

SUPPLEMENTARY MATERIAL

Table SM-1. Structural information deduced from the Rietveld analysis of ND patterns of $\text{Li}_3\text{Ti}_2(\text{PO}_4)_3$. Thermal B factors are given in \AA^{-1} ; x/a, y/b and z/c are dimensionless and Occ occupancies are expressed as percentages.

	100K	200K	300K	400K
a	8.37028(28)	8.37465(21)	8.38314(17)	8.39612(17)
c	22.88900(48)	22.87864(77)	22.87180(63)	22.85708(63)
Li x/a	0.0266(23)	0.0251(20)	0.0294(18)	0.0260(29)
y/b	0.3091(23)	0.3097(19)	0.3149(17)	0.3093(29)
z/c	0.0448(7)	0.0446(6)	0.0442(6)	0.0458(8)
B	0.32	0.58	1.52	1.64
Occ	2.06	2.11	2.13	1.95
Li x/a	0.0482(47)	0.0542(43)	0.0851(50)	0.0885(53)
y/b	0.3578(49)	0.3663(47)	0.3987(50)	0.4023(60)
z/c	0.1189(16)	0.1201(15)	0.1198(18)	0.1169(22)
B	0.32	0.58	1.52	1.64
Occ	0.94	0.89	0.80	0.85
Ti z/c	0.1434(6)	0.1424(5)	0.1418(4)	0.1434(6)
B	0.56	0.65	0.63	0.90
Occ	1	1	1	1
Ti z/c	0.3467(6)	0.3459(5)	0.3464(4)	0.3469(6)
B	0.56	0.65	0.63	0.90
Occ	1	1	1	1
P x/a	0.2893(5)	0.2892(4)	0.2889(4)	0.2919(5)
y/b	-0.0008(6)	-0.0017(5)	-0.0019(4)	0.0001(6)
z/c	0.2507(2)	0.2506(2)	0.2505(2)	0.2502(2)
B	0.12	0.10	0.10	0.36
O1 x/a	0.1642(6)	0.1650(5)	0.1670(4)	0.1671(6)
y/b	0.2171(6)	0.2169(5)	0.2181(4)	0.2162(6)
z/c	0.0897(2)	0.0900(1)	0.0897(1)	0.0901(2)
B	0.84	1.00	1.05	1.15
O2 x/a	0.1371(5)	0.1359(4)	0.1354(4)	0.1385(5)
y/b	0.2304(6)	0.2288(5)	0.2279(4)	0.2286(6)
z/c	0.3982(2)	0.3983(2)	0.3980(1)	0.3984(2)
B	0.72	0.80	0.83	0.88
O3 x/a	0.1944(6)	0.1957(5)	0.1966(4)	0.1961(6)
y/b	0.9907(5)	0.9914(4)	0.992(4)	0.9925(6)
z/c	0.1939(2)	0.1938(2)	0.1933(1)	0.1933(2)
B	0.96	1.25	1.63	1.84
O4 x/a	0.9085(5)	0.9087(4)	0.9095(4)	0.9110(6)
y/b	0.1434(6)	0.1443(5)	0.1449(4)	0.1461(6)
z/c	0.2994(2)	0.2993(1)	0.2993(1)	0.2993(2)
B	0.88	1.07	1.24	1.44
R _B	4.8	4.6	5.1	9.1
R _F	3.0	2.8	3.0	8.0
χ^2	7.1	5.1	3.6	1.4
R _P	16.4	14.9	13.5	26.6
R _{wp}	16.6	14.3	12.4	17.3

Table SM-2. Structural information deduced from the Rietveld analysis of ND patterns of $\text{Li}_3\text{Ti}_{1.8}\text{Al}_{0.2}(\text{PO}_4)_3$. Thermal B factors are given in \AA^{-1} ; x/a, y/b and z/c are dimensionless and Occ occupancies are expressed as percentages.

	5K	100K	200K	300K	400K	500K
a	8.34619(10)	8.34714(10)	8.35203(10)	8.36000(11)	8.37578(11)	8.39187(12)
c	22.78888(36)	22.78375(36)	22.77614(38)	22.76789(41)	22.74957(41)	22.73297(42)
Li x/a	0.0292(12)	0.0306(12)	0.0306(12)	0.0333(14)	0.0288(15)	0.0227(19)
y/b	0.3133(11)	0.3111(11)	0.3110(12)	0.3134(14)	0.3103(14)	0.3072(17)
z/c	0.0448(4)	0.0448(4)	0.0449(4)	0.0463(4)	0.0482(5)	0.0501(6)
B	0.71	0.80	0.88	1.17	1.90	3.38
Occ	2.17	2.12	2.10	2.13	2.00	1.95
Li x/a	0.0613(29)	0.0474(26)	0.0518(26)	0.0603(32)	0.0649(35)	0.0748(49)
y/b	0.3800(29)	0.3697(27)	0.3744(27)	0.3784(35)	0.3855(37)	0.3917(52)
z/c	0.1179(9)	0.1191(9)	0.1183(9)	0.1189(11)	0.1206(13)	0.1189(19)
B	0.71	0.80	0.88	1.17	1.90	3.38
Occ	0.83	0.88	0.88	0.87	0.80	0.73
Ti z/c	0.1441(3)	0.1435(3)	0.1435(3)	0.1438(3)	0.1432(3)	0.1438(3)
B	0.42	0.38	0.29	0.52	0.67	0.99
Occ	0.92	0.90	0.87	0.90	0.90	0.94
Ti z/c	0.3478(3)	0.3477(3)	0.3475(3)	0.3477(4)	0.3473(4)	0.3476(4)
B	0.42	0.38	0.29	0.52	0.67	0.99
Occ	0.90	0.89	0.91	0.93	0.92	0.92
P x/a	0.2909(2)	0.2909(3)	0.2902(3)	0.2912(3)	0.2914(3)	0.2914(3) -
y/b	-0.0013(3)	-0.0008(3)	-0.0016(3)	-0.0008(4)	-0.0007(3)	0.0003(3)
z/c	0.2502(1)	0.2506(1)	0.2505(1)	0.2505(1)	0.2504(1)	0.2503(1)
B	0.40	0.46	0.53	0.49	0.52	0.69
O1 x/a	0.1659(2)	0.1664(3)	0.1667(3)	0.1669(3)	0.1664(3)	0.16720(31)
y/b	0.2160(3)	0.2153(3)	0.2155(3)	0.2148(3)	0.2129(3)	0.21224(32)
z/c	0.0899(1)	0.0900(1)	0.0899(1)	0.0896(1)	0.0899(1)	0.08950(10)
B	0.55	0.82	1.11	1.26	1.34	1.53
O2 x/a	0.1356(2)	0.1356(3)	0.1358(3)	0.1360(3)	0.1375(3)	0.1397(3)
y/b	0.2293(3)	0.2300(3)	0.2293(3)	0.2283(3)	0.2291(3)	0.2293(3)
z/c	0.3984(1)	0.3985(1)	0.3985(1)	0.3987(1)	0.3988(1)	0.3989(1)
B	0.46	0.83	1.01	0.84	1.10	1.41
O3 x/a	0.1941(3)	0.1932(3)	0.1943(3)	0.1951(3)	0.1947(3)	0.1955(4)
y/b	0.9926(3)	0.9921(3)	0.9918(3)	0.9925(3)	0.9915(3)	0.9916(3)
z/c	0.1932(1)	0.1935(1)	0.1933(1)	0.1932(1)	0.1930(1)	0.1929(1)
B	0.99	1.52	1.75	1.85	2.09	2.28
O4 x/a	0.9118(3)	0.9106(3)	0.9114(3)	0.9118(3)	0.9122(3)	0.9126(3)
y/b	0.1460(3)	0.1461(3)	0.1456(3)	0.1455(3)	0.1449(3)	0.1442(3)
z/c	0.2996(1)	0.2998(1)	0.2995(1)	0.2994(1)	0.2994(1)	0.2995(1)
B	0.86	1.16	1.33	1.44	1.62	1.79
R _B	4.5	4.0	4.0	4.4	5.1	5.4
R _F	2.5	2.8	3.3	3.6	3.7	3.8
χ^2	1.9	1.8	1.9	2.3	2.4	2.4
R _P	10.6	11.3	11.9	12.9	12.6	12.7
R _{wp}	9.1	9.4	9.8	11.3	10.5	10.7