



## 模擬設計帶動材料創新與產業升級

技術主編：張志祥 C. H. Chang

現職：工研院材化所(MCL/ITRI) 前瞻材料基盤技術組 副組長

學歷：國立清華大學(NTHU) 材料科學與工程研究所 博士

專長：無機材料與元件、材料設計應用

「人工智慧AlphaGo連續擊敗世界頂尖棋王」的新聞引起許多人的注目與好奇，這種結合電腦運算與大數據分析技術是否也能應用在創新材料的研發與智慧製造呢？

近年來，由於電腦運算能力大幅提升，加上理論基礎與計算方法不斷精進，運用電腦設計新材料，找出最佳組成配方與製程優化，以達應用規格所需之特性，已成為研究開發者必備的手法。傳統以經驗累積、Trial and Error方式從新材料發現、開發製造到產業應用，至少得花費15~20年。為此，美國於2011年提出材料基因組計畫(Materials Genome Initiative; MGI)，期望透過高通量計算、實驗與場域快速驗證、數位資料庫三大核心之跨領域整合技術，將研發模式轉變為「優先理論預測，再行實驗驗證」，藉此縮減研發時程與成本，並重振美國製造業的競爭優勢；其他包括歐盟、日本、中國等也相繼啟動類似的計畫，目標都是希望透過創新基礎環境建構來加速提升製造業的競爭力。

工研院材化所長期以來為加速新材料的開發應用，積極投入電腦輔助工程技術之開發，建構高速平行運算電腦系統、理論計算工具與方法，並建立跨尺度材料模擬設計平台，包括微觀尺度量子力學、分子動力與蒙地卡羅計算；介觀尺度粗粒化分子動力、布朗動力與耗散力學動力計算；以及宏觀尺度連續體理論計算，如固體力學、流體力學、熱傳、電化學、電磁學等。本期「高值材化生產力4.0」專題，規劃包括「材料模擬於智慧製造之應用」、「高分子材料之多尺度模擬設計平台」、「混合分散技術平台之介紹」、「第一原理與量子化學計算在材料基因組的應用」、「淺談大數據解析技術—機器學習於材料科學與工程之應用」等數篇專文，透過實際案例，介紹材料開發者如何透過理論計算、搭配實驗驗證與數位資料庫，能夠快速精準找出新材料的設計準則、組成配方與製程優化條件，應用領域擴及構裝產業、鋰電池、3D列印、顯示照明、化工高分子與奈米傳產等，相信對業界先進在創新材料的研發上會有相當的助益與啟發。

製造業一向是台灣經濟賴以成長的重要命脈，而材料創新是製造業創造競爭優勢與差異化產品的驅動力。面對紅色供應鏈、資源有限、環境永續與少子化等多重挑戰下，台灣應善用ICT軟硬整合優勢，中長期系統性規模化投入材料創新基礎環境建構，並引導國內製造業朝向客製化設計專業服務發展，策略性聚焦藍海市場利基型產品，以「製造服務一體化」創新模式帶動國內產業高值轉型。☒