

Supporting information

Table Refined structural data for $\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$ and $\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$

Atom	x			y			z			U		
	$\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiPF}_6$	$\text{PEO}_6\text{:LiSbF}_6$
Li	0.815(6)	0.791(12)	-0.018(4)	0.008(5)	-0.001(7)	-0.012(13)	0.04(1)	0.02(1)				
Hexafluorophosphate												
P	0.674(4)	0.626(11)	0.284(3)	0.249(5)	0.491(5)	0.512(12)	0.015(3)	0.015(2)				
F1	0.629(9)	0.478(12)	0.294(5)	0.257(9)	0.633(8)	0.524(19)	0.015(3)	0.015(2)				
F2	0.779(6)	0.573(16)	0.336(4)	0.286(7)	0.59(1)	0.320(12)	0.015(3)	0.015(2)				
F3	0.739(8)	0.647(16)	0.206(3)	0.346(5)	0.54(1)	0.572(15)	0.015(3)	0.015(2)				
F4	0.610(6)	0.589(13)	0.354(4)	0.155(5)	0.393(9)	0.432(16)	0.015(3)	0.015(2)				
F5	0.558(6)	0.687(16)	0.235(5)	0.219(7)	0.44(1)	0.707(13)	0.015(3)	0.015(2)				
F6	0.734(7)	0.770(12)	0.279(5)	0.245(9)	0.362(8)	0.486(19)	0.015(3)	0.015(2)				

[illegible]

C11	0.577(7)	0.554(8)	0.080(4)	0.104(6)	0.766(8)	0.821(15)	0.006(5)	0.004(5)
C12	0.500(6)	0.458(7)	0.122(5)	0.136(5)	0.86(1)	0.883(12)	0.006(5)	0.004(5)
O6	0.389(7)	0.371(10)	0.082(5)	0.082(7)	0.80(1)	0.883(10)	0.006(5)	0.004(5)
D1	1.402(8)	1.366(11)	0.048(5)	0.010(7)	0.606(8)	0.732(15)	0.006(5)	0.004(5)
D2	1.463(7)	1.295(11)	-0.025(5)	0.110(6)	0.71(1)	0.712(15)	0.006(5)	0.004(5)
D3	1.209(7)	1.093(10)	-0.019(5)	0.039(7)	0.574(9)	0.667(17)	0.006(5)	0.004(5)
D4	1.312(8)	1.171(13)	-0.106(4)	-0.006(9)	0.69(1)	0.565(11)	0.006(5)	0.004(5)
D5	1.14(1)	1.222(13)	-0.126(4)	-0.104(8)	0.73(1)	0.677(9)	0.006(5)	0.004(5)
D6	1.071(7)	1.319(9)	-0.067(6)	-0.089(8)	0.75(1)	0.866(15)	0.006(5)	0.004(5)
D7	1.267(7)	1.139(10)	-0.152(5)	-0.197(6)	1.037(9)	0.806(14)	0.006(5)	0.004(5)
D8	1.287(6)	1.266(10)	-0.104(5)	-0.174(8)	0.96(1)	0.967(13)	0.006(5)	0.004(5)
D9	1.094(9)	1.095(13)	-0.156(5)	-0.196(5)	1.19(1)	1.076(17)	0.006(5)	0.004(5)
D10	1.223(7)	1.196(9)	-0.081(5)	-0.114(9)	1.27(1)	1.171(13)	0.006(5)	0.004(5)
D11	1.066(8)	0.994(11)	0.008(4)	-0.139(7)	1.30(1)	1.233(13)	0.006(5)	0.004(5)
D12	1.132(8)	1.048(12)	-0.067(6)	-0.054(6)	1.374(9)	1.244(15)	0.006(5)	0.004(5)

D13	0.967(9)	0.933(15)	-0.156(5)	-0.129(9)	0.96(1)	0.884(15)	0.006(5)	0.004(5)
D14	0.943(8)	0.899(14)	-0.209(5)	-0.196(6)	1.14(1)	1.021(17)	0.006(5)	0.004(5)
D15	0.758(9)	0.738(14)	-0.222(5)	-0.185(7)	0.94(1)	0.763(16)	0.006(5)	0.004(5)
D16	0.722(8)	0.671(15)	-0.158(6)	-0.168(8)	1.097(9)	0.910(17)	0.006(5)	0.004(5)
D17	0.579(8)	0.641(15)	-0.135(7)	-0.127(7)	0.906(9)	0.652(15)	0.006(5)	0.004(5)
D18	0.593(8)	0.564(11)	-0.182(5)	-0.064(10)	0.76(1)	0.734(18)	0.006(5)	0.004(5)
D19	0.721(8)	0.703(12)	-0.061(6)	-0.002(10)	0.68(1)	0.652(18)	0.006(5)	0.004(5)
D20	0.531(7)	0.543(11)	-0.054(6)	-0.017(10)	0.69(1)	0.637(17)	0.006(5)	0.004(5)
D21	0.569(8)	0.481(9)	0.134(4)	0.077(9)	0.77(1)	0.781(19)	0.006(5)	0.004(5)
D22	0.556(8)	0.599(14)	0.066(6)	0.147(7)	0.620(8)	0.887(20)	0.006(5)	0.004(5)
D23	0.527(8)	0.502(13)	0.162(5)	0.162(9)	0.989(9)	0.981(13)	0.006(5)	0.004(5)
D24	0.428(8)	0.394(11)	0.165(5)	0.177(7)	0.83(1)	0.830(17)	0.006(5)	0.004(5)