

模板信息

模板名称 催化材料数据模板

模板标签 特种功能材料

模板类型 模板

可见范围 公开

模板说明 根据 T/CSTM 00120 《材料基因工程数据通则》 和 T/CSTM 00796 《材料实验数据 通用要求》 的核心理念，材料数据库主要为催化材料理论计算数据提供支持

创建人 云伟航

创建时间 2026-02-01 15:33:31

更新人 郭宇

更新时间 2026-02-04 15:30:26

审核人

审核时间

审核状态 待审核

模板来源 新材料大数据中心

▼ 对象区域

▼ 通用元数据（容器型）

数据唯一标识（字符串型）

创建日期（字符串型）

▼ 材料识别（容器型）

基底材料（字符串型）

晶面指数（字符串型）

活性位点（字符串型）

负载团簇（字符串型）

▼ 结构表示（容器型）

洁净表面结构（文件型）

吸附构型文件（文件型）

过渡态结构文件（文件型）

结构哈希（字符串型）

▼ 操作区域

▼ 计算参数（容器型）

泛函类型（字符串型）

以上网格（字符串型）

K点网格 (字符串型)

截断能 (数值型)

▼ 过渡态搜索 (容器型)

方法 (字符串型)

插值图象数 (数值型)

收敛标准 (数值型)

▼ 结果区域

▼ 表面性质 (容器型)

表面能 (数值型)

功函数 (数值型)

d带中心 (数值型)

▼ 反应热力学 (容器型)

吸附物种 (字符串型)

吸附能 (数值型)

吉布斯自由变能 (数值型)

极限电位 (数值型)

▼ 反应动力学 (容器型)

基元反应步骤 (字符串型)

活化能垒 (数值型)

反应热 (数值型)

理论转换频率 (数值型)

模板内容

对象区域

*通用元数据



*数据唯一标识

*创建日期

*材料识别



*基底材料

*晶面指数

描述: (111)/(100)等

*活性位点

负载团簇

描述: 如有则填

*结构表示

洁净表面结构

↑上传

吸附构型文件

↑上传

过渡态结构文件

↑上传

结构哈希

操作区域

*计算参数



泛函类型

K点网格

截断能

eV

*过渡态搜索 ^

方法

描述: CI – NEB/Dimmer等

插值图象数

  单位

收敛标准

  eV

结果区域 ^

表面性质

表面能

^
vJ/m²

功函数

^
v

eV

d带中心

^
v

eV

*反应热力学

^

吸附物种

吸附能

^
v

eV

吉布斯自由变能

^
v

eV

极限电位

 ^ ▼

V

*反应动力学

^

基元反应步骤

活化能垒

 ^ ▼

eV

反应热

 ^ ▼

eV

*理论转换频率

 ^ ▼

s⁻¹

规则配置

按整个模板计入

对象区域

*通用元数据 ^

*数据唯一标识

*创建日期

*材料识别 ^

*基底材料

*晶面指数

描述: (111)/(100)等

*活性位点

负载团簇

描述: 如有则填

*结构表示

洁净表面结构

↑上传

吸附构型文件

↑上传

过渡态结构文件

↑上传

结构哈希

操作区域

*计算参数



泛函类型

K点网格

截断能

^
v

eV

*过渡态搜索 ^

方法

描述: CI – NEB/Dimmer等

插值图象数

  单位

收敛标准

  eV

结果区域

按容器计入

表面性质



表面能

	-	J/m ²
--	---	------------------

功函数

	-	eV
--	---	----

d带中心

	-	eV
--	---	----

按容器计入

*反应热力学



吸附物种

	-	
--	---	--

吸附能

	-	eV
--	---	----

吉布斯自由变能

	-	eV
--	---	----

计1个

