

## 模板信息

---

模板名称 二维材料计算数据模板

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，材料数据库主要为二维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 15:57:11

---

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）

化学式（字符串型）

层数（数值型）

堆垛方式（字符串型）

晶格常数（数值型）

夹角（数值型）

### ▼ 结构表示（容器型）

单层结构文件（文件型）

异质结结构文件（文件型）

结构哈希（字符串型）

## ▼ 操作区域

### ▼ 模型设置（容器型）

真空层厚度（数值型）

招兜大小（字符串型）

超胞大小 (字符串型)

▼ 计算方法 (容器型)

泛函类型 (字符串型)

范德华修正 (字符串型)

K点网格 (字符串型)

截断能 (数值型)

软件及版本 (字符串型)

▼ 结果区域

▼ 能量性质 (容器型)

形成能 (数值型)

剥离能 (数值型)

层间结合能 (数值型)

▼ 电子性质 (容器型)

带隙 (数值型)

带隙类型 (候选型)

功函数 (数值型)

能带结构数据 (文件型)

态密度数据 (文件型)

▼ 力学性质 (容器型)

杨氏模量 (数值型)

泊松比 (数值型)

断裂强度 (数值型)

▼ 磁学性质 (容器型)

磁序 (字符串型)

总磁矩 (数值型)

居里温度 (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



\*化学式

\*层数

单位

### \*堆垛方式

描述: AA/AB/ABC等

### \*晶格常数

|  |        |
|--|--------|
|  | ^<br>v |
|--|--------|

Å

### 夹角

|  |        |
|--|--------|
|  | ^<br>v |
|--|--------|

°

### \*结构表示



### \*单层结构文件

↑上传

### 异质结结构文件

↑上传

# 结构哈希

## 操作区域

### \*模型设置

#### 真空层厚度

 Å

#### 超胞大小

### \*计算方法

#### 泛函类型

## 范德华修正

描述: D2/D3/TS等

## K点网格

## 截断能

 

eV

## 软件及版本

## 结果区域

\*能量性质

### 形成能

^  
v

eV/atom

### 剥离能

^  
v

meV/ $\text{\AA}^2$

### 层间结合能

^  
v

eV

### \*电子性质

#### \*带隙

^  
v

eV

#### \*带隙类型

v

### 功函数

^  
v

eV

## 能带结构数据

↑上传

## 态密度数据

↑上传

## \*力学性质

^

### 杨氏模量

^  
v

N/m

### 泊松比

^  
v

单位

### 断裂强度

^  
v

N/m

## \*磁学性质

^

### 磁序

描述: FM/AFM/NM

### 总磁矩

 μB

### 居里温度

 K

# 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

**\*层数**

^  
v

单位

**\*堆垛方式**

描述: AA/AB/ABC等

**\*晶格常数**

^  
v

Å

**夹角**

^  
v

°

**\*结构表示**

^

**\*单层结构文件**

↑上传

**异质结结构文件**

↑上传

## 结构哈希

## 操作区域

### \*模型设置



#### 真空层厚度

^▼ Å

#### 超胞大小

### \*计算方法



## 泛函类型

## 范德华修正

描述: D2/D3/TS等

## K点网格

## 截断能

A horizontal input field for energy cutoff. It consists of a text input box, an up arrow button, a down arrow button, and a unit label 'eV'.

## 软件及版本



功函数

|  |  |    |
|--|--|----|
|  |  | eV |
|--|--|----|

 能带结构数据 全上传 态密度数据 全上传

计1个

 按容器计入**\*力学性质** 杨氏模量

|  |  |     |
|--|--|-----|
|  |  | N/m |
|--|--|-----|

 泊松比

|  |  |    |
|--|--|----|
|  |  | 单位 |
|--|--|----|

 断裂强度

|  |  |     |
|--|--|-----|
|  |  | N/m |
|--|--|-----|

