|  |  |
| --- | --- |
| 结构  Structure | 属性1：“简介：结构节点包含静态的晶体结构信息和动态的结构演化相关的性质。” |
| 成分  Composition | 属性1：“简介：成分节点包含原子、原子间及整体的物理或化学性质。” |
| 工艺  Process | 属性1：“简介：工艺节点包括用于表征或制备的参数。” |
| 条件  Condition | 属性1：“简介：材料在表征时的环境参数。” |
| 本征原子参数  Intrinsic-atomic parameter | 属性1：“简介：本征原子参数描述原子的本征性质。” |
| 非本征原子参数  Extrinsic-atomic parameter | 属性1：“简介：非本征原子参数描述了原子的外在性质。” |
| 原子之间参数  Interatomic parameter | 属性1：“简介：原子间参数，用于描述原子间的物理或化学性质。” |
| 整体参数  Overall parameter | 属性1：“简介：用于描述与成分相关的整体的物理或化学性质。” |
| 整体结构  General structure | 属性1：“简介：整体结构描述了整个晶体结构的静态信息和整体结构的动态演化相关的性质。” |
| 局部结构  Local structure | 属性1：“简介：局部结构描述了局部晶体结构的静态信息和局部结构的动态演化相关的性质。” |
| 表征参数  Characteristic parameter | 属性1：“简介：表征参数包含表征过程中使用的条件或其他参数。” |
| 工艺参数  Preparation parameter | 属性1：“简介：工艺参数包含制备过程中使用的条件或其他参数。” |
| M1位元素电负性  Electronegativity of M1 | 属性1：“简介：”中M1位元素的电负性。”  属性2：“来源：Pauling电负性表[[58](#_ENREF_58)]。 |
| M2位元素电负性  Electronegativity of M2 | 属性1：“简介：中M2位元素的电负性。”  属性2：“来源：Pauling电负性表。” |
| X1位元素电负性  Electronegativity of X1 | 属性1：“简介：中X1位元素的电负性。”  属性2：“来源：Pauling电负性表。” |
| X2位元素电负性  Electronegativity of X2 | 属性1：“简介：中X2位元素的电负性。”  属性2：“来源：Pauling电负性表。” |
| M位平均有效元素电负性  Effective mean electronegativity of M | 属性1：“简介：M位有效平均电负性（12c）。”  属性2：“公式1：’  和 来自 Pauling电负性表。”  公式2：其中来自 Pauling电负性表，表示化学式中M位元素的化学计量数。” |
| X位平均有效元素电负性  Effective mean electronegativity of X | 属性1：“简介：X位有效平均电负性（18e）。”  属性2：“公式1：  其中，电负性均来自Pauling电负性表。  公式2：  其中来自 Pauling电负性表，表示化学式中X位元素的化学计量数。” |
| Na位有效电负性  Calculated effective electronegativity according to formula (Na) | 属性1：“简介：Na位元素有效电负性。”  属性2：“公式：  其中来自 Pauling电负性表，表示化学式中Na的化学计量数。” |
| M位电负性的标准差  Standard deviation of electronegativity in M site | 属性1：“简介：M位电负性的标准差。”  属性2：“公式：,其中是M位置元素，N位M位所有元素总数，为的算数平均数。” |
| X位电负性的标准差  Standard deviation of electronegativity in X site | 属性1：“简介：X位电负性的标准差。”  属性2：“公式：,其中是X位置元素，N位X位所有元素总数，为的算数平均数。” |
| M位电负性的最大偏差  Maximum deviation of electronegativity in M site | 属性1：“简介：M位电负性的最大偏差。”  属性2：“公式：,其中是M位置元素电负性的最大值，为的算数平均数。” |
| X位电负性的最大偏差  Maximum deviation of electronegativity in X site | 属性1：“简介：X位电负性的最大偏差。”  属性2：“公式：,其中是X位置元素电负性的最大值，为的算数平均数。” |
| M为平均有效电负性与Na离子电负性的差值。  X\_m\_avg-X\_Na | 属性1：“简介：M为平均有效电负性与Na离子电负性的差值。”  属性2：“来源：文献[[35](#_ENREF_35)]。” |
| M为平均有效电负性与X位离子电负性的差值。  X\_m\_avg-X\_A | 属性1：“简介：M为平均有效电负性与X位离子电负性的差值。”  属性2：“来源：文献[[35](#_ENREF_35)]。” |
| M1位元素极化率  Polarizability of M1 | 属性1：“简介：M1位置原子的极化率。” |
| M2位元素极化率  Polarizability of M2 | 属性1：“简介：M2位置原子的极化率。” |
| X1位元素极化率  Polarizability of X1 | 属性1：“简介：X1位置原子的极化率。” |
| X2位元素极化率  Polarizability of X2 | 属性1：“简介：X2位置原子的极化率。” |
| M位平均有效极化率  Effective mean element polarizability of M | 属性1：“简介：M位平均有效极化率。”  属性2：“公式：  和 是M位原子极化率, 和 是18e位置的离子占据率。” |
| X位平均有效极化率  Effective mean element polarizability of X | 属性1：“简介：X位平均有效极化率。”  属性2：“公式：，其中 和 是X位原子极化率, 和 是12c位置的离子占据率。” |
| Na离子半径  Radius of Na | 属性1：“简介：Na离子半径。”  属性2：“来源：Shannon 表[[59](#_ENREF_59)]。” |
| M1位元素离子半径  Radius of M1 | 属性1：“简介： M位离子半径（12c）。”  属性2：“来源：Shannon 表。” |
| M2位元素离子半径  Radius of M2 | 属性1：“简介： M位离子半径（12c）。”  属性2：“来源：Shannon 表。” |
| X1位元素离子半径  Radius of X1 | 属性1：“简介： X位离子半径（18e）。”  属性2：“来源：Shannon 表。” |
| X2位元素离子半径  Radius of X2 | 属性1：“简介： X位离子半径（18e）。”  属性2：“来源：Shannon 表。” |
| X位平均有效离子半径  Effective mean radius of X | 属性1：“简介：X位平均有效离子半径。”  属性2：“公式1：，其中 和 是Shannon半径表中的离子半径, 和 是18e位置的离子占据率。  公式：，其中是化学计量数。” |
| M位平均有效离子半径  Effective mean radius of M | 属性1：“简介：M位平均有效离子半径。”  属性2：“公式1：，其中 和 是Shannon半径表中的离子半径, 和 是12c位置的离子占据率。  公式2：, 其中是化学计量数。” |
| 根据化学式得到的有效Na离子半径  Calculated effective ionic radius according to formula(Na) | 属性1：“简介：根据化学式得到的有效Na离子半径。”  属性2：“公式：，其中是化学计量数。” |
| M位半径的标准差  Standard deviation of radius in M site | 属性1：“简介：M位半径的标准差。”  属性2：“公式：同上。” |
| X位半径的标准差  Standard deviation of radius in X site | 属性1：“简介：X位半径的标准差。”  属性2：“公式：同上。” |
| M位半径的最大偏差  Maximum deviation of radius in M site | 属性1：“简介：M位半径的最大偏差。”  属性2：“公式：同上。” |
| X位半径的最大偏差  Maximum deviation of radius in X site | 属性1：“简介：X位半径的最大偏差。”  属性2：“公式：同上。” |
| R\_m\_avg/R\_Na | 属性1：“简介：M位有效离子半径除以Na离子半径。”  属性2：“来源：文献[[35](#_ENREF_35)]。” |
| M1位元素价态  Valence of M1 | 属性1：“简介：M位（12c）元素价态。” |
| M2位元素价态  Valence of M2 | 属性1：“简介：M位（12c）元素价态。 |
| X1位元素价态  Valence of X1 | 属性1：“简介：X位（18e）元素价态。” |
| X2位元素价态  Valence of X2 | 属性1：“简介：X位（18e）元素价态。” |
| M位元素平均有价态  Effective mean valence of M | 属性1：“简介：M位（12c）元素平均有效价态。  属性2：“公式：对于，，其中Valence代表价态。” |
| X位元素平均有价态  Effective mean valence of X | 属性1：“简介：X位（18e）元素平均有效价态。  属性2：“公式：对于，**,**其中Valence代表价态。” |
| M位价态的标准差  Standard deviation of ionic charge states in M site | 属性1：“简介：M位价态的标准差。”  属性2：“公式：同上。” |
| X位价态的标准差  Standard deviation of ionic charge states in X site | 属性1：“简介：X位价态的标准差。”  属性2：“公式：同上。” |
| M位价态的最大偏差  Maximum deviation of ionic charge states in M site | 属性1：“简介：M位价态的最大偏差。”  属性2：“公式：同上。” |
| X位价态的最大偏差  Maximum deviation of ionic charge states in X site | 属性1：“简介：X位价态的最大偏差。”  属性2：“公式：同上。” |
| 磁性  magnetic | 属性1：“简介：磁性材料由它们对外部场的响应定义。磁性材料有 3 种主要类型：铁磁性、顺磁性和抗磁性。在这里，若存在磁性则为1否则为0。” |
| M1位元素第一电离能  First ionization energy of M1 | 属性1：“简介：元素的电离能是从孤立的气态原子 的价壳中除去一个电子形成离子所需的最小能量。此处指M1元素的第一电离能。” |
| M2位元素第二电离能  Second ionization energy of M2 | 属性1：“简介：同第一电离能类似，失去第二个电子时所需能量。此处指M2元素的第一电离能。” |
| X1位元素第一电离能  First ionization energy of X1 | 属性1：“简介：元素的电离能是从孤立的气态原子的价壳中除去一个电子形成离子所需的最小能量。此处指X1元素的第一电离能。” |
| X2位元素第二电离能  Second ionization energy of X2 | 属性1：“简介：同第一电离能类似，失去第二个电子时所需能量。此处指X2元素的第一电离能。” |
| M1位离子的体积  Volume of M1 | 属性1：“简介： M1离子的体积。”  属性2：“公式： ，r为离子半径。” |
| M2位离子的体积  Volume of M2 | 属性1：“简介：M2离子的体积。”  属性2：“公式：同上。” |
| X1位离子的体积  Volume of X1 | 属性1：“简介：X1离子的体积。”  属性2：“公式：同上。” |
| X2位离子的体积  Volume of X2 | 属性1：“简介：X2离子的体积。”  属性2：“公式：同上。” |
| Na的有效离子体积  Calculated effective volume of species D1 according to formula (Na) | 属性1：“简介：Na的有效离子体积。”  属性2：“公式：，为Na的化学计量数。” |
| M平均有效体积  Effective mean volume of M | 属性1：“简介：M平均有效体积。”  属性2：“公式： ，其中 和V是由离子半径计算得到的体积, 和 是12c位置的离子占据率。” |
| X平均有效体积  Effective mean volume of X | 属性1：“简介：X平均有效体积。”  属性2：“公式： ，其中 和V是由离子半径计算得到的体积, 和 是18e位置的离子占据率。” |
| M1位元素质量  Mass of M1 | 属性1：“简介： M1位元素质量。” |
| M2位元素质量  Mass of M2 | 属性1：“简介： M2位元素质量。” |
| X1位元素质量  Mass of X1 | 属性1：“简介： X1位元素质量。” |
| X2位元素质量  Mass of X2 | 属性1：“简介： X2位元素质量。” |
| M位平均有效质量  Effective mean mass of M | 属性1：“简介：M位平均有效质量。”  属性2：“公式：，其中 和是原子质量, 和 是12c位置的离子占据率。” |
| X位平均有效质量  Effective mean mass of X | 属性1：“简介：X位平均有效质量。”  属性2：“公式：，其中 和是原子质量, 和 是18e位置的离子占据率。” |
| Na的化学计量数  Stoichiometric number of species Na according to formula | 属性1：“简介：根据公式计算的物质Na的化学计量数，此处也可以理解为载流子浓度。”  属性2：“  公式1：直接通过化学式得到。  公式2：若想表达载流子浓度，还可以用此公式进行计算 ，其中，为载流子数目，为总离子数。  公式3：，其中, 和 代码Na离子在三个不同位置的占据率。”  属性3：“来源：文献[[34](#_ENREF_34)]。” |
| M的化学计量数  Stoichiometric number of species M according to formula | 属性1：“简介：根据公式计算的物质M的化学计量数。” |
| PO4的化学计量数  Stoichiometric number of species PO4 according to formula | 属性1：“简介：根据公式计算的物质PO4的化学计量数。” |
| X的化学计量数  Stoichiometric number of species X according to formula | 属性1：“简介：根据公式计算的物质X的化学计量数。” |
| 6b位置离子占据率  Occupancy of Na ( 6b ) | 属性1：“简介：6b位离子占据率(Na)。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 18e位置离子占据率  Occupancy of Na (18e ) | 属性1：“简介：18e位离子占据率(Na)。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 36f位置离子占据率  Occupancy of Na (36f ) | 属性1：“简介：36f位离子占据率(Na)。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| M1位元素离子占据率  Occupancy of M1 | 属性1：“简介：12c位M1离子占据率。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| M2位元素离子占据率  Occupancy of M2 | 属性1：“简介：12c位M2离子占据率。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| X1位元素离子占据率  Occupancy of X1 | 属性1：“简介：12e位X1离子占据率。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| X2位元素离子占据率  Occupancy of X2 | 属性1：“简介：12e位X2离子占据率。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| M位元素空位的占据率  Vacancy of M | 属性1：“简介：M位空位的占据率。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| X位元素空位的占据率  Vacancy of X | 属性1：“简介：X位空位的占据率。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 6b空位的占据率  Vacancy of 6b | 属性1：“简介：6b位空位的占据率(Na)。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 18e空位的占据率  Vacancy of 18e | 属性1：“简介：18e位空位的占据率(Na)。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 36f空位的占据率  Vacancy of 36f | 属性1：“简介：36f位空位的占据率(Na)。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 库伦作用  Coulomb interaction | 属性1：“简介：库伦相互作用。” |
| X-O的键强  Bond strength of XO | 属性1：“简介：X-O的键强。” |
| M-O的键强  Bond strength of MO | 属性1：“简介：M-O的键强。” |
| X-O的键长  Bond length of XO | 属性1：“简介：X-O的键长。” |
| M-O的键长  Bond length of MO | 属性1：“简介：M-O的键长。” |
| Ewald 能  Ewald summation energy | 属性1：“简介：晶胞中原子间长程静电作用的一种求法，该方法利用误差函数将静电能求和拆解为短程项及长程项两部分，并将这两项分别在实空间及倒空间中进行运算，从而实现了静电能求和的快速收敛。”  属性2：“公式1：  公式2  公式3  ”  属性3：“来源：文献[[60](#_ENREF_60)]。” |
| 材料形成能  Formation energy of materials | 属性1：“简介：反应形成化合物所需要释放或吸收的能量。” |
| 空位形成能  Vacancy formation energy | 属性1：“简介：空位形成时所需要释放或吸收的能量。” |
| 迁移熵  Entropy of migration | 属性1：“简介：离子迁移到最近邻点位时形成的熵。” |
| 能量分布  Energy landscapes | 属性1：“简介：能量分布是系统可能状态的映射。该概念经常用于物理、化学和生物化学，例如描述分子实体的所有可能构象，或系统中相互作用分子的空间位置，或参数及其相应的能级，通常是吉布斯自由能。” |
| 晶格参数a  a | 属性1：“简介：晶格常数。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 晶格参数c  c | 属性1：“简介：晶格常数。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 晶胞体积  V\_cell | 属性1：“简介：晶胞体积。”  属性2：“来源：CIF文件。” |
| 晶格常数a与c的比  a/c | 属性1：“简介：晶格常数之比。”  属性2：“公式： ”  属性3：“来源：文献[[34](#_ENREF_34)]。” |
| 晶格斜边平面  h | 属性1：“简介：以R-3C空间群NASICON为例，晶胞中一个面的面积。”  属性2：“公式：”  属性 3：“来源：文献[[34](#_ENREF_34)]” |
| 晶胞直径  d | 属性1：“简介：以R-3C空间群NASICON为例，晶胞直径的定义。”  属性2：“公式：”  属性 3：“来源：文献[[34](#_ENREF_34)]。” |
| 6b位构型熵  Configuration entropy of Na (6b) | 属性1：“简介：Na在6b位的构型熵。”  属性2：“公式：  其中 = 8.314. 代表6b位置Na的占据率。” |
| 18e位构型熵  Configuration entropy of Na (18e) | 属性1：“简介：Na在18e位的构型熵”  属性2：“公式：  其中 = 8.314. 代表18e位置Na的占据率。” |
| 36f位构型熵  Configuration entropy of Na (36f) | 属性1：“简介：Na在36f位的构型熵。”  属性2：“公式：  其中 = 8.314. 代表36f位置Na的占据率。” |
| M位构型熵  Configuration entropy of M | 属性1：“简介：M位的构型熵。”  属性2：“公式：对于而言，  其中 R=8.314，Occu\_M为M位离子占据率” |
| X位构型熵  Configuration entropy of X | 属性1：“简介：X位的构型熵。”  属性2：“公式：对于而言  其中 R=8.314，Occu\_Si4+为Si4+离子占据率，Occu\_P5+为P5+离子的占据率。” |
| Na位构型熵  Configuration entropy of Na (all) | 属性1：“简介：Na的构型熵（所有位置的Na）。”  属性2：“公式：  其中 R=8.314。Occu\_Nax代表不同位置Na的占据率” |
| 阻措  Frustration | 属性1：“简介：定义为Li-Li和Li-阴离子相互作用之间的竞争，导致移动离子亚晶格的退化（或几乎退化）或不稳定的基态。”  属性2：“来源：文献[[43](#_ENREF_43)]。” |
| 晶格畸变  Lattice distortion | 属性1：“简介：晶格畸变。” |
| 堆积方式  Packing mode | 属性1：“简介：晶体的堆积方式。” |
| 堆积率  Packing fraciton | 属性1：“简介：对于超胞中的每个离子，有效半径是根据键合环境给出的。对于其中离子，如果其键离子性质大于 2，则选择离子半径，如果小于 2，则选择共价半径。给定所有离子的有效半径r后，在原单元格中随机分布N个点，计算每个离子有效半径内的点数M。 M与N之比为晶体结合率。”  属性2：“公式：,其中代表第个离子到第个离子之间的距离。”  属性3：“来源：文献[[11](#_ENREF_11)]。” |
| 热膨胀  Thermal expansion | 属性1：“简介：热膨胀是在固体、液体和气体中观察到的现象。在这个过程中，物体或物体在热（温度）的作用下膨胀。热膨胀定义了物体由于热量而在长度、密度、面积或体积方面改变其尺寸的趋势。可用热膨胀系数来表示。” |
| 转变温度  Transition temperature | 属性1：“简介：物理性质发生突然变化的温度，例如相或晶体结构的变化，或物质变为超导的温度。” |
| 晶格动力学  Lattice dynamics | 属性1：“简介：研究晶体原子在平衡点附近的振动和这些振动对晶体物理性质的影响。”  属性2：“来源：文献[[54](#_ENREF_54)]。” |
| 晶格软度  Lattice softness | 属性1：“简介：晶格的柔软程度，对离子传输具有较大影响”  属性2：“来源：文献[[54](#_ENREF_54)]。” |
| 晶格对称性  Lattice symmetry | 属性1：“简介：晶格对称，材料的电子和结构特性很大程度上取决于其对称性”  属性2：“来源：文献[[61](#_ENREF_61)]。” |
| 德拜频率  Debye frequency | 属性1：“简介：在材料中原子振动可以达到的最高频率。”  属性2：“来源：文献[[62](#_ENREF_62)] 。” |
| 声子带心  Average phonon band center | 属性1：“简介：声子带心，考虑谐波效应的快离子导体的振动态密度。”  属性2：“公式：  , 其中表示声子振动频率。” |
| 介电常数  Dielectric constant | 属性1：“简介：介电常数是反映压电智能材料电介质在静电场作用下介电性质或极化性质的主要参数，通常用ɛ来表示。” |
| 几何因子  Geometry factor | 属性1：“简介：几何结构因子，原胞内所有原子在某一方向上引起的散射波的总振幅与某一电子在该方向上所引起的散射波的振幅之比。”  属性2：“公式：,其中Q是散射矢量，是晶胞中第j个因子得散射因子，n是晶胞中原子得个数。” |
| Haven比  Haven ratio | 属性1：“简介：示踪剂扩散系数与电导扩散系数的比值。”  属性2：“公式：HR =D\*/，其中D\*是示踪剂扩散系数，是电导扩散系数。” |
| 跳跃频率  Jump frequency | 属性1：“简介：单位时间内，每个原子的平均跳跃次数。”  属性2：“公式：Γ=J/(N\*t)，其中J是跳跃次数，N是扩散原子的数量，t是模拟时间。”  属性3：“来源：文献[[63](#_ENREF_63)]。” |
| 尝试频率  Attempt frequency | 属性1：“简介：离子在平衡位置沿某一跳跃方向的振动频率。”  属性2：“来源：文献[[64](#_ENREF_64)]。” |
| 协同运动  Concerted Migration | 属性1：“简介：多个原子相互关联，同时运动。”  属性2：“来源：文献[[29](#_ENREF_29)]。” |
| 协同跳跃率  The percentage of the correlated jumps | 属性1：“简介：协同跳跃数与总跳跃数之比。”  属性2：“来源：文献[[63](#_ENREF_63)]。” |
| 总跳跃事件  All jump events | 属性1：“简介：原子在不同位点之间的转移。”  属性2：“来源：文献[[63](#_ENREF_63)]。” |
| 体积效应  Volume effect | 属性1：“简介：体积效应是指，随着较大尺寸离子的掺杂，晶格发生扩展，离子传导性能将随之增强。” |
| 压缩应变  Compressive strain | 属性1：“简介：材料受到压力时晶格发生的畸变。” |
| 原子间距离  Distance between atoms | 属性1：“简介：不同原子之间的距离。” |
| 跳跃距离  Jump distance | 属性1：“简介：载流子从一个位点到另一个位点跃迁的距离。” |
| MO6多面体  Polyhedral of MO6 | 属性1：“简介： MO6多面体，实际表示多面体体积。”  属性2：“来源：VESTA。” |
| XO4多面体  Polyhedral of XO4 | 属性1：“简介： XO4多面体，实际表示多面体体积。”  属性2：“来源：VESTA。” |
| Na(1)O6多面体  Polyhedral of Na(1)O6 | 属性1：“简介：Na(1)O6多面体，实际表示多面体体积。”  属性2：“来源：VESTA。” |
| Na(2)O8多面体  Polyhedral of Na(2)O8 | 属性1：“简介：Na(2)O8多面体，实际表示多面体体积。”  属性2：“来源：VESTA。” |
| Na(3)O5多面体  Polyhedral of Na(3)O5 | 属性1：“简介：Na(3)O5多面体，实际表示多面体体积。”  属性2：“来源：VESTA。” |
| 瓶颈1  BT1 | 属性1：“简介：运输通道中横截面积最小的区域。”  属性2：“公式：，可计算外接圆也可计算内接圆来表征瓶颈。” |
| 瓶颈2  BT2 | 属性1：“简介：运输通道中横截面积最小的区域。”  属性2：“公式：” |
| 最小瓶颈  Min\_BT | 属性1：“简介：BT1和BT2之间的最小值。” |
| 导通阈值  Conduction threshold | 属性1：“简介：传导阈值被认为是三个方向上最小瓶颈值的最大值。描述符源自描述多孔材料中孔隙几何结构的描述符最大自由球半径[[65](#_ENREF_65)]。”  属性2：“来源：CIF文件。”  属性3：“计算方法：CAVD[[53](#_ENREF_53)]。” |
| 扩散通道的维度  The dimensionality of diffusion pathways | 属性1：“简介：晶胞内扩散通道的维度。” |
| 扩散通道的体积  The volume of diffusion pathways | 属性1：“简介：晶胞内扩散通道的体积。” |
| 退火条件  annealing condition | 属性1：“简介：退火条件。” |
| 退火温度  annealing temperature | 属性1：“简介：退火温度。” |
| 孔隙率  porosity | 属性1：“简介：孔隙率。” |
| 压力  press | 属性1：“简介：压力。” |
| 机械强度  Mechanical strength | 属性1：“简介：机械强度。” |
| 温度  Temperature | 属性1：“简介：测量温度。”  属性2：“来源：CIF文件中文献的记载。” |
| 湿度  Humidity | 属性1：“简介：湿度。” |
| 平均原子体积Average Atomic Volume, AAV | 属性1：“简介：晶胞体积除以阴离子数目。”  属性2：“公式：，  其中，为晶胞体积,为阴离子数。”  属性3：“来源：文献[[11](#_ENREF_11)]，表格之后的描述符均出自此文献。” |
| 平均阴离子体积Volume Per Anion, VPA | 属性1：“简介：用晶胞体积除以阴离子数目。”  属性2：“公式：  其中，为晶胞体积,为阴离子数。” |
| 平均锂离子最小间距average shortest Li-Li Separation Distance, LLSD | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，形成新的重复单元，在超胞单元中，边界条件选择周期性边界条件，之后对于每一个锂离子，计算它与其它锂离子的距离，并选择其中最小的距离，最后对所有的最小距离取平均值。”  属性2：“公式：  其中，为第个锂离子和第个锂离子之间的距离，为锂离子数。” |
| 平均阴离子最小间距  average shortest Anion-Anion Separation Distance, AASD | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，考虑周期性边界条件，计算每一个阴离子与其他阴离子的距离，选择其中最小的作为阴离子间最小间距，最后对最小间距取平均值。”  属性2：“公式：  其中，表示目标阴离子与第个阴离子之间的最小距离。” |
| 平均锂离子-阴离子最小间距  average shortest Li-Anion Separation Distance, LASD | 属性1：“简介：考虑周期性边界条件的超胞中，对于每一个锂离子，计算它与所有阴离子的距离，选择最小的作为锂离子-阴离子最小间距，最后对最小间距取平均值。”  属性2：“公式：，其中，为第个锂离子和第个阴离子之间的距离，为锂离子数。” |
| 平均锂离子邻近数  average Li Neighbor Count, LNC | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，在超胞内，对于每一个锂离子，计算与它的距离小于4Å的离子的数目，计算出所有锂离子的邻近离子数，最后取平均值。”  属性2：“公式：  其中，为第个锂离子和第个锂离子之间的距离，是邻近离子的最远距离,即4Å,是胞内离子数目。” |
| 锂离子邻近数标准差Standard Deviation in Li neighbor Count, SDLC | 属性1：“简介：计算所有锂离子的邻近数的标准差。”  属性2：“公式：，其中，为锂离子和邻近离子之间的距离。” |
| 平均子晶格邻近数  average Sublattice Neighbor Count, SNC | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞后，在超胞内，对于每一个非锂离子，计算与其距离小于4Å的离子的数目，最后，将所有邻近原子数取平均值。”  属性2：“公式：，表示非锂离子与其他离子之间的距离” |
| 平均锂离子-锂离子键个数  average Li-Li Bonds per Li, LLB | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，在超胞内，对于每一个锂离子，计算与之距离小于4Å的锂离子的数目，最后取平均值。”  属性2：“公式：，为第个锂离子和第个锂离子之间的距离” |
| 平均锂离子化学键电负性  average Li Bond Ionicity, LBI | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，在超胞内，对于每一个锂离子，找到与之距离小于4Å的所有离子，之后计算锂离子与所有邻近离子的电负性之差，最后取所有电负性之差的平均值。”  属性2：“公式：  其中，为所有符合条件的键的个数,为锂离子与符合条件的邻近离子的电负性之差。” |
| 锂离子化学键电负性标准差  Standard Deviation in Li Bond Ionicity, SDLI | 属性1：“简介：在计算平均锂离子化学键电负性的过程中，记录所有的电负性差数据，并且取标准差。”  属性2：“公式：，同上” |
| 平均子晶格化学键电负性  average Bond Ionicity of Sublattice, SBI | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，在超胞内，对于每一个非锂离子，寻找所有与之距离小于4Å的离子，之后计算该离子和所有邻近离子的电负性之差，最后取其平均值。”  属性2：“公式：，为非锂离子与符合条件的邻近离子的电负性之差。” |
| 平均子晶格电负性  average Electro Negativity of Sublattice, ENS | 属性1：“简介：在晶胞内，计算所有非锂离子的电负性（鲍林标准），取平均值。”  属性2：“公式：  其中，表示第个离子的电负性。” |
| 阴离子框架配位数  Anion Framework Coordination, AFC | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，在超胞内，对于每一个骨架阴离子，计算出它与别的阴离子的距离，取最小的距离，并求出在最小距离和最小距离加1Å的范围内的所有阴离子的数目，最后求平均值。”  属性2：“公式：  其中表示阴离子之间距离，表示考虑PCB边界条件之后的阴离子数目。” |
| 晶体结合率  Packing Fraction of full crystal, PF | 属性1：“简介：将晶胞扩展为超胞，对于每一个离子，先计算有效半径,有效半径的计算方式是对于锂离子，根据锂离子化学键的大小选择离子半径或者共价半径，如果该锂离子化学键大于2，则有效半径为离子半径，否则为共价半径。而对于非锂离子，则根据子晶格化学键电负性的大小取离子半径或共价半径（大于2则为离子半径，否则为共价半径）。之后在晶胞内随机选择X个点，统计这X个点中位于该离子有效半径中的数目Y，最后求Y与X的比值。”  属性2：“公式：  其中，其中代表第个离子到第个离子之间的距离。” |
| 子晶格结合率  Packing Fraction of Sublattice, SPF | 属性1：“简介：与晶体结合率的计算方法类似，只考虑子晶格，即不考虑锂离子。对于每一个非锂离子求它的有效半径内对于X个随机点分布在其中的数目Y，最后求Y与X的比值。”  属性2：“公式：  其中，其中代表第个离子到第个离子之间的距离。” |
| 平均直线路径最大半径  average Straight-Line Path Width, SLPW | 属性1：“简介：直线路径是将离子通道抽象为直线通道以此来表示瓶颈的一种微观结构。平均直线路径宽度就是离子通道的半径的一种表现，首先计算超胞内所有非锂离子，计算它们和通道连通的两个目标锂离子形成的夹角，若两个夹角都是锐角，则保留，否则舍弃。计算所有保留的离子（离子X）的有效半径和离子X到两个目标锂离子组成连线的距离。如果，则h=0，否则取=。对于每一个锂离子都计算，最后取其平均值。” |
| 平均直线路径电负性  average Straight-Line Path Electronegativity, SLPE | 属性1：“简介：在计算平均直线路径宽度的时候，计算其中的保留离子（离子X）的电负性，统计晶胞中每个锂离子对应的离子X的电负性并且取平均值。” |
| 平均锂离子化学键离子性与平均子晶格化学键离子性的比例  Ratio of average Li bond ionicity to average sublattice bond ionicity, RBI | 属性1：“简介：对平均锂离子化学键离子性和平均子晶格化学键离子性，二者取比值，即为RBI。”  属性2：“公式：” |
| 锂离子平均邻近数与子晶格平均邻近数的比例  Ratio of average Li neighbor count to average sublattice neighbor count, RNC | 属性1：“简介：对锂离子平均邻近数与子晶格平均邻近数，二者取比值，即为RNC。”  属性2：“公式：” |