

# 质子交换膜燃料电池两相水管理研究进展

李 英, 潘欢欢, 周晓慧

(大连交通大学环境与化学工程学院, 辽宁 大连 116028)

**摘要:**对质子交换膜燃料电池水管理、尤其是两相水管理建模研究的内容、发展阶段、面临挑战进行了全面综述。就膜、扩散层和流道中的两相水管理研究分别加以论述, 并就水管理研究面临的挑战进行了分析。

**关键词:**质子交换膜燃料电池; 水管理; 模型

中图分类号: TM911.4

文献标识码: A

文章编号: 0253-4320(2008)05-0026-04

## Progress in two-phase water management of proton exchange membrane fuel cell

LI Ying, PAN Huan-huan, ZHOU Xiao-hui

(College of Environmental and Chemical Engineering, Dalian Jiaotong University, Dalian 116028, China)

**Abstract:** In this paper, the content, stage and challenges of water management study on proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) are reviewed, especially for modeling of two-phase water management. The two-phase water management of membrane, diffusion layer and flow channel are discussed individually. At the same time, the challenges of water management study are analyzed.

**Key words:** proton exchange membrane fuel cell; water management; model

质子交换膜燃料电池中的液态水存在对燃料电池有以下影响: 流道中的液态水存在时形成两相流, 可能造成局部堵塞, 使得氢、氧的流动和扩散减弱或中断, 影响电池的工作; 扩散层中液态水传递涉及到多孔介质的两相流问题; 水在质子交换膜中的传递方式有 3 种: 电迁移、反扩散、压力扩散。在质子交换膜燃料电池水管理研究中, 计算机模拟在指导设计和实验, 节省人力、物力、财力, 缩短开发周期方面具有重要意义。基于数学模型的燃料电池计算机模拟分为 3 类: 解析、半经验、机理模型<sup>[1]</sup>。解析模型<sup>[2]</sup>不能精确预测传递过程, 只限于预测简单设计的电压损失和水管理需求, 但对简单系统的快速计算是有用的。半经验模型<sup>[3]</sup>结合了理论上的偏微分方程和经验关联得来的代数方程, 限于很窄的操作条件, 超出范围则预测能力不好; 在快速预测已存在的系统设计时非常有用, 不能用来预测创新设计或在经验关联参数变化外起的响应。

机理模型基于与电池内部现象联系的物理和电化学的微分和代数方程, 这些方程通过各种类型的计算方法求解, 分为多区域模型<sup>[4]</sup>和单区域模型<sup>[5]</sup>。多区域模型包含燃料电池不同种方程的求导, 如阴阳极扩散层、阴阳极气体流道、膜和催化剂层, 这些方程同步分开求解。单区域模型将燃料电池看成一

个区域, 在每个区域通过源汇项区别, 所有的方程写成一般的对流扩散方程, 所有项不符合标准形式的加入源汇项, 这种形式可以通过 CFD 求解。单区域模型困难更少, 因不需要内部的边界条件和连续性条件, 且更容易利用商用的 CFD 代码, 相应地也缩短建模时间。本文所介绍的水管理研究多采用机理模型, 且对流道、扩散层和膜分别研究。

## 1 质子交换膜燃料电池内水的观察和测量

Satija 等<sup>[6]</sup>利用中子辐射法进行质子交换膜燃料电池流道液态水的测量诊断。Tuhan 等<sup>[7]</sup>采用同样的中子辐射法观察电池内水的聚集和分布。X 射线和原子核外的电子云发生作用, 而中子射线和原子核本身发生作用, 轻元素和中子射线发生作用的可能性比和重元素发生作用的可能性大得多, 而燃料电池中正好是由轻元素 H 和较重元素 C、Al、Cu 等组成。不同元素被辐射后的质量衰减系数不同, 这一特征被用来检测质子交换膜燃料电池流道液态水的状况。燃料电池被中子射线辐射后得到类似于 X 光一样的底片, 对底片进行分析就可以获得流道内液态水的存在和分布状况。该方法目前还处于实验室研究阶段, 它只能检测流道内的液态水, 并且因为要求曝光时间较长, 只能用于稳态状况和单电池,

收稿日期: 2008-01-02

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(20376080); 大连市青年科技人才基金项目(2007J23JH015)

作者简介: 李英(1975-), 女, 博士, 副教授, 研究领域为化工系统工程, liying@djtu.edu.cn。

实验对象的流场板是镀金铝板。Tüber等<sup>[8]</sup>研制出用于测试的透明电池,直接观测到了液态水从扩散层中渗出到流道进而形成小水珠、水珠长大、再到堵塞流道的现象,并测量了电池性能和流道中发生水堵的关联状态,探讨了不同的空气流量、温度、空气加湿度和扩散层疏水性和亲水性对电池性能的影响。但研究得到的结论局限于30℃、低电流密度的运行状态。Feindel等<sup>[9]</sup>认为NMR光谱的无损特性使之在多相系统在线观测上有独特的应用,他们使用<sup>1</sup>H-NMR光谱检测操作状态下H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>质子交换膜燃料电池的水分布,包括流道、电流收集器、碳氢类膜电极(MEA)和膜周围的催化剂。Jürgen等<sup>[10]</sup>采用碳氢类膜电极MRED(resistance and electrode diffusivity)方法,测量纯欧姆阻抗、电极的有效扩散、燃料电池的自由气体体积。纯的欧姆阻抗用来确定膜中的水含量;自由气体体积可推算出阴、阳极的水含量。

## 2 质子交换膜燃料电池内水管理模型

### 2.1 通道内水的传递

一个理想的流道设计应该在电极表面有均匀的反应物浓度和温度,相对合理的压降,整个电池的膜水合,避免进口膜失水,避免多孔电极的水淹和通道出口的水淹。质子交换膜燃料电池流体通道的设计需兼顾传递和压降特性。Ge和Yi<sup>[11]</sup>最早反应物传递采用直通道,在低进口湿度时,逆流好于并流。交指型流场<sup>[12]</sup>在完全润湿条件下好于一般流场,在高电流密度时,有助于过量水移出。Yi等所在课题组<sup>[13]</sup>应用对流和毛细压力扩散机理描述气体多孔电极的液体传输,提出了一个交叉梳状流道质子交换膜燃料电池的二维、两相多组分传递模型,研究了气相和液相水动力学对空气阴极质子交换膜燃料电池性能的影响。对以空气为阴极反应物的交叉梳状流道质子交换膜燃料电池进行了运行工况和设计参数的数值模拟。Li等<sup>[14]</sup>指出蛇型流道相比于交叉指型流道,在将反应气带入催化层进行电化学反应和从反应区及电极去除产生的水效果更好。但蛇型流道有下述问题:首先反应路径相对较长,导致明显的压降和功率损失。其次,从进口到出口反应物浓度不断降低,导致大尺寸单电池明显的能斯特损失。

最重要的是,经常导致通道进口部分膜失水和出口部分的水淹。由于大量水被反应气带入下游并聚集,这就出现了小电池行为良好而大电池行为不好的现象。其基本的原因就是缺少质子交换膜燃料电池放大定律。

Quan和Lai<sup>[15]</sup>采用VOF模拟蛇型流道中水行为,考察了不同操作条件下(表面亲水性、通道形状和空气进口流速)水行为、水含量和两相压降,采用VOF模拟、伪稳态模拟得到一系列结果。这些研究工作的一个共同问题是事先假定液态水处于计算域中的某个位置,这使得模拟缺少物理真实性且属于伪稳态模拟,在提供过程的重要预见性上不是很成功。Yan等<sup>[16]</sup>发现,当操作电压高于0.6V时流道设计对电流密度的影响可以忽略。电池行为依下列顺序逐渐升高:并行流道、Z型流道、蛇型流道、带有挡板的Z型流道、带有挡板的并行流道。带有挡板的Z型流道有最大的压降,其后依次是蛇型流道、带有挡板的并行流道、Z型流道、并行流道。带有挡板的并行流道是同时考虑电池行为和压降的最好选择。Xu和Zhao<sup>[17]</sup>则认为通过优化流道设计可以增强通过气体扩散层(GDL)的对流,是减少阴极水淹的有效方式,同时增强传质,提高电池行为和操作稳定性。

### 2.2 扩散层中水的传递

Wang和Cheng<sup>[18]</sup>最先提出复合相混合物模型,应用非饱和流体理论,假设多孔介质内气相压力为常数,液相分压为气相分压和毛细压力之和,并描述了阴极侧水的传递及水淹现象。Pasaogullari等<sup>[19]</sup>发展了复合相混合物模型,将复杂多相的多孔体系看成一种在大尺度上均匀分布的虚拟连续介质,即不同流速层中流体分子间碰撞交换动量,宏观表现为流体是以黏滞形式出现的流动,从而可以利用表面观当量参数的唯象方法进行研究。同前一类模型不同之处在于,该模型无需知道孔内气相分压。Meng等<sup>[20]</sup>提出的三维PEFC模型包含4个子模型用来解释两相现象:催化剂层的催化剂覆盖模型、气体扩散层的两相模型、GDL-通道截面的液体覆盖模型、气体通道的两相模型。他们首次提出了液态水在GDL/GC表面的界面覆盖模型,用来解释水滴在GDL

(上接第25页)

[15] 张耀君,辛勤. 微量热法研究 $\gamma$ -Mo<sub>2</sub>N催化剂表面氢的微分吸附热[J]. 物理化学学报, 2000, 16(5): 464-467.  
[16] 立本英机,安部郁夫. 活性炭的应用技术-其维持管理及存在问

题[M]. 高尚愚,译. 南京:东南大学出版社, 2002: 30-125.  
[17] Valce G. Supercritical carbon dioxide dsorption of organics from activated carbon and zeolite[J]. Environ Prog, 1990, 9(4): 204-210.  
[18] 傅大放. 活性炭微波辐照再生试验[J]. 中国给水排水, 1997, 3(5): 7-10. ■

界面上的出现。包含的这种界面模型可以使原有的两相模型用来预测阴极水淹对电池行为的影响,且使得先前的两相流模型更准确地预测气速(或化学计量)对电池行为的影响。

Pasaogullari 等<sup>[21]</sup>建立了基于  $M^2$  模型的两相、全电池模型,包含两层阴极气体扩散介质:一个是粗的 GDL,平均孔径  $10 \sim 30 \mu\text{m}$ ;一个是微孔层(MPL),平均孔径  $0.1 \sim 1.0 \mu\text{m}$ 。考察了 MPL 对液态水传递的影响,包含平均孔径、润湿性、孔隙率和厚度。定性实验表明,MPL 通过提高跨膜压差来提高通过膜向阳极的后扩散速率,因此减少通过阴极的净水移出。另外,不同的 MPL 微孔和润湿特性将会引起在 MPL-GDL 界面液体饱和曲线的不连续,反过来减少在催化剂层-MPL 界面的液态水含量。分析表面水的后扩散随着 MPL 亲水性和厚度的提高、孔尺寸不均匀降低而提高。Wang 等<sup>[22]</sup>考察在阴极侧逆流条件下 2 个相邻通道湿度和反应物的相互传递。

Um 等<sup>[23]</sup>再次证实了在低润湿条件下,通过逆流操作来维持水的内部循环是非常重要的。Sun 等<sup>[24]</sup>建立了一个新的二维、两相流模型来研究质子交换膜燃料电池中的两相传质及其对质子膜阻抗和阴极性能的影响。模型不仅将催化剂层包含在电极中,还考虑了电池中相变及其对传质的影响。模型可同时用于电池的阴极和阳极。模拟结果显示,提高加湿温度可以降低质子膜的阻抗,但过高的加湿温度会降低阴极气体扩散层的有效孔隙率,从而降低阴极的性能。Weber 等<sup>[25]</sup>通过模拟显示,微孔层的作用是将水移出阴极气体扩散层并通过阳极移出;并考察了微孔层在不同操作条件下的影响,主要是提高燃料电池行为和在水管理方面的影响。Tang 等<sup>[26]</sup>证实气体扩散层的多孔性和厚度对传递现象和 PEM 单电池行为有重要影响,尤其是水传质,有水的行为要比无水时差。另外,燃料和空气的并流要好于逆流。Yoshikawa 等<sup>[27]</sup>为了保持膜组件湿润,只使用催化剂层中产生的水,并设计了一个新的气体扩散层,在气体扩散层上涂一个水管理层(扩散层和催化层之间)。

### 2.3 质子交换膜中水的传递

水在质子交换膜中的传递方式有 3 种:电迁移、水分子伴随质子、从阳极向阴极电迁移。Bernardi<sup>[28]</sup>分析了不同操作条件下膜中的水平衡关系,模型没有考虑水在膜内的传递机理,并认为膜是均一且各向同性的。Springer 等<sup>[29]</sup>考虑了电渗和扩散影响条件下的膜水合,发现与水通过膜的传递相比,与电化

学反应产生的水是不明显的。Nguyen 和 White<sup>[30]</sup>考虑了由于电渗和扩散作用水通过膜的传递,同时考虑了水的相变。Okada 等<sup>[31]</sup>用简单的线性传递方程分析了膜内水的一维分布状况,并通过实验获得了水的迁移数和扩散系数等参数。Cao 等<sup>[32]</sup>应用水和电流的守恒理论研究了膜中的水管理问题,并联系电渗曳力和水含量的经验关联,得到了膜内水摩尔浓度的传递方程。讨论和分析了两维、温度和压力非均匀性的影响。Meier 等<sup>[33]</sup>认为,对一个厚膜来说,最大电流密度取决于膜的欧姆损失;对薄膜来说,最大电流密度受阴极传质限制。Fimrite 等<sup>[34]</sup>提出了通过膜的水传递模型,考虑了电渗拖曳、扩散和水力学渗透的影响。Liu 等<sup>[35]</sup>通过同时测定局部电流密度和水浓度,确定了沿流动方向净水传递系数的空间分布。

### 3 采用 CFD 模拟的单区域模型

Gurau 等<sup>[36]</sup>提出了第一个真正的电池流动通道和 MEA 的两维模型,研究了反应物中组分改变的影响。Um 等<sup>[37]</sup>提出了三维瞬时模型,并且研究了通道结构和设计的影响。Meng 等<sup>[38]</sup>提出了大规模并行 CFD 模型。Berning 和 Djilali<sup>[39]</sup>提出了质子交换膜燃料电池传递的三维模型,考察了操作压力、温度、结构和材料性质的影响,并且提出了两相流模型。上述模型多是预测既定设计的电池行为,不适合于优化电池设计和考察电池中的其他单元。Guvelioglu 和 Stenger<sup>[40]</sup>指出,PEMFC 建模需要不同寻常的水平衡方程,但电池组不适合 CFD 模拟。Meng<sup>[41]</sup>指出,虽然完全耦合的传递现象对整个质子交换膜燃料电池的行为影响很小,如平均电流密度,但对电流分布、净水传递系数、速度和密度变化、组分分布有明显影响。膜传质、电动力学、密度和速度变化、组分分布等错综复杂的相互作用解释了准确的单电池行为。詹志刚<sup>[42]</sup>提出燃料电池的计算机模拟仍有许多局限:①模型建立假设条件过多;②数学模型多以传统的宏观尺度下的流动、传热、扩散等方程描述。较准确的描述应该运用 Boltzmann 输运理论、分子动力学理论等,利用 Monte Carlo 等方法模拟,但目前这方面的工作可能还是空白,燃料电池内部复杂过程的机理仍有待深入研究。Djilali<sup>[43]</sup>指出质子交换膜燃料电池基于机理的建模面临以下挑战:质子交换膜中的离子和水传递缺乏通用模型;气体扩散电极和气体流动通道缺乏两相传递模型;催化剂层的宏观模型和处理不足;材料和传递参数有

限,且缺乏用于验证的在线数据;存在一个很宽的时间尺度。

#### 4 结语

水管理是质子交换膜燃料电池可靠运行的关键。通过计算机模拟将该过程可视化,可以获得对燃料电池内部复杂过程的深入理解。在与实验数据的结合中,解析模型和半经验模型的发展尚有很大空间。从全电池建模来看,单区域模型更有利于采用 CFD 求解;但多区域模型可以满足不同层次、不同需要。另外,为了使电池模型在实际应用中发挥更大的指导作用,还要考虑模型在非稳态条件下以及电池组的适应性。

#### 参考文献

- [1] Cheddie D, Munroe N. Review and comparison of approaches to proton exchange membrane fuel cell modeling[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 147:72 - 84.
- [2] Standaert F, Hemmes K, Woudstra N. Analytical fuel cell modeling[J]. *Journal of Power Sources*, 1996, 63:212 - 234.
- [3] Springer T F, Zawodzinski T A, Gottesfeld S. Polymer electrolyte fuel cell model[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1991, 138(8): 2334 - 2342.
- [4] Gurau V, Liu H, Kakac S. Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells[J]. *AIChE Journal*, 1998, 44(11):2410 - 2422.
- [5] Wang C Y, Gu W B, Liaw B Y. Micro-macroscopic coupled modeling of batteries and fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1998, 145:3407 - 3417.
- [6] Satija R, Jacobson D L, Arif M, *et al.* In situ neutron imaging technique for evaluation of water management system in operating PEM fuel cells[J]. *J Power Sources*, 2004, 129:238 - 245.
- [7] Turhan A, Heller K, Brenizer J S, *et al.* Quantification of liquid water accumulation and distribution in a polymer electrolyte fuel cell using neutron imaging[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 160:1195 - 1203.
- [8] Tüber K, Póca D, Hebling C. Visualization of water buildup in the cathode of a transparent PEM fuel cell[J]. *J Power Sources*, 2003, 124: 403 - 414.
- [9] Feindel K W, LaRocque L P A, Starke D, *et al.* In situ observations of water production and distribution in an operating H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> PEM fuel cell assembly using <sup>1</sup>H-NMR microscopy[J]. *J Am Chem Soc*, 2004, 126: 11436 - 11437.
- [10] Stumper J, Löhr M, Hamada S. Diagnostic tools for liquid water in PEM fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 143:150 - 157.
- [11] Ge S, Yi B. A mathematical model for PEMFC in different flow modes[J]. *Journal of Power Sources*, 2003, 124:1 - 11.
- [12] Um S, Wang C Y. Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, 125:40 - 51.
- [13] Yi J S, Nguye T V. Multicomponent transport in porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated gas distributors[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1999, 146(1): 38 - 45.
- [14] Li X G, Sabir I, Park J. A flow channel design procedure for PEM fuel cells with effective water removal[J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 163:933 - 942.
- [15] Quan P, Lai M C. Numerical study of water management in the air flow channel of a PEM fuel cell cathode[J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 164:222 - 237.
- [16] Yan W M, Li H Y, Tsai W C. Three-dimensional analysis of PEMFCs with different flow channel designs[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2006, 153(10): A1984 - A1991.
- [17] Xu C, Zhao T S. A new flow field design for polymer electrolyte-based fuel cells[J]. *Electrochemistry Communications*, 2007(9): 497 - 503.
- [18] Wang C Y, Cheng P. Multidimensional modeling of steam injection into porous media[J]. *Journal of Heat Transfer, Transactions ASME*, 1998, 120(1):286 - 290.
- [19] Pasaoquallari U, Wang C Y. Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2005, 152(2): A380 - A390.
- [20] Meng H, Wang C Y. Model of two-phase flow and flooding dynamics in polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2005, 152(9): A1733 - A1741.
- [21] Pasaoquallari U, Wang C Y, Chen K S. Two-phase transport in polymer electrolyte fuel cells with bilayer cathode gas diffusion media[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2005, 152(8): A1574 - A1582.
- [22] Wang Y, Wang C Y. Simulation of flow and transport phenomena in a polymer electrolyte fuel cell under low-humidity operation[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 147(1/2): 148 - 161.
- [23] Um S, Wang C Y. Computational study of water transport in proton exchange membrane fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 156: 211 - 223.
- [24] Sun H, Liu H T, Guo L J. PEM fuel cell performance and its two-phase mass transport[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 143(1/2): 125 - 135.
- [25] Weber A Z, Newan J. Effects of microporous layers in polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2005, 152(4): A677 - A688.
- [26] Tang J H, Yan W M, Shih C C. Effects of the gas diffusion-layer parameters on cell performance of PEM fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 161:323 - 332.
- [27] Yoshikawa Y, Matsuura T, Kato M, *et al.* Design of low-humidification PEMFC by using cell simulator and its power generation verification test[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 158:143 - 147.
- [28] Bernardi D M. Water-balance calculations for solid-polymer-electrolyte fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1990, 137(11): 3344 - 3350.
- [29] Springer T F, Zawodzinski T A, Gottesfeld S. Modeling and experimental diagnostics in polymer electrolyte fuel cell[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1993, 140(12): 3513 - 3522.
- [30] Nguyen T V, White R E. A water and heat management model for proton exchange membrane fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1993, 140(8): 2178 - 2188.

接触,而且也降低了IL的黏性,增加了传质过程。

早期研究IL-CO<sub>2</sub>的相行为证明了该体系是不寻常的两相体系。尽管大量的CO<sub>2</sub>溶解入IL富相,降低了IL的黏度,但在CO<sub>2</sub>富相检测不到[bmim][PF<sub>6</sub>]<sup>[5]</sup>。Blanchard等<sup>[6]</sup>认为,即使压力在

40 MPa的情况下,该体系仍保留2个明显的相。因此,[bmim][PF<sub>6</sub>]-CO<sub>2</sub>高压相行为不同于任何普通的有机液体-CO<sub>2</sub>体系。表1概括了近年来研究过的IL-气体系相行为,包括常用的IL和气体类型、实验条件、基本结果和相关参数。

表1 IL-气体系相行为

体系	温度/℃	压力/MPa	结果	参考文献
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-CO <sub>2</sub>	40,50,60	≤9.3	CO <sub>2</sub> 在IL中的溶度随着压力的增加而增加	[5]
[C <sub>8</sub> -mim][PF <sub>6</sub> ]-CO <sub>2</sub>			CO <sub>2</sub> 在IL富相的溶度随着温度升高而降低	
[C <sub>8</sub> -mim][BF <sub>4</sub> ]-CO <sub>2</sub>			CO <sub>2</sub> 溶度依赖于阳离子和阴离子的性质	
[bmim][NO <sub>3</sub> ]-CO <sub>2</sub>			含有氟化阴离子的ILs、CO <sub>2</sub> 在IL富相的溶度最高	
[bmim][EtSO <sub>4</sub> ]-CO <sub>2</sub>			所有的ILs的相行为的一般趋势几乎都可以明确	
[N-bupy][BF <sub>4</sub> ]-CO <sub>2</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-CO <sub>2</sub>	10,25,50	≤1.3	CO <sub>2</sub> 在[bmim][PF <sub>6</sub> ]中的溶度最高,且水和CO <sub>2</sub> 相互作用最强,然后是C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> 、C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> 、CH <sub>4</sub> 。Ar和O <sub>2</sub> 在IL中的溶度都很低,且和IL没有交互作用	[7-9]
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-CH <sub>4</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-Ar				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-O <sub>2</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-CO				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-N <sub>2</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-H <sub>2</sub>				
[bmim][PF <sub>6</sub> ]-CO <sub>2</sub>	20~120	≤9.7	随着CO <sub>2</sub> 在IL中数量的增加,总压呈线性增加	[8]
[bmim][BF <sub>4</sub> ]-CO <sub>2</sub>	30~70	大气压	CO <sub>2</sub> 在IL中的溶度比O <sub>2</sub> 多1个数量级	[9]
[bmim][BF <sub>4</sub> ]-O <sub>2</sub>			CO <sub>2</sub> 在IL中的溶度随温度的升高而降低,O <sub>2</sub> 在IL中的溶度随着温度的升高略微增加	
			在[bmim][PF <sub>6</sub> ]中获得了类似的结果	

(上接第29页)

- [31] Okada T, Xie G, Meeg M. Simulation for water management in membranes for polymer electrolyte fuel cells[J]. *Electrochimica Acta*, 1998, 43(14/15): 2141 - 2155.
- [32] Cao J, Djilali N. Numerical modeling of PEM fuel cells under partially hydrated membrane conditions[J]. *Journal of Energy Resources Technology, Transactions of the ASME*, 2005, 127(1): 26 - 36.
- [33] Meier F, Eigenberger G. Transport parameters for the modeling of water transport in ionomer membranes for PEM-fuel cells[J]. *Electrochimica Acta*, 2004, 49: 1731 - 1742.
- [34] Fimrite J, Carnes B, Struchtrup H, et al. Transport phenomena in polymer electrolyte membranes: II. Binary friction membrane model[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2005, 152(9): A1815 - A1825.
- [35] Liu F Q, Lu G Q, Wang C Y. Water transport coefficient distribution through the membrane in a polymer electrolyte fuel cell[J]. *Journal of Membrane Science*, 2007, 287: 126 - 131.
- [36] Gurau V, Liu H, Kakac S. Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells[J]. *AIChE Journal*, 1998, 44(11): 2410 - 2422.
- [37] Um S, Wang C Y. Three-dimensional analysis of transport and electro-

chemical reactions in polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, 125: 40 - 51.

- [38] Meng H, Wang C Y. Large-scale simulation of polymer electrolyte fuel cells by parallel computing[J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59: 3331 - 3343.
- [39] Berning T, Djilali N. Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell: A parametric study[J]. *Journal of Power Sources*, 2003, 124: 440 - 452.
- [40] Guvelioglu G H, Stenger H G. Computational fluid dynamics modeling of polymer electrolyte membrane fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 147: 95 - 106.
- [41] Meng H. A three-dimensional mixed-domain PEM fuel cell model with fully-coupled transport phenomena[J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 164: 688 - 696.
- [42] 詹志刚. 质子交换膜燃料电池中水传输机理研究[D]. 武汉: 武汉理工大学, 2006.
- [43] Djilali N. Computational modeling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: Challenges and opportunities[J]. *Energy*, 2007, 32: 269 - 280. ■