

**S1. Structure types of GM for Pd<sub>m</sub>Au<sub>98-m</sub> clusters obtained with the DFT-fit Gupta potential**

<b>m</b>	<b>Structure</b>	<b>m</b>	<b>Structure</b>	<b>m</b>	<b>Structure</b>
0	FCC-HCP	33	M-Dh	66	Dh
1	FCC	34	M-Dh	67	M-Dh
2	Dh	35	Dh	68	Dh
3	FCC-HCP	36	M-Dh	69	M-Dh
4	FCC-HCP	37	M-Dh	70	M-Dh
5	FCC-HCP	38	M-Dh	71	M-Dh
6	M-Dh	39	M-Dh	72	M-Dh
7	M-Dh	40	Dh	73	M-Dh
8	M-Dh	41	M-Dh	74	Dh
9	In-Ico	42	M-Dh	75	Dh
10	M-Dh	43	M-Dh	76	In-Ico
11	M-Dh	44	M-Dh	77	Dh
12	M-Dh	45	M-Dh	78	M-Dh
13	M-Dh	46	M-Dh	79	M-Dh
14	Dh	47	In-Ico	80	Dh
15	M-Dh	48	M-Dh	81	M-Dh
16	M-Dh	49	M-Dh	82	M-Dh
17	Dh	50	M-Dh	83	M-Dh
18	Dh	51	Dh	84	M-Dh
19	Dh	52	M-Dh	85	Dh
20	Dh	53	Dh	86	M-Dh
21	In-Ico	54	M-Dh	87	Dh
22	In-Ico	55	M-Dh	88	M-Dh
23	In-Ico	56	In-Ico	89	M-Dh
24	Dh	57	M-Dh	90	FCC-HCP
25	In-Ico	58	M-Dh	91	M-Dh
26	M-Dh	59	M-Dh	92	FCC-HCP
27	M-Dh	60	M-Dh	93	FCC-HCP
28	M-Dh	61	M-Dh	94	Dh
29	Dh	62	M-Dh	95	M-Dh
30	M-Dh	63	M-Dh	96	M-Dh
31	M-Dh	64	M-Dh	97	Dh
32	Dh	65	Dh	98	M-Dh

**S2. Structure types of the GM for Pd<sub>m</sub>Au<sub>98-m</sub> clusters obtained with the Exp-fit Gupta potential**

<b>m</b>	<b>Structure</b>	<b>m</b>	<b>Structure</b>	<b>m</b>	<b>Structure</b>
0	FCC-HCP	33	M-Dh	66	In-Ico
1	In-Ico	34	M-Dh	67	In-Ico
2	FCC-HCP	35	Dh	68	In-Ico
3	Dh	36	M-Dh	69	In-Ico
4	In-Ico	37	FCC-HCP	70	In-Ico
5	FCC-HCP	38	In-Ico	71	In-Ico
6	In-Ico	39	M-Dh	72	In-Ico
7	M-Dh	40	M-Dh	73	In-Ico
8	FCC-HCP	41	M-Dh	74	In-Ico
9	FCC-HCP	42	Dh	75	In-Ico
10	In-Ico	43	M-Dh	76	In-Ico
11	In-Ico	44	Dh	77	In-Ico
12	Dh	45	In-Ico	78	In-Ico
13	In-Ico	46	M-Dh	79	In-Ico
14	Dh	47	M-Dh	80	In-Ico
15	In-Ico	48	In-Ico	81	In-Ico
16	In-Ico	49	In-Ico	82	Dh
17	M-Dh	50	In-Ico	83	M-Dh
18	M-Dh	51	Dh	84	In-Ico
19	Dh	52	In-Ico	85	M-Dh
20	FCC	53	In-Ico	86	Dh
21	In-Ico	54	In-Ico	87	Dh
22	Dh	55	In-Ico	88	M-Dh
23	FCC-HCP	56	In-Ico	89	Dh
24	M-Dh	57	In-Ico	90	Dh
25	M-Dh	58	In-Ico	91	Dh
26	Dh	59	In-Ico	92	M-Dh
27	M-Dh	60	In-Ico	93	FCC-HCP
28	M-Dh	61	In-Ico	94	FCC-HCP
29	Dh	62	In-Ico	95	M-Dh
30	M-Dh	63	Dh	96	M-Dh
31	Dh	64	In-Ico	97	M-Dh
32	In-Ico	65	In-Ico	98	Dh

**S3. Structure types of the GM for Pd<sub>m</sub>Au<sub>98-m</sub> clusters obtained with the Average Gupta potential**

---

<b>m</b>	<b>Structure</b>	<b>m</b>	<b>Structure</b>	<b>m</b>	<b>Structure</b>
0	Dh	33	In-Ico	66	M-Dh
1	M-Dh	34	Dh	67	M-Dh
2	FCC	35	In-Ico	68	M-Dh
3	M-Dh	36	In-Ico	69	M-Dh
4	In-Ico	37	In-Ico	70	In-Ico
5	FCC-HCP	38	In-Ico	71	M-Dh
6	FCC	39	In-Ico	72	M-Dh
7	FCC-HCP	40	Dh	73	Dh
8	M-Dh	41	In-Ico	74	M-Dh
9	FCC-HCP	42	Dh	75	M-Dh
10	Dh	43	In-Ico	76	M-Dh
11	M-Dh	44	In-Ico	77	FCC-HCP
12	Dh	45	M-Dh	78	M-Dh
13	Dh	46	M-Dh	79	Dh
14	Dh	47	M-Dh	80	Dh
15	Dh	48	M-Dh	81	Dh
16	Dh	49	M-Dh	82	M-Dh
17	Dh	50	M-Dh	83	Dh
18	Dh	51	In-Ico	84	Dh
19	Dh	52	Dh	85	M-Dh
20	Dh	53	M-Dh	86	M-Dh
21	In-Ico	54	M-Dh	87	M-Dh
22	In-Ico	55	Dh	88	Dh
23	Dh	56	Dh	89	M-Dh
24	In-Ico	57	Dh	90	Dh
25	In-Ico	58	In-Ico	91	M-Dh
26	Dh	59	Dh	92	Dh
27	In-Ico	60	Dh	93	M-Dh
28	In-Ico	61	M-Dh	94	In-Ico
29	In-Ico	62	In-Ico	95	M-Dh
30	In-Ico	63	M-Dh	96	FCC-HCP
31	In-Ico	64	M-Dh	97	M-Dh
32	In-Ico	65	In-Ico	98	M-Dh

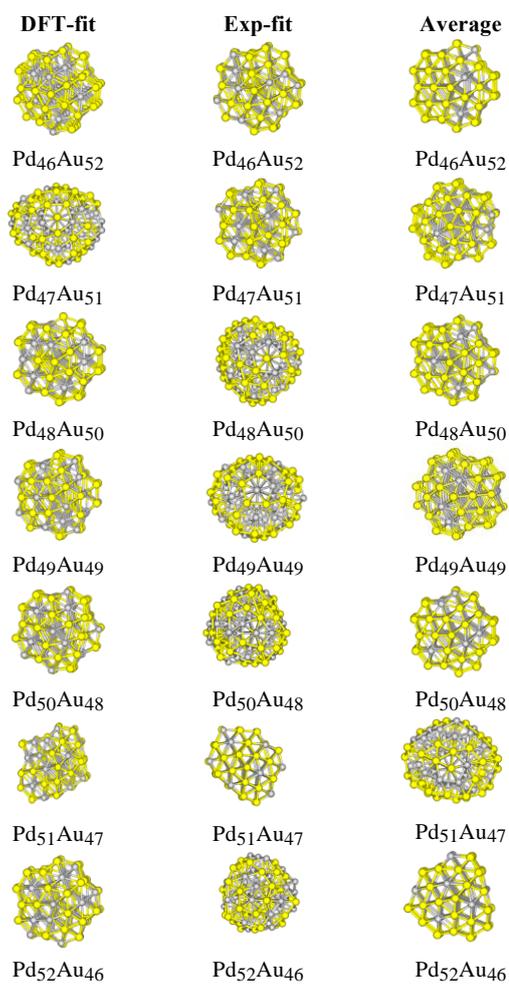
---

**S4. Numbers of heteronuclear and homonuclear bonds for GM clusters in the interval Pd<sub>46</sub>Au<sub>52</sub> – Pd<sub>52</sub>Au<sub>46</sub>. Leary Tetrahedra (LT) (with Average potential) are included for comparison.**

<b>Gupta Potential</b>	<b>Au<sub>46</sub>Pd<sub>52</sub></b>	<b>Au<sub>47</sub>Pd<sub>51</sub></b>	<b>Au<sub>48</sub>Pd<sub>50</sub></b>	<b>Au<sub>49</sub>Pd<sub>49</sub></b>	<b>Au<sub>50</sub>Pd<sub>48</sub></b>	<b>Au<sub>51</sub>Pd<sub>47</sub></b>	<b>Au<sub>52</sub>Pd<sub>46</sub></b>
<b>Average</b>							
Au-Au	206	194	180	174	166	156	152
Pd-Au	318	322	332	328	326	324	334
Pd-Pd	332	340	344	354	364	376	370
<b>DFT-fit</b>							
Au-Au	154	150	138	140	130	120	122
Au-Pd	462	454	470	476	444	492	458
Pd-Pd	240	252	248	240	282	244	276
<b>Exp-fit</b>							
Au-Au	174	160	162	170	166	148	148
Au-Pd	476	478	456	418	442	402	402
Pd-Pd	204	218	238	282	266	324	324
<b>Leary Tetrahedra</b>							
Au-Au	168	N/A	156	N/A	144	N/A	144
Au-Pd	360		432		336		360
Pd-Pd	336		276		384		360

**S5. Structures of AuPd clusters (generated as GM for the three Gupta potentials) in the interval Pd<sub>46</sub>Au<sub>52</sub>-Pd<sub>52</sub>Au<sub>46</sub> after DFT relaxation.**

---



**S5. Excess energies (eV) for various structural motifs obtained for the Average potential (after BHMC homotop optimization) and subsequently relaxed at the DFT level.**

---

<b>Composition</b>	<b>Leary Tetrahedron</b>	<b>FCC-HCP</b>	<b>Icosahedron</b>	<b>Marks Decahedron</b>
<b>Pd<sub>46</sub>Au<sub>52</sub></b>	-11.6273	-11.4923	-9.5497	-11.6147
<b>Pd<sub>47</sub>Au<sub>51</sub></b>	-11.1456	-11.3739	-9.3903	-11.6383
<b>Pd<sub>48</sub>Au<sub>50</sub></b>	-10.9303	-11.4708	-8.9275	-11.4839
<b>Pd<sub>49</sub>Au<sub>49</sub></b>	-11.0112	-11.5620	-9.2246	-11.5060
<b>Pd<sub>50</sub>Au<sub>48</sub></b>	-10.7925	-11.2877	-9.1592	-11.3032
<b>Pd<sub>51</sub>Au<sub>47</sub></b>	-10.5726	-11.2604	-8.7121	-11.2280
<b>Pd<sub>52</sub>Au<sub>46</sub></b>	-10.3450	-10.9750	-8.6772	-10.9586