

## 模板信息

---

模板名称 电池有机正极材料电压计算数据模板

模板标签 能源材料

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 15:30:09

---

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

有机正极材料名称（字符串型）

分子名称（字符串型）

分子式（字符串型）

材料类型（候选型）

相对分子质量（数值型）

Smiles字符串（字符串型）

分子结构（文件型）

CAS号（字符串型）

## ▼ 操作区域

计算软件（字符串型）

计算方法与基组（字符串型）

溶剂化模型（字符串型）

嵌入离子（字符串型）

每个活性单元嵌入离子数（数值型）

## ▼ 结果区域

HOMO（数值型）

LUMO（数值型）

LUMO (数值型)

LUMO – HOMO Gap (数值型)

相对还原电位(vs.SHE) (数值型)

理论平均工作电压 ( $\text{Li}^+/\text{Li}$ ) 数值型)

理论比容量 (数值型)

理论质量能量密度 (数值型)

# 模板内容

## 对象区域

\*有机正极材料名称

描述：如：对苯二甲酸二钾

\*分子名称

\*分子式

\*材料类型

请选择



\*相对分子质量

^▼

单位

\*Smiles字符串

**\*分子结构**

 上传

描述：支持.xyz, .cif, .sdf, .mol文件上传

**\*CAS号**

## 操作区域

**\*计算软件**

**\*计算方法与基组**

**\*溶剂化模型**

\*嵌入离子

\*每个活性单元嵌入离子数

## 结果区域

\*HOMO

\*LUMO

\*LUMO – HOMO Gap

\*相对还原电位(vs.SHE)

**\*理论平均工作电压 (Li<sup>+</sup>/Li)**

描述：相对于金属锂的理论平均工作电压

**\*理论比容量**

**\*理论质量能量密度**

# 规则配置

按整个模板计入

## 对象区域

\*有机正极材料名称

描述：如：对苯二甲酸二钾

\*分子名称

\*分子式

\*材料类型

请选择



\*相对分子质量

	^
	▼

单位

**\*Smiles字符串**

**\*分子结构**

 上传

描述：支持.xyz, .cif, .sdf, .mol文件上传

**\*CAS号**

**操作区域**

**\*计算软件**

**\*计算方法与基组**

**\*溶剂化模型**

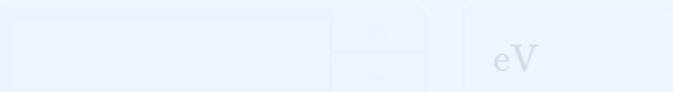
\*嵌入离子

\*每个活性单元嵌入离子数

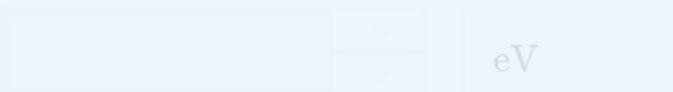
单位

## 结果区域

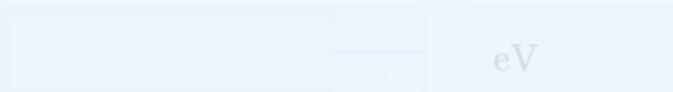
\*HOMO



\*LUMO



\*LUMO – HOMO Gap



\*相对还原电位(--- SHE)

\*相对还原电位(vs.SHE)

V

计1个

\*理论平均工作电压(Li<sup>+</sup>/Li)

单位

描述：相对于金属锂的理论平均工作电压

\*理论比容量

mAh/g

\*理论质量能量密度

Wh/kg