

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）

截断能（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

默认

▼

*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”

描述，例如：1.4.4.4

范德华修正

*软件及版本

结果区域

*电子结构



*带隙类型

直接带隙

基态带隙

^
v

eV

光学带隙

^
v

^

↓

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

^

↓

m0

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

默认

▼

*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

直接带隙

☐ 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

↑

↓

m0

