



理論與模擬加速 奈米科技之發展

材料科學與工程是高度複雜、多領域整合的，材料的研發橫跨材料、化工、化學、物理、機械、電子、電機等各種學門。因此，從材料設計、製程到產品應用，各個學門領域所發展之理論模式及更進一步的電腦輔助設計、分析及製造，統稱電腦輔助工程，在材料的研發領域中集其大成。材料所自創所之初，從事工業材料及相關產品開發研究工作，即積極地引進或自行開發先進的電腦輔助工程軟體與技術，諸如：複合材料結構設計、接觸衝擊模擬、熱傳分析、流體動力計算、模流分析、電磁場計算、結構／壓電／聲場耦合分析等，並成功地運用於複合材料自行車、電子構裝產品、音響產品、塑膠／金屬射出成形產品、微機電壓力感測器，以及其他光電及通訊材料應用產品的開發。

新材料的發展是使得現代大多數科技產業及產品得以實現(Enable)的關鍵。由於材料奈米化可具有不同於較大尺寸材料之特殊性質，因此除了材料的組成，材料的尺寸成為新材料及新產品開發的嶄新面向，並將對未來的科技產業產生重大的衝擊，這是奈米科技之所以受到廣泛注意的原因。然而，由於奈米結構尺寸太小，直接量測困難；奈米結構性能特殊，需要足夠的瞭解，才能設計及應用；奈米結構精密製程控制不易，必須瞭解其形成機制，才能加速其產業化。因此，建立涵蓋奈米尺度之理論與計算模擬方法，將是協助闡釋實驗量測結果、設計性能特殊奈米結構應用產品、精密控制奈米結構製程之必要工具。

奈米尺度介於微觀尺度（電子、原子結構）和巨觀尺度（連續介質）之間的介觀尺度，原本基於微觀尺度或巨觀尺度分析的假設而發展出來的簡化理論分析模式，在介觀尺度分析可能不再適用。因此，因應介觀尺度物理現象的複雜性，必須由更基礎的微觀尺度分析工具（量子力學、分子動力）出發，發展適用於介觀尺度分析的理論與計算模擬方法，並連接既有之連續體理論電腦輔助工程技術，形成多尺度模擬技術，始得以協助和加速奈米科技之發展。發展暨運用先進的電腦計算模擬技術，使得在更堅實的理論基礎上，開發研究的潛力、加速研究工作的進行、提升研究的競爭力、落實技術的生根及產業的應用，係奈米科技未來成功與成就的關鍵。◻

朱中明