V Excel workbooku *Material classification.xlsx* je zavihek ID creation, ki pove, kako materialu dodelimo ID. Prva cifra je skupina, druga cifra je dimenzionalnost materiala in zadnje štiri so dejanska zaporedna številka materiala.

Vsaka skupina ima svoj zavihek. Opis posameznih polj:

* Id materiala
* Kratko ime materiala, ki bo del imena mape, v kateri bodo shranjene lastnosti materiala.
* Polno ime materiala
* Kratek opis, če je ta potreben (npr., thin film annealed at 1000 K)

Naslednja polja so vsa boolean vrednosti, ki povejo, ali je podatek shranjen v mapi materiala ali ne.

* Flags. Ta polja služijo temu, da v kodi označimo, v katero skupino material spada glede na funkcionalnost znotraj toplotnega sistema. Če je material invariant, ne more biti nič drugega. Sicer pa ima lahko več flagov.
* Podatki o toplotnih lastnostih, označeni z rdečo, morajo biti v mapi materiala vedno prisotni. To so lastnosti pri sobni temperaturi (~293 K), ki morajo biti na voljo v primeru, da ne poznamo temperaturnih odvisnosti. Te boolean vrednosti so zato vedno 1.
* Ostali podatki so vezani na skupino znotraj toplotnega sistema. Invariantni materiali bodo npr. imeli datoteke rho(T), cp(T), k(T), magnetokalorični pa rho(T), k(T), cp(T) pa ne, ker bo teh cp(T) več, in sicer za heating in cooling pri več magnetnih poljih (glej modro obarvana polja). Teh kombinacij, katere lastnosti in odvisnosti bodo navedene, je lahko še več, in so odvisne od materiala.

V mapi posameznega materiala morajo biti poleg opisnih datotek, v katerih so zabeleženi viri podatkov, dodatne informacije, opombe in podobno, nujno tudi datoteke, ki jih uporabljamo v kodi TCCbuilderja. Te datoteke morajo imeti vedno enako strukturirana imena in vsebino (glej npr. pri Gd), vsi podatki pa morajo biti v osnovnih enotah. Te datoteke so:

* Datoteka info.txt vsebuje zaporedoma ID materiala, kratko ime in temperaturo tališča, ločeno z vejicami.
* Datoteke rho.txt, cp.txt in k.txt (bodisi ena vrednost pri sobni temperaturi, bodisi en stolpec 20000 vrednosti od 0 do 2000 K v korakih po 0.1 K); tu notri so samo vrednosti brez temperatur.
* Ena ali več od zgornjih treh datotek je lahko zamenjana z več datotekami pri različnih zunanjih poljih (magnetno zapisujemo v T, električno v MVm (kar pomeni MV/m)), npr. cp\_0T.txt, cp\_1T.txt, itd. To se zgodi npr. pri kaloričnih materialih.
* Obstajajo tudi druge opcije, kjer so omenjene tri datoteke zamenjane z neko histerezo, npr. cp\_heating.txt in cp\_cooling.txt, tj. kadar ima material cpThysteresis flag true. Lahko pa je histereza tudi pri različnih poljih, takrat dobimo cp\_0T\_cooling.txt, cp\_0T\_heating.txt, cp\_1T\_cooling.txt itd.
* Datoteka RT properties.txt je v JSON formatu in mora vsebovati vrednosti gostote, specifične toplote, prevodnosti in emisivnosti pri sobni temperaturi.
* Datoteka Ranges.txt je v JSON formatu in mora vsebovati temperaturna območja, pri katerih je posamezna lastnost materiala definirana. Temperaturna območja morajo biti zapisana za density, specific heat capacity, thermal conductivity, adiabatic temperature change (če je material kaloričen), emissivity, in ostale relevantne lastnosti (npr. seebeckov coefficient pri termoelektričnih materialih ipd.).
* Datoteka Fields.txt vsebuje stolpec z jakostmi zunanjih polj, pri katerih so definirane lastnosti za kalorične materiale. Ko gre za magnetna polja, so vrednosti v T, ko gre za električna, so v MV/m, pri pressure in stress pa v barih.