



## 材料設計—跨出創新永續產業的第一步

技術主編：張志祥

現職：工研院材化所(MCL/ITRI)多尺度模擬研究室 主任 / 研究員

專長：薄膜材料元件、材料設計應用

學歷：國立清華大學(National Tsing Haw University) 材料科學與工程研究所 博士

受到全球金融大海嘯影響，以製造代工、出口導向為主的台灣經濟受到極大的衝擊，產業面臨相當嚴峻的考驗。代工群聚產業型態的背後是大量資本、人力和時間密集的堆砌，透過快速投資、壓低成本及削價競爭來賺取微薄利潤。在景氣低迷之際，許多人趁著無薪假，開始認真思索台灣未來新的機會點。

以往靠大量生產、大量消費而產生大量廢棄物方式來刺激經濟、提高國內生產毛額(GDP)的方式，在面對全球經濟衰退與地球資源過度消耗的雙重壓力下已不可行；取而代之，應該重新思考改以合理生產、合理消費與零廢棄物排放的方式，達到環境經濟兩端平衡的永續經濟體，創造高的真實進步指數(Genuine Progress Indicator; GPI)，才能延續產業的永續發展。

由此角度來看，台灣的製造業除了面臨消費需求飽和的壓力外，也必須逐步朝向循環型的 3R (Reduce, Reuse, Recycle)材料產品開發。更甚者，包括新材料從研發到量產所產生的能源耗損或廢棄物，也都需列入評估。突破目前困境的方法之一，就從材料設計著手，直接透過原子、分子等微觀尺度的模擬設計來預測材料調變改質後的巨觀特性，不僅能縮短新材料的開發時程，亦可減少先期投入的資源。透過迅速研發具創新的應用產品，才能維持台灣產業的優勢。因此，如何建構快速精準的新材料設計方法與工具，將成為許多廠商未來迫切的需求。

工研院材化所長期以來積極投入電腦輔助工程技術之開發，並建構高速平行運算電腦系統、理論計算軟體與材料特性資料庫。本期「材料應用設計」技術專題將透過實際案例，介紹設計者如何透過已建立的理論計算工具與資料庫，快速精準找出新材料的開發方向，包括「快速精準設計理想高分子新材料」與「溶解度參數在塗料溶劑設計之應用」專文，相信對業者有相當的助益。此外，完全由最基本的物理定律出發，而不依賴實驗數據及經驗公式的第一原理（量子力學）計算，近幾年來也有相當的進展，在「固態材料性質第一原理之展望與挑戰」一文中，讀者將了解到第一原理計算工具在各應用領域中實際所扮演的角色與產生的價值。

全球經濟大海嘯，讓人重新思考企業存在的目的，除了創造股東的最大利益外，更應負起永續生存的企業公民責任。同樣地，材料科技的發展在考量企業利潤的同時，更需兼顧產業的永續發展。如何在困境之際，成功跨出創新永續產業的第一步，就從材料設計開始吧！