

Accurate Screening of Functional Materials with Machine-Learning Potential and Transfer-Learned Regressions: Heusler Alloy Benchmark

Enda Xiao

*Research Center for Magnetic and Spintronic Materials,
National Institute for Materials Science, Tsukuba 305-0047, Japan*

Terumasa Tadano

*Research Center for Magnetic and Spintronic Materials,
National Institute for Materials Science, Tsukuba 305-0047, Japan and
Digital Transformation Initiative Center for Magnetic Materials (DXMag),
National Institute for Materials Science, Tsukuba 305-0047, Japan*

(Dated: September 4, 2025)

I. CONTENT IN THE SUPPLEMENTAL MATERIAL

Figures

1. Convergence test for MLIP-based structural optimization.
2. Benchmark comparison of E_{aniso} values overlapping with previous studies, demonstrating consistency between our calculations and published data.
3. Comparison of local magnetic moments obtained from DFT and SPRKKR calculations.

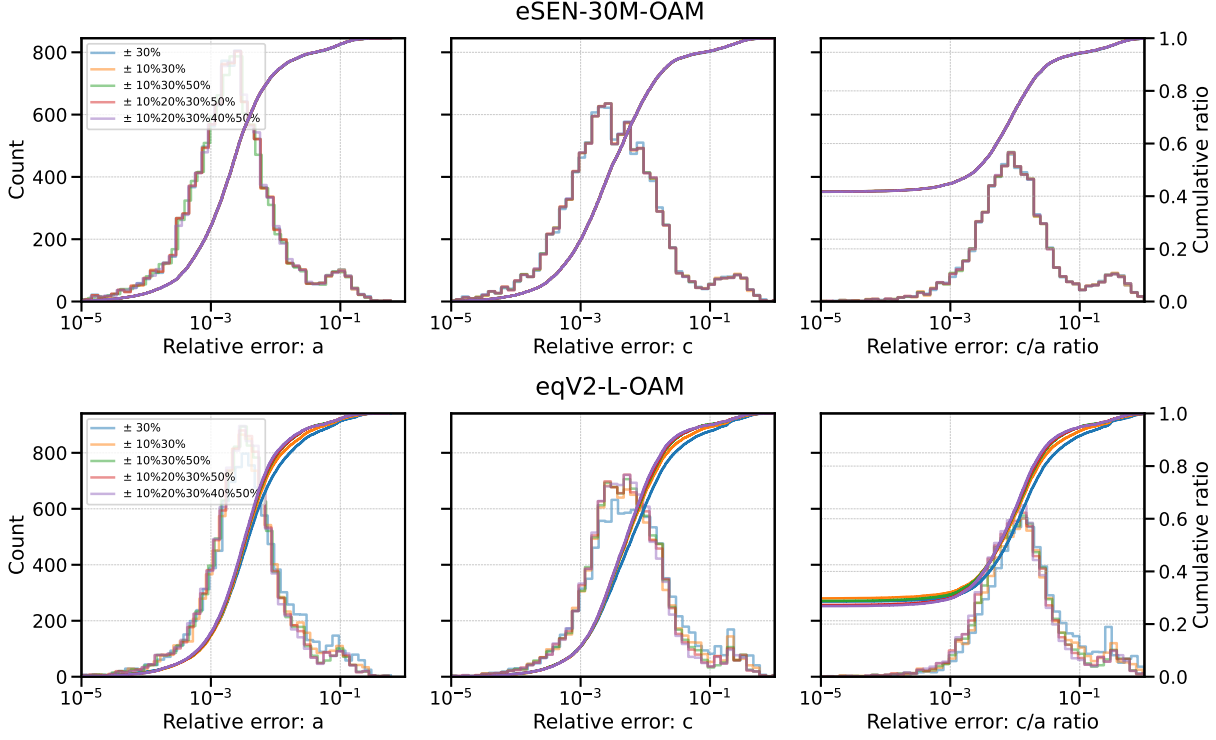
Tables

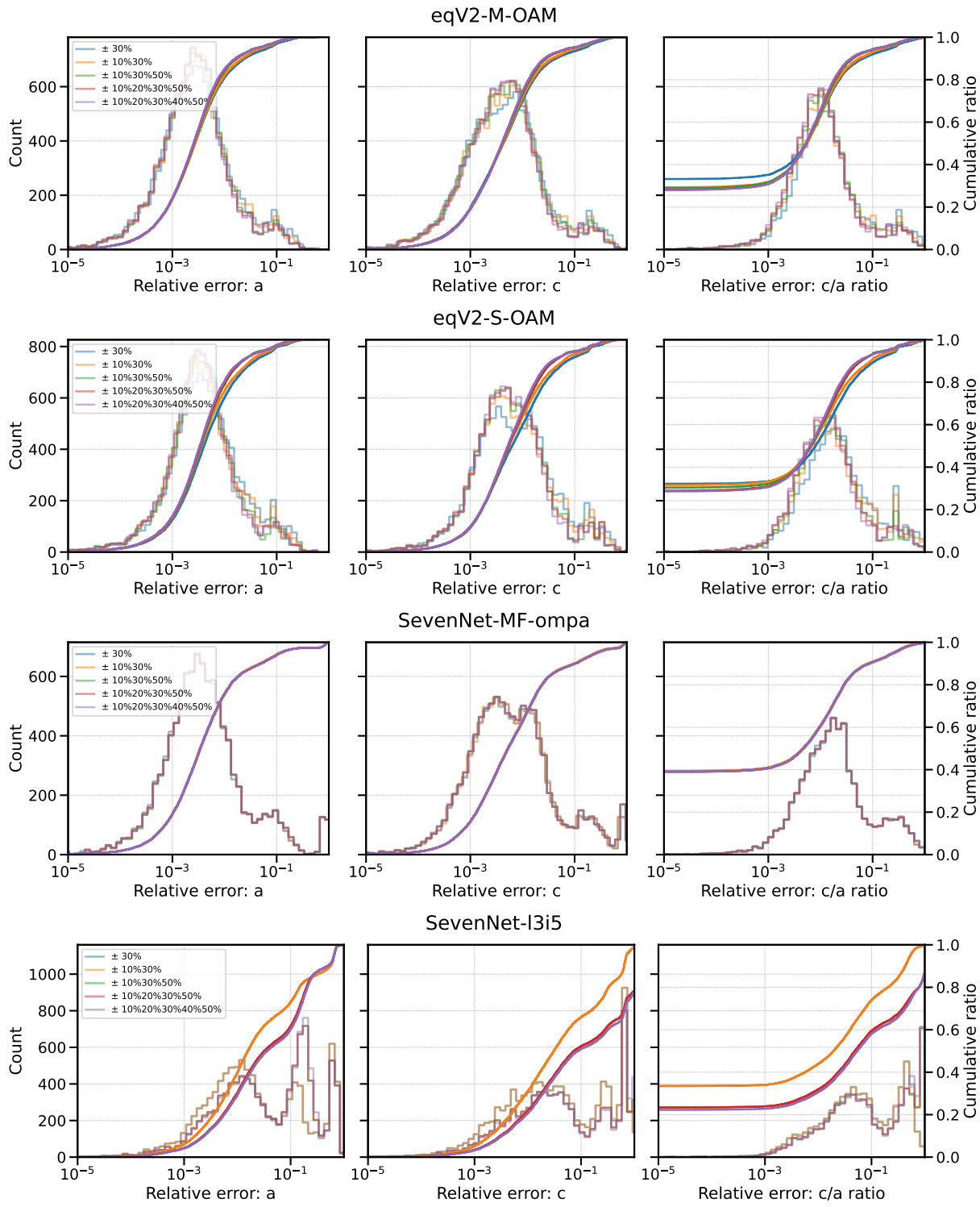
1. Candidate list of DFT-screened stable Heusler compounds with large E_{aniso} , including 135 conventional ternary Heusler compounds.
2. Candidate list of ML-screened stable Heusler compounds with large E_{aniso} , including 366 conventional quaternary and 924 all- d Heusler compounds, with corresponding DFT validation results.

II. CONVERGENCE TEST FOR MLIP STRUCTURE OPTIMIZATION

In the legend, each label indicates the applied strains:

- “ $\pm 30\%$ ”: scaling of all axes or c -axis by $\pm 30\%$.
- “ $\pm 10\%30\%$ ”: scaling of all axes or c -axis by $\pm 10\%$, $\pm 30\%$.
- “ $\pm 10\%30\%50\%$ ”: scaling of all axes by $\pm 10\%$, $\pm 30\%$; or c -axis by $\pm 10\%$, $\pm 30\%$, $\pm 50\%$.
- “ $\pm 10\%20\%30\%50\%$ ”: scaling of all axes by $\pm 10\%$, $\pm 30\%$; or c -axis by $\pm 10\%$, $\pm 20\%$, $\pm 30\%$, $\pm 50\%$.
- “ $\pm 10\%20\%30\%40\%50\%$ ”: scaling of all axes by $\pm 10\%$, $\pm 30\%$; or c -axis by $\pm 10\%$, $\pm 20\%$, $\pm 30\%$, $\pm 40\%$, $\pm 50\%$.





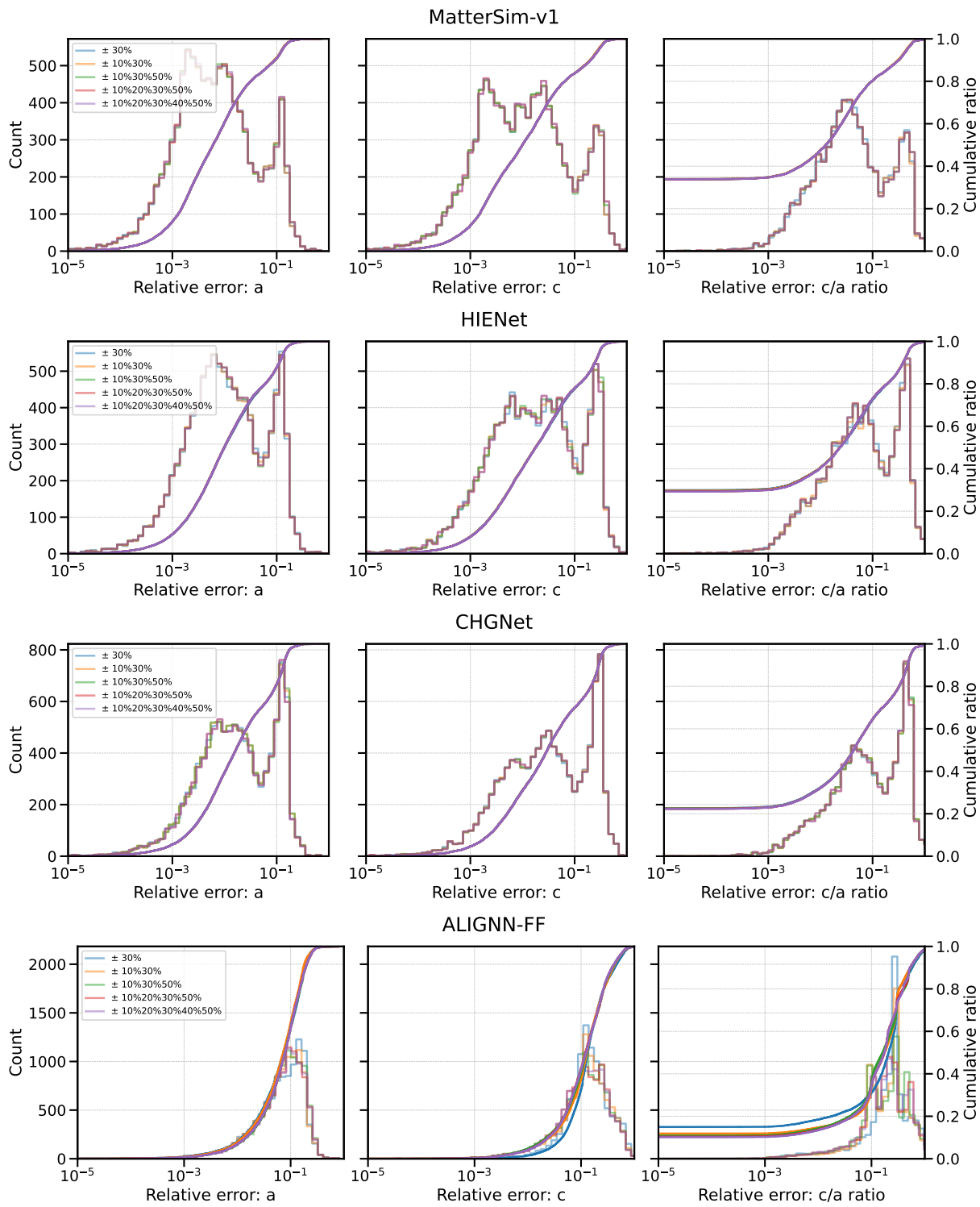


Figure S1. Convergence test of MLIP-based structural optimization with varying initial structure guesses.

III. COMPARISON OF OVERLAPPED E_{aniso} DATA WITH PREVIOUS WORK

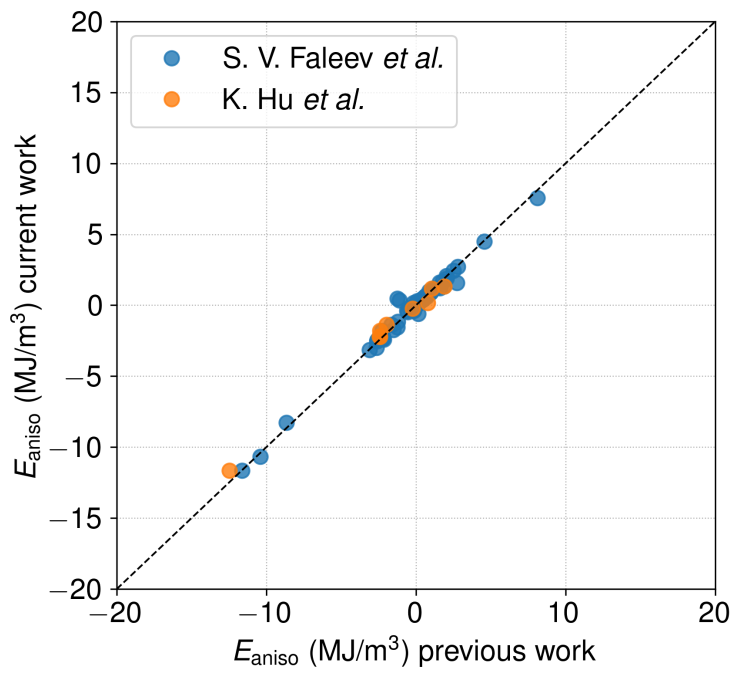


Figure S2. Benchmark comparison of E_{aniso} values overlapping with previous studies, demonstrating consistency between our calculations and published data. [1, 2].

IV. COMPARISON OF LOCAL MAGNETIC MOMENT BETWEEN DFT AND SPRKKR RESULTS.

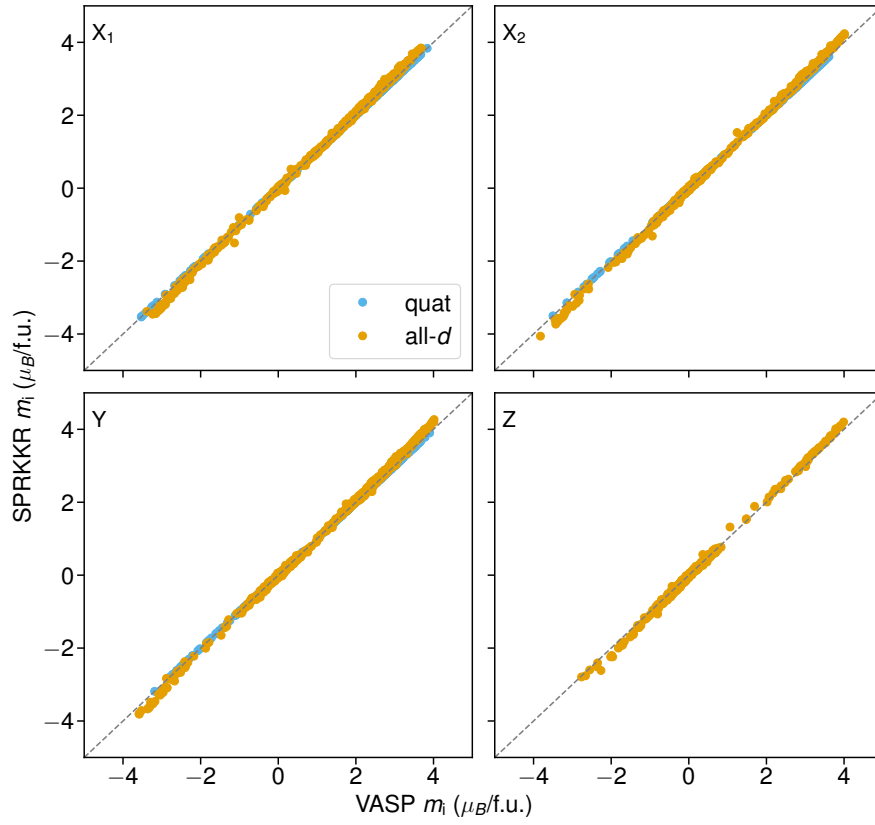


Figure S3. Comparison of local magnetic moments obtained by DFT and SPRKKR calculations for quaternary and all- d candidate compounds across all atomic sites. A corresponding analysis for ternary compounds is reported in our previous work [3].

V. LIST OF CONVENTIONAL TERNARY HEUSLER COMPOUNDS CANDIDATES

Table S1: List of conventional ternary Heusler compounds candidates identified by DFT-HTP approach. For each composition, the following properties are listed: lattice constant a , c/a ratio, formation energy ΔE (eV/atom), energy above the convex hull ΔH (eV/atom), total magnetic moment $\sum \mathbf{m}_i$ (μ_B /f.u.), absolute total magnetic moment $\sum |\mathbf{m}_i|$ (μ_B /f.u.), Curie temperature T_c (K), and magnetic anisotropy energy E_{aniso} (MJ/m³). The local magnetic moment $\mathbf{m}_i$, along with other relevant properties, is available in the DXMag Heusler database.

composition	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
Au ₂ MnSn	7.24	0.81	-0.07	0.09	4.02	4.08	347	2.41
Co ₂ CrGe	5.09	1.43	-0.03	0.10	1.88	3.08	572	1.16
Co ₂ FeGe	5.01	1.47	-0.08	0.10	4.56	4.74	863	-1.29
Co ₂ FeSi	4.93	1.47	-0.26	0.10	4.44	4.56	772	-1.95
Co ₂ IrGa	5.33	1.34	-0.11	0.10	3.30	3.38	630	-10.67
Co ₂ MnAl	4.97	1.51	-0.22	0.15	2.43	3.61	390	1.12
Co ₂ MnP	7.97	0.71	-0.28	0.27	5.91	5.91	1259	2.21
Co ₂ NiAl	5.19	1.30	-0.28	0.08	2.81	2.87	776	-2.18
Co ₂ NiSi	5.02	1.35	-0.32	0.07	2.28	2.34	590	1.17
Co ₂ PdAl	5.39	1.29	-0.29	0.18	2.84	2.90	845	-2.64
Co ₂ PdGa	5.38	1.31	-0.15	0.18	2.82	2.94	799	-3.00
Co ₂ PtAl	5.37	1.32	-0.40	0.13	2.93	2.99	836	-12.29
Co ₂ PtAl	5.18	1.47	-0.36	0.18	2.99	3.07	617	-1.72
Co ₂ PtGa	5.37	1.33	-0.22	0.12	2.96	3.06	786	-11.65
Co ₂ RhAl	5.07	1.53	-0.27	0.29	3.25	3.33	548	-3.68
Co ₂ RhGa	5.12	1.50	-0.12	0.23	3.25	3.39	501	-3.50
Co ₂ RhSn	5.53	1.32	-0.04	0.23	3.02	3.14	670	-1.75
Co ₃ Ge	5.15	1.32	-0.08	0.05	3.09	3.21	627	-2.35
Co ₃ Si	5.06	1.31	-0.28	0.07	2.85	2.93	632	-2.34
Cr ₂ AuAl	5.56	1.40	-0.04	0.16	0.09	5.91	1931	6.52
Cr ₂ MnAs	5.34	1.34	-0.01	0.12	2.00	6.48	1240	1.68
Cr ₂ PtAl	5.55	1.32	-0.32	0.20	0.08	5.50	1700	7.74
Cr ₂ PtGa	5.50	1.37	-0.23	0.10	0.08	5.64	1733	5.99
Cr ₂ PtGe	5.45	1.41	-0.16	0.08	0.05	5.55	1726	8.56
Cr ₂ PtIn	5.72	1.38	-0.05	0.21	0.02	6.32	1660	3.73
Cr ₂ PtSi	5.38	1.39	-0.27	0.18	0.02	5.02	1633	12.33
Cr ₂ PtSn	5.68	1.40	-0.10	0.21	0.04	6.10	1754	5.05
Cr ₂ RhSn	5.71	1.34	-0.04	0.23	0.08	5.92	1544	1.51
Fe ₂ AuGa	5.31	1.51	-0.03	0.11	5.11	5.29	1152	1.83
Fe ₂ CoGa	5.09	1.46	-0.10	0.09	6.29	6.51	1331	2.97
Fe ₂ CoGe	5.04	1.47	-0.08	0.09	5.59	5.81	1080	1.14
Fe ₂ CuSi	5.01	1.46	-0.14	0.16	4.33	4.45	849	1.89
Fe ₂ IrGe	5.18	1.53	-0.02	0.15	5.36	5.56	500	-8.55
Fe ₂ MnAs	5.15	1.43	-0.03	0.13	6.67	6.81	741	1.81
Fe ₂ MnGa	5.55	1.16	-0.10	0.01	7.15	7.37	1019	2.04
Fe ₂ MnGe	5.42	1.23	-0.10	0.03	6.81	7.01	935	1.93
Fe ₂ NbGa	5.67	1.23	-0.06	0.20	4.03	4.67	719	1.25
Fe ₂ OsAl	5.17	1.46	-0.05	0.17	3.42	3.48	403	-9.48
Fe ₂ PtAl	5.12	1.59	-0.40	0.13	5.02	5.14	1093	-1.54
Fe ₂ PtAs	5.27	1.53	-0.03	0.22	5.76	5.76	1369	1.95
Fe ₂ PtGe	5.20	1.55	-0.15	0.10	5.25	5.41	1061	4.23
Fe ₂ PtIn	5.63	1.35	-0.05	0.21	5.38	5.54	1010	-3.13
Fe ₂ PtSb	5.47	1.51	-0.02	0.23	5.64	5.68	1307	2.89
Fe ₂ PtSn	5.62	1.36	-0.07	0.25	5.22	5.38	949	-6.41
Fe ₂ RhGa	5.14	1.54	-0.15	0.19	5.58	5.78	749	-2.02
Fe ₂ ZnAl	5.18	1.46	-0.13	0.06	4.28	4.48	931	1.62
Fe ₂ ZnAl	5.17	1.47	-0.11	0.08	4.49	4.65	1173	2.00
Fe ₂ ZnGa	5.21	1.45	-0.05	0.07	4.32	4.60	847	1.28
Fe ₂ ZnGa	5.17	1.50	-0.02	0.10	4.63	4.87	1203	2.15
Fe ₂ ZnSi	5.04	1.50	-0.09	0.21	4.18	4.34	1158	-1.25
Fe ₃ Ga	5.41	1.23	-0.10	0.04	6.76	7.00	1243	2.50
Hf ₂ CrGa	5.63	1.61	-0.06	0.27	1.93	2.61	360	-2.02

Continued on next page

composition	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
Hf ₂ MnIn	6.03	1.44	-0.05	0.15	2.82	3.78	711	2.40
Hf ₂ MnSn	5.84	1.60	-0.13	0.23	2.83	3.47	530	2.09
Hf ₂ VGa	6.05	1.32	-0.12	0.18	1.42	1.44	379	-1.58
IrVGa	5.88	0.99	-0.27	0.22	0.76	0.76	354	-1.05
Mn ₂ AuAl	5.50	1.43	-0.19	0.04	6.31	6.49	709	1.46
Mn ₂ AuGa	5.61	1.36	-0.11	0.01	6.38	6.70	679	2.55
Mn ₂ AuGe	5.58	1.38	-0.02	0.10	6.17	6.43	883	7.00
Mn ₂ AuIn	6.07	1.22	-0.00	0.12	0.02	7.22	781	-1.60
Mn ₂ CoGe	5.33	1.32	-0.15	0.04	6.80	7.04	874	1.47
Mn ₂ CrAs	5.21	1.41	-0.12	0.02	1.53	6.39	1072	1.99
Mn ₂ CrGa	5.39	1.29	-0.13	0.00	2.73	6.67	1319	2.39
Mn ₂ CrGe	5.31	1.34	-0.15	0.00	1.93	6.35	1228	2.46
Mn ₂ CuAl	5.33	1.37	-0.13	0.06	5.68	5.84	737	1.40
Mn ₂ CuAs	5.28	1.40	-0.05	0.09	5.37	5.51	382	2.59
Mn ₂ CuGa	5.38	1.34	-0.08	0.00	5.75	6.01	989	1.62
Mn ₂ CuGe	5.33	1.34	-0.10	0.00	5.22	5.46	508	2.06
Mn ₂ CuSi	5.23	1.34	-0.22	0.06	4.87	5.05	620	1.60
Mn ₂ FeAl	5.33	1.27	-0.16	0.03	5.20	5.30	338	2.09
Mn ₂ FeAl	5.23	1.38	-0.23	0.00	0.82	6.54	928	1.83
Mn ₂ FeGa	5.22	1.39	-0.18	0.00	0.78	6.80	994	1.20
Mn ₂ FeGa	5.31	1.29	-0.10	0.00	5.36	5.54	329	2.16
Mn ₂ FeGe	5.36	1.27	-0.12	0.02	6.27	6.47	312	1.57
Mn ₂ HfGa	5.39	1.55	-0.20	0.09	4.57	5.53	845	-1.22
Mn ₂ HfIn	6.28	1.04	-0.04	0.15	3.56	4.68	398	2.07
Mn ₂ HfSb	5.50	1.64	-0.09	0.18	0.82	5.56	859	-3.90
Mn ₂ IrAl	5.43	1.34	-0.51	0.00	0.22	5.86	947	10.64
Mn ₂ IrAl	5.20	1.48	-0.34	0.14	3.80	4.04	749	11.72
Mn ₂ IrGa	5.27	1.44	-0.20	0.05	3.94	4.30	572	15.22
Mn ₂ IrGa	5.42	1.37	-0.39	0.00	0.19	6.09	983	7.56
Mn ₂ IrGe	5.26	1.43	-0.14	0.06	3.45	3.95	1642	-3.85
Mn ₂ IrIn	5.59	1.41	-0.15	0.01	0.05	6.73	887	4.50
Mn ₂ IrSn	5.65	1.35	-0.18	0.03	0.50	6.34	447	-1.74
Mn ₂ IrSn	5.67	1.38	-0.05	0.16	7.01	7.31	1695	-6.94
Mn ₂ NbGa	5.17	1.64	-0.13	0.05	3.10	4.46	545	-1.44
Mn ₂ NbGe	5.18	1.63	-0.15	0.14	1.03	4.51	569	-1.02
Mn ₂ NiGe	5.24	1.38	-0.19	0.00	5.52	5.76	925	1.43
Mn ₂ NiSn	5.44	1.43	-0.05	0.10	6.26	6.56	418	1.67
Mn ₂ OsGe	5.39	1.37	-0.13	0.00	0.04	5.76	705	7.23
Mn ₂ PtGe	5.47	1.40	-0.23	0.04	6.45	6.75	530	-2.69
Mn ₂ PtIn	5.75	1.37	-0.16	0.12	7.26	7.52	1742	-2.01
Mn ₂ PtSn	5.86	1.28	-0.23	0.09	0.05	6.91	724	-4.04
Mn ₂ ReGa	5.22	1.50	-0.06	0.08	0.07	5.05	639	-4.42
Mn ₂ RhAl	5.43	1.34	-0.48	0.07	0.22	6.02	1065	1.92
Mn ₂ RhAl	5.16	1.51	-0.29	0.26	4.02	4.26	1016	2.20
Mn ₂ RhGa	5.42	1.37	-0.40	0.00	0.16	6.28	1102	1.01
Mn ₂ RhSi	5.11	1.47	-0.34	0.12	3.25	3.67	1329	2.71
Mn ₂ RuGa	5.38	1.38	-0.25	0.00	0.22	6.28	1170	1.68
Mn ₂ RuIn	5.60	1.39	-0.00	0.05	0.13	6.87	1147	2.07
Mn ₂ RuSn	5.60	1.38	-0.11	0.00	0.03	6.49	850	1.19
Mn ₂ ScGa	5.64	1.35	-0.17	0.13	5.09	5.59	512	1.48
Mn ₂ ScGe	5.56	1.39	-0.22	0.21	4.83	5.25	476	2.28
Mn ₂ TiAs	5.09	1.61	-0.32	0.22	1.12	3.86	663	-1.02
Mn ₂ VSn	5.70	1.25	-0.07	0.10	3.01	5.87	1143	2.19
Mn ₂ ZnGa	5.46	1.32	-0.14	0.00	5.26	5.62	649	2.09
Mn ₂ ZnGe	5.38	1.36	-0.10	0.00	4.95	5.29	646	2.42
Mn ₂ ZnSi	5.33	1.32	-0.21	0.07	4.67	4.93	770	2.13
Mn ₃ Al	5.36	1.31	-0.24	0.00	1.72	7.24	814	2.54
Mn ₃ Ga	5.34	1.33	-0.21	0.00	1.76	7.52	958	2.73
Mn ₃ Ge	5.29	1.34	-0.25	0.00	0.98	6.86	942	2.45
Mn ₃ Sn	5.56	1.34	-0.04	0.00	1.08	7.80	765	2.66

Continued on next page

composition	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
Ni ₂ CoGa	5.10	1.39	-0.21	0.07	2.07	2.15	435	-1.27
Ni ₂ MnGa	5.34	1.27	-0.34	0.00	4.10	4.22	554	-1.12
Pt ₂ CoAl	5.55	1.31	-0.58	0.07	2.09	2.11	569	-1.90
Pt ₂ CoAl	5.40	1.43	-0.47	0.18	1.93	1.97	360	8.44
Pt ₂ CoGa	5.47	1.40	-0.25	0.16	1.92	2.00	308	13.37
Pt ₂ CoGa	5.56	1.32	-0.36	0.06	2.09	2.15	551	-1.59
Pt ₂ CoIn	5.70	1.36	-0.22	0.13	2.10	2.16	489	-1.11
Pt ₂ CrAl	5.40	1.51	-0.51	0.14	3.10	3.16	322	1.52
Pt ₂ FeAl	5.59	1.31	-0.60	0.05	3.36	3.40	614	-7.54
Pt ₂ FeGa	5.59	1.33	-0.39	0.06	3.40	3.46	536	-7.88
Pt ₂ FeIn	5.74	1.36	-0.26	0.12	3.39	3.45	507	-5.66
Rh ₂ CoSn	5.76	1.24	-0.20	0.11	2.25	2.31	517	-1.36
Rh ₂ FeGa	5.95	1.04	-0.42	0.02	4.22	4.24	484	-1.04
Rh ₂ FeSn	5.87	1.21	-0.28	0.05	3.91	3.95	447	-2.43
Rh ₂ MnAl	5.21	1.56	-0.50	0.19	3.15	3.43	397	3.80
Rh ₂ MnGa	5.25	1.55	-0.36	0.17	3.21	3.47	430	3.74
Rh ₂ MnIn	5.45	1.53	-0.19	0.15	3.42	3.64	393	2.74
Rh ₂ MnSi	5.87	1.06	-0.61	0.00	4.40	4.40	360	1.04
Ru ₂ CrGa	5.14	1.60	-0.02	0.16	1.23	2.33	421	-1.11
Ru ₂ MnGe	5.26	1.50	-0.08	0.19	2.50	3.22	713	1.34
Sc ₂ MnPb	6.00	1.58	-0.11	0.24	2.56	4.16	701	1.87
Sc ₂ MnPb	6.23	1.40	-0.14	0.21	2.85	4.19	746	1.21
Sc ₂ MnTl	6.03	1.51	-0.04	0.18	2.25	4.35	757	3.04

VI. LIST OF CONVENTIONAL QUATERNARY HEUSLER COMPOUNDS CANDIDATES

Table S2: List of conventional quaternary Heusler compounds candidates identified by ML-HTP approach. For each composition, the following properties obtained by ML and DFT are listed: lattice constant a , c/a ratio, formation energy ΔE (eV/atom), energy above the convex hull ΔH (eV/atom), total magnetic moment $\sum \mathbf{m}_i$ (μ_B /f.u.), absolute total magnetic moment $\sum |\mathbf{m}_i|$ (μ_B /f.u.), Curie temperature T_c (K), and magnetic anisotropy energy E_{aniso} (MJ/m³). The local magnetic moment $\mathbf{m}_i$, along with other relevant properties, is available in the DXMag Heusler database.

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
AuCrFeAl	5.54	1.36	-0.02	0.20	0.33	5.56	1104	2.21	5.55	1.33	0.00	0.22	0.05	4.81	823	1.42
AuCrMnAl	5.64	1.34	-0.14	0.11	0.38	6.35	1458	1.71	5.64	1.30	-0.15	0.07	0.92	5.84	1353	1.40
AuCrMnGa	5.64	1.36	-0.07	0.08	0.34	6.53	1461	1.47	5.64	1.32	-0.06	0.06	0.92	6.16	1114	1.27
AuCrNbAl	5.57	1.49	-0.05	0.20	1.98	3.17	457	1.16	5.60	1.44	-0.05	0.21	1.06	2.28	215	2.86
AuCrVAl	5.54	1.41	-0.06	0.18	1.03	4.38	1279	2.20	5.53	1.41	-0.06	0.18	0.87	3.95	1175	4.78
AuCrVGa	5.50	1.45	-0.00	0.16	1.04	4.58	1236	1.65	5.49	1.45	-0.00	0.16	0.92	4.20	1264	2.85
AuFeCoAl	5.40	1.38	-0.12	0.19	4.01	4.10	910	-1.26	5.38	1.38	-0.12	0.19	3.47	3.57	691	-6.19
AuFeMnGa	5.46	1.43	-0.01	0.15	1.84	3.07	698	-2.64	5.92	1.13	-0.02	0.12	1.05	5.83	227	-0.93
AuFeNiAl	5.45	1.35	-0.17	0.16	3.19	3.24	337	1.40	5.44	1.35	-0.18	0.16	3.11	3.15	240	1.30
AuFeVAl	5.61	1.31	-0.13	0.21	0.58	3.77	841	1.22	5.87	1.14	-0.12	0.22	0.64	3.56	534	-2.01
AuFeVGa	5.54	1.37	-0.04	0.19	0.58	3.99	869	1.81	5.58	1.33	-0.01	0.21	1.19	3.29	529	2.16
AuIrFeGa	5.65	1.32	-0.04	0.17	3.43	3.48	480	-4.31	5.66	1.31	-0.04	0.16	3.34	3.40	594	-2.13
AuMnCoAl	5.40	1.42	-0.17	0.21	4.57	4.66	584	-1.86	5.36	1.45	-0.17	0.18	4.43	4.53	645	1.71
AuMnCoGa	5.41	1.44	-0.06	0.17	4.76	4.90	617	-1.63	5.37	1.47	-0.05	0.15	4.68	4.84	734	1.63
AuMnCrAl	5.61	1.35	-0.13	0.12	0.13	6.28	1569	3.02	5.58	1.34	-0.12	0.10	0.61	5.65	1045	0.35
AuMnCrGa	5.57	1.39	-0.04	0.10	0.18	6.51	1457	2.02	5.68	1.33	-0.03	0.09	0.10	6.58	811	1.35
AuMnFeAl	5.43	1.43	-0.10	0.16	1.02	5.20	671	-1.72	5.61	1.30	-0.12	0.11	0.93	5.49	505	-1.55
AuMnNbAl	5.58	1.48	-0.15	0.17	2.18	3.79	527	1.73	5.57	1.47	-0.14	0.15	2.04	3.08	204	-0.46
AuMnNbGa	5.52	1.55	-0.10	0.15	2.40	4.14	553	1.06	5.48	1.57	-0.10	0.12	2.36	3.66	248	4.32
AuMnTiAl	5.61	1.39	-0.31	0.13	1.86	3.36	499	1.19	5.59	1.37	-0.33	0.08	1.08	2.36	273	1.37
AuMnVAl	5.58	1.37	-0.18	0.20	1.16	4.65	1233	1.95	5.55	1.35	-0.16	0.18	0.29	3.83	930	3.51
AuMnVGa	5.52	1.43	-0.11	0.18	1.21	5.04	1182	1.63	5.54	1.42	-0.09	0.17	1.15	4.99	806	1.25
AuTiFeAl	5.59	1.38	-0.24	0.22	1.62	2.80	777	1.91	5.62	1.36	-0.24	0.22	1.48	2.90	561	-1.30
AuTiFeGa	5.61	1.38	-0.19	0.19	1.71	2.99	756	1.91	5.66	1.34	-0.19	0.20	1.56	3.06	616	-0.57
AuVCrAl	5.55	1.42	-0.04	0.20	1.22	4.38	1391	2.60	5.52	1.44	-0.04	0.21	0.81	4.57	1278	6.56
AuVFeGa	5.64	1.31	-0.02	0.20	0.18	3.15	1125	2.05	5.68	1.28	-0.03	0.20	0.99	4.19	996	0.93
AuVMnAl	5.66	1.32	-0.19	0.19	2.75	3.25	1343	2.14	5.70	1.29	-0.20	0.14	1.00	5.22	1706	3.71
AuVMnGa	5.65	1.35	-0.12	0.17	1.64	4.53	1355	1.35	5.67	1.33	-0.13	0.13	1.01	5.39	1735	2.38
AuZnMnAl	5.51	1.46	-0.19	0.11	3.28	3.47	486	1.08	5.50	1.46	-0.21	0.05	3.26	3.44	789	-1.42
CoCrFeGe	5.20	1.36	-0.03	0.12	0.51	4.59	922	1.01	5.35	1.26	-0.03	0.12	0.93	4.77	664	0.49
CoCrIrAl	5.13	1.52	-0.27	0.20	1.93	2.36	420	1.83	5.13	1.50	-0.26	0.22	0.00	0.00	523	2.66
CoCrIrGa	5.18	1.49	-0.12	0.14	2.04	2.49	479	1.40	5.21	1.45	-0.11	0.15	0.55	0.79	614	2.73
CoCuIrGa	5.29	1.41	-0.04	0.15	1.84	1.90	334	1.88	5.32	1.38	-0.03	0.17	1.91	1.99	418	10.26
CoFeIrGa	5.13	1.53	-0.10	0.13	4.21	4.36	406	-4.20	5.17	1.51	-0.09	0.15	4.41	4.57	269	7.44
CoFeIrGe	5.14	1.53	-0.02	0.17	4.32	4.44	438	-9.75	5.15	1.53	-0.00	0.19	4.40	4.54	574	-12.46
CoFePtAl	5.10	1.58	-0.41	0.14	4.38	4.46	1014	-1.85	5.12	1.56	-0.40	0.16	4.30	4.38	1070	-3.83
CoFePtGa	5.17	1.55	-0.24	0.12	4.41	4.56	933	-1.21	5.19	1.53	-0.22	0.14	4.29	4.45	982	-3.21
CoFePtGe	5.24	1.50	-0.12	0.15	4.50	4.60	872	3.09	5.22	1.51	-0.11	0.16	4.50	4.58	870	7.93
CoFeRhGa	5.06	1.60	-0.18	0.20	4.57	4.73	729	-1.47	5.08	1.57	-0.16	0.22	4.65	4.81	893	-0.39
CoFeRhGe	5.09	1.57	-0.11	0.20	4.54	4.68	757	-1.10	5.11	1.55	-0.10	0.21	4.42	4.58	761	-1.90
CoIrFeSn	5.75	1.23	-0.03	0.11	4.59	4.65	703	-3.00	5.71	1.25	-0.02	0.15	4.25	4.33	765	-2.47
CoIrMnSb	5.79	1.22	-0.09	0.14	4.59	4.62	516	-1.33	5.75	1.23	-0.08	0.13	4.29	4.35	494	3.84
CoIrNiAl	5.30	1.35	-0.33	0.15	2.40	2.43	433	-3.74	5.28	1.36	-0.33	0.15	2.22	2.26	460	-5.61
CoIrNiGa	5.33	1.34	-0.16	0.07	2.42	2.47	435	-3.59	5.31	1.35	-0.15	0.08	2.20	2.26	448	-7.15
CoMnIrGa	5.19	1.49	-0.18	0.15	3.23	3.60	403	3.81	5.24	1.45	-0.18	0.12	2.10	3.64	181	5.64
CoMnIrSn	5.44	1.47	-0.01	0.20	4.56	4.75	474	-2.99	5.46	1.46	0.01	0.21	4.65	4.87	225	-12.34
CoMnOsGa	5.20	1.45	-0.01	0.20	2.30	2.66	366	-3.27	5.21	1.45	-0.01	0.16	2.30	2.84	453	-7.37
CoMnPtGe	5.27	1.50	-0.22	0.15	4.84	5.00	564	-3.47	5.26	1.51	-0.21	0.12	4.92	5.08	686	-1.57
CoMnPtSn	5.49	1.47	-0.18	0.15	4.84	5.04	620	-1.60	5.50	1.47	-0.17	0.16	4.95	5.15	638	-2.31
CoMnRhSb	5.41	1.50	-0.09	0.20	5.05	5.19	477	-1.21	5.39	1.53	-0.08	0.19	5.26	5.38	578	-1.94
CoMnRuGa	5.13	1.51	-0.11	0.17	2.38	2.98	509	1.26	5.15	1.49	-0.11	0.14	2.46	3.18	622	-1.16
CoNiPtAl	5.26	1.41	-0.42	0.12	1.99	2.04	367	7.05	5.26	1.40	-0.42	0.13	1.92	1.96	355	16.12

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CoNiPtGa	5.34	1.36	-0.25	0.11	1.94	2.02	325	8.86	5.34	1.36	-0.24	0.13	1.85	1.93	327	19.99
CoNiRhAl	5.19	1.42	-0.35	0.21	1.96	2.01	329	-3.47	5.19	1.41	-0.34	0.22	1.87	1.91	238	-6.10
CoNiRhGa	5.23	1.40	-0.20	0.15	2.02	2.12	357	-4.12	5.24	1.39	-0.19	0.17	1.92	2.02	238	-6.06
CoPdPtAl	5.39	1.43	-0.44	0.20	1.96	2.00	348	6.63	5.41	1.42	-0.43	0.21	1.86	1.90	357	15.76
CoPdPtGa	5.46	1.40	-0.26	0.20	1.91	1.99	312	8.74	5.46	1.39	-0.25	0.20	1.86	1.94	327	17.58
CoPdRhGa	5.37	1.42	-0.22	0.20	2.17	2.26	363	-4.32	5.36	1.42	-0.20	0.22	1.99	2.07	247	-6.37
CoPdRhIn	5.59	1.39	-0.09	0.22	2.32	2.40	366	-3.76	5.59	1.39	-0.07	0.24	2.12	2.22	297	-3.92
CoPtFeAl	5.56	1.22	-0.46	0.09	4.52	4.56	931	-2.65	5.52	1.25	-0.46	0.10	4.18	4.24	956	-3.40
CoPtFeGa	5.52	1.26	-0.30	0.06	4.46	4.54	885	-2.16	5.49	1.28	-0.29	0.07	4.11	4.21	949	-3.81
CoPtFeSn	5.65	1.32	-0.12	0.20	4.27	4.36	779	-4.40	5.58	1.36	-0.09	0.25	3.92	4.04	716	-2.49
CoPtMnGe	5.55	1.26	-0.28	0.09	4.53	4.62	582	-1.17	5.51	1.28	-0.27	0.06	4.16	4.28	549	-0.78
CoPtNiAl	5.38	1.32	-0.45	0.09	2.19	2.23	420	-1.23	5.36	1.32	-0.45	0.10	2.01	2.05	481	-5.12
CoPtNiIn	5.49	1.40	-0.08	0.19	2.35	2.43	359	-1.44	5.50	1.39	-0.07	0.20	2.08	2.16	361	-3.61
CoPtRhIn	5.57	1.42	-0.11	0.18	2.29	2.37	336	-5.55	5.55	1.43	-0.08	0.21	2.09	2.17	270	-7.35
CoRhNiAl	5.34	1.31	-0.36	0.20	2.46	2.50	506	-1.50	5.30	1.33	-0.35	0.21	2.19	2.23	450	-0.28
CoRhNiGa	5.36	1.31	-0.22	0.13	2.45	2.53	503	-1.05	5.35	1.31	-0.21	0.15	2.25	2.33	450	-0.29
CoRhPdGa	5.41	1.40	-0.20	0.22	2.25	2.33	324	-2.10	5.41	1.39	-0.19	0.23	2.22	2.30	279	-1.11
CoRhPtAl	5.36	1.42	-0.43	0.18	1.98	2.01	307	-2.66	5.35	1.43	-0.42	0.20	1.92	1.96	201	-14.24
CoRhPtIn	5.65	1.36	-0.11	0.19	2.12	2.20	309	-1.08	5.65	1.36	-0.08	0.21	2.21	2.29	291	-8.26
CoRuNiAl	5.19	1.43	-0.19	0.19	2.79	2.82	458	1.04	5.16	1.44	-0.19	0.20	2.70	2.74	483	2.04
CoRuNiGa	5.23	1.41	-0.06	0.15	2.81	2.87	473	1.60	5.20	1.42	-0.05	0.17	2.78	2.86	482	1.94
CrFeIrGa	5.19	1.51	-0.08	0.16	3.46	3.67	401	1.83	5.15	1.52	-0.10	0.14	2.00	2.24	709	-2.18
CrFeIrGe	5.21	1.48	-0.04	0.17	3.16	3.62	428	-1.44	5.23	1.46	-0.04	0.16	2.83	3.29	432	1.81
CrFePtGa	5.27	1.48	-0.13	0.20	3.76	4.10	442	1.11	5.24	1.48	-0.18	0.15	2.90	3.30	689	2.92
CrFePtGe	5.31	1.44	-0.08	0.17	3.77	4.17	311	-3.14	5.31	1.44	-0.08	0.16	3.40	3.74	474	-4.47
CrHfTiAl	5.57	1.57	-0.06	0.22	1.72	2.48	432	-1.20	5.54	1.58	-0.06	0.23	1.65	2.37	328	-2.51
CrIrCoAl	5.20	1.47	-0.27	0.20	1.63	3.05	719	2.24	5.13	1.50	-0.28	0.20	0.00	0.00	963	2.62
CrIrCoGa	5.23	1.46	-0.13	0.13	1.69	3.30	775	1.65	5.16	1.48	-0.14	0.12	0.00	0.00	1055	0.89
CrIrCoGe	5.31	1.40	-0.08	0.15	1.69	3.23	555	2.19	5.33	1.39	-0.08	0.15	1.69	3.57	987	14.67
CrIrFeGa	5.46	1.33	-0.15	0.09	0.31	5.43	961	4.06	5.47	1.33	-0.17	0.07	0.21	5.55	1057	7.95
CrIrFeGe	5.41	1.36	-0.08	0.13	0.30	5.04	890	2.19	5.49	1.30	-0.08	0.12	0.32	5.12	687	3.06
CrIrMnIn	5.73	1.33	-0.03	0.15	0.14	6.42	1391	3.95	5.73	1.33	-0.05	0.09	0.27	6.55	1603	10.57
CrIrMnSn	5.79	1.28	-0.12	0.09	0.26	6.30	1277	2.88	5.71	1.33	-0.14	0.06	0.39	6.35	1561	8.86
CrIrNiAl	5.28	1.43	-0.29	0.20	2.45	2.85	383	2.53	5.24	1.46	-0.30	0.20	2.37	2.77	664	2.80
CrIrNiGa	5.32	1.41	-0.17	0.15	2.54	2.90	373	1.90	5.30	1.42	-0.16	0.16	2.43	2.97	711	3.36
CrNiFeGa	5.30	1.33	-0.07	0.13	0.00	4.90	1079	1.15	5.37	1.26	-0.07	0.15	0.84	4.44	618	0.14
CrPtCoAl	5.33	1.41	-0.34	0.19	1.62	3.65	784	2.86	5.33	1.42	-0.33	0.20	1.91	3.83	993	10.19
CrPtCoGa	5.34	1.41	-0.20	0.12	1.67	3.83	762	2.14	5.36	1.41	-0.20	0.13	1.83	4.03	1083	10.13
CrPtFeAl	5.47	1.34	-0.34	0.19	0.24	5.45	1078	3.77	5.43	1.37	-0.33	0.20	0.29	5.21	1005	4.40
CrPtFeGa	5.48	1.35	-0.22	0.11	0.28	5.62	1058	3.08	5.43	1.39	-0.21	0.12	0.32	5.46	1061	3.88
CrPtFeGe	5.44	1.38	-0.12	0.13	0.33	5.40	990	1.16	5.42	1.39	-0.09	0.16	0.35	4.97	923	5.52
CrPtMnGa	5.58	1.32	-0.36	0.02	0.37	6.18	1508	4.43	5.54	1.34	-0.37	0.00	0.35	6.31	1853	7.38
CrPtMnGe	5.54	1.35	-0.26	0.04	0.38	6.11	1272	1.27	5.54	1.33	-0.26	0.01	0.92	5.88	1286	1.75
CrPtMnIn	5.78	1.32	-0.19	0.11	0.25	6.58	1461	1.86	5.73	1.36	-0.20	0.08	0.36	6.82	1704	3.36
CrPtRuAl	5.31	1.52	-0.34	0.19	2.02	2.88	563	4.54	5.32	1.51	-0.32	0.21	2.20	2.88	728	5.46
CrPtRuGa	5.32	1.52	-0.20	0.13	2.07	3.03	580	4.04	5.33	1.51	-0.18	0.15	2.24	2.98	796	4.37
CrPtVSn	5.66	1.41	-0.15	0.20	1.12	4.55	1182	1.35	5.66	1.40	-0.14	0.24	0.94	4.28	1260	3.89
CrPtZnGa	5.81	1.19	-0.29	0.10	3.21	3.31	434	1.45	5.82	1.19	-0.29	0.11	3.26	3.38	905	4.65
CrPtZnIn	5.91	1.27	-0.15	0.21	3.42	3.50	301	1.23	5.91	1.27	-0.14	0.21	3.47	3.55	638	3.04
CrRhFeGa	5.47	1.32	-0.17	0.17	0.17	5.70	1037	1.05	5.44	1.34	-0.19	0.16	0.05	5.57	1140	0.71
CrRhPtAl	5.33	1.51	-0.48	0.16	2.70	3.00	335	1.22	5.32	1.52	-0.46	0.17	2.57	2.85	565	1.32
CrRuPtAl	5.26	1.55	-0.35	0.19	2.14	2.56	425	2.34	5.26	1.55	-0.33	0.20	1.75	2.91	736	6.84
CrRuPtGa	5.32	1.51	-0.19	0.14	2.23	2.77	461	1.60	5.34	1.49	-0.17	0.16	1.88	3.16	780	6.98
CuFeIrGa	5.31	1.43	-0.08	0.12	3.11	3.21	431	-2.90	5.38	1.36	-0.07	0.13	2.90	3.02	458	-2.62
CuFePtAl	5.30	1.45	-0.35	0.17	3.01	3.06	373	3.57	5.29	1.45	-0.34	0.18	2.95	2.99	296	7.60
CuFePtGa	5.39	1.39	-0.20	0.13	3.02	3.10	302	3.46	5.40	1.39	-0.19	0.14	3.09	3.15	304	9.17
CuIrCoAl	5.42	1.30	-0.27	0.20	2.01	2.02	467	-1.00	5.41	1.30	-0.26	0.21	2.04	2.06	628	3.99
CuIrCoGa	5.42	1.31	-0.10	0.10	2.01	2.04	453	-1.45	5.39	1.32	-0.08	0.12	1.97	2.01	564	5.90
CuIrMnGe	5.48	1.33	-0.13	0.09	3.55	3.65	321	-1.66	5.66	1.21	-0.12	0.07	3.11	3.37	178	6.41
CuNbMnGa	5.47	1.43	-0.02	0.21	1.96	3.25	620	1.19	5.48	1.42	-0.02	0.18	2.02	3.26	612	-0.13

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
FeIrCoGa	5.23	1.44	-0.13	0.10	4.40	4.53	749	-1.02	5.28	1.41	-0.12	0.11	4.57	4.69	688	1.66
FeIrCoGe	5.25	1.42	-0.06	0.13	3.94	4.07	584	-9.11	5.25	1.42	-0.06	0.13	3.90	4.02	585	-8.33
FeIrCrGa	5.39	1.36	-0.17	0.07	0.06	4.74	839	4.00	5.34	1.39	-0.16	0.08	0.13	4.53	591	-3.68
FeIrCuAl	5.30	1.42	-0.26	0.21	2.99	3.03	412	1.64	5.26	1.45	-0.25	0.22	2.96	3.00	64	1.57
FeIrCuGa	5.32	1.42	-0.11	0.10	3.06	3.12	354	2.26	5.30	1.43	-0.10	0.11	3.06	3.14	71	1.70
FeIrNiAl	5.22	1.45	-0.36	0.15	3.52	3.57	517	-2.28	5.21	1.45	-0.36	0.14	3.54	3.58	395	1.66
FeIrNiGa	5.24	1.44	-0.20	0.05	3.53	3.63	507	-1.52	5.24	1.44	-0.20	0.06	3.59	3.67	360	1.20
FeIrPdGa	5.30	1.53	-0.17	0.18	3.45	3.55	315	-2.98	5.30	1.53	-0.17	0.19	3.49	3.57	180	-0.79
FeMnAuAl	5.34	1.51	-0.17	0.09	5.57	5.70	883	1.51	5.30	1.53	-0.18	0.04	5.44	5.58	587	-0.00
FeMnAuGa	5.44	1.45	-0.07	0.10	5.65	5.89	888	2.27	5.43	1.45	-0.07	0.07	5.62	5.88	609	3.70
FeMnCoAl	5.33	1.30	-0.18	0.16	6.70	6.83	1090	2.50	5.42	1.24	-0.19	0.12	6.86	6.98	1272	1.77
FeMnCoGa	5.28	1.34	-0.12	0.08	6.71	6.96	1117	2.50	5.30	1.33	-0.12	0.06	6.88	7.10	1173	1.85
FeMnCoGe	5.13	1.44	-0.11	0.10	6.10	6.34	903	2.22	5.14	1.42	-0.11	0.08	5.97	6.21	842	2.25
FeMnCrAs	5.12	1.47	-0.04	0.14	1.33	5.97	982	1.69	5.10	1.50	-0.06	0.09	1.43	6.29	1248	0.29
FeMnCrGa	5.28	1.36	-0.07	0.05	2.22	6.44	1204	1.81	5.27	1.36	-0.07	0.02	1.86	6.24	1219	2.13
FeMnCrGe	5.19	1.42	-0.09	0.07	1.58	6.14	1097	1.61	5.21	1.39	-0.09	0.04	1.13	5.75	1065	1.64
FeMnCuGa	5.22	1.42	-0.09	0.05	5.19	5.40	1005	1.01	5.21	1.42	-0.09	0.01	5.02	5.24	871	2.23
FeMnCuGe	5.21	1.42	-0.07	0.05	4.99	5.19	881	1.30	5.18	1.43	-0.08	0.03	4.85	5.05	923	1.21
FeMnCuSi	5.14	1.40	-0.20	0.14	4.73	4.88	867	1.26	5.11	1.41	-0.21	0.10	4.64	4.80	957	1.41
FeMnIrAl	5.10	1.54	-0.30	0.21	3.46	3.75	458	4.86	5.11	1.53	-0.33	0.14	3.13	3.55	711	1.86
FeMnIrGe	5.19	1.51	-0.09	0.15	4.60	4.85	483	-6.73	5.18	1.49	-0.12	0.08	3.20	3.70	411	-3.89
FeMnNiAl	5.00	1.54	-0.24	0.13	4.89	5.00	753	1.03	5.02	1.52	-0.24	0.10	4.93	5.05	409	0.98
FeMnNiGa	5.14	1.45	-0.16	0.08	5.58	5.80	1053	1.24	5.17	1.43	-0.16	0.05	5.59	5.83	561	1.51
FeMnNiGe	5.09	1.47	-0.17	0.06	5.10	5.31	729	1.11	5.05	1.48	-0.18	0.02	4.54	4.76	569	0.34
FeMnNiSn	5.28	1.51	-0.03	0.12	5.46	5.71	824	1.62	5.26	1.52	-0.03	0.12	5.39	5.65	593	0.80
FeMnPdGe	5.31	1.47	-0.15	0.15	5.69	5.94	674	1.56	5.31	1.47	-0.14	0.13	5.67	5.91	379	1.49
FeMnPdSb	5.51	1.48	-0.09	0.17	5.88	6.03	708	1.05	5.47	1.50	-0.08	0.15	5.54	5.72	416	1.21
FeMnPdSn	5.50	1.48	-0.10	0.20	5.74	6.02	780	1.51	5.52	1.47	-0.10	0.19	5.81	6.09	438	2.13
FeMnPtAl	5.22	1.54	-0.41	0.15	5.61	5.75	789	1.14	5.23	1.53	-0.40	0.13	5.60	5.74	523	2.54
FeMnPtSb	5.53	1.48	-0.11	0.20	5.98	6.12	785	1.89	5.50	1.50	-0.09	0.19	5.77	5.93	608	6.78
FeMnRuGa	5.17	1.49	-0.07	0.16	4.27	4.41	414	1.46	5.16	1.49	-0.08	0.11	3.89	4.03	587	-2.75
FeMnZnAl	5.32	1.39	-0.18	0.05	4.85	5.06	956	1.48	5.32	1.38	-0.18	0.01	4.76	5.00	1020	1.74
FeMnZnGa	5.33	1.39	-0.12	0.01	4.91	5.20	986	1.43	5.31	1.39	-0.13	0.00	4.78	5.10	994	1.30
FeMnZnGe	5.34	1.39	-0.04	0.09	4.90	5.13	757	1.25	5.30	1.41	-0.04	0.07	4.70	4.96	606	1.76
FeMoPtAl	5.25	1.57	-0.31	0.22	2.09	2.17	313	1.35	5.26	1.56	-0.30	0.22	1.72	2.36	217	2.47
FeMoPtGa	5.33	1.52	-0.16	0.17	2.29	2.42	323	1.10	5.34	1.50	-0.16	0.18	1.76	2.58	233	2.38
FeNiCoGe	5.13	1.38	-0.12	0.08	3.73	3.88	743	-1.05	5.11	1.38	-0.12	0.10	3.37	3.51	690	-0.97
FeNiPtAl	5.21	1.48	-0.45	0.11	3.38	3.44	423	-1.52	5.25	1.45	-0.44	0.11	3.17	3.25	425	-0.40
FeNiPtGa	5.29	1.43	-0.28	0.08	3.31	3.42	360	-1.14	5.33	1.40	-0.27	0.09	3.11	3.25	384	0.14
FeNiRhGa	5.15	1.51	-0.23	0.15	3.50	3.62	311	-1.63	5.15	1.51	-0.21	0.17	3.64	3.74	296	-2.40
FeNiRhSn	5.49	1.39	-0.09	0.18	3.35	3.49	302	-1.29	5.52	1.36	-0.08	0.22	3.14	3.28	296	-0.62
FeOsCoAl	5.09	1.51	-0.10	0.21	2.02	2.48	301	6.77	5.13	1.48	-0.10	0.21	2.12	2.82	102	12.95
FeOsNiAl	5.14	1.51	-0.13	0.19	3.46	3.49	464	7.72	5.13	1.51	-0.15	0.19	3.61	3.65	380	21.80
FePdRhIn	5.52	1.48	-0.14	0.20	3.60	3.72	321	-1.66	5.51	1.49	-0.11	0.22	3.57	3.67	240	-2.24
FePtCoAl	5.31	1.40	-0.39	0.16	4.14	4.22	900	-6.09	5.32	1.39	-0.38	0.18	4.06	4.14	862	-12.44
FePtCoGa	5.32	1.40	-0.24	0.12	4.27	4.42	874	-6.00	5.32	1.40	-0.22	0.14	4.14	4.28	839	-11.35
FePtCrAl	5.49	1.31	-0.37	0.16	0.60	4.83	972	1.43	5.48	1.30	-0.36	0.17	0.87	4.35	552	0.21
FePtCrGa	5.45	1.35	-0.23	0.10	0.56	4.91	951	2.42	5.46	1.34	-0.22	0.11	0.88	4.60	544	-0.69
FePtMnIn	5.63	1.39	-0.10	0.21	0.33	5.66	554	-2.59	5.64	1.36	-0.09	0.18	1.88	5.48	198	-5.04
FePtNiAl	5.34	1.37	-0.46	0.10	3.46	3.51	497	-2.09	5.35	1.36	-0.46	0.10	3.20	3.26	565	-4.08
FePtNiGa	5.35	1.38	-0.30	0.06	3.44	3.53	410	-2.10	5.38	1.36	-0.29	0.07	3.22	3.34	491	-2.83
FePtVGa	5.46	1.34	-0.36	0.09	0.64	2.71	623	1.19	5.45	1.32	-0.34	0.11	0.04	0.32	0	0.00
FeRhCoGe	5.26	1.40	-0.14	0.17	4.16	4.31	701	-2.10	5.25	1.40	-0.13	0.18	4.02	4.16	648	-1.91
FeRhCoSn	5.41	1.45	-0.05	0.22	4.38	4.56	686	-1.79	5.42	1.44	-0.03	0.26	4.34	4.50	702	-1.31
FeRhCrGa	5.41	1.34	-0.19	0.16	0.15	4.95	1010	1.10	5.34	1.38	-0.17	0.17	0.19	4.61	684	1.43
FeRhCuGa	5.36	1.37	-0.18	0.17	3.06	3.15	341	1.45	5.35	1.37	-0.16	0.19	3.11	3.23	167	0.49
FeRhPdAl	5.25	1.55	-0.40	0.22	3.60	3.66	439	-1.06	5.25	1.55	-0.39	0.22	3.67	3.73	312	0.18
FeRuCoAl	5.07	1.52	-0.16	0.21	2.12	2.71	439	1.33	5.11	1.48	-0.16	0.21	2.05	2.97	182	3.54
FeRuCoGa	5.15	1.48	-0.04	0.16	4.04	4.15	677	2.16	5.14	1.48	-0.03	0.17	2.03	3.17	204	3.59
FeScMnGa	5.42	1.51	-0.18	0.18	4.47	5.11	860	-1.09	5.41	1.52	-0.17	0.15	4.63	5.35	699	1.54

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
HfMnAuIn	5.89	1.44	-0.16	0.20	2.99	3.57	403	-1.23	5.88	1.44	-0.16	0.16	2.40	3.56	634	0.38
HfMnCuGa	5.39	1.51	-0.19	0.14	1.49	1.96	350	-1.18	5.43	1.48	-0.19	0.10	1.33	2.23	481	-1.62
HfMnFeGa	5.45	1.47	-0.18	0.18	3.89	4.71	850	-1.43	5.32	1.57	-0.18	0.14	0.23	4.13	844	-6.22
HfMnPdGa	5.51	1.51	-0.42	0.16	2.35	2.97	342	-1.21	5.51	1.51	-0.42	0.12	1.98	2.94	648	-2.49
HfRhFeGa	5.34	1.59	-0.45	0.19	1.72	2.21	328	-1.17	5.31	1.63	-0.44	0.20	1.59	2.17	410	-1.84
IrMnCoAl	5.19	1.47	-0.36	0.16	2.27	3.62	516	8.78	5.22	1.45	-0.38	0.11	1.96	3.84	551	17.04
IrMnCoGa	5.24	1.46	-0.22	0.12	2.54	3.88	687	6.89	5.26	1.44	-0.23	0.07	1.92	4.06	573	16.53
IrMnCoGe	5.25	1.44	-0.15	0.14	3.40	3.52	419	-1.72	5.29	1.40	-0.14	0.12	1.90	3.58	238	8.19
IrMnCrGa	5.43	1.38	-0.26	0.04	0.53	5.83	1331	3.09	5.37	1.41	-0.26	0.00	0.65	5.61	1320	4.32
IrMnCrGe	5.39	1.39	-0.21	0.04	0.44	5.60	1237	5.83	5.38	1.39	-0.20	0.00	0.11	5.29	1021	6.17
IrMnCrIn	5.65	1.37	-0.03	0.15	0.34	6.33	1332	4.25	5.58	1.43	-0.02	0.12	0.48	6.38	1387	3.67
IrMnCrSi	5.33	1.37	-0.36	0.10	0.45	5.19	1131	5.24	5.31	1.37	-0.37	0.06	0.11	4.75	946	4.80
IrMnCrSn	5.63	1.37	-0.10	0.12	0.14	6.05	1223	4.57	5.61	1.39	-0.09	0.11	0.10	5.94	1099	4.47
IrMnCuAl	5.36	1.41	-0.38	0.12	3.77	3.81	335	-1.85	5.38	1.39	-0.37	0.10	3.77	3.83	290	8.03
IrMnFeGe	5.31	1.41	-0.13	0.11	0.72	4.96	649	-1.35	5.29	1.42	-0.14	0.06	0.97	4.75	572	8.65
IrMnFeSn	5.54	1.41	-0.03	0.18	2.13	4.64	624	-1.77	5.49	1.44	-0.03	0.16	0.92	5.38	297	7.32
IrMnNiAl	5.25	1.46	-0.44	0.11	3.70	3.76	356	1.19	5.23	1.47	-0.45	0.07	3.74	3.80	394	13.17
IrMnNiGa	5.28	1.44	-0.30	0.06	3.79	3.90	367	2.35	5.26	1.45	-0.30	0.03	3.76	3.86	432	11.07
IrMnOsGa	5.31	1.49	-0.08	0.21	2.38	3.02	520	10.34	5.32	1.48	-0.08	0.17	2.55	3.01	633	9.09
IrMnRhAl	5.25	1.53	-0.48	0.21	2.82	3.31	358	18.98	5.26	1.53	-0.47	0.18	2.77	3.37	315	17.16
IrMnRhGa	5.28	1.52	-0.31	0.17	2.99	3.40	372	19.03	5.30	1.51	-0.30	0.15	2.86	3.50	360	15.07
IrMnRuAl	5.24	1.53	-0.36	0.18	2.44	3.15	604	9.24	5.26	1.51	-0.36	0.14	2.65	3.09	658	13.16
IrMnRuGa	5.26	1.52	-0.20	0.14	2.51	3.29	651	9.27	5.28	1.51	-0.20	0.10	2.67	3.23	714	12.58
IrMnRuSn	5.48	1.50	-0.03	0.18	2.66	3.58	336	9.89	5.49	1.49	-0.01	0.19	2.79	3.55	187	19.82
IrMnVIn	5.72	1.32	-0.11	0.22	1.73	4.60	995	1.67	5.66	1.35	-0.10	0.19	1.70	4.34	951	0.56
IrMnZrGa	5.73	1.36	-0.47	0.19	2.88	3.24	316	-1.56	5.71	1.36	-0.48	0.15	2.73	3.15	71	5.61
IrMnZrIn	6.17	1.20	-0.32	0.16	3.02	3.48	313	-1.14	6.53	1.01	-0.34	0.12	3.47	3.91	25	0.11
IrNiCoAl	5.35	1.31	-0.38	0.10	2.26	2.29	576	-5.00	5.34	1.31	-0.38	0.11	2.18	2.20	584	-2.80
IrNiCoGa	5.35	1.32	-0.20	0.03	2.26	2.31	548	-5.79	5.34	1.32	-0.19	0.05	2.16	2.20	549	-1.80
IrNiFeAl	5.53	1.22	-0.44	0.07	3.82	3.85	546	-2.56	5.51	1.23	-0.43	0.08	3.80	3.82	472	-1.53
IrNiFeGa	5.49	1.26	-0.26	0.00	3.75	3.81	538	-2.79	5.49	1.26	-0.26	0.00	3.86	3.90	473	-1.16
IrNiFeIn	5.67	1.28	-0.02	0.10	3.82	3.87	520	-1.13	5.66	1.29	-0.01	0.12	3.91	3.97	502	-0.26
IrNiFeSn	5.61	1.32	-0.08	0.09	3.57	3.63	492	-5.00	5.59	1.32	-0.07	0.13	3.37	3.45	553	0.96
IrPdCoAl	5.64	1.22	-0.40	0.14	2.33	2.35	545	-3.62	5.63	1.22	-0.40	0.15	2.28	2.30	674	-4.48
IrPdCoGa	5.64	1.24	-0.22	0.12	2.26	2.31	528	-3.88	5.63	1.24	-0.21	0.13	2.24	2.28	652	-3.50
IrPdFeAl	5.74	1.18	-0.48	0.09	3.70	3.71	488	-2.78	5.73	1.19	-0.47	0.10	3.65	3.67	421	-2.66
IrPdFeGa	5.71	1.22	-0.30	0.06	3.66	3.70	499	-3.00	5.71	1.22	-0.29	0.07	3.70	3.74	420	-2.87
IrPdFeIn	5.87	1.24	-0.13	0.16	3.71	3.75	470	-1.74	5.86	1.24	-0.11	0.18	3.76	3.80	416	-1.67
IrPdFeSn	5.80	1.28	-0.16	0.14	3.46	3.52	459	-4.55	5.79	1.28	-0.14	0.17	3.35	3.41	560	-0.35
IrPtCoAl	5.59	1.26	-0.47	0.09	2.19	2.22	544	-7.09	5.58	1.26	-0.47	0.10	2.22	2.24	603	-8.83
IrPtCoGa	5.59	1.27	-0.25	0.08	2.16	2.19	521	-7.49	5.59	1.27	-0.23	0.10	2.24	2.26	584	-8.87
IrPtCoIn	5.70	1.33	-0.05	0.21	2.32	2.37	492	-7.30	5.69	1.33	-0.04	0.23	2.21	2.27	519	-4.26
IrPtCoSn	5.69	1.34	-0.12	0.18	2.08	2.13	462	-2.00	5.69	1.33	-0.11	0.21	2.07	2.11	552	-1.33
IrPtFeAl	5.69	1.22	-0.54	0.05	3.78	3.79	489	-7.58	5.68	1.23	-0.53	0.06	3.70	3.72	450	-11.87
IrPtFeGa	5.67	1.25	-0.33	0.03	3.74	3.77	469	-8.23	5.67	1.26	-0.31	0.04	3.76	3.78	420	-11.56
IrPtFeIn	5.81	1.28	-0.14	0.15	3.78	3.81	473	-5.39	5.81	1.28	-0.13	0.16	3.78	3.82	449	-9.54
IrPtFeSn	5.75	1.32	-0.16	0.16	3.49	3.54	481	-8.48	5.74	1.33	-0.14	0.20	3.36	3.42	534	-7.04
IrRhCoSn	5.72	1.28	-0.11	0.13	2.18	2.23	453	-3.79	5.74	1.27	-0.09	0.18	2.23	2.27	530	-4.53
IrRhFeSn	5.85	1.23	-0.19	0.07	3.88	3.91	418	-6.24	5.85	1.23	-0.17	0.12	3.86	3.88	424	-5.70
IrTiMnGa	5.28	1.56	-0.50	0.12	2.32	3.35	475	-1.50	5.28	1.56	-0.51	0.08	2.28	3.30	643	0.39
IrVCrGa	5.28	1.50	-0.20	0.16	1.15	2.64	545	-1.22	5.23	1.54	-0.18	0.18	1.07	2.53	318	-5.67
IrZnFeAl	5.44	1.36	-0.28	0.21	3.03	3.14	488	-1.42	5.44	1.36	-0.28	0.21	3.08	3.14	478	-2.23
IrZnFeGa	5.35	1.45	-0.14	0.13	3.06	3.22	492	-1.23	5.36	1.44	-0.13	0.14	3.17	3.23	496	-4.96
MnMoPtAl	5.23	1.61	-0.40	0.19	2.24	2.37	409	1.46	5.21	1.61	-0.39	0.16	1.24	2.86	604	3.37
MnMoPtGa	5.31	1.55	-0.25	0.14	2.56	2.97	469	1.19	5.34	1.53	-0.24	0.12	1.72	3.68	807	3.64
MnNbIrSn	5.59	1.52	-0.17	0.15	2.83	3.22	317	-1.10	5.65	1.47	-0.16	0.16	2.53	3.41	537	-2.40
MnNbPtSn	5.64	1.51	-0.28	0.14	2.82	3.37	367	-1.07	5.64	1.51	-0.26	0.15	1.97	3.87	799	1.73
MnOsCoAl	5.11	1.52	-0.16	0.20	2.01	2.99	477	4.92	5.16	1.49	-0.19	0.14	1.91	3.49	724	5.22
MnOsCoGa	5.15	1.50	-0.02	0.19	2.10	3.26	517	4.51	5.21	1.46	-0.05	0.13	1.91	3.83	765	6.80
MnOsCrGa	5.44	1.34	-0.04	0.10	1.19	5.24	1043	3.45	5.51	1.28	-0.04	0.06	1.07	5.11	814	15.89

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
MnOsCuAl	5.29	1.46	-0.10	0.16	3.73	3.77	415	2.31	5.28	1.46	-0.10	0.12	3.67	3.73	345	16.07
MnOsIrGa	5.29	1.51	-0.09	0.20	2.44	3.10	533	14.66	5.32	1.49	-0.09	0.15	2.37	3.25	691	21.84
MnOsNiAl	5.18	1.50	-0.19	0.19	3.16	3.20	429	7.47	5.15	1.51	-0.20	0.15	2.81	2.91	451	4.31
MnOsNiGa	5.23	1.46	-0.06	0.19	3.30	3.38	429	8.77	5.22	1.47	-0.06	0.16	2.95	3.17	447	4.79
MnOsZnAl	5.49	1.36	-0.14	0.12	3.70	3.76	417	3.84	5.63	1.25	-0.14	0.09	3.63	3.73	375	9.57
MnPdHfGa	5.65	1.41	-0.41	0.16	2.63	3.07	379	-1.06	5.68	1.37	-0.40	0.14	1.94	2.50	31	1.26
MnPdNiAl	5.31	1.44	-0.43	0.11	4.07	4.14	403	-1.01	5.30	1.45	-0.44	0.08	4.00	4.08	375	-0.85
MnPdRuGa	5.31	1.52	-0.19	0.21	3.05	3.65	446	1.04	5.32	1.51	-0.18	0.19	3.22	3.66	126	0.72
MnPtCoGa	5.32	1.44	-0.31	0.11	4.70	4.84	605	-1.69	5.35	1.42	-0.30	0.09	4.77	4.93	660	-2.64
MnPtCoIn	5.47	1.48	-0.14	0.17	4.88	5.01	575	-1.26	5.50	1.46	-0.13	0.15	5.02	5.16	674	-4.14
MnPtCoSn	5.45	1.49	-0.18	0.16	4.76	4.92	309	-3.38	5.45	1.50	-0.16	0.17	4.78	4.96	630	-2.24
MnPtCrAl	5.51	1.34	-0.46	0.10	0.17	5.87	1554	6.80	5.45	1.37	-0.44	0.09	0.05	5.63	1330	8.17
MnPtCrGa	5.48	1.37	-0.35	0.03	0.22	6.07	1484	5.62	5.45	1.40	-0.32	0.02	0.03	5.91	1320	5.59
MnPtCrGe	5.41	1.43	-0.24	0.06	0.29	5.92	1280	4.71	5.44	1.38	-0.21	0.06	0.64	5.32	731	2.55
MnPtCrIn	5.69	1.37	-0.17	0.14	0.08	6.61	1378	2.89	5.66	1.41	-0.14	0.13	0.04	6.64	1110	2.49
MnPtCrSn	5.65	1.40	-0.17	0.16	0.02	6.34	1141	1.23	5.70	1.36	-0.15	0.17	0.43	6.11	182	-0.29
MnPtFeGa	5.38	1.41	-0.27	0.11	1.37	5.03	728	-1.66	5.34	1.43	-0.26	0.08	0.76	5.36	171	0.89
MnPtFeIn	5.56	1.44	-0.10	0.21	1.63	5.43	643	-1.27	5.62	1.41	-0.08	0.19	1.06	6.16	367	0.76
MnPtFeSn	5.54	1.45	-0.13	0.20	3.12	3.58	552	-2.74	5.53	1.45	-0.12	0.19	1.23	5.25	470	-1.88
MnPtHfGa	5.63	1.43	-0.55	0.21	2.65	3.01	332	-1.15	5.67	1.38	-0.54	0.19	1.96	2.46	17	1.63
MnPtMoGa	5.38	1.51	-0.22	0.18	2.12	3.89	624	2.48	5.39	1.49	-0.21	0.15	1.73	3.43	603	2.38
MnPtNiAl	5.32	1.43	-0.56	0.04	3.99	4.06	302	-3.71	5.32	1.43	-0.55	0.01	4.01	4.07	204	-2.69
MnPtNiGa	5.34	1.43	-0.42	0.03	4.00	4.12	300	-3.67	5.35	1.42	-0.41	0.01	4.05	4.17	257	-3.23
MnPtNiIn	5.45	1.50	-0.27	0.07	4.16	4.27	335	-2.44	5.45	1.50	-0.26	0.05	4.19	4.29	292	-1.81
MnPtRuAl	5.29	1.52	-0.42	0.19	2.61	3.31	357	11.66	5.29	1.53	-0.39	0.17	2.83	3.31	58	12.79
MnPtRuGa	5.31	1.52	-0.26	0.17	2.87	3.51	456	9.78	5.32	1.52	-0.24	0.16	3.03	3.51	91	-1.95
MnPtRuIn	5.53	1.49	-0.09	0.22	3.15	3.80	446	8.45	5.55	1.48	-0.06	0.21	3.23	3.79	125	-1.80
MnPtVAl	5.50	1.34	-0.51	0.19	1.31	4.02	1109	2.82	5.50	1.33	-0.51	0.16	0.89	3.47	917	3.69
MnPtVGa	5.44	1.40	-0.42	0.09	1.45	4.33	1130	1.79	5.44	1.39	-0.41	0.07	0.95	3.93	1084	1.51
MnPtVGe	5.36	1.47	-0.34	0.09	1.49	4.33	972	1.36	5.34	1.47	-0.32	0.08	1.45	3.81	799	-0.44
MnRhCoGa	5.22	1.47	-0.26	0.16	3.63	3.77	681	1.59	5.22	1.47	-0.25	0.14	2.36	4.18	518	3.90
MnRhCrGe	5.41	1.38	-0.26	0.07	0.37	5.80	1364	1.06	5.38	1.39	-0.24	0.05	0.10	5.48	1209	0.75
MnRhHfIn	6.26	1.11	-0.35	0.18	2.49	2.94	347	-1.09	6.23	1.11	-0.34	0.16	2.19	2.67	19	1.54
MnRhRuGa	5.25	1.53	-0.24	0.19	2.61	3.43	638	1.64	5.26	1.52	-0.24	0.16	2.67	3.35	726	-0.12
MnRhRuGe	5.26	1.51	-0.18	0.22	2.58	3.33	360	1.34	5.27	1.50	-0.16	0.20	2.58	3.34	144	5.41
MnRhRuSn	5.48	1.49	-0.11	0.21	2.89	3.65	401	1.49	5.48	1.50	-0.08	0.22	2.96	3.58	216	4.02
MnRuAuAl	5.41	1.52	-0.20	0.21	4.00	4.06	330	1.06	5.39	1.52	-0.20	0.18	3.98	4.06	509	-1.44
MnRuAuGa	5.49	1.47	-0.07	0.19	4.05	4.15	306	1.05	5.47	1.47	-0.06	0.17	4.04	4.16	500	-1.31
MnRuCoGe	5.18	1.47	-0.11	0.19	2.42	3.46	519	1.32	5.22	1.43	-0.11	0.15	2.05	3.71	512	2.36
MnRuCrGa	5.48	1.32	-0.12	0.10	1.05	5.66	1196	1.37	5.49	1.30	-0.11	0.07	0.91	5.45	1022	2.73
MnRuIrAl	5.23	1.54	-0.37	0.17	2.54	3.09	523	6.18	5.25	1.52	-0.37	0.13	2.48	3.22	701	10.20
MnRuIrGa	5.28	1.51	-0.20	0.14	2.60	3.27	579	6.44	5.29	1.49	-0.20	0.10	2.52	3.38	744	10.25
MnRuNiAl	5.17	1.50	-0.28	0.16	3.33	3.38	439	1.16	5.14	1.51	-0.28	0.12	3.01	3.13	504	0.13
MnRuNiGa	5.22	1.47	-0.18	0.13	3.51	3.62	481	1.36	5.21	1.47	-0.17	0.11	3.07	3.35	564	0.95
MnRuPdGa	5.32	1.52	-0.19	0.21	3.59	3.71	399	2.73	5.31	1.52	-0.18	0.19	3.28	3.46	535	1.43
MnRuPtAl	5.28	1.54	-0.44	0.17	3.23	3.44	350	12.59	5.28	1.54	-0.42	0.15	3.11	3.31	491	4.27
MnRuPtGa	5.35	1.50	-0.27	0.16	3.31	3.52	327	12.31	5.37	1.48	-0.25	0.15	2.90	3.58	537	2.85
MnRuPtIn	5.55	1.49	-0.10	0.21	3.56	3.70	317	10.55	5.56	1.47	-0.07	0.21	3.09	3.83	494	3.16
MnRuRhAl	5.19	1.56	-0.37	0.22	2.68	3.25	531	1.81	5.21	1.55	-0.36	0.19	2.61	3.35	636	1.92
MnRuRhGa	5.24	1.54	-0.24	0.20	2.72	3.43	564	1.92	5.25	1.52	-0.23	0.17	2.63	3.53	682	2.03
MnRuRhSn	5.47	1.51	-0.12	0.20	3.24	3.57	324	3.04	5.49	1.48	-0.09	0.21	2.92	3.68	478	1.62
MnVIrGa	5.20	1.57	-0.33	0.10	2.15	3.69	474	-1.27	5.16	1.60	-0.33	0.05	1.19	3.93	1213	-5.28
NbZnMnAl	5.55	1.42	-0.09	0.21	1.92	3.02	592	1.13	5.55	1.39	-0.09	0.18	1.52	2.64	256	-0.06
NbZnMnGa	5.51	1.46	-0.06	0.19	1.99	3.45	592	1.03	5.51	1.45	-0.05	0.17	2.06	3.12	273	-0.05
NiOsCoAl	5.32	1.32	-0.15	0.20	1.86	1.88	363	2.19	5.26	1.35	-0.14	0.21	0.65	0.65	47	0.57
NiOsFeGa	5.53	1.22	-0.02	0.18	3.46	3.48	320	2.43	5.58	1.20	-0.02	0.19	3.71	3.71	170	-2.66
NiPdFeSn	5.64	1.32	-0.13	0.17	3.21	3.31	314	1.77	5.63	1.32	-0.12	0.21	3.10	3.18	258	2.10
NiPtCoAl	5.31	1.37	-0.47	0.07	2.16	2.20	553	-1.50	5.30	1.37	-0.48	0.07	2.06	2.10	544	1.76
NiPtCoGa	5.32	1.38	-0.29	0.06	2.18	2.26	526	-1.06	5.31	1.38	-0.29	0.08	2.10	2.18	548	1.71
NiPtCoIn	5.48	1.41	-0.11	0.17	2.23	2.30	467	-1.13	5.49	1.40	-0.10	0.17	2.15	2.23	458	1.42

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
NiPtFeAl	5.43	1.31	-0.50	0.06	3.56	3.60	592	-3.65	5.38	1.34	-0.49	0.07	3.24	3.30	638	-0.71
NiPtFeGa	5.41	1.34	-0.33	0.04	3.57	3.64	544	-4.36	5.36	1.37	-0.32	0.04	3.33	3.43	623	-0.78
NiPtFeIn	5.61	1.34	-0.15	0.15	3.56	3.64	509	-3.18	5.56	1.37	-0.14	0.16	3.37	3.47	540	-0.11
NiPtMnAl	5.60	1.23	-0.62	0.00	4.20	4.24	402	-2.55	5.51	1.28	-0.61	0.00	4.01	4.07	431	-0.04
NiPtMnGa	5.54	1.29	-0.46	0.00	4.13	4.21	412	-2.20	5.49	1.31	-0.46	0.00	4.00	4.10	431	-0.48
NiPtMnIn	5.76	1.27	-0.30	0.04	4.27	4.34	394	-1.03	5.71	1.31	-0.29	0.02	4.15	4.25	393	-0.54
NiPtMnTi	5.77	1.32	-0.02	0.22	4.36	4.42	352	-1.26	5.73	1.34	-0.01	0.19	4.24	4.30	325	-1.03
NiRhCoAl	5.35	1.30	-0.40	0.16	2.42	2.45	616	-1.91	5.34	1.30	-0.39	0.17	2.29	2.33	518	-2.04
NiRhCoGa	5.35	1.31	-0.26	0.10	2.44	2.50	599	-2.27	5.34	1.31	-0.24	0.11	2.29	2.37	484	-2.18
NiRhCoIn	5.53	1.34	-0.03	0.19	2.52	2.60	580	-1.82	5.52	1.34	-0.02	0.21	2.33	2.41	456	-1.43
NiRhCoSb	5.44	1.39	-0.10	0.16	2.27	2.28	309	2.25	5.42	1.40	-0.09	0.18	2.06	2.08	278	1.20
NiRhCoSn	5.49	1.36	-0.14	0.10	2.23	2.30	484	1.18	5.49	1.35	-0.13	0.15	2.10	2.18	476	1.64
NiTaMnGa	5.24	1.55	-0.14	0.22	1.85	2.50	358	1.01	5.22	1.56	-0.14	0.20	1.35	2.79	421	-2.10
NiVFeGa	5.24	1.39	-0.17	0.13	1.32	2.71	878	1.16	5.26	1.37	-0.16	0.14	1.28	2.92	493	0.13
PdPtCoAl	5.58	1.28	-0.52	0.11	2.04	2.07	468	-1.00	5.56	1.30	-0.52	0.12	2.02	2.04	497	2.19
PdPtFeAl	5.68	1.25	-0.56	0.08	3.36	3.39	529	-2.86	5.64	1.27	-0.55	0.09	3.20	3.24	571	-1.15
PdPtFeGa	5.66	1.28	-0.39	0.08	3.38	3.44	498	-3.57	5.62	1.30	-0.37	0.09	3.27	3.35	540	-0.85
PdPtFeIn	5.82	1.29	-0.28	0.11	3.33	3.41	443	-1.83	5.78	1.32	-0.26	0.13	3.25	3.33	489	-0.40
PdRhCoAl	5.63	1.22	-0.46	0.13	2.48	2.51	584	-1.78	5.62	1.22	-0.45	0.14	2.30	2.32	598	-2.21
PdRhCoGa	5.63	1.24	-0.31	0.11	2.43	2.49	575	-2.02	5.62	1.24	-0.29	0.13	2.34	2.40	586	-2.16
PdRhCoIn	5.77	1.27	-0.15	0.15	2.48	2.55	555	-1.71	5.76	1.27	-0.13	0.18	2.38	2.44	523	-1.75
PdRhFeAl	5.74	1.18	-0.53	0.09	3.83	3.87	543	-1.13	5.73	1.18	-0.51	0.10	3.62	3.66	411	-1.85
PdRhFeGa	5.71	1.21	-0.39	0.07	3.81	3.86	544	-1.13	5.70	1.21	-0.37	0.09	3.69	3.73	430	-1.97
PdVRhGa	5.36	1.49	-0.37	0.18	1.18	1.51	313	1.37	5.38	1.47	-0.35	0.19	0.00	0.00	376	0.37
PtRhCoAl	5.59	1.25	-0.54	0.08	2.38	2.41	597	-4.11	5.58	1.25	-0.53	0.09	2.20	2.22	572	-6.29
PtRhCoGa	5.60	1.26	-0.35	0.06	2.32	2.37	579	-4.59	5.59	1.26	-0.33	0.08	2.28	2.32	548	-6.14
PtRhCoIn	5.72	1.31	-0.18	0.12	2.44	2.50	569	-4.11	5.72	1.31	-0.15	0.14	2.27	2.33	471	-4.36
PtRhFeAl	5.71	1.20	-0.62	0.05	3.90	3.92	529	-4.23	5.69	1.21	-0.60	0.07	3.80	3.82	470	-7.00
PtRhFeGa	5.69	1.23	-0.44	0.03	3.85	3.89	511	-4.41	5.68	1.24	-0.41	0.05	3.78	3.82	465	-7.09
PtRhFeIn	5.84	1.26	-0.27	0.07	3.86	3.91	507	-2.59	5.84	1.26	-0.24	0.09	3.82	3.88	459	-5.94
PtRhFeSn	5.76	1.31	-0.29	0.07	3.53	3.59	486	-4.43	5.74	1.32	-0.27	0.12	3.37	3.45	528	-1.68
PtRuFeSn	5.85	1.25	-0.13	0.17	3.81	3.85	429	-3.52	5.86	1.25	-0.09	0.22	3.85	3.87	453	-4.20
PtTaMnGa	5.52	1.45	-0.31	0.20	2.27	2.99	518	3.04	5.53	1.44	-0.29	0.18	2.01	3.15	623	2.26
PtTiFeGa	5.41	1.45	-0.50	0.12	1.62	2.62	564	1.47	5.42	1.44	-0.49	0.14	1.29	2.91	619	-1.34
PtVCrGa	5.40	1.45	-0.26	0.14	1.72	3.16	1042	1.85	5.38	1.47	-0.23	0.17	0.72	3.84	966	-3.83
PtVCrGe	5.40	1.45	-0.21	0.17	0.94	3.91	1069	4.54	5.39	1.46	-0.19	0.19	0.66	3.92	1005	0.83
PtVFeGa	5.51	1.34	-0.32	0.13	2.74	2.75	1040	4.36	5.56	1.30	-0.32	0.13	1.05	4.19	973	2.27
PtVFeGe	5.49	1.35	-0.23	0.16	0.55	3.70	920	2.15	5.58	1.29	-0.22	0.17	0.89	4.17	974	8.75
PtVMnGe	5.52	1.36	-0.34	0.10	1.41	4.54	1148	3.06	5.54	1.35	-0.33	0.07	1.05	4.97	1500	4.88
PtVMnSn	5.76	1.34	-0.26	0.20	1.21	5.17	1213	1.77	5.78	1.33	-0.26	0.20	1.05	5.49	1683	4.03
TaZnMnAl	5.50	1.44	-0.05	0.21	1.88	2.71	498	1.67	5.51	1.42	-0.05	0.18	1.59	2.35	258	1.59
TaZnMnGa	5.47	1.47	-0.01	0.20	2.04	3.01	490	1.76	5.48	1.46	0.00	0.18	2.04	2.78	297	1.85

VII. LIST OF ALL-D HEUSLER COMPOUNDS CANDIDATES

Table S3: List of all- d Heusler compounds candidates identified by ML-HTP approach. For each composition, the following properties obtained by ML and DFT are listed: lattice constant a , c/a ratio, formation energy ΔE (eV/atom), energy above the convex hull ΔH (eV/atom), total magnetic moment $\sum \mathbf{m}_i$ (μ_B /f.u.), absolute total magnetic moment $\sum |\mathbf{m}_i|$ (μ_B /f.u.), Curie temperature T_c (K), and magnetic anisotropy energy E_{aniso} (MJ/m³). The local magnetic moment $\mathbf{m}_i$, along with other relevant properties, is available in the DXMag Heusler database.

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
AgAgMnPd	5.58	1.52	-0.05	0.08	4.16	4.16	428	1.27	5.57	1.52	-0.05	0.05	4.20	4.20	490	0.07
AgAgMnPt	5.54	1.55	-0.07	0.14	4.12	4.12	356	1.42	5.53	1.55	-0.07	0.11	4.24	4.24	427	-4.45
AgAuMnPd	5.64	1.47	-0.14	0.04	4.18	4.18	357	1.10	5.63	1.47	-0.15	0.00	4.20	4.20	387	-0.06
AgAuMnPt	5.60	1.50	-0.13	0.11	4.16	4.16	303	1.10	5.59	1.50	-0.14	0.07	4.24	4.24	393	-3.70
AgAuMnTi	5.66	1.46	-0.08	0.21	2.99	4.15	675	1.05	5.62	1.47	-0.10	0.17	2.25	4.29	1057	-0.74
AgCdMnPd	5.68	1.50	-0.11	0.13	4.13	4.16	345	1.51	5.68	1.49	-0.11	0.10	4.07	4.13	403	0.15
AgCdMnSc	6.09	1.34	-0.04	0.20	3.46	3.94	371	1.42	6.05	1.37	-0.04	0.17	3.35	3.93	469	-0.21
AgCrMnPt	5.52	1.46	-0.06	0.15	0.33	6.82	1599	2.37	5.55	1.44	-0.06	0.12	0.16	7.02	1453	-7.26
AgCuMnPd	5.40	1.53	-0.06	0.09	4.14	4.14	507	1.24	5.38	1.52	-0.07	0.05	4.24	4.24	512	0.02
AgCuMnPt	5.38	1.54	-0.11	0.10	4.08	4.08	421	1.38	5.38	1.53	-0.11	0.07	4.17	4.17	400	-2.35
AgMnAgPd	5.75	1.39	-0.05	0.07	4.16	4.16	420	1.23	5.73	1.39	-0.06	0.04	4.20	4.20	135	-0.37
AgMnAgPt	5.80	1.35	-0.07	0.14	4.14	4.14	314	1.03	5.78	1.35	-0.07	0.11	4.23	4.23	68	0.75
AgMnAuPd	5.76	1.38	-0.16	0.02	4.18	4.18	383	1.09	5.74	1.38	-0.17	0.00	4.24	4.24	127	-0.18
AgMnAuZn	5.72	1.40	-0.05	0.08	3.93	4.00	323	2.07	5.73	1.39	-0.06	0.05	3.92	3.98	99	0.72
AgMnCdPd	5.73	1.46	-0.09	0.14	4.14	4.18	338	1.81	5.71	1.47	-0.09	0.12	4.11	4.15	179	-0.78
AgMnCrPt	5.55	1.44	-0.06	0.15	2.46	4.03	1554	2.13	5.55	1.43	-0.07	0.11	0.27	6.95	1575	-4.81
AgMnCuPd	5.52	1.43	-0.06	0.09	4.12	4.12	500	1.21	5.50	1.43	-0.06	0.06	4.17	4.17	267	-0.46
AgMnPdZn	5.53	1.47	-0.15	0.17	4.06	4.11	405	1.58	5.52	1.47	-0.15	0.14	4.00	4.06	235	-1.13
AgMnRhZn	5.47	1.48	-0.07	0.16	4.05	4.09	321	1.21	5.46	1.48	-0.06	0.14	4.04	4.10	144	-0.23
AgPdAuMn	5.67	1.44	-0.15	0.03	4.17	4.17	387	1.24	5.66	1.44	-0.16	0.00	4.18	4.18	202	-1.13
AgPdCuMn	5.62	1.35	-0.07	0.08	4.12	4.12	426	1.14	5.60	1.35	-0.07	0.05	4.18	4.18	99	-0.23
AgPdMnTi	5.54	1.48	-0.17	0.21	2.90	4.11	633	1.03	5.50	1.49	-0.17	0.18	2.60	4.06	943	-0.78
AgPtCrMn	5.55	1.44	-0.03	0.18	5.73	5.74	1007	1.60	8.96	0.71	-0.03	0.15	7.72	7.72	1080	-8.19
AgPtMnTi	5.62	1.42	-0.30	0.20	2.99	4.07	475	1.14	5.57	1.43	-0.30	0.18	2.77	4.09	816	-0.80
AgRhFeZn	5.75	1.23	-0.00	0.19	3.58	3.62	567	1.86	5.76	1.21	0.01	0.20	3.50	3.54	383	-0.97
AgTiMnPt	5.59	1.44	-0.31	0.20	3.32	3.91	359	1.03	5.56	1.45	-0.30	0.18	3.06	3.98	446	-1.91
AgZnMnPd	5.50	1.50	-0.17	0.15	4.08	4.12	415	1.58	5.51	1.48	-0.17	0.11	4.09	4.15	476	0.03
AgZnMnRh	5.40	1.53	-0.10	0.14	4.05	4.12	379	1.66	5.39	1.53	-0.09	0.11	4.11	4.19	532	1.19
AuAuMnTi	5.36	1.59	-0.01	0.20	2.40	3.68	655	1.23	5.42	1.54	-0.03	0.17	1.70	3.98	1187	0.38
AuAuFeHf	5.79	1.41	-0.23	0.19	2.48	2.73	327	2.30	5.79	1.40	-0.25	0.17	2.10	2.78	452	0.72
AuAuFeTi	5.64	1.43	-0.15	0.17	2.51	2.99	484	1.47	5.68	1.39	-0.18	0.15	1.96	3.36	717	-0.51
AuAuFeZr	5.82	1.42	-0.22	0.21	2.56	2.84	332	1.64	5.86	1.38	-0.25	0.18	2.25	2.91	474	0.29
AuAuMnNi	5.65	1.36	-0.06	0.07	4.36	4.35	315	1.04	5.59	1.39	-0.08	0.02	4.22	4.22	374	-0.55
AuAuMnPd	5.67	1.45	-0.21	0.02	4.21	4.21	320	1.04	5.64	1.46	-0.22	0.00	4.26	4.26	358	-0.34
AuCdMnNi	5.66	1.41	-0.01	0.15	4.21	4.28	364	1.59	5.64	1.41	-0.01	0.12	4.20	4.26	494	-0.22
AuCdMnZn	6.18	1.15	-0.04	0.13	3.66	3.83	345	1.60	6.11	1.19	-0.04	0.10	3.74	3.88	457	0.64
AuCoCoHf	5.40	1.50	-0.23	0.13	2.19	2.45	417	1.04	5.38	1.50	-0.25	0.12	1.77	2.25	487	-0.91
AuCoCoTi	5.29	1.47	-0.19	0.10	2.21	2.70	506	1.28	5.27	1.48	-0.21	0.09	1.88	2.68	552	0.97
AuCoFeHf	5.47	1.47	-0.20	0.17	3.17	3.61	675	1.27	5.47	1.46	-0.22	0.15	2.88	3.62	848	-4.15
AuCoFeNb	5.35	1.51	-0.00	0.12	2.94	3.61	452	1.41	5.33	1.51	-0.02	0.11	2.46	3.52	648	0.86
AuCoFeTa	5.33	1.51	-0.04	0.13	2.88	3.30	480	1.82	5.32	1.50	-0.06	0.11	2.51	3.25	685	2.38
AuCoHfRu	5.48	1.52	-0.24	0.20	1.98	2.14	326	1.36	5.49	1.50	-0.25	0.18	2.04	2.34	436	-0.96
AuCoMnPt	5.44	1.46	-0.07	0.15	5.36	5.36	555	3.14	5.46	1.44	-0.06	0.12	5.73	5.73	525	-1.43
AuCoMnTa	5.40	1.49	-0.08	0.15	3.58	4.24	635	1.48	5.38	1.49	-0.10	0.10	2.99	3.85	837	-10.88
AuCoMnV	5.32	1.47	-0.06	0.16	3.40	5.84	994	1.03	5.29	1.47	-0.07	0.12	2.74	5.36	1204	-0.90
AuCoRhSc	5.47	1.53	-0.38	0.21	2.01	2.17	331	1.97	5.47	1.52	-0.39	0.22	1.98	2.16	451	1.70
AuCoRhZn	5.41	1.45	-0.00	0.19	2.41	2.48	460	-1.08	5.40	1.45	0.01	0.21	2.18	2.24	308	-2.72
AuCoRuZr	5.52	1.52	-0.19	0.19	2.09	2.30	308	1.20	5.51	1.51	-0.22	0.16	2.08	2.36	435	-0.33
AuCrAuMn	5.61	1.45	-0.05	0.07	3.98	3.98	1580	3.46	5.57	1.48	-0.07	0.01	0.17	7.13	1593	-1.06
AuCrAuTi	5.66	1.45	-0.13	0.19	3.33	3.50	520	1.74	5.65	1.46	-0.14	0.18	3.07	3.47	430	-3.37
AuCrCrPt	5.54	1.44	-0.02	0.07	0.13	6.30	1583	1.29	5.54	1.44	-0.01	0.07	0.34	6.14	565	-2.56
AuCrCuTi	5.53	1.42	-0.04	0.18	3.08	3.18	513	1.33	5.52	1.42	-0.04	0.18	3.09	3.23	338	0.70

Continued on next page

composition	a ^{ML}	c/a ^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a ^{DFT}	c/a ^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
AuCrFePt	5.48	1.45	-0.02	0.10	5.22	5.22	1230	3.06	5.46	1.49	-0.03	0.09	6.27	6.27	1042	-6.84
AuCrIrMn	5.46	1.46	-0.03	0.17	0.69	6.53	1416	1.19	5.43	1.46	-0.04	0.13	1.21	6.37	1275	0.34
AuCrMnNi	5.41	1.42	-0.03	0.08	0.53	6.83	1669	2.10	5.40	1.40	-0.04	0.04	0.36	6.34	1708	-6.36
AuCrMnPd	5.53	1.46	-0.14	0.04	0.66	6.55	1585	1.63	5.54	1.44	-0.15	0.00	0.23	7.07	1543	-7.04
AuCrMnPt	5.51	1.46	-0.20	0.02	0.39	6.86	1546	3.01	5.52	1.45	-0.20	0.00	0.35	6.85	1419	-9.07
AuCrMnRh	5.47	1.46	-0.08	0.06	0.52	6.82	1494	1.44	5.45	1.45	-0.07	0.04	1.11	6.75	1215	-2.95
AuCrMnZn	5.61	1.36	-0.05	0.09	0.38	6.62	1687	3.65	5.57	1.38	-0.05	0.05	0.27	6.71	1790	4.30
AuCrNbPd	5.60	1.48	-0.01	0.19	2.92	3.28	516	1.42	5.60	1.47	-0.02	0.19	2.82	3.38	454	-0.26
AuCrNbPt	5.58	1.51	-0.12	0.19	2.91	3.32	487	1.53	5.58	1.49	-0.13	0.19	2.82	3.30	435	-0.18
AuCrPdTa	5.57	1.49	-0.01	0.21	2.84	3.07	480	2.29	5.57	1.48	-0.02	0.20	2.87	3.15	379	0.24
AuCrPtTa	5.55	1.51	-0.13	0.20	2.86	3.13	460	2.08	5.56	1.50	-0.14	0.19	2.85	3.13	409	0.23
AuCrPtV	5.49	1.48	-0.08	0.20	1.97	4.33	795	1.59	5.47	1.49	-0.06	0.21	2.40	4.00	290	-0.27
AuCrTiZn	5.57	1.44	-0.07	0.17	2.75	3.08	442	1.63	5.55	1.45	-0.08	0.17	2.52	3.32	496	1.29
AuCrZnZn	5.79	1.27	-0.02	0.12	3.40	3.45	415	1.95	5.79	1.27	-0.02	0.12	3.39	3.47	603	2.30
AuCuAuMn	5.55	1.48	-0.08	0.03	4.16	4.17	402	1.56	5.55	1.47	-0.09	0.00	4.09	4.09	237	0.59
AuCuCdMn	5.91	1.28	-0.00	0.12	3.90	3.95	418	1.93	5.89	1.28	-0.00	0.09	3.96	4.00	247	0.35
AuCuCrTi	5.42	1.51	-0.03	0.19	2.66	3.41	447	1.24	5.34	1.54	-0.03	0.19	2.18	3.00	377	-2.45
AuCuCuMn	5.44	1.41	-0.04	0.04	4.07	4.07	515	2.18	5.40	1.43	-0.04	0.00	3.99	3.99	305	0.52
AuCuFeTi	5.24	1.58	-0.14	0.13	1.85	2.63	387	1.25	5.21	1.60	-0.15	0.13	1.29	2.65	704	1.45
AuCuMnNi	5.27	1.50	-0.06	0.05	4.23	4.23	487	1.16	5.25	1.50	-0.07	0.01	4.30	4.30	497	0.71
AuCuMnPd	5.41	1.52	-0.19	0.01	4.16	4.16	460	1.10	5.39	1.52	-0.19	0.00	4.25	4.25	416	0.11
AuCuMnRh	5.34	1.54	-0.07	0.08	3.94	3.95	342	1.32	5.32	1.54	-0.07	0.05	3.85	3.85	421	3.76
AuCuMnTa	5.31	1.60	-0.00	0.18	2.39	2.96	477	1.06	5.28	1.61	-0.00	0.15	1.59	2.83	849	1.17
AuCuMnTi	5.34	1.54	-0.18	0.11	2.64	3.75	716	1.33	5.32	1.54	-0.20	0.07	2.10	3.64	1104	-2.99
AuCuMnZn	5.70	1.27	-0.09	0.05	3.77	3.84	478	1.80	5.69	1.27	-0.10	0.02	3.77	3.85	317	0.09
AuFeAuTi	5.62	1.43	-0.17	0.15	1.91	3.37	505	1.36	5.60	1.43	-0.17	0.16	1.32	3.18	595	-0.44
AuFeCrPt	5.47	1.45	-0.03	0.09	1.54	4.61	1286	1.78	5.46	1.46	-0.05	0.07	0.03	6.05	1238	-0.30
AuFeCuTi	5.45	1.41	-0.12	0.16	1.61	2.79	417	1.58	5.43	1.41	-0.12	0.16	1.06	2.60	406	0.65
AuFeMnNb	5.43	1.51	-0.01	0.16	4.56	5.84	823	1.24	5.39	1.52	-0.01	0.12	3.89	5.65	928	0.26
AuFeMnPt	5.46	1.49	-0.10	0.12	6.83	6.83	647	1.71	5.48	1.47	-0.13	0.07	7.20	7.20	581	-1.80
AuFeMnTa	5.42	1.50	-0.03	0.19	4.45	5.36	822	1.57	5.38	1.51	-0.04	0.15	4.03	5.19	909	-8.78
AuFeNiV	5.34	1.42	-0.02	0.13	1.51	4.47	1056	1.00	5.32	1.42	-0.02	0.12	0.95	3.91	1143	0.08
AuFeNiZn	5.45	1.36	-0.01	0.13	3.38	3.48	566	1.59	5.44	1.35	-0.02	0.13	3.20	3.28	444	-2.70
AuFePdZn	5.47	1.47	-0.10	0.19	3.16	3.24	301	1.51	5.50	1.44	-0.10	0.19	3.09	3.17	208	-0.87
AuFePtV	5.47	1.46	-0.16	0.13	1.30	4.63	1077	1.04	5.46	1.45	-0.16	0.13	0.94	4.40	1286	-3.51
AuFeTiZn	5.60	1.35	-0.17	0.14	1.31	2.63	469	2.04	5.54	1.37	-0.18	0.15	0.94	2.12	293	0.77
AuHfMnPt	5.69	1.46	-0.56	0.17	3.44	3.69	374	1.03	5.68	1.46	-0.56	0.14	3.23	3.55	340	-1.69
AuMnAuMn	5.59	1.50	-0.05	0.10	6.52	6.52	694	1.34	5.58	1.50	-0.13	0.00	7.84	7.84	55	1.95
AuMnAuNb	5.74	1.43	-0.00	0.16	2.53	4.45	516	3.11	5.71	1.43	0.00	0.13	1.54	4.16	710	-1.29
AuMnAuTi	5.63	1.47	-0.24	0.11	2.88	4.33	503	1.18	5.59	1.49	-0.24	0.08	2.45	4.15	568	0.35
AuMnAuV	5.62	1.45	-0.07	0.11	1.40	5.72	1256	2.02	5.62	1.44	-0.08	0.07	0.96	5.66	1499	-7.72
AuMnCdNi	5.55	1.48	-0.01	0.15	4.31	4.37	436	1.36	5.52	1.50	-0.01	0.12	4.37	4.39	307	1.00
AuMnCdPd	5.65	1.52	-0.21	0.07	4.16	4.21	311	1.67	5.64	1.52	-0.21	0.05	4.14	4.18	154	0.18
AuMnCoNb	5.33	1.57	-0.02	0.16	3.71	4.55	624	1.83	5.35	1.54	-0.03	0.11	3.34	4.30	607	1.71
AuMnCoPd	5.49	1.43	-0.00	0.18	5.40	5.40	485	1.16	5.47	1.45	0.00	0.15	5.74	5.74	159	-2.08
AuMnCoTa	5.32	1.56	-0.05	0.18	3.70	4.25	629	3.03	5.33	1.54	-0.07	0.13	3.39	4.03	679	3.93
AuMnCoTi	5.31	1.54	-0.21	0.13	4.04	4.83	722	1.04	5.31	1.51	-0.23	0.08	3.69	4.63	739	0.72
AuMnCoV	5.31	1.48	-0.00	0.22	3.02	6.06	998	1.75	5.28	1.48	-0.02	0.17	2.94	5.42	967	1.23
AuMnCrNi	5.40	1.42	-0.03	0.09	5.80	5.80	1675	2.17	5.38	1.43	-0.04	0.04	6.56	6.56	1690	-2.14
AuMnCrPd	5.54	1.45	-0.13	0.05	5.11	5.11	1616	1.87	5.42	1.39	-0.14	0.00	0.49	0.51	1574	-3.09
AuMnCrPt	5.52	1.46	-0.19	0.02	5.41	5.42	1552	2.70	5.49	1.52	-0.21	0.00	7.17	7.17	1524	-1.64
AuMnCrRh	5.47	1.46	-0.05	0.09	5.44	5.44	1500	1.23	5.38	1.54	-0.04	0.07	6.52	6.52	828	-1.25
AuMnCrZn	5.57	1.38	-0.04	0.10	0.11	6.69	1671	3.54	5.55	1.41	-0.00	0.10	0.20	6.74	1018	5.76
AuMnCuCu	5.46	1.39	-0.05	0.02	4.05	4.05	536	1.03	5.43	1.39	-0.05	0.00	3.93	3.93	489	0.23
AuMnCuPd	5.48	1.46	-0.18	0.01	4.14	4.14	468	1.13	5.46	1.46	-0.19	0.00	4.16	4.16	324	-1.73
AuMnCuV	5.47	1.41	-0.00	0.20	1.44	5.30	1259	2.36	5.45	1.41	-0.01	0.16	0.95	4.97	1508	-2.76
AuMnCuZn	5.58	1.35	-0.10	0.04	3.81	3.87	412	1.60	5.54	1.37	-0.10	0.02	3.78	3.82	10	1.88
AuMnFeHf	5.45	1.56	-0.18	0.20	4.92	5.49	798	1.42	5.43	1.57	-0.21	0.13	4.97	5.75	966	-1.88
AuMnFeTa	5.36	1.55	-0.02	0.20	4.56	5.32	759	3.03	5.36	1.53	-0.04	0.14	4.14	5.12	778	2.44
AuMnHfNi	5.44	1.55	-0.31	0.15	3.34	3.66	455	1.11	5.43	1.55	-0.32	0.11	3.17	3.53	383	2.56

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
AuMnMnNb	5.40	1.58	-0.04	0.16	5.61	6.70	916	1.44	5.38	1.59	-0.06	0.07	4.97	6.85	1063	0.91
AuMnNbNb	5.62	1.52	-0.02	0.16	2.79	3.49	470	2.53	5.62	1.52	-0.04	0.11	2.89	3.61	272	-0.84
AuMnNbNi	5.39	1.53	-0.05	0.17	3.03	3.85	422	1.56	5.38	1.52	-0.06	0.13	2.35	3.57	562	-0.14
AuMnNbPd	5.58	1.49	-0.13	0.14	2.93	4.04	390	1.46	5.57	1.49	-0.13	0.11	2.17	4.03	729	-0.46
AuMnNbPt	5.57	1.50	-0.24	0.15	2.97	4.02	381	1.59	5.56	1.50	-0.22	0.14	2.38	3.82	487	-1.57
AuMnNbTi	5.58	1.50	-0.12	0.19	2.34	3.80	472	2.13	5.53	1.54	-0.14	0.14	2.99	3.37	360	-1.45
AuMnNbZn	5.58	1.46	-0.01	0.19	2.14	3.99	576	2.91	5.57	1.43	-0.01	0.16	1.07	3.03	486	0.78
AuMnNiTa	5.37	1.53	-0.07	0.20	2.97	3.51	348	3.36	5.36	1.52	-0.08	0.16	2.50	3.22	471	2.83
AuMnNiV	5.37	1.45	-0.07	0.17	2.00	5.36	1067	1.34	5.35	1.43	-0.06	0.14	1.82	4.86	1018	-2.74
AuMnPdTi	5.49	1.51	-0.37	0.11	3.29	4.01	433	1.13	5.47	1.52	-0.37	0.08	2.93	3.99	547	-0.73
AuMnPdV	5.51	1.47	-0.16	0.11	1.62	5.60	1149	1.49	5.51	1.45	-0.14	0.09	1.44	5.40	1105	-3.46
AuMnPdZn	5.47	1.52	-0.28	0.08	4.10	4.15	362	1.09	5.47	1.51	-0.28	0.05	4.04	4.10	177	-0.52
AuMnPtTa	5.54	1.51	-0.25	0.18	3.12	3.71	303	2.61	5.53	1.50	-0.24	0.15	2.54	3.36	362	-12.96
AuMnPtV	5.48	1.49	-0.25	0.13	1.71	5.46	1038	1.80	5.48	1.48	-0.23	0.11	1.69	5.23	1120	-8.23
AuMnTiZn	5.56	1.43	-0.19	0.14	2.37	3.87	525	1.65	5.50	1.46	-0.19	0.11	1.88	3.58	497	0.75
AuMnZnZn	5.96	1.15	-0.11	0.07	3.57	3.72	316	1.78	5.96	1.15	-0.11	0.03	3.60	3.72	448	-0.96
AuNbCrPt	5.70	1.41	-0.17	0.15	2.99	3.26	521	1.54	5.69	1.41	-0.17	0.15	2.91	3.39	439	2.29
AuNbMnNi	5.62	1.34	-0.04	0.17	2.98	3.61	421	1.11	5.60	1.34	-0.05	0.14	2.20	3.48	515	-0.57
AuNbMnPd	5.67	1.42	-0.14	0.13	3.15	3.90	399	1.53	5.66	1.41	-0.14	0.10	2.27	3.95	681	0.16
AuNbMnPt	5.66	1.43	-0.26	0.13	3.18	3.90	352	2.62	5.66	1.41	-0.25	0.11	2.36	3.70	443	3.69
AuNiCdMn	5.74	1.34	-0.02	0.14	4.38	4.42	440	1.51	5.67	1.38	-0.03	0.10	4.28	4.34	398	-0.83
AuNiCrMn	5.28	1.51	-0.04	0.07	3.18	4.18	1085	1.57	5.28	1.49	-0.03	0.05	0.53	6.29	1487	-2.52
AuNiFeHf	5.40	1.53	-0.27	0.16	2.28	2.69	305	1.75	5.40	1.52	-0.29	0.15	2.07	2.61	694	-0.88
AuNiFeTi	5.27	1.52	-0.25	0.11	2.45	3.09	440	1.04	5.25	1.52	-0.26	0.11	2.07	3.05	769	-1.80
AuNiFeZn	5.43	1.37	-0.01	0.13	3.49	3.57	541	1.75	5.37	1.41	-0.02	0.13	3.29	3.37	498	-0.05
AuNiHfMn	5.49	1.49	-0.29	0.17	3.08	3.60	426	1.01	5.45	1.51	-0.31	0.12	2.81	3.35	850	-10.92
AuNiMnRh	5.36	1.49	-0.05	0.10	4.59	4.59	389	1.62	5.32	1.49	-0.04	0.07	3.02	4.04	283	0.90
AuNiMnTa	5.32	1.55	-0.13	0.14	2.84	3.40	496	1.83	5.30	1.55	-0.14	0.09	2.14	3.02	983	-1.87
AuNiMnTi	5.34	1.50	-0.28	0.11	3.02	4.06	601	1.15	5.30	1.51	-0.30	0.07	2.65	3.85	908	-1.58
AuNiMnZn	5.53	1.34	-0.15	0.05	4.27	4.33	506	1.29	5.46	1.38	-0.17	0.00	4.09	4.17	483	-0.21
AuPdCdFe	5.86	1.32	-0.02	0.21	3.18	3.25	318	1.69	5.81	1.34	-0.02	0.22	3.12	3.18	330	1.98
AuPdCrTa	5.54	1.50	-0.04	0.18	2.58	3.09	347	1.13	5.51	1.51	-0.04	0.18	2.10	2.72	374	-7.10
AuPdFeHf	5.57	1.50	-0.39	0.20	2.21	2.58	317	1.33	5.57	1.50	-0.40	0.18	2.10	2.64	696	0.07
AuPdFeZn	5.72	1.28	-0.13	0.16	3.21	3.27	376	1.74	5.71	1.28	-0.13	0.16	3.10	3.16	434	1.45
AuPdMnTa	5.51	1.52	-0.19	0.12	2.89	3.54	528	1.25	5.49	1.52	-0.20	0.08	2.29	3.39	1063	0.21
AuPtCdFe	5.83	1.33	-0.02	0.19	3.25	3.31	351	1.66	5.79	1.36	-0.01	0.20	3.17	3.23	429	-0.28
AuPtCoMn	5.55	1.38	-0.09	0.13	5.62	5.62	736	1.21	5.51	1.40	-0.09	0.10	5.82	5.82	441	15.73
AuPtCoZn	5.64	1.31	-0.10	0.19	1.99	2.03	333	1.46	5.60	1.34	-0.10	0.19	1.96	2.00	415	-1.74
AuPtCrMn	5.56	1.44	-0.18	0.04	5.40	5.40	1006	1.54	5.34	1.46	-0.19	0.00	0.00	0.00	1122	-2.07
AuPtCrV	5.53	1.46	-0.12	0.16	2.20	4.58	634	1.10	5.50	1.45	-0.10	0.17	1.59	4.07	490	1.30
AuPtFeFe	5.51	1.40	-0.03	0.09	6.20	6.20	985	1.32	5.49	1.41	-0.03	0.09	6.47	6.47	922	0.16
AuPtFeHf	5.60	1.48	-0.49	0.20	2.30	2.64	366	1.34	5.59	1.48	-0.50	0.20	2.17	2.67	706	-0.01
AuPtFeTi	5.51	1.45	-0.42	0.11	2.43	3.07	490	1.25	5.50	1.45	-0.42	0.11	2.15	3.17	766	-2.02
AuPtFeV	5.47	1.46	-0.15	0.13	4.35	4.35	805	1.08	5.45	1.45	-0.16	0.12	1.42	4.28	1035	-1.30
AuPtFeZn	6.56	0.86	-0.15	0.13	3.32	3.34	383	1.59	6.55	0.86	-0.15	0.14	3.18	3.22	360	6.12
AuPtFeZr	5.62	1.49	-0.46	0.20	2.34	2.73	319	1.33	5.61	1.49	-0.48	0.18	2.19	2.73	676	-0.17
AuPtHfMn	5.70	1.44	-0.54	0.19	3.16	3.66	375	1.00	5.65	1.47	-0.55	0.15	2.87	3.41	824	-9.62
AuPtMnTa	5.55	1.49	-0.29	0.13	3.00	3.59	457	1.31	5.53	1.49	-0.30	0.09	2.38	3.38	1023	0.64
AuPtMnTi	5.59	1.43	-0.49	0.08	3.04	4.11	516	1.68	5.55	1.45	-0.49	0.04	2.77	4.03	873	0.11
AuPtMnV	5.52	1.45	-0.29	0.10	3.17	4.18	907	1.49	5.50	1.45	-0.28	0.07	1.84	5.16	1279	2.95
AuRhCoSc	5.67	1.37	-0.40	0.20	1.92	2.08	349	1.70	5.64	1.38	-0.40	0.21	1.96	2.18	554	-0.79
AuRhCrMn	5.52	1.42	-0.10	0.04	4.65	4.66	993	1.49	5.53	1.38	-0.07	0.04	1.22	6.56	659	0.59
AuRhCrPt	5.54	1.44	-0.01	0.13	2.41	3.30	346	1.63	5.52	1.44	-0.02	0.12	1.87	3.49	243	-2.37
AuRhFeTa	5.50	1.47	-0.21	0.10	2.44	2.70	314	1.50	5.49	1.47	-0.22	0.09	2.36	2.90	675	1.91
AuRhFeZn	5.69	1.27	-0.13	0.09	3.76	3.80	603	1.10	5.68	1.27	-0.12	0.10	3.65	3.69	436	-5.13
AuRhMnTi	5.65	1.36	-0.41	0.08	3.39	4.17	324	1.02	5.64	1.35	-0.41	0.05	3.41	4.19	433	-0.14
AuRuCoHf	5.65	1.39	-0.23	0.21	2.13	2.25	482	1.56	5.64	1.39	-0.23	0.21	1.93	2.13	559	-1.51
AuRuCoTa	5.54	1.41	-0.07	0.13	1.69	1.77	345	1.25	5.51	1.42	-0.08	0.13	1.63	1.81	383	1.20
AuRuCoTi	5.56	1.36	-0.18	0.21	1.99	2.25	436	1.23	5.55	1.36	-0.18	0.22	1.95	2.27	570	-0.88
AuRuCoZr	5.67	1.41	-0.18	0.21	2.21	2.36	446	1.17	5.66	1.40	-0.19	0.19	1.96	2.18	523	-0.75

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
AuTaCrPd	5.68	1.41	-0.02	0.20	3.00	3.15	521	1.59	5.67	1.41	-0.03	0.19	3.01	3.23	416	0.21
AuTaCrPt	5.67	1.42	-0.17	0.17	2.94	3.12	482	2.39	5.67	1.41	-0.18	0.16	2.99	3.19	411	3.61
AuTaMnNi	5.58	1.36	-0.05	0.21	2.91	3.35	363	1.24	5.55	1.36	-0.06	0.18	2.28	3.04	388	-1.96
AuTaMnPd	5.64	1.43	-0.13	0.18	3.14	3.64	306	2.09	5.62	1.42	-0.14	0.14	2.37	3.43	541	0.19
AuTaMnRh	5.64	1.40	-0.22	0.14	3.35	3.73	354	1.57	5.62	1.40	-0.23	0.10	3.17	3.77	503	3.28
AuTaRhV	5.72	1.36	-0.14	0.16	1.71	1.70	321	1.16	5.74	1.34	-0.14	0.16	2.06	2.06	387	-0.43
AuTiCdTi	5.96	1.37	-0.11	0.17	2.36	2.36	921	1.15	5.95	1.37	-0.12	0.20	2.37	2.37	1080	0.83
AuTiCrPt	5.62	1.43	-0.38	0.16	3.30	3.43	503	1.53	5.61	1.43	-0.38	0.15	3.30	3.30	337	4.08
AuTiCrZn	5.56	1.46	-0.03	0.22	2.81	3.35	493	1.60	5.52	1.49	-0.03	0.22	2.24	3.46	439	0.27
AuTiCuFe	5.50	1.38	-0.10	0.17	1.77	2.90	513	1.16	5.49	1.37	-0.10	0.17	1.17	2.87	555	4.18
AuTiFeFe	5.41	1.45	-0.11	0.16	4.41	5.54	915	1.35	5.40	1.44	-0.12	0.16	3.97	5.51	1097	-1.06
AuTiFeMn	5.45	1.46	-0.13	0.18	4.84	6.17	752	1.88	5.43	1.46	-0.15	0.13	4.76	6.16	898	-4.38
AuTiFeZn	5.56	1.39	-0.14	0.17	1.60	3.06	730	3.29	5.57	1.38	-0.15	0.18	1.33	3.25	816	1.44
AuTiMnPt	5.56	1.46	-0.49	0.07	3.35	4.00	379	1.08	5.54	1.46	-0.49	0.05	3.13	3.99	514	-3.36
AuTiMnTi	5.51	1.52	-0.22	0.18	1.66	3.62	616	1.10	5.52	1.50	-0.25	0.15	1.29	4.25	923	0.12
AuTiMnZn	5.55	1.45	-0.17	0.15	2.30	4.14	646	2.36	5.56	1.45	-0.17	0.13	2.15	4.21	814	-1.13
AuVCoMn	5.43	1.38	-0.03	0.19	3.32	5.84	1113	1.24	5.43	1.37	-0.05	0.14	2.73	5.85	1237	-3.18
AuVCrPt	5.56	1.43	-0.11	0.17	2.06	4.26	911	1.72	5.53	1.43	-0.10	0.17	2.49	4.03	422	7.45
AuVFeIr	5.46	1.42	-0.07	0.19	2.25	3.83	674	1.15	5.45	1.42	-0.08	0.19	1.78	4.22	862	-2.40
AuVFeMn	5.49	1.37	-0.00	0.20	3.98	6.93	1115	1.73	5.50	1.35	-0.03	0.14	3.65	7.23	1432	-5.75
AuVFePt	5.50	1.43	-0.17	0.12	1.54	4.47	1027	1.68	5.50	1.42	-0.16	0.12	1.06	4.24	1207	-9.74
AuVIrMn	5.51	1.42	-0.16	0.19	2.61	4.57	854	1.20	5.50	1.41	-0.16	0.15	2.28	4.86	785	5.59
AuVMnPt	5.53	1.45	-0.27	0.11	1.87	5.30	1086	2.86	5.53	1.43	-0.26	0.09	1.80	5.24	1262	-5.09
AuZnCdMn	5.98	1.28	-0.04	0.13	3.74	3.89	371	1.92	6.04	1.24	-0.04	0.10	3.74	3.88	397	1.13
AuZnCoMn	5.31	1.51	-0.04	0.10	4.91	5.04	862	1.53	5.33	1.49	-0.05	0.07	4.87	5.01	870	2.92
AuZnCrTi	5.46	1.52	-0.10	0.14	2.49	3.39	512	1.44	5.44	1.52	-0.11	0.15	2.05	3.11	637	-3.46
AuZnCuMn	5.56	1.37	-0.09	0.05	3.81	3.87	440	2.06	5.56	1.37	-0.09	0.02	3.85	3.91	205	1.30
AuZnFeRh	5.37	1.53	-0.07	0.15	3.64	3.70	497	1.56	5.38	1.51	-0.06	0.15	3.72	3.78	528	-0.69
AuZnFeTi	5.29	1.59	-0.19	0.13	1.45	2.18	355	1.04	5.30	1.57	-0.21	0.13	0.92	2.74	715	2.18
AuZnIrMn	5.42	1.52	-0.10	0.14	3.90	3.98	315	1.35	5.43	1.51	-0.10	0.10	4.05	4.11	467	7.15
AuZnMnMn	5.65	1.35	-0.03	0.14	6.99	7.20	1277	1.24	5.61	1.38	-0.11	0.00	7.03	7.21	636	1.59
AuZnMnNi	5.36	1.48	-0.15	0.06	4.21	4.27	467	1.52	5.36	1.47	-0.16	0.02	4.09	4.17	549	-0.55
AuZnMnPd	5.50	1.50	-0.29	0.07	4.11	4.16	337	1.31	5.50	1.49	-0.30	0.03	4.08	4.14	462	-0.51
AuZnMnRh	5.42	1.52	-0.22	0.07	4.05	4.13	337	1.45	5.41	1.52	-0.22	0.04	4.13	4.21	444	0.52
AuZnMnTi	5.43	1.53	-0.24	0.09	2.62	3.63	624	1.02	5.46	1.50	-0.25	0.05	1.88	3.90	1050	1.31
AuZnMnV	5.30	1.59	-0.09	0.20	2.11	4.28	967	1.04	5.32	1.57	-0.12	0.13	0.94	5.16	1902	2.66
AuZnMnZn	5.74	1.29	-0.12	0.06	3.57	3.74	451	2.31	5.80	1.25	-0.12	0.03	3.57	3.73	526	1.68
CdCoPtPt	5.66	1.37	-0.07	0.14	2.29	2.33	501	-3.66	5.64	1.39	-0.06	0.15	2.27	2.31	422	-3.62
CdCrMnPt	5.63	1.41	-0.09	0.15	0.18	6.79	1525	3.73	5.58	1.46	-0.08	0.13	0.26	6.88	1548	0.32
CdCuMnPd	5.50	1.50	-0.11	0.13	4.09	4.12	433	1.36	5.51	1.49	-0.11	0.10	4.12	4.16	491	0.15
CdCuMnRh	5.40	1.53	-0.04	0.11	4.04	4.09	372	1.49	5.40	1.53	-0.03	0.09	4.16	4.20	538	1.34
CdFePdPd	5.84	1.27	-0.14	0.10	3.52	3.58	480	1.44	5.84	1.27	-0.13	0.12	3.50	3.54	250	-1.81
CdFePdRh	5.94	1.19	-0.08	0.16	4.02	4.06	581	1.21	5.93	1.19	-0.06	0.18	4.06	4.08	514	-0.40
CdFePtPt	5.77	1.32	-0.18	0.10	3.66	3.70	551	-1.64	5.76	1.33	-0.16	0.12	3.74	3.76	418	-9.94
CdFePtRh	5.85	1.24	-0.11	0.09	4.01	4.04	538	1.33	5.83	1.25	-0.09	0.11	4.01	4.03	492	-1.22
CdMnCdPd	5.95	1.35	-0.11	0.16	3.93	4.04	311	1.78	5.92	1.37	-0.10	0.14	4.00	4.08	154	-0.26
CdMnCrPt	5.69	1.38	-0.10	0.14	0.24	6.71	1520	2.99	5.67	1.40	-0.10	0.10	0.22	6.98	1620	4.86
CdMnCuPd	5.74	1.32	-0.10	0.14	4.00	4.05	405	1.68	5.69	1.35	-0.09	0.12	4.03	4.07	202	-1.28
CdMnCuPt	5.74	1.32	-0.15	0.09	4.00	4.04	325	1.61	5.67	1.36	-0.13	0.08	4.02	4.06	134	0.72
CdMnCuRh	5.73	1.29	-0.04	0.11	4.06	4.10	333	1.43	5.72	1.29	-0.02	0.09	4.18	4.20	75	0.14
CdMnMnPt	5.57	1.41	-0.10	0.17	0.30	6.75	876	2.04	5.60	1.44	-0.18	0.03	0.13	7.29	801	-0.17
CdMnPdZn	5.76	1.36	-0.15	0.16	3.83	3.95	376	1.71	5.76	1.36	-0.14	0.14	3.89	3.99	123	-0.52
CdNiMnPd	5.43	1.50	-0.10	0.18	4.21	4.28	421	1.07	5.43	1.50	-0.10	0.15	4.37	4.41	468	0.02
CdNiMnPt	5.42	1.51	-0.15	0.12	4.16	4.24	385	1.15	5.42	1.51	-0.15	0.10	4.31	4.35	383	-3.33
CdNiMnRh	5.35	1.53	-0.01	0.18	3.96	4.04	369	1.49	5.33	1.54	0.00	0.15	3.73	3.79	505	1.50
CdPdCuMn	5.62	1.41	-0.08	0.16	4.07	4.11	359	1.83	5.58	1.44	-0.08	0.13	4.08	4.12	191	-0.47
CdPdMnNi	5.47	1.48	-0.08	0.19	4.15	4.21	328	1.22	5.46	1.48	-0.08	0.16	4.27	4.31	438	0.09
CdPdMnPd	5.56	1.52	-0.28	0.07	4.13	4.18	314	1.14	5.55	1.52	-0.27	0.04	4.18	4.22	394	-0.07
CdPdMnRh	5.49	1.54	-0.14	0.19	3.92	3.99	321	1.30	5.49	1.54	-0.12	0.18	3.88	3.94	302	1.81
CdPdMnZn	5.82	1.32	-0.15	0.17	3.80	3.93	349	1.82	5.77	1.35	-0.14	0.15	3.90	4.00	151	0.22

Continued on next page

composition	a ^{ML}	c/a ^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a ^{DFT}	c/a ^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CdPdMnZr	5.66	1.56	-0.20	0.20	2.90	3.61	392	1.08	5.63	1.57	-0.21	0.16	2.38	3.48	924	-0.87
CdRhCrPt	5.53	1.50	-0.05	0.16	2.71	3.42	380	2.62	5.55	1.48	-0.03	0.18	2.56	3.50	361	2.85
CdRhMnRh	5.50	1.49	-0.04	0.16	3.43	3.72	372	2.67	5.50	1.48	-0.02	0.14	2.85	4.19	380	0.33
CdTiMnPt	5.72	1.39	-0.30	0.21	2.85	3.98	394	1.13	5.67	1.42	-0.28	0.20	2.66	3.86	412	0.37
CdZnMnRh	5.56	1.46	-0.14	0.11	3.99	4.06	324	1.92	5.57	1.45	-0.13	0.09	4.16	4.26	412	0.35
CoCoCoNi	4.99	1.40	-0.00	0.02	5.60	5.60	1255	-1.50	4.98	1.40	-0.00	0.03	5.74	5.74	1427	-0.29
CoCoCoPt	5.18	1.41	-0.07	0.03	5.32	5.32	1279	-2.00	5.18	1.40	-0.05	0.06	5.63	5.63	1315	-2.64
CoCoHfPt	5.47	1.40	-0.44	0.14	2.38	2.55	418	2.23	5.47	1.39	-0.43	0.15	2.24	2.68	529	1.32
CoCoHfRh	5.37	1.45	-0.31	0.18	2.63	2.82	467	-1.43	5.34	1.47	-0.30	0.19	2.88	3.28	617	-0.22
CoCoMnMo	5.14	1.41	-0.02	0.07	2.75	3.23	368	-1.02	5.09	1.43	-0.02	0.04	1.11	1.67	127	-0.33
CoCoMnPt	5.21	1.44	-0.10	0.11	6.30	6.30	887	2.71	5.19	1.39	-0.09	0.09	3.27	3.27	528	-2.73
CoCoMnRe	5.10	1.42	-0.04	0.06	2.98	3.24	350	1.05	5.09	1.42	-0.03	0.05	1.70	2.18	280	6.81
CoCoNiPt	5.14	1.45	-0.07	0.02	4.62	4.62	958	-1.64	5.13	1.45	-0.06	0.03	4.74	4.74	1019	5.19
CoCoPdPt	5.39	1.38	-0.02	0.06	4.28	4.28	875	-1.55	5.36	1.39	-0.01	0.07	4.62	4.62	862	4.47
CoCoPtRh	5.38	1.36	-0.03	0.04	4.59	4.59	921	-1.55	5.37	1.36	-0.02	0.06	5.03	5.03	770	6.75
CoCoPtTi	5.29	1.41	-0.43	0.09	2.19	2.53	415	3.87	5.28	1.42	-0.42	0.11	2.25	3.11	624	0.88
CoCoPtV	5.24	1.40	-0.26	0.05	1.91	2.53	432	1.84	5.23	1.40	-0.25	0.05	1.63	3.27	561	1.49
CoCoPtZr	5.52	1.39	-0.37	0.17	2.43	2.65	375	1.50	5.50	1.39	-0.39	0.16	2.29	2.73	497	-0.57
CoCoRhTi	5.20	1.45	-0.31	0.11	2.15	2.43	377	-1.93	5.22	1.41	-0.30	0.14	0.00	0.00	666	-0.96
CoCoRhV	5.14	1.42	-0.17	0.08	1.64	2.16	397	-1.11	5.12	1.42	-0.16	0.09	0.00	0.00	494	0.17
CoCoRhZr	5.42	1.44	-0.24	0.18	2.75	2.96	462	-1.31	5.37	1.46	-0.25	0.17	2.94	3.34	796	-0.09
CoCrIrPt	5.38	1.37	-0.13	0.07	3.07	3.12	475	1.65	5.35	1.36	-0.15	0.05	0.00	0.00	611	0.00
CoCrPtPt	5.41	1.39	-0.15	0.03	3.77	3.77	514	2.00	5.34	1.40	-0.18	0.02	0.00	0.00	578	-5.79
CoCrPtRh	5.37	1.38	-0.11	0.03	3.54	3.54	623	1.65	5.32	1.39	-0.13	0.01	1.78	1.78	604	-5.60
CoCrPtRu	5.37	1.36	-0.03	0.06	2.42	2.51	377	1.16	5.35	1.36	-0.04	0.07	1.64	1.66	627	0.00
CoCrPtZn	5.19	1.51	-0.07	0.21	2.20	2.73	414	2.25	5.23	1.49	-0.07	0.22	1.62	3.78	525	-2.01
CoCuFeHf	5.33	1.44	-0.10	0.17	3.00	3.43	757	1.25	5.22	1.48	-0.11	0.16	0.00	0.00	848	-2.45
CoCuFeTa	5.16	1.49	-0.03	0.14	2.61	3.03	556	2.60	5.13	1.50	-0.03	0.14	2.16	2.78	583	1.21
CoCuMnNb	5.26	1.46	-0.01	0.13	3.46	4.23	671	1.00	5.23	1.46	-0.02	0.10	2.71	3.81	778	-0.83
CoCuMnPt	5.30	1.40	-0.11	0.10	5.02	5.02	565	2.74	5.24	1.44	-0.11	0.07	2.38	4.60	666	1.83
CoCuMnTa	5.24	1.46	-0.05	0.16	3.38	3.92	715	1.22	5.21	1.47	-0.06	0.12	2.76	3.48	786	-7.17
CoCuNiPt	5.22	1.40	-0.04	0.06	2.96	2.96	679	-2.20	5.20	1.41	-0.04	0.07	2.85	2.85	523	-5.80
CoCuPdPt	5.52	1.30	-0.05	0.07	2.69	2.69	594	-1.45	5.47	1.33	-0.04	0.08	2.63	2.63	398	-2.80
CoCuPtPt	5.50	1.33	-0.09	0.04	2.71	2.71	582	-3.63	5.46	1.35	-0.08	0.05	2.63	2.63	407	-3.32
CoCuPtRh	5.46	1.32	-0.01	0.09	3.22	3.22	581	-1.15	5.46	1.32	0.01	0.11	3.22	3.22	501	3.38
CoCuPtZn	5.35	1.38	-0.12	0.18	1.83	1.88	343	3.02	5.35	1.38	-0.10	0.20	1.84	1.88	387	7.35
CoFeCoMn	4.97	1.44	-0.01	0.06	5.59	5.59	1051	-1.16	4.91	1.44	-0.03	0.01	3.74	3.74	1098	1.10
CoFeCoPt	5.21	1.42	-0.11	0.02	6.22	6.22	1269	-1.06	5.20	1.42	-0.09	0.04	6.50	6.50	1273	-1.81
CoFeCrPt	5.23	1.44	-0.12	0.00	3.52	4.96	1321	1.24	5.22	1.44	-0.13	0.00	1.57	6.61	1495	4.13
CoFeHfIr	5.33	1.53	-0.31	0.21	3.87	4.14	690	-1.41	5.34	1.53	-0.31	0.21	4.07	4.47	813	-6.12
CoFeHfRh	5.26	1.59	-0.30	0.20	4.14	4.44	865	-1.30	5.26	1.59	-0.30	0.20	4.22	4.62	1062	-0.56
CoFeIrTi	5.18	1.51	-0.33	0.13	3.27	3.74	397	-4.09	5.22	1.45	-0.32	0.15	1.66	2.32	92	-6.23
CoFeIrV	5.16	1.43	-0.22	0.07	1.78	2.59	393	-1.01	5.15	1.43	-0.21	0.09	1.32	2.16	347	-10.14
CoFeMnRh	5.14	1.44	-0.03	0.13	5.74	5.74	838	-1.22	5.12	1.44	-0.08	0.04	4.59	5.21	1148	1.39
CoFePtTa	5.41	1.40	-0.30	0.10	3.03	3.32	406	1.36	5.40	1.40	-0.29	0.10	2.78	3.52	604	1.06
CoFeRhTi	5.12	1.57	-0.30	0.13	3.89	4.45	756	-1.11	5.10	1.59	-0.29	0.15	4.15	4.81	1029	-1.30
CoFeRhV	5.14	1.46	-0.16	0.08	3.09	4.31	712	-1.31	5.14	1.41	-0.15	0.08	0.00	0.00	792	-0.32
CoHfCoIr	5.41	1.43	-0.34	0.16	2.65	2.81	573	-2.42	5.41	1.43	-0.33	0.17	2.69	2.99	595	-4.29
CoHfIrRh	5.63	1.35	-0.50	0.16	1.95	2.05	386	-1.74	5.65	1.33	-0.48	0.18	2.04	2.16	333	-1.77
CoHfPtPt	5.59	1.42	-0.79	0.05	1.62	1.71	315	1.24	5.58	1.43	-0.78	0.06	1.58	1.86	482	-0.50
CoIrCoMn	5.11	1.42	-0.06	0.07	3.65	3.81	593	-1.15	5.08	1.42	-0.09	0.02	1.95	2.25	610	-7.07
CoIrCoRe	5.22	1.43	-0.05	0.09	1.96	1.96	457	1.35	5.21	1.43	-0.04	0.10	1.70	1.86	281	-12.65
CoIrCoTi	5.27	1.41	-0.36	0.08	2.43	2.67	567	-2.02	5.27	1.41	-0.35	0.10	2.67	3.15	583	-4.15
CoIrCoZr	5.44	1.44	-0.25	0.17	2.81	3.00	551	-1.16	5.42	1.44	-0.27	0.16	2.77	3.07	583	-4.43
CoIrFeIr	5.23	1.44	-0.04	0.01	3.65	3.70	506	1.13	5.23	1.44	-0.04	0.02	3.31	3.45	237	-13.44
CoIrFeMn	5.15	1.42	-0.08	0.08	4.66	4.72	625	-1.02	5.09	1.43	-0.13	0.00	2.96	3.46	693	-5.18
CoIrFeTa	5.40	1.39	-0.30	0.07	3.16	3.37	578	-1.05	5.39	1.40	-0.29	0.08	2.91	3.35	487	-4.33
CoIrFeV	5.23	1.40	-0.25	0.04	3.01	3.70	647	-1.66	5.14	1.43	-0.24	0.06	0.00	0.00	550	-1.79
CoIrMnMo	5.29	1.42	-0.16	0.06	2.73	3.25	338	-1.28	5.27	1.42	-0.16	0.02	1.30	2.38	78	-1.25
CoIrMnPt	5.31	1.43	-0.12	0.13	3.85	4.12	425	1.12	5.29	1.43	-0.12	0.09	3.28	3.70	263	-26.59

Continued on next page

composition	a ^{ML}	c/a ^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a ^{DFT}	c/a ^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CoIrMnRu	5.21	1.45	-0.07	0.06	2.79	3.19	384	-1.20	5.19	1.45	-0.07	0.03	1.73	2.97	142	4.15
CoIrMnW	5.30	1.42	-0.17	0.05	2.54	2.85	356	-1.59	5.28	1.42	-0.17	0.02	1.25	1.97	46	-4.30
CoMnCoMn	5.01	1.42	-0.03	0.05	5.98	5.98	1257	-1.15	4.96	1.37	-0.09	0.00	0.00	0.00	1131	1.45
CoMnCuPd	5.21	1.48	-0.01	0.15	5.28	5.28	756	1.04	5.20	1.49	-0.00	0.13	5.46	5.46	488	0.66
CoMnCuV	5.28	1.31	-0.03	0.16	3.07	4.46	903	1.01	5.23	1.34	-0.02	0.13	2.66	4.82	943	0.51
CoMnCuZn	5.08	1.51	-0.03	0.06	4.58	4.67	956	1.41	5.09	1.49	-0.03	0.03	4.51	4.63	960	0.65
CoMnFeNi	4.98	1.44	-0.00	0.10	5.45	5.45	915	-1.19	4.96	1.42	-0.04	0.03	4.62	4.62	994	0.21
CoMnHfIr	5.35	1.55	-0.35	0.19	4.12	4.41	431	-1.47	5.43	1.45	-0.35	0.16	2.27	3.57	220	-1.60
CoMnIrZn	5.21	1.47	-0.07	0.11	4.14	4.22	431	3.88	5.23	1.45	-0.09	0.06	2.33	3.91	581	-9.98
CoMnMnZn	5.18	1.39	-0.04	0.06	0.04	5.88	1178	1.50	5.16	1.43	-0.09	0.00	0.31	6.15	1376	0.90
CoMnNiZn	5.02	1.52	-0.07	0.09	4.69	4.81	690	1.58	5.03	1.51	-0.07	0.07	4.81	4.91	724	-0.33
CoMnPdZn	5.18	1.55	-0.13	0.20	4.90	5.04	676	1.34	5.18	1.55	-0.12	0.18	5.04	5.16	626	-1.11
CoMnPtZn	5.23	1.51	-0.21	0.11	4.96	5.11	671	2.94	5.24	1.51	-0.19	0.10	5.04	5.16	459	-0.88
CoMnRhW	5.32	1.41	-0.04	0.15	2.74	3.15	409	-1.08	5.30	1.41	-0.04	0.11	2.46	3.18	250	-0.45
CoMnRhZn	5.17	1.51	-0.11	0.13	4.84	4.96	535	1.76	5.17	1.49	-0.11	0.10	2.40	4.08	624	-0.46
CoMnTiZn	5.63	1.17	-0.20	0.12	2.98	3.69	706	1.26	5.66	1.15	-0.19	0.11	2.80	3.90	624	1.66
CoMnZnZn	5.23	1.45	-0.09	0.00	4.36	4.48	822	2.26	5.23	1.45	-0.08	0.00	4.54	4.70	1087	1.18
CoNbMnPt	5.30	1.54	-0.34	0.03	4.04	4.54	704	1.03	5.31	1.53	-0.34	0.01	3.64	4.42	551	3.46
CoNiCoPt	5.21	1.39	-0.07	0.02	4.59	4.59	999	-1.33	5.21	1.38	-0.06	0.04	4.80	4.80	1083	-4.44
CoNiCrIr	5.13	1.44	-0.04	0.09	3.75	3.75	518	1.22	5.10	1.44	-0.05	0.08	2.34	2.34	458	6.63
CoNiCuPt	5.19	1.43	-0.03	0.08	2.77	2.77	573	-1.32	5.16	1.44	-0.02	0.08	2.67	2.67	514	3.00
CoNiFeIr	5.17	1.41	-0.03	0.03	5.56	5.56	957	2.43	5.18	1.40	-0.03	0.04	5.38	5.38	605	15.09
CoNiFeTa	5.22	1.42	-0.20	0.06	3.00	3.33	708	1.19	5.20	1.42	-0.21	0.06	2.67	3.27	706	-1.77
CoNiFeW	5.11	1.44	-0.03	0.05	2.96	3.22	589	1.78	5.10	1.44	-0.04	0.04	2.43	2.99	534	6.20
CoNiHfIr	5.44	1.40	-0.43	0.13	1.49	1.55	318	1.38	5.45	1.39	-0.44	0.13	1.77	2.03	339	8.71
CoNiIrMn	5.16	1.41	-0.09	0.07	4.19	4.19	579	3.28	5.13	1.42	-0.10	0.02	3.40	3.40	520	3.65
CoNiIrSc	5.46	1.36	-0.33	0.20	1.78	1.90	315	-1.43	5.49	1.33	-0.32	0.22	1.83	2.05	210	-4.43
CoNiIrZn	5.26	1.37	-0.03	0.09	2.04	2.09	390	-1.72	5.30	1.34	-0.02	0.11	1.96	2.00	192	21.82
CoNiMnPt	5.25	1.41	-0.16	0.08	5.52	5.52	749	2.76	5.22	1.39	-0.15	0.06	3.79	3.79	529	-6.20
CoNiMnRe	5.10	1.45	-0.04	0.09	3.71	4.03	570	1.45	5.08	1.45	-0.04	0.06	2.61	3.19	575	6.43
CoNiNiPt	5.17	1.42	-0.08	0.01	3.77	3.77	710	-1.42	5.15	1.42	-0.08	0.01	3.51	3.51	703	-0.66
CoNiPdPt	5.42	1.35	-0.03	0.04	3.48	3.48	621	-1.14	5.39	1.36	-0.03	0.04	3.25	3.25	611	0.64
CoNiPtPt	5.43	1.35	-0.10	0.00	3.54	3.54	632	-1.92	5.40	1.36	-0.10	0.00	3.24	3.24	558	4.48
CoNiPtSc	5.46	1.39	-0.46	0.18	1.72	1.87	327	3.65	5.47	1.37	-0.45	0.19	1.92	2.12	406	-0.78
CoNiRhSc	5.41	1.40	-0.31	0.21	1.97	2.13	394	-1.61	5.43	1.38	-0.29	0.23	1.92	2.16	286	-1.92
CoNiRuSc	5.49	1.33	-0.14	0.21	2.12	2.25	356	-1.58	5.51	1.30	-0.12	0.23	1.75	1.95	318	-2.28
CoOsFeTa	5.41	1.39	-0.07	0.12	2.91	3.05	445	-1.39	5.31	1.42	-0.05	0.14	0.00	0.00	99	-1.85
CoOsIrMn	5.23	1.44	-0.06	0.08	2.95	3.32	451	1.23	5.22	1.45	-0.05	0.05	2.34	2.86	158	12.87
CoOsMnPt	5.27	1.44	-0.01	0.20	3.36	3.83	447	2.94	5.26	1.44	-0.01	0.17	2.87	3.51	194	3.37
CoPdCoPt	5.34	1.42	-0.01	0.07	4.34	4.34	895	-1.51	5.33	1.42	0.00	0.09	4.47	4.47	1021	-1.20
CoPdCuPt	5.32	1.45	-0.02	0.10	2.47	2.47	515	-1.08	5.29	1.47	-0.01	0.11	2.49	2.49	497	3.37
CoPdFeTa	5.34	1.44	-0.19	0.11	3.06	3.43	670	1.05	5.34	1.44	-0.19	0.11	2.85	3.53	792	-2.26
CoPdIrMn	5.31	1.45	-0.02	0.17	4.82	4.82	584	1.06	5.28	1.44	-0.03	0.14	3.60	3.64	492	7.85
CoPdMnPt	5.38	1.45	-0.15	0.12	5.48	5.49	656	2.24	5.37	1.42	-0.14	0.10	3.73	3.73	556	-9.97
CoPdMnRh	5.32	1.45	-0.03	0.15	5.57	5.57	673	-1.27	5.29	1.43	-0.04	0.12	3.63	3.63	467	-0.62
CoPdNiPt	5.29	1.45	-0.02	0.05	3.49	3.49	632	-1.33	5.28	1.45	-0.02	0.05	3.35	3.35	699	1.57
CoPdPtZn	5.41	1.42	-0.18	0.17	2.17	2.24	403	-1.03	5.41	1.42	-0.17	0.19	2.12	2.18	357	-12.46
CoPdRhZn	5.32	1.45	-0.10	0.19	2.42	2.49	430	-1.52	5.29	1.47	-0.08	0.21	2.30	2.36	314	0.89
CoPtCoPt	5.33	1.43	-0.08	0.02	4.27	4.27	884	-1.01	5.32	1.43	-0.06	0.04	4.46	4.46	912	3.59
CoPtCoRe	5.20	1.47	-0.00	0.14	2.05	2.05	348	1.45	5.18	1.48	0.01	0.16	1.53	1.67	136	1.04
CoPtCoRh	5.28	1.43	-0.03	0.05	4.52	4.52	930	-1.80	5.29	1.42	-0.01	0.07	4.87	4.87	909	0.96
CoPtCoZn	5.32	1.37	-0.12	0.17	3.54	3.62	864	-5.20	5.32	1.37	-0.10	0.19	3.49	3.55	927	-11.88
CoPtCrCu	5.26	1.40	-0.04	0.07	2.19	2.32	836	1.26	5.26	1.41	-0.03	0.09	1.31	3.51	384	-5.38
CoPtCrIr	5.28	1.46	-0.09	0.11	2.45	2.45	510	2.85	5.21	1.48	-0.09	0.10	0.00	0.00	512	3.87
CoPtCrPt	5.35	1.45	-0.13	0.05	1.84	2.85	666	1.46	5.29	1.45	-0.15	0.05	0.00	0.00	707	-4.20
CoPtCrZn	5.39	1.35	-0.14	0.14	2.01	2.73	379	1.58	5.42	1.32	-0.14	0.15	2.06	2.84	136	0.22
CoPtCuNi	5.21	1.42	-0.02	0.09	3.06	3.06	595	-1.08	5.17	1.44	-0.02	0.09	2.76	2.76	626	-6.89
CoPtCuPd	5.28	1.49	-0.01	0.11	2.51	2.51	413	-1.05	5.26	1.50	-0.01	0.11	2.59	2.59	537	-5.30
CoPtCuPt	5.33	1.46	-0.05	0.08	2.45	2.45	435	-1.32	5.30	1.48	-0.04	0.09	2.45	2.45	408	-2.75
CoPtFeIr	5.30	1.44	-0.06	0.08	4.88	4.88	761	1.57	5.31	1.43	-0.04	0.10	4.68	4.68	375	-1.65

Continued on next page

composition	a ^{ML}	c/a ^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a ^{DFT}	c/a ^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CoPtFeTa	5.36	1.44	-0.38	0.02	3.05	3.34	641	1.06	5.36	1.43	-0.37	0.02	2.73	3.33	714	-5.75
CoPtIrMn	5.30	1.45	-0.14	0.11	4.19	4.26	479	1.99	5.29	1.44	-0.13	0.08	3.63	3.79	393	-10.95
CoPtMnPt	5.38	1.45	-0.21	0.10	5.28	5.28	617	3.98	5.35	1.44	-0.21	0.06	3.65	3.65	480	-15.63
CoPtNiPd	5.29	1.45	-0.01	0.06	3.67	3.67	594	-1.05	5.27	1.46	-0.01	0.06	3.38	3.38	695	-2.98
CoPtNiPd	5.30	1.45	-0.07	0.02	3.60	3.60	586	-1.21	5.29	1.46	-0.07	0.03	3.38	3.38	562	-0.17
CoPtNiRh	5.27	1.44	-0.03	0.04	3.71	3.71	619	-2.17	5.27	1.43	-0.01	0.06	3.88	3.88	588	-0.48
CoPtNiZn	5.31	1.38	-0.16	0.13	2.64	2.70	539	-1.28	5.30	1.38	-0.16	0.14	2.44	2.50	559	-7.82
CoPtPdPt	5.49	1.41	-0.03	0.08	3.01	3.01	447	-1.09	5.46	1.43	-0.02	0.08	2.96	2.96	566	6.64
CoPtPdZn	5.34	1.49	-0.17	0.18	2.37	2.43	333	-1.06	5.35	1.47	-0.16	0.19	2.30	2.34	350	-7.08
CoPtPtRh	5.46	1.41	-0.03	0.03	3.15	3.15	452	-2.12	5.43	1.42	-0.03	0.04	2.60	2.60	518	6.22
CoPtPtSc	5.51	1.47	-0.65	0.18	1.88	2.00	316	3.61	5.52	1.46	-0.63	0.20	1.96	2.12	427	-2.09
CoPtRhRh	5.41	1.41	-0.00	0.04	3.02	3.02	377	-1.79	5.39	1.41	0.00	0.05	2.67	2.67	292	-1.50
CoPtRhSc	5.47	1.47	-0.53	0.19	1.97	2.10	368	-2.83	5.44	1.50	-0.50	0.22	2.47	2.59	388	-9.04
CoPtRhZn	5.32	1.46	-0.16	0.15	2.19	2.25	306	-2.44	5.29	1.48	-0.13	0.18	2.20	2.26	243	-7.27
CoReFeIr	5.23	1.43	-0.05	0.12	3.09	3.27	621	2.42	5.23	1.43	-0.04	0.13	2.67	3.21	385	-8.13
CoReFePt	5.26	1.44	-0.01	0.16	3.20	3.53	504	3.06	5.25	1.44	0.00	0.17	2.45	3.09	293	-8.44
CoReIrMn	5.26	1.43	-0.11	0.08	3.11	3.52	511	1.08	5.26	1.40	-0.11	0.06	0.00	0.00	193	15.73
CoReMnNi	5.14	1.40	-0.00	0.13	2.78	3.32	464	1.19	5.14	1.39	-0.00	0.10	2.11	2.67	297	-0.86
CoReMnPt	5.28	1.45	-0.07	0.18	3.30	4.00	526	4.00	5.29	1.41	-0.07	0.15	0.93	1.39	422	-2.89
CoRhCoTa	5.32	1.42	-0.27	0.10	2.34	2.47	606	1.02	5.30	1.43	-0.26	0.11	2.20	2.56	459	-0.13
CoRhFePt	5.31	1.43	-0.08	0.05	5.18	5.18	876	-1.07	5.31	1.43	-0.06	0.08	5.82	5.82	714	-7.23
CoRhMnRh	5.24	1.45	-0.05	0.09	4.01	4.11	482	-1.38	5.20	1.46	-0.05	0.06	1.15	4.35	155	0.30
CoRhMnRu	5.21	1.45	-0.01	0.12	3.10	3.46	425	-1.23	5.18	1.45	-0.01	0.09	1.91	3.15	68	1.63
CoRhNiPt	5.24	1.46	-0.03	0.04	3.91	3.91	592	-1.15	5.23	1.47	-0.02	0.06	4.06	4.06	699	11.13
CoRhPtPt	5.45	1.42	-0.04	0.03	3.28	3.28	425	-2.08	5.43	1.42	-0.03	0.03	3.04	3.04	498	8.36
CoRhPtRh	5.40	1.41	-0.01	0.04	2.93	2.93	336	-2.24	5.39	1.41	-0.01	0.04	2.44	2.44	281	1.13
CoScIrNi	5.44	1.39	-0.31	0.21	2.06	2.21	467	-1.97	5.46	1.38	-0.30	0.23	2.26	2.40	522	-3.72
CoScIrPt	5.63	1.36	-0.53	0.19	1.98	2.09	403	-3.87	5.64	1.35	-0.52	0.20	2.18	2.30	507	-4.11
CoScNiPd	5.45	1.41	-0.34	0.20	1.88	2.04	352	1.14	5.42	1.42	-0.34	0.20	1.86	2.16	494	0.33
CoScPtRh	5.66	1.33	-0.57	0.15	2.06	2.21	451	-1.07	5.65	1.34	-0.55	0.18	2.19	2.33	452	-1.53
CoTaCuMn	5.13	1.57	-0.03	0.18	3.29	3.80	680	1.26	5.13	1.56	-0.04	0.14	3.03	3.61	715	0.70
CoTaFePt	5.31	1.48	-0.35	0.05	3.38	3.71	727	2.03	5.30	1.49	-0.34	0.05	3.09	3.67	689	-2.82
CoTaIrMn	5.30	1.50	-0.31	0.09	3.96	4.23	428	-1.09	5.28	1.51	-0.31	0.05	3.60	3.96	139	11.13
CoTaMnPt	5.30	1.53	-0.39	0.04	3.97	4.32	696	1.50	5.30	1.52	-0.40	0.00	3.63	4.15	599	3.48
CoTaPdRh	5.48	1.41	-0.34	0.10	1.53	1.60	313	1.15	5.46	1.42	-0.35	0.10	1.61	1.85	361	-0.09
CoTaPtRh	5.50	1.40	-0.51	0.04	1.61	1.66	362	1.57	5.47	1.41	-0.51	0.04	1.61	1.81	420	1.63
CoTaPtRu	5.54	1.37	-0.36	0.04	1.89	1.97	448	1.50	5.53	1.37	-0.35	0.05	1.77	1.91	393	-0.30
CoTaRhRh	5.51	1.37	-0.40	0.09	1.72	1.80	435	1.17	5.50	1.36	-0.39	0.10	1.65	1.85	300	-1.34
CoTiFeIr	5.23	1.48	-0.33	0.14	3.58	4.08	469	-1.75	5.20	1.50	-0.33	0.15	3.69	4.23	542	1.17
CoTiFeRh	5.21	1.49	-0.28	0.15	3.76	4.34	590	-1.17	5.20	1.49	-0.28	0.17	3.72	4.46	664	-0.03
CoTiIrMn	5.21	1.51	-0.36	0.12	3.36	3.83	349	-1.15	5.26	1.46	-0.36	0.09	1.91	3.63	253	14.22
CoTiIrRh	5.49	1.33	-0.46	0.12	1.68	1.81	326	-1.79	5.49	1.33	-0.45	0.14	1.71	1.83	153	-3.21
CoTiOsPt	5.52	1.34	-0.34	0.20	1.55	1.61	304	-1.70	5.52	1.34	-0.33	0.22	1.81	1.81	307	-7.35
CoTiPtPt	5.48	1.40	-0.68	0.04	1.54	1.74	334	1.26	5.46	1.41	-0.68	0.04	1.61	2.01	505	-0.05
CoVFeIr	5.19	1.43	-0.23	0.07	3.19	4.02	691	-1.16	5.17	1.41	-0.22	0.07	0.00	0.00	518	6.20
CoVIrPt	5.42	1.37	-0.37	0.04	1.49	1.69	314	1.12	5.40	1.37	-0.37	0.03	1.61	1.93	406	0.03
CoWFeIr	5.26	1.44	-0.11	0.08	3.18	3.40	673	1.11	5.26	1.44	-0.11	0.08	2.77	3.33	481	5.19
CoWFePt	5.27	1.46	-0.10	0.07	3.16	3.50	664	2.07	5.28	1.44	-0.10	0.07	2.46	3.12	496	-4.54
CoWIrMn	5.28	1.45	-0.14	0.08	3.47	3.79	527	-1.13	5.26	1.47	-0.14	0.05	3.26	3.72	186	14.11
CoZnCrPt	5.30	1.44	-0.11	0.18	1.47	4.19	940	1.68	5.31	1.44	-0.11	0.18	1.78	4.10	964	5.87
CoZnFeIr	5.23	1.44	-0.01	0.12	4.87	4.96	865	4.99	5.26	1.42	-0.01	0.12	4.93	4.99	782	8.04
CoZnFeNi	5.10	1.42	-0.02	0.13	4.50	4.62	998	1.17	5.11	1.41	-0.03	0.14	4.67	4.75	1115	0.43
CoZnFePt	5.32	1.40	-0.15	0.17	4.61	4.71	968	-1.33	5.32	1.40	-0.14	0.18	4.68	4.76	1024	-7.80
CoZnFeRh	5.26	1.41	-0.05	0.17	4.99	5.09	946	2.52	5.31	1.37	-0.05	0.18	5.11	5.19	979	1.13
CoZnIrMn	5.24	1.45	-0.08	0.10	2.60	4.00	691	5.07	5.22	1.46	-0.11	0.04	2.15	4.27	829	14.72
CoZnIrNi	5.30	1.35	-0.05	0.08	2.61	2.65	582	-2.03	5.29	1.36	-0.03	0.10	2.70	2.72	443	-0.61
CoZnIrPd	5.63	1.23	-0.07	0.22	2.64	2.67	598	-1.53	5.61	1.25	-0.05	0.24	2.60	2.60	509	1.80
CoZnIrPt	5.55	1.29	-0.11	0.18	2.43	2.45	491	-4.35	5.55	1.29	-0.09	0.20	2.44	2.46	434	0.85
CoZnMnNb	5.22	1.53	-0.03	0.15	3.03	3.92	470	2.01	5.19	1.54	-0.03	0.12	2.21	3.39	671	0.56
CoZnMnNi	5.09	1.46	-0.06	0.11	4.50	4.60	603	1.39	5.16	1.40	-0.05	0.09	5.00	5.08	605	1.91

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CoZnMnPd	5.31	1.43	-0.12	0.21	4.67	4.77	572	1.03	5.30	1.43	-0.11	0.18	3.67	3.73	611	1.03
CoZnMnPt	5.32	1.43	-0.22	0.11	4.72	4.81	623	3.53	5.29	1.45	-0.21	0.09	2.48	4.44	582	-2.40
CoZnMnRh	5.24	1.45	-0.11	0.13	3.77	3.86	652	2.52	5.19	1.48	-0.13	0.08	2.36	4.26	853	0.88
CoZnMnTa	5.22	1.52	-0.05	0.19	2.89	3.57	513	2.09	5.18	1.55	-0.05	0.15	2.28	3.10	682	6.00
CoZnMnTi	5.23	1.47	-0.17	0.15	3.31	4.40	783	2.00	5.28	1.43	-0.18	0.12	3.21	4.41	955	-0.02
CoZnMnZn	5.33	1.36	-0.03	0.05	4.21	4.39	748	1.41	5.30	1.38	-0.02	0.02	4.17	4.35	629	0.73
CoZnNiPt	5.31	1.38	-0.19	0.11	2.49	2.55	619	-3.43	5.30	1.38	-0.18	0.12	2.29	2.35	470	-2.98
CoZnPdPt	5.61	1.28	-0.24	0.11	2.32	2.37	553	-1.94	5.57	1.29	-0.24	0.12	2.24	2.28	453	-2.79
CoZnPtPt	5.57	1.31	-0.28	0.06	2.35	2.39	598	-4.77	5.55	1.32	-0.27	0.07	2.21	2.25	459	-4.99
CoZnPtRh	5.59	1.26	-0.20	0.10	2.74	2.78	586	-2.61	5.59	1.26	-0.18	0.13	2.67	2.69	489	-5.26
CoZnRhZn	5.34	1.39	-0.13	0.17	1.93	2.02	392	1.53	5.35	1.38	-0.10	0.19	1.85	1.93	364	0.29
CoZrIrRh	5.64	1.37	-0.42	0.16	1.97	2.10	348	-1.20	5.64	1.35	-0.43	0.16	1.98	2.10	284	-2.21
CoZrPtRh	5.64	1.39	-0.59	0.11	1.89	2.01	385	1.05	5.62	1.39	-0.60	0.10	1.79	2.01	471	-0.74
CrCuFePt	5.32	1.41	-0.09	0.04	0.37	5.55	1369	2.05	5.28	1.43	-0.07	0.06	0.09	5.35	1166	-1.98
CrCuMnPd	5.37	1.43	-0.06	0.09	0.43	6.59	1706	1.02	5.39	1.40	-0.06	0.06	0.24	6.58	1783	-0.44
CrCuMnPt	5.36	1.42	-0.20	0.01	0.44	6.56	1629	2.17	5.37	1.41	-0.19	0.00	0.34	6.28	1615	-8.93
CrCuMnRh	5.32	1.41	-0.06	0.07	0.82	6.42	1460	1.31	5.29	1.41	-0.04	0.06	1.10	6.00	1245	-1.26
CrCuPtRu	5.47	1.33	-0.00	0.10	1.53	2.12	525	1.86	5.43	1.33	0.01	0.12	0.00	0.00	414	-1.39
CrFeFeIr	5.21	1.42	-0.08	0.04	3.30	7.20	1159	-1.12	5.19	1.43	-0.07	0.04	2.83	6.75	985	4.96
CrIrCrPt	5.38	1.43	-0.15	0.06	1.81	2.40	878	1.02	5.35	1.43	-0.15	0.05	0.01	3.95	485	18.37
CrIrCuPt	5.27	1.51	-0.04	0.17	2.19	2.71	351	3.18	5.26	1.51	-0.04	0.16	1.70	2.80	345	-6.42
CrIrFeOs	5.27	1.44	-0.02	0.11	1.48	2.65	642	1.54	5.26	1.44	-0.02	0.10	0.40	3.62	483	18.10
CrIrFePt	5.34	1.45	-0.15	0.09	4.25	4.25	1082	1.58	5.26	1.44	-0.15	0.09	2.04	2.12	842	2.26
CrIrFeZn	5.39	1.37	-0.04	0.12	0.38	5.47	1047	4.35	5.35	1.39	-0.07	0.08	0.18	5.52	1318	6.31
CrIrIrMn	5.30	1.45	-0.23	0.03	0.93	4.89	1110	1.55	5.28	1.45	-0.24	0.00	0.55	4.43	795	23.67
CrIrIrNi	5.23	1.47	-0.09	0.08	2.00	2.25	302	1.70	5.19	1.48	-0.09	0.08	0.00	0.00	225	12.06
CrIrIrPd	5.42	1.43	-0.01	0.17	1.90	2.43	306	1.07	5.39	1.44	-0.01	0.17	1.72	2.20	89	15.91
CrIrIrZn	5.27	1.53	-0.07	0.16	1.78	2.63	501	4.43	5.27	1.52	-0.07	0.16	1.84	2.56	467	-4.37
CrIrMnOs	5.30	1.44	-0.10	0.07	0.98	4.24	981	1.97	5.29	1.43	-0.10	0.03	0.54	3.96	604	17.68
CrIrMnPt	5.35	1.46	-0.24	0.09	0.74	5.91	1245	2.76	5.33	1.45	-0.23	0.06	0.59	5.09	766	1.61
CrIrMnRe	5.32	1.43	-0.10	0.12	1.18	3.56	933	1.27	5.31	1.43	-0.09	0.09	0.46	3.58	432	-0.11
CrIrMnRh	5.29	1.46	-0.18	0.07	0.89	5.41	1130	1.07	5.28	1.44	-0.19	0.02	0.50	4.64	739	7.64
CrIrNbZn	5.77	1.26	-0.17	0.11	2.88	3.18	570	1.11	5.89	1.19	-0.16	0.13	2.82	3.28	608	15.87
CrIrNiPt	5.27	1.47	-0.10	0.10	2.42	2.55	333	3.14	5.25	1.48	-0.10	0.10	0.97	3.03	253	5.69
CrIrNiRh	5.22	1.47	-0.06	0.08	2.44	2.50	350	1.74	5.19	1.48	-0.06	0.08	1.68	1.90	152	6.42
CrIrNiZn	5.18	1.50	-0.05	0.20	2.23	2.67	487	1.35	5.18	1.50	-0.05	0.20	1.82	2.90	493	-13.19
CrIrPdRh	5.41	1.44	-0.01	0.14	2.22	2.63	331	1.25	5.37	1.45	0.00	0.15	1.66	2.34	33	10.38
CrIrPtRh	5.43	1.43	-0.13	0.09	2.04	2.48	307	1.09	5.39	1.44	-0.13	0.09	1.49	2.31	96	12.84
CrIrRhZn	5.22	1.56	-0.12	0.20	1.89	2.77	515	1.18	5.22	1.55	-0.11	0.20	1.68	2.76	413	-3.41
CrMnCrPt	5.71	1.21	-0.10	0.11	3.41	9.10	1688	1.14	5.70	1.21	-0.08	0.09	3.84	8.88	1051	6.19
CrMnCuPt	5.25	1.52	-0.19	0.02	3.07	3.87	1120	1.12	5.24	1.50	-0.17	0.01	0.47	6.07	1493	-11.07
CrMnFeIr	5.21	1.43	-0.14	0.03	3.32	7.25	955	-1.66	5.14	1.44	-0.12	0.00	1.38	4.34	537	7.22
CrMnPtPt	5.25	1.47	-0.29	0.00	1.99	5.91	1039	1.05	5.21	1.46	-0.25	0.00	1.40	5.78	1163	-0.99
CrMnNiZn	5.04	1.59	-0.03	0.13	1.64	5.38	1089	1.09	4.98	1.61	-0.07	0.06	0.16	5.56	2171	-1.52
CrMnPdZn	5.22	1.59	-0.12	0.20	4.66	4.74	1024	1.35	4.94	1.70	-0.15	0.13	0.00	0.00	2223	-1.29
CrMnPtPt	5.51	1.40	-0.41	0.00	3.45	3.72	1081	1.86	5.50	1.38	-0.38	0.00	1.23	6.17	826	3.37
CrMnPtZn	5.27	1.56	-0.23	0.09	5.18	5.27	980	1.99	5.24	1.56	-0.25	0.03	0.28	6.32	1937	-2.49
CrMnRhZn	5.19	1.58	-0.15	0.09	2.96	4.10	1054	1.02	5.16	1.57	-0.13	0.07	0.51	5.83	1653	-3.61
CrNbFePt	5.39	1.45	-0.14	0.18	0.18	3.41	444	-1.34	5.36	1.48	-0.14	0.19	0.24	3.24	275	-0.02
CrNiCrPt	5.32	1.39	-0.08	0.04	0.71	5.26	1390	1.26	5.31	1.38	-0.07	0.05	0.80	4.52	492	4.61
CrNiFePt	5.25	1.43	-0.16	0.00	1.00	6.12	1380	2.13	5.24	1.42	-0.15	0.00	0.63	5.43	1200	-12.61
CrNiMnPt	5.29	1.43	-0.25	0.00	1.08	6.75	1581	1.40	5.28	1.41	-0.24	0.00	1.19	6.17	1394	-9.47
CrNiMnZn	5.30	1.37	-0.04	0.12	0.55	5.97	1535	2.09	5.29	1.36	-0.05	0.08	0.31	5.95	1826	0.19
CrNiRhZn	5.16	1.51	-0.09	0.11	2.44	2.80	362	1.38	5.18	1.49	-0.08	0.12	2.38	2.68	325	-1.08
CrNiTiZn	5.58	1.26	-0.09	0.17	3.02	3.07	712	1.21	5.48	1.32	-0.07	0.21	3.05	3.11	360	0.37
CrOsFePt	5.27	1.47	-0.01	0.12	2.70	2.70	663	1.43	5.21	1.46	0.00	0.13	0.09	0.13	469	-11.83
CrOsIrMn	5.27	1.46	-0.11	0.06	0.89	4.37	1006	1.44	5.25	1.46	-0.11	0.02	0.84	3.64	589	15.79
CrOsMnMn	5.22	1.41	-0.00	0.08	2.68	6.35	1090	1.21	5.21	1.39	0.00	0.02	1.67	4.25	373	2.04
CrOsMnPt	5.30	1.47	-0.09	0.13	0.70	4.84	1023	1.71	5.28	1.47	-0.09	0.09	0.56	3.98	684	11.34
CrOsMnRh	5.25	1.47	-0.04	0.10	0.91	4.61	992	1.43	5.23	1.46	-0.04	0.06	0.85	3.67	533	3.67

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CrOsPtPt	5.43	1.45	-0.02	0.16	2.17	2.57	344	2.43	5.36	1.48	-0.01	0.16	0.00	0.00	268	18.17
CrOsPtRh	5.38	1.45	-0.04	0.11	1.88	2.30	312	1.36	5.35	1.46	-0.04	0.10	1.33	1.95	191	13.06
CrPdCuMn	5.41	1.40	-0.05	0.10	3.71	3.71	1726	1.24	5.26	1.36	-0.07	0.05	0.00	0.00	1841	-0.84
CrPdFePt	5.39	1.45	-0.14	0.01	5.80	5.80	1313	1.42	5.33	1.44	-0.14	0.01	3.57	3.57	1247	-10.08
CrPdMnPt	5.42	1.47	-0.28	0.00	0.78	6.48	1527	1.64	5.44	1.44	-0.25	0.00	0.89	6.73	1160	-12.95
CrPdMnZn	5.53	1.35	-0.15	0.17	0.33	6.49	1670	1.92	5.54	1.34	-0.16	0.13	0.34	6.66	1818	0.30
CrPdRhZn	5.33	1.51	-0.16	0.17	2.66	3.22	402	1.09	5.34	1.49	-0.14	0.18	2.57	3.11	293	-1.17
CrPdTiZn	5.68	1.30	-0.20	0.17	3.09	3.16	616	1.05	5.62	1.35	-0.19	0.19	3.23	3.25	428	0.37
CrPdZnZn	5.67	1.28	-0.17	0.16	3.43	3.47	374	1.74	5.65	1.30	-0.16	0.16	3.55	3.55	621	0.34
CrPtCrPt	5.44	1.43	-0.20	0.00	4.16	4.16	1387	5.46	5.37	1.46	-0.19	0.00	4.00	4.00	521	16.73
CrPtCrRh	5.38	1.43	-0.11	0.03	1.26	3.48	900	1.03	5.37	1.42	-0.12	0.02	0.18	4.48	334	8.84
CrPtCrZn	5.47	1.40	-0.13	0.16	0.12	5.88	1624	1.89	5.51	1.36	-0.12	0.16	0.14	5.86	1405	-3.06
CrPtCuFe	5.34	1.40	-0.08	0.05	2.30	3.84	1371	2.60	5.33	1.40	-0.09	0.04	0.05	5.67	1426	8.33
CrPtCuIr	5.32	1.47	-0.05	0.16	1.95	2.79	353	3.33	5.31	1.47	-0.05	0.15	1.70	2.78	278	6.83
CrPtCuMn	5.39	1.41	-0.19	0.02	4.41	4.41	1689	2.23	5.25	1.38	-0.20	0.00	0.00	0.00	1727	-6.41
CrPtCuNb	5.52	1.42	-0.16	0.16	2.88	3.07	483	1.22	5.51	1.42	-0.14	0.18	2.89	3.21	389	3.79
CrPtCuNi	5.25	1.44	-0.06	0.07	2.77	2.95	354	1.00	5.24	1.44	-0.05	0.08	2.47	3.01	158	-5.76
CrPtCuRh	5.32	1.47	-0.09	0.07	2.27	3.09	408	1.66	5.30	1.47	-0.08	0.07	1.80	2.84	167	4.66
CrPtCuTa	5.50	1.42	-0.18	0.17	2.81	2.93	475	1.54	5.50	1.42	-0.16	0.18	2.92	3.06	326	4.44
CrPtCuV	5.46	1.34	-0.13	0.15	2.47	3.53	691	1.65	5.41	1.38	-0.10	0.17	2.64	3.42	383	6.79
CrPtFeIr	5.34	1.46	-0.17	0.07	1.23	5.06	1095	1.45	5.32	1.46	-0.17	0.07	1.26	5.70	924	-4.92
CrPtFeNi	5.28	1.41	-0.15	0.00	3.64	3.64	1339	1.12	5.26	1.40	-0.15	0.00	0.46	5.50	1377	0.73
CrPtFeOs	5.32	1.44	-0.01	0.12	1.68	3.73	741	1.77	5.32	1.44	-0.00	0.12	1.39	4.67	603	12.09
CrPtFePt	5.39	1.45	-0.24	0.00	5.23	5.23	1244	2.04	5.38	1.45	-0.23	0.00	0.51	5.83	1191	-10.58
CrPtFeRe	5.34	1.42	-0.01	0.15	2.31	2.53	487	1.12	5.33	1.42	0.00	0.16	0.92	3.82	245	NaN
CrPtFeRh	5.33	1.46	-0.17	0.00	2.89	3.75	1223	1.18	5.33	1.45	-0.17	0.00	1.26	6.04	1088	4.12
CrPtFeRu	5.31	1.45	-0.06	0.06	2.15	4.11	946	1.64	5.30	1.45	-0.05	0.07	1.39	5.31	744	2.39
CrPtFeZn	5.46	1.36	-0.15	0.14	0.17	5.84	1212	4.43	5.42	1.38	-0.16	0.13	0.18	5.76	1233	6.28
CrPtHfPt	5.59	1.50	-0.68	0.16	3.28	3.34	310	-1.20	5.59	1.50	-0.66	0.17	3.35	3.35	38	6.12
CrPtHfRh	5.51	1.53	-0.55	0.22	2.97	3.02	308	-1.39	5.49	1.55	-0.54	0.22	3.25	3.27	14	8.82
CrPtIrMn	5.37	1.45	-0.27	0.06	1.00	5.86	1279	1.53	5.36	1.44	-0.26	0.03	1.14	5.58	828	20.81
CrPtMnMn	5.58	1.29	-0.24	0.00	4.00	9.21	1662	1.09	5.57	1.29	-0.25	0.00	4.01	9.63	1637	8.46
CrPtMnNi	5.31	1.42	-0.24	0.00	0.80	6.73	1601	1.77	5.32	1.40	-0.23	0.00	0.98	6.30	1343	1.83
CrPtMnOs	5.36	1.43	-0.10	0.12	1.32	4.76	1024	2.64	5.34	1.42	-0.09	0.10	0.82	4.48	550	24.55
CrPtMnPd	5.43	1.47	-0.28	0.00	1.19	6.05	1502	1.78	5.45	1.44	-0.25	0.00	0.82	6.80	972	5.69
CrPtMnPt	5.42	1.47	-0.37	0.00	0.51	6.69	1453	2.80	5.43	1.45	-0.35	0.00	1.05	6.53	1198	-2.23
CrPtMnRe	5.36	1.43	-0.08	0.16	1.45	3.66	902	1.15	5.35	1.42	-0.07	0.14	0.42	3.86	460	105.47
CrPtMnRh	5.37	1.46	-0.27	0.00	0.78	6.54	1376	1.45	5.38	1.44	-0.25	0.00	1.37	6.27	758	3.05
CrPtMnRu	5.36	1.44	-0.15	0.06	1.16	5.67	1172	1.58	5.34	1.42	-0.12	0.05	0.82	5.08	648	5.52
CrPtMnTi	5.61	1.31	-0.36	0.15	0.20	5.94	1346	2.67	5.62	1.30	-0.36	0.12	0.55	5.77	1311	6.58
CrPtMnV	5.33	1.45	-0.22	0.14	0.47	5.44	1236	1.04	5.33	1.42	-0.22	0.11	0.39	5.15	937	4.97
CrPtMnW	5.36	1.47	-0.08	0.13	0.08	4.59	1059	1.38	5.34	1.47	-0.07	0.11	0.54	4.24	497	-2.70
CrPtMnZn	5.51	1.36	-0.28	0.04	0.31	6.33	1597	4.91	5.51	1.36	-0.29	0.00	0.33	6.51	1810	8.04
CrPtMoW	5.45	1.48	-0.01	0.16	1.74	2.31	314	1.13	5.48	1.44	-0.01	0.15	0.00	0.00	158	5.77
CrPtNbZn	5.55	1.44	-0.20	0.18	2.57	2.91	387	1.32	5.55	1.44	-0.19	0.19	2.57	3.15	538	2.91
CrPtNiW	5.35	1.44	-0.05	0.12	2.51	2.84	418	1.27	5.34	1.45	-0.04	0.12	2.65	2.95	293	6.23
CrPtNiZn	5.33	1.43	-0.17	0.12	2.91	3.13	373	1.26	5.33	1.43	-0.16	0.13	2.73	3.27	251	10.36
CrPtPtV	5.43	1.45	-0.35	0.08	2.19	3.11	470	1.19	5.42	1.45	-0.33	0.09	2.66	2.82	121	5.47
CrPtRhZn	5.32	1.52	-0.24	0.09	2.49	3.14	466	2.99	5.34	1.50	-0.23	0.10	2.43	3.11	494	2.12
CrPtRuZn	5.33	1.50	-0.09	0.20	1.85	3.29	662	3.43	5.32	1.50	-0.06	0.22	1.64	3.30	581	7.62
CrPtTaZn	5.54	1.43	-0.19	0.19	2.46	2.75	335	1.31	5.56	1.42	-0.18	0.20	2.54	2.88	480	5.57
CrPtTiZn	5.69	1.29	-0.39	0.15	3.06	3.18	569	1.35	5.64	1.33	-0.37	0.17	3.24	3.26	332	3.77
CrPtVZn	5.51	1.35	-0.19	0.17	1.93	3.81	892	2.78	5.53	1.33	-0.16	0.19	1.64	3.78	550	0.60
CrRePtPt	5.41	1.48	-0.10	0.13	2.21	2.69	364	1.93	5.38	1.49	-0.08	0.14	1.40	2.38	308	27.24
CrRhCuPt	5.27	1.50	-0.09	0.07	2.33	2.83	359	1.42	5.25	1.50	-0.08	0.07	1.86	2.88	140	-4.23
CrRhFePt	5.34	1.45	-0.16	0.00	5.34	5.34	1191	1.03	5.33	1.44	-0.16	0.00	1.12	5.86	1017	-7.44
CrRhIrZn	5.27	1.51	-0.11	0.21	1.88	2.85	519	1.54	5.26	1.51	-0.10	0.21	1.80	2.74	334	-1.86
CrRhMnOs	5.30	1.43	-0.03	0.10	1.16	4.38	981	1.28	5.30	1.41	-0.03	0.07	0.58	4.30	539	13.82
CrRhMnRe	5.32	1.43	-0.01	0.15	2.04	2.18	934	1.48	5.22	1.45	-0.00	0.12	0.00	0.00	376	-5.50
CrRhNiZn	5.17	1.51	-0.08	0.13	2.39	2.86	483	1.17	5.17	1.50	-0.06	0.14	2.29	2.97	395	-1.18

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CrRhPdPd	5.48	1.43	-0.00	0.07	2.72	3.00	334	1.28	5.51	1.40	0.01	0.09	2.39	3.37	37	0.03
CrRhPdZn	5.26	1.56	-0.14	0.18	2.67	3.07	346	1.18	5.23	1.58	-0.12	0.20	2.56	3.04	281	-1.85
CrRhPtZn	5.32	1.52	-0.23	0.10	2.48	3.04	437	2.27	5.32	1.50	-0.21	0.12	2.31	3.07	387	1.51
CrRuNiPt	5.22	1.50	-0.04	0.08	2.52	2.55	398	1.19	5.18	1.50	-0.03	0.09	1.79	2.15	250	2.70
CrRuPtZn	5.22	1.57	-0.09	0.20	1.86	2.73	420	1.47	5.23	1.57	-0.08	0.21	1.49	3.21	630	1.11
CrTaFePt	5.40	1.43	-0.19	0.17	0.16	2.83	430	-1.82	5.36	1.47	-0.19	0.17	0.30	2.96	253	-0.00
CrTiMnPt	5.52	1.37	-0.35	0.16	0.26	5.85	1350	1.69	5.51	1.37	-0.35	0.13	0.36	5.60	943	6.99
CrTiPdZn	5.33	1.57	-0.17	0.20	2.37	3.28	360	1.34	5.27	1.59	-0.17	0.21	2.11	2.87	455	-0.30
CrTiZnZn	5.31	1.52	-0.03	0.13	1.60	2.49	362	1.72	5.31	1.52	-0.04	0.14	1.09	2.47	528	-0.19
CrWIrMn	5.32	1.46	-0.09	0.11	1.08	4.25	980	1.28	5.31	1.46	-0.08	0.08	0.98	3.46	421	8.98
CrZnFeIr	5.35	1.39	-0.06	0.10	0.35	5.07	1068	3.06	5.29	1.43	-0.04	0.11	0.37	4.93	715	0.71
CrZnFePt	5.43	1.36	-0.16	0.13	0.15	5.38	1214	4.93	5.35	1.42	-0.13	0.15	0.25	5.07	873	1.82
CrZnFeRh	5.37	1.38	-0.06	0.14	0.21	5.33	1187	2.28	5.31	1.41	-0.04	0.16	0.19	5.15	906	1.55
CrZnIrMn	5.42	1.38	-0.14	0.06	0.68	5.98	1346	2.26	5.37	1.41	-0.14	0.02	0.60	5.84	1284	-3.08
CrZnMnNi	5.31	1.36	-0.04	0.12	0.41	5.75	1558	1.67	5.22	1.41	-0.05	0.08	0.44	5.54	1805	0.31
CrZnMnPd	5.48	1.38	-0.15	0.17	0.23	6.52	1639	1.73	5.41	1.43	-0.14	0.14	0.37	6.43	1804	0.19
CrZnMnPt	5.46	1.39	-0.28	0.04	0.28	6.34	1565	4.45	5.40	1.43	-0.26	0.02	0.42	6.26	1679	2.80
CrZnMnRh	5.44	1.37	-0.15	0.09	0.51	6.24	1490	2.23	5.38	1.41	-0.14	0.06	0.40	6.12	1454	-0.54
CrZnPtV	5.38	1.47	-0.14	0.21	1.48	4.27	940	1.63	5.37	1.48	-0.12	0.23	1.47	4.13	760	-11.49
CuCuIrMn	5.22	1.48	-0.00	0.13	3.82	3.82	405	1.62	5.19	1.49	-0.00	0.10	3.85	3.85	445	9.63
CuCuMnPd	5.29	1.45	-0.13	0.02	4.10	4.10	601	1.03	5.29	1.44	-0.13	0.00	4.10	4.10	533	0.02
CuCuMnRh	5.19	1.49	-0.07	0.06	3.91	3.91	441	1.27	5.16	1.50	-0.06	0.04	3.90	3.90	480	1.69
CuCuMnTi	5.12	1.56	-0.08	0.11	2.32	3.27	710	1.30	5.11	1.55	-0.09	0.08	1.89	3.09	1008	-0.06
CuCuMnZn	5.53	1.23	-0.02	0.07	3.62	3.70	649	1.77	5.52	1.23	-0.01	0.05	3.62	3.72	365	0.11
CuFeFePt	5.35	1.36	-0.06	0.07	5.75	5.76	815	1.78	5.35	1.36	-0.05	0.08	6.08	6.08	614	-1.25
CuFeIrPt	5.53	1.29	-0.06	0.09	3.63	3.63	402	3.88	5.53	1.29	-0.05	0.10	3.63	3.63	117	14.21
CuFeMnPt	5.33	1.42	-0.12	0.09	4.80	4.79	765	1.23	5.27	1.45	-0.15	0.03	0.66	6.16	447	5.90
CuFeNbPt	5.47	1.40	-0.17	0.16	1.88	2.57	343	2.43	5.48	1.39	-0.16	0.17	1.09	2.67	442	1.26
CuFeNiZn	5.27	1.32	-0.00	0.13	3.27	3.36	697	1.71	5.25	1.32	-0.00	0.13	3.04	3.12	582	0.32
CuFePdZn	5.37	1.39	-0.07	0.21	3.00	3.09	460	1.72	5.40	1.36	-0.07	0.21	2.96	3.04	458	0.92
CuFePtTa	5.43	1.42	-0.21	0.17	1.94	2.36	305	2.43	5.44	1.40	-0.20	0.17	1.23	2.17	325	-1.51
CuFePtZn	5.40	1.37	-0.16	0.13	3.07	3.15	479	1.37	5.44	1.34	-0.16	0.14	2.99	3.07	574	-3.87
CuFeRhZn	5.30	1.41	-0.08	0.13	3.35	3.43	601	1.12	5.29	1.41	-0.06	0.15	3.34	3.40	282	-1.59
CuFeTiZn	5.44	1.30	-0.08	0.18	0.92	1.75	311	1.49	5.39	1.33	-0.08	0.20	0.66	1.50	189	0.02
CuIrFePt	5.34	1.44	-0.00	0.15	3.17	3.17	332	4.14	5.35	1.43	0.01	0.16	3.30	3.30	49	-1.00
CuIrFeTa	5.33	1.48	-0.21	0.11	2.24	2.50	356	1.15	5.31	1.49	-0.21	0.12	2.08	2.52	607	-0.75
CuIrFeZn	5.46	1.30	-0.05	0.05	3.35	3.38	581	1.19	5.45	1.30	-0.04	0.06	3.37	3.41	383	6.97
CuIrIrMn	5.28	1.47	-0.05	0.12	2.86	3.35	452	8.45	5.27	1.47	-0.05	0.09	2.31	3.53	450	-6.03
CuIrMnNi	5.20	1.43	-0.05	0.09	3.12	3.38	314	2.67	5.21	1.41	-0.07	0.05	2.57	3.33	57	-29.87
CuIrMnPd	5.35	1.45	-0.04	0.19	3.19	3.55	362	1.60	5.36	1.43	-0.04	0.15	2.93	3.63	64	-31.24
CuIrMnPt	5.35	1.45	-0.12	0.15	3.06	3.50	388	8.59	5.34	1.45	-0.12	0.11	2.69	3.67	239	-20.72
CuIrMnRh	5.27	1.47	-0.06	0.10	2.93	3.39	440	2.18	5.26	1.46	-0.06	0.06	2.22	3.74	377	-5.45
CuMnCuPd	5.33	1.42	-0.14	0.02	4.04	4.03	577	1.03	5.31	1.43	-0.13	0.00	4.01	4.01	269	-0.33
CuMnCuZn	5.39	1.33	-0.01	0.08	3.64	3.70	637	2.02	5.35	1.35	-0.00	0.05	3.62	3.68	179	0.33
CuMnFeIr	5.21	1.42	-0.02	0.11	0.17	5.61	1080	3.96	5.20	1.46	-0.07	0.03	0.35	5.75	707	3.05
CuMnFePt	5.26	1.43	-0.10	0.11	2.33	2.48	731	2.54	5.24	1.40	-0.15	0.03	2.22	2.96	673	-0.44
CuMnFeRh	5.19	1.45	-0.00	0.13	0.19	5.80	1124	1.25	5.18	1.47	-0.05	0.04	0.32	6.02	790	1.17
CuMnHfIr	5.41	1.55	-0.38	0.15	3.32	3.58	488	-1.31	5.43	1.51	-0.39	0.11	3.45	3.61	312	-0.67
CuMnIrMn	5.28	1.41	-0.13	0.07	0.33	6.41	1374	1.67	5.28	1.42	-0.19	0.00	0.18	6.46	1366	-1.06
CuMnMnNi	5.11	1.43	-0.05	0.05	0.06	6.37	1530	1.30	5.10	1.45	-0.12	0.00	0.09	6.31	1717	0.22
CuMnMnPd	5.29	1.43	-0.10	0.08	0.08	6.29	1431	1.30	5.29	1.46	-0.19	0.00	0.12	7.00	1636	-0.07
CuMnMnPt	5.30	1.43	-0.24	0.00	0.04	6.50	1432	2.66	5.31	1.45	-0.32	0.00	0.11	6.87	1514	4.43
CuMnMoPt	5.45	1.39	-0.04	0.18	2.06	4.06	717	2.65	5.45	1.38	-0.03	0.15	1.00	3.92	949	-7.25
CuMnNiZn	5.23	1.41	-0.08	0.07	3.95	4.00	596	1.35	5.19	1.43	-0.08	0.05	3.92	3.96	395	-0.95
CuMnPdZn	5.35	1.47	-0.20	0.12	3.96	4.00	472	1.55	5.34	1.47	-0.20	0.09	3.96	4.02	205	-0.81
CuMnPtRu	5.51	1.30	-0.07	0.14	2.42	3.39	435	2.86	5.50	1.29	-0.07	0.11	2.07	3.45	244	1.66
CuMnPtTa	5.42	1.47	-0.23	0.18	2.72	3.29	442	1.07	5.41	1.47	-0.21	0.17	2.33	3.13	545	-8.97
CuMnRhZn	5.30	1.46	-0.17	0.08	3.88	3.91	330	1.18	5.28	1.46	-0.16	0.05	3.95	3.99	110	-0.12
CuMnTiZn	5.38	1.41	-0.06	0.18	2.02	3.27	466	1.08	5.35	1.42	-0.06	0.15	1.84	3.08	450	0.06
CuMoMnPt	5.37	1.45	-0.07	0.14	2.43	3.82	582	3.03	5.39	1.42	-0.07	0.12	1.51	3.37	602	-4.56

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
CuNiFeHf	5.24	1.51	-0.17	0.18	1.97	2.39	303	1.38	5.24	1.50	-0.18	0.16	1.80	2.28	628	0.76
CuNiFeZn	5.35	1.27	-0.01	0.11	3.33	3.41	660	1.53	5.34	1.26	-0.01	0.12	3.07	3.17	610	0.23
CuNiIrMn	5.19	1.45	-0.04	0.11	3.79	3.79	392	4.09	5.17	1.45	-0.04	0.07	2.88	3.62	364	-6.84
CuNiMnRh	5.18	1.46	-0.07	0.07	3.99	3.99	437	1.67	5.15	1.46	-0.06	0.04	3.07	3.61	325	-0.37
CuNiMnTa	5.16	1.52	-0.09	0.16	2.44	2.89	502	1.05	5.14	1.52	-0.10	0.12	1.83	2.53	863	0.79
CuNiMnZn	5.39	1.28	-0.10	0.06	3.99	4.05	580	1.38	5.30	1.33	-0.10	0.03	3.97	4.05	469	-0.92
CuPdFeHf	5.35	1.54	-0.28	0.19	1.95	2.33	310	1.00	5.34	1.54	-0.29	0.18	1.83	2.35	731	0.47
CuPdFeZn	5.43	1.34	-0.09	0.19	3.04	3.12	491	1.54	5.43	1.33	-0.09	0.20	2.92	3.02	572	0.80
CuPdIrMn	5.28	1.51	-0.04	0.18	3.57	3.58	308	4.22	5.28	1.50	-0.03	0.16	3.05	3.69	252	-3.78
CuPdMnZn	5.50	1.34	-0.22	0.10	3.90	3.97	474	1.50	5.43	1.39	-0.21	0.07	3.93	3.99	293	-0.86
CuPtFeFe	5.21	1.47	-0.08	0.05	5.99	5.99	1089	2.19	5.21	1.47	-0.06	0.06	6.13	6.13	924	6.99
CuPtFeHf	5.39	1.51	-0.44	0.14	2.12	2.46	342	2.09	5.39	1.51	-0.43	0.14	1.96	2.42	673	-1.35
CuPtFeRh	5.26	1.50	-0.07	0.07	3.81	3.81	362	1.63	5.27	1.49	-0.06	0.09	3.85	3.85	159	10.26
CuPtFeTi	5.25	1.51	-0.41	0.08	2.21	2.79	410	1.35	5.24	1.51	-0.40	0.10	1.95	2.83	755	-3.19
CuPtFeZn	5.49	1.31	-0.18	0.12	3.18	3.23	545	1.30	5.48	1.31	-0.17	0.12	2.99	3.07	682	-1.18
CuPtIrMn	5.31	1.49	-0.12	0.15	3.36	3.45	330	11.19	5.31	1.48	-0.12	0.11	2.82	3.74	497	-1.58
CuPtMnNi	5.25	1.45	-0.21	0.03	4.05	4.04	351	1.13	5.24	1.45	-0.20	0.00	3.91	3.91	39	6.92
CuPtMnRh	5.31	1.49	-0.19	0.08	3.66	3.67	300	2.42	5.30	1.48	-0.18	0.04	2.92	3.86	306	-2.88
CuPtMnRu	5.26	1.51	-0.04	0.17	3.15	3.50	421	2.85	5.26	1.49	-0.04	0.14	2.25	3.93	473	-5.53
CuPtMnZn	5.54	1.32	-0.31	0.02	3.87	3.92	380	1.11	5.48	1.35	-0.29	0.00	3.89	3.93	166	2.55
CuRhFeTa	5.28	1.51	-0.19	0.12	2.19	2.49	358	1.49	5.26	1.51	-0.18	0.12	2.00	2.50	630	1.05
CuRhFeZn	5.43	1.31	-0.12	0.09	3.48	3.53	678	1.58	5.43	1.31	-0.10	0.11	3.43	3.49	436	-0.95
CuRhIrMn	5.27	1.48	-0.06	0.10	3.11	3.43	421	4.46	5.25	1.48	-0.06	0.07	2.43	3.67	330	10.93
CuRhMnPt	5.34	1.46	-0.18	0.08	3.56	3.61	329	3.42	5.33	1.45	-0.17	0.05	2.88	3.82	181	0.62
CuRhMnRh	5.27	1.48	-0.08	0.06	3.34	3.56	402	1.32	5.26	1.47	-0.07	0.04	2.43	3.91	167	-0.21
CuRhMnZn	5.53	1.28	-0.21	0.04	3.96	4.01	396	1.33	5.52	1.28	-0.20	0.02	4.04	4.08	57	0.48
CuRuMnPt	5.32	1.46	-0.04	0.17	2.72	3.73	508	5.13	5.30	1.46	-0.03	0.14	1.98	4.04	516	2.22
CuTaFeRu	5.44	1.39	-0.03	0.15	2.71	2.90	335	1.01	5.47	1.36	-0.01	0.17	2.36	2.92	309	3.03
CuTaMnOs	5.53	1.37	-0.04	0.16	3.22	3.45	359	1.23	5.56	1.34	-0.04	0.13	3.17	3.57	349	13.64
CuTaMnPd	5.41	1.47	-0.09	0.20	2.78	3.24	400	1.12	5.41	1.46	-0.09	0.17	2.47	3.21	611	4.74
CuTaMnPt	5.42	1.46	-0.29	0.13	2.78	3.17	374	1.42	5.42	1.46	-0.27	0.11	2.56	3.12	385	2.37
CuTiFeMn	5.25	1.45	-0.05	0.20	4.64	5.43	692	1.31	5.22	1.46	-0.05	0.17	4.42	5.40	849	1.65
CuTiFeZn	5.28	1.45	-0.04	0.21	1.28	2.45	433	1.68	5.28	1.44	-0.04	0.23	1.03	2.51	493	0.01
CuTiMnZn	5.30	1.49	-0.04	0.20	2.06	3.55	539	1.47	5.28	1.49	-0.04	0.17	1.75	3.41	592	-0.03
CuVFeIr	5.32	1.37	-0.16	0.10	2.24	3.16	537	1.24	5.31	1.37	-0.15	0.11	1.69	3.33	570	2.47
CuVFePt	5.34	1.39	-0.22	0.07	1.75	3.56	925	2.29	5.34	1.38	-0.20	0.08	1.04	3.36	886	-5.65
CuVMnOs	5.49	1.28	-0.01	0.18	2.81	3.81	548	1.18	5.48	1.28	-0.01	0.14	2.72	3.98	450	13.63
CuVMnPt	5.37	1.40	-0.27	0.10	2.21	4.56	1019	1.93	5.38	1.39	-0.25	0.08	1.76	4.52	955	-2.86
CuWIrMn	5.40	1.40	-0.04	0.16	2.69	3.18	353	1.11	5.41	1.38	-0.04	0.12	2.37	3.17	308	0.77
CuWMnPt	5.38	1.43	-0.04	0.18	2.44	3.17	422	4.46	5.40	1.41	-0.03	0.15	1.57	2.73	426	-4.25
CuZnFeIr	5.22	1.49	-0.02	0.08	3.40	3.44	583	1.88	5.21	1.49	-0.02	0.09	3.46	3.50	274	6.87
CuZnFePd	5.44	1.34	-0.07	0.21	2.96	3.03	325	2.42	5.45	1.32	-0.07	0.21	2.89	2.97	225	0.31
CuZnFePt	5.34	1.42	-0.16	0.14	3.08	3.13	313	3.02	5.29	1.46	-0.15	0.14	3.09	3.13	93	-3.15
CuZnFeRh	5.23	1.48	-0.08	0.13	3.50	3.54	606	1.76	5.22	1.48	-0.07	0.14	3.60	3.66	408	1.04
CuZnIrMn	5.30	1.46	-0.14	0.05	3.82	3.87	389	1.05	5.29	1.46	-0.14	0.01	3.87	3.93	646	11.70
CuZnMnNi	5.15	1.47	-0.11	0.05	4.09	4.12	656	1.48	5.14	1.47	-0.11	0.02	4.08	4.14	688	0.24
CuZnMnPd	5.39	1.42	-0.23	0.08	3.96	4.00	516	1.23	5.39	1.42	-0.23	0.05	3.96	4.02	605	-0.02
CuZnMnRh	5.28	1.47	-0.21	0.04	3.95	4.00	461	1.49	5.29	1.45	-0.20	0.02	3.92	4.00	625	1.31
CuZnMnTi	5.15	1.58	-0.12	0.11	1.99	2.99	594	1.15	5.19	1.55	-0.13	0.08	1.41	3.15	920	0.20
CuZnMnV	5.00	1.65	-0.03	0.20	1.66	3.50	983	1.11	5.05	1.61	-0.05	0.14	0.70	4.38	1868	-0.17
FeFeIrNi	5.21	1.40	-0.05	0.02	6.04	6.04	722	1.06	5.18	1.40	-0.07	0.00	5.48	5.48	912	-8.38
FeFeIrTi	5.11	1.63	-0.31	0.12	4.70	5.24	1039	-1.13	5.13	1.61	-0.31	0.13	5.10	5.74	991	-10.12
FeFeIrV	5.17	1.46	-0.19	0.07	3.34	4.72	612	-3.37	5.15	1.44	-0.18	0.09	1.98	3.30	266	-1.04
FeFeIrZn	5.26	1.45	-0.01	0.11	5.81	5.98	701	4.21	5.27	1.44	0.00	0.12	5.92	6.02	1224	22.64
FeFeMnPt	5.20	1.46	-0.18	0.04	6.44	6.44	1077	1.13	5.17	1.50	-0.19	0.00	2.06	8.14	1046	8.26
FeFeNiTa	5.14	1.52	-0.11	0.12	4.43	4.82	849	1.08	5.15	1.50	-0.11	0.12	3.88	4.64	958	6.31
FeFeNiZn	5.02	1.52	-0.01	0.11	5.48	5.65	997	2.19	5.05	1.49	-0.01	0.12	5.69	5.83	1070	0.81
FeFePtTa	5.39	1.45	-0.26	0.10	4.18	4.67	783	1.31	5.39	1.44	-0.25	0.11	3.95	4.85	900	-0.56
FeFeRhZn	5.18	1.51	-0.06	0.14	5.88	6.04	832	1.42	5.18	1.50	-0.04	0.16	5.99	6.11	768	1.25
FeHfIrIr	5.84	1.25	-0.51	0.15	3.35	3.41	318	-7.16	5.56	1.39	-0.50	0.16	0.00	0.00	389	-8.35

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
FeHfIrNi	5.56	1.35	-0.42	0.14	2.87	3.07	406	-1.56	5.55	1.35	-0.42	0.14	2.94	3.24	638	0.13
FeHfIrPd	5.75	1.31	-0.51	0.17	2.84	3.05	355	-1.43	5.75	1.31	-0.51	0.17	2.92	3.24	654	0.70
FeHfIrPt	5.72	1.34	-0.65	0.10	2.76	2.94	337	-2.81	5.70	1.35	-0.64	0.11	2.88	3.18	631	-3.31
FeHfIrRh	5.92	1.20	-0.52	0.14	3.49	3.58	335	-3.59	5.58	1.37	-0.51	0.15	0.00	0.00	431	-2.84
FeHfNiNi	5.32	1.42	-0.29	0.16	2.57	2.88	444	1.10	5.23	1.44	-0.30	0.15	0.00	0.00	616	-2.44
FeHfPtRu	5.90	1.22	-0.46	0.18	3.44	3.53	347	-1.84	5.59	1.37	-0.43	0.21	0.00	0.00	424	-3.50
FeIrFeIr	5.24	1.45	-0.06	0.00	4.47	4.65	522	3.36	5.24	1.45	-0.06	0.00	4.46	4.70	150	-0.45
FeIrFeNb	5.37	1.45	-0.18	0.10	4.30	4.81	605	-1.51	5.35	1.47	-0.17	0.11	4.19	5.11	521	0.07
FeIrFeNi	5.19	1.41	-0.03	0.04	5.82	5.82	803	1.90	5.18	1.40	-0.04	0.03	5.64	5.64	154	-4.15
FeIrFePt	5.32	1.45	-0.08	0.07	5.69	5.69	643	1.81	5.33	1.44	-0.06	0.09	5.84	5.84	105	-4.41
FeIrFeTa	5.38	1.43	-0.24	0.09	4.18	4.54	633	-2.88	5.35	1.46	-0.23	0.10	4.21	4.85	563	-1.55
FeIrFeV	5.23	1.42	-0.21	0.06	3.83	5.04	710	-2.82	5.21	1.41	-0.20	0.07	0.24	3.76	619	5.04
FeIrMnMo	5.30	1.43	-0.11	0.09	3.72	4.32	515	-1.11	5.26	1.43	-0.13	0.04	1.40	1.94	407	5.35
FeIrMnPt	5.32	1.45	-0.14	0.11	5.09	5.10	523	1.97	5.31	1.47	-0.19	0.03	5.61	5.61	282	-30.00
FeIrMnV	5.23	1.41	-0.24	0.08	3.41	4.45	473	-1.29	5.20	1.42	-0.25	0.03	2.08	3.06	490	7.83
FeIrMnW	5.31	1.43	-0.13	0.07	3.50	3.89	530	-1.62	5.27	1.43	-0.13	0.03	1.20	1.54	335	2.79
FeIrMnZn	5.27	1.41	-0.09	0.09	0.66	5.13	862	7.88	5.30	1.42	-0.15	0.00	0.32	5.54	517	-2.02
FeIrNiNi	5.14	1.44	-0.04	0.04	4.98	4.97	728	3.64	5.12	1.45	-0.04	0.04	5.05	5.05	608	21.13
FeIrNiPt	5.28	1.47	-0.06	0.09	4.39	4.39	468	4.56	5.27	1.47	-0.05	0.10	4.63	4.63	359	6.27
FeIrNiZn	5.17	1.49	-0.08	0.08	3.67	3.73	577	1.80	5.16	1.49	-0.08	0.08	3.67	3.75	353	14.50
FeIrPdPt	5.46	1.43	-0.00	0.13	3.95	3.95	349	1.77	5.47	1.42	0.00	0.14	3.76	3.76	211	-3.81
FeMnIrZn	5.39	1.37	-0.05	0.13	6.15	6.30	676	2.09	5.41	1.36	-0.10	0.05	6.25	6.33	519	-6.51
FeMnMnOs	5.17	1.42	-0.05	0.04	4.01	5.30	1004	1.68	5.16	1.40	-0.07	0.00	0.08	4.84	799	10.39
FeMnMnPt	5.30	1.42	-0.24	0.01	6.20	6.19	1374	2.00	5.14	1.42	-0.25	0.00	2.48	2.60	1462	9.60
FeMnMnRe	5.16	1.42	-0.03	0.13	4.97	5.03	790	1.19	5.11	1.43	-0.04	0.06	0.64	2.92	533	-2.14
FeMnNiZn	5.18	1.42	-0.02	0.14	6.22	6.39	1208	2.20	5.17	1.42	-0.01	0.12	6.06	6.18	736	1.45
FeMnPtV	5.33	1.42	-0.26	0.11	3.79	6.25	916	1.17	5.39	1.38	-0.24	0.09	4.17	7.03	933	-0.84
FeMnPtZn	5.37	1.43	-0.18	0.14	6.16	6.36	1121	2.29	5.37	1.43	-0.19	0.10	6.32	6.44	682	2.41
FeMnRhTa	5.27	1.55	-0.17	0.18	4.74	5.26	461	-1.02	5.24	1.58	-0.16	0.15	5.05	5.65	386	1.31
FeMnRhZn	5.34	1.42	-0.08	0.15	6.44	6.60	895	1.81	5.36	1.40	-0.11	0.09	6.60	6.70	609	-1.34
FeMnZnZn	5.31	1.40	-0.02	0.03	5.20	5.46	1063	2.71	5.30	1.40	-0.03	0.00	5.14	5.42	955	2.42
FeMoMnPt	5.29	1.50	-0.13	0.09	4.68	5.55	787	1.38	5.29	1.49	-0.13	0.06	3.92	5.48	445	5.34
FeNbMnPt	5.33	1.54	-0.30	0.06	4.95	5.59	814	1.30	5.31	1.57	-0.29	0.04	4.88	6.10	721	1.76
FeNbNiPt	5.31	1.49	-0.36	0.03	2.55	2.88	323	1.03	5.30	1.49	-0.35	0.03	2.13	2.89	599	-2.60
FeNbPtPt	5.51	1.46	-0.52	0.01	2.47	2.74	304	1.00	5.50	1.46	-0.51	0.02	2.32	3.06	660	-2.20
FeNiIrPt	5.45	1.33	-0.09	0.06	3.94	3.94	456	1.06	5.45	1.31	-0.09	0.06	2.38	3.26	142	-12.02
FeNiIrRh	5.39	1.32	-0.03	0.04	3.43	3.43	355	1.16	5.37	1.32	-0.04	0.03	2.29	2.81	58	-6.63
FeNiIrTi	5.24	1.46	-0.40	0.10	2.54	2.98	397	-1.31	5.22	1.48	-0.41	0.10	3.01	3.49	384	-6.15
FeNiMnRe	5.14	1.42	-0.02	0.11	3.73	4.23	354	1.53	5.15	1.40	-0.01	0.09	2.55	3.33	243	6.14
FeNiMnZn	5.19	1.35	-0.01	0.14	1.53	4.26	779	2.08	5.25	1.32	-0.04	0.09	1.12	5.10	312	0.61
FeNiNbRu	5.33	1.44	-0.09	0.09	2.40	2.75	336	-1.12	5.29	1.47	-0.10	0.09	2.72	3.26	229	-1.46
FeNiPtTi	5.31	1.44	-0.47	0.09	2.67	3.19	450	1.29	5.29	1.45	-0.47	0.10	2.61	3.37	512	-3.80
FeNiIrMn	5.25	1.44	-0.06	0.07	4.30	4.48	723	1.73	5.22	1.46	-0.08	0.02	0.28	4.36	389	23.79
FeOsMnMn	5.16	1.43	-0.05	0.04	4.34	4.33	944	1.26	5.09	1.41	-0.06	0.00	0.00	0.00	653	15.25
FeOsMnPt	5.28	1.45	-0.03	0.18	4.41	4.66	433	1.77	5.26	1.46	-0.05	0.13	4.11	4.63	421	2.30
FeOsMnRe	5.29	1.41	-0.01	0.10	3.46	3.64	561	1.06	5.26	1.41	-0.02	0.06	1.49	1.83	567	15.54
FePdIrMn	5.32	1.48	-0.03	0.17	6.44	6.44	368	-1.02	5.32	1.48	-0.10	0.06	6.51	6.51	703	6.97
FePdIrTi	5.34	1.51	-0.40	0.16	2.75	3.24	325	-1.16	5.33	1.51	-0.41	0.15	3.05	3.55	351	-6.15
FePdIrV	5.30	1.49	-0.19	0.11	2.16	3.66	570	-1.03	5.30	1.48	-0.19	0.12	2.19	3.99	565	-4.43
FePdIrZr	5.51	1.51	-0.41	0.20	2.98	3.24	354	-1.03	5.50	1.51	-0.44	0.17	3.11	3.39	437	-2.41
FePdRhSc	5.41	1.56	-0.43	0.21	3.25	3.53	359	-1.62	5.41	1.56	-0.42	0.23	3.54	3.72	437	-0.99
FePtFeRe	5.27	1.45	-0.03	0.13	3.93	4.33	554	2.00	5.26	1.45	-0.02	0.14	3.47	4.23	457	-0.15
FePtFeTi	5.32	1.46	-0.40	0.07	4.39	5.27	858	-1.31	5.30	1.47	-0.39	0.08	4.32	5.50	1008	-2.48
FePtFeW	5.30	1.45	-0.10	0.04	3.88	4.39	766	1.27	5.29	1.45	-0.10	0.04	3.35	4.31	686	-0.11
FePtIrTa	5.44	1.49	-0.44	0.10	2.59	2.81	342	1.40	5.43	1.49	-0.44	0.10	2.71	3.15	358	-5.25
FePtMnTa	5.40	1.47	-0.32	0.09	4.54	5.12	714	-1.02	5.37	1.48	-0.31	0.06	4.49	5.39	640	-10.90
FePtMnV	5.26	1.48	-0.29	0.08	4.41	6.50	1077	-1.14	5.22	1.41	-0.27	0.07	1.27	2.09	864	-3.42
FePtMnZn	5.37	1.40	-0.18	0.14	0.70	5.47	633	1.48	5.43	1.35	-0.21	0.07	1.00	5.56	141	-1.74
FePtPdPd	5.51	1.42	-0.12	0.02	4.05	4.05	477	-1.16	5.50	1.42	-0.12	0.03	4.05	4.05	388	-4.23
FePtPdRh	5.49	1.41	-0.08	0.06	4.27	4.27	417	-1.27	5.48	1.41	-0.07	0.08	3.92	3.92	268	-9.59

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum m_i^{\text{ML}}$	$\sum m_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum m_i^{\text{DFT}}$	$\sum m_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
FePtPdZn	5.31	1.55	-0.26	0.14	3.50	3.56	398	-1.24	5.31	1.54	-0.25	0.16	3.50	3.56	374	-6.26
FePtRhRh	5.46	1.39	-0.09	0.04	3.80	3.80	357	-1.06	5.45	1.39	-0.09	0.06	3.51	3.51	87	-14.88
FePtRuV	5.26	1.49	-0.24	0.06	1.85	2.74	314	-1.39	5.27	1.48	-0.22	0.07	1.85	2.99	154	-20.42
FePtVZn	5.46	1.34	-0.28	0.10	1.25	3.22	880	3.64	5.43	1.34	-0.27	0.11	0.85	2.85	568	-1.78
FeReIrMn	5.27	1.43	-0.10	0.09	3.94	4.28	632	1.61	5.24	1.43	-0.12	0.04	1.92	2.54	443	24.80
FeReMnPt	5.29	1.46	-0.07	0.17	4.16	4.84	463	3.12	5.27	1.46	-0.07	0.14	3.65	4.85	349	17.17
FeReNiPt	5.20	1.51	-0.03	0.16	2.99	2.99	349	1.26	5.17	1.52	-0.02	0.16	2.07	2.55	128	-2.30
FeReNiRh	5.19	1.48	-0.01	0.11	2.98	2.98	314	1.59	5.16	1.49	-0.02	0.11	2.39	2.77	317	6.03
FeRhIrV	5.27	1.47	-0.27	0.08	2.01	2.84	329	-1.47	5.26	1.47	-0.25	0.09	1.78	2.84	111	-6.97
FeRhMnW	5.30	1.43	-0.04	0.13	3.69	4.18	525	-1.13	5.24	1.44	-0.04	0.10	1.51	2.05	222	-2.10
FeRhMnZn	5.25	1.42	-0.10	0.14	0.71	5.17	879	2.59	5.30	1.41	-0.14	0.06	0.41	5.71	553	1.33
FeRhPdRh	5.42	1.42	-0.00	0.06	4.27	4.26	394	-1.51	5.41	1.42	0.00	0.07	3.94	3.94	162	-1.64
FeRhPtRh	5.44	1.41	-0.11	0.03	3.95	3.95	383	-1.23	5.42	1.41	-0.10	0.04	3.69	3.69	147	-3.17
FeRhRhRh	5.40	1.41	-0.04	0.01	3.73	3.73	332	-1.55	5.30	1.42	-0.04	0.01	0.00	0.00	53	-2.06
FeRhRhV	5.27	1.47	-0.23	0.08	2.40	3.51	429	-1.05	5.25	1.47	-0.21	0.09	2.49	3.81	248	-0.59
FeRuNiPt	5.22	1.49	-0.02	0.13	4.05	4.05	420	1.05	5.22	1.48	-0.01	0.14	3.91	3.91	284	2.17
FeScIrPd	5.96	1.18	-0.45	0.20	3.34	3.53	309	-1.00	5.96	1.18	-0.44	0.21	3.71	3.73	484	-2.16
FeScIrPt	5.83	1.25	-0.56	0.16	3.31	3.45	350	-2.50	5.83	1.25	-0.55	0.17	3.67	3.67	535	-9.92
FeScZnZn	5.51	1.44	-0.15	0.13	1.54	2.02	341	1.24	5.47	1.46	-0.16	0.12	1.03	1.69	169	0.68
FeTaNiNi	5.15	1.48	-0.23	0.06	2.23	2.54	375	1.88	5.13	1.48	-0.24	0.05	1.93	2.43	592	1.13
FeTaNiPd	5.28	1.50	-0.24	0.09	2.33	2.62	335	1.54	5.26	1.50	-0.24	0.09	2.01	2.59	632	1.01
FeTaNiPt	5.30	1.49	-0.42	0.03	2.48	2.72	377	1.90	5.28	1.50	-0.42	0.03	2.11	2.63	617	-1.57
FeTaOsPt	5.61	1.35	-0.30	0.06	2.50	2.65	315	-1.26	5.61	1.35	-0.29	0.07	2.57	2.79	379	-0.48
FeTaPdPt	5.49	1.45	-0.43	0.04	2.40	2.60	318	1.42	5.48	1.45	-0.43	0.04	2.28	2.82	678	0.51
FeTaPtPt	5.50	1.45	-0.57	0.00	2.40	2.58	358	1.56	5.48	1.46	-0.57	0.00	2.31	2.81	657	0.10
FeTiIrNi	5.37	1.37	-0.43	0.08	2.74	3.07	403	-1.00	5.37	1.36	-0.43	0.08	2.79	3.27	602	0.50
FeTiIrPt	5.58	1.33	-0.60	0.04	2.66	2.96	312	-2.52	5.57	1.33	-0.59	0.05	2.81	3.31	583	-2.41
FeTiMnZn	5.16	1.57	-0.11	0.15	4.00	5.24	799	1.01	5.13	1.58	-0.12	0.11	3.82	5.16	905	0.34
FeTiOsPt	5.62	1.30	-0.35	0.18	2.61	2.84	305	-2.14	5.68	1.26	-0.33	0.20	3.28	3.28	107	-9.23
FeVIrZn	5.18	1.53	-0.16	0.14	2.03	2.91	364	1.20	5.13	1.57	-0.16	0.14	1.13	3.25	773	-5.81
FeVPtZn	5.15	1.60	-0.24	0.14	2.09	2.60	518	1.17	5.16	1.58	-0.25	0.13	0.53	3.73	1117	1.29
FeWMnPt	5.29	1.49	-0.13	0.10	4.46	5.09	759	2.13	5.25	1.48	-0.12	0.07	1.42	2.52	479	8.42
FeWNiNi	5.05	1.50	-0.02	0.06	2.10	2.39	322	2.03	5.03	1.50	-0.03	0.05	1.43	1.91	290	4.84
FeWNiPt	5.22	1.51	-0.13	0.04	2.62	2.76	348	1.01	5.20	1.52	-0.14	0.03	1.91	2.35	327	2.90
FeWNiRh	5.24	1.46	-0.10	0.04	2.67	2.83	385	1.06	5.23	1.46	-0.11	0.03	2.40	2.88	562	6.62
FeZnHfPt	5.47	1.51	-0.42	0.19	1.83	2.35	355	1.14	5.50	1.50	-0.40	0.21	1.71	2.45	275	-1.66
FeZnIrNi	5.47	1.26	-0.14	0.02	3.98	4.01	593	1.85	5.51	1.23	-0.13	0.03	4.02	4.04	451	3.13
FeZnIrPd	5.78	1.16	-0.18	0.13	3.87	3.90	513	1.05	5.78	1.16	-0.18	0.13	3.96	3.96	421	1.62
FeZnIrPt	5.69	1.23	-0.23	0.08	3.88	3.90	470	2.56	5.69	1.23	-0.22	0.09	3.89	3.89	368	4.53
FeZnIrV	5.23	1.49	-0.18	0.12	1.47	3.41	647	2.40	5.26	1.47	-0.19	0.11	1.32	3.60	759	5.25
FeZnMnNi	5.14	1.41	-0.01	0.15	0.45	5.17	755	1.72	5.13	1.44	-0.01	0.12	0.62	5.32	90	1.70
FeZnMnPt	5.39	1.41	-0.20	0.12	0.77	6.10	730	2.13	5.33	1.44	-0.20	0.08	0.58	5.90	307	1.05
FeZnMnTi	5.23	1.50	-0.12	0.14	4.04	5.22	882	1.50	5.21	1.51	-0.12	0.12	3.91	5.33	989	-0.66
FeZnNiNi	5.27	1.28	-0.13	0.04	4.02	4.10	722	1.82	5.24	1.30	-0.13	0.04	3.92	4.00	668	-1.46
FeZnNiPd	5.45	1.30	-0.17	0.15	3.84	3.91	683	1.47	5.41	1.32	-0.17	0.15	3.77	3.83	596	-1.08
FeZnNiRh	5.53	1.21	-0.20	0.04	4.26	4.31	711	1.30	5.55	1.20	-0.19	0.05	4.08	4.14	588	-0.08
FeZnNiTi	5.11	1.55	-0.18	0.15	1.56	2.54	350	1.20	5.08	1.56	-0.18	0.18	1.10	2.18	291	1.23
FeZnNiV	5.13	1.45	-0.05	0.16	1.14	3.47	856	1.63	5.14	1.45	-0.05	0.15	0.70	3.52	807	0.39
FeZnNiZn	5.37	1.30	-0.03	0.12	3.02	3.18	607	2.10	5.36	1.31	-0.03	0.12	3.06	3.16	495	0.84
FeZnPdPd	5.70	1.24	-0.28	0.06	3.58	3.64	556	1.24	5.69	1.24	-0.27	0.07	3.48	3.52	306	-1.68
FeZnPdZn	5.43	1.40	-0.14	0.19	2.81	2.96	369	2.37	5.40	1.42	-0.13	0.19	2.83	2.97	373	1.78
FeZnPtPt	5.65	1.28	-0.38	0.03	3.73	3.76	597	-3.74	5.63	1.29	-0.36	0.04	3.70	3.72	438	-11.99
FeZnPtTa	5.48	1.43	-0.21	0.20	1.76	2.27	406	4.57	5.51	1.41	-0.21	0.20	1.63	2.45	303	0.29
FeZnPtTi	5.35	1.49	-0.43	0.12	1.73	2.76	519	2.03	5.38	1.46	-0.41	0.13	1.46	2.94	564	3.23
FeZnPtV	5.41	1.40	-0.24	0.14	1.40	3.78	1056	4.14	5.44	1.38	-0.25	0.13	0.82	4.30	1186	1.52
FeZnPtZn	5.45	1.39	-0.22	0.13	2.91	3.05	402	2.36	5.47	1.37	-0.20	0.14	3.01	3.09	419	5.94
FeZnRhTa	5.30	1.53	-0.18	0.21	1.79	2.33	324	2.27	5.33	1.50	-0.17	0.22	1.43	2.27	258	4.41
FeZnRhV	5.21	1.50	-0.16	0.14	1.37	3.63	765	1.54	5.24	1.47	-0.16	0.14	1.20	3.80	964	0.49
FeZnRhZn	5.44	1.34	-0.16	0.14	3.15	3.31	599	1.60	5.46	1.33	-0.14	0.15	2.96	3.12	645	-0.15
FeZnTiZn	5.49	1.35	-0.07	0.15	1.26	2.37	378	2.09	5.55	1.30	-0.07	0.17	1.18	2.46	398	-0.40

Continued on next page

composition	a ^{ML}	c/a ^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a ^{DFT}	c/a ^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
FeZrPtRu	5.87	1.26	-0.38	0.17	3.39	3.54	331	-1.21	5.85	1.26	-0.38	0.18	3.50	3.60	359	-3.12
HfMnPtZn	5.56	1.47	-0.48	0.17	2.70	3.28	357	1.15	5.49	1.51	-0.48	0.13	2.29	2.99	748	-8.76
HfRhMnPd	5.41	1.62	-0.57	0.14	3.84	4.04	304	-1.21	5.42	1.60	-0.57	0.11	4.06	4.22	132	0.46
IrMnIrNi	5.25	1.46	-0.16	0.03	3.16	3.40	419	2.77	5.16	1.48	-0.16	0.00	0.00	0.00	372	6.80
IrMnIrZn	5.30	1.50	-0.15	0.09	2.64	3.31	506	21.55	5.32	1.48	-0.16	0.05	2.63	3.45	692	11.18
IrMnMnPt	5.35	1.44	-0.25	0.10	0.08	5.94	889	1.60	5.33	1.47	-0.32	0.00	0.58	6.50	899	-3.33
IrMnMnZn	5.35	1.40	-0.20	0.04	0.02	6.26	1285	6.36	5.37	1.40	-0.28	0.00	0.01	6.51	1330	10.64
IrMnMoPd	5.49	1.42	-0.12	0.17	3.02	3.67	326	-1.14	5.50	1.39	-0.13	0.14	2.42	3.86	325	7.96
IrMnMoZn	5.43	1.42	-0.09	0.15	2.40	3.42	523	1.22	5.45	1.39	-0.09	0.11	1.70	3.10	309	-0.13
IrMnNbZn	5.55	1.39	-0.26	0.06	2.71	3.28	378	1.06	5.55	1.39	-0.25	0.04	2.61	3.33	169	2.63
IrMnNiNi	5.16	1.43	-0.11	0.05	4.24	4.24	440	4.73	5.14	1.43	-0.12	0.01	2.12	3.68	368	18.18
IrMnNiOs	5.25	1.44	-0.07	0.08	2.88	3.21	408	1.94	5.21	1.44	-0.08	0.04	0.00	0.00	396	7.43
IrMnNiPd	5.29	1.47	-0.07	0.14	4.22	4.22	354	3.38	5.27	1.47	-0.06	0.11	2.08	4.32	292	20.03
IrMnNiPt	5.29	1.47	-0.17	0.10	3.98	3.98	343	4.47	5.28	1.46	-0.17	0.07	2.61	3.57	304	12.77
IrMnNiRe	5.30	1.42	-0.13	0.09	2.79	3.24	351	1.35	5.29	1.39	-0.14	0.05	0.00	0.00	387	9.59
IrMnNiRh	5.25	1.46	-0.14	0.03	3.61	3.62	404	1.06	5.23	1.46	-0.14	0.00	3.25	3.37	263	11.43
IrMnNiTi	5.29	1.47	-0.44	0.10	3.54	3.94	305	-1.50	5.28	1.47	-0.44	0.07	3.48	3.74	125	10.60
IrMnNiZn	5.23	1.47	-0.16	0.10	3.61	3.68	451	6.05	5.22	1.47	-0.16	0.07	3.56	3.62	473	9.95
IrMnPtV	5.38	1.45	-0.41	0.10	2.51	3.94	478	1.16	5.37	1.45	-0.39	0.08	2.54	3.94	122	4.88
IrMnPtZn	5.34	1.51	-0.25	0.17	3.33	3.51	338	24.33	5.33	1.52	-0.24	0.15	3.36	3.48	435	30.38
IrMnRhZn	5.26	1.53	-0.20	0.13	2.83	3.48	489	10.91	5.28	1.51	-0.20	0.10	2.74	3.60	634	13.66
IrMnRuZn	5.27	1.51	-0.07	0.11	2.52	3.48	646	4.59	5.26	1.50	-0.07	0.08	2.32	3.56	586	2.94
IrMnTiZn	5.72	1.22	-0.43	0.08	2.93	3.47	441	1.17	5.79	1.18	-0.43	0.06	2.78	3.62	453	9.05
IrMnVZn	5.60	1.24	-0.27	0.08	2.19	3.85	837	1.79	5.58	1.24	-0.26	0.05	1.95	3.81	676	8.85
IrMnZnZn	5.43	1.41	-0.24	0.00	3.77	3.82	335	1.44	5.46	1.38	-0.23	0.00	3.80	3.88	323	7.16
IrNiMnMo	5.30	1.44	-0.19	0.05	3.01	3.51	346	-1.06	5.28	1.44	-0.20	0.01	2.33	3.15	306	3.19
IrNiMnOs	5.23	1.46	-0.07	0.07	3.10	3.25	437	1.24	5.20	1.47	-0.08	0.03	2.49	3.13	550	5.72
IrNiMnPt	5.31	1.44	-0.17	0.11	3.36	3.71	334	3.09	5.29	1.45	-0.17	0.07	2.21	3.63	170	-25.13
IrPdMnRu	5.42	1.42	-0.04	0.16	3.27	3.50	435	-1.14	5.40	1.42	-0.04	0.13	2.82	3.46	131	-3.01
IrPdMnW	5.50	1.40	-0.16	0.13	3.09	3.44	371	-1.15	5.36	1.46	-0.16	0.10	0.00	0.00	358	3.36
IrPtMnRu	5.43	1.42	-0.16	0.08	3.12	3.34	368	-1.29	5.41	1.43	-0.16	0.05	2.62	3.30	205	-0.87
IrTiMnNi	5.22	1.52	-0.43	0.10	3.28	3.63	313	-1.51	5.25	1.49	-0.44	0.07	3.11	3.39	23	-8.31
IrZnMnPt	5.37	1.48	-0.24	0.18	3.13	3.51	347	22.53	5.39	1.48	-0.23	0.16	3.29	3.55	28	14.45
IrZnMnRh	5.29	1.50	-0.19	0.14	2.79	3.42	509	8.16	5.30	1.48	-0.20	0.10	2.65	3.57	612	-7.81
IrZnMnRu	5.27	1.51	-0.07	0.12	2.59	3.42	552	1.11	5.27	1.50	-0.07	0.08	2.43	3.47	535	-6.86
IrZnMnTi	5.44	1.43	-0.37	0.13	2.85	3.73	397	1.13	5.38	1.46	-0.38	0.11	2.59	3.53	710	1.54
IrZrMnNi	5.44	1.51	-0.39	0.15	3.67	3.91	327	-1.02	5.42	1.51	-0.43	0.07	3.95	4.13	141	0.98
IrZrMnPd	5.49	1.59	-0.51	0.13	3.74	3.95	304	-1.02	5.49	1.57	-0.53	0.07	4.00	4.16	57	0.93
MnMnMnPt	5.41	1.38	-0.29	0.00	6.21	6.21	1447	2.41	5.13	1.43	-0.30	0.00	2.13	2.19	1148	1.29
MnMnMnRe	5.21	1.42	-0.05	0.14	4.23	4.43	994	1.16	5.22	1.38	-0.06	0.04	0.98	5.18	464	0.02
MnNbOsZn	5.54	1.41	-0.01	0.16	2.95	3.43	365	1.50	5.47	1.44	-0.01	0.13	2.48	3.22	543	-0.95
MnNiMnPt	5.24	1.44	-0.28	0.01	0.46	6.19	1376	1.57	5.28	1.43	-0.36	0.00	0.00	6.68	1354	-5.39
MnNiMnTa	5.18	1.53	-0.10	0.20	0.85	5.13	642	-1.05	5.19	1.48	-0.12	0.11	0.95	3.69	275	-0.16
MnNiMnV	5.11	1.39	-0.12	0.13	0.20	1.87	338	-1.02	5.02	1.47	-0.13	0.05	0.64	3.36	329	0.08
MnNiMnZn	5.24	1.37	-0.11	0.08	0.31	6.08	1261	2.23	5.23	1.40	-0.15	0.00	0.21	6.27	1240	0.21
MnNiNbZn	5.43	1.38	-0.07	0.16	2.06	2.81	434	1.36	5.42	1.38	-0.07	0.13	1.70	2.78	380	-0.28
MnNiNiOs	5.14	1.40	-0.01	0.11	2.32	2.92	313	1.73	5.13	1.40	-0.02	0.06	1.32	2.84	320	15.24
MnNiOsPt	5.42	1.34	-0.06	0.18	2.46	3.12	366	2.40	5.41	1.34	-0.06	0.14	1.38	3.58	338	8.76
MnNiPdZn	5.20	1.54	-0.24	0.11	4.07	4.13	431	1.08	5.20	1.53	-0.24	0.08	4.11	4.19	458	-0.12
MnNiPtRe	5.43	1.34	-0.08	0.19	2.24	3.26	437	2.25	5.42	1.33	-0.09	0.15	1.42	3.02	576	-2.87
MnNiPtTa	5.42	1.44	-0.38	0.11	3.15	3.53	522	1.14	5.41	1.44	-0.37	0.08	2.96	3.46	458	-0.71
MnNiRhZn	5.19	1.50	-0.21	0.07	3.63	3.69	366	1.34	5.20	1.48	-0.20	0.05	3.59	3.65	49	0.51
MnNiRuZn	5.19	1.47	-0.03	0.12	2.79	3.39	470	2.26	5.19	1.45	-0.03	0.10	2.50	3.14	187	-0.80
MnNiVZn	5.32	1.34	-0.10	0.21	1.68	3.79	1028	1.61	5.34	1.31	-0.10	0.17	0.89	3.61	1011	-0.16
MnNiZnZn	5.40	1.32	-0.14	0.05	3.63	3.69	464	1.99	5.40	1.31	-0.14	0.01	3.59	3.75	550	0.88
MnOsMnOs	5.29	1.43	-0.05	0.06	4.02	4.02	947	2.32	5.25	1.42	-0.08	0.00	1.90	2.38	927	24.80
MnOsMnRe	5.32	1.42	-0.06	0.11	1.25	3.86	902	1.58	5.26	1.43	-0.07	0.04	1.56	1.96	753	9.25
MnOsMnRh	5.28	1.44	-0.08	0.10	3.50	3.50	930	1.40	5.19	1.46	-0.12	0.00	2.00	2.50	809	19.75
MnOsMnRu	5.27	1.44	-0.04	0.05	2.81	3.11	1012	1.49	5.29	1.41	-0.07	0.00	0.06	5.06	994	14.93
MnOsNbZn	5.77	1.24	-0.07	0.09	2.98	3.50	525	3.07	5.79	1.23	-0.07	0.07	2.93	3.67	338	13.15

Continued on next page

composition	a ^{ML}	c/a ^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a ^{DFT}	c/a ^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
MnOsNiPt	5.25	1.48	-0.06	0.18	3.46	3.55	424	3.40	5.23	1.49	-0.06	0.15	2.69	3.33	572	1.06
MnOsNiRh	5.22	1.47	-0.03	0.11	3.41	3.48	453	1.36	5.19	1.47	-0.04	0.07	2.63	3.21	458	12.28
MnOsPtPt	5.45	1.45	-0.10	0.21	3.35	3.56	368	1.09	5.42	1.46	-0.10	0.18	2.84	3.46	635	4.66
MnOsRhRh	5.38	1.42	-0.08	0.07	2.93	3.17	321	-1.10	5.36	1.43	-0.07	0.04	2.41	3.11	25	16.92
MnPdMnZn	5.42	1.39	-0.19	0.16	0.28	6.65	1176	1.74	5.43	1.41	-0.24	0.04	0.16	6.92	835	0.22
MnPdNbPt	5.51	1.49	-0.39	0.09	3.31	3.89	458	1.03	5.51	1.48	-0.37	0.08	2.99	3.89	486	-2.49
MnPdNiTa	5.31	1.52	-0.23	0.14	3.33	3.67	508	1.32	5.31	1.51	-0.23	0.11	3.14	3.66	577	1.96
MnPdPdTa	5.50	1.48	-0.27	0.14	3.27	3.69	425	1.27	5.49	1.48	-0.26	0.11	3.06	3.64	552	1.98
MnPdPtTa	5.49	1.50	-0.43	0.08	3.30	3.71	408	1.87	5.49	1.49	-0.42	0.06	3.11	3.63	514	-1.79
MnPdRhZn	5.33	1.51	-0.28	0.13	3.73	3.79	362	1.11	5.35	1.50	-0.27	0.11	3.74	3.80	27	1.06
MnPtMnPt	5.38	1.53	-0.36	0.07	7.38	7.38	348	1.60	5.36	1.56	-0.47	0.00	7.98	7.98	1069	-14.19
MnPtMnTa	5.35	1.54	-0.33	0.10	0.48	5.69	596	-1.65	5.35	1.50	-0.35	0.02	0.89	4.63	527	2.84
MnPtMnZn	5.42	1.39	-0.32	0.03	0.27	6.55	1122	2.34	5.42	1.41	-0.37	0.00	0.22	6.70	1040	3.26
MnPtMoNb	5.48	1.51	-0.23	0.15	2.56	3.22	322	1.29	5.49	1.48	-0.22	0.12	1.94	2.90	167	6.09
MnPtMoPt	5.50	1.45	-0.27	0.11	2.91	4.04	493	1.15	5.51	1.42	-0.26	0.08	2.20	3.98	584	3.32
MnPtMoTa	5.48	1.50	-0.26	0.14	2.42	3.08	322	1.39	5.49	1.47	-0.26	0.11	1.91	2.63	198	5.75
MnPtMoZn	5.42	1.46	-0.13	0.21	2.05	3.90	725	3.74	5.46	1.41	-0.13	0.18	1.14	3.42	604	0.71
MnPtNbNb	5.57	1.50	-0.30	0.12	2.68	3.23	350	1.29	5.55	1.52	-0.30	0.09	2.78	3.40	335	3.71
MnPtNbPd	5.53	1.47	-0.41	0.07	3.36	3.85	404	1.00	5.53	1.46	-0.39	0.06	2.98	3.86	487	-0.25
MnPtNbPt	5.53	1.48	-0.53	0.03	3.34	3.83	417	1.44	5.53	1.47	-0.51	0.02	3.06	3.82	398	1.09
MnPtNbTa	5.58	1.48	-0.31	0.17	2.53	3.05	352	1.37	5.56	1.50	-0.31	0.14	2.67	3.17	258	5.01
MnPtNbV	5.42	1.51	-0.31	0.19	1.99	3.73	494	1.25	5.39	1.53	-0.30	0.17	2.20	3.42	309	5.39
MnPtNbW	5.51	1.48	-0.18	0.20	2.36	2.90	308	1.69	5.52	1.46	-0.18	0.17	1.85	2.53	221	6.60
MnPtNbZn	5.51	1.45	-0.31	0.12	2.52	3.35	447	1.63	5.52	1.42	-0.29	0.10	1.84	3.08	301	0.70
MnPtNiNi	5.26	1.41	-0.22	0.05	4.85	4.85	493	2.77	5.20	1.40	-0.21	0.02	4.91	4.91	386	5.55
MnPtNiOs	5.29	1.44	-0.05	0.19	2.78	3.43	387	4.28	5.27	1.45	-0.05	0.16	2.02	3.16	377	1.55
MnPtNiPd	5.37	1.45	-0.22	0.08	4.61	4.61	325	1.31	5.35	1.45	-0.21	0.06	3.13	4.03	198	3.09
MnPtNiRe	5.30	1.44	-0.10	0.17	2.60	3.52	330	5.32	5.31	1.39	-0.09	0.14	0.00	0.00	488	1.98
MnPtNiRh	5.33	1.44	-0.19	0.07	4.22	4.22	345	1.34	5.29	1.44	-0.18	0.05	2.16	4.06	113	-4.87
MnPtNiRu	5.28	1.44	-0.10	0.14	3.13	3.81	465	1.50	5.26	1.45	-0.10	0.11	2.22	3.48	344	-6.08
MnPtNiTa	5.34	1.50	-0.43	0.06	3.36	3.65	504	1.73	5.35	1.49	-0.42	0.04	3.19	3.63	501	1.83
MnPtPdTa	5.51	1.47	-0.44	0.06	3.30	3.66	367	1.49	5.51	1.46	-0.43	0.04	3.11	3.61	475	-0.06
MnPtPdW	5.50	1.43	-0.12	0.16	2.97	3.65	339	1.97	5.52	1.40	-0.12	0.13	2.20	3.52	579	-6.81
MnPtPtRe	5.50	1.41	-0.14	0.22	2.58	3.65	409	2.88	5.48	1.38	-0.13	0.19	0.00	0.00	607	5.72
MnPtPtTa	5.51	1.49	-0.57	0.04	3.33	3.67	374	2.01	5.51	1.48	-0.55	0.01	3.16	3.62	430	-0.91
MnPtPtV	5.40	1.48	-0.49	0.07	2.42	4.65	815	1.46	5.43	1.45	-0.46	0.06	2.30	4.90	678	-2.58
MnPtRhZn	5.33	1.52	-0.34	0.10	3.55	3.61	374	8.20	5.32	1.52	-0.32	0.08	3.53	3.61	99	-5.64
MnPtRuZn	5.33	1.50	-0.17	0.16	2.76	3.60	583	10.52	5.33	1.49	-0.16	0.13	2.60	3.60	497	8.54
MnPtTaTa	5.59	1.46	-0.32	0.16	2.29	2.79	351	1.13	5.59	1.46	-0.32	0.13	2.23	2.73	193	5.15
MnPtTaV	5.43	1.48	-0.33	0.17	1.87	3.51	518	1.76	5.40	1.51	-0.32	0.15	2.13	3.03	257	5.59
MnPtTaW	5.51	1.47	-0.22	0.19	2.18	2.72	318	1.83	5.52	1.46	-0.21	0.15	1.78	2.36	250	6.11
MnPtTiZn	5.52	1.42	-0.31	0.15	2.31	2.90	374	2.14	5.55	1.38	-0.30	0.12	1.74	2.48	187	-0.51
MnPtTaN	5.51	1.40	-0.49	0.08	2.73	3.43	437	1.12	5.47	1.43	-0.48	0.06	2.64	3.48	386	0.61
MnPtVV	5.29	1.48	-0.32	0.13	1.64	3.69	371	1.05	5.25	1.50	-0.31	0.10	1.95	3.07	256	5.50
MnPtVW	5.34	1.49	-0.22	0.15	1.97	2.94	341	2.06	5.35	1.48	-0.20	0.13	1.69	2.35	224	6.50
MnPtVZn	5.46	1.38	-0.33	0.13	1.67	4.51	1139	3.43	5.44	1.38	-0.32	0.11	1.35	4.33	1124	-2.28
MnPtZnZr	5.67	1.42	-0.47	0.18	3.03	3.42	391	1.01	5.66	1.42	-0.47	0.14	2.71	3.23	243	2.02
MnReMnRu	5.30	1.43	-0.04	0.12	0.18	5.51	969	1.25	5.30	1.41	-0.05	0.05	0.07	4.69	718	0.90
MnReNiOs	5.31	1.40	-0.04	0.10	2.62	2.91	352	1.52	5.23	1.43	-0.04	0.07	0.00	0.00	99	15.43
MnRhMnZn	5.36	1.40	-0.22	0.05	0.03	6.54	1357	2.23	5.36	1.41	-0.28	0.00	0.18	6.72	1401	1.13
MnRhMoZn	5.41	1.43	-0.07	0.19	2.37	3.64	573	1.29	5.46	1.38	-0.06	0.16	1.67	3.27	496	-0.85
MnRhNbZn	5.54	1.39	-0.23	0.14	2.82	3.39	433	1.17	5.54	1.39	-0.22	0.11	2.57	3.45	338	0.28
MnRhNiOs	5.24	1.44	-0.02	0.12	2.89	3.40	402	1.79	5.22	1.41	-0.03	0.08	0.00	0.00	312	9.37
MnRhNiRe	5.27	1.43	-0.06	0.13	2.84	3.48	366	1.46	5.28	1.37	-0.07	0.08	0.00	0.00	453	-1.08
MnRhNiZn	5.20	1.49	-0.21	0.07	3.76	3.84	460	1.64	5.18	1.49	-0.20	0.04	3.72	3.78	506	2.41
MnRhPdRh	5.45	1.42	-0.11	0.08	4.04	4.04	356	-1.24	5.45	1.41	-0.09	0.07	3.19	3.99	18	0.70
MnRhPdZn	5.28	1.56	-0.28	0.13	3.70	3.79	370	1.75	5.25	1.57	-0.27	0.10	3.68	3.76	442	2.10
MnRhPtRe	5.46	1.41	-0.13	0.17	2.71	3.45	323	1.22	5.46	1.40	-0.13	0.14	2.28	3.62	439	10.48
MnRhPtZn	5.33	1.52	-0.34	0.11	3.56	3.63	350	8.38	5.30	1.54	-0.32	0.08	3.56	3.64	386	13.07
MnRhRhZn	5.25	1.53	-0.25	0.10	3.01	3.56	478	2.88	5.26	1.51	-0.24	0.07	2.71	3.77	534	0.34

Continued on next page

composition	a^{ML}	c/a^{ML}	ΔE^{ML}	ΔH^{ML}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{ML}} $	T_c^{ML}	$E_{\text{aniso}}^{\text{ML}}$	a^{DFT}	c/a^{DFT}	ΔE^{DFT}	ΔH^{DFT}	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}}$	$\sum \mathbf{m}_i^{\text{DFT}} $	T_c^{DFT}	$E_{\text{aniso}}^{\text{DFT}}$
MnRhRuZn	5.26	1.51	-0.09	0.14	2.51	3.64	640	1.97	5.26	1.50	-0.08	0.12	2.28	3.76	556	1.72
MnRhTiZn	5.78	1.18	-0.41	0.13	2.85	3.48	552	1.23	5.93	1.07	-0.40	0.11	2.33	3.45	545	2.15
MnRhZnZn	5.44	1.40	-0.30	0.02	3.86	3.91	402	1.62	5.44	1.39	-0.29	0.01	4.01	4.09	461	0.62
MnRuMnZn	5.36	1.38	-0.03	0.08	0.40	6.25	1297	2.28	5.32	1.42	-0.09	0.00	0.28	6.32	1117	1.40
MnRuNiNi	5.11	1.45	-0.01	0.10	4.05	4.05	531	1.14	5.07	1.46	-0.01	0.06	2.03	3.43	453	-1.56
MnRuNiZn	5.14	1.51	-0.02	0.14	3.12	3.25	489	2.14	5.16	1.49	-0.02	0.11	2.57	3.71	512	-0.55
MnRuPdRh	5.41	1.43	-0.03	0.15	3.57	3.58	471	-1.22	5.39	1.43	-0.02	0.13	3.01	3.67	40	0.69
MnRuPtRh	5.42	1.43	-0.16	0.07	3.38	3.46	410	-1.25	5.40	1.43	-0.15	0.05	2.76	3.44	59	-2.83
MnRuPtRu	5.41	1.42	-0.09	0.12	2.90	3.36	313	-1.38	5.40	1.42	-0.08	0.10	2.45	3.25	49	2.36
MnRuPtZn	5.30	1.52	-0.16	0.16	2.99	3.48	412	9.71	5.32	1.50	-0.16	0.13	2.70	3.82	617	10.23
MnRuRhRh	5.38	1.42	-0.09	0.06	3.14	3.30	344	-1.57	5.35	1.42	-0.08	0.03	2.41	3.23	15	2.13
MnScScZn	5.75	1.53	-0.07	0.22	2.02	3.69	573	1.01	5.78	1.51	-0.06	0.19	2.01	4.05	638	-0.32
MnTaOsZn	5.51	1.42	-0.03	0.17	2.83	3.23	371	2.22	5.45	1.45	-0.04	0.13	2.52	3.06	612	-4.26
MnTiMnZn	5.22	1.57	-0.10	0.18	0.74	5.24	947	1.63	5.18	1.54	-0.12	0.10	0.79	4.39	981	0.14
MnTiNiZn	5.11	1.57	-0.23	0.12	2.25	3.26	513	1.34	5.12	1.56	-0.24	0.09	2.01	3.19	900	-0.22
MnTiPdZn	5.25	1.60	-0.33	0.13	2.40	3.56	600	1.26	5.26	1.59	-0.34	0.11	1.97	3.49	1076	-0.61
MnTiPtZn	5.35	1.52	-0.48	0.09	2.54	3.62	503	1.20	5.33	1.53	-0.48	0.07	2.18	3.50	918	-4.62
MnTiZnPt	5.25	1.54	-0.15	0.09	1.58	2.63	548	1.32	5.13	1.61	-0.17	0.05	0.00	0.00	1020	0.25
MnVPtPt	5.50	1.40	-0.56	0.00	2.95	4.36	775	1.32	5.48	1.40	-0.52	0.00	2.36	4.68	844	3.94
MnVZnZn	5.16	1.59	-0.03	0.15	1.56	3.67	983	1.37	5.25	1.53	-0.05	0.09	0.80	4.72	1713	0.40
MnZnMnZr	5.45	1.53	-0.05	0.20	5.24	6.02	908	1.04	5.44	1.54	-0.07	0.12	5.06	6.10	958	-0.92
MnZnNbNi	5.25	1.54	-0.02	0.21	2.14	3.24	403	1.45	5.23	1.55	-0.02	0.18	1.49	3.21	532	0.21
MnZnNbPt	5.53	1.44	-0.25	0.18	2.36	3.59	507	3.12	5.56	1.43	-0.23	0.17	2.35	3.81	671	-3.70
MnZnNiZn	5.49	1.26	-0.12	0.07	3.57	3.74	611	1.67	5.50	1.25	-0.11	0.05	3.67	3.81	332	-0.37
MnZnPdTi	5.37	1.52	-0.29	0.18	2.48	3.85	516	1.13	5.37	1.52	-0.29	0.16	2.38	3.86	655	-0.22
MnZnPdZn	5.54	1.37	-0.25	0.10	3.67	3.80	444	1.76	5.56	1.36	-0.24	0.08	3.76	3.86	176	-0.04
MnZnPtTa	5.47	1.48	-0.25	0.21	2.41	3.19	456	2.60	5.47	1.48	-0.22	0.20	2.20	3.28	527	-7.54
MnZnPtV	5.41	1.43	-0.31	0.15	1.44	4.92	1105	3.38	5.42	1.42	-0.30	0.13	1.15	4.89	1339	-0.22
MnZnPtZn	5.55	1.36	-0.33	0.05	3.61	3.75	341	1.25	5.57	1.34	-0.32	0.03	3.76	3.84	125	-2.20
MnZnTiZn	5.42	1.46	-0.07	0.17	1.87	3.53	579	1.71	5.42	1.46	-0.07	0.15	1.65	3.79	794	-0.02
MnZrPdZn	5.47	1.57	-0.32	0.14	2.60	3.32	419	1.12	5.46	1.56	-0.33	0.10	2.22	3.14	901	-1.41
NiZnPdRh	5.65	1.21	-0.18	0.11	1.81	1.84	355	1.02	5.63	1.21	-0.18	0.11	1.61	1.63	386	0.09

-
- [1] S. V. Faleev, Y. Ferrante, J. Jeong, M. G. Samant, B. Jones, and S. S. P. Parkin, Heusler compounds with perpendicular magnetic anisotropy and large tunneling magnetoresistance, [Physical Review Materials](#) **1**, 024402 (2017).
 - [2] K. Hu, R. Xie, C. Shen, H. Peng, H. Liu, and H. Zhang, High-throughput design of Co-based magnetic Heusler compounds, [Acta Materialia](#) **259**, 119255 (2023).
 - [3] E. Xiao and T. Tadano, High-throughput computational screening of Heusler compounds with phonon considerations for enhanced material discovery, [Acta Materialia](#) **297**, 121312 (2025).