Thesis Title Molecular Dynamic Simulations of Nafion Membrane in a Fuel Cell

Author Ms. Janchai Yana

Degree Master of Science (Chemistry)

Thesis Advisory Committee Dr. Vannajan Sanghiran Lee Chairperson

Dr. Piyarat Nimmanpipug Member

ABSTRACT

The optimized Nafion side chain and hydronium ion structures with $-CF_2SO_3^-$ and H_3O^+ positions of trifluoromethane sulfonic monohydrate crystal data were used as the initial model of Nafion fuel cell membrane. Molecular dynamic simulations of Nafion crystal cluster model and dry and wet systems of Nafion model were carried out to understand the effect of water molecules in a proton diffusion process by using AMBER 9 program package. From simulation, the diffusion of hydronium ions between two sulfonate side chains in the wet system was faster than in the dry system. To study the modification of Nafion using composite material, molecular dynamic simulations of 5% by weight of Krytox-Silica-Nafion polymer composite and

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

pure Nafion models, simulated at temperature of 298, 333, 353, and 373 K with the associated content of water, 1,766, 883, 527, and 354 molecules, respectively, were used and compared with the experimental data. As a result, 5% Krytox-Silica composite polymer can improve its efficiency at high operating temperatures due to the fact that silica acts as a water absorbent and can retain the water which has an important role in the proton transfer process at high temperature. The results are in a good agreement with experiments and could be used to describe the possibility of the application of Krytox-Silica in Nafion composite at the high temperature.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์ การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลของแนฟิออนเมมเบรนในเซลล์เชื้อเพลิง

ผู้เขียน นางสาวจันทร์ฉาย ยานะ

ปริญญา วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (เคมี)

คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ดร. วรรณจันทร์ แสงหิรัญ ลี ประธานกรรมการ
ดร. ปิยรัตน์ นิมมานพิภักดิ์ กรรมการ

บทคัดย่อ

โครงสร้างของกิ่งโซ่แนฟฟิออน และไฮโดรเนียม ไอออน ที่มีพลังงานต่ำสุดแล้วตามตำแหน่ง $-CF_2SO_3^-$ และ H_3O^+ ที่สอดคล้องกับข้อมูลผลึกของกรดไตรฟลูออโรมีเทน ซัลโฟนิก มอนอไฮเดรต ใช้เป็นแบบจำลองเริ่มต้นแนฟิออนเมมเบรนสำหรับเซลล์เชื้อเพลิง การจำลองพลวัติเชิงโมเลกุลของแบบจำลองแนฟิออนระบบแห้งและเปียกใช้ศึกษาผลของโมเลกุลน้ำต่อการส่งผ่านโปรตอนโดยใช้โปรแกรมแอมเบอร์ 9 จากการจำลองพบว่าระบบเปียกสามารถเหนี่ยวนำไฮโดรเนียมไอออนระหว่างกิ่งซัลโฟเนตสองข้างได้เร็วกว่าระบบแห้ง เพื่อการศึกษาการปรับปรุงคุณภาพของแนฟิออน โดยใช้วัสดุผสม ได้จำลองพลวัติเชิงโมเลกุลของ 5% โดยน้ำหนักของไครทอกซ์-ซิลิกาในแนฟิออน และแนฟฟิออนล้วน ที่อุณหภูมิ 298 333 353 และ 373 K ด้วยปริมาณน้ำ 1766, 883, 527, และ 354 โมเลกุล ตามลำดับ ผลการทดลองพบว่า 5% โดยน้ำหนักของไครทอกซ์-ซิลิกาในแนฟิออนมีประสิทธิภาพสูงขึ้นที่อุณหภูมิสูงเนื่องจากซิลิกาเป็นตัวดูดน้ำ และสามารถกักน้ำ ซึ่งมีส่วนสำคัญในขบวนการส่งผ่านโปรตอนไว้ได้ที่อุณหภูมิสูง ผลการจำลองสอดคล้องกับการทดลอง และสามารถใช้อธิบายการประยุกต์พอลิเมอร์ผสมของไครทอกซ์-ซิลิกาในแนฟิออนที่อุณหภูมิสูงได้

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved