



## 材料設計 — 藉助於電腦的輔助



技術主編：葉吉田

現職：工研院材化所多尺度模擬研究室主任 / 研究員  
學歷：國立清華大學動力機械工程學系 博士  
專長：有限元素法、計算接觸衝擊力學、計算流體動力學

「在紙上設計材料，最佳化其組成及製程步驟，以達到特定應用所需要的性質，已經是材料研究者長久以來的夢想。」— MIT 的 Ceder 教授在 *Science* (1998) 的一篇文章如是說。

數世紀以來，科學家及工程師運用自然現象的數學模式，藉以強化科學及工程之理論基礎；但直到現代計算方法及電腦的發明，大部份所發展的理论模式才得以被充分運用及發揮。自二次世界大戰以來，計算方法及工具的進步改變了全世界科學及工程的進行方式。今天，固體力學、電磁學、熱傳、流體力學、電漿物理、分子動力、量子力學以及其他科學範疇之理論，業已經由計算方法及電腦的快速進步，根植於各種工程設計、製造，以及廣泛的自然及人造現象研究。

材料科技的進步，往往是許多工業產品革命性進步之關鍵；例如：矽半導體材料淘汰了真空管，帶來新的電腦資訊電子時代。材料科學與工程是高度複雜、多領域整合的，材料的研發橫跨物理、化學、材料、化工、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。

工研院材化所長久以來為加速材料的開發與應用，戮力於電腦輔助工程技術之培養。我們建構了具有超高傳輸速率之平行運算叢集電腦，並建置國際最先進的量子力學計算和分子動力計算軟體、自行發展之高效能流體動力計算軟體，以及其他跨領域計算軟體業已成功地應用於透明導電氧化物、奈米複合透明基板材料、燃料電池、相變化記憶體等之設計開發。

材料之性質取決於其組成及微結構；為了兼顧材料應用所需被滿足的多種性質及可製造性，利用有機分子及無機物共同組成的複合材料，是一個主要的材料設計方向。本期「材料設計」專題，報導複合材料微結構影像分析及傳導性質計算模型技術，藉由電腦影像處理材料的電子顯微鏡圖片，量化分析材料之微結構。一方面可用該量化資料與材料性質之關係作為品質控制之依據，另一方面可用該真實微結構建立模擬模式，並透過計算探討改進設計之方向。另外，由於再生能源開發的殷切需求，熱電材料受到注目，本專題因而特別報導以量子力學計算篩選熱電材料之設計方法。☞