

**Table S1.** Crystal Data and Structure Refinement for LiY(MoO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

Empirical formula	LiY(MoO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>
Formula weight	425.98
Temperature	293 K
Wavelength	0.71073
Crystal system	Tetragonal
Space group	<i>I</i> 4 <sub>1</sub> / <i>a</i> (No. 88)
Unit cell dimensions	<i>a</i> = 5.1493 (3) Å <i>c</i> = 11.2092 (8) Å
Volume	297.22 (4) Å <sup>3</sup>
<i>Z</i>	2
Density (calculated)	4.759 g/cm <sup>3</sup>
Absorption coefficient	15.039
F(000)	389.0
Crystal size	0.12 × 0.08 × 0.07 mm <sup>3</sup>
θ range for data collection	4.4 to 26.8° −6 ≤ <i>h</i> ≤ 6
Index ranges	−6 ≤ <i>k</i> ≤ 6 −14 ≤ <i>l</i> ≤ 14
Reflections collected	4787
Independent reflections	165 [ <i>R</i> <sub>int</sub> = 0.0670, <i>R</i> <sub>sigma</sub> = 0.0342]
<i>R</i> <sub>int</sub>	0.067
Data / restraints / parameters	165/0/16
Goodness-of-fit on F <sup>2</sup>	1.114

Final R indices [ $>2 \sigma(I)$ ] $R_1 = 0.0660$ ,  $wR_2 = 0.1273$ 

R indices [all data]

 $R_1 = 0.0663$ ,  $wR_2 = 0.1299$ 

Largest diff. peak and hole

2.26 and  $-1.51 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$ 

$R = \Sigma ||F_o| - |F_c|| / \Sigma |F_o|$ ,  $wR = \{ \Sigma [w(|F_o|^2 - |F_c|^2)^2] / \Sigma [w(|F_o|^4)] \}^{1/2}$  and calc  $w = 1 / [ \sigma^2 (F_o^2) + (0.0503P)^2 + 0.0000P ]$  where  $P = (F_o^2 + 2F_c^2) / 3$

**Table S2.** Selected bond lengths ( $\text{\AA}$ ) and angles (deg.) in  $\text{LiY}(\text{MoO}_4)_2$ 

Mo1—O1 <sup>1</sup>	1.773(2)	Y1—O1 <sup>9</sup>	2.402 (2)
Mo1—O1 <sup>2</sup>	1.773(2)	Y1—O1 <sup>10</sup>	2.402 (2)
Mo1—O1 <sup>3</sup>	1.773(2)	Y1—O1	2.402 (2)
Mo1—O1	1.773(2)	Y1—O1 <sup>11</sup>	2.402 (2)
Y1—Y1 <sup>4</sup>	3.80548(19)	Y1—O1 <sup>12</sup>	2.402 (2)
Y1—Y1 <sup>5</sup>	3.80548(19)	Y1—O1 <sup>13</sup>	2.402 (2)
Y1—Y1 <sup>6</sup>	3.80548(17)	Y1—O1 <sup>5</sup>	2.402 (2)
Y1—Y1 <sup>7</sup>	3.80548(17)	O1—Li1 <sup>9</sup>	2.402 (2)
Y1—O1 <sup>8</sup>	2.402(2)		
O1 <sup>1</sup> —Mo1—O1 <sup>2</sup>	106.78(7)	O1 <sup>12</sup> —Y1—O1 <sup>8</sup>	69.11(5)
O1 <sup>2</sup> —Mo1—O1 <sup>3</sup>	106.78(7)	O1—Y1—O1 <sup>10</sup>	79.31(11)
O1 <sup>1</sup> —Mo1—O1 <sup>3</sup>	115.01(15)	O1 <sup>5</sup> —Y1—O1 <sup>8</sup>	99.03(4)
O1—Mo1—O1 <sup>2</sup>	115.00(15)	O1 <sup>13</sup> —Y1—O1 <sup>5</sup>	73.82(4)
O1—Mo1—O1 <sup>1</sup>	106.78(7)	O1 <sup>12</sup> —Y1—O1 <sup>11</sup>	75.32(8)
O1—Mo1—O1 <sup>3</sup>	106.78(7)	O1 <sup>10</sup> —Y1—O1 <sup>11</sup>	152.71(10)
Y1 <sup>4</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	122.838(4)	O1 <sup>5</sup> —Y1—O1 <sup>11</sup>	99.03(4)
Y1 <sup>6</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	122.838(4)	O1 <sup>8</sup> —Y1—O1 <sup>11</sup>	133.32(11)
Y1 <sup>7</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	85.151(5)	O1—Y1—O1 <sup>13</sup>	126.36(7)
Y1 <sup>6</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	85.151(5)	O1 <sup>12</sup> —Y1—O1 <sup>5</sup>	152.71(10)

Y1 <sup>7</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	122.838(3)	O1 <sup>13</sup> —Y1—O1 <sup>10</sup>	126.36(7)
Y1 <sup>7</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	122.838(4)	O1—Y1—O1 <sup>12</sup>	126.35(7)
O1 <sup>8</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	131.32(6)	O1 <sup>13</sup> —Y1—O1 <sup>12</sup>	79.31(11)
O1 <sup>9</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	85.60(5)	O1 <sup>9</sup> —Y1—O1 <sup>5</sup>	133.32(11)
O1 <sup>10</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	159.35(5)	O1—Y1—O1 <sup>9</sup>	69.11(5)
O1 <sup>8</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	37.64(5)	O1 <sup>13</sup> —Y1—O1 <sup>9</sup>	152.71(10)
O1 <sup>10</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	69.97(6)	O1 <sup>13</sup> —Y1—O1 <sup>11</sup>	69.11(5)
O1 <sup>11</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	37.64(5)	O1—Y1—O1 <sup>8</sup>	152.71(10)
O1 <sup>12</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	37.68(5)	O1 <sup>10</sup> —Y1—O1 <sup>9</sup>	75.32(8)
O1 <sup>10</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	101.43(5)	O1 <sup>10</sup> —Y1—O1 <sup>5</sup>	69.11(5)
O1 <sup>12</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	69.97(6)	Mo1—O1—Y1 <sup>5</sup>	120.54(11)
O1 <sup>13</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	101.43(5)	Mo1—O1—Y1	130.80(12)
O1 <sup>9</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	37.64(5)	Mo1—O1—Li1	130.80(12)
O1 <sup>12</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	159.35(5)	Y1—O1—Y1 <sup>5</sup>	104.68(8)
O1 <sup>5</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	102.03(6)	O1 <sup>12</sup> —Li1—O1 <sup>5</sup>	152.71(10)
O1 <sup>11</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	102.03(6)	O1—Li1—O1 <sup>11</sup>	73.82(4)
O1 <sup>8</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	85.60(5)	O1 <sup>9</sup> —Li1—O1 <sup>11</sup>	99.03(4)
O1 <sup>8</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	102.03(6)	O1 <sup>10</sup> —Li1—O1 <sup>8</sup>	73.82(4)
O1 <sup>11</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	131.31(6)	O1—Li1—O1 <sup>8</sup>	152.71(10)
O1 <sup>9</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	102.03(6)	O1 <sup>5</sup> —Li1—O1 <sup>11</sup>	99.03(4)
O1—Y1—Y1 <sup>7</sup>	159.35(5)	O1 <sup>9</sup> —Li1—O1 <sup>8</sup>	99.03(4)
O1—Y1—Y1 <sup>6</sup>	69.97(6)	O1 <sup>13</sup> —Li1—O1 <sup>8</sup>	75.32(8)
O1—Y1—Y1 <sup>4</sup>	101.43(5)	O1 <sup>10</sup> —Li1—O1 <sup>11</sup>	152.71(10)
O1—Y1—Y1 <sup>5</sup>	37.68(5)	O1 <sup>12</sup> —Li1—O1 <sup>11</sup>	75.32(8)
O1 <sup>5</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	37.64(5)	O1 <sup>8</sup> —Li1—O1 <sup>11</sup>	133.32(11)

O1 <sup>13</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	159.35(5)	O1—Li1—O1 <sup>10</sup>	79.31(11)
O1 <sup>11</sup> —Y1—Y1 <sup>5</sup>	85.60(5)	O1—Li1—O1 <sup>9</sup>	69.11(5)
O1 <sup>9</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	131.31(6)	O1 <sup>5</sup> —Li1—O1 <sup>8</sup>	99.03(4)
O1 <sup>5</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	85.60(5)	O1 <sup>13</sup> —Li1—O1 <sup>9</sup>	152.71(10)
O1 <sup>10</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	37.68(5)	O1 <sup>13</sup> —Li1—O1 <sup>10</sup>	126.36(7)
O1 <sup>5</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	131.31(6)	O1 <sup>10</sup> —Li1—O1 <sup>9</sup>	75.32(8)
O1 <sup>13</sup> —Y1—Y1 <sup>7</sup>	37.68(5)	O1 <sup>9</sup> —Li1—O1 <sup>5</sup>	133.32(11)
O1 <sup>12</sup> —Y1—Y1 <sup>6</sup>	101.43(5)	O1 <sup>12</sup> —Li1—O1 <sup>9</sup>	73.82(4)
O1 <sup>13</sup> —Y1—Y1 <sup>4</sup>	69.97(6)	O1—Li1—O1 <sup>12</sup>	126.35(7)
O1 <sup>12</sup> —Y1—O1 <sup>9</sup>	73.82(4)	O1—Li1—O1 <sup>5</sup>	75.32(8)
O1 <sup>10</sup> —Y1—O1 <sup>8</sup>	73.82(4)	O1 <sup>12</sup> —Li1—O1 <sup>8</sup>	69.11(5)
O1—Y1—O1 <sup>11</sup>	73.82(4)	O1 <sup>13</sup> —Li1—O1 <sup>5</sup>	73.82(4)
O1 <sup>9</sup> —Y1—O1 <sup>11</sup>	99.03(4)	O1 <sup>13</sup> —Li1—O1 <sup>12</sup>	79.31(11)
O1 <sup>9</sup> —Y1—O1 <sup>8</sup>	99.03(4)	O1 <sup>10</sup> —Li1—O1 <sup>5</sup>	69.11(5)
O1 <sup>10</sup> —Y1—O1 <sup>12</sup>	126.36(7)	O1 <sup>13</sup> —Li1—O1 <sup>11</sup>	69.11(5)
O1 <sup>13</sup> —Y1—O1 <sup>8</sup>	75.32(8)	O1—Li1—O1 <sup>13</sup>	126.36(7)
O1—Y1—O1 <sup>5</sup>	75.32(8)	O1 <sup>10</sup> —Li1—O1 <sup>12</sup>	126.36(7)

---

(1)  $1/4+Y, 3/4-X, 3/4-Z$ ; (2)  $1-X, 1/2-Y, +Z$ ; (3)  $3/4-Y, -1/4+X, 3/4-Z$ ; (4)  $3/2-X, 1/2-Y, 3/2-Z$ ; (5)  $2-X, 1-Y, 1-Z$ ; (6)  $2-X, -Y, 1-Z$ ; (7)  $5/2-X, 1/2-Y, 3/2-Z$ ; (8)  $7/4-Y, -3/4+X, 1/4+Z$ ; (9)  $+X, -1/2+Y, 1-Z$ ; (10)  $2-X, 1/2-Y, +Z$ ; (11)  $1/4+Y, 5/4-X, 1/4+Z$ ; (12)  $5/4-Y, -3/4+X, 5/4-Z$ ; (13)  $3/4+Y, 5/4-X, 5/4-Z$

**Table S3.** Atomic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for  $\text{LiY}(\text{MoO}_4)_2$ 

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{23}$	$U^{13}$	$U^{12}$
Mo1	31.8(10)	31.8(10)	34.5(14)	0	0	0
Y1	37.4(18)	37.4(18)	38(3)	0	0	0
O1	41.4(17)	35.6(14)	39.9(18)	0.8(10)	-4.2(7)	-1.4(8)
Li1	37.4(18)	37.4(18)	38(3)	0	0	0