

TABLE 5. Atomic fractional coordinates ( $\times 10^4$ ), equivalent isotropic and anisotropic displacement coefficients ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ).

Run N° 1: Sr-feldspar quenched from 1410°C

Site	x	y	z	U(eq)	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sr	2691(1)	-22(1)	656(1)	16(1)	8(1)	20(1)	16(1)	-2(1)	3(1)	0(1)
T <sub>1</sub> (0)	71(1)	1745(1)	1085(1)	8(1)	8(1)	8(1)	6(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>1</sub> (z)	30(1)	1777(1)	6164(1)	8(1)	9(1)	7(1)	7(1)	-1(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>2</sub> (0)	6937(1)	1204(1)	1704(1)	7(1)	7(1)	6(1)	7(1)	0(1)	2(1)	0(1)
T <sub>2</sub> (z)	6852(1)	1132(1)	6716(1)	7(1)	7(1)	6(1)	8(1)	0(1)	3(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (1)	45(2)	1292(1)	3(1)	11(1)	13(1)	13(1)	7(1)	1(1)	4(1)	1(1)
O <sub>A</sub> (2)	5916(2)	2(1)	1427(1)	11(1)	8(1)	7(1)	16(1)	0(1)	3(1)	0(1)
O <sub>B</sub> (0)	8282(2)	1265(1)	1064(1)	14(1)	12(1)	16(1)	17(1)	-2(1)	10(1)	-4(1)
O <sub>B</sub> (z)	8089(2)	1268(1)	6114(1)	14(1)	13(1)	16(1)	18(1)	1(1)	9(1)	-3(1)
O <sub>C</sub> (0)	131(2)	2979(1)	1184(1)	14(1)	14(1)	11(1)	16(1)	-2(1)	5(1)	-4(1)
O <sub>C</sub> (z)	179(2)	3096(1)	6303(1)	13(1)	12(1)	9(1)	17(1)	-2(1)	5(1)	-4(1)
O <sub>D</sub> (0)	1876(2)	1249(1)	1959(1)	15(1)	12(1)	19(1)	9(1)	2(1)	1(1)	2(1)
O <sub>D</sub> (z)	1976(2)	1185(1)	7037(1)	13(1)	12(1)	15(1)	9(1)	2(1)	1(1)	1(1)

Run N° 2: Sr-feldspar quenched from 1560°C

Site	x	y	z	U(eq)	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sr	2691(1)	-20(1)	656(1)	17(1)	8(1)	24(1)	16(1)	-2(1)	3(1)	0(1)
T <sub>1</sub> (0)	69(1)	1746(1)	1086(1)	8(1)	8(1)	10(1)	5(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>1</sub> (z)	32(1)	1776(1)	6162(1)	7(1)	7(1)	9(1)	6(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>2</sub> (0)	6934(1)	1202(1)	1704(1)	7(1)	6(1)	7(1)	6(1)	0(1)	2(1)	0(1)
T <sub>2</sub> (z)	6852(1)	1134(1)	6716(1)	7(1)	6(1)	7(1)	7(1)	0(1)	2(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (1)	40(2)	1291(1)	3(1)	11(1)	13(1)	14(1)	7(1)	0(1)	5(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (2)	5913(2)	2(1)	1428(1)	11(1)	7(1)	9(1)	15(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
O <sub>B</sub> (0)	8271(2)	1266(1)	1065(1)	14(1)	13(1)	16(1)	16(1)	-2(1)	9(1)	-4(1)
O <sub>B</sub> (z)	8087(2)	1268(1)	6113(1)	15(1)	12(1)	18(1)	18(1)	0(1)	9(1)	-3(1)
O <sub>C</sub> (0)	134(2)	2983(1)	1188(1)	14(1)	14(1)	13(1)	16(1)	-2(1)	5(1)	-5(1)
O <sub>C</sub> (z)	182(2)	3094(1)	6302(1)	14(1)	11(1)	12(1)	17(1)	-3(1)	5(1)	-4(1)
O <sub>D</sub> (0)	1880(2)	1247(1)	1962(1)	15(1)	13(1)	20(1)	8(1)	2(1)	1(1)	2(1)
O <sub>D</sub> (z)	1975(2)	1186(1)	7036(1)	14(1)	11(1)	17(1)	10(1)	2(1)	0(1)	1(1)

Run N° 3: Sr-feldspar quenched from 1610°C

Site	x	y	z	U(eq)	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sr	2691(1)	-19(1)	656(1)	19(1)	10(1)	27(1)	18(1)	-2(1)	3(1)	0(1)
T <sub>1</sub> (0)	66(1)	1746(1)	1090(1)	8(1)	10(1)	10(1)	6(1)	-1(1)	4(1)	-2(1)
T <sub>1</sub> (z)	35(1)	1774(1)	6157(1)	7(1)	8(1)	8(1)	6(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>2</sub> (0)	6934(1)	1199(1)	1706(1)	6(1)	7(1)	5(1)	6(1)	0(1)	2(1)	0(1)
T <sub>2</sub> (z)	6855(1)	1136(1)	6715(1)	7(1)	8(1)	6(1)	8(1)	-1(1)	3(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (1)	33(4)	1291(2)	4(2)	12(1)	16(1)	15(1)	7(1)	-2(1)	6(1)	-1(1)
O <sub>A</sub> (2)	5916(3)	3(2)	1429(2)	12(1)	11(1)	7(1)	15(1)	-1(1)	4(1)	-1(1)
O <sub>B</sub> (0)	8262(4)	1261(2)	1067(2)	15(1)	16(1)	16(1)	17(1)	-1(1)	10(1)	-2(1)
O <sub>B</sub> (z)	8102(4)	1270(2)	6115(2)	15(1)	13(1)	18(1)	19(1)	1(1)	11(1)	-4(1)
O <sub>C</sub> (0)	134(4)	2989(2)	1189(2)	15(1)	18(1)	12(1)	16(1)	-1(1)	7(1)	-6(1)
O <sub>C</sub> (z)	178(3)	3088(2)	6297(2)	14(1)	12(1)	13(1)	15(1)	-1(1)	4(1)	-4(1)
O <sub>D</sub> (0)	1883(4)	1244(2)	1969(2)	16(1)	15(1)	20(1)	8(1)	2(1)	1(1)	1(1)
O <sub>D</sub> (z)	1973(4)	1193(2)	7038(2)	14(1)	11(1)	17(1)	10(1)	1(1)	1(1)	1(1)

## Run N° 4: Sr-feldspar quenched from 1640°C

Site	x	y	z	U(eq)	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sr	2693(1)	-17(1)	656(1)	20(1)	9(1)	30(1)	19(1)	-2(1)	4(1)	0(1)
T <sub>1</sub> (0)	67(1)	1750(1)	1092(1)	8(1)	9(1)	11(1)	6(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>1</sub> (z)	32(1)	1775(1)	6154(1)	8(1)	9(1)	10(1)	6(1)	-1(1)	4(1)	-3(1)
T <sub>2</sub> (0)	6931(1)	1196(1)	1707(1)	7(1)	6(1)	8(1)	6(1)	0(1)	3(1)	0(1)
T <sub>2</sub> (z)	6861(1)	1138(1)	6715(1)	8(1)	8(1)	8(1)	8(1)	0(1)	4(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (1)	32(3)	1295(2)	0(2)	13(1)	15(1)	16(1)	7(1)	1(1)	6(1)	1(1)
O <sub>A</sub> (2)	5917(3)	-1(2)	1428(2)	13(1)	8(1)	10(1)	18(1)	1(1)	4(1)	0(1)
O <sub>B</sub> (0)	8256(4)	1268(2)	1068(2)	15(1)	14(1)	18(1)	16(1)	0(1)	9(1)	-4(1)
O <sub>B</sub> (z)	8101(4)	1271(2)	6107(2)	16(1)	15(1)	21(1)	17(1)	0(1)	11(1)	-4(1)
O <sub>C</sub> (0)	141(4)	2991(2)	1196(2)	16(1)	14(1)	15(1)	18(1)	0(1)	5(1)	-5(1)
O <sub>C</sub> (z)	182(4)	3087(2)	6294(2)	15(1)	15(1)	13(1)	18(1)	-2(1)	7(1)	-3(1)
O <sub>D</sub> (0)	1886(4)	1246(2)	1975(2)	16(1)	13(1)	22(1)	10(1)	2(1)	2(1)	0(1)
O <sub>D</sub> (z)	1963(4)	1197(2)	7036(2)	15(1)	13(1)	18(1)	9(1)	1(1)	1(1)	-1(1)

## Run N° 5. Sr-feldspar quenched from 1625°C

Site	x	y	z	U(eq)	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sr	2693(1)	-18(1)	656(1)	20(1)	8(1)	28(1)	19(1)	-2(1)	3(1)	0(1)
T <sub>1</sub> (0)	68(1)	1748(1)	1091(1)	9(1)	8(1)	10(1)	8(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>1</sub> (z)	32(1)	1775(1)	6157(1)	8(1)	7(1)	9(1)	7(1)	-1(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>2</sub> (0)	6932(1)	1199(1)	1706(1)	7(1)	6(1)	7(1)	7(1)	0(1)	2(1)	0(1)
T <sub>2</sub> (z)	6859(1)	1136(1)	6716(1)	8(1)	6(1)	7(1)	9(1)	0(1)	2(1)	-1(1)
O <sub>A</sub> (1)	40(2)	1296(2)	3(1)	12(1)	14(1)	15(1)	8(1)	-1(1)	5(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (2)	5916(2)	1(1)	1428(1)	12(1)	7(1)	9(1)	17(1)	1(1)	2(1)	0(1)
O <sub>B</sub> (0)	8267(3)	1265(2)	1070(1)	15(1)	13(1)	18(1)	18(1)	0(1)	9(1)	-4(1)
O <sub>B</sub> (z)	8101(3)	1269(2)	6111(2)	16(1)	14(1)	18(1)	21(1)	1(1)	11(1)	-4(1)
O <sub>C</sub> (0)	139(3)	2992(2)	1194(1)	16(1)	15(1)	14(1)	19(1)	-1(1)	6(1)	-5(1)
O <sub>C</sub> (z)	176(3)	3088(1)	6295(1)	15(1)	13(1)	13(1)	17(1)	-2(1)	6(1)	-5(1)
O <sub>D</sub> (0)	1882(3)	1248(2)	1966(1)	16(1)	13(1)	21(1)	10(1)	2(1)	2(1)	2(1)
O <sub>D</sub> (z)	1965(3)	1190(2)	7033(1)	15(1)	14(1)	18(1)	10(1)	2(1)	1(1)	1(1)

## Run N° 6: Sr-feldspar quenched from 1600°C

Site	x	y	z	U(eq)	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
Sr	2693(1)	-19(1)	656(1)	20(1)	9(1)	29(1)	19(1)	-2(1)	3(1)	0(1)
T <sub>1</sub> (0)	68(1)	1749(1)	1090(1)	9(1)	9(1)	12(1)	6(1)	0(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>1</sub> (z)	33(1)	1776(1)	6157(1)	8(1)	8(1)	10(1)	7(1)	-1(1)	3(1)	-2(1)
T <sub>2</sub> (0)	6933(1)	1200(1)	1706(1)	7(1)	6(1)	9(1)	7(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
T <sub>2</sub> (z)	6859(1)	1136(1)	6715(1)	8(1)	7(1)	9(1)	8(1)	0(1)	2(1)	0(1)
O <sub>A</sub> (1)	37(3)	1293(2)	3(2)	12(1)	15(1)	16(1)	7(1)	-1(1)	6(1)	-1(1)
O <sub>A</sub> (2)	5919(2)	-1(2)	1428(1)	13(1)	9(1)	11(1)	16(1)	-1(1)	4(1)	0(1)
O <sub>B</sub> (0)	8268(3)	1268(2)	1068(2)	16(1)	13(1)	20(1)	16(1)	-3(1)	8(1)	-4(1)
O <sub>B</sub> (z)	8101(3)	1274(2)	6111(2)	16(1)	12(1)	20(1)	18(1)	3(1)	8(1)	-3(1)
O <sub>C</sub> (0)	132(3)	2989(2)	1190(2)	17(1)	16(1)	16(1)	17(1)	-1(1)	7(1)	-5(1)
O <sub>C</sub> (z)	179(3)	3086(2)	6298(2)	16(1)	13(1)	14(1)	17(1)	-1(1)	4(1)	-4(1)
O <sub>D</sub> (0)	1875(3)	1245(2)	1966(2)	16(1)	12(1)	22(1)	9(1)	2(1)	0(1)	1(1)
O <sub>D</sub> (z)	1971(3)	1192(2)	7038(2)	15(1)	13(1)	17(1)	10(1)	1(1)	1(1)	2(1)

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U<sub>ij</sub> tensor. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  $-2\pi^2 (h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2hka^* b^* U_{12})$ .