

Supplementary Materials:

Table S1. Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2) for hydroxylclinohumite V_11_2d sample.

Site	occupancy	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	<i>U</i> ^{ani}
Si1	Si	0.42665(8)	0.56618(4)	0.88940(3)	0.00457(10)
Si2	Si	0.07615(8)	0.17667(4)	0.33514(3)	0.00477(10)
Mg1	Mg	0.50276(10)	0.05382(5)	0.22576(4)	0.00629(12)
Mg2	Mg	0.48862(11)	0.63998(5)	0.66979(4)	0.00660(12)
Mg3	Mg	0	½	1	0.00621(15)
Mg4	Mg	0.50910(11)	0.25018(5)	0.88801(4)	0.00620(12)
Mg5	Mg _{0.91} Ti _{0.09}	0.00573(10)	0.38107(5)	0.54195(4)	0.00789(12)
O1	O	0.2774(2)	0.65868(10)	0.98642(8)	0.0066(2)
O2	O	0.2781(2)	0.41991(10)	0.88774(8)	0.00590(19)
O3	O	0.7666(2)	0.56452(10)	0.88800(8)	0.0055(2)
O4	O	0.2767(2)	0.61238(10)	0.79342(8)	0.0062(2)
O5	O	0.2223(2)	0.03146(10)	0.33719(8)	0.0062(2)
O6	O	0.2244(2)	0.22056(10)	0.23788(8)	0.0065(2)
O7	O	-0.2642(2)	0.17709(10)	0.33714(8)	0.0060(2)
O8	O	0.2278(2)	0.27260(10)	0.43042(8)	0.0069(2)
O9	O _{0.63} F _{0.37}	0.2383(2)	0.54592(10)	0.55528(8)	0.0106(2)
H9	H _{0.445}	0.388(6)	0.507(4)	0.514(2)	0.57(19)

Table S2. Selected interatomic distances for hydroxylclinohumite V_11_2d sm.

Si1 – O1	1.6361(11)	Mg1 – O6	2.1392(11)	Mg4 – O1	2.2368(12)
Si1 – O2	1.6514(11)	Mg1 – O7	2.0974(11)	Mg4 – O1	2.0561(11)
Si1 – O3	1.6109(11)	<Mg1 – O>	2.1005	Mg4 – O2	2.0548(11)
Si1 – O4	1.6373(11)			Mg4 – O3	2.1783(11)
<Si1 – O>	1.6339	Mg2 – O4	2.0293(12)	Mg4 – O4	2.1916(11)
		Mg2 – O5	2.0628(11)	Mg4 – O5	2.0688(12)
Si2 – O5	1.6456(11)	Mg2 – O6	2.1900(12)	<Mg4 – O>	2.1310
Si2 – O6	1.6385(11)	Mg2 – O7	2.1720(11)		
Si2 – O7	1.6126(11)	Mg2 – O8	2.2233(12)	Mg5 – O9	2.0085(11)
Si2 – O8	1.6401(11)	Mg2 – O9	2.0516(11)	Mg5 – O5	2.1839(11)
<Si2 – O>	1.6342	<Mg2 – O>	2.1215	Mg5 – O7	2.1544(12)
				Mg5 – O8	2.1397(11)
Mg1 – O2	2.0818(11)	Mg3 – O1	2.1255(10)	×2 Mg5 – O8	2.0048(11)
Mg1 – O3	2.1025(11)	Mg3 – O2	2.0694(10)	×2 Mg5 – O9	1.9954(11)
Mg1 – O4	2.1171(11)	Mg3 – O3	2.0931(10)	×2 <Mg5 – O>	2.0811
Mg1 – O5	2.0651(11)	<Mg3 – O>	2.096		

Table S3. Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2) for hydroxylclinohumite V_11_2a sample.

Site	occupancy	x/a	y/b	z/c	U^{ani}
Si1	Si	0.42667(7)	0.56630(3)	0.88941(2)	0.00438(8)
Si2	Si	0.07611(6)	0.17667(3)	0.33511(2)	0.00454(8)
Mg1	Mg	0.50282(8)	0.05375(4)	0.22572(3)	0.00611(10)
Mg2	Mg	0.48851(8)	0.63994(4)	0.66976(3)	0.00634(10)
Mg3	Mg	0	$\frac{1}{2}$	1	0.00588(12)
Mg4	Mg	0.50893(8)	0.25029(4)	0.88806(3)	0.00590(9)
Mg5	Mg _{0.90} Ti _{0.10}	0.00559(8)	0.38118(4)	0.54188(3)	0.00787(9)
O1	O	0.27770(17)	0.65859(8)	0.98642(6)	0.00641(16)
O2	O	0.27847(17)	0.41984(8)	0.88778(6)	0.00605(16)
O3	O	0.76672(17)	0.56451(8)	0.88810(6)	0.00549(16)
O4	O	0.27667(17)	0.61229(8)	0.79352(6)	0.00632(16)
O5	O	0.22225(17)	0.03149(8)	0.33727(6)	0.00628(16)
O6	O	0.22423(17)	0.22039(8)	0.23794(6)	0.00638(16)
O7	O	-0.26423(17)	0.17724(8)	0.33725(6)	0.00620(16)
O8	O	0.22734(17)	0.27229(8)	0.43033(6)	0.00696(16)
O9	O _{0.67} F _{0.33}	0.23803(18)	0.54570(8)	0.55516(6)	0.01036(17)
H9	H _{0.465}	0.401(5)	0.520(4)	0.5139(19)	0.13(3)

Table S4. Selected interatomic distances for hydroxylclinohumite V_11_2a sample.

Si1 – O2	1.6529(9)	Mg1 – O3	2.1027(9)	Mg4 – O1	2.2368(12)
Si1 – O4	1.6359(9)	Mg1 – O7	2.0995(9)	Mg4 – O1	2.0561(11)
Si1 – O1	1.6346(8)	<Mg1 – O>	2.1014	Mg4 – O2	2.0548(11)
Si1 – O3	1.6122(9)			Mg4 – O3	2.1783(11)
<Si1 – O>	1.6339	Mg2 – O5	2.0631(9)	Mg4 – O4	2.1916(11)
		Mg2 – O4	2.0313(9)	Mg4 – O5	2.0688(12)
Si2 – O5	1.6459(9)	Mg2 – O6	2.1921(9)	<Mg4 – O>	2.1311
Si2 – O6	1.6370(9)	Mg2 – O8	2.2264(9)		
Si2 – O8	1.6373(9)	Mg2 – O9	2.0537(9)	Mg5 – O9	2.0085(11)
Si2 – O7	1.6137(9)	Mg2 – O7	2.1713(9)	Mg5 – O5	2.1839(11)
<Si2 – O>	1.6334	<Mg2 – O>	2.1230	Mg5 – O7	2.1544(12)
				Mg5 – O8	2.1397(11)
Mg1 – O5	2.0671(9)	Mg3 – O1	2.1255(10)	×2 Mg5 – O8	2.0048(11)
Mg1 – O2	2.0838(9)	Mg3 – O2	2.0694(10)	×2 Mg5 – O9	1.9954(11)
Mg1 – O4	2.1160(9)	Mg3 – O3	2.0931(10)	×2 <Mg5 – O>	2.0811
Mg1 – O6	2.1395(9)	<Mg3 – O>	2.096		

Table S5. Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2) for hydroxylclinohumite V_12_03 sample.

Site	occupancy	x/a	y/b	z/c	U^{ani}
Si1	Si	0.42647(8)	0.56627(4)	0.88952(3)	0.00426(10)
Si2	Si	0.07614(8)	0.17663(4)	0.33507(3)	0.00447(10)
Mg1	Mg	0.50285(9)	0.05375(5)	0.22568(4)	0.00605(12)
Mg2	Mg	0.48814(10)	0.64000(5)	0.66995(4)	0.00637(12)
Mg3	Mg	0	$\frac{1}{2}$	1	0.00596(15)
Mg4	Mg	0.50900(10)	0.25023(5)	0.88801(4)	0.00587(12)
Mg5	Mg _{0.89} Ti _{0.11}	0.00543(10)	0.38179(5)	0.54168(4)	0.00778(12)
O1	O	0.2773(2)	0.65863(10)	0.98643(8)	0.0062(2)
O2	O	0.2783(2)	0.41997(10)	0.88777(8)	0.0056(2)
O3	O	0.7668(2)	0.56438(10)	0.88811(8)	0.0054(2)
O4	O	0.2763(2)	0.61239(10)	0.79359(8)	0.0058(2)
O5	O	0.2227(2)	0.03147(10)	0.33710(8)	0.0059(2)
O6	O	0.2245(2)	0.22057(10)	0.23802(8)	0.0062(2)
O7	O	-0.2642(2)	0.17695(10)	0.33701(8)	0.0057(2)
O8	O	0.2276(2)	0.27230(10)	0.43047(8)	0.0067(2)
O9	O _{0.68} F _{0.32}	0.2396(2)	0.54571(10)	0.55482(8)	0.0107(2)
H9	H	0.383(6)	0.509(4)	0.511(2)	0.22(7)

Table S6. Selected interatomic distances for hydroxylclinohumite V_12_03 sample.

Si1 – O2	1.6508(11)	Mg1 – O3	2.1022(11)	Mg4 – O1	2.0541(11)	
Si1 – O4	1.6373(11)	Mg1 – O7	2.0969(11)	Mg4 – O1	2.1899(11)	
Si1 – O1	1.6349(11)	<Mg1 – O>	2.1001	Mg4 – O2	2.0572(12)	
Si1 – O3	1.6127(11)			Mg4 – O3	2.2373(12)	
<Si1 – O>	1.6339	Mg2 – O5	2.0651(11)	Mg4 – O4	2.0714(12)	
		Mg2 – O4	2.0300(12)	Mg4 – O5	2.1802(11)	
Si2 – O5	1.6458(11)	Mg2 – O6	2.1896(12)	<Mg4 – O>	2.1317	
Si2 – O6	1.6371(11)	Mg2 – O8	2.2291(12)			
Si2 – O8	1.6401(11)	Mg2 – O9	2.0538(12)	Mg5 – O9	2.1839(11)	
Si2– O7	1.6131(11)	Mg2 – O7	2.1718(11)	Mg5 – O5	2.0072(11)	
<Si2 – O>	1.6340	<Mg2 – O>	2.1232	Mg5 – O7	2.1438(11)	
				Mg5 – O8	1.9919(11)	
Mg1 – O5	2.0644(11)	Mg3 – O1	2.1248(10)	×2	Mg5 – O8	2.0018(12)
Mg1 – O2	2.0822(11)	Mg3 – O2	2.0701(10)	×2	Mg5 – O9	2.1625(12)
Mg1 – O4	2.1153(11)	Mg3 – O3	2.0913(10)	×2	<Mg5 – O>	2.0819
Mg1 – O6	2.1395(11)	<Mg3 – O>	2.0954			