Mg2 Ga1 60.38(6) 2 30 ?
Pd1 Mg2 Mg2 122.33(4) . 30 ?
Pd3 Mg2 Mg2 58.201(12) . 30 ?
Ga1 Mg2 Mg2 60.38(6) 2 30 ?
Mg2 Mg2 Mg2 60.38(6) 2 30 ?
Ga1 Mg2 Mg2 0.00(10) 30 30 ?
Pd1 Mg2 Ga1 120.33(7) . 10 ?
Pd3 Mg2 Ga1 58.201(12) . 10 ?
Ga1 Mg2 Ga1 108.40(6) 2 10 ?
Mg2 Mg2 Ga1 108.40(6) 2 10 ?
Ga1 Mg2 Ga1 60.0 30 10 ?
Mg2 Mg2 Ga1 60.0 30 10 ?
Pd1 Mg2 Mg2 120.33(7) . 10 ?
Pd3 Mg2 Mg2 58.201(12) . 10 ?
Ga1 Mg2 Mg2 108.40(6) 2 10 ?
Mg2 Mg2 Mg2 108.40(6) 2 10 ?
Ga1 Mg2 Mg2 60.0 30 10 ?
Mg2 Mg2 Mg2 60.0 30 10 ?
Ga1 Mg2 Mg2 0.00(12) 10 10 ?
Pd1 Mg2 Ga1 120.33(7) . 9 ?
Pd3 Mg2 Ga1 58.201(12) . 9 ?
Ga1 Mg2 Ga1 108.40(6) 2 9 ?
Mg2 Mg2 Ga1 108.40(6) 2 9 ?
Ga1 Mg2 Ga1 107.50(7) 30 9 ?
Mg2 Mg2 Ga1 107.50(7) 30 9 ?
Ga1 Mg2 Ga1 59.24(11) 10 9 ?
Mg2 Mg2 Ga1 59.24(11) 10 9 ?
Pd1 Mg2 Ga1 122.33(4) . 5 ?
Pd3 Mg2 Ga1 58.201(12) . 5 ?
Ga1 Mg2 Ga1 60.38(6) 2 5 ?
Mg2 Mg2 Ga1 60.38(6) 2 5 ?
Ga1 Mg2 Ga1 108.18(3) 30 5 ?
Mg2 Mg2 Ga1 108.18(3) 30 5 ?
Ga1 Mg2 Ga1 107.50(7) 10 5 ?
Mg2 Mg2 Ga1 107.50(7) 10 5 ?
Ga1 Mg2 Ga1 60.0 9 5 ?

Pd1 Mg2 Mg2 120.33(7) . 9 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 58.201(12) . 9 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 108.40(6) 2 9 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 108.40(6) 2 9 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 107.50(7) 30 9 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 107.50(7) 30 9 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 59.24(11) 10 9 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 59.24(11) 10 9 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 0.00(11) 9 9 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 60.0 5 9 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 122.33(4) . 5 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 58.201(12) . 5 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 60.38(6) 2 5 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 60.38(6) 2 5 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 108.18(3) 30 5 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 108.18(3) 30 5 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 107.50(7) 10 5 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 107.50(7) 10 5 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 60.0 9 5 ?
 Ga1 Mg2 Mg2 0.00(10) 5 5 ?
 Mg2 Mg2 Mg2 60.0 9 5 ?
 Pd1 Ga1 Pd3 178.20(10) . . ?
 Pd1 Ga1 Ga1 123.19(6) . 2 ?
 Pd3 Ga1 Ga1 58.61(5) . 2 ?
 Pd1 Ga1 Mg2 123.19(6) . 2 ?
 Pd3 Ga1 Mg2 58.61(5) . 2 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 0.00(9) 2 2 ?
 Pd1 Ga1 Ga1 122.33(4) . 30 ?
 Pd3 Ga1 Ga1 58.201(12) . 30 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 60.38(6) 2 30 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 60.38(6) 2 30 ?
 Pd1 Ga1 Mg2 122.33(4) . 30 ?
 Pd3 Ga1 Mg2 58.201(12) . 30 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 60.38(6) 2 30 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 60.38(6) 2 30 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 0.00(10) 30 30 ?
 Pd1 Ga1 Ga1 120.33(7) . 10 ?
 Pd3 Ga1 Ga1 58.201(12) . 10 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 108.40(6) 2 10 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 108.40(6) 2 10 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 60.0 30 10 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 60.0 30 10 ?
 Pd1 Ga1 Mg2 120.33(7) . 10 ?
 Pd3 Ga1 Mg2 58.201(12) . 10 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 108.40(6) 2 10 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 108.40(6) 2 10 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 60.0 30 10 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 60.0 30 10 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 0.00(12) 10 10 ?
 Pd1 Ga1 Ga1 120.33(7) . 9 ?
 Pd3 Ga1 Ga1 58.201(12) . 9 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 108.40(6) 2 9 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 108.40(6) 2 9 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 107.50(7) 30 9 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 107.50(7) 30 9 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 59.24(11) 10 9 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 59.24(11) 10 9 ?

Pd1 Ga1 Ga1 122.33(4) . 5 ?
 Pd3 Ga1 Ga1 58.201(12) . 5 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 60.38(6) 2 5 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 60.38(6) 2 5 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 108.18(3) 30 5 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 108.18(3) 30 5 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 107.50(7) 10 5 ?
 Mg2 Ga1 Ga1 107.50(7) 10 5 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 60.0 9 5 ?
 Pd1 Ga1 Mg2 120.33(7) . 9 ?
 Pd3 Ga1 Mg2 58.201(12) . 9 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 108.40(6) 2 9 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 108.40(6) 2 9 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 107.50(7) 30 9 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 107.50(7) 30 9 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 59.24(11) 10 9 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 59.24(11) 10 9 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 0.00(11) 9 9 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 60.0 5 9 ?
 Pd1 Ga1 Mg2 122.33(4) . 5 ?
 Pd3 Ga1 Mg2 58.201(12) . 5 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 60.38(6) 2 5 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 60.38(6) 2 5 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 108.18(3) 30 5 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 108.18(3) 30 5 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 107.50(7) 10 5 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 107.50(7) 10 5 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 60.0 9 5 ?
 Ga1 Ga1 Mg2 0.00(10) 5 5 ?
 Mg2 Ga1 Mg2 60.0 9 5 ?
 Ga1 Pd1 Mg2 0.00(10) . . ?
 Ga1 Pd1 Ga2 123.64(8) . . ?
 Mg2 Pd1 Ga2 123.64(8) . . ?
 Ga1 Pd1 Al1 123.64(8) . . ?
 Mg2 Pd1 Al1 123.64(8) . . ?
 Ga2 Pd1 Al1 0.00(10) . . ?
 Ga1 Pd1 Ga2 125.57(7) . 45 ?
 Mg2 Pd1 Ga2 125.57(7) . 45 ?
 Ga2 Pd1 Ga2 102.35(2) . 45 ?
 Al1 Pd1 Ga2 102.35(2) . 45 ?
 Ga1 Pd1 Al1 125.57(7) . 45 ?
 Mg2 Pd1 Al1 125.57(7) . 45 ?
 Ga2 Pd1 Al1 102.35(2) . 45 ?
 Al1 Pd1 Al1 102.35(2) . 45 ?
 Ga2 Pd1 Al1 0.00(13) 45 45 ?
 Ga1 Pd1 Ga2 125.57(7) . 46_455 ?
 Mg2 Pd1 Ga2 125.57(7) . 46_455 ?
 Ga2 Pd1 Ga2 102.35(2) . 46_455 ?
 Al1 Pd1 Ga2 102.35(2) . 46_455 ?
 Ga2 Pd1 Ga2 59.60(9) 45 46_455 ?
 Al1 Pd1 Ga2 59.60(9) 45 46_455 ?
 Ga1 Pd1 Al1 125.57(7) . 46_455 ?
 Mg2 Pd1 Al1 125.57(7) . 46_455 ?
 Ga2 Pd1 Al1 102.35(2) . 46_455 ?
 Al1 Pd1 Al1 102.35(2) . 46_455 ?
 Ga2 Pd1 Al1 59.60(9) 45 46_455 ?
 Al1 Pd1 Al1 59.60(9) 45 46_455 ?

Ga2 Pd1 Al1 0.00(13) 46_455 46_455 ?
 Ga1 Pd1 Pd2 178.06(7) . 41 ?
 Mg2 Pd1 Pd2 178.06(7) . 41 ?
 Ga2 Pd1 Pd2 54.42(6) . 41 ?
 Al1 Pd1 Pd2 54.42(6) . 41 ?
 Ga2 Pd1 Pd2 55.97(5) 45 41 ?
 Al1 Pd1 Pd2 55.97(5) 45 41 ?
 Ga2 Pd1 Pd2 55.97(5) 46_455 41 ?
 Al1 Pd1 Pd2 55.97(5) 46_455 41 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 68.91(6) . 30 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 68.91(6) . 30 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 117.94(5) . 30 ?
 Al1 Pd1 Mg1 117.94(5) . 30 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 115.85(7) 45 30 ?
 Al1 Pd1 Mg1 115.85(7) 45 30 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 64.29(6) 46_455 30 ?
 Al1 Pd1 Mg1 64.29(6) 46_455 30 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 111.75(5) 41 30 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 68.91(6) . 5 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 68.91(6) . 5 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 117.94(5) . 5 ?
 Al1 Pd1 Mg1 117.94(5) . 5 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 64.29(6) 45 5 ?
 Al1 Pd1 Mg1 64.29(6) 45 5 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 115.85(7) 46_455 5 ?
 Al1 Pd1 Mg1 115.85(7) 46_455 5 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 111.75(5) 41 5 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 122.13(10) 30 5 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 69.75(6) . 28 ?
 Mg2 Pd1 Mg1 69.75(6) . 28 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 63.15(6) . 28 ?
 Al1 Pd1 Mg1 63.15(6) . 28 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 164.44(7) 45 28 ?
 Al1 Pd1 Mg1 164.44(7) 45 28 ?
 Ga2 Pd1 Mg1 115.75(7) 46_455 28 ?
 Al1 Pd1 Mg1 115.75(7) 46_455 28 ?
 Pd2 Pd1 Mg1 108.65(5) 41 28 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 70.10(9) 30 28 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 126.23(7) 5 28 ?
 Pd2 Al1 Pd2 172.32(11) 41 9 ?
 Pd2 Al1 Pd1 66.62(6) 41 . ?
 Pd2 Al1 Pd1 121.06(9) 9 . ?
 Pd2 Al1 Ga2 113.82(6) 41 2_565 ?
 Pd2 Al1 Ga2 58.50(5) 9 2_565 ?
 Pd1 Al1 Ga2 179.56(5) . 2_565 ?
 Pd2 Al1 Al1 113.82(6) 41 2_565 ?
 Pd2 Al1 Al1 58.50(5) 9 2_565 ?
 Pd1 Al1 Al1 179.56(5) . 2_565 ?
 Ga2 Al1 Al1 0.00(10) 2_565 2_565 ?
 Pd2 Al1 Pd1 113.72(5) 41 18_455 ?
 Pd2 Al1 Pd1 63.41(5) 9 18_455 ?
 Pd1 Al1 Pd1 119.69(5) . 18_455 ?
 Ga2 Al1 Pd1 60.20(4) 2_565 18_455 ?
 Al1 Al1 Pd1 60.20(4) 2_565 18_455 ?
 Pd2 Al1 Pd1 113.72(5) 41 41 ?
 Pd2 Al1 Pd1 63.41(5) 9 41 ?
 Pd1 Al1 Pd1 119.69(5) . 41 ?

Ga2 Al1 Pd1 60.20(5) 2_565 41 ?
 Al1 Al1 Pd1 60.20(5) 2_565 41 ?
 Pd1 Al1 Pd1 114.14(9) 18_455 41 ?
 Pd2 Al1 Mg1 118.71(9) 41 28 ?
 Pd2 Al1 Mg1 67.48(7) 9 28 ?
 Pd1 Al1 Mg1 63.34(7) . 28 ?
 Ga2 Al1 Mg1 116.31(6) 2_565 28 ?
 Al1 Al1 Mg1 116.31(6) 2_565 28 ?
 Pd1 Al1 Mg1 67.30(6) 18_455 28 ?
 Pd1 Al1 Mg1 120.58(9) 41 28 ?
 Pd2 Al1 Mg1 118.71(9) 41 . ?
 Pd2 Al1 Mg1 67.48(7) 9 . ?
 Pd1 Al1 Mg1 63.34(7) . . ?
 Ga2 Al1 Mg1 116.31(6) 2_565 . ?
 Al1 Al1 Mg1 116.31(6) 2_565 . ?
 Pd1 Al1 Mg1 120.58(9) 18_455 . ?
 Pd1 Al1 Mg1 67.30(6) 41 . ?
 Mg1 Al1 Mg1 64.41(11) 28 . ?
 Pd2 Al1 Mg1 67.85(6) 41 23_455 ?
 Pd2 Al1 Mg1 114.01(6) 9 23_455 ?
 Pd1 Al1 Mg1 67.81(6) . 23_455 ?
 Ga2 Al1 Mg1 112.31(6) 2_565 23_455 ?
 Al1 Al1 Mg1 112.31(6) 2_565 23_455 ?
 Pd1 Al1 Mg1 59.58(5) 18_455 23_455 ?
 Pd1 Al1 Mg1 172.49(10) 41 23_455 ?
 Mg1 Al1 Mg1 62.13(10) 28 23_455 ?
 Mg1 Al1 Mg1 118.92(8) . 23_455 ?
 Pd2 Al1 Mg1 67.85(6) 41 45 ?
 Pd2 Al1 Mg1 114.01(6) 9 45 ?
 Pd1 Al1 Mg1 67.81(6) . 45 ?
 Ga2 Al1 Mg1 112.31(6) 2_565 45 ?
 Al1 Al1 Mg1 112.31(6) 2_565 45 ?
 Pd1 Al1 Mg1 172.49(10) 18_455 45 ?
 Pd1 Al1 Mg1 59.58(5) 41 45 ?
 Mg1 Al1 Mg1 118.92(8) 28 45 ?
 Mg1 Al1 Mg1 62.13(10) . 45 ?
 Mg1 Al1 Mg1 126.31(12) 23_455 45 ?
 Pd2 Al1 Mg3 60.09(5) 41 37 ?
 Pd2 Al1 Mg3 113.58(8) 9 37 ?
 Pd1 Al1 Mg3 116.61(8) . 37 ?
 Ga2 Al1 Mg3 63.75(5) 2_565 37 ?
 Al1 Al1 Mg3 63.75(5) 2_565 37 ?
 Pd1 Al1 Mg3 111.61(10) 18_455 37 ?
 Pd1 Al1 Mg3 61.20(7) 41 37 ?
 Mg1 Al1 Mg3 178.11(10) 28 37 ?
 Mg1 Al1 Mg3 117.37(9) . 37 ?
 Mg1 Al1 Mg3 116.02(11) 23_455 37 ?
 Mg1 Al1 Mg3 62.29(8) 45 37 ?
 Pd2 Ga2 Pd2 172.32(11) 41 9 ?
 Pd2 Ga2 Pd1 66.62(6) 41 . ?
 Pd2 Ga2 Pd1 121.06(9) 9 . ?
 Pd2 Ga2 Ga2 113.82(6) 41 2_565 ?
 Pd2 Ga2 Ga2 58.50(5) 9 2_565 ?
 Pd1 Ga2 Ga2 179.56(5) . 2_565 ?
 Pd2 Ga2 Al1 113.82(6) 41 2_565 ?
 Pd2 Ga2 Al1 58.50(5) 9 2_565 ?
 Pd1 Ga2 Al1 179.56(5) . 2_565 ?

Ga2 Ga2 Al1 0.00(10) 2_565 2_565 ?
 Pd2 Ga2 Pd1 113.72(5) 41 18_455 ?
 Pd2 Ga2 Pd1 63.41(5) 9 18_455 ?
 Pd1 Ga2 Pd1 119.69(5) . 18_455 ?
 Ga2 Ga2 Pd1 60.20(4) 2_565 18_455 ?
 Al1 Ga2 Pd1 60.20(4) 2_565 18_455 ?
 Pd2 Ga2 Pd1 113.72(5) 41 41 ?
 Pd2 Ga2 Pd1 63.41(5) 9 41 ?
 Pd1 Ga2 Pd1 119.69(5) . 41 ?
 Ga2 Ga2 Pd1 60.20(5) 2_565 41 ?
 Al1 Ga2 Pd1 60.20(5) 2_565 41 ?
 Pd1 Ga2 Pd1 114.14(9) 18_455 41 ?
 Pd2 Ga2 Mg1 118.71(9) 41 28 ?
 Pd2 Ga2 Mg1 67.48(7) 9 28 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 63.34(7) . 28 ?
 Ga2 Ga2 Mg1 116.31(6) 2_565 28 ?
 Al1 Ga2 Mg1 116.31(6) 2_565 28 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 67.30(6) 18_455 28 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 120.58(9) 41 28 ?
 Pd2 Ga2 Mg1 118.71(9) 41 . ?
 Pd2 Ga2 Mg1 67.48(7) 9 . ?
 Pd1 Ga2 Mg1 63.34(7) . . ?
 Ga2 Ga2 Mg1 116.31(6) 2_565 . ?
 Al1 Ga2 Mg1 116.31(6) 2_565 . ?
 Pd1 Ga2 Mg1 120.58(9) 18_455 . ?
 Pd1 Ga2 Mg1 67.30(6) 41 . ?
 Mg1 Ga2 Mg1 64.41(11) 28 . ?
 Pd2 Ga2 Mg1 67.85(6) 41 23_455 ?
 Pd2 Ga2 Mg1 114.01(6) 9 23_455 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 67.81(6) . 23_455 ?
 Ga2 Ga2 Mg1 112.31(6) 2_565 23_455 ?
 Al1 Ga2 Mg1 112.31(6) 2_565 23_455 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 59.58(5) 18_455 23_455 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 172.49(10) 41 23_455 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 62.13(10) 28 23_455 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 118.92(8) . 23_455 ?
 Pd2 Ga2 Mg1 67.85(6) 41 45 ?
 Pd2 Ga2 Mg1 114.01(6) 9 45 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 67.81(6) . 45 ?
 Ga2 Ga2 Mg1 112.31(6) 2_565 45 ?
 Al1 Ga2 Mg1 112.31(6) 2_565 45 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 172.49(10) 18_455 45 ?
 Pd1 Ga2 Mg1 59.58(5) 41 45 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 118.92(8) 28 45 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 62.13(10) . 45 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 126.31(12) 23_455 45 ?
 Pd2 Ga2 Mg3 60.09(5) 41 37 ?
 Pd2 Ga2 Mg3 113.58(8) 9 37 ?
 Pd1 Ga2 Mg3 116.61(8) . 37 ?
 Ga2 Ga2 Mg3 63.75(5) 2_565 37 ?
 Al1 Ga2 Mg3 63.75(5) 2_565 37 ?
 Pd1 Ga2 Mg3 111.61(10) 18_455 37 ?
 Pd1 Ga2 Mg3 61.20(7) 41 37 ?
 Mg1 Ga2 Mg3 178.11(10) 28 37 ?
 Mg1 Ga2 Mg3 117.37(9) . 37 ?
 Mg1 Ga2 Mg3 116.02(11) 23_455 37 ?
 Mg1 Ga2 Mg3 62.29(8) 45 37 ?

Ga2 Pd2 Al1 0.00(11) 22_545 22_545 ?
 Ga2 Pd2 Ga2 132.36(12) 22_545 45 ?
 Al1 Pd2 Ga2 132.36(12) 22_545 45 ?
 Ga2 Pd2 Al1 132.36(12) 22_545 45 ?
 Al1 Pd2 Al1 132.36(12) 22_545 45 ?
 Ga2 Pd2 Al1 0.00(11) 45 45 ?
 Ga2 Pd2 Ga2 110.14(6) 22_545 6_556 ?
 Al1 Pd2 Ga2 110.14(6) 22_545 6_556 ?
 Ga2 Pd2 Ga2 110.14(6) 45 6_556 ?
 Al1 Pd2 Ga2 110.14(6) 45 6_556 ?
 Ga2 Pd2 Al1 110.14(6) 22_545 6_556 ?
 Al1 Pd2 Al1 110.14(6) 22_545 6_556 ?
 Ga2 Pd2 Al1 110.14(6) 45 6_556 ?
 Al1 Pd2 Al1 110.14(6) 45 6_556 ?
 Ga2 Pd2 Al1 0.00(11) 6_556 6_556 ?
 Ga2 Pd2 Ga2 110.14(6) 22_545 5 ?
 Al1 Pd2 Ga2 110.14(6) 22_545 5 ?
 Ga2 Pd2 Ga2 110.14(6) 45 5 ?
 Al1 Pd2 Ga2 110.14(6) 45 5 ?
 Ga2 Pd2 Ga2 63.01(11) 6_556 5 ?
 Al1 Pd2 Ga2 63.01(11) 6_556 5 ?
 Ga2 Pd2 Al1 110.14(6) 22_545 5 ?
 Al1 Pd2 Al1 110.14(6) 22_545 5 ?
 Ga2 Pd2 Al1 110.14(6) 45 5 ?
 Al1 Pd2 Al1 110.14(6) 45 5 ?
 Ga2 Pd2 Al1 63.01(11) 6_556 5 ?
 Al1 Pd2 Al1 63.01(11) 6_556 5 ?
 Ga2 Pd2 Al1 0.00(10) 5 5 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 168.68(7) 22_545 45 ?
 Al1 Pd2 Pd1 168.68(7) 22_545 45 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 58.95(6) 45 45 ?
 Al1 Pd2 Pd1 58.95(6) 45 45 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 60.62(3) 6_556 45 ?
 Al1 Pd2 Pd1 60.62(3) 6_556 45 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 60.62(3) 5 45 ?
 Al1 Pd2 Pd1 60.62(3) 5 45 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 58.95(6) 22_545 22_545 ?
 Al1 Pd2 Pd1 58.95(6) 22_545 22_545 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 168.68(7) 45 22_545 ?
 Al1 Pd2 Pd1 168.68(7) 45 22_545 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 60.62(3) 6_556 22_545 ?
 Al1 Pd2 Pd1 60.62(3) 6_556 22_545 ?
 Ga2 Pd2 Pd1 60.62(3) 5 22_545 ?
 Al1 Pd2 Pd1 60.62(3) 5 22_545 ?
 Pd1 Pd2 Pd1 109.73(5) 45 22_545 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 70.29(5) 22_545 9 ?
 Al1 Pd2 Mg3 70.29(5) 22_545 9 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 70.29(5) 45 9 ?
 Al1 Pd2 Mg3 70.29(5) 45 9 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 178.14(10) 6_556 9 ?
 Al1 Pd2 Mg3 178.14(10) 6_556 9 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 115.13(9) 5 9 ?
 Al1 Pd2 Mg3 115.13(9) 5 9 ?
 Pd1 Pd2 Mg3 118.73(3) 45 9 ?
 Pd1 Pd2 Mg3 118.73(3) 22_545 9 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 70.29(5) 22_545 33_556 ?
 Al1 Pd2 Mg3 70.29(5) 22_545 33_556 ?

Ga2 Pd2 Mg3 70.29(5) 45 33_556 ?
 Al1 Pd2 Mg3 70.29(5) 45 33_556 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 115.13(9) 6_556 33_556 ?
 Al1 Pd2 Mg3 115.13(9) 6_556 33_556 ?
 Ga2 Pd2 Mg3 178.14(10) 5 33_556 ?
 Al1 Pd2 Mg3 178.14(10) 5 33_556 ?
 Pd1 Pd2 Mg3 118.73(3) 45 33_556 ?
 Pd1 Pd2 Mg3 118.73(3) 22_545 33_556 ?
 Mg3 Pd2 Mg3 66.7(2) 9 33_556 ?
 Pd2 Mg3 Pd2 113.3(2) 5 29_655 ?
 Pd2 Mg3 Pd1 97.86(3) 5 5 ?
 Pd2 Mg3 Pd1 97.86(3) 29_655 5 ?
 Pd2 Mg3 Pd1 97.86(3) 5 6 ?
 Pd2 Mg3 Pd1 97.86(3) 29_655 6 ?
 Pd1 Mg3 Pd1 151.2(2) 5 6 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 49.62(6) 5 37 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 95.21(11) 29_655 37 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 53.77(4) 5 37 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 147.45(9) 6 37 ?
 Pd2 Mg3 Al1 49.62(6) 5 37 ?
 Pd2 Mg3 Al1 95.21(11) 29_655 37 ?
 Pd1 Mg3 Al1 53.77(4) 5 37 ?
 Pd1 Mg3 Al1 147.45(9) 6 37 ?
 Ga2 Mg3 Al1 0.00(10) 37 37 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 95.21(11) 5 38_545 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 49.62(6) 29_655 38_545 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 53.77(4) 5 38_545 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 147.45(9) 6 38_545 ?
 Ga2 Mg3 Ga2 52.49(10) 37 38_545 ?
 Al1 Mg3 Ga2 52.49(10) 37 38_545 ?
 Pd2 Mg3 Al1 95.21(11) 5 38_545 ?
 Pd2 Mg3 Al1 49.62(6) 29_655 38_545 ?
 Pd1 Mg3 Al1 53.77(4) 5 38_545 ?
 Pd1 Mg3 Al1 147.45(9) 6 38_545 ?
 Ga2 Mg3 Al1 52.49(10) 37 38_545 ?
 Al1 Mg3 Al1 52.49(10) 37 38_545 ?
 Ga2 Mg3 Al1 0.00(10) 38_545 38_545 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 95.21(11) 5 13_544 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 49.62(6) 29_655 13_544 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 147.45(9) 5 13_544 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 53.77(4) 6 13_544 ?
 Ga2 Mg3 Ga2 119.2(2) 37 13_544 ?
 Al1 Mg3 Ga2 119.2(2) 37 13_544 ?
 Ga2 Mg3 Ga2 95.51(12) 38_545 13_544 ?
 Al1 Mg3 Ga2 95.51(12) 38_545 13_544 ?
 Pd2 Mg3 Al1 95.21(11) 5 13_544 ?
 Pd2 Mg3 Al1 49.62(6) 29_655 13_544 ?
 Pd1 Mg3 Al1 147.45(9) 5 13_544 ?
 Pd1 Mg3 Al1 53.77(4) 6 13_544 ?
 Ga2 Mg3 Al1 119.2(2) 37 13_544 ?
 Al1 Mg3 Al1 119.2(2) 37 13_544 ?
 Ga2 Mg3 Al1 95.51(12) 38_545 13_544 ?
 Al1 Mg3 Al1 95.51(12) 38_545 13_544 ?
 Ga2 Mg3 Al1 0.00(10) 13_544 13_544 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 49.62(6) 5 14_554 ?
 Pd2 Mg3 Ga2 95.21(11) 29_655 14_554 ?
 Pd1 Mg3 Ga2 147.45(9) 5 14_554 ?

Pd1 Mg3 Ga2 53.77(4) 6 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Ga2 95.51(12) 37 14_554 ?
 Al1 Mg3 Ga2 95.51(12) 37 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Ga2 119.2(2) 38_545 14_554 ?
 Al1 Mg3 Ga2 119.2(2) 38_545 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Ga2 52.49(10) 13_544 14_554 ?
 Al1 Mg3 Ga2 52.49(10) 13_544 14_554 ?
 Pd2 Mg3 Al1 49.62(6) 5 14_554 ?
 Pd2 Mg3 Al1 95.21(11) 29_655 14_554 ?
 Pd1 Mg3 Al1 147.45(9) 5 14_554 ?
 Pd1 Mg3 Al1 53.77(4) 6 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Al1 95.51(12) 37 14_554 ?
 Al1 Mg3 Al1 95.51(12) 37 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Al1 119.2(2) 38_545 14_554 ?
 Al1 Mg3 Al1 119.2(2) 38_545 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Al1 52.49(10) 13_544 14_554 ?
 Al1 Mg3 Al1 52.49(10) 13_544 14_554 ?
 Ga2 Mg3 Al1 0.00(10) 14_554 14_554 ?
 Ga1 Pd3 Ga1 63.60(2) 33 29 ?
 Ga1 Pd3 Ga1 63.60(2) 33 25 ?
 Ga1 Pd3 Ga1 63.60(2) 29 25 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) 33 25 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) 29 25 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 0.00(9) 25 25 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 0.00(9) 33 33 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) 29 33 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) 25 33 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.60(2) 25 33 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) 33 29 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 0.00(9) 29 29 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) 25 29 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.60(2) 25 29 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.60(2) 33 29 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 116.40(2) 33 . ?
 Ga1 Pd3 Mg2 116.40(2) 29 . ?
 Ga1 Pd3 Mg2 180.0 25 . ?
 Mg2 Pd3 Mg2 180.0 25 . ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.40(2) 33 . ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.40(2) 29 . ?
 Ga1 Pd3 Ga1 116.40(2) 33 . ?
 Ga1 Pd3 Ga1 116.40(2) 29 . ?
 Ga1 Pd3 Ga1 180.0 25 . ?
 Mg2 Pd3 Ga1 180.0 25 . ?
 Mg2 Pd3 Ga1 116.40(2) 33 . ?
 Mg2 Pd3 Ga1 116.40(2) 29 . ?
 Mg2 Pd3 Ga1 0.00(9) . . ?
 Ga1 Pd3 Mg2 116.40(2) 33 5 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 180.0 29 5 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 116.40(2) 25 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.40(2) 25 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 116.40(2) 33 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 180.0 29 5 ?
 Mg2 Pd3 Mg2 63.60(2) . 5 ?
 Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) . 5 ?
 Ga1 Pd3 Ga1 180.0 33 9 ?
 Ga1 Pd3 Ga1 116.40(2) 29 9 ?
 Ga1 Pd3 Ga1 116.40(2) 25 9 ?

Mg2 Pd3 Ga1 116.40(2) 25 9 ?
Mg2 Pd3 Ga1 180.0 33 9 ?
Mg2 Pd3 Ga1 116.40(2) 29 9 ?
Mg2 Pd3 Ga1 63.60(2) . 9 ?
Ga1 Pd3 Ga1 63.60(2) . 9 ?
Mg2 Pd3 Ga1 63.60(2) 5 9 ?
Ga1 Pd3 Mg2 180.0 33 9 ?
Ga1 Pd3 Mg2 116.40(2) 29 9 ?
Ga1 Pd3 Mg2 116.40(2) 25 9 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.40(2) 25 9 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 33 9 ?
Mg2 Pd3 Mg2 116.40(2) 29 9 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.60(2) . 9 ?
Ga1 Pd3 Mg2 63.60(2) . 9 ?
Mg2 Pd3 Mg2 63.60(2) 5 9 ?
Ga1 Pd3 Mg2 0.00(9) 9 9 ?
Ga1 Pd3 Ga1 116.40(2) 33 5 ?
Ga1 Pd3 Ga1 180.0 29 5 ?
Ga1 Pd3 Ga1 116.40(2) 25 5 ?
Mg2 Pd3 Ga1 116.40(2) 25 5 ?
Mg2 Pd3 Ga1 116.40(2) 33 5 ?
Mg2 Pd3 Ga1 180.0 29 5 ?
Mg2 Pd3 Ga1 63.60(2) . 5 ?
Ga1 Pd3 Ga1 63.60(2) . 5 ?
Mg2 Pd3 Ga1 0.00(9) 5 5 ?
Ga1 Pd3 Ga1 63.60(2) 9 5 ?
Mg2 Pd3 Ga1 63.60(2) 9 5 ?

_refine_diff_density_max 1.075
_refine_diff_density_min -2.743
_refine_diff_density_rms 0.462

data_741

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\apers

FB Chemie Uni Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaepers@web.de'

#=====

2. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\at Dortmund

Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle

vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

#=====

3. TEXT

_publ_section_abstract

;

cF-Approximant im System Ga-Mg-Pd, Kapitel 5.5

Datensatz Nummer: 741

;

#=====

4. Results

_chemical_name_systematic

;

?

;

_chemical_name_common ?

```

_chemical_formula_moiety      ?
_chemical_formula_structural  ?
_chemical_formula_analytical  ?
_chemical_formula_sum         'Ga34.48 Mg176.48 Pd53.04'
_chemical_formula_weight      12336.75
_chemical_melting_point       ?
_chemical_compound_source     ?

```

```
loop_
```

```

_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Ga' 'Ga' 0.2307 1.6083
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

```

```

_symmetry_cell_setting        'cubic'
_symmetry_space_group_name_H-M 'Fm-3'

```

```
loop_
```

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'
'x, -y, -z'
'-x, y, -z'
'z, x, y'
'y, z, x'
'-z, -x, y'
'-y, z, -x'
'z, -x, -y'
'-y, -z, x'
'-z, x, -y'
'y, -z, -x'
'x, y+1/2, z+1/2'
'-x, -y+1/2, z+1/2'
'x, -y+1/2, -z+1/2'
'-x, y+1/2, -z+1/2'
'z, x+1/2, y+1/2'
'y, z+1/2, x+1/2'
'-z, -x+1/2, y+1/2'
'-y, z+1/2, -x+1/2'
'z, -x+1/2, -y+1/2'
'-y, -z+1/2, x+1/2'
'-z, x+1/2, -y+1/2'
'y, -z+1/2, -x+1/2'
'x+1/2, y, z+1/2'
'-x+1/2, -y, z+1/2'
'x+1/2, -y, -z+1/2'
'-x+1/2, y, -z+1/2'
'z+1/2, x, y+1/2'
'y+1/2, z, x+1/2'
'-z+1/2, -x, y+1/2'

```

'-y+1/2, z, -x+1/2'
 'z+1/2, -x, -y+1/2'
 '-y+1/2, -z, x+1/2'
 '-z+1/2, x, -y+1/2'
 'y+1/2, -z, -x+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 '-x+1/2, -y+1/2, z'
 'x+1/2, -y+1/2, -z'
 '-x+1/2, y+1/2, -z'
 'z+1/2, x+1/2, y'
 'y+1/2, z+1/2, x'
 '-z+1/2, -x+1/2, y'
 '-y+1/2, z+1/2, -x'
 'z+1/2, -x+1/2, -y'
 '-y+1/2, -z+1/2, x'
 '-z+1/2, x+1/2, -y'
 'y+1/2, -z+1/2, -x'
 '-x, -y, -z'
 'x, y, -z'
 '-x, y, z'
 'x, -y, z'
 '-z, -x, -y'
 '-y, -z, -x'
 'z, x, -y'
 'y, -z, x'
 '-z, x, y'
 'y, z, -x'
 'z, -x, y'
 '-y, z, x'
 '-x, -y+1/2, -z+1/2'
 'x, y+1/2, -z+1/2'
 '-x, y+1/2, z+1/2'
 'x, -y+1/2, z+1/2'
 '-z, -x+1/2, -y+1/2'
 '-y, -z+1/2, -x+1/2'
 'z, x+1/2, -y+1/2'
 'y, -z+1/2, x+1/2'
 '-z, x+1/2, y+1/2'
 'y, z+1/2, -x+1/2'
 'z, -x+1/2, y+1/2'
 '-y, z+1/2, x+1/2'
 '-x+1/2, -y, -z+1/2'
 'x+1/2, y, -z+1/2'
 '-x+1/2, y, z+1/2'
 'x+1/2, -y, z+1/2'
 '-z+1/2, -x, -y+1/2'
 '-y+1/2, -z, -x+1/2'
 'z+1/2, x, -y+1/2'
 'y+1/2, -z, x+1/2'
 '-z+1/2, x, y+1/2'
 'y+1/2, z, -x+1/2'
 'z+1/2, -x, y+1/2'
 '-y+1/2, z, x+1/2'
 '-x+1/2, -y+1/2, -z'
 'x+1/2, y+1/2, -z'
 '-x+1/2, y+1/2, z'
 'x+1/2, -y+1/2, z'

```

'-z+1/2, -x+1/2, -y'
'-y+1/2, -z+1/2, -x'
'z+1/2, x+1/2, -y'
'y+1/2, -z+1/2, x'
'-z+1/2, x+1/2, y'
'y+1/2, z+1/2, -x'
'z+1/2, -x+1/2, y'
'-y+1/2, z+1/2, x'

_cell_length_a      17.057(5)
_cell_length_b      17.057(5)
_cell_length_c      17.057(5)
_cell_angle_alpha   90.000(5)
_cell_angle_beta    90.000(5)
_cell_angle_gamma   90.000(5)
_cell_volume        4962.6(25)
_cell_formula_units_Z  1
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used 184
_cell_measurement_theta_min 8.3
_cell_measurement_theta_max 51.3

_exptl_crystal_description 'irregular'
_exptl_crystal_colour 'silver'
_exptl_crystal_size_max 0.3
_exptl_crystal_size_mid 0.2
_exptl_crystal_size_min 0.2
_exptl_crystal_density_meas 'none'
_exptl_crystal_density_diffn 4.488
_exptl_crystal_density_method 'none'
_exptl_crystal_F_000 6076
_exptl_absorpt_coefficient_mu 13.054
_exptl_absorpt_correction_type 'none'
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
_diffn_radiation_wavelength 0.71069
_diffn_radiation_type MoKa
_diffn_radiation_source 'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator graphite
_diffn_measurement_device 'Kappa-CCD'
_diffn_measurement_method 'phi-scan'
_diffn_standards_number ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_% ?
_diffn_reflns_number 6216
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0403
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0182
_diffn_reflns_limit_h_min -19
_diffn_reflns_limit_h_max 19

```

```

_diffrn_reflms_limit_k_min    -20
_diffrn_reflms_limit_k_max    20
_diffrn_reflms_limit_l_min    -20
_diffrn_reflms_limit_l_max    20
_diffrn_reflms_theta_min      4.14
_diffrn_reflms_theta_max      25.66
_reflms_number_total          433
_reflms_number_observed       410
_reflms_observed_criterion     >2sigma(I)

_computing_data_collection     'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement     'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction      'NRCVAX Software'
_computing_structure_solution  'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics  ?
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F2. The observed criterion
of F2 > 2sigma(F2) is used only for calculating _R_factor_obs etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type        full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s2(Fo2)+( 0.0321P)2+15.7386P] where P=(Fo2+2Fc2)/3'
_refine_ls_hydrogen_treatment ?
_refine_ls_extinction_method  SHELXL
_refine_ls_extinction_coef    0.00029(2)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc*=kFc[1+0.001xFc2I3/sin(2q)]-1/4'
_refine_ls_number_reflms      433
_refine_ls_number_parameters   35
_refine_ls_number_restraints   0
_refine_ls_R_factor_all        0.0248
_refine_ls_R_factor_obs        0.0215
_refine_ls_wR_factor_all       0.0544
_refine_ls_wR_factor_obs       0.0532
_refine_ls_goodness_of_fit_all  1.221
_refine_ls_goodness_of_fit_obs  1.231
_refine_ls_restrained_S_all    1.221
_refine_ls_restrained_S_obs    1.231
_refine_ls_shift/esd_max       0.000
_refine_ls_shift/esd_mean      0.000

loop_

```

```

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Mg1 Mg 0.09463(7) 0.25849(7) 0.15825(7) 0.0185(3) Uani 1 d . .
Ga1 Ga 0.0000 0.08814(5) 0.36276(5) 0.0211(4) Uani 0.490(4) d SP .
Mg10 Mg 0.0000 0.08814(5) 0.36276(5) 0.0211(4) Uani 0.510(4) d SP .
Pd1 Pd 0.0000 0.15460(2) 0.22887(2) 0.0159(2) Uani 1 d S .
Mg2 Mg 0.09452(6) 0.09452(6) 0.09452(6) 0.0176(4) Uani 1 d S .
Mg3 Mg 0.21437(13) 0.0000 0.0000 0.0207(5) Uani 1 d S .
Ga2 Ga 0.2500 0.2500 0.2500 0.0188(3) Uani 1 d S .
Pd2 Pd 0.5000 0.5000 0.5000 0.0156(3) Uani 1 d S .
Pd3 Pd 0.0000 0.0000 0.0000 0.0169(7) Uani 0.26(2) d SP .
Ga10 Ga 0.0000 0.0000 0.0000 0.0169(7) Uani 0.74(2) d SP .

```

```
loop_
```

```

_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Mg1 0.0185(6) 0.0178(6) 0.0192(6) -0.0011(5) 0.0016(4) -0.0032(5)
Ga1 0.0257(5) 0.0210(5) 0.0167(5) 0.0032(4) 0.000 0.000
Mg10 0.0257(5) 0.0210(5) 0.0167(5) 0.0032(4) 0.000 0.000
Pd1 0.0156(3) 0.0148(3) 0.0173(3) 0.00110(14) 0.000 0.000
Mg2 0.0176(4) 0.0176(4) 0.0176(4) -0.0012(5) -0.0012(5) -0.0012(5)
Mg3 0.0234(12) 0.0266(12) 0.0120(11) 0.000 0.000 0.000
Ga2 0.0188(3) 0.0188(3) 0.0188(3) 0.000 0.000 0.000
Pd2 0.0156(3) 0.0156(3) 0.0156(3) 0.000 0.000 0.000
Pd3 0.0169(7) 0.0169(7) 0.0169(7) 0.000 0.000 0.000
Ga10 0.0169(7) 0.0169(7) 0.0169(7) 0.000 0.000 0.000

```

```
_geom_special_details
```

```

;
All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes)
are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken
into account individually in the estimation of esds in distances, angles
and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only
used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic)
treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.
;

```

```
loop_
```

```

_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag

```

Mg1 Pd1 2.6824(14) . ?
Mg1 Pd1 2.9172(15) 61 ?
Mg1 Pd1 2.9306(15) 6 ?
Mg1 Mg2 3.001(2) . ?
Mg1 Mg1 3.078(2) 46 ?
Mg1 Mg1 3.078(2) 21 ?
Mg1 Ga2 3.0811(15) . ?
Mg1 Mg10 3.095(2) 61 ?
Mg1 Ga1 3.095(2) 61 ?
Mg1 Mg1 3.143(2) 15 ?
Mg1 Mg1 3.228(3) 51 ?
Mg1 Mg3 3.234(2) 5 ?
Ga1 Pd1 2.5497(12) . ?
Ga1 Pd2 2.7822(11) 37_445 ?
Ga1 Mg10 2.9054(12) 79_455 ?
Ga1 Ga1 2.9054(12) 79_455 ?
Ga1 Mg10 2.9054(12) 77 ?
Ga1 Ga1 2.9054(12) 77 ?
Ga1 Mg10 2.9055(12) 68 ?
Ga1 Ga1 2.9055(12) 68 ?
Ga1 Mg10 2.9055(12) 66 ?
Ga1 Ga1 2.9055(12) 66 ?
Ga1 Mg3 2.944(2) 6 ?
Ga1 Mg10 3.007(2) 2 ?
Mg10 Pd1 2.5497(12) . ?
Mg10 Pd2 2.7822(11) 37_445 ?
Mg10 Mg10 2.9054(12) 79_455 ?
Mg10 Ga1 2.9054(12) 79_455 ?
Mg10 Mg10 2.9054(12) 77 ?
Mg10 Ga1 2.9054(12) 77 ?
Mg10 Mg10 2.9055(12) 68 ?
Mg10 Ga1 2.9055(12) 68 ?
Mg10 Mg10 2.9055(12) 66 ?
Mg10 Ga1 2.9055(12) 66 ?
Mg10 Mg3 2.944(2) 6 ?
Mg10 Mg10 3.007(2) 2 ?
Pd1 Mg3 2.6486(9) 6 ?
Pd1 Mg1 2.6824(14) 51 ?
Pd1 Mg1 2.9171(15) 15 ?
Pd1 Mg1 2.9171(15) 61 ?
Pd1 Mg1 2.9306(15) 57 ?
Pd1 Mg1 2.9306(15) 5 ?
Pd1 Mg2 2.9834(11) 51 ?
Pd1 Mg2 2.9834(11) . ?
Mg2 Ga10 2.792(2) . ?
Mg2 Pd3 2.792(2) . ?
Mg2 Pd1 2.9834(11) 6 ?
Mg2 Pd1 2.9834(11) 5 ?
Mg2 Mg1 3.001(2) 5 ?
Mg2 Mg1 3.001(2) 6 ?
Mg2 Mg3 3.062(2) . ?
Mg2 Mg3 3.062(2) 6 ?
Mg2 Mg3 3.062(2) 5 ?
Mg2 Mg2 3.224(2) 50 ?
Mg3 Pd1 2.6487(9) 5 ?
Mg3 Pd1 2.6487(9) 55 ?
Mg3 Mg10 2.944(2) 5 ?

Mg3 Ga1 2.944(2) 5 ?
 Mg3 Mg10 2.944(2) 55 ?
 Mg3 Ga1 2.944(2) 55 ?
 Mg3 Mg2 3.062(2) 3 ?
 Mg3 Mg2 3.062(2) 52 ?
 Mg3 Mg2 3.062(2) 50 ?
 Mg3 Mg1 3.234(2) 6 ?
 Mg3 Mg1 3.234(2) 12 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 24 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 28 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 43 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 6 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 5 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 46 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 15 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 35 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 38 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 32 ?
 Ga2 Mg1 3.0812(15) 21 ?
 Pd2 Mg10 2.7822(11) 80_565 ?
 Pd2 Mg10 2.7822(11) 32 ?
 Pd2 Mg10 2.7822(11) 67 ?
 Pd2 Ga1 2.7822(11) 38 ?
 Pd2 Ga1 2.7822(11) 86_556 ?
 Pd2 Mg10 2.7822(11) 19_655 ?
 Pd2 Mg10 2.7822(11) 86_556 ?
 Pd2 Mg10 2.7822(11) 38 ?
 Pd2 Ga1 2.7822(11) 80_565 ?
 Pd2 Ga1 2.7822(11) 19_655 ?
 Pd2 Ga1 2.7822(11) 67 ?
 Pd2 Ga1 2.7822(11) 32 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 49 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 52 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 2 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 50 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 3 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 51 ?
 Pd3 Mg2 2.792(2) 4 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 49 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 52 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 2 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 50 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 3 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 51 ?
 Ga10 Mg2 2.792(2) 4 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
 Pd1 Mg1 Pd1 72.93(3) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Pd1 120.65(5) . 6 ?
 Pd1 Mg1 Pd1 152.71(5) 61 6 ?

Pd1 Mg1 Mg2 63.04(3) . . ?
 Pd1 Mg1 Mg2 135.43(4) 61 . ?
 Pd1 Mg1 Mg2 60.38(2) 6 . ?
 Pd1 Mg1 Mg1 162.36(3) . 46 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 116.66(4) 61 46 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 58.03(4) 6 46 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 107.63(5) . 46 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 122.87(6) . 21 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 58.46(4) 61 21 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 116.25(4) 6 21 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 157.85(4) . 21 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 60.0 46 21 ?
 Pd1 Mg1 Ga2 104.98(4) . . ?
 Pd1 Mg1 Ga2 99.47(3) 61 . . ?
 Pd1 Mg1 Ga2 99.18(4) 6 . ?
 Mg2 Mg1 Ga2 98.09(4) . . ?
 Mg1 Mg1 Ga2 60.04(2) 46 . ?
 Mg1 Mg1 Ga2 60.04(2) 21 . . ?
 Pd1 Mg1 Mg10 107.25(4) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Mg10 50.08(3) 61 61 ?
 Pd1 Mg1 Mg10 102.78(4) 6 61 ?
 Mg2 Mg1 Mg10 138.21(5) . 61 ?
 Mg1 Mg1 Mg10 89.64(2) 46 61 ?
 Mg1 Mg1 Mg10 63.21(3) 21 61 ?
 Ga2 Mg1 Mg10 123.17(4) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 107.25(4) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 50.08(3) 61 61 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 102.78(4) 6 61 ?
 Mg2 Mg1 Ga1 138.21(5) . 61 ?
 Mg1 Mg1 Ga1 89.64(2) 46 61 ?
 Mg1 Mg1 Ga1 63.21(3) 21 61 ?
 Ga2 Mg1 Ga1 123.17(4) . 61 ?
 Mg10 Mg1 Ga1 0.00(3) 61 61 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 59.47(3) . 15 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 52.38(3) 61 15 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 154.33(4) 6 15 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 105.96(5) . 15 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 113.18(4) 46 15 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 67.39(6) 21 15 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 59.33(2) . 15 ?
 Mg10 Mg1 Mg1 101.14(5) 61 15 ?
 Ga1 Mg1 Mg1 101.14(5) 61 15 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 53.01(2) . 51 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 56.41(2) 61 51 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 110.43(2) 6 51 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 89.96(3) . 51 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 144.495(4) 46 51 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 110.65(3) 21 51 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 149.33(2) . 51 ?
 Mg10 Mg1 Mg1 58.56(2) 61 51 ?
 Ga1 Mg1 Mg1 58.56(2) 61 51 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 90.0 15 51 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 85.46(4) . 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 113.14(4) 61 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 50.60(2) 6 5 ?
 Mg2 Mg1 Mg3 58.69(5) . 5 ?
 Mg1 Mg1 Mg3 102.67(5) 46 5 ?

Mg1 Mg1 Mg3 138.64(4) 21 5 ?
Ga2 Mg1 Mg3 147.39(4) . 5 ?
Mg10 Mg1 Mg3 80.77(5) 61 5 ?
Ga1 Mg1 Mg3 80.77(5) 61 5 ?
Mg1 Mg1 Mg3 144.07(4) 15 5 ?
Mg1 Mg1 Mg3 60.06(2) 51 5 ?
Pd1 Ga1 Pd2 173.69(4) . 37_445 ?
Pd1 Ga1 Mg10 119.23(2) . 79_455 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.523(4) 37_445 79_455 ?
Pd1 Ga1 Ga1 119.23(2) . 79_455 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.523(4) 37_445 79_455 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(4) 79_455 79_455 ?
Pd1 Ga1 Mg10 119.23(2) . 77 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.523(4) 37_445 77 ?
Mg10 Ga1 Mg10 107.355(13) 79_455 77 ?
Ga1 Ga1 Mg10 107.355(13) 79_455 77 ?
Pd1 Ga1 Ga1 119.23(2) . 77 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.523(4) 37_445 77 ?
Mg10 Ga1 Ga1 107.355(13) 79_455 77 ?
Ga1 Ga1 Ga1 107.355(13) 79_455 77 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(4) 77 77 ?
Pd1 Ga1 Mg10 126.41(2) . 68 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.522(4) 37_445 68 ?
Mg10 Ga1 Mg10 109.50(3) 79_455 68 ?
Ga1 Ga1 Mg10 109.50(3) 79_455 68 ?
Mg10 Ga1 Mg10 60.0 77 68 ?
Ga1 Ga1 Mg10 60.0 77 68 ?
Pd1 Ga1 Ga1 126.41(2) . 68 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.522(4) 37_445 68 ?
Mg10 Ga1 Ga1 109.50(3) 79_455 68 ?
Ga1 Ga1 Ga1 109.50(3) 79_455 68 ?
Mg10 Ga1 Ga1 60.0 77 68 ?
Ga1 Ga1 Ga1 60.0 77 68 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(4) 68 68 ?
Pd1 Ga1 Mg10 126.41(2) . 66 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.522(4) 37_445 66 ?
Mg10 Ga1 Mg10 60.0 79_455 66 ?
Ga1 Ga1 Mg10 60.0 79_455 66 ?
Mg10 Ga1 Mg10 109.50(3) 77 66 ?
Ga1 Ga1 Mg10 109.50(3) 77 66 ?
Mg10 Ga1 Mg10 62.33(4) 68 66 ?
Ga1 Ga1 Mg10 62.33(4) 68 66 ?
Pd1 Ga1 Ga1 126.41(2) . 66 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.522(4) 37_445 66 ?
Mg10 Ga1 Ga1 60.0 79_455 66 ?
Ga1 Ga1 Ga1 60.0 79_455 66 ?
Mg10 Ga1 Ga1 109.50(3) 77 66 ?
Ga1 Ga1 Ga1 109.50(3) 77 66 ?
Mg10 Ga1 Ga1 62.33(4) 68 66 ?
Ga1 Ga1 Ga1 62.33(4) 68 66 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(4) 66 66 ?
Pd1 Ga1 Mg3 57.11(3) . 6 ?
Pd2 Ga1 Mg3 116.58(4) 37_445 6 ?
Mg10 Ga1 Mg3 89.06(3) 79_455 6 ?
Ga1 Ga1 Mg3 89.06(3) 79_455 6 ?
Mg10 Ga1 Mg3 89.06(3) 77 6 ?
Ga1 Ga1 Mg3 89.06(3) 77 6 ?

Mg10 Ga1 Mg3 147.13(3) 68 6 ?
Ga1 Ga1 Mg3 147.13(3) 68 6 ?
Mg10 Ga1 Mg3 147.13(3) 66 6 ?
Ga1 Ga1 Mg3 147.13(3) 66 6 ?
Pd1 Ga1 Mg10 116.40(2) . 2 ?
Pd2 Ga1 Mg10 57.29(2) 37_445 2 ?
Mg10 Ga1 Mg10 58.84(2) 79_455 2 ?
Ga1 Ga1 Mg10 58.84(2) 79_455 2 ?
Mg10 Ga1 Mg10 58.84(2) 77 2 ?
Ga1 Ga1 Mg10 58.84(2) 77 2 ?
Mg10 Ga1 Mg10 106.75(2) 68 2 ?
Ga1 Ga1 Mg10 106.75(2) 68 2 ?
Mg10 Ga1 Mg10 106.75(2) 66 2 ?
Ga1 Ga1 Mg10 106.75(2) 66 2 ?
Mg3 Ga1 Mg10 59.29(3) 6 2 ?
Pd1 Mg10 Pd2 173.69(4) . 37_445 ?
Pd1 Mg10 Mg10 119.23(2) . 79_455 ?
Pd2 Mg10 Mg10 58.523(4) 37_445 79_455 ?
Pd1 Mg10 Ga1 119.23(2) . 79_455 ?
Pd2 Mg10 Ga1 58.523(4) 37_445 79_455 ?
Mg10 Mg10 Ga1 0.00(4) 79_455 79_455 ?
Pd1 Mg10 Mg10 119.23(2) . 77 ?
Pd2 Mg10 Mg10 58.523(4) 37_445 77 ?
Mg10 Mg10 Mg10 107.355(13) 79_455 77 ?
Ga1 Mg10 Mg10 107.355(13) 79_455 77 ?
Pd1 Mg10 Ga1 119.23(2) . 77 ?
Pd2 Mg10 Ga1 58.523(4) 37_445 77 ?
Mg10 Mg10 Ga1 107.355(13) 79_455 77 ?
Ga1 Mg10 Ga1 107.355(13) 79_455 77 ?
Mg10 Mg10 Ga1 0.00(4) 77 77 ?
Pd1 Mg10 Mg10 126.41(2) . 68 ?
Pd2 Mg10 Mg10 58.522(4) 37_445 68 ?
Mg10 Mg10 Mg10 109.50(3) 79_455 68 ?
Ga1 Mg10 Mg10 109.50(3) 79_455 68 ?
Mg10 Mg10 Mg10 60.0 77 68 ?
Ga1 Mg10 Mg10 60.0 77 68 ?
Pd1 Mg10 Ga1 126.41(2) . 68 ?
Pd2 Mg10 Ga1 58.522(4) 37_445 68 ?
Mg10 Mg10 Ga1 109.50(3) 79_455 68 ?
Ga1 Mg10 Ga1 109.50(3) 79_455 68 ?
Mg10 Mg10 Ga1 60.0 77 68 ?
Ga1 Mg10 Ga1 60.0 77 68 ?
Mg10 Mg10 Ga1 0.00(4) 68 68 ?
Pd1 Mg10 Mg10 126.41(2) . 66 ?
Pd2 Mg10 Mg10 58.522(4) 37_445 66 ?
Mg10 Mg10 Mg10 60.0 79_455 66 ?
Ga1 Mg10 Mg10 60.0 79_455 66 ?
Mg10 Mg10 Mg10 109.50(3) 77 66 ?
Ga1 Mg10 Mg10 109.50(3) 77 66 ?
Mg10 Mg10 Mg10 62.33(4) 68 66 ?
Ga1 Mg10 Mg10 62.33(4) 68 66 ?
Pd1 Mg10 Ga1 126.41(2) . 66 ?
Pd2 Mg10 Ga1 58.522(4) 37_445 66 ?
Mg10 Mg10 Ga1 60.0 79_455 66 ?
Ga1 Mg10 Ga1 60.0 79_455 66 ?
Mg10 Mg10 Ga1 109.50(3) 77 66 ?
Ga1 Mg10 Ga1 109.50(3) 77 66 ?

Mg10 Mg10 Ga1 62.33(4) 68 66 ?
Ga1 Mg10 Ga1 62.33(4) 68 66 ?
Mg10 Mg10 Ga1 0.00(4) 66 66 ?
Pd1 Mg10 Mg3 57.11(3) . 6 ?
Pd2 Mg10 Mg3 116.58(4) 37_445 6 ?
Mg10 Mg10 Mg3 89.06(3) 79_455 6 ?
Ga1 Mg10 Mg3 89.06(3) 79_455 6 ?
Mg10 Mg10 Mg3 89.06(3) 77 6 ?
Ga1 Mg10 Mg3 89.06(3) 77 6 ?
Mg10 Mg10 Mg3 147.13(3) 68 6 ?
Ga1 Mg10 Mg3 147.13(3) 68 6 ?
Mg10 Mg10 Mg3 147.13(3) 66 6 ?
Ga1 Mg10 Mg3 147.13(3) 66 6 ?
Pd1 Mg10 Mg10 116.40(2) . 2 ?
Pd2 Mg10 Mg10 57.29(2) 37_445 2 ?
Mg10 Mg10 Mg10 58.84(2) 79_455 2 ?
Ga1 Mg10 Mg10 58.84(2) 79_455 2 ?
Mg10 Mg10 Mg10 58.84(2) 77 2 ?
Ga1 Mg10 Mg10 58.84(2) 77 2 ?
Mg10 Mg10 Mg10 106.75(2) 68 2 ?
Ga1 Mg10 Mg10 106.75(2) 68 2 ?
Mg10 Mg10 Mg10 106.75(2) 66 2 ?
Ga1 Mg10 Mg10 106.75(2) 66 2 ?
Mg3 Mg10 Mg10 59.29(3) 6 2 ?
Mg10 Pd1 Ga1 0.00(4) . . ?
Mg10 Pd1 Mg3 68.96(6) . 6 ?
Ga1 Pd1 Mg3 68.96(6) . 6 ?
Mg10 Pd1 Mg1 134.10(3) . 51 ?
Ga1 Pd1 Mg1 134.10(3) . 51 ?
Mg3 Pd1 Mg1 128.01(4) 6 51 ?
Mg10 Pd1 Mg1 134.10(3) . . ?
Ga1 Pd1 Mg1 134.10(3) . . ?
Mg3 Pd1 Mg1 128.01(4) 6 . ?
Mg1 Pd1 Mg1 73.98(5) 51 . ?
Mg10 Pd1 Mg1 68.58(3) . 15 ?
Ga1 Pd1 Mg1 68.58(3) . 15 ?
Mg3 Pd1 Mg1 124.58(5) 6 15 ?
Mg1 Pd1 Mg1 107.07(3) 51 15 ?
Mg1 Pd1 Mg1 68.15(4) . 15 ?
Mg10 Pd1 Mg1 68.58(3) . 61 ?
Ga1 Pd1 Mg1 68.58(3) . 61 ?
Mg3 Pd1 Mg1 124.58(5) 6 61 ?
Mg1 Pd1 Mg1 68.15(4) 51 61 ?
Mg1 Pd1 Mg1 107.07(3) . 61 ?
Mg1 Pd1 Mg1 67.19(5) 15 61 ?
Mg10 Pd1 Mg1 71.96(2) . 57 ?
Ga1 Pd1 Mg1 71.96(2) . 57 ?
Mg3 Pd1 Mg1 70.64(2) 6 57 ?
Mg1 Pd1 Mg1 75.75(5) 51 57 ?
Mg1 Pd1 Mg1 149.569(13) . 57 ?
Mg1 Pd1 Mg1 124.98(3) 15 57 ?
Mg1 Pd1 Mg1 63.51(5) 61 57 ?
Mg10 Pd1 Mg1 71.96(2) . 5 ?
Ga1 Pd1 Mg1 71.96(2) . 5 ?
Mg3 Pd1 Mg1 70.64(2) 6 5 ?
Mg1 Pd1 Mg1 149.568(13) 51 5 ?
Mg1 Pd1 Mg1 75.75(5) . 5 ?

Mg1 Pd1 Mg1 63.51(5) 15 5 ?
Mg1 Pd1 Mg1 124.98(3) 61 5 ?
Mg1 Pd1 Mg1 134.17(5) 57 5 ?
Mg10 Pd1 Mg2 122.36(2) . 51 ?
Ga1 Pd1 Mg2 122.36(2) . 51 ?
Mg3 Pd1 Mg2 65.56(5) 6 51 ?
Mg1 Pd1 Mg2 63.70(4) 51 51 ?
Mg1 Pd1 Mg2 101.96(3) . 51 ?
Mg1 Pd1 Mg2 168.67(3) 15 51 ?
Mg1 Pd1 Mg2 112.49(4) 61 51 ?
Mg1 Pd1 Mg2 60.97(3) 57 51 ?
Mg1 Pd1 Mg2 120.68(4) 5 51 ?
Mg10 Pd1 Mg2 122.36(2) . . ?
Ga1 Pd1 Mg2 122.36(2) . . ?
Mg3 Pd1 Mg2 65.56(5) 6 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 101.96(3) 51 . . ?
Mg1 Pd1 Mg2 63.70(4) . . ?
Mg1 Pd1 Mg2 112.49(4) 15 . . ?
Mg1 Pd1 Mg2 168.67(3) 61 . . ?
Mg1 Pd1 Mg2 120.68(4) 57 . . ?
Mg1 Pd1 Mg2 60.97(3) 5 . . ?
Mg2 Pd1 Mg2 65.42(6) 51 . . ?
Ga10 Mg2 Pd3 0.0 . . ?
Ga10 Mg2 Pd1 109.26(3) . 6 ?
Pd3 Mg2 Pd1 109.26(3) . 6 ?
Ga10 Mg2 Pd1 109.26(3) . 5 ?
Pd3 Mg2 Pd1 109.26(3) . 5 ?
Pd1 Mg2 Pd1 109.68(3) 6 5 ?
Ga10 Mg2 Pd1 109.26(3) . . ?
Pd3 Mg2 Pd1 109.26(3) . . ?
Pd1 Mg2 Pd1 109.68(3) 6 . ?
Pd1 Mg2 Pd1 109.68(3) 5 . ?
Ga10 Mg2 Mg1 138.39(3) . . ?
Pd3 Mg2 Mg1 138.39(3) . . ?
Pd1 Mg2 Mg1 58.64(3) 6 . ?
Pd1 Mg2 Mg1 112.25(6) 5 . ?
Pd1 Mg2 Mg1 53.26(3) . . ?
Ga10 Mg2 Mg1 138.39(3) . 5 ?
Pd3 Mg2 Mg1 138.39(3) . 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 112.25(6) 6 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 53.26(3) 5 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 58.64(3) . 5 ?
Mg1 Mg2 Mg1 70.21(5) . 5 ?
Ga10 Mg2 Mg1 138.39(3) . 6 ?
Pd3 Mg2 Mg1 138.39(3) . 6 ?
Pd1 Mg2 Mg1 53.26(3) 6 6 ?
Pd1 Mg2 Mg1 58.64(3) 5 6 ?
Pd1 Mg2 Mg1 112.25(6) . 6 ?
Mg1 Mg2 Mg1 70.21(5) . 6 ?
Mg1 Mg2 Mg1 70.22(5) 5 6 ?
Ga10 Mg2 Mg3 77.15(5) . . ?
Pd3 Mg2 Mg3 77.15(5) . . ?
Pd1 Mg2 Mg3 83.715(14) 6 . ?
Pd1 Mg2 Mg3 51.95(2) 5 . ?
Pd1 Mg2 Mg3 161.08(3) . . ?
Mg1 Mg2 Mg3 132.92(5) . . ?
Mg1 Mg2 Mg3 104.43(4) 5 . ?

Mg1 Mg2 Mg3 64.46(4) 6 . ?
 Ga10 Mg2 Mg3 77.15(5) . 6 ?
 Pd3 Mg2 Mg3 77.15(5) . 6 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 161.08(3) 6 6 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 83.715(14) 5 6 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 51.95(2) . 6 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 104.43(4) . 6 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 64.46(4) 5 6 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 132.92(5) 6 6 ?
 Mg3 Mg2 Mg3 115.20(3) . 6 ?
 Ga10 Mg2 Mg3 77.15(5) . 5 ?
 Pd3 Mg2 Mg3 77.15(5) . 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 51.95(2) 6 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 161.08(3) 5 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 83.716(14) . 5 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 64.46(4) . 5 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 132.92(5) 5 5 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 104.43(4) 6 5 ?
 Mg3 Mg2 Mg3 115.20(3) . 5 ?
 Mg3 Mg2 Mg3 115.20(3) 6 5 ?
 Ga10 Mg2 Mg2 54.7 . 50 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 54.7 . 50 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 57.29(3) 6 50 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 110.09(2) 5 50 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 140.18(2) . 50 ?
 Mg1 Mg2 Mg2 111.24(2) . 50 ?
 Mg1 Mg2 Mg2 158.76(2) 5 50 ?
 Mg1 Mg2 Mg2 90.04(3) 6 50 ?
 Mg3 Mg2 Mg2 58.23(3) . 50 ?
 Mg3 Mg2 Mg2 131.88(5) 6 50 ?
 Mg3 Mg2 Mg2 58.23(3) 5 50 ?
 Pd1 Mg3 Pd1 169.29(10) 5 55 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 53.93(3) 5 5 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 115.36(7) 55 5 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 53.93(3) 5 5 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 115.36(7) 55 5 ?
 Mg10 Mg3 Ga1 0.00(3) 5 5 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 115.36(7) 5 55 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 53.93(3) 55 55 ?
 Mg10 Mg3 Mg10 61.42(5) 5 55 ?
 Ga1 Mg3 Mg10 61.42(5) 5 55 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 115.36(7) 5 55 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 53.93(3) 55 55 ?
 Mg10 Mg3 Ga1 61.42(5) 5 55 ?
 Ga1 Mg3 Ga1 61.42(5) 5 55 ?
 Mg10 Mg3 Ga1 0.00(3) 55 55 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.49(3) 5 . ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.91(6) 55 . ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.76(4) 5 . ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.76(4) 5 . ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.44(4) 55 . ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.44(4) 55 . ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.91(6) 5 3 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.49(3) 55 3 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.44(4) 5 3 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.44(4) 5 3 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.76(4) 55 3 ?

Ga1 Mg3 Mg2 107.76(4) 55 3 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 96.24(9) . 3 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.49(3) 5 52 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.91(6) 55 52 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.76(4) 5 52 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.76(4) 5 52 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.44(4) 55 52 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.44(4) 55 52 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.53(5) . 52 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.53(5) 3 52 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.91(6) 5 50 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.49(3) 55 50 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.44(4) 5 50 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.44(4) 5 50 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.76(4) 55 50 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.76(4) 55 50 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.53(5) . 50 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.53(5) 3 50 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 96.24(9) 52 50 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 58.76(2) 5 6 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 118.37(3) 55 6 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 62.94(3) 5 6 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 62.94(3) 5 6 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 93.14(5) 55 6 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 93.14(5) 55 6 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 56.85(4) . 6 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 149.04(7) 3 6 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 109.39(3) 52 6 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 88.78(3) 50 6 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 118.37(3) 5 12 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 58.76(2) 55 12 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 93.14(5) 5 12 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 93.14(5) 5 12 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 62.94(3) 55 12 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 62.94(3) 55 12 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 149.04(7) . 12 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 56.85(4) 3 12 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 88.78(3) 52 12 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 109.39(3) 50 12 ?
 Mg1 Mg3 Mg1 153.09(9) 6 12 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) . 24 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 174.61(4) . 28 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 24 28 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) . 43 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 24 43 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 28 43 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) . 6 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 174.61(4) 24 6 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 28 6 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 43 6 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) . 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 24 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 28 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 174.61(4) 43 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 6 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) . 46 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 118.95(4) 24 46 ?

Mg1 Ga2 Mg1 116.963(12) 28 46 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 43 46 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.34(4) 6 46 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 5 46 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.34(4) . 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 24 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.95(4) 28 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 43 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 6 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 5 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 46 15 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.962(13) . 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 24 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 28 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.95(4) 43 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 6 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.34(4) 5 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 46 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 15 35 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.95(4) . 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 24 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.34(4) 28 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 43 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 6 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 5 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 46 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.61(4) 15 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 35 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) . 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.34(4) 24 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 28 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 43 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.95(4) 6 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 5 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.61(4) 46 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 15 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 35 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 38 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.93(3) . 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 24 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 28 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.34(4) 43 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.85(2) 6 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.95(4) 5 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.92(3) 46 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.12(3) 15 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.61(4) 35 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 38 21 ?
Mg1 Ga2 Mg1 116.963(13) 32 21 ?
Mg10 Pd2 Mg10 180.0 80_565 32 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.046(8) 80_565 67 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.954(8) 32 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 80_565 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 32 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 67 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 80_565 86_556 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 32 86_556 ?

Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 67 86_556 ?
Ga1 Pd2 Ga1 180.0 38 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.954(8) 80_565 19_655 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.046(8) 32 19_655 ?
Mg10 Pd2 Mg10 180.0 67 19_655 ?
Ga1 Pd2 Mg10 117.046(8) 38 19_655 ?
Ga1 Pd2 Mg10 62.954(8) 86_556 19_655 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.954(8) 80_565 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.046(8) 32 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.046(8) 67 86_556 ?
Ga1 Pd2 Mg10 180.0 38 86_556 ?
Ga1 Pd2 Mg10 0.00(3) 86_556 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.954(8) 19_655 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.046(8) 80_565 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.954(8) 32 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.954(8) 67 38 ?
Ga1 Pd2 Mg10 0.00(3) 38 38 ?
Ga1 Pd2 Mg10 180.0 86_556 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.046(8) 19_655 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 180.0 86_556 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(3) 80_565 80_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 32 80_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 67 80_565 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.046(8) 38 80_565 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.954(8) 86_556 80_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 19_655 80_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 86_556 80_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 38 80_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 80_565 19_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 32 19_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 67 19_655 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.046(8) 38 19_655 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.954(8) 86_556 19_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(3) 19_655 19_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 86_556 19_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 38 19_655 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.954(8) 80_565 19_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 80_565 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 32 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(3) 67 67 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.954(8) 38 67 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.046(8) 86_556 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 19_655 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 86_556 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 38 67 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.046(8) 80_565 67 ?
Ga1 Pd2 Ga1 180.0 19_655 67 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 80_565 32 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(3) 32 32 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 67 32 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.954(8) 38 32 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.046(8) 86_556 32 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 19_655 32 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.046(8) 86_556 32 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.954(8) 38 32 ?
Ga1 Pd2 Ga1 180.0 80_565 32 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.046(8) 19_655 32 ?

Ga1 Pd2 Ga1 62.954(8) 67 32 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 . 49 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 . 52 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 49 52 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 . 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 49 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 52 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 . 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 49 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 52 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 2 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 . 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 49 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 52 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 2 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 50 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 . 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 49 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 52 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 2 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 50 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 3 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 . 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 49 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 52 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 2 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 50 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 3 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 51 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 180.0 . 49 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 . 52 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 49 52 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 . 2 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 49 2 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 52 2 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 . 50 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 49 50 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 52 50 ?
Mg2 Ga10 Mg2 180.0 2 50 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 . 3 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 49 3 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 52 3 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 2 3 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 50 3 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 . 51 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 49 51 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 52 51 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 2 51 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 50 51 ?
Mg2 Ga10 Mg2 180.0 3 51 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 . 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 49 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 180.0 52 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 2 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 50 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 109.5 3 4 ?
Mg2 Ga10 Mg2 70.5 51 4 ?

_refine_diff_density_max 0.861
_refine_diff_density_min -0.720
_refine_diff_density_rms 0.149

data_574

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\"apers
FB Chemie Uni Dortmund
Otto-Hahn-Str. 6
44221 Dortmund
Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaeppers@web.de'

#####

3. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\"at Dortmund
Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle
vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\"apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\"at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

#####

4. TEXT

_publ_section_abstract

;

1/1-R-Approximant im System Al-Mg-Pd, Kapitel 5.7
Datensatz Nummer: 574

;

#####

4. RESULTS

_chemical_name_systematic

;

?

;

```

_chemical_name_common      ?
_chemical_formula_moiety   ?
_chemical_formula_structural ?
_chemical_formula_analytical ?
_chemical_formula_sum      'Al54.00 Mg132.00 Pd63.00'
_chemical_formula_weight   11368.46
_chemical_melting_point    ?
_chemical_compound_source  ?

```

```
loop_
```

```

_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

```

```

_symmetry_cell_setting      'hexagonal'
_symmetry_space_group_name_H-M 'R-3m'

```

```
loop_
```

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-y, x-y, z'
'-x+y, -x, z'
'y, x, -z'
'x-y, -y, -z'
'-x, -x+y, -z'
'x+2/3, y+1/3, z+1/3'
'-y+2/3, x-y+1/3, z+1/3'
'-x+y+2/3, -x+1/3, z+1/3'
'y+2/3, x+1/3, -z+1/3'
'x-y+2/3, -y+1/3, -z+1/3'
'-x+2/3, -x+y+1/3, -z+1/3'
'x+1/3, y+2/3, z+2/3'
'-y+1/3, x-y+2/3, z+2/3'
'-x+y+1/3, -x+2/3, z+2/3'
'y+1/3, x+2/3, -z+2/3'
'x-y+1/3, -y+2/3, -z+2/3'
'-x+1/3, -x+y+2/3, -z+2/3'
'-x, -y, -z'
'y, -x+y, -z'
'x-y, x, -z'
'-y, -x, z'
'-x+y, y, z'
'x, x-y, z'
'-x+2/3, -y+1/3, -z+1/3'
'y+2/3, -x+y+1/3, -z+1/3'
'x-y+2/3, x+1/3, -z+1/3'
'-y+2/3, -x+1/3, z+1/3'
'-x+y+2/3, y+1/3, z+1/3'
'x+2/3, x-y+1/3, z+1/3'

```

```

'-x+1/3, -y+2/3, -z+2/3'
'y+1/3, -x+y+2/3, -z+2/3'
'x-y+1/3, x+2/3, -z+2/3'
'-y+1/3, -x+2/3, z+2/3'
'-x+y+1/3, y+2/3, z+2/3'
'x+1/3, x-y+2/3, z+2/3'

_cell_length_a      13.647(2)
_cell_length_b      13.647(2)
_cell_length_c      26.745(5)
_cell_angle_alpha   90.00
_cell_angle_beta    90.00
_cell_angle_gamma   120.00
_cell_volume        4313.7(12)
_cell_formula_units_Z  1
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used 6
_cell_measurement_theta_min 4.5
_cell_measurement_theta_max 54.12

_exptl_crystal_description 'irregular'
_exptl_crystal_colour 'silver'
_exptl_crystal_size_max 0.25
_exptl_crystal_size_mid 0.25
_exptl_crystal_size_min 0.25
_exptl_crystal_density_meas 'none'
_exptl_crystal_density_diffn 4.398
_exptl_crystal_density_method 'none'
_exptl_crystal_F_000 5205
_exptl_absorpt_coefficient_mu 7.190
_exptl_absorpt_correction_type 'none'
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
_diffn_radiation_wavelength 0.71069
_diffn_radiation_type MoKa
_diffn_radiation_source 'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator graphite
_diffn_measurement_device 'Kappa-CCD'
_diffn_measurement_method 'phi-scan'
_diffn_standards_number ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_% ?
_diffn_reflns_number 5899
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0531
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0353
_diffn_reflns_limit_h_min -14
_diffn_reflns_limit_h_max 17
_diffn_reflns_limit_k_min -17
_diffn_reflns_limit_k_max 17

```

```

_diffn_reflms_limit_l_min    -21
_diffn_reflms_limit_l_max    34
_diffn_reflms_theta_min     2.28
_diffn_reflms_theta_max     27.30
_reflms_number_total        1225
_reflms_number_observed     1027
_reflms_observed_criterion   >2sigma(I)

_computing_data_collection   'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement   'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction    'NRCVAX Software'
_computing_structure_solution 'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics 'Schakal 97'
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F2. The observed criterion
of F2 > 2sigma(F2) is used only for calculating _R_factor_obs etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type        full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s2(Fo2)+( 0.1017P)2+222.0592P] where P=(Fo2+2Fc2)/3'
_refine_ls_solution_primary   direct
_refine_ls_solution_secondary difmap
_refine_ls_solution_hydrogens geom
_refine_ls_hydrogen_treatment none
_refine_ls_extinction_method  none
_refine_ls_extinction_coef    none
_refine_ls_number_reflms     1225
_refine_ls_number_parameters  82
_refine_ls_number_restraints  0
_refine_ls_R_factor_all      0.0605
_refine_ls_R_factor_obs      0.0453
_refine_ls_wR_factor_all     0.1808
_refine_ls_wR_factor_obs     0.1631
_refine_ls_goodness_of_fit_all 1.221
_refine_ls_goodness_of_fit_obs 1.210
_refine_ls_restrained_S_all   1.221
_refine_ls_restrained_S_obs   1.210
_refine_ls_shift/esd_max      0.000
_refine_ls_shift/esd_mean     0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y

```



```

_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Mg1 Mg 0.3260(3) 0.0417(3) 0.10858(14) 0.0173(8) Uani 1 d . .
Al1 Al 0.3986(2) 0.6014(2) 0.0109(2) 0.0128(9) Uani 1 d S .
Pd1 Pd 0.44308(5) 0.55692(5) 0.37510(4) 0.0164(4) Uani 1 d S .
Pd2 Pd 0.45444(6) 0.54556(6) 0.08690(4) 0.0161(4) Uani 1 d S .
Mg2 Mg 0.4583(2) 0.5417(2) 0.2656(2) 0.0149(11) Uani 1 d S .
Pd3 Pd 0.52710(5) 0.47290(5) 0.17445(4) 0.0150(4) Uani 1 d S .
Mg3 Mg 0.5482(2) 0.4518(2) 0.3521(2) 0.0164(11) Uani 1 d S .
Al2 Al 0.5602(2) 0.4398(2) 0.0833(2) 0.0154(10) Uani 1 d S .
Mg4 Mg 0.5934(2) 0.4066(2) 0.2503(2) 0.0152(11) Uani 1 d S .
Mg5 Mg 0.7427(2) 0.2573(2) 0.1549(2) 0.0156(11) Uani 1 d S .
Al3 Al 0.2014(3) 0.0000 0.5000 0.0151(10) Uani 1 d S .
Mg6 Mg 0.3829(4) 0.0000 0.0000 0.0154(11) Uani 1 d S .
Pd4 Pd 0.0000 0.0000 0.26079(10) 0.0240(6) Uani 1 d S .
Mg7 Mg 0.0000 0.0000 0.4406(4) 0.015(2) Uani 1 d S .
Pd5 Pd 0.0000 0.0000 0.0000 0.0161(7) Uani 1 d S .

```

```

loop_
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Mg1 0.019(2) 0.016(2) 0.015(2) 0.0028(15) 0.0034(15) 0.008(2)
Al1 0.013(2) 0.013(2) 0.012(2) 0.0000(9) 0.0000(9) 0.007(2)
Pd1 0.0164(5) 0.0164(5) 0.0166(6) 0.0009(2) -0.0009(2) 0.0084(5)
Pd2 0.0189(5) 0.0189(5) 0.0135(6) 0.0007(2) -0.0007(2) 0.0116(5)
Mg2 0.015(2) 0.015(2) 0.015(2) -0.0003(10) 0.0003(10) 0.007(2)
Pd3 0.0165(5) 0.0165(5) 0.0137(6) 0.0003(2) -0.0003(2) 0.0095(5)
Mg3 0.017(2) 0.017(2) 0.018(3) -0.0005(11) 0.0005(11) 0.011(2)
Al2 0.016(2) 0.016(2) 0.015(2) -0.0004(9) 0.0004(9) 0.008(2)
Mg4 0.015(2) 0.015(2) 0.013(2) 0.0012(10) -0.0012(10) 0.006(2)
Mg5 0.015(2) 0.015(2) 0.014(2) 0.0008(11) -0.0008(11) 0.006(2)
Al3 0.015(2) 0.013(2) 0.017(2) -0.001(2) -0.0006(9) 0.0064(11)
Mg6 0.017(2) 0.016(3) 0.014(3) 0.000(2) 0.0002(10) 0.0078(13)
Pd4 0.0233(8) 0.0233(8) 0.0252(12) 0.000 0.000 0.0117(4)
Mg7 0.015(3) 0.015(3) 0.014(4) 0.000 0.000 0.0074(14)
Pd5 0.0154(9) 0.0154(9) 0.0173(15) 0.000 0.000 0.0077(5)

```

```

_geom_special_details

```

```

;
```

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

```

;
```

```

loop_
  _geom_bond_atom_site_label_1
  _geom_bond_atom_site_label_2
  _geom_bond_distance
  _geom_bond_site_symmetry_2
  _geom_bond_publ_flag
Mg1 Pd1 2.826(4) 15_554 ?
Mg1 Pd3 2.848(4) 25 ?
Mg1 Al3 2.877(6) 14_544 ?
Mg1 Al2 2.897(4) 2_655 ?
Mg1 Mg5 3.040(6) 3_665 ?
Mg1 Mg4 3.068(5) 25 ?
Mg1 Mg3 3.102(6) 15_554 ?
Mg1 Mg1 3.112(8) 12 ?
Mg1 Mg6 3.131(4) . ?
Mg1 Pd2 3.142(4) 2_655 ?
Mg1 Mg2 3.153(5) 25 ?
Mg1 Pd3 3.193(4) 2_655 ?
Al1 Pd2 2.423(5) . ?
Al1 Pd1 2.663(3) 26_455 ?
Al1 Pd1 2.663(3) 27 ?
Al1 Al1 2.671(8) 3_565 ?
Al1 Al1 2.671(8) 2_665 ?
Al1 Al2 2.702(6) 19_665 ?
Al1 Pd4 2.714(5) 13_554 ?
Al1 Mg6 2.896(5) 21 ?
Al1 Mg6 2.896(5) 3_665 ?
Al1 Mg2 2.975(5) 27 ?
Al1 Mg2 2.975(5) 26_455 ?
Al1 Mg7 3.002(9) 13_554 ?
Pd1 Mg3 2.559(6) . ?
Pd1 Al1 2.664(3) 26_455 ?
Pd1 Al1 2.664(3) 27 ?
Pd1 Pd4 2.7215(15) 31 ?
Pd1 Al2 2.787(3) 9_565 ?
Pd1 Al2 2.787(3) 8 ?
Pd1 Mg1 2.826(4) 8 ?
Pd1 Mg1 2.826(4) 29 ?
Pd1 Mg6 2.9413(15) 25 ?
Pd1 Mg6 2.9413(15) 8 ?
Pd1 Mg2 2.949(6) . ?
Pd1 Mg5 3.128(6) 7_455 ?
Pd2 Al2 2.501(5) . ?
Pd2 Al3 2.5831(12) 13_554 ?
Pd2 Al3 2.5831(12) 32 ?
Pd2 Pd3 2.904(2) . ?
Pd2 Mg7 2.914(2) 13_554 ?
Pd2 Mg2 2.954(3) 26_455 ?
Pd2 Mg2 2.954(3) 27 ?
Pd2 Mg6 3.019(3) 21 ?
Pd2 Mg6 3.019(3) 3_665 ?
Pd2 Mg1 3.142(4) 3_665 ?
Pd2 Mg1 3.142(4) 24 ?
Mg2 Pd3 2.932(6) . ?
Mg2 Pd2 2.954(3) 26_455 ?
Mg2 Pd2 2.954(3) 27 ?
Mg2 Al1 2.975(5) 27 ?

```

Mg2 Al1 2.975(5) 26_455 ?
Mg2 Al3 3.037(5) 32 ?
Mg2 Al3 3.037(5) 13_554 ?
Mg2 Mg7 3.137(7) 31 ?
Mg2 Mg3 3.140(8) . ?
Mg2 Mg1 3.153(5) 25 ?
Mg2 Mg1 3.153(5) 10 ?
Pd3 Al2 2.561(5) . ?
Pd3 Mg4 2.563(6) . ?
Pd3 Al3 2.602(2) 32 ?
Pd3 Al3 2.602(3) 13_554 ?
Pd3 Mg1 2.848(4) 10 ?
Pd3 Mg1 2.848(4) 25 ?
Pd3 Mg5 2.909(2) 3_665 ?
Pd3 Mg5 2.909(2) 2_655 ?
Pd3 Mg1 3.193(4) 24 ?
Pd3 Mg1 3.193(4) 3_665 ?
Mg3 Pd5 2.845(6) 7 ?
Mg3 Mg4 2.925(8) . ?
Mg3 Mg3 2.975(7) 33_545 ?
Mg3 Mg3 2.975(7) 32 ?
Mg3 Mg4 2.993(6) 32 ?
Mg3 Mg4 2.993(6) 33_545 ?
Mg3 Mg1 3.102(6) 8 ?
Mg3 Mg1 3.102(6) 29 ?
Mg3 Mg6 3.170(6) 25 ?
Mg3 Mg6 3.170(6) 8 ?
Al2 Pd4 2.534(5) 25 ?
Al2 Al1 2.702(6) 19_665 ?
Al2 Pd1 2.787(3) 15_554 ?
Al2 Pd1 2.787(3) 14_654 ?
Al2 Mg1 2.897(4) 3_665 ?
Al2 Mg1 2.897(4) 24 ?
Al2 Mg5 2.951(5) 2_655 ?
Al2 Mg5 2.951(5) 3_665 ?
Al2 Mg6 3.088(5) 21 ?
Al2 Mg6 3.088(5) 3_665 ?
Mg4 Pd5 2.817(5) 7 ?
Mg4 Mg3 2.993(6) 32 ?
Mg4 Mg3 2.993(6) 33_545 ?
Mg4 Mg4 2.999(10) 3_665 ?
Mg4 Mg4 2.999(10) 2_655 ?
Mg4 Mg1 3.068(5) 25 ?
Mg4 Mg1 3.068(5) 10 ?
Mg4 Mg5 3.103(7) 3_665 ?
Mg4 Mg5 3.103(7) 2_655 ?
Mg5 Pd4 2.842(6) 25 ?
Mg5 Pd3 2.909(2) 3_665 ?
Mg5 Pd3 2.909(2) 2_655 ?
Mg5 Al2 2.951(5) 2_655 ?
Mg5 Al2 2.951(5) 3_665 ?
Mg5 Mg1 3.040(6) 23_655 ?
Mg5 Mg1 3.040(6) 2_655 ?
Mg5 Mg4 3.103(7) 3_665 ?
Mg5 Mg4 3.103(7) 2_655 ?
Mg5 Mg5 3.113(10) 3_665 ?
Mg5 Mg5 3.113(10) 2_655 ?

Mg5 Pd1 3.128(6) 13_544 ?
Al3 Pd2 2.5831(12) 33_545 ?
Al3 Pd2 2.5831(12) 7_445 ?
Al3 Pd3 2.602(3) 7_445 ?
Al3 Pd3 2.602(3) 33_545 ?
Al3 Al3 2.749(5) 20_556 ?
Al3 Al3 2.749(5) 21_556 ?
Al3 Mg1 2.876(6) 9 ?
Al3 Mg1 2.877(6) 16_545 ?
Al3 Mg2 3.037(5) 33_545 ?
Al3 Mg2 3.037(5) 7_445 ?
Al3 Mg7 3.175(6) 19_556 ?
Al3 Mg7 3.175(6) . ?
Mg6 Al1 2.896(5) 20 ?
Mg6 Al1 2.896(5) 2_655 ?
Mg6 Pd1 2.9413(14) 25 ?
Mg6 Pd1 2.9413(14) 15_554 ?
Mg6 Pd2 3.019(3) 2_655 ?
Mg6 Pd2 3.019(3) 20 ?
Mg6 Al2 3.088(5) 2_655 ?
Mg6 Al2 3.088(5) 20 ?
Mg6 Mg1 3.131(4) 5 ?
Mg6 Mg3 3.170(6) 25 ?
Mg6 Mg3 3.170(6) 15_554 ?
Pd4 Al2 2.534(5) 25 ?
Pd4 Al2 2.534(5) 27_445 ?
Pd4 Al2 2.534(5) 26_455 ?
Pd4 Al1 2.714(5) 7_445 ?
Pd4 Al1 2.714(5) 8 ?
Pd4 Al1 2.714(5) 9_455 ?
Pd4 Pd1 2.7214(15) 31 ?
Pd4 Pd1 2.7216(15) 33_545 ?
Pd4 Pd1 2.7216(15) 32_445 ?
Pd4 Mg5 2.842(6) 26_455 ?
Pd4 Mg5 2.842(6) 27_445 ?
Pd4 Mg5 2.842(6) 25 ?
Mg7 Pd2 2.914(2) 7_445 ?
Mg7 Pd2 2.914(2) 9_455 ?
Mg7 Pd2 2.914(2) 8 ?
Mg7 Al1 3.002(9) 7_445 ?
Mg7 Al1 3.002(9) 9_455 ?
Mg7 Al1 3.002(9) 8 ?
Mg7 Mg2 3.137(7) 31 ?
Mg7 Mg2 3.137(7) 32_445 ?
Mg7 Mg2 3.137(7) 33_545 ?
Mg7 Al3 3.175(6) 21_556 ?
Mg7 Al3 3.175(6) 2 ?
Mg7 Al3 3.175(6) 3 ?
Pd5 Mg4 2.817(5) 26_455 ?
Pd5 Mg4 2.817(5) 14_544 ?
Pd5 Mg4 2.817(5) 25 ?
Pd5 Mg4 2.817(5) 13_444 ?
Pd5 Mg4 2.817(5) 27_445 ?
Pd5 Mg4 2.817(5) 15_554 ?
Pd5 Mg3 2.845(6) 15_554 ?
Pd5 Mg3 2.845(6) 27_445 ?
Pd5 Mg3 2.845(6) 26_455 ?

Pd5 Mg3 2.845(6) 14_544 ?
 Pd5 Mg3 2.845(6) 25 ?
 Pd5 Mg3 2.845(6) 13_444 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
 Pd1 Mg1 Pd3 159.7(2) 15_554 25 ?
 Pd1 Mg1 Al3 145.0(2) 15_554 14_544 ?
 Pd3 Mg1 Al3 54.07(8) 25 14_544 ?
 Pd1 Mg1 Al2 58.28(12) 15_554 2_655 ?
 Pd3 Mg1 Al2 140.6(2) 25 2_655 ?
 Al3 Mg1 Al2 86.85(14) 14_544 2_655 ?
 Pd1 Mg1 Mg5 64.33(13) 15_554 3_665 ?
 Pd3 Mg1 Mg5 127.2(2) 25 3_665 ?
 Al3 Mg1 Mg5 102.48(14) 14_544 3_665 ?
 Al2 Mg1 Mg5 59.6(2) 2_655 3_665 ?
 Pd1 Mg1 Mg4 108.8(2) 15_554 25 ?
 Pd3 Mg1 Mg4 51.18(11) 25 25 ?
 Al3 Mg1 Mg4 101.08(15) 14_544 25 ?
 Al2 Mg1 Mg4 152.5(2) 2_655 25 ?
 Mg5 Mg1 Mg4 141.0(2) 3_665 25 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 50.90(12) 15_554 15_554 ?
 Pd3 Mg1 Mg3 109.2(2) 25 15_554 ?
 Al3 Mg1 Mg3 151.3(2) 14_544 15_554 ?
 Al2 Mg1 Mg3 103.9(2) 2_655 15_554 ?
 Mg5 Mg1 Mg3 105.9(2) 3_665 15_554 ?
 Mg4 Mg1 Mg3 58.0(2) 25 15_554 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 127.1(2) 15_554 12 ?
 Pd3 Mg1 Mg1 64.61(12) 25 12 ?
 Al3 Mg1 Mg1 57.25(9) 14_544 12 ?
 Al2 Mg1 Mg1 100.4(2) 2_655 12 ?
 Mg5 Mg1 Mg1 63.43(15) 3_665 12 ?
 Mg4 Mg1 Mg1 106.0(2) 25 12 ?
 Mg3 Mg1 Mg1 142.41(14) 15_554 12 ?
 Pd1 Mg1 Mg6 58.92(8) 15_554 . ?
 Pd3 Mg1 Mg6 118.39(14) 25 . ?
 Al3 Mg1 Mg6 103.73(14) 14_544 . ?
 Al2 Mg1 Mg6 61.48(15) 2_655 . ?
 Mg5 Mg1 Mg6 112.7(2) 3_665 . ?
 Mg4 Mg1 Mg6 91.1(2) 25 . ?
 Mg3 Mg1 Mg6 61.15(14) 15_554 . ?
 Mg1 Mg1 Mg6 156.1(2) 12 . ?
 Pd1 Mg1 Pd2 98.04(12) 15_554 2_655 ?
 Pd3 Mg1 Pd2 95.73(12) 25 2_655 ?
 Al3 Mg1 Pd2 50.60(8) 14_544 2_655 ?
 Al2 Mg1 Pd2 48.72(11) 2_655 2_655 ?
 Mg5 Mg1 Pd2 100.78(14) 3_665 2_655 ?
 Mg4 Mg1 Pd2 118.2(2) 25 2_655 ?
 Mg3 Mg1 Pd2 118.53(14) 15_554 2_655 ?
 Mg1 Mg1 Pd2 99.06(11) 12 2_655 ?
 Mg6 Mg1 Pd2 57.54(11) . 2_655 ?

Pd1 Mg1 Mg2 119.3(2) 15_554 25 ?
 Pd3 Mg1 Mg2 58.23(12) 25 25 ?
 Al3 Mg1 Mg2 60.28(14) 14_544 25 ?
 Al2 Mg1 Mg2 101.0(2) 2_655 25 ?
 Mg5 Mg1 Mg2 156.2(2) 3_665 25 ?
 Mg4 Mg1 Mg2 62.34(15) 25 25 ?
 Mg3 Mg1 Mg2 91.4(2) 15_554 25 ?
 Mg1 Mg1 Mg2 111.76(15) 12 25 ?
 Mg6 Mg1 Mg2 61.31(12) . 25 ?
 Pd2 Mg1 Mg2 55.97(11) 2_655 25 ?
 Pd1 Mg1 Pd3 101.08(12) 15_554 2_655 ?
 Pd3 Mg1 Pd3 99.00(12) 25 2_655 ?
 Al3 Mg1 Pd3 50.44(7) 14_544 2_655 ?
 Al2 Mg1 Pd3 49.45(11) 2_655 2_655 ?
 Mg5 Mg1 Pd3 55.57(9) 3_665 2_655 ?
 Mg4 Mg1 Pd3 150.0(2) 25 2_655 ?
 Mg3 Mg1 Pd3 151.7(2) 15_554 2_655 ?
 Mg1 Mg1 Pd3 53.68(11) 12 2_655 ?
 Mg6 Mg1 Pd3 103.7(2) . 2_655 ?
 Pd2 Mg1 Pd3 54.56(7) 2_655 2_655 ?
 Mg2 Mg1 Pd3 102.00(15) 25 2_655 ?
 Pd2 Al1 Pd1 119.60(10) . 26_455 ?
 Pd2 Al1 Pd1 119.60(10) . 27 ?
 Pd1 Al1 Pd1 115.0(2) 26_455 27 ?
 Pd2 Al1 Al1 118.16(9) . 3_565 ?
 Pd1 Al1 Al1 59.90(10) 26_455 3_565 ?
 Pd1 Al1 Al1 110.00(10) 27 3_565 ?
 Pd2 Al1 Al1 118.16(9) . 2_665 ?
 Pd1 Al1 Al1 110.00(10) 26_455 2_665 ?
 Pd1 Al1 Al1 59.90(10) 27 2_665 ?
 Al1 Al1 Al1 60.0 3_565 2_665 ?
 Pd2 Al1 Al2 125.8(2) . 19_665 ?
 Pd1 Al1 Al2 62.59(9) 26_455 19_665 ?
 Pd1 Al1 Al2 62.59(9) 27 19_665 ?
 Al1 Al1 Al2 108.22(12) 3_565 19_665 ?
 Al1 Al1 Al2 108.22(12) 2_665 19_665 ?
 Pd2 Al1 Pd4 178.4(2) . 13_554 ?
 Pd1 Al1 Pd4 60.80(9) 26_455 13_554 ?
 Pd1 Al1 Pd4 60.80(9) 27 13_554 ?
 Al1 Al1 Pd4 60.52(8) 3_565 13_554 ?
 Al1 Al1 Pd4 60.52(8) 2_665 13_554 ?
 Al2 Al1 Pd4 55.79(14) 19_665 13_554 ?
 Pd2 Al1 Mg6 68.51(11) . 21 ?
 Pd1 Al1 Mg6 63.72(10) 26_455 21 ?
 Pd1 Al1 Mg6 119.2(2) 27 21 ?
 Al1 Al1 Mg6 116.17(11) 3_565 21 ?
 Al1 Al1 Mg6 173.13(9) 2_665 21 ?
 Al2 Al1 Mg6 66.85(13) 19_665 21 ?
 Pd4 Al1 Mg6 112.78(13) 13_554 21 ?
 Pd2 Al1 Mg6 68.51(11) . 3_665 ?
 Pd1 Al1 Mg6 119.2(2) 26_455 3_665 ?
 Pd1 Al1 Mg6 63.72(10) 27 3_665 ?
 Al1 Al1 Mg6 173.13(9) 3_565 3_665 ?
 Al1 Al1 Mg6 116.17(11) 2_665 3_665 ?
 Al2 Al1 Mg6 66.85(13) 19_665 3_665 ?
 Pd4 Al1 Mg6 112.79(14) 13_554 3_665 ?
 Mg6 Al1 Mg6 67.0(2) 21 3_665 ?

Pd2 Al1 Mg2 65.43(11) . 27 ?
 Pd1 Al1 Mg2 173.3(2) 26_455 27 ?
 Pd1 Al1 Mg2 62.80(10) 27 27 ?
 Al1 Al1 Mg2 114.25(11) 3_565 27 ?
 Al1 Al1 Mg2 63.32(10) 2_665 27 ?
 Al2 Al1 Mg2 118.94(14) 19_665 27 ?
 Pd4 Al1 Mg2 114.04(12) 13_554 27 ?
 Mg6 Al1 Mg2 123.0(2) 21 27 ?
 Mg6 Al1 Mg2 66.14(12) 3_665 27 ?
 Pd2 Al1 Mg2 65.43(11) . 26_455 ?
 Pd1 Al1 Mg2 62.80(11) 26_455 26_455 ?
 Pd1 Al1 Mg2 173.3(2) 27 26_455 ?
 Al1 Al1 Mg2 63.32(10) 3_565 26_455 ?
 Al1 Al1 Mg2 114.25(11) 2_665 26_455 ?
 Al2 Al1 Mg2 118.94(14) 19_665 26_455 ?
 Pd4 Al1 Mg2 114.04(12) 13_554 26_455 ?
 Mg6 Al1 Mg2 66.14(12) 21 26_455 ?
 Mg6 Al1 Mg2 123.0(2) 3_665 26_455 ?
 Mg2 Al1 Mg2 118.6(3) 27 26_455 ?
 Pd2 Al1 Mg7 63.94(14) . 13_554 ?
 Pd1 Al1 Mg7 114.00(11) 26_455 13_554 ?
 Pd1 Al1 Mg7 114.00(11) 27 13_554 ?
 Al1 Al1 Mg7 63.58(10) 3_565 13_554 ?
 Al1 Al1 Mg7 63.58(10) 2_665 13_554 ?
 Al2 Al1 Mg7 170.3(2) 19_665 13_554 ?
 Pd4 Al1 Mg7 114.5(2) 13_554 13_554 ?
 Mg6 Al1 Mg7 120.80(15) 21 13_554 ?
 Mg6 Al1 Mg7 120.80(15) 3_665 13_554 ?
 Mg2 Al1 Mg7 63.31(13) 27 13_554 ?
 Mg2 Al1 Mg7 63.31(13) 26_455 13_554 ?
 Mg3 Pd1 Al1 122.47(14) . 26_455 ?
 Mg3 Pd1 Al1 122.47(14) . 27 ?
 Al1 Pd1 Al1 60.2(2) 26_455 27 ?
 Mg3 Pd1 Pd4 176.33(14) . 31 ?
 Al1 Pd1 Pd4 60.51(10) 26_455 31 ?
 Al1 Pd1 Pd4 60.51(10) 27 31 ?
 Mg3 Pd1 Al2 124.12(10) . 9_565 ?
 Al1 Pd1 Al2 105.97(13) 26_455 9_565 ?
 Al1 Pd1 Al2 59.37(12) 27 9_565 ?
 Pd4 Pd1 Al2 54.75(9) 31 9_565 ?
 Mg3 Pd1 Al2 124.12(10) . 8 ?
 Al1 Pd1 Al2 59.37(12) 26_455 8 ?
 Al1 Pd1 Al2 105.97(13) 27 8 ?
 Pd4 Pd1 Al2 54.75(9) 31 8 ?
 Al2 Pd1 Al2 102.9(2) 9_565 8 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 70.15(13) . 8 ?
 Al1 Pd1 Mg1 167.25(13) 26_455 8 ?
 Al1 Pd1 Mg1 112.82(13) 27 8 ?
 Pd4 Pd1 Mg1 106.97(10) 31 8 ?
 Al2 Pd1 Mg1 62.14(12) 9_565 8 ?
 Al2 Pd1 Mg1 116.70(13) 8 8 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 70.15(13) . 29 ?
 Al1 Pd1 Mg1 112.82(13) 26_455 29 ?
 Al1 Pd1 Mg1 167.25(13) 27 29 ?
 Pd4 Pd1 Mg1 106.97(10) 31 29 ?
 Al2 Pd1 Mg1 116.70(13) 9_565 29 ?
 Al2 Pd1 Mg1 62.14(11) 8 29 ?

Mg1 Pd1 Mg1 71.7(2) 8 29 ?
Mg3 Pd1 Mg6 70.00(12) . 25 ?
Al1 Pd1 Mg6 61.98(14) 26_455 25 ?
Al1 Pd1 Mg6 114.91(12) 27 25 ?
Pd4 Pd1 Mg6 111.16(11) 31 25 ?
Al2 Pd1 Mg6 165.89(15) 9_565 25 ?
Al2 Pd1 Mg6 65.17(13) 8 25 ?
Mg1 Pd1 Mg6 129.03(12) 8 25 ?
Mg1 Pd1 Mg6 65.72(9) 29 25 ?
Mg3 Pd1 Mg6 70.00(12) . 8 ?
Al1 Pd1 Mg6 114.91(12) 26_455 8 ?
Al1 Pd1 Mg6 61.98(14) 27 8 ?
Pd4 Pd1 Mg6 111.16(11) 31 8 ?
Al2 Pd1 Mg6 65.17(13) 9_565 8 ?
Al2 Pd1 Mg6 165.89(14) 8 8 ?
Mg1 Pd1 Mg6 65.72(9) 8 8 ?
Mg1 Pd1 Mg6 129.03(12) 29 8 ?
Mg6 Pd1 Mg6 125.3(2) 25 8 ?
Mg3 Pd1 Mg2 69.1(2) . . ?
Al1 Pd1 Mg2 63.77(12) 26_455 . ?
Al1 Pd1 Mg2 63.77(12) 27 . ?
Pd4 Pd1 Mg2 114.59(13) 31 . ?
Al2 Pd1 Mg2 116.97(11) 9_565 . ?
Al2 Pd1 Mg2 116.97(11) 8 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 124.47(12) 8 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 124.47(12) 29 . ?
Mg6 Pd1 Mg2 65.90(4) 25 . ?
Mg6 Pd1 Mg2 65.90(4) 8 . ?
Mg3 Pd1 Mg5 118.7(2) . 7_455 ?
Al1 Pd1 Mg5 109.72(12) 26_455 7_455 ?
Al1 Pd1 Mg5 109.72(12) 27 7_455 ?
Pd4 Pd1 Mg5 57.64(11) 31 7_455 ?
Al2 Pd1 Mg5 59.53(11) 9_565 7_455 ?
Al2 Pd1 Mg5 59.53(11) 8 7_455 ?
Mg1 Pd1 Mg5 61.16(12) 8 7_455 ?
Mg1 Pd1 Mg5 61.16(12) 29 7_455 ?
Mg6 Pd1 Mg5 115.66(5) 25 7_455 ?
Mg6 Pd1 Mg5 115.66(5) 8 7_455 ?
Mg2 Pd1 Mg5 172.2(2) . 7_455 ?
Al1 Pd2 Al2 120.8(2) . . ?
Al1 Pd2 Al3 126.21(11) . 13_554 ?
Al2 Pd2 Al3 102.63(14) . 13_554 ?
Al1 Pd2 Al3 126.21(11) . 32 ?
Al2 Pd2 Al3 102.63(14) . 32 ?
Al3 Pd2 Al3 64.29(12) 13_554 32 ?
Al1 Pd2 Pd3 176.77(12) . . ?
Al2 Pd2 Pd3 55.97(11) . . ?
Al3 Pd2 Pd3 56.25(7) 13_554 . ?
Al3 Pd2 Pd3 56.25(7) 32 . ?
Al1 Pd2 Mg7 67.7(2) . 13_554 ?
Al2 Pd2 Mg7 171.5(2) . 13_554 ?
Al3 Pd2 Mg7 70.3(2) 13_554 13_554 ?
Al3 Pd2 Mg7 70.3(2) 32 13_554 ?
Pd3 Pd2 Mg7 115.5(2) . 13_554 ?
Al1 Pd2 Mg2 66.33(11) . 26_455 ?
Al2 Pd2 Mg2 117.52(10) . 26_455 ?
Al3 Pd2 Mg2 121.11(14) 13_554 26_455 ?

Al3 Pd2 Mg2 66.13(11) 32 26_455 ?
 Pd3 Pd2 Mg2 114.69(11) . 26_455 ?
 Mg7 Pd2 Mg2 64.63(11) 13_554 26_455 ?
 Al1 Pd2 Mg2 66.33(11) . 27 ?
 Al2 Pd2 Mg2 117.52(10) . 27 ?
 Al3 Pd2 Mg2 66.13(11) 13_554 27 ?
 Al3 Pd2 Mg2 121.11(14) 32 27 ?
 Pd3 Pd2 Mg2 114.69(11) . 27 ?
 Mg7 Pd2 Mg2 64.63(11) 13_554 27 ?
 Mg2 Pd2 Mg2 119.9(2) 26_455 27 ?
 Al1 Pd2 Mg6 63.19(10) . 21 ?
 Al2 Pd2 Mg6 67.27(9) . 21 ?
 Al3 Pd2 Mg6 169.73(10) 13_554 21 ?
 Al3 Pd2 Mg6 114.88(12) 32 21 ?
 Pd3 Pd2 Mg6 114.19(5) . 21 ?
 Mg7 Pd2 Mg6 119.6(2) 13_554 21 ?
 Mg2 Pd2 Mg6 64.87(12) 26_455 21 ?
 Mg2 Pd2 Mg6 119.46(14) 27 21 ?
 Al1 Pd2 Mg6 63.19(10) . 3_665 ?
 Al2 Pd2 Mg6 67.27(9) . 3_665 ?
 Al3 Pd2 Mg6 114.88(12) 13_554 3_665 ?
 Al3 Pd2 Mg6 169.73(10) 32 3_665 ?
 Pd3 Pd2 Mg6 114.19(5) . 3_665 ?
 Mg7 Pd2 Mg6 119.6(2) 13_554 3_665 ?
 Mg2 Pd2 Mg6 119.46(14) 26_455 3_665 ?
 Mg2 Pd2 Mg6 64.87(12) 27 3_665 ?
 Mg6 Pd2 Mg6 63.9(2) 21 3_665 ?
 Al1 Pd2 Mg1 115.28(9) . 3_665 ?
 Al2 Pd2 Mg1 60.52(8) . 3_665 ?
 Al3 Pd2 Mg1 59.37(12) 13_554 3_665 ?
 Al3 Pd2 Mg1 113.03(8) 32 3_665 ?
 Pd3 Pd2 Mg1 63.62(8) . 3_665 ?
 Mg7 Pd2 Mg1 117.16(9) 13_554 3_665 ?
 Mg2 Pd2 Mg1 177.84(13) 26_455 3_665 ?
 Mg2 Pd2 Mg1 62.21(12) 27 3_665 ?
 Mg6 Pd2 Mg1 114.32(11) 21 3_665 ?
 Mg6 Pd2 Mg1 61.04(10) 3_665 3_665 ?
 Al1 Pd2 Mg1 115.28(9) . 24 ?
 Al2 Pd2 Mg1 60.52(8) . 24 ?
 Al3 Pd2 Mg1 113.03(8) 13_554 24 ?
 Al3 Pd2 Mg1 59.37(12) 32 24 ?
 Pd3 Pd2 Mg1 63.62(8) . 24 ?
 Mg7 Pd2 Mg1 117.16(9) 13_554 24 ?
 Mg2 Pd2 Mg1 62.21(12) 26_455 24 ?
 Mg2 Pd2 Mg1 177.84(13) 27 24 ?
 Mg6 Pd2 Mg1 61.04(10) 21 24 ?
 Mg6 Pd2 Mg1 114.32(11) 3_665 24 ?
 Mg1 Pd2 Mg1 115.6(2) 3_665 24 ?
 Pd3 Mg2 Pd1 153.3(2) . . ?
 Pd3 Mg2 Pd2 98.12(13) . 26_455 ?
 Pd1 Mg2 Pd2 96.31(13) . 26_455 ?
 Pd3 Mg2 Pd2 98.12(13) . 27 ?
 Pd1 Mg2 Pd2 96.31(13) . 27 ?
 Pd2 Mg2 Pd2 114.1(2) 26_455 27 ?
 Pd3 Mg2 Al1 146.3(2) . 27 ?
 Pd1 Mg2 Al1 53.43(12) . 27 ?
 Pd2 Mg2 Al1 95.0(2) 26_455 27 ?

Pd2 Mg2 Al1 48.24(10) 27 27 ?
 Pd3 Mg2 Al1 146.3(2) . 26_455 ?
 Pd1 Mg2 Al1 53.43(12) . 26_455 ?
 Pd2 Mg2 Al1 48.24(10) 26_455 26_455 ?
 Pd2 Mg2 Al1 95.0(2) 27 26_455 ?
 Al1 Mg2 Al1 53.4(2) 27 26_455 ?
 Pd3 Mg2 Al3 51.65(10) . 32 ?
 Pd1 Mg2 Al3 147.37(12) . 32 ?
 Pd2 Mg2 Al3 51.07(7) 26_455 32 ?
 Pd2 Mg2 Al3 97.5(2) 27 32 ?
 Al1 Mg2 Al3 120.6(2) 27 32 ?
 Al1 Mg2 Al3 95.93(14) 26_455 32 ?
 Pd3 Mg2 Al3 51.65(10) . 13_554 ?
 Pd1 Mg2 Al3 147.37(12) . 13_554 ?
 Pd2 Mg2 Al3 97.5(2) 26_455 13_554 ?
 Pd2 Mg2 Al3 51.07(7) 27 13_554 ?
 Al1 Mg2 Al3 95.93(14) 27 13_554 ?
 Al1 Mg2 Al3 120.6(2) 26_455 13_554 ?
 Al3 Mg2 Al3 53.81(13) 32 13_554 ?
 Pd3 Mg2 Mg7 104.0(2) . 31 ?
 Pd1 Mg2 Mg7 102.7(2) . 31 ?
 Pd2 Mg2 Mg7 57.07(9) 26_455 31 ?
 Pd2 Mg2 Mg7 57.07(9) 27 31 ?
 Al1 Mg2 Mg7 58.8(2) 27 31 ?
 Al1 Mg2 Mg7 58.8(2) 26_455 31 ?
 Al3 Mg2 Mg7 61.9(2) 32 31 ?
 Al3 Mg2 Mg7 61.9(2) 13_554 31 ?
 Pd3 Mg2 Mg3 103.7(2) . . ?
 Pd1 Mg2 Mg3 49.59(13) . . ?
 Pd2 Mg2 Mg3 118.47(11) 26_455 . ?
 Pd2 Mg2 Mg3 118.47(11) 27 . ?
 Al1 Mg2 Mg3 96.9(2) 27 . ?
 Al1 Mg2 Mg3 96.9(2) 26_455 . ?
 Al3 Mg2 Mg3 140.3(2) 32 . ?
 Al3 Mg2 Mg3 140.3(2) 13_554 . ?
 Mg7 Mg2 Mg3 152.3(3) 31 . ?
 Pd3 Mg2 Mg1 55.67(11) . 25 ?
 Pd1 Mg2 Mg1 113.86(14) . 25 ?
 Pd2 Mg2 Mg1 61.82(8) 26_455 25 ?
 Pd2 Mg2 Mg1 149.7(2) 27 25 ?
 Al1 Mg2 Mg1 154.0(2) 27 25 ?
 Al1 Mg2 Mg1 100.60(12) 26_455 25 ?
 Al3 Mg2 Mg1 55.34(13) 32 25 ?
 Al3 Mg2 Mg1 98.7(2) 13_554 25 ?
 Mg7 Mg2 Mg1 110.5(2) 31 25 ?
 Mg3 Mg2 Mg1 85.4(2) . 25 ?
 Pd3 Mg2 Mg1 55.67(11) . 10 ?
 Pd1 Mg2 Mg1 113.86(14) . 10 ?
 Pd2 Mg2 Mg1 149.7(2) 26_455 10 ?
 Pd2 Mg2 Mg1 61.82(8) 27 10 ?
 Al1 Mg2 Mg1 100.60(12) 27 10 ?
 Al1 Mg2 Mg1 154.0(2) 26_455 10 ?
 Al3 Mg2 Mg1 98.7(2) 32 10 ?
 Al3 Mg2 Mg1 55.34(13) 13_554 10 ?
 Mg7 Mg2 Mg1 110.5(2) 31 10 ?
 Mg3 Mg2 Mg1 85.4(2) . 10 ?
 Mg1 Mg2 Mg1 105.4(2) 25 10 ?

Al2 Pd3 Mg4 124.5(2) . . ?
 Al2 Pd3 Al3 100.47(10) . 32 ?
 Mg4 Pd3 Al3 125.48(11) . 32 ?
 Al2 Pd3 Al3 100.47(10) . 13_554 ?
 Mg4 Pd3 Al3 125.48(11) . 13_554 ?
 Al3 Pd3 Al3 63.8(2) 32 13_554 ?
 Al2 Pd3 Mg1 117.16(8) . 10 ?
 Mg4 Pd3 Mg1 68.86(9) . 10 ?
 Al3 Pd3 Mg1 119.02(13) 32 10 ?
 Al3 Pd3 Mg1 63.53(11) 13_554 10 ?
 Al2 Pd3 Mg1 117.16(8) . 25 ?
 Mg4 Pd3 Mg1 68.86(9) . 25 ?
 Al3 Pd3 Mg1 63.53(11) 32 25 ?
 Al3 Pd3 Mg1 119.02(13) 13_554 25 ?
 Mg1 Pd3 Mg1 123.5(2) 10 25 ?
 Al2 Pd3 Pd2 54.02(11) . . ?
 Mg4 Pd3 Pd2 178.55(13) . . ?
 Al3 Pd3 Pd2 55.63(4) 32 . ?
 Al3 Pd3 Pd2 55.63(4) 13_554 . ?
 Mg1 Pd3 Pd2 111.61(8) 10 . ?
 Mg1 Pd3 Pd2 111.61(8) 25 . ?
 Al2 Pd3 Mg5 64.95(14) . 3_665 ?
 Mg4 Pd3 Mg5 68.77(15) . 3_665 ?
 Al3 Pd3 Mg5 113.61(14) 32 3_665 ?
 Al3 Pd3 Mg5 164.99(11) 13_554 3_665 ?
 Mg1 Pd3 Mg5 125.06(15) 10 3_665 ?
 Mg1 Pd3 Mg5 68.37(13) 25 3_665 ?
 Pd2 Pd3 Mg5 110.04(11) . 3_665 ?
 Al2 Pd3 Mg5 64.95(14) . 2_655 ?
 Mg4 Pd3 Mg5 68.77(15) . 2_655 ?
 Al3 Pd3 Mg5 164.99(11) 32 2_655 ?
 Al3 Pd3 Mg5 113.61(14) 13_554 2_655 ?
 Mg1 Pd3 Mg5 68.37(13) 10 2_655 ?
 Mg1 Pd3 Mg5 125.06(15) 25 2_655 ?
 Pd2 Pd3 Mg5 110.04(11) . 2_655 ?
 Mg5 Pd3 Mg5 64.7(2) 3_665 2_655 ?
 Al2 Pd3 Mg2 164.1(2) . . ?
 Mg4 Pd3 Mg2 71.4(2) . . ?
 Al3 Pd3 Mg2 66.26(10) 32 . ?
 Al3 Pd3 Mg2 66.26(10) 13_554 . ?
 Mg1 Pd3 Mg2 66.11(9) 10 . ?
 Mg1 Pd3 Mg2 66.11(9) 25 . ?
 Pd2 Pd3 Mg2 110.03(12) . . ?
 Mg5 Pd3 Mg2 127.44(13) 3_665 . ?
 Mg5 Pd3 Mg2 127.44(13) 2_655 . ?
 Al2 Pd3 Mg1 59.25(8) . 24 ?
 Mg4 Pd3 Mg1 117.70(9) . 24 ?
 Al3 Pd3 Mg1 58.46(11) 32 24 ?
 Al3 Pd3 Mg1 110.89(11) 13_554 24 ?
 Mg1 Pd3 Mg1 173.41(11) 10 24 ?
 Mg1 Pd3 Mg1 61.71(13) 25 24 ?
 Pd2 Pd3 Mg1 61.82(8) . 24 ?
 Mg5 Pd3 Mg1 59.54(13) 3_665 24 ?
 Mg5 Pd3 Mg1 112.60(13) 2_655 24 ?
 Mg2 Pd3 Mg1 115.68(8) . 24 ?
 Al2 Pd3 Mg1 59.25(8) . 3_665 ?
 Mg4 Pd3 Mg1 117.70(9) . 3_665 ?

Al3 Pd3 Mg1 110.89(11) 32 3_665 ?
 Al3 Pd3 Mg1 58.46(11) 13_554 3_665 ?
 Mg1 Pd3 Mg1 61.71(13) 10 3_665 ?
 Mg1 Pd3 Mg1 173.41(11) 25 3_665 ?
 Pd2 Pd3 Mg1 61.82(8) . 3_665 ?
 Mg5 Pd3 Mg1 112.60(13) 3_665 3_665 ?
 Mg5 Pd3 Mg1 59.54(13) 2_655 3_665 ?
 Mg2 Pd3 Mg1 115.68(8) . 3_665 ?
 Mg1 Pd3 Mg1 112.76(14) 24 3_665 ?
 Pd1 Mg3 Pd5 176.2(2) . 7 ?
 Pd1 Mg3 Mg4 125.4(2) . . ?
 Pd5 Mg3 Mg4 58.4(2) 7 . ?
 Pd1 Mg3 Mg3 122.55(2) . 33_545 ?
 Pd5 Mg3 Mg3 58.49(3) 7 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 61.0(2) . 33_545 ?
 Pd1 Mg3 Mg3 122.55(2) . 32 ?
 Pd5 Mg3 Mg3 58.49(3) 7 32 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 61.0(2) . 32 ?
 Mg3 Mg3 Mg3 109.3(2) 33_545 32 ?
 Pd1 Mg3 Mg4 119.3(2) . 32 ?
 Pd5 Mg3 Mg4 57.63(13) 7 32 ?
 Mg4 Mg3 Mg4 107.4(2) . 32 ?
 Mg3 Mg3 Mg4 107.3(2) 33_545 32 ?
 Mg3 Mg3 Mg4 58.7(2) 32 32 ?
 Pd1 Mg3 Mg4 119.3(2) . 33_545 ?
 Pd5 Mg3 Mg4 57.63(13) 7 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg4 107.4(2) . 33_545 ?
 Mg3 Mg3 Mg4 58.7(2) 33_545 33_545 ?
 Mg3 Mg3 Mg4 107.3(2) 32 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg4 60.1(2) 32 33_545 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 58.95(13) . 8 ?
 Pd5 Mg3 Mg1 118.0(2) 7 8 ?
 Mg4 Mg3 Mg1 147.68(9) . 8 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 148.8(3) 33_545 8 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 89.2(2) 32 8 ?
 Mg4 Mg3 Mg1 60.42(15) 32 8 ?
 Mg4 Mg3 Mg1 92.4(2) 33_545 8 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 58.95(13) . 29 ?
 Pd5 Mg3 Mg1 118.0(2) 7 29 ?
 Mg4 Mg3 Mg1 147.68(9) . 29 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 89.2(2) 33_545 29 ?
 Mg3 Mg3 Mg1 148.8(3) 32 29 ?
 Mg4 Mg3 Mg1 92.4(2) 32 29 ?
 Mg4 Mg3 Mg1 60.42(15) 33_545 29 ?
 Mg1 Mg3 Mg1 64.5(2) 8 29 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 61.3(2) . . ?
 Pd5 Mg3 Mg2 122.5(2) 7 . ?
 Mg4 Mg3 Mg2 64.0(2) . . ?
 Mg3 Mg3 Mg2 94.1(2) 33_545 . ?
 Mg3 Mg3 Mg2 94.1(2) 32 . ?
 Mg4 Mg3 Mg2 149.43(13) 32 . ?
 Mg4 Mg3 Mg2 149.43(13) 33_545 . ?
 Mg1 Mg3 Mg2 109.9(2) 8 . ?
 Mg1 Mg3 Mg2 109.9(2) 29 . ?
 Pd1 Mg3 Mg6 60.66(10) . 25 ?
 Pd5 Mg3 Mg6 120.51(11) 7 25 ?
 Mg4 Mg3 Mg6 92.98(14) . 25 ?

Mg3 Mg3 Mg6 62.03(10) 33_545 25 ?
 Mg3 Mg3 Mg6 151.1(3) 32 25 ?
 Mg4 Mg3 Mg6 148.8(2) 32 25 ?
 Mg4 Mg3 Mg6 91.70(12) 33_545 25 ?
 Mg1 Mg3 Mg6 112.2(2) 8 25 ?
 Mg1 Mg3 Mg6 59.87(10) 29 25 ?
 Mg2 Mg3 Mg6 61.03(10) . 25 ?
 Pd1 Mg3 Mg6 60.66(10) . 8 ?
 Pd5 Mg3 Mg6 120.51(11) 7 8 ?
 Mg4 Mg3 Mg6 92.98(14) . 8 ?
 Mg3 Mg3 Mg6 151.1(3) 33_545 8 ?
 Mg3 Mg3 Mg6 62.03(10) 32 8 ?
 Mg4 Mg3 Mg6 91.70(12) 32 8 ?
 Mg4 Mg3 Mg6 148.8(2) 33_545 8 ?
 Mg1 Mg3 Mg6 59.87(10) 8 8 ?
 Mg1 Mg3 Mg6 112.2(2) 29 8 ?
 Mg2 Mg3 Mg6 61.03(10) . 8 ?
 Mg6 Mg3 Mg6 111.0(2) 25 8 ?
 Pd2 Al2 Pd4 175.7(2) . 25 ?
 Pd2 Al2 Pd3 70.00(13) . . ?
 Pd4 Al2 Pd3 114.3(2) 25 . ?
 Pd2 Al2 Al1 113.4(2) . 19_665 ?
 Pd4 Al2 Al1 62.3(2) 25 19_665 ?
 Pd3 Al2 Al1 176.6(2) . 19_665 ?
 Pd2 Al2 Pd1 116.94(11) . 15_554 ?
 Pd4 Al2 Pd1 61.31(9) 25 15_554 ?
 Pd3 Al2 Pd1 120.85(10) . 15_554 ?
 Al1 Al2 Pd1 58.03(9) 19_665 15_554 ?
 Pd2 Al2 Pd1 116.94(11) . 14_654 ?
 Pd4 Al2 Pd1 61.31(9) 25 14_654 ?
 Pd3 Al2 Pd1 120.85(10) . 14_654 ?
 Al1 Al2 Pd1 58.03(9) 19_665 14_654 ?
 Pd1 Al2 Pd1 107.4(2) 15_554 14_654 ?
 Pd2 Al2 Mg1 70.76(12) . 3_665 ?
 Pd4 Al2 Mg1 110.19(12) 25 3_665 ?
 Pd3 Al2 Mg1 71.31(12) . 3_665 ?
 Al1 Al2 Mg1 109.50(12) 19_665 3_665 ?
 Pd1 Al2 Mg1 166.7(2) 15_554 3_665 ?
 Pd1 Al2 Mg1 59.58(8) 14_654 3_665 ?
 Pd2 Al2 Mg1 70.76(12) . 24 ?
 Pd4 Al2 Mg1 110.19(12) 25 24 ?
 Pd3 Al2 Mg1 71.31(12) . 24 ?
 Al1 Al2 Mg1 109.50(12) 19_665 24 ?
 Pd1 Al2 Mg1 59.58(8) 15_554 24 ?
 Pd1 Al2 Mg1 166.7(2) 14_654 24 ?
 Mg1 Al2 Mg1 133.2(2) 3_665 24 ?
 Pd2 Al2 Mg5 121.5(2) . 2_655 ?
 Pd4 Al2 Mg5 61.86(13) 25 2_655 ?
 Pd3 Al2 Mg5 63.23(13) . 2_655 ?
 Al1 Al2 Mg5 114.0(2) 19_665 2_655 ?
 Pd1 Al2 Mg5 116.3(2) 15_554 2_655 ?
 Pd1 Al2 Mg5 65.98(11) 14_654 2_655 ?
 Mg1 Al2 Mg5 62.62(14) 3_665 2_655 ?
 Mg1 Al2 Mg5 120.6(2) 24 2_655 ?
 Pd2 Al2 Mg5 121.5(2) . 3_665 ?
 Pd4 Al2 Mg5 61.86(13) 25 3_665 ?
 Pd3 Al2 Mg5 63.23(13) . 3_665 ?

Al1 Al2 Mg5 114.0(2) 19_665 3_665 ?
 Pd1 Al2 Mg5 65.98(11) 15_554 3_665 ?
 Pd1 Al2 Mg5 116.3(2) 14_654 3_665 ?
 Mg1 Al2 Mg5 120.6(2) 3_665 3_665 ?
 Mg1 Al2 Mg5 62.62(14) 24 3_665 ?
 Mg5 Al2 Mg5 63.7(2) 2_655 3_665 ?
 Pd2 Al2 Mg6 64.40(10) . 21 ?
 Pd4 Al2 Mg6 112.09(15) 25 21 ?
 Pd3 Al2 Mg6 123.11(15) . 21 ?
 Al1 Al2 Mg6 59.58(12) 19_665 21 ?
 Pd1 Al2 Mg6 59.83(9) 15_554 21 ?
 Pd1 Al2 Mg6 109.4(2) 14_654 21 ?
 Mg1 Al2 Mg6 119.7(2) 3_665 21 ?
 Mg1 Al2 Mg6 62.99(13) 24 21 ?
 Mg5 Al2 Mg6 173.4(2) 2_655 21 ?
 Mg5 Al2 Mg6 116.59(15) 3_665 21 ?
 Pd2 Al2 Mg6 64.40(10) . 3_665 ?
 Pd4 Al2 Mg6 112.09(15) 25 3_665 ?
 Pd3 Al2 Mg6 123.11(15) . 3_665 ?
 Al1 Al2 Mg6 59.58(12) 19_665 3_665 ?
 Pd1 Al2 Mg6 109.4(2) 15_554 3_665 ?
 Pd1 Al2 Mg6 59.83(9) 14_654 3_665 ?
 Mg1 Al2 Mg6 62.99(13) 3_665 3_665 ?
 Mg1 Al2 Mg6 119.7(2) 24 3_665 ?
 Mg5 Al2 Mg6 116.59(15) 2_655 3_665 ?
 Mg5 Al2 Mg6 173.4(2) 3_665 3_665 ?
 Mg6 Al2 Mg6 62.3(2) 21 3_665 ?
 Pd3 Mg4 Pd5 179.8(2) . 7 ?
 Pd3 Mg4 Mg3 120.8(2) . . ?
 Pd5 Mg4 Mg3 59.38(15) 7 . ?
 Pd3 Mg4 Mg3 121.51(15) . 32 ?
 Pd5 Mg4 Mg3 58.56(13) 7 32 ?
 Mg3 Mg4 Mg3 60.34(12) . 32 ?
 Pd3 Mg4 Mg3 121.51(15) . 33_545 ?
 Pd5 Mg4 Mg3 58.56(13) 7 33_545 ?
 Mg3 Mg4 Mg3 60.34(12) . 33_545 ?
 Mg3 Mg4 Mg3 108.3(3) 32 33_545 ?
 Pd3 Mg4 Mg4 121.99(10) . 3_665 ?
 Pd5 Mg4 Mg4 57.84(9) 7 3_665 ?
 Mg3 Mg4 Mg4 108.46(13) . 3_665 ?
 Mg3 Mg4 Mg4 59.93(12) 32 3_665 ?
 Mg3 Mg4 Mg4 108.03(13) 33_545 3_665 ?
 Pd3 Mg4 Mg4 121.99(10) . 2_655 ?
 Pd5 Mg4 Mg4 57.84(9) 7 2_655 ?
 Mg3 Mg4 Mg4 108.46(13) . 2_655 ?
 Mg3 Mg4 Mg4 108.03(13) 32 2_655 ?
 Mg3 Mg4 Mg4 59.93(12) 33_545 2_655 ?
 Mg4 Mg4 Mg4 60.0 3_665 2_655 ?
 Pd3 Mg4 Mg1 59.96(12) . 25 ?
 Pd5 Mg4 Mg1 120.11(12) 7 25 ?
 Mg3 Mg4 Mg1 90.7(2) . 25 ?
 Mg3 Mg4 Mg1 148.2(2) 32 25 ?
 Mg3 Mg4 Mg1 61.56(13) 33_545 25 ?
 Mg4 Mg4 Mg1 150.30(12) 3_665 25 ?
 Mg4 Mg4 Mg1 92.91(12) 2_655 25 ?
 Pd3 Mg4 Mg1 59.96(12) . 10 ?
 Pd5 Mg4 Mg1 120.11(12) 7 10 ?

Mg3 Mg4 Mg1 90.7(2) . 10 ?
 Mg3 Mg4 Mg1 61.56(13) 32 10 ?
 Mg3 Mg4 Mg1 148.2(2) 33_545 10 ?
 Mg4 Mg4 Mg1 92.91(12) 3_665 10 ?
 Mg4 Mg4 Mg1 150.30(12) 2_655 10 ?
 Mg1 Mg4 Mg1 109.7(2) 25 10 ?
 Pd3 Mg4 Mg5 60.89(11) . 3_665 ?
 Pd5 Mg4 Mg5 118.9(2) 7 3_665 ?
 Mg3 Mg4 Mg5 149.72(11) . 3_665 ?
 Mg3 Mg4 Mg5 148.2(2) 32 3_665 ?
 Mg3 Mg4 Mg5 92.10(14) 33_545 3_665 ?
 Mg4 Mg4 Mg5 91.06(12) 3_665 3_665 ?
 Mg4 Mg4 Mg5 61.10(11) 2_655 3_665 ?
 Mg1 Mg4 Mg5 63.22(14) 25 3_665 ?
 Mg1 Mg4 Mg5 111.7(2) 10 3_665 ?
 Pd3 Mg4 Mg5 60.89(11) . 2_655 ?
 Pd5 Mg4 Mg5 118.9(2) 7 2_655 ?
 Mg3 Mg4 Mg5 149.72(11) . 2_655 ?
 Mg3 Mg4 Mg5 92.10(14) 32 2_655 ?
 Mg3 Mg4 Mg5 148.2(2) 33_545 2_655 ?
 Mg4 Mg4 Mg5 61.10(11) 3_665 2_655 ?
 Mg4 Mg4 Mg5 91.06(12) 2_655 2_655 ?
 Mg1 Mg4 Mg5 111.7(2) 25 2_655 ?
 Mg1 Mg4 Mg5 63.22(14) 10 2_655 ?
 Mg5 Mg4 Mg5 60.2(2) 3_665 2_655 ?
 Pd3 Mg4 Mg2 59.6(2) . . ?
 Pd5 Mg4 Mg2 120.6(2) 7 . ?
 Mg3 Mg4 Mg2 61.2(2) . . ?
 Mg3 Mg4 Mg2 92.08(15) 32 . ?
 Mg3 Mg4 Mg2 92.08(15) 33_545 . ?
 Mg4 Mg4 Mg2 149.20(3) 3_665 . ?
 Mg4 Mg4 Mg2 149.20(3) 2_655 . ?
 Mg1 Mg4 Mg2 60.13(12) 25 . ?
 Mg1 Mg4 Mg2 60.13(12) 10 . ?
 Mg5 Mg4 Mg2 111.8(2) 3_665 . ?
 Mg5 Mg4 Mg2 111.8(2) 2_655 . ?
 Pd4 Mg5 Pd3 96.17(11) 25 3_665 ?
 Pd4 Mg5 Pd3 96.17(11) 25 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Pd3 158.4(2) 3_665 2_655 ?
 Pd4 Mg5 Al2 51.83(12) 25 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Al2 146.4(2) 3_665 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Al2 51.83(10) 2_655 2_655 ?
 Pd4 Mg5 Al2 51.83(12) 25 3_665 ?
 Pd3 Mg5 Al2 51.83(10) 3_665 3_665 ?
 Pd3 Mg5 Al2 146.4(2) 2_655 3_665 ?
 Al2 Mg5 Al2 95.3(2) 2_655 3_665 ?
 Pd4 Mg5 Mg1 98.5(2) 25 23_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg1 130.2(2) 3_665 23_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg1 64.89(9) 2_655 23_655 ?
 Al2 Mg5 Mg1 57.81(12) 2_655 23_655 ?
 Al2 Mg5 Mg1 105.8(2) 3_665 23_655 ?
 Pd4 Mg5 Mg1 98.5(2) 25 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg1 64.89(9) 3_665 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg1 130.2(2) 2_655 2_655 ?
 Al2 Mg5 Mg1 105.8(2) 2_655 2_655 ?
 Al2 Mg5 Mg1 57.81(12) 3_665 2_655 ?
 Mg1 Mg5 Mg1 66.0(2) 23_655 2_655 ?

Pd4 Mg5 Mg4 116.6(2) 25 3_665 ?
 Pd3 Mg5 Mg4 50.34(12) 3_665 3_665 ?
 Pd3 Mg5 Mg4 108.1(2) 2_655 3_665 ?
 Al2 Mg5 Mg4 146.7(2) 2_655 3_665 ?
 Al2 Mg5 Mg4 96.99(13) 3_665 3_665 ?
 Mg1 Mg5 Mg4 144.9(2) 23_655 3_665 ?
 Mg1 Mg5 Mg4 106.97(15) 2_655 3_665 ?
 Pd4 Mg5 Mg4 116.6(2) 25 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg4 108.1(2) 3_665 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg4 50.34(12) 2_655 2_655 ?
 Al2 Mg5 Mg4 96.99(13) 2_655 2_655 ?
 Al2 Mg5 Mg4 146.7(2) 3_665 2_655 ?
 Mg1 Mg5 Mg4 106.97(15) 23_655 2_655 ?
 Mg1 Mg5 Mg4 144.9(2) 2_655 2_655 ?
 Mg4 Mg5 Mg4 57.8(2) 3_665 2_655 ?
 Pd4 Mg5 Mg5 56.79(9) 25 3_665 ?
 Pd3 Mg5 Mg5 116.56(11) 3_665 3_665 ?
 Pd3 Mg5 Mg5 57.64(11) 2_655 3_665 ?
 Al2 Mg5 Mg5 58.17(12) 2_655 3_665 ?
 Al2 Mg5 Mg5 102.20(12) 3_665 3_665 ?
 Mg1 Mg5 Mg5 111.26(11) 23_655 3_665 ?
 Mg1 Mg5 Mg5 155.13(12) 2_655 3_665 ?
 Mg4 Mg5 Mg5 88.95(12) 3_665 3_665 ?
 Mg4 Mg5 Mg5 59.89(11) 2_655 3_665 ?
 Pd4 Mg5 Mg5 56.79(9) 25 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg5 57.64(11) 3_665 2_655 ?
 Pd3 Mg5 Mg5 116.56(11) 2_655 2_655 ?
 Al2 Mg5 Mg5 102.20(12) 2_655 2_655 ?
 Al2 Mg5 Mg5 58.17(12) 3_665 2_655 ?
 Mg1 Mg5 Mg5 155.13(12) 23_655 2_655 ?
 Mg1 Mg5 Mg5 111.26(11) 2_655 2_655 ?
 Mg4 Mg5 Mg5 59.89(11) 3_665 2_655 ?
 Mg4 Mg5 Mg5 88.95(12) 2_655 2_655 ?
 Mg5 Mg5 Mg5 60.001(1) 3_665 2_655 ?
 Pd4 Mg5 Pd1 53.99(10) 25 13_544 ?
 Pd3 Mg5 Pd1 100.79(11) 3_665 13_544 ?
 Pd3 Mg5 Pd1 100.79(11) 2_655 13_544 ?
 Al2 Mg5 Pd1 54.49(11) 2_655 13_544 ?
 Al2 Mg5 Pd1 54.49(11) 3_665 13_544 ?
 Mg1 Mg5 Pd1 54.51(12) 23_655 13_544 ?
 Mg1 Mg5 Pd1 54.51(12) 2_655 13_544 ?
 Mg4 Mg5 Pd1 150.66(11) 3_665 13_544 ?
 Mg4 Mg5 Pd1 150.66(11) 2_655 13_544 ?
 Mg5 Mg5 Pd1 102.74(9) 3_665 13_544 ?
 Mg5 Mg5 Pd1 102.74(9) 2_655 13_544 ?
 Pd2 Al3 Pd2 168.0(2) 33_545 7_445 ?
 Pd2 Al3 Pd3 118.06(7) 33_545 7_445 ?
 Pd2 Al3 Pd3 68.12(4) 7_445 7_445 ?
 Pd2 Al3 Pd3 68.12(4) 33_545 33_545 ?
 Pd2 Al3 Pd3 118.06(7) 7_445 33_545 ?
 Pd3 Al3 Pd3 124.2(2) 7_445 33_545 ?
 Pd2 Al3 Al3 115.32(7) 33_545 20_556 ?
 Pd2 Al3 Al3 57.86(6) 7_445 20_556 ?
 Pd3 Al3 Al3 58.12(9) 7_445 20_556 ?
 Pd3 Al3 Al3 175.00(5) 33_545 20_556 ?
 Pd2 Al3 Al3 57.86(6) 33_545 21_556 ?
 Pd2 Al3 Al3 115.32(7) 7_445 21_556 ?

Pd3 Al3 Al3 174.99(5) 7_445 21_556 ?
 Pd3 Al3 Al3 58.12(9) 33_545 21_556 ?
 Al3 Al3 Al3 119.999(2) 20_556 21_556 ?
 Pd2 Al3 Mg1 121.1(2) 33_545 9 ?
 Pd2 Al3 Mg1 70.03(10) 7_445 9 ?
 Pd3 Al3 Mg1 71.10(13) 7_445 9 ?
 Pd3 Al3 Mg1 62.40(11) 33_545 9 ?
 Al3 Al3 Mg1 116.53(8) 20_556 9 ?
 Al3 Al3 Mg1 113.23(8) 21_556 9 ?
 Pd2 Al3 Mg1 70.02(10) 33_545 16_545 ?
 Pd2 Al3 Mg1 121.1(2) 7_445 16_545 ?
 Pd3 Al3 Mg1 62.40(11) 7_445 16_545 ?
 Pd3 Al3 Mg1 71.10(13) 33_545 16_545 ?
 Al3 Al3 Mg1 113.23(8) 20_556 16_545 ?
 Al3 Al3 Mg1 116.53(8) 21_556 16_545 ?
 Mg1 Al3 Mg1 65.5(2) 9 16_545 ?
 Pd2 Al3 Mg2 116.35(7) 33_545 33_545 ?
 Pd2 Al3 Mg2 62.80(8) 7_445 33_545 ?
 Pd3 Al3 Mg2 121.81(9) 7_445 33_545 ?
 Pd3 Al3 Mg2 62.09(10) 33_545 33_545 ?
 Al3 Al3 Mg2 112.93(11) 20_556 33_545 ?
 Al3 Al3 Mg2 63.10(7) 21_556 33_545 ?
 Mg1 Al3 Mg2 64.38(12) 9 33_545 ?
 Mg1 Al3 Mg2 122.6(2) 16_545 33_545 ?
 Pd2 Al3 Mg2 62.80(8) 33_545 7_445 ?
 Pd2 Al3 Mg2 116.35(7) 7_445 7_445 ?
 Pd3 Al3 Mg2 62.09(10) 7_445 7_445 ?
 Pd3 Al3 Mg2 121.81(9) 33_545 7_445 ?
 Al3 Al3 Mg2 63.09(7) 20_556 7_445 ?
 Al3 Al3 Mg2 112.92(11) 21_556 7_445 ?
 Mg1 Al3 Mg2 122.6(2) 9 7_445 ?
 Mg1 Al3 Mg2 64.38(12) 16_545 7_445 ?
 Mg2 Al3 Mg2 172.8(3) 33_545 7_445 ?
 Pd2 Al3 Mg7 59.75(13) 33_545 19_556 ?
 Pd2 Al3 Mg7 108.8(2) 7_445 19_556 ?
 Pd3 Al3 Mg7 111.41(8) 7_445 19_556 ?
 Pd3 Al3 Mg7 116.44(8) 33_545 19_556 ?
 Al3 Al3 Mg7 64.35(4) 20_556 19_556 ?
 Al3 Al3 Mg7 64.35(4) 21_556 19_556 ?
 Mg1 Al3 Mg7 176.8(2) 9 19_556 ?
 Mg1 Al3 Mg7 117.2(2) 16_545 19_556 ?
 Mg2 Al3 Mg7 112.4(2) 33_545 19_556 ?
 Mg2 Al3 Mg7 60.6(2) 7_445 19_556 ?
 Pd2 Al3 Mg7 108.9(2) 33_545 . ?
 Pd2 Al3 Mg7 59.75(13) 7_445 . ?
 Pd3 Al3 Mg7 116.44(8) 7_445 . ?
 Pd3 Al3 Mg7 111.41(8) 33_545 . ?
 Al3 Al3 Mg7 64.35(4) 20_556 . ?
 Al3 Al3 Mg7 64.35(4) 21_556 . ?
 Mg1 Al3 Mg7 117.2(2) 9 . ?
 Mg1 Al3 Mg7 176.8(2) 16_545 . ?
 Mg2 Al3 Mg7 60.6(2) 33_545 . ?
 Mg2 Al3 Mg7 112.4(2) 7_445 . ?
 Mg7 Al3 Mg7 60.1(3) 19_556 . ?
 Al1 Mg6 Al1 113.0(2) 20 2_655 ?
 Al1 Mg6 Pd1 145.80(14) 20 25 ?
 Al1 Mg6 Pd1 54.29(7) 2_655 25 ?

Al1 Mg6 Pd1 54.29(7) 20 15_554 ?
 Al1 Mg6 Pd1 145.80(14) 2_655 15_554 ?
 Pd1 Mg6 Pd1 154.5(2) 25 15_554 ?
 Al1 Mg6 Pd2 94.65(15) 20 2_655 ?
 Al1 Mg6 Pd2 48.31(10) 2_655 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 95.08(5) 25 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 98.33(5) 15_554 2_655 ?
 Al1 Mg6 Pd2 48.31(10) 20 20 ?
 Al1 Mg6 Pd2 94.65(15) 2_655 20 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 98.33(5) 25 20 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 95.08(5) 15_554 20 ?
 Pd2 Mg6 Pd2 116.1(2) 2_655 20 ?
 Al1 Mg6 Al2 53.56(13) 20 2_655 ?
 Al1 Mg6 Al2 91.3(2) 2_655 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Al2 143.30(13) 25 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Al2 55.01(7) 15_554 2_655 ?
 Pd2 Mg6 Al2 48.33(10) 2_655 2_655 ?
 Pd2 Mg6 Al2 96.72(15) 20 2_655 ?
 Al1 Mg6 Al2 91.3(2) 20 20 ?
 Al1 Mg6 Al2 53.56(13) 2_655 20 ?
 Pd1 Mg6 Al2 55.01(7) 25 20 ?
 Pd1 Mg6 Al2 143.30(13) 15_554 20 ?
 Pd2 Mg6 Al2 96.72(15) 2_655 20 ?
 Pd2 Mg6 Al2 48.33(10) 20 20 ?
 Al2 Mg6 Al2 117.7(2) 2_655 20 ?
 Al1 Mg6 Mg1 102.92(12) 20 5 ?
 Al1 Mg6 Mg1 98.65(12) 2_655 5 ?
 Pd1 Mg6 Mg1 55.36(9) 25 5 ?
 Pd1 Mg6 Mg1 114.77(12) 15_554 5 ?
 Pd2 Mg6 Mg1 146.85(10) 2_655 5 ?
 Pd2 Mg6 Mg1 61.41(8) 20 5 ?
 Al2 Mg6 Mg1 156.47(14) 2_655 5 ?
 Al2 Mg6 Mg1 55.53(9) 20 5 ?
 Al1 Mg6 Mg1 98.65(12) 20 . ?
 Al1 Mg6 Mg1 102.92(12) 2_655 . ?
 Pd1 Mg6 Mg1 114.77(12) 25 . ?
 Pd1 Mg6 Mg1 55.36(9) 15_554 . ?
 Pd2 Mg6 Mg1 61.41(8) 2_655 . ?
 Pd2 Mg6 Mg1 146.85(10) 20 . ?
 Al2 Mg6 Mg1 55.53(9) 2_655 . ?
 Al2 Mg6 Mg1 156.47(14) 20 . ?
 Mg1 Mg6 Mg1 140.4(2) 5 . ?
 Al1 Mg6 Mg3 146.8(2) 20 25 ?
 Al1 Mg6 Mg3 97.91(11) 2_655 25 ?
 Pd1 Mg6 Mg3 49.34(11) 25 25 ?
 Pd1 Mg6 Mg3 105.2(2) 15_554 25 ?
 Pd2 Mg6 Mg3 115.55(11) 2_655 25 ?
 Pd2 Mg6 Mg3 120.23(12) 20 25 ?
 Al2 Mg6 Mg3 140.7(2) 2_655 25 ?
 Al2 Mg6 Mg3 98.03(12) 20 25 ?
 Mg1 Mg6 Mg3 58.98(14) 5 25 ?
 Mg1 Mg6 Mg3 85.2(2) . 25 ?
 Al1 Mg6 Mg3 97.91(11) 20 15_554 ?
 Al1 Mg6 Mg3 146.8(2) 2_655 15_554 ?
 Pd1 Mg6 Mg3 105.2(2) 25 15_554 ?
 Pd1 Mg6 Mg3 49.34(11) 15_554 15_554 ?
 Pd2 Mg6 Mg3 120.23(12) 2_655 15_554 ?

Pd2 Mg6 Mg3 115.56(11) 20 15_554 ?
 Al2 Mg6 Mg3 98.03(12) 2_655 15_554 ?
 Al2 Mg6 Mg3 140.7(2) 20 15_554 ?
 Mg1 Mg6 Mg3 85.2(2) 5 15_554 ?
 Mg1 Mg6 Mg3 58.98(14) . 15_554 ?
 Mg3 Mg6 Mg3 56.0(2) 25 15_554 ?
 Al2 Pd4 Al2 118.74(5) 25 27_445 ?
 Al2 Pd4 Al2 118.74(5) 25 26_455 ?
 Al2 Pd4 Al2 118.74(5) 27_445 26_455 ?
 Al2 Pd4 Al1 61.86(15) 25 7_445 ?
 Al2 Pd4 Al1 112.05(11) 27_445 7_445 ?
 Al2 Pd4 Al1 112.05(11) 26_455 7_445 ?
 Al2 Pd4 Al1 112.05(11) 25 8 ?
 Al2 Pd4 Al1 112.05(11) 27_445 8 ?
 Al2 Pd4 Al1 61.86(15) 26_455 8 ?
 Al1 Pd4 Al1 59.0(2) 7_445 8 ?
 Al2 Pd4 Al1 112.05(11) 25 9_455 ?
 Al2 Pd4 Al1 61.86(15) 27_445 9_455 ?
 Al2 Pd4 Al1 112.05(11) 26_455 9_455 ?
 Al1 Pd4 Al1 59.0(2) 7_445 9_455 ?
 Al1 Pd4 Al1 59.0(2) 8 9_455 ?
 Al2 Pd4 Pd1 168.9(2) 25 31 ?
 Al2 Pd4 Pd1 63.94(4) 27_445 31 ?
 Al2 Pd4 Pd1 63.94(4) 26_455 31 ?
 Al1 Pd4 Pd1 107.03(13) 7_445 31 ?
 Al1 Pd4 Pd1 58.69(5) 8 31 ?
 Al1 Pd4 Pd1 58.69(5) 9_455 31 ?
 Al2 Pd4 Pd1 63.94(4) 25 33_545 ?
 Al2 Pd4 Pd1 168.9(2) 27_445 33_545 ?
 Al2 Pd4 Pd1 63.94(4) 26_455 33_545 ?
 Al1 Pd4 Pd1 58.69(5) 7_445 33_545 ?
 Al1 Pd4 Pd1 58.69(5) 8 33_545 ?
 Al1 Pd4 Pd1 107.03(13) 9_455 33_545 ?
 Pd1 Pd4 Pd1 111.27(5) 31 33_545 ?
 Al2 Pd4 Pd1 63.94(4) 25 32_445 ?
 Al2 Pd4 Pd1 63.94(4) 27_445 32_445 ?
 Al2 Pd4 Pd1 168.9(2) 26_455 32_445 ?
 Al1 Pd4 Pd1 58.69(5) 7_445 32_445 ?
 Al1 Pd4 Pd1 107.03(13) 8 32_445 ?
 Al1 Pd4 Pd1 58.69(5) 9_455 32_445 ?
 Pd1 Pd4 Pd1 111.27(5) 31 32_445 ?
 Pd1 Pd4 Pd1 111.27(5) 33_545 32_445 ?
 Al2 Pd4 Mg5 66.31(10) 25 26_455 ?
 Al2 Pd4 Mg5 66.31(10) 27_445 26_455 ?
 Al2 Pd4 Mg5 122.7(2) 26_455 26_455 ?
 Al1 Pd4 Mg5 117.23(12) 7_445 26_455 ?
 Al1 Pd4 Mg5 175.4(2) 8 26_455 ?
 Al1 Pd4 Mg5 117.23(12) 9_455 26_455 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 122.39(5) 31 26_455 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 122.39(5) 33_545 26_455 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 68.37(12) 32_445 26_455 ?
 Al2 Pd4 Mg5 66.31(10) 25 27_445 ?
 Al2 Pd4 Mg5 122.7(2) 27_445 27_445 ?
 Al2 Pd4 Mg5 66.31(10) 26_455 27_445 ?
 Al1 Pd4 Mg5 117.23(12) 7_445 27_445 ?
 Al1 Pd4 Mg5 117.23(12) 8 27_445 ?
 Al1 Pd4 Mg5 175.4(2) 9_455 27_445 ?

Pd1 Pd4 Mg5 122.39(5) 31 27_445 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 68.37(12) 33_545 27_445 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 122.39(5) 32_445 27_445 ?
 Mg5 Pd4 Mg5 66.4(2) 26_455 27_445 ?
 Al2 Pd4 Mg5 122.7(2) 25 25 ?
 Al2 Pd4 Mg5 66.31(10) 27_445 25 ?
 Al2 Pd4 Mg5 66.31(10) 26_455 25 ?
 Al1 Pd4 Mg5 175.4(2) 7_445 25 ?
 Al1 Pd4 Mg5 117.23(12) 8 25 ?
 Al1 Pd4 Mg5 117.23(12) 9_455 25 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 68.37(12) 31 25 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 122.39(5) 33_545 25 ?
 Pd1 Pd4 Mg5 122.39(5) 32_445 25 ?
 Mg5 Pd4 Mg5 66.4(2) 26_455 25 ?
 Mg5 Pd4 Mg5 66.4(2) 27_445 25 ?
 Pd2 Mg7 Pd2 116.60(11) 7_445 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Pd2 116.60(11) 7_445 8 ?
 Pd2 Mg7 Pd2 116.59(11) 9_455 8 ?
 Pd2 Mg7 Al1 48.33(13) 7_445 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Al1 95.3(2) 9_455 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Al1 95.3(2) 8_7_445 ?
 Pd2 Mg7 Al1 95.3(2) 7_445 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Al1 48.32(13) 9_455 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Al1 95.3(2) 8 9_455 ?
 Al1 Mg7 Al1 52.8(2) 7_445 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Al1 95.3(2) 7_445 8 ?
 Pd2 Mg7 Al1 95.3(2) 9_455 8 ?
 Pd2 Mg7 Al1 48.32(13) 8 8 ?
 Al1 Mg7 Al1 52.8(2) 7_445 8 ?
 Al1 Mg7 Al1 52.8(2) 9_455 8 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 149.5(4) 7_445 31 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 58.30(5) 9_455 31 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 58.30(5) 8 31 ?
 Al1 Mg7 Mg2 101.2(3) 7_445 31 ?
 Al1 Mg7 Mg2 57.9(2) 9_455 31 ?
 Al1 Mg7 Mg2 57.9(2) 8 31 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 58.30(6) 7_445 32_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 58.31(6) 9_455 32_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 149.5(4) 8 32_445 ?
 Al1 Mg7 Mg2 57.9(2) 7_445 32_445 ?
 Al1 Mg7 Mg2 57.9(2) 9_455 32_445 ?
 Al1 Mg7 Mg2 101.2(3) 8 32_445 ?
 Mg2 Mg7 Mg2 109.2(2) 31 32_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 58.30(5) 7_445 33_545 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 149.5(4) 9_455 33_545 ?
 Pd2 Mg7 Mg2 58.31(5) 8 33_545 ?
 Al1 Mg7 Mg2 57.9(2) 7_445 33_545 ?
 Al1 Mg7 Mg2 101.2(3) 9_455 33_545 ?
 Al1 Mg7 Mg2 57.9(2) 8 33_545 ?
 Mg2 Mg7 Mg2 109.2(2) 31 33_545 ?
 Mg2 Mg7 Mg2 109.2(2) 32_445 33_545 ?
 Pd2 Mg7 Al3 95.36(7) 7_445 21_556 ?
 Pd2 Mg7 Al3 146.1(2) 9_455 21_556 ?
 Pd2 Mg7 Al3 49.98(5) 8 21_556 ?
 Al1 Mg7 Al3 115.43(11) 7_445 21_556 ?
 Al1 Mg7 Al3 144.5(2) 9_455 21_556 ?
 Al1 Mg7 Al3 92.54(11) 8 21_556 ?

Mg2 Mg7 Al3 99.72(6) 31 21_556 ?
Mg2 Mg7 Al3 151.00(12) 32_445 21_556 ?
Mg2 Mg7 Al3 57.52(10) 33_545 21_556 ?
Pd2 Mg7 Al3 146.1(2) 7_445 2 ?
Pd2 Mg7 Al3 95.36(7) 9_455 2 ?
Pd2 Mg7 Al3 49.98(5) 8 2 ?
Al1 Mg7 Al3 144.5(2) 7_445 2 ?
Al1 Mg7 Al3 115.43(11) 9_455 2 ?
Al1 Mg7 Al3 92.54(11) 8 2 ?
Mg2 Mg7 Al3 57.52(10) 31 2 ?
Mg2 Mg7 Al3 151.00(12) 32_445 2 ?
Mg2 Mg7 Al3 99.72(6) 33_545 2 ?
Al3 Mg7 Al3 51.30(9) 21_556 2 ?
Pd2 Mg7 Al3 95.36(7) 7_445 3 ?
Pd2 Mg7 Al3 49.98(5) 9_455 3 ?
Pd2 Mg7 Al3 146.1(2) 8 3 ?
Al1 Mg7 Al3 115.43(11) 7_445 3 ?
Al1 Mg7 Al3 92.54(11) 9_455 3 ?
Al1 Mg7 Al3 144.5(2) 8 3 ?
Mg2 Mg7 Al3 99.72(6) 31 3 ?
Mg2 Mg7 Al3 57.52(10) 32_445 3 ?
Mg2 Mg7 Al3 151.00(12) 33_545 3 ?
Al3 Mg7 Al3 119.9(3) 21_556 3 ?
Al3 Mg7 Al3 97.1(2) 2 3 ?
Mg4 Pd5 Mg4 180.0 26_455 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.3(2) 26_455 25 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.7(2) 14_544 25 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.7(2) 26_455 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.3(2) 14_544 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg4 180.0 25 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.3(2) 26_455 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.7(2) 14_544 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.3(2) 25 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.7(2) 13_444 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.7(2) 26_455 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.3(2) 14_544 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.7(2) 25 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.3(2) 13_444 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 180.0 27_445 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 26_455 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 14_544 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 25 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 13_444 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 117.8(2) 27_445 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 62.2(2) 15_554 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 26_455 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 14_544 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 25 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 13_444 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg3 62.2(2) 27_445 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg3 117.8(2) 15_554 27_445 ?
Mg3 Pd5 Mg3 180.0 15_554 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg3 62.2(2) 26_455 26_455 ?
Mg4 Pd5 Mg3 117.8(2) 14_544 26_455 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 25 26_455 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 13_444 26_455 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 27_445 26_455 ?

Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 15_554 26_455 ?
Mg3 Pd5 Mg3 63.03(7) 15_554 26_455 ?
Mg3 Pd5 Mg3 116.97(7) 27_445 26_455 ?
Mg4 Pd5 Mg3 117.8(2) 26_455 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg3 62.2(2) 14_544 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 25 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 13_444 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 27_445 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 15_554 14_544 ?
Mg3 Pd5 Mg3 116.97(7) 15_554 14_544 ?
Mg3 Pd5 Mg3 63.03(7) 27_445 14_544 ?
Mg3 Pd5 Mg3 180.0 26_455 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 26_455 25 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 14_544 25 ?
Mg4 Pd5 Mg3 62.2(2) 25 25 ?
Mg4 Pd5 Mg3 117.8(2) 13_444 25 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 27_445 25 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 15_554 25 ?
Mg3 Pd5 Mg3 63.03(7) 15_554 25 ?
Mg3 Pd5 Mg3 116.97(7) 27_445 25 ?
Mg3 Pd5 Mg3 116.97(7) 26_455 25 ?
Mg3 Pd5 Mg3 63.03(7) 14_544 25 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 26_455 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 14_544 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg3 117.8(2) 25 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg3 62.2(2) 13_444 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg3 63.81(10) 27_445 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg3 116.19(10) 15_554 13_444 ?
Mg3 Pd5 Mg3 116.97(7) 15_554 13_444 ?
Mg3 Pd5 Mg3 63.03(7) 27_445 13_444 ?
Mg3 Pd5 Mg3 63.03(7) 26_455 13_444 ?
Mg3 Pd5 Mg3 116.97(7) 14_544 13_444 ?
Mg3 Pd5 Mg3 180.0 25 13_444 ?

_refine_diff_density_max 1.709
_refine_diff_density_min -6.034
_refine_diff_density_rms 0.575

data_664

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\"apers

FB Chemie Uni Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaeppers@web.de'

#=====

2. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\"at Dortmund

Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle

vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\"apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\"at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

#=====

3. TEXT

_publ_section_abstract

;

1/1-R-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd, Kapitel 5.9

Datensatz Nummer: 664

;

#=====

4. Results

_chemical_name_systematic

;

?

;

_chemical_name_common ?

_chemical_formula_moiety ?
 _chemical_formula_structural ?
 _chemical_formula_analytical ?
 _chemical_formula_sum 'Al0 Ga30.20 Mg160.14 Pd58.66'
 _chemical_formula_weight 12239.17
 _chemical_melting_point ?
 _chemical_compound_source ?

loop_

_atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scatter_dispersion_real
 _atom_type_scatter_dispersion_imag
 _atom_type_scatter_source
 'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Ga' 'Ga' 0.2307 1.6083
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting 'hexagonal'
 _symmetry_space_group_name_H-M 'R-3m'

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-y, x-y, z'
 '-x+y, -x, z'
 'y, x, -z'
 'x-y, -y, -z'
 '-x, -x+y, -z'
 'x+2/3, y+1/3, z+1/3'
 '-y+2/3, x-y+1/3, z+1/3'
 '-x+y+2/3, -x+1/3, z+1/3'
 'y+2/3, x+1/3, -z+1/3'
 'x-y+2/3, -y+1/3, -z+1/3'
 '-x+2/3, -x+y+1/3, -z+1/3'
 'x+1/3, y+2/3, z+2/3'
 '-y+1/3, x-y+2/3, z+2/3'
 '-x+y+1/3, -x+2/3, z+2/3'
 'y+1/3, x+2/3, -z+2/3'
 'x-y+1/3, -y+2/3, -z+2/3'
 '-x+1/3, -x+y+2/3, -z+2/3'
 '-x, -y, -z'
 'y, -x+y, -z'
 'x-y, x, -z'
 '-y, -x, z'
 '-x+y, y, z'
 'x, x-y, z'
 '-x+2/3, -y+1/3, -z+1/3'
 'y+2/3, -x+y+1/3, -z+1/3'
 'x-y+2/3, x+1/3, -z+1/3'
 '-y+2/3, -x+1/3, z+1/3'
 '-x+y+2/3, y+1/3, z+1/3'


```

'x+2/3, x-y+1/3, z+1/3'
'-x+1/3, -y+2/3, -z+2/3'
'y+1/3, -x+y+2/3, -z+2/3'
'x-y+1/3, x+2/3, -z+2/3'
'-y+1/3, -x+2/3, z+2/3'
'-x+y+1/3, y+2/3, z+2/3'
'x+1/3, x-y+2/3, z+2/3'

_cell_length_a      13.684(2)
_cell_length_b      13.684(2)
_cell_length_c      27.018(5)
_cell_angle_alpha   90.00
_cell_angle_beta    90.00
_cell_angle_gamma   120.00
_cell_volume        4381.4(12)
_cell_formula_units_Z  1
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used 47
_cell_measurement_theta_min 6
_cell_measurement_theta_max 53.95

_exptl_crystal_description 'irregular'
_exptl_crystal_colour 'silver'
_exptl_crystal_size_max 0.25
_exptl_crystal_size_mid 0.25
_exptl_crystal_size_min 0.25
_exptl_crystal_density_meas 'none'
_exptl_crystal_density_diffn 4.696
_exptl_crystal_density_method 'none'
_exptl_crystal_F_000 5604
_exptl_absorpt_coefficient_mu 10.197
_exptl_absorpt_correction_type 'none'
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
_diffn_radiation_wavelength 0.71069
_diffn_radiation_type MoKa
_diffn_radiation_source 'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator graphite
_diffn_measurement_device 'Kappa-CCD'
_diffn_measurement_method 'phi-scan'
_diffn_standards_number ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_% ?
_diffn_reflns_number 11435
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0661
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0420
_diffn_reflns_limit_h_min -17
_diffn_reflns_limit_h_max 17
_diffn_reflns_limit_k_min -17

```

```

_diffn_reflms_limit_k_max      17
_diffn_reflms_limit_l_min     -34
_diffn_reflms_limit_l_max      34
_diffn_reflms_theta_min       2.98
_diffn_reflms_theta_max       26.98
_reflms_number_total          1205
_reflms_number_observed        890
_reflms_observed_criterion     >2sigma(I)

_computing_data_collection     'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement     'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction      'NRCVAX Software'
_computing_structure_solution  'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics  'Schakal 97'
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F2. The observed criterion
of F2 > 2sigma(F2) is used only for calculating _R_factor_obs etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type         full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s2(Fo2)+( 0.1043P)2+0.0000P] where P=(Fo2+2Fc2)/3'
_refine_ls_solution_primary    direct
_refine_ls_solution_secondary difmap
_refine_ls_solution_hydrogens  geom
_refine_ls_hydrogen_treatment none
_refine_ls_extinction_method   none
_refine_ls_extinction_coef     none
_refine_ls_number_reflms      1205
_refine_ls_number_parameters   88
_refine_ls_number_restraints   0
_refine_ls_R_factor_all        0.0663
_refine_ls_R_factor_obs        0.0421
_refine_ls_wR_factor_all       0.1632
_refine_ls_wR_factor_obs       0.1044
_refine_ls_goodness_of_fit_all 1.121
_refine_ls_goodness_of_fit_obs 0.844
_refine_ls_restrained_S_all    1.121
_refine_ls_restrained_S_obs    0.844
_refine_ls_shift/esd_max       -0.003
_refine_ls_shift/esd_mean      0.001

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x

```

_atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_thermal_displace_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_group
 Mg1 Mg 0.3281(3) 0.0426(3) 0.10861(14) 0.0203(9) Uani 1 d . .
 Ga1 Ga 0.39853(10) 0.60147(10) 0.01185(9) 0.0160(9) Uani 0.587(12) d SP .
 Mg21 Mg 0.39853(10) 0.60147(10) 0.01185(9) 0.0160(9) Uani 0.413(12) d SP .
 Pd1 Pd 0.44413(5) 0.55587(5) 0.37452(5) 0.0199(4) Uani 1 d S .
 Pd2 Pd 0.45648(6) 0.54352(6) 0.08666(5) 0.0206(4) Uani 1 d S .
 Mg2 Mg 0.4592(2) 0.5408(2) 0.2654(2) 0.0184(12) Uani 1 d S .
 Pd3 Pd 0.52946(5) 0.47054(5) 0.17481(4) 0.0170(4) Uani 1 d S .
 Mg3 Mg 0.54910(15) 0.45090(15) 0.35241(13) 0.0201(13) Uani 0.679(13) d SP .
 Ga14 Ga 0.54910(15) 0.45090(15) 0.35241(13) 0.0201(13) Uani 0.321(13) d SP .
 Ga2 Ga 0.5644(2) 0.4356(2) 0.08294(13) 0.0158(15) Uani 0.155(12) d SP .
 Mg18 Mg 0.5644(2) 0.4356(2) 0.08294(13) 0.0158(15) Uani 0.845(12) d SP .
 Mg4 Mg 0.59308(14) 0.40692(14) 0.25144(12) 0.0182(12) Uani 0.681(12) d SP .
 Ga15 Ga 0.59308(14) 0.40692(14) 0.25144(12) 0.0182(12) Uani 0.319(12) d SP .
 Mg5 Mg 0.7439(2) 0.2561(2) 0.1584(2) 0.0201(12) Uani 1 d S .
 Ga3 Ga 0.2009(2) 0.0000 0.5000 0.0133(11) Uani 0.296(12) d SP .
 Mg19 Mg 0.2009(2) 0.0000 0.5000 0.0133(11) Uani 0.704(12) d SP .
 Mg6 Mg 0.3833(4) 0.0000 0.0000 0.0145(11) Uani 1 d S .
 Pd4 Pd 0.0000 0.0000 0.25999(15) 0.0046(14) Uani 0.276(11) d SP .
 Mg20 Mg 0.0000 0.0000 0.25999(15) 0.0046(14) Uani 0.724(11) d SP .
 Mg7 Mg 0.0000 0.0000 0.4409(3) 0.014(2) Uani 1 d S .
 Pd5 Pd 0.0000 0.0000 0.0000 0.0169(7) Uani 1 d S .

loop_

_atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
 Mg1 0.022(2) 0.019(2) 0.017(2) 0.002(2) 0.003(2) 0.007(2)
 Ga1 0.0171(11) 0.0171(11) 0.0138(14) -0.0004(5) 0.0004(5) 0.0085(11)
 Mg21 0.0171(11) 0.0171(11) 0.0138(14) -0.0004(5) 0.0004(5) 0.0085(11)
 Pd1 0.0192(5) 0.0192(5) 0.0215(7) 0.0012(3) -0.0012(3) 0.0097(6)
 Pd2 0.0234(6) 0.0234(6) 0.0166(7) 0.0005(3) -0.0005(3) 0.0129(6)
 Mg2 0.020(2) 0.020(2) 0.016(3) -0.0005(11) 0.0005(11) 0.011(2)
 Pd3 0.0181(5) 0.0181(5) 0.0155(7) 0.0003(2) -0.0003(2) 0.0095(5)
 Mg3 0.020(2) 0.020(2) 0.023(2) -0.0004(7) 0.0004(7) 0.012(2)
 Ga14 0.020(2) 0.020(2) 0.023(2) -0.0004(7) 0.0004(7) 0.012(2)
 Ga2 0.015(2) 0.015(2) 0.009(2) -0.0004(8) 0.0004(8) 0.002(2)
 Mg18 0.015(2) 0.015(2) 0.009(2) -0.0004(8) 0.0004(8) 0.002(2)
 Mg4 0.019(2) 0.019(2) 0.016(2) 0.0018(7) -0.0018(7) 0.009(2)
 Ga15 0.019(2) 0.019(2) 0.016(2) 0.0018(7) -0.0018(7) 0.009(2)
 Mg5 0.015(2) 0.015(2) 0.027(3) -0.0011(11) 0.0011(11) 0.006(2)
 Ga3 0.014(2) 0.012(2) 0.013(2) 0.0002(12) 0.0001(6) 0.0058(9)
 Mg19 0.014(2) 0.012(2) 0.013(2) 0.0002(12) 0.0001(6) 0.0058(9)
 Mg6 0.016(2) 0.013(3) 0.013(3) -0.003(2) -0.0015(10) 0.0066(13)
 Pd4 0.005(2) 0.005(2) 0.004(2) 0.000 0.000 0.0024(8)
 Mg20 0.005(2) 0.005(2) 0.004(2) 0.000 0.000 0.0024(8)

Mg7 0.015(3) 0.015(3) 0.012(5) 0.000 0.000 0.0076(14)
 Pd5 0.0166(9) 0.0166(9) 0.018(2) 0.000 0.000 0.0083(5)

_geom_special_details

;

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

;

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1

_geom_bond_atom_site_label_2

_geom_bond_distance

_geom_bond_site_symmetry_2

_geom_bond_publ_flag

Mg1 Pd1 2.829(4) 15_554 ?

Mg1 Pd3 2.876(4) 25 ?

Mg1 Mg19 2.894(5) 14_544 ?

Mg1 Ga3 2.894(5) 14_544 ?

Mg1 Mg18 2.918(4) 2_655 ?

Mg1 Ga2 2.918(4) 2_655 ?

Mg1 Mg5 3.054(6) 3_665 ?

Mg1 Ga15 3.105(4) 25 ?

Mg1 Mg4 3.105(4) 25 ?

Mg1 Pd2 3.115(4) 2_655 ?

Mg1 Mg3 3.134(5) 15_554 ?

Mg1 Ga14 3.134(5) 15_554 ?

Ga1 Pd2 2.444(3) . ?

Ga1 Mg21 2.676(4) 3_565 ?

Ga1 Ga1 2.676(4) 2_665 ?

Ga1 Ga1 2.676(4) 3_565 ?

Ga1 Mg21 2.676(4) 2_665 ?

Ga1 Pd1 2.698(2) 26_455 ?

Ga1 Pd1 2.698(2) 27 ?

Ga1 Mg18 2.708(4) 19_665 ?

Ga1 Ga2 2.708(4) 19_665 ?

Ga1 Mg20 2.772(4) 13_554 ?

Ga1 Pd4 2.772(4) 13_554 ?

Ga1 Mg6 2.905(4) 21 ?

Mg21 Pd2 2.444(3) . ?

Mg21 Mg21 2.676(4) 3_565 ?

Mg21 Ga1 2.676(4) 2_665 ?

Mg21 Ga1 2.676(4) 3_565 ?

Mg21 Mg21 2.676(4) 2_665 ?

Mg21 Pd1 2.698(2) 26_455 ?

Mg21 Pd1 2.698(2) 27 ?

Mg21 Mg18 2.708(4) 19_665 ?

Mg21 Ga2 2.708(4) 19_665 ?

Mg21 Mg20 2.772(4) 13_554 ?

Mg21 Pd4 2.772(4) 13_554 ?

Mg21 Mg6 2.905(4) 21 ?

Pd1 Ga14 2.559(4) . ?

Pd1 Mg3 2.559(4) . ?

Pd1 Mg21 2.698(2) 26_455 ?
Pd1 Ga1 2.698(2) 26_455 ?
Pd1 Mg21 2.698(2) 27 ?
Pd1 Ga1 2.698(2) 27 ?
Pd1 Mg20 2.766(2) 31 ?
Pd1 Pd4 2.766(2) 31 ?
Pd1 Mg18 2.771(2) 9_565 ?
Pd1 Ga2 2.771(2) 9_565 ?
Pd1 Mg18 2.771(2) 8 ?
Pd1 Ga2 2.771(2) 8 ?
Pd2 Mg18 2.559(4) . ?
Pd2 Ga2 2.559(4) . ?
Pd2 Mg19 2.6175(11) 13_554 ?
Pd2 Ga3 2.6175(11) 13_554 ?
Pd2 Mg19 2.6175(11) 32 ?
Pd2 Ga3 2.6175(11) 32 ?
Pd2 Pd3 2.944(2) . ?
Pd2 Mg7 2.973(2) 13_554 ?
Pd2 Mg2 2.995(3) 26_455 ?
Pd2 Mg2 2.995(3) 27 ?
Mg2 Pd3 2.962(6) . ?
Mg2 Pd2 2.995(3) 26_455 ?
Mg2 Pd2 2.995(3) 27 ?
Mg2 Mg21 2.995(5) 27 ?
Mg2 Ga1 2.995(5) 27 ?
Mg2 Mg21 2.995(5) 26_455 ?
Mg2 Ga1 2.995(5) 26_455 ?
Mg2 Mg19 3.062(5) 32 ?
Mg2 Ga3 3.062(5) 32 ?
Mg2 Mg19 3.062(5) 13_554 ?
Mg2 Ga3 3.062(5) 13_554 ?
Pd3 Ga15 2.561(4) . ?
Pd3 Mg4 2.561(4) . ?
Pd3 Mg18 2.616(4) . ?
Pd3 Ga2 2.616(4) . ?
Pd3 Mg19 2.661(2) 32 ?
Pd3 Ga3 2.661(2) 32 ?
Pd3 Mg19 2.661(2) 13_554 ?
Pd3 Ga3 2.661(2) 13_554 ?
Pd3 Mg5 2.8584(15) 3_665 ?
Pd3 Mg5 2.8584(15) 2_655 ?
Pd3 Mg1 2.876(4) 10 ?
Pd3 Mg1 2.876(4) 25 ?
Mg3 Pd5 2.834(3) 7 ?
Mg3 Ga15 2.920(5) . ?
Mg3 Mg4 2.920(5) . ?
Mg3 Ga15 2.971(3) 32 ?
Mg3 Mg4 2.971(3) 32 ?
Mg3 Ga15 2.971(3) 33_545 ?
Mg3 Mg4 2.971(3) 33_545 ?
Mg3 Mg3 2.971(4) 33_545 ?
Mg3 Ga14 2.971(4) 33_545 ?
Mg3 Mg3 2.971(4) 32 ?
Mg3 Ga14 2.971(4) 32 ?
Ga14 Pd5 2.834(3) 7 ?
Ga14 Ga15 2.920(5) . ?
Ga14 Mg4 2.920(5) . ?

Ga14 Ga15 2.971(3) 32 ?
Ga14 Mg4 2.971(3) 32 ?
Ga14 Ga15 2.971(3) 33_545 ?
Ga14 Mg4 2.971(3) 33_545 ?
Ga14 Mg3 2.971(4) 33_545 ?
Ga14 Ga14 2.971(4) 33_545 ?
Ga14 Mg3 2.971(4) 32 ?
Ga14 Ga14 2.971(4) 32 ?
Ga2 Mg20 2.439(4) 25 ?
Ga2 Pd4 2.439(4) 25 ?
Ga2 Mg21 2.708(4) 19_665 ?
Ga2 Ga1 2.708(4) 19_665 ?
Ga2 Pd1 2.771(2) 15_554 ?
Ga2 Pd1 2.771(2) 14_654 ?
Ga2 Mg1 2.918(4) 3_665 ?
Ga2 Mg1 2.918(4) 24 ?
Ga2 Mg5 2.990(5) 2_655 ?
Ga2 Mg5 2.990(5) 3_665 ?
Mg18 Mg20 2.439(4) 25 ?
Mg18 Pd4 2.439(4) 25 ?
Mg18 Mg21 2.708(4) 19_665 ?
Mg18 Ga1 2.708(4) 19_665 ?
Mg18 Pd1 2.771(2) 15_554 ?
Mg18 Pd1 2.771(2) 14_654 ?
Mg18 Mg1 2.918(4) 3_665 ?
Mg18 Mg1 2.918(4) 24 ?
Mg18 Mg5 2.990(5) 2_655 ?
Mg18 Mg5 2.990(5) 3_665 ?
Mg4 Pd5 2.817(3) 7 ?
Mg4 Ga14 2.971(4) 32 ?
Mg4 Mg3 2.971(4) 32 ?
Mg4 Ga14 2.971(4) 33_545 ?
Mg4 Mg3 2.971(4) 33_545 ?
Mg4 Ga15 3.021(6) 3_665 ?
Mg4 Ga15 3.021(6) 2_655 ?
Mg4 Mg4 3.021(6) 3_665 ?
Mg4 Mg4 3.021(6) 2_655 ?
Ga15 Pd5 2.817(3) 7 ?
Ga15 Ga14 2.971(4) 32 ?
Ga15 Mg3 2.971(4) 32 ?
Ga15 Ga14 2.971(4) 33_545 ?
Ga15 Mg3 2.971(4) 33_545 ?
Ga15 Mg4 3.021(6) 3_665 ?
Ga15 Mg4 3.021(6) 2_655 ?
Ga15 Mg5 3.086(6) 3_665 ?
Ga15 Mg5 3.086(6) 2_655 ?
Mg5 Pd3 2.8584(15) 3_665 ?
Mg5 Pd3 2.8584(15) 2_655 ?
Mg5 Mg20 2.937(6) 25 ?
Mg5 Pd4 2.937(6) 25 ?
Mg5 Mg18 2.990(5) 2_655 ?
Mg5 Ga2 2.990(5) 2_655 ?
Mg5 Mg18 2.990(5) 3_665 ?
Mg5 Ga2 2.990(5) 3_665 ?
Mg5 Mg1 3.054(6) 23_655 ?
Mg5 Mg1 3.054(6) 2_655 ?
Mg5 Ga15 3.086(6) 3_665 ?

Mg5 Mg4 3.086(6) 3_665 ?
 Ga3 Pd2 2.6175(11) 7_445 ?
 Ga3 Pd2 2.6175(11) 33_545 ?
 Ga3 Pd3 2.661(2) 7_445 ?
 Ga3 Pd3 2.661(2) 33_545 ?
 Ga3 Mg19 2.749(3) 20_556 ?
 Ga3 Ga3 2.749(3) 20_556 ?
 Ga3 Mg19 2.749(3) 21_556 ?
 Ga3 Ga3 2.749(3) 21_556 ?
 Ga3 Mg1 2.894(5) 9 ?
 Ga3 Mg1 2.894(5) 16_545 ?
 Ga3 Mg2 3.062(5) 33_545 ?
 Ga3 Mg2 3.062(5) 7_445 ?
 Mg19 Pd2 2.6175(11) 7_445 ?
 Mg19 Pd2 2.6175(11) 33_545 ?
 Mg19 Pd3 2.661(2) 7_445 ?
 Mg19 Pd3 2.661(2) 33_545 ?
 Mg19 Mg19 2.749(3) 20_556 ?
 Mg19 Ga3 2.749(3) 20_556 ?
 Mg19 Mg19 2.749(3) 21_556 ?
 Mg19 Ga3 2.749(3) 21_556 ?
 Mg19 Mg1 2.894(5) 9 ?
 Mg19 Mg1 2.894(5) 16_545 ?
 Mg19 Mg2 3.062(5) 33_545 ?
 Mg19 Mg2 3.062(5) 7_445 ?
 Mg6 Mg21 2.905(4) 20 ?
 Mg6 Ga1 2.905(4) 20 ?
 Mg6 Mg21 2.905(4) 2_655 ?
 Mg6 Ga1 2.905(4) 2_655 ?
 Mg6 Pd1 2.9413(14) 15_554 ?
 Mg6 Pd1 2.9414(14) 25 ?
 Mg6 Pd2 3.016(3) 2_655 ?
 Mg6 Pd2 3.016(3) 20 ?
 Mg6 Mg18 3.146(4) 2_655 ?
 Mg6 Ga2 3.146(4) 2_655 ?
 Mg6 Mg18 3.146(4) 20 ?
 Mg6 Ga2 3.146(4) 20 ?
 Pd4 Mg18 2.438(4) 25 ?
 Pd4 Ga2 2.438(4) 25 ?
 Pd4 Mg18 2.439(4) 27_445 ?
 Pd4 Ga2 2.439(4) 27_445 ?
 Pd4 Mg18 2.439(4) 26_455 ?
 Pd4 Ga2 2.439(4) 26_455 ?
 Pd4 Pd1 2.766(2) 31 ?
 Pd4 Pd1 2.766(2) 33_545 ?
 Pd4 Pd1 2.766(2) 32_445 ?
 Pd4 Ga1 2.772(4) 7_445 ?
 Pd4 Mg21 2.772(4) 7_445 ?
 Pd4 Mg21 2.772(4) 8 ?
 Mg20 Mg18 2.438(4) 25 ?
 Mg20 Ga2 2.438(4) 25 ?
 Mg20 Mg18 2.439(4) 27_445 ?
 Mg20 Ga2 2.439(4) 27_445 ?
 Mg20 Mg18 2.439(4) 26_455 ?
 Mg20 Ga2 2.439(4) 26_455 ?
 Mg20 Pd1 2.766(2) 31 ?
 Mg20 Pd1 2.766(2) 33_545 ?

Mg20 Pd1 2.766(2) 32_445 ?
Mg20 Ga1 2.772(4) 7_445 ?
Mg20 Mg21 2.772(4) 7_445 ?
Mg20 Mg21 2.772(4) 8 ?
Mg7 Pd2 2.973(2) 9_455 ?
Mg7 Pd2 2.973(2) 8 ?
Mg7 Pd2 2.973(2) 7_445 ?
Mg7 Ga1 3.011(8) 7_445 ?
Mg7 Mg21 3.011(8) 7_445 ?
Mg7 Mg21 3.012(8) 9_455 ?
Mg7 Ga1 3.012(8) 9_455 ?
Mg7 Ga1 3.012(8) 8 ?
Mg7 Mg21 3.012(8) 8 ?
Mg7 Mg2 3.169(6) 31 ?
Mg7 Mg2 3.169(6) 32_445 ?
Mg7 Mg2 3.169(6) 33_545 ?
Pd5 Ga15 2.817(3) 26_455 ?
Pd5 Ga15 2.817(3) 14_544 ?
Pd5 Mg4 2.817(3) 26_455 ?
Pd5 Mg4 2.817(3) 14_544 ?
Pd5 Ga15 2.817(3) 25 ?
Pd5 Ga15 2.817(3) 13_444 ?
Pd5 Mg4 2.817(3) 25 ?
Pd5 Mg4 2.817(3) 13_444 ?
Pd5 Ga15 2.817(3) 27_445 ?
Pd5 Ga15 2.817(3) 15_554 ?
Pd5 Mg4 2.817(3) 27_445 ?
Pd5 Mg4 2.817(3) 15_554 ?

loop_
_geom_angle_atom_site_label_1
_geom_angle_atom_site_label_2
_geom_angle_atom_site_label_3
_geom_angle
_geom_angle_site_symmetry_1
_geom_angle_site_symmetry_3
_geom_angle_publ_flag
Pd1 Mg1 Pd3 157.4(2) 15_554 25 ?
Pd1 Mg1 Mg19 146.3(2) 15_554 14_544 ?
Pd3 Mg1 Mg19 54.92(8) 25 14_544 ?
Pd1 Mg1 Ga3 146.3(2) 15_554 14_544 ?
Pd3 Mg1 Ga3 54.92(8) 25 14_544 ?
Mg19 Mg1 Ga3 0.00(7) 14_544 14_544 ?
Pd1 Mg1 Mg18 57.64(10) 15_554 2_655 ?
Pd3 Mg1 Mg18 143.7(2) 25 2_655 ?
Mg19 Mg1 Mg18 88.96(13) 14_544 2_655 ?
Ga3 Mg1 Mg18 88.96(13) 14_544 2_655 ?
Pd1 Mg1 Ga2 57.64(10) 15_554 2_655 ?
Pd3 Mg1 Ga2 143.7(2) 25 2_655 ?
Mg19 Mg1 Ga2 88.96(13) 14_544 2_655 ?
Ga3 Mg1 Ga2 88.96(13) 14_544 2_655 ?
Mg18 Mg1 Ga2 0.0(3) 2_655 2_655 ?
Pd1 Mg1 Mg5 67.28(13) 15_554 3_665 ?
Pd3 Mg1 Mg5 125.0(2) 25 3_665 ?
Mg19 Mg1 Mg5 101.72(14) 14_544 3_665 ?
Ga3 Mg1 Mg5 101.72(14) 14_544 3_665 ?
Mg18 Mg1 Mg5 60.05(14) 2_655 3_665 ?

Ga2 Mg1 Mg5 60.05(14) 2_655 3_665 ?
 Pd1 Mg1 Ga15 107.34(14) 15_554 25 ?
 Pd3 Mg1 Ga15 50.54(9) 25 25 ?
 Mg19 Mg1 Ga15 100.82(12) 14_544 25 ?
 Ga3 Mg1 Ga15 100.82(12) 14_544 25 ?
 Mg18 Mg1 Ga15 152.2(2) 2_655 25 ?
 Ga2 Mg1 Ga15 152.2(2) 2_655 25 ?
 Mg5 Mg1 Ga15 140.4(2) 3_665 25 ?
 Pd1 Mg1 Mg4 107.34(14) 15_554 25 ?
 Pd3 Mg1 Mg4 50.54(9) 25 25 ?
 Mg19 Mg1 Mg4 100.82(12) 14_544 25 ?
 Ga3 Mg1 Mg4 100.82(12) 14_544 25 ?
 Mg18 Mg1 Mg4 152.2(2) 2_655 25 ?
 Ga2 Mg1 Mg4 152.2(2) 2_655 25 ?
 Mg5 Mg1 Mg4 140.4(2) 3_665 25 ?
 Ga15 Mg1 Mg4 0.00(12) 25 25 ?
 Pd1 Mg1 Pd2 97.94(11) 15_554 2_655 ?
 Pd3 Mg1 Pd2 97.55(12) 25 2_655 ?
 Mg19 Mg1 Pd2 51.48(8) 14_544 2_655 ?
 Ga3 Mg1 Pd2 51.48(8) 14_544 2_655 ?
 Mg18 Mg1 Pd2 50.06(10) 2_655 2_655 ?
 Ga2 Mg1 Pd2 50.06(10) 2_655 2_655 ?
 Mg5 Mg1 Pd2 101.42(14) 3_665 2_655 ?
 Ga15 Mg1 Pd2 118.13(14) 25 2_655 ?
 Mg4 Mg1 Pd2 118.13(14) 25 2_655 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 50.50(9) 15_554 15_554 ?
 Pd3 Mg1 Mg3 107.36(14) 25 15_554 ?
 Mg19 Mg1 Mg3 150.58(15) 14_544 15_554 ?
 Ga3 Mg1 Mg3 150.58(15) 14_544 15_554 ?
 Mg18 Mg1 Mg3 103.50(14) 2_655 15_554 ?
 Ga2 Mg1 Mg3 103.50(14) 2_655 15_554 ?
 Mg5 Mg1 Mg3 107.60(14) 3_665 15_554 ?
 Ga15 Mg1 Mg3 56.87(11) 25 15_554 ?
 Mg4 Mg1 Mg3 56.87(11) 25 15_554 ?
 Pd2 Mg1 Mg3 118.43(13) 2_655 15_554 ?
 Pd1 Mg1 Ga14 50.50(9) 15_554 15_554 ?
 Pd3 Mg1 Ga14 107.36(14) 25 15_554 ?
 Mg19 Mg1 Ga14 150.58(15) 14_544 15_554 ?
 Ga3 Mg1 Ga14 150.58(15) 14_544 15_554 ?
 Mg18 Mg1 Ga14 103.50(14) 2_655 15_554 ?
 Ga2 Mg1 Ga14 103.50(14) 2_655 15_554 ?
 Mg5 Mg1 Ga14 107.60(14) 3_665 15_554 ?
 Ga15 Mg1 Ga14 56.87(11) 25 15_554 ?
 Mg4 Mg1 Ga14 56.87(11) 25 15_554 ?
 Pd2 Mg1 Ga14 118.43(13) 2_655 15_554 ?
 Mg3 Mg1 Ga14 0.0(2) 15_554 15_554 ?
 Pd2 Ga1 Mg21 119.13(5) . 3_565 ?
 Pd2 Ga1 Ga1 119.13(5) . 2_665 ?
 Mg21 Ga1 Ga1 60.0 3_565 2_665 ?
 Pd2 Ga1 Ga1 119.13(5) . 3_565 ?
 Mg21 Ga1 Ga1 0.00(11) 3_565 3_565 ?
 Ga1 Ga1 Ga1 60.0 2_665 3_565 ?
 Pd2 Ga1 Mg21 119.13(5) . 2_665 ?
 Mg21 Ga1 Mg21 60.0 3_565 2_665 ?
 Ga1 Ga1 Mg21 0.00(11) 2_665 2_665 ?
 Ga1 Ga1 Mg21 60.0 3_565 2_665 ?
 Pd2 Ga1 Pd1 119.19(6) . 26_455 ?

Mg21 Ga1 Pd1 60.26(5) 3_565 26_455 ?
Ga1 Ga1 Pd1 110.30(5) 2_665 26_455 ?
Ga1 Ga1 Pd1 60.26(5) 3_565 26_455 ?
Mg21 Ga1 Pd1 110.30(5) 2_665 26_455 ?
Pd2 Ga1 Pd1 119.19(6) . 27 ?
Mg21 Ga1 Pd1 110.30(5) 3_565 27 ?
Ga1 Ga1 Pd1 60.26(5) 2_665 27 ?
Ga1 Ga1 Pd1 110.30(5) 3_565 27 ?
Mg21 Ga1 Pd1 60.26(5) 2_665 27 ?
Pd1 Ga1 Pd1 114.90(10) 26_455 27 ?
Pd2 Ga1 Mg18 126.84(14) . 19_665 ?
Mg21 Ga1 Mg18 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Ga1 Ga1 Mg18 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Ga1 Ga1 Mg18 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Mg21 Ga1 Mg18 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Pd1 Ga1 Mg18 61.68(6) 26_455 19_665 ?
Pd1 Ga1 Mg18 61.68(6) 27 19_665 ?
Pd2 Ga1 Ga2 126.84(14) . 19_665 ?
Mg21 Ga1 Ga2 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Ga1 Ga1 Ga2 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Ga1 Ga1 Ga2 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Mg21 Ga1 Ga2 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Pd1 Ga1 Ga2 61.68(6) 26_455 19_665 ?
Pd1 Ga1 Ga2 61.68(6) 27 19_665 ?
Mg18 Ga1 Ga2 0.00(5) 19_665 19_665 ?
Pd2 Ga1 Mg20 179.67(12) . 13_554 ?
Mg21 Ga1 Mg20 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Ga1 Ga1 Mg20 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Ga1 Ga1 Mg20 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Mg21 Ga1 Mg20 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Pd1 Ga1 Mg20 60.73(5) 26_455 13_554 ?
Pd1 Ga1 Mg20 60.73(5) 27 13_554 ?
Mg18 Ga1 Mg20 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Ga2 Ga1 Mg20 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Pd2 Ga1 Pd4 179.67(12) . 13_554 ?
Mg21 Ga1 Pd4 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Ga1 Ga1 Pd4 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Ga1 Ga1 Pd4 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Mg21 Ga1 Pd4 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Pd1 Ga1 Pd4 60.73(5) 26_455 13_554 ?
Pd1 Ga1 Pd4 60.73(5) 27 13_554 ?
Mg18 Ga1 Pd4 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Ga2 Ga1 Pd4 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Mg20 Ga1 Pd4 0.00(9) 13_554 13_554 ?
Pd2 Ga1 Mg6 68.02(6) . 21 ?
Mg21 Ga1 Mg6 116.24(9) 3_565 21 ?
Ga1 Ga1 Mg6 172.73(6) 2_665 21 ?
Ga1 Ga1 Mg6 116.24(9) 3_565 21 ?
Mg21 Ga1 Mg6 172.73(6) 2_665 21 ?
Pd1 Ga1 Mg6 63.21(8) 26_455 21 ?
Pd1 Ga1 Mg6 118.44(11) 27 21 ?
Mg18 Ga1 Mg6 68.09(9) 19_665 21 ?
Ga2 Ga1 Mg6 68.09(9) 19_665 21 ?
Mg20 Ga1 Mg6 111.71(8) 13_554 21 ?
Pd4 Ga1 Mg6 111.71(8) 13_554 21 ?
Pd2 Mg21 Mg21 119.13(5) . 3_565 ?
Pd2 Mg21 Ga1 119.13(5) . 2_665 ?

Mg21 Mg21 Ga1 60.0 3_565 2_665 ?
Pd2 Mg21 Ga1 119.13(5) . 3_565 ?
Mg21 Mg21 Ga1 0.00(11) 3_565 3_565 ?
Ga1 Mg21 Ga1 60.0 2_665 3_565 ?
Pd2 Mg21 Mg21 119.13(5) . 2_665 ?
Mg21 Mg21 Mg21 60.0 3_565 2_665 ?
Ga1 Mg21 Mg21 0.00(11) 2_665 2_665 ?
Ga1 Mg21 Mg21 60.0 3_565 2_665 ?
Pd2 Mg21 Pd1 119.19(6) . 26_455 ?
Mg21 Mg21 Pd1 60.26(5) 3_565 26_455 ?
Ga1 Mg21 Pd1 110.30(5) 2_665 26_455 ?
Ga1 Mg21 Pd1 60.26(5) 3_565 26_455 ?
Mg21 Mg21 Pd1 110.30(5) 2_665 26_455 ?
Pd2 Mg21 Pd1 119.19(6) . 27 ?
Mg21 Mg21 Pd1 110.30(5) 3_565 27 ?
Ga1 Mg21 Pd1 60.26(5) 2_665 27 ?
Ga1 Mg21 Pd1 110.30(5) 3_565 27 ?
Mg21 Mg21 Pd1 60.26(5) 2_665 27 ?
Pd1 Mg21 Pd1 114.90(10) 26_455 27 ?
Pd2 Mg21 Mg18 126.84(14) . 19_665 ?
Mg21 Mg21 Mg18 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Ga1 Mg21 Mg18 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Ga1 Mg21 Mg18 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Mg21 Mg21 Mg18 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Pd1 Mg21 Mg18 61.68(6) 26_455 19_665 ?
Pd1 Mg21 Mg18 61.68(6) 27 19_665 ?
Pd2 Mg21 Ga2 126.84(14) . 19_665 ?
Mg21 Mg21 Ga2 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Ga1 Mg21 Ga2 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Ga1 Mg21 Ga2 106.34(9) 3_565 19_665 ?
Mg21 Mg21 Ga2 106.34(9) 2_665 19_665 ?
Pd1 Mg21 Ga2 61.68(6) 26_455 19_665 ?
Pd1 Mg21 Ga2 61.68(6) 27 19_665 ?
Mg18 Mg21 Ga2 0.00(5) 19_665 19_665 ?
Pd2 Mg21 Mg20 179.67(12) . 13_554 ?
Mg21 Mg21 Mg20 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Ga1 Mg21 Mg20 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Ga1 Mg21 Mg20 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Mg21 Mg21 Mg20 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Pd1 Mg21 Mg20 60.73(5) 26_455 13_554 ?
Pd1 Mg21 Mg20 60.73(5) 27 13_554 ?
Mg18 Mg21 Mg20 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Ga2 Mg21 Mg20 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Pd2 Mg21 Pd4 179.67(12) . 13_554 ?
Mg21 Mg21 Pd4 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Ga1 Mg21 Pd4 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Ga1 Mg21 Pd4 61.14(5) 3_565 13_554 ?
Mg21 Mg21 Pd4 61.14(5) 2_665 13_554 ?
Pd1 Mg21 Pd4 60.73(5) 26_455 13_554 ?
Pd1 Mg21 Pd4 60.73(5) 27 13_554 ?
Mg18 Mg21 Pd4 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Ga2 Mg21 Pd4 52.83(11) 19_665 13_554 ?
Mg20 Mg21 Pd4 0.00(9) 13_554 13_554 ?
Pd2 Mg21 Mg6 68.02(6) . 21 ?
Mg21 Mg21 Mg6 116.24(9) 3_565 21 ?
Ga1 Mg21 Mg6 172.73(6) 2_665 21 ?
Ga1 Mg21 Mg6 116.24(9) 3_565 21 ?

Mg21 Mg21 Mg6 172.73(6) 2_665 21 ?
Pd1 Mg21 Mg6 63.21(8) 26_455 21 ?
Pd1 Mg21 Mg6 118.44(11) 27 21 ?
Mg18 Mg21 Mg6 68.09(9) 19_665 21 ?
Ga2 Mg21 Mg6 68.09(9) 19_665 21 ?
Mg20 Mg21 Mg6 111.71(8) 13_554 21 ?
Pd4 Mg21 Mg6 111.71(8) 13_554 21 ?
Ga14 Pd1 Mg3 0.0(2) . . ?
Ga14 Pd1 Mg21 122.96(9) . 26_455 ?
Mg3 Pd1 Mg21 122.96(9) . 26_455 ?
Ga14 Pd1 Ga1 122.96(9) . 26_455 ?
Mg3 Pd1 Ga1 122.96(9) . 26_455 ?
Mg21 Pd1 Ga1 0.0(2) 26_455 26_455 ?
Ga14 Pd1 Mg21 122.96(9) . 27 ?
Mg3 Pd1 Mg21 122.96(9) . 27 ?
Mg21 Pd1 Mg21 59.47(10) 26_455 27 ?
Ga1 Pd1 Mg21 59.47(10) 26_455 27 ?
Ga14 Pd1 Ga1 122.96(9) . 27 ?
Mg3 Pd1 Ga1 122.96(9) . 27 ?
Mg21 Pd1 Ga1 59.47(10) 26_455 27 ?
Ga1 Pd1 Ga1 59.47(10) 26_455 27 ?
Mg21 Pd1 Ga1 0.0(2) 27 27 ?
Ga14 Pd1 Mg20 175.19(12) . 31 ?
Mg3 Pd1 Mg20 175.19(12) . 31 ?
Mg21 Pd1 Mg20 60.96(8) 26_455 31 ?
Ga1 Pd1 Mg20 60.96(8) 26_455 31 ?
Mg21 Pd1 Mg20 60.96(8) 27 31 ?
Ga1 Pd1 Mg20 60.96(8) 27 31 ?
Ga14 Pd1 Pd4 175.19(12) . 31 ?
Mg3 Pd1 Pd4 175.19(12) . 31 ?
Mg21 Pd1 Pd4 60.96(8) 26_455 31 ?
Ga1 Pd1 Pd4 60.96(8) 26_455 31 ?
Mg21 Pd1 Pd4 60.96(8) 27 31 ?
Ga1 Pd1 Pd4 60.96(8) 27 31 ?
Mg20 Pd1 Pd4 0.0(2) 31 31 ?
Ga14 Pd1 Mg18 126.23(9) . 9_565 ?
Mg3 Pd1 Mg18 126.23(9) . 9_565 ?
Mg21 Pd1 Mg18 103.98(9) 26_455 9_565 ?
Ga1 Pd1 Mg18 103.98(9) 26_455 9_565 ?
Mg21 Pd1 Mg18 59.34(8) 27 9_565 ?
Ga1 Pd1 Mg18 59.34(8) 27 9_565 ?
Mg20 Pd1 Mg18 52.26(8) 31 9_565 ?
Pd4 Pd1 Mg18 52.26(8) 31 9_565 ?
Ga14 Pd1 Ga2 126.23(9) . 9_565 ?
Mg3 Pd1 Ga2 126.23(9) . 9_565 ?
Mg21 Pd1 Ga2 103.98(9) 26_455 9_565 ?
Ga1 Pd1 Ga2 103.98(9) 26_455 9_565 ?
Mg21 Pd1 Ga2 59.34(8) 27 9_565 ?
Ga1 Pd1 Ga2 59.34(8) 27 9_565 ?
Mg20 Pd1 Ga2 52.26(8) 31 9_565 ?
Pd4 Pd1 Ga2 52.26(8) 31 9_565 ?
Mg18 Pd1 Ga2 0.0(3) 9_565 9_565 ?
Ga14 Pd1 Mg18 126.23(9) . 8 ?
Mg3 Pd1 Mg18 126.23(9) . 8 ?
Mg21 Pd1 Mg18 59.34(8) 26_455 8 ?
Ga1 Pd1 Mg18 59.34(8) 26_455 8 ?
Mg21 Pd1 Mg18 103.98(9) 27 8 ?

Ga1 Pd1 Mg18 103.98(9) 27 8 ?
 Mg20 Pd1 Mg18 52.26(8) 31 8 ?
 Pd4 Pd1 Mg18 52.26(8) 31 8 ?
 Mg18 Pd1 Mg18 98.5(2) 9_565 8 ?
 Ga2 Pd1 Mg18 98.5(2) 9_565 8 ?
 Ga14 Pd1 Ga2 126.23(9) . 8 ?
 Mg3 Pd1 Ga2 126.23(9) . 8 ?
 Mg21 Pd1 Ga2 59.34(8) 26_455 8 ?
 Ga1 Pd1 Ga2 59.34(8) 26_455 8 ?
 Mg21 Pd1 Ga2 103.98(9) 27 8 ?
 Ga1 Pd1 Ga2 103.98(9) 27 8 ?
 Mg20 Pd1 Ga2 52.26(8) 31 8 ?
 Pd4 Pd1 Ga2 52.26(8) 31 8 ?
 Mg18 Pd1 Ga2 98.5(2) 9_565 8 ?
 Ga2 Pd1 Ga2 98.5(2) 9_565 8 ?
 Mg18 Pd1 Ga2 0.0(3) 8 8 ?
 Mg21 Pd2 Ga1 0.00(6) . . ?
 Mg21 Pd2 Mg18 121.95(11) . . ?
 Ga1 Pd2 Mg18 121.95(11) . . ?
 Mg21 Pd2 Ga2 121.95(11) . . ?
 Ga1 Pd2 Ga2 121.95(11) . . ?
 Mg18 Pd2 Ga2 0.0(2) . . ?
 Mg21 Pd2 Mg19 124.58(7) . 13_554 ?
 Ga1 Pd2 Mg19 124.58(7) . 13_554 ?
 Mg18 Pd2 Mg19 103.75(10) . 13_554 ?
 Ga2 Pd2 Mg19 103.75(10) . 13_554 ?
 Mg21 Pd2 Ga3 124.58(7) . 13_554 ?
 Ga1 Pd2 Ga3 124.58(7) . 13_554 ?
 Mg18 Pd2 Ga3 103.75(10) . 13_554 ?
 Ga2 Pd2 Ga3 103.75(10) . 13_554 ?
 Mg19 Pd2 Ga3 0.00(14) 13_554 13_554 ?
 Mg21 Pd2 Mg19 124.58(7) . 32 ?
 Ga1 Pd2 Mg19 124.58(7) . 32 ?
 Mg18 Pd2 Mg19 103.75(10) . 32 ?
 Ga2 Pd2 Mg19 103.75(10) . 32 ?
 Mg19 Pd2 Mg19 63.36(8) 13_554 32 ?
 Ga3 Pd2 Mg19 63.36(8) 13_554 32 ?
 Mg21 Pd2 Ga3 124.58(7) . 32 ?
 Ga1 Pd2 Ga3 124.58(7) . 32 ?
 Mg18 Pd2 Ga3 103.75(10) . 32 ?
 Ga2 Pd2 Ga3 103.75(10) . 32 ?
 Mg19 Pd2 Ga3 63.36(8) 13_554 32 ?
 Ga3 Pd2 Ga3 63.36(8) 13_554 32 ?
 Mg19 Pd2 Ga3 0.00(14) 32 32 ?
 Mg21 Pd2 Pd3 178.21(8) . . ?
 Ga1 Pd2 Pd3 178.21(8) . . ?
 Mg18 Pd2 Pd3 56.26(9) . . ?
 Ga2 Pd2 Pd3 56.26(9) . . ?
 Mg19 Pd2 Pd3 56.81(5) 13_554 . ?
 Ga3 Pd2 Pd3 56.81(5) 13_554 . ?
 Mg19 Pd2 Pd3 56.81(5) 32 . ?
 Ga3 Pd2 Pd3 56.81(5) 32 . ?
 Mg21 Pd2 Mg7 66.7(2) . 13_554 ?
 Ga1 Pd2 Mg7 66.7(2) . 13_554 ?
 Mg18 Pd2 Mg7 171.3(2) . 13_554 ?
 Ga2 Pd2 Mg7 171.3(2) . 13_554 ?
 Mg19 Pd2 Mg7 69.0(2) 13_554 13_554 ?

Ga3 Pd2 Mg7 69.0(2) 13_554 13_554 ?
 Mg19 Pd2 Mg7 69.0(2) 32 13_554 ?
 Ga3 Pd2 Mg7 69.0(2) 32 13_554 ?
 Pd3 Pd2 Mg7 115.1(2) . 13_554 ?
 Mg21 Pd2 Mg2 65.92(11) . 26_455 ?
 Ga1 Pd2 Mg2 65.92(11) . 26_455 ?
 Mg18 Pd2 Mg2 118.01(10) . 26_455 ?
 Ga2 Pd2 Mg2 118.01(10) . 26_455 ?
 Mg19 Pd2 Mg2 119.67(12) 13_554 26_455 ?
 Ga3 Pd2 Mg2 119.67(12) 13_554 26_455 ?
 Mg19 Pd2 Mg2 65.73(11) 32 26_455 ?
 Ga3 Pd2 Mg2 65.73(11) 32 26_455 ?
 Pd3 Pd2 Mg2 114.65(11) . 26_455 ?
 Mg7 Pd2 Mg2 64.16(10) 13_554 26_455 ?
 Mg21 Pd2 Mg2 65.92(11) . 27 ?
 Ga1 Pd2 Mg2 65.92(11) . 27 ?
 Mg18 Pd2 Mg2 118.01(10) . 27 ?
 Ga2 Pd2 Mg2 118.01(10) . 27 ?
 Mg19 Pd2 Mg2 65.73(11) 13_554 27 ?
 Ga3 Pd2 Mg2 65.73(11) 13_554 27 ?
 Mg19 Pd2 Mg2 119.67(12) 32 27 ?
 Ga3 Pd2 Mg2 119.67(12) 32 27 ?
 Pd3 Pd2 Mg2 114.65(11) . 27 ?
 Mg7 Pd2 Mg2 64.16(10) 13_554 27 ?
 Mg2 Pd2 Mg2 119.2(2) 26_455 27 ?
 Pd3 Mg2 Pd1 152.7(2) . . ?
 Pd3 Mg2 Pd2 98.40(12) . 26_455 ?
 Pd1 Mg2 Pd2 96.14(12) . 26_455 ?
 Pd3 Mg2 Pd2 98.40(12) . 27 ?
 Pd1 Mg2 Pd2 96.14(12) . 27 ?
 Pd2 Mg2 Pd2 115.1(2) 26_455 27 ?
 Pd3 Mg2 Mg21 146.42(14) . 27 ?
 Pd1 Mg2 Mg21 53.80(10) . 27 ?
 Pd2 Mg2 Mg21 95.0(2) 26_455 27 ?
 Pd2 Mg2 Mg21 48.16(8) 27 27 ?
 Pd3 Mg2 Ga1 146.42(14) . 27 ?
 Pd1 Mg2 Ga1 53.80(10) . 27 ?
 Pd2 Mg2 Ga1 95.0(2) 26_455 27 ?
 Pd2 Mg2 Ga1 48.16(8) 27 27 ?
 Mg21 Mg2 Ga1 0.00(14) 27 27 ?
 Pd3 Mg2 Mg21 146.42(14) . 26_455 ?
 Pd1 Mg2 Mg21 53.80(10) . 26_455 ?
 Pd2 Mg2 Mg21 48.16(8) 26_455 26_455 ?
 Pd2 Mg2 Mg21 95.0(2) 27 26_455 ?
 Mg21 Mg2 Mg21 53.08(13) 27 26_455 ?
 Ga1 Mg2 Mg21 53.08(13) 27 26_455 ?
 Pd3 Mg2 Ga1 146.42(14) . 26_455 ?
 Pd1 Mg2 Ga1 53.80(10) . 26_455 ?
 Pd2 Mg2 Ga1 48.16(8) 26_455 26_455 ?
 Pd2 Mg2 Ga1 95.0(2) 27 26_455 ?
 Mg21 Mg2 Ga1 53.08(13) 27 26_455 ?
 Ga1 Mg2 Ga1 53.08(13) 27 26_455 ?
 Mg21 Mg2 Ga1 0.00(15) 26_455 26_455 ?
 Pd3 Mg2 Mg19 52.40(10) . 32 ?
 Pd1 Mg2 Mg19 147.32(12) . 32 ?
 Pd2 Mg2 Mg19 51.20(7) 26_455 32 ?
 Pd2 Mg2 Mg19 97.5(2) 27 32 ?

Mg21 Mg2 Mg19 119.8(2) 27 32 ?
Ga1 Mg2 Mg19 119.8(2) 27 32 ?
Mg21 Mg2 Mg19 95.45(13) 26_455 32 ?
Ga1 Mg2 Mg19 95.45(13) 26_455 32 ?
Pd3 Mg2 Ga3 52.40(10) . 32 ?
Pd1 Mg2 Ga3 147.32(12) . 32 ?
Pd2 Mg2 Ga3 51.20(7) 26_455 32 ?
Pd2 Mg2 Ga3 97.5(2) 27 32 ?
Mg21 Mg2 Ga3 119.8(2) 27 32 ?
Ga1 Mg2 Ga3 119.8(2) 27 32 ?
Mg21 Mg2 Ga3 95.45(13) 26_455 32 ?
Ga1 Mg2 Ga3 95.45(13) 26_455 32 ?
Mg19 Mg2 Ga3 0.00(12) 32 32 ?
Pd3 Mg2 Mg19 52.40(10) . 13_554 ?
Pd1 Mg2 Mg19 147.32(12) . 13_554 ?
Pd2 Mg2 Mg19 97.5(2) 26_455 13_554 ?
Pd2 Mg2 Mg19 51.20(7) 27 13_554 ?
Mg21 Mg2 Mg19 95.45(13) 27 13_554 ?
Ga1 Mg2 Mg19 95.45(13) 27 13_554 ?
Mg21 Mg2 Mg19 119.8(2) 26_455 13_554 ?
Ga1 Mg2 Mg19 119.8(2) 26_455 13_554 ?
Mg19 Mg2 Mg19 53.36(11) 32 13_554 ?
Ga3 Mg2 Mg19 53.36(11) 32 13_554 ?
Pd3 Mg2 Ga3 52.40(10) . 13_554 ?
Pd1 Mg2 Ga3 147.32(12) . 13_554 ?
Pd2 Mg2 Ga3 97.5(2) 26_455 13_554 ?
Pd2 Mg2 Ga3 51.20(7) 27 13_554 ?
Mg21 Mg2 Ga3 95.45(13) 27 13_554 ?
Ga1 Mg2 Ga3 95.45(13) 27 13_554 ?
Mg21 Mg2 Ga3 119.8(2) 26_455 13_554 ?
Ga1 Mg2 Ga3 119.8(2) 26_455 13_554 ?
Mg19 Mg2 Ga3 53.36(11) 32 13_554 ?
Ga3 Mg2 Ga3 53.36(11) 32 13_554 ?
Mg19 Mg2 Ga3 0.00(12) 13_554 13_554 ?
Ga15 Pd3 Mg4 0.00(8) . . ?
Ga15 Pd3 Mg18 125.51(13) . . ?
Mg4 Pd3 Mg18 125.51(13) . . ?
Ga15 Pd3 Ga2 125.51(13) . . ?
Mg4 Pd3 Ga2 125.51(13) . . ?
Mg18 Pd3 Ga2 0.00(5) . . ?
Ga15 Pd3 Mg19 124.65(7) . 32 ?
Mg4 Pd3 Mg19 124.65(7) . 32 ?
Mg18 Pd3 Mg19 101.01(9) . 32 ?
Ga2 Pd3 Mg19 101.01(9) . 32 ?
Ga15 Pd3 Ga3 124.65(7) . 32 ?
Mg4 Pd3 Ga3 124.65(7) . 32 ?
Mg18 Pd3 Ga3 101.01(9) . 32 ?
Ga2 Pd3 Ga3 101.01(9) . 32 ?
Mg19 Pd3 Ga3 0.00(12) 32 32 ?
Ga15 Pd3 Mg19 124.65(7) . 13_554 ?
Mg4 Pd3 Mg19 124.65(7) . 13_554 ?
Mg18 Pd3 Mg19 101.01(9) . 13_554 ?
Ga2 Pd3 Mg19 101.01(9) . 13_554 ?
Mg19 Pd3 Mg19 62.22(12) 32 13_554 ?
Ga3 Pd3 Mg19 62.22(12) 32 13_554 ?
Ga15 Pd3 Ga3 124.65(7) . 13_554 ?
Mg4 Pd3 Ga3 124.65(7) . 13_554 ?

Mg18 Pd3 Ga3 101.01(9) . 13_554 ?
Ga2 Pd3 Ga3 101.01(9) . 13_554 ?
Mg19 Pd3 Ga3 62.22(12) 32 13_554 ?
Ga3 Pd3 Ga3 62.22(12) 32 13_554 ?
Mg19 Pd3 Ga3 0.00(12) 13_554 13_554 ?
Ga15 Pd3 Mg5 69.18(13) . 3_665 ?
Mg4 Pd3 Mg5 69.18(13) . 3_665 ?
Mg18 Pd3 Mg5 66.04(14) . 3_665 ?
Ga2 Pd3 Mg5 66.04(14) . 3_665 ?
Mg19 Pd3 Mg5 113.41(13) 32 3_665 ?
Ga3 Pd3 Mg5 113.41(13) 32 3_665 ?
Mg19 Pd3 Mg5 166.00(12) 13_554 3_665 ?
Ga3 Pd3 Mg5 166.00(12) 13_554 3_665 ?
Ga15 Pd3 Mg5 69.18(13) . 2_655 ?
Mg4 Pd3 Mg5 69.18(13) . 2_655 ?
Mg18 Pd3 Mg5 66.04(14) . 2_655 ?
Ga2 Pd3 Mg5 66.04(14) . 2_655 ?
Mg19 Pd3 Mg5 166.00(12) 32 2_655 ?
Ga3 Pd3 Mg5 166.00(12) 32 2_655 ?
Mg19 Pd3 Mg5 113.41(13) 13_554 2_655 ?
Ga3 Pd3 Mg5 113.41(13) 13_554 2_655 ?
Mg5 Pd3 Mg5 67.4(2) 3_665 2_655 ?
Ga15 Pd3 Mg1 69.37(9) . 10 ?
Mg4 Pd3 Mg1 69.37(9) . 10 ?
Mg18 Pd3 Mg1 117.34(8) . 10 ?
Ga2 Pd3 Mg1 117.34(8) . 10 ?
Mg19 Pd3 Mg1 117.11(11) 32 10 ?
Ga3 Pd3 Mg1 117.11(11) 32 10 ?
Mg19 Pd3 Mg1 62.89(9) 13_554 10 ?
Ga3 Pd3 Mg1 62.89(9) 13_554 10 ?
Mg5 Pd3 Mg1 126.82(15) 3_665 10 ?
Mg5 Pd3 Mg1 67.73(14) 2_655 10 ?
Ga15 Pd3 Mg1 69.37(9) . 25 ?
Mg4 Pd3 Mg1 69.37(9) . 25 ?
Mg18 Pd3 Mg1 117.34(8) . 25 ?
Ga2 Pd3 Mg1 117.34(8) . 25 ?
Mg19 Pd3 Mg1 62.89(9) 32 25 ?
Ga3 Pd3 Mg1 62.89(9) 32 25 ?
Mg19 Pd3 Mg1 117.11(11) 13_554 25 ?
Ga3 Pd3 Mg1 117.11(11) 13_554 25 ?
Mg5 Pd3 Mg1 67.73(14) 3_665 25 ?
Mg5 Pd3 Mg1 126.82(15) 2_655 25 ?
Mg1 Pd3 Mg1 123.8(2) 10 25 ?
Pd1 Mg3 Pd5 177.0(2) . 7 ?
Pd1 Mg3 Ga15 124.41(15) . . ?
Pd5 Mg3 Ga15 58.61(9) 7 . ?
Pd1 Mg3 Mg4 124.41(15) . . ?
Pd5 Mg3 Mg4 58.61(9) 7 . ?
Ga15 Mg3 Mg4 0.00(5) . . ?
Pd1 Mg3 Ga15 119.55(12) . 32 ?
Pd5 Mg3 Ga15 58.01(8) 7 32 ?
Ga15 Mg3 Ga15 107.67(13) . 32 ?
Mg4 Mg3 Ga15 107.67(13) . 32 ?
Pd1 Mg3 Mg4 119.55(12) . 32 ?
Pd5 Mg3 Mg4 58.01(8) 7 32 ?
Ga15 Mg3 Mg4 107.67(13) . 32 ?
Mg4 Mg3 Mg4 107.67(13) . 32 ?

Ga15 Mg3 Mg4 0.0(2) 32 32 ?
 Pd1 Mg3 Ga15 119.55(12) . 33_545 ?
 Pd5 Mg3 Ga15 58.01(8) 7 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Ga15 107.67(13) . 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Ga15 107.67(13) . 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Ga15 61.12(15) 32 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Ga15 61.12(15) 32 33_545 ?
 Pd1 Mg3 Mg4 119.55(12) . 33_545 ?
 Pd5 Mg3 Mg4 58.01(8) 7 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Mg4 107.67(13) . 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg4 107.67(13) . 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Mg4 61.12(15) 32 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg4 61.12(15) 32 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Mg4 0.0(2) 33_545 33_545 ?
 Pd1 Mg3 Mg3 122.48(2) . 33_545 ?
 Pd5 Mg3 Mg3 58.38(2) 7 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Mg3 60.56(11) . 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 60.56(11) . 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Mg3 108.00(10) 32 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 108.00(10) 32 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Mg3 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Pd1 Mg3 Ga14 122.48(2) . 33_545 ?
 Pd5 Mg3 Ga14 58.38(2) 7 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Ga14 60.56(11) . 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Ga14 60.56(11) . 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Ga14 108.00(10) 32 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Ga14 108.00(10) 32 33_545 ?
 Ga15 Mg3 Ga14 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Mg4 Mg3 Ga14 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Mg3 Mg3 Ga14 0.0(2) 33_545 33_545 ?
 Pd1 Mg3 Mg3 122.48(2) . 32 ?
 Pd5 Mg3 Mg3 58.38(2) 7 32 ?
 Ga15 Mg3 Mg3 60.56(11) . 32 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 60.56(11) . 32 ?
 Ga15 Mg3 Mg3 58.87(10) 32 32 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 58.87(10) 32 32 ?
 Ga15 Mg3 Mg3 108.00(10) 33_545 32 ?
 Mg4 Mg3 Mg3 108.00(10) 33_545 32 ?
 Mg3 Mg3 Mg3 108.63(13) 33_545 32 ?
 Ga14 Mg3 Mg3 108.63(13) 33_545 32 ?
 Pd1 Mg3 Ga14 122.48(2) . 32 ?
 Pd5 Mg3 Ga14 58.38(2) 7 32 ?
 Ga15 Mg3 Ga14 60.56(11) . 32 ?
 Mg4 Mg3 Ga14 60.56(11) . 32 ?
 Ga15 Mg3 Ga14 58.87(10) 32 32 ?
 Mg4 Mg3 Ga14 58.87(10) 32 32 ?
 Ga15 Mg3 Ga14 108.00(10) 33_545 32 ?
 Mg4 Mg3 Ga14 108.00(10) 33_545 32 ?
 Mg3 Mg3 Ga14 108.63(13) 33_545 32 ?
 Ga14 Mg3 Ga14 108.63(13) 33_545 32 ?
 Mg3 Mg3 Ga14 0.0(2) 32 32 ?
 Pd1 Ga14 Pd5 177.0(2) . 7 ?
 Pd1 Ga14 Ga15 124.41(15) . . ?
 Pd5 Ga14 Ga15 58.61(9) 7 . ?
 Pd1 Ga14 Mg4 124.41(15) . . ?
 Pd5 Ga14 Mg4 58.61(9) 7 . ?

Ga15 Ga14 Mg4 0.00(5) . . ?
 Pd1 Ga14 Ga15 119.55(12) . 32 ?
 Pd5 Ga14 Ga15 58.01(8) 7 32 ?
 Ga15 Ga14 Ga15 107.67(13) . 32 ?
 Mg4 Ga14 Ga15 107.67(13) . 32 ?
 Pd1 Ga14 Mg4 119.55(12) . 32 ?
 Pd5 Ga14 Mg4 58.01(8) 7 32 ?
 Ga15 Ga14 Mg4 107.67(13) . 32 ?
 Mg4 Ga14 Mg4 107.67(13) . 32 ?
 Ga15 Ga14 Mg4 0.0(2) 32 32 ?
 Pd1 Ga14 Ga15 119.55(12) . 33_545 ?
 Pd5 Ga14 Ga15 58.01(8) 7 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Ga15 107.67(13) . 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Ga15 107.67(13) . 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Ga15 61.12(15) 32 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Ga15 61.12(15) 32 33_545 ?
 Pd1 Ga14 Mg4 119.55(12) . 33_545 ?
 Pd5 Ga14 Mg4 58.01(8) 7 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Mg4 107.67(13) . 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Mg4 107.67(13) . 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Mg4 61.12(15) 32 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Mg4 61.12(15) 32 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Mg4 0.0(2) 33_545 33_545 ?
 Pd1 Ga14 Mg3 122.48(2) . 33_545 ?
 Pd5 Ga14 Mg3 58.38(2) 7 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Mg3 60.56(11) . 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Mg3 60.56(11) . 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Mg3 108.00(10) 32 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Mg3 108.00(10) 32 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Mg3 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Mg3 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Pd1 Ga14 Ga14 122.48(2) . 33_545 ?
 Pd5 Ga14 Ga14 58.38(2) 7 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Ga14 60.56(11) . 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Ga14 60.56(11) . 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Ga14 108.00(10) 32 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Ga14 108.00(10) 32 33_545 ?
 Ga15 Ga14 Ga14 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Mg4 Ga14 Ga14 58.87(10) 33_545 33_545 ?
 Mg3 Ga14 Ga14 0.0(2) 33_545 33_545 ?
 Pd1 Ga14 Mg3 122.48(2) . 32 ?
 Pd5 Ga14 Mg3 58.38(2) 7 32 ?
 Ga15 Ga14 Mg3 60.56(11) . 32 ?
 Mg4 Ga14 Mg3 60.56(11) . 32 ?
 Ga15 Ga14 Mg3 58.87(10) 32 32 ?
 Mg4 Ga14 Mg3 58.87(10) 32 32 ?
 Ga15 Ga14 Mg3 108.00(10) 33_545 32 ?
 Mg4 Ga14 Mg3 108.00(10) 33_545 32 ?
 Mg3 Ga14 Mg3 108.63(13) 33_545 32 ?
 Ga14 Ga14 Mg3 108.63(13) 33_545 32 ?
 Pd1 Ga14 Ga14 122.48(2) . 32 ?
 Pd5 Ga14 Ga14 58.38(2) 7 32 ?
 Ga15 Ga14 Ga14 60.56(11) . 32 ?
 Mg4 Ga14 Ga14 60.56(11) . 32 ?
 Ga15 Ga14 Ga14 58.87(10) 32 32 ?
 Mg4 Ga14 Ga14 58.87(10) 32 32 ?
 Ga15 Ga14 Ga14 108.00(10) 33_545 32 ?

Mg4 Ga14 Ga14 108.00(10) 33_545 32 ?
Mg3 Ga14 Ga14 108.63(13) 33_545 32 ?
Ga14 Ga14 Ga14 108.63(13) 33_545 32 ?
Mg3 Ga14 Ga14 0.0(2) 32 32 ?
Mg20 Ga2 Pd4 0.0(2) 25 25 ?
Mg20 Ga2 Pd2 176.1(2) 25 . ?
Pd4 Ga2 Pd2 176.1(2) 25 . ?
Mg20 Ga2 Pd3 114.5(2) 25 . ?
Pd4 Ga2 Pd3 114.5(2) 25 . ?
Pd2 Ga2 Pd3 69.32(11) . . ?
Mg20 Ga2 Mg21 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd4 Ga2 Mg21 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd2 Ga2 Mg21 111.2(2) . 19_665 ?
Pd3 Ga2 Mg21 179.5(2) . 19_665 ?
Mg20 Ga2 Ga1 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd4 Ga2 Ga1 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd2 Ga2 Ga1 111.2(2) . 19_665 ?
Pd3 Ga2 Ga1 179.5(2) . 19_665 ?
Mg21 Ga2 Ga1 0.00(3) 19_665 19_665 ?
Mg20 Ga2 Pd1 63.76(9) 25 15_554 ?
Pd4 Ga2 Pd1 63.76(9) 25 15_554 ?
Pd2 Ga2 Pd1 114.64(10) . 15_554 ?
Pd3 Ga2 Pd1 120.87(8) . 15_554 ?
Mg21 Ga2 Pd1 58.98(7) 19_665 15_554 ?
Ga1 Ga2 Pd1 58.98(7) 19_665 15_554 ?
Mg20 Ga2 Pd1 63.76(9) 25 14_654 ?
Pd4 Ga2 Pd1 63.76(9) 25 14_654 ?
Pd2 Ga2 Pd1 114.64(10) . 14_654 ?
Pd3 Ga2 Pd1 120.87(8) . 14_654 ?
Mg21 Ga2 Pd1 58.98(7) 19_665 14_654 ?
Ga1 Ga2 Pd1 58.98(7) 19_665 14_654 ?
Pd1 Ga2 Pd1 110.28(14) 15_554 14_654 ?
Mg20 Ga2 Mg1 111.89(12) 25 3_665 ?
Pd4 Ga2 Mg1 111.89(12) 25 3_665 ?
Pd2 Ga2 Mg1 68.98(11) . 3_665 ?
Pd3 Ga2 Mg1 70.37(10) . 3_665 ?
Mg21 Ga2 Mg1 109.78(11) 19_665 3_665 ?
Ga1 Ga2 Mg1 109.78(11) 19_665 3_665 ?
Pd1 Ga2 Mg1 168.7(2) 15_554 3_665 ?
Pd1 Ga2 Mg1 59.56(8) 14_654 3_665 ?
Mg20 Ga2 Mg1 111.89(11) 25 24 ?
Pd4 Ga2 Mg1 111.89(11) 25 24 ?
Pd2 Ga2 Mg1 68.98(11) . 24 ?
Pd3 Ga2 Mg1 70.37(10) . 24 ?
Mg21 Ga2 Mg1 109.78(11) 19_665 24 ?
Ga1 Ga2 Mg1 109.78(11) 19_665 24 ?
Pd1 Ga2 Mg1 59.56(8) 15_554 24 ?
Pd1 Ga2 Mg1 168.7(2) 14_654 24 ?
Mg1 Ga2 Mg1 130.0(2) 3_665 24 ?
Mg20 Ga2 Mg5 64.56(15) 25 2_655 ?
Pd4 Ga2 Mg5 64.56(15) 25 2_655 ?
Pd2 Ga2 Mg5 118.53(15) . 2_655 ?
Pd3 Ga2 Mg5 60.87(11) . 2_655 ?
Mg21 Ga2 Mg5 118.71(15) 19_665 2_655 ?
Ga1 Ga2 Mg5 118.71(15) 19_665 2_655 ?
Pd1 Ga2 Mg5 120.6(2) 15_554 2_655 ?
Pd1 Ga2 Mg5 68.89(11) 14_654 2_655 ?

Mg1 Ga2 Mg5 62.24(14) 3_665 2_655 ?
Mg1 Ga2 Mg5 119.7(2) 24 2_655 ?
Mg20 Ga2 Mg5 64.56(15) 25 3_665 ?
Pd4 Ga2 Mg5 64.56(15) 25 3_665 ?
Pd2 Ga2 Mg5 118.53(15) . 3_665 ?
Pd3 Ga2 Mg5 60.87(11) . 3_665 ?
Mg21 Ga2 Mg5 118.71(15) 19_665 3_665 ?
Ga1 Ga2 Mg5 118.71(15) 19_665 3_665 ?
Pd1 Ga2 Mg5 68.89(11) 15_554 3_665 ?
Pd1 Ga2 Mg5 120.6(2) 14_654 3_665 ?
Mg1 Ga2 Mg5 119.7(2) 3_665 3_665 ?
Mg1 Ga2 Mg5 62.24(14) 24 3_665 ?
Mg5 Ga2 Mg5 64.0(2) 2_655 3_665 ?
Mg20 Mg18 Pd4 0.0(2) 25 25 ?
Mg20 Mg18 Pd2 176.1(2) 25 . ?
Pd4 Mg18 Pd2 176.1(2) 25 . ?
Mg20 Mg18 Pd3 114.5(2) 25 . ?
Pd4 Mg18 Pd3 114.5(2) 25 . ?
Pd2 Mg18 Pd3 69.32(11) . . ?
Mg20 Mg18 Mg21 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd4 Mg18 Mg21 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd2 Mg18 Mg21 111.2(2) . 19_665 ?
Pd3 Mg18 Mg21 179.5(2) . 19_665 ?
Mg20 Mg18 Ga1 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd4 Mg18 Ga1 64.94(14) 25 19_665 ?
Pd2 Mg18 Ga1 111.2(2) . 19_665 ?
Pd3 Mg18 Ga1 179.5(2) . 19_665 ?
Mg21 Mg18 Ga1 0.00(3) 19_665 19_665 ?
Mg20 Mg18 Pd1 63.76(9) 25 15_554 ?
Pd4 Mg18 Pd1 63.76(9) 25 15_554 ?
Pd2 Mg18 Pd1 114.64(10) . 15_554 ?
Pd3 Mg18 Pd1 120.87(8) . 15_554 ?
Mg21 Mg18 Pd1 58.98(7) 19_665 15_554 ?
Ga1 Mg18 Pd1 58.98(7) 19_665 15_554 ?
Mg20 Mg18 Pd1 63.76(9) 25 14_654 ?
Pd4 Mg18 Pd1 63.76(9) 25 14_654 ?
Pd2 Mg18 Pd1 114.64(10) . 14_654 ?
Pd3 Mg18 Pd1 120.87(8) . 14_654 ?
Mg21 Mg18 Pd1 58.98(7) 19_665 14_654 ?
Ga1 Mg18 Pd1 58.98(7) 19_665 14_654 ?
Pd1 Mg18 Pd1 110.28(14) 15_554 14_654 ?
Mg20 Mg18 Mg1 111.89(12) 25 3_665 ?
Pd4 Mg18 Mg1 111.89(12) 25 3_665 ?
Pd2 Mg18 Mg1 68.98(11) . 3_665 ?
Pd3 Mg18 Mg1 70.37(10) . 3_665 ?
Mg21 Mg18 Mg1 109.78(11) 19_665 3_665 ?
Ga1 Mg18 Mg1 109.78(11) 19_665 3_665 ?
Pd1 Mg18 Mg1 168.7(2) 15_554 3_665 ?
Pd1 Mg18 Mg1 59.56(8) 14_654 3_665 ?
Mg20 Mg18 Mg1 111.89(11) 25 24 ?
Pd4 Mg18 Mg1 111.89(11) 25 24 ?
Pd2 Mg18 Mg1 68.98(11) . 24 ?
Pd3 Mg18 Mg1 70.37(10) . 24 ?
Mg21 Mg18 Mg1 109.78(11) 19_665 24 ?
Ga1 Mg18 Mg1 109.78(11) 19_665 24 ?
Pd1 Mg18 Mg1 59.56(8) 15_554 24 ?
Pd1 Mg18 Mg1 168.7(2) 14_654 24 ?

Mg1 Mg18 Mg1 130.0(2) 3_665 24 ?
Mg20 Mg18 Mg5 64.56(15) 25 2_655 ?
Pd4 Mg18 Mg5 64.56(15) 25 2_655 ?
Pd2 Mg18 Mg5 118.53(15) . 2_655 ?
Pd3 Mg18 Mg5 60.87(11) . 2_655 ?
Mg21 Mg18 Mg5 118.71(15) 19_665 2_655 ?
Ga1 Mg18 Mg5 118.71(15) 19_665 2_655 ?
Pd1 Mg18 Mg5 120.6(2) 15_554 2_655 ?
Pd1 Mg18 Mg5 68.89(11) 14_654 2_655 ?
Mg1 Mg18 Mg5 62.24(14) 3_665 2_655 ?
Mg1 Mg18 Mg5 119.7(2) 24 2_655 ?
Mg20 Mg18 Mg5 64.56(15) 25 3_665 ?
Pd4 Mg18 Mg5 64.56(15) 25 3_665 ?
Pd2 Mg18 Mg5 118.53(15) . 3_665 ?
Pd3 Mg18 Mg5 60.87(11) . 3_665 ?
Mg21 Mg18 Mg5 118.71(15) 19_665 3_665 ?
Ga1 Mg18 Mg5 118.71(15) 19_665 3_665 ?
Pd1 Mg18 Mg5 68.89(11) 15_554 3_665 ?
Pd1 Mg18 Mg5 120.6(2) 14_654 3_665 ?
Mg1 Mg18 Mg5 119.7(2) 3_665 3_665 ?
Mg1 Mg18 Mg5 62.24(14) 24 3_665 ?
Mg5 Mg18 Mg5 64.0(2) 2_655 3_665 ?
Pd3 Mg4 Pd5 177.82(15) . 7 ?
Pd3 Mg4 Ga14 123.03(14) . . ?
Pd5 Mg4 Ga14 59.16(9) 7 . ?
Pd3 Mg4 Mg3 123.03(14) . . ?
Pd5 Mg4 Mg3 59.16(9) 7 . ?
Ga14 Mg4 Mg3 0.00(5) . . ?
Pd3 Mg4 Ga14 122.09(9) . 32 ?
Pd5 Mg4 Ga14 58.55(8) 7 32 ?
Ga14 Mg4 Ga14 60.56(8) . 32 ?
Mg3 Mg4 Ga14 60.56(8) . 32 ?
Pd3 Mg4 Mg3 122.09(9) . 32 ?
Pd5 Mg4 Mg3 58.55(8) 7 32 ?
Ga14 Mg4 Mg3 60.56(8) . 32 ?
Mg3 Mg4 Mg3 60.56(8) . 32 ?
Ga14 Mg4 Mg3 0.0(2) 32 32 ?
Pd3 Mg4 Ga14 122.09(9) . 33_545 ?
Pd5 Mg4 Ga14 58.55(8) 7 33_545 ?
Ga14 Mg4 Ga14 60.56(8) . 33_545 ?
Mg3 Mg4 Ga14 60.56(8) . 33_545 ?
Ga14 Mg4 Ga14 108.6(2) 32 33_545 ?
Mg3 Mg4 Ga14 108.6(2) 32 33_545 ?
Pd3 Mg4 Mg3 122.09(9) . 33_545 ?
Pd5 Mg4 Mg3 58.55(8) 7 33_545 ?
Ga14 Mg4 Mg3 60.56(8) . 33_545 ?
Mg3 Mg4 Mg3 60.56(8) . 33_545 ?
Ga14 Mg4 Mg3 108.6(2) 32 33_545 ?
Mg3 Mg4 Mg3 108.6(2) 32 33_545 ?
Ga14 Mg4 Mg3 0.0(2) 33_545 33_545 ?
Pd3 Mg4 Ga15 120.65(7) . 3_665 ?
Pd5 Mg4 Ga15 57.58(6) 7 3_665 ?
Ga14 Mg4 Ga15 108.00(8) . 3_665 ?
Mg3 Mg4 Ga15 108.00(8) . 3_665 ?
Ga14 Mg4 Ga15 59.44(7) 32 3_665 ?
Mg3 Mg4 Ga15 59.44(7) 32 3_665 ?
Ga14 Mg4 Ga15 107.69(8) 33_545 3_665 ?

Mg3 Mg4 Ga15 107.69(8) 33_545 3_665 ?
Pd3 Mg4 Ga15 120.65(7) . 2_655 ?
Pd5 Mg4 Ga15 57.58(6) 7 2_655 ?
Ga14 Mg4 Ga15 108.00(8) . 2_655 ?
Mg3 Mg4 Ga15 108.00(8) . 2_655 ?
Ga14 Mg4 Ga15 107.69(8) 32 2_655 ?
Mg3 Mg4 Ga15 107.69(8) 32 2_655 ?
Ga14 Mg4 Ga15 59.44(7) 33_545 2_655 ?
Mg3 Mg4 Ga15 59.44(7) 33_545 2_655 ?
Ga15 Mg4 Ga15 60.0 3_665 2_655 ?
Pd3 Mg4 Mg4 120.65(7) . 3_665 ?
Pd5 Mg4 Mg4 57.58(6) 7 3_665 ?
Ga14 Mg4 Mg4 108.00(8) . 3_665 ?
Mg3 Mg4 Mg4 108.00(8) . 3_665 ?
Ga14 Mg4 Mg4 59.44(7) 32 3_665 ?
Mg3 Mg4 Mg4 59.44(7) 32 3_665 ?
Ga14 Mg4 Mg4 107.69(8) 33_545 3_665 ?
Mg3 Mg4 Mg4 107.69(8) 33_545 3_665 ?
Ga15 Mg4 Mg4 0.00(14) 3_665 3_665 ?
Ga15 Mg4 Mg4 60.0 2_655 3_665 ?
Pd3 Mg4 Mg4 120.65(7) . 2_655 ?
Pd5 Mg4 Mg4 57.58(6) 7 2_655 ?
Ga14 Mg4 Mg4 108.00(8) . 2_655 ?
Mg3 Mg4 Mg4 108.00(8) . 2_655 ?
Ga14 Mg4 Mg4 107.69(8) 32 2_655 ?
Mg3 Mg4 Mg4 107.69(8) 32 2_655 ?
Ga14 Mg4 Mg4 59.44(7) 33_545 2_655 ?
Mg3 Mg4 Mg4 59.44(7) 33_545 2_655 ?
Ga15 Mg4 Mg4 60.0 3_665 2_655 ?
Ga15 Mg4 Mg4 0.00(14) 2_655 2_655 ?
Mg4 Mg4 Mg4 60.0 3_665 2_655 ?
Pd3 Ga15 Pd5 177.82(15) . 7 ?
Pd3 Ga15 Ga14 123.03(14) . . ?
Pd5 Ga15 Ga14 59.16(9) 7 . ?
Pd3 Ga15 Mg3 123.03(14) . . ?
Pd5 Ga15 Mg3 59.16(9) 7 . ?
Ga14 Ga15 Mg3 0.00(5) . . ?
Pd3 Ga15 Ga14 122.09(9) . 32 ?
Pd5 Ga15 Ga14 58.55(8) 7 32 ?
Ga14 Ga15 Ga14 60.56(8) . 32 ?
Mg3 Ga15 Ga14 60.56(8) . 32 ?
Pd3 Ga15 Mg3 122.09(9) . 32 ?
Pd5 Ga15 Mg3 58.55(8) 7 32 ?
Ga14 Ga15 Mg3 60.56(8) . 32 ?
Mg3 Ga15 Mg3 60.56(8) . 32 ?
Ga14 Ga15 Mg3 0.0(2) 32 32 ?
Pd3 Ga15 Ga14 122.09(9) . 33_545 ?
Pd5 Ga15 Ga14 58.55(8) 7 33_545 ?
Ga14 Ga15 Ga14 60.56(8) . 33_545 ?
Mg3 Ga15 Ga14 60.56(8) . 33_545 ?
Ga14 Ga15 Ga14 108.6(2) 32 33_545 ?
Mg3 Ga15 Ga14 108.6(2) 32 33_545 ?
Pd3 Ga15 Mg3 122.09(9) . 33_545 ?
Pd5 Ga15 Mg3 58.55(8) 7 33_545 ?
Ga14 Ga15 Mg3 60.56(8) . 33_545 ?
Mg3 Ga15 Mg3 60.56(8) . 33_545 ?
Ga14 Ga15 Mg3 108.6(2) 32 33_545 ?

Mg3 Ga15 Mg3 108.6(2) 32 33_545 ?
Ga14 Ga15 Mg3 0.0(2) 33_545 33_545 ?
Pd3 Ga15 Mg4 120.65(7) . 3_665 ?
Pd5 Ga15 Mg4 57.58(6) 7 3_665 ?
Ga14 Ga15 Mg4 108.00(8) . 3_665 ?
Mg3 Ga15 Mg4 108.00(8) . 3_665 ?
Ga14 Ga15 Mg4 59.44(7) 32 3_665 ?
Mg3 Ga15 Mg4 59.44(7) 32 3_665 ?
Ga14 Ga15 Mg4 107.69(8) 33_545 3_665 ?
Mg3 Ga15 Mg4 107.69(8) 33_545 3_665 ?
Pd3 Ga15 Mg4 120.65(7) . 2_655 ?
Pd5 Ga15 Mg4 57.58(6) 7 2_655 ?
Ga14 Ga15 Mg4 108.00(8) . 2_655 ?
Mg3 Ga15 Mg4 108.00(8) . 2_655 ?
Ga14 Ga15 Mg4 107.69(8) 32 2_655 ?
Mg3 Ga15 Mg4 107.69(8) 32 2_655 ?
Ga14 Ga15 Mg4 59.44(7) 33_545 2_655 ?
Mg3 Ga15 Mg4 59.44(7) 33_545 2_655 ?
Mg4 Ga15 Mg4 60.0 3_665 2_655 ?
Pd3 Ga15 Mg5 59.96(8) . 3_665 ?
Pd5 Ga15 Mg5 118.28(11) 7 3_665 ?
Ga14 Ga15 Mg5 148.99(11) . 3_665 ?
Mg3 Ga15 Mg5 148.99(11) . 3_665 ?
Ga14 Ga15 Mg5 148.3(2) 32 3_665 ?
Mg3 Ga15 Mg5 148.3(2) 32 3_665 ?
Ga14 Ga15 Mg5 90.95(11) 33_545 3_665 ?
Mg3 Ga15 Mg5 90.95(11) 33_545 3_665 ?
Mg4 Ga15 Mg5 91.39(11) 3_665 3_665 ?
Mg4 Ga15 Mg5 60.70(8) 2_655 3_665 ?
Pd3 Ga15 Mg5 59.96(8) . 2_655 ?
Pd5 Ga15 Mg5 118.28(11) 7 2_655 ?
Ga14 Ga15 Mg5 148.99(11) . 2_655 ?
Mg3 Ga15 Mg5 148.99(11) . 2_655 ?
Ga14 Ga15 Mg5 90.95(11) 32 2_655 ?
Mg3 Ga15 Mg5 90.95(11) 32 2_655 ?
Ga14 Ga15 Mg5 148.3(2) 33_545 2_655 ?
Mg3 Ga15 Mg5 148.3(2) 33_545 2_655 ?
Mg4 Ga15 Mg5 60.70(8) 3_665 2_655 ?
Mg4 Ga15 Mg5 91.39(11) 2_655 2_655 ?
Mg5 Ga15 Mg5 61.8(2) 3_665 2_655 ?
Pd3 Mg5 Pd3 160.3(2) 3_665 2_655 ?
Pd3 Mg5 Mg20 94.42(12) 3_665 25 ?
Pd3 Mg5 Mg20 94.42(12) 2_655 25 ?
Pd3 Mg5 Pd4 94.42(12) 3_665 25 ?
Pd3 Mg5 Pd4 94.42(12) 2_655 25 ?
Mg20 Mg5 Pd4 0.00(10) 25 25 ?
Pd3 Mg5 Mg18 141.5(2) 3_665 2_655 ?
Pd3 Mg5 Mg18 53.09(8) 2_655 2_655 ?
Mg20 Mg5 Mg18 48.58(11) 25 2_655 ?
Pd4 Mg5 Mg18 48.58(11) 25 2_655 ?
Pd3 Mg5 Ga2 141.5(2) 3_665 2_655 ?
Pd3 Mg5 Ga2 53.09(8) 2_655 2_655 ?
Mg20 Mg5 Ga2 48.58(11) 25 2_655 ?
Pd4 Mg5 Ga2 48.58(11) 25 2_655 ?
Mg18 Mg5 Ga2 0.0(3) 2_655 2_655 ?
Pd3 Mg5 Mg18 53.09(8) 3_665 3_665 ?
Pd3 Mg5 Mg18 141.5(2) 2_655 3_665 ?

Mg20 Mg5 Mg18 48.58(11) 25 3_665 ?
Pd4 Mg5 Mg18 48.58(11) 25 3_665 ?
Mg18 Mg5 Mg18 89.2(2) 2_655 3_665 ?
Ga2 Mg5 Mg18 89.2(2) 2_655 3_665 ?
Pd3 Mg5 Ga2 53.09(8) 3_665 3_665 ?
Pd3 Mg5 Ga2 141.5(2) 2_655 3_665 ?
Mg20 Mg5 Ga2 48.58(11) 25 3_665 ?
Pd4 Mg5 Ga2 48.58(11) 25 3_665 ?
Mg18 Mg5 Ga2 89.2(2) 2_655 3_665 ?
Ga2 Mg5 Ga2 89.2(2) 2_655 3_665 ?
Mg18 Mg5 Ga2 0.0(3) 3_665 3_665 ?
Pd3 Mg5 Mg1 131.0(2) 3_665 23_655 ?
Pd3 Mg5 Mg1 65.40(9) 2_655 23_655 ?
Mg20 Mg5 Mg1 95.8(2) 25 23_655 ?
Pd4 Mg5 Mg1 95.8(2) 25 23_655 ?
Mg18 Mg5 Mg1 57.72(12) 2_655 23_655 ?
Ga2 Mg5 Mg1 57.72(12) 2_655 23_655 ?
Mg18 Mg5 Mg1 103.3(2) 3_665 23_655 ?
Ga2 Mg5 Mg1 103.3(2) 3_665 23_655 ?
Pd3 Mg5 Mg1 65.40(9) 3_665 2_655 ?
Pd3 Mg5 Mg1 131.0(2) 2_655 2_655 ?
Mg20 Mg5 Mg1 95.8(2) 25 2_655 ?
Pd4 Mg5 Mg1 95.8(2) 25 2_655 ?
Mg18 Mg5 Mg1 103.3(2) 2_655 2_655 ?
Ga2 Mg5 Mg1 103.3(2) 2_655 2_655 ?
Mg18 Mg5 Mg1 57.72(12) 3_665 2_655 ?
Ga2 Mg5 Mg1 57.72(12) 3_665 2_655 ?
Mg1 Mg5 Mg1 65.9(2) 23_655 2_655 ?
Pd3 Mg5 Ga15 50.86(9) 3_665 3_665 ?
Pd3 Mg5 Ga15 109.5(2) 2_655 3_665 ?
Mg20 Mg5 Ga15 116.3(2) 25 3_665 ?
Pd4 Mg5 Ga15 116.3(2) 25 3_665 ?
Mg18 Mg5 Ga15 146.6(2) 2_655 3_665 ?
Ga2 Mg5 Ga15 146.6(2) 2_655 3_665 ?
Mg18 Mg5 Ga15 98.48(10) 3_665 3_665 ?
Ga2 Mg5 Ga15 98.48(10) 3_665 3_665 ?
Mg1 Mg5 Ga15 147.8(2) 23_655 3_665 ?
Mg1 Mg5 Ga15 108.32(13) 2_655 3_665 ?
Pd3 Mg5 Mg4 50.86(9) 3_665 3_665 ?
Pd3 Mg5 Mg4 109.5(2) 2_655 3_665 ?
Mg20 Mg5 Mg4 116.3(2) 25 3_665 ?
Pd4 Mg5 Mg4 116.3(2) 25 3_665 ?
Mg18 Mg5 Mg4 146.6(2) 2_655 3_665 ?
Ga2 Mg5 Mg4 146.6(2) 2_655 3_665 ?
Mg18 Mg5 Mg4 98.48(10) 3_665 3_665 ?
Ga2 Mg5 Mg4 98.48(10) 3_665 3_665 ?
Mg1 Mg5 Mg4 147.8(2) 23_655 3_665 ?
Mg1 Mg5 Mg4 108.32(13) 2_655 3_665 ?
Ga15 Mg5 Mg4 0.0(2) 3_665 3_665 ?
Pd2 Ga3 Pd2 170.28(15) 7_445 33_545 ?
Pd2 Ga3 Pd3 67.78(4) 7_445 7_445 ?
Pd2 Ga3 Pd3 117.34(5) 33_545 7_445 ?
Pd2 Ga3 Pd3 117.34(5) 7_445 33_545 ?
Pd2 Ga3 Pd3 67.79(4) 33_545 33_545 ?
Pd3 Ga3 Pd3 122.67(12) 7_445 33_545 ?
Pd2 Ga3 Mg19 58.32(4) 7_445 20_556 ?
Pd2 Ga3 Mg19 116.14(5) 33_545 20_556 ?

Pd3 Ga3 Mg19 58.89(6) 7_445 20_556 ?
 Pd3 Ga3 Mg19 175.10(3) 33_545 20_556 ?
 Pd2 Ga3 Ga3 58.32(4) 7_445 20_556 ?
 Pd2 Ga3 Ga3 116.14(5) 33_545 20_556 ?
 Pd3 Ga3 Ga3 58.89(6) 7_445 20_556 ?
 Pd3 Ga3 Ga3 175.10(3) 33_545 20_556 ?
 Mg19 Ga3 Ga3 0.00(11) 20_556 20_556 ?
 Pd2 Ga3 Mg19 116.14(5) 7_445 21_556 ?
 Pd2 Ga3 Mg19 58.32(4) 33_545 21_556 ?
 Pd3 Ga3 Mg19 175.10(3) 7_445 21_556 ?
 Pd3 Ga3 Mg19 58.90(6) 33_545 21_556 ?
 Mg19 Ga3 Mg19 120.0 20_556 21_556 ?
 Ga3 Ga3 Mg19 120.0 20_556 21_556 ?
 Pd2 Ga3 Ga3 116.14(5) 7_445 21_556 ?
 Pd2 Ga3 Ga3 58.32(4) 33_545 21_556 ?
 Pd3 Ga3 Ga3 175.10(3) 7_445 21_556 ?
 Pd3 Ga3 Ga3 58.90(6) 33_545 21_556 ?
 Mg19 Ga3 Ga3 120.0 20_556 21_556 ?
 Ga3 Ga3 Ga3 120.0 20_556 21_556 ?
 Mg19 Ga3 Ga3 0.00(11) 21_556 21_556 ?
 Pd2 Ga3 Mg1 68.63(9) 7_445 9 ?
 Pd2 Ga3 Mg1 120.45(12) 33_545 9 ?
 Pd3 Ga3 Mg1 70.16(10) 7_445 9 ?
 Pd3 Ga3 Mg1 62.18(10) 33_545 9 ?
 Mg19 Ga3 Mg1 116.02(8) 20_556 9 ?
 Ga3 Ga3 Mg1 116.02(8) 20_556 9 ?
 Mg19 Ga3 Mg1 113.67(8) 21_556 9 ?
 Ga3 Ga3 Mg1 113.67(8) 21_556 9 ?
 Pd2 Ga3 Mg1 120.45(12) 7_445 16_545 ?
 Pd2 Ga3 Mg1 68.63(9) 33_545 16_545 ?
 Pd3 Ga3 Mg1 62.18(10) 7_445 16_545 ?
 Pd3 Ga3 Mg1 70.16(10) 33_545 16_545 ?
 Mg19 Ga3 Mg1 113.67(8) 20_556 16_545 ?
 Ga3 Ga3 Mg1 113.67(8) 20_556 16_545 ?
 Mg19 Ga3 Mg1 116.02(8) 21_556 16_545 ?
 Ga3 Ga3 Mg1 116.02(8) 21_556 16_545 ?
 Mg1 Ga3 Mg1 65.7(2) 9 16_545 ?
 Pd2 Ga3 Mg2 63.07(7) 7_445 33_545 ?
 Pd2 Ga3 Mg2 116.34(7) 33_545 33_545 ?
 Pd3 Ga3 Mg2 121.58(7) 7_445 33_545 ?
 Pd3 Ga3 Mg2 61.86(10) 33_545 33_545 ?
 Mg19 Ga3 Mg2 113.25(10) 20_556 33_545 ?
 Ga3 Ga3 Mg2 113.25(10) 20_556 33_545 ?
 Mg19 Ga3 Mg2 63.32(6) 21_556 33_545 ?
 Ga3 Ga3 Mg2 63.32(6) 21_556 33_545 ?
 Mg1 Ga3 Mg2 64.07(11) 9 33_545 ?
 Mg1 Ga3 Mg2 121.9(2) 16_545 33_545 ?
 Pd2 Ga3 Mg2 116.34(7) 7_445 7_445 ?
 Pd2 Ga3 Mg2 63.07(7) 33_545 7_445 ?
 Pd3 Ga3 Mg2 61.86(10) 7_445 7_445 ?
 Pd3 Ga3 Mg2 121.58(7) 33_545 7_445 ?
 Mg19 Ga3 Mg2 63.32(6) 20_556 7_445 ?
 Ga3 Ga3 Mg2 63.32(6) 20_556 7_445 ?
 Mg19 Ga3 Mg2 113.25(10) 21_556 7_445 ?
 Ga3 Ga3 Mg2 113.25(10) 21_556 7_445 ?
 Mg1 Ga3 Mg2 121.9(2) 9 7_445 ?
 Mg1 Ga3 Mg2 64.07(11) 16_545 7_445 ?

Mg2 Ga3 Mg2 173.8(2) 33_545 7_445 ?
Pd2 Mg19 Pd2 170.28(15) 7_445 33_545 ?
Pd2 Mg19 Pd3 67.78(4) 7_445 7_445 ?
Pd2 Mg19 Pd3 117.34(5) 33_545 7_445 ?
Pd2 Mg19 Pd3 117.34(5) 7_445 33_545 ?
Pd2 Mg19 Pd3 67.79(4) 33_545 33_545 ?
Pd3 Mg19 Pd3 122.67(12) 7_445 33_545 ?
Pd2 Mg19 Mg19 58.32(4) 7_445 20_556 ?
Pd2 Mg19 Mg19 116.14(5) 33_545 20_556 ?
Pd3 Mg19 Mg19 58.89(6) 7_445 20_556 ?
Pd3 Mg19 Mg19 175.10(3) 33_545 20_556 ?
Pd2 Mg19 Ga3 58.32(4) 7_445 20_556 ?
Pd2 Mg19 Ga3 116.14(5) 33_545 20_556 ?
Pd3 Mg19 Ga3 58.89(6) 7_445 20_556 ?
Pd3 Mg19 Ga3 175.10(3) 33_545 20_556 ?
Mg19 Mg19 Ga3 0.00(11) 20_556 20_556 ?
Pd2 Mg19 Mg19 116.14(5) 7_445 21_556 ?
Pd2 Mg19 Mg19 58.32(4) 33_545 21_556 ?
Pd3 Mg19 Mg19 175.10(3) 7_445 21_556 ?
Pd3 Mg19 Mg19 58.90(6) 33_545 21_556 ?
Mg19 Mg19 Mg19 120.0 20_556 21_556 ?
Ga3 Mg19 Mg19 120.0 20_556 21_556 ?
Pd2 Mg19 Ga3 116.14(5) 7_445 21_556 ?
Pd2 Mg19 Ga3 58.32(4) 33_545 21_556 ?
Pd3 Mg19 Ga3 175.10(3) 7_445 21_556 ?
Pd3 Mg19 Ga3 58.90(6) 33_545 21_556 ?
Mg19 Mg19 Ga3 120.0 20_556 21_556 ?
Ga3 Mg19 Ga3 120.0 20_556 21_556 ?
Mg19 Mg19 Ga3 0.00(11) 21_556 21_556 ?
Pd2 Mg19 Mg1 68.63(9) 7_445 9 ?
Pd2 Mg19 Mg1 120.45(12) 33_545 9 ?
Pd3 Mg19 Mg1 70.16(10) 7_445 9 ?
Pd3 Mg19 Mg1 62.18(10) 33_545 9 ?
Mg19 Mg19 Mg1 116.02(8) 20_556 9 ?
Ga3 Mg19 Mg1 116.02(8) 20_556 9 ?
Mg19 Mg19 Mg1 113.67(8) 21_556 9 ?
Ga3 Mg19 Mg1 113.67(8) 21_556 9 ?
Pd2 Mg19 Mg1 120.45(12) 7_445 16_545 ?
Pd2 Mg19 Mg1 68.63(9) 33_545 16_545 ?
Pd3 Mg19 Mg1 62.18(10) 7_445 16_545 ?
Pd3 Mg19 Mg1 70.16(10) 33_545 16_545 ?
Mg19 Mg19 Mg1 113.67(8) 20_556 16_545 ?
Ga3 Mg19 Mg1 113.67(8) 20_556 16_545 ?
Mg19 Mg19 Mg1 116.02(8) 21_556 16_545 ?
Ga3 Mg19 Mg1 116.02(8) 21_556 16_545 ?
Mg1 Mg19 Mg1 65.7(2) 9 16_545 ?
Pd2 Mg19 Mg2 63.07(7) 7_445 33_545 ?
Pd2 Mg19 Mg2 116.34(7) 33_545 33_545 ?
Pd3 Mg19 Mg2 121.58(7) 7_445 33_545 ?
Pd3 Mg19 Mg2 61.86(10) 33_545 33_545 ?
Mg19 Mg19 Mg2 113.25(10) 20_556 33_545 ?
Ga3 Mg19 Mg2 113.25(10) 20_556 33_545 ?
Mg19 Mg19 Mg2 63.32(6) 21_556 33_545 ?
Ga3 Mg19 Mg2 63.32(6) 21_556 33_545 ?
Mg1 Mg19 Mg2 64.07(11) 9 33_545 ?
Mg1 Mg19 Mg2 121.9(2) 16_545 33_545 ?
Pd2 Mg19 Mg2 116.34(7) 7_445 7_445 ?

Pd2 Mg19 Mg2 63.07(7) 33_545 7_445 ?
 Pd3 Mg19 Mg2 61.86(10) 7_445 7_445 ?
 Pd3 Mg19 Mg2 121.58(7) 33_545 7_445 ?
 Mg19 Mg19 Mg2 63.32(6) 20_556 7_445 ?
 Ga3 Mg19 Mg2 63.32(6) 20_556 7_445 ?
 Mg19 Mg19 Mg2 113.25(10) 21_556 7_445 ?
 Ga3 Mg19 Mg2 113.25(10) 21_556 7_445 ?
 Mg1 Mg19 Mg2 121.9(2) 9 7_445 ?
 Mg1 Mg19 Mg2 64.07(11) 16_545 7_445 ?
 Mg2 Mg19 Mg2 173.8(2) 33_545 7_445 ?
 Mg21 Mg6 Ga1 0.0(2) 20 20 ?
 Mg21 Mg6 Mg21 113.3(2) 20 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Mg21 113.3(2) 20 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Ga1 113.3(2) 20 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Ga1 113.3(2) 20 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Ga1 0.00(11) 2_655 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Pd1 54.96(5) 20 15_554 ?
 Ga1 Mg6 Pd1 54.96(5) 20 15_554 ?
 Mg21 Mg6 Pd1 145.82(12) 2_655 15_554 ?
 Ga1 Mg6 Pd1 145.82(12) 2_655 15_554 ?
 Mg21 Mg6 Pd1 145.82(12) 20 25 ?
 Ga1 Mg6 Pd1 145.82(12) 20 25 ?
 Mg21 Mg6 Pd1 54.96(5) 2_655 25 ?
 Ga1 Mg6 Pd1 54.96(5) 2_655 25 ?
 Pd1 Mg6 Pd1 153.4(2) 15_554 25 ?
 Mg21 Mg6 Pd2 94.45(13) 20 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Pd2 94.45(13) 20 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Pd2 48.71(7) 2_655 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Pd2 48.71(7) 2_655 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 97.75(5) 15_554 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 96.25(5) 25 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Pd2 48.71(7) 20 20 ?
 Ga1 Mg6 Pd2 48.71(7) 20 20 ?
 Mg21 Mg6 Pd2 94.45(13) 2_655 20 ?
 Ga1 Mg6 Pd2 94.45(13) 2_655 20 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 96.25(5) 15_554 20 ?
 Pd1 Mg6 Pd2 97.75(5) 25 20 ?
 Pd2 Mg6 Pd2 116.1(2) 2_655 20 ?
 Mg21 Mg6 Mg18 52.99(10) 20 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Mg18 52.99(10) 20 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Mg18 92.51(13) 2_655 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Mg18 92.51(13) 2_655 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Mg18 54.03(7) 15_554 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Mg18 145.19(12) 25 2_655 ?
 Pd2 Mg6 Mg18 49.01(9) 2_655 2_655 ?
 Pd2 Mg6 Mg18 96.80(13) 20 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Ga2 52.99(10) 20 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Ga2 52.99(10) 20 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Ga2 92.51(13) 2_655 2_655 ?
 Ga1 Mg6 Ga2 92.51(13) 2_655 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Ga2 54.03(7) 15_554 2_655 ?
 Pd1 Mg6 Ga2 145.19(12) 25 2_655 ?
 Pd2 Mg6 Ga2 49.01(9) 2_655 2_655 ?
 Pd2 Mg6 Ga2 96.80(13) 20 2_655 ?
 Mg18 Mg6 Ga2 0.0(3) 2_655 2_655 ?
 Mg21 Mg6 Mg18 92.51(13) 20 20 ?
 Ga1 Mg6 Mg18 92.51(13) 20 20 ?

Mg21 Mg6 Mg18 52.99(10) 2_655 20 ?
Ga1 Mg6 Mg18 52.99(10) 2_655 20 ?
Pd1 Mg6 Mg18 145.18(12) 15_554 20 ?
Pd1 Mg6 Mg18 54.04(7) 25 20 ?
Pd2 Mg6 Mg18 96.80(13) 2_655 20 ?
Pd2 Mg6 Mg18 49.01(9) 20 20 ?
Mg18 Mg6 Mg18 119.0(2) 2_655 20 ?
Ga2 Mg6 Mg18 119.0(2) 2_655 20 ?
Mg21 Mg6 Ga2 92.51(13) 20 20 ?
Ga1 Mg6 Ga2 92.51(13) 20 20 ?
Mg21 Mg6 Ga2 52.99(10) 2_655 20 ?
Ga1 Mg6 Ga2 52.99(10) 2_655 20 ?
Pd1 Mg6 Ga2 145.18(12) 15_554 20 ?
Pd1 Mg6 Ga2 54.04(7) 25 20 ?
Pd2 Mg6 Ga2 96.80(13) 2_655 20 ?
Pd2 Mg6 Ga2 49.01(9) 20 20 ?
Mg18 Mg6 Ga2 119.0(2) 2_655 20 ?
Ga2 Mg6 Ga2 119.0(2) 2_655 20 ?
Mg18 Mg6 Ga2 0.0(2) 20 20 ?
Mg18 Pd4 Ga2 0.0(2) 25 25 ?
Mg18 Pd4 Mg18 118.89(5) 25 27_445 ?
Ga2 Pd4 Mg18 118.89(5) 25 27_445 ?
Mg18 Pd4 Ga2 118.89(5) 25 27_445 ?
Ga2 Pd4 Ga2 118.89(5) 25 27_445 ?
Mg18 Pd4 Ga2 0.0(3) 27_445 27_445 ?
Mg18 Pd4 Mg18 118.89(5) 25 26_455 ?
Ga2 Pd4 Mg18 118.89(5) 25 26_455 ?
Mg18 Pd4 Mg18 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Ga2 Pd4 Mg18 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Mg18 Pd4 Ga2 118.89(5) 25 26_455 ?
Ga2 Pd4 Ga2 118.89(5) 25 26_455 ?
Mg18 Pd4 Ga2 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Ga2 Pd4 Ga2 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Mg18 Pd4 Ga2 0.0(3) 26_455 26_455 ?
Mg18 Pd4 Pd1 167.8(2) 25 31 ?
Ga2 Pd4 Pd1 167.8(2) 25 31 ?
Mg18 Pd4 Pd1 63.98(4) 27_445 31 ?
Ga2 Pd4 Pd1 63.98(4) 27_445 31 ?
Mg18 Pd4 Pd1 63.98(4) 26_455 31 ?
Ga2 Pd4 Pd1 63.98(4) 26_455 31 ?
Mg18 Pd4 Pd1 63.98(4) 25 33_545 ?
Ga2 Pd4 Pd1 63.98(4) 25 33_545 ?
Mg18 Pd4 Pd1 167.8(2) 27_445 33_545 ?
Ga2 Pd4 Pd1 167.8(2) 27_445 33_545 ?
Mg18 Pd4 Pd1 63.99(4) 26_455 33_545 ?
Ga2 Pd4 Pd1 63.99(4) 26_455 33_545 ?
Pd1 Pd4 Pd1 110.61(8) 31 33_545 ?
Mg18 Pd4 Pd1 63.98(4) 25 32_445 ?
Ga2 Pd4 Pd1 63.98(4) 25 32_445 ?
Mg18 Pd4 Pd1 63.99(4) 27_445 32_445 ?
Ga2 Pd4 Pd1 63.99(4) 27_445 32_445 ?
Mg18 Pd4 Pd1 167.8(2) 26_455 32_445 ?
Ga2 Pd4 Pd1 167.8(2) 26_455 32_445 ?
Pd1 Pd4 Pd1 110.61(8) 31 32_445 ?
Pd1 Pd4 Pd1 110.61(8) 33_545 32_445 ?
Mg18 Pd4 Ga1 62.23(11) 25 7_445 ?
Ga2 Pd4 Ga1 62.23(11) 25 7_445 ?

Mg18 Pd4 Ga1 111.43(12) 27_445 7_445 ?
Ga2 Pd4 Ga1 111.43(12) 27_445 7_445 ?
Mg18 Pd4 Ga1 111.43(12) 26_455 7_445 ?
Ga2 Pd4 Ga1 111.43(12) 26_455 7_445 ?
Pd1 Pd4 Ga1 105.56(13) 31_7_445 ?
Pd1 Pd4 Ga1 58.31(6) 33_545 7_445 ?
Pd1 Pd4 Ga1 58.31(6) 32_445 7_445 ?
Mg18 Pd4 Mg21 62.23(11) 25_7_445 ?
Ga2 Pd4 Mg21 62.23(11) 25_7_445 ?
Mg18 Pd4 Mg21 111.43(12) 27_445 7_445 ?
Ga2 Pd4 Mg21 111.43(12) 27_445 7_445 ?
Mg18 Pd4 Mg21 111.43(12) 26_455 7_445 ?
Ga2 Pd4 Mg21 111.43(12) 26_455 7_445 ?
Pd1 Pd4 Mg21 105.56(13) 31_7_445 ?
Pd1 Pd4 Mg21 58.31(6) 33_545 7_445 ?
Pd1 Pd4 Mg21 58.31(6) 32_445 7_445 ?
Ga1 Pd4 Mg21 0.00(5) 7_445 7_445 ?
Mg18 Pd4 Mg21 111.43(12) 25_8 ?
Ga2 Pd4 Mg21 111.43(12) 25_8 ?
Mg18 Pd4 Mg21 111.43(12) 27_445 8 ?
Ga2 Pd4 Mg21 111.43(12) 27_445 8 ?
Mg18 Pd4 Mg21 62.23(11) 26_455 8 ?
Ga2 Pd4 Mg21 62.23(11) 26_455 8 ?
Pd1 Pd4 Mg21 58.31(6) 31_8 ?
Pd1 Pd4 Mg21 58.31(6) 33_545 8 ?
Pd1 Pd4 Mg21 105.57(13) 32_445 8 ?
Ga1 Pd4 Mg21 57.72(11) 7_445 8 ?
Mg21 Pd4 Mg21 57.72(11) 7_445 8 ?
Mg18 Mg20 Ga2 0.0(2) 25_25 ?
Mg18 Mg20 Mg18 118.89(5) 25_27_445 ?
Ga2 Mg20 Mg18 118.89(5) 25_27_445 ?
Mg18 Mg20 Ga2 118.89(5) 25_27_445 ?
Ga2 Mg20 Ga2 118.89(5) 25_27_445 ?
Mg18 Mg20 Ga2 0.0(3) 27_445 27_445 ?
Mg18 Mg20 Mg18 118.89(5) 25_26_455 ?
Ga2 Mg20 Mg18 118.89(5) 25_26_455 ?
Mg18 Mg20 Mg18 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Ga2 Mg20 Mg18 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Mg18 Mg20 Ga2 118.89(5) 25_26_455 ?
Ga2 Mg20 Ga2 118.89(5) 25_26_455 ?
Mg18 Mg20 Ga2 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Ga2 Mg20 Ga2 118.88(5) 27_445 26_455 ?
Mg18 Mg20 Ga2 0.0(3) 26_455 26_455 ?
Mg18 Mg20 Pd1 167.8(2) 25_31 ?
Ga2 Mg20 Pd1 167.8(2) 25_31 ?
Mg18 Mg20 Pd1 63.98(4) 27_445 31 ?
Ga2 Mg20 Pd1 63.98(4) 27_445 31 ?
Mg18 Mg20 Pd1 63.98(4) 26_455 31 ?
Ga2 Mg20 Pd1 63.98(4) 26_455 31 ?
Mg18 Mg20 Pd1 63.98(4) 25_33_545 ?
Ga2 Mg20 Pd1 63.98(4) 25_33_545 ?
Mg18 Mg20 Pd1 167.8(2) 27_445 33_545 ?
Ga2 Mg20 Pd1 167.8(2) 27_445 33_545 ?
Mg18 Mg20 Pd1 63.99(4) 26_455 33_545 ?
Ga2 Mg20 Pd1 63.99(4) 26_455 33_545 ?
Pd1 Mg20 Pd1 110.61(8) 31_33_545 ?
Mg18 Mg20 Pd1 63.98(4) 25_32_445 ?

Ga2 Mg20 Pd1 63.98(4) 25 32_445 ?
 Mg18 Mg20 Pd1 63.99(4) 27_445 32_445 ?
 Ga2 Mg20 Pd1 63.99(4) 27_445 32_445 ?
 Mg18 Mg20 Pd1 167.8(2) 26_455 32_445 ?
 Ga2 Mg20 Pd1 167.8(2) 26_455 32_445 ?
 Pd1 Mg20 Pd1 110.61(8) 31 32_445 ?
 Pd1 Mg20 Pd1 110.61(8) 33_545 32_445 ?
 Mg18 Mg20 Ga1 62.23(11) 25 7_445 ?
 Ga2 Mg20 Ga1 62.23(11) 25 7_445 ?
 Mg18 Mg20 Ga1 111.43(12) 27_445 7_445 ?
 Ga2 Mg20 Ga1 111.43(12) 27_445 7_445 ?
 Mg18 Mg20 Ga1 111.43(12) 26_455 7_445 ?
 Ga2 Mg20 Ga1 111.43(12) 26_455 7_445 ?
 Pd1 Mg20 Ga1 105.56(13) 31 7_445 ?
 Pd1 Mg20 Ga1 58.31(6) 33_545 7_445 ?
 Pd1 Mg20 Ga1 58.31(6) 32_445 7_445 ?
 Mg18 Mg20 Mg21 62.23(11) 25 7_445 ?
 Ga2 Mg20 Mg21 62.23(11) 25 7_445 ?
 Mg18 Mg20 Mg21 111.43(12) 27_445 7_445 ?
 Ga2 Mg20 Mg21 111.43(12) 27_445 7_445 ?
 Mg18 Mg20 Mg21 111.43(12) 26_455 7_445 ?
 Ga2 Mg20 Mg21 111.43(12) 26_455 7_445 ?
 Pd1 Mg20 Mg21 105.56(13) 31 7_445 ?
 Pd1 Mg20 Mg21 58.31(6) 33_545 7_445 ?
 Pd1 Mg20 Mg21 58.31(6) 32_445 7_445 ?
 Ga1 Mg20 Mg21 0.00(5) 7_445 7_445 ?
 Mg18 Mg20 Mg21 111.43(12) 25 8 ?
 Ga2 Mg20 Mg21 111.43(12) 25 8 ?
 Mg18 Mg20 Mg21 111.43(12) 27_445 8 ?
 Ga2 Mg20 Mg21 111.43(12) 27_445 8 ?
 Mg18 Mg20 Mg21 62.23(11) 26_455 8 ?
 Ga2 Mg20 Mg21 62.23(11) 26_455 8 ?
 Pd1 Mg20 Mg21 58.31(6) 31 8 ?
 Pd1 Mg20 Mg21 58.31(6) 33_545 8 ?
 Pd1 Mg20 Mg21 105.57(13) 32_445 8 ?
 Ga1 Mg20 Mg21 57.72(11) 7_445 8 ?
 Mg21 Mg20 Mg21 57.72(11) 7_445 8 ?
 Pd2 Mg7 Pd2 116.49(11) 9_455 8 ?
 Pd2 Mg7 Pd2 116.49(11) 9_455 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Pd2 116.49(11) 8 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Ga1 95.1(2) 9_455 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Ga1 95.1(2) 8 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Ga1 48.20(10) 7_445 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg21 95.1(2) 9_455 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg21 95.1(2) 8 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg21 48.20(10) 7_445 7_445 ?
 Ga1 Mg7 Mg21 0.00(5) 7_445 7_445 ?
 Pd2 Mg7 Mg21 48.20(10) 9_455 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Mg21 95.1(2) 8 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Mg21 95.1(2) 7_445 9_455 ?
 Ga1 Mg7 Mg21 52.8(2) 7_445 9_455 ?
 Mg21 Mg7 Mg21 52.8(2) 7_445 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Ga1 48.20(10) 9_455 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Ga1 95.1(2) 8 9_455 ?
 Pd2 Mg7 Ga1 95.1(2) 7_445 9_455 ?
 Ga1 Mg7 Ga1 52.8(2) 7_445 9_455 ?
 Mg21 Mg7 Ga1 52.8(2) 7_445 9_455 ?

Mg21 Mg7 Ga1 0.0(2) 9_455 9_455 ?
Pd2 Mg7 Ga1 95.1(2) 9_455 8 ?
Pd2 Mg7 Ga1 48.20(10) 8 8 ?
Pd2 Mg7 Ga1 95.1(2) 7_445 8 ?
Ga1 Mg7 Ga1 52.8(2) 7_445 8 ?
Mg21 Mg7 Ga1 52.8(2) 7_445 8 ?
Mg21 Mg7 Ga1 52.8(2) 9_455 8 ?
Ga1 Mg7 Ga1 52.8(2) 9_455 8 ?
Pd2 Mg7 Mg21 95.1(2) 9_455 8 ?
Pd2 Mg7 Mg21 48.20(10) 8 8 ?
Pd2 Mg7 Mg21 95.1(2) 7_445 8 ?
Ga1 Mg7 Mg21 52.8(2) 7_445 8 ?
Mg21 Mg7 Mg21 52.8(2) 7_445 8 ?
Mg21 Mg7 Mg21 52.8(2) 9_455 8 ?
Ga1 Mg7 Mg21 52.8(2) 9_455 8 ?
Ga1 Mg7 Mg21 0.0(2) 8 8 ?
Pd2 Mg7 Mg2 58.26(5) 9_455 31 ?
Pd2 Mg7 Mg2 58.26(5) 8 31 ?
Pd2 Mg7 Mg2 149.3(3) 7_445 31 ?
Ga1 Mg7 Mg2 101.1(3) 7_445 31 ?
Mg21 Mg7 Mg2 101.1(3) 7_445 31 ?
Mg21 Mg7 Mg2 57.89(14) 9_455 31 ?
Ga1 Mg7 Mg2 57.89(14) 9_455 31 ?
Ga1 Mg7 Mg2 57.89(14) 8 31 ?
Mg21 Mg7 Mg2 57.89(14) 8 31 ?
Pd2 Mg7 Mg2 58.26(5) 9_455 32_445 ?
Pd2 Mg7 Mg2 149.3(3) 8 32_445 ?
Pd2 Mg7 Mg2 58.25(5) 7_445 32_445 ?
Ga1 Mg7 Mg2 57.89(14) 7_445 32_445 ?
Mg21 Mg7 Mg2 57.89(14) 7_445 32_445 ?
Mg21 Mg7 Mg2 57.89(14) 9_455 32_445 ?
Ga1 Mg7 Mg2 57.89(14) 9_455 32_445 ?
Ga1 Mg7 Mg2 101.1(3) 8 32_445 ?
Mg21 Mg7 Mg2 101.1(3) 8 32_445 ?
Mg2 Mg7 Mg2 109.2(2) 31 32_445 ?
Pd2 Mg7 Mg2 149.3(3) 9_455 33_545 ?
Pd2 Mg7 Mg2 58.26(5) 8 33_545 ?
Pd2 Mg7 Mg2 58.25(5) 7_445 33_545 ?
Ga1 Mg7 Mg2 57.89(14) 7_445 33_545 ?
Mg21 Mg7 Mg2 57.89(14) 7_445 33_545 ?
Mg21 Mg7 Mg2 101.1(3) 9_455 33_545 ?
Ga1 Mg7 Mg2 101.1(3) 9_455 33_545 ?
Ga1 Mg7 Mg2 57.89(14) 8 33_545 ?
Mg21 Mg7 Mg2 57.89(14) 8 33_545 ?
Mg2 Mg7 Mg2 109.2(2) 31 33_545 ?
Mg2 Mg7 Mg2 109.2(2) 32_445 33_545 ?
Ga15 Pd5 Ga15 180.0 26_455 14_544 ?
Ga15 Pd5 Mg4 0.0(2) 26_455 26_455 ?
Ga15 Pd5 Mg4 180.0 14_544 26_455 ?
Ga15 Pd5 Mg4 180.0 26_455 14_544 ?
Ga15 Pd5 Mg4 0.0(2) 14_544 14_544 ?
Mg4 Pd5 Mg4 180.0 26_455 14_544 ?
Ga15 Pd5 Ga15 64.84(11) 26_455 25 ?
Ga15 Pd5 Ga15 115.16(11) 14_544 25 ?
Mg4 Pd5 Ga15 64.84(11) 26_455 25 ?
Mg4 Pd5 Ga15 115.16(11) 14_544 25 ?
Ga15 Pd5 Ga15 115.16(11) 26_455 13_444 ?

Ga15 Pd5 Ga15 64.84(11) 14_544 13_444 ?
Mg4 Pd5 Ga15 115.16(11) 26_455 13_444 ?
Mg4 Pd5 Ga15 64.84(11) 14_544 13_444 ?
Ga15 Pd5 Ga15 180.0 25 13_444 ?
Ga15 Pd5 Mg4 64.84(11) 26_455 25 ?
Ga15 Pd5 Mg4 115.16(11) 14_544 25 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.84(11) 26_455 25 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.16(11) 14_544 25 ?
Ga15 Pd5 Mg4 0.00(8) 25 25 ?
Ga15 Pd5 Mg4 180.0 13_444 25 ?
Ga15 Pd5 Mg4 115.16(11) 26_455 13_444 ?
Ga15 Pd5 Mg4 64.84(11) 14_544 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.16(11) 26_455 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.84(11) 14_544 13_444 ?
Ga15 Pd5 Mg4 180.0 25 13_444 ?
Ga15 Pd5 Mg4 0.00(8) 13_444 13_444 ?
Mg4 Pd5 Mg4 180.0 25 13_444 ?
Ga15 Pd5 Ga15 64.84(11) 26_455 27_445 ?
Ga15 Pd5 Ga15 115.16(11) 14_544 27_445 ?
Mg4 Pd5 Ga15 64.84(11) 26_455 27_445 ?
Mg4 Pd5 Ga15 115.16(11) 14_544 27_445 ?
Ga15 Pd5 Ga15 64.84(11) 25_27_445 ?
Ga15 Pd5 Ga15 115.16(11) 13_444 27_445 ?
Mg4 Pd5 Ga15 64.84(11) 25_27_445 ?
Mg4 Pd5 Ga15 115.16(11) 13_444 27_445 ?
Ga15 Pd5 Ga15 115.16(11) 26_455 15_554 ?
Ga15 Pd5 Ga15 64.84(11) 14_544 15_554 ?
Mg4 Pd5 Ga15 115.16(11) 26_455 15_554 ?
Mg4 Pd5 Ga15 64.84(11) 14_544 15_554 ?
Ga15 Pd5 Ga15 115.16(11) 25 15_554 ?
Ga15 Pd5 Ga15 64.84(11) 13_444 15_554 ?
Mg4 Pd5 Ga15 115.16(11) 25 15_554 ?
Mg4 Pd5 Ga15 64.84(11) 13_444 15_554 ?
Ga15 Pd5 Ga15 180.0 27_445 15_554 ?
Ga15 Pd5 Mg4 64.84(11) 26_455 27_445 ?
Ga15 Pd5 Mg4 115.16(11) 14_544 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.84(11) 26_455 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.16(11) 14_544 27_445 ?
Ga15 Pd5 Mg4 64.84(11) 25_27_445 ?
Ga15 Pd5 Mg4 115.16(11) 13_444 27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.84(11) 25_27_445 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.16(11) 13_444 27_445 ?
Ga15 Pd5 Mg4 0.0(2) 27_445 27_445 ?
Ga15 Pd5 Mg4 180.0 15_554 27_445 ?
Ga15 Pd5 Mg4 115.16(11) 26_455 15_554 ?
Ga15 Pd5 Mg4 64.84(11) 14_544 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.16(11) 26_455 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.84(11) 14_544 15_554 ?
Ga15 Pd5 Mg4 115.16(11) 25 15_554 ?
Ga15 Pd5 Mg4 64.84(11) 13_444 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 115.16(11) 25 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 64.84(11) 13_444 15_554 ?
Ga15 Pd5 Mg4 180.0 27_445 15_554 ?
Ga15 Pd5 Mg4 0.0(2) 15_554 15_554 ?
Mg4 Pd5 Mg4 180.0 27_445 15_554 ?

_refine_diff_density_max 2.966

ShelX cif Dateien

_refine_diff_density_min -2.855
_refine_diff_density_rms 0.589

data_434

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\"apers
FB Chemie Uni Dortmund
Otto-Hahn-Str. 6
44221 Dortmund
Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaepers@web.de'

#=====

2. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\"at Dortmund
Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle
vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\"apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\"at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

#=====

3. TEXT

_publ_section_abstract

;

tetragonale Verbindung Al17Mg4Pd8 (Al58,6Mg13,8Pd27,6), Anhang A
Datensatz Nummer: 434

;

#=====

4. RESULTS

_chemical_name_systematic

;

?

;

```

_chemical_name_common      ?
_chemical_formula_moiety   ?
_chemical_formula_structural ?
_chemical_formula_analytical ?
_chemical_formula_sum      'Al68 Mg16 Pd32'
_chemical_formula_weight   5628.40
_chemical_melting_point    ?
_chemical_compound_source  ?

```

```

loop_
  _atom_type_symbol
  _atom_type_description
  _atom_type_scatter_dispersion_real
  _atom_type_scatter_dispersion_imag
  _atom_type_scatter_source
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

```

```

_symmetry_cell_setting      'tetragonal'
_symmetry_space_group_name_H-M 'I41/a'

```

```

loop_
  _symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x+1/2, -y, z+1/2'
'-y+3/4, x+1/4, z+1/4'
'y+3/4, -x+3/4, z+3/4'
'x+1/2, y+1/2, z+1/2'
'-x+1, -y+1/2, z+1'
'-y+5/4, x+3/4, z+3/4'
'y+5/4, -x+5/4, z+5/4'
'-x, -y, -z'
'x-1/2, y, -z-1/2'
'y-3/4, -x-1/4, -z-1/4'
'-y-3/4, x-3/4, -z-3/4'
'-x+1/2, -y+1/2, -z+1/2'
'x, y+1/2, -z'
'y-1/4, -x+1/4, -z+1/4'
'-y-1/4, x-1/4, -z-1/4'

```

```

_cell_length_a      13.177(2)
_cell_length_b      13.177(2)
_cell_length_c      10.656(2)
_cell_angle_alpha    90.00
_cell_angle_beta     90.00
_cell_angle_gamma    90.00
_cell_volume         1850.2(5)
_cell_formula_units_Z 1
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used 131
_cell_measurement_theta_min 8.8
_cell_measurement_theta_max 60.99

```

```

_exptl_crystal_description    'irregular'
_exptl_crystal_colour        'silver'
_exptl_crystal_size_max      0.2
_exptl_crystal_size_mid      0.2
_exptl_crystal_size_min      0.2
_exptl_crystal_density_meas   'none'
_exptl_crystal_density_diffm  5.051
_exptl_crystal_density_method 'none'
_exptl_crystal_F_000         2548
_exptl_absorpt_coefficient_mu 8.525
_exptl_absorpt_correction_type 'none'
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffm_ambient_temperature    293(2)
_diffm_radiation_wavelength    0.71073
_diffm_radiation_type          MoKa
_diffm_radiation_source        'fine-focus sealed tube'
_diffm_radiation_monochromator  graphite
_diffm_measurement_device      'Kappa-CCD'
_diffm_measurement_method      'phi-scan'
_diffm_standards_number        ?
_diffm_standards_interval_count ?
_diffm_standards_interval_time ?
_diffm_standards_decay_%       ?
_diffm_reflns_number           9540
_diffm_reflns_av_R_equivalents 0.0645
_diffm_reflns_av_sigma/netI    0.0369
_diffm_reflns_limit_h_min      -18
_diffm_reflns_limit_h_max      18
_diffm_reflns_limit_k_min      -18
_diffm_reflns_limit_k_max      18
_diffm_reflns_limit_l_min      -14
_diffm_reflns_limit_l_max      14
_diffm_reflns_theta_min        4.37
_diffm_reflns_theta_max        30.49
_reflns_number_total           1410
_reflns_number_observed        1228
_reflns_observed_criterion     >2sigma(I)

_computing_data_collection     'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement     'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction      'NRCVAX Software'
_computing_structure_solution  'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics  'Schakal 97'
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors

```

wR and all goodnesses of fit S are based on F^2 , conventional R-factors R are based on F, with F set to zero for negative F^2 . The observed criterion of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating `_R_factor_obs` etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-factors based on ALL data will be even larger.

;

```

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s^2*(Fo^2)+( 0.0381P)^2+0.0000P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary direct
_atom_sites_solution_secondary difmap
_atom_sites_solution_hydrogens geom
_refine_ls_hydrogen_treatment none
_refine_ls_extinction_method none
_refine_ls_extinction_coef none
_refine_ls_number_reflns 1410
_refine_ls_number_parameters 66
_refine_ls_number_restraints 0
_refine_ls_R_factor_all 0.0342
_refine_ls_R_factor_obs 0.0278
_refine_ls_wR_factor_all 0.0640
_refine_ls_wR_factor_obs 0.0626
_refine_ls_goodness_of_fit_all 1.056
_refine_ls_goodness_of_fit_obs 1.110
_refine_ls_restrained_S_all 1.056
_refine_ls_restrained_S_obs 1.110
_refine_ls_shift/esd_max 0.001
_refine_ls_shift/esd_mean 0.000

```

loop_

```

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Al1 Al 0.01109(9) 0.03103(8) 0.14075(10) 0.0117(2) Uani 1 d . .
Al2 Al 0.08614(9) 0.00168(8) 0.42699(10) 0.0121(2) Uani 1 d . .
Al3 Al 0.08967(8) 0.19389(8) 0.52407(10) 0.0120(2) Uani 1 d . .
Pd1 Pd 0.09835(2) 0.54270(2) 0.32588(2) 0.01094(10) Uani 1 d . .
Pd2 Pd 0.13070(2) 0.14968(2) 0.27764(2) 0.01223(10) Uani 1 d . .
Al4 Al 0.22246(8) 0.03688(9) 0.09988(10) 0.0119(2) Uani 1 d . .
Mg Mg 0.42049(10) 0.15466(10) 0.15274(12) 0.0138(3) Uani 1 d . .
Al5 Al 0.0000 0.2500 0.1250 0.0123(4) Uani 1 d S .

```

loop_

```

_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22

```

```

_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Al1 0.0116(5) 0.0113(5) 0.0122(5) 0.0001(4) 0.0010(4) 0.0001(4)
Al2 0.0129(5) 0.0108(5) 0.0126(5) -0.0002(4) 0.0019(4) -0.0003(4)
Al3 0.0130(5) 0.0113(5) 0.0116(5) 0.0002(4) -0.0013(4) 0.0003(4)
Pd1 0.01008(14) 0.01246(15) 0.0103(2) -0.00200(10) -0.00029(10) 0.00041(10)
Pd2 0.01299(15) 0.01252(15) 0.0112(2) 0.00030(10) -0.00047(10) -0.00019(10)
Al4 0.0131(5) 0.0123(5) 0.0103(5) 0.0008(4) -0.0002(4) -0.0004(4)
Mg 0.0178(6) 0.0103(6) 0.0135(6) 0.0004(5) -0.0023(5) 0.0010(5)
Al5 0.0134(6) 0.0134(6) 0.0100(10) 0.000 0.000 0.000

```

```
_geom_special_details
```

```
;
```

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

```
;
```

```
loop_
```

```

_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Al1 Pd2 2.5938(12) 15 ?
Al1 Pd2 2.5998(12) 7_444 ?
Al1 Pd1 2.6297(12) 6_454 ?
Al1 Pd2 2.6564(11) . ?
Al1 Al4 2.820(2) . ?
Al1 Al5 2.8939(11) . ?
Al1 Al3 2.954(2) 7_444 ?
Al1 Al4 2.956(2) 15 ?
Al1 Mg 2.987(2) 10_556 ?
Al1 Mg 3.038(2) 15 ?
Al1 Mg 3.323(2) 7_444 ?
Al2 Pd1 2.5752(12) 16_656 ?
Al2 Pd2 2.5848(12) . ?
Al2 Pd1 2.6932(12) 14_546 ?
Al2 Al3 2.714(2) 7_444 ?
Al2 Pd1 2.7226(12) 6_454 ?
Al2 Al3 2.736(2) . ?
Al2 Al2 2.753(2) 9_556 ?
Al2 Al4 2.791(2) 8_444 ?
Al2 Mg 3.090(2) 10_556 ?
Al2 Mg 3.168(2) 2 ?
Al3 Pd1 2.5569(12) 14_546 ?
Al3 Pd1 2.6172(12) 3 ?
Al3 Al2 2.714(2) 8_444 ?
Al3 Pd2 2.7436(12) . ?
Al3 Mg 2.748(2) 13 ?
Al3 Al3 2.788(2) 6_454 ?
Al3 Al3 2.918(2) 15_556 ?

```

Al3 Al3 2.918(2) 12_667 ?
 Al3 Al1 2.954(2) 8_444 ?
 Al3 Mg 2.964(2) 10_556 ?
 Pd1 Al3 2.5571(12) 14_556 ?
 Pd1 Al2 2.5752(12) 11_666 ?
 Pd1 Al4 2.5790(12) 12_666 ?
 Pd1 Al3 2.6171(12) 4_454 ?
 Pd1 Mg 2.6225(14) 13 ?
 Pd1 Al1 2.6297(12) 6_454 ?
 Pd1 Al2 2.6932(12) 14_556 ?
 Pd1 Al4 2.7020(12) 13 ?
 Pd1 Al2 2.7226(12) 6_454 ?
 Pd1 Mg 2.9618(13) 12_666 ?
 Pd2 Al1 2.5939(12) 12_666 ?
 Pd2 Al1 2.5998(12) 8_444 ?
 Pd2 Al4 2.6944(12) . ?
 Pd2 Al5 2.7127(4) . ?
 Pd2 Al4 2.7237(12) 8_444 ?
 Pd2 Mg 2.7662(14) 13 ?
 Pd2 Mg 2.8683(14) 10_556 ?
 Al4 Pd1 2.5790(12) 15 ?
 Al4 Pd1 2.7020(12) 13 ?
 Al4 Pd2 2.7237(12) 7_444 ?
 Al4 Al2 2.791(2) 7_444 ?
 Al4 Al4 2.7987(7) 8_444 ?
 Al4 Al4 2.7987(7) 7_444 ?
 Al4 Al1 2.956(2) 12_666 ?
 Al4 Mg 3.088(2) . ?
 Al4 Mg 3.212(2) 7_444 ?
 Mg Pd1 2.6225(14) 13 ?
 Mg Al3 2.748(2) 13 ?
 Mg Pd2 2.7662(14) 13 ?
 Mg Pd2 2.8682(14) 10_656 ?
 Mg Al5 2.8783(13) 13 ?
 Mg Pd1 2.9618(13) 15 ?
 Mg Al3 2.964(2) 10_656 ?
 Mg Al1 2.987(2) 10_656 ?
 Mg Al1 3.039(2) 12_666 ?
 Mg Al2 3.090(2) 10_656 ?
 Mg Al2 3.168(2) 2_554 ?
 Al5 Pd2 2.7127(4) 15 ?
 Al5 Pd2 2.7127(4) 12_666 ?
 Al5 Pd2 2.7128(4) 6_454 ?
 Al5 Mg 2.8783(13) 10_556 ?
 Al5 Mg 2.8783(13) 13 ?
 Al5 Mg 2.8784(13) 7_444 ?
 Al5 Mg 2.8784(13) 4_454 ?
 Al5 Al1 2.8940(11) 15 ?
 Al5 Al1 2.8940(11) 12_666 ?
 Al5 Al1 2.8940(11) 6_454 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1

_geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
 Pd2 Al1 Pd2 106.08(4) 15 7_444 ?
 Pd2 Al1 Pd1 111.98(4) 15 6_454 ?
 Pd2 Al1 Pd1 108.32(4) 7_444 6_454 ?
 Pd2 Al1 Pd2 116.85(4) 15 . ?
 Pd2 Al1 Pd2 115.77(4) 7_444 . ?
 Pd1 Al1 Pd2 97.52(4) 6_454 . ?
 Pd2 Al1 Al4 116.09(5) 15 . ?
 Pd2 Al1 Al4 60.17(3) 7_444 . ?
 Pd1 Al1 Al4 131.88(5) 6_454 . ?
 Pd2 Al1 Al4 58.85(3) . . ?
 Pd2 Al1 Al5 58.95(2) 15 . ?
 Pd2 Al1 Al5 139.08(4) 7_444 . ?
 Pd1 Al1 Al5 112.59(4) 6_454 . ?
 Pd2 Al1 Al5 58.33(2) . . ?
 Al4 Al1 Al5 90.78(4) . . ?
 Pd2 Al1 Al3 146.00(5) 15 7_444 ?
 Pd2 Al1 Al3 58.79(3) 7_444 7_444 ?
 Pd1 Al1 Al3 55.53(3) 6_454 7_444 ?
 Pd2 Al1 Al3 96.84(4) . 7_444 ?
 Al4 Al1 Al3 84.22(4) . 7_444 ?
 Al5 Al1 Al3 152.75(5) . 7_444 ?
 Pd2 Al1 Al4 57.64(3) 15 15 ?
 Pd2 Al1 Al4 117.11(4) 7_444 15 ?
 Pd1 Al1 Al4 54.61(3) 6_454 15 ?
 Pd2 Al1 Al4 125.70(5) . 15 ?
 Al4 Al1 Al4 173.02(4) . 15 ?
 Al5 Al1 Al4 88.11(4) . 15 ?
 Al3 Al1 Al4 99.85(4) 7_444 15 ?
 Pd2 Al1 Mg 92.22(4) 15 10_556 ?
 Pd2 Al1 Mg 159.70(5) 7_444 10_556 ?
 Pd1 Al1 Mg 55.23(3) 6_454 10_556 ?
 Pd2 Al1 Mg 60.76(4) . 10_556 ?
 Al4 Al1 Mg 119.58(5) . 10_556 ?
 Al5 Al1 Mg 58.58(3) . 10_556 ?
 Al3 Al1 Mg 101.04(5) 7_444 10_556 ?
 Al4 Al1 Mg 65.43(4) 15 10_556 ?
 Pd2 Al1 Mg 91.44(4) 15 15 ?
 Pd2 Al1 Mg 58.14(3) 7_444 15 ?
 Pd1 Al1 Mg 62.51(3) 6_454 15 ?
 Pd2 Al1 Mg 150.69(5) . 15 ?
 Al4 Al1 Mg 117.14(5) . 15 ?
 Al5 Al1 Mg 147.05(5) . 15 ?
 Al3 Al1 Mg 54.56(4) 7_444 15 ?
 Al4 Al1 Mg 61.99(4) 15 15 ?
 Mg Al1 Mg 113.87(6) 10_556 15 ?
 Pd2 Al1 Mg 54.06(3) 15 7_444 ?
 Pd2 Al1 Mg 85.21(4) 7_444 7_444 ?
 Pd1 Al1 Mg 163.76(5) 6_454 7_444 ?
 Pd2 Al1 Mg 84.00(4) . 7_444 ?
 Al4 Al1 Mg 62.42(4) . 7_444 ?
 Al5 Al1 Mg 54.63(3) . 7_444 ?
 Al3 Al1 Mg 140.53(5) 7_444 7_444 ?
 Al4 Al1 Mg 111.60(4) 15 7_444 ?
 Mg Al1 Mg 113.21(5) 10_556 7_444 ?
 Mg Al1 Mg 121.40(4) 15 7_444 ?

Pd1 Al2 Pd2 116.35(4) 16_656 . ?
 Pd1 Al2 Pd1 97.59(4) 16_656 14_546 ?
 Pd2 Al2 Pd1 115.91(4) . 14_546 ?
 Pd1 Al2 Al3 57.74(3) 16_656 7_444 ?
 Pd2 Al2 Al3 104.89(5) . 7_444 ?
 Pd1 Al2 Al3 138.90(5) 14_546 7_444 ?
 Pd1 Al2 Pd1 112.35(4) 16_656 6_454 ?
 Pd2 Al2 Pd1 96.96(4) . 6_454 ?
 Pd1 Al2 Pd1 118.91(4) 14_546 6_454 ?
 Al3 Al2 Pd1 57.55(3) 7_444 6_454 ?
 Pd1 Al2 Al3 136.06(5) 16_656 . ?
 Pd2 Al2 Al3 62.00(4) . . ?
 Pd1 Al2 Al3 56.18(3) 14_546 . ?
 Al3 Al2 Al3 163.20(6) 7_444 . ?
 Pd1 Al2 Al3 111.32(5) 6_454 . ?
 Pd1 Al2 Al2 120.36(6) 16_656 9_556 ?
 Pd2 Al2 Al2 123.20(7) . 9_556 ?
 Pd1 Al2 Al2 59.98(4) 14_546 9_556 ?
 Al3 Al2 Al2 101.92(6) 7_444 9_556 ?
 Pd1 Al2 Al2 58.93(4) 6_454 9_556 ?
 Al3 Al2 Al2 79.35(5) . 9_556 ?
 Pd1 Al2 Al4 60.31(3) 16_656 8_444 ?
 Pd2 Al2 Al4 60.74(3) . 8_444 ?
 Pd1 Al2 Al4 101.93(4) 14_546 8_444 ?
 Al3 Al2 Al4 93.29(5) 7_444 8_444 ?
 Pd1 Al2 Al4 139.12(5) 6_454 8_444 ?
 Al3 Al2 Al4 88.98(5) . 8_444 ?
 Al2 Al2 Al4 161.82(7) 9_556 8_444 ?
 Pd1 Al2 Mg 161.16(5) 16_656 10_556 ?
 Pd2 Al2 Mg 59.93(3) . 10_556 ?
 Pd1 Al2 Mg 100.37(4) 14_546 10_556 ?
 Al3 Al2 Mg 104.18(5) 7_444 10_556 ?
 Pd1 Al2 Mg 53.18(3) 6_454 10_556 ?
 Al3 Al2 Mg 60.80(4) . 10_556 ?
 Al2 Al2 Mg 65.38(5) 9_556 10_556 ?
 Al4 Al2 Mg 120.59(5) 8_444 10_556 ?
 Pd1 Al2 Mg 61.05(3) 16_656 2 ?
 Pd2 Al2 Mg 164.65(5) . 2 ?
 Pd1 Al2 Mg 52.39(3) 14_546 2 ?
 Al3 Al2 Mg 86.58(5) 7_444 2 ?
 Pd1 Al2 Mg 97.83(4) 6_454 2 ?
 Al3 Al2 Mg 108.38(5) . 2 ?
 Al2 Al2 Mg 62.46(5) 9_556 2 ?
 Al4 Al2 Mg 109.21(5) 8_444 2 ?
 Mg Al2 Mg 127.84(4) 10_556 2 ?
 Pd1 Al3 Pd1 116.59(4) 14_546 3 ?
 Pd1 Al3 Al2 58.39(4) 14_546 8_444 ?
 Pd1 Al3 Al2 61.38(4) 3_8_444 ?
 Pd1 Al3 Al2 61.06(4) 14_546 . ?
 Pd1 Al3 Al2 144.07(5) 3 . ?
 Al2 Al3 Al2 96.05(5) 8_444 . ?
 Pd1 Al3 Pd2 115.11(4) 14_546 . ?
 Pd1 Al3 Pd2 104.50(4) 3 . ?
 Al2 Al3 Pd2 112.87(5) 8_444 . ?
 Al2 Al3 Pd2 56.29(3) . . ?
 Pd1 Al3 Mg 175.39(6) 14_546 13 ?
 Pd1 Al3 Mg 66.96(4) 3 13 ?

Al2 Al3 Mg 123.76(6) 8_444 13 ?
 Al2 Al3 Mg 114.34(6) . 13 ?
 Pd2 Al3 Mg 60.49(4) . 13 ?
 Pd1 Al3 Al3 116.82(5) 14_546 6_454 ?
 Pd1 Al3 Al3 95.13(5) 3 6_454 ?
 Al2 Al3 Al3 138.07(4) 8_444 6_454 ?
 Al2 Al3 Al3 118.46(6) . 6_454 ?
 Pd2 Al3 Al3 106.24(3) . 6_454 ?
 Mg Al3 Al3 64.75(4) 13 6_454 ?
 Pd1 Al3 Al3 56.66(4) 14_546 15_556 ?
 Pd1 Al3 Al3 110.63(5) 3 15_556 ?
 Al2 Al3 Al3 93.05(6) 8_444 15_556 ?
 Al2 Al3 Al3 97.31(5) . 15_556 ?
 Pd2 Al3 Al3 143.43(5) . 15_556 ?
 Mg Al3 Al3 125.70(5) 13 15_556 ?
 Al3 Al3 Al3 61.46(2) 6_454 15_556 ?
 Pd1 Al3 Al3 93.37(5) 14_546 12_667 ?
 Pd1 Al3 Al3 54.71(4) 3 12_667 ?
 Al2 Al3 Al3 76.86(5) 8_444 12_667 ?
 Al2 Al3 Al3 152.32(6) . 12_667 ?
 Pd2 Al3 Al3 151.08(6) . 12_667 ?
 Mg Al3 Al3 91.14(5) 13 12_667 ?
 Al3 Al3 Al3 61.46(2) 6_454 12_667 ?
 Al3 Al3 Al3 57.08(5) 15_556 12_667 ?
 Pd1 Al3 Al1 114.77(5) 14_546 8_444 ?
 Pd1 Al3 Al1 55.93(3) 3 8_444 ?
 Al2 Al3 Al1 69.31(4) 8_444 8_444 ?
 Al2 Al3 Al1 91.06(4) . 8_444 ?
 Pd2 Al3 Al1 54.14(3) . 8_444 ?
 Mg Al3 Al1 64.28(4) 13 8_444 ?
 Al3 Al3 Al1 128.10(5) 6_454 8_444 ?
 Al3 Al3 Al1 161.25(6) 15_556 8_444 ?
 Al3 Al3 Al1 110.59(5) 12_667 8_444 ?
 Pd1 Al3 Mg 107.17(5) 14_546 10_556 ?
 Pd1 Al3 Mg 135.64(5) 3 10_556 ?
 Al2 Al3 Mg 161.36(6) 8_444 10_556 ?
 Al2 Al3 Mg 65.51(4) . 10_556 ?
 Pd2 Al3 Mg 60.18(3) . 10_556 ?
 Mg Al3 Mg 69.76(6) 13 10_556 ?
 Al3 Al3 Mg 56.97(4) 6_454 10_556 ?
 Al3 Al3 Mg 86.96(5) 15_556 10_556 ?
 Al3 Al3 Mg 117.99(4) 12_667 10_556 ?
 Al1 Al3 Mg 111.79(5) 8_444 10_556 ?
 Al3 Pd1 Al2 63.86(4) 14_556 11_666 ?
 Al3 Pd1 Al4 139.46(4) 14_556 12_666 ?
 Al2 Pd1 Al4 75.75(4) 11_666 12_666 ?
 Al3 Pd1 Al3 68.64(5) 14_556 4_454 ?
 Al2 Pd1 Al3 103.91(4) 11_666 4_454 ?
 Al4 Pd1 Al3 121.02(4) 12_666 4_454 ?
 Al3 Pd1 Mg 135.57(4) 14_556 13 ?
 Al2 Pd1 Mg 133.64(4) 11_666 13 ?
 Al4 Pd1 Mg 76.27(4) 12_666 13 ?
 Al3 Pd1 Mg 122.14(4) 4_454 13 ?
 Al3 Pd1 Al1 137.09(4) 14_556 6_454 ?
 Al2 Pd1 Al1 130.57(4) 11_666 6_454 ?
 Al4 Pd1 Al1 69.16(4) 12_666 6_454 ?
 Al3 Pd1 Al1 68.54(3) 4_454 6_454 ?

Mg Pd1 Al1 69.32(4) 13_6_454 ?
Al3 Pd1 Al2 62.76(4) 14_556 14_556 ?
Al2 Pd1 Al2 100.54(4) 11_666 14_556 ?
Al4 Pd1 Al2 132.31(4) 12_666 14_556 ?
Al3 Pd1 Al2 106.18(4) 4_454 14_556 ?
Mg Pd1 Al2 73.16(4) 13_14_556 ?
Al1 Pd1 Al2 128.80(4) 6_454 14_556 ?
Al3 Pd1 Al4 99.11(4) 14_556 13 ?
Al2 Pd1 Al4 63.80(3) 11_666 13 ?
Al4 Pd1 Al4 63.96(2) 12_666 13 ?
Al3 Pd1 Al4 166.21(4) 4_454 13 ?
Mg Pd1 Al4 70.88(4) 13_13 ?
Al1 Pd1 Al4 123.74(4) 6_454 13 ?
Al2 Pd1 Al4 71.82(3) 14_556 13 ?
Al3 Pd1 Al2 83.11(4) 14_556 6_454 ?
Al2 Pd1 Al2 146.97(4) 11_666 6_454 ?
Al4 Pd1 Al2 137.21(4) 12_666 6_454 ?
Al3 Pd1 Al2 61.07(4) 4_454 6_454 ?
Mg Pd1 Al2 70.62(4) 13_6_454 ?
Al1 Pd1 Al2 74.21(4) 6_454 6_454 ?
Al2 Pd1 Al2 61.09(4) 14_556 6_454 ?
Al4 Pd1 Al2 125.53(3) 13_6_454 ?
Al3 Pd1 Mg 94.06(4) 14_556 12_666 ?
Al2 Pd1 Mg 69.41(4) 11_666 12_666 ?
Al4 Pd1 Mg 67.33(4) 12_666 12_666 ?
Al3 Pd1 Mg 58.63(4) 4_454 12_666 ?
Mg Pd1 Mg 129.34(5) 13_12_666 ?
Al1 Pd1 Mg 65.52(4) 6_454 12_666 ?
Al2 Pd1 Mg 156.58(4) 14_556 12_666 ?
Al4 Pd1 Mg 118.24(4) 13_12_666 ?
Al2 Pd1 Mg 115.82(4) 6_454 12_666 ?
Al2 Pd2 Al1 162.72(4) . 12_666 ?
Al2 Pd2 Al1 103.23(4) . 8_444 ?
Al1 Pd2 Al1 73.92(4) 12_666 8_444 ?
Al2 Pd2 Al1 76.07(4) . . ?
Al1 Pd2 Al1 102.67(3) 12_666 . ?
Al1 Pd2 Al1 166.61(4) 8_444 . ?
Al2 Pd2 Al4 96.81(4) . . ?
Al1 Pd2 Al4 67.95(4) 12_666 . ?
Al1 Pd2 Al4 103.50(4) 8_444 . ?
Al1 Pd2 Al4 63.61(4) . . ?
Al2 Pd2 Al5 126.34(3) . . ?
Al1 Pd2 Al5 66.05(3) 12_666 . ?
Al1 Pd2 Al5 122.77(3) 8_444 . ?
Al1 Pd2 Al5 65.22(2) . . ?
Al4 Pd2 Al5 97.60(3) . . ?
Al2 Pd2 Al4 63.37(3) . 8_444 ?
Al1 Pd2 Al4 101.02(3) 12_666 8_444 ?
Al1 Pd2 Al4 63.93(3) 8_444 8_444 ?
Al1 Pd2 Al4 104.82(4) . 8_444 ?
Al4 Pd2 Al4 62.20(3) . 8_444 ?
Al5 Pd2 Al4 159.57(3) . 8_444 ?
Al2 Pd2 Al3 61.71(4) . . ?
Al1 Pd2 Al3 129.07(4) 12_666 . ?
Al1 Pd2 Al3 67.07(3) 8_444 . ?
Al1 Pd2 Al3 122.25(3) . . ?
Al4 Pd2 Al3 151.46(4) . . ?

Al5 Pd2 Al3 110.20(3) . . ?
 Al4 Pd2 Al3 90.22(4) 8_444 . ?
 Al2 Pd2 Mg 118.86(4) . 13 ?
 Al1 Pd2 Mg 76.55(4) 12_666 13 ?
 Al1 Pd2 Mg 68.90(4) 8_444 13 ?
 Al1 Pd2 Mg 123.45(4) . 13 ?
 Al4 Pd2 Mg 144.30(4) . 13 ?
 Al5 Pd2 Mg 63.37(3) . 13 ?
 Al4 Pd2 Mg 131.24(4) 8_444 13 ?
 Al3 Pd2 Mg 59.83(4) . 13 ?
 Al2 Pd2 Mg 68.82(4) . 10_556 ?
 Al1 Pd2 Mg 126.80(4) 12_666 10_556 ?
 Al1 Pd2 Mg 127.27(4) 8_444 10_556 ?
 Al1 Pd2 Mg 65.33(4) . 10_556 ?
 Al4 Pd2 Mg 128.89(4) . 10_556 ?
 Al5 Pd2 Mg 62.02(3) . 10_556 ?
 Al4 Pd2 Mg 132.08(4) 8_444 10_556 ?
 Al3 Pd2 Mg 63.73(4) . 10_556 ?
 Mg Pd2 Mg 70.96(5) 13 10_556 ?
 Pd1 Al4 Pd2 110.37(4) 15 . ?
 Pd1 Al4 Pd1 97.27(4) 15 13 ?
 Pd2 Al4 Pd1 113.61(4) . 13 ?
 Pd1 Al4 Pd2 116.74(4) 15 7_444 ?
 Pd2 Al4 Pd2 110.51(4) . 7_444 ?
 Pd1 Al4 Pd2 107.81(4) 13 7_444 ?
 Pd1 Al4 Al2 136.53(5) 15 7_444 ?
 Pd2 Al4 Al2 111.76(5) . 7_444 ?
 Pd1 Al4 Al2 55.89(3) 13 7_444 ?
 Pd2 Al4 Al2 55.89(3) 7_444 7_444 ?
 Pd1 Al4 Al4 127.46(5) 15 8_444 ?
 Pd2 Al4 Al4 59.42(3) . 8_444 ?
 Pd1 Al4 Al4 55.89(3) 13 8_444 ?
 Pd2 Al4 Al4 114.52(4) 7_444 8_444 ?
 Al2 Al4 Al4 68.96(4) 7_444 8_444 ?
 Pd1 Al4 Al4 60.16(3) 15 7_444 ?
 Pd2 Al4 Al4 144.76(5) . 7_444 ?
 Pd1 Al4 Al4 101.50(4) 13 7_444 ?
 Pd2 Al4 Al4 58.39(4) 7_444 7_444 ?
 Al2 Al4 Al4 89.89(5) 7_444 7_444 ?
 Al4 Al4 Al4 154.97(4) 8_444 7_444 ?
 Pd1 Al4 Al1 118.86(5) 15 . ?
 Pd2 Al4 Al1 57.54(3) . . ?
 Pd1 Al4 Al1 143.82(5) 13 . ?
 Pd2 Al4 Al1 55.90(3) 7_444 . ?
 Al2 Al4 Al1 92.82(5) 7_444 . ?
 Al4 Al4 Al1 98.70(4) 8_444 . ?
 Al4 Al4 Al1 95.47(5) 7_444 . ?
 Pd1 Al4 Al1 56.23(3) 15 12_666 ?
 Pd2 Al4 Al1 54.41(3) . 12_666 ?
 Pd1 Al4 Al1 113.05(4) 13 12_666 ?
 Pd2 Al4 Al1 139.06(5) 7_444 12_666 ?
 Al2 Al4 Al1 159.91(5) 7_444 12_666 ?
 Al4 Al4 Al1 90.95(5) 8_444 12_666 ?
 Al4 Al4 Al1 109.55(4) 7_444 12_666 ?
 Al1 Al4 Al1 90.39(5) . 12_666 ?
 Pd1 Al4 Mg 62.26(4) 15 . ?
 Pd2 Al4 Mg 88.49(4) . . ?

Pd1 Al4 Mg 53.36(3) 13 . ?
 Pd2 Al4 Mg 158.54(5) 7_444 . ?
 Al2 Al4 Mg 108.63(5) 7_444 . ?
 Al4 Al4 Mg 65.93(4) 8_444 . ?
 Al4 Al4 Mg 111.30(4) 7_444 . ?
 Al1 Al4 Mg 145.10(5) . . ?
 Al1 Al4 Mg 60.31(4) 12_666 . ?
 Pd1 Al4 Mg 52.47(3) 15 7_444 ?
 Pd2 Al4 Mg 85.61(4) . 7_444 ?
 Pd1 Al4 Mg 149.31(5) 13 7_444 ?
 Pd2 Al4 Mg 85.48(4) 7_444 7_444 ?
 Al2 Al4 Mg 140.87(5) 7_444 7_444 ?
 Al4 Al4 Mg 143.59(5) 8_444 7_444 ?
 Al4 Al4 Mg 61.37(4) 7_444 7_444 ?
 Al1 Al4 Mg 66.48(4) . 7_444 ?
 Al1 Al4 Mg 57.74(4) 12_666 7_444 ?
 Mg Al4 Mg 106.53(4) . 7_444 ?
 Pd1 Mg Al3 140.82(6) 13 13 ?
 Pd1 Mg Pd2 151.39(6) 13 13 ?
 Al3 Mg Pd2 59.68(4) 13 13 ?
 Pd1 Mg Pd2 92.65(4) 13 10_656 ?
 Al3 Mg Pd2 103.95(5) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Pd2 100.80(4) 13 10_656 ?
 Pd1 Mg Al5 113.32(4) 13 13 ?
 Al3 Mg Al5 105.36(5) 13 13 ?
 Pd2 Mg Al5 57.41(3) 13 13 ?
 Pd2 Mg Al5 56.34(2) 10_656 13 ?
 Pd1 Mg Pd1 90.25(4) 13 15 ?
 Al3 Mg Pd1 54.41(3) 13 15 ?
 Pd2 Mg Pd1 95.42(4) 13 15 ?
 Pd2 Mg Pd1 139.59(5) 10_656 15 ?
 Al5 Mg Pd1 152.82(5) 13 15 ?
 Pd1 Mg Al3 107.42(5) 13 10_656 ?
 Al3 Mg Al3 58.28(5) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Al3 101.03(5) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Al3 56.09(3) 10_656 10_656 ?
 Al5 Mg Al3 99.97(5) 13 10_656 ?
 Pd1 Mg Al3 84.67(4) 15 10_656 ?
 Pd1 Mg Al1 55.46(3) 13 10_656 ?
 Al3 Mg Al1 157.04(6) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Al1 114.09(5) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Al1 53.91(3) 10_656 10_656 ?
 Al5 Mg Al1 59.10(3) 13 10_656 ?
 Pd1 Mg Al1 145.68(5) 15 10_656 ?
 Al3 Mg Al1 105.24(5) 10_656 10_656 ?
 Pd1 Mg Al1 112.84(5) 13 12_666 ?
 Al3 Mg Al1 61.16(4) 13 12_666 ?
 Pd2 Mg Al1 52.96(3) 13 12_666 ?
 Pd2 Mg Al1 153.37(5) 10_656 12_666 ?
 Al5 Mg Al1 104.01(4) 13 12_666 ?
 Pd1 Mg Al1 51.97(3) 15 12_666 ?
 Al3 Mg Al1 118.67(5) 10_656 12_666 ?
 Al1 Mg Al1 135.51(6) 10_656 12_666 ?
 Pd1 Mg Al4 55.76(3) 13 . ?
 Al3 Mg Al4 101.46(5) 13 . ?
 Pd2 Mg Al4 108.14(5) 13 . ?
 Pd2 Mg Al4 148.40(5) 10_656 . ?

Al5 Mg Al4 132.62(5) 13 . ?
 Pd1 Mg Al4 50.41(3) 15 . ?
 Al3 Mg Al4 127.39(5) 10_656 . ?
 Al1 Mg Al4 101.42(5) 10_656 . ?
 Al1 Mg Al4 57.70(4) 12_666 . ?
 Pd1 Mg Al2 56.21(3) 13 10_656 ?
 Al3 Mg Al2 108.64(5) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Al2 148.64(5) 13 10_656 ?
 Pd2 Mg Al2 51.25(3) 10_656 10_656 ?
 Al5 Mg Al2 104.70(4) 13 10_656 ?
 Pd1 Mg Al2 99.59(4) 15 10_656 ?
 Al3 Mg Al2 53.69(4) 10_656 10_656 ?
 Al1 Mg Al2 64.18(4) 10_656 10_656 ?
 Al1 Mg Al2 151.21(5) 12_666 10_656 ?
 Al4 Mg Al2 102.64(5) . 10_656 ?
 Pd1 Mg Al2 54.45(3) 13 2_554 ?
 Al3 Mg Al2 87.15(5) 13 2_554 ?
 Pd2 Mg Al2 143.40(5) 13 2_554 ?
 Pd2 Mg Al2 102.01(5) 10_656 2_554 ?
 Al5 Mg Al2 156.72(5) 13 2_554 ?
 Pd1 Mg Al2 49.54(3) 15 2_554 ?
 Al3 Mg Al2 69.60(4) 10_656 2_554 ?
 Al1 Mg Al2 102.46(5) 10_656 2_554 ?
 Al1 Mg Al2 99.22(5) 12_666 2_554 ?
 Al4 Mg Al2 60.75(4) . 2_554 ?
 Al2 Mg Al2 52.16(4) 10_656 2_554 ?
 Pd2 Al5 Pd2 106.32(2) 15 12_666 ?
 Pd2 Al5 Pd2 111.071(9) 15 . ?
 Pd2 Al5 Pd2 111.070(9) 12_666 . ?
 Pd2 Al5 Pd2 111.071(9) 15 6_454 ?
 Pd2 Al5 Pd2 111.070(9) 12_666 6_454 ?
 Pd2 Al5 Pd2 106.32(2) . 6_454 ?
 Pd2 Al5 Mg 92.23(3) 15 10_556 ?
 Pd2 Al5 Mg 161.41(3) 12_666 10_556 ?
 Pd2 Al5 Mg 61.65(3) . 10_556 ?
 Pd2 Al5 Mg 59.22(3) 6_454 10_556 ?
 Pd2 Al5 Mg 161.41(3) 15 13 ?
 Pd2 Al5 Mg 92.23(3) 12_666 13 ?
 Pd2 Al5 Mg 59.22(3) . 13 ?
 Pd2 Al5 Mg 61.64(3) 6_454 13 ?
 Mg Al5 Mg 69.27(5) 10_556 13 ?
 Pd2 Al5 Mg 59.22(3) 15 7_444 ?
 Pd2 Al5 Mg 61.64(3) 12_666 7_444 ?
 Pd2 Al5 Mg 92.23(3) . 7_444 ?
 Pd2 Al5 Mg 161.41(3) 6_454 7_444 ?
 Mg Al5 Mg 132.61(3) 10_556 7_444 ?
 Mg Al5 Mg 132.61(3) 13 7_444 ?
 Pd2 Al5 Mg 61.64(3) 15 4_454 ?
 Pd2 Al5 Mg 59.22(3) 12_666 4_454 ?
 Pd2 Al5 Mg 161.41(3) . 4_454 ?
 Pd2 Al5 Mg 92.23(3) 6_454 4_454 ?
 Mg Al5 Mg 132.61(3) 10_556 4_454 ?
 Mg Al5 Mg 132.61(3) 13 4_454 ?
 Mg Al5 Mg 69.26(5) 7_444 4_454 ?
 Pd2 Al5 Al1 55.00(2) 15 . ?
 Pd2 Al5 Al1 130.03(2) 12_666 . ?
 Pd2 Al5 Al1 56.45(2) . . ?

Pd2 Al5 Al1 118.89(2) 6_454 . ?
 Mg Al5 Al1 62.32(3) 10_556 . ?
 Mg Al5 Al1 111.66(3) 13 . ?
 Mg Al5 Al1 70.29(3) 7_444 . ?
 Mg Al5 Al1 115.64(3) 4_454 . ?
 Pd2 Al5 Al1 56.45(2) 15 15 ?
 Pd2 Al5 Al1 118.89(2) 12_666 15 ?
 Pd2 Al5 Al1 130.03(2) . 15 ?
 Pd2 Al5 Al1 55.00(2) 6_454 15 ?
 Mg Al5 Al1 70.29(3) 10_556 15 ?
 Mg Al5 Al1 115.64(3) 13 15 ?
 Mg Al5 Al1 111.66(3) 7_444 15 ?
 Mg Al5 Al1 62.32(3) 4_454 15 ?
 Al1 Al5 Al1 90.192(2) . 15 ?
 Pd2 Al5 Al1 118.89(2) 15 12_666 ?
 Pd2 Al5 Al1 56.45(2) 12_666 12_666 ?
 Pd2 Al5 Al1 55.00(2) . 12_666 ?
 Pd2 Al5 Al1 130.02(2) 6_454 12_666 ?
 Mg Al5 Al1 115.64(3) 10_556 12_666 ?
 Mg Al5 Al1 70.29(3) 13 12_666 ?
 Mg Al5 Al1 62.32(3) 7_444 12_666 ?
 Mg Al5 Al1 111.66(3) 4_454 12_666 ?
 Al1 Al5 Al1 90.194(2) . 12_666 ?
 Al1 Al5 Al1 173.35(4) 15 12_666 ?
 Pd2 Al5 Al1 130.02(2) 15 6_454 ?
 Pd2 Al5 Al1 55.00(2) 12_666 6_454 ?
 Pd2 Al5 Al1 118.89(2) . 6_454 ?
 Pd2 Al5 Al1 56.45(2) 6_454 6_454 ?
 Mg Al5 Al1 111.66(3) 10_556 6_454 ?
 Mg Al5 Al1 62.32(3) 13 6_454 ?
 Mg Al5 Al1 115.64(3) 7_444 6_454 ?
 Mg Al5 Al1 70.29(3) 4_454 6_454 ?
 Al1 Al5 Al1 173.35(4) . 6_454 ?
 Al1 Al5 Al1 90.192(3) 15 6_454 ?
 Al1 Al5 Al1 90.192(2) 12_666 6_454 ?

_refine_diff_density_max 0.891
 _refine_diff_density_min -1.597
 _refine_diff_density_rms 0.301

data_630

_audit_creation_method SHELXL

1. SUBMISSION DETAILS

_publ_contact_author

;

Dpl.-chem. Melanie Sch\apers

FB Chemie Uni Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

_publ_contact_author_email 'melanie_schaepers@web.de'

#####

2. TITLE AND AUTHOR LIST

_publ_section_title

;

Dissertation Universit\at Dortmund

Zur Strukturchemie von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle

vom Mackay Ikosaeder-Typ

;

loop_

_publ_author_name

_publ_author_address

'Sch\apers, Melanie'

;

FB Chemie

Universit\at Dortmund

Otto-Hahn-Str. 6

44221 Dortmund

Germany

;

#####

3. TEXT

_publ_section_abstract

;

cF-Approximant im System Al-Ga-Mg-Pd, Anhang E

Datensatz Nummer: 630

;

#####

4. Results

_chemical_name_systematic

;

?

;

_chemical_name_common ?


```

_chemical_formula_moiety      ?
_chemical_formula_structural  ?
_chemical_formula_analytical  ?
_chemical_formula_sum         'Ga37.54 Mg173.94 Pd52.52'
_chemical_formula_weight      12434.37
_chemical_melting_point       ?
_chemical_compound_source     ?

```

loop_

```

_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Ga' 'Ga' 0.2307 1.6083
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Pd' 'Pd' -0.9988 1.0072
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

```

```

_symmetry_cell_setting        'cubic'
_symmetry_space_group_name_H-M 'Fm-3'

```

loop_

```

_symmetry_equiv_pos_as_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'
'-x, y, -z'
'x, -y, -z'
'z, x, y'
'z, -x, -y'
'-z, -x, y'
'-z, x, -y'
'y, z, x'
'-y, z, -x'
'y, -z, -x'
'-y, -z, x'
'x, y+1/2, z+1/2'
'-x, -y+1/2, z+1/2'
'-x, y+1/2, -z+1/2'
'x, -y+1/2, -z+1/2'
'z, x+1/2, y+1/2'
'z, -x+1/2, -y+1/2'
'-z, -x+1/2, y+1/2'
'-z, x+1/2, -y+1/2'
'y, z+1/2, x+1/2'
'-y, z+1/2, -x+1/2'
'y, -z+1/2, -x+1/2'
'-y, -z+1/2, x+1/2'
'x+1/2, y, z+1/2'
'-x+1/2, -y, z+1/2'
'-x+1/2, y, -z+1/2'
'x+1/2, -y, -z+1/2'
'z+1/2, x, y+1/2'
'z+1/2, -x, -y+1/2'
'-z+1/2, -x, y+1/2'

```

'-z+1/2, x, -y+1/2'
'y+1/2, z, x+1/2'
'-y+1/2, z, -x+1/2'
'y+1/2, -z, -x+1/2'
'-y+1/2, -z, x+1/2'
'x+1/2, y+1/2, z'
'-x+1/2, -y+1/2, z'
'-x+1/2, y+1/2, -z'
'x+1/2, -y+1/2, -z'
'z+1/2, x+1/2, y'
'z+1/2, -x+1/2, -y'
'-z+1/2, -x+1/2, y'
'-z+1/2, x+1/2, -y'
'y+1/2, z+1/2, x'
'-y+1/2, z+1/2, -x'
'y+1/2, -z+1/2, -x'
'-y+1/2, -z+1/2, x'
'-x, -y, -z'
'x, y, -z'
'x, -y, z'
'-x, y, z'
'-z, -x, -y'
'-z, x, y'
'z, x, -y'
'z, -x, y'
'-y, -z, -x'
'y, -z, x'
'-y, z, x'
'y, z, -x'
'-x, -y+1/2, -z+1/2'
'x, y+1/2, -z+1/2'
'x, -y+1/2, z+1/2'
'-x, y+1/2, z+1/2'
'-z, -x+1/2, -y+1/2'
'-z, x+1/2, y+1/2'
'z, x+1/2, -y+1/2'
'z, -x+1/2, y+1/2'
'-y, -z+1/2, -x+1/2'
'y, -z+1/2, x+1/2'
'-y, z+1/2, x+1/2'
'y, z+1/2, -x+1/2'
'-x+1/2, -y, -z+1/2'
'x+1/2, y, -z+1/2'
'x+1/2, -y, z+1/2'
'-x+1/2, y, z+1/2'
'-z+1/2, -x, -y+1/2'
'-z+1/2, x, y+1/2'
'z+1/2, x, -y+1/2'
'z+1/2, -x, y+1/2'
'-y+1/2, -z, -x+1/2'
'y+1/2, -z, x+1/2'
'-y+1/2, z, x+1/2'
'y+1/2, z, -x+1/2'
'-x+1/2, -y+1/2, -z'
'x+1/2, y+1/2, -z'
'x+1/2, -y+1/2, z'
'-x+1/2, y+1/2, z'

'-z+1/2, -x+1/2, -y'
 '-z+1/2, x+1/2, y'
 'z+1/2, x+1/2, -y'
 'z+1/2, -x+1/2, y'
 '-y+1/2, -z+1/2, -x'
 'y+1/2, -z+1/2, x'
 '-y+1/2, z+1/2, x'
 'y+1/2, z+1/2, -x'

_cell_length_a 17.053(2)
 _cell_length_b 17.053(2)
 _cell_length_c 17.053(2)
 _cell_angle_alpha 90.00
 _cell_angle_beta 90.00
 _cell_angle_gamma 90.00
 _cell_volume 4959.1(10)
 _cell_formula_units_Z 1
 _cell_measurement_temperature 293(2)
 _cell_measurement_reflns_used 27
 _cell_measurement_theta_min 4.5
 _cell_measurement_theta_max 54.02

_exptl_crystal_description 'irregular'
 _exptl_crystal_colour 'silver'
 _exptl_crystal_size_max 0.3
 _exptl_crystal_size_mid 0.2
 _exptl_crystal_size_min 0.2
 _exptl_crystal_density_meas 'none'
 _exptl_crystal_density_diffn 3.932
 _exptl_crystal_density_method 'none'
 _exptl_crystal_F_000 5331
 _exptl_absorpt_coefficient_mu 9.645
 _exptl_absorpt_correction_type 'none'
 _exptl_absorpt_correction_T_min ?
 _exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
 ;
 ?
 ;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
 _diffn_radiation_wavelength 0.71069
 _diffn_radiation_type MoKa
 _diffn_radiation_source 'fine-focus sealed tube'
 _diffn_radiation_monochromator graphite
 _diffn_measurement_device 'Kappa-CCD'
 _diffn_measurement_method 'phi-scan'
 _diffn_standards_number ?
 _diffn_standards_interval_count ?
 _diffn_standards_interval_time ?
 _diffn_standards_decay_% ?
 _diffn_reflns_number 9873
 _diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0967
 _diffn_reflns_av_sigma/netI 0.0341
 _diffn_reflns_limit_h_min -21
 _diffn_reflns_limit_h_max 21

```

_diffn_reflms_limit_k_min    -21
_diffn_reflms_limit_k_max    21
_diffn_reflms_limit_l_min    -21
_diffn_reflms_limit_l_max    21
_diffn_reflms_theta_min      3.38
_diffn_reflms_theta_max      27.01
_reflms_number_total         512
_reflms_number_observed       406
_reflms_observed_criterion    >2sigma(I)

_computing_data_collection    'Denzo/Scalepack'
_computing_cell_refinement     'Denzo/Scalepack'
_computing_data_reduction      'NRCVAX Software'
_computing_structure_solution  'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics  'Schakal 97'
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement on F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F2. The observed criterion
of F2 > 2sigma(F2) is used only for calculating _R_factor_obs etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type        full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[s2(Fo2)+( 0.0283P)2+0.0000P] where P=(Fo2+2Fc2)/3'
_refine_ls_solution_primary    direct
_refine_ls_solution_secondary  difmap
_refine_ls_solution_hydrogens  geom
_refine_ls_hydrogen_treatment  none
_refine_ls_extinction_method   none
_refine_ls_extinction_coef     none
_refine_ls_number_reflms       512
_refine_ls_number_parameters    34
_refine_ls_number_restraints    0
_refine_ls_R_factor_all         0.0396
_refine_ls_R_factor_obs         0.0265
_refine_ls_wR_factor_all        0.0535
_refine_ls_wR_factor_obs        0.0516
_refine_ls_goodness_of_fit_all  1.022
_refine_ls_goodness_of_fit_obs  1.117
_refine_ls_restrained_S_all     1.022
_refine_ls_restrained_S_obs     1.117
_refine_ls_shift/esd_max        0.000
_refine_ls_shift/esd_mean       0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol

```

```

_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Mg1 Mg 0.09464(8) 0.25898(9) 0.15802(8) 0.0193(3) Uani 1 d . .
Ga1 Ga 0.0000 0.08825(6) 0.36316(6) 0.0231(4) Uani 0.543(6) d SP .
Mg10 Mg 0.0000 0.08825(6) 0.36316(6) 0.0231(4) Uani 0.457(6) d SP .
Pd1 Pd 0.0000 0.15466(3) 0.22935(3) 0.0180(2) Uani 1 d S .
Mg2 Mg 0.09486(8) 0.09486(8) 0.09486(8) 0.0182(6) Uani 1 d S .
Mg3 Mg 0.2153(2) 0.0000 0.0000 0.0209(7) Uani 1 d S .
Ga2 Ga 0.2500 0.2500 0.2500 0.0192(4) Uani 1 d S .
Pd2 Pd 0.5000 0.5000 0.5000 0.0212(4) Uani 1 d S .
Pd3 Pd 0.0000 0.0000 0.0000 0.0193(9) Uani 0.13(3) d SP .
Ga11 Ga 0.0000 0.0000 0.0000 0.0193(9) Uani 0.87(3) d SP .

```

```

loop_
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Mg1 0.0197(8) 0.0184(7) 0.0197(7) -0.0013(6) 0.0023(7) -0.0031(7)
Ga1 0.0271(7) 0.0236(7) 0.0188(6) 0.0028(5) 0.000 0.000
Mg10 0.0271(7) 0.0236(7) 0.0188(6) 0.0028(5) 0.000 0.000
Pd1 0.0171(3) 0.0176(3) 0.0195(3) 0.0013(2) 0.000 0.000
Mg2 0.0182(6) 0.0182(6) 0.0182(6) -0.0006(6) -0.0006(6) -0.0006(6)
Mg3 0.024(2) 0.027(2) 0.0125(15) 0.000 0.000 0.000
Ga2 0.0192(4) 0.0192(4) 0.0192(4) 0.000 0.000 0.000
Pd2 0.0212(4) 0.0212(4) 0.0212(4) 0.000 0.000 0.000
Pd3 0.0193(9) 0.0193(9) 0.0193(9) 0.000 0.000 0.000
Ga11 0.0193(9) 0.0193(9) 0.0193(9) 0.000 0.000 0.000

```

```
_geom_special_details
```

```
;
```

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

```
;
```

```

loop_
_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Mg1 Pd1 2.692(2) . ?
Mg1 Pd1 2.909(2) 61 ?

```

Mg1 Pd1 2.9266(15) 9 ?
Mg1 Mg2 2.999(2) . ?
Mg1 Mg1 3.066(3) 18 ?
Mg1 Mg1 3.066(2) 48 ?
Mg1 Ga2 3.0826(14) . ?
Mg1 Mg10 3.086(2) 61 ?
Mg1 Ga1 3.086(2) 61 ?
Mg1 Mg1 3.152(3) 16 ?
Mg1 Mg1 3.228(3) 52 ?
Mg1 Mg3 3.228(2) 5 ?
Ga1 Pd1 2.5474(12) . ?
Ga1 Pd2 2.7768(11) 37_445 ?
Ga1 Mg10 2.8978(12) 70 ?
Ga1 Ga1 2.8978(12) 70 ?
Ga1 Mg10 2.8978(12) 69 ?
Ga1 Ga1 2.8978(12) 69 ?
Ga1 Mg10 2.8978(12) 30_455 ?
Ga1 Ga1 2.8978(12) 30_455 ?
Ga1 Ga1 2.8978(12) 77 ?
Ga1 Mg10 2.8978(12) 77 ?
Ga1 Mg3 2.936(3) 9 ?
Ga1 Mg10 3.010(2) 2 ?
Mg10 Pd1 2.5474(12) . ?
Mg10 Pd2 2.7768(11) 37_445 ?
Mg10 Mg10 2.8978(12) 70 ?
Mg10 Ga1 2.8978(12) 70 ?
Mg10 Mg10 2.8978(12) 69 ?
Mg10 Ga1 2.8978(12) 69 ?
Mg10 Mg10 2.8978(12) 30_455 ?
Mg10 Ga1 2.8978(12) 30_455 ?
Mg10 Ga1 2.8978(12) 77 ?
Mg10 Mg10 2.8978(12) 77 ?
Mg10 Mg3 2.936(3) 9 ?
Mg10 Mg10 3.010(2) 2 ?
Pd1 Mg3 2.6481(6) 9 ?
Pd1 Mg1 2.693(2) 52 ?
Pd1 Mg1 2.909(2) 16 ?
Pd1 Mg1 2.909(2) 61 ?
Pd1 Mg1 2.9265(15) 54 ?
Pd1 Mg1 2.9265(15) 5 ?
Pd1 Mg2 2.9860(10) 52 ?
Pd1 Mg2 2.9860(10) . ?
Mg2 Ga11 2.802(3) . ?
Mg2 Pd3 2.802(3) . ?
Mg2 Pd1 2.9860(10) 9 ?
Mg2 Pd1 2.9860(10) 5 ?
Mg2 Mg1 2.999(2) 9 ?
Mg2 Mg1 2.999(2) 5 ?
Mg2 Mg3 3.075(2) . ?
Mg2 Mg3 3.075(2) 9 ?
Mg2 Mg3 3.075(2) 5 ?
Mg2 Mg2 3.235(3) 50 ?
Mg3 Pd1 2.6482(6) 5 ?
Mg3 Pd1 2.6482(6) 6 ?
Mg3 Mg10 2.936(3) 5 ?
Mg3 Ga1 2.936(3) 5 ?
Mg3 Mg10 2.936(3) 6 ?

Mg3 Ga1 2.936(3) 6 ?
 Mg3 Mg2 3.075(2) 4 ?
 Mg3 Mg2 3.075(2) 51 ?
 Mg3 Mg2 3.075(2) 50 ?
 Mg3 Mg1 3.228(2) 9 ?
 Mg3 Mg1 3.228(2) 11 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 23 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 43 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 27 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 9 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 5 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 48 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 16 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 32 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 18 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 38 ?
 Ga2 Mg1 3.0825(14) 34 ?
 Pd2 Mg10 2.7768(11) 82_565 ?
 Pd2 Mg10 2.7768(11) 34 ?
 Pd2 Mg10 2.7768(11) 66_655 ?
 Pd2 Ga1 2.7768(11) 38 ?
 Pd2 Ga1 2.7768(11) 86_556 ?
 Pd2 Mg10 2.7768(11) 18 ?
 Pd2 Mg10 2.7768(11) 86_556 ?
 Pd2 Ga1 2.7768(11) 18 ?
 Pd2 Ga1 2.7768(11) 66_655 ?
 Pd2 Mg10 2.7768(11) 38 ?
 Pd2 Ga1 2.7768(11) 82_565 ?
 Pd2 Ga1 2.7768(11) 34 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 49 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 52 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 2 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 50 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 3 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 51 ?
 Pd3 Mg2 2.802(3) 4 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 49 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 52 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 2 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 50 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 3 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 51 ?
 Ga11 Mg2 2.802(3) 4 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
 Pd1 Mg1 Pd1 72.76(4) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Pd1 120.76(6) . 9 ?
 Pd1 Mg1 Pd1 152.80(6) 61 9 ?
 Pd1 Mg1 Mg2 63.02(3) . . ?
 Pd1 Mg1 Mg2 135.26(5) 61 . ?

Pd1 Mg1 Mg2 60.50(3) 9 . ?
 Pd1 Mg1 Mg1 122.73(7) . 18 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 58.58(5) 61 18 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 116.25(5) 9 18 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 157.68(5) . 18 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 162.21(4) . 48 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 116.79(5) 61 48 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 58.03(5) 9 48 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 107.65(7) . 48 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 60.0 18 48 ?
 Pd1 Mg1 Ga2 104.63(5) . . ?
 Pd1 Mg1 Ga2 99.56(4) 61 . ?
 Pd1 Mg1 Ga2 99.17(4) 9 . ?
 Mg2 Mg1 Ga2 97.78(5) . . ?
 Mg1 Mg1 Ga2 60.18(2) 18 . ?
 Mg1 Mg1 Ga2 60.17(2) 48 . ?
 Pd1 Mg1 Mg10 107.29(5) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Mg10 50.19(3) 61 61 ?
 Pd1 Mg1 Mg10 102.76(5) 9 61 ?
 Mg2 Mg1 Mg10 138.29(6) . 61 ?
 Mg1 Mg1 Mg10 63.33(4) 18 61 ?
 Mg1 Mg1 Mg10 89.71(3) 48 61 ?
 Ga2 Mg1 Mg10 123.44(5) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 107.29(5) . 61 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 50.19(3) 61 61 ?
 Pd1 Mg1 Ga1 102.76(5) 9 61 ?
 Mg2 Mg1 Ga1 138.29(6) . 61 ?
 Mg1 Mg1 Ga1 63.33(4) 18 61 ?
 Mg1 Mg1 Ga1 89.71(3) 48 61 ?
 Ga2 Mg1 Ga1 123.44(5) . 61 ?
 Mg10 Mg1 Ga1 0.00(4) 61 61 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 59.08(4) . 16 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 52.56(4) 61 16 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 154.11(5) 9 16 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 105.47(7) . 16 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 67.65(7) 18 16 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 113.31(5) 48 16 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 59.25(3) . 16 ?
 Mg10 Mg1 Mg1 101.45(6) 61 16 ?
 Ga1 Mg1 Mg1 101.45(6) 61 16 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 53.17(3) . 52 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 56.30(3) 61 52 ?
 Pd1 Mg1 Mg1 110.47(3) 9 52 ?
 Mg2 Mg1 Mg1 90.07(4) . 52 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 110.64(4) 18 52 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 144.495(5) 48 52 ?
 Ga2 Mg1 Mg1 149.25(3) . 52 ?
 Mg10 Mg1 Mg1 58.46(3) 61 52 ?
 Ga1 Mg1 Mg1 58.46(3) 61 52 ?
 Mg1 Mg1 Mg1 90.0 16 52 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 85.70(5) . 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 112.99(5) 61 5 ?
 Pd1 Mg1 Mg3 50.68(2) 9 5 ?
 Mg2 Mg1 Mg3 59.04(6) . 5 ?
 Mg1 Mg1 Mg3 138.53(6) 18 5 ?
 Mg1 Mg1 Mg3 102.66(6) 48 5 ?
 Ga2 Mg1 Mg3 147.46(6) . 5 ?

Mg10 Mg1 Mg3 80.53(6) 61 5 ?
Ga1 Mg1 Mg3 80.53(6) 61 5 ?
Mg1 Mg1 Mg3 143.94(5) 16 5 ?
Mg1 Mg1 Mg3 60.00(3) 52 5 ?
Pd1 Ga1 Pd2 173.57(5) . 37_445 ?
Pd1 Ga1 Mg10 126.46(3) . 70 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.548(5) 37_445 70 ?
Pd1 Ga1 Ga1 126.46(3) . 70 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.548(5) 37_445 70 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(5) 70 70 ?
Pd1 Ga1 Mg10 126.46(3) . 69 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.548(5) 37_445 69 ?
Mg10 Ga1 Mg10 62.58(5) 70 69 ?
Ga1 Ga1 Mg10 62.58(5) 70 69 ?
Pd1 Ga1 Ga1 126.46(3) . 69 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.548(5) 37_445 69 ?
Mg10 Ga1 Ga1 62.58(5) 70 69 ?
Ga1 Ga1 Ga1 62.58(5) 70 69 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(5) 69 69 ?
Pd1 Ga1 Mg10 119.14(3) . 30_455 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.548(5) 37_445 30_455 ?
Mg10 Ga1 Mg10 109.66(3) 70 30_455 ?
Ga1 Ga1 Mg10 109.66(3) 70 30_455 ?
Mg10 Ga1 Mg10 60.0 69 30_455 ?
Ga1 Ga1 Mg10 60.0 69 30_455 ?
Pd1 Ga1 Ga1 119.14(3) . 30_455 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.548(5) 37_445 30_455 ?
Mg10 Ga1 Ga1 109.66(3) 70 30_455 ?
Ga1 Ga1 Ga1 109.66(3) 70 30_455 ?
Mg10 Ga1 Ga1 60.0 69 30_455 ?
Ga1 Ga1 Ga1 60.0 69 30_455 ?
Mg10 Ga1 Ga1 0.00(5) 30_455 30_455 ?
Pd1 Ga1 Ga1 119.14(3) . 77 ?
Pd2 Ga1 Ga1 58.548(5) 37_445 77 ?
Mg10 Ga1 Ga1 60.0 70 77 ?
Ga1 Ga1 Ga1 60.0 70 77 ?
Mg10 Ga1 Ga1 109.66(3) 69 77 ?
Ga1 Ga1 Ga1 109.66(3) 69 77 ?
Mg10 Ga1 Ga1 107.28(2) 30_455 77 ?
Ga1 Ga1 Ga1 107.28(2) 30_455 77 ?
Pd1 Ga1 Mg10 119.14(3) . 77 ?
Pd2 Ga1 Mg10 58.548(5) 37_445 77 ?
Mg10 Ga1 Mg10 60.0 70 77 ?
Ga1 Ga1 Mg10 60.0 70 77 ?
Mg10 Ga1 Mg10 109.66(3) 69 77 ?
Ga1 Ga1 Mg10 109.66(3) 69 77 ?
Mg10 Ga1 Mg10 107.28(2) 30_455 77 ?
Ga1 Ga1 Mg10 107.28(2) 30_455 77 ?
Ga1 Ga1 Mg10 0.00(5) 77 77 ?
Pd1 Ga1 Mg3 57.23(4) . 9 ?
Pd2 Ga1 Mg3 116.34(5) 37_445 9 ?
Mg10 Ga1 Mg3 146.93(4) 70 9 ?
Ga1 Ga1 Mg3 146.93(4) 70 9 ?
Mg10 Ga1 Mg3 146.93(4) 69 9 ?
Ga1 Ga1 Mg3 146.93(4) 69 9 ?
Mg10 Ga1 Mg3 88.81(5) 30_455 9 ?
Ga1 Ga1 Mg3 88.81(5) 30_455 9 ?

Ga1 Ga1 Mg3 88.81(5) 77 9 ?
 Mg10 Ga1 Mg3 88.81(5) 77 9 ?
 Pd1 Ga1 Mg10 116.39(3) . 2 ?
 Pd2 Ga1 Mg10 57.18(2) 37_445 2 ?
 Mg10 Ga1 Mg10 106.62(3) 70 2 ?
 Ga1 Ga1 Mg10 106.62(3) 70 2 ?
 Mg10 Ga1 Mg10 106.62(3) 69 2 ?
 Ga1 Ga1 Mg10 106.62(3) 69 2 ?
 Mg10 Ga1 Mg10 58.71(3) 30_455 2 ?
 Ga1 Ga1 Mg10 58.71(3) 30_455 2 ?
 Ga1 Ga1 Mg10 58.71(3) 77 2 ?
 Mg10 Ga1 Mg10 58.71(3) 77 2 ?
 Mg3 Ga1 Mg10 59.16(4) 9 2 ?
 Pd1 Mg10 Pd2 173.57(5) . 37_445 ?
 Pd1 Mg10 Mg10 126.46(3) . 70 ?
 Pd2 Mg10 Mg10 58.548(5) 37_445 70 ?
 Pd1 Mg10 Ga1 126.46(3) . 70 ?
 Pd2 Mg10 Ga1 58.548(5) 37_445 70 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 0.00(5) 70 70 ?
 Pd1 Mg10 Mg10 126.46(3) . 69 ?
 Pd2 Mg10 Mg10 58.548(5) 37_445 69 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 62.58(5) 70 69 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 62.58(5) 70 69 ?
 Pd1 Mg10 Ga1 126.46(3) . 69 ?
 Pd2 Mg10 Ga1 58.548(5) 37_445 69 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 62.58(5) 70 69 ?
 Ga1 Mg10 Ga1 62.58(5) 70 69 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 0.00(5) 69 69 ?
 Pd1 Mg10 Mg10 119.14(3) . 30_455 ?
 Pd2 Mg10 Mg10 58.548(5) 37_445 30_455 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 109.66(3) 70 30_455 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 109.66(3) 70 30_455 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 60.0 69 30_455 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 60.0 69 30_455 ?
 Pd1 Mg10 Ga1 119.14(3) . 30_455 ?
 Pd2 Mg10 Ga1 58.548(5) 37_445 30_455 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 109.66(3) 70 30_455 ?
 Ga1 Mg10 Ga1 109.66(3) 70 30_455 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 60.0 69 30_455 ?
 Ga1 Mg10 Ga1 60.0 69 30_455 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 0.00(5) 30_455 30_455 ?
 Pd1 Mg10 Ga1 119.14(3) . 77 ?
 Pd2 Mg10 Ga1 58.548(5) 37_445 77 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 60.0 70 77 ?
 Ga1 Mg10 Ga1 60.0 70 77 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 109.66(3) 69 77 ?
 Ga1 Mg10 Ga1 109.66(3) 69 77 ?
 Mg10 Mg10 Ga1 107.28(2) 30_455 77 ?
 Ga1 Mg10 Ga1 107.28(2) 30_455 77 ?
 Pd1 Mg10 Mg10 119.14(3) . 77 ?
 Pd2 Mg10 Mg10 58.548(5) 37_445 77 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 60.0 70 77 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 60.0 70 77 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 109.66(3) 69 77 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 109.66(3) 69 77 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 107.28(2) 30_455 77 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 107.28(2) 30_455 77 ?

Ga1 Mg10 Mg10 0.00(5) 77 77 ?
 Pd1 Mg10 Mg3 57.23(4) . 9 ?
 Pd2 Mg10 Mg3 116.34(5) 37_445 9 ?
 Mg10 Mg10 Mg3 146.93(4) 70 9 ?
 Ga1 Mg10 Mg3 146.93(4) 70 9 ?
 Mg10 Mg10 Mg3 146.93(4) 69 9 ?
 Ga1 Mg10 Mg3 146.93(4) 69 9 ?
 Mg10 Mg10 Mg3 88.81(5) 30_455 9 ?
 Ga1 Mg10 Mg3 88.81(5) 30_455 9 ?
 Ga1 Mg10 Mg3 88.81(5) 77 9 ?
 Mg10 Mg10 Mg3 88.81(5) 77 9 ?
 Pd1 Mg10 Mg10 116.39(3) . 2 ?
 Pd2 Mg10 Mg10 57.18(2) 37_445 2 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 106.62(3) 70 2 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 106.62(3) 70 2 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 106.62(3) 69 2 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 106.62(3) 69 2 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 58.71(3) 30_455 2 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 58.71(3) 30_455 2 ?
 Ga1 Mg10 Mg10 58.71(3) 77 2 ?
 Mg10 Mg10 Mg10 58.71(3) 77 2 ?
 Mg3 Mg10 Mg10 59.16(4) 9 2 ?
 Mg10 Pd1 Ga1 0.00(5) . . ?
 Mg10 Pd1 Mg3 68.78(7) . 9 ?
 Ga1 Pd1 Mg3 68.78(7) . 9 ?
 Mg10 Pd1 Mg1 134.30(3) . . ?
 Ga1 Pd1 Mg1 134.30(3) . . ?
 Mg3 Pd1 Mg1 128.12(5) 9 . ?
 Mg10 Pd1 Mg1 134.30(3) . 52 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 134.30(3) . 52 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 128.12(5) 9 52 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 73.66(6) . 52 ?
 Mg10 Pd1 Mg1 68.51(3) . 16 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 68.51(3) . 16 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 124.32(6) 9 16 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 68.36(5) . 16 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 107.24(4) 52 16 ?
 Mg10 Pd1 Mg1 68.51(3) . 61 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 68.51(3) . 61 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 124.32(6) 9 61 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 107.24(4) . 61 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 68.35(5) 52 61 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 67.40(6) 16 61 ?
 Mg10 Pd1 Mg1 71.93(3) . 54 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 71.93(3) . 54 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 70.57(3) 9 54 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 149.43(2) . 54 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 75.94(6) 52 54 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 125.02(4) 16 54 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 63.39(6) 61 54 ?
 Mg10 Pd1 Mg1 71.93(3) . 5 ?
 Ga1 Pd1 Mg1 71.93(3) . 5 ?
 Mg3 Pd1 Mg1 70.57(3) 9 5 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 75.94(6) . 5 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 149.43(2) 52 5 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 63.39(6) 16 5 ?
 Mg1 Pd1 Mg1 125.02(4) 61 5 ?

Mg1 Pd1 Mg1 134.09(6) 54 5 ?
Mg10 Pd1 Mg2 122.43(2) . 52 ?
Ga1 Pd1 Mg2 122.43(2) . 52 ?
Mg3 Pd1 Mg2 65.83(6) 9 52 ?
Mg1 Pd1 Mg2 101.74(4) . 52 ?
Mg1 Pd1 Mg2 63.51(5) 52 52 ?
Mg1 Pd1 Mg2 168.68(3) 16 52 ?
Mg1 Pd1 Mg2 112.30(5) 61 52 ?
Mg1 Pd1 Mg2 60.95(4) 54 52 ?
Mg1 Pd1 Mg2 120.80(6) 5 52 ?
Mg10 Pd1 Mg2 122.43(2) . . ?
Ga1 Pd1 Mg2 122.43(2) . . ?
Mg3 Pd1 Mg2 65.83(6) 9 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 63.51(5) . . ?
Mg1 Pd1 Mg2 101.74(4) 52 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 112.30(5) 16 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 168.68(3) 61 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 120.80(6) 54 . ?
Mg1 Pd1 Mg2 60.95(4) 5 . ?
Mg2 Pd1 Mg2 65.60(9) 52 . ?
Ga11 Mg2 Pd3 0.0 . . ?
Ga11 Mg2 Pd1 109.14(5) . 9 ?
Pd3 Mg2 Pd1 109.14(5) . 9 ?
Ga11 Mg2 Pd1 109.14(5) . 5 ?
Pd3 Mg2 Pd1 109.14(5) . 5 ?
Pd1 Mg2 Pd1 109.80(4) 9 5 ?
Ga11 Mg2 Pd1 109.14(5) . . ?
Pd3 Mg2 Pd1 109.14(5) . . ?
Pd1 Mg2 Pd1 109.80(4) 9 . ?
Pd1 Mg2 Pd1 109.80(4) 5 . ?
Ga11 Mg2 Mg1 138.20(4) . 9 ?
Pd3 Mg2 Mg1 138.20(4) . 9 ?
Pd1 Mg2 Mg1 53.47(4) 9 9 ?
Pd1 Mg2 Mg1 58.55(4) 5 9 ?
Pd1 Mg2 Mg1 112.57(8) . 9 ?
Ga11 Mg2 Mg1 138.20(4) . . ?
Pd3 Mg2 Mg1 138.20(4) . . ?
Pd1 Mg2 Mg1 58.55(4) 9 . ?
Pd1 Mg2 Mg1 112.57(8) 5 . ?
Pd1 Mg2 Mg1 53.47(4) . . ?
Mg1 Mg2 Mg1 70.51(7) 9 . ?
Ga11 Mg2 Mg1 138.20(4) . 5 ?
Pd3 Mg2 Mg1 138.20(4) . 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 112.57(8) 9 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 53.47(4) 5 5 ?
Pd1 Mg2 Mg1 58.55(4) . 5 ?
Mg1 Mg2 Mg1 70.51(7) 9 5 ?
Mg1 Mg2 Mg1 70.51(7) . 5 ?
Ga11 Mg2 Mg3 77.19(6) . . ?
Pd3 Mg2 Mg3 77.19(6) . . ?
Pd1 Mg2 Mg3 83.73(2) 9 . ?
Pd1 Mg2 Mg3 51.79(3) 5 . ?
Pd1 Mg2 Mg3 161.03(3) . . ?
Mg1 Mg2 Mg3 64.20(5) 9 . ?
Mg1 Mg2 Mg3 132.90(7) . . ?
Mg1 Mg2 Mg3 104.50(5) 5 . ?
Ga11 Mg2 Mg3 77.19(6) . 9 ?

Pd3 Mg2 Mg3 77.19(6) . 9 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 161.03(3) 9 9 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 83.73(2) 5 9 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 51.79(3) . 9 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 132.90(7) 9 9 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 104.50(5) . 9 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 64.20(5) 5 9 ?
 Mg3 Mg2 Mg3 115.23(4) . 9 ?
 Ga11 Mg2 Mg3 77.19(6) . 5 ?
 Pd3 Mg2 Mg3 77.19(6) . 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 51.79(3) 9 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 161.03(3) 5 5 ?
 Pd1 Mg2 Mg3 83.74(2) . 5 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 104.50(5) 9 5 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 64.20(5) . 5 ?
 Mg1 Mg2 Mg3 132.90(7) 5 5 ?
 Mg3 Mg2 Mg3 115.23(4) . 5 ?
 Mg3 Mg2 Mg3 115.23(4) 9 5 ?
 Ga11 Mg2 Mg2 54.7 . 50 ?
 Pd3 Mg2 Mg2 54.7 . 50 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 57.20(4) 9 50 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 109.97(3) 5 50 ?
 Pd1 Mg2 Mg2 140.18(3) . 50 ?
 Mg1 Mg2 Mg2 89.93(4) 9 50 ?
 Mg1 Mg2 Mg2 111.05(3) . 50 ?
 Mg1 Mg2 Mg2 158.95(3) 5 50 ?
 Mg3 Mg2 Mg2 58.26(3) . 50 ?
 Mg3 Mg2 Mg2 131.93(6) 9 50 ?
 Mg3 Mg2 Mg2 58.26(3) 5 50 ?
 Pd1 Mg3 Pd1 169.65(13) 5 6 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 53.99(4) 5 5 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 115.66(10) 6 5 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 53.99(4) 5 5 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 115.66(10) 6 5 ?
 Mg10 Mg3 Ga1 0.00(4) 5 5 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 115.66(10) 5 6 ?
 Pd1 Mg3 Mg10 53.99(4) 6 6 ?
 Mg10 Mg3 Mg10 61.68(7) 5 6 ?
 Ga1 Mg3 Mg10 61.68(7) 5 6 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 115.66(10) 5 6 ?
 Pd1 Mg3 Ga1 53.99(4) 6 6 ?
 Mg10 Mg3 Ga1 61.68(7) 5 6 ?
 Ga1 Mg3 Ga1 61.68(7) 5 6 ?
 Mg10 Mg3 Ga1 0.00(4) 6 6 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.38(4) 5 . ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.75(7) 6 . ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.70(5) 5 . ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.70(5) 5 . ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.50(5) 6 . ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.50(5) 6 . ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.75(7) 5 4 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.38(4) 6 4 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.50(5) 5 4 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.50(5) 5 4 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.70(5) 6 4 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.70(5) 6 4 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 96.15(12) . 4 ?

Pd1 Mg3 Mg2 62.38(4) 5 51 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.75(7) 6 51 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.70(5) 5 51 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.70(5) 5 51 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.50(5) 6 51 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.50(5) 6 51 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.48(7) . 51 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.48(7) 4 51 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 125.75(7) 5 50 ?
 Pd1 Mg3 Mg2 62.38(4) 6 50 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 147.50(5) 5 50 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 147.50(5) 5 50 ?
 Mg10 Mg3 Mg2 107.70(5) 6 50 ?
 Ga1 Mg3 Mg2 107.70(5) 6 50 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.48(7) . 50 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 63.48(7) 4 50 ?
 Mg2 Mg3 Mg2 96.15(12) 51 50 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 58.75(3) 5 9 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 118.50(4) 6 9 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 62.98(4) 5 9 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 62.98(4) 5 9 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 93.34(7) 6 9 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 93.34(7) 6 9 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 56.76(5) . 9 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 148.90(10) 4 9 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 109.28(4) 51 9 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 88.74(4) 50 9 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 118.50(4) 5 11 ?
 Pd1 Mg3 Mg1 58.75(3) 6 11 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 93.34(7) 5 11 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 93.34(7) 5 11 ?
 Mg10 Mg3 Mg1 62.98(4) 6 11 ?
 Ga1 Mg3 Mg1 62.98(4) 6 11 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 148.90(10) . 11 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 56.76(5) 4 11 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 88.74(4) 51 11 ?
 Mg2 Mg3 Mg1 109.28(4) 50 11 ?
 Mg1 Mg3 Mg1 153.34(12) 9 11 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 23 43 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 23 27 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 43 27 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 174.30(6) 23 9 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 43 9 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 27 9 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 23 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 174.30(5) 43 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 27 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 9 5 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 118.83(5) 23 48 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 43 48 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 27 48 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 61.49(5) 9 48 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 5 48 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 23 16 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 43 16 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 118.83(5) 27 16 ?
 Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 9 16 ?

Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 5 16 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 48 16 ?
Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 23 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.83(5) 43 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 27 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 9 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.49(5) 5 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 48 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 16 32 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 23 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.49(5) 43 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 27 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 9 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.83(5) 5 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 48 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 16 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.30(5) 32 18 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 23 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 43 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.49(5) 27 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 9 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 5 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 48 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.30(6) 16 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 32 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 18 38 ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.49(5) 23 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 43 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 27 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.83(5) 9 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 5 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.30(6) 48 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 16 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 32 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 18 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 38 34 ?
Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 23 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 43 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 174.30(6) 27 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 9 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 68.33(4) 5 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 48 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 61.49(5) 16 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 117.05(2) 32 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 59.65(4) 18 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 118.83(5) 38 . ?
Mg1 Ga2 Mg1 114.83(2) 34 . ?
Mg10 Pd2 Mg10 180.0 82_565 34 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.904(10) 82_565 66_655 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.096(10) 34 66_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 82_565 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 34 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 66_655 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 82_565 86_556 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 34 86_556 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 66_655 86_556 ?
Ga1 Pd2 Ga1 180.0 38 86_556 ?

Mg10 Pd2 Mg10 117.096(10) 82_565 18 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.904(10) 34 18 ?
Mg10 Pd2 Mg10 180.0 66_655 18 ?
Ga1 Pd2 Mg10 62.904(10) 38 18 ?
Ga1 Pd2 Mg10 117.096(10) 86_556 18 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.904(10) 82_565 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.096(10) 34 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.904(10) 66_655 86_556 ?
Ga1 Pd2 Mg10 180.0 38 86_556 ?
Ga1 Pd2 Mg10 0.00(4) 86_556 86_556 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.096(10) 18 86_556 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 82_565 18 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 34 18 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 66_655 18 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.904(10) 38 18 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.096(10) 86_556 18 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(4) 18 18 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 86_556 18 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 82_565 66_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 34 66_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(4) 66_655 66_655 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.096(10) 38 66_655 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.904(10) 86_556 66_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 18 66_655 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 86_556 66_655 ?
Ga1 Pd2 Ga1 180.0 18 66_655 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.096(10) 82_565 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.904(10) 34 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 117.096(10) 66_655 38 ?
Ga1 Pd2 Mg10 0.00(4) 38 38 ?
Ga1 Pd2 Mg10 180.0 86_556 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 62.904(10) 18 38 ?
Mg10 Pd2 Mg10 180.0 86_556 38 ?
Ga1 Pd2 Mg10 62.904(10) 18 38 ?
Ga1 Pd2 Mg10 117.096(10) 66_655 38 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(4) 82_565 82_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 34 82_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 66_655 82_565 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.096(10) 38 82_565 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.904(10) 86_556 82_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 18 82_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 86_556 82_565 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.096(10) 18 82_565 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.904(10) 66_655 82_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 38 82_565 ?
Mg10 Pd2 Ga1 180.0 82_565 34 ?
Mg10 Pd2 Ga1 0.00(4) 34 34 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 66_655 34 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.904(10) 38 34 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.096(10) 86_556 34 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 18 34 ?
Mg10 Pd2 Ga1 117.096(10) 86_556 34 ?
Ga1 Pd2 Ga1 62.904(10) 18 34 ?
Ga1 Pd2 Ga1 117.096(10) 66_655 34 ?
Mg10 Pd2 Ga1 62.904(10) 38 34 ?
Ga1 Pd2 Ga1 180.0 82_565 34 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 . 49 ?

Mg2 Pd3 Mg2 70.5 . 52 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 49 52 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 . 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 49 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 52 2 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 . 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 49 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 52 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 2 50 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 . 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 49 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 52 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 2 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 50 3 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 . 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 49 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 52 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 2 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 50 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 3 51 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 . 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 49 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 180.0 52 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 2 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 50 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 109.5 3 4 ?
Mg2 Pd3 Mg2 70.5 51 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 180.0 . 49 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 . 52 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 49 52 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 . 2 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 49 2 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 52 2 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 . 50 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 49 50 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 52 50 ?
Mg2 Ga11 Mg2 180.0 2 50 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 . 3 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 49 3 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 52 3 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 2 3 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 50 3 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 . 51 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 49 51 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 52 51 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 2 51 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 50 51 ?
Mg2 Ga11 Mg2 180.0 3 51 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 . 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 49 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 180.0 52 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 2 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 50 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 109.5 3 4 ?
Mg2 Ga11 Mg2 70.5 51 4 ?

_refine_diff_density_max 0.720

_refine_diff_density_min -2.010
_refine_diff_density_rms 0.233

Literatur

- [1] Encyclopaedia Britannica: W.E. Preece (Hg.), 14. Ed., Chicago u.a. 1973.
- [2] M. Lexer, Mittelhochdeutsches Taschenwörterbuch in der Ausgabe letzter Hand, 2. Nachdruck der 3. Auflage von 1885, Stuttgart 1992.
- [3] V. Biringuccio, De la pirotechnia, Venedig, 1540: Pirotechnia [deutsch], übers. U. Erl. Von O. Johannsen, Braunschweig, 1925.
- [4] G. Agricola, De re metallica, Basel, 1556: Zwölf Bücher vom Berg- und Hüttenwesen, C. Schiffner (Hg.), Düsseldorf 1961, 3. Auflage, Nachdr. 1. Aufl. 1928.
- [5] C.E. Gellert, Anfangsgründe zur metallurgischen Chymie. Leipzig, 1751.
- [6] Fachlexikon ABC Chemie, 3. Überarb. Auflage 1987, Thun und Frankfurt a. M.
- [7] K. Karsten, Pogg. Ann. **46** (1839) 160.
- [8] M. Laue, W. Friedrich und P. Knipping, Sitzber. K. Akad. Wiss., Universität München (1912) 303.
- [9] P. Debeye und P. Scherrer, Phys. Z. **18** (1917) 291.
- [10] A.W. Hull, Phys. Rev. **10** (1917) 661.
- [11] Mary R. Andrews, Phys. Rev. **10** (1921) 245.
- [12] L. Pauling, J. Am. Chem. Soc. **45** (1923) 2777.
- [13] S. Samson, Nature **195** (1962) 259.
- [14] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias und J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 1951
- [15] J. Kepler, [Strena seu de nive sexangula] Vom sechseckigen Schnee, 1. Aufl., Leipzig, 1987.
- [16] R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. **10** (1974) 266.
- [17] A. L. Mackay, Sov. Phys. Crystallogr. **26** (1981) 701.
- [18] C. L. Henley und V. Elser, Phys. Rev. **B32** (1986) L59
- [19] D. Levine und P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 2477.
- [20] J.W. Cahn, D. Gratias und B. Mozer, Phys. Rev. **B38** (1988) 1643.
- [21] J.W. Cahn, D. Gratias und B. Mozer, Phys. Rev. **B38** (1988) 1638.
- [22] J.W. Cahn, D. Gratias und B. Mozer, J. Phys. (Paris) **49** (1988) 1225.
- [23] W. Steurer, Acta Cryst. **B45** (1989) 534.

- [24] N. G. de Bruijn, Kon. Ned. Ak. Wet. **A84** (1981) 39.
- [25] V. E. Korepin, E. Gähler und F. Rhyner, Acta Cryst. **A44** (1988) 667.
- [26] A. Katz und M. Duneau, J. Physique **47** (1986) 181.
- [27] C. Janot, Quasicrystals. A primer. Clarendon Press, Oxford 1992.
- [28] D. Levine und P. J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 2477.
- [29] U. Dehlinger, Z. Krist. **65** (1927) 615.
- [30] C. H. Johansson und J. O. Linde, Ann. Phys. Lpz. **25** (1936) 1.
- [31] A. Janner und T. Janssen, Phys. Rev **B15** (1977) 643.
- [32] A. Janner und T. Janssen, Physica **A99** (1979) 47.
- [33] A. Janner und T. Janssen, Acta Cryst. **A36** (1980) 399.
- [34] A. Janner und T. Janssen, Acta Cryst. **A36** (1980) 408.
- [35] M. Cooper und K. Robinson, Acta Cryst. **20** (1966) 614.
- [36] G. Bergman, J. L. T. Waugh und L. Pauling, Acta Cryst. **10** (1957) 254.
- [37] N. K. Mukhopadhyay, K. Chattopadhyay und S. Ranganathan, Metall. Trans. **A20** (1988) 805.
- [38] J. W. Cahn, D. Gratias und B. Mozer, J. Phys. France **49** (1988) 1225.
- [39] A. Yamamoto und K. Hiraga, Phys. Rev. **B37** (1988) 6207.
- [40] C. Janot, M. DeBoissieu, J. M. Dubois und J. Pannetier, J. Phys.: Condens. Matt. **1** (1988) 1029.
- [41] M. DeBoissieu, C. Janot, J. M. Dubois, M. Audier und B. Dubost, J. Phys.: Condens. Matt **3** (1991) 1.
- [42] S. van Smaalen, J. L. deBoer und Y. Shen, Phys. Rev. **B43** (1991) 929.
- [43] A. Yamamoto, Phys. Rev. **B45** (1992) 5217.
- [44] S. Y. Qiu und M. V. Jaric, J. Non-Crystall. Solids **153 & 154** (1993) 221.
- [45] A. P. Tsai, A. Inoue und T. Matsumoto, Mater. Trans. JIM **30** (1989) 300.
- [46] A. P. Tsai, A. Inoue und T. Matsumoto, Jpn. J. Appl. Phys. **27** (1988) L1587.
- [47] A. P. Tsai, A. Inoue und T. Matsumoto, Mater. Trans. JIM **31** (1990) 98.
- [48] N. Koshikawa, S. Sakamoto, K. Edagawa und S. Takeuchi, Jpn. J. Appl. Phys. **31** (1991) L966.
- [49] W. Steurer, Mater. Sci. Forum **150 - 151** (1994) 15.
- [50] A. Yamamoto, Acta Cryst. **A52** (1996) 509.

- [51] B. Grünbaum und G. C. Shepard. *Tilings and Patterns: An Introduction*. W. H. Freeman and Compyna, New York 1989.
- [52] D. Levine und P. J. Steinhardt, *Phys. Rev.* **B34** (1986) 596.
- [53] M. Gardner, *Sci. Am.* **236** (1977) 110.
- [54] S. Spiekermann, Dissertation Universität Dortmund, Aachen: Shaker, 1999.
- [55] A. Katz und M. Duneau, *J. Physique* **47** (1986) 181.
- [56] M. Duneau und A. Katz, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 2688.
- [57] V. Elser, *Phys. Rev.* **B32** (1985) 4892.
- [58] C. L. Henley, *Phys. Rev.* **B43** (1991) 993.
- [59] J. W. Cahn, D. Gratias und B. Mozer, *J. Phys. France* **49** (1988) 1225.
- [60] C. L. Henley und V. Elser, *Phil. Mag.* **B35** (1986) L59.
- [61] J. E. S. Socolar und P. J. Steinhardt, *Phys. Rev.* **B34** (1986) 617.
- [62] L. Danzer, *Discrete Mathematics* **76** (1989) 1.
- [63] L. Danzer, Z. Papadopolos und K. Talis, *Int.J. Mod.* **B7** (1993) 1379.
- [64] J. Roth, *J. Phys.* **A26** (1993) 1455.
- [65] L. Danzer und A. Talis. In: Behara, Fritsch und Lintz (Hg.), *Symposia Gausiana, Conf. A*, New York (1995).
- [66] J. L. C. Daams, P. Villars und J. H. N. van Vucht, *Atlas of Crystal Structure Types for Intermetallic Phases*. ASM International, Materials Park OH 44073, 1991.
- [67] F. Laves, *Naturwissenschaften* **27** (1939) 65.
- [68] F. Laves und H. Witte, *Metallwissenschaft* **14** (1935) 645.
- [69] D. P. Shoemaker und C. B. Shoemaker. In: M. V. Jaric (Hg.), *Aperiodicity and Order*, Vol. 1, Academic Press Inc., New York (1988), 1.
- [70] D. P. Shoemaker und C. B. Shoemaker, *Acta Cryst.* **B42** (1986) 3.
- [71] F. C. Frank und J. S. Kasper, *Acta Cryst.* **11** (1958) 184.
- [72] F. C. Frank und J. S. Kasper, *Acta Cryst.* **12** (1959) 483.
- [73] Oberflächenkoordination ist definiert als die Anzahl n aller Nachbaratome, die sich um ein Atom herum befinden, das sich auf der äußeren Schale eines bestimmten Polyeders befindet. Siehe auch: W. B. Pearson, *The Crystal Chemistry and Physics of Metals and Alloys*, Wiley-Interscience, New York 1972, 33.
- [74] G. Kreiner und H. F. Franzen, *J. Alloys Comp.* **221** (1995) 15.

- [75] G. Kreiner und S. Spiekermann, *J. Alloys Comp.* **261** (1997) 62.
- [76] G. Kreiner und M. Schäpers, *J. Alloys Comp.* **259** (1997) 83.
- [77] G. Kreiner und H. F. Franzen, *J. Alloys Comp.* **261** (1997) 83.
- [78] K. Sugiyama, N. Kaji und K. Hiraga, *Z. Krist.* **213** (1998) 168.
- [79] G. Cordier und V. Müller, *Z. Kristallogr.* **205** (1993) 133.
- [80] A. L. Mackay, *Acta Cryst.* **15** (1962) 916.
- [81] P. J. Steinhardt, D. R. Nelson und R. Ronchetti, *Phys. Rev.* **B28** (1983) 784.
- [82] M. Goeppert-Mayer, *Phys. Rev.* **75** (1949) 1669L.
- [83] O. Haxel, J. H.D. Jensen und H. E. Suess, *Phys. Rev.* **75** (1949) 1766L.
- [84] W. A. de Heer, W. D. Knight, M. Y. Chou und M. L. Cohen, *Solid-state Phys.* **40** (1987) 93.
- [85] T. P. Martin, T. Bergmann, H. Göhlich und T. Lange, *J. Phys. Chem.* **95** (1991) 6421.
- [86] C. Janot. In: M. de Boissieu, J.-L. Verger-Gaugry und R. Curat (Hg.), *Aperiodic '97*, World Scientific Singapore, 1998, 699.
- [87] R. E. Leuchtner, A. C. Harms und A. W. Cstleman Jr., *J. Chem. Phys.* **91** (1989) 2753.
- [88] S. N. Khanna und P. Jena, *Phys. Rev. Lett.* **B51** (1995) 13705.
- [89] E. J. Gabe, Y. Le Page, J.-P. Charland, F. L. Lee und P. S. White. NRCVAX - An Interactive Programm System for Structuer Analysis. *J. App. Cryst.* **22** (1989) 384.
- [90] Z. Otwinowsky und W. Minor, *Methods in Enzymology* **276** (1997) 307.
- [91] G. M. Sheldrick, SHELXS-86, Programm For The Solution Of Crystal Structures, Göttingen 1986; G. M. Sheldrick, *Acta Cryst.* **A46** (1990) 467.
- [92] A. Altomare, M. C. Burla, M. Camalli, G. L. Cascarano, C. Giacovazzo, A. Guagliardi, A. G. G. Moliterni, G. Polidori und R. Spagna, SIR97: A New Tool For Crystal Structure Determination And Refinement. *J. Appl. Cryst.* **32** (1999) 115.
- [93] G. M. Sheldrick, SHELXS-93, Programm For The Refinement Of Crystal Structures, Göttingen 1993.
- [94] E. Keller, SCHAKAL97, Kristallographisches Institut der Universität Freiburg, Deutschland, 1997.
- [95] S. Wolfram, Mathematica, Wolfram Research Inc., Campaign, IL., USA, 1993.

- [96] ATOMS for Windows 3.1, Eric Dowty, 1995.
- [97] L. M. Gelato und E. Parthé, *J. Appl. Cryst.* **20** (1987) 139.
- [98] L.A. Bendersky und M.J. Kaufman, *Phil. Mag.* **B53** (1986) L75.
- [99] N. Koshikawa, K. Edagawa, Y. Honda und S. Takeuchi, *Phil. Mag. Lett.* **68** (1993) 123.
- [100] S. Samson, *Acta Cryst.* **B28** (1972) 936.
- [101] J.H. Westbrook und R.L. Fleischer (Eds.), *Intermetallic Compounds*, Vol. 1, John Wiley, 1995.
- [102] J. Friedel, *Helv. Phys. Acta* **61** (1988) 538.
- [103] A.P. Tsai, A. Inoue und T. Masumoto, *Mater. Trans., JIM* **30** (1989) 463.
- [104] M. Krajcí und J. Hafner, *Phys. Rev.* **B46** (1992) 10669
- [105] U. Mizutani, Y. Yamada, K. Hashimoto, E. Belin, A. Sadoc, T. Yamauchi und T. Matsuda, *J. Phys.: Condens. Matter* **6** (1994) 7335.
- [106] M.J. Wheeler G. Blankenburgs und R.W. Staddon, *Nature* **207** (1965) 746.
- [107] G. Kreiner und S. Spiekermann, *J. Alloys and Comp.* [Ag-Al-Mg II.]
- [108] J.L. Libbert, K.F. Kelton, A.I. Goldman und W.B. Yelon, *Phys. Rev.* **B49** (1994) 11675.
- [109] A.V. Arakcheeva, O.G. Karpinskii, V.E. Kolesnichenko, *Sov. Phys. Crystallogr.* **33** (1988) 907.
- [110] K. Cenzual, B. Chabot, E. Parthé, *Acta Cryst.* **C41** (1985) 313.
- [111] M. Quiquandon, A. Quivy, Y. Calvayrac, F. Faudot, L. Bresson, A. Katz und D. Gratias, *GDR-SPQK Joint Colloquium*, Strasbourg 1998.
- [112] A. Quivy, M. Quiquandon, Y. Calvayrac, F. Faudot, D. Gratias, C. Berger, R. A. Brand, V. Simonet und F. Hippert, *J. Phys.: Condens. Matter* **8** (1996) 4223.
- [113] N. Koshikawa, K. Edagawa und S. Takeuchi, *Mat. Sci. & Eng.* **A181/A182** (1994) 811.
- [114] T. Takeuchi, U. Mizutani, S. Yamaguchi, T. Fukunaga und T. Mizuno, *Phys. Rev.* **B58** (1998) 11345.
- [115] S. Samson, *Acta Cryst.* **B28** (1972) 936.
- [116] M.V. Prokofev, V.E. Kolesnichenko und V.V. Karonik, *Inorg. Mater.* **21** (1985) 1168.

- [117] P. Villars, L. D. Calvert (Hrsg.), Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases, ASM International, Metals Park, Ohio, 2nd edition, 1991.