



材料知識數位化，AI賦能高效研發

技術主編：劉子瑜 T. Y. Liu

現職：工研院(ITRI) 材料與化工研究所 先進陶瓷與無機半導體材料研究組 副組長

學歷：成功大學(NCKU) 化學研究所 博士

專長：材料人工智慧、材料資訊、陶瓷/無機材料製程

在追求淨零碳排與高效能運算的全球浪潮下，從半導體、固態電池到傳統重工業，先進材料的研發競爭正快速升溫。然而，材料化學領域長期高度依賴專家經驗與「試誤法(Trial-and-Error)」的開發模式，不僅研發週期長、成本高，也常卡在實驗室成果難以跨越量產化的「死亡之谷」。

隨著人工智慧(AI)、機器學習(ML)與數位雙生(Digital Twin)技術日益成熟，材料研發的核心邏輯正被重新定義。AI的價值並非取代專家，而是將複雜的物理與化學機制數位化，協助研究人員從大量數據中挖掘隱藏規律，加速知識累積與材料創新。未來材料競爭的關鍵，也將從設備與資本，逐步轉向「數據資產化」與知識模型建立能力。

本專題以「由策略到技術、由基礎到應用」為主軸，集結五篇代表性專文，帶領讀者全面理解AI在材料化學領域的轉型脈絡。首先，《材料化學領域導入AI策略》提出，企業成功轉型的關鍵，在於建立跨域的「混合型人才(Material-AI Architect)」與推動數據資產化，並建議從高頻、小場景切入，逐步將專家經驗轉化為AI可學習的特徵。

在基礎技術面，《分子指紋技術》介紹如何透過延伸連結性指紋(ECFP)等演算法，將複雜化學結構轉化為可被電腦快速辨識的數位特徵，使AI能在龐大資料庫中進行高速比對，對新藥與高分子材料開發極具價值。

進一步在實戰應用上，本專題展示三大AI技術方向：其一，生成式AI與SEM量測結合的「PISAI」技術，可整合文獻與私有數據，自動生成新型固態電池配方，大幅提升預測精準度與研發效率；其二，數位雙生技術應用於碳化矽(SiC)長晶爐，利用代理模型將高溫熱場模擬壓縮至秒級運算，打造低成本虛擬實驗室；其三，文獻驅動機器學習則透過XGBoost與缺值處理策略，在資料不完整的情況下，仍能有效縮小耐火材料配方搜尋範圍。

整體而言，本專題所描繪的，不只是工具導入，而是一場重塑材料研發流程、知識體系與產業競爭模式的轉型。AI驅動材料研發，將成為下一世代材料科技的重要核心能力。🔗