## Supplementary atomic coordinates of some key structures:

```
5.9%-HEA(111)
   1.000000000000000
    10.5600004195999997
                            0.0000000000000000
                                                   0.00000000000000000
     5.2800002097999998
                            9.1452286273999999
                                                   0.00000000000000000
     0.00000000000000000
                            0.0000000000000000
                                                  22.00000000000000000
   Pt
        Fe
                        Ni
             Co
                   Cu
    32
          13
                 10
                       13
                             12
Direct
  0.7866955608705455
                      0.8792044975121758
                                           0.3175808625878520
                      0.8830759499196502
  0.0418308564857226
                                           0.3158791456068304
  0.2789186495124180
                      0.3812235485499275
                                           0.3197460385463542
  0.8737165499545997
                      0.9621321433744678
                                           0.4245676320617704
  0.1214275202434205
                      0.4624754585335132
                                           0.4280095400050535
  0.1240179580814707
                      0.9615625048004561
                                           0.4218278807601187
  0.8734751351958615
                      0.4600962361380234
                                           0.4266690346097864
  0.3740907078762025
                      0.9601775316192104
                                           0.4204861524722942
  0.8733090230011947
                      0.2114037980188913
                                           0.4206039990110941
                                           0.4224017627726728
  0.1248815315729999
                      0.2110912147065346
  0.6239527528920046
                      0.9610701240522634
                                           0.4239794270420173
  0.8735573264723734
                      0.7110750306028916
                                           0.4267115688478330
  0.3740744316750741
                      0.2094355836928070
                                           0.4250190515285985
  0.3747736242329639
                      0.7123878828839542
                                           0.4243718634276460
  0.6250233071194520
                      0.4615668075608913
                                           0.4228434414042465
  0.1235535120068129
                      0.7112530855774848
                                           0.4266143729385040
  0.6244071883554327
                      0.2107178540197893
                                           0.4219107611887854
  0.5480331280459114
                      0.3760749439603601
                                           0.3172115450582432
  0.5339200346521665
                      0.1248316745336111
                                           0.3149471333925754
  0.5470002567309411
                      0.1235332521918851
                                           0.0399417999792641
  0.1208089481838826
                      0.4601783015997043
                                           0.1280394984827537
  0.0429215414748025
                      0.1371190363105959
                                           0.3139924551932819
  0.0424414900737916
                      0.1302099981135529
                                           0.0329802953695375
  0.1304832192218990
                      0.9579853651904472
                                           0.1318324513652442
  0.3739378913464741
                                           0.4269096073707236
                      0.4616784405866258
  0.4545409546924842
                      0.5457192756245021
                                           0.2188518202987367
  0.6222270952484268
                      0.7115633672883623
                                           0.4241398446441191
  0.9557150112780803
                      0.7901309279847157
                                           0.2210448635643216
  0.7936456872174327
                      0.6228807728370108
                                           0.3191411487033626
  0.2915147773321587
                      0.6314372181231120
                                           0.3185821011048740
  0.2026302282532692
                      0.2805717472662115
                                           0.2254649220963286
  0.7064516142076765
                      0.5493905794579688
                                           0.2207507679886420
  0.0400757068763293
                      0.6313466213986089
                                           0.3256202375890569
  0.7973180911857300
                      0.8616265572046822
                                           0.0420760910781761
  0.0560985910251621
                      0.8657185943726389
                                           0.0377408024139789
  0.0464128728296122
                      0.6281990126391532
                                           0.0369911384080026
  0.6273755757357057
                      0.2222416784154088
                                           0.1287505962321819
```

0.3821141315825324	0.9550040284741640	0.1298830475232643
0.0352966908963618	0.3839556480413341	0.3245221470782765
0.0311405267505630	0.3816759960279116	0.0375046088689482
0.8722404389414802	0.2153943248380508	0.1282949969568862
0.9547121146412580	0.5451880757532641	0.2238905465224089
0.2963477552667665	0.1159381207168453	0.3214123985237181
0.5397901687438148	0.6304762615550641	0.3223206516584783
0.2952537777573352	0.1193869715977776	0.0394092290051724
0.5482511333460868	0.6253176515919384	0.0436557828226837
0.2955313611129770	0.3794825008886505	0.0388921565765087
0.6254873592740272	0.9499576153305589	0.1320861515426503
0.7063418941376099	0.7943482474531584	0.2201040810409905
0.8657230809026896	0.7055915708183955	0.1288086150341889
0.6261967559753983	0.4601083651772431	0.1271035316941006
0.2974994334049239	0.8757804131260595	0.3179488423833239
0.3058183792095300	0.8681273535779789	0.0402965921580058
0.6267113460396334	0.7146527937796420	0.1282718373779367
0.2238985663360460	0.0282395707652511	0.2273103066600564
0.5426930146743730	0.3810225683391800	0.0346170130491015
0.3782499856636635	0.2053095451198300	0.1325912588926681
0.1361840205673691	0.7049738332520920	0.1317829863304705
0.7048694108175633	0.0502839582141930	0.2203633218762522
0.7924544449592754	0.1300869471321136	0.3168798477854691
0.5378510221786829	0.8733305506119454	0.3167983874264148
0.7965506180300537	0.1231154660588082	0.0345346489215057
0.5461463374709618	0.8704875427066201	0.0358963983795519
0.2072223479365503	0.5428206522703709	0.2241705479812726
0.9515132437925310	0.2967218890121097	0.2212922910368358
0.8718576990596274	0.9638570180222641	0.1289765751150571
0.7142109858861703	0.2900443576212550	0.2233456813423590
0.4576441343993998	0.2914717494979414	0.2208305283948577
0.8758100826512220	0.4565068959116802	0.1279466825133640
0.1276916528003058	0.2069238958546323	0.1287633622288855
0.7922909547094094	0.6217683887307786	0.0402482254018294
0.2978485906329956	0.6254074402968374	0.0420896375614645
0.3856750788570704	0.7114654717231881	0.1289187271216785
0.3820764845374152	0.4516090485206886	0.1264952625703708
0.7925069304056553	0.3792461951626670	0.3203221183388076
0.7909247997102078	0.3772595911578204	0.0394562840913370
0.9555996101377208	0.0529344377675856	0.2214324969807444
0.4575573979138599	0.7971559299409201	0.2244088666744103
0.2131500369791654	0.7976872161537959	0.2245790410596954
0.4623985897492356	0.0302163017453282	0.2220026953531440

H<sup>A</sup>-5.9%-HEA(111) 1.00000000000000000

```
10.5600004195999997
                            0.00000000000000000
                                                   0.00000000000000000
     5.2800002097999998
                            9.1452286273999999
                                                   0.00000000000000000
                                                  22.0000000000000000
     0.00000000000000000
                            0.00000000000000000
   Pt
        Fe
             Co
                   Cu
                        Ni
                              Η
                       13
                              12
    32
          13
                 10
                                     1
Selective dynamics
Direct
  0.7863864729633794
                       0.8786927382514871
                                            0.3172911686051222
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  Т
                                                                      Т
                                                                           T
  0.0424541453863420
                       0.8814743287112409
                                            0.3163571478987051
  0.2781392292492300
                       0.3811292466494839
                                            0.3203619430639992
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8739346192915710
                       0.9619999578682965
                                            0.4238678014402876
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1208491581427452
                       0.4600203468818858
                                            0.4307173995771355
                                                                  T
  0.1245737711934627
                       0.9621204633940592
                                            0.4218174207069630
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8744629861414973
                       0.4594349614721486
                                            0.4270601689983972
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.3740571365910505
                       0.9600421285492720
                                            0.4205142606715712
  0.8737826612213616
                       0.2109557383176397
                                            0.4203019016814601
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1253659406203005
                       0.2106696775963250
                                            0.4227306892367478
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6245098288554671
                       0.9602727749761164
                                            0.4243301689792294
                                                                      T
                                                                           Т
                       0.7108422082036119
                                            0.4259590119642521
                                                                  Т
  0.8724539594607013
                                                                           T
  0.3756359337175666
                       0.2068303822966845
                                            0.4245304045011966
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                      T
                                                                           T
  0.3766255669534950
                       0.7134314008561090
                                            0.4228139224688238
                                                                  T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6264662315380809
                       0.4610914989076234
                                            0.4225356395181736
                                                                           T
  0.1223064345399627
                       0.7142051366838007
                                            0.4287599909039299
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.6252256269975756
                       0.2096441626357571
                                            0.4220987202179937
  0.5466056887207555
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                       0.3760723318958507
                                            0.3177059896138326
                                                                           T
  0.5340608738459265
                       0.1247188477715536
                                            0.3149373073517697
                                                                  T
                                                                      T
                       0.1235332521939583
                                            0.0399417999772709
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.5470002567308043
                                                                      F
                                                                           F
  0.1208089481832886
                       0.4601783015999317
                                            0.1280394984818187
                                                                  F
  0.0427534565143114
                       0.1362638962218582
                                            0.3140147394850957
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                      F
                                                                          F
  0.0424414900706935
                       0.1302099981111695
                                           0.0329802953681835
                                                                 F
                                                                      F
                                                                           F
  0.1304832192178935
                       0.9579853651937356
                                            0.1318324513636355
                                                                  F
  0.3778914982165423
                       0.4595086279807109
                                            0.4293601716702968
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.4545409546936767
                       0.5457192756283078
                                            0.2188518203000029
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6232439038244187
                       0.7105771241355123
                                            0.4239160305046009
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.9557150112739734
                       0.7901309279847197
                                            0.2210448635636340
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.7941215322031610
                       0.6217867563165573
                                            0.3189757736774712
  0.2910767516735879
                                                                      T
                                                                           T
                       0.6303409502345666
                                            0.3186483304403771
                                                                  T
                       0.2805717472619946
                                                                      F
                                                                           F
  0.2026302282546482
                                            0.2254649220954548
                                                                  F
  0.7064516142104935
                       0.5493905794598390
                                            0.2207507679909071
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  Т
                                                                      T
                                                                           T
  0.0405190135990850
                       0.6296922377750217
                                            0.3261186336688357
  0.7973180911857654
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                       0.8616265572072663
                                            0.0420760910772700
  0.0560985910286504
                       0.8657185943694543
                                            0.0377408024136372
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.0464128728304587
                       0.6281990126400245
                                            0.0369911384090926
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.6273755757405439
                       0.2222416784103771
                                            0.1287505962318178
  0.3821141315863983
                       0.9550040284758836
                                            0.1298830475227248
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                      Т
                                                                           T
  0.0353634793113642
                       0.3830453105567624
                                            0.3248752376728922
                                                                  Т
```

0.0311405267529068	0.3816759960316460	0.0375046088681827	F	F	F
0.8722404389362310	0.2153943248393162	0.1282949969590916	F	F	F
0.9547121146441953	0.5451880757537140	0.2238905465227248	F	F	F
0.2959708138016640	0.1160703742261619	0.3212035063293723	T	T	T
0.5400861484743673	0.6295940320176936	0.3216860120179791	T	T	T
0.2952537777580275	0.1193869715983666	0.0394092290045478	F	F	F
0.5482511333458362	0.6253176515966246	0.0436557828227251	F	F	F
0.2955313611175683	0.3794825008859988	0.0388921565772762	F	F	F
0.6254873592728032	0.9499576153264400	0.1320861515409106	F	F	F
0.7063418941412323	0.7943482474494772	0.2201040810409083	F	F	F
0.8657230808985474	0.7055915708183349	0.1288086150363625	F	F	F
0.6261967559749806	0.4601083651744915	0.1271035316954539	F	F	F
0.2978600675896851	0.8748512607668532	0.3177064464643907	T	T	T
0.3058183792080129	0.8681273535812224	0.0402965921590877	F	F	F
0.6267113460374674	0.7146527937769136	0.1282718373772695	F	F	F
0.2238985663333324	0.0282395707665799	0.2273103066590920	F	F	F
0.5426930146679965	0.3810225683434538	0.0346170130500028	F	F	F
0.3782499856614123	0.2053095451189151	0.1325912588909119	F	F	F
0.1361840205679030	0.7049738332493618	0.1317829863318210	F	F	F
0.7048694108137141	0.0502839582186283	0.2203633218772723	F	F	F
0.7921221436669490	0.1296495265016222	0.3168144943024288	T	T	T
0.5380355299888078	0.8731031329976769	0.3169982221218692	T	T	T
0.7965506180334998	0.1231154660613569	0.0345346489227296	F	F	F
0.5461463374708515	0.8704875427114658	0.0358963983818157	F	F	F
0.2072223479328272	0.5428206522718000	0.2241705479818208	F	F	F
0.9515132437870619	0.2967218890154157	0.2212922910363631	F	F	F
0.8718576990639662	0.9638570180181532	0.1289765751136329	F	F	F
0.7142109858849466	0.2900443576175675	0.2233456813409092	F	F	F
0.4576441344000983	0.2914717494993724	0.2208305283954530	F	F	F
0.8758100826533664	0.4565068959120069	0.1279466825136382	F	F	F
0.1276916528005785	0.2069238958586865	0.1287633622272750	F	F	F
0.7922909547091166	0.6217683887271619	0.0402482253999992	F	F	F
0.2978485906287958	0.6254074402977565	0.0420896375636346	F	F	F
0.3856750788553356	0.7114654717221427	0.1289187271227306	F	F	F
0.3820764845414715	0.4516090485180371	0.1264952625681843	F	F	F
0.7921053057065153	0.3787773570648846	0.3204554559827166	T	T	T
0.7909247997136220	0.3772595911558838	0.0394562840909103	F	F	F
0.9555996101362965	0.0529344377623957	0.2214324969818193	F	F	F
0.4575573979143996	0.7971559299412050	0.2244088666727251	F	F	F
0.2131500369795702	0.7976872161559072	0.2245790410590942	F	F	F
0.4623985897484246	0.0302163017414401	0.2220026953545471	F	F	F
0.2174564833188864	0.5516315544932382	0.4760110588745085	T	T	T

H<sup>B</sup>-5.9%-HEA(111)

1.000000000000000

5.280000209799998 9.1452286273999999 0.000000000000000000.000000000000000000.0000000000000000022.00000000000000000 Pt Fe Co Cu Ni Η 32 13 10 13 12 1 Selective dynamics Direct 0.8791792235412013 0.3172317720309701 T T T 0.7868336906576296 0.0429681390769490 0.8833672847310937 0.3160753491095518 T T T T T T 0.2791584798805685 0.3808469582831979 0.3196318315725933 0.8733247877029434 0.9614296356894347 0.4230525017031206 T T T T T 0.1222708349940893 0.4631843694538332 0.4284257638356053 T T T 0.1261367409210747 0.9586925542520320 0.4245581898821650 T 0.4627872575438300 Т T T 0.8732292171824115 0.4263827889227591 0.3769610335502833 0.9594528511879395 T T T 0.4194136680728516 T Т T 0.8711568641247169 0.2137902520132504 0.4243965398555938 0.2135491623688829 T T T 0.1277024451576383 0.4246587742590180 0.6251243129209767 0.9612304925732577 0.4241587286766439 T T T T T T 0.8745810291309083 0.7112428804103860 0.4271658371207988 T T 0.3752580487784625 0.2094277723954034 0.4248052547995912 T T 0.3760143607747835 0.7126052455050917 0.4236072890326305 T T T T 0.6256699514568342 0.4619836431551934 0.4225965757865992 T T T T 0.1246501261529845 0.7104675483443696 0.4267305248177026 0.6249196341353066 0.2111486216144178 0.4220329091124903 Т T T T T T 0.5488765230956323 0.3755851982894909 0.3171245092690341 T T T 0.5346260086922461 0.1247745217206027 0.3149681683894240 0.5470002567308043 0.1235332521939583 0.0399417999772709F F F F F F 0.1208089481832886 0.4601783015999317 0.1280394984818187 T T 0.0430441217170356 0.1371727576355770 0.3149509970535340 T 0.0424414900706935 0.1302099981111695 0.0329802953681835 F F F 0.1304832192178935 0.9579853651937356 0.1318324513636355 F F F T 0.3745933395253607 0.4261126366934170 T T 0.4619421029614944 0.4545409546936767 0.5457192756283078 0.2188518203000029 F F F 0.6232587124490727 0.7116330585310450 0.4240032536226285 Τ T T F F 0.9557150112739734 0.7901309279847197 0.2210448635636340 F 0.7942246176388154 0.6227141756730149 T T T 0.3189604564732547 T T T 0.2916939031092237 0.6311737312933352 0.3183424938107259 F 0.2026302282546482 0.2805717472619946 0.2254649220954548 F F 0.7064516142104935 0.2207507679909071 F F 0.5493905794598390 F 0.63091163094673720.0404673737058591 0.3255371208425424 Τ T T F F 0.7973180911857654 0.8616265572072663 0.0420760910772700 F F F 0.0560985910286504 0.8657185943694543 0.0377408024136372 F 0.0464128728304587 0.6281990126400245 0.0369911384090926 F F F 0.6273755757405439 0.2222416784103771 0.1287505962318178 F F F F F F 0.3821141315863983 0.9550040284758836 0.1298830475227248 0.0358631559802783 0.3834600858216325 0.3249627304423422 T T T F 0.0311405267529068 0.3816759960316460 0.0375046088681827 F F

0.8722404389362310	0.2153943248393162	0.1282949969590916	F	F	F
0.9547121146441953	0.5451880757537140	0.2238905465227248	F	F	F
0.2962349524481308	0.1164452108305508	0.3213265617830132	T	T	T
0.5404466121676799	0.6300218210093343	0.3218555474023013	T	T	T
0.2952537777580275	0.1193869715983666	0.0394092290045478	F	F	F
0.5482511333458362	0.6253176515966246	0.0436557828227251	F	F	F
0.2955313611175683	0.3794825008859988	0.0388921565772762	F	F	F
0.6254873592728032	0.9499576153264400	0.1320861515409106	F	F	F
0.7063418941412323	0.7943482474494772	0.2201040810409083	F	F	F
0.8657230808985474	0.7055915708183349	0.1288086150363625	F	F	F
0.6261967559749806	0.4601083651744915	0.1271035316954539	F	F	F
0.2983393162680389	0.8752351844091405	0.3175210646484599	T	T	T
0.3058183792080129	0.8681273535812224	0.0402965921590877	F	F	F
0.6267113460374674	0.7146527937769136	0.1282718373772695	F	F	F
0.2238985663333324	0.0282395707665799	0.2273103066590920	F	F	F
0.5426930146679965	0.3810225683434538	0.0346170130500028	F	F	F
0.3782499856614123	0.2053095451189151	0.1325912588909119	F	F	F
0.1361840205679030	0.7049738332493618	0.1317829863318210	F	F	F
0.7048694108137141	0.0502839582186283	0.2203633218772723	F	F	F
0.7935974364846596	0.1304941977956216	0.3173947424160786	T	T	T
0.5385969786639159	0.8732190653378223	0.3166732653241142	T	T	T
0.7965506180334998	0.1231154660613569	0.0345346489227296	F	F	F
0.5461463374708515	0.8704875427114658	0.0358963983818157	F	F	F
0.2072223479328272	0.5428206522718000	0.2241705479818208	F	F	F
0.9515132437870619	0.2967218890154157	0.2212922910363631	F	F	F
0.8718576990639662	0.9638570180181532	0.1289765751136329	F	F	F
0.7142109858849466	0.2900443576175675	0.2233456813409092	F	F	F
0.4576441344000983	0.2914717494993724	0.2208305283954530	F	F	F
0.8758100826533664	0.4565068959120069	0.1279466825136382	F	F	F
0.1276916528005785	0.2069238958586865	0.1287633622272750	F	F	F
0.7922909547091166	0.6217683887271619	0.0402482253999992	F	F	F
0.2978485906287958	0.6254074402977565	0.0420896375636346	F	F	F
0.3856750788553356	0.7114654717221427	0.1289187271227306	F	F	F
0.3820764845414715	0.4516090485180371	0.1264952625681843	F	F	F
0.7933859952796237	0.3793184792860648	0.3208252598900940	T	T	T
0.7909247997136220	0.3772595911558838	0.0394562840909103	F	F	F
0.9555996101362965	0.0529344377623957	0.2214324969818193	F	F	F
0.4575573979143996	0.7971559299412050	0.2244088666727251	F	F	F
0.2131500369795702	0.7976872161559072	0.2245790410590942	F	F	F
0.4623985897484246	0.0302163017414401	0.2220026953545471	F	F	F
0.0380568214865442	0.1213547913160932	0.4698470382375277	T	T	T

 $H^{B}$ - $H^{A}$ -5.9%-HEA(111)

1.000000000000000

 $\begin{array}{cccc} 10.5600004195999997 & 0.00000000000000 & 0.00000000000000 \\ 5.2800002097999998 & 9.145228627399999 & 0.0000000000000000 \end{array}$ 

```
0.00000000000000000
                            0.00000000000000000
                                                  22.00000000000000000
   Pt
        Fe
             Co
                   Cu
                        Ni
                              Η
                              12
                                     2
    32
          13
                 10
                       13
Selective dynamics
Direct
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.7867370600168689
                       0.8792553247412855
                                            0.3171210749421370
                       0.8817950252104866
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0431609599898056
                                            0.3167819017554419
  0.2779543832991407
                       0.3813862253123076
                                            0.3199579882003093
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8728014039853046
                       0.9616421462334269
                                            0.4231941417701491
  0.1202762561430734
                       0.4612768924150766
                                            0.4302882959138817
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1260932011349592
                       0.9591616839223676
                                           0.4250026144869347
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
  0.8733985910110619
                       0.4615285692821643
                                           0.4260875966274302
                                                                  Τ
                       0.9594342785168857
                                            0.4196445643849945
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.3763822980583795
                                            0.4244398851614154
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8707194208854399
                       0.2132640074170684
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.1274414715957723
                       0.2131426652357528
                                            0.4237744059002587
  0.6250453712511673
                                           0.4245401317034999
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                       0.9605820830886922
  0.8728489886171849
                       0.7112142679372784
                                           0.4255267872910110
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.3762479155542993
                       0.2067942411918023
                                           0.4234325023788779
                                                                      T
                                                                           T
  0.3768139062624532
                       0.7139377024575988
                                            0.4219578976380247
                                                                  T
                                                                           T
  0.6261177872604256
                       0.4619393844665551
                                            0.4220997587106782
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1221903898331536
                       0.7138677112247073
                                           0.4287979671063021
                                                                  Τ
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6251636729987753
                       0.2100127227499373
                                            0.4217780442883452
                                                                           T
  0.5470985628073848
                       0.3763352750025301
                                            0.3174577850656869
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                       0.1251341310549951
                                                                  T
                                                                      T
  0.5345590753160391
                                            0.3145636001563347
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.5470002567308043
                       0.1235332521939583
                                            0.0399417999772709
  0.1208089481832886
                       0.4601783015999317
                                            0.1280394984818187
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.0426042839541886
                       0.1359062417286684
                                            0.3150371099111689
                                                                      F
                                                                          F
  0.0424414900706935
                       0.1302099981111695
                                           0.0329802953681835
                                                                 F
  0.1304832192178935
                       0.9579853651937356
                                            0.1318324513636355
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                      T
                                                                           T
  0.3782912362264606
                       0.4597261086622941
                                            0.4289514484249175
                                                                  T
                                                                           F
                       0.5457192756283078
                                            0.2188518203000029
                                                                  F
                                                                      F
  0.4545409546936767
                       0.7111035905538623
                                           0.4242057598724089
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6231884072987813
  0.9557150112739734
                       0.7901309279847197
                                           0.2210448635636340
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.7936907342156454
                       0.6227772255881523
                                            0.3187858793361220
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.2910100980095377
                       0.6303901080959436
                                            0.3184566063899649
                                                                      F
                                                                           F
  0.2026302282546482
                       0.2805717472619946
                                            0.2254649220954548
                                                                  F
  0.7064516142104935
                       0.5493905794598390
                                            0.2207507679909071
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0406734632162143
                       0.6298203229771940
                                           0.3255329348671557
  0.7973180911857654
                       0.8616265572072663
                                           0.0420760910772700
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                       0.8657185943694543
                                            0.0377408024136372
  0.0560985910286504
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
  0.0464128728304587
                       0.6281990126400245
                                            0.0369911384090926
  0.6273755757405439
                       0.2222416784103771
                                            0.1287505962318178
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.3821141315863983
                       0.9550040284758836
                                            0.1298830475227248
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0349654221823151
                       0.3826857049055385
                                            0.3242264316260091
  0.0311405267529068
                       0.3816759960316460
                                            0.0375046088681827
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                           F
  0.8722404389362310
                       0.2153943248393162
                                            0.1282949969590916
                                                                  F
                                                                      F
```

0.9547121146441953	0.5451880757537140	0.2238905465227248	F	F	F
0.2959891791836000	0.1161558161657059	0.3210479118156222	T	T	T
0.5402951988869072	0.6302212339276144	0.3212356499909910	T	T	T
0.2952537777580275	0.1193869715983666	0.0394092290045478	F	F	F
0.5482511333458362	0.6253176515966246	0.0436557828227251	F	F	F
0.2955313611175683	0.3794825008859988	0.0388921565772762	F	F	F
0.6254873592728032	0.9499576153264400	0.1320861515409106	F	F	F
0.7063418941412323	0.7943482474494772	0.2201040810409083	F	F	F
0.8657230808985474	0.7055915708183349	0.1288086150363625	F	F	F
0.6261967559749806	0.4601083651744915	0.1271035316954539	F	F	F
0.2984953469432047	0.8750342951076260	0.3171936272326141	T	T	T
0.3058183792080129	0.8681273535812224	0.0402965921590877	F	F	F
0.6267113460374674	0.7146527937769136	0.1282718373772695	F	F	F
0.2238985663333324	0.0282395707665799	0.2273103066590920	F	F	F
0.5426930146679965	0.3810225683434538	0.0346170130500028	F	F	F
0.3782499856614123	0.2053095451189151	0.1325912588909119	F	F	F
0.1361840205679030	0.7049738332493618	0.1317829863318210	F	F	F
0.7048694108137141	0.0502839582186283	0.2203633218772723	F	F	F
0.7931550071335546	0.1304780232909614	0.3173364781708886	T	T	T
0.5384994404146519	0.8736024569285312	0.3167726777712634	T	T	T
0.7965506180334998	0.1231154660613569	0.0345346489227296	F	F	F
0.5461463374708515	0.8704875427114658	0.0358963983818157	F	F	F
0.2072223479328272	0.5428206522718000	0.2241705479818208	F	F	F
0.9515132437870619	0.2967218890154157	0.2212922910363631	F	F	F
0.8718576990639662	0.9638570180181532	0.1289765751136329	F	F	F
0.7142109858849466	0.2900443576175675	0.2233456813409092	F	F	F
0.4576441344000983	0.2914717494993724	0.2208305283954530	F	F	F
0.8758100826533664	0.4565068959120069	0.1279466825136382	F	F	F
0.1276916528005785	0.2069238958586865	0.1287633622272750	F	F	F
0.7922909547091166	0.6217683887271619	0.0402482253999992	F	F	F
0.2978485906287958	0.6254074402977565	0.0420896375636346	F	F	F
0.3856750788553356	0.7114654717221427	0.1289187271227306	F	F	F
0.3820764845414715	0.4516090485180371	0.1264952625681843	F	F	F
0.7927813089829038	0.3789657790969365	0.3206408807389557	T	T	T
0.7909247997136220	0.3772595911558838	0.0394562840909103	F	F	F
0.9555996101362965	0.0529344377623957	0.2214324969818193	F	F	F
0.4575573979143996	0.7971559299412050	0.2244088666727251	F	F	F
0.2131500369795702	0.7976872161559072	0.2245790410590942	F	F	F
0.4623985897484246	0.0302163017414401	0.2220026953545471	F	F	F
0.0353353331325524	0.1200953101005297	0.4702056418835970	T	T	T
0.2164788766809596	0.5503149349063703	0.4752074984114062	T	T	T

H<sup>B</sup>-H<sup>C</sup>-5.9%-HEA(111) 1.00000000000000000

 $\begin{array}{cccc} 10.5600004195999997 & 0.00000000000000 & 0.00000000000000 \\ 5.2800002097999998 & 9.145228627399999 & 0.0000000000000000 \end{array}$ 

```
0.00000000000000000
                            0.00000000000000000
                                                  22.00000000000000000
   Pt
        Fe
             Co
                   Cu
                        Ni
                              Η
                              12
                                     2
    32
          13
                 10
                       13
Selective dynamics
Direct
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.7875040261028398
                       0.8804976982017575
                                            0.3173285362573391
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
  0.0436252560731296
                       0.8851580311280337
                                            0.3175275338238245
  0.2789862314286780
                       0.3817163248207019
                                            0.3195416089223203
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  Т
                                                                      Т
                                                                           T
  0.8726629423971615
                       0.9630488554631367
                                            0.4230189361781175
                                            0.4286886795615442
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1221735360360466
                       0.4646568617594358
                                                                      T
                                                                           T
  0.1245051735144798
                       0.9622732779626265
                                            0.4341055238194059
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8740114326404270
                       0.4631687977700990
                                           0.4269390386257611
                                                                  T
                       0.9611803246935980
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
  0.3785831713649286
                                           0.4263079481284040
                                            0.4275449407275513
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8710482318018455
                       0.2164202097594614
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.1255261756102307
                       0.2168014511368336
                                           0.4208248652129694
  0.6243130055348359
                                            0.4229963096899514
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                       0.9623130546024579
  0.8745234729627004
                       0.7127172258453752
                                            0.4263358800671443
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                       0.2118060253803895
                                            0.4252092701569797
  0.3751593484835151
                                                                      T
                                                                           T
  0.3763936144575988
                       0.7125736334301349
                                            0.4217393472086494
                                                                  T
                                                                           T
  0.6264491777116515
                       0.4629995466112859
                                           0.4220594430360568
                                                                  T
                                                                      T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1248614432585309
                       0.7101986216968431
                                            0.4258558623088102
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6238948119077485
                       0.2132438122643993
                                            0.4217406697616584
                                                                           T
  0.5484653337089770
                       0.3762128334263807
                                            0.3171342140218466
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.5333874769664376
                       0.1256477699745292
                                            0.3148012065550850
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.5470002567308043
                       0.1235332521939583
                                            0.0399417999772709
  0.1208089481832886
                       0.4601783015999317
                                            0.1280394984818187
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0421369146254052
                       0.1373360478877831
                                            0.3150986722824408
                                                                      F
                                                                          F
  0.0424414900706935
                       0.1302099981111695
                                           0.0329802953681835
                                                                 F
  0.1304832192178935
                       0.9579853651937356
                                            0.1318324513636355
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                           T
  0.3741719736597089
                       0.4639835052679979
                                            0.4262005632479287
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           F
                       0.5457192756283078
                                            0.2188518203000029
                                                                  F
                                                                      F
  0.4545409546936767
  0.6239355896252957
                       0.7124043258888875
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                            0.4235994862412664
  0.9557150112739734
                       0.7901309279847197
                                           0.2210448635636340
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.7938476105855070
                       0.6240328322032979
                                            0.3189538082224940
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.2913724406864178
                       0.6326436989712357
                                            0.3180475522994515
                                                                      F
                                                                           F
  0.2026302282546482
                       0.2805717472619946
                                            0.2254649220954548
                                                                  F
  0.7064516142104935
                       0.5493905794598390
                                            0.2207507679909071
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0405774756193292
                       0.6322028441729953
                                            0.3250751251222266
  0.7973180911857654
                       0.8616265572072663
                                           0.0420760910772700
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                       0.8657185943694543
  0.0560985910286504
                                            0.0377408024136372
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
  0.0464128728304587
                       0.6281990126400245
                                            0.0369911384090926
                       0.2222416784103771
  0.6273755757405439
                                            0.1287505962318178
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.3821141315863983
                       0.9550040284758836
                                            0.1298830475227248
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           Τ
  0.0350251768874855
                       0.3850444119711764
                                           0.3240479858042460
  0.0311405267529068
                       0.3816759960316460
                                            0.0375046088681827
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                           F
  0.8722404389362310
                       0.2153943248393162
                                            0.1282949969590916
                                                                  F
                                                                      F
```

0.247766956517910	6 -0.0366973570717205	0.4822069227689301	T	T	T
-0.020458058625776	7 0.0818932643747370	0.4812112379705145	T	T	T
0.462398589748424	6 0.0302163017414401	0.2220026953545471	F	F	F
0.213150036979570	0.7976872161559072	0.2245790410590942	F	F	F
0.457557397914399		0.2244088666727251	F	F	F
0.955599610136296		0.2214324969818193	F	F	F
0.790924799713622		0.0394562840909103	F	F	F
0.793826718756135		0.3207465342805089	T	T	T
0.382076484541471		0.1264952625681843	F	F	F
0.385675078855335		0.1289187271227306	F	F	F
0.297848590628795		0.0420896375636346	F	F	F
0.792290954709116		0.0402482253999992	F	F	F
0.127691652800578		0.1287633622272750	F	F	F
0.875810082653366		0.1279466825136382	F	F	F
0.457644134400098		0.2208305283954530	F	F	F
0.714210985884946		0.2233456813409092	F	F	F
0.871857699063966		0.1289765751136329	F	F	F
0.951513243787061		0.2212922910363631	F	F	F
0.207222347932827		0.2241705479818208	F	F	F
0.546146337470851		0.0358963983818157	F	F	F
0.796550618033499		0.0345346489227296	F	F	F
0.536942235307018		0.3177329684846986	T	T	T
0.793580465866937		0.3177433136655369	T	T	T
0.704869410813714		0.2203633218772723	F	F	F
0.136184020567903		0.1317829863318210	F	F	F
0.378249985661412	3 0.2053095451189151	0.1325912588909119	F	F	F
0.542693014667996	5 0.3810225683434538	0.0346170130500028	F	F	F
0.223898566333332	4 0.0282395707665799	0.2273103066590920	F	F	F
0.626711346037467		0.1282718373772695	F	F	F
0.305818379208012		0.0402965921590877	F	F	F
0.297844350510283		0.3172455962884717	T	T	T
0.626196755974980		0.1271035316954539	F	F	F
0.865723080898547		0.1288086150363625	F	F	F
0.706341894141232		0.2201040810409083	F	F	F
0.625487359272803		0.1320861515409106	F	F	F
0.295531361117568		0.0388921565772762	F	F	F
0.548251133345836		0.0436557828227251	F	F	F
0.295253777758027		0.0394092290045478	F	F	F
0.540846116626984		0.3218234859128256	T	T	T
0.294972822601150		0.3230363838852753	T	T	Т
0.954712114644195	3 0.5451880757537140	0.2238905465227248	F	F	F

## H<sub>2</sub>-5.9%-HEA(111)

1.0000000000000000

 $\begin{array}{cccc} 10.5600004195999997 & 0.00000000000000 & 0.00000000000000 \\ 5.2800002097999998 & 9.145228627399999 & 0.0000000000000000 \end{array}$ 

```
0.00000000000000000
                            0.00000000000000000
                                                  22.00000000000000000
   Pt
        Fe
             Co
                   Cu
                        Ni
                              Η
                              12
                                     2
    32
          13
                 10
                       13
Selective dynamics
Direct
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.7872371778935290
                       0.8788636672452164
                                            0.3175466767862037
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0426781491432636
                       0.8823650269012833
                                            0.3158146951740492
  0.2800233043653830
                       0.3803394822745351
                                            0.3196999304290937
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8754995737240663
                       0.9620521081418104
                                            0.4242134390023810
                       0.4619969474998401
                                            0.4282952590197112
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1235161325106780
                                                                      T
                                                                           T
  0.1259056928243786
                       0.9610711704932652
                                            0.4215213428452614
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
  0.8754940216679151
                       0.4599291471252899
                                            0.4268237178753214
                                                                  T
  0.3762317425248135
                       0.9596928051921474
                                            0.4205102013261539
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                            0.4207923925854104
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.8752298062392809
                       0.2112264183516363
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.1266704062623518
                       0.2107520556836136
                                            0.4221917855767472
                       0.9605183239754010
                                            0.4241767833657849
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6261272375713436
  0.8754833068666265
                       0.7107167014838469
                                            0.4267886436346932
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                      T
                                                                           T
  0.3760161299580182
                       0.2090352554361887
                                            0.4253435484932276
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.3769826141364955
                       0.7118703040520735
                                            0.4239390410847196
                                                                  Т
                                                                      T
                                                                           T
  0.6267653745423629
                       0.4610946982565586
                                            0.4225356195858399
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.1255308668344654
                       0.7109586857686355
                                            0.4268652347830093
                                                                  T
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.6261907685963074
                       0.2104932240643039
                                            0.4222493542122885
                                                                           T
  0.5488248095249909
                       0.3753353981850138
                                            0.3171739032589128
                                                                  T
                                                                      T
                                                                      T
                                                                           T
                                                                  T
  0.5348248314834616
                       0.1242760186701279
                                            0.3150230981109958
                       0.1235332521939583
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.5470002567308043
                                            0.0399417999772709
  0.1208089481832886
                       0.4601783015999317
                                            0.1280394984818187
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                           T
                                                                  T
                                                                      T
  0.0437422295287760
                       0.1366573175709307
                                            0.3141576832517529
                                                                      F
                                                                          F
  0.0424414900706935
                       0.1302099981111695
                                           0.0329802953681835
                                                                 F
  0.1304832192178935
                       0.9579853651937356
                                            0.1318324513636355
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                      T
                                                                           T
  0.3755166447742225
                       0.4611788326647108
                                            0.4263932443206824
                                                                  Τ
                                                                           F
                       0.5457192756283078
                                            0.2188518203000029
                                                                  F
                                                                      F
  0.4545409546936767
  0.6245008731505943
                       0.7109144099765112
                                            0.4241106878004999
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.9557150112739734
                       0.7901309279847197
                                           0.2210448635636340
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  Τ
                                                                      T
                                                                           T
  0.7949598884981139
                       0.6219878422117323
                                           0.3190752097961280
  0.2921383320417445
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
                       0.6309620262874132
                                            0.3184369967819825
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.2026302282546482
                       0.2805717472619946
                                            0.2254649220954548
  0.7064516142104935
                       0.5493905794598390
                                            0.2207507679909071
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0411254997645959
                       0.6306256940350851
                                           0.3257416190168108
  0.7973180911857654
                       0.8616265572072663
                                           0.0420760910772700
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                       0.8657185943694543
  0.0560985910286504
                                            0.0377408024136372
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
  0.0464128728304587
                       0.6281990126400245
                                            0.0369911384090926
                       0.2222416784103771
  0.6273755757405439
                                            0.1287505962318178
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
  0.3821141315863983
                       0.9550040284758836
                                           0.1298830475227248
                                                                  F
                                                                      F
                                                                          F
                                                                  T
                                                                      T
                                                                           T
  0.0363981716182228
                       0.3831504245480091
                                            0.3248391042166364
  0.0311405267529068
                       0.3816759960316460
                                            0.0375046088681827
                                                                  F
                                                                      F
                                                                           F
                                                                           F
  0.8722404389362310
                       0.2153943248393162
                                            0.1282949969590916
                                                                  F
                                                                      F
```

0.9547121146441953	0.5451880757537140	0.2238905465227248	F	F	F
0.2966911972384251	0.1164380447430289	0.3215682195881576	T	T	T
0.5407170595244978	0.6300179881829333	0.3220434622271121	T	T	Ť
0.2952537777580275	0.1193869715983666	0.0394092290045478	F	F	F
0.5482511333458362	0.6253176515966246	0.0436557828227251	F	F	F
0.2955313611175683	0.3794825008859988	0.0388921565772762	F	F	F
0.6254873592728032	0.9499576153264400	0.1320861515409106	F	F	F
0.7063418941412323	0.7943482474494772	0.2201040810409083	F	F	F
0.8657230808985474	0.7055915708183349	0.1288086150363625	F	F	F
0.6261967559749806	0.4601083651744915	0.1271035316954539	F	F	F
0.2980502390869530	0.8755324521334942	0.3181296843711975	T	T	T
0.3058183792080129	0.8681273535812224	0.0402965921590877	F	F	F
0.6267113460374674	0.7146527937769136	0.1282718373772695	F	F	F
0.2238985663333324	0.0282395707665799	0.2273103066590920	F	F	F
0.5426930146679965	0.3810225683434538	0.0346170130500028	F	F	F
0.3782499856614123	0.2053095451189151	0.1325912588909119	F	F	F
0.1361840205679030	0.7049738332493618	0.1317829863318210	F	F	F
0.7048694108137141	0.0502839582186283	0.2203633218772723	F	F	F
0.7936259770568579	0.1298873870483245	0.3172208190232866	T	T	T
0.5387049347795566	0.8728050739771195	0.3169375661401658	T	T	T
0.7965506180334998	0.1231154660613569	0.0345346489227296	F	F	F
0.5461463374708515	0.8704875427114658	0.0358963983818157	F	F	F
0.2072223479328272	0.5428206522718000	0.2241705479818208	F	F	F
0.9515132437870619	0.2967218890154157	0.2212922910363631	F	F	F
0.8718576990639662	0.9638570180181532	0.1289765751136329	F	F	F
0.7142109858849466	0.2900443576175675	0.2233456813409092	F	F	F
0.4576441344000983	0.2914717494993724	0.2208305283954530	F	F	F
0.8758100826533664	0.4565068959120069	0.1279466825136382	F	F	F
0.1276916528005785	0.2069238958586865	0.1287633622272750	F	F	F
0.7922909547091166	0.6217683887271619	0.0402482253999992	F	F	F
0.2978485906287958	0.6254074402977565	0.0420896375636346	F	F	F
0.3856750788553356	0.7114654717221427	0.1289187271227306	F	F	F
0.3820764845414715	0.4516090485180371	0.1264952625681843	F	F	F
0.7934603681270049	0.3787687254435396	0.3205811590732114	T	T	T
0.7909247997136220	0.3772595911558838	0.0394562840909103	F	F	F
0.9555996101362965	0.0529344377623957	0.2214324969818193	F	F	F
0.4575573979143996	0.7971559299412050	0.2244088666727251	F	F	F
0.2131500369795702	0.7976872161559072	0.2245790410590942	F	F	F
0.4623985897484246	0.0302163017414401	0.2220026953545471	F	F	F
0.0793990938515137	0.0891693881075891	0.5567114661597622	T	T	T
0.1616610862898024	0.0469020131114457	0.5548335514029991	T	T	T