

模板信息

模板名称	有机光电材料电荷传输计算数据模板
模板标签	信息材料
模板类型	模板
可见范围	公开
模板说明	
创建人	石冬婕
创建时间	2026-01-21 18:21:56
更新人	郭宇
更新时间	2026-02-04 15:30:24
审核人	樊士茜
审核时间	2026-01-26 10:12:51
审核状态	已通过
模板来源	材料计算设计专用数据资源节点

▼ 对象区域

有机光电材料分子名称（字符串型）

分子式（字符串型）

CAS号（字符串型）

COD号（字符串型）

Smiles字符串（字符串型）

相对分子质量（数值型）

分子结构（文件型）

晶体结构（文件型）

▼ 操作区域

计算软件（字符串型）

计算方法（字符串型）

温度（数值型）

截断半径（数值型）

步长（数值型）

步数（数值型）

▼ 结果区域

前线轨道（表格型）

▼ 前线轨道（表格型）

LUMO（数值型）

HOMO（数值型）

Egap（数值型）

▼ 重组能（表格型）

空穴（数值型）

电子（数值型）

▼ 载流子迁移率（表格型）

μ_a^{\rightarrow} （数值型）

μ_b^{\rightarrow} （数值型）

μ_c^{\rightarrow} （数值型）

μ_{avg} （数值型）

Huang – RhysFactor（字符串型）

▼ 转移积分（表格型）

空穴（数值型）

电子（数值型）

对象区域

***有机光电材料分子名称**

描述：如2,6 – Diphenylanthracene

***分子式**

***CAS号**

***COD号**

***Smiles字符串**

***相对分子质量**

*相对分子质量

^

↓

单位

*分子结构

⬆️上传

描述：支持.log, .sdf, .xyz, .mol格式

*晶体结构

⬆️上传

描述：支持.cif格式

操作区域

*计算软件

描述：可列多个软件

*计算方法

描述：可描述方法，基组等

***温度**

K

***截断半径**

Å

***步长**

$$f_S$$

***歩数**

单位

结果区域

*前线轨道



#	*LUMO	*HOMO	*Egap	操作
暂无数据				

*重组能



#	*空穴	*电子	操作
暂无数据			

*载流子迁移率



#	* $\mu \vec{a}$	* $\mu \vec{b}$	* $\mu \vec{c}$	* μ_{avg}	操作
暂无数据					

*Huang — RhysFactor

描述：需标明该振动模式的频率和它贡献的重组能

*转移积分



#	*空穴	*电子	操作
暂无数据			

规则配置

按整个模板计入 ☒

对象区域

***有机光电材料分子名称**

描述：如2,6 – Diphenylanthracene

***分子式**

***CAS号**

***COD号**

***Smiles字符串**

*相对分子质量

^

v

单位

*分子结构

⬆️上传

描述：支持.log, .sdf, .xyz, .mol格式

*晶体结构

⬆️上传

描述：支持.cif格式

操作区域

*计算软件

描述：可列多个软件

*计算方法

描述：可描述方法，基组等

***温度**

^
v

K

***截断半径**

^
v

Å

***步长**

^
v

fs

***步数**

^
v

单位

结果区域

☐ 按表格计入

☐ 每行计1个

***前线轨道**

#	<input type="checkbox"/> *LUMO	<input type="checkbox"/> *HOMO	<input type="checkbox"/> *Egap	操作

暂无数据

☐ 按表格计入

☐ 每行计1个

*重组能

#	<input type="checkbox"/> *空穴	<input type="checkbox"/> *电子	操作
暂无数据			

☐ 按表格计入

☐ 每行计1个

*载流子迁移率

#	<input type="checkbox"/> * $\mu \vec{a}$	<input type="checkbox"/> * $\mu \vec{b}$ 计1个	<input type="checkbox"/> * $\mu \vec{c}$	<input type="checkbox"/> * μ_{avg}	操作
暂无数据					

☐ *Huang – RhysFactor

描述：需标明该振动模式的频率和它贡献的重组能

