

Table 1. Atomic coordinates for the $14a_p \times 28a_p \times 2a_p$ supercell used for the simulation shown in Figure 3b (Space Group Cmmm).

Lattice parameters $a= 53.56$ Angstroms, $b=107.09$ Angstroms, $c=7.71$ Angstroms, $\alpha=\beta=\gamma=90$
(Reproduced from Reference 1).

Atom	x/a	y/b	z/c	occupancy	Wyckoff site
Ti1	0.036	0.018	0.750	1	16r
Ti2	0.036	0.054	0.750	1	16r
Ti3	0.036	0.089	0.750	1	16r
Ti4	0.036	0.125	0.750	1	16r
Ti5	0.036	0.161	0.750	1	16r
Ti6	0.036	0.197	0.750	1	16r
Ti7	0.036	0.232	0.750	1	16r
Ti8	0.036	0.268	0.750	1	16r
Ti9	0.036	0.304	0.750	1	16r
Ti10	0.036	0.339	0.750	1	16r
Ti11	0.036	0.375	0.750	1	16r
Ti12	0.036	0.411	0.750	1	16r
Ti13	0.036	0.446	0.750	1	16r
Ti14	0.036	0.482	0.750	1	16r
Ti15	0.107	0.018	0.750	1	16r
Ti16	0.107	0.054	0.750	1	16r
Ti17	0.107	0.089	0.750	1	16r
Ti18	0.107	0.125	0.750	1	16r
Ti19	0.107	0.161	0.750	1	16r
Ti20	0.107	0.196	0.750	1	16r
Ti21	0.107	0.232	0.750	1	16r
Ti22	0.107	0.268	0.750	1	16r
Ti23	0.107	0.304	0.750	1	16r
Ti24	0.107	0.339	0.750	1	16r
Ti25	0.107	0.375	0.750	1	16r
Ti26	0.107	0.411	0.750	1	16r
Ti27	0.107	0.446	0.750	1	16r
Ti28	0.107	0.482	0.750	1	16r
Ti29	0.179	0.018	0.750	1	16r
Ti30	0.179	0.054	0.750	1	16r
Ti31	0.179	0.089	0.750	1	16r
Ti32	0.179	0.125	0.750	1	16r
Ti33	0.179	0.161	0.750	1	16r
Ti34	0.179	0.196	0.750	1	16r
Ti35	0.179	0.232	0.750	1	16r
Ti36	0.179	0.268	0.750	1	16r
Ti37	0.179	0.304	0.750	1	16r
Ti38	0.179	0.339	0.750	1	16r
Ti39	0.179	0.375	0.750	1	16r
Ti40	0.179	0.411	0.750	1	16r
Ti41	0.179	0.447	0.750	1	16r
Ti42	0.179	0.482	0.750	1	16r
Ti43	0.250	0.018	0.750	1	16r
Ti44	0.250	0.054	0.750	1	16r
Ti45	0.250	0.089	0.750	1	16r
Ti46	0.250	0.125	0.750	1	16r

Ti47	0.250	0.161	0.750	1	16r
Ti48	0.250	0.196	0.750	1	16r
Ti49	0.250	0.232	0.750	1	16r
Nd1	0.071	0.964	0.000	1	8p
Nd2	0.071	0.929	0.000	1	8p
Nd3	0.071	0.893	0.000	1	8p
Nd4	0.071	0.857	0.000	1	8p
Nd5	0.071	0.821	0.000	1	8p
Nd6	0.071	0.786	0.000	1	8p
Nd7	0.071	0.750	0.000	1	8p
Nd8	0.071	0.714	0.000	1	8p
Nd9	0.071	0.679	0.000	1	8p
Nd10	0.071	0.643	0.000	1	8p
Nd11	0.071	0.607	0.000	1	8p
Nd12	0.071	0.571	0.000	1	8p
Nd13	0.071	0.536	0.000	1	8p
Nd14	0.143	0.964	0.000	1	8p
Nd15	0.143	0.929	0.000	1	8p
Nd16	0.143	0.893	0.000	1	8p
Nd17	0.143	0.857	0.000	1	8p
Nd18	0.143	0.821	0.000	1	8p
Nd19	0.143	0.786	0.000	1	8p
Nd20	0.143	0.750	0.000	1	8p
Nd21	0.143	0.714	0.000	1	8p
Nd22	0.143	0.679	0.000	1	8p
Nd23	0.143	0.643	0.000	1	8p
Nd24	0.143	0.607	0.000	1	8p
Nd25	0.143	0.571	0.000	1	8p
Nd26	0.143	0.536	0.000	1	8p
Nd27	0.214	0.964	0.000	1	8p
Nd28	0.214	0.929	0.000	1	8p
Nd29	0.214	0.893	0.000	1	8p
Nd30	0.214	0.857	0.000	1	8p
Nd31	0.214	0.821	0.000	1	8p
Nd32	0.214	0.786	0.000	1	8p
Nd33	0.214	0.750	0.000	1	8p
Nd34	0.214	0.714	0.000	1	8p
Nd35	0.214	0.679	0.000	1	8p
Nd36	0.214	0.643	0.000	1	8p
Nd37	0.214	0.607	0.000	1	8p
Nd38	0.214	0.571	0.000	1	8p
Nd39	0.214	0.536	0.000	1	8p
Nd40	0.000	0.964	0.000	1	4i
Nd41	0.000	0.929	0.000	1	4i
Nd42	0.000	0.893	0.000	1	4i
Nd43	0.000	0.857	0.000	1	4i
Nd44	0.000	0.821	0.000	1	4i
Nd45	0.000	0.786	0.000	1	4i
Nd46	0.000	0.750	0.000	1	4i
Nd47	0.000	0.714	0.000	1	4i
Nd48	0.000	0.679	0.000	1	4i
Nd49	0.000	0.643	0.000	1	4i
Nd50	0.000	0.607	0.000	1	4i

Nd51	0.000	0.571	0.000	1	4i
Nd52	0.000	0.536	0.000	1	4i
Nd53	0.071	0.500	0.000	1	4g
Nd54	0.143	0.500	0.000	1	4g
Nd55	0.214	0.500	0.000	1	4g
Nd56	0.071	0.000	0.000	1	4g
Nd57	0.143	0.000	0.000	1	4g
Nd58	0.214	0.000	0.000	1	4g
Nd59	0.000	0.500	0.000	1	2b
Nd60	0.000	0.000	0.000	1	2a
Nd61	0.071	0.786	0.500	0.2943	8q
Nd62	0.071	0.750	0.500	0.2943	8q
Nd63	0.071	0.714	0.500	0.2943	8q
Nd64	0.071	0.679	0.500	0.2943	8q
Nd65	0.071	0.643	0.500	0.2943	8q
Nd66	0.071	0.607	0.500	0.2943	8q
Nd67	0.071	0.571	0.500	0.2943	8q
Nd68	0.071	0.536	0.500	0.2943	8q
Nd69	0.143	0.821	0.500	0.2943	8q
Nd70	0.143	0.786	0.500	0.2943	8q
Nd71	0.143	0.750	0.500	0.2943	8q
Nd72	0.143	0.714	0.500	0.2943	8q
Nd73	0.143	0.679	0.500	0.2943	8q
Nd74	0.143	0.643	0.500	0.2943	8q
Nd75	0.143	0.607	0.500	0.2943	8q
Nd76	0.143	0.571	0.500	0.2943	8q
Nd77	0.214	0.857	0.500	0.2943	8q
Nd78	0.214	0.821	0.500	0.2943	8q
Nd79	0.214	0.786	0.500	0.2943	8q
Nd80	0.214	0.750	0.500	0.2943	8q
Nd81	0.214	0.714	0.500	0.2943	8q
Nd82	0.214	0.679	0.500	0.2943	8q
Nd83	0.214	0.643	0.500	0.2943	8q
Nd84	0.214	0.607	0.500	0.2943	8q
Nd85	0.000	0.750	0.500	0.2943	4j
Nd86	0.000	0.714	0.500	0.2943	4j
Nd87	0.000	0.679	0.500	0.2943	4j
Nd88	0.000	0.643	0.500	0.2943	4j
Nd89	0.000	0.607	0.500	0.2943	4j
Nd90	0.000	0.571	0.500	0.2943	4j
Nd91	0.000	0.536	0.500	0.2943	4j
Nd92	0.000	0.500	0.500	0.2943	2c
Li1	0.071	0.982	0.500	1	8q
Li2	0.071	0.946	0.500	1	8q
Li3	0.071	0.911	0.500	1	8q
Li4	0.071	0.875	0.500	1	8q
Li5	0.071	0.839	0.500	1	8q
Li6	0.071	0.804	0.500	1	8q
Li7	0.071	0.518	0.500	1	8q
Li8	0.143	0.982	0.500	1	8q
Li9	0.143	0.946	0.500	1	8q
Li10	0.143	0.911	0.500	1	8q
Li11	0.143	0.875	0.500	1	8q

Li12	0.143	0.839	0.500	1	8q
Li13	0.143	0.554	0.500	1	8q
Li14	0.143	0.518	0.500	1	8q
Li15	0.214	0.982	0.500	1	8q
Li16	0.214	0.946	0.500	1	8q
Li17	0.214	0.911	0.500	1	8q
Li18	0.214	0.875	0.500	1	8q
Li19	0.214	0.589	0.500	1	8q
Li20	0.214	0.554	0.500	1	8q
Li21	0.214	0.518	0.500	1	8q
Li22	0.000	0.982	0.500	1	4j
Li23	0.000	0.946	0.500	1	4j
Li24	0.000	0.911	0.500	1	4j
Li25	0.000	0.875	0.500	1	4j
Li26	0.000	0.839	0.500	1	4j
Li27	0.000	0.804	0.500	1	4j
Li28	0.000	0.768	0.500	1	4j
O1	0.071	0.982	0.202	1	16r
O2	0.071	0.946	0.298	1	16r
O3	0.071	0.911	0.202	1	16r
O4	0.071	0.875	0.298	1	16r
O5	0.071	0.839	0.202	1	16r
O6	0.071	0.804	0.298	1	16r
O7	0.071	0.768	0.202	1	16r
O8	0.071	0.732	0.298	1	16r
O9	0.071	0.696	0.202	1	16r
O10	0.071	0.661	0.298	1	16r
O11	0.071	0.625	0.202	1	16r
O12	0.071	0.589	0.298	1	16r
O13	0.071	0.554	0.202	1	16r
O14	0.071	0.518	0.298	1	16r
O15	0.143	0.982	0.298	1	16r
O16	0.143	0.946	0.202	1	16r
O17	0.143	0.911	0.298	1	16r
O18	0.143	0.875	0.202	1	16r
O19	0.143	0.839	0.298	1	16r
O20	0.143	0.804	0.202	1	16r
O21	0.143	0.768	0.298	1	16r
O22	0.143	0.732	0.202	1	16r
O23	0.143	0.696	0.298	1	16r
O24	0.143	0.661	0.202	1	16r
O25	0.143	0.625	0.298	1	16r
O26	0.143	0.589	0.202	1	16r
O27	0.143	0.554	0.298	1	16r
O28	0.143	0.518	0.202	1	16r
O29	0.214	0.982	0.202	1	16r
O30	0.214	0.946	0.298	1	16r
O31	0.214	0.911	0.202	1	16r
O32	0.214	0.875	0.298	1	16r
O33	0.214	0.839	0.202	1	16r
O34	0.214	0.804	0.298	1	16r
O35	0.214	0.768	0.202	1	16r
O36	0.214	0.732	0.298	1	16r

O37	0.214	0.696	0.202	1	16r
O38	0.214	0.661	0.298	1	16r
O39	0.214	0.625	0.202	1	16r
O40	0.214	0.589	0.298	1	16r
O41	0.214	0.554	0.202	1	16r
O42	0.214	0.518	0.298	1	16r
O43	0.036	0.964	0.202	1	16r
O44	0.036	0.929	0.298	1	16r
O45	0.036	0.893	0.202	1	16r
O46	0.036	0.857	0.298	1	16r
O47	0.036	0.821	0.202	1	16r
O48	0.036	0.786	0.298	1	16r
O49	0.036	0.750	0.202	1	16r
O50	0.036	0.714	0.298	1	16r
O51	0.036	0.679	0.202	1	16r
O52	0.036	0.643	0.298	1	16r
O53	0.036	0.607	0.202	1	16r
O54	0.036	0.571	0.298	1	16r
O55	0.036	0.536	0.202	1	16r
O56	0.107	0.964	0.298	1	16r
O57	0.107	0.929	0.202	1	16r
O58	0.107	0.893	0.298	1	16r
O59	0.107	0.857	0.202	1	16r
O60	0.107	0.821	0.298	1	16r
O61	0.107	0.786	0.202	1	16r
O62	0.107	0.750	0.298	1	16r
O63	0.107	0.714	0.202	1	16r
O64	0.107	0.679	0.298	1	16r
O65	0.107	0.643	0.202	1	16r
O66	0.107	0.607	0.298	1	16r
O67	0.107	0.571	0.202	1	16r
O68	0.107	0.536	0.298	1	16r
O69	0.179	0.964	0.202	1	16r
O70	0.179	0.929	0.298	1	16r
O71	0.179	0.893	0.202	1	16r
O72	0.179	0.857	0.298	1	16r
O73	0.179	0.821	0.202	1	16r
O74	0.179	0.786	0.298	1	16r
O75	0.179	0.750	0.202	1	16r
O76	0.179	0.714	0.298	1	16r
O77	0.179	0.679	0.202	1	16r
O78	0.179	0.643	0.298	1	16r
O79	0.179	0.607	0.202	1	16r
O80	0.179	0.571	0.298	1	16r
O81	0.179	0.536	0.202	1	16r
O82	0.250	0.964	0.298	1	16r
O83	0.250	0.929	0.202	1	16r
O84	0.250	0.893	0.298	1	16r
O85	0.250	0.857	0.202	1	16r
O86	0.250	0.821	0.298	1	16r
O87	0.250	0.786	0.202	1	16r
O88	0.043	0.979	0.500	1	8q
O89	0.029	0.950	0.500	1	8q

O90	0.043	0.907	0.500	1	8q
O91	0.029	0.879	0.500	1	8q
O92	0.043	0.836	0.500	1	8q
O93	0.029	0.807	0.500	1	8q
O94	0.043	0.764	0.500	1	8q
O95	0.029	0.736	0.500	1	8q
O96	0.043	0.693	0.500	1	8q
O97	0.029	0.664	0.500	1	8q
O98	0.043	0.622	0.500	1	8q
O99	0.029	0.593	0.500	1	8q
O100	0.043	0.550	0.500	1	8q
O101	0.029	0.521	0.500	1	8q
O102	0.100	0.986	0.500	1	8q
O103	0.114	0.943	0.500	1	8q
O104	0.100	0.914	0.500	1	8q
O105	0.114	0.872	0.500	1	8q
O106	0.100	0.843	0.500	1	8q
O107	0.114	0.800	0.500	1	8q
O108	0.100	0.771	0.500	1	8q
O109	0.114	0.729	0.500	1	8q
O110	0.100	0.700	0.500	1	8q
O111	0.114	0.657	0.500	1	8q
O112	0.100	0.629	0.500	1	8q
O113	0.114	0.586	0.500	1	8q
O114	0.100	0.557	0.500	1	8q
O115	0.114	0.514	0.500	1	8q
O116	0.186	0.979	0.500	1	8q
O117	0.172	0.950	0.500	1	8q
O118	0.186	0.907	0.500	1	8q
O119	0.172	0.879	0.500	1	8q
O120	0.186	0.836	0.500	1	8q
O121	0.172	0.807	0.500	1	8q
O122	0.186	0.764	0.500	1	8q
O123	0.172	0.736	0.500	1	8q
O124	0.186	0.693	0.500	1	8q
O125	0.172	0.664	0.500	1	8q
O126	0.186	0.622	0.500	1	8q
O127	0.172	0.593	0.500	1	8q
O128	0.186	0.550	0.500	1	8q
O129	0.172	0.521	0.500	1	8q
O130	0.243	0.986	0.500	1	8q
O131	0.257	0.943	0.500	1	8q
O132	0.243	0.914	0.500	1	8q
O133	0.257	0.872	0.500	1	8q
O134	0.243	0.843	0.500	1	8q
O135	0.257	0.800	0.500	1	8q
O136	0.243	0.771	0.500	1	8q
O137	0.029	0.986	0.000	1	8p
O138	0.043	0.943	0.000	1	8p
O139	0.029	0.914	0.000	1	8p
O140	0.043	0.872	0.000	1	8p
O141	0.029	0.843	0.000	1	8p
O142	0.043	0.800	0.000	1	8p

O143	0.029	0.771	0.000	1	8p
O144	0.043	0.729	0.000	1	8p
O145	0.029	0.700	0.000	1	8p
O146	0.043	0.657	0.000	1	8p
O147	0.029	0.629	0.000	1	8p
O148	0.043	0.586	0.000	1	8p
O149	0.029	0.557	0.000	1	8p
O150	0.043	0.514	0.000	1	8p
O151	0.114	0.979	0.000	1	8p
O152	0.100	0.950	0.000	1	8p
O153	0.114	0.907	0.000	1	8p
O154	0.100	0.879	0.000	1	8p
O155	0.114	0.836	0.000	1	8p
O156	0.100	0.807	0.000	1	8p
O157	0.114	0.764	0.000	1	8p
O158	0.100	0.736	0.000	1	8p
O159	0.114	0.693	0.000	1	8p
O160	0.100	0.664	0.000	1	8p
O161	0.114	0.622	0.000	1	8p
O162	0.100	0.593	0.000	1	8p
O163	0.114	0.550	0.000	1	8p
O164	0.100	0.521	0.000	1	8p
O165	0.172	0.986	0.000	1	8p
O166	0.186	0.943	0.000	1	8p
O167	0.172	0.914	0.000	1	8p
O168	0.186	0.872	0.000	1	8p
O169	0.172	0.843	0.000	1	8p
O170	0.186	0.800	0.000	1	8p
O171	0.172	0.771	0.000	1	8p
O172	0.186	0.729	0.000	1	8p
O173	0.172	0.700	0.000	1	8p
O174	0.186	0.657	0.000	1	8p
O175	0.172	0.629	0.000	1	8p
O176	0.186	0.586	0.000	1	8p
O177	0.172	0.557	0.000	1	8p
O178	0.186	0.514	0.000	1	8p
O179	0.257	0.979	0.000	1	8p
O180	0.243	0.950	0.000	1	8p
O181	0.257	0.907	0.000	1	8p
O182	0.243	0.879	0.000	1	8p
O183	0.257	0.836	0.000	1	8p
O184	0.243	0.807	0.000	1	8p
O185	0.257	0.764	0.000	1	8p
O186	0.036	0.500	0.298	1	8o
O187	0.107	0.500	0.202	1	8o
O188	0.179	0.500	0.298	1	8o
O189	0.250	0.500	0.202	1	8o
O190	0.036	0.000	0.298	1	8o
O191	0.107	0.000	0.202	1	8o
O192	0.179	0.000	0.298	1	8o
O193	0.000	0.982	0.298	1	8n
O194	0.000	0.946	0.202	1	8n
O195	0.000	0.911	0.298	1	8n

O196	0.000	0.875	0.202	1	8n
O197	0.000	0.839	0.298	1	8n
O198	0.000	0.804	0.202	1	8n
O199	0.000	0.768	0.298	1	8n
O200	0.000	0.732	0.202	1	8n
O201	0.000	0.696	0.298	1	8n
O202	0.000	0.661	0.202	1	8n
O203	0.000	0.625	0.298	1	8n
O204	0.000	0.589	0.202	1	8n
O205	0.000	0.554	0.298	1	8n
O206	0.000	0.518	0.202	1	8n
O207	0.250	0.750	0.298	1	8m

Table 2. $(Nd_{7/12}Li_{1/4})TiO_3$ (Space Group $P2/m$)

Atom	x/a	y/b	z/c	occupancy	Wyckoff site
Nd1	0.250	0.000	0.750	1	2m
Nd2	0.250	0.500	0.750	0.167	2n
Li1	0.500	0.500	0.000	0.5	1e
Li2	0.000	0.500	0.500	0.5	1f
Ti1	0.766	0.750	0.766	1	4o
O1	0.500	0.702	0.000	1	2j
O2	0.500	0.798	0.500	1	2l
O3	0.000	0.798	0.000	1	2i
O4	0.000	0.702	0.500	1	2k
O5	0.750	0.000	0.848	1	2m
O6	0.750	0.500	0.652	1	2n

Atomic coordinates used for the simulation shown in Figure 3a.

Lattice parameters are $a=c=5.41$ Angstroms, $b=7.71$ Angstroms, $\beta=90$.

The unique axis, b , is parallel to the c axis in the supercell.

These parameters describe 1:1 primary order but no phase separation.