

## 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）

基片网格（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）

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**

^

v

单位

**收敛标准**

^

v

eV

**结果区域**

**表面性质**



**表面能**

功函数

J/m<sup>2</sup>

d带中心

eV

## \*反应热力学



吸附物种

吸附能

eV

吉布斯自由变能

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

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

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

^

v

单位

收敛标准

^

v

eV

结果区域

☐ 按容器计入

表面性质



☐ 表面能

↑

↓

J/m<sup>2</sup>

☐ 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



