

## SUPPLEMENTARY MATERIALS

### Complete list of 105 studied crystal structures

Compound	Periodicity		ICSD Collection Code
	Voronoi-Dirichlet graph	Dual net	
$\beta$ -Li <sub>0.30</sub> V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	1	1	24179, 28455
Li <sub>0.33</sub> MoO <sub>3</sub>	1	*	201959
$\beta^2$ -Li <sub>0.48</sub> V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	1	1	42706
$\beta^3$ -Li <sub>0.67</sub> V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	1	1	25383
Li <sub>0.88</sub> U <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	2	2	69846
Li <sub>0.93</sub> WO <sub>3</sub>	3	3	28882
LiB <sub>3</sub> O <sub>5</sub>	1	3	39106
LiClO <sub>4</sub>	3	3	413238
$\alpha$ -LiIO <sub>3</sub>	1	1	20012
$\beta$ -LiIO <sub>3</sub>	1	*	201816
LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3	3	53603, 281589
LiMn <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	3	3	201556
LiPO <sub>3</sub>	2	*	638
LiPO <sub>3</sub>	1	*	51630
LiReO <sub>4</sub>	3	3	37118
$\beta$ -LiRhO <sub>2</sub>	3	3	59179
LiTi <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3	3	15789, 51184
LiV <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3	3	56720
$\delta$ -LiV <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	2	2	50982, 88642, 201974
Li <sub>1.5</sub> Mn <sub>0.97</sub> O <sub>2</sub>	3	3	62047
Li <sub>1.5</sub> V <sub>12</sub> O <sub>29</sub>	1	*	62743
Li <sub>1.7</sub> V <sub>9</sub> O <sub>22</sub>	1	*	62746
Li <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	3	3	66942
Li <sub>2</sub> CrO <sub>4</sub>	3	3	1972
Li <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3	3	28178
Li <sub>2</sub> MnO <sub>2</sub>	2	2	37327
Li <sub>2</sub> MoO <sub>4</sub>	3	*	92904, 94489
Li <sub>2</sub> Mo <sub>4</sub> O <sub>13</sub>	1	*	4155
Li <sub>2</sub> Mo <sub>4</sub> O <sub>13</sub>	3	*	6134
Li <sub>2</sub> NiO <sub>2</sub>	2	2	73874
Li <sub>2</sub> PbO <sub>3</sub>	3	3	35429
Li <sub>2</sub> PdO <sub>3</sub>	2	2	51652
Li <sub>2</sub> SeO <sub>4</sub>	1	3	48106, 67234
Li <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub>	1	1	853
Li <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3	3	15414, 280481
Li <sub>2</sub> SnO <sub>3</sub>	3	3	35235
$\beta$ -Li <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	3	3	58
Li <sub>2</sub> TeO <sub>3</sub>	3	3	4317
Li <sub>2</sub> TeO <sub>4</sub>	3	3	1485
$\alpha$ -Li <sub>2</sub> Te <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3	3	26451
$\beta$ -Li <sub>2</sub> Te <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	3	3	26452
Li <sub>2</sub> TiO <sub>3</sub>	3	3	15150
Li <sub>2</sub> UO <sub>4</sub>	3	2	20508
$\alpha$ -Li <sub>2</sub> UO <sub>4</sub>	3	3	200297
Li <sub>2</sub> W <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	1	2	1897
Li <sub>2</sub> WO <sub>4</sub>	3	3	1045, 67236
Li <sub>2.1</sub> V <sub>12</sub> O <sub>29</sub>	1	*	62744
$\alpha$ -Li <sub>3</sub> AsO <sub>4</sub>	2	2	75927
$\gamma$ -Li <sub>3</sub> AsO <sub>4</sub>	3	3	78159
Li <sub>3</sub> AuO <sub>3</sub>	3	3	15113
$\alpha$ -Li <sub>3</sub> BO <sub>3</sub>	3	3	9105
Li <sub>3</sub> BiO <sub>3</sub>	1	*	85072
Li <sub>3</sub> CuO <sub>3</sub>	3	3	4201
Li <sub>3</sub> InO <sub>3</sub>	3	3	15112
Li <sub>3</sub> NbO <sub>4</sub>	3	3	30251
$\beta$ -Li <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	2	2	10257
$\gamma$ -Li <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	2	2	77095, 79427
Li <sub>3</sub> SbO <sub>4</sub>	2	2	82864
Li <sub>3</sub> VO <sub>4</sub>	2	2	19002
Li <sub>3</sub> V <sub>6</sub> O <sub>16</sub>	1	1	40417

Li <sub>4</sub> GeO <sub>4</sub>	3	3	18096
Li <sub>4</sub> Mo <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	2	2	84602
Li <sub>4</sub> Mo <sub>5</sub> O <sub>17</sub>	1	*	85439
Li <sub>4</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	3	*	39814, 59243
Li <sub>4</sub> SeO <sub>5</sub>	3	3	92395
Li <sub>4</sub> SiO <sub>4</sub>	3	3	8222, 35169
Li <sub>4</sub> TeO <sub>5</sub>	2	2	2403
Li <sub>4</sub> UO <sub>5</sub>	1	1	20452
Li <sub>4</sub> V <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	1	1	67845
Li <sub>5</sub> BiO <sub>5</sub>	3	3	203031
Li <sub>5</sub> SbO <sub>5</sub>	1	1	203030
Li <sub>6</sub> Ge <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	3	3	31050
Li <sub>6</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	3	3	25752
α -Li <sub>6</sub> UO <sub>6</sub>	3	3	48209
Li <sub>7</sub> BiO <sub>6</sub>	3	3	155950
Li <sub>7</sub> NbO <sub>6</sub>	3	3	413371
Li <sub>7</sub> OsO <sub>6</sub>	3	3	155952
Li <sub>7</sub> RuO <sub>6</sub>	3	3	155951
Li <sub>7</sub> SbO <sub>6</sub>	3	3	15631, 413370
Li <sub>7</sub> TaO <sub>6</sub>	3	3	74949, 74950, 413372
Li <sub>8</sub> CeO <sub>6</sub> **	3	3	61219
Li <sub>8</sub> CoO <sub>6</sub>	3	3	21026
Li <sub>8</sub> GeO <sub>6</sub>	3	3	65175
Li <sub>8</sub> IrO <sub>6</sub> **	3	3	61217
Li <sub>8</sub> PbO <sub>6</sub> **	3	3	10062
Li <sub>8</sub> PrO <sub>6</sub> **	3	3	49024
Li <sub>8</sub> PtO <sub>6</sub> **	3	3	61218
Li <sub>8</sub> SiO <sub>6</sub>	3	3	65176
Li <sub>8</sub> SnO <sub>6</sub> **	3	3	15104
Li <sub>8</sub> TbO <sub>6</sub> **	3	3	49026

\* The tiling could not be constructed.

\*\* The Voronoi-Dirichlet graph coincides with the dual net.