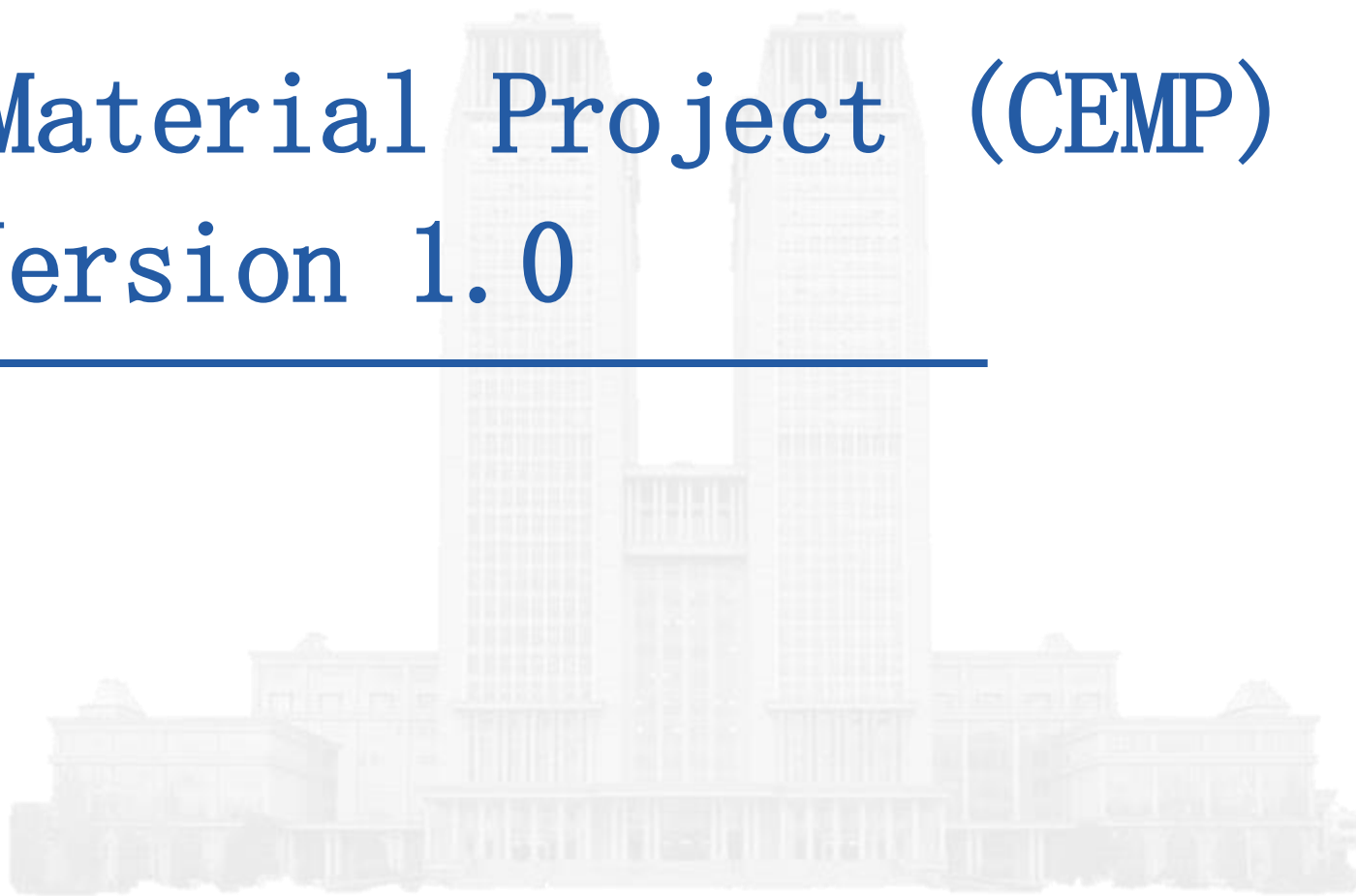




Clean Energy Material Project (CEMP)

Version 1.0



01

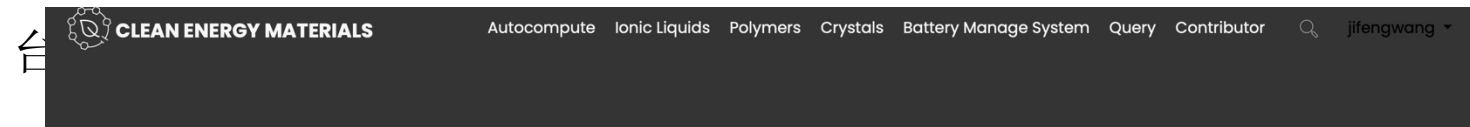
CEMP简介



1. 平台简介与基本构成

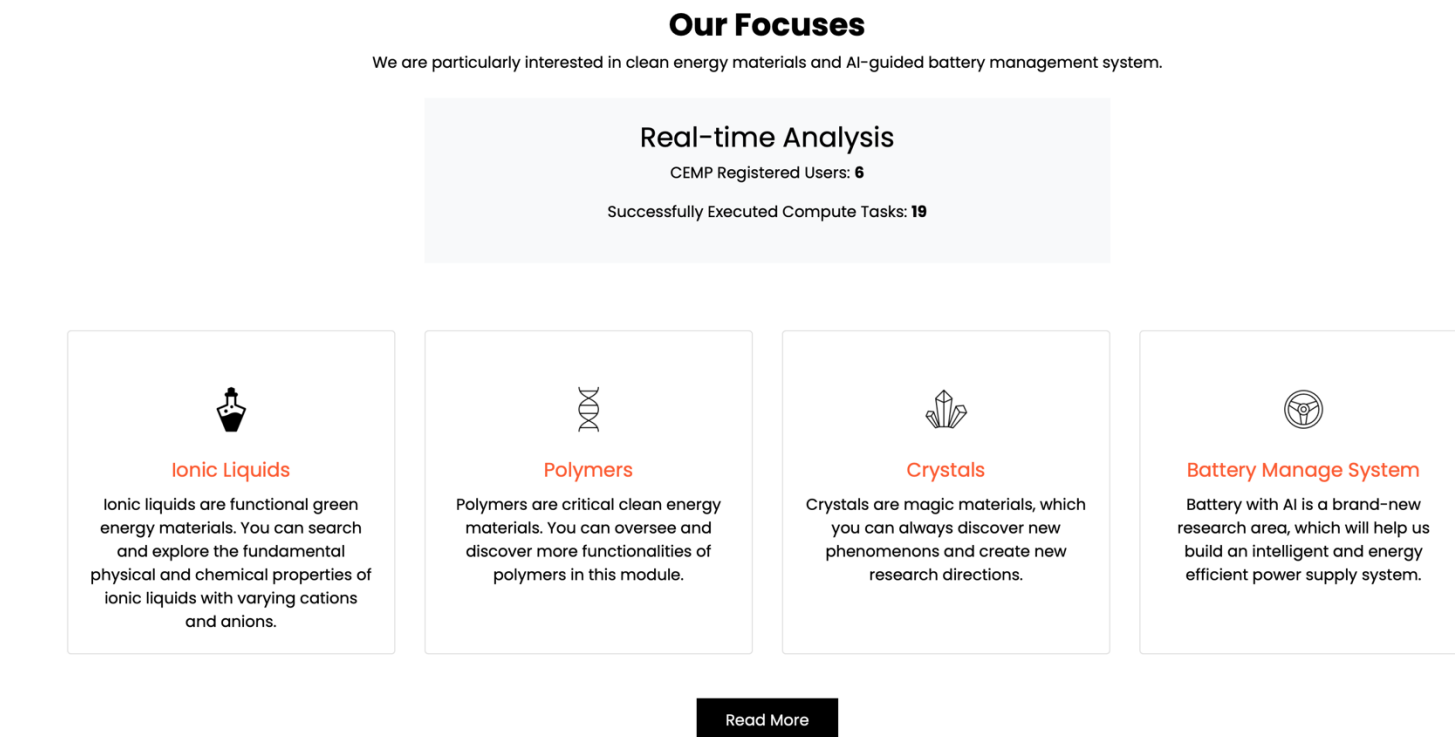


CEMP平台旨在实现新能源材料基因组计划，目前提供了一站式材料数据库检索、材料性质计算、预测以及任务查询功能，项目基于Django框架开发，功能基于python以及Web语言（HTML和JavaScript）开发。用户可输入网址（ <https://cleanenergymaterials.cpolar.top> ）以访问CEMP平



CEMP目前包含5大模块：

- Autocompute
- Ionic Liquid
- Polymers (*)
- Crystals (*)
- Battery Manage System



网站优势：

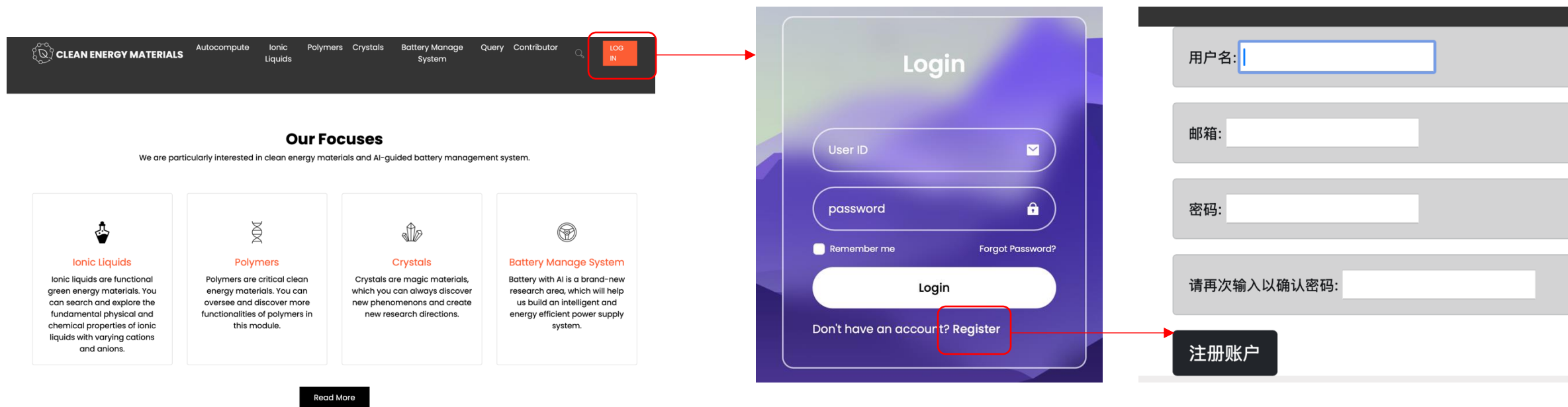
1. 使用极其简便，自定义程度高。
2. 功能齐全。

访问地址： <https://cleanenergymaterials.cpolar.top>

1.1 用户登录



CEMP平台的大部分功能仅对注册用户开放，在正式使用前需要注册账户，用户所有在网站上的活动均会与账户关联。用户登录后平台将会记忆登录状态，在相同设备下无需重复登录。需要注意必须保管好账户和密码。



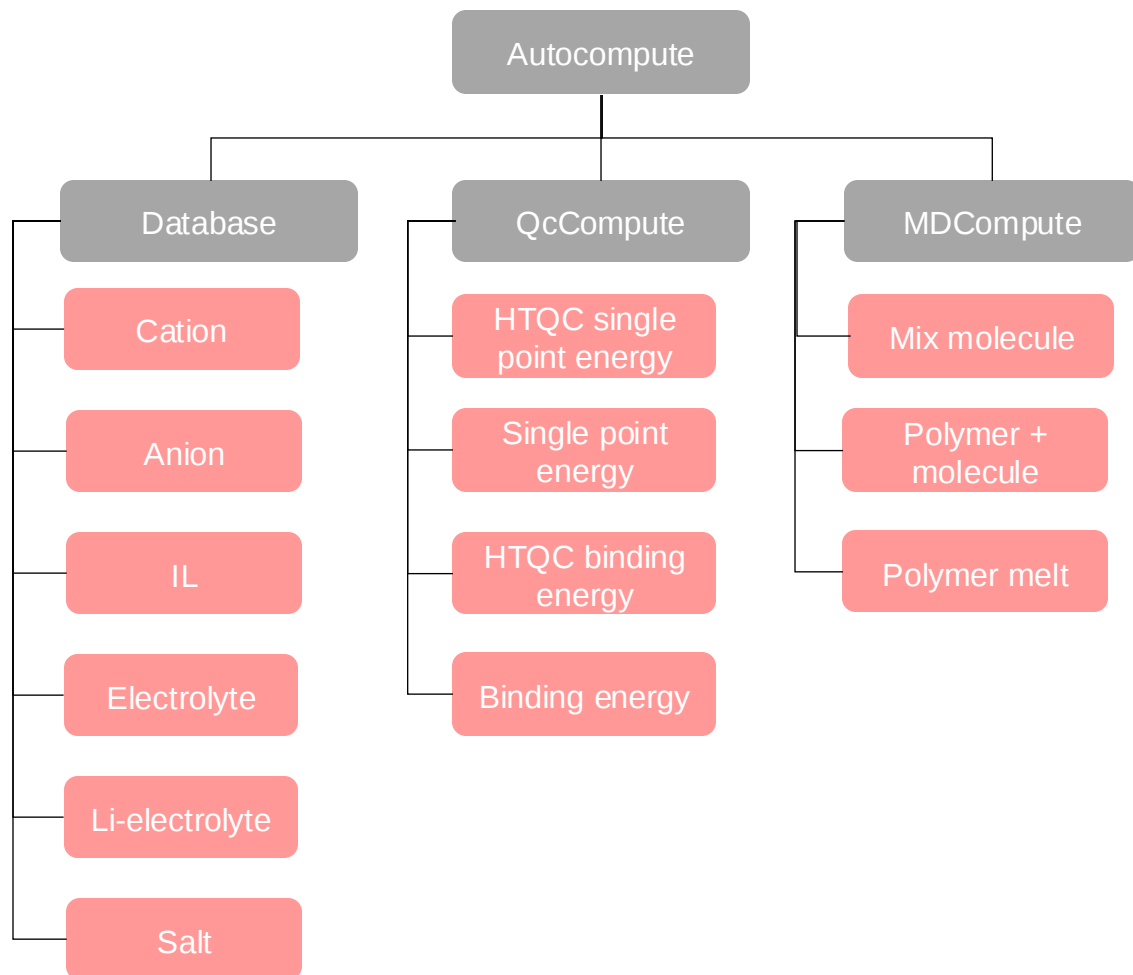
02

Autocompute模块



2. Autocompute模块

Autocompute模块为用户提供了在线高通量理论计算程序(QcCompute和MDCompute)以及综合材料数据库Database。



1. Database

The database contains results from high-throughput quantum chemistry calculations, including cations, anions, ionic liquids, electrolytes, Li+-electrolyte dimers, and salts (lithium salts, sodium salts, and potassium salts). The structure optimizations were performed at the **B3LYP/6-31G**** level with GD3BJ dispersion corrections. Frequency calculations accounted for a frequency correction factor of 0.9682. The energy calculations were carried out using initial configurations from the structure optimizations, performed at the **M062X/6-311+(2d,p)** level with GD3 dispersion corrections.

The types of data in the database include:

- Name
- SMILES
- Single-point energy (Hartree)
- Free energy correction (Hartree)
- Enthalpy correction (Hartree)
- Entropy (J/mol K)

2. QCCompute

QCCompute is a high-throughput quantum chemistry calculation platform. Users can perform high-throughput quantum chemistry calculations based on Gaussian16 by submitting Excel files in the specified format. The quantum chemistry tasks include structure optimization and energy calculations, using the same theoretical levels and computational methods as those adopted in the database.

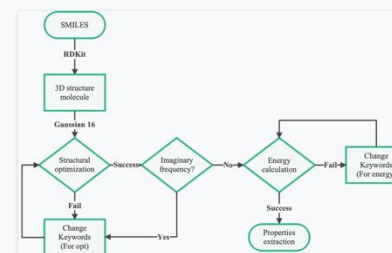


Figure 1: Workflow diagram of the high-throughput quantum chemistry calculation process in QCCompute

3. MDCompute

MDCCompute is an automated molecular dynamics calculation platform. Users can perform automated molecular dynamics calculations based on **Gromacs 2018.8** by submitting Excel files in the specified format. The calculations employ the GAFF force field and RESP atomic charges with a scaling factor of 0.7.

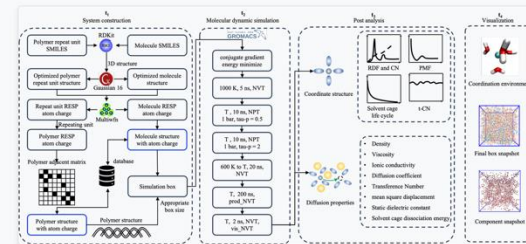


Figure 2: Workflow diagram of the automated molecular dynamics calculation process in MDCompute

2.1 Autocompute - Database 综合材料数据库



Autocompute - Database提供了大量量子化学数据数据，包含：

1. Cation: 431条阳离子数据
2. Anion: 63条阴离子数据
3. Ionic Liquid: 1065条离子液体数据
4. Li- Electrolyte二聚体: 4198条数据
5. Salt: 499条数据 (Li⁺, Na⁺, K⁺盐)

数据类型包括: HOMO, LUMO, 能量, 焓, 熵, 吉布斯自由能, 偶极矩, 基于HOMO-LUMO预测的电化学窗口。

数据来源: 所有数据全部来源于自主设计的高通量计算程序。

切换数据库

id	Name	SMILES	Energy_Hatree	Thermal_correction_to_Gibbs_Free_Energy_Hatree	Thermal_correction_to_Entropy_Hatree
1	ComponentA9	CCOCC[N+](C)CCCC1	-484.6546604	0.242185	0.294891
2	ComponentA10	CCCCC[n+](CC)c1	-501.7095016	0.231569	0.288519
3	ComponentA11	CCOCCn1cc[n+](C)c1	-498.3066667	0.18283	0.236185
4	ComponentA12	CCOCC[n+](C)CCCC1	-481.0483951	0.175027	0.225258
5	ComponentA20	CCn1cc[n+](CCOC)c1	-498.3071013	0.183296	0.236355
6	ComponentA22	COCC[n+](C)CCCC1	-441.7393463	0.149945	0.196508
7	ComponentA23	CCOCC[n+](C)CCCC1	-520.3545827	0.200094	0.254088
8	ComponentA24	CCCCCCC(O)CNCCCn1cc[nH+]c1	-789.4822513	0.354556	0.428035
9	ComponentA25	COCC[N+](C)CCCC1	-484.6538342	0.242921	0.295276
10	ComponentA26	COCC[n+](C)CCCC1	-481.0480631	0.176316	0.225646

提供多种下载方式

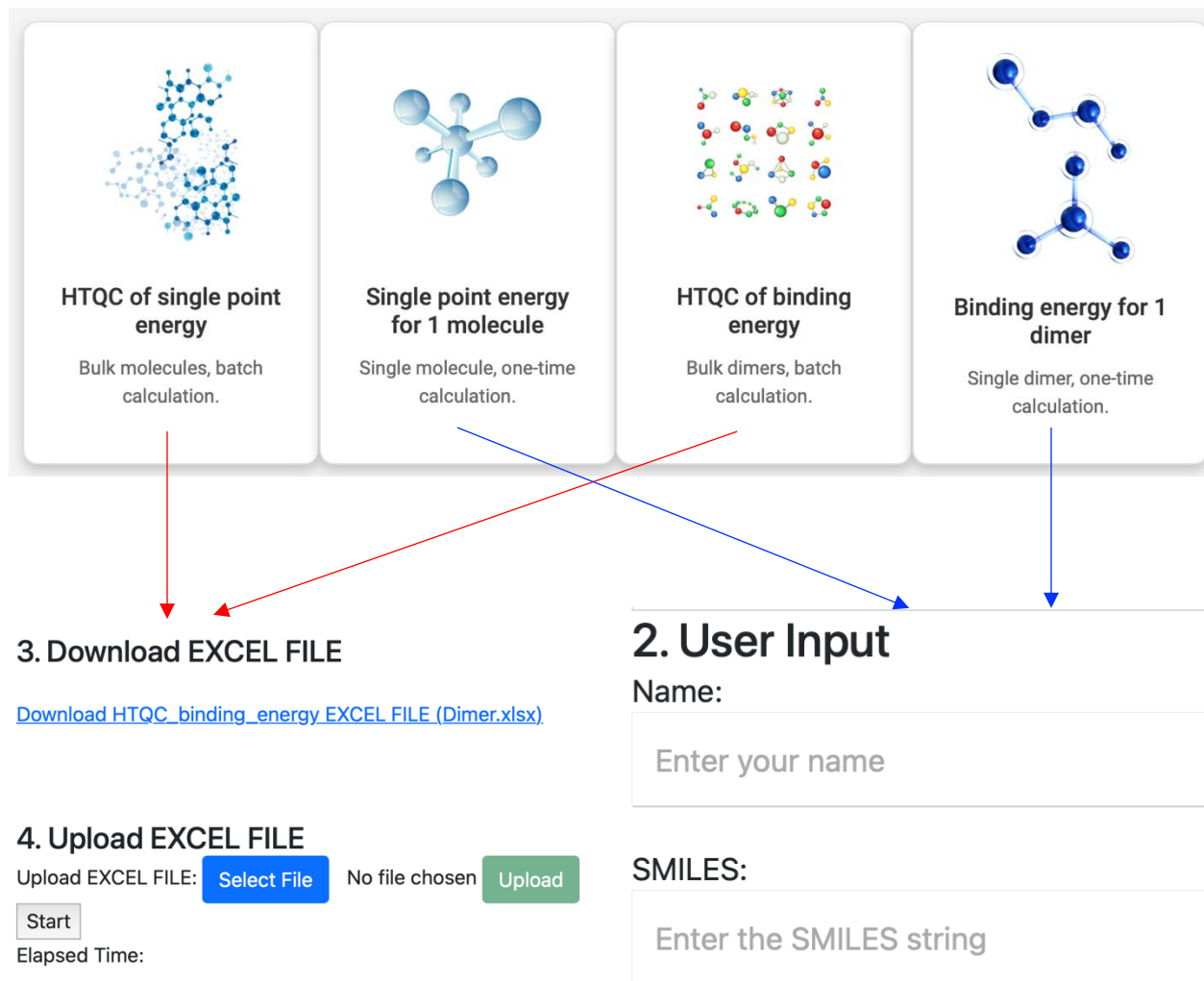
查询框

2.2 Autocompute - QcCompute 高通量量子化学计算在线平台



该模块下包含四部分计算程序，分别是针对大量分子的高通量计算程序

（HTQC_single_point_energy和HTQC_binding_energy）以及针对少量分子（或单个分子的）的单次量子化学计算程序（single_point_energy和Binding_energy）。用户可以根据自己的需求选择合适的计算方式，程序最终会返回量子化学过程文件以及自动提取的性质文件。



注：模块的具体使用方法以及注意事项已经详细展示在网页中。

访问地址：<https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/QCcompute>

2.3 Autocompute - QcCompute 高通量量子化学计算程序用户提交文件



针对大量分子的高通量计算程序（HTQC_single_point_energy和HTQC_binding_energy）以及针对少量分子（或单个分子的），用户需要根据模版文件填写。

1. HTQC_single_point_energy模块的模版文件：HTQC.xlsx

Name	SMILES
test3	COCN
test4	NCCO

用户只需要填写Name和SMILES式即可，每一行代表一种需要量子化学计算的分子。

↓ 提交任务，开始计算

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
Name	SMILES	Energy (Hartree)	Gibbs free energy (Hartree)	Ionization potential (Hartree)	Entropy (J/mol)	HOMO (Hartree)	LUMO (Hartree)	Dipole (Debye)	Energy gap (Hartree)	Electron affinity (Hartree)	ECW (V)
test3	COCN	-210.353	0.066505	0.100628	300.4907	-0.25184	0.03904	1.7721	-210.287	-210.253	7.911936
test4	NCCO	-210.362	0.067189	0.101028	297.9845	-0.24203	0.02038	1.4033	-210.294	-210.261	7.137552

计算结果，返回各项信息

2. HTQC_binding_energy模块的模版文件：Dimer.xlsx

Dimer Name	Dimer SMILES	Monomer Name	Monomer SMILES	Monomer Name	Monomer SMILES
test1	0. [Li+]	Li+	[Li+]	H2O	0

填写二聚体以及对应组分的Name和SMILES式即可

↓ 提交任务，开始计算

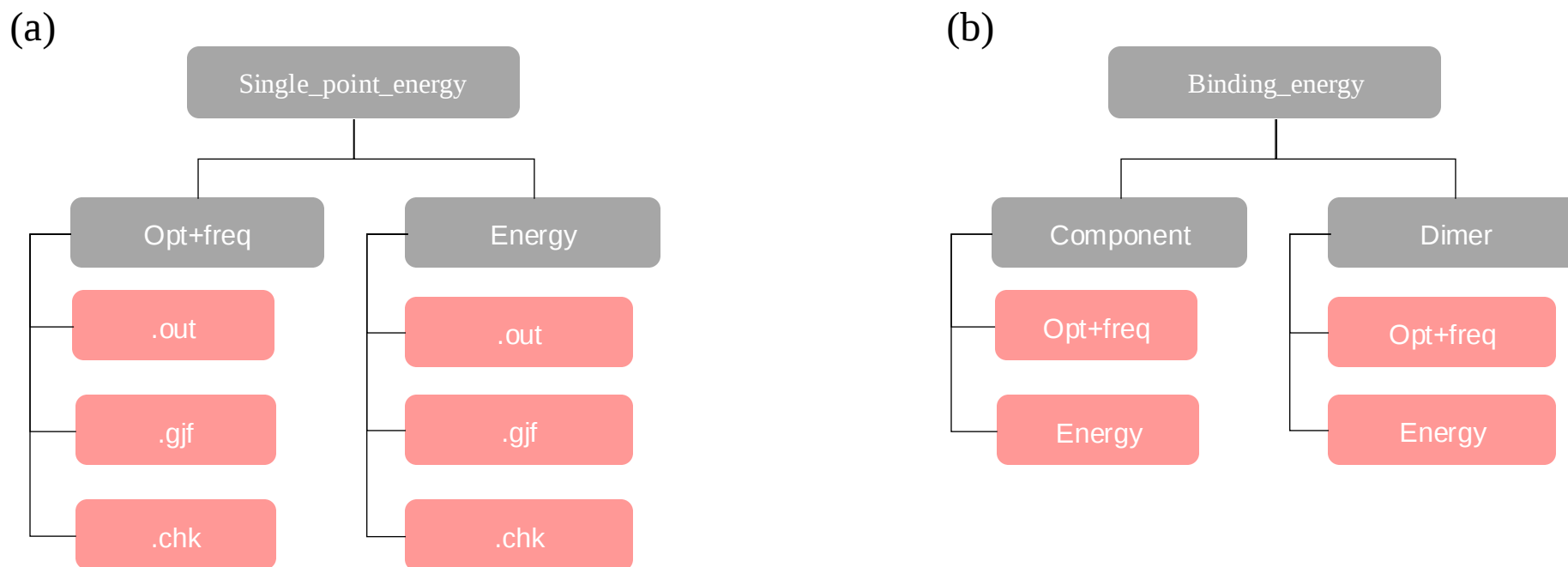
Dimer Name	Dimer SMILES	Monomer Name	Monomer SMILES	Monomer Name	Monomer SMILES	A Energy	B Energy	Ionization potential	Ionization potential	Correction	Correction	Entropy
test1	0. [Li+]	Li+	[Li+]	H2O	0	-7.2812	-76.4219	-0.01275		0.00236		133.0428
Entropy	A HOMO	A LUMO	B HOMO	B LUMO	A Dipole	B Dipole	A LUMO	B LUMO	Free Energy	Enthalpy	Free Energy	Enthalpy
	-2.3488	0	-0.29885	0	0	2.0707	-0.25486	0.02729	-7.29395	-7.27884		-83.76

计算结果，返回各项信息，包含二聚体以及各个组分的量子化学计算结果

2.4 Autocompute - QcCompute 高通量量子化学计算结果文件Result



针对single_point_energy系列量子化学计算（单点能计算），除了返回提取了量子化学数据后的EXCEL表格，还提供了量子化学过程文件（结构优化与能量计算的gjf，chk以及out文件），而binding_energy系列还会返回二聚体和组分的量子化学过程文件，用户可以根据自身需要对过程文件进行进一步分析，以提取更多有用的信息。

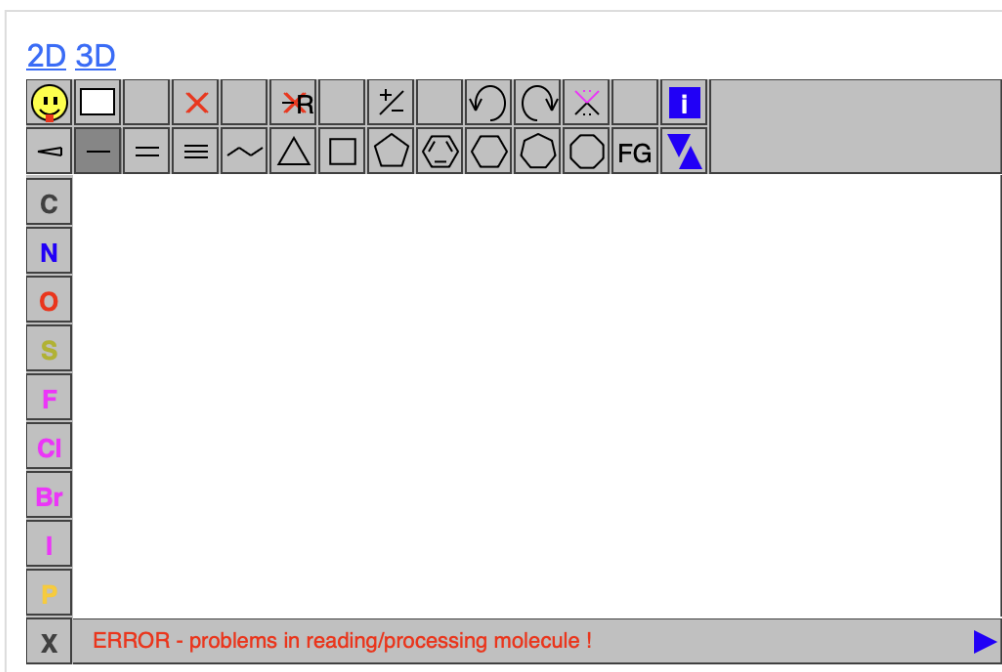


图： (a) single_point_energy系列量子化学过程文件； (b) Binding_energy系列量子化学过程文件

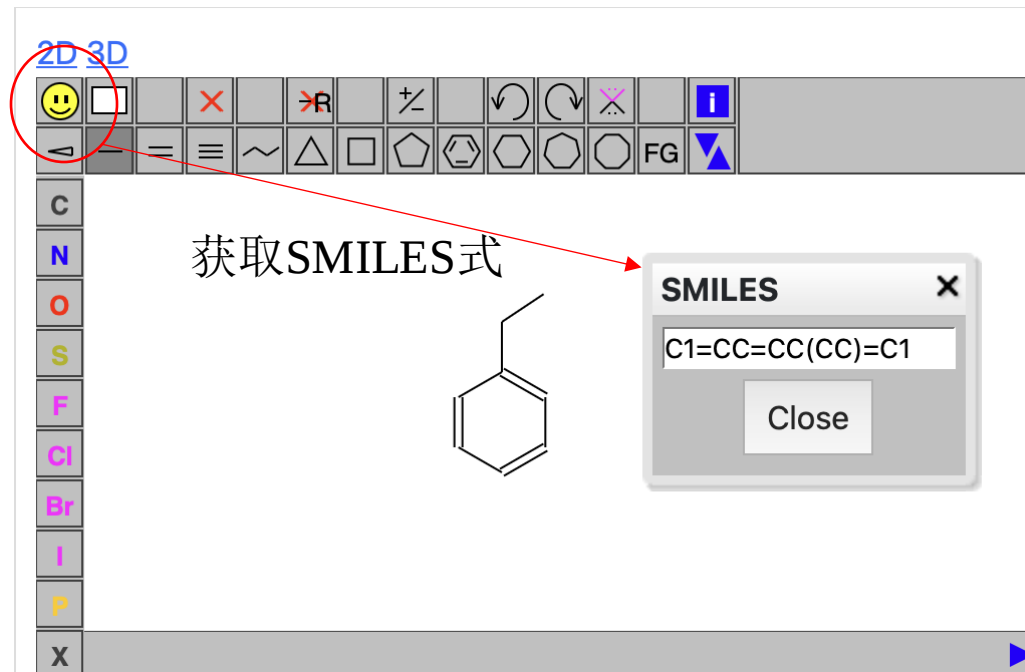
2.5 Autocompute - QcCompute Structure2SMILES绘制与转化



在上述介绍的single_point_energy和Binding_energy模块中均集成了Structure2SMILES绘制模块，提供了一个便捷方式供用户获取希望进行计算的SMILES式，用户可以绘制分子的二维结构，并点击左上角“笑脸”获取SMILES式。控件基于Jsmol提供，属于javascript插件。



绘制分子结构



注：模块的具体使用方法以及注意事项已经详细展示在网页中。

访问地址：https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/Single_point_energy

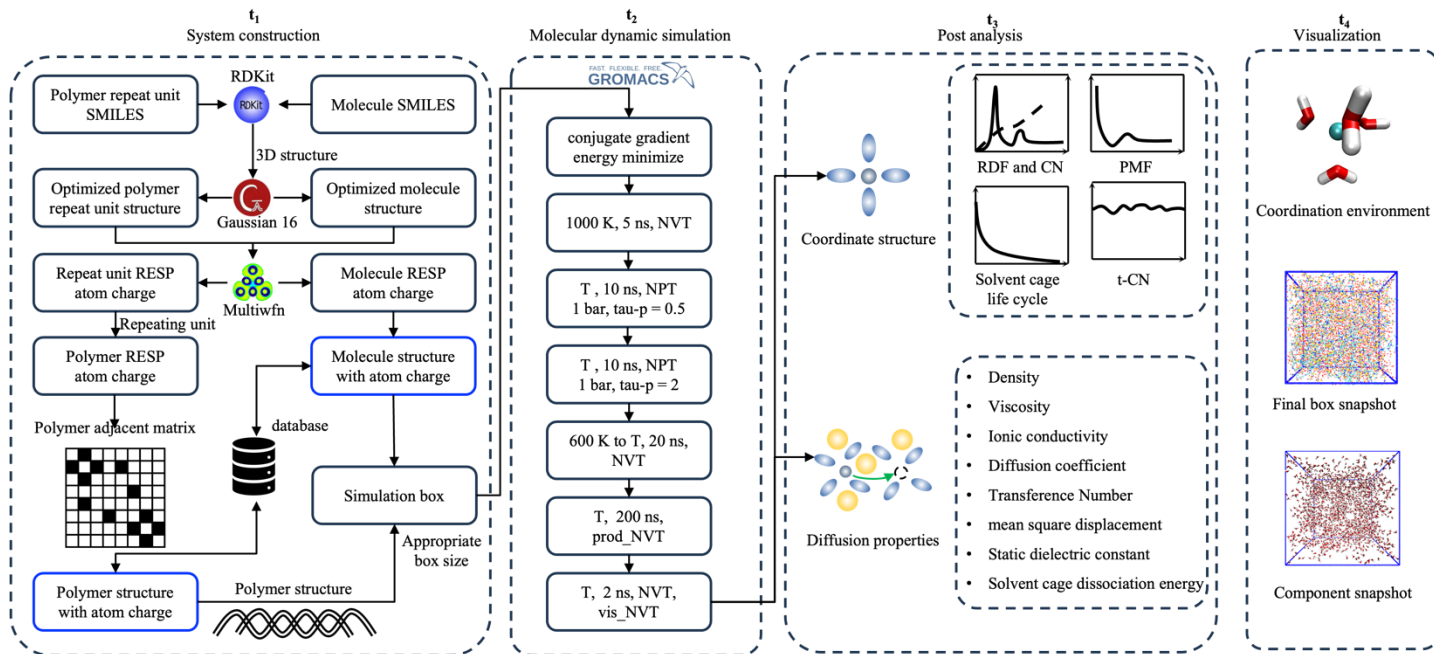
博学而笃志，切问而近思

2.6 Autocompute - MDCompute 分子动力学模拟计算在线平台



MDCompute模块提供了在线平台以供用户执行分子动力学模拟，用户仅需要按照第二小节的

(System.xlsx instructions) 填写模版文件System.xlsx文件（均在网页端提供下载链接），并且上传，即可开始执行分子动力学模拟任务。



3. Download the EXCEL(System.xlsx) File

[Download the System.xlsx](#)

Serial Number	Name
1	PBDT
2	PEG
3	Li+

4. Upload the EXCEL(System.xlsx) File

Upload EXCEL File:

Elapsed Time:

注：（1）由于分子动力学模拟需要耗费大量时间，考虑到目前资源的有限性，这里采用的是简化版流程（缩短平衡模拟时间，控制生产模拟时间至50 ns以内）；（2）为了简化用户使用，目前模拟的初始配置仅提供无规混合物，不支持自定义初始构型。



2.7 Query查询模块的使用方法

Query模块承担了平台与用户直接交互的功能，具体功能包括：任务状态查询、进程守护、队列控制、结果文件下载等众多前后端衔接功能。

密钥输入框：输入密钥以获取结果文件的下载链接。

总任务信息展示：平台任务正在执行任务数（同时执行任务上限为3）与队列任务数。

任务状态：Success, Pending, Failed, Queuing.

当前用户任务信息：与当前登录用户绑定。包含创建时间、任务类型、任务状态、密钥ID。

Task Status Checker

Enter your encrypted ID to check the status of your task and download the results.

Currently Total Pending and Queuing Tasks

Number of tasks still in progress: 0

Number of tasks still in queue: 0

Your Task History

Success: Task successful

Pending: Task in progress

Failed: Task failed

Queuing: Task in queue

Created At	TASK Type	Status	PID	Send Email	Task ID
2024-09-18 14:28:38	HTQC_binding_energy	success	50392	True	gAAAAABm6nMW9inFEgRNA09BbLm6ex2DKU82qNR4ZBvRrRqsBxuiVRYugO6wHJwcbcm bprFFvIWw9xGbB3BlOcUywOvJaz9yeDEYP6Z8JeqRGjsBgG7TMIvIsZVVJmRjHOva_W4II AeuSQkfl6E3KVYhrsG5ir8i79zS7nDAz5iINQ7vO_TvOI0O5yw8IVhBCP8642w9IVHfzAz5DI
2024-09-18 14:28:27	MDCoumpute	success	50392	True	gAAAAABm6nMLui-umJc4X9nnZkBDsqFcTAZe3jMOhx1KDI7gsls0AV9rFMzaQg0ZDINO3d: uik3g02RFjcAZR_-QzpD3MEs-6q1iUn-E89P_VHOQqAc16JungawWtd48oRFOTBBRu-srP2
2024-09-18 14:28:16	HTQC_single_point_energy	success	50392	True	gAAAAABm6nMAPFExLny7kkCrvuOLsYQC-GSo6_doWYq2y-_1CAo1XDSUzEGdxoDjWib7 KbaEJgic5TjWNKD2xhxyPSLfxoOHf7CEI9hYfPX01MiXzmZDmThbPDdCy2VkJrLbLv0OWrC CI9GE7VSeqnD6K1oBOBvyZLZZvhKIO0thcvk3EMdg5eqePSWQXb32ns9ZGosAx4CQadpl

2.8 Query查询模块的使用方法



(1) 复制对应任务密钥； (2) 提交密钥； (3) 下载任务结果文件。

Task Status Checker

Enter your encrypted ID to check the status of your task and download the results.

Task Status Checker

Enter your encrypted ID to check the status of your task and download the results.

Task completed successfully! You can download your files:

复制密钥并且提交

Your Task History

Success: Task successful

Pending: Task in progress

Failed: Task failed

Queuing: Task in queue

Created At	TASK Type	Status	PID	Send Email	Task ID
2024-09-18 14:28:38	HTQC_binding_energy	success	50392	True	gAAAAABm6nMW9inFEgRNA09BbLm6ex2DKU82qNR4ZBvRrRqsBxuiVRYugO6wHJwcbcrbprFFvIWw9xGbB3BlocUywOvJaz9yeDEYP6Z8JeqRGjsBgG7TMI FvlsZVVJmRjHOva_W4I AeuSQKfl6E3KVYhrsG5ir8i79zS7nDAz5liNQ7vO_TvOI0O5yw8IVbBCP8642w9IVHfzAz5Df
2024-09-18 14:28:27	MDCoumpute	success	50392	True	gAAAAABm6nMLui-umJc4X9nnZkBDsqFcTAZe3jMOhx1KDI7gsls0AV9rFMzaQg0ZDINO3d;uik3g02RFjcAZR_-QzpD3MEs-6q1iUn-E89P_VHOQqAc16JungawWtd48oRFOTBBRu-srP2
2024-09-18 14:28:16	HTQC_single_point_energy	success	50392	True	gAAAAABm6nMAPFExLny7kkCrvuOLsYQC-GSo6_doWYq2y-_1CAo1XDSUzEGdxoDjWlb7KbaEJgic5TjWNKD2xhxyPSLfxoOHf7CEI9hYfPX01MiXzmZDmThbPDdCy2VkJrLbLv0OWrC9GE7VSeqnD6K1oBOBvyZLZZvhKiO0thcvk3EMdg5eqePSWXq32ns9ZGOsAx4CQadpl

如果任务状态为“success”，则会返回下载链接

2.9 Email任务状态提示



CEMP平台配备了自动邮件提醒功能，当用户提交的任务结束后，将会在邮箱中收到任务结束提示，以便于用户及时获取计算数据信息，用户可以通过邮件获取任务种类、任务状态、结束时间信息。用户接受信息的邮箱为注册时提交的邮箱。CEMP平台目前的邮箱为： cemp5510@gmail.com。

Task Completion Notice - CEMP Platform

发件人: cemp5510<cemp5510@gmail.com> (定制我的回信邮箱域名, 对外沟通更显专业, [立即定制](#))

收件人: 我<wangjifeng1111@126.com>

时间: 2024年09月18日 16:07 (星期三)

翻译成中文

3w起即可申请香港身份! [立即咨询](#)

Hello jifengwang,

We are pleased to inform you that the task you submitted on 2024-09-18 06:28:38 as part of the CEMP (Clean Energy Material Project) platform has been completed.

Task Details:

- Task Type: HTQC_binding_energy
- Submission Time: 2024-09-18 06:28:38
- Completion Time: 2024-09-18 08:06:05
- Task Status: Success

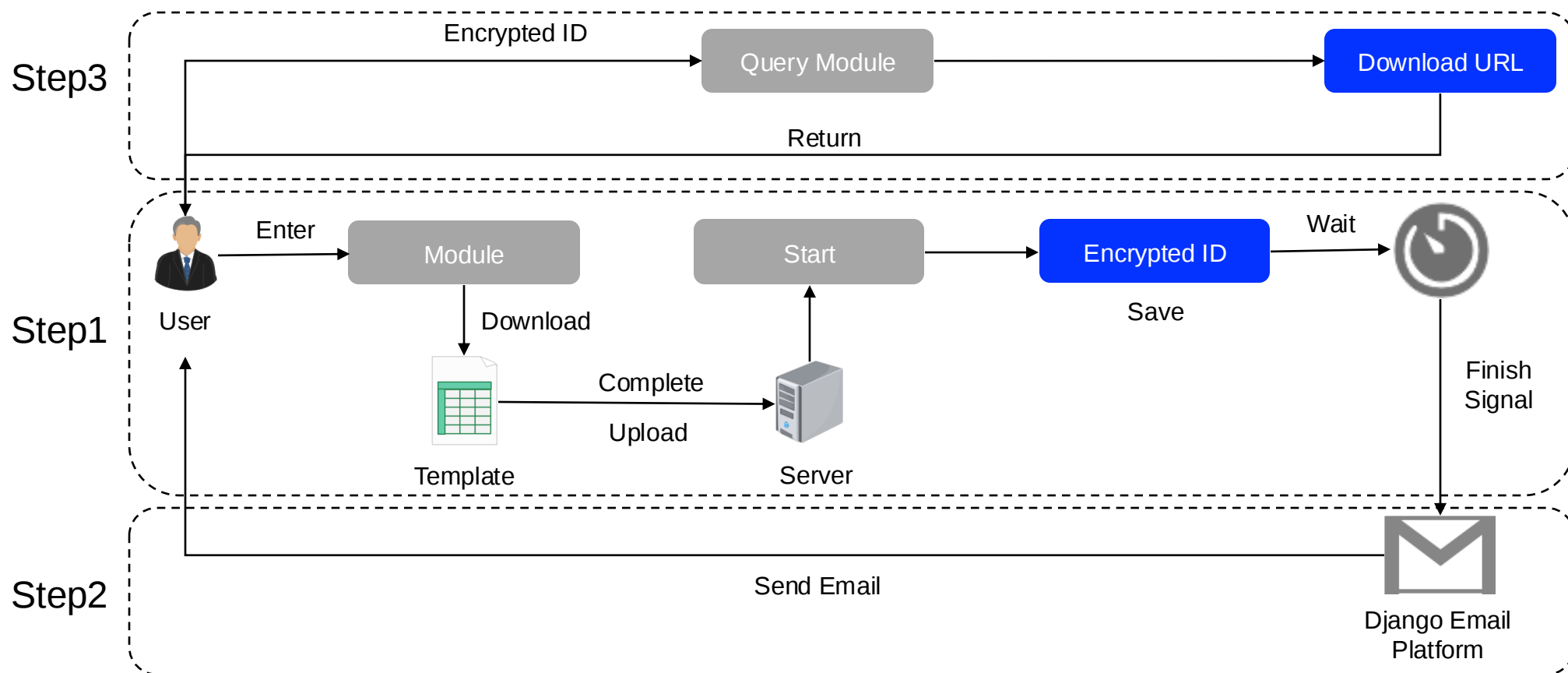
Please note that the data will be stored for 30 days only. We encourage you to log in to the CEMP platform and manage your task as soon as possible.

Best regards,
The CEMP Team

2.10 Autocompute模块的使用流程



(1) 用户需要先在对应功能网页下载模版文件（EXCEL文件）并且填写，(2) 将填写后的结果上传后，点击**Start**即可开始运算，此时网页会同步返回一个密钥，(3) 任务结束后，用户会接收一份任务状态邮件，(4) 然后通过“**Query**”模块输入密钥以查询任务结果，若任务成功结束后将会返回计算结果的下载链接。



03

Ionic Liquid模块





3. Ionic Liquid模块

Ionic Liquid模块为用户提供了离子液体计算数据库、离子液体性质高通量预测程序、单个离子液体性质预测程序、离子液体性质查找、基于psi4的离子液体量子化学计算。

Ionic Liquid

GeneratedIL Database

IL Batch Prediction

Search

Calculate

Predict

Show	10	entries	Column visibility	CSV	Copy to clipboard	Excel	PDF	Print	Search:
ID	Name	SMILES	Anion_Name	Cation_Name	Cation_SMILES_type	Anion_SMILES	Cation_SMILES	cc	
1	c-c49+c-b60.a-c6+a-b22+a-b25	C=Cc1cn[n+](C)c1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c49+c-b60	triazolium	CCCCC[N-]OC	C=Cc1cn[n+](C)c1	0.5	
2	c-c49+c-b81.a-c6+a-b22+a-b25	CCCc1cn[n+](C)c1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c49+c-b81	triazolium	CCCCC[N-]OC	CCCc1cn[n+](C)c1	0.4	
3	c-c49+c-b10.a-c6+a-b22+a-b25	Cc1cn[n+](C)c1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c49+c-b10	triazolium	CCCCC[N-]OC	Cc1cn[n+](C)c1	0.4	

GeneratedIL Database

1. Introduction to the Ionic Liquid Property Prediction Models

Using XGBoost, separate predictive models were developed for five different properties of ionic liquids: room temperature conductivity (σ), electrochemical window (ECW), melting point (T_m), as well as the pre-exponential factor (j_0) and activation energy (E_a) in the Arrhenius equation. The datasets used for training were sourced from the ILthermo ionic liquid database. The specific training processes for these models follow the methodology described in the unpublished paper 'IsIGen: A Data-Driven Discovery of Ionic Liquids for High-Performance Lithium-Ion Batteries Based on Small Datasets', which includes detailed training procedures and model performance.

2. Notes

- Users must use the provided Excel file to input relevant parameters.
- Ensure the Name column does not contain illegal characters (e.g., Chinese characters, commas, periods, slashes, etc.).
- Ensure the SMILES notation is correct (RDKit can be used to validate SMILES), otherwise the program will not function correctly.

3.!!!! Important Considerations !!!!

- After the user uploads the ionic_liquid_list.xlsx file and clicks the Start button, calculations will begin.
- Once the Start button is closed, the user should not exit or refresh the current page, as this may result in the loss of calculation results. Please do not close or refresh the browser until the computation is complete.
- By utilizing a pre-trained model for property prediction, large-scale ionic liquid property predictions can be conducted in a short amount of time.

4. Download EXCEL FILE

Download ionic liquid list EXCEL FILE

5. Upload EXCEL FILE

Upload EXCEL FILE. Select File No file chosen Upload

Start

Elapsed Time:

Figure 1: Example of ionic liquid list EXCEL file.

Search Ionic Liquid by Type

Search Ionic Liquid by Name

Search

Calculate

3.1 Ionic Liquid — GeneratedIL Database计算离子液体数据库



GeneratedIL Database提供了基于离子液体生成器生成得到的离子液体，包括SMILES，熔点、ECW、电导率、阿伦尼乌斯公式的指前因子 $\ln A$ 和活化能 E_a （数据全部基于XGBoost模型得到）。该模块的设计目的为提供了大量的原始数据以供深度学习或数据挖掘研究。

IONIC LIQUID									
GeneratedIL Database IL Batch Prediction Search Calculate Predict Home									
Show 10 entries Column visibility CSV Copy to clipboard Excel PDF Print Search:									
id	Name	SMILES	Anion_Name	Cation_Name	Cation_SMILES_type	Anion_SMILES	Cation_SMILES	cc	
1	c-c49+c-b60.a-c6+a-b22+a-b25	C=CCn1cn[n+](C)c1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c49+c-b60	triazolium	CCCCC[N-]OC	C=CCn1cn[n+](C)c1	0.5	
2	c-c49+c-b81.a-c6+a-b22+a-b25	CCCn1cn[n+](C)c1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c49+c-b81	triazolium	CCCCC[N-]OC	CCCn1cn[n+](C)c1	0.4	
3	c-c49+c-b10.a-c6+a-b22+a-b25	CCn1cn[n+](C)c1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c49+c-b10	triazolium	CCCCC[N-]OC	CCn1cn[n+](C)c1	0.4	
4	c-c140+c-b10.a-c6+a-b22+a-b25	CCn1cc[n+](N)n1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c140+c-b10	triazolium	CCCCC[N-]OC	CCn1cc[n+](N)n1	0.4	
5	c-c140+c-	CCCn1cc[n+](N)n1.CCCCC[N-]OC	a-c6+a-b22+a-b25	c-c140+c-b81	triazolium	CCCCC[N-]OC	CCCn1cc[n+](N)n1	0.4	

3.2 Ionic Liquid — IL Batch Prediction高通量离子液体性质预测



IL Batch Prediction提供了高通量离子液体性质预测程序，可以供研究者快速定性判断离子液体的基本性能，预测的性质包括：熔点、ECW、电导率、阿伦尼乌斯公式的指前因子 $\ln A$ 和活化能 E_a ，性质预测模型基于XGBoost开发。填写模版文件上传提交后，可快速进行性质预测。

4. Download EXCEL FILE

[Download ionic liquid list EXCEL FILE](#)

5. Upload EXCEL FILE

Upload EXCEL FILE: No file chosen

Elapsed Time:

3.3 Ionic Liquid — Search离子液体查找



Search提供了查找离子液体功能，数据库来源为Iolitech公司所存储的离子液体实验数据，其中查找到的离子液体都是实际存在并且可以购买的，性质数据为实验数据。用户可以选择通过离子液体种类查询或离子液体名称查询，如下图所示。

Search Ionic Liquid by Type

Cation type:

Anion type:

Dataset:

Submit

Search Ionic Liquid by Name

Cation name:

Anion name:

Dataset:

Submit

展示查找结果

	label	formula	cation	anion	cation_type	anion_type	ECW
0	Choline acetate	C7H17NO3	Choline	acetate	Choline	acetate	0.0
	melting_point	conductivity	T_conductivity	viscosity	T_viscosity	density	T_density
	>RT	0.0	25	0.0	25	0.0	25

依托文章: Machine learning-guided discovery of ionic polymer electrolytes for lithium metal batteries

访问地址: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/ionic_liquid/XGBoostpredict

开发者: 汪莹老师

博学而笃志，切问而近思



3.4 Ionic Liquid — Calculate离子液体量子化学计算

Callculate提供了离子液体量子化学计算功能，与之前的高通量计算程序相比，这里采用psi4作为计算程序，用户需要输入SMILES式，基组和泛函后，才能开始量子化学计算。但是近期开发的基于Gaussian16的量子化学计算程序的计算稳定性和速度要优于psi4，所以该模块将会被慢慢淘汰掉。可以使用Autocompute中的量子化学程序代替。

Cation

Enter Cation SMILES

Theory:

scf

Basis set:

6-31g*

Method:

single-point

Calculate

Enter Anion SMILES

Theory:

scf

Basis set:

6-31g*

Method:

single-point

Calculate

计算结果
—————>



Asphericity	0.420323
basis_sets	b3lyp/6-31g*
Dipole_Total	0.0
Dipole_x	0.0
Dipole_y	0.0
Dipole_z	0.0
Eccentricity	0.964396
energy	-79.828835
ExactMolWt	30.04695
FpDensityMorgan1	2.0

依托文章: Machine learning-guided discovery of ionic polymer electrolytes for lithium metal batteries

访问地址: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/ionic_liquid/calculate 开发者: 汪莹老师

博学而笃志，切问而近思

3.5 CEMP项目功能一览



数据库:

1. 综合计算数据库: <https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/Database>
2. 离子液体计算数据库: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/ionic_liquid/ILgenerator_IL_database

高通量/用户友好计算程序:

1. 量子化学单点高通量计算程序: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/HTQC_single_point
2. 量子化学单点计算程序: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/Single_point_energy
3. 二聚体/结合能高通量计算程序: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/HTQC_binding_energy
4. 二聚体/结合能单点计算程序: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/Binding_energy
5. 分子动力学模拟自动化 workflow: <https://cleanenergymaterials.cpolar.top/autocompute/MDCompute>

性质预测程序:

1. 离子液体性质高通量预测程序: https://cleanenergymaterials.cpolar.top/ionic_liquid/XGBoost_predict

更多功能正在开发中…….

04

技术支持与平台对比





技术支持:

1. 高通量量子化学计算程序
2. 分子动力学模拟自动化 workflows
3. 聚合物2Dto3D生成程序
4. 聚合物熔体与聚合物模拟平衡理论与流程
5. 相关原始数据积累
6. 离子液体生成器
7. 离子液体性质预测模型

软件支持:

1. 量子化学计算: Gaussian16
2. 分子动力学模拟: Gromacs2018.8
3. 框架: Django
4. 开发语言: Python, Javascript, HTML
5. AI支持: CHATGPT, Perplexity



1. CalcUS¹: 开源的计算化学平台, Django开发, 依托第三方程序 (Gaussian等) 进行量子化学计算, 目前仅在arxiv上发布, 没有实体网站。 (**ARXIV**)
2. Rowan (<https://rowansci.com>): 商业的基于云技术的量子化学, WEB端, 提供了单点能、结构优化、pka、构象搜索、势能面扫描、氧化还原反应预测等。
3. AceCloud²: 开源的云端分子动力学模拟, 基于ACEMD程序开发, 操作复杂, 需要使用命令行执行, 没有图形化界面, 设计目的为利用云端计算资源进行MD计算。 (**JCIM**)
4. GROMACS in the Cloud³: 开源的云端分子动力学模拟, 设计理念同AceCloud (**JCIM**)。
5. Visual dynamics⁴ (<http://visualdynamics.fiocruz.br/login>): 开源的WEB端 (Flask开发) 分子动力学模拟平台, 主要用于蛋白质分子模拟, 基于Gromacs, 设计理念类似于CEMP的MDCompute。 (**BMC Bioinformatics**)
6. WebGro (<https://simlab.uams.edu/>): 开源WEB端平台, 设计理念和方式类似于CEMP的MDCompute。
7. QCArchive (<https://qcarchive.molssi.org/>): 开源WEB端平台, 支持量子化学计算, 需通过代码实现。

[1] CalcUS: An Open-Source Computational Chemistry Web Platform.

[2] AceCloud: Molecular Dynamics Simulations in the Cloud

[3] GROMACS in the Cloud: A Global Supercomputer to Speed Up Alchemical Drug Design

[4] Visual dynamics: a WEB application for molecular dynamics simulation using GROMACS



相比于上述工作的优点:

1. 第一款提供量子化学计算、分子动力学模拟的在线平台。
2. 全面且用户友好, 同时集成数据库, 量子化学计算、分子动力学模拟的在线平台。
3. 支持高通量计算程序执行。

网站目前不足之处:

1. 计算设定几乎不可调节 (例如量子化学的基组和泛函, 分子动力学的力场, 初始构型等), 用户可以选择需要进行分析的性质。
2. 网站不具备手把手的清晰教程。
3. 可进行更多计算功能, 例如势能面扫描、反应预测、光谱计算等。
4. 数据库的交互界面远不如现在非常成熟的Materials Project。

未来建议:

1. 网站使用教程上, 应学习: <https://simlab.uams.edu/ProteinInWater-tutorial/index.html>
2. 量子化学计算功能, 应学习: <https://rowansci.com/features>
3. 计算设定调节上, 应学习: <https://simlab.uams.edu/ProteinInWater-tutorial/index.html>

注意事项



1. 网站部署于课题组服务器，由于资源限制以及版权，目前仅针对课题组内部开放使用权限。
2. 任务数据仅会保留30天，过期将会被删除。
3. 提交的数据将会同步保存在数据库中。
4. 由于资源限制，所有程序将以规定的核心数和进程数运行，用户无法更改。
5. 平台具有队列控制，目前最大允许同时进行任务数为3，正在运行的任务数超过3时，将进入排队队列，任务将被休眠，直至前方任务收到任务结束信号，所以请不要多次重复提交任务以免造成资源浪费。
6. 用户提交的任务最大执行时限为72小时，如果执行时间超过了72小时，任务将被强制终止，所以对于分子动力学模拟，仅支持较短时间的模拟（50ns以内），而高通量量子化学程序，如果提交分子数较多，需要分多次提交任务以避免超时。
7. **Gaussian具有版权，如果使用方没有版权，则计算数据不能用于发表或者商业目的。**

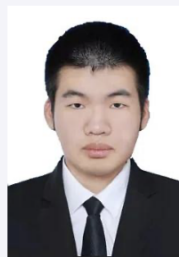


Ying Wang

Contact: wying@fudan.edu.cn

Contribution:

1. Provided the website concept.
2. Guided the design direction.
3. Developed the framework of the website.
4. **Ionic Liquids** section.



Jifeng Wang

Contact: wangjifeng11111@gmail.com

Contribution:

1. **Autocompute** section.
2. **Ionic Liquids** section.
3. **Query** Algorithm.
4. Logic Algorithm and Function Development.
5. **Contributor** section.



JiaZhe Ju

Contact: jiazheju@gmail.com

Contribution:

1. **BATTERY MANAGE SYSTEM** section.
2. Website details.
3. **User login and management**.



恳请指正！

博学而笃志

切问而近思

