Design and Synthesis of Plasticizing Fillers Based on Zirconium Phosphonates for Glycerol-Free Composite Starch Films

Anna Donnadio, Monica Pica, Marco Taddei, and Riccardo Vivani

Electronic Supplementary Information

Table S1: Fractional atomic coordinates and isotropic atomic displacement parameters for ZC3.

Atom	x/*a*	y/*b*	z/*c*	*U*iso×100
Zr	0.0872(3)	0.7389(5)	0.4533(3)	1.51(7)
P1	0.8304(5)	0.9137(9)	0.9079(8)	1.51
P2	0.9114(7)	0.5030(8)	0.8078(8)	1.51
O1	0.744(1)	0.851(2)	0.996(2)	1.51
O2	0.856(1)	1.085(1)	0.915(1)	1.51
O3	0.9374(9)	0.846(2)	0.957(1)	1.51
O4	1.024(1)	0.609(2)	0.822(1)	1.51
O5	0.907(1)	0.420(2)	0.680(1)	1.51
O6	0.922(1)	0.380(2)	0.913(1)	1.51
F	0.2243(9)	0.824(2)	0.414(1)	1.51
C1	0.792(1)	0.858(2)	0.740(1)	1.51
C2	0.779 (1)	0.606(2)	0.832(2)	1.51
N	0.737(1)	0.705(2)	0.728(1)	1.51
C3	0.618(1)	0.725(3)	0.744(2)	1.51
C4	0.548(1)	0.805(2)	0.634(2)	1.51
C5	0.434(2)	0.730(3)	0.624(1)	1.51
O7	0.412(1)	0.706(2)	0.753(2)	1.51

Table S2: Bond lengths (Å) and angles (°) for ZC3.

Zr - O2	2.04(1)	P2 - O6	1.57(1)
Zr - O3	2.01(1)	P2 - C2	1.93(1)
Zr - O4	2.05(1)	N - C1	1.52(1)
Zr - O5	2.03(1)	N - C2	1.47(1)
Zr - O6	1.94(1)	N - C3	1.52(1)
Zr - F	1.96(1)	C3 - C4	1.56(3)
P1 - O1	1.63(1)	C4 - C5	1.56(3)
P1 - O2	1.56(1)	C5 - O7	1.48(1)
P1 - O3	1.49(1)		
P1 - C1	1.90(1)	O1····N	2.58(2)
P2 - O4	1.67(1)	O7····F	3.09(2)
P2 - O5	1.57(1)		
O2 - Zr - O3	88.2(5)	O2 - P1 - O3	102.6(7)
O2 - Zr - O4	177.7(7)	O2 - P1 - C1	109.3(7)
O2 - Zr - O5	89.4(6)	O3 - P1 - C1	109.9(7)
O2 - Zr - O6	87.7(6)	O4 - P2 - O5	106.4(7)
O2 - Zr - F	100.6(6)	O4 - P2 - O6	109.8(7)
O3 - Zr - O4	89.5(6)	O4 - P2 - C2	115.5(7)
O3 - Zr - O5	82.6(6)	O5 - P2 - O6	107.4(7)
O3 - Zr - O6	94.9(6)	O5 - P2 - C2	114.4(7)
O3 - Zr - F	168.5(7)	O6 - P2 - C2	103.0(7)
O4 - Zr - O5	90.7(7)	P1 - C1 - N	111.8(7)
O4 - Zr - O6	92.1(5)	P2 - C2 - N	114.0(8)
O4 - Zr - F	81.7(6)	C1 - N - C2	111.3(8)
O5 - Zr - O6	176.3(8)	C1 - N - C3	108.4(9)
O5 - Zr - F	90.0(6)	C2 - N - C3	103.5(8)
O6 - Zr - F	92.9(6)	N - C3 - C4	114.5(8)
O1 - P1 - O2	116.8(7)	C3 - C4 - C5	104.7(8)
O1 - P1 - O3	105.8(7)	C4 - C5 - O7	105.5(8)
O1 - P1 - C1	111.9(7)		

Table S3: Fractional atomic coordinates and isotropic atomic displacement parameters for ZC4a.

Atom	x/*a*	y/*b*	z/*c*	*U*iso×100
Zr	0.0837(4)	-0.2374(8)	0.5914(8)	3.3(2)
P1	0.080(1)	0.013(1)	0.837(1)	3.3
P2	0.1695(8)	0.420(1)	0.981(1)	3.3
O1	0.092(2)	-0.075(3)	0.724(3)	3.3
O2	-0.028(2)	0.101(3)	0.800(3)	3.3
O3	0.075(2)	-0.102(3)	0.947(2)	3.3
O4	0.247(2)	0.358(3)	1.099(3)	3.3
O5	0.063(1)	0.352(3)	0.969(3)	3.3
O6	0.166(2)	0.587(2)	1.008(3)	3.3
F	0.227(1)	-0.293(3)	0.690(2)	3.3
C1	0.193(2)	0.145(3)	0.899(2)	3.3
C2	0.218(2)	0.377(2)	0.832(3)	3.3
N	0.241(1)	0.220(2)	0.807(2)	3.3
C3	0.360(2)	0.194(3)	0.845(4)	3.3
C4	0.425(2)	0.342(3)	0.836(5)	3.3
C5	0.542(2)	0.319(4)	0.837(3)	3.3
C6	0.567(3)	0.443(3)	0.741(3)	3.3
O7	0.567(2)	0.388(3)	0.611(3)	3.3

Table S4: Bond lengths (Å) and angles (°) for ZC4a.

Zr - O1	2.02(2)	P2 - O6	1.52(2)
Zr - O2	2.13(2)	P2 - C2	1.95(2)
Zr - O3	2.11(2)	N - C1	1.50(3)
Zr - O5	2.06(2)	N - C2	1.48(3)
Zr - O6	2.10(2)	N - C3	1.55(3)
Zr - F	1.98(2)	C3 - C4	1.60(4)
P1 - O1	1.50(2)	C4 - C5	1.59(4)
P1 - O2	1.60(2)	C5 - C6	1.62(5)
P1 - O3	1.59(2)	C6 - O7	1.50(4)
P1 - C1	1.89(2)		
P2 - O4	1.51(2)	O4····N	2.38(3)
P2 - O5	1.52(2)	O7····F	3.40(1)
O1 - Zr - O2	93(2)	O2 - P1 - O3	106(1)
O1 - Zr - O3	177(2)	O2 - P1 - C1	111(1)
O1 - Zr - O5	78(1)	O3 - P1 - C1	110(1)
O1 - Zr - O6	85(1)	O4 - P2 - O5	110(1)
O1 - Zr - F	87.2(9)	O4 - P2 - O6	104(1)
O2 - Zr - O3	89.9(9)	O4 - P2 - C2	109(1)
O2 - Zr - O5	89(1)	O5 - P2 - O6	109(1)
O2 - Zr - O6	169(1)	O5 - P2 - C2	112(1)
O2 - Zr - F	89(1)	O6 - P2 - C2	113(1)
O3 - Zr - O5	100(1)	P1 - C1 - N	120(1)
O3 - Zr - O6	92(1)	P2 - C2 - N	118(1)
O3 - Zr - F	94(1)	C1 - N - C2	99(2)
O5 - Zr - O6	100.9(8)	C1 - N - C3	112(1)
O5 - Zr - F	165(1)	C2 - N - C3	110(1)
O6 - Zr - F	80.8(9)	N - C3 - C4	114(1)
O1 - P1 - O2	111(1)	C3 - C4 - C5	117(1)
O1 - P1 - O3	108(1)	C4 - C5 - C6	107(3)
O1 - P1 - C1	111(1)	C5 - C6 - O7	116(1)

Table S5: Fractional atomic coordinates and isotropic atomic displacement parameters for ZC5.

Atom	x/*a*	y/*b*	z/*c*	*U*iso×100
Zr	0.0768(6)	0.764(1)	0.4400(6)	1.8(2)
P1	0.151(1)	0.120(2)	0.560(2)	1.8
P2	0.063(1)	0.495(2)	0.684(2)	1.8
O1	0.103(2)	0.947(2)	0.553(2)	1.8
O2	0.060(1)	0.202(3)	0.544(2)	1.8
O3	0.214(2)	0.210(4)	0.470(3)	1.8
O4	0.075(2)	0.590(3)	0.803(2)	1.8
O5	0.069(2)	0.624(3)	0.584(2)	1.8
O6	-0.046(2)	0.412(3)	0.677(2)	1.8
F	0.200(1)	0.722(3)	0.424(2)	1.8
C1	0.202(2)	0.142(4)	0.723(3)	1.8
C2	0.173(2)	0.382(4)	0.641(3)	1.8
N	0.223(2)	0.301(4)	0.741(3)	1.8
C3	0.329(3)	0.336(4)	0.745(4)	1.8
C4	0.394(3)	0.187(5)	0.742(4)	1.8
C5	0.468(3)	0.195(5)	0.846(5)	1.8
C6	0.506(4)	0.355(5)	0.849(5)	1.8
C7	0.599(3)	0.352(5)	0.923(6)	1.8
O7	0.631(2)	0.206(4)	0.914(4)	1.8

Table S6: Bond lengths (Å) and angles (°) for ZC5.

Zr - O1	2.06(2)	P2 - C2	1.96(2)
Zr - O2	2.02(2)	N - C1	1.46(5)
Zr - O4	1.98(2)	N - C2	1.46(2)
Zr - O5	2.01(2)	N - C3	1.56(5)
Zr - O6	2.04(2)	C3 - C4	1.63(6)
Zr - F	1.84(2)	C4 - C5	1.51(7)
P1 - O1	1.69(2)	C5 - C6	1.53(6)
P1 - O2	1.52(2)	C6 - C7	1.52(8)
P1 - O3	1.60(2)	C7 - O7	1.38(6)
P1 - C1	1.88(2)		
P2 - O4	1.55(2)	O3····N	2.50(3)
P2 - O5	1.59(2)	O7····F	2.92(4)
P2 - O6	1.74(2)		
O1 - Zr - O2	88.3(9)	O2 - P1 - C1	110(2)
O1 - Zr - O4	85.7(9)	O3 - P1 - C1	109(1)
O1 - Zr - O5	92(1)	O4 - P2 - O5	100(1)
O1 - Zr - O6	177(1)	O4 - P2 - O6	108(1)
O1 - Zr - F	94(1)	O4 - P2 - C2	116(1)
O2 - Zr - O4	90.3(9)	O5 - P2 - O6	112(1)
O2 - Zr - O5	85.3(1)	O5 - P2 - C2	97(1)
O2 - Zr - O6	89.9(9)	O6 - P2 - C2	122(1)
O2 - Zr - F	177(1)	P1 - C1 - N	107(1)
O4 - Zr - O5	175(1)	P2 - C2 - N	116(2)
O4 - Zr - O6	92(1)	C1 - N - C2	107(2)
O4 - Zr - F	92(1)	C1 - N - C3	113(2)
O5 - Zr - O6	89.7(9)	C2 - N - C3	111(2)
O5 - Zr - F	93(1)	N - C3 - C4	114(2)
O6 - Zr - F	88(1)	C3 - C4 - C5	110(2)
O1 - P1 - O2	95(1)	C4 - C5 - C6	107(4)
O1 - P1 - O3	133(2)	C5 - C6 - C7	108(4)
O1 - P1 - C1	106(1)	C6 - C7 - O7	106(4)
O2 - P1 - O3	102(1)		

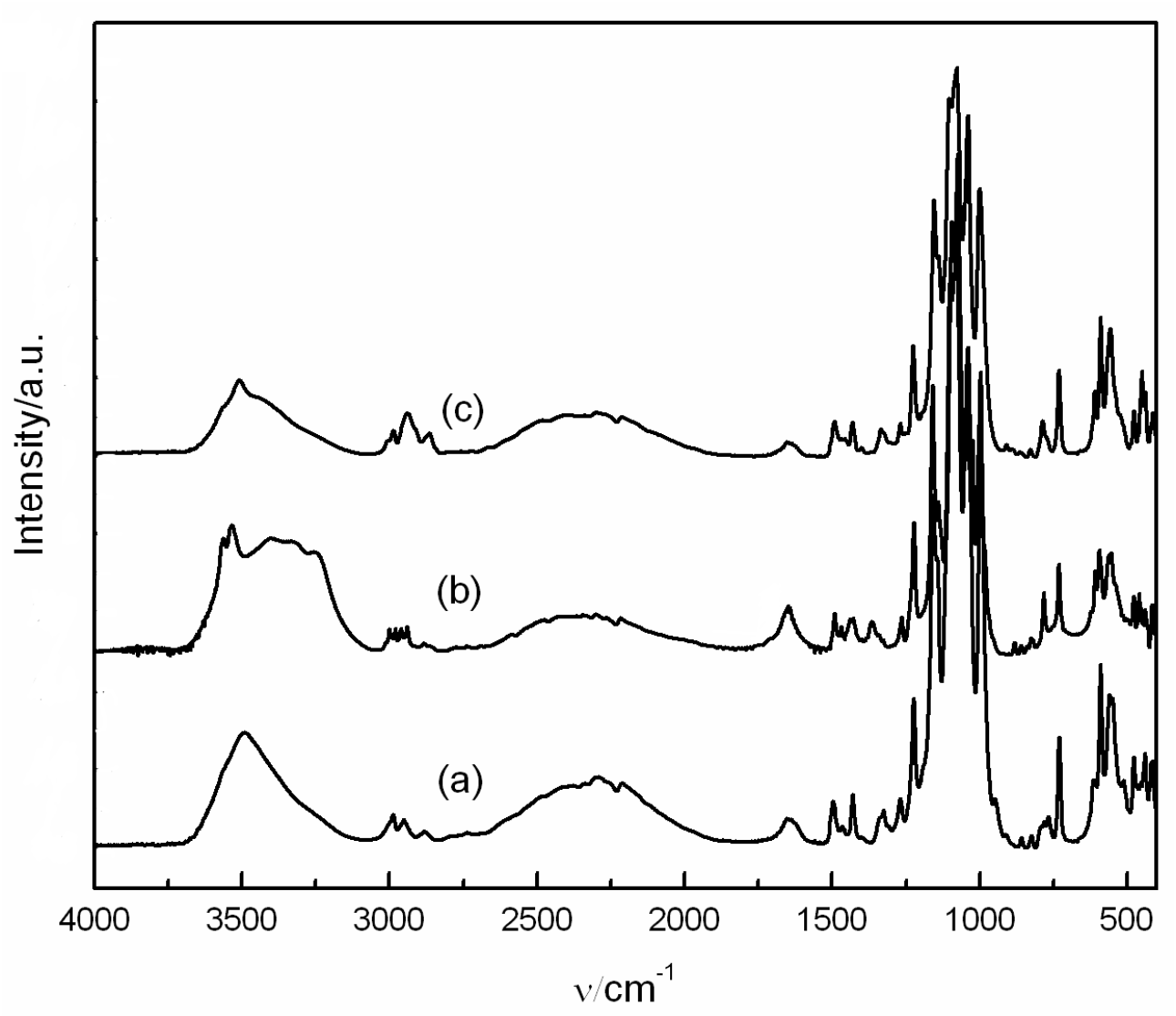

Figure S1: FT-IR spectra of ZC3 (a), ZC4 (b), and ZC5 (c).