李积升,山金芳,郭锦先,等.二元熔盐体系熔化焓的数据集及其预测模型构建与性能研究[J].盐湖研究,2026,34(2):16-21.
Li J S, Shan J F, Guo J X, et al. Dataset and prediction model construction of melting enthalpy of binary molten salt systems and their performance research[J]. Journal of Salt Lake Research, 2026, 34(2): 16-21.
DOI:10.3724/j.yhyj.2025101
CSTR:32273.14.j.yhyj.2025101

二元熔盐体系熔化焓的数据集及其预测模型构建与性能研究

李积升[1,2],山金芳[1],郭锦先[1],胡玉峰[2],张来勇[2],孙长宇[2]
(1.中国科学院青海盐湖研究所,盐湖资源绿色高值利用重点实验室,青海 西宁 810008;
2.中国石油大学(北京)化学工程与环境学院,北京 102200)

摘 要:研究系统收集了氯化盐、硝酸盐和碳酸盐等二元熔盐体系的熔化焓实验值数据,并以此为基础,建立了四种经验预测模型,分别为对数形式(模型Ⅰ)、线性加和形式(模型Ⅱ)、分数形式(模型Ⅲ)和幂指数形式(模型Ⅳ)。此外,将各不同模型预测值与实验值进行了对比和误差计算。结果表明,采用分数形式的模型Ⅲ具有最佳的预测准确性,该模型预测值与实验值的总平均绝对相对误差仅为0.07。这表明混合熔盐熔化焓与不同组分间存在分数非线性关系。模型Ⅰ的预测精度次之,而模型Ⅱ与模型Ⅳ的预测误差较前二者更大。各模型对氯化盐与碳酸盐体系的预测精度高于硝酸盐体系,分析认为这与硝酸根离子具有更复杂的空间结构以及更强的位阻效应有关。研究为二元熔盐关键热物性熔化焓的快速预测提供了可靠模型,并为后续推广至多元熔盐体系预测模型提供了参考和依据。

关键词:二元熔盐体系;熔化焓;预测模型;热物性
中图分类号:TQ124.4 **文献标志码**:A **文章编号**:1008-858X(2026)02-0016-06

“双碳”背景下,可再生能源快速发展,正成为国家能源的重要来源之一[1]。然而,受自然因素的影响,可再生能源极易出现供应和需求不平衡的问题[2]。在此背景下,热能储存被认为是有效解决可再生能源供需平衡的关键技术,发展高效、稳定、经济的储热系统能为可再生能源的大规模应用提供重要支撑[3,4]。在众多储热材料中,熔盐因其工作温度范围宽、蒸汽压低、热稳定性和化学稳定性良好、成本低廉等特点,被广泛应用于光热发电站、核电站、余热回收等场景[5,6]。

熔盐材料的热物理性质直接决定了其作为储热材料时储热系统的效率、成本和运行稳定性[7]。为获得适用于不同场景下的理想熔盐材料,例如更低的熔点、更好的稳定性和更低廉的成本,实际应用时往往采用共晶熔盐,即多元混合熔盐体系[8,9]。而获取多元熔盐体系的物性数据主要源于反复的实验测定,这需要大量的时间、人力、物力成本[10,11]。因此,建立适用于多元熔盐物性的预测模型至关重要,能显著缩短熔盐体系设计与开发周期。

熔化焓是熔盐作为储热介质的关键热物性,反映了熔盐材料的储能密度。尤其在相变储热中,熔化焓的值直接决定系统能否维持温度恒定,以确保整个储热系统的稳定[12,13]。目前,对于熔盐熔化焓的预测,简易的线性混合计算预测效果欠佳,因为熔盐作为离子流体,混合后的物性通常具有一定的非理想性[14]。一些经验模型在预测熔盐熔化焓时,预测精度仍有所不足,且对于众多不同种类的熔盐体系,适用性也有所欠缺[15]。二元熔盐体系是构成多元体系的基础,建立能准确预测二元熔盐体系的计算模型,并分析其适用性是进一步推广至多元熔盐预测模型的必要步骤。

基于以上,本研究旨在构建能够准确预测二元熔盐体系熔化焓的预测模型体系,且能够适用于不同的熔盐体系,同时为将来推广到多元熔盐体系奠定基础。在研究前期,我们收集并整理了二元熔盐体系的熔化焓数据,涵盖氯化盐、硝酸盐、碳酸盐等熔盐种类,确定了不同类别熔盐熔化焓的大致数值

收稿日期:2025-11-26;**修回日期**:2025-12-09
基金项目:青海省科技厅基础研究计划项目(2023-ZJ-711)
作者简介:李积升(1984—),男,博士研究生,高级工程师,研究方向:盐湖资源综合利用及储热应用。Email:lijisheng2000@126.com。

范围。以整理的二元熔盐体系熔化焓数据为基础,本研究建立了四种不同计算类型,分别基于对数形式、加和形式、分数形式及幂指数形式。此外,将各模型的预测值与收集的实验值进行对比和误差计算,评估不同计算形式下模型的适用性。得到的结论可为模型进一步优化,并最终构建多元熔盐混合预测模型提供参考和依据。

1　数据集元数据简介

《二元熔盐体系熔化焓的数据集及其预测模型构建与性能研究》的名称、作者、地理区域、数据年代、地理区域、数据量、数据格式、数据出版与共享服务平台、基金项目和数据集组成见表1。

表1　数据库(集)基本信息简介

Table 1　Introduction to basic information of the database (set)

数据库(集)名称	二元熔盐体系熔化焓的数据集及其预测模型构建与性能研究
数据作者	李积升,山金芳,郭锦先,胡玉峰,张来勇,孙长宇
数据通信作者	李积升
数据年代	1983-2019
地理区域	中国,美国,英国
数据量	111 KB
数据格式	*.png,*.doc,*.xlsx,*.py
数据服务系统网址	https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00265.00019; https://cstr.cn/31253.11.sciencedb.j00265.00019
基金项目	青海省科技厅基础研究计划项目(2023-ZJ-711)
数据集组成	本数据集包含氯化盐、硝酸盐和碳酸盐三个二元熔盐体系,不同质量分数的熔化焓实验值数据和预测数据,建立了四种熔化焓的预测模型

2　数据采集和处理方法

2.1　数据收集

在建立模型之前,收集了不同二元熔盐体系的熔化焓数据,如表2所示[8,16-18]。这些数据为后续预测模型的建立和验证提供了基础。

由表2中的数据可以初步评价,不同类型熔盐的熔化焓差异明显,即使同一类型熔盐的熔化焓,组分的不同也对熔化焓有不可忽略的影响。而熔盐熔化焓受组分组成变化的影响有限,这一点由图1~3中的趋势也可以得到。图中趋势还表明,三类二元熔盐体系熔化焓随组分变化的趋势呈现一定的规律,探究这种规律的内在联系能为有效建立模型提供基础。

表2　二元熔盐体系熔化焓

Table 2　Melting enthalpy of binary molten salt system

组分1	质量分数/wt%	组分2	质量分数/wt%	熔化焓/(kJ·kg^{-1})
		氯化盐		
$AlCl_3$	82.50	LiCl	17.50	251.00
$AlCl_3$	78.40	KCl	21.60	254.00
$AlCl_3$	88.50	LiCl	11.50	252.00
KCl	61.00	$MgCl_2$	39.00	351.00
KCl	51.20	KF	48.80	407.00
NaCl	73.40	NaF	26.60	170.00
NaCl	76.00	LiF	24.00	476.90
LiCl	64.50	NaCl	35.50	414.50
		硝酸盐		
$LiNO_3$	62.00	$NaNO_3$	38.00	248.00
$LiNO_3$	60.00	$NaNO_3$	40.00	265.00
$LiNO_3$	85.00	NaCl	15.00	369.00
$LiNO_3$	92.50	NaCl	7.50	354.00
$LiNO_3$	97.40	$Ba(NO_3)_2$	2.60	368.00
$LiNO_3$	99.00	$Ba(NO_3)_2$	1.00	368.00
$NaNO_3$	74.20	NaOH	25.80	158.00
$NaNO_3$	72.00	NaOH	28.00	158.00
KNO_3	58.00	$LiNO_3$	42.00	170.00
KNO_3	59.50	$LiNO_3$	40.50	136.00
KNO_3	50.00	$NaNO_3$	50.00	100.70
KNO_3	40.00	$NaNO_3$	60.00	108.67
KNO_3	50.00	$NaNO_3$	50.00	105.00
		碳酸盐		
K_2CO_3	72.00	Li_2CO_3	28.00	263.00
K_2CO_3	71.50	Li_2CO_3	28.50	316.00
K_2CO_3	50.00	Li_2CO_3	50.00	335.00
K_2CO_3	65.00	Li_2CO_3	35.00	344.00
Li_2CO_3	75.20	LiF	24.80	594.50
Na_2CO_3	55.70	Li_2CO_3	44.30	372.00
Na_2CO_3	56.00	Li_2CO_3	44.00	368.00
Na_2CO_3	55.60	Li_2CO_3	44.40	370.00
Na_2CO_3	78.30	Li_2CO_3	21.70	316.00

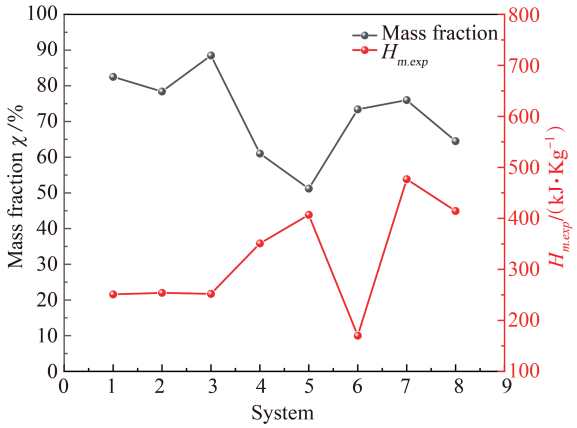


图1　各种氯化盐熔盐体系熔化焓比较

Fig. 1　Comparison of melting enthalpies of various chloride molten salt systems

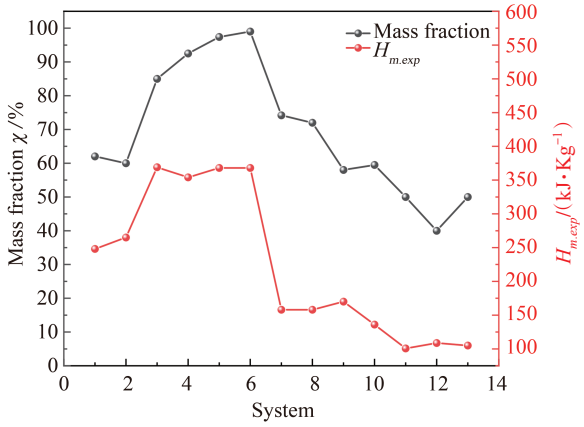


图2 各种硝酸盐熔盐体系熔化焓比较

Fig. 2 Comparison of melting enthalpies of various nitrate molten salt systems

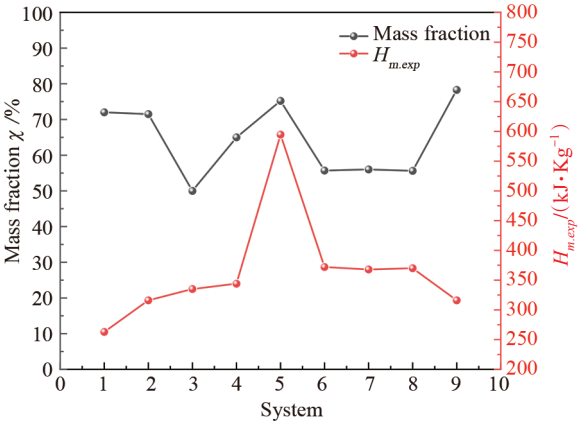


图3 各种碳酸盐熔盐体系熔化焓比较

Fig. 3 Comparison of melting enthalpies of various carbonate molten salt systems

2.2 数据模型建立

采用模型建立假设体系的组成可通过质量分数、摩尔分数和体积分数表示，基于体系的组成建立初步的组分分数方程如(1)所示：

$$0 \leqslant m_i \leqslant 1 \tag{1}$$

其中，m_i表示体系中各不同组分的质量分数、摩尔分数或体积分数；i表示体系中的每个组分。

根据已有的经验预测模型以及熔化焓物性的变化趋势，本研究建立以下四种类型的预测模型对二元熔盐体系的熔化焓进行预测：

模型Ⅰ，对数形式：

$$\lg\left(\Delta H_{f,mix}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(m_i \lg\left(\Delta H_{f,i}\right)\right) \tag{2}$$

模型Ⅱ，加和形式：

$$\Delta H_{f,mix}=\sum_{i=1}^{n}\left(m_i \Delta H_{f,i}\right) \tag{3}$$

模型Ⅲ，分数形式：

$$\frac{1}{\Delta H_{f,mix}}=\sum_{i=1}^{n}\left(m_i \frac{1}{\Delta H_{f,i}}\right) \tag{4}$$

模型Ⅳ，幂指数形式：

$$\Delta H_{f,mix}=\left(\sum_{i=1}^{n} m_i * \Delta H_{f,i}^{\frac{1}{n}}\right)^n \tag{5}$$

幂指数方程形式的指数需要取决于熔盐体系的不同进行变化。

其中，$\Delta H_{f,mix}$表示二元混合熔盐的熔化焓，$\Delta H_{f,i}$表示纯组分的熔化焓，m_i表示该组分在混合熔盐中的含量，通常以摩尔分数、质量分数或体积分数表示。

2.3 数据处理

预测结果需与从实验结果得到的实验数据进行比较。在不同组分和组成体系的整个数据范围内，模型预测值和实验测量值之间的平均绝对相对误差可以通过下式定义。

$$\delta_d=\frac{1}{N}\sum_{i}^{n}\left|H_{m.exp}-H_{m.cal}\right| \Big/ H_{m.exp} \tag{6}$$

3 数据产品描述

3.1 预测结果比较与分析

不同二元熔盐体系的预测计算结果与原始实验值的对比和误差如表2所示。图4展示了不同体系各模型预测值与实验值的相对误差，图5展示了不同熔盐体系下各模型的平均误差与总相对误差的对比。由表2以及图4、5可知，通过对建立的模型方程预测数据与实验值进行比较，三种熔盐体系在四种模型方程下的预测精度各不相同。

在氯化盐体系下，平均绝对相对误差最大为0.16；

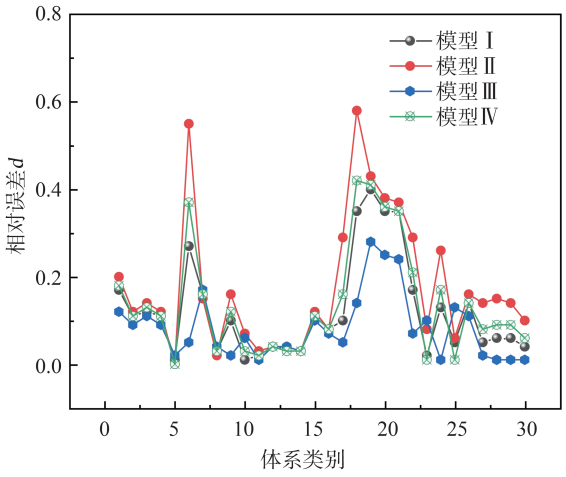


图4 各模型预测值的相对误差

Fig. 4 Relative errors of predicted values for each model

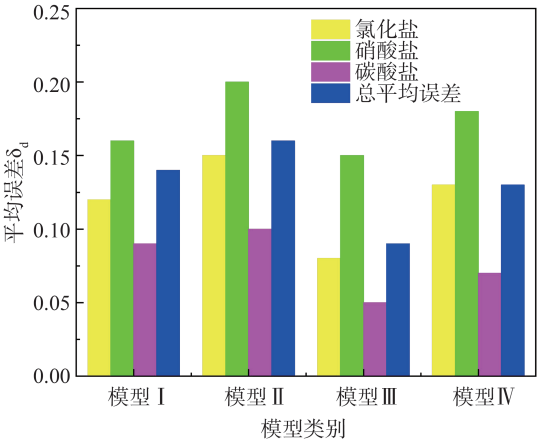


图5　各模型的平均误差与总相对误差对比

Fig. 5　Comparison of average error and total relative error of various models

预测值与实验值的最大绝对偏差为94.09 kJ·kg^{-1},来源于NaCl-LiF体系。硝酸盐体系下,平均绝对相对误差最大为0.20;预测值与实验值的最大绝对偏差为78.82 kJ·kg^{-1},来源于KNO_3-$LiNO_3$体系。碳酸盐体系下,平均绝对相对误差最大为0.15;预测值与实验值的最大绝对偏差为93.10 kJ·kg^{-1},来源于Li_2CO_3-LiF体系。由图4和图5发现,采用模型Ⅰ与模型Ⅲ计算得到的预测值与实验值的误差要明显低于模型Ⅱ和模型Ⅳ。后两种模型误差较前两种高的原因可能为模型Ⅱ为简易的线性加和形式,熔盐作为离子流体,其内部的相互作用导致了熔盐混合后物性产生一定的非线性变化[19]。而模型Ⅳ为幂指数形式,其指数值的变化直接影响模型预测的准确性。

表2　模型方程预测结果对比

Table 2　Comparison of prediction results from model equations

体系组成		质量分数/wt%		文献值	模型Ⅰ		模型Ⅱ		模型Ⅲ		模型Ⅳ		最大绝对偏差
Com_1	Com_2	m_1	m_2	$H_{m.exp}$	$H_{m.c}$	d	$H_{m.c}$	d	$H_{m.c}$	d	$H_{m.c}$	d	$\lvert\Delta\rvert$
$AlCl_3$	LiCl	82.50	17.50	251	292.85	0.17	300.62	0.20	286.90	0.12	295.23	0.18	49.62
$AlCl_3$	KCl	78.40	21.60	254	281.98	0.11	284.03	0.12	280.15	0.09	282.64	0.11	30.03
$AlCl_3$	LiCl	88.50	11.50	252	283.04	0.12	288.46	0.14	279.05	0.11	284.67	0.13	36.46
KCl	$MgCl_2$	61.00	39.00	351	388.65	0.11	391.59	0.12	385.84	0.09	389.62	0.11	40.59
KCl	KF	51.20	48.80	407	404.86	0.01	408.94	0.00	400.85	0.02	406.22	0.00	6.15
NaCl	NaF	73.40	26.60	170	215.38	0.27	264.09	0.55	162.00	0.05	233.46	0.37	94.09
NaCl	LiF	76.00	24.00	476.9	399.30	0.16	403.29	0.15	395.44	0.17	400.62	0.16	81.46
LiCl	NaCl	64.50	35.50	414.5	400.44	0.03	404.45	0.02	396.54	0.04	401.76	0.03	17.96
平均绝对相对误差 δ_d						0.12		0.16		0.09		0.14	
$LiNO_3$	$NaNO_3$	62.00	38.00	248	271.90	0.10	288.56	0.16	254.35	0.02	277.66	0.12	40.56
$LiNO_3$	$NaNO_3$	60.00	40.00	265	267.91	0.01	284.80	0.07	250.49	0.06	273.71	0.03	19.80
$LiNO_3$	NaCl	85.00	15.00	369	376.09	0.02	378.27	0.03	374.19	0.01	376.79	0.02	9.27
$LiNO_3$	NaCl	92.50	7.50	354	367.96	0.04	369.14	0.04	366.96	0.04	368.33	0.04	15.14
$LiNO_3$	$Ba(NO_3)_2$	97.40	2.60	368	354.95	0.04	356.07	0.03	353.36	0.04	355.36	0.03	14.64
$LiNO_3$	$Ba(NO_3)_2$	99.00	1.00	368	358.05	0.03	358.49	0.03	357.42	0.03	358.21	0.03	10.58
$NaNO_2$	NaOH	74.20	25.80	158	176.07	0.11	176.19	0.12	175.95	0.10	176.11	0.11	18.19
$NaNO_3$	NaOH	72.00	28.00	158	170.08	0.08	170.11	0.08	170.06	0.07	170.09	0.08	12.11
KNO_3	$LiNO_3$	58.00	42.00	170	186.65	0.10	218.48	0.29	162.16	0.05	196.78	0.16	48.48
KNO_3	$LiNO_3$	59.50	40.50	136	183.51	0.35	214.82	0.58	159.89	0.14	193.39	0.42	78.82
KNO_3	$NaNO_3$	50.00	50.00	100.7	141.25	0.40	144.00	0.43	138.56	0.28	142.17	0.41	43.30
KNO_3	$NaNO_3$	40.00	60.00	108.67	146.93	0.35	149.60	0.38	144.16	0.25	147.83	0.36	40.93
KNO_3	$NaNO_3$	50.00	50.00	105	141.25	0.35	144.00	0.37	138.56	0.24	142.17	0.35	39.00
平均绝对相对误差 δ_d						0.15		0.20		0.10		0.16	
K_2CO_3	Li_2CO_3	72.00	28.00	263	307.46	0.17	339.88	0.29	284.73	0.07	317.24	0.21	76.88
K_2CO_3	Li_2CO_3	71.50	28.50	316	308.92	0.02	341.74	0.08	285.78	0.10	318.84	0.01	30.22
K_2CO_3	Li_2CO_3	50.00	50.00	335	378.49	0.13	421.50	0.26	339.86	0.01	392.77	0.17	86.50
K_2CO_3	Li_2CO_3	65.00	35.00	344	328.48	0.05	365.85	0.06	300.22	0.13	340.11	0.01	43.78
Li_2CO_3	LiF	75.20	24.80	594.5	675.11	0.14	687.60	0.16	664.46	0.11	679.07	0.14	93.10
Na_2CO_2	Li_2CO_3	55.70	44.30	372	391.33	0.05	422.63	0.14	363.91	0.02	401.52	0.08	50.63
Na_2CO_3	Li_2CO_3	56.00	44.00	368	390.40	0.06	421.64	0.15	363.13	0.01	400.57	0.09	53.64
Na_2CO_3	Li_2CO_3	55.60	44.40	370	391.63	0.06	422.96	0.14	364.17	0.01	401.84	0.09	52.96
Na_2CO_3	Li_2CO_3	78.30	21.70	316	327.48	0.04	347.83	0.10	313.04	0.01	333.58	0.06	31.83
平均绝对相对误差 δ_d						0.08		0.15		0.05		0.09	
总平均绝对相对误差						0.13		0.18		0.07		0.13	

在本研究中，幂指数可能缺乏更详细具体的规则对其进行约束，这也是该形式的预测模型继续优化的方向。分数形式的模型Ⅲ是四类熔盐焓预测模型中的最佳预测模型，同时在相同熔盐种类中预测效果也最好，这表明混合熔盐的熔融焓与熔盐体系中各组分的熔融焓之间存在一定的分数非线性关系。此外，各模型对氯化盐和碳酸熔盐的预测效果优于硝酸盐，这一现象可能源于硝酸根离子的形状相对而言不规则，具有更显著的空间位阻效应[20,21]。

3.2 模型讨论

四种不同形式的预测模型，其本质均是对熔盐混合前后物性变化的数学描述。模型Ⅰ和模型Ⅱ形式简易，可以看作是对熔盐纯组分性质的加和，能快速进行物性预测，但缺乏对混合后相互作用的细致描述。模型Ⅲ的形式为分数形式，在热力学或者传输理论中，物性的倒数常常用来表述阻力或流动方面的能力。例如，电阻率的倒数是电导率，黏度的倒数反映流体的流动性等。因此，某种程度上熔化焓的倒数反映了熔化的效率或能力，这或许导致其在四种模型中有最好的预测性能。模型Ⅳ中的指数项 n 可作为随体系或组分调节的可调参数，以分别反映不同离子对之间的相互作用。理论上当熔盐体系组分增加，该参数可推广为更复杂的形式以更精确描述多元熔盐的混合，但需要大量准确的实验数据来约束参数规则，模型Ⅳ不稳定的预测误差也证明了这一点。

4 结 论

本研究提出了用于预测二元熔盐熔化焓的模型方程，包括对数形式、加和形式、分数形式和幂指数形式四种经验预测模型。四种预测模型均对氯化盐、硝酸盐和碳酸盐相关的二元熔盐体系进行了验证，并将计算出的多种熔盐的熔化焓预测值与文献报道的实测值进行了比较。结果表明，采用分数形式的模型Ⅲ具有最佳的预测性能，该模型下预测值与实验值的总平均绝对相对误差仅为0.07。模型Ⅰ的预测精度次之。由于方程形式与离子相互作用的因素，模型Ⅱ和模型Ⅳ预测误差高于前两种模型。此外，四种模型对氯化盐与碳酸盐体系的预测效果均优于硝酸盐体系。所有模型下三种熔盐体系熔化焓预测值与实验值的平均绝对相对误差均小于0.20，总平均绝对相对误差均小于0.18。理论上，模型Ⅳ具有推广至预测更多元熔盐体系的潜力，但需要大量准确的实验数据对可调参数进行约束。

作者分工：李积升，软件模拟、手稿写作、资源、监督；山金芳，数据收集、建模；郭锦先，数据分析；胡玉峰，模型开发；张来勇，数据处理；孙长宇，数据对比。

参考文献

[1] 齐英瑛. “双碳”目标下中国能源转型路径研究[D]. 成都：四川大学，2025.

[2] 周志霞. 可再生能源发展跟不上全球能源需求增速[J]. 中国石油石化，2025(18)：13.

[3] 潘晗晗，许磊，张燕，等. 熔盐储热耦合煤电机组调频调峰的技术研究[J]. 能源新观察，2025(8)：112-113.

[4] 牟志国，吕游，梁庚，等. 燃煤发电机组灵活性改造中熔盐储能系统的建模与性能分析[J]. 动力工程学报，2025：1-8.

[5] RANJAN PARIDA D，DANI N，BASU S. Data-Driven analysis of molten-salt nanofluids for specific heat enhancement using unsupervised machine learning methodologies [J]. Solar Energy，2021，227：447-456.

[6] LI Q J，KÜÇÜKBENLI E，LAM S，et al. Development of robust neural-network interatomic potential for molten salt [J]. Cell Reports Physical Science，2021，2(3)：100359.

[7] HASSAN M A，BANERJEE D. A soft computing approach for estimating the specific heat capacity of molten salt-based nanofluids[J]. Journal of Molecular Liquids，2019，281：365-375.

[8] SMIRNOV M V，KHOKHLOV V A，FILATOV E S. Thermal conductivity of molten alkali halides and their mixtures [J]. Electrochimica Acta，1987，32(7)：1019-1026.

[9] ZHAO D，YAN L，JIANG T，et al. On the viscosity of molten salts and molten salt mixtures and its temperature dependence [J]. Journal of Energy Storage，2023，61：106707.

[10] WEI X，CHEN D，LIU S，et al. Structure and thermophysical properties of molten calcium-containing multi-component chlorides by using specific BMH potential parameters[J]. Energies，2022，15(23)：8878.

[11] BHATNAGAR P，SIDDIQUI S，SREEDHAR I，et al. Molten salts：Potential candidates for thermal energy storage applications [J]. International Journal of Energy Research，2022，46(13)：17755-17785.

[12] WU X，HAO K，ZHAO M，et al. Investigation on thermal property enhancement of low melting point ternary molten salt and composite materials [J]. International Communications in Heat and Mass Transfer，2025，169：109332.

[13] 翁雪香，周奇昕，吴朝辉. 学科理解：比较分子晶体熔点应综合考虑熔化焓变和熔化熵变[J]. 化学教育(中英文)，2024，45(23)：99-103.

[14] XIE Y，BU M，LU G. Insights into $CaCl_2$-NaCl-KCl molten salt：A machine learning approach to unraveling structure and properties[J]. Journal of Energy Storage，2024，102：114156.

[15] SALANNE M, SIMON C, TURQ P, et al. Modeling of molten salts[M]//Molten Salts Chemistry. Elsevier, 2013: 1-16[2025-11-15].
[16] JANZ G J, TOMKINS R P T. Physical properties data compilations relevant to energy storage: Ⅳ. molten salts: Data on additional single and multi-component salt systems[J]. nasa sti/recon technical report n, 1981.
[17] JANZ G J, ALLEN C B, DOWNEY J R, et al. Physical properties data compilations relevant to energy storage[J]. Journal of physical and chemical reference data, 1988, 17.
[18] RODRIGUEZ A, LAM S, HU M. Thermodynamic and transport properties of LiF and FLiBe molten salts with deep learning potentials[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2021, 13(46): 55367-55379.
[19] 于超,潘格川崎. 高性能氯化物熔盐的结构与热物性分子动力学研究[J]. 储能科学与技术,2024,13(12):4368-4380.
[20] 邱刚,陈玉静,刘燕. 硝酸熔盐储能材料的研究进展与应用[J]. 氮肥技术,2025,46(3):33-35.
[21] XIE Y, BU M, LU G. Local structure and thermophysical property prediction for $CaCl_2$-KCl molten salt with machine learning potentials[J]. Materials Today Communications, 2024, 41: 110243.

Dataset and Prediction Model Construction of Melting Enthalpy of Binary Molten Salt Systems and Their Performance Research

LI Jisheng[1,2], SHAN Jinfang[1], GUO Jinxian[1], HU Yufeng[2], ZHANG Laiyong[2], SUN Changyu[2]
(1. *Key Laboratory of Green and High-end Utilization of Salt Lake Resources, Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xining*, 810008, *China*; 2. *School of Chemical Engineering and Environment, China University of Petroleum (Beijing), Beijing*, 102200, *China*)

Abstract: This study systematically collected experimental data on the melting enthalpy of binary molten salt systems, including chloride, nitrate, and carbonate salts. Based on this, four empirical prediction models were established, namely logarithmic form (Model Ⅰ), linear additive form (Model Ⅱ), fractional form (Model Ⅲ), and power-law form (Model Ⅳ). Furthermore, the predicted values of each model were compared with the experimental values, and the errors were calculated. The results showed that Model Ⅲ, using a fractional form, exhibited the best prediction accuracy, with a total average absolute relative error of only 0.07 between the predicted and experimental values. This indicates a fractional nonlinear relationship between the melting enthalpy of mixed molten salts and their different components. Model I had the second-highest prediction accuracy, while Models Ⅱ and Ⅳ had larger prediction errors compared to the former two models. The prediction accuracy of each model for chloride and carbonate systems was higher than that for the nitrate system, which is believed to be related to the more complex spatial structure and stronger steric hindrance effect of nitrate ions. This study provides reliable models for the rapid prediction of melting enthalpy, a key thermal property of binary molten salts, and offers a reference and basis for the subsequent extension of prediction models to multi-component molten salt systems.

Key words: Binary molten salt system; Melting enthalpy; Prediction model; Thermophysical properties