

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

— 共价轨道 (字符串型)

▼ 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** 

fs

***步数** 

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

^

#	* μ_a^{\rightarrow}	* μ_b^{\rightarrow}	* μ_c^{\rightarrow}	* 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**

↑
↓

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**

 

fs

***步数**

 

单位

结果区域

按表格计入

***前线轨道**

每行计1个

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

暂无数据

按表格计入

*重组能

每行计1个

#

*空穴

*电子

操作

暂无数据

按表格计入

*载流子迁移率

每行计1个

#

* μ a \rightarrow

* μ b \rightarrow

计1个

* μ c \rightarrow

* 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

