材料數位設計服務平台-
客製化材料物性資料庫與設計地圖

Customized Materials Physical Properties Database and Design Maps

❒技術簡介

利用客製化材料物性資料庫、材料設計地圖等技術服務，加速使用者進行材料篩選，並建議材料設計的方向，大幅縮減材料研發階段的成本與時間。

❒創新特色

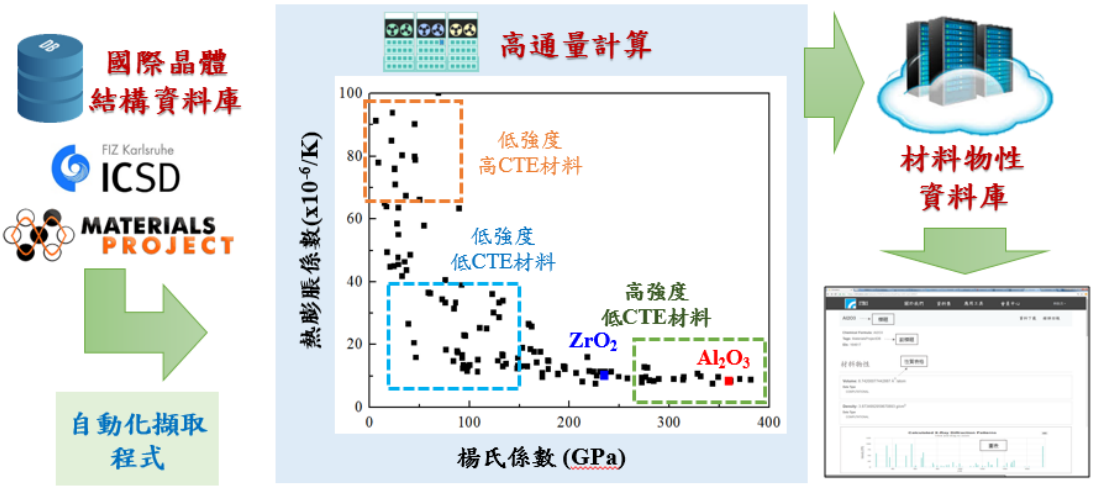
導入材料基因組計畫(Materials Genome Initiative, MGI)的概念與工具，以高通量計算和高通量實驗為技術基礎，配合數位化資料庫的儲存/管理/搜尋等功能，依據材料的關鍵性質，快速建立材料地圖，並給予材料篩選與設計的建議。

❒研發成果

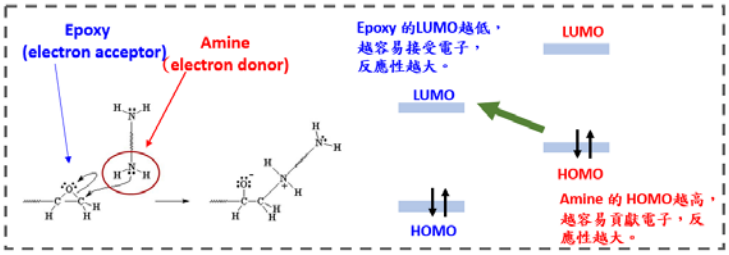
運用 MGI 材料數位平台，建立二元金屬氧化物機械性質資料庫，加速高機械強度與低熱膨脹性質的新材料開發。建立樹脂硬化反應性資料庫，促進高導熱絕緣封裝材料的設計。建立鋰金屬負極電池添加劑資料庫，建議枝晶抑制型添加劑材料的篩選。

❒可應用範圍

客製化材料篩選與開發服務，例如:陶瓷燒結添加助溶劑材料、絕緣封裝材料、電解液添加劑材料…等，以及相關模擬技術技轉與人才培育。



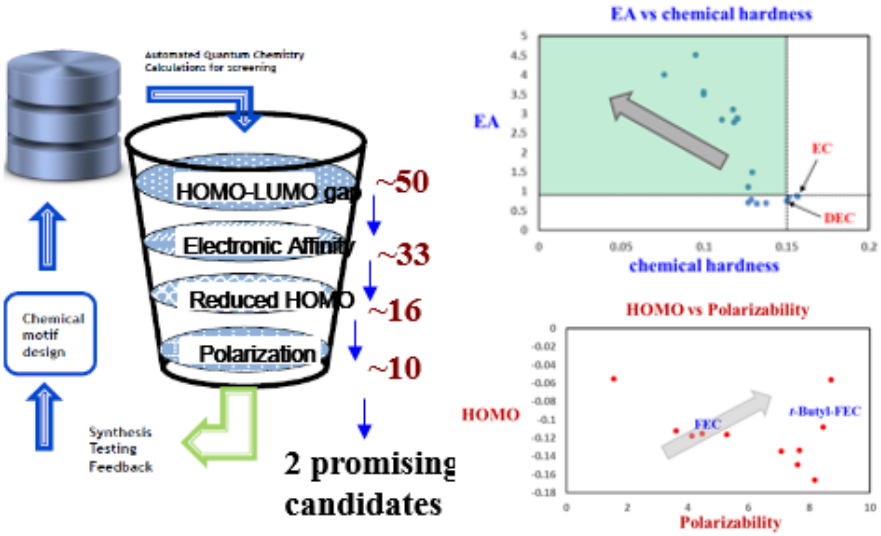
圖一、二元金屬氧化物物性資料庫建立流程與材料地圖



	Epoxy	Type	M/P	HOMO	LUMO
○	4000	Aromatic	M	-0.27057	0.007462
△	NEO	Aliphatic	M	-0.32717	0.011450
△	BUT ()	Aliphatic	M	-0.32464	0.012769
○	2E (synthesis)	Aromatic	M	-0.26043	0.008283
△	TM (synthesis)	Aromatic	M	-0.28159	0.010336
☆	DGE (synthesis)	Aromatic	M	-0.24522	-0.041310

	Amine	Type	M/P	HOMO	LUMO
○	DDM	Aromatic	M	-0.24456	0.010260
○	BAPB	Aromatic	M	-0.24909	0.002158
△	113	Aliphatic	M	-0.29508	0.012588
○	MDA	Aromatic	M	-0.24843	0.008445
☆	ODA	Aromatic	M	-0.23282	0.009630
△	DDS	Aromatic	M	-0.27641	-2.1E-05
○	BAPP	Aromatic	M	-0.24970	0.003149
△	CUA	Aliphatic	M	-0.26499	0.000713
○	MED	Aromatic	M	-0.24277	0.009460
△	250	Aliphatic	P	-0.26162	0.0006270

圖二、高導熱絕緣封裝材料計算方法與資料庫



圖三、電解液添加劑篩選流程圖與模擬結果

研發部門及聯絡窗口：

工研院材化所：林鈺杰(03-5913924)、李涵榮(03-5913087)、張志祥(03-5914353)