用户测评报告

合成氨催化剂推荐工具

报告编号：ZNKXJ-2025-06FZKXFX-001

测评对象：合成氨催化剂推荐工具

测评周期：2025.11.11 -- 2025.11.25

测评方：中国科学技术大学化学物理系合成氨催化研究团队

一、测评概述

1. 测评目的：本次用户测评以收集用户对合成氨催化剂推荐工具的使用反馈为主要目的，重点评估工具在铁基与钴基合成氨催化剂设计场景中的实际适用性与专业一致性，通过分析用户对推荐结果合理性、参数设置过程及整体使用体验的主观评价，识别工具在当前应用范围内的优势与不足，为后续功能优化提供依据。

2. 测评范围：本次测评范围限定在铁基催化剂与钴基催化剂两类合成氨体系，围绕用户在上述催化剂类型下的参数输入、约束条件设置以及推荐结果展示等环节的使用反馈展开，重点关注用户对活性相、载体、助剂、微观结构、尺寸及组分负载量等关键推荐信息在专业合理性和可理解性方面的评价。

3. 测评方法：本次测评采用用户反馈收集的方法开展，组织相关领域用户基于铁基与钴基合成氨催化剂的典型设计案例使用推荐工具，在完成操作后通过问卷和文字描述形式反馈其使用体验与意见，最终得到测评结论。

二、测评信息

1. 测评对象版本：合成氨催化剂推荐工具 V1.0。

2. 目标用户：中国科学技术大学化学物理系合成氨催化研究团队研究生。

3. 测评样本：4 名用户，2 组测试数据（含铁基催化剂和钴基催化剂）。

三、测评结果

3.1 测评数据

数据来源于中国科学技术大学化学物理系合成氨催化研究团队的实验需求，具体

内容如下：

铁基催化剂

活性相：Fe

载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes)

助剂：待预测（提示：Exclude common promoters, e.g., potassium, sodium, cesium, barium, and calcium；数量：10）

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：待预测（提示：无；数量：1）

组分负载量：待预测（提示：Fe: 10.0 wt%；数量：1）

钴基催化剂

活性相：Co

载体：待预测（提示：Limit the support to lanthanide metal oxides；数量：1）

助剂：NOT USED

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：待预测（提示：无；数量：1）

组分负载量：Co: 1.0-5.0 wt%

3.2 测评结果

根据用户提供的铁基催化剂设计需求，工具生成的候选配方如下，表中未加粗部分表示用户输入的限制条件，加粗部分表示工具预测的推荐结果：

铁基催化剂 01

活性相：Fe

载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes)

助剂：**Sm_2O_3**

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：**Fe: 3.5 nm**

组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, Sm_2O_3: 2.5 wt%**

铁基催化剂 02

活性相：Fe

载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes)

助剂：**La_2O_3**

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：**Fe: 8.5 nm**

组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, La_2O_3: 5.0 wt%**

铁基催化剂 03

活性相：Fe

载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes)

助剂：**CeO_2**

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：**Fe: 8.5 nm**

组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, CeO_2: 5.0 wt%**

铁基催化剂 04

活性相：Fe

载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes)

助剂：**Y_2O_3**

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：**Fe: 5.0 nm**

组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, Y_2O_3: 2.0 wt%**

铁基催化剂 05

活性相：Fe

载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes)

助剂：**ZrO_2**

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：**Fe: 7.5 nm**

组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, ZrO_2: 2.0 wt%**
铁基催化剂 06 活性相：Fe 载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes) 助剂：**TiO_2** 活性相微观结构：Supported Nanoparticles 活性相尺寸：**Fe: 3.5 nm** 组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, TiO_2: 2.0 wt%**
铁基催化剂 07 活性相：Fe 载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes) 助剂：**MgO** 活性相微观结构：Supported Nanoparticles 活性相尺寸：**Fe: 3.5 nm** 组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, MgO: 2.5 wt%**
铁基催化剂 08 活性相：Fe 载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes) 助剂：**Al_2O_3** 活性相微观结构：Supported Nanoparticles 活性相尺寸：**Fe: 4.5 nm** 组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, Al_2O_3: 2.5 wt%**
铁基催化剂 09 活性相：Fe 载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes) 助剂：**SiO_2**

活性相微观结构：Supported Nanoparticles 活性相尺寸：**Fe: 8.5 nm** 组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, SiO_2: 2.5 wt%**
铁基催化剂 10 活性相：Fe 载体：WMCNTs (Multi-walled Carbon Nanotubes) 助剂：**MoO_3** 活性相微观结构：Supported Nanoparticles 活性相尺寸：**Fe: 1.5 nm** 组分负载量：**Fe: 10.0 wt%, MoO_3: 2.0 wt%**

在工具给出的铁基催化剂设计方案（Fe/WMCNTs 体系，引入 MoO_3 作为助剂）的指导下，用户进一步开展了针对性的催化性能测试。通过在 300-400 °C 不同反应温度条件下测定催化剂的氨生成速率（以 $mmol \cdot gcat^{-1} \cdot h^{-1}$ 表示），对推荐结果的有效性进行了初步实验验证。实验结果表明，与 Fe/N-MWCNTs 及 Mo/N-MWCNTs 对照样品相比，Mo-Fe/N-MWCNTs 催化剂在中高温区间表现出显著更高的氨生成速率。具体而言，在 350 °C、375 °C 和 400 °C 条件下，Mo-Fe/N-MWCNTs 催化剂的氨生成速率分别约为 Fe/N-MWCNTs 的 **2.9 倍**、**2.8 倍**和 **2.8 倍**。此外，在 Mo/N-MWCNTs 具备可比数据的 375 °C 和 400 °C 条件下，Mo-Fe/N-MWCNTs 催化剂的氨生成速率分别约为其 **4.4 倍**和 **7.3 倍**。上述结果表明，Mo 助剂与 Fe 活性组分之间可能存在协同促进效应，其引入可显著提升铁基催化剂在中高温区间的合成氨活性。相关实验结果在一定程度上验证了该推荐工具在助剂选择及催化剂组成设计方面的合理性，为其在铁基合成氨催化剂设计中的应用提供了初步的实验依据。后续可结合更丰富的实验数据与对照体系，对推荐工具在不同催化剂构型中的适用性与稳定性进行进一步评估。

催化剂样品	组成说明	300 °C	325 °C	350 °C	375 °C	400 °C
Mo-Fe/N-MWCNTs	Mo:Fe = 1:10	0	0.50	1.17	2.39	4.22
Fe/N-MWCNTs	10 wt% Fe	0	0	0.40	0.86	1.52
Mo/N-MWCNTs	20 wt% Mo	0	0	0	0.54	0.58

根据用户提供的钴基催化剂设计需求，工具生成的候选配方如下，表中未加粗部

分表示用户输入的限制条件，加粗部分表示工具预测的推荐结果：

钴基催化剂 01

活性相：Co

载体：**CeO_2**

助剂：NOT USED

活性相微观结构：Supported Nanoparticles

活性相尺寸：**Co: 2.5 nm**

组分负载量：Co: 1.0-5.0 wt%

3.3 用户反馈

1. 优势亮点：

1) 工具在多数测试场景下输出的催化剂推荐结果具有较好的专业合理性，且具备一定的科研可行性，用户愿意基于推荐结果开展后续实验验证。例如，在钴基合成氨催化剂设计中，工具预测的载体为二氧化铈，活性相尺寸集中在 1.5 nm 至 3.0 nm 区间；在铁基催化剂设计中，工具不局限于常见助剂体系，还能够推荐三氧化钼、氧化镧、二氧化铈、氧化钐等相对新颖且具备理论合理性的助剂组合，体现出一定的探索性与潜在科研价值；

2) 工具在给出推荐结果的同时能够关联参考文献，并展示大语言模型的推理过程，有助于用户理解推荐逻辑，提高了结果的透明度与整体可信度；

3) 工具能够在约一分钟内完成单一催化剂配方的推荐，整体响应速度较快，适用于多方案并行对比与初步大规模筛选场景。

2. 主要问题：

1) 部分用户指出，当前工具在提供参考文献的基础上，仍可进一步细化文献依据的呈现方式，例如明确对应的具体段落或关键信息位置，并在推理过程中更直观地体现预测结果与文献依据之间的对应关系，以进一步增强结果的可解释性与可信度。

3. 典型建议：

1) 建议后续在现有文献库基础上，进一步总结不同体系下的催化机理与经验规律，并将其引入推荐逻辑中，以提升预测结果的科学支撑程度，增强推荐可信度，从而更好地辅助科研人员进行快速迭代与方案优化。

四、测评结论

综合本次用户测评结果，合成氨催化剂推荐工具在核心功能表现、专业合理性及响应效率等方面整体表现良好，能够在铁基与钴基合成氨催化剂设计场景中为用户提供具有参考价值的推荐方案。用户普遍认为，工具输出结果具备较好的科学合理性与一定的实验可行性，推荐内容不仅覆盖常见催化体系，还体现出一定的探索性，有助于拓展研究思路。同时，工具在结果生成过程中提供文献关联与推理过程展示，提高了推荐结果的透明度与可信度，并在推荐效率上满足多方案并行筛选的实际需求。测评也显示，工具在文献依据呈现的精细化与机理层面支撑方面仍具进一步优化空间。总体来看，该工具已具备较好的应用基础和科研辅助价值，通过持续完善文献支撑与知识整合能力，有望在催化剂设计与快速迭代中发挥更大的支撑作用。

测评方签字：	**日期：** 2025.12.27