

## 李遠哲博士於 NCS開幕致詞全文

專題報導

計算機的使用是在六〇年代的初期，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，如原子的分子，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，在七0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確的計算，使我們對化學反應的過程更了解，但對於某些大分子計算，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的實驗，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裏，花時間解釋我的設備給師傅聽，我將工程圖拿給他看，但他還是不懂，於是從他的角度畫給他看，在他紙上的，而且畫那麼清楚的。我們是很好的朋友，每次他打獵打到第一隻山雞一定送給我，那時我像你設計圖給我的指導教授看的時候，他總是說如果我不是像你有五千年的文化，這個圖是能動的。等到柏克萊看到學生用CAD畫設計圖，我才發現當時能畫出的人不在我的信，但現在能畫出的人已比比皆是，使我觸及電腦研究更微的，所以在我們的作用電子計算機用量子化學算更複雜、更細

但在這我要說的是，這些變化對教育，科學環境的影響，如今地球上十億人，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了我們的勞動力，就像我之提到手搖計算

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，在我覺得是不對的，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）