

Table 10 (deposited). Anisotropic atomic displacement parameters, multiplied by 100.

## Val Malenco clinohumite, RT

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1 <sub>c</sub>	0.63(9)	1.05(8)	0.67(7)	0.006(59)	-0.042(54)	0.26(5)
M1 <sub>n</sub>	0.40(6)	1.19(6)	0.78(5)	-0.017(35)	0.093(34)	0.08(4)
M2 <sub>s</sub>	0.65(6)	0.95(6)	0.81(5)	0.007(41)	-0.027(39)	0.29(4)
M2 <sub>b</sub>	0.65(6)	0.84(6)	0.87(6)	-0.043(41)	-0.029(40)	0.18(4)
M3	0.59(9)	0.65(8)	0.91(8)	-0.20(6)	0.05(6)	0.52(5)
Si1	0.27(7)	0.92(6)	0.70(6)	0.05(5)	-0.05(5)	0.22(5)
Si2	0.31(7)	0.85(7)	0.74(6)	-0.02(5)	0.05(5)	0.13(5)
O1,1	0.51(6)	1.08(5)	0.87(5)	0.02(4)	-0.02(4)	0.15(4)
O1,2	0.48(5)	0.86(5)	0.89(5)	-0.01(4)	-0.01(4)	0.25(4)
O1,3	0.48(5)	1.15(5)	0.86(5)	0.00(4)	0.07(4)	0.39(4)
O1,4	0.64(5)	0.99(5)	0.81(5)	-0.01(4)	-0.01(4)	0.06(4)
O2,1	0.37(6)	1.09(5)	0.92(5)	-0.04(4)	-0.04(4)	0.28(4)
O2,2	0.61(5)	0.91(5)	1.00(5)	0.04(4)	0.02(4)	0.28(4)
O2,3	0.61(6)	1.13(5)	0.97(5)	0.02(4)	-0.02(4)	0.45(4)
O2,4	0.68(6)	1.11(5)	0.84(5)	0.03(4)	0.13(4)	-0.01(4)
O/F	1.23(7)	1.41(6)	1.29(6)	0.00(5)	0.40(5)	0.06(4)
H	1.7(3)	2.4(3)	2.1(3)	-0.4(2)	-0.6(2)	0.0(2)

Note: Here O/F  $\bar{1}$  O(H), no F

## Val Malenco, 100 K

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1 <sub>c</sub>	0.2(1)	0.7(1)	0.46(9)	-0.10(7)	-0.09(7)	0.15(6)
M1 <sub>n</sub>	0.36(7)	0.81(6)	0.44(6)	0.00(4)	0.01(4)	0.13(4)
M2 <sub>s</sub>	0.39(7)	0.64(7)	0.55(6)	0.01(5)	-0.02(5)	0.15(5)
M2 <sub>b</sub>	0.28(8)	0.75(7)	0.60(7)	-0.08(5)	-0.02(5)	0.10(4)
M3	0.48(11)	0.25(9)	0.53(9)	-0.13(7)	0.07(7)	0.19(6)
Si1	0.26(9)	0.70(8)	0.52(8)	0.08(6)	0.00(6)	0.13(6)
Si2	0.27(9)	0.70(8)	0.44(8)	0.03(6)	-0.01(6)	0.02(6)
O1,1	0.27(7)	0.90(6)	0.53(5)	-0.02(5)	0.00(5)	0.15(5)
O1,2	0.48(6)	0.69(6)	0.75(6)	-0.04(5)	0.10(5)	0.20(4)
O1,3	0.41(7)	0.88(6)	0.55(6)	-0.03(5)	0.07(5)	0.16(4)
O1,4	0.32(6)	0.85(6)	0.60(5)	-0.09(5)	-0.03(5)	0.05(4)
O2,1	0.31(7)	0.93(6)	0.68(6)	-0.05(5)	0.03(5)	0.17(5)
O2,2	0.43(6)	0.81(6)	0.63(5)	0.00(5)	0.02(5)	0.20(4)
O2,3	0.34(7)	0.96(6)	0.70(6)	0.01(5)	-0.02(5)	0.36(5)
O2,4	0.56(7)	0.79(6)	0.68(6)	0.01(5)	0.18(5)	0.05(4)
O/F	1.02(8)	1.15(7)	0.98(6)	-0.05(5)	0.32(6)	-0.05(5)
H	1.3(3)	2.0(3)	2.4(3)	-0.4(2)	-0.6(2)	-0.2(2)

Note: Here O/F  $\bar{1}$  O(H), no F

## Val Malenco clinohumite, 20 K

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1 <sub>c</sub>	0.3(1)	0.68(9)	0.42(8)	0.03(6)	-0.01(6)	0.17(6)
M1 <sub>n</sub>	0.13(6)	0.70(6)	0.50(5)	-0.02(4)	0.02(4)	0.08(4)
M2 <sub>s</sub>	0.24(7)	0.65(7)	0.54(6)	-0.01(5)	-0.07(4)	0.24(4)
M2 <sub>b</sub>	0.21(7)	0.60(7)	0.52(6)	-0.02(4)	-0.04(4)	0.13(4)
M3	0.25(10)	0.31(9)	0.62(9)	-0.27(7)	0.07(7)	0.39(6)
Si1	0.25(9)	0.64(7)	0.55(7)	0.01(6)	-0.05(6)	0.24(6)
Si2	0.11(9)	0.70(8)	0.48(7)	-0.04(6)	0.05(5)	0.09(6)
O1,1	0.24(7)	0.73(6)	0.64(6)	-0.02(4)	0.03(4)	0.09(4)
O1,2	0.43(6)	0.56(5)	0.65(6)	-0.06(5)	-0.01(5)	0.23(4)
O1,3	0.33(6)	0.85(6)	0.66(6)	-0.05(5)	0.03(5)	0.19(4)
O1,4	0.36(6)	0.72(6)	0.54(5)	-0.05(5)	-0.04(4)	0.05(4)
O2,1	0.15(7)	0.78(6)	0.79(6)	-0.13(4)	-0.05(4)	0.27(5)
O2,2	0.30(6)	0.72(6)	0.72(5)	0.00(5)	0.00(4)	0.19(4)
O2,3	0.27(6)	0.86(6)	0.72(6)	0.04(5)	-0.02(4)	0.43(4)
O2,4	0.45(6)	0.66(5)	0.75(6)	0.01(5)	0.11(5)	0.07(4)
O/F	0.95(8)	1.21(6)	1.03(6)	0.05(5)	0.34(5)	0.11(5)
H	1.5(3)	2.1(3)	1.9(3)	-0.2(2)	-0.8(2)	0.2(2)

Note: Here O/F  $\bar{1}$  O(H), no F

## Kukh-i-Lal clinohumite, RT

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1 <sub>c</sub>	0.52(6)	0.77(6)	0.54(6)	0.01(5)	-0.01(5)	0.27(5)
M1 <sub>n</sub>	0.52(4)	0.70(4)	0.49(4)	0.02(3)	0.03(3)	-0.003(30)
M2 <sub>s</sub>	0.65(5)	0.58(4)	0.65(4)	0.01(3)	0.02(4)	0.22(3)
M2 <sub>b</sub>	0.58(5)	0.54(4)	0.64(4)	-0.01(3)	-0.02(4)	0.13(3)

M3	0.55(6)	0.46(5)	0.49(5)	0.02(4)	-0.09(4)	0.23(4)
Si1	0.36(6)	0.49(5)	0.41(5)	0.01(4)	0.09(4)	0.10(4)
Si2	0.24(6)	0.48(5)	0.42(5)	-0.02(4)	-0.01(4)	0.06(4)
O1,1	0.39(4)	0.69(4)	0.56(4)	-0.03(3)	-0.06(3)	0.15(3)
O1,2	0.56(4)	0.49(4)	0.65(4)	0.07(3)	0.04(3)	0.16(3)
O1,3	0.58(4)	0.70(4)	0.52(4)	-0.03(3)	0.03(3)	0.26(3)
O1,4	0.52(4)	0.66(4)	0.52(4)	0.08(3)	0.00(3)	-0.01(3)
O2,1	0.34(4)	0.67(4)	0.65(4)	0.01(3)	0.01(3)	0.18(3)
O2,2	0.68(4)	0.52(4)	0.64(4)	-0.02(3)	0.02(3)	0.13(3)
O2,3	0.57(4)	0.73(4)	0.56(4)	0.01(3)	0.02(3)	0.29(3)
O2,4	0.57(4)	0.64(4)	0.56(4)	0.00(3)	0.12(3)	-0.03(3)
O/F	0.90(5)	0.76(4)	0.85(5)	0.09(3)	0.34(4)	0.19(3)
H	1.6(2)	2.4(2)	2.0(2)	-0.4(2)	-0.6(2)	-0.2(2)

## Kukh-i-Lal clinohumite, 100 K

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1 <sub>c</sub>	0.27(7)	0.49(6)	0.28(6)	0.00(5)	-0.02(6)	0.20(5)
M1 <sub>n</sub>	0.25(4)	0.43(4)	0.25(4)	0.004(3)	0.01(4)	0.05(3)
M2 <sub>s</sub>	0.39(5)	0.35(5)	0.38(5)	-0.03(4)	-0.02(4)	0.19(4)
M2 <sub>b</sub>	0.35(5)	0.41(4)	0.29(5)	-0.08(4)	-0.04(4)	0.01(3)
M3	0.26(7)	0.09(6)	0.22(6)	-0.10(4)	-0.01(5)	0.24(4)
Si1	0.07(6)	0.34(5)	0.20(6)	-0.01(4)	0.03(5)	0.09(4)
Si2	0.32(6)	0.35(6)	0.12(6)	0.01(4)	-0.02(5)	0.00(4)
O1,1	0.28(5)	0.37(4)	0.30(4)	0.01(3)	0.00(4)	0.14(3)
O1,2	0.35(4)	0.35(4)	0.35(4)	0.05(3)	0.03(4)	0.11(3)
O1,3	0.37(5)	0.35(4)	0.29(4)	0.03(3)	0.08(4)	0.09(3)
O1,4	0.35(4)	0.39(4)	0.35(4)	0.00(3)	-0.02(4)	0.11(3)
O2,1	0.22(5)	0.38(4)	0.34(4)	-0.01(3)	-0.06(3)	0.09(3)
O2,2	0.40(5)	0.30(4)	0.35(4)	0.00(3)	0.01(4)	0.11(3)
O2,3	0.43(5)	0.40(4)	0.28(4)	-0.01(4)	0.08(4)	0.15(3)
O2,4	0.37(5)	0.44(4)	0.24(4)	0.04(3)	0.04(4)	0.03(3)
O/F	0.78(5)	0.59(4)	0.57(5)	0.04(4)	0.31(4)	0.11(4)
H	1.6(3)	2.0(2)	1.9(3)	-0.3(2)	-0.7(2)	-0.3(2)

## Kukh-i-Lal clinohumite, 20 K

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1 <sub>c</sub>	0.24(7)	0.41(6)	0.32(6)	-0.04(5)	-0.05(6)	0.15(5)
M1 <sub>n</sub>	0.30(5)	0.43(4)	0.23(4)	0.02(3)	0.05(4)	0.06(3)
M2 <sub>s</sub>	0.38(5)	0.37(4)	0.31(4)	-0.09(4)	-0.02(4)	0.12(4)
M2 <sub>b</sub>	0.36(5)	0.32(4)	0.33(4)	-0.04(4)	-0.06(4)	0.12(3)
M3	0.27(7)	0.15(6)	0.24(6)	-0.04(4)	0.05(5)	0.21(4)
Si1	0.18(6)	0.30(5)	0.22(6)	-0.03(4)	0.06(5)	0.14(4)
Si2	0.25(6)	0.27(5)	0.17(6)	-0.02(4)	0.00(4)	0.04(4)
O1,1	0.26(5)	0.42(4)	0.28(4)	0.03(3)	-0.09(4)	0.11(3)
O1,2	0.37(4)	0.40(4)	0.32(4)	0.02(3)	-0.02(4)	0.14(3)
O1,3	0.36(5)	0.44(4)	0.27(4)	0.03(3)	0.00(4)	0.14(3)
O1,4	0.45(5)	0.37(4)	0.29(4)	0.04(3)	-0.05(4)	0.04(3)
O2,1	0.22(5)	0.42(4)	0.35(4)	0.02(3)	-0.03(4)	0.11(3)
O2,2	0.41(5)	0.30(4)	0.31(4)	0.02(3)	0.03(4)	0.10(3)
O2,3	0.39(5)	0.45(4)	0.18(4)	-0.02(3)	-0.02(4)	0.13(3)
O2,4	0.33(5)	0.35(4)	0.33(4)	0.01(3)	0.04(4)	0.00(3)
O/F	0.77(5)	0.51(4)	0.54(5)	0.05(4)	0.28(4)	0.09(4)
H	1.4(2)	2.5(3)	2.2(3)	-0.3(2)	-0.6(2)	-0.0(2)

## Tilley Foster chondrodite, RT

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1	0.64(4)	0.87(5)	1.00(5)	0.05(39)	0.03(3)	0.18(3)
M2	0.63(3)	0.69(3)	1.03(3)	-0.03(2)	-0.02(2)	0.30(2)
M3	0.78(3)	0.85(3)	0.96(3)	-0.01(2)	-0.04(2)	0.29(2)
Si1	0.34(4)	0.73(4)	0.89(4)	-0.00(3)	0.03(3)	0.25(3)
O1	0.73(3)	0.76(3)	1.08(3)	-0.01(2)	0.02(2)	0.32(2)
O2	0.65(3)	0.79(3)	1.00(3)	0.02(2)	0.07(2)	0.11(2)
O3	0.69(3)	1.01(3)	1.00(3)	-0.03(2)	0.02(2)	0.41(2)
O4	0.51(3)	0.93(3)	1.09(3)	-0.01(2)	0.00(2)	0.31(2)
O/F	1.05(3)	0.97(3)	1.37(3)	0.17(2)	0.33(2)	0.40(3)
H	1.5(1)	3.0(2)	2.8(2)	-0.5(1)	-0.7(1)	0.3(1)

## Tilley Foster chondrodite, 100 K

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1	0.57(5)	0.54(5)	0.55(5)	0.02(3)	0.00(3)	0.05(3)
M2	0.48(3)	0.50(3)	0.57(3)	-0.00(2)	0.03(2)	0.11(2)
M3	0.62(3)	0.62(3)	0.64(3)	0.01(2)	-0.01(2)	0.15(2)

Si1	0.39(4)	0.55(4)	0.55(4)	0.01(3)	-0.01(3)	0.09(3)
O1	0.645(3)	0.60(3)	0.68(3)	-0.00(2)	0.02(2)	0.17(2)
O2	0.57(3)	0.58(3)	0.64(3)	0.00(2)	0.06(2)	0.02(2)
O3	0.61(3)	0.74(3)	0.64(3)	-0.02(2)	0.01(2)	0.22(2)
O4	0.48(3)	0.70(39)	0.68(3)	-0.02(2)	-0.00(2)	0.15(2)
O/F	0.88(4)	0.75(3)	0.86(3)	0.09(2)	0.24(2)	0.21(3)
H	1.2(1)	2.6(2)	2.2(2)	-0.4(1)	-0.5(1)	0.3(1)

## Tilley Foster chondrodite, 10 K

Site	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
M1	0.40(5)	0.58(5)	0.49(5)	0.01(3)	-0.01(3)	0.02(3)
M2	0.355(3)	0.48(3)	0.58(3)	0.04(2)	0.03(2)	0.10(3)
M3	0.50(4)	0.61(3)	0.60(3)	-0.04(2)	-0.04(2)	0.13(3)
Si1	0.34(4)	0.50(4)	0.52(4)	0.02(3)	0.03(3)	0.09(3)
O1	0.53(3)	0.59(3)	0.65(3)	0.00(2)	0.00(2)	0.15(2)
O2	0.46(3)	0.59(3)	0.61(3)	0.04(2)	0.07(2)	0.02(2)
O3	0.48(3)	0.71(3)	0.62(3)	-0.01(2)	0.02(2)	0.20(3)
O4	0.43(3)	0.68(3)	0.67(3)	0.02(2)	0.03(2)	0.14(2)
O/F	0.79(4)	0.69(3)	0.83(4)	0.09(2)	0.24(2)	0.19(3)
H	1.0(1)	2.3(2)	2.0(2)	-0.3(1)	-0.3(1)	0.0(1)