

Supplement 1. Selected bond lengths (Å) and angles (°) in coesite and coesite-II from DFT (GGA) calculations

A. Coesite

<i>P</i> (GPa)	0	5	10	15	20	25	30
Si1-O1	1.6096	1.5898	1.5749	1.5635	1.5538	1.5458	1.5380
Si1-O3	1.6213	1.6132	1.6075	1.6035	1.5992	1.5954	1.5902
Si1-O4	1.6203	1.6102	1.6035	1.5976	1.5915	1.5863	1.5820
Si1-O5	1.6265	1.6212	1.6156	1.6094	1.6044	1.5989	1.5939
Si2-O2	1.6193	1.6104	1.6019	1.595	1.5885	1.583	1.5777
Si2-O3	1.6212	1.6136	1.6087	1.605	1.6012	1.5969	1.5934
Si2-O4	1.6153	1.6038	1.5939	1.5851	1.5775	1.5703	1.5635
Si2-O5	1.6251	1.6204	1.6168	1.613	1.609	1.6052	1.6017
Si1-O1-Si1	180.000	180.000	180.000	180.000	180.000	180.000	180.000
Si1-O4-Si2	149.847	149.211	148.445	147.784	147.067	146.183	145.209
Si2-O3-Si1	145.271	143.562	140.050	136.681	134.561	132.962	131.809
Si2-O2-Si2	146.127	139.717	135.396	131.784	128.899	126.528	124.734
Si1-O5-Si2	140.114	135.129	131.535	128.625	126.238	124.444	123.181

B. Coesite-II

<i>P</i> (GPa)	0	10	20	25	30	35	40	45
Si2-O15	1.6110	1.5756	1.5550	1.5604	1.5622	1.5628	1.5622	1.5606
Si3-O15	1.6106	1.5754	1.5543	1.5638	1.5650	1.5645	1.5665	1.5652
Si7-O4	1.6082	1.5747	1.5527	1.5449	1.5381	1.5322	1.5281	1.5247
Si4-O4	1.6083	1.5746	1.5531	1.5451	1.5368	1.5293	1.5242	1.5190
Si7-O3	1.6195	1.6037	1.5919	1.5955	1.5899	1.5841	1.5786	1.5745
Si2-O11	1.6206	1.6037	1.5924	1.5829	1.5804	1.5783	1.5783	1.5769
Si5-O9	1.6196	1.6035	1.5915	1.6024	1.6040	1.6052	1.6070	1.6090
Si3-O14	1.6199	1.6031	1.5919	1.5723	1.5696	1.5700	1.5687	1.5687
Si4-O3	1.6152	1.5943	1.5772	1.5814	1.5767	1.5712	1.5668	1.5630
Si1-O11	1.6157	1.5939	1.5780	1.5695	1.5681	1.5662	1.5659	1.5647
Si6-O14	1.6153	1.5941	1.5774	1.5584	1.5555	1.5542	1.5543	1.5535
Si8-O9	1.6152	1.5942	1.5772	1.5847	1.5846	1.5832	1.5848	1.5855
Si2-O15-Si3	180.000	180.000	180.000	158.489	151.267	146.847	141.932	138.923
Si5-O4-Si7	180.000	179.264	178.877	176.720	178.249	178.023	177.630	175.845
Si2-O11-Si1	149.460	148.648	146.644	146.238	144.502	143.462	142.048	141.053
Si7-O3-Si4	149.594	148.710	146.720	143.409	143.076	143.316	143.956	144.521
Si3-O14-Si6	149.123	148.218	146.559	164.329	158.420	152.497	145.916	141.470
Si5-O9-Si8	149.278	149.059	147.048	135.574	133.880	132.650	132.528	132.181