|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Eg=F(Xn)** | | **以Zn0.6Cd0.4S为例** | | | |
| 元素相关 | | Zn | Cd | S | 来源 |
| X1 | 周期 | 4 | 5 | 3 | 元素周期表 |
| X2 | 主族 | 2 | 2 | 6 | 元素周期表 |
| X3 | 元素电负性a | 1.65 | 1.69 | 2.58 | Page 9-97  Handbook of  Chemistry and Physics |
| X4 | 离子半径b | 0.60 | 0.78 | 1.84 | 见批注 |
| X5 | 离子性百分数c | 19.07% | 17.97% | 0 | 见公式(1) |
| X6 | 价态 | +2 | +2 | -2 | 参考族序数，保证总电价为0 |
| X7 | 元素替代摩尔百分数 | 60% | 40% | 0 | 参考化学计量数 |
| X8 | 原子序数 | 30 | 48 | 16 | 元素周期表 |
| X9 | 相对原子质量 | 65 | 112 | 32 | 元素周期表 |
| X10 | 第一电子亲和能d | 0 | 0 | 2.08 | Page 10-148  Handbook of  Chemistry and Physics |
| X11 | 第一电离能d | 9.39 | 8.99 | 10.36 | Page 1-17  Handbook of  Chemistry and Physics |
| X12 | 离子最外层d电子数 | 10 | 10 | 0 | 需要人为赋值 |
| X13 | 离子最外层p电子数 | 0 | 0 | 6 | 需要人为赋值 |
| X14 | 离子最外层s电子数 | 0 | 0 | 2 | 需要人为赋值 |
| X15 | 原子最外层d电子数 | 10 | 10 | 0 | 需要人为赋值 |
| X16 | 原子最外层p电子数 | 0 | 0 | 4 | 需要人为赋值 |
| X17 | 原子最外层s电子数 | 2 | 2 | 2 | 需要人为赋值 |
| 晶体相关 | | | | | |
| X18 | 晶胞参数（晶棱）e | 5.5788 | 5.5788 | 5.5788 | 见批注 |
| X19 | 晶胞参数（角度）f | 90 | 90 | 90 | 其他文献 |
| X20 | 晶系 | 立方晶系 | | | 其他文献 |
| X21 | 空间群 | F3m | | | 文献 |

注：aPauling电负性；bShannon半径（注意区分阴阳离子，参见网页http://abulafia.mt.ic.ac.uk/shannon/ptable.php#opennewwindow）；c见公式(1)，其中χA和χB分别为阴、阳离子的电负性，f>50%反映A-B键主要为离子键；d单位eV；e依次分别为a、b、c，单位Å，固溶体晶胞参数遵循Vegard's law（固溶体晶胞参数是同晶体结构端元晶胞参数的线性组合），即a=0.6×5.4093+0.4×5.8330（5.4093和5.8330 Å分别为ZnS和CdS晶胞参数）；f依次分别为α、β和γ。