

Supporting Information

Near UV-pumped green-emitting $\text{Na}_3(\text{Y,Sc})\text{Si}_3\text{O}_9:\text{Eu}^{2+}$ phosphor for white-emitting diodes

Zhiguo Xia^{*a}, Jun Zhou^a, Zhiyong Mao^b

Table S1. Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2)

	x	y	z	$B_{\text{iso}}^*/B_{\text{eq}}$	Occ. (<1)
Sc1	0.3730 (7)	0.3691 (8)	0.3717 (6)	3.0 (2)	0.496 (21)
Sc2	0.1107 (7)	0.1212 (8)	0.1100 (7)	3.0 (2)	0.591 (25)
Sc3	0.3802 (9)	0.1185 (10)	0.8643 (8)	3.0 (2)	0.978 (19)
Sc4	0.1291 (10)	0.3810 (10)	0.6070 (8)	3.0 (2)	1.000 (22)
Y1	0.3730 (7)	0.3691 (8)	0.3717 (6)	3.0 (2)	0.504 (21)
Y2	0.1107 (7)	0.1212 (8)	0.1100 (7)	3.0 (2)	0.409 (25)
Y3	0.3802 (9)	0.1185 (10)	0.8643 (8)	3.0 (2)	0.022 (19)
Y4	0.1291 (10)	0.3810 (10)	0.6070 (8)	3.0 (2)	0.000 (22)
Si1	0.4770 (11)	0.4769 (13)	0.7538 (12)	2.52 (17)	
Si2	0.4884 (12)	0.2497 (12)	0.0272 (11)	2.52 (17)	
Si3	0.2343 (11)	0.4680 (13)	0.0171 (11)	2.52 (17)	
Si4	0.0232 (12)	0.0163 (13)	0.7636 (11)	2.52 (17)	
Si5	0.4977 (12)	0.2647 (13)	0.7319 (11)	2.52 (17)	
Si6	0.2286 (11)	0.4911 (14)	0.2295 (11)	2.52 (17)	
Si7	0.2828 (11)	0.0204 (13)	0.2200 (11)	2.52 (17)	
Si8	0.2738 (12)	0.2725 (13)	0.9876 (12)	2.52 (17)	
Si9	0.4842 (11)	0.2526 (12)	0.5359 (11)	2.52 (17)	
Si10	0.2259 (11)	0.0251 (12)	0.5153 (11)	2.52 (17)	
Si11	0.0319 (11)	0.2299 (12)	0.7833 (11)	2.52 (17)	
Si12	0.2713 (11)	0.2302 (13)	0.5248 (11)	2.52 (17)	

Na1	0.136 (2)	0.397 (2)	0.4080 (15)	1.9 (2)	
Na2	0.101 (2)	0.160 (2)	0.6397 (18)	1.9 (2)	
Na3	0.3853 (19)	0.097 (2)	0.6202 (17)	1.9 (2)	
Na4	0.4340 (17)	0.502 (2)	1.0068 (18)	1.9 (2)	
Na5	0.1661 (17)	0.122 (3)	0.9002 (16)	1.9 (2)	
Na6	0.124 (2)	0.400 (2)	0.8387 (15)	1.9 (2)	
Na7	0.1917 (19)	0.212 (2)	0.3315 (15)	1.9 (2)	
Na8	0.0515 (17)	0.023 (2)	0.5452 (18)	1.9 (2)	
Na9	0.136 (2)	0.357 (2)	0.0879 (16)	1.9 (2)	
Na10	0.2367 (19)	0.262 (3)	0.222 (2)	1.9 (2)	
Na11	0.4075 (17)	0.141 (2)	0.3776 (18)	1.9 (2)	
Na12	0.2745 (17)	0.264 (2)	0.7158 (18)	1.9 (2)	
O1	0.3326 (14)	0.4775 (14)	0.4493 (14)	2	
O2	0.1029 (13)	0.2873 (15)	0.7248 (12)	2	
O3	0.4371 (12)	0.2815 (17)	0.2703 (13)	2	
O4	0.4945 (16)	0.1771 (15)	0.9424 (12)	2	
O5	0.3744 (12)	0.2341 (18)	0.5689 (17)	2	
O6	0.2745 (15)	0.0463 (14)	0.7829 (13)	2	
O7	0.2493 (19)	0.3749 (16)	0.9542 (19)	2	
O8	0.2864 (17)	0.2122 (14)	0.9022 (12)	2	
O9	0.0554 (13)	0.3076 (14)	0.5142 (14)	2	
O10	0.3822 (12)	0.0362 (14)	0.2639 (14)	2	
O11	0.0946 (11)	0.2166 (15)	0.2209 (13)	2	
O12	0.1796 (15)	0.0074 (19)	0.6166 (11)	2	
O13	0.0294 (17)	0.226 (2)	0.3720 (12)	2	
O14	0.2132 (18)	0.4499 (19)	0.1309 (10)	2	
O15	0.4863 (16)	0.0213 (17)	0.8312 (12)	2	
O16	0.3753 (12)	0.2608 (19)	0.0374 (14)	2	
O17	0.4682 (15)	0.4662 (19)	0.3183 (12)	2	
O18	0.2092 (15)	0.4236 (13)	0.7179 (15)	2	
O19	0.239 (2)	0.1314 (15)	0.4874 (18)	2	
O20	0.0077 (15)	0.2935 (19)	0.8699 (13)	2	

O21	0.4509 (14)	0.3671 (13)	0.7446 (16)	2	
O22	0.4657 (16)	0.3444 (13)	0.4802 (14)	2	
O23	0.1692 (12)	0.4787 (15)	0.5105 (16)	2	
O24	0.0384 (15)	0.0175 (18)	0.1662 (12)	2	
O25	0.1722 (11)	0.0168 (17)	0.0322 (17)	2	
O26	0.0572 (14)	0.1200 (14)	0.7994 (18)	2	
O27	0.2220 (13)	0.1036 (14)	0.1983 (16)	2	
O28	0.1234 (13)	0.4833 (16)	0.2726 (15)	2	
O29	0.0292 (13)	0.4822 (15)	0.6497 (12)	2	
O30	0.4416 (18)	0.1956 (15)	0.7783 (14)	2	
O31	0.0491 (15)	0.1686 (14)	0.9924 (14)	2	
O32	0.2009 (12)	0.2289 (19)	0.0507 (14)	2	
O33	0.2812 (14)	0.4242 (14)	0.2912 (12)	2	
O34	0.2796 (18)	0.2898 (15)	0.4352 (13)	2	
O35	0.3186 (15)	0.0251 (15)	0.9462 (12)	2	
O36	0.2054 (12)	0.2668 (15)	0.5875 (12)	2	

Table S2. Main bond lengths (Å)

Sc1—O1	2.07 (2)	Si11—O20	1.64 (3)
Sc1—O3	2.21 (2)	Si11—O26	1.69 (3)
Sc1—O17	2.17 (3)	Si12—O5	1.66 (3)
Sc1—O22	2.15 (2)	Si12—O19	1.64 (3)
Sc1—O33	1.99 (2)	Si12—O34	1.61 (3)
Sc1—O34	2.05 (3)	Si12—O36	1.46 (3)
Sc2—O11	2.19 (2)	Na1—O9	2.38 (3)
Sc2—O24	2.05 (3)	Na1—O23	2.02 (4)
Sc2—O25	2.14 (3)	Na1—O28	2.40 (3)
Sc2—O27	2.12 (2)	Na1—O33	2.79 (3)
Sc2—O31 ⁱ	2.10 (2)	Na1—O34	2.67 (4)
Sc2—O32	2.26 (3)	Na2—O2	2.27 (4)
Sc3—O4	2.23 (3)	Na2—O3 ^{viii}	2.90 (4)

Sc3—O6	2.25 (3)	Na2—O9	2.96 (4)
Sc3—O8	2.04 (3)	Na2—O12	2.57 (4)
Sc3—O15	2.19 (3)	Na2—O17 ^{vii}	2.78 (4)
Sc3—O30	1.94 (3)	Na2—O22 ^{viii}	2.68 (4)
Sc3—O35	2.06 (3)	Na2—O26	2.54 (4)
Sc4—O2	2.27 (2)	Na2—O36	2.35 (4)
Sc4—O9	2.07 (2)	Na3—O5	2.18 (4)
Sc4—O18	2.13 (3)	Na3—O19	2.98 (4)
Sc4—O23	2.13 (3)	Na3—O24 ^{vi}	2.15 (4)
Sc4—O29	2.20 (3)	Na3—O25 ^{vi}	2.30 (4)
Sc4—O36	2.05 (3)	Na3—O30	2.90 (4)
Si1—O15 ⁱⁱ	1.53 (3)	Na4—O9 ^{iv}	2.82 (4)
Si1—O21	1.68 (3)	Na4—O23 ^{iv}	1.55 (3)
Si1—O24 ⁱⁱⁱ	1.50 (3)	Na4—O29 ^{iv}	2.21 (3)
Si1—O28 ^{iv}	1.62 (3)	Na5—O6	2.63 (4)
Si2—Si11 ⁱⁱⁱ	2.92 (2)	Na5—O8	2.22 (4)
Si2—O4 ⁱ	1.66 (3)	Na5—O25 ^x	2.52 (4)
Si2—O16	1.69 (3)	Na5—O26	2.20 (3)
Si2—O20 ⁱⁱⁱ	1.69 (3)	Na5—O31	2.32 (3)
Si2—O31 ⁱⁱⁱ	1.54 (3)	Na5—O32 ^x	2.80 (4)
Si3—Si8 ⁱ	2.99 (3)	Na5—O35	2.76 (4)
Si3—O1 ^v	1.63 (3)	Na6—O1 ^{iv}	2.54 (4)
Si3—O7 ⁱ	1.68 (3)	Na6—O2	2.40 (3)
Si3—O14	1.75 (2)	Na6—O7	2.56 (4)
Si3—O23 ^v	1.63 (3)	Na6—O17 ^{iv}	2.43 (4)
Si4—Si7 ^{vi}	2.99 (2)	Na6—O18	2.23 (3)
Si4—O10 ^{vi}	1.60 (3)	Na6—O20	2.38 (4)
Si4—O17 ^{vii}	1.49 (3)	Na7—O11	2.19 (3)
Si4—O26	1.70 (3)	Na7—O13	2.48 (4)
Si4—O29 ^{viii}	1.59 (3)	Na7—O19	2.71 (4)
Si5—Si9	2.94 (2)	Na7—O27	2.60 (4)
Si5—O11 ⁱⁱⁱ	1.62 (2)	Na7—O34	2.33 (4)

Si5—O13 ⁱⁱⁱ	1.63 (3)	Na8—O12	2.19 (3)
Si5—O21	1.68 (3)	Na8—O17 ^{vii}	2.38 (3)
Si5—O30	1.49 (3)	Na8—O22 ^{vii}	2.37 (4)
Si6—O14	1.61 (3)	Na8—O35 ^{ix}	2.53 (3)
Si6—O18 ^v	1.57 (3)	Na9—O4 ^{vii}	2.20 (4)
Si6—O28	1.69 (3)	Na9—O7 ⁱ	2.62 (4)
Si6—O33	1.56 (3)	Na9—O11	2.94 (4)
Si7—O6 ^{ix}	1.61 (3)	Na9—O14	1.90 (4)
Si7—O10	1.63 (3)	Na9—O32	2.19 (4)
Si7—O12 ^{ix}	1.69 (2)	Na10—O11	2.20 (3)
Si7—O27	1.56 (3)	Na10—O27	2.38 (4)
Si8—O7	1.64 (3)	Na10—O32	2.66 (4)
Si8—O8	1.57 (3)	Na10—O33	2.70 (4)
Si8—O16 ^x	1.68 (3)	Na11—O3	2.67 (4)
Si8—O32 ^x	1.57 (3)	Na11—O9 ⁱⁱⁱ	2.82 (3)
Si9—O5	1.72 (3)	Na11—O10	2.33 (4)
Si9—O9 ⁱⁱⁱ	1.57 (3)	Na11—O19	2.99 (4)
Si9—O13 ⁱⁱⁱ	1.56 (3)	Na11—O29 ⁱⁱⁱ	2.59 (4)
Si9—O22	1.62 (3)	Na12—O2	2.56 (3)
Si10—O12	1.68 (2)	Na12—O5	2.68 (4)
Si10—O19	1.64 (3)	Na12—O8	2.89 (3)
Si10—O25 ^{vi}	1.65 (2)	Na12—O18	2.56 (4)
Si10—O35 ^{ix}	1.43 (3)	Na12—O30	2.83 (4)
Si11—O2	1.61 (3)	Na12—O36	2.17 (3)
Si11—O3 ^{vii}	1.62 (2)		

Symmetry codes: (i) $x, y, z-1$; (ii) $-x+1, y+1/2, -z+3/2$; (iii) $x+1/2, -y+1/2, -z+1$; (iv) $-x+1/2, -y+1, z+1/2$; (v) $-x+1/2, -y+1, z-1/2$; (vi) $-x+1/2, -y, z+1/2$; (vii) $x-1/2, -y+1/2, -z+1$; (viii) $-x, y-1/2, -z+3/2$; (ix) $-x+1/2, -y, z-1/2$; (x) $x, y, z+1$.