

Supplementary material

Table S1. The experimental lattice parameters (a_{exp}) collected from Pearson's book [18] and those from APB (a_{apb}), AFLOW [17] (a_{aflow}), and from Materials Project [20] (a_{mat}), are tabulated for $MgCu_2$ type compounds. The elemental radii R_A and R_B are also given in the table [19].

Sl.no	Compounds	a_{exp} (Å)	a_{apb} (Å)	a_{aflow} (Å)	a_{mat} (Å)	R_A (Å)	R_B (Å)
1	BaPd ₂	7.95	8.10	8.08	8.13	2.22	1.37
2	SrRh ₂	7.69	7.87	7.75	7.78	2.15	1.34
3	BaPt ₂	7.92	8.20	8.02	8.08	2.22	1.39
4	CaNi ₂	7.26	7.18	7.16	7.18	1.97	1.24
5	SrIr ₂	7.85	7.97	7.71	7.76	2.15	1.36
6	CsBi ₂	9.80	10.20	9.79	9.84	2.67	1.7
7	SrPd ₂	7.82	8.02	7.91	7.94	2.15	1.37
8	YbNi ₂	7.09	7.15	7.14	6.99	1.94	1.24
9	YbCo ₂	7.12	7.21	7.79	7.11	1.94	1.25
10	SrPt ₂	7.77	8.11	7.83	7.89	2.15	1.39
11	LaNi ₂	7.39	7.09	7.40	7.35	1.87	1.24
12	NdNi ₂	7.27	7.06	7.29	7.30	1.82	1.24
13	PrNi ₂	7.28	7.06	7.27	7.34	1.82	1.24
14	SmNi ₂	7.23	7.05		7.24	1.81	1.24
15	CeNi ₂	7.22	7.05	7.22	7.17	1.81	1.24
16	RbBi ₂	9.61	9.87	9.66	9.71	2.48	1.7
17	PrCo ₂	7.31	7.11	7.36	7.33	1.82	1.25
18	NdCo ₂	7.31	7.11	7.04	7.28	1.82	1.25
19	TbNi ₂	7.16	7.04	7.10	7.17	1.8	1.24
20	DyNi ₂	7.16	7.04	7.08	7.17	1.8	1.24
21	CeCo ₂	7.16	7.10	7.63	7.07	1.81	1.25

22	SmCo ₂	7.27	7.10	7.86	7.26	1.81	1.25
23	YbRh ₂	7.43	7.65	7.54	7.50	1.94	1.34
24	PrFe ₂	7.46	7.16	7.89	7.48	1.82	1.26
25	GdNi ₂	7.20	7.04	7.20	7.20	1.79	1.24
26	HoNi ₂	7.14	7.04	7.08	7.13	1.79	1.24
27	TbCo ₂	7.21	7.09	7.64	7.19	1.8	1.25
28	DyCo ₂	7.19	7.09	7.61	7.17	1.8	1.25
29	CaPd ₂	7.67	7.82	7.71	7.75	1.97	1.37
30	CeFe ₂	7.30	7.15	7.68	7.23	1.81	1.26
31	SmFe ₂	7.42	7.15		7.38	1.81	1.26
32	ErNi ₂	7.13	7.03	7.07	7.11	1.78	1.24
33	YNi ₂	7.19	7.03	7.14	7.17	1.78	1.24
34	HoCo ₂	7.17	7.09	7.39	7.16	1.79	1.25
35	GdCo ₂	7.25	7.09	7.07	7.24	1.79	1.25
36	TbFe ₂	7.35	7.14	7.84	7.30	1.8	1.26
37	DyFe ₂	7.32	7.14	7.73	7.26	1.8	1.26
38	YbIr ₂	7.48	7.74	7.52	7.54	1.94	1.36
39	YCo ₂	7.22	7.08	7.63	7.13	1.78	1.25
40	ErCo ₂	7.16	7.08	7.34	7.12	1.78	1.25
41	GdFe ₂	7.39	7.14	7.70	7.32	1.79	1.26
42	HoFe ₂	7.30	7.14	7.70	7.24	1.79	1.26
43	TmCo ₂	7.12	7.07		7.10	1.77	1.25
44	YFe ₂	7.36	7.13	7.76	7.29	1.78	1.26
45	ErFe ₂	7.28	7.13	7.71	7.22	1.78	1.26
46	LuNi ₂	7.06	7.01	6.87	7.06	1.75	1.24
47	TmFe ₂	7.25	7.12		7.18	1.77	1.26
48	LuCo ₂	7.11	7.06	7.47	7.07	1.75	1.25
49	YbPt ₂	7.55	7.88	7.68	7.66	1.94	1.39
50	LaRu ₂	7.70	7.58	7.82	7.73	1.87	1.34

51	LaRh ₂	7.63	7.58	7.71	7.72	1.87	1.34
52	LuFe ₂	7.22	7.11	7.65	7.15	1.75	1.26
53	KBi ₂	9.50	9.66	9.59	9.60	2.35	1.7
54	CaAl ₂	8.04	8.08	8.01	8.02	1.97	1.43
55	LaIr ₂	7.69	7.68	7.73	7.74	1.87	1.36
56	NaPt ₂	7.48	7.84	7.54	7.59	1.9	1.39
57	PrRu ₂	7.62	7.54	7.55	7.71	1.82	1.34
58	NdRh ₂	7.56	7.54	7.66	7.68	1.82	1.34
59	NdRu ₂	7.61	7.54	7.63	7.68	1.82	1.34
60	PrRh ₂	7.58	7.54	7.53	7.71	1.82	1.34
61	YbAl ₂	7.88	8.05	7.99	7.97	1.94	1.43
62	CeRu ₂	7.54	7.53	7.60	7.58	1.81	1.34
63	CeRh ₂	7.55	7.53	7.55	7.59	1.81	1.34
64	SmRu ₂	7.58	7.53	7.63	7.63	1.81	1.34
65	SmRh ₂	7.54	7.53	7.51	7.63	1.81	1.34
66	PrOs ₂	7.66	7.59	7.61	7.74	1.82	1.35
67	LaPt ₂	7.78	7.81	7.86	7.87	1.87	1.39
68	DyRh ₂	7.49	7.52	7.50	7.56	1.8	1.34
69	ThRu ₂	7.66	7.52	7.83	7.68	1.8	1.34
70	TbRh ₂	7.49	7.52	7.52	7.57	1.8	1.34
71	CeOs ₂	7.59	7.58	7.63	7.63	1.81	1.35
72	PrIr ₂	7.62	7.63	7.56	7.73	1.82	1.36
73	NdIr ₂	7.60	7.63	7.57	7.70	1.82	1.36
74	HfCo ₂	6.91	7.01	7.03	6.88	1.67	1.25
75	GdRh ₂	7.56	7.52	7.55	7.60	1.79	1.34
76	HoRh ₂	7.43	7.52	7.49	7.54	1.79	1.34
77	GdRu ₂	7.51	7.52	7.63	7.59	1.79	1.34
78	DyMn ₂	7.57	7.57	7.75	7.22	1.8	1.35
79	TbMn ₂	7.65	7.57	7.61	7.26	1.8	1.35

80	ThOs ₂	7.71	7.57	7.84	7.73	1.8	1.35
81	CeIr ₂	7.58	7.62	7.58	7.63	1.81	1.36
82	TaBe ₂	6.51	6.28	6.57	6.52	1.49	1.12
83	ErRh ₂	7.44	7.51	7.47	7.53	1.78	1.34
84	YRh ₂	7.50	7.51	7.52	7.57	1.78	1.34
85	GdMn ₂	7.22	7.56	7.22	7.28	1.79	1.35
86	HoMn ₂	7.52	7.56	7.56	7.20	1.79	1.35
87	HfFe ₂	7.02	7.06	7.23	6.99	1.67	1.26
88	TbIr ₂	7.53	7.61	7.53	7.60	1.8	1.36
89	ThIr ₂	7.66	7.61	7.80	7.72	1.8	1.36
90	DyIr ₂	7.51	7.61	7.52		1.8	1.36
91	TmRh ₂	7.42	7.50		7.51	1.77	1.34
92	NaAg ₂	7.92	8.05	8.10	8.05	1.9	1.44
93	YMn ₂	7.68	7.55	8.31	7.24	1.78	1.35
94	GdIr ₂	7.55	7.61	7.57		1.79	1.36
95	HoIr ₂	7.49	7.61	7.50	7.57	1.79	1.36
96	TiBe ₂	6.45	6.28	6.52	6.43	1.47	1.12
97	NdPt ₂	7.69	7.76	7.83	7.81	1.82	1.39
98	PrPt ₂	7.65	7.76	7.74	7.84	1.82	1.39
99	YIr ₂	7.52	7.60	7.53	7.59	1.78	1.36
100	ErIr ₂	7.49	7.60	7.49	7.56	1.78	1.36
101	LaAl ₂	8.15	7.98	8.19	8.14	1.87	1.43
102	ScNi ₂	6.93	6.94	6.90	6.88	1.62	1.24
103	LuRh ₂	7.42	7.49	7.43	7.49	1.75	1.34
104	NbBe ₂	6.54	6.28	6.56	6.54	1.46	1.12
105	SmPt ₂	7.66	7.76	7.72	7.77	1.81	1.39
106	CePt ₂	7.73	7.76	7.73	7.77	1.81	1.39
107	TmIr ₂	7.48	7.59	7.49	7.54	1.77	1.36
108	NaAu ₂	7.80	8.14	7.94	7.97	1.9	1.46

109	ScCo ₂	6.92	6.98	7.20	6.90	1.62	1.25
110	DyPt ₂	7.60	7.75	7.64	7.69	1.8	1.39
111	TbPt ₂	7.62	7.75	7.66	7.71	1.8	1.39
112	ZrNi ₂	6.92	6.93	6.92	6.97	1.6	1.24
113	HoPt ₂	7.59	7.74	7.63	7.68	1.79	1.39
114	GdPt ₂	7.56	7.74	7.67	7.73	1.79	1.39
115	LuIr ₂	7.45	7.57	7.46	7.52	1.75	1.36
116	ScFe ₂	7.04	7.03	7.45	6.97	1.62	1.26
117	AgBe ₂	6.30	6.27	6.43	6.42	1.44	1.12
118	HfCr ₂	7.16	7.25	7.12	7.09	1.67	1.3
119	YPt ₂	7.59	7.73	7.66	7.71	1.78	1.39
120	ErPt ₂	7.58	7.73	7.61	7.67	1.78	1.39
121	ZrCo ₂	6.95	6.97	7.16	6.91	1.6	1.25
122	TmPt ₂	7.56	7.72		7.65	1.77	1.39
123	PrAl ₂	7.99	7.93	8.09	8.09	1.82	1.43
124	NdAl ₂	8.00	7.93	8.04	8.04	1.82	1.43
125	ZrFe ₂	7.07	7.02	7.33	7.05	1.6	1.26
126	SmAl ₂	7.94	7.92	7.94	7.98	1.81	1.43
127	CeAl ₂	8.06	7.92	7.96	7.95	1.81	1.43
128	TbAl ₂	7.87	7.92	7.89	7.89	1.8	1.43
129	DyAl ₂	7.83	7.92	7.87	7.87	1.8	1.43
130	HoAl ₂	7.82	7.91	7.84	7.84	1.79	1.43
131	GdAl ₂	7.90	7.91	7.90	7.91	1.79	1.43
132	MgCu ₂	7.05	7.12	7.03	7.02	1.6	1.28
133	HfV ₂	7.39	7.43	7.47	7.32	1.67	1.34
134	YAl ₂	7.86	7.90	7.88	7.88	1.78	1.43
135	ErAl ₂	7.79	7.90	7.82	7.82	1.78	1.43
136	TmAl ₂	7.78	7.89	7.88	7.80	1.77	1.43
137	ZrCr ₂	7.25	7.21	7.18	7.15	1.6	1.3

138	LuAl ₂	7.74	7.87	7.82	7.76	1.75	1.43
139	PuNi ₂	7.14	6.89	6.84	6.90	1.51	1.24
140	PuCo ₂	7.08	6.94	6.98	7.08	1.51	1.25
141	HfMo ₂	7.56	7.64	7.60	7.58	1.67	1.39
142	PbAu ₂	7.92	7.99	8.08	8.14	1.75	1.46
143	PuFe ₂	7.18	6.98	6.74	6.80	1.51	1.26
144	ZrV ₂	7.45	7.38	7.52	7.36	1.6	1.34
145	TaCo ₂	6.78	6.93	6.92	6.73	1.49	1.25
146	ScIr ₂	7.45	7.48	7.39	7.76	1.62	1.36
147	HfW ₂	7.58	7.72	7.65	7.63	1.67	1.41
148	ZrIr ₂	7.35	7.47	7.38	7.44	1.6	1.36
149	TiCo ₂	6.69	6.92	7.03	6.64	1.47	1.25
150	LaMg ₂	8.79	8.64	8.80	8.78	1.87	1.6
151	NbCo ₂	6.76	6.92	6.91	6.74	1.46	1.25
152	BiAu ₂	7.96	7.95	8.06	8.10	1.7	1.46
153	ZrZn ₂	7.39	7.55	7.37	7.42	1.6	1.38
154	ZrMo ₂	7.59	7.59	7.65	7.63	1.6	1.39
155	TaCr ₂	6.98	7.15	6.99	6.94	1.49	1.3
156	CuBe ₂	5.99	6.29	6.00	5.99	1.28	1.12
157	PrMg ₂	8.69	8.58	8.70	8.72	1.82	1.6
158	NdMg ₂	8.66	8.58	8.90	8.68	1.82	1.6
159	ZrW ₂	7.62	7.67	7.69	7.67	1.6	1.41
160	ScAl ₂	7.58	7.77	7.64	7.59	1.62	1.43
161	CeMg ₂	8.73	8.57	8.45	8.63	1.81	1.6
162	SmMg ₂	8.62	8.57	8.73	8.62	1.81	1.6
163	TiCr ₂	6.94	7.15	6.96	6.86	1.47	1.3
164	PuRu ₂	7.48	7.33	7.33	7.38	1.51	1.34
165	ThMg ₂	8.57	8.56	8.64	8.55	1.8	1.6
166	NbCr ₂	6.98	7.14	6.99	6.96	1.46	1.3

167	GdMg ₂	8.55	8.55	8.58	8.51	1.79	1.6
168	PuOs ₂	7.53	7.37	7.44	7.46	1.51	1.35
169	PuMn ₂	7.29	7.37	6.86	6.88	1.51	1.35
170	LiPt ₂	7.60	7.56	7.40	7.45	1.55	1.39
171	TaV ₂	7.15	7.32	7.23	7.13	1.49	1.34
172	PuIr ₂	7.51	7.42	7.40	7.47	1.51	1.36
173	UCo ₂	7.00	6.90	6.98	6.91	1.38	1.25
174	UFe ₂	7.06	6.94	7.53	6.97	1.38	1.26
175	PuZn ₂	7.76	7.50	7.66	7.71	1.51	1.38
176	PuPt ₂	7.63	7.54	7.54	7.65	1.51	1.39
177	PuAl ₂	7.87	7.69	7.83	7.54	1.51	1.43
178	UMn ₂	7.16	7.32	7.28	7.06	1.38	1.35
179	UOs ₂	7.51	7.32	7.60	7.52	1.38	1.35
180	UIr ₂	7.50	7.35	7.57	7.53	1.38	1.36
181	UAl ₂	7.76	7.61	7.85	7.72	1.38	1.43
182	LaOs ₂	7.74	7.63	7.79	7.73	1.87	1.35
183	CaIr ₂	7.55	7.77	7.55	7.54	1.97	1.36