**MXenes 数据计算整理标准v1**

1. **不吸附**

MXenes -> 基底名称 -> 负载物 -> 搀杂物 -> 标签

例子

MXenes -> Ti2NO2 -> no\_add -> no\_doping -> pure\_opt/pure\_static/no\_absorb/scf

MXenes -> Ti2NO2 -> no\_add -> Mo -> pure\_opt/pure\_static/no\_absorb/scf

**(2). 吸附**

MXenes -> 基底名称 -> 负载物 -> 搀杂物 -> 吸附物 -> 等效位点 -> 标签

例子

MXenes -> Ti2NO2 -> no\_add -> no\_doping -> H/add\_H -> top -> opt/static

MXenes -> TiNCrNTi-O2 -> Hf -> C -> Li -> S0 -> 00

MXenes -> TiNCrNTi-O2 -> Zr -> no\_doping -> Li -> random\_16 -> 01

**(3). NEB**

MXenes -> 基底名称 -> 负载物 -> 搀杂物 -> 吸附物 -> 等效位点路径 -> 标签

例子

MXenes -> Ti2NO2 -> no\_add -> no\_doping -> H -> S0-S1/neb\_S0-S1 -> 00/01/01/03/04/ini/fin/...

1.``->`` 代表下一层

2. ``/`` 代表或者

3. 不能出现同一文件夹下出现计算文件又出现文件夹情况，辅助文件可以出现。即A文件夹只要有子文件夹，则A文件夹下不能有INCAR等。