

引文格式:武芸竹,张二小,郭利超,等. FactSage 软件及数据库在氯化物熔盐体系中的应用[J]. 太原理工大学学报, 2026, 57(3):491-499.

WU Yunzhu, ZHANG Erxiao, GUO Lichao, et al. Applications of FactSage software and databases in chloride molten salt systems[J]. Journal of Taiyuan University of Technology, 2026, 57(3):491-499.

FactSage 软件及数据库在氯化物熔盐体系中的应用

武芸竹^{1,2}, 张二小^{1,2}, 郭利超², 刘刚², 罗树林¹, 吴桂选^{1,3}

(1. 中国科学院山西煤炭化学研究所 煤炭高效低碳利用全国重点实验室, 山西 太原;

2. 太原理工大学 化学与化工学院, 山西 太原; 3. 中国科学院大学, 北京)

摘要:【目的】高效储热技术成为解决可再生能源间歇性问题的关键,其性能由相变储能材料决定。氯化物熔盐因其热容高和导热性能好等诸多优势被广泛用作相变储能材料,但其热力学性质的实验测定面临高温和诸多不确定因素的挑战,因此热力学计算模拟方法成为重要手段。FactSage 作为一款强大的热力学计算软件,通过整合多类数据库和功能模块,为熔盐体系的热力学模拟提供了高效工具。【方法】系统介绍了 FactSage 在氯化物熔盐相变材料中的应用,通过平衡模块的吉布斯自由能最小化算法,准确预测了 NaCl-KCl-MgCl₂-CaCl₂ 体系在不同温度下以及 NaCl-KCl 体系在不同 KCl 组成下的相平衡状态及热力学参数;利用相图模块成功绘制了 KCl-MgCl₂-CaCl₂ 的液相线投影图及 MgCl₂-CaCl₂ 二元相图。【结果】为熔盐储能材料的组分设计和性能优化提供了理论支持,为氯化物熔盐体系研究领域的相关问题提供了新的解决方案和思路。

关键词:相变;相平衡;热力学;设计;优化;Factsage

中图分类号:TQ021.1 **文献标识码:**A

DOI: 10.16355/j.tyut.1007-9432.20250269

文章编号:1007-9432(2026)03-0491-09

Applications of FactSage Software and Databases in Chloride Molten Salt Systems

WU Yunzhu^{1,2}, ZHANG Erxiao^{1,2}, GUO Lichao², LIU Gang², LUO Shulin¹, WU Guixuan^{1,3}

(1. State Key Laboratory of Coal Conversion, Institute of Coal Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Taiyuan, Shanxi, China; 2. College of Chemistry and Chemical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan, Shanxi, China; 3. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, China)

Abstract:【Purposes】Efficient thermal storage technology is the key to solving the problem of intermittent renewable energy sources, whose performance is determined by phase change energy storage materials. Molten chloride salts are widely used as phase change energy storage materials owing to their many advantages, such as high heat capacity and good thermal conductivity. Still, the experimental determination of their thermodynamic properties faces challenges from high-temperature conditions

收稿日期:2025-04-23;修回日期:2025-05-28

基金项目:山西省留学回国人员科技活动择优资助项目(20230064)

第一作者:武芸竹,硕士研究生, (E-mail) wuyunzhu0710@link.tyut.edu.cn

通信作者:刘刚,博士,讲师,主要从事量子计算研究, (E-mail) liugang@tyut.edu.cn

罗树林,博士,助理研究员,主要从事机器学习研究, (E-mail) luoshulin@sxicc.ac.cn

吴桂选,博士,研究员,主要从事热力学计算模拟研究, (E-mail) wuguiquan@sxicc.ac.cn

and multiple uncertain factors, and thermodynamic calculation and simulation methods have become more and more important. FactSage is a powerful thermodynamic calculation software that provides efficient methods for thermodynamic simulation of molten salt systems by integrating multiple databases and functional modules. **【Methods】** In this paper, the application of FactSage were systematically presented on chloride molten salt phase change materials. The phase equilibrium states and thermodynamic parameters of the NaCl-KCl- MgCl_2 - CaCl_2 system at different temperatures and the NaCl-KCl system with different KCl compositions were accurately predicted by the Gibbs free energy minimization algorithm of the Equilib module. The liquid phase line projection map of KCl- MgCl_2 - CaCl_2 and the binary phase diagram of MgCl_2 - CaCl_2 had been successfully plotted with the Phase Diagram module. **【Results】** This research provides theoretical support for component design and performance optimization of molten salt energy storage materials, and provides new solutions and ideas for addressing related problems in the research field of chloride molten salt systems.

Keywords: phase change; phase equilibria; thermodynamic; design; optimization; FactSage

随着全球能源需求增长和清洁能源转型的快速发展,太阳能、风能等可再生能源的利用规模不断扩大^[1,2]。但其固有的间歇性和不稳定性迫切需要高效储能技术予以缓解。热能储存(Thermal Energy Storage, TES)成为解决这一问题的关键技术之一, TES技术在建筑节能^[3]、工业余热回收^[4]及可再生能源存储等领域具有广泛应用前景。TES设备的性能主要取决于所使用的相变储能材料(Phase Change Materials, PCMs),其中熔盐,尤其是氯化物熔盐及其混合物因其高热容量、高导热性、宽液相温度范围、优异热稳定性及低成本优势而备受关注^[5,6],广泛应用于太阳能发电^[7,8],核能领域^[9-11],冶金工业^[12,13]等领域。

在氯化物熔盐相变储能材料的研发和应用过程中,盐组分优化、材料相容性评估以及杂质影响分析等关键问题的解决亟须精确的热力学预测,但其复杂的化学平衡和相变行为对热力学预测精度要求极高,通过传统实验手段在高温物性测量方面存在显著局限性。近年来借助热力学计算工具的方法因其高效、计算效率高的特点而广泛应用。相较于其他热力学软件,FactSage软件展现出独特优势,其具备强大的数据库支撑,集成了专门的FTsalt熔盐数据库,涵盖了大量氯化物体系的热力学参数,其温度压力适用范围能够全面覆盖氯化物熔盐在相变储能领域的典型工况条件,并可实现相图、热力学性质及气相平衡的一体化计算。此外,其算法能够准确处理复杂的多相平衡问题,并且支持用户自定义添加或修改热力学数据,兼具操作便捷性和计算灵活性。基于以上考虑,选择FactSage软件对氯化物熔盐体系进行热力学研究。

FactSage是一款功能强大且应用广泛的热力学计算软件,集成了多种热力学数据库和计算模块,能够模拟复杂多组分体系的相平衡、热力学性质及化学反应行为,为用户提供全面的热力学分析和预测能力。该软件在材料科学、冶金工程、化学工程等领域的研究和工程实践中发挥了重要作用。随着计算技术、软件算法和硬件性能的不断进步,热力学软件现已能够精确模拟和预测各种复杂多相体系的相平衡条件^[14]。FactSage作为全球使用最广泛的热力学软件之一,已为众多大学、政府机构和非政府研究实验室提供服务^[15]。它通过整合加拿大麦吉尔大学的FactWin 3.05和德国GTT的Chemsage 4.0,将多个热化学数据库与多种功能计算程序相结合,形成了一个全面、综合的热化学计算平台^[16,17]。最初,FactSage的主要研究重点集中在火法冶金的热化学模拟,为冶金领域的研究和应用提供了广泛且精确的支持^[16,18]。

本文旨在介绍FactSage软件的基本功能及其在氯化物熔盐相变储能材料研究中的应用。氯化物熔盐相变储能材料的研究需要深入理解其热力学性质、相变行为以及组分间的相互作用,因此本文创新性地采用FactSage软件为核心研究工具,通过结合FTsalt熔盐专业数据库和平衡模块、相图模块,高效预测了一些氯化物熔盐体系的相图、热力学性质以及相变温度等关键参数,为熔盐储能材料的组分设计和性能优化提供了理论支持,节省了实验成本。并通过具体案例展示FactSage在氯化物熔盐研究中的实际应用,展现了该软件的独特优势与重要意义。本文可为氯化物熔盐体系研究领域的相关问题提供了新的解决方案和思路。

1 FactSage 热力学数据库及功能模块介绍

1.1 FactSage 数据库介绍

FactSage 软件主要由溶液和纯物质数据库组成^[19]。前者包含溶液相吉布斯能的优化模型参数,是成分和温度的函数。后者包含稳定计量化合物,也就是纯组分的属性,这些属性可以从已公布的实验数据和相图优化中获得,也可以从标准汇编中获取。

FactPS:现包含 4 777 种化合物的纯物质数据。它包含来自标准汇编的数据,以及经过评估和优化的化合物数据,以确保与 FToxid、FTsalt 等溶液数据库的热力学一致性。

FToxid 是 FACT 的氧化物数据库,目前包含 374 种化学计量氧化物和 87 种氧化物溶液相的热力学数据,全面涵盖炉渣、玻璃、陶瓷、耐火材料等。该数据库不仅包含常见纯氧化物(Al_2O_3 、 CaO 、 FeO 、 MgO 等)以及形成的多组分氧化物溶液的基础数据,该数据库还包括 Al_2O_3 - Re_2O_3 体系的数据,其中 Re 代表镧系元素。FToxid 主要针对氧化物体系,也对氯化物熔盐研究具有重要的辅助价值。一方面可为熔盐-氧化物界面反应提供必要的基础热力学参数,另一方面,在评估熔盐中氧杂质行为、研究熔盐腐蚀产物形成机制等关键问题上,该数据库能够提供可靠的数据支撑。

FTsalt 是 FACT 盐数据库。该数据库经过广泛更新后,目前包含 221 种纯盐和 79 种盐溶液的数据。这些盐溶液是由 27 种阳离子 Li、Na、K、Rb、Cs、Mg、Ca、Sr、Ba、 NH_4 、Mn、Al、Fe(II)、Fe(III)、Co、Ni、Zn、Pb、La、Ce、Nd、U、Pu、Th、Cr、Mo、Be 和 10 种阴离子 F、Cl、Br、I、 NO_3 、 NO_2 、OH、 CO_3 、 SO_4 、 ClO_4 的不同组合形成的。其中特别包括氯氟化物体系 Li、Na、K、Mg、Ca//Cl、F,和氯化物体系 LiCl-NaCl-KCl-RbCl-CsCl-MgCl₂-CaCl₂-SrCl₂-BaCl₂ 以及 LiCl-NaCl-KCl-MgCl₂-CaCl₂-MnCl₂-FeCl₂-FeCl₃-CoCl₂-NiCl₂-AlCl₃,它们可用作金属处理的助熔剂。熔盐相称为 FTsalt-Salt,包括 O^{2-} 和 OH 的稀溶液。目前,针对 NaCl-KCl-MgCl₂-CaCl₂-LiF-NaF-KF-MgF₂-CaF₂ 以及 NaCl-KCl-ZnCl₂ 熔盐体系,已有一个考虑混合时过量体积的密度模型^[20]。对于诸如 Li、Na、K、Mg、Ca//Cl、F 等更复杂的体系,也可以进行近似密度计算。FTsalt 是目前可用的关于盐体系最为全面的热力学数据库,也是本文计算氯化物熔盐热力学性质和相图的数据基础。

FTOxCN—FTOxCN 是一个新的 FACT 数据库,专门用于氧碳氮化物体系,包含了在高温条件下对 Al-(Si-Ca-Mg-Fe-Na)-C-O-N-S 系统进行平衡计算所需的数据。

FTOxCN 溶液数据库包含了氧碳氮化物溶液以及与之兼容的液态金属溶液。该数据库创新性地将液态炉渣相处理为一个包含所有 10 种元素单一的溶液相,适用于所有温度范围和感兴趣的成分范围。因此,该相涵盖了高温氧碳氧化物炉渣、富硫液体、低温下可能出现的氧化物炉渣、氧氮化物液体等。FTOxCN 化合物数据库包含所有化学计量的固态和液态氧碳氮化物、硫化物和氧硫化物化合物,这些数据经过评估和优化,以确保与 FTOxCN 溶液数据库的热力学一致性。FTOxCN 主要面向氧碳氮化物体系,也与氯化物熔盐的研究存在一定关联。在处理含 Mg、Ca、Na 等元素的氯化物熔盐体系时,FTOxCN 中的金属溶液数据可辅助分析熔盐-金属界面反应,其多组元溶液相处理方法对建立复杂氯化物熔盐体系的热力学模型具有借鉴意义。

FTfrtz 是一个新的 FACT 数据库,专门用于从含水到无水条件下生产硝酸盐基肥料。它还可用于计算肥料产品中的热力学性质和相平衡,以及某些爆炸物的性质相关计算。FTfrtz 化合物数据库和溶液数据库包含了 26 种纯盐和 14 种盐溶液的数据,这些数据基于硝酸铵(NH_4NO_3)、磷酸二氢铵($\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$)、氯化铵(NH_4Cl)和硫酸铵($(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$)等肥料体系,并添加了相应的钾盐或者钠盐。该模型涵盖了添加水量高达约 50% 的情况。

FTnucl 是一个为核工业开发的新 FACT 数据库,该数据库可用于开发基于以下物质的先进核燃料:Th、U、Np、Pu 和 Am,氧化物、碳化物、氮化物和碳氮化物以及金属。它还可用于估算基于 Cs、I、Zr、Ru、Ba 和 Rb 的裂变产物的热力学行为和相平衡关系,包括惰性气体和金属包壳(Fe、Zr、C)。

此外,还包括工业过程的特定数据库,如合金数据库包含铝合金、镁合金、铜合金、钢铁等,造纸行业和铝电解等^[19]。正是这些丰富多样的热力学数据库为 FactSage 在各行业的精确模拟和精密计算提供了坚实的基础。由于其数据库功能齐全且不断扩充,该软件已广泛应用于有价金属回收、固废热处理等环保领域^[21]。

1.2 FactSage 模块功能介绍

通过 FactSage 主菜单,可以进入软件包的各个模块。模块分为四类:1. 信息(Info),2. 数据库(Da-

tabases), 3. 计算 (Calculate), 4. 操作 (Manipulate), 如图 1 所示。



图 1 FactSage 8.3 主菜单窗口

Fig.1 FactSage 8.3 main menu window

文档 (Documentation) 功能通过打开 FactSage 浏览器, 用户能够操作数据库帮助文件并显示相图预览。存储在 FactSage 浏览器中的相图列表已更新至 4 967 个。针对氯化物熔盐体系的研究, 用户可以通过该功能快速调取 FTsalt 熔盐数据库中的专业数据, 包括关键氯化物体系的相图信息, 熔盐溶液相的热力学参数和相关化合物的物性数据等。

化合物和溶液模块。热力学数据可以通过化合物 (Compound) 和溶液 (Solution) 模块存储在个人化合物和溶液数据库中。在 FactSage 8.3 中, 溶液模块做出了很大改进, 使用新的溶液模块, 可以通过以下溶液模型输入和存储数据: 单亚晶格多项式模型, 包括简单多项式、Redlich-Kister 多项式或 Legendre 多项式, 并使用 Muggianu、Kohler 或 Toop 方法扩展到多组分体系; 化合物能量形式化模型支持多达 5 个亚晶格^[22]; 双亚晶格多项式模型支持有无短程有序的情况^[23]; 单亚晶格修正准化学模型^[24,25]; 双亚晶格修正准化学模型, 包括第一近邻和第二近邻短程有序之间的耦合^[26]; 离子液体模型^[27]; 统一相互作用参数形式, 包括修正的 Wagner 形式; Pitzer 模型。此外, 还可以输入磁性性质, 例如磁化率和体积性质, 例如密度、热膨胀率、压缩率的数据。

这些改进对氯化物熔盐研究具有重要价值, 双亚晶格修正的准化学模型能更准确地描述熔盐中的短程有序度, 单亚晶格多项式模型例如 Redlich-Kister 多项式拟合效果精确, 离子液体模型为低温熔盐体系提供了新的模拟方法。

溶液模块还包含以下新功能: 支持从化合物数据库直接导入纯组分的吉布斯自由能表达式, 并作为函数存储在新的溶液数据库中。所需的表达式通过化合物模块选择, 通过拖放操作导入到溶液模块中。存储在数据库中的函数可以被该数据库内的所有溶液相访问和使用。这些新功能进一步增强了溶液模块的灵活性和易用性, 为用户提供了更强大的工具来构建和管理复杂的热力学模型, 简化了复杂氯化物熔盐体系热力学模型的构建流程。

查看数据模块。查看数据 (View Data) 模块显示了存储在溶液和化合物数据库中的热化学数据摘要。数据可以通过多种格式进行排序和显示。在 FactSage 8.3 中, 包含了针对所有元素的搜索选项。通过新的排序溶液 (Sort Solutions) 下拉菜单, 还可以显示所有溶液并按以下方式排序: 按相编号、按字母顺序、按物种数量、按元素数量、按溶液模型编号, 还可以对输出列表进行限制, 例如列出所有物种或不列出所有物种。此外, 还可以显示存储在个人数据库中的溶液数据。对于氯化物熔盐体系的研究, 通过多种排序和显示格式, 用户可以更直观地查看和分析各类氯化物及其混合体系的热化学数据, 新增的搜索选项和排序功能使数据管理更加灵活和高效, 并且用户可以查看和管理个人数据库中的溶液数据, 满足特定研究需求。这些改进不仅进一步增强了 View Data 模块的功能, 而且提升了熔盐热力学数据分析的效率。

计算 (Calculate) 模块这一组模块是 FactSage 的核心, 也是本文介绍的重点。用户可以通过多种方式与软件和数据库进行交互, 并以多种格式计算和显示热化学平衡及相图。

平衡 (Equilib) 模块是 FactSage 中基于吉布斯能量最小化的核心工具。该模块通过 ChemApp 算法^[28], 计算多相、多组分体系的热力学平衡条件, 并提供多种表格和图形输出模式。它能够在各种可能的约束条件下, 通过利用吉布斯最小自由能算法以及一系列函数来实现复杂体系的热力学平衡计算, 这些函数用于计算在吉布斯总能量全局最小化的条件下系统的组成和相含量^[29]。对于本文研究的氯化物熔盐体系, 该模块发挥着重要作用, 能够预测多元氯化物体系在不同设定条件下的系统组成; 其次, 能够模拟杂质元素对熔盐结构及热力学性质的影响, 为优化熔盐配比, 解析杂质行为等问题提供理论依据, 有效提升研究与应用效率。

以下是平衡模块支持的多种计算类型。

平衡:平衡(Equilibrium)基于单数据库或多个数据库的热化学数据计算平衡,支持从单个或多个热化学数据库中提取数据,计算多相、多组分体系的热力学平衡。

铸造:铸造(Casting)模拟铸造过程中的热力学行为,优化铸造工艺参数,提高铸件质量。

开放系统:开放系统(Open)允许用户在开放体系中进行热力学计算,考虑物质流入和流出的影响。

过程模拟:过程模拟(Simulation of processes)支持复杂工业过程的模拟,如冶金、化工和材料加工过程,通过宏处理实现自动化计算。

流体与回收:流体与回收(Streams and recycling)模拟流体的流动和循环过程,优化资源利用和能量效率。

Fact-XML 定制输出:Fact-XML 定制输出(Fact-XML customized output)支持以XML格式输出计算结果,生成自定义的表格、电子表格和图形,便于数据分析和报告。

Fact-功能生成器:Fact-功能生成器(Fact-Function-Builder)允许用户创建自定义函数,扩展计算功能,满足特定需求。

Fact优化:Fact优化(FactOptimal)结合热力学和物性数据库,识别合金设计和工艺优化中的最佳条件,支持多目标优化和约束条件下的热力学分析。

相图和图形模块:在相图(Phase Diagram)模块中,两个热力学性质分别绘制在X轴和Y轴上,而其他属性则保持不变。可以选择作为坐标轴或常数的热力学性质包括: T (或 $1/T$); P ,总压力; V ,体积;Comp,成分(摩尔分数、摩尔比、质量分数、质量比);Pot $_i$,化学势($RT\ln(a_i)$ 、 $RT\ln(P_i)$ 、 $\log(a_i)$ 、 $\log(P_i)$),其中 a_i 和 P_i 分别为组分 i 的活度和分压; ΔH ,相对于标准状态温度的焓。此外,还可以计算各种投影图,例如液相面投影图,将会在2.2节具体展示。FactSage的一个独特且非常有用的功能是,可以通过将光标放置在相图上的任意点并点击,计算该点处所有相的平衡数量和组成。

相图模块通过热力学计算,可精确预测不同温度、压力和成分条件下的氯化物熔盐体系相态分布,直观呈现其相态转变与平衡关系。在熔盐储能领域,该模块可助研究人员确定熔盐工作温度范围,避免因相变导致储能效率下降,为熔盐储能系统的优化设计提供理论支撑。在后面的章节中,将展示一些FactSage新增的计算相图,这些示例结合了相图模块、平衡模块和图形模块的使用。

2 FactSage软件在氯化物熔盐体系中的应用案例

2.1 平衡模块

平衡模块专门用于确定特定元素或化合物反应中单个物质的浓度,尤其是当系统处于化学平衡时。该模块通过利用吉布斯最小自由能算法以及一系列函数,在吉布斯总能量全局最小化的条件下计算系统的组成和相含量。在熔盐储能系统设计中,利用平衡模块结合FTsalt熔盐数据库,能够有效优化熔盐配方。以NaCl-KCl-MgCl₂-CaCl₂体系为例,在900~1 500 K下的系统组成和相位含量的菜单窗口和结果窗口如图2和图3所示,根据得到的热力学参数可进一步计算密度、黏度、相变潜热等关键物性,从而筛选出相变潜热高、热稳定性强的熔盐配比,确保储能系统在高温运行时的高效性与安全性。在冶金电解领域,平衡模块发挥重要作用,以NaCl-KCl体系为例,在1 100 K和不同KCl组成下的系统组成和相位含量的菜单窗口和结果窗口如图4和图5所示,根据计算结果可调控熔盐电解质的成分,优化金属沉积过程。

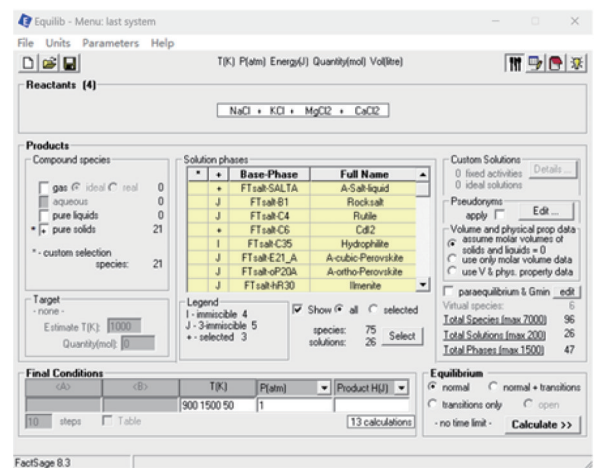


图2 平衡模块—菜单窗口,计算NaCl-KCl-MgCl₂-CaCl₂体系在900~1 500 K下的系统组成和相位含量

Fig.2 Equilib module-menu window for calculating system compositions and phase contents of NaCl-KCl-MgCl₂-CaCl₂ system at 900~1 500 K

2.2 相图模块

相图是材料设计中的一种宝贵工具,它不仅是冶金学家的指南,也是热力学数据的来源。相图在多个领域得到广泛应用,包括冶金、材料和化学等^[30]。虽然实验方法能够确保相图测定的准确性,但它们需要大量的工作量,难以满足实际需求^[31]。相比之下,FactSage结合了热力学理论和计算机模

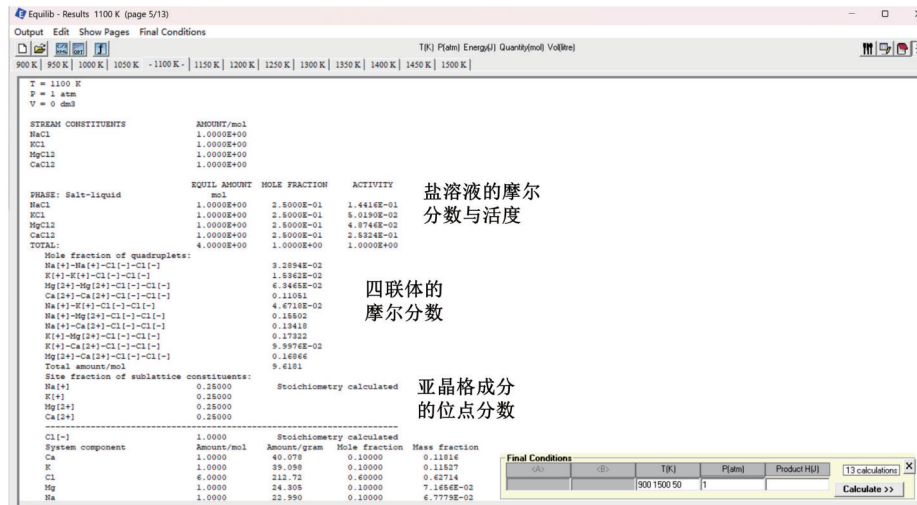


图3 平衡模块—结果窗口汇总 NaCl-KCl- MgCl₂-CaCl₂体系在 900~1 500 K 下的系统组成和相位含量

Fig.3 Equilib module-results window for summarizing system compositions and phase contents of NaCl-KCl- MgCl₂-CaCl₂ system at 900~1 500 K

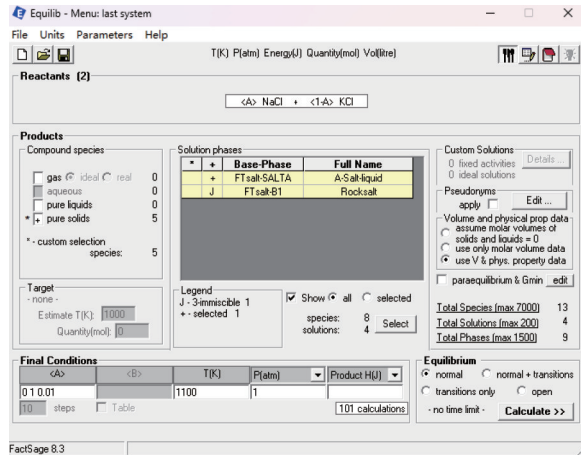


图4 平衡模块—菜单窗口,用于计算 NaCl-KCl 体系在 1 100 K 和不同 KCl 组成下的系统组成和相位含量

Fig.4 Equilib module-menu window for calculating system compositions and phase contents of NaCl-KCl system at 1 100 K and with different KCl compositions

拟,因其绘制相图的能力而受到研究人员的认可。在评估系统的平衡状态时,最关键的是要考虑所有

可能形成的相。在进行计算之前,必须非常谨慎地选择相。遗漏某些相可能会极大地影响所确定的平衡状态。在氯化物熔盐储能领域,绘制相图能够直观了解不同成分比例下熔盐的相变温度这一关键热物性参数以及相态分布,由此筛选出在储能工况温度范围内,能够保持稳定相态的熔盐配方。以 MgCl₂-CaCl₂ 体系为例,其相图如图 6 所示,以 KCl-MgCl₂-CaCl₂ 体系为例,绘制其多温投影图如图 7 所示。1993 年, Perry 等研究人员对 KCl-MgCl₂-CaCl₂ 体系的二元和三元相图进行了系统性的总结^[32]。其中, MgCl₂-CaCl₂ 二元相图数据引自 Grjotheim 等的研究成果^[33]。通过对比分析发现,基于 FactSage 软件的计算结果不仅与原始实验数据高度吻合,而且在经过系统拓展和优化后,相图信息的完整性和准确性都得到了显著提升。对于 KCl-MgCl₂-CaCl₂ 三元体系,本研究采用的计算结果与 Ivanoy 等报道的实验数据同样展现出良好的一致性^[33]。得益于

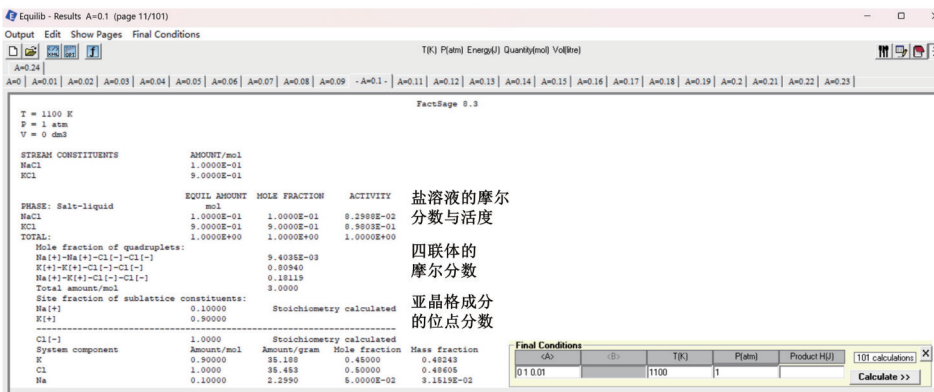


图5 平衡模块—结果窗口汇总 NaCl-KCl 体系在中在 1 100 K 和不同 KCl 组成下的系统组成和相位含量

Fig.5 Equilib module-results window for summarizing system compositions and phase contents of NaCl-KCl system at 1 100 K and with different KCl compositions

现代可视化技术的进步,本研究采用彩色相图呈现方式,显著提升了相图的可读性和直观性,为研究者提供了更为清晰的数据展示。

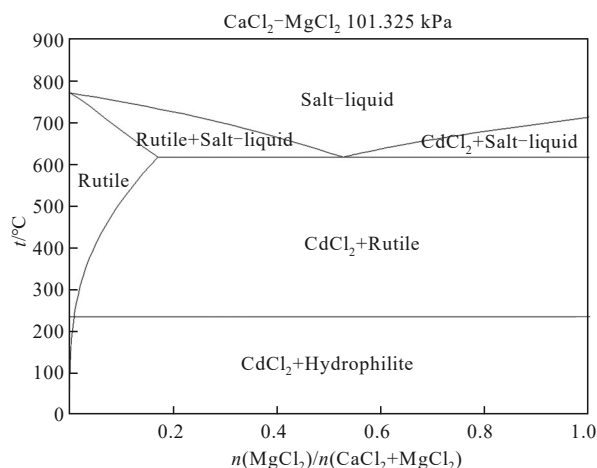


图6 相图模块—使用 FactSage FTsalt 数据库计算得出的 MgCl_2 - CaCl_2 体系相图, 101.325 kPa

Fig.6 Phase diagram module—phase diagram of MgCl_2 - CaCl_2 system calculated by using the FactSage FTsalt database, 101.325 kPa

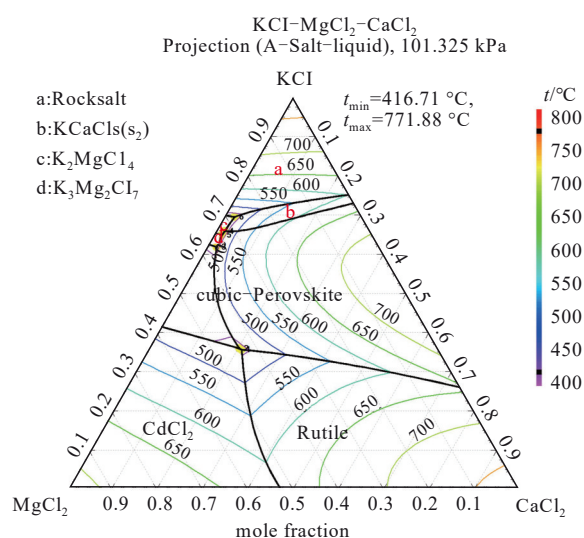


图7 相图模块—不同温度下 KCl - MgCl_2 - CaCl_2 体系的多温投影, 101.325 kPa

Fig.7 Phase diagram module—isothermal projection of KCl - MgCl_2 - CaCl_2 system at different temperatures, 101.325 kPa

3 结语

本文通过详细介绍 FactSage 软件的功能及其在氯化物熔盐相变储能材料中的应用,全面展示了

该软件在热力学计算和相图绘制方面的强大能力。详细地介绍了其丰富的数据库及其在相关领域的应用,包括 FactPS、FToxid、FTsalt、FTOxCN、FTfrtz 和 FTnucl。介绍了 FactSage 软件中不同的功能模块,重点介绍了平衡模块和相图模块,为熔盐储能材料的研究和开发提供了重要的理论支持和技术保障。

通过平衡模块和相图模块中的具体案例,本文验证了 FactSage 软件在预测熔盐体系相变温度、热力学性质及相图方面的有效性,同时 FactSage 软件在熔盐体系研究中也展现出显著优势。具体体现在:集成了 Factsalt 专业数据库,覆盖大量氯化物体系热力学参数,基于丰富的数据基础,可适配于多元氯化物熔盐体系研究,并且支持宽域温度与压力参数设置,模拟不同的工况条件。此外,操作简便快捷,兼具专业性与易用性。利用平衡模块中的吉布斯自由能最小化算法准确预测了 NaCl - KCl - MgCl_2 - CaCl_2 体系在不同温度下以及 NaCl - KCl 体系在不同 KCl 组成下的相平衡状态,同时获得了四联体的摩尔分数等关键热力学参数,为设计和优化熔盐材料的成分配比提供了定量依据。相图模块则成功构建了 KCl - MgCl_2 - CaCl_2 的液相线投影图和 MgCl_2 - CaCl_2 的相图,清晰揭示了共晶点位置和相变温度随组分变化的规律,为储能系统的温度控制提供了理论指导。研究表明,FactSage 的热力学模拟方法可显著提高熔盐相变材料的研究效率,为新型储能材料的开发提供可靠的计算工具。

尽管 FactSage 在氯化物熔盐相变储能材料的研究中展现了强大的热力学计算能力,

但在实际应用中仍然面临数据库覆盖范围不足,非平衡态模拟缺失以及单一的热力学计算无法满足多物理场耦合的工程需求等问题。未来的研究可以通过结合实验数据和机器学习算法,扩展数据库覆盖范围以及引入动力学模型,开发非平衡态模拟功能等方法,进一步提升 FactSage 在熔盐储能材料研究中的应用价值。同时,降低用户学习成本和增强对新兴材料的支持也是 FactSage 未来发展的重要方向。

参考文献:

- [1] ASHRAF M, AYAZ M, KHAN M, et al. Recent trends in sustainable solar energy conversion technologies: Mechanisms, prospects, and challenges[J]. Energy Fuels, 2023, 37(9): 6283-6301.
- [2] SHRESTHA A, MUSTAFA A A, HTIKE M M, et al. Evolution of energy mix in emerging countries: Modern renewable energy, traditional renewable energy, and non-renewable energy [J]. Renewable energy, 2022, 199: 419-432.

- [3] WANG X, ZHANG H, CUI L, et al. Borehole thermal energy storage for building heating application: A review [J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2024, 203: 114772.
- [4] WU D, MA B, ZHANG J, et al. Working fluid pair selection of thermally integrated pumped thermal electricity storage system for waste heat recovery and energy storage [J]. *Applied Energy*, 2024, 371: 123693.
- [5] 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.
- [6] MA S, YANG Q, LI Y, et al. A review on preparation, thermal transport properties, phase-change characteristics, and thermal stability of molten salts [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2024, 444: 141272.
- [7] RONG Z, YE Y, DING J, et al. Thermal stability mechanism and operating temperature limit of molten chloride salts for thermal energy storage and concentrated solar power applications [J]. *Renewable Energy*, 2024, 231: 121037.
- [8] YAN T, ZHANG H. A critical review of salt hydrates as thermochemical sorption heat storage materials: Thermophysical properties and reaction kinetics [J]. *Solar Energy*, 2022, 242: 157–183.
- [9] LIN M, CHENG M-S, DAI Z M. Feasibility of an innovative long-life molten chloride-cooled reactor [J]. *Nuclear Science and Techniques*, 2020, 31(4): 33.
- [10] HERRERA-HERNÁNDEZ E, PÉREZ-VALSECA A, AGUILAR-MADERA C G, et al. Heat transfer coefficients for bubbly molten salt nuclear reactors [J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2023, 414: 112549.
- [11] ROPER R, HARKEMA M, SABHARWALL P, et al. Molten salt for advanced energy applications: A review [J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, 169: 108924.
- [12] LI M, LIU C, DING A, et al. A review on the extraction and recovery of critical metals using molten salt electrolysis [J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2023, 11(3): 109746.
- [13] WEI X, GAO S, LE Q, et al. Preparation of Mg-Nd alloys by in situ reduction using Nd_2O_3 [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2024, 1004: 175720.
- [14] HAN X, CAO Y, JING D R. Application of factsage in steel slag treatment [J]. *Multipurpose Utilization of Mineral Resources*, 2019, 3: 102–107.
- [15] JUNG I-H, VAN ENDE M A. Computational thermodynamic calculations: FactSage from CALPHAD thermodynamic database to virtual process simulation [J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2020, 51(5): 1851–1874.
- [16] BALE C W, CHARTRAND P, DEGTEROV S A, et al. FactSage thermochemical software and databases [J]. *Calphad*, 2002, 26(2): 189–228.
- [17] CAO Z, SONG X, QIAO Z Y. Thermodynamic modeling software FactSage and its application [J]. *Chinese Journal of Rare Metals*, 2008, 32(2): 216–219.
- [18] HARVEY J-P, LEBREUX-DESILETS F, MARCHAND J, et al. On the application of the FactSage thermochemical software and databases in materials science and pyrometallurgy [J]. *Processes*, 2020, 8(9): 1156.
- [19] BALE C W, BÉLISLE E, CHARTRAND P, DEGTEROV S A, et al. FactSage thermochemical software and databases [J]. *Calphad*, 2002, 26(2): 189–228.
- [20] ROBÉLIN C, CHARTRAND P, ERIKSSON G. A Density Model for Multicomponent Liquids Based on the Modified Quasi-chemical Model: Application to the $\text{NaCl-KCl-MgCl}_2\text{-CaCl}_2$ System [J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2007, 38(6): 869–879.
- [21] WU L, WANG H, DONG K. Effect of sulfur content on copper recovery in the reduction smelting process [J]. *Metals*, 2022, 12(5): 857.
- [22] BARRY T, DINSDALE A, GISBY J A, et al. The compound energy model for ionic solutions with applications to solid oxides [J]. *Journal of Phase Equilibria*, 1992, 13: 459–475.
- [23] DESSUREAULT Y, PELTON A. D. Contribution to the quasichemical model of reciprocal molten salt solutions [J]. *Journal de Chimie Physique*, 1991, 88: 1811–1830.
- [24] PELTON A D, DEGTEROV S A, ERIKSSON G, et al. The modified quasichemical model I—Binary solutions [J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2000, 31(4): 651–659.
- [25] PELTON A D, CHARTRAND P. The modified quasi-chemical model: Part II. Multicomponent solutions [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2001, 32(6): 1355–1360.
- [26] PELTON A D, CHARTRAND P, ERIKSSON G. The modified quasi-chemical model: Part IV. Two-sublattice quadruplet approximation [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2001, 32: 1409–1416.
- [27] SUNDMAN B. Modification of the two-sublattice model for liquids [J]. *Calphad*, 1991, 15(2): 109–119.
- [28] ERIKSSON G, HACK K, PETERSEN S. ChemApp—a programmable thermodynamic calculation interface [J]. *Werkstoff Woche*, 1997, 96: 47–51.

- [29] PRITHIV T S, THIRUMURUGAN G, MADAN M, et al. Thermodynamic assessment of steelmaking practices for the production of re-sulfur steels [J]. Transactions of the Indian Institute of Metals, 2020, 73(6): 1595-1603.
- [30] SCHUPSKY J P, SAAR O, WU G, et al. Viscosity and crystal morphology data of anorthite bearing synthetic coal slag systems [J]. Fuel, 2020, 280: 118663.
- [31] YANG G, REN Q, XU J, et al. Co-melting properties and mineral transformation behavior of mixtures by MSWI fly ash and coal ash [J]. Journal of the Energy Institut, 2021, 96: 148-157.
- [32] PERRY G S, FLETCHER H. The MgCl_2 - KCl - CaCl_2 phase diagram [J]. Thermochimica Acta, 1993, 217: 277-84.
- [33] GRJOTHEIM K, HOLM J, MALMO J. Phase diagram of system MgCl_2 - CaCl_2 , and thermodynamic properties of molten mixtures in this system [J]. Acta Chemica Scandinavica, 1970, 24(1): 77.

(编辑:贾丽红)