

Supporting Information for

Feature-Assisted Machine Learning for Predicting Band Gaps of Binary Semiconductors

Sitong Huo, Shuqing Zhang *, Qilin Wu and Xinping Zhang *

Institute of Information Photonics Technology, School of Physics and Optoelectronic Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China; hst6110@emails.bjut.edu.cn (S.H.); qlwu2001@emails.bjut.edu.cn (Q.W.)

* Correspondence: zhangsq@bjut.edu.cn (S.Z.); zhangxinping@bjut.edu.cn (X.Z.)

In this work, we utilized six supervised learning algorithms, LASSO, Kernel Ridge Regression (KRR), Support Vector regression (SVR), Decision Trees (DT), Random Forests (RF), and GBDT. All these models are implemented in python 3.8 environment and training and optimization is done based on Scikit-learn^[1] framework. Our machine learning models employed three-fold cross-validation. The specific model parameters are given in Table S1.

Table S1. Parameters of traditional machine learning models.

Model	Main parameters
Lasso	selection = 'cyclic', alpha = 0.04, max_iter = 1200
Kernel Ridge	kernel = 'rbf'
Support Vector Regression	kernel = 'rbf', gamma = 'scale'
Decision Tree	Splitter = "best", criterion = "mse"
Random Forest	max_depth = 30
Gradient Boosting Regressor	n_estimators = 358, learning_rate = 0.1

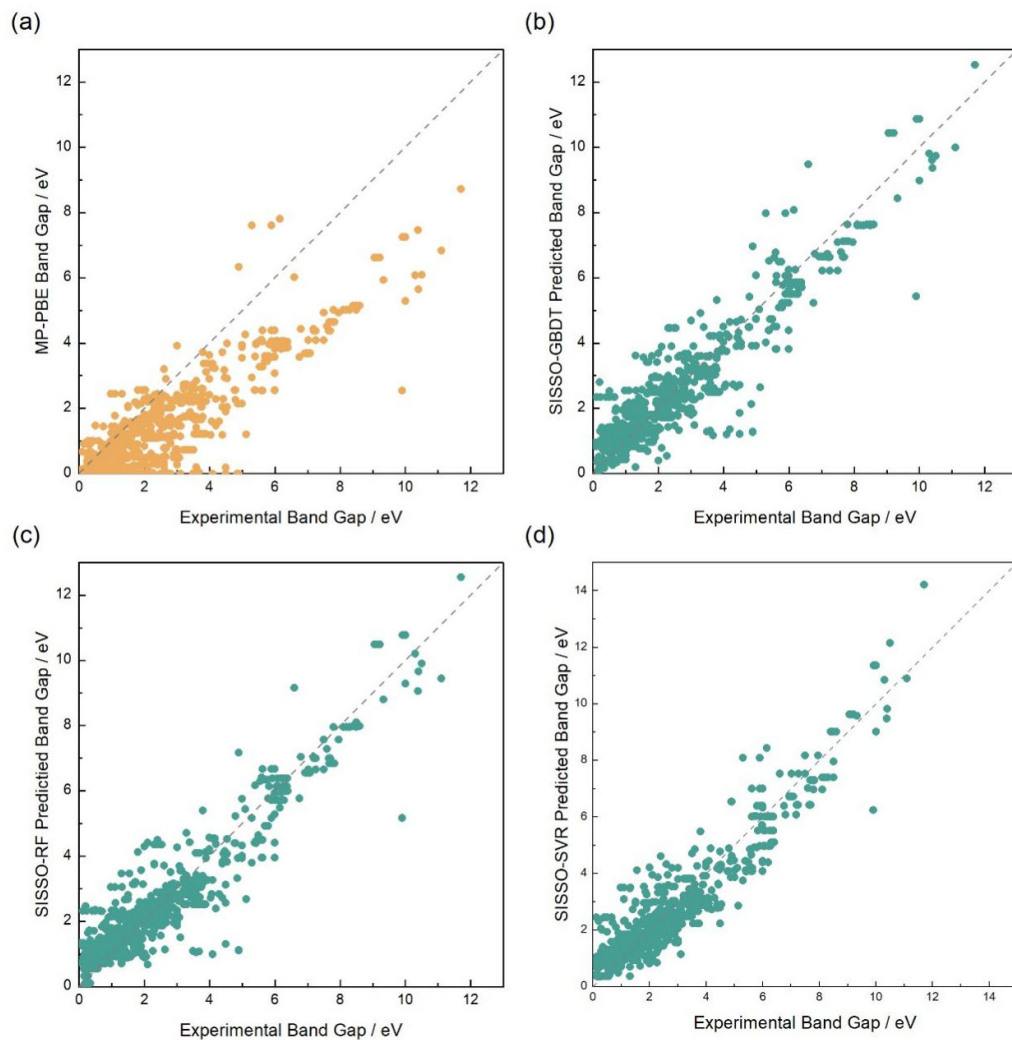


Figure S1. (a) Comparison of experimental band gap values with PBE-calculated band gaps from the Materials Project database. (b–d) Comparison of band gap values predicted by three stable SISSO 2D models. Using the top 11 from SVR as inputs for the SISSO-SVR method (b), the top 7 from RF as inputs for the SISSO-RF method (c), and the top 4 features from GBDT as inputs for the SISSO-GBDT method (d).

Table S2. Predicted band gap values for all stable binary semiconductors in the Materials Project database. The band gap values from left to right are the PBE calculated values and the predicted band gap values of the stable SISSO model based on GBDT, RF and SVR respectively.

Unit: eV

E_g Formula	PBE	SISSO- GBDT	SISSO- RF	SISSO- SVR	E_g Formula	PBE	SISSO- GBDT	SISSO- RF	SISSO- SVR
Ac ₂ O ₃	3.56	6.49	6.31	6.37	As ₂ O ₅	1.43	2.74	2.94	3.50
Ac ₂ S ₃	2.27	4.15	3.42	4.07	As ₂ Os	0.76	0.56	0.95	0.07
AcBr ₃	4.11	6.40	6.38	6.89	As ₂ Pt	0.29	0.30	0.54	0
AcCl ₃	5.11	7.62	7.64	8.15	As ₂ Rh	0.31	0.32	0.56	0
AcF ₃	6.21	9.66	9.64	11.21	As ₂ Ru	0.56	0.40	0.74	0
AcH ₃	0.68	2.09	2.00	3.93	As ₂ S ₃	2.20	2.26	2.82	2.45
AcI ₃	2.59	4.56	4.33	5.18	As ₂ Se ₃	0.63	0.97	1.18	1.48
AcMg ₁₄₉	0.22	0.11	0.58	0.58	As ₃ Ir	0.03	0	0.18	0
AcN	0.06	2.65	2.23	4.04	AsBr ₃	3.20	3.57	4.30	4.33
Ag ₂ O	0.06	2.04	1.78	1.71	AsCl ₃	4.10	4.54	5.45	5.24
Ag ₂ S	1.39	2.04	2.27	1.58	AsCl ₅	1.46	2.42	2.68	4.36
Ag ₃ P ₁₁	1.10	1.24	1.55	0.95	AsF ₃	5.40	6.52	7.67	7.61
AgBr	1.17	2.37	2.44	2.49	AsF ₅	4.63	5.91	6.86	7.67
AgCl	1.20	2.64	2.68	2.87	AsI ₃	2.25	2.41	2.84	3.32
AgF ₃	0.21	2.78	2.50	3.83	AsS	2.12	2.20	2.77	2.97
AgI	1.72	2.43	2.70	2.40	AsS ₂	1.29	1.54	1.90	2.37
Al ₂ O ₃	6.04	7.59	8.37	5.35	Au ₂ O ₃	0.89	1.84	2.01	1.33
Al ₂ Os	0.31	1.37	1.08	0	Au ₂ S	1.91	1.53	2.17	1.17
Al ₂ Ru	0.10	1.20	0.85	0	Au ₃ F ₈	0.55	2.20	2.22	5.78
Al ₂ S ₃	3.24	4.27	4.54	2.94	AuBr	2.06	2.19	2.73	2.16
Al ₂ Se ₃	2.16	3.35	2.55	2.22	AuBr ₃	0.81	1.15	1.42	1.64
Al ₂ Te ₃	1.84	2.46	2.09	1.82	AuCl	2.08	2.47	2.96	2.44
Al ₂ Te ₅	1.13	1.89	1.82	1.71	AuCl ₂	0.96	1.55	1.79	1.85
Al ₄ C ₃	1.34	2.69	2.52	1.39	AuCl ₃	1.39	1.90	2.24	2.13
AlAs	1.69	2.46	2.33	2.12	AuF ₃	1.55	3.03	3.27	3.25
AlBr ₃	4.10	5.45	5.84	4.67	AuF ₅	0.79	2.40	2.47	3.53
AlCl ₃	5.31	6.67	7.31	5.71	AuI	2.09	1.80	2.45	1.85
AlF ₃	7.72	9.55	10.70	8.60	AuSe	0.32	0.17	0.48	0.61
AlH ₃	3.25	3.76	4.15	9.84	B ₂ H ₅	6.35	5.33	6.94	8.10
AlI ₃	3.27	4.40	4.65	3.74	B ₂ O ₃	6.34	6.96	8.23	6.53
AlN	4.05	5.51	5.87	4.98	B ₂ S ₃	2.53	2.78	3.23	3.21
AlP	1.82	2.58	2.20	2.40	B ₃ H ₇	3.56	3.07	4.02	2.14
AlSb	1.26	1.92	1.91	1.50	B ₆ As	2.97	2.56	3.39	2.94
As ₂ Ir	1.15	0.88	1.36	0.38	B ₆ O	2.21	3.61	3.56	4.34
As ₂ O ₃	3.63	4.50	5.25	4.25	B ₆ P	2.73	2.37	3.14	3.02
B ₉ H ₁₁	2.91	2.54	3.35	0.29	BeBr ₂	5.35	6.84	7.18	7.25

Ba ₂ Ge	0.05	1.27	1.36	0.40	BeCl ₂	6.34	8.11	8.44	8.48
Ba ₂ Pb	0.04	1.73	1.68	0.25	BeF ₂	7.96	10.80	10.99	11.75
Ba ₂ Sb ₃	0.27	1.55	1.63	1.11	BeH ₂	5.40	5.75	6.44	16.70
Ba ₂ Si	0.06	1.10	1.25	0.48	BeI ₂	4.08	5.14	5.54	5.74
Ba ₂ Sn	0.02	1.15	1.27	0.22	BeO	7.46	9.60	9.90	9.47
Ba ₃ As ₁₄	1.18	2.65	2.12	1.68	BeP ₂	0.86	1.20	1.68	2.69
Ba ₃ P ₁₄	1.92	3.40	2.93	2.19	BeS	3.24	4.18	4.58	4.89
Ba ₃ P ₂	0.22	1.71	1.73	1.63	BeSe	2.90	3.80	4.19	4.37
Ba ₃ P ₄	0.48	1.97	2.00	1.82	BeTe	2.21	2.40	3.00	3.53
Ba ₃ Si ₄	0.00	1.05	1.19	0.50	BF ₃	8.16	9.05	10.70	10.45
Ba ₄ P ₃	0.75	2.23	2.28	1.87	BH ₃	5.28	4.47	5.83	14.66
Ba ₅ P ₄	0.96	2.45	2.35	1.98	Bi ₂ O ₃	2.25	3.67	3.49	3.02
Ba ₅ Sb ₄	0.27	1.55	1.63	1.00	Bi ₂ S ₃	1.50	1.99	2.29	1.72
BaAs ₂	0.43	1.90	1.94	1.74	Bi ₂ Se ₃	0.54	1.19	1.26	1.12
BaB ₆	0.06	1.32	1.40	3.95	Bi ₂ Te ₃	0.39	0.41	0.62	0.83
BaBr ₂	4.37	6.92	6.88	5.83	BI ₃	0.00	0.84	0.78	2.67
BaCl ₂	5.61	8.41	8.38	7.08	Bi ₃ Sb	0.08	0.08	0.24	0.13
BaF ₂	6.62	10.43	10.30	9.62	Bi ₄ O ₇	0.90	2.59	2.56	3.23
BaF ₃	0.88	4.69	4.29	6.19	Bi ₄ Te ₃	0.26	0.30	0.49	0.55
BaGe ₂	0.57	1.79	1.91	0.89	BiBr ₃	2.91	3.61	4.05	3.58
BaH ₂	2.87	4.37	4.51	14.49	BiCl ₃	3.43	4.27	4.91	4.21
BaI ₂	3.44	5.58	5.58	5.05	BiF ₃	4.70	6.23	7.10	6.30
BaMg ₁₄₉	0.36	0.36	0.95	0.12	BiF ₅	1.90	4.00	4.18	5.44
BaN ₆	3.81	6.46	6.38	6.26	BiI ₃	2.56	2.95	3.27	2.96
BaO	2.26	5.41	2.69	4.89	BiO ₂	1.08	2.73	2.75	2.84
BaO ₂	2.29	5.45	2.79	4.67	BiS ₂	1.19	1.74	1.96	1.92
BaP ₂	0.90	2.39	2.42	2.23	BN	4.49	4.98	5.88	6.18
BaP ₃	2.12	2.20	2.77	2.97	BP	1.47	1.35	1.83	2.73
BaS	1.29	1.54	1.90	2.37	Br ₂ O ₃	1.79	2.02	2.51	2.72
BaS ₂	0.89	1.84	2.01	1.33	BrCl	1.83	1.70	2.26	3.47
BaS ₃	1.91	1.53	2.17	1.17	BrF ₃	2.34	3.09	3.65	5.21
BaSe	0.55	2.20	2.22	5.78	BrF ₅	3.46	3.97	3.78	6.37
BaSe ₂	2.06	2.19	2.73	2.16	BS ₂	2.55	2.80	3.32	3.61
BaSi ₂	0.81	1.15	1.42	1.64	BSe ₂	1.77	2.12	2.52	2.92
BaSn ₂	2.08	2.47	2.96	2.44	Ca ₂ As ₃	0.17	1.42	1.54	1.85
BaTe	0.96	1.55	1.79	1.85	Ca ₂ Bi	0.05	1.06	1.26	0.76
BBr ₃	1.39	1.90	2.24	2.13	Ca ₂ Ge	0.31	1.30	1.52	0.84
BCl ₃	1.55	3.03	3.27	3.25	Ca ₂ Pb	0.08	1.55	1.61	0.52
Be ₂ C	0.79	2.40	2.47	3.53	Ca ₂ Si	0.29	1.10	1.38	0.92
Be ₃ N ₂	3.72	5.32	5.56	5.49	Ca ₂ Sn	0.06	0.97	1.20	0.48
Be ₃ P ₂	0.89	1.23	1.71	2.29	Ca ₃₁ Sn ₂₀	0.04	0.94	1.18	0.28
Be ₅ Pt	0.15	0.64	1.04	0	Ca ₃ N ₂	1.11	3.56	3.20	4.11
Ca ₄ As ₃	0.69	1.94	2.09	2.01	CO ₂	6.64	6.42	8.01	7.60
Ca ₅ P ₈	1.19	2.46	2.22	3.75	CoAs ₂	0.17	0.50	0.63	1.05

Ca ₅ Sb ₃	0.25	1.30	1.50	1.29	CoBr ₂	0.12	1.55	1.39	2.20
CaB ₆	3.72	5.32	5.56	5.49	CoCl ₂	0.10	1.78	1.58	2.58
CaBr ₂	0.89	1.23	1.71	2.29	CoF ₂	2.27	4.59	3.89	5.19
CaCl ₂	0.15	0.64	1.04	0	CoF ₃	2.05	4.40	4.12	5.13
CaF ₂	5.35	6.84	7.18	7.25	CoO	0.84	2.75	2.65	2.77
CaH ₂	6.34	8.11	8.44	8.48	CoO ₂	0.59	2.54	2.38	2.63
CaI ₂	7.96	10.80	10.99	11.75	CoP ₂	0.54	0.83	1.03	1.41
CaMg ₁₄₉	5.40	5.75	6.44	16.70	CoSb ₃	0.58	0.64	0.92	1.07
CaN ₆	4.08	5.14	5.54	5.74	Cr ₂ O ₃	2.43	4.49	2.92	3.24
CaO	7.46	9.60	9.90	9.47	Cr ₅ O ₁₂	1.82	3.95	3.56	2.60
CaP	0.86	1.20	1.68	2.69	CrBr ₃	1.29	2.88	2.84	2.90
CaP ₃	3.24	4.18	4.58	4.89	CrCl ₃	0.18	2.15	1.89	2.77
CaS	2.90	3.80	4.19	4.37	CrF ₃	3.09	5.70	3.92	5.68
CaSe	2.14	3.92	3.13	3.87	CrF ₄	1.57	4.36	4.20	5.09
CaTe	1.60	2.73	1.93	3.15	CrF ₅	1.46	4.26	4.09	5.27
CCl ₄	4.51	4.36	5.50	6.89	CrF ₆	2.09	4.82	3.85	6.02
CdAs ₂	0.19	1.02	0.85	1.28	CrI ₃	1.16	2.36	2.40	2.37
CdBr ₂	2.94	4.31	4.50	4.13	CS ₁₄	2.70	2.12	2.99	3.48
CdCl ₂	3.59	5.09	5.43	4.92	Cs ₂ As ₃	0.68	1.57	2.30	1.58
CdF ₂	3.07	5.60	3.84	6.32	Cs ₂ In ₃	2.14	3.92	3.13	3.87
CdI ₂	2.44	3.52	3.24	3.34	Cs ₂ O	1.60	2.73	1.93	3.15
CdP ₂	1.59	2.18	2.32	2.18	Cs ₂ O ₂	4.51	4.36	5.50	6.89
CdS	1.12	2.33	2.23	2.28	Cs ₂ P ₃	0.19	1.02	0.85	1.28
CdS ₂	1.54	2.68	2.67	2.44	Cs ₂ S	2.94	4.31	4.50	4.13
CdSb	0.05	0.71	0.57	0.77	Cs ₂ S ₃	3.59	5.09	5.43	4.92
CdSe	0.51	1.80	1.57	1.69	Cs ₂ S ₅	3.07	5.60	3.84	6.32
CdTe	1.23	1.75	1.85	1.90	Cs ₂ Sb	2.44	3.52	3.24	3.34
Ce ₂ Br ₅	0.00	1.62	2.06	2.32	Cs ₂ Se	1.59	2.18	2.32	2.18
CeAs ₂	0.07	1.40	1.26	1.04	Cs ₂ Se ₃	1.12	2.33	2.23	2.28
CeBr ₃	0.01	1.62	2.06	2.42	Cs ₂ Se ₅	1.54	2.68	2.67	2.44
CeCl ₃	0.01	1.71	2.27	2.84	Cs ₂ Te	0.05	0.71	0.57	0.77
CeF ₄	2.15	3.80	1.45	5.56	Cs ₂ Te ₃	0.55	1.30	2.08	1.62
CeO ₂	1.88	3.30	1.39	3.45	Cs ₃ As ₁₁	1.39	2.33	1.79	1.75
CF ₄	9.07	9.00	11.12	11.65	Cs ₃ As ₇	1.57	2.53	1.96	3.68
Cl ₂ O	1.15	1.32	1.63	2.62	Cs ₃ Bi	0.36	0.97	1.80	0.57
Cl ₂ O ₇	3.68	3.31	4.27	7.14	Cs ₃ P ₇	2.34	3.38	4.05	4.64
ClF	2.09	2.71	3.18	5.45	Cs ₃ Sb	1.10	1.82	1.95	1.49
ClF ₃	2.54	3.06	3.65	5.67	Cs ₄ Pb ₉	0.82	1.95	2.54	0.56
ClF ₅	3.12	3.52	4.26	6.64	Cs ₅ Sb ₈	0.58	1.26	2.06	1.86
ClO ₂	0.97	1.18	1.44	3.04	CsAu	1.99	3.51	2.88	1.29
ClO ₃	1.21	1.37	1.69	3.34	CsBi	0.25	0.85	1.68	0.67
CsBr	4.42	6.73	7.04	6.08	ErCl ₃	2.34	3.38	4.05	4.64
CsBr ₃	2.32	4.46	3.51	4.31	ErF ₃	1.10	1.82	1.95	1.49
CsCl	5.02	7.64	7.87	6.98	ErH ₃	0.82	1.95	2.54	0.56

CsF	5.28	8.98	9.00	9.02	ErI ₃	0.58	1.26	2.06	1.86
CsGa ₃	0.13	0.38	1.33	0	ErMg ₁₄₉	1.99	3.51	2.88	1.29
CsGe	1.20	1.87	1.80	1.21	ErN	0.25	0.85	1.68	0.67
CsH	2.59	3.66	4.32	12.82	ErS ₂	4.42	6.73	7.04	6.08
CsI	3.86	5.70	6.13	5.11	EuBr ₂	2.32	4.46	3.51	4.31
CsI ₃	2.02	3.71	2.85	3.58	EuCl ₂	1.52	2.87	2.12	3.41
CsI ₄	1.78	3.46	2.13	3.50	EuI ₂	1.23	2.46	2.08	2.39
CsIn ₃	0.17	0.37	1.35	0	EuMg ₁₄₉	0.02	1.45	0.26	0.77
CsN ₃	4.26	6.66	6.95	5.04	EuP ₇	0.39	1.69	1.32	6.21
CsP ₇	1.28	2.23	1.92	5.91	FeAs ₂	0.29	0.66	0.80	1.16
CsS	1.73	3.29	2.05	3.09	FeBr ₃	0.03	1.53	1.35	2.36
CsS ₃	1.68	3.23	1.90	2.87	FeCl ₃	0.43	2.13	1.98	2.95
CsSb	0.56	1.23	2.03	1.30	FeCl ₄	0.28	2.00	1.82	3.04
CsSe ₄	0.97	2.43	2.61	2.36	FeF ₂	1.74	4.23	4.21	5.09
CsSi	1.56	2.08	2.23	1.51	FeF ₃	3.07	5.36	3.68	5.77
CsSn	1.14	1.71	1.82	1.01	FeO	2.30	4.08	3.24	3.77
CsTe	1.01	1.79	2.11	2.10	FeP ₂	0.47	0.83	1.00	1.43
CsTe ₄	0.63	1.39	2.16	1.91	FeP ₄	0.90	1.20	1.45	2.01
Cu ₂ O	0.51	2.46	2.28	2.46	FeS ₂	0.98	1.84	1.94	1.92
Cu ₂ P ₇	0.91	1.14	1.39	5.47	FeSe ₂	0.40	1.30	1.31	1.45
CuBr	0.49	1.86	1.75	2.54	FeSi	0.17	0.10	0.38	0.40
CuI	1.46	2.27	2.46	2.69	FeSi ₂	0.70	0.56	0.94	0.75
CuP ₁₀	1.04	1.25	1.53	2.55	FeTe ₂	0.12	0.39	0.55	1.08
CuP ₂	0.96	1.19	1.45	1.73	Ga ₂ I ₃	2.25	3.12	2.53	2.42
Dy ₂ O ₃	3.94	4.72	4.29	4.12	Ga ₂ O ₃	2.04	3.90	3.49	2.91
Dy ₂ S ₃	0.59	1.88	1.83	1.56	Ga ₂ Ru	0.12	0.75	0.67	0
Dy ₂ Se ₃	0.57	1.86	1.79	1.36	Ga ₂ S ₃	2.03	2.83	2.61	1.95
Dy ₂ Te ₃	0.79	1.92	1.42	1.22	Ga ₂ Se ₃	1.68	2.51	2.67	1.62
Dy ₆ Se ₁₁	0.53	1.83	1.77	1.18	Ga ₂ Te ₃	1.01	1.32	1.50	1.10
DyBr ₃	3.01	3.83	3.36	3.86	Ga ₂ Te ₅	1.02	1.32	1.50	1.37
DyCl ₃	3.90	4.57	3.98	4.70	Ga ₃ Fe	0.58	0.53	0.76	0
DyF ₃	7.87	7.93	6.68	8.22	Ga ₃ Os	0.97	1.43	1.55	0
DyH ₃	0.01	1.35	1.16	3.46	Ga ₃ Ru	0.72	1.23	1.30	0
DyI ₃	2.18	3.09	1.65	2.97	Ga ₇ Te ₁₀	0.90	1.23	1.38	0.91
DyMg ₁₄₉	0.26	1.59	0.35	0.82	GaAs	0.18	0.77	0.71	0.92
DyN	0.21	1.76	2.14	2.36	GaBr ₂	3.11	4.19	4.59	3.63
Er ₂ O ₃	0.55	1.30	2.08	1.62	GaBr ₃	3.36	4.40	4.86	3.75
Er ₂ S ₃	1.39	2.33	1.79	1.75	GaCl ₂	4.03	5.19	5.76	4.47
Er ₂ Se ₃	1.57	2.53	1.96	3.68	GaCl ₃	4.28	5.39	6.02	4.56
Er ₂ Te ₃	0.36	0.97	1.80	0.57	GaF ₃	4.84	6.78	7.47	6.30
GaI ₂	2.38	3.22	2.94	2.81	H ₃ N	4.34	5.63	5.56	7.94
GaI ₃	2.39	3.22	2.95	2.84	H ₃ S	4.35	4.90	5.08	6.63
GaN	1.74	3.18	3.24	3.07	H ₄ C	7.64	8.40	8.49	8.17
GaP	1.68	2.00	2.29	1.99	HBr	4.94	6.16	6.10	9.30

GaS	2.01	2.81	2.62	2.44	HCl	5.97	7.57	7.39	10.95
GaSb	0.37	0.71	0.77	0.72	HF	6.72	9.56	9.03	14.42
GaSe	1.26	2.16	2.22	1.80	Hf ₃ N ₄	1.01	3.29	3.01	2.77
GaTe	0.90	1.22	1.38	1.37	HfBr ₄	4.29	6.23	6.36	4.90
Gd ₁₀ S ₁₉	0.34	1.71	1.72	1.22	HfCl ₄	4.18	6.39	6.46	5.28
Gd ₂ C ₁₃	0.09	1.74	2.22	2.68	HfF ₄	5.46	8.55	8.65	7.61
Gd ₂ O ₃	2.94	4.02	2.67	3.75	HfI ₄	2.31	4.00	3.25	3.39
Gd ₂ S ₃	0.46	1.79	1.77	1.55	HfMg ₁₄₉	0.14	0	0.29	1.00
Gd ₂ Se ₃	0.62	1.90	1.81	1.43	HfO ₂	4.07	6.62	6.63	4.85
Gd ₂ Te ₃	0.10	1.40	1.12	0.95	HfS ₂	1.23	2.89	2.76	2.29
GdBr ₃	1.52	2.87	2.12	3.41	HfS ₃	1.14	2.81	2.66	2.29
GdCl ₃	1.23	2.46	2.08	2.39	HfSe ₂	0.55	2.23	2.02	1.74
GdF ₃	0.02	1.45	0.26	0.77	HfSe ₃	0.61	2.28	2.08	1.84
GdH ₃	0.39	1.69	1.32	6.21	HgBr	2.46	3.31	2.75	3.13
GdP ₅	0.29	0.66	0.80	1.16	HgBr ₂	2.84	3.61	3.86	3.09
GdS ₂	0.03	1.53	1.35	2.36	HgCl	2.82	3.85	3.59	3.69
Ge ₃ F ₈	0.43	2.13	1.98	2.95	HgCl ₂	3.17	4.14	4.67	3.60
Ge ₃ N ₄	0.28	2.00	1.82	3.04	HgF	1.98	4.11	4.28	4.53
Ge ₃ Ru ₂	1.74	4.23	4.21	5.09	HgF ₂	1.17	3.45	3.43	4.00
Ge ₅ F ₁₂	3.07	5.36	3.68	5.77	HgI	1.89	2.44	2.80	2.38
Ge ₅ Ir ₄	2.30	4.08	3.24	3.77	HgI ₂	1.46	2.09	2.35	2.04
GeAs ₂	0.47	0.83	1.00	1.43	HgO	1.25	2.90	2.95	2.58
GeBr ₂	2.60	3.39	3.09	3.71	HgS ₄	1.05	1.64	1.84	1.88
GeBr ₄	3.08	3.77	4.35	4.11	HgSe	0.12	0.85	0.84	0.90
GeCl ₄	4.27	4.98	5.80	5.10	HI	4.08	4.75	4.89	7.66
GeF ₂	4.03	5.73	6.42	6.48	Ho ₁₃ Zn ₅₈	0.05	1.35	0.60	0
GeF ₄	5.68	7.06	8.14	7.39	Ho ₂ O ₃	3.96	4.73	4.37	4.09
GeH ₄	5.78	4.91	6.39	13.16	Ho ₂ S ₃	1.46	2.53	1.77	1.93
GeI ₂	2.07	2.58	2.85	2.94	Ho ₂ Se ₃	2.60	3.39	3.09	3.71
GeI ₄	2.00	2.51	2.90	3.11	Ho ₂ Te ₃	3.08	3.77	4.35	4.11
GeO ₂	3.26	4.51	4.68	4.20	Ho ₄ C ₇	4.27	4.98	5.80	5.10
GeS	1.24	1.79	2.02	2.20	HoBr ₃	4.03	5.73	6.42	6.48
GeS ₂	2.26	2.62	2.58	2.66	HoCl ₃	5.68	7.06	8.14	7.39
GeSe	0.44	1.11	1.16	1.51	HoF ₃	5.78	4.91	6.39	13.16
GeSe ₂	1.66	2.10	2.44	2.17	HoH ₃	2.07	2.58	2.85	2.94
GeTe	0.82	0.76	1.09	1.51	HoI ₃	2.00	2.51	2.90	3.11
H ₂ O	5.53	7.51	7.22	9.57	HoMg ₁₄₉	3.26	4.51	4.68	4.20
H ₂ S	4.37	4.93	5.11	6.76	HoN	1.24	1.79	2.02	2.20
H ₃ F ₂	7.91	10.84	10.27	14.15	I ₂ O ₅	2.26	2.62	2.58	2.66
IBr	0.44	1.11	1.16	1.51	K ₂ S ₅	1.95	3.49	2.69	3.53
ICl	1.86	2.05	2.61	3.27	K ₂ Se	2.09	3.60	3.18	3.53
ICl ₃	1.81	2.02	2.56	3.23	K ₂ Se ₃	0.65	2.05	2.63	2.42
IF ₅	4.68	5.25	6.41	6.47	K ₂ Se ₅	0.94	2.36	2.68	2.70
IF ₇	1.55	2.78	3.14	7.43	K ₂ Te	2.14	2.98	3.71	3.25

In ₂ Br ₃	2.13	3.46	2.87	2.48	K ₂ Te ₃	0.68	1.41	2.19	2.13
In ₂ O ₃	0.93	3.07	2.85	2.11	K ₃ As	0.11	0.92	1.67	1.61
In ₂ S ₃	0.83	1.92	1.84	1.19	K ₃ As ₁₁	1.47	2.38	1.73	2.23
In ₂ Se ₃	0.99	2.01	1.98	1.09	K ₃ As ₇	1.40	2.31	1.81	4.01
In ₂ Te ₅	0.85	1.25	1.36	1.09	K ₃ Bi	0.03	0.57	1.42	0.63
In ₃ Ru	0.25	0.91	0.83	0	K ₃ Bi	0.04	0.58	1.43	0.64
In ₄ Te ₃	0.20	0.72	0.68	0.37	K ₃ Ga ₁₃	0.06	0.27	1.23	0
In ₇ Cl ₉	2.19	3.76	3.01	4.38	K ₃ P ₁₁	1.93	2.90	3.05	2.69
In ₇ Te ₁₀	0.81	1.22	1.32	0.68	K ₃ Sb	0.39	1.01	1.83	1.37
InAs	0.31	0.93	0.87	0.81	K ₄₉ Tl ₁₀₈	0.05	0.63	1.46	0
InBr	1.62	3.05	3.06	2.67	K ₄ Sn ₉	1.12	1.66	1.87	0.95
InBr ₂	2.42	3.70	2.77	2.93	KAs	1.13	2.01	2.10	2.50
InBr ₃	2.76	3.97	3.84	3.10	KBi	0.41	0.98	1.82	1.08
InCl	2.19	3.75	3.01	3.36	KBr	4.52	6.79	7.10	7.01
InCl ₂	3.02	4.43	4.46	3.57	KCl	5.04	7.64	7.86	7.96
InCl ₃	3.03	4.44	4.48	3.57	KF	6.07	9.81	9.79	10.85
InF ₃	4.03	6.18	6.65	5.37	KF ₂	1.47	4.85	3.61	7.20
InI	1.74	2.77	2.88	2.33	KGa ₃	0.62	0.87	1.82	0.38
InI ₂	1.79	2.80	2.91	2.22	KGe	1.33	1.96	1.71	1.61
InI ₃	2.34	3.25	2.83	2.69	KH	3.54	4.64	5.28	17.07
InN	0.48	2.22	1.95	2.03	KI	4.04	5.87	6.29	6.01
InP	0.47	1.08	1.05	1.07	KN ₃	4.20	6.56	6.85	5.80
InS	1.55	2.50	2.59	1.90	KP	1.48	2.41	1.73	3.01
InSe	0.66	1.74	1.63	1.22	KP ₁₅	1.52	2.45	1.77	2.52
Ir ₂ S ₃	1.15	1.38	1.73	0.92	KPb	0.37	1.43	2.11	0.80
IrBr ₃	1.63	2.31	2.64	2.14	KrF ₂	2.85	6.34	4.07	8.08
IrCl ₃	1.94	2.83	3.17	2.56	KS	1.67	3.19	1.95	3.60
IrF ₃	1.17	3.17	3.22	3.42	KS ₃	1.80	3.33	2.24	3.50
IrF ₆	0.78	2.84	2.82	4.32	KSb	0.88	1.54	2.22	1.90
IrI ₃	1.40	1.70	2.08	1.70	KSb ₂	0.27	0.89	1.71	1.48
IrS ₂	0.56	0.89	1.12	1.04	KSe	0.98	2.40	2.64	2.84
IrSe ₂	0.07	0.42	0.57	0.70	KSi	1.26	1.71	1.66	1.65
K ₂ Ga ₃	0.28	0.50	1.46	0	KSn	0.73	1.24	2.09	1.03
K ₂ O	1.72	4.42	2.79	4.88	KTe	0.67	1.40	2.18	2.31
K ₂ O ₂	2.40	5.15	3.20	5.08	La ₁₀ S ₁₉	0.72	2.67	2.44	1.41
K ₂ P ₃	1.09	1.99	2.14	2.47	La ₁₀ Se ₁₉	0.57	2.48	2.25	1.16
K ₂ S	2.32	3.89	3.86	3.95	La ₂ I ₅	0.18	2.26	1.95	1.98
K ₂ S ₃	1.32	2.81	2.31	3.05	La ₂ O ₃	3.59	6.51	6.34	4.11
La ₂ S ₃	1.04	2.97	2.77	1.86	Lu ₂ Te ₃	0.59	1.78	1.33	1.24
La ₂ Se ₃	1.54	3.41	2.34	1.90	LuBr ₃	3.10	3.85	3.62	4.11
La ₂ Te ₃	1.00	2.24	2.23	1.41	LuCl ₃	3.85	4.48	4.25	4.92
La ₄ Pb ₃	0.05	1.68	1.48	0	LuF ₃	7.69	7.67	7.25	8.51
La ₇ Ru ₃	0.04	1.48	1.33	0	LuH ₃	0.11	1.44	1.17	3.82
LaAs	0.04	1.45	1.31	1.00	LuI ₃	2.18	3.07	1.80	3.15

LaBr ₂	0.59	3.05	2.70	2.73	LuMg ₁₄₉	0.33	1.63	0.36	0.93
LaBr ₃	2.93	5.28	5.07	3.94	LuN	0.38	1.88	2.20	2.64
LaCl ₃	3.67	6.24	6.13	4.73	Mg ₁₄₉ Ag	0.57	0.86	1.38	0
LaF ₃	6.02	9.49	9.45	7.53	Mg ₁₄₉ Al	0.50	0.22	0.97	0
LaI ₃	2.07	4.07	2.70	3.02	Mg ₁₄₉ Au	0.56	1.81	2.01	0.14
LaN	1.15	3.68	3.26	3.04	Mg ₁₄₉ Be	0.53	0.17	0.96	0.52
LaP ₂	0.63	2.03	1.93	1.55	Mg ₁₄₉ Bi	0.29	0.74	1.18	0.62
LaP ₅	0.11	1.53	1.39	1.82	Mg ₁₄₉ Br	0.00	1.85	1.86	3.26
LaP ₇	0.87	2.26	2.19	6.37	Mg ₁₄₉ Cd	0.57	0.44	1.13	0.40
LaS ₂	0.66	2.61	2.38	1.87	Mg ₁₄₉ Cl	0.12	2.23	2.19	3.91
LaSe ₂	0.28	2.21	1.95	1.48	Mg ₁₄₉ Cr	0.02	0	0.53	0
LaTe ₂	0.11	1.40	1.30	1.15	Mg ₁₄₉ Fe	0.08	0.20	0.76	0
Li ₂ O	4.99	7.80	7.93	8.07	Mg ₁₄₉ Ga	0.48	0.57	1.16	0
Li ₂ O ₂	2.02	4.60	2.64	5.53	Mg ₁₄₉ H	0.04	0.78	1.11	0
Li ₂ S	3.54	5.03	5.51	5.42	Mg ₁₄₉ Hg	0.57	0.98	1.45	0.74
Li ₂ Se	3.11	4.53	5.03	4.80	Mg ₁₄₉ I	0.00	1.43	1.55	2.60
Li ₂ Te	2.52	3.20	3.94	4.00	Mg ₁₄₉ In	0.53	0.56	1.18	0
Li ₃ As	0.64	1.30	2.06	2.34	Mg ₁₄₉ Mn	0.11	0	0.50	0
Li ₃ Bi	0.38	0.76	1.62	1.12	Mg ₁₄₉ Mo	0.15	0.82	1.18	0
Li ₃ N	1.00	2.95	3.30	4.56	Mg ₁₄₉ Nb	0.12	0	0.56	0
Li ₃ P	0.92	1.61	2.36	2.83	Mg ₁₄₉ Ni	0.02	0.28	0.78	0
Li ₃ P ₇	1.79	2.56	2.44	5.31	Mg ₁₄₉ P	0.00	0.72	1.06	1.62
Li ₃ Sb	0.81	1.27	2.10	1.98	Mg ₁₄₉ Pb	0.38	1.32	1.60	0.43
LiAs	0.36	0.99	1.76	2.35	Mg ₁₄₉ Pd	0.01	0.75	1.08	0
LiB ₃	0.09	0.48	1.34	1.05	Mg ₁₄₉ Pt	0.02	0.88	1.17	0
LiBr	4.94	7.09	7.37	8.16	Mg ₁₄₉ Re	0.11	0.36	0.87	0
LiCl	5.93	8.43	8.62	9.58	Mg ₁₄₉ Rh	0.04	0.91	1.20	0
LiF	8.72	12.53	12.40	14.21	Mg ₁₄₉ Ru	0.07	0.80	1.13	0
LiH	3.18	4.07	4.73	16.20	Mg ₁₄₉ S	0.16	1.47	1.63	2.16
LiI	4.38	6.06	6.48	6.99	Mg ₁₄₉ Sb	0.27	0.76	1.19	1.10
LiN ₃	3.66	5.83	6.12	6.27	Mg ₁₄₉ Sc	0.25	0	0.45	0
LiP	0.85	1.55	2.29	3.00	Mg ₁₄₉ Se	0.17	1.44	1.61	1.91
LiP ₇	1.66	2.41	2.02	8.00	Mg ₁₄₉ Si	0.34	0.59	1.11	0.64
LiS ₄	2.16	3.55	3.19	4.35	Mg ₁₄₉ Sn	0.42	0.76	1.25	0.43
Lu ₂ O ₃	4.03	4.73	4.65	4.39	Mg ₁₄₉ Ta	0.15	0	0.49	0
Lu ₂ S ₃	2.66	3.40	2.99	2.67	Mg ₁₄₉ Tc	0.10	0.34	0.85	0
Lu ₂ Se ₃	1.36	2.44	2.04	1.85	Mg ₁₄₉ Te	0.15	0.73	1.12	1.58
Mg ₁₄₉ Ti	0.20	0	0.58	0	MoF ₆	4.17	5.92	6.40	5.50
Mg ₁₄₉ Tl	0.49	0.97	1.41	0	MoI ₂	1.68	2.02	2.41	1.64
Mg ₁₄₉ V	0.08	0	0.55	0	MoO ₂	0.47	1.99	1.97	1.66
Mg ₁₄₉ Zn	0.58	0.37	1.09	0.50	MoO ₃	1.65	3.04	3.20	2.23
Mg ₁₄₉ Zr	0.03	0	0.19	0	MoS ₂	1.46	1.71	2.11	1.34
Mg ₂ Ge	0.25	0.68	1.13	0.73	MoSe ₂	1.59	1.78	2.21	1.25
Mg ₂ Si	0.29	0.54	1.06	0.84	N ₂ O	6.24	5.53	7.08	7.63

Mg ₃ As ₂	1.43	2.13	2.29	2.35	N ₂ O ₅	0.69	1.09	1.27	4.09
Mg ₃ N ₂	1.51	3.46	3.11	4.20	Na ₂ O	2.04	4.66	2.57	5.84
Mg ₃ P ₂	1.61	2.33	2.12	2.72	Na ₂ O ₂	1.77	4.37	2.85	5.42
Mg ₃ Sb ₂	0.16	0.65	1.07	1.17	Na ₂ S	2.44	3.90	4.12	4.62
MgAs ₄	0.84	1.54	1.92	2.61	Na ₂ S ₅	1.80	3.21	2.10	4.01
MgB ₄	0.37	0.84	1.28	1.45	Na ₂ Se	2.28	3.69	3.65	4.21
MgB ₇	1.46	1.94	2.11	7.14	Na ₂ Te	2.28	3.00	3.75	3.86
MgBr ₂	4.46	6.30	6.53	6.61	Na ₃ As	0.06	0.73	1.51	1.95
MgCl ₂	5.67	7.78	8.01	7.97	Na ₃ As ₇	1.42	2.20	1.90	4.61
MgF ₂	6.83	9.99	10.08	10.90	Na ₃ P	0.40	1.12	1.87	2.49
MgH ₂	3.90	4.63	5.15	12.31	Na ₃ P ₁₁	1.97	2.80	3.05	3.20
MgI ₂	3.68	5.10	5.39	5.44	Na ₃ Sb	0.39	0.88	1.72	1.71
MgO	4.64	7.11	7.22	7.30	NaAs	0.58	1.29	2.05	2.54
MgP ₄	0.67	1.39	1.75	2.79	NaBr	4.09	6.22	6.54	7.53
MgS	2.96	4.27	4.57	4.65	NaCl	5.15	7.64	7.85	9.01
MgS ₂	1.13	2.44	2.65	3.21	NaCl ₃	2.71	5.01	4.36	6.68
MgSe	2.55	3.81	4.09	4.08	NaCl ₇	0.52	2.65	3.01	6.25
MgTe	2.36	2.94	3.43	3.62	NaF	6.10	9.74	9.70	12.15
Mn ₂ O ₃	0.08	2.67	2.19	2.67	NaGe	1.12	1.60	2.04	1.79
Mn ₃ O ₄	0.84	3.33	2.99	2.98	NaH	4.07	5.09	5.72	19.87
Mn ₄ Si ₇	0.80	1.20	1.34	0.40	NaI	3.57	5.24	5.68	6.38
MnBr ₂	1.61	3.41	3.17	3.54	NaMg ₁₄₉	0.55	0	1.10	0.22
MnCl ₂	1.80	3.82	3.18	4.10	NaN ₃	4.09	6.33	6.62	6.55
MnF ₂	2.54	5.43	3.27	6.24	NaP	0.89	1.64	2.38	3.06
MnF ₃	0.51	3.67	3.21	5.19	NaP ₇	1.74	2.56	2.34	7.92
MnF ₄	0.20	3.40	2.88	5.16	NaS	1.26	2.63	2.49	3.84
MnI ₂	1.18	2.65	2.53	2.78	NaS ₂	2.04	3.47	2.86	4.23
MnN	0.09	2.20	1.79	2.65	NaSb	0.65	1.15	1.98	2.10
MnO	0.20	2.77	2.32	2.91	NaSe	0.49	1.76	2.35	2.96
MnO ₂	1.17	3.62	3.34	3.47	NaSe ₂	1.21	2.53	2.51	3.41
MnP ₄	0.52	1.41	1.35	2.05	NaSi	1.42	1.75	1.64	2.10
Mo ₈ O ₂₃	0.91	2.38	2.43	0.98	NaSn	0.53	0.88	1.77	1.17
MoBr ₂	2.12	2.83	3.19	2.17	NaTe ₃	0.70	1.29	2.09	2.77
MoCl ₂	2.47	3.40	3.12	2.61	Nb ₂ F ₅	0.16	3.17	2.79	3.81
MoCl ₆	1.08	2.17	2.31	3.16	Nb ₂ O ₅	1.67	3.90	3.66	2.88
MoF ₃	3.64	5.46	5.14	4.22	Nb ₂ Se ₉	0.80	1.95	1.97	2.63
Nb ₃ Br ₈	0.06	1.84	1.62	3.80	P ₂ O ₅	5.20	5.74	6.89	5.77
Nb ₃ Cl ₇	0.98	2.92	2.79	3.10	P ₂ Os	0.86	0.62	1.04	0.20
Nb ₃ Cl ₈	0.15	2.18	1.92	4.26	P ₂ Pd	0.41	0.26	0.57	0
Nb ₃ I ₈	0.08	1.45	1.33	3.38	P ₂ Pt	1.13	0.96	1.41	0.47
NbBr ₄	0.87	2.57	2.47	2.60	P ₂ Rh	0.54	0.49	0.80	0
NbBr ₅	1.56	3.19	3.19	3.13	P ₂ Ru	0.52	0.35	0.68	0
NbCl ₄	1.08	3.01	2.90	3.06	P ₂ S ₅	2.58	2.55	3.23	3.23
NbCl ₅	2.22	4.04	2.79	3.79	P ₂ S ₇	2.04	2.12	2.67	4.88

NbF ₅	4.58	7.17	7.42	6.29	P ₃ Ir	0.09	0.01	0.24	0
NbI ₄	0.49	1.82	1.75	1.99	P ₃ N ₅	3.56	3.94	4.75	4.50
NbI ₅	0.99	2.28	2.28	2.43	P ₃ Ru	1.03	0.76	1.22	0
NbO ₂	0.30	2.66	2.37	2.30	P ₄ Os	1.30	0.98	1.51	0.17
NCl ₃	2.16	1.92	2.52	5.38	P ₄ Ru	1.12	0.84	1.32	0
Nd ₁₀ S ₁₉	0.50	1.80	1.79	1.33	P ₄ S ₃	2.87	2.78	3.54	2.83
Nd ₁₀ Se ₁₉	0.28	1.62	1.69	1.06	P ₄ S ₇	2.78	2.71	3.45	4.19
Nd ₂ O ₃	3.71	4.64	3.65	4.17	P ₄ S ₉	2.72	2.66	3.39	3.96
Nd ₂ S ₃	0.76	2.00	1.87	1.73	P ₇ Pb	0.89	0.84	1.21	0.28
Nd ₂ Se ₃	1.43	2.50	1.43	1.85	PaBr ₄	0.19	2.75	1.71	3.63
Nd ₂ Te ₃	0.02	1.30	1.15	0.95	PaBr ₅	1.96	4.12	1.21	4.86
NdBr ₃	2.92	3.81	2.83	3.95	PaCl ₄	0.16	2.96	1.91	4.14
NdCl ₃	4.30	4.96	3.53	5.06	PaCl ₅	2.42	4.71	0.96	5.65
NdF ₃	7.81	8.07	5.44	8.43	Pb ₃ O ₄	1.15	2.30	2.50	1.57
NdH ₃	0.08	1.36	1.27	3.21	PbBr ₂	2.73	2.97	3.18	2.53
NdI ₃	2.02	3.00	0.99	3.00	PbCl ₂	3.37	3.74	4.53	3.10
NdMg ₁₄₉	0.19	1.47	0.37	0.65	PbCl ₄	2.15	2.76	3.25	2.83
NdN	0.43	1.93	2.25	2.60	PbF ₂	4.44	5.57	6.51	4.71
NdO ₂	3.51	4.49	3.59	4.37	PbF ₃	2.09	3.67	4.05	3.78
NdP ₅	0.06	1.35	1.25	1.82	PbF ₄	2.00	3.60	3.95	3.93
NdS ₂	0.49	1.79	1.79	1.79	PbI ₂	2.41	2.31	2.83	2.05
NF ₂	1.90	2.71	3.10	7.22	PbO	1.54	2.61	2.91	2.28
Ni ₃ O ₄	0.40	2.34	2.15	2.34	PbO ₂	0.01	1.38	1.31	1.57
NiBr ₂	0.48	1.81	1.73	2.54	PBr ₃	3.35	3.67	4.44	4.80
NiF ₂	4.91	6.73	7.44	6.85	PBr ₅	1.64	2.30	2.65	4.35
NiO	2.41	4.02	3.21	3.92	PBr ₇	1.24	1.98	2.24	6.05
NiS ₂	0.19	1.07	1.03	1.58	PbS	0.99	1.06	1.43	1.24
NO ₂	2.86	2.83	3.55	5.42	PbS ₂	0.81	0.91	1.24	1.15
NpCl ₃	0.01	2.42	2.02	4.55	PbSe	0.91	0.95	1.31	1.05
NpF ₆	1.15	3.69	3.26	8.18	PCl ₃	4.08	4.50	5.42	5.67
OF ₂	2.13	2.54	2.92	7.46	PCl ₅	1.79	2.68	3.03	4.91
OsF ₅	0.72	2.79	2.75	3.73	PdBr ₂	0.94	1.73	1.92	1.92
OsO ₄	3.30	4.36	4.59	3.16	PdCl ₂	1.43	2.39	2.64	2.45
OsSe ₂	0.58	0.85	1.11	0.91	PdF ₄	0.79	2.84	2.82	3.68
P ₂ Ir	0.78	0.56	0.96	0.17	PdI ₂	0.96	1.33	1.62	1.56
PdS	0.01	0.43	0.54	0.81	PtI ₄	0.69	0.99	1.26	1.67
PdS ₂	0.65	0.97	1.22	1.19	PtO ₂	0.66	1.99	2.04	1.89
PdSe ₂	0.01	0.39	0.51	0.77	PtS	0.47	0.70	0.94	0.99
PF ₅	7.11	7.87	9.45	9.60	PtS ₂	1.44	1.51	1.96	1.46
PI ₂	2.06	2.24	2.78	3.47	PtSe ₂	0.67	0.82	1.12	0.99
PI ₃	2.36	2.48	2.74	3.70	PuF ₃	0.00	2.48	2.96	6.99
Pm ₂ O ₃	3.78	4.57	3.81	4.25	Rb ₂ As ₃	0.64	1.49	2.23	1.74
Pm ₂ S ₃	2.57	3.28	2.49	2.62	Rb ₂ O	0.48	3.09	3.38	3.61
Pm ₂ Se ₃	0.50	1.68	1.79	1.44	Rb ₂ O ₂	1.84	4.55	2.67	4.34

PmBr ₃	2.89	3.67	2.86	3.98	Rb ₂ P ₃	1.07	1.96	2.17	2.19
PmCl ₃	3.54	4.26	3.44	4.73	Rb ₂ S	1.99	3.54	2.83	3.39
PmF ₃	5.10	5.87	4.81	7.16	Rb ₂ S ₃	1.36	2.85	2.27	2.77
PmI ₃	2.07	2.93	1.19	3.07	Rb ₂ S ₅	1.98	3.52	2.78	3.22
PmMg ₁₄₉	0.20	1.37	0.39	0.63	Rb ₂ Se	1.82	3.31	2.31	3.03
PmS ₂	0.46	1.67	1.80	1.80	Rb ₂ Se ₃	0.69	2.09	2.67	2.18
Pr ₁₀ S ₁₉	0.51	1.83	1.79	1.25	Rb ₂ Se ₅	0.84	2.25	2.78	2.37
Pr ₁₀ Se ₁₉	0.31	1.67	1.70	0.99	Rb ₂ Te	1.89	2.72	3.03	2.79
Pr ₁₃ Zn ₅₈	0.16	1.38	0.72	0	Rb ₂ Te ₃	0.74	1.47	2.24	1.91
Pr ₂ Br ₅	0.29	1.81	2.12	2.43	Rb ₂ Te ₅	0.40	1.10	1.89	1.85
Pr ₂ I ₅	0.13	1.57	1.77	1.87	Rb ₃ As ₁₁	1.47	2.38	1.73	1.98
Pr ₂ O ₃	3.66	4.64	3.51	4.00	Rb ₃ As ₇	1.46	2.37	1.75	3.81
Pr ₂ S ₃	0.78	2.04	1.85	1.65	Rb ₃ P ₁₁	1.93	2.90	3.05	2.40
Pr ₂ Se ₃	1.43	2.53	1.37	1.76	Rb ₃ Sb	0.09	0.69	1.51	0.96
Pr ₂ Te ₃	0.88	1.98	1.38	1.27	Rb ₄ Pb ₉	0.30	1.35	2.03	0.46
Pr ₄ Ge ₃	0.15	1.40	1.09	0	RbAs	1.05	1.92	2.18	2.20
PrBr ₃	3.43	4.24	2.95	4.06	RbAu	0.72	2.11	2.69	0.57
PrCl ₃	4.35	5.04	3.40	4.91	RbBi	0.38	0.95	1.79	0.89
PrF ₃	7.60	7.97	5.11	8.08	RbBr	4.37	6.64	6.95	6.42
PrH ₃	0.29	1.54	1.33	3.47	RbCl	5.02	7.60	7.83	7.40
PrI ₃	1.96	2.98	0.77	2.85	RbF	5.65	9.36	9.36	9.83
PrMg ₁₄₉	0.18	1.46	0.37	0.63	RbF ₃	2.11	5.54	2.94	7.00
PrN	0.41	1.94	2.24	2.48	RbGa ₃	0.62	0.87	1.82	0.27
PrP ₅	0.04	1.35	1.25	1.73	RbGe	0.92	1.52	2.14	1.16
PrS ₂	0.49	1.82	1.78	1.70	RbH	3.20	4.28	4.93	15.62
PrSe ₂	0.00	1.43	1.62	1.26	RbI	3.95	5.77	6.20	5.51
PSe	2.25	2.24	2.74	3.10	RbI ₃	1.96	3.62	2.66	3.84
Pt ₃ I ₈	0.80	1.08	1.37	4.24	RbMg ₁₄₉	0.02	0	0.67	0
PtBr ₃	0.94	1.61	1.83	1.93	RbN ₃	4.20	6.56	6.85	5.36
PtCl ₂	1.83	2.61	2.97	2.52	RbP ₁₅	1.51	2.44	1.71	2.24
PtCl ₃	1.07	1.98	2.17	2.29	RbPb	0.41	1.46	2.14	0.68
PtF ₄	1.29	3.15	3.27	3.74	RbS	1.58	3.09	2.04	3.23
PtI ₂	1.25	1.46	1.84	1.60	RbSb	0.69	1.34	2.14	1.55
PtI ₃	0.42	0.77	0.97	1.37	RbSb ₂	0.31	0.93	1.75	1.31
RbSe	0.92	2.34	2.69	2.53	SbF ₃	4.54	6.05	6.91	6.57
RbSi	1.35	1.81	1.57	1.52	SbF ₄	3.44	5.17	4.63	6.18
RbSn	0.74	1.25	2.11	0.88	SbF ₅	3.68	5.36	5.38	6.59
RbTe	0.61	1.33	2.11	2.02	SbI ₃	2.21	2.61	2.75	2.98
Re ₂ O ₇	2.68	4.29	2.94	4.67	SbO ₂	1.90	3.34	3.58	3.44
Re ₂ P ₅	0.49	0.68	0.95	1.06	SBr	2.31	2.26	2.95	3.97
Re ₂ Te ₅	0.61	0.64	0.98	0.87	Sc ₂ Ni	0.01	0.45	0.72	0
Re ₃ Br ₇	0.36	1.67	1.62	2.06	Sc ₂ O ₃	3.81	6.25	6.30	4.39
Re ₄ Si ₇	0.03	0	0.16	0	Sc ₂ Pd	0.01	0.92	1.03	0
ReCl ₃	0.97	2.46	2.47	2.46	Sc ₂ S ₃	1.07	2.48	2.53	1.98

ReF ₇	2.00	4.34	4.20	6.30	Sc ₂ Se ₃	0.66	2.05	2.07	1.57
ReI ₃	0.96	1.78	1.93	1.73	Sc ₂ Te ₃	0.04	0.78	0.95	1.03
ReP ₄	0.76	0.92	1.23	1.51	Sc ₄ C ₃	0.47	1.87	1.87	1.08
ReS ₂	1.45	2.10	2.36	1.59	Sc ₅₇ Pt ₁₃	0.10	1.12	1.20	0
ReSe ₂	1.24	1.87	2.11	1.35	Sc ₅₇ Ru ₁₃	0.02	0.92	1.03	0
Rh ₂ S ₃	0.19	0.45	0.65	0.60	ScBr ₃	2.25	4.13	2.68	3.80
RhBr ₃	1.31	1.93	2.22	2.08	ScCl ₃	3.88	5.95	6.08	5.07
RhCl ₃	1.56	2.40	2.69	2.48	ScF ₃	6.11	9.10	9.27	7.90
RhF ₃	0.89	2.83	2.85	3.40	ScI ₃	1.70	3.20	2.56	3.00
RhF ₆	0.88	2.82	2.84	4.48	SCl	2.89	2.98	3.20	4.80
RhI ₃	1.06	1.30	1.64	1.62	SCl ₄	2.62	2.76	3.40	4.67
RuF ₄	0.19	2.34	2.19	3.22	ScN	0.33	2.40	2.23	2.69
RuO ₄	2.43	3.61	3.50	2.84	Se ₂ O ₅	3.02	3.47	3.36	3.93
RuS ₂	0.68	0.98	1.25	1.09	SeBr ₄	2.21	2.22	2.88	3.70
RuSe ₂	0.48	0.76	1.00	0.87	SeCl ₄	3.04	3.14	3.70	4.51
S ₇ N	0.65	1.05	1.29	2.23	SeF ₄	4.14	4.98	5.97	6.61
S ₈ O	2.42	2.95	3.57	3.55	SeO ₂	3.36	3.73	4.40	4.20
Sb ₂ F ₇	3.83	5.48	5.85	7.19	SeS ₇	1.90	1.46	2.15	7.31
Sb ₂ Ir	0.45	0.55	0.76	0	SF ₄	4.88	5.53	6.71	7.51
Sb ₂ O ₃	2.23	3.60	3.54	3.22	SF ₆	5.91	6.35	7.79	9.17
Sb ₂ O ₅	0.79	2.45	2.42	2.86	Si ₂ Os	0.65	1.00	1.13	0
Sb ₂ Os	0.40	0.52	0.71	0	Si ₂ Ru	0.48	0.86	0.95	0
Sb ₂ Rh	0.00	0.32	0.38	0	Si ₃ N ₄	4.26	5.03	5.78	4.20
Sb ₂ Ru	0.09	0.26	0.38	0	Si ₃ Os ₂	0.86	1.17	1.34	0
Sb ₂ S ₃	1.31	1.78	2.06	1.78	Si ₃ Ru ₂	0.55	0.92	1.02	0
Sb ₂ Se ₃	0.86	1.38	1.55	1.38	Si ₅ Ir ₃	0.93	1.23	1.43	0
Sb ₂ Te ₃	0.16	0.17	0.35	0.83	Si ₇ Tc ₄	1.07	0.86	1.25	0.89
Sb ₃ Ir	0.53	0.61	0.84	0	SiAs	1.48	1.64	1.98	2.05
Sb ₃ Rh	0.23	0.49	0.61	0	SiAs ₂	0.90	1.17	1.36	1.67
Sb ₇ F ₂₉	3.60	5.30	5.11	4.94	SiB ₃	1.49	1.43	1.84	1.38
SbBr ₃	3.45	3.99	4.70	4.07	SiBr ₄	4.11	4.81	5.54	4.89
SbCl ₃	3.75	4.48	5.22	4.62	SiC	2.04	2.62	2.65	2.51
SbCl ₅	1.84	2.95	3.22	4.14	SiCl ₄	5.79	6.41	7.51	6.17
SiF ₄	7.94	9.08	10.62	8.95	SO ₃	5.14	5.11	6.42	5.48
SiH ₈	7.35	6.39	8.14	10.39	Sr ₂ Ge	0.37	1.46	1.64	0.72
SiI ₃	2.96	3.50	4.02	3.66	Sr ₂ Pb	0.04	1.61	1.62	0.34
SiI ₄	2.86	3.42	3.92	3.74	Sr ₂ Sb ₃	0.13	1.28	1.42	1.16
SiO ₂	5.85	6.79	7.87	5.81	Sr ₂ Si	0.34	1.26	1.49	0.77
SiP	1.82	1.92	2.34	2.46	Sr ₂ Sn	0.15	1.16	1.35	0.39
SiP ₂	1.49	1.66	1.99	2.17	Sr ₃ As ₄	0.68	2.03	2.13	1.83
SiRu	0.25	0.68	0.71	0.18	Sr ₃ P ₁₄	1.82	3.18	2.57	2.33
SiS ₂	3.14	3.54	4.13	3.31	Sr ₃ P ₂	0.14	1.50	1.58	1.73
SiSe ₂	2.18	2.73	2.51	2.60	Sr ₃ P ₄	0.89	2.25	2.36	2.18
Sm ₂ O ₃	3.88	4.74	3.92	4.11	Sr ₄ As ₃	0.59	1.93	2.03	1.70

Sm ₂ S ₃	0.74	1.99	1.88	1.64	SrAs	0.02	1.37	1.44	1.61
Sm ₂ Se ₃	0.51	1.80	1.76	1.34	SrB ₆	0.04	1.17	1.31	4.26
Sm ₂ Te ₃	0.92	2.00	1.44	1.29	SrBr ₂	4.47	6.90	6.92	6.21
SmBr ₃	2.93	3.80	3.01	3.83	SrCl ₂	5.23	7.92	7.92	7.21
SmCl ₃	3.59	4.39	3.52	4.56	SrF ₂	6.78	10.48	10.40	10.21
SmF ₃	7.86	8.05	5.94	8.24	SrGe ₂	0.40	1.49	1.66	0.92
SmH ₃	0.13	1.42	1.26	3.42	SrH ₂	3.24	4.61	4.83	9.31
SmI ₃	2.12	3.07	1.33	2.94	SrI ₂	3.80	5.83	5.90	5.17
SmMg ₁₄₉	0.21	1.51	0.36	0.71	SrN ₆	3.67	6.20	6.16	6.53
SmN	0.02	1.62	2.10	2.25	SrO	3.45	6.49	6.35	6.03
SmP ₅	0.06	1.37	1.22	1.77	SrO ₂	2.91	5.95	4.66	5.31
SmS ₂	0.54	1.84	1.81	1.73	SrP	0.75	2.11	2.21	2.36
Sn ₃ F ₈	3.22	5.17	4.03	8.80	SrP ₂	0.81	2.17	2.28	2.35
Sn ₃ N ₄	0.47	1.87	1.76	1.93	SrP ₃	0.38	1.74	1.83	2.18
Sn ₅ O ₆	1.77	3.39	3.53	2.76	SrS	2.56	4.48	4.48	4.07
SnBr ₂	2.20	3.16	2.98	3.08	SrS ₃	1.29	3.21	2.48	3.07
SnBr ₄	2.71	3.57	3.50	3.50	SrSe	2.29	4.17	3.67	3.63
SnCl ₂	3.11	4.14	4.53	3.91	SrTe	2.04	3.27	3.36	3.16
SnCl ₄	3.69	4.60	5.25	4.31	Ta ₂ O ₅	2.29	4.64	2.91	3.41
SnF ₂	3.27	5.21	4.20	5.44	Ta ₃ Br ₇	1.27	3.12	2.99	3.11
SnF ₃	2.92	4.93	3.29	5.28	Ta ₃ I ₇	0.89	2.37	2.28	2.43
SnF ₄	3.20	5.15	3.97	5.55	Ta ₃ N ₅	1.26	3.21	3.06	2.62
SnI ₂	1.83	2.48	2.79	2.46	TaBr ₅	2.03	3.81	2.67	3.58
SnI ₄	2.03	2.63	2.85	2.75	TaCl ₅	2.82	4.77	4.12	4.34
SnO	0.63	2.48	2.34	2.49	TaF ₅	5.56	8.22	8.54	7.16
SnO ₂	1.41	3.10	3.16	2.87	TaI ₅	1.17	2.63	2.58	2.70
SnS	1.11	1.79	1.95	1.83	Tb ₂ Cl ₃	0.87	2.27	2.57	3.06
SnS ₂	1.56	2.15	2.42	2.00	Tb ₂ O ₃	3.91	4.69	4.21	4.20
SnSe	0.82	1.51	1.61	1.49	Tb ₂ S ₃	0.58	1.84	1.83	1.60
SnSe ₂	0.80	1.50	1.59	1.47	Tb ₂ Se ₃	0.55	1.80	1.79	1.39
SnTe	0.66	0.73	0.97	1.18	Tb ₂ Te ₃	0.79	1.88	1.43	1.27
SO ₂	3.20	3.57	3.89	4.47	Tb ₈ Se ₁₅	0.32	1.63	1.69	1.03
TbBr ₃	2.86	3.69	3.03	3.86	ThBr ₄	2.95	4.58	2.49	5.36
TbCl ₃	4.65	5.11	4.24	5.16	ThCl ₄	3.75	5.30	2.91	6.37
TbF ₃	7.95	7.99	6.56	8.40	ThF ₄	6.54	7.87	4.38	10.06
TbH ₃	0.00	1.30	1.18	3.37	ThI ₄	1.85	3.61	0.82	4.09
TbI ₃	2.10	3.00	1.41	2.99	ThMg ₁₄₉	0.02	0.86	0.15	1.00
TbMg ₁₄₉	0.25	1.54	0.36	0.78	ThO ₂	4.46	5.98	3.36	6.31
TbN	0.19	1.71	2.14	2.41	ThS ₂	1.03	2.95	1.70	2.94
TbS ₂	0.48	1.76	1.79	1.75	ThSe ₂	0.65	2.64	1.58	2.46
Tc ₂ O ₇	2.67	4.29	2.94	4.67	ThSe ₃	1.50	3.30	1.36	3.01
Tc ₂ Te ₅	0.53	0.58	0.89	0.83	ThTe ₃	1.09	2.87	1.21	2.47
TcBr ₃	0.08	1.43	1.33	1.75	Ti ₂ Sn	0.05	0.38	0.62	0
TcCl ₃	0.68	2.20	2.16	2.33	TiBr ₃	0.02	1.82	1.64	2.37

TcCl ₄	0.78	2.30	2.27	2.53	TiBr ₄	2.84	4.43	4.35	3.85
TcF ₄	1.30	3.74	3.68	4.02	TiCl ₃	0.03	2.10	1.86	2.79
TcP ₃	0.39	0.60	0.84	1.11	TiCl ₄	3.47	5.28	5.46	4.55
TcP ₄	0.85	1.00	1.32	1.55	TiF ₄	4.17	6.93	7.05	6.45
TcS ₂	1.18	1.87	2.08	1.48	TiI ₃	0.20	1.58	1.52	1.98
Te ₂ Br	0.77	1.77	1.84	2.53	TiI ₄	1.11	2.42	2.47	2.55
Te ₂ I	0.66	1.29	1.41	1.96	TiO ₂	2.69	4.91	3.38	3.79
Te ₂ Mo	1.86	1.53	2.14	1.61	TiS ₃	0.23	1.50	1.47	1.67
Te ₂ O ₅	1.70	3.08	3.31	3.46	Tl ₂ Cl ₃	1.77	2.92	3.16	1.99
Te ₂ Os	0.52	0.53	0.79	0	Tl ₂ O	0.57	2.28	2.20	1.36
Te ₂ Ru	0.32	0.37	0.57	0	Tl ₂ O ₃	0.03	1.84	1.63	1.19
Te ₃ As ₂	0.58	0.54	0.83	0.91	Tl ₂ S	0.90	1.46	1.64	0.80
Te ₄ Mo ₃	0.01	0.06	0.21	0	Tl ₂ S ₅	1.70	2.11	2.48	1.37
TeBr ₄	2.52	3.16	2.79	3.97	Tl ₂ Te	0.65	0.55	0.88	0.37
TeCl ₄	3.11	3.87	4.39	4.68	Tl ₄ O ₃	1.20	2.79	2.85	1.40
TeF ₄	4.02	5.53	6.31	6.77	TlBr	2.35	3.14	2.91	2.48
TeF ₆	4.40	5.83	6.70	7.88	TlBr ₂	1.81	2.70	2.99	2.05
TeI	0.73	1.35	1.49	2.31	TlCl	2.60	3.59	2.86	2.91
TeI ₄	1.76	2.17	2.57	3.10	TlCl ₂	2.31	3.36	3.15	2.56
TeO ₂	2.24	3.51	3.59	3.80	TlCl ₃	2.35	3.38	3.12	2.61
TeO ₃	2.16	3.45	3.67	3.83	TlF	3.26	5.08	4.08	4.40
TePb	1.06	1.14	1.48	0.88	TlF ₃	1.27	3.46	3.49	3.33
TeSe	0.95	1.37	1.60	1.89	TlI	2.44	2.81	2.86	2.18
TeSe ₂	0.90	1.33	1.54	1.86	TlI ₃	1.85	2.34	2.72	1.79
Th ₂ S ₅	2.12	3.79	0.97	3.51	TlP ₅	1.42	1.32	1.78	2.10
Th ₂ Se ₅	1.34	3.18	1.66	2.82	TlSe	0.36	0.98	1.04	0.69
Th ₃ As ₄	0.28	2.26	1.12	1.62	Tm ₁₀ S ₁₉	0.53	1.83	1.80	1.27
Th ₃ Bi ₄	0.21	2.18	0.93	0.68	Tm ₂ O ₃	3.99	4.72	4.51	4.23
Th ₃ N ₄	1.67	3.62	1.55	4.05	Tm ₂ S ₃	2.27	3.12	2.07	2.39
Th ₃ P ₄	0.27	2.25	1.12	1.86	Tm ₂ Se ₃	1.37	2.44	1.96	1.77
Th ₃ Sb ₄	0.17	2.15	0.96	1.14	Tm ₂ Te ₃	0.58	1.76	1.33	1.17
TmBr ₃	2.99	3.78	3.49	3.93	XeF ₆	2.79	3.80	4.11	6.92
TmCl ₃	5.02	5.36	4.76	5.35	Y ₂ Br ₃	0.70	2.91	2.69	2.84
TmF ₃	5.51	6.10	5.87	7.20	Y ₂ Cl ₃	0.86	3.32	3.06	3.37
TmH ₃	0.06	1.39	1.16	3.67	Y ₂ O ₃	4.11	6.77	6.75	4.65
TmI ₃	2.27	3.14	1.98	3.08	Y ₂ S ₃	1.60	3.26	2.44	2.31
TmN	0.31	1.83	2.17	2.49	Y ₂ Se ₃	1.35	2.98	2.66	1.99
U ₁₁ Se ₂₀	0.00	2.31	1.36	1.94	Y ₂ Te ₃	0.79	1.79	1.89	1.46
U ₃ O ₈	0.03	2.68	2.30	3.67	Y ₄ C ₇	0.61	2.27	2.17	1.31
UBr ₄	0.22	2.62	1.85	4.23	Yb ₁₃ Zn ₅₈	0.07	0.64	0.75	0
UBr ₅	0.29	2.67	1.87	4.47	Yb ₂ Ge	0.04	0.63	1.11	0.26
UCl ₅	0.33	2.79	2.10	5.08	Yb ₂ Si	0.04	0.62	0.99	0.33
UCl ₆	1.58	3.75	2.05	6.25	Yb ₃ N ₂	0.49	1.27	2.43	2.84
UF ₃	0.22	3.09	2.92	6.96	YbB ₆	0.11	0.68	1.17	4.74

UF ₅	0.75	3.50	3.08	7.60	YbBr ₂	4.88	4.47	4.71	5.73
UF ₆	2.80	5.08	1.22	9.30	YbCl ₂	5.40	4.93	5.21	6.50
UI ₄	0.26	2.54	1.55	3.57	YbF ₂	6.73	6.31	6.78	9.11
UN ₂	0.77	3.08	2.10	4.34	YbH ₂	2.89	2.76	2.84	9.20
UO ₃	1.65	3.92	2.22	5.22	YbI ₂	4.01	3.72	3.93	4.67
V ₂ O ₃	0.49	2.78	2.54	2.44	YbMg ₁₄₉	0.49	1.02	0.62	0.57
V ₂ O ₅	2.34	4.45	2.99	3.52	YbO	3.53	3.68	4.49	5.42
V ₂ Se ₉	0.77	1.86	1.90	2.85	YBr ₃	4.05	6.11	6.20	4.82
V ₃ O ₅	1.15	3.37	3.23	2.78	YbS	2.44	2.54	2.72	3.50
VBr ₂	1.19	2.80	2.77	2.86	YbS ₂	1.64	1.95	1.43	2.80
VCl ₂	1.26	3.12	3.05	3.31	YbSe	2.03	2.22	1.67	3.00
VCl ₅	1.05	2.93	2.83	3.62	YbTe	1.53	1.74	1.11	2.39
VF ₃	1.64	4.46	4.29	5.10	YCl ₃	4.98	7.25	7.37	5.74
VF ₄	2.31	5.07	3.58	5.55	YF ₃	7.65	10.81	11.03	8.85
VF ₅	2.99	5.68	3.66	6.10	YH ₃	0.01	1.19	1.17	3.46
VI ₂	1.11	2.32	2.37	2.35	YI ₃	3.06	4.76	4.84	3.78
VS ₄	0.95	2.07	2.13	2.16	YMg ₁₄₉	0.27	0	0.51	0.83
WBr ₂	2.47	2.88	3.12	2.08	YN	0.29	2.62	2.34	2.74
WBr ₆	1.13	1.70	1.95	2.78	Zn ₃ As ₂	0.14	1.07	0.83	1.21
WCl ₂	2.83	3.47	3.24	2.49	Zn ₃ N ₂	0.43	2.45	2.04	2.99
WCl ₄	0.28	1.22	1.26	1.81	Zn ₃ P ₂	0.61	1.47	1.33	1.70
WCl ₆	1.92	2.67	2.98	3.34	Zn ₆ Ru	0.01	0.99	0.72	0
WF ₆	5.36	6.75	7.44	5.66	ZnAs ₂	0.22	1.14	0.92	1.69
WI ₂	1.96	2.01	2.50	1.56	ZnBr ₂	3.22	4.63	4.88	5.10
WO ₃	1.15	2.35	2.47	1.86	ZnCl ₂	4.06	5.56	5.96	6.11
WS ₂	1.62	1.59	2.06	1.24	ZnF ₂	3.48	6.02	5.16	7.71
WSe ₂	1.51	1.45	1.91	1.08	ZnI ₂	2.91	4.00	4.23	4.31
XeF ₂	2.82	3.83	4.06	5.62	ZnO	0.73	3.17	2.77	3.81
XeF ₃	2.64	3.69	4.25	5.59	ZnP ₂	1.47	2.17	2.23	2.60
XeF ₄	2.86	3.87	4.02	5.89	ZnS	1.21	2.51	2.38	2.88
ZnS ₂	2.00	3.15	2.46	3.26	ZrI ₂	0.30	2.08	1.84	2.13
ZnSb	0.08	0.82	0.63	1.12	ZrI ₃	0.20	1.98	1.73	2.15
ZnSe	1.61	2.79	2.77	2.92	ZrI ₄	2.01	3.66	2.28	3.15
ZnTe	1.08	1.72	1.73	2.26	ZrO ₂	3.54	6.08	6.05	4.46
Zr ₃ N ₄	1.27	3.48	3.26	2.79	ZrS ₂	1.04	2.66	2.53	2.12
ZrBr ₄	3.78	5.70	5.80	4.53	ZrS ₃	1.09	2.70	2.59	2.20
ZrCl ₂	0.86	3.25	2.95	3.36	ZrSe ₂	0.34	1.97	1.77	1.56
ZrCl ₃	0.54	2.95	2.61	3.25	ZrSe ₃	0.56	2.17	1.99	1.75
ZrCl ₄	3.62	5.81	5.84	4.88	ZrTe ₅	0.08	1.06	1.02	1.66
ZrF ₄	5.35	8.39	8.51	7.38	ZrZn	0.02	0.26	0.49	0.22