

Table S1 to Table S16 respectively list the crystal data and cell parameters at four temperatures. Mo and O atoms at each temperature are named independently (the same Mo and O atoms have been renamed in the manuscript).

Table S1. Crystal Data and Structure Refinement for $Y_2Mo_4O_{15}$ (293K)

Empirical formula	$LiY(MoO_4)_2$	
Formula weight	801.58 g/mol	
Temperature	292.99(1) K	
Wavelength	0.71073	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	$P2_1/c$	
Sum formula	$Y_2Mo_4O_{15}$	
Cell	$a = 6.8110$ (4) Å	
	$b = 9.5833$ (6) Å	
	$c = 10.5124$ (8) Å	
	alpha = 90	
	beta = 105.512 (7)	
Volume	gamma = 90	
	661.17 (8) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	4.02612 g/cm ³	
μ coefficient	15.636	15.0
Nref	1351	
Tmin, Tmax	0.556, 0.780	
F(000)	732.0	
Crystal size	0.12 × 0.09 × 0.07 mm ³	
Theat (max)	26.372	
Index ranges	-9 ≤ h ≤ 9	
	-12 ≤ k ≤ 13	
	-13 ≤ l ≤ 14	
R (reflections)	0.0531 (1217)	
wR2 (reflections)	0.1306 (1342)	
Data completeness	0.993	
Largest diff. peak and hole	2.19 and -2.12 e Å ⁻³	

Table S2. Selected bond angles (deg.) in Y₂Mo₄O₁₅ (293 K)

Atom1	Atom2	Atom3	Angle 2, 1, 3
Mo1	O3	O8	109.985(315)
Mo1	O3	O7	109.076(303)
Mo1	O3	O2	110.583(321)
Mo1	O8	O7	107.683(323)
Mo1	O8	O2	109.055(303)
Mo1	O7	O2	110.412(306)
Mo2	O4	O6	105.052(333)
Mo2	O4	O5	114.019(325)
Mo2	O4	O1	113.098(239)
Mo2	O6	O5	103.896(336)
Mo2	O6	O1	103.465(236)
Mo2	O5	O1	115.590(233)
Y1	O8	O7	163.077(234)
Y1	O8	O3	82.356(235)
Y1	O8	O5	118.090(245)
Y1	O8	O2	90.103(231)
Y1	O8	O4	87.144(246)
Y1	O8	O6	83.232(243)
Y1	O7	O3	96.127(237)
Y1	O7	O5	77.486(245)
Y1	O7	O2	82.997(225)
Y1	O7	O4	104.355(256)
Y1	O7	O6	80.109(249)
Y1	O3	O5	76.019(249)
Y1	O3	O2	150.631(238)
Y1	O3	O4	139.260(258)
Y1	O3	O6	75.050(257)
Y1	O5	O2	131.551(239)
Y1	O5	O4	74.647(257)
Y1	O5	O6	140.94(25)
Y1	O2	O4	67.962(252)
Y1	O2	O6	75.894(241)
Y1	O4	O6	142.516(247)

O1	Mo1	Mo2	180.000
O2	Mo2	Y1	135.613(339)
O3	Mo1	Y1	164.748(395)
O4	Mo1	Y1	119.675(353)
O5	Mo2	Y1	143.557(374)
O6	Mo2	Y1	163.482(402)
O7	Mo2	Y1	147.785(359)
O8	Mo1	Y1	144.926(363)

Table S3. Selected bond lengths (Å) in LiY(MoO₄)₂ (293K)

Atom 1	Atom 1	d 1,2 (Å)
Mo1	O3	1.7457(74)
Mo1	O8	1.7504(73)
Mo1	O7	1.7632(63)
Mo1	O2	1.7829(63)
Mo2	O4	1.7350(78)
Mo2	O6	1.7351(68)
Mo2	O5	1.7373(68)
Mo2	O1	1.8661(9)
Y1	O8	2.2470(67)
Y1	O7	2.2593(63)
Y1	O3	2.2679(77)
Y1	O5	2.3011(67)
Y1	O2	2.3152(69)
Y1	O4	2.3413(70)
Y1	O6	2.3552(64)
O1	Mo2	1.8661(9)
O1	Mo2	1.8661(9)
O2	Mo1	1.7829(63)
O2	Y1	2.3152(69)
O3	Mo1	1.7457(74)
O3	Y1	2.2679(77)
O4	Mo2	1.7350(78)
O4	Y1	2.3413(70)
O5	Mo2	1.7373(68)

O5	Y1	2.3011(67)
O6	Mo2	1.7351(68)
O6	Y1	2.3552(64)
O7	Mo1	1.7632(63)
O7	Y1	2.2593(63)
O8	Mo1	1.7504(73)
O8	Y1	2.2470(67)

Table S4. Atomic displacement parameters (\AA^2) for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (293K)

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Mo1	0.0125(5)	0.0143(5)	0.0097(5)	0.0013(2)	0.0007(3)	0.0002(2)
Mo2	0.0104(5)	0.0150(5)	0.0117(5)	0.0008(3)	0.0032(3)	0.0004(2)
Y1	0.0112(6)	0.0135(5)	0.0106(5)	0.0002(3)	0.0028(3)	0.0005(3)
O1	0.019(6)	0.029(5)	0.022(5)	-0.001(4)	-0.003(3)	0.014(4)
O2	0.019(4)	0.019(3)	0.021(3)	-0.002(3)	0.010(3)	0.006(2)
O3	0.023(4)	0.023(3)	0.020(3)	0.001(3)	0.004(2)	-0.006(2)
O4	0.010(3)	0.031(4)	0.017(3)	-0.001(3)	0.010(3)	-0.010(3)
O5	0.015(4)	0.021(3)	0.024(3)	0.005(2)	0.006(3)	0.004(2)
O6	0.008(3)	0.032(4)	0.022(3)	0.000(3)	0.002(3)	-0.006(3)
O7	0.023(4)	0.026(4)	0.016(3)	-0.002(3)	0.002(5)	-0.008(3)
O8	0.018(4)	0.028(3)	0.019(3)	0.011(3)	0.000(3)	0.011(3)

Table S5. Crystal Data and Structure Refinement for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (323 K)

Empirical formula	$\text{LiY}(\text{MoO}_4)_2$
Formula weight	801.58 g/mol
Temperature	322.99 (1) K
Wavelength	0.71073
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/c$
Sum formula	$\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$
Cell	$a = 6.8176 (5) \text{\AA}$ $b = 9.5857 (6) \text{\AA}$ $c = 10.5127 (8) \text{\AA}$ $\alpha = 90$ $\beta = 105.512 (8)$

		gamma = 90	
	Volume	662.00 (9) Å ³	
	Z	2	
	Density (calculated)	4.0211 g/cm ³	
μ coefficient	15.413		15.0
	Nref	1353	
	Tmin, Tmax	0.557, 0.780	
	F(000)	732.0	
	Crystal size	0.12 × 0.09 × 0.07 mm ³	
	Theat (max)	26.372	
		-9 ≤ h ≤ 9	
	Index ranges	-12 ≤ k ≤ 13	
		-13 ≤ l ≤ 14	
	R (reflections)	0.0498 (1210)	
	wR2 (reflections)	0.1217 (1349)	
	Data completeness	0.997	
	Largest diff. peak and hole	1.90 and -2.16 e Å ⁻³	

Table S6. Selected bond angles (deg.) in Y₂Mo₄O₁₅ (323K)

Atom1	Atom2	Atom3	Angle 2, 1, 3
Mo1	O7	O6	109.846(303)
Mo1	O7	O4	109.095(294)
Mo1	O7	O2	110.783(285)
Mo1	O6	O4	107.409(308)
Mo1	O6	O2	109.966(281)
Mo1	O4	O2	109.673(298)
Mo2	O3	O1	104.254(298)
Mo2	O3	O5	105.301(330)
Mo2	O3	O8	103.203(229)
Mo2	O1	O5	113.757(292)
Mo2	O1	O8	115.541(213)
Mo2	O5	O8	113.150(235)
Y1	O6	O7	82.239(226)
Y1	O6	O4	162.637(226)
Y1	O6	O1	118.376(216)
Y1	O6	O2	90.418(215)

Y1	O6	O5	87.286(235)
Y1	O6	O3	83.173(229)
Y1	O7	O4	96.066(227)
Y1	O7	O1	76.130(221)
Y1	O7	O2	150.447(223)
Y1	O7	O5	139.210(243)
Y1	O7	O3	74.937(244)
Y1	O4	O1	77.559(232)
Y1	O4	O2	82.566(220)
Y1	O4	O5	104.617(229)
Y1	O4	O3	79.718(235)
Y1	O1	O2	131.435(216)
Y1	O1	O5	74.614(236)
Y1	O1	O3	140.741(229)
Y1	O2	O5	68.286(232)
Y1	O2	O3	75.784(224)
Y1	O5	O3	142.693(247)
O1	Mo2	Y1	143.527(323)
O2	Mo1	Y1	136.206(315)
O3	Mo2	Y1	163.454(397)
O4	Mo1	Y1	147.870(357)
O5	Mo2	Y1	119.719(345)
O6	Mo1	Y1	145.634(341)
O7	Mo1	Y1	164.695(365)
O8	Mo2	Mo2	180.000

Table S7. Selected bond lengths (Å) in LiY(MoO₄)₂ (323K)

Atom 1	Atom 1	d 1,2 (Å)
Mo1	O7	1.7441(68)
Mo1	O6	1.7482(71)
Mo1	O4	1.7518(60)
Mo1	O2	1.7865(57)
Mo2	O3	1.7315(68)
Mo2	O1	1.7387(58)
Mo2	O5	1.7406(77)
Mo2	O8	1.8667(9)

Y1	O6	2.2423(62)
Y1	O7	2.2694(72)
Y1	O4	2.2694(63)
Y1	O1	2.3022(59)
Y1	O2	2.3047(64)
Y1	O5	2.3411(69)
Y1	O3	2.3586(63)
O1	Mo2	1.7387(58)
O1	Y1	2.3022(59)
O2	Mo1	1.7865(57)
O2	Y1	2.3047(64)
O3	Mo2	1.7375(68)
O3	Y1	2.3586(63)
O4	Mo1	1.7518(60)
O4	Y1	2.2694(63)
O5	Mo2	1.7406(77)
O5	Y1	2.3411(69)
O6	Mo1	1.7482(71)
O6	Y1	2.2423(62)
O7	Mo1	1.7441(68)
O7	Y1	2.2694(72)
O8	Mo2	1.8667(9)
O8	Mo2	1.8667(9)

Table S8. Atomic displacement parameters (\AA^2) for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (323K)

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Mo1	0.0105(5)	0.0133(5)	0.0096(5)	-0.0015(2)	0.0021(4)	-0.0003(2)
Mo2	0.0079(5)	0.0134(5)	0.0126(5)	0.0005(2)	0.0005(3)	0.0002(2)
Y1	0.0087(5)	0.0126(5)	0.0110(5)	-0.0003(3)	0.0021(4)	-0.0004(3)
O1	0.010(3)	0.015(3)	0.023(3)	0.005(2)	-0.003(3)	0.000(2)
O2	0.017(3)	0.023(3)	0.019(3)	0.001(3)	0.006(3)	-0.006(2)
O3	0.009(3)	0.027(2)	0.023(3)	-0.001(2)	0.007(2)	-0.002(2)
O4	0.016(4)	0.028(3)	0.017(3)	0.001(3)	-0.001(3)	0.006(3)
O5	0.005(3)	0.031(3)	0.021(4)	-0.001(2)	0.001(3)	-0.010(3)

O6	0.021(4)	0.023(3)	0.019(3)	-0.002(3)	0.009(3)	-0.011(3)
O7	0.021(4)	0.021(3)	0.021(4)	0.000(2)	0.010(3)	0.005(2)
O8	0.020(6)	0.027(5)	0.029(6)	-0.002(4)	0.004(5)	0.012(4)

Table S9. Crystal Data and Structure Refinement for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (348K)

Empirical formula	$\text{LiY}(\text{MoO}_4)_2$	
Formula weight	801.58 g/mol	
Temperature	348.00 (1) K	
Wavelength	0.71073	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	$P2_1/c$	
Sum formula	$\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$	
Cell	$a = 6.8195$ (5) Å	
	$b = 9.5837$ (6) Å	
	$c = 10.5199$ (8) Å	
	alpha = 90	
	beta = 105.504 (8)	
Volume	gamma = 90	
	662.52 (9) Å ³	
Z	2	
Density (calculated)	4.01791 g/cm ³	
μ coefficient	15.403	15.0
Nref	1353	
Tmin, Tmax	0.557, 0.780	
F(000)	732.0	
Crystal size	0.12 × 0.09 × 0.07 mm ³	
Theat (max)	26.372	
Index ranges	-8 ≤ h ≤ 8	
	-11 ≤ k ≤ 11	
	-13 ≤ l ≤ 13	
R (reflections)	0.0497 (1217)	
wR2 (reflections)	0.1152 (1343)	
Data completeness	0.991	
Largest diff. peak and hole	1.67 and -1.81 e Å ⁻³	

Table S10. Selected bond angles (deg.) in Y₂Mo₄O₁₅ (348K)

Atom1	Atom2	Atom3	Angle 2, 1, 3
Mo1	O6	O5	113.596(279)
Mo1	O6	O1	113.459(202)
Mo1	O6	O7	104.389(314)
Mo1	O5	O1	103.357(208)
Mo1	O5	O7	115.530(198)
Mo1	O1	O7	109.976(305)
Mo2	O2	O4	108.663(290)
Mo2	O2	O8	110.463(295)
Mo2	O2	O3	108.663(290)
Mo2	O4	O8	110.463 (295)
Mo2	O4	O3	108.108(299)
Mo2	O8	O3	109.378(276)
Y1	O4	O8	163.098(215).
Y1	O4	O2	82.193(231)
Y1	O4	O31	118.133(211)
Y1	O4	O3	90.145(213)
Y1	O4	O6	87.079(228)
Y1	O4	O5	83.532(232)
Y1	O8	O2	96.365(228)
Y1	O8	O1	77.47(221)
Y1	O8	O3	82.799(214)
Y1	O8	O6	104.354(227)
Y1	O8	O5	79.835(228)
Y1	O2	O1	76.146(228)
Y1	O2	O3	150.375(225)
Y1	O2	O6	139.061(242)
Y1	O2	O15	75.026(234)
Y1	O1	O3	131.660(208)
Y1	O1	O6	74.530(232)
Y1	O1	O5	140.733(226)
Y1	O3	O6	68.351(217)
Y1	O3	O5	75.697(219)
Y1	O6	O5	143.755(232)

O1	Mo1	Y1	143.474(320)
O2	Mo2	Y1	164.753(383)
O3	Mo2	Y1	136.372(314)
O4	Mo2	Y1	144.852(339)
O5	Mo1	Y1	163.566(362)
O6	Mo1	Y1	119.307(333)
O7	Mo1	Mo1	180.000(27)
O8	Mo2	Y1	147.326(337)

Table S11. Selected bond lengths (Å) in LiY(MoO₄)₂ (348K)

Atom 1	Atom 1	d 1,2 (Å)
Mo1	O6	1.7380(69)
Mo1	O5	1.7385(62)
Mo1	O1	1.7393(58)
Mo1	O7	1.8655(6)
Mo2	O2	1.7384(71)
Mo2	O4	1.7448(71)
Mo2	O8	1.7560(57)
Mo2	O3	1.7837(56)
Y1	O4	2.2540(61)
Y1	O8	2.2729(59)
Y1	O2	2.3753(73)
Y1	O1	2.3023(58)
Y1	O3	2.3047(63)
Y1	O6	2.3525(69)
Y1	O5	2.3532(58)
O1	Mo1	1.7393(58)
O1	Y1	2.3023(58)
O2	Mo2	1.7384(71)
O2	Y1	2.2753(73)
O3	Mo2	1.7837(56)
O3	Y1	2.3094(63)
O4	Mo2	1.7448(71)
O4	Y1	2.2540(61)
O5	Mo1	1.7358(62)
O5	Y1	2.3532(58)

O6	Mo1	1.7380(69)
O6	Y1	2.3525(69)
O7	Mo1	1.8655(6)
O7	Mo1	1.8655(6)
O8	Mo2	1.7560(57)
O8	Y1	2.2729(59)

Table S12. Atomic displacement parameters (\AA^2) for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (348K)

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Mo1	0.0105(5)	0.0149(5)	0.0150(5)	-0.0007(2)	0.0007(3)	-0.0004(2)
Mo2	0.0137(5)	0.0140(5)	0.0122(5)	0.0017(2)	0.0032(3)	0.0004(2)
Y1	0.0116(5)	0.0134(5)	0.0130(5)	-0.0002(3)	0.0028(3)	-0.0003(3)
O1	0.015(3)	0.017(3)	0.029(3)	-0.004(2)	-0.003(3)	-0.001(2)
O2	0.019(3)	0.024(3)	0.031(3)	0.000(3)	0.010(3)	-0.007(2)
O3	0.015(3)	0.022(3)	0.019(3)	-0.003(2)	0.004(2)	0.008(2)
O4	0.018(3)	0.024(3)	0.026(3)	0.005(2)	0.010(3)	0.011(2)
O5	0.005(3)	0.035(3)	0.029(3)	0.003(3)	0.006(3)	0.005(3)
O6	0.017(4)	0.028(3)	0.024(3)	0.004(3)	0.002(3)	0.008(3)
O7	0.029(6)	0.035(5)	0.029(5)	-0.007(4)	0.002(5)	-0.024(4)
O8	0.020(3)	0.030(3)	0.023(3)	0.003(3)	0.000(3)	-0.004(3)

Table S13. Crystal Data and Structure Refinement for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (373K)

Empirical formula	$\text{LiY}(\text{MoO}_4)_2$
Formula weight	801.58 g/mol
Temperature	373.00 (1) K
Wavelength	0.71073
Crystal system	Monoclinic
Space group	$P2_1/C$
Sum formula	$\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$
	a = 6.8217 (5) \AA
	b = 9.5822 (6) \AA
	c = 10.5206 (8) \AA
Cell	alpha = 90
	beta = 105.445 (8)
	gamma = 90
Volume	663.28 (8) \AA^3

Z	2
Density (calculated)	4.01332 g/cm ³
extinction coefficient	15.889
Nref	1355
Tmin, Tmax	0.557, 0.781
F(000)	732.0
Crystal size	0.12 × 0.09 × 0.07 mm ³
Theat (max)	26.367
	-8 ≤ h ≤ 8
Index ranges	-12 ≤ k ≤ 10
	-13 ≤ l ≤ 14
R (reflections)	0.0431 (1207)
wR2 (reflections)	0.1066 (1349)
Data completeness	0.996
Largest diff. peak and hole	1.20 and -2.40 e Å ⁻³

Table S14. Selected bond angles (deg.) in Y₂Mo₄O₁₅ (373K)

Atom1	Atom2	Atom3	Angle 2, 1, 3
Mo1	O5	O3	104.175(282)
Mo1	O5	O8	104.885(294)
Mo1	O5	O6	103.696(203)
Mo1	O3	O8	113.463(276)
Mo1	O3	O6	115.646(197)
Mo1	O8	O6	113.340(202)
Mo2	O4	O7	109.822(297)
Mo2	O4	O2	109.488(281)
Mo2	O4	O1	110.246(280)
Mo2	O7	O2	107.927(292)
Mo2	O7	O1	109.070(275)
Mo2	O2	O1	110.251(287)
Y1	O7	O2	163.344(215)
Y1	O7	O4	82.476(219)
Y1	O7	O13	117.89(216)
Y1	O7	O1	90.363(212)
Y1	O7	O8	86.700(217)
Y1	O7	O5	83.706(215)

Y1	O2	O4	95.771(223)
Y1	O2	O3	77.389(211)
Y1	O2	O1	82.977(214)
Y1	O2	O8	104.789(227)
Y1	O2	O5	79.871(224)
Y1	O4	O3	76.330(213)
Y1	O4	O1	150.272(219)
Y1	O4	O8	139.276(232)
Y1	O4	O5	74.722(232)
Y1	O3	O1	131.452(208)
Y1	O3	O8	74.483(217)
Y1	O3	O5	140.832(214)
Y1	O1	O8	68.349(215)
Y1	O1	O5	75.833(221)
Y1	O8	O5	142.789(221)
O1	Mo2	Y1	136.171(313)
O2	Mo2	Y1	148.111(339)
O3	Mo1	Y1	143.619(319)
O4	Mo2	Y1	164.521(364)
O5	Mo1	Y1	163.830(358)
O6	Mo1	Mo1	180.000
O7	Mo2	Y1	144.366(332)
O8	Mo1	Y1	119.425(311)

Table S15. Selected bond lengths (Å) in LiY(MoO₄)₂ (373K)

Atom 1	Atom 1	d 1,2 (Å)
Mo1	O5	1.7334(61)
Mo1	O3	1.7433(58)
Mo1	O8	1.7437(68)
Mo1	O6	1.8668(8)
Mo2	O4	1.7437(68)
Mo2	O7	1.7421(68)
Mo2	O2	1.7531(57)
Mo2	O1	1.7877(55)
Y1	O7	2.2531(62)
Y1	O2	2.2680(59)

Y1	O4	2.2697(72)
Y1	O3	2.2993(57)
Y1	O1	2.3095(63)
Y1	O8	2.3479(69)
Y1	O5	2.3564(57)
O1	Mo2	1.7877(55)
O1	Y1	2.3095(63)
O2	Mo2	1.7531(57)
O2	Y1	2.2680(59)
O3	Mo1	1.7433(58)
O3	Y1	2.2993(57)
O4	Mo2	1.7437(68)
O4	Y1	2.2697(72)
O5	Mo1	1.7334(61)
O5	Y1	2.3564(57)
O6	Mo1	1.8668(8)
O6	Mo1	1.8668(8)
O7	Mo2	1.7421(68)
O7	Y1	2.2531(61)
O8	Mo1	1.7437(68)
O8	Y1	2.3479(63)

Table S16. Atomic displacement parameters (\AA^2) for $\text{Y}_2\text{Mo}_4\text{O}_{15}$ (373K)

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Mo1	0.0105(4)	0.0142(4)	0.0146(4)	0.0008(2)	0.0003(3)	0.0003(2)
Mo2	0.0133(5)	0.0137(4)	0.0114(4)	0.0015(2)	0.0022(3)	0.0002(2)
Y1	0.0106(5)	0.0127(4)	0.0130(5)	0.0005(2)	0.0021(3)	0.0007(2)
O1	0.014(3)	0.023(3)	0.021(3)	-0.001(2)	0.005(2)	0.007(2)
O2	0.030(4)	0.027(3)	0.021(3)	0.000(3)	0.003(3)	-0.003(2)
O3	0.018(3)	0.015(3)	0.032(3)	0.002(2)	-0.002(3)	-0.001(2)
O4	0.029(3)	0.021(3)	0.032(4)	0.000(2)	0.019(3)	0.007(2)
O5	0.016(3)	0.030(3)	0.028(3)	-0.002(2)	0.008(3)	-0.007(2)
O6	0.017(5)	0.034(5)	0.029(5)	0.009(4)	0.004(4)	0.019(4)
O7	0.024(3)	0.025(3)	0.027(3)	0.001(2)	0.010(3)	0.012(2)
O8	0.015(3)	0.033(3)	0.022(3)	0.001(2)	0.002(3)	0.009(3)