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

模板大纲

- 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 – HOMO Gap（数值型）

相对还原电位(vs.SHE)（数值型）

理论平均工作电压（Li^+/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

单位

结果区域

*HOMO

eV

*LUMO

eV

*LUMO – HOMO Gap

eV

*相对还原电位(vs.SHE)

V

*理论平均工作电压（Li^+/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

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

eV

*LUMO

eV

*LUMO – HOMO Gap

eV

*相对还原电位(vs.SHE)

V

计1个

*理论平均工作电压（Li^+/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