

出國報告(出國類別:學術研討會)

赴日本參加
ICNSE- International Congress in Natural
Sciences and Engineering
返國報告

服務機關：海軍軍官學校

姓名職稱：戴中傑助理教授

派赴國家：日本

出國期間：109年1月17日—1月26日

報告日期：109年2月10日

摘要

計畫主持人於2020年1月17日出發前往名古屋參加日本亞洲研究協會所舉辦的「國際科學與工程大會」，由高雄小港機場搭乘華航飛機飛往日本關西機場，並於2020年1月19日下榻名古屋「國際科學與工程大會」會場附近之飯店，本次在名古屋國際會議中心進行報到和註冊，並領取大會資料和議程相關資料。1月20日下午張貼論文海報，題目為” Proton Transport Characteristics in Nafion/Sio2 Composite Membrane: A Molecular Dynamics Simulation Approach”。主要內容是報告數值研究質子交換膜燃料電池中質子交換膜在高溫運行過程中容易失水導致失效。摻入二氧化矽(SiO₂)奈米顆粒以保持水份，但此物質會使質子交換膜導電度下降，降低燃料電池性能，利用分子動力學研究摻入奈米顆粒之二氧化矽對高分子膜中質子的傳遞機制是本研究的重點，探討質子的傳遞受二氧化矽的影響可瞭解燃料電池核心質子交換膜的性能，也就是交換膜的導電度。本計畫重點研究了二氧化矽與水及氫離子之間的交互作用及質子在交換膜中傳遞的路徑。成功的將氫離子在膜中靠著水分子的載運機制及在水分子之間跳躍機制實現了傳遞機制，從陽極往陰極方向前進，最終與陰極的氧原子結合，形成水分子，提出高分子的模擬方法，最後運用GRB法完成了分子動力模擬；本研究計畫提出的方法除了可應用於質子交換膜的分子動力模擬運算，更可運用於生物化學方面的模擬，可預測計算出交換膜的導電度及燃料電池的性能。在會場中與各方學者討論熱烈。會議期間，主持人亦與一些研究學者討論有再生能源、環境保護以及計算模擬在產業上應用的知識與技術。

目次

摘要.....	1
目次.....	2
本文.....	3
一、目的.....	3
二、會議概況.....	3
三、過程與心得.....	4
四、發表論文.....	6
五、建議事項.....	9
附錄一：活動照片.....	10
附錄二：大會議程截錄.....	11

出席國際會議心得報告

一、目的：

出席國際大型研討會，可與國際著名學者討論與交流有關新能源及計算模擬的發展與應用，並發表個人論文，參與討論以增加個人於本研究領域廣度及深度。

二、會議概況：

國際科學與工程大會（ICNSE）為科學界與工程界之國際學術研討會，今年 1 月 20 日至 1 月 23 日在日本名古屋的國際會議中心(Nagoya Convention Hall)舉行，這是日本亞洲研究學會(Asia Research association)，每年所舉辦的其中一場關於科學界與工程界頗具盛名的國際研討會。本次研討內容主要為複雜流場的模擬運算技術探討。會議邀請了許多重量級的學者與會演講，參加的學者以亞洲及歐美洲地區為最多數，每場演講後的討論正是各個學者意見互相交流的時間，可以相互激發思慮。本次研討會學術交流分為三個部份，包括：(一)專題演講(keynote speakers)；(二)口頭報告(presentations)及(三)海報展示(Poster)。大會議程安排第一天早上二場專題演講。本次大會第一天就排進了 5 個議程，每一個議程平均 3~5 場的報告；本人此次發表的研討會論文於 1 月 20 日下午於海報展示會場發表。由於專題演講、口頭發表與海報論文發表於同一時段進行，三天下來，研討會之論文發表與專題發表場次可選擇有興趣的參加，且與國外學者共同討論研究心得獲益良多。此外本次會議議程相當緊湊，除了下午的論文發表外，還有專題講演，過得相當充實。除在學術專業與各國學者交流外，對異國風情文化亦略有體會與感受。

三、過程與心得：

計畫主持人參與會議經過，如下所述：

主持人於 2020 年 1 月 17 日研討會赴高雄小港機場坐飛往日本關西機場，適逢週末假日，交通繁忙，於 1 月 19 日抵達日本名古屋，於 1 月 20 日在名古屋國際會議中心(Nagoya Convention Hall)進行報到和註冊，並領取大會資料和議程相關資料。此次大會的主要學術議程有邀請演講、口頭報告及海報展示二種方式。主持人於會議期間 1 月 20 日下午 1 點 30 分於海報展示會場展示本人發表之論文，題目為" Proton Transport Characteristics in Nafion/Sio₂ Composite Membrane: A Molecular Dynamics Simulation Approach "。主要內容是報告質子交換膜燃料電池中，質子的傳遞機制及演算法。本研究重點在於使用分子動力學及 GRB 演算法。將摻入二氧化矽奈米顆粒的高分子膜內含有的水分子與氫質子經過分子動力模擬計算後，擷取出氫質子與水分子的移動路徑及其分子間的交互作用，其中水分子受到二氧化矽奈米顆粒的表面吸附，均方根位移因二氧化矽顆粒數量增加而下降並展現氫質子與水分子之間的相對位置，演示出氫質子是依靠水分子的載運機制及擴散原理及在水分子間的跳躍運動。展示後多人向本人詢問相關理論機制問題，討論熱烈。其中有學者提問對於有關分子動力模擬之基礎之分子力學及分子結構等有關問題；另有學者則是詢問模擬參數設計以及與結果的比對驗證。顯示此一領域的國際學者在研究上是理論與實驗技術並重的。另外本次研討會當有其它研究領域的學者，研討會論文報告共計 480 篇：流場計算與燃燒、電漿流體動力及未來應用、渦動流體力學、紊流流體力學等各方面都有，並有各個論文作者分別在現場說明。

此外，聽了中原大學化工系的陳昱劭教授討論有關有色污水去色的化學反應，他介紹了利用光催化作用在旋轉盤降解甲基藍的化學顏料，其研究主要是解決紡織染整工廠在排放有色廢水的困擾，使用旋轉盤及光化學反應，使用二氧化鈦做催化劑，讓甲基藍水溶液的顏色因二氧化鈦催化劑在光線下將甲基藍分解為水及無害之化學物質，同時在會議現場之研究海報亦顯示了其實驗相關機具與研究之過程及程序，課題相當重要且有趣；日本金大大學電子工程學系的栗田浩一教授發表了以超靈敏靜電感應器結合深度學

習，對於下肢肢體殘疾有關之復建病人，在不接觸的情況下利用感測器，獲得膝蓋部位的運動情況，利用電腦程式深度學習的方式分析數據，獲得病人肢體復建最佳的方式，對於復建醫學有相當大的助益。本次研討會讓不同領域的研究者對物理治療及深度學習的復健方式有了基本的認識。此外，與日本名古屋工業大學的石田健介教授討論有關物聯網的技術，它利用光學的影像分析原理分析在工廠生產線裏的員工手部的運動，發展提高生產良率的手部安裝零件的問題，教授發表了他與他的團隊使用影像處理，在處理生產線上之人員手部的安裝產品的影像，分析出正確安裝的流程，並結合物聯網，對生產線上的工作人員展示正確的動作，即時修正安裝錯誤的動作，提高生產產品的良率，也有效率的提高生產效率；讓我們與會者受益良多。這場研討會所邀請之專家學者演講之主題結合了物聯網、醫療技術、深度學習及環保的科學，與本人未來的研究相當有關連，參加本次研討會，雖然只有短短三天，但所學習的新知，卻是需要花費大量研讀時間才可獲得的，因此也激發了個人在相關研究上的靈感。

研討會最後一天(1月23日)無與本人相關論文發表以及學術議程，在名古屋市區參觀了名古屋工業大學及科學館，覺得日本對於環境的保護投注了相當大的資源，許多不起眼的地方都能發現對環保的重視，隔日由名古屋返回大阪，由於返回大阪時間已晚，於大阪落腳之隔日，1月26日由關西機場搭機返台，結束本次受益良多的研討會。

四、論文發表：

Proton Transport characteristics in Nafion/SiO₂ composite membrane: A Molecular Dynamics Simulation Approach

Chung Chieh Tai^a, Cheng Lung Chen^b

^aDepartment of marine mechanical Engineering, R.O.C. Naval Academy, Zuoying District,
Kaohsiung, Taiwan, R.O.C.
E-mail address: taijack@gmail.com

^bDepartment of Chemistry, National SunYat Sen University, Kaoshiung, Taiwan R.O.C.
E-mail address: chen1@mail.nsysu.edu.tw

1. Background/ Objectives and Goals

Fuel cells are considered to be a promising technology for clean and efficient power generation. Proton exchange membranes are the key components in fuel system. Extensive studies of systems using such membranes have focused on their proton conductivity and its dependence on temperature and humidity, with the studies showing that proton transfer in ionomer membranes is mainly dependent on the humidity of the given system. Rodgers et al. [1] investigated the effects of incorporating SiO₂ into a Nafion membrane on water retention, proton concentration, effective proton mobility, and proton conductivity of the membrane. They found that the SiO₂ formed rigid scaffolding inside the membrane, which led to an increase in the water content of the membrane. This increased water content diluted the concentration of protons in the membrane, which led, in turn, to a reduction of its proton conductivity. In spite of extensive experimental studies, the detailed mechanism of proton transport in an SiO₂-containing membrane system is still unclear. In the current research, a systematic study of the effect of SiO₂ content on the proton transfer in a membrane system was carried out.

2. Methods

In the present work Molecular dynamics simulation was employed to study the mechanism of the transport of hydronium ion in Nafion membrane doping into SiO₂ nanoparticles. The nafion membrane was hydrated with $\lambda=7, 14, 28$ and SiO₂ nanoparticles content was 1.6wt%, 4.6wt%, 7.3wt% respectively. MD simulation with (NVT) ensemble was carried out. In order to generate reasonable simulated systems, Gradually-Reduce-Sizes (GRS) method was applied[2]. This method was used previously for the simulation of Nafion/water system and obtained reliable results. To

analyze the inter-molecular distance, The root mean square displacement (RMSD) of a particle was calculated as

$$RMSD = \left\langle \left| \bar{r}_i(t) - \bar{r}_i(0) \right|^2 \right\rangle \quad (1)$$

where $\langle \rangle$ represents the average and \bar{r}_i denotes the position of the i th particle. The diffusion constant D can be obtained from RMSD, with D calculated as

$$D = \frac{1}{6N} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \left\langle \left| \bar{r}(t) - \bar{r}(0) \right|^2 \right\rangle \quad (2)$$

The conductivity of protons (σ , siemens per meter) was evaluated from the diffusion coefficient of proton, D_{proton} , with σ calculated as

$$\sigma = \frac{Nz^2e^2}{Vk_B T} D_{proton} \quad (3)$$

3. Expected Results/ Conclusion/ Contribution

Through the analysis we observed the proton trajectories affect by SiO₂ particles. The result in Fig 1. It showed that the proton RMSD decreasing with increase SiO₂ content, it suggested the proton conductivity affect by SiO₂ particles in Nafion membrane. Given in Table 1 are the calculated diffusion constant of proton and its conductivity in SiO₂/ Nafion membrane. The table shows the diffusion constant of proton was decreased from $6.31 \times 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{s}$ to $2.11 \times 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ and conductivity was decreased from $1.48 \times 10^{-1} \text{ S/cm}$ to $1.09 \times 10^{-2} \text{ S/cm}$ as the content of SiO₂ increased from 1.6wt% to 7.3wt%. This clearly indicates the mobility of proton was affected significantly by the content of SiO₂ nano-particles.

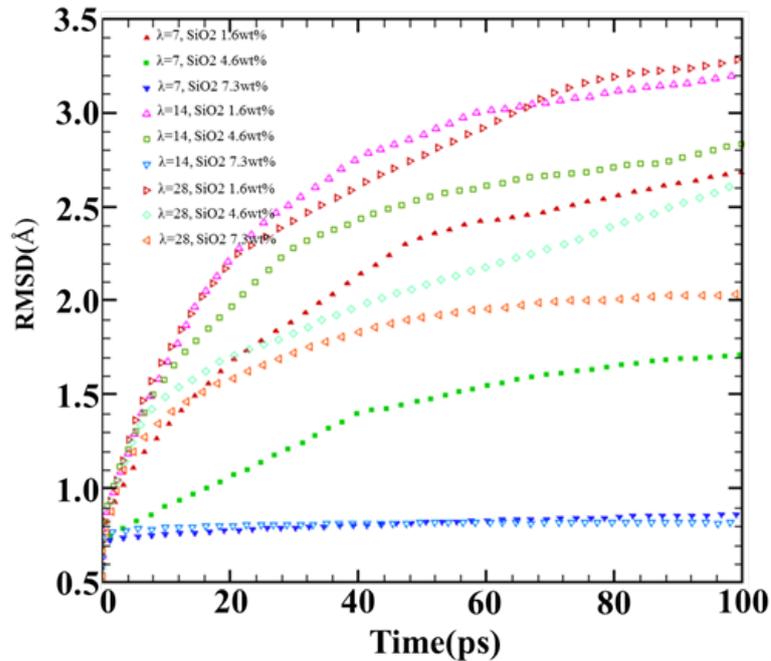


Fig 1. Root mean square displacement of proton in SiO₂/Nafion membrane.

Table 1. Evaluation results of the diffusion constant and Conductivity of proton in SiO₂/Nafion membrane.

SiO ₂ content	Water content	Diffusion constant (cm ² /s)	Conductivity (S/cm)
	7	2.7×10^{-9}	1.48×10^{-1}
1.6 wt%	14	3.05×10^{-9}	1.45×10^{-1}
	28	2.11×10^{-9}	7.54×10^{-2}
	7	1.63×10^{-9}	8.52×10^{-2}
4.6 wt%	14	2.44×10^{-9}	1.10×10^{-1}
	28	1.82×10^{-9}	6.50×10^{-2}
	7	2.11×10^{-10}	1.09×10^{-2}
7.3 wt%	14	6.31×10^{-11}	2.76×10^{-2}
	28	6.50×10^{-10}	2.37×10^{-2}

Keywords: PEMFC, Nafion composite membrane, proton transport, SiO₂

Reference

- [1] M.P. Rodgers, Z. Shi, S. Holdcroft, Transport properties of composite membranes containing silicon dioxide and Nafion®, *Journal of Membrane Science*, 325 (2008) 346-356.
- [2] C.C. Tai, C.L. Chen, C.W. Liu, Computer simulation to investigate proton transport and conductivity in perfluorosulfonate ionomeric membrane, *International Journal of Hydrogen Energy*, 42 (2017) 3981-3986.

五、建議事項：

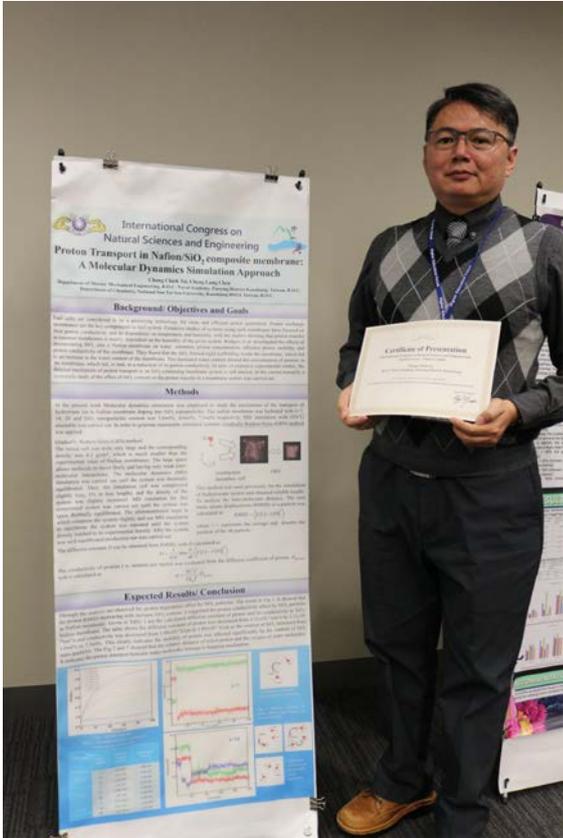
本次研討會給我的感覺是學術交流與國際視野開拓的重要性。國際間，針對各種專業領域不乏會有知名學者，在各領域均有相當之成果與大家分享，在參與研討會的過程中，可從學者報告的內容瞭解其研究特別之處也增加了其它知識的質與量，在問與答之間，可瞭解各國不同的發展現況及研究領域的新奇想法；亦可在私下討論時，了解每位學者間所關注的焦點，同時能使我們對世界整體研究趨勢有部份的了解，有助我們掌握新的研究方向。因此，教育部或科技部往後應盡量補助國內年輕學者或博士生，踴躍參與國際學術會議，開拓其國際視野並邁向國際；同時，也希望能多多補助支持國內大專院校，承辦一些大型國際會議，使無法獲得出國補助的學生及國內年輕老師，也能參與國際會議，增加與國外學者進行交流與見習的機會，亦可提升台灣在國際上的知名度。總結此次學術之旅，共可歸結出幾點重要結論與建議：

- (1)外國的學校對於教授的研究均有實質上的支持，提供富豐的資源讓教授能在自己專長的領域深入發展，然而許多尖端技術的發展，還是要有透徹的理論基礎，及靈活的頭腦，因此基礎教育非常的重要。
- (2)不少論文乃頗有前瞻性的議題，例如物聯網、電腦運算與深度學習及理論模擬等研究；結合實際的問題，甚有參考價值。由於研討會的範圍非常廣泛，個人收穫者有限，台灣近年來學界亦逐漸重視此領域，希望能夠及時追趕國際腳步，使台灣的資訊科技在國際上一直走在最前端。
- (3)對於能源及環保的議題，建議針對具未來性的研究議題及環境保護的議題能擇項支援，對於國家的能源政策及地球環境的永續發展有相當的助益，相關技術可輔助國內的產業在世界上佔有一席之地。

附錄一：活動照片



本人於 ICNSE 研討會會場註冊



本人於研討會會場發表研究論文

附錄二：大會議程截錄

13:30-14:30 | Room 207

Monday Poster Session (1)

Engineering/ Applied Sciences/ ICT — Information & Communication Technologies

10003

Machine Learning Method to Explore the Association between Stroke and Uterine Fibroids

Hui-Wen Lin, Soochow University, Taiwan

10057

Novel Walking Ability Classification Technique Using Ultra-Sensitive Electrostatic Induction Sensor

Koichi Kurita, Kindai University, Japan

10006

Study on Recycling Furnace Slags of Industrial Byproduct to Produce Slag-Based Zeolite

Jen-Hao Chi, Wu Feng University, Taiwan

Chung-Hao Wu, Chung Yuan Christian University, Taiwan

Yi-Hao Huang, Maple Rainforest Disaster Prevention Technology Ltd., Taiwan

10030

Step Up Multiple Test for Finding First Change Point of Sequence of Normal Means with Ordered Restriction

Tsune-hisa Imada, Tokai University, Japan

10084

A High Quality Factor Dielectric Resonator Antenna for Use in a Wireless High-Temperature Sensor

Yih-Chien Chen, Lunghwa University of Science and Technology, Taiwan

Chih-Hung Li, National Taiwan University of Science and Technology, Taiwan

Cheng-Chien Kuo, National Taiwan University of Science and Technology, Taiwan

Tse-Lung Lin, Lunghwa University of Science and Technology, Taiwan

10031

Proton Transport Characteristics in Nafion/Sio₂ Composite Membrane: A Molecular Dynamics Simulation Approach

Chung Chieh Tai, R.O.C. Naval Academy, Taiwan

Cheng Lung Chen, National SunYat Sen University, Taiwan

10104

Design and Implementation of Electrical Power System for 2U Cubesat

Yu-Kai Chen, National Formosa University, Taiwan