淡江時報 第 422 期

**李 遠 哲 博 士 於 NCS開 幕 致 詞 全 文**

**專題報導**

計 算 機 的 使 用 是 在 六 ○ 年 代 的 初 期 ， 我 大 學 作 研 究 的 時 候 是 1960年 ， 買 了 第 一 部 電 子 計 算 機 是 IBM的 型 號 ， 因 為 我 做 結 晶 學 的 研 究 。 各 位 年 輕 的 同 學 可 能 不 曉 得 ， 我 們 那 個 時 候 做 傅 利 葉 轉 換 ， 常 常 拿 著 手 搖 計 算 機 搖 兩 下 ， 再 搖 三 下 ， 你 如 果 看 到 一 個 學 者 ， 他 的 手 臂 很 大 的 話 ， 他 一 定 是 做 結 晶 構 造 研 究 的 。 由 於 每 天 在 那 裡 搖 數 字 ， 計 算 傅 利 葉 轉 換 的 工 作 ， 加 上 又 喜 歡 打 網 球 ， 所 以 我 的 手 臂 很 大 。

1962年 因 為 交 大 引 進 這 個 電 腦 ， 以 為 就 不 必 搖 了 ， 那 時 候 的 電 子 計 算 機 只 有 4000個 Memory， 我 還 記 得 有 10個 digit、 2個 digit storage optimal ， 從 這 裡 移 到 那 裡 算 的 很 慢 。 交 大 的 這 部 電 子 計 算 機 一 過 來 以 後 ， 房 子 裡 面 溫 度 太 高 ， 它 不 好 好 的 運 作 ， 我 又 等 了 等 ， 還 是 不 行 ， 然 後 交 大 就 決 定 去 買 冷 氣 機 ， 他 們 買 了 冷 氣 機 之 後 放 在 房 子 裡 面 ， 溫 度 是 越 來 越 高 ， 等 了 半 天 還 是 不 能 用 ， 我 一 位 同 事 王 李 田 同 學 ， 去 看 交 大 買 了 這 個 冷 氣 機 之 後 ， 房 子 越 來 越 熱 ， 才 看 到 他 們 買 的 是 窗 形 冷 氣 機 ， 買 了 冷 氣 機 之 後 ， 就 放 在 屋 子 的 中 央 ， 前 面 是 冷 的 ， 後 面 是 熱 氣 ， 他 們 也 沒 看 過 這 個 冷 氣 機 ， 房 子 裡 面 溫 度 越 來 越 熱 ， 他 們 才 知 道 ， 這 個 冷 氣 機 應 該 要 裝 在 窗 口 。 但 是 ， 最 後 結 果 還 是 不 能 用 ， 因 為 台 灣 是 水 力 發 電 ， 日 月 潭 佔 主 要 部 分 ， 它 發 電 的 頻 率 不 穩 定 ， 計 算 機 也 跟 著 不 穩 定 ， 手 臂 也 跟 著 越 來 越 粗 了 ， 我 們 還 是 沒 有 用 到 電 子 計 算 機 。

後 來 我 到 美 國 柏 克 萊 留 學 ， 做 化 學 物 理 的 研 究 ， 那 時 候 電 子 計 算 機 對 我 們 的 影 響 不 大 ， 一 直 到 68年 我 到 芝 加 哥 大 學 做 教 授 的 時 候 ， 有 幾 位 化 學 界 的 大 師 ， 用 量 子 力 學 算 分 子 構 造 的 大 師 叫 馬 力 根 ， 後 來 有 得 諾 貝 爾 化 學 獎 ， 做 分 子 軌 道 的 。 另 外 有 一 位 叫 諾 頓 的 大 師 成 立 計 算 機 中 心 ， IBM看 到 計 算 機 就 想 到 學 術 界 一 定 會 有 用 ， 請 一 位 科 學 家 叫 卡 曼 地 ， IBM就 叫 他 告 訴 全 世 界 ， 量 子 力 學 可 以 用 電 子 計 算 機 ， 化 學 問 題 都 可 以 解 決 。 我 到 芝 加 哥 的 時 候 他 們 電 子 計 算 機 是 相 當 不 錯 的 ， 很 多 學 校 就 開 始 設 立 計 算 中 心 ， 卡 曼 利 算 給 大 家 看 這 是 有 用 的 ， 各 大 學 都 買 IBM的 電 子 計 算 機 ， 成 立 電 子 計 算 機 的 中 心 。 那 個 時 候 馬 力 根 在 算 分 子 的 構 造 時 計 算 機 還 是 相 當 簡 陋 的 ， 這 位 老 先 生 是 很 有 趣 的 ， 我 見 到 他 的 時 候 他 80歲 ， 有 一 天 我 去 找 他 ， 問 他 五 年 前 算 相 互 作 用 ， 算 得 準 嗎 ？ 他 就 說 ： 「 讓 我 想 想 看 。 」 ， 想 了 五 分 鐘 不 吭 聲 ， 十 、 十 五 分 鐘 都 過 了 ， 他 還 在 那 邊 想 ， 我 就 不 曉 得 他 的 memory有 那 麼 大 ， scan他 的 memory五 年 前 做 的 事 情 要 那 麼 久 ， 或 者 是 他 的 年 紀 大 ， 他 的 scan速 度 變 慢 了 。 結 果 在 那 等 了 20分 鐘 後 他 終 於 抬 起 頭 來 ， 他 就 說 這 個 計 算 可 能 是 不 太 好 的 。 不 過 那 個 時 候 量 子 力 學 最 難 的 就 是 開 始 在 算 一 些 分 子 間 的 作 用 ， 分 子 間 的 結 構 ， 所 以 我 在 芝 加 哥 大 學 做 的 是 分 子 和 分 子 的 碰 撞 ， 也 很 了 解 化 合 物 相 互 的 作 用 。

有 一 位 學 者 叫 做 克 李 斯 歐 ， 論 文 在 算 neon和 neon相 互 的 作 用 ， 結 論 是 互 相 排 斥 的 ， 但 奇 怪 的 是 在 遠 距 離 原 子 與 原 子 應 是 相 互 吸 引 的 才 對 ， 量 子 力 學 雖 可 掌 握 原 子 與 原 子 和 分 子 與 分 子 相 互 的 作 用 ， 但 還 是 不 能 做 得 很 精 確 。 我 作 的 實 驗 ， 我 們 如 果 看 到 一 個 宏 觀 的 現 象 你 說 大 氣 中 氧 跟 氮 ， 現 在 天 氣 比 較 冷 ， 我 們 會 想 到 現 在 分 子 運 動 得 比 較 慢 ， 碰 到 我 們 的 身 體 將 熱 帶 走 ， 會 想 到 空 氣 中 的 熱 傳 導 是 如 何 ， 其 實 都 是 分 子 間 碰 撞 ， 相 互 作 用 ， 如 果 能 知 道 彼 此 間 的 轉 換 ， 就 能 算 出 熱 導 ， 這 部 分 可 用 經 典 力 學 算 出 來 的 ， 但 相 互 作 用 就 需 用 電 子 計 算 機 才 行 ， 如 果 電 腦 很 好 的 話 ， 可 以 算 出 分 子 間 的 微 觀 的 現 象 ， 研 究 者 即 可 在 實 驗 室 中 研 究 他 的 宏 觀 現 象 。 後 來 我 們 又 繼 續 研 究 分 子 間 的 相 互 反 應 ， 如 原 子 分 子 ， 在 反 應 的 過 程 中 ， 這 些 熱 到 哪 裡 去 了 ， 是 變 為 分 子 的 震 動 ， 還 是 變 為 分 子 的 快 速 移 動 ， 我 們 對 這 些 分 子 動 態 了 解 的 不 多 ， 但 我 們 經 不 斷 的 實 驗 ， 對 分 子 的 動 態 還 是 有 了 相 當 的 了 解 ， 在 七 O年 代 的 初 期 ， 由 不 同 環 境 的 分 子 間 作 用 力 ， 來 推 出 其 他 可 能 發 生 的 情 況 。

有 一 次 參 加 美 國 化 學 學 會 研 討 會 ， 很 多 用 量 子 力 學 、 電 腦 計 算 分 子 相 互 作 用 的 學 者 ， 他 們 計 算 分 子 相 互 反 應 所 產 生 的 熱 誤 差 還 是 相 當 大 ， 但 此 計 算 隨 著 電 腦 的 進 步 越 來 越 精 準 ， 使 我 們 對 化 學 反 應 的 過 程 更 了 解 ， 但 對 於 某 些 大 分 子 的 計 算 ， 以 目 前 的 電 腦 來 計 算 ， 還 是 不 夠 的 ， 但 可 由 電 腦 的 計 算 省 略 了 許 多 實 驗 ， 電 腦 的 進 步 對 化 學 的 研 究 有 相 當 的 改 進 。 在 1974年 的 時 候 我 從 芝 加 哥 回 柏 克 萊 時 ， 找 了 以 前 幫 我 畫 圖 的 幾 個 工 程 師 ， 發 現 以 前 畫 圖 的 工 具 都 不 見 了 ， 全 部 改 由 電 腦 繪 圖 、 CAD， 即 使 不 是 有 專 業 幾 何 概 念 的 人 ， 透 過 電 腦 繪 圖 、 CAD一 樣 能 畫 出 專 業 圖 形 。 我 感 到 非 常 訝 異 ， 立 刻 叫 我 的 學 生 去 安 裝 了 CAD軟 體 ， 我 當 時 的 感 受 很 深 ， 是 因 為 我 在 哈 佛 作 研 究 時 ， 為 了 解 決 分 子 間 碰 撞 的 問 題 ， 我 設 計 了 一 個 非 常 複 雜 的 設 備 ， 所 以 我 常 常 在 機 械 工 廠 裡 ， 花 時 間 解 釋 我 的 設 備 給 裡 面 的 師 傅 聽 ， 我 將 工 程 圖 拿 給 他 看 ， 但 他 還 是 看 不 懂 ， 於 是 我 從 他 的 角 度 畫 給 他 看 ， 他 說 他 在 哈 佛 工 作 了 卅 年 ， 還 沒 看 過 將 三 度 空 間 的 圖 畫 在 紙 上 的 ， 而 且 畫 那 麼 清 楚 的 。 我 們 是 很 好 的 朋 友 ， 每 次 他 打 獵 打 到 的 第 一 隻 山 雞 一 定 送 給 我 ， 那 時 我 拿 我 的 設 計 圖 給 我 的 指 導 教 授 看 的 時 候 ， 他 總 是 說 如 果 不 是 像 你 有 五 千 年 文 化 的 人 ， 恐 怕 畫 不 出 如 此 複 雜 的 設 計 圖 ， 他 還 不 太 相 信 這 個 圖 是 能 動 的 。 等 我 到 柏 克 萊 看 到 學 生 用 CAD畫 設 計 圖 ， 我 才 發 現 當 時 能 像 我 一 樣 畫 出 三 度 空 間 設 計 圖 的 人 不 多 ， 但 現 在 能 畫 出 的 人 已 比 比 皆 是 ， 使 我 感 觸 很 深 ， 現 在 我 們 在 原 子 研 究 所 作 的 研 究 ， 很 多 是 與 電 腦 研 究 同 時 進 行 的 ， 所 以 我 們 可 以 用 電 子 計 算 機 用 量 子 化 學 算 更 複 雜 、 更 細 微 的 東 西 。

但 在 這 我 要 說 的 是 ， 這 些 變 化 對 教 育 ， 科 學 環 境 的 影 響 ， 如 今 地 球 上 有 六 十 億 人 口 ， 是 由 於 科 技 的 進 步 ， 生 產 的 提 昇 ， 將 傳 染 疾 病 消 除 ， 今 天 大 家 能 在 此 聽 我 演 講 ， 是 由 於 工 業 革 命 省 去 我 們 的 勞 動 力 ， 就 像 我 之 前 提 到 的 手 搖 計 算 機 ， 如 果 沒 有 強 壯 的 手 臂 ， 就 沒 法 使 用 。 現 在 我 們 使 用 電 腦 大 家 都 變 得 平 等 了 ， 之 前 我 們 要 用 手 繪 複 雜 的 幾 何 圖 形 ， 如 今 使 用 CAD大 家 都 能 用 ， 電 腦 慢 慢 在 超 越 我 們 的 腦 力 勞 動 。 我 覺 得 很 奇 怪 的 是 ， 現 在 學 校 考 試 ， 把 每 個 人 放 在 一 個 格 子 ， 不 准 討 論 ， 將 腦 中 記 憶 的 東 西 全 寫 出 來 ， 但 卻 是 人 類 已 經 解 決 的 問 題 ， 十 九 世 紀 老 師 站 在 黑 板 上 教 ， 學 生 在 底 下 拼 命 的 寫 ， 但 如 今 快 到 二 十 一 世 紀 ， 卻 還 是 如 此 ， 我 覺 得 是 不 對 的 ， 如 今 我 們 已 經 超 越 了 體 力 勞 動 了 ， 現 在 應 想 想 如 何 超 越 腦 力 勞 動 。

現 在 地 球 人 口 暴 增 ， 生 態 遭 破 壞 ， 黑 金 政 治 ， 我 們 已 發 現 以 前 走 的 路 已 行 不 通 了 ， 我 們 雖 知 道 這 些 狀 況 ， 但 該 如 何 改 呢 ？ 這 需 要 我 們 大 家 好 好 的 想 一 想 ， 至 於 已 經 解 決 的 問 題 ， 就 可 以 將 他 擺 在 電 腦 裡 了 ， 如 今 網 際 網 路 的 流 行 ， 將 大 家 的 知 識 集 合 起 來 ， 所 產 生 的 力 量 是 非 常 大 的 ， 才 能 為 世 界 帶 來 進 步 。 （ 資 工 系 整 理 ）