

模板信息

模板名称 钙钛矿材料计算数据模板

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，材料数据库主要为钙钛矿材料理论计算数据提供支持。

创建人 云伟航

创建时间 2026-02-01 15:11:04

更新人 郭宇

更新时间 2026-02-04 15:30:26

审核人

审核时间

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）

化学通式（字符串型）

A位离子（字符串型）

B位离子（字符串型）

X位离子（字符串型）

晶系（字符串型）

空间群（字符串型）

▼ 结构表示（容器型）

结构文件（文件型）

超胞结构（文件型）

结构哈希（字符串型）

▼ 操作区域

▼ 计算设置（容器型）

方法相关设置（字符串型）

父换相关泛函 (字符串型)

K点网络 (字符串型)

截断能 (数值型)

软件及版本 (字符串型)

▼ 动力学模拟 (容器型)

系综 (字符串型)

温度 (数值型)

时间步长 (数值型)

总时长 (数值型)

▼ 结果区域

▼ 结构稳定性 (容器型)

容忍因子 (数值型)

八面体因子 (数值型)

分解能 (数值型)

八面体倾斜角 (数值型)

▼ 电子结构 (容器型)

带隙 (数值型)

带隙类型 (候选型)

电子有效质量 (数值型)

空穴有效质量 (数值型)

▼ 缺陷性质（容器型）

主要缺陷类型（字符串型）

缺陷形成能（数值型）

▼ 离子输运（容器型）

迁移路径（字符串型）

迁移能垒（数值型）

扩散系数（数值型）

模板内容

对象区域

*通用元数据



*数据唯一标识

*创建日期

*材料识别



*化学通式

*A位离子

*B位离子

*X位离子

*晶系

*空间群

*结构表示



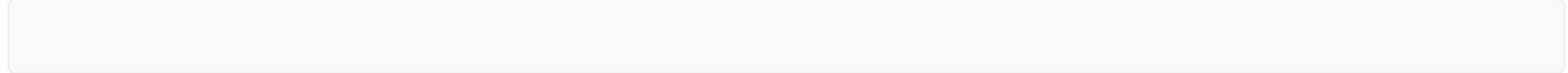
*结构文件

↑上传

超胞结构

↑上传

结构哈希



操作区域

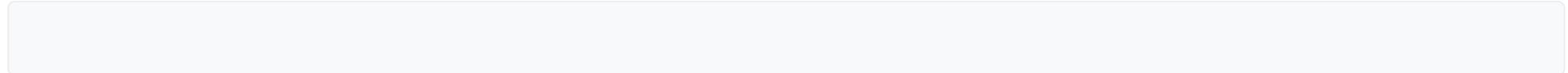
计算设置



交换相关泛函



K点网络



截断能



eV

软件及版本

动力学模拟

系统

温度

K

*时间步长

fs

*总时长

ps

结果区域

*结构稳定性



*容忍因子

 ^
▼ 单位

八面体因子

 ^
▼ 。

分解能

 ^
▼ eV/atom

*八面体倾斜角

 ^
▼ 。

*电子结构



*带隙

 ^ ▼ eV

*带隙类型

滑块控件

电子有效质量

 ^ ▼ m0

空穴有效质量

 ^ ▼ m0

*缺陷性质



主要缺陷类型

滑块控件

缺陷形成能

 ^ ▼

eV

*离子输运



迁移路径

迁移能垒

eV

扩散系数

 cm²/s

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 ^

*化学通式

*A位离子

*B位离子

*X位离子

*晶系

*空间群

*结构表示



*结构文件

↑ 上传

上传

超胞结构

↑上传

结构哈希

操作区域

计算设置



交换相关泛函

K点网络

截断能

^
v

eV

软件及版本

动力学模拟



系综

温度

^
v

K

*时间步长

^
v

fs

*总时长

^
v

ps

按容器计入

*电子结构



*带隙

		eV
--	--	----

*带隙类型

肖特基型	<
------	---

电子有效质量

	m0
--	----

空穴有效质量

计1个

	m0
--	----

按容器计入

*缺陷性质



主要缺陷类型

--

