

Electronic Supplementary Information

Reactions of metal iodides as a simple route to heterometallics: Synthesis, structural transformations, thermal and luminescent properties of novel hybrid iodoargentate derivatives templated by $[\text{YL}_8]^{3+}$ or $[\text{YL}_7]^{3+}$ cations (L = DMF or DMSO)

Shashank Mishra,^{*a} Erwann Jeanneau,^b Stéphane Daniele^a and Gilles Ledoux^c

^a Université Lyon 1, IRCELYON, 2 Avenue A. Einstein, 69626 Villeurbanne, France

E-mail: mishrashashank74@rediffmail.com; Fax : +33 472445399; Tel: +33 472445329

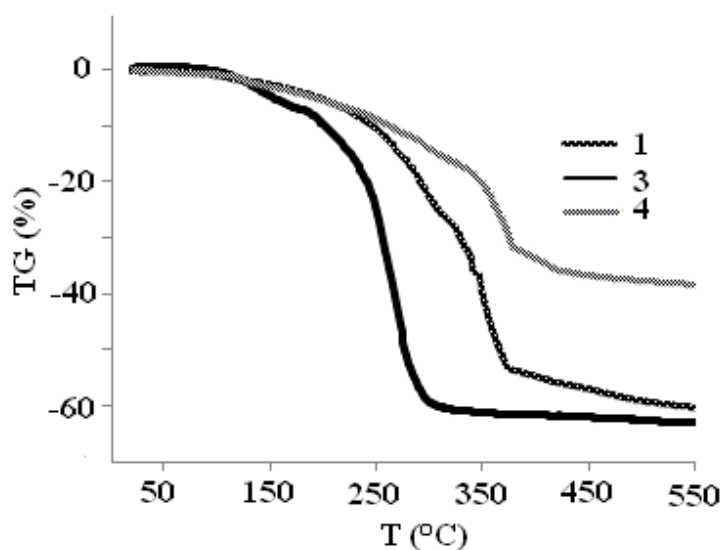
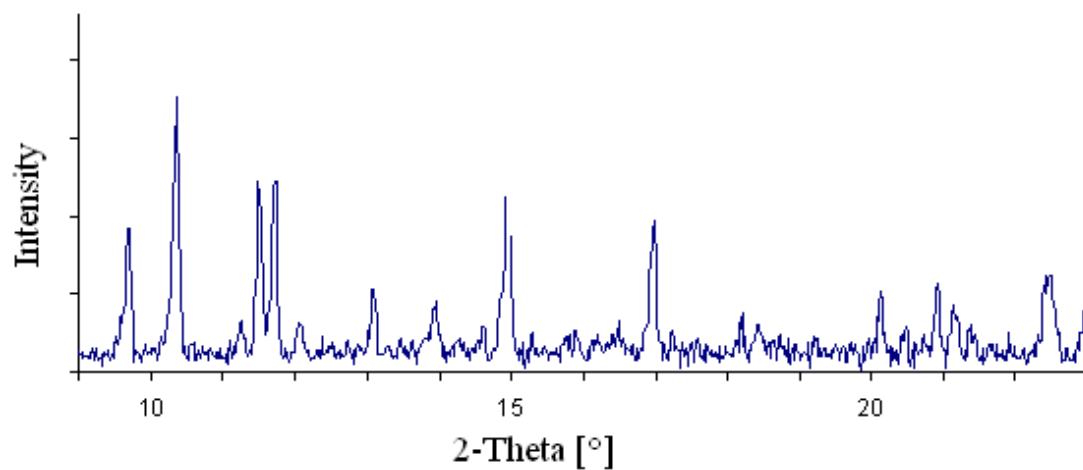


Fig. S1 Thermo-gravimetric curves for **1**, **3** and **4**.

(a)



(b)

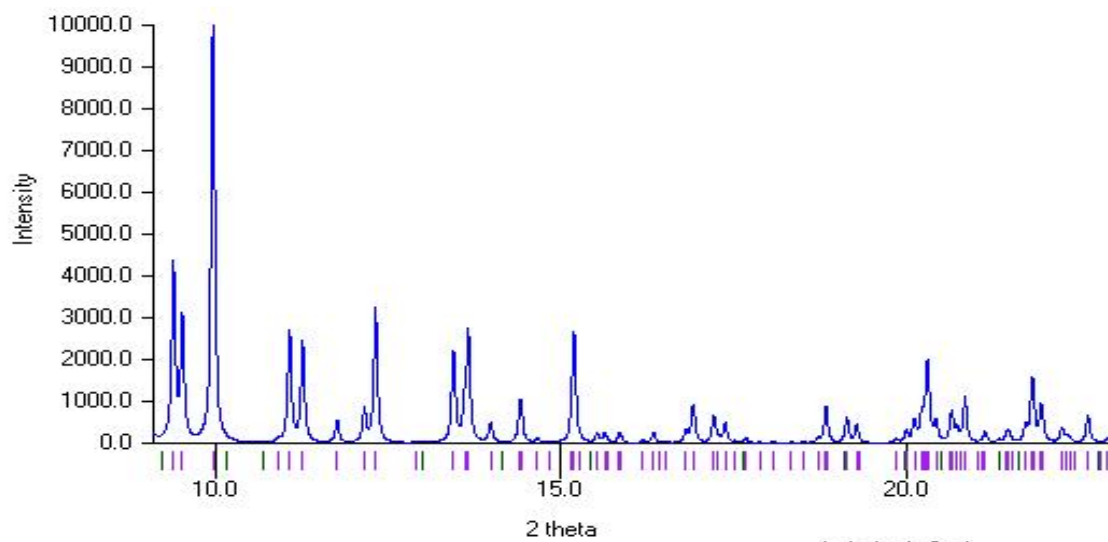
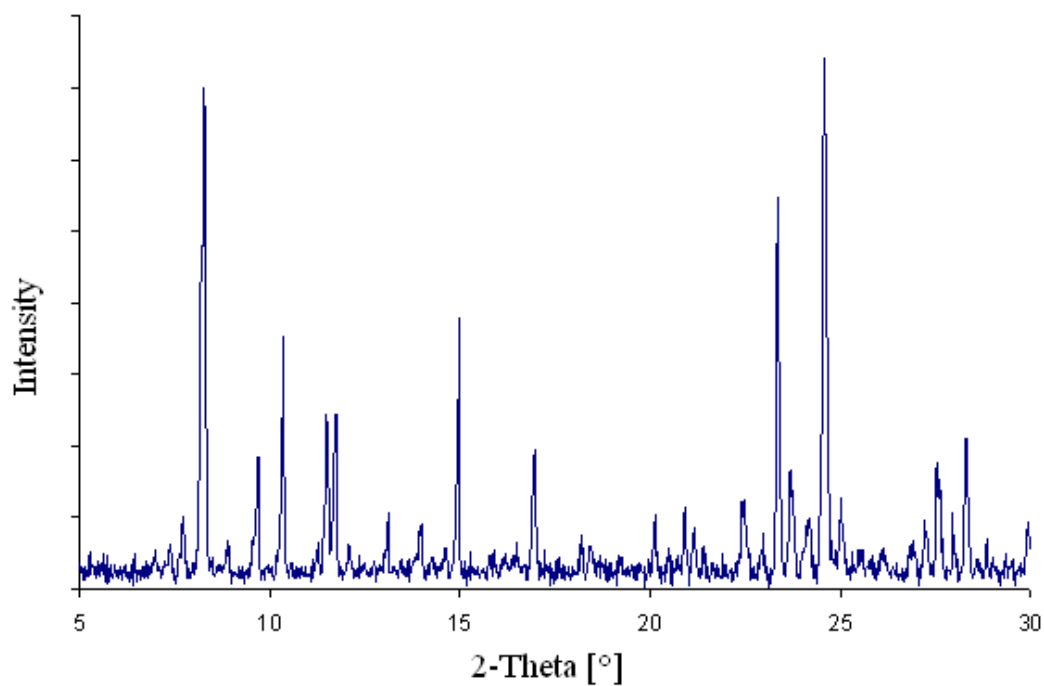


Fig. S2 Powder X-Ray diffraction of **1**: experimental pattern (a) and pattern obtained from the single crystal X-ray diffraction data (b).

(a)



(b)

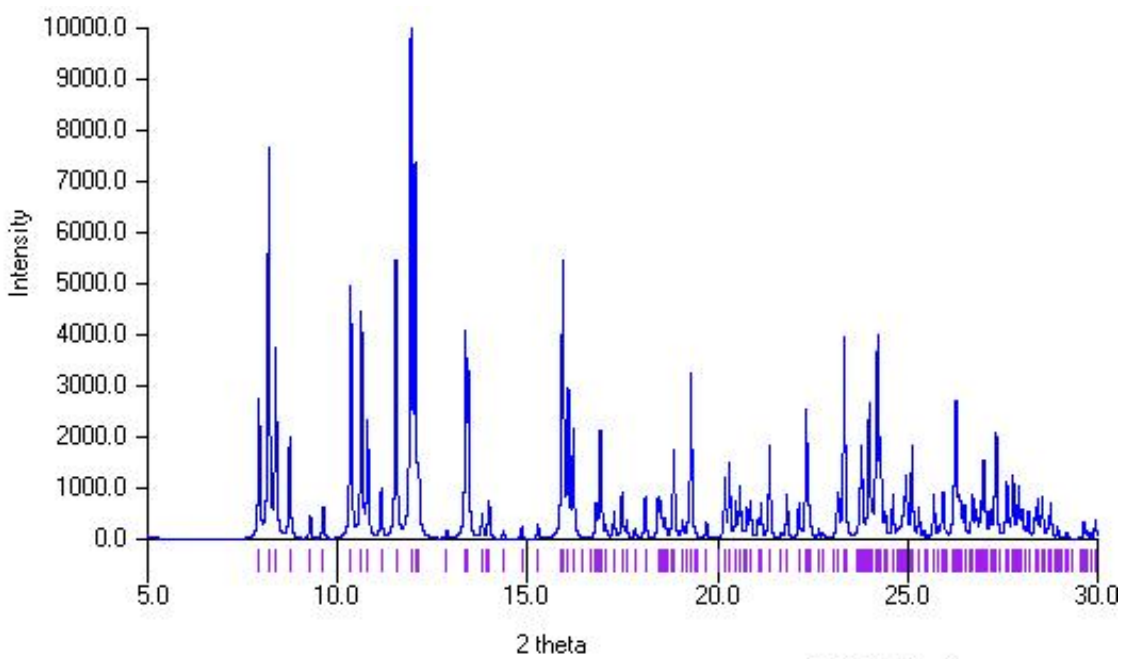
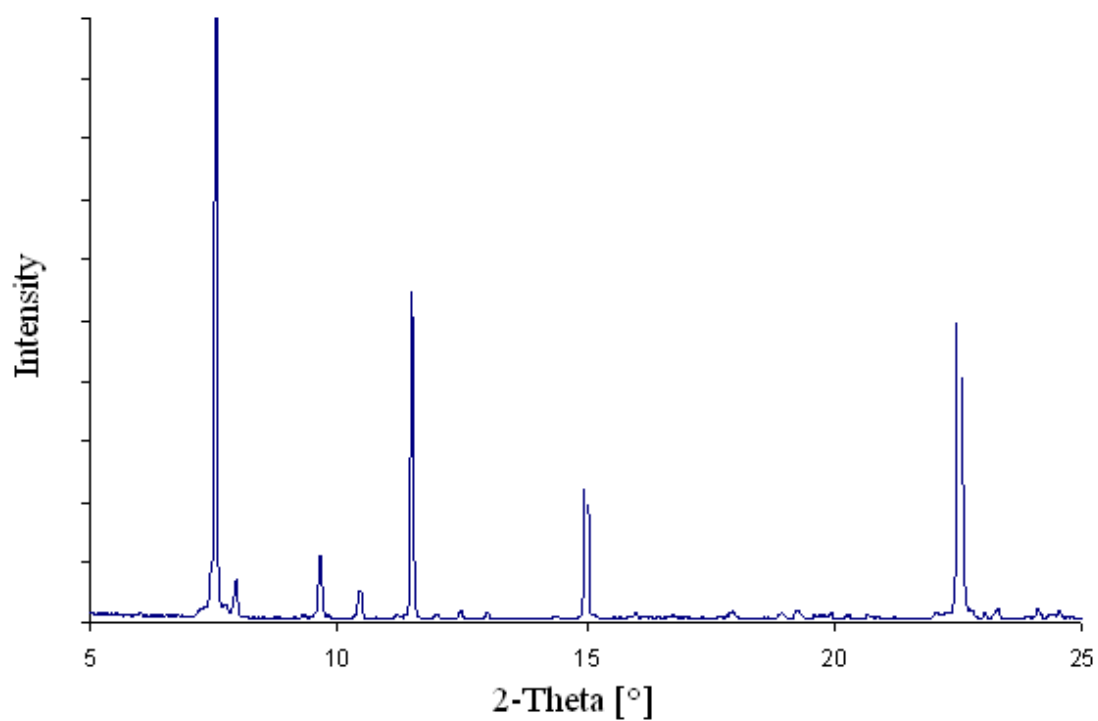


Fig. S3 Powder X-Ray diffraction of **3**: experimental pattern (a) and pattern obtained from the single crystal X-ray diffraction data (b).

(a)



(b)

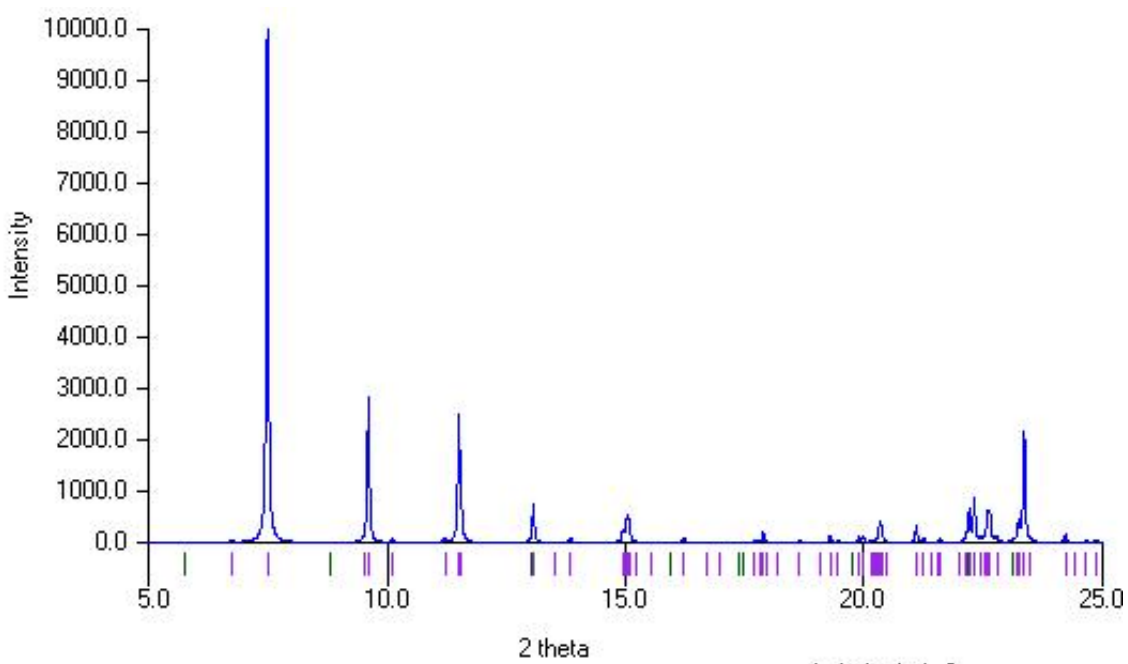


Fig. S4 Powder X-Ray diffraction of **4**: experimental pattern (a) and pattern obtained from the single crystal X-ray diffraction data (b).

Table S1. Selected bond lengths and angles for **1**

Bond length (Å)			
O1—Y1	2.317(5)	Ag1—I6	2.8628(9)
O2—Y1	2.366(5)	Ag2—I2	2.7202(10)
O3—Y1	2.347(5)	Ag2—I3	2.7229(9)
O4—Y1	2.362(5)	Ag2—I5	2.9048(12)
O5—Y1	2.358(5)	Ag3—I3	2.9234(10)
O6—Y1	2.333(5)	Ag3—I4	2.7144(10)
O7—Y1	2.372(5)	Ag3—I5	3.3166(13)
O8—Y1	2.328(5)	Ag3—I6	2.8003(10)
Ag1—I1	2.7320(8)	Ag1...Ag2	2.8671(10)
Ag1—I2	3.1065(9)	Ag2...Ag3	2.8513(12)
Ag1—I5	2.9690(9)		
Bond angle (°)			
O7—Y1—O2	139.22(17)	Ag2—Ag1—I2	54.00(2)
O7—Y1—O4	73.31(18)	I1—Ag1—I2	120.62(3)
O2—Y1—O4	121.51(19)	Ag2—Ag1—I5	59.67(3)
O7—Y1—O5	120.0(2)	I1—Ag1—I5	117.08(3)
O2—Y1—O5	75.63(19)	I2—Ag1—I5	97.30(2)
O4—Y1—O5	139.1(2)	Ag2—Ag1—I6	75.45(3)
O7—Y1—O3	76.75(19)	I1—Ag1—I6	113.53(3)
O2—Y1—O3	71.21(19)	I2—Ag1—I6	101.92(3)
O4—Y1—O3	77.23(19)	I5—Ag1—I6	103.64(3)
O5—Y1—O3	141.23(19)	Ag1—Ag2—Ag3	83.48(3)
O7—Y1—O6	72.71(18)	Ag1—Ag2—I2	67.50(3)
O2—Y1—O6	76.43(18)	Ag3—Ag2—I2	145.76(4)
O4—Y1—O6	141.5(2)	Ag1—Ag2—I3	145.62(4)
O5—Y1—O6	75.2(2)	Ag3—Ag2—I3	63.21(3)
O3—Y1—O6	77.9(2)	I2—Ag2—I3	139.07(4)
O7—Y1—O8	76.81(17)	Ag1—Ag2—I5	61.91(2)
O2—Y1—O8	140.96(18)	Ag3—Ag2—I5	70.36(3)
O4—Y1—O8	75.96(18)	I2—Ag2—I5	108.34(3)
O5—Y1—O8	70.90(18)	I3—Ag2—I5	110.30(4)
O3—Y1—O8	146.64(19)	Ag2—Ag3—I3	56.25(2)
O7—Y1—O1	143.25(18)	Ag2—Ag3—I4	167.57(4)
O2—Y1—O1	71.68(18)	I3—Ag3—I4	117.63(4)
O4—Y1—O1	71.9(2)	Ag2—Ag3—I5	55.57(3)
O5—Y1—O1	81.1(2)	I3—Ag3—I5	95.30(3)
O3—Y1—O1	106.3(2)	I4—Ag3—I5	118.03(4)
O6—Y1—O8	112.74(19)	Ag2—Ag3—I6	76.68(3)
O6—Y1—O1	144.0(2)	I3—Ag3—I6	110.12(3)
O8—Y1—O1	83.67(18)	I4—Ag3—I6	115.57(3)
Ag2—Ag1—I1	170.94(4)	I5—Ag3—I6	96.73(3)

Table S2. Selected bond lengths and angles for **2**

Bond length (Å)			
O1—Y1	2.380(1)	Ag1—I2 ⁱ	2.948(2)
O2—Y1	2.308(1)	Ag1—I3	2.922(2)
O3—Y1	2.379(1)	Ag1—I1	2.755(2)
O4—Y1	2.304(1)	Ag1—I2	2.969(2)
		Ag1...Ag1 ⁱ	2.835(3)
Bond angle (°)			
O1 ⁱⁱ —Y1—O1	134.6(6)	O2—Y1—O4	144.2(4)
O1 ⁱⁱ —Y1—O3	71.9(4)	O1 ⁱⁱ —Y1—O4 ⁱⁱ	141.9(4)
O1—Y1—O3	130.4(4)	O1—Y1—O4 ⁱⁱ	74.3(4)
O1 ⁱⁱ —Y1—O3 ⁱⁱ	130.4(4)	O3—Y1—O4 ⁱⁱ	70.0(4)
O1—Y1—O3 ⁱⁱ	71.9(4)	O3 ⁱⁱ —Y1—O4 ⁱⁱ	75.9(5)
O3—Y1—O3 ⁱⁱ	128.2(7)	O2—Y1—O4 ⁱⁱ	95.9(5)
O1 ⁱⁱ —Y1—O2	75.6(4)	O2 ⁱⁱ —Y1—O4	95.9(5)
O1—Y1—O2	74.0(4)	O2 ⁱⁱ —Y1—O4 ⁱⁱ	144.2(4)
O3—Y1—O2	76.6(5)	O4—Y1—O4 ⁱⁱ	95.9(7)
O3 ⁱⁱ —Y1—O2	145.8(4)	I2 ⁱ —Ag1—Ag1 ⁱ	61.74(5)
O1 ⁱⁱ —Y1—O2 ⁱⁱ	74.0(4)	I2 ⁱ —Ag1—I3	99.36(5)
O1—Y1—O2 ⁱⁱ	75.6(4)	Ag1 ⁱ —Ag1—I3	60.97(3)
O3—Y1—O2 ⁱⁱ	145.8(4)	I2 ⁱ —Ag1—I1	115.71(6)
O3 ⁱⁱ —Y1—O2 ⁱⁱ	76.6(5)	Ag1 ⁱ —Ag1—I1	172.55(5)
O2—Y1—O2 ⁱⁱ	94.1(7)	I3—Ag1—I1	126.29(7)
O1 ⁱⁱ —Y1—O4	74.3(4)	I2 ⁱ —Ag1—I2	98.10(8)
O1—Y1—O4	141.9(4)	Ag1 ⁱ —Ag1—I2	61.00(5)
O3—Y1—O4	75.9(5)	I3—Ag1—I2	98.88(6)
O3 ⁱⁱ —Y1—O4	70.0(4)	I1—Ag1—I2	113.78(7)

Symmetry codes: (i) x, 1-y, -z; (ii) -x, y, 1/2-z.

Table S3. Selected bond lengths and angles for **3**

Bond length (Å)			
Y1—O8	2.344(6)	I4—Ag2	2.717(1)
Y1—O7	2.369(6)	I3—Ag1	2.921(1)
Y1—O3	2.368(6)	I3—Ag2	2.875(1)
Y1—O2	2.348(6)	I1—Ag1 ⁱ	2.783(1)
Y1—O1	2.370(6)	I1—Ag2	3.164(1)
Y1—O5	2.356(6)	I2—Ag1	2.932(1)
Y1—O6	2.345(6)	I2—Ag2	2.887(1)
Y1—O4	2.375(6)	Ag1...Ag1 ⁱ	3.004(1)
I1—Ag1	3.037(1)	Ag1...Ag2	2.864(1)
Bond angle (°)			
O8—Y1—O7	74.2(2)	O7—Y1—O4	144.8(2)
O8—Y1—O3	76.0(2)	O3—Y1—O4	75.5(2)
O7—Y1—O3	76.8(2)	O2—Y1—O4	114.5(2)
O8—Y1—O2	141.2(2)	O1—Y1—O4	72.3(2)
O7—Y1—O2	76.8(2)	O5—Y1—O6	72.0(2)
O3—Y1—O2	72.7(2)	O5—Y1—O4	78.5(2)
O8—Y1—O1	143.4(2)	O6—Y1—O4	140.6(2)
O7—Y1—O1	140.6(2)	I1—Ag1—I2	98.06(3)

O3—Y1—O1	115.7(2)	I1—Ag1—I3	100.68(3)
O2—Y1—O1	72.6(2)	I2—Ag1—I3	98.05(3)
O8—Y1—O5	74.4(2)	I1—Ag1—I1 ⁱ	118.04(3)
O7—Y1—O5	113.9(2)	I2—Ag1—I1 ⁱ	117.57(3)
O3—Y1—O5	143.8(2)	I3—Ag1—I1 ⁱ	120.25(3)
O2—Y1—O5	142.2(2)	I1—Ag2—I2	96.20(3)
O1—Y1—O5	78.9(2)	I1—Ag2—I3	98.75(3)
O8—Y1—O6	116.8(2)	I2—Ag2—I3	100.15(3)
O7—Y1—O6	72.9(2)	I1—Ag2—I4	106.94(4)
O3—Y1—O6	141.5(2)	I2—Ag2—I4	122.81(4)
O2—Y1—O6	77.6(2)	I3—Ag2—I4	125.71(4)
O1—Y1—O6	76.8(2)	Ag1 ⁱ —Ag1—Ag2	119.60(4)
O8—Y1—O4	78.2(2)		

Symmetry codes: (i) -x, -y, -z.

Table S4. Selected bond lengths and angles for **4**

Bond length (Å)			
O1—Y8	2.344(4)	I3—Ag2	2.9407(7)
O2—Y8	2.305(5)	I3—Ag3	2.9340(8)
O3—Y8	2.418(5)	I4—Ag1 ⁱⁱ	2.8993(7)
O4—Y8	2.292(5)	I4—Ag2 ⁱⁱ	2.8836(7)
I1—Ag3 ⁱ	2.8136(8)	I4—Ag2	2.8664(7)
I1—Ag1	2.8487(7)	I5—Ag2	2.7924(7)
I2—Ag1 ⁱⁱ	2.8093(7)	I5—Ag3	2.8157(9)
I2—Ag1	2.8093(7)	Ag1...Ag3 ⁱ	3.3371(9)
I3—Ag3 ⁱ	2.9007(8)	Ag1...Ag2	3.0277(8)
I3—Ag1	2.9911(7)	Ag2...Ag3	3.3515(9)
Bond angle (°)			
O3—Y8—O3 ⁱⁱⁱ	126.1(3)	O2 ⁱⁱⁱ —Y8—O4	143.21(19)
O3—Y8—O1 ⁱⁱⁱ	74.08(17)	O2 ⁱⁱⁱ —Y8—O4 ⁱⁱⁱ	88.6(2)
O3 ⁱⁱⁱ —Y8—O1 ⁱⁱⁱ	134.43(17)	O4—Y8—O4 ⁱⁱⁱ	99.6(3)
O3—Y8—O1	134.43(17)	I3—Ag1—I4 ⁱⁱ	116.52(2)
O3 ⁱⁱⁱ —Y8—O1	74.08(17)	I3—Ag1—I1	107.24(2)
O1 ⁱⁱⁱ —Y8—O1	123.9(3)	I4 ⁱⁱ —Ag1—I1	98.61(2)
O3—Y8—O2	74.4(2)	I3—Ag1—I2	96.09(2)
O3 ⁱⁱⁱ —Y8—O2	144.42(18)	I4 ⁱⁱ —Ag1—I2	114.57(2)
O1 ⁱⁱⁱ —Y8—O2	75.32(18)	I1—Ag1—I2	124.81(2)
O1—Y8—O2	71.86(18)	I3—Ag2—I4 ⁱⁱ	118.66(2)
O3—Y8—O2 ⁱⁱⁱ	144.42(18)	I3—Ag2—I4	98.52(2)
O3 ⁱⁱⁱ —Y8—O2 ⁱⁱⁱ	74.4(2)	I4 ⁱⁱ —Ag2—I4	95.29(2)
O1 ⁱⁱⁱ —Y8—O2 ⁱⁱⁱ	71.86(18)	I3—Ag2—I5	108.29(2)
O1—Y8—O2 ⁱⁱⁱ	75.32(18)	I4 ⁱⁱ —Ag2—I5	114.80(2)
O2—Y8—O2 ⁱⁱⁱ	106.1(3)	I4—Ag2—I5	120.35(2)
O3—Y8—O4	71.59(18)	I3—Ag3—I3 ⁱ	99.30(2)
O3 ⁱⁱⁱ —Y8—O4	74.4(2)	I3—Ag3—I5	107.84(3)
O1 ⁱⁱⁱ —Y8—O4	144.90(18)	I3 ⁱ —Ag3—I5	111.39(3)
O1—Y8—O4	77.80(18)	I3—Ag3—I1 ⁱ	105.17(3)
O2—Y8—O4	88.6(2)	I3 ⁱ —Ag3—I1 ⁱ	110.74(3)
O3—Y8—O4 ⁱⁱⁱ	74.4(2)	I5—Ag3—I1 ⁱ	120.05(3)

O3 ⁱⁱⁱ —Y8—O4 ⁱⁱⁱ	71.59(18)	Ag3 ⁱ —Ag1—Ag2	92.59(2)
O1 ⁱⁱⁱ —Y8—O4 ⁱⁱⁱ	77.80(18)	Ag1—Ag2—Ag3	100.10(2)
O1—Y8—O4 ⁱⁱⁱ	144.90(18)	Ag2—Ag3—Ag1 ⁱ	166.37(3)
O2—Y8—O4 ⁱⁱⁱ	143.21(19)		

Symmetry codes: (i) 3/2-x, 3/2-y, 1-z; (ii) 1-x, y, 1/2-z; (iii) 1-x, y, 3/2-z.

Table S5. Selected bond lengths and angles for **5**.

Bond length (Å)			
O1—Y1	2.30(2)	I14—Ag6	2.905(4)
O2—Y1	2.34(3)	I14—Ag7	2.909(5)
O3—Y1	2.46(3)	I15—Ag8	2.903(4)
O4—Y1	2.27(2)	I15—Ag5	2.919(4)
O5—Y1	2.51(3)	I15—Ag6	2.926(4)
O6—Y1	2.28(3)	I16—Ag8	2.906(4)
O7—Y1	2.24(2)	I16—Ag6	2.892(4)
I9—Ag5	2.763(4)	I16—Ag7	2.923(4)
I10—Ag6	2.757(5)	Ag8...Ag5	3.126(5)
I11—Ag7	2.782(4)	Ag8...Ag6	3.375(5)
I12—Ag8	2.759(4)	Ag5...Ag7	3.328(5)
I13—Ag8	2.906(4)	Ag1...Ag3	3.392(5)
I13—Ag5	2.913(4)	Ag2...Ag3	3.404(5)
I13—Ag7	2.900(4)	Ag2...Ag4	3.385(5)
I14—Ag5	2.940(4)	Ag6...Ag7	3.354(5)
Bond angle (°)			
O5—Y1—O2	153.8(8)	I15—Ag5—I9	107.90(13)
O5—Y1—O1	118.7(9)	I13—Ag5—I9	106.51(14)
O2—Y1—O1	75.9(9)	I15—Ag6—I14	106.76(13)
O5—Y1—O6	75.7(10)	I15—Ag6—I16	105.17(13)
O2—Y1—O6	88.1(10)	I14—Ag6—I16	108.41(13)
O1—Y1—O6	76.5(10)	I15—Ag6—I10	106.35(13)
O5—Y1—O4	74.0(9)	I14—Ag6—I10	111.50(15)
O2—Y1—O4	84.3(9)	I16—Ag6—I10	117.91(15)
O1—Y1—O4	153.0(9)	I16—Ag7—I14	107.46(13)
O6—Y1—O4	84.8(10)	I16—Ag7—I13	100.98(12)
O5—Y1—O7	76.8(9)	I14—Ag7—I13	107.51(14)
O2—Y1—O7	129.4(9)	I16—Ag7—I11	116.06(15)
O1—Y1—O7	73.2(9)	I14—Ag7—I11	110.23(14)
O6—Y1—O7	121.4(10)	I13—Ag7—I11	113.90(14)
O4—Y1—O7	133.7(10)	I16—Ag8—I13	101.23(11)
O5—Y1—O3	105.1(10)	I16—Ag8—I15	105.38(13)
O2—Y1—O3	82.1(10)	I13—Ag8—I15	113.76(13)
O1—Y1—O3	120.1(9)	I16—Ag8—I12	114.47(14)
O6—Y1—O3	157.4(8)	I13—Ag8—I12	109.52(14)
O4—Y1—O3	74.1(9)	I15—Ag8—I12	112.06(12)
O7—Y1—O3	80.0(9)	Ag8—Ag5—Ag7	65.72(10)
I14—Ag5—I13	106.32(12)	Ag8—Ag6—Ag7	62.80(10)
I14—Ag5—I15	106.00(13)	Ag6—Ag7—Ag5	59.14(10)
I15—Ag5—I13	113.05(13)	Ag5—Ag8—Ag6	60.81(10)