
上海应物所在氯化镁基熔盐热物性及微观结构研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25118.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院上海应用物理研究所在熔盐物性及结构预测方面取得了重要进展。该研究利用机器学习与分子动力学模拟技术，阐释了二元氯化镁基熔盐的微纳结构、热物性及其构效关系。相关研究成果以Development of Deep Potentials of Molten $\text{MgCl}_2\text{-NaCl}$ and $\text{MgCl}_2\text{-KCl}$ Salts Driven by Machine Learning为题，发表在ACS Applied Materials Interfaces上。

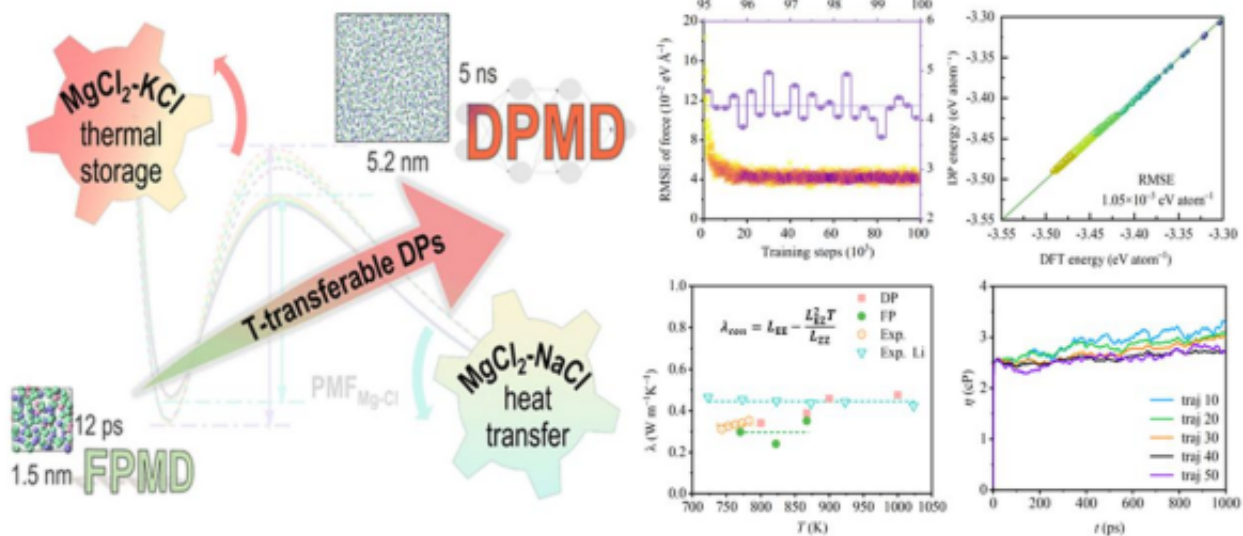
$\text{MgCl}_2\text{-NaCl}$ (MN) 和 MgCl_2

-KCl (MK) 熔盐作为性能较优且价格低廉的传热流体和储热介质，有望在第四代熔盐反应堆系统以及第三代太阳能热发电系统中发挥重要作用。熔盐的热容、密度、粘度和热导率等性质直接关系到热工系统的设计，但通过实验测量无法避免因熔盐高温下的反应性和腐蚀性带来的较大误差。第一性原理分子动力学 (FPMD) 模拟无需力场模型即可预测熔盐的性质，但可延申的时空尺度受限，对时间关联型性质的预测误差大；经典分子动力学模拟可以一定程度上消除尺度效应，但需要经验势参数的输入。

该研究基于FPMD模拟结果，采用深度学习的方法，获得两种盐的相互作用势；进一步，进行更大时空尺度的深度势模拟 (DPMD)，采用时间分解法并考虑热电耦合效应，优化了熔盐粘度和热导率的计算协议，解释了熔盐性质与局域结构的关联。本研究将熔盐性质预测误差减小到5%以内，并发现MK盐的比热容更高、储热性能更优。MN盐具有较大的热导率和较低的粘度，且在热传递方面表现更好。通过径向分布函数、平均力势和配位数等结构分析，该工作揭示了Mg-Cl键在熔盐性质中的重要作用：相比MN盐，Mg-Cl键在MK盐中结合更紧密，阴离子跳出第一配位壳层所需的能垒更高，因而MK盐的比热容高而传输性能低。此外，该研究获得的深度势模型具有高度泛化的能力，能够准确模拟在数据集温度下的熔盐性质，并能够实现非数据集温度下性质的预测。上述成果展示了机器学习在熔盐化学领域特别是在处理复杂熔盐体系热动力学性质方面的应用潜力。

研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金和上海应物所育新计划的支持。

[论文链接](#)



上海应物所在氯化镁基熔盐热物性及微观结构研究中获进展

研究团队单位：上海应用物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发