

我的研究主題為「隱形眼鏡」，廣義來說隱形眼鏡算是一種高分子，目前正在研發所謂的高透氧矽水膠隱形眼鏡，高透氧能提升每日的配戴時間，並減低角膜缺氧發生的機會，而隱形眼鏡的主要材料大致可分為親水性單體與疏水性單體，親水性單體在隱形眼鏡歷史中發展已久，重點在疏水性單體的開發，通常以矽氧烷為主要架構，這同時也是各大隱形眼鏡公司專利佈局的重點。

當中研究上最大的困難就是配方的比例變化可以說是數百千種，平均一塊隱形眼鏡會使用到約莫 10 種高分子單體，而每種比例都可以調整，因此會產生許多種排列組合，且每個配方所製備出的隱形眼鏡必須經過多種檢測，並量測各種性質包括含水量、透氧率、接觸角、透光度等，若要找出最適合的配方可以說是曠世費時。

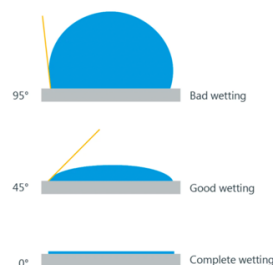
若想利用機器學習解決實驗時間過長的問題，輸入層可以利用 RDKit 將單體的化學結構轉換成 Fingerprint，如此可將結構因子導入輸入層中，另外可以從文獻或實驗中取得不同單體間的比例，以及各種比例所製作出來的隱形眼鏡和其性質，單體間的比例可與結構因子一併放入輸入層中，而如上述的各種性質，透氧、含水量、透光度等，可放入輸出層，中間可置放多種 Hidden layer 來解決此「回歸問題」，若此 Model 可解決並預測出任意比例單體所製成隱形眼鏡的各種性質，那將可以省下大量的時間與金錢，可以縮短配方的研發過程，甚至可以設計新的矽氧烷 Macromer，不用浪費時間合成預測效果不好的分子，僅需將 Model 預測性質較佳的比例製成成品並量測性質即可，另外隱形

眼鏡領域當中目前很少甚至沒有相關的文獻來處理這塊問題，若能利用機器學習來突破，將會是該領域重要的一步。

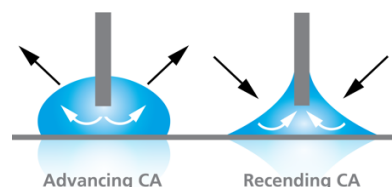
接觸角是決定隱形眼鏡表面均勻性及親水性相當重要的量測指標，靜態接觸角越小表示表面越親水，動態接觸角越小表示表面越均勻，但因為接觸角的量測並沒有標準的 ISO 方法，所以資料庫中的資料只能參考，大部分數據還是只能從自己的實驗室中取得，這會是量產資料上很大的困難。



接觸角量測儀



靜態接觸角



動態接觸角

另一個重要量測指標則是透氧率，極譜法利用電極電流來將氧分子分散穿透於鏡片上，當氧分子碰觸到電極時，會轉化為氫氧離子，此時藉由儀器量化此離子數量，進而轉化成電流；並透過所量測到的電流，來計算獲得隱形眼鏡透氧率(Dk)和透氧量(Dk/t)，大多數資料庫上都會有所謂 Gas Permeability，雖然資料庫上較少隱形眼鏡的透氧率，但卻有許多高分子(如：PDMS)的透氧率，通常隱形眼鏡的透氧率會隨著這些高透氧高分子的比例增加而變好。



極譜法所使用之透氧儀



極譜法所使用之電極頭