

模板信息

模板名称 光电材料计算数据模板

模板标签 特种功能材料

模板类型 模板

可见范围 公开

模板说明 根据 T/CSTM 00120 《材料基因工程数据通则》和 T/CSTM 00796 《材料实验数据通用要求》的核心理念，材料数据库主要为理论计算数据提供支持。

创建人 云伟航

创建时间 2026-01-20 23:44:30

更新人 郭宇

更新时间 2026-02-04 15:30:26

审核人 樊士茜

审核时间 2026-01-21 10:38:54

审核状态 待审核

模板来源 新材料大数据中心

▼ 对象区域

▼ 通用元数据（容器型）

数据唯一标识（字符串型）

创建日期（字符串型）

▼ 材料识别（容器型）

化学式（字符串型）

空间群（字符串型）

晶体结构类型（字符串型）

点群（字符串型）

▼ 结构表示（容器型）

初始结构文件（文件型）

优化后结构文件（文件型）

结构哈希（字符串型）

▼ 操作区域

▼ 计算方法设置（容器型）

理论级别（候选型）

交换相关泛函（字符串型）

裁断能（数值型）

截断能 (数值型)

K点网格 (字符串型)

范德华修正 (字符串型)

软件及版本 (字符串型)

▼ 结果区域

▼ 电子结构 (容器型)

带隙类型 (候选型)

基态带隙 (数值型)

光学带隙 (数值型)

VBM (数值型)

CBM (数值型)

费米能级 (数值型)

功函数 (数值型)

▼ 载流子性质 (容器型)

电子有效质量 (数值型)

空穴有效质量 (数值型)

理论迁移率 (数值型)

▼ 光学性质 (容器型)

激子结合能 (数值型)

吸收光谱数据 (文件型)

偶极矩 (数值型)

对象区域

***通用元数据**



***数据唯一标识**

***创建日期**

***材料识别**



***化学式**

***空间群**

***晶体结构类型**

***点群**

***结构表示**



***初始结构文件**

[↑上传](#)

描述: CIF, POSCAR等

优化后结构文件

[↑上传](#)

***结构哈希**

操作区域

*计算方法设置

*理论级别

Wien2k

*交换相关泛函

描述: PBE/HSE06/B3LYP

截断能

^
▼

eV

K点网格

描述: 例如: “4·4·4”

范德华修正

*软件及版本

结果区域

*电子结构

^

*带隙类型

自动选择

▼

基态带隙

 ^ ▼ eV

光学带隙

 ^ ▼

eV

VBM

↑
↓

单位

CBM

↑
↓

单位

费米能级

↑
↓

eV

功函数

↑
↓

eV

*载流子性质



电子有效质量

↑
↓

m_0

空穴有效质量

^▼

m0

理论迁移率

^▼

cm²/Vs

*光学性质

^

激子结合能

^▼

eV

吸收光谱数据

↑上传

偶极矩

^▼

Debye

规则配置

按整个模板计入

对象区域

***通用元数据** ^

***数据唯一标识**

***创建日期**

***材料识别** ^

***化学式**

*空间群

*晶体结构类型

*点群

*结构表示

*初始结构文件

↑上传

描述: CIF, POSCAR等

优化后结构文件

↑上传

*结构哈希

操作区域

*计算方法设置

*理论级别

自定义

*交换相关泛函

描述: PBE/HSE06/B3LYP

截断能

^
v

eV

K点网格

描述: 例如: “4 · 4 · 4”

范德华修正

***软件及版本**

结果区域

按容器计入

***电子结构**



***带隙类型**

自选



基态带隙

eV

光学带隙

		eV
--	--	----

VBM

		单位
--	--	----

CBM

		单位
--	--	----

费米能级

		eV
--	--	----

功函数

		eV
--	--	----

按容器计入

*载流子性质

计1个



电子有效质量

		m_0
--	--	-------

