



星球永續健康線上直播

量子健康科學 (10)

量子智慧分子藥物設計

2026 年 9 月 30 日

新藥研發是現代醫學最具挑戰性領域之一，從疾病標靶的確認、候選化合物的篩選，到安全性與療效驗證，往往需要投入大量時間與成本。近年人工智慧已逐步應用於藥物研發，於藥物分子與電子層級量子科學也展現應用潛力。本週我們將探討「量子電腦能設計新藥嗎？」以及「標靶藥物的量子設計潛力」進一步了解 AI、量子計算與未來藥物研發之間可能帶來的全新發展。

健康科學新知

川習峰會 AI 難有突破:「同床異夢」

OpenAI 執行長 Sam Altman 呼籲美中兩國就人工智慧安全達成協議，避免在爭奪 AI 主導權的競賽中增加失控風險。然而，美中自 2024 年就「核武應由人類掌控」形成共識後，正式 AI 對話進展有限。原先美方希望重啟 AI 專門會談並成立聯合工作小組，但由於雙方立場仍有差距，目前較可能從 AI 失控、生物安全及網路詐騙等共同風險尋找合作空間。另一方面，美中 AI 競爭與互信問題持續升高。美方指控中國 AI 實驗室透過「蒸餾」等方式取得美國模型能力與資料，Anthropic 也對中國相關 AI 活動及敏感資料使用提出安全疑慮；中國則認為，美國限制先進晶片與晶片製造設備出口，是藉 AI 安全之名維持科技優勢。雙方對 AI 發展速度的立場同樣存在差異，美國部分 AI 業者主張降低前沿 AI 開發速度，但川普政府則強調維持 AI 競爭力，中國方面也更加重視自主發展及與全球南方國家的 AI 合作。儘管全面性的美中 AI 協議短期內仍面臨許多障礙，雙方仍可能從較具體的 AI 安全議題開始合作，例如分享 AI 安全事故資訊、交流前沿模型安全評估方法，以及討論失控 AI 模型與自主代理的風險。

美中競賽下 AI 管制難產:「進退維谷」

《經濟學人》報導指出隨著 AI 能力快速提升，科技界對失控風險的警告日益升高。



AI 代理在測試中已出現突破沙盒限制、相互協作及進行網路攻擊等行為，使部分 AI 研究人員與企業領袖呼籲放慢前沿模型的發展。然而，烏克蘭戰場顯示科技優勢可能直接影響國家安全與軍事競爭，因此美國政府也擔心，一旦單方面放慢 AI 發展，可能將技術優勢讓給中國。社論認為，在缺乏有效國際查核機制的情況下，全面暫停 AI 發展並不容易實現，較可行的方向是提高透明度，包括通報 AI 安全事故、強化資安，以及分享不涉及商業競爭優勢的 AI 安全與對齊研究。與此同時，AI 安全與監管已成為美國政壇的重要議題。部分政治人物與 AI 研究人員警告，前沿模型可能帶來嚴重甚至災難性的風險，要求政府加速建立監管制度；但另一方則擔心，過度或過早的管制可能削弱美國在全球 AI 競爭中的優勢。目前美國各州已開始推動 AI 安全事故通報等規範，聯邦層級也出現多種方案，包括政府測試高風險模型、建立重大風險門檻，以及針對更高能力 AI 系統制定限制，但對於應該管到什麼程度仍缺乏共識。因此，當前 AI 治理面臨的核心矛盾，是如何同時兼顧科技安全與國際競爭力。一方面，AI 能力快速進步，使失控、網路安全及其他潛在風險受到更多關注；另一方面，美中科技競爭又使任何放慢發展的政策面臨國家安全與戰略考量。

Anthropic 上市與 AI 放緩：「戒急用忍」

Anthropic 長期面臨 AI 安全與商業發展之間的拉扯。執行長 Dario Amodei 呼籲業界放慢前沿 AI 開發之際，公司正面臨高度受矚目的資本市場前景，使 AI 風險警告與商業利益之間的矛盾更加突出。Amodei 主張增加第三方對模型的評估權限、建立前沿模型監管制度，並推動涵蓋中國的國際合作。然而，美國政府擔心放慢發展可能削弱對中國的 AI 競爭優勢，使「安全」與「競爭力」之間形成明顯衝突。更深層的問題在於，人類是否真的能夠理解並控制能力愈來愈強的 AI。部分前沿模型在安全測試中曾出現未預期的網路行為，使研究人員更加重視「可解釋性」與模型對齊問題。雖然推理模型的「思維鏈」提供了觀察模型推理過程的可能途徑，但如果模型能夠隱藏或改變呈現出的推理內容，思維鏈就未必能完整反映模型真正的運作過程。因此，研究人員也開始探索新的安全訓練方法，希望讓 AI 不只完成任務，也能更可靠地揭露自身的決策與行為



過程。然而，即使 AI 業界開始出現放慢發展的呼聲，真正建立全球性的限制仍非常困難。各家公司之間存在商業競爭，美中之間也缺乏足夠互信，而 AI 訓練又可能逐漸從大型資料中心走向更分散的運算模式，使監督與查核更加困難。

AI 生物武器報告引爭議：「眾說紛紜」

Anthropics 近期公布該公司智能體不當使用調查結果與毒素等五起案例。這也是尖端 AI 公司首次公開承認，自家模型可能被應用於具有生物恐怖主義或生物戰疑慮的研究。部分案例涉及提升病毒傳播、哺乳類適應或免疫逃脫能力，也有研究利用 AI 分析或重新設計毒素，使原本屬於假設性的「AI 生物安全風險」，開始出現真實世界的案例。然而，科學界對這些案例究竟有多危險存在明顯分歧。部分公共衛生專家認為這是一項重要警訊，但病毒學家與生物安全專家指出，其中許多研究也可能屬於正常的基礎生物醫學研究，例如研究病毒突變、致病機制，以及開發疫苗或新藥。真正值得關注的問題，可能不是專業研究人員使用 AI 本身，而是缺乏專業背景、甚至具有惡意的人，是否能透過 AI 快速取得原本需要高度專業訓練才能掌握的生物學知識與研究能力。因此，爭議的核心逐漸轉向「如何監管」。部分專家主張限制特定使用者利用 AI 進行高風險生物研究，但也有人擔心過度限制可能阻礙合法的病毒學、疫苗與藥物研究，甚至讓 AI 公司掌握過大的科學研究發展權。

AI 預測擊敗人類高手：「後來居上」

AI 在預測未來的能力上出現重要突破，9 月 5 日，AI 首度奪下季度 Metaculus 盃冠軍，第 2 名與第 5 名同樣由 AI 取得，人類則位居第 3 與第 4 名。比賽要求參賽者預測資料中心政策、疾病疫情、原油價格等不同領域的事件。更值得注意的是，AI 預測能力已開始進入真實市場，例如 FutureSearch 利用 AI 尋找預測市場中的定價錯誤並進行交易。研究也顯示，AI 在持續更新的預測問題上，表現已逐漸接近人類的「超級預測員」。這些 AI 與傳統針對特定領域建立的預測模型不同，而是以大型語言模型（LLM）為基礎，可以閱讀新聞、分析數據並整合大量不同來源的資訊。表現較好的系統還會結合多個模型，讓不同 AI 分別蒐集資料、分析問題，再透過相互辯論形成預測；有些系統則



會評估不同新聞評論者過去預測的準確度，決定哪些資訊值得採信。AI 還能透過重建過去的資訊環境，反覆測試不同資料與指令如何影響預測結果，從錯誤中持續改善。這些能力使 AI 能以遠低於人類專家的時間與成本，大規模進行預測。不過，AI 是否已真正超越最頂尖的人類預測者仍有待觀察。目前比賽主要集中在數月內可以驗證的短期事件，對多年期的長期預測能力仍缺乏充分證據，而且人類預測者本身也愈來愈常利用 AI 進行研究。未來更可能形成人類與 AI 協作預測模式，人類提供現實世界的資訊、經驗與判斷，AI 則負責快速整合遠超過人類處理能力的大量資料。隨著 AI 持續進步，它或許不只能提高預測準確度，更可能幫助人類理解：未來究竟有多少是可以預測的，又有多少本質上就是不可知的。

AI 提前颱風預警：「未雨綢繆」

《自然》期刊介紹 WeatherNext Cyclones (WN-C) AI 氣旋預測工具能進行最長約兩週熱帶氣旋預報的 AI 模型。傳統氣象模式對氣旋路徑已有不錯的預測能力，但氣旋強度受到風、濕度、雲等較小尺度現象影響，要以全球高解析度模式即時模擬，需要極高的運算成本。WN-C 則結合近 5,000 筆歷史氣旋紀錄與傳統模式重建的全球大氣資料，讓 AI 同時學習全球大氣狀態與熱帶氣旋發展，並產生多種可能情境，而非只有單一預測結果。研究顯示，WN-C 的 15 天預報在氣旋路徑、強度與風場範圍等方面，可與既有高解析度氣旋模式競爭，平均還能增加至少一天的預警時間，而且具有全球預報能力。值得注意的是，過去認為精準預測氣旋強度需要掌握約 100 公尺至 1 公里尺度的大氣結構，但 WN-C 使用的輸入資料解析度約為 25 至 30 公里，仍能取得良好結果，顯示 AI 可能從大量歷史資料中學習到傳統模式不易掌握的預測訊號。不過，這也帶來新的科學問題：AI 究竟學到了真正具有物理意義的關係，還是依賴資料中的統計相關性，仍需要進一步驗證。AI 氣旋預報要真正轉化為災害預警與疏散決策仍面臨不少挑戰。由於模型主要從歷史資料學習，在全球暖化使極端氣旋變得更強的情況下，AI 可能低估超出既有資料範圍的極端事件；衛星與地面觀測資料不足，也可能造成區域性偏差。因此，AI 並不能取代傳統氣象觀測與物理模式，而應與兩者相互整合。未來若能透過國際合



作，開放模型、資料與建模知識，並讓更多國家具備自行運行 AI 氣象模型的能力，這項技術才更有機會轉化為更早的預警，進一步降低極端氣旋造成的人命與經濟損失。

數學家抗議 OpenAI: 「一步登天」

AI 在數學領域的快速進展引起數學界廣泛憂慮。25 位費爾茲獎得主聯名警告 AI 公司將解決數學難題視為衡量模型能力的競賽，可能忽略數學研究真正的價值。爭議在 OpenAI 宣稱解決「千禧年難題」之一的納維－斯托克斯問題後進一步升高。數學家並非反對使用 AI，包括陶哲軒在內的研究者也肯定 AI 能協助進行實驗、探索更大膽的想法。數學界質疑 AI 改變數學知識被發現與分享的方式。「得到答案」並不是研究的全部，尋找答案的過程同樣重要。證明過程中的失敗、推導與新發現，往往會產生新的問題，甚至開啟新的研究領域。如果 AI 直接提供最終答案，卻沒有充分揭露人類可以理解與驗證的推導過程，這些研究價值可能隨之流失。數學家 Hugo Duminil-Copin 以登山比喻，直接把一個人空投到聖母峰頂，與親自完成攀登，所獲得的經驗完全不同。另一方面，研究者也擔心 AI 競爭可能使數學家降低研究公開程度，以免尚未完成的成果被 AI 或科技公司搶先完成。更長遠的問題則是「認知卸載」。當人類習慣將記憶、搜尋甚至推理工作交給科技工具，部分心智能力可能逐漸弱化；已有研究發現，頻繁依賴搜尋引擎或 AI 工具與某些認知及批判思考表現之間存在關聯。

量子電腦能設計新藥嗎？

《藥命效應》中，主角艾迪原本是一名陷入創作瓶頸的作家，事業與生活皆陷入低潮，甚至連女友也選擇離開。就在他人生最低潮時，艾迪遇見前妻的弟弟維儂，並從他手中取得一種名為「NZT-48」的實驗性藥物。維儂表示，這種藥物能夠大幅提升人的認知、記憶與思考能力，並強化大腦的運作效率。艾迪服用後，原本停滯已久的思緒突然變得異常清晰，不僅迅速完成長期無法完成的小說，也展現出驚人的學習與分析能力。隨著持續服用 NZT-48，艾迪的能力很快從寫作延伸至不同領域。他能快速吸收新知、整合資訊並進行推理，在數學、金融、語言及其他專業領域都展現出高度能力。憑藉大幅提升的分析與判斷能力，他開始投入股票市場並快速累積財富，也因此受到金融大亨



卡爾·范隆的注意，被邀請參與大型投資與企業併購活動。此時的艾迪幾乎成為一名全方位的高能力人才，人生也從原本的低谷迅速走向成功。然而，NZT-48 效果同時伴隨嚴重風險。艾迪逐漸出現記憶斷片、身體不適與認知異常等副作用，一旦停止服藥，更可能產生明顯的戒斷反應。他的前妻也告訴他，自己過去曾使用過 NZT-48，但停藥後留下嚴重後遺症，認知與身體狀況都受到影響。艾迪因此意識到，自己目前所獲得的成功幾乎都建立在藥物作用之上，而身體也已逐漸對藥物產生依賴，使他陷入難以停止使用的困境。為了突破這個問題，艾迪開始運用 NZT-48 所賦予的高度認知與分析能力，進一步研究藥物本身，希望重新調整其作用方式與相關特性，在維持原有認知增強效果的同時，降低毒性與副作用。他一方面進行藥物設計與改良，另一方面尋找專業公司協助進行藥物合成，最終成功改善藥物，使自己在維持敏銳觀察力、記憶力與高度認知能力的同時，也降低原有的不良反應。到了電影後期，艾迪甚至進一步踏入政壇，準備競選公職人生進入另一個階段。

從藥物開發的角度來看，電影中的艾迪可以被類比為一套高度智慧化的藥物設計系統：先分析既有藥物的療效與問題，再透過重新設計與優化，尋找兼顧效果與安全性的改良方案。這樣的情節雖然具有科幻色彩，但也可以用來引出現今人工智慧在藥物開發上的應用，例如分析藥物結構、預測藥物與標的之間的作用、進行分子設計與優化，以及協助降低毒性與副作用等。因此，《藥命效應》的故事可以作為理解 AI 輔助藥物設計概念的一個具體而容易理解的例子。在整個藥物研發的過程中，可以看到其中存在許多困難。過去曾經談過，無論是病毒、細菌或其他病原體，都會持續發生變化。以病毒為例，其基因體序列（genome sequence）可能不斷產生變異。當病原體發生改變並侵入人體之後，便需要重新尋找適合的治療標靶，進一步評估是否可以利用既有藥物進行改良，或者需要開發全新的藥物。在藥物研發的早期階段，其中最困難的工作之一，就是確認與疾病相關的標靶。藥物進入人體之後，必須與特定的蛋白質、受體或其他生物分子產生適當的交互作用。因此，如何了解標靶蛋白的結構，以及藥物分子如何與標靶進行結合，是非常複雜的問題。光是標靶的發現與確認，就可能需要大約 4 至 5 年的時間。確



認標靶之後，下一個階段才是從大量的化合物當中，尋找具有潛力的先導化合物 (lead compounds)，這個階段可能又需要 1 至 2 年的時間。過去所介紹的人工智慧，其實已經能夠在這個階段提供相當大的協助，例如協助篩選可能的候選化合物、預測分子特性，以及縮小需要進一步實驗的範圍。找到可能的化合物之後必須進一步了解其活性以及與標靶結合時的能量變化，確認藥物與人體相關蛋白質或受體之間的交互作用。接著才會進入臨床前研究，透過細胞與動物實驗評估藥效、安全性與毒理特性，再進一步進入人體臨床試驗，確認藥物的安全性與療效，最後才進入審查與核准階段。因此，從臨床前研究、臨床試驗一直到最後的審查需要大約 6 年的時間，再加上前端的標靶發現、先導化合物篩選與藥物最佳化，整體藥物研發往往需要超過 10 年的時間。

人工智慧對藥物研發帶來相當大幫助。然而，對於標靶確認、先導化合物發現以及後續的分子最佳化而言，仍然存在非常大的挑戰。其中一個重要原因，就是可能的化學空間極其龐大。理論上具有藥物潛力的分子可能達到約 10^{60} 種甚至更高的數量級。要從如此龐大的化學空間中找出真正具有療效潛力的候選化合物，本身就是極為困難的問題。更重要的是，每一個分子內部都包含大量電子，而電子之間存在複雜的吸引、排斥以及各種交互作用。當藥物分子與蛋白質標靶接近並產生結合時，電子的分布與能量狀態也會隨之改變。因此，要真正理解一個藥物分子為什麼能夠與特定標靶結合、結合是否穩定，以及如何進一步最佳化其分子結構，就必須處理非常複雜的電子結構與能量計算。這也是傳統人工智慧與傳統計算方法仍然面臨限制的地方。即使 AI 可以快速分析大量既有資料、預測可能的分子結構與性質，但若要進一步精確描述分子內部電子之間的交互作用與量子狀態，計算複雜度仍然非常高。因此，傳統藥物研發不僅時程漫長，往往需要超過 10 年，也必須投入龐大的研發成本，而且候選藥物的淘汰率相當高。尤其是在藥物研發的前端，從標靶確認、先導化合物發現，到進一步進行化合物最佳化，都必須從龐大的化學空間中尋找適合的分子，同時還要了解這些分子的能量狀態以及與標靶之間的交互作用。當談到「能量」、電子之間的「吸引」與「排斥」，就會發現這些問題本質上與量子力學密切相關。因為在微觀尺度下，分子的結構、電子的分布以及能量狀



態，本來就是由量子力學所描述。這也正是量子科學特別適合應用於藥物設計的原因。

量子電腦引入藥物研發協助研究者處理如此龐大的分子與化學空間。蛋白質或藥物分子深入到微觀尺度之後涉及電子以及電子之間的交互作用。透過量子科學與量子計算，可以更進一步模擬分子的量子狀態，研究電子結構以及不同分子構型所對應的能量變化，進而協助了解藥物分子與標靶之間的交互作用。將量子計算有效導入藥物研發有機會協助研究者從龐大的化學空間中，快速地篩選出真正值得進一步實驗的候選藥物，縮小後續實驗所需要探索的範圍。量子計算協助解決如何更快速地確認適合的藥物標靶，並從大量可能的化合物中找到具有潛力的候選分子，縮短藥物發現與開發所需要的時間。

從大約 10^{60} 種可能的分子當中，找到一個真正具有藥物潛力的候選分子，就如同大海撈針一般困難。也正因如此，面對不斷變化的病原體及其基因體序列，藥物設計必須能夠針對新的標靶與分子結構，快速尋找可能具有療效的候選化合物。在這個過程中，量子科學便開始扮演重要的角色。因為藥物分子的設計涉及電子分布、化學鍵形成，以及分子能量的變化，而這些現象從根本上來看，都是量子力學所描述的問題。換言之，當研究進一步深入到藥物與標靶之間最微觀的交互作用時，真正需要處理的其實就是電子如何分布、電子彼此之間如何交互作用、化學鍵如何形成，以及不同分子結構所對應的能量狀態。

過去在醫學影像的應用中，主要是將傳統 AI 所使用的資料轉換成量子狀態，再交由量子電腦進行運算。這是量子運算在醫學領域中的一項重要發展，先前也已經討論過許多相關內容，說明人工智慧與量子科學如何相互結合、相輔相成。藥物設計所涉及的，不只是將傳統資料轉換成量子狀態進行分析，而是進一步深入到藥物本身的微觀尺度，探討分子結構以及電子之間的交互作用。電子正是量子科學所關注的重要微觀粒子之一。當研究尺度進一步深入到分子與電子層級時，包括電子的分布、電子之間的交互作用、化學鍵的形成，以及分子的能量狀態等，都必須透過量子力學的觀點來理解。因此，與過去利用量子電腦處理醫學影像或傳統 AI 資料不同，量子藥物設計所面對的，是一個本質上就存在於量子尺度的問題。



量子科學如何描述電子與電子之間的交互作用？在傳統化學中所談到的化學鍵，例如共價鍵、離子鍵等，從更微觀的角度來看，都與電子之間的吸引、排斥以及相互作用有關，而這些交互作用進一步決定了整個分子系統的能量。因此，量子科學與量子化學便成為現今藥物設計非常重要的理論基礎。所以，與其單純稱為「量子運算在藥物設計上的應用」，其實更重要的是理解「量子化學」所扮演的角色。量子化學是將量子力學應用於化學系統，研究電子的狀態、電子之間的交互作用、化學鍵的形成，以及這些作用所產生的能量變化。建立這樣的觀念之後，就比較容易理解本次所要討論的內容，也就是進一步走入微觀世界。過去在醫學研究中，可能著重於器官、病人所產生的資料，例如血糖、血壓，以及各種可以觀察到的生理或行為表現。但是，當研究進一步深入到分子尺度時，就不能只停留在這些巨觀資料，而必須進一步了解分子的結構，包括原子之間如何形成化學鍵、電子如何分布，以及電子之間如何產生交互作用。

在量子化學中，Hamiltonian(哈密頓算符)可以理解為描述分子系統能量關係的「規則書」，涵蓋電子的運動、電子彼此之間，以及電子與原子核之間的交互作用。研究分子時，一個核心問題就是利用 Hamiltonian 找出系統最穩定的量子狀態，也就是基態 (ground state)，以及其所對應的最低能量——基態能量 (ground-state energy)。在進行量子計算時，初始狀態的選擇也相當重要。如果初始量子狀態與真正的分子基態較接近、具有較高的重疊程度，通常更有利於後續的能量估計或最佳化。這就像在複雜的「能量地形」中尋找最低點，如果起點已經接近最低處，就更有機會有效率地找到目標。因此，可以把整個分子想像成一個「電子的舞台」，Hamiltonian 則是決定舞台運作方式的能量規則，描述電子如何運動及彼此交互作用，最終決定分子的量子狀態與能量。透過電子結構與基態能量的計算，量子化學得以進一步分析分子的穩定性、電子分布與分子間交互作用，並成為從量子能量計算延伸至分子模擬與藥物設計的重要基礎。Hamiltonian 也就是哈密頓算符所要描述的問題。當研究一個真實的分子系統時，必須考慮原子核與電子之間，以及電子與電子之間各種不同的交互作用。如果回到最基礎的化學概念，帶負電的電子與帶正電的原子核之間存在吸引作用，而電子與電子之間則存在排斥作用。這



些交互作用會影響電子如何分布，以及化學鍵如何形成。因此，Hamiltonian 所描述的，就是整個系統中電子的動能，以及電子與原子核、電子與電子、原子核與原子核之間的交互作用能。透過這些物理規則，可以進一步描述整個分子系統的能量，以及電子在其中可能呈現的狀態。但是，要真正找到分子的穩定狀態，還有一個非常重要的問題：一開始所選擇的起始狀態，究竟距離真正的答案有多遠？

舉例說明如下，假設今天的目的地是台北 101，如果起點位於台北車站，距離目的地相對較近；但如果起點位於桃園，要抵達台北 101 所需要的時間與成本自然會增加。同樣的概念也可以用來理解量子計算。當研究電子之間的吸引、排斥與其他交互作用之後，還需要進一步了解：在什麼樣的狀態下，整個分子系統的能量最低？如果希望有效率地找到這個答案，就必須選擇一個適當的初始狀態。當初始狀態越接近真正的基態，後續進行能量估計與最佳化時，就越有機會以較高的效率找到所需要的答案。這也是量子科學與量子計算在這裡可以發揮的重要功能。在一個分子系統中，可以存在許多不同的能量狀態，其中最低的能量狀態就是前面所提到的「基態 (ground state)」，其所對應的能量就是「基態能量 (ground-state energy)」。因此，一個重要的問題就是：如何更有效率地找到分子的基態及其基態能量？如果能夠快速而準確地掌握一個分子的低能量狀態，就能夠進一步了解這個分子中原子與電子如何排列、電子如何分布，以及不同原子之間如何形成穩定的化學鍵。換言之，就比較不容易在龐大而複雜的可能狀態中迷失方向，而能夠朝向較穩定、較低能量的分子狀態進行搜尋。這個概念應用到藥物設計時就非常重要。因為藥物分子最後必須與人體中的蛋白質、受體或其他生物分子產生交互作用。當藥物逐漸接近標靶時，雙方的電子分布、分子構型以及整體能量都可能發生改變。因此，如果能夠更準確地掌握分子的電子結構與能量狀態，就能進一步協助研究藥物與標靶之間可能形成的交互作用，並評估哪些分子結構可能形成較穩定的結合。這也就是為什麼「尋找基態能量」會成為量子化學與量子藥物設計中非常重要的基礎。

量子相位估計 (Quantum Phase Estimation, QPE) 是量子計算中用來估計能量的重要方法之一。對分子系統而言，Hamiltonian 描述了其電子結構與能量關係，而 QPE 可



以利用量子系統隨時間的演化，將能量資訊編碼到量子態的相位中，再透過相位估計取得與 Hamiltonian 能量本徵值相關的資訊。因此，QPE 提供了一種從量子態出發，進一步估計分子能量的方法。若將這個概念延伸到藥物研發，關鍵問題便是如何從極其龐大的化學空間 (chemical space) 中找出少數真正具有潛力的候選藥物。這個過程可用 Drug Discovery Funnel 來理解：研究者先從大量可能的分子結構開始，逐步篩選其化學性質、電子結構與能量狀態，再進一步評估候選分子與藥物標靶之間的交互作用。經過多層次的篩選與最佳化後，候選分子的數量不斷縮小，最後留下少數值得進一步進行實驗驗證與開發的候選藥物。量子化學在藥物發現中的重要價值在於提供更深入的電子結構、能量與分子交互作用資訊，協助研究者更精確地判斷不同候選分子的特性。以《藥命效應》的情節作為比喻，就如同艾迪希望在維持藥效的同時降低副作用；現實中的藥物設計同樣需要透過持續的計算、篩選與最佳化，從龐大的化學空間中逐步找到療效與安全性更符合需求的候選分子。如果在這個基礎上，再結合大型語言模型與生成式 AI，就可以進一步加速小分子藥物的生成與篩選。例如，可以利用分子生成模型或分子片段生成模型探索新的分子結構，從龐大的化學空間中提出可能的候選分子。生成模型也可以結合既有的實驗資料與化學知識，分析不同的分子排列、圖形結構、化學性質、官能基組合以及可能發生的化學反應，進一步生成新的候選分子。

生成式 AI 可以協助回答「還有哪些新的分子值得探索？」而量子計算與量子化學則可以進一步協助回答「這些分子的電子結構與能量如何？與標靶之間可能形成什麼樣的交互作用？」透過兩者的結合，就可以逐步縮小候選範圍，進一步篩選出較具有潛力的分子。當候選藥物進一步進入後續階段時，還需要評估藥物動力學、藥物的安全性，以及藥物與細胞受體或其他標靶蛋白之間的結合情形。例如，過去在 COVID-19 疫情期間所熟悉的 SARS-CoV-2，就是透過病毒表面的棘蛋白與人體細胞上的 ACE2 受體產生交互作用。藥物設計同樣需要了解分子與標靶之間如何接近、如何結合，以及這種結合是否具有足夠的穩定性與選擇性。因此，從前端的候選分子生成，到分子的電子結構與能量估計，再到後續藥物與標靶之間的交互作用評估，量子輔助方法都有機會在整個藥



物發現流程中扮演重要的角色。

量子科學在藥物設計中具有高度發展潛力重要原因為量子計算有機會在特定問題上展現量子優勢。當分子中的電子數量增加時，電子彼此之間的交互作用與量子關聯會迅速變得複雜，甚至涉及量子糾纏等多體量子效應，使傳統計算在處理大型量子系統時面臨相當大的挑戰。從 Hamiltonian 的角度來看，它負責描述分子中電子與原子核之間的交互作用及整體能量，而量子化學的重要任務，就是進一步求得這些複雜電子狀態及其對應的能量。由於量子電腦本身依循量子力學原理進行運算，因此未來有機會更直接地處理某些複雜的電子結構問題，這也是量子計算受到藥物研發領域關注的重要原因之一。若將量子計算放入完整的藥物研發流程中，未來更可能採用多種技術相互整合的方式。首先可以利用生成式 AI 從龐大的化學空間中提出大量候選分子，再透過蛋白質結構預測工具取得標靶蛋白的三維結構資訊。然而，真實的蛋白質與藥物分子並非固定不動，因此還需要進一步利用分子動力學（Molecular Dynamics, MD）模擬分子在不同時間與環境下的構型變化與動態交互作用。當研究問題進一步深入到電子結構、量子狀態與能量層級時，則可以導入量子處理器（Quantum Processing Unit, QPU）與量子化學方法，研究更細緻的電子層級交互作用。未來的藥物設計可能形成一套混合式藥物研發生態系統（Hybrid Drug Discovery Ecosystem）。AI 負責生成與篩選候選分子，蛋白質結構預測與分子動力學負責描述三維結構及動態行為，量子計算則進一步處理較複雜的電子結構與能量問題，最後仍需透過實驗室進行藥物合成與實驗驗證。若實驗結果與原先預測不同，實驗資料便可重新回饋到 AI 模型、分子動力學與量子計算流程中，持續修正並產生下一輪候選分子，形成不斷迭代與最佳化的研發循環。

這樣的概念也與 Digital Twin，也就是數位孿生的發展方向相互呼應。研究者希望在數位環境中建立越來越接近真實分子系統的模型，先透過計算進行預測、模擬與篩選，再利用實驗驗證結果，並將實驗資料持續回饋至數位模型之中。因此，AI、分子結構預測、分子動力學、量子計算與實驗驗證，未來可能形成彼此互補的完整藥物設計流程。

標靶藥物量子智慧設計應用潛力



過往肺癌常常面臨較晚期診斷，病人的存活率相對較低。另一方面，過去可以使用的有效治療藥物也相對有限，主要治療方式包括手術、化學治療與放射治療。如果病人已經無法接受手術，而化學治療或放射治療的效果又有限，往往就很難獲得理想的治療結果。這樣的情況在近年已經有很大的改變。許多標靶藥物陸續開發，這樣的進展主要得益於基因科學與生物資訊科學的進步。大規模基因體資料、生物資料庫以及癌症分子資料的累積，研究者可以進一步辨識不同癌症亞型的分子特徵，了解不同病人的腫瘤究竟是由哪些基因變異所驅動，以及背後可能的致病機轉。在大量資料的分析與分類過程中，人工智慧也能夠提供相當大的協助。第二個則是製藥科學的進步。當研究者辨識出某一類癌症的關鍵致病機轉之後，就可以進一步尋找適合的治療標靶，針對造成癌細胞生長與增殖的特定分子異常設計藥物。標靶治療可以透過不同的方式進行。例如，如果癌細胞具有特定的分子標誌，就可以設計能夠辨識這些標誌的治療方式，將治療作用更集中於腫瘤細胞。另一方面，如果癌細胞的生長是由特定致癌訊號持續活化所驅動，就可以利用小分子標靶藥物或單株抗體等方式，阻斷相關訊號傳遞路徑。換言之，如果把致癌訊號想像成一個持續被「打開」的開關，標靶治療的目的之一，就是設法抑制這個異常開啟的訊號，使癌細胞的生長與增殖受到抑制。當癌細胞的增殖速度下降，腫瘤就有可能縮小或延緩惡化，也可以進一步與其他治療方式搭配，提高整體治療效果。

在肺癌當中，目前已經發現許多具有臨床治療意義的分子標靶。例如 EGFR 是亞洲非小細胞肺癌病人中特別重要的驅動基因之一；此外還包括 ALK、ROS1、MET、RET、BRAF 以及 HER2 等不同的分子異常。針對這些不同的致癌驅動因子，目前已經陸續發展出相對應的標靶治療策略。這也代表現代肺癌治療已經逐漸從過去主要依照腫瘤所在的位置與病理型態進行治療，進一步走向分子分型與精準治療。即使同樣被診斷為肺癌，不同病人的腫瘤可能具有完全不同的基因變異，因此適合的治療方式也可能不同。更重要的是，這些致癌基因的變異並不一定只存在於單一癌症。例如，BRAF 變異除了可以出現在肺癌，也可以出現在大腸癌、黑色素瘤等其他癌症；HER2 相關異常除了肺癌之外，在乳癌、胃癌等癌症中也具有重要的臨床意義。因此，當研究者掌握一個重要的致



癌標靶，並成功發展出相對應的藥物之後，這項治療策略有時並不侷限於單一癌症，而可能進一步應用到其他具有相同或相關分子異常的腫瘤。這也反映出現代精準醫療的一個重要方向：治療癌症時，不只是要了解「癌症長在哪一個器官」，還要進一步了解「究竟是哪一個分子異常驅動癌細胞生長」。掌握這些分子特徵之後，才有機會找到更精準、更適合病人的治療方式，進一步改善治療效果並延長病人的存活。

RAS 家族是癌症中非常重要的致癌驅動因子，包括 KRAS、NRAS 與 HRAS，其中 KRAS 突變尤其常見。RAS 本身像是一個分子開關，負責調控細胞生長與增殖訊號；當致癌突變使 RAS 長時間維持在活化狀態時，就可能促進腫瘤形成與進展。因此，若能有效抑制異常活化的 RAS，理論上具有重要的治療價值。然而，RAS 蛋白表面相對平坦，可供小分子藥物穩定結合的口袋有限，而且部分結合區域具有高度動態性，會隨蛋白質構型改變而出現或消失，因此 RAS 長期被視為相當難以成藥的標靶。

KRAS G12C 抑制劑的發展帶來重要突破。研究者找到可利用的結合區域，並設計出能夠作用於特定位點、將 KRAS 維持在非活化狀態的藥物，證明直接標靶 RAS 並非不可能。近年的研發又逐步延伸到 G12D、G12V 及其他 RAS 突變，希望突破只針對單一突變型的限制。新一代藥物策略也不再只是尋找既有的深層結合口袋，而是嘗試利用分子膠等設計概念，建立新的分子交互作用界面，讓藥物、RAS 與其他細胞內分子形成較穩定的複合體。這類設計除了要求藥物能夠有效結合，也必須同時考慮結合穩定性、選擇性與脫靶效應，以降低對正常蛋白質的不必要作用與相關毒性。

AI 與生成模型可以先利用既有的分子結構、蛋白質結構及實驗資料，從龐大的化學空間中產生並篩選具有潛力的候選分子；蛋白質結構則可結合實驗解析資料與 AlphaFold 等工具提供的資訊。之後再利用分子動力學模擬候選藥物與 RAS 蛋白在不同時間與環境中的動態構型及交互作用。當問題進一步深入到電子結構、化學鍵與能量層級時，量子化學與量子計算則有機會提供更細緻的分析，例如評估不同候選分子與標靶之間的能量、電子結構與結合穩定性。RAS 藥物設計的另一項挑戰是腫瘤的高度異質性。KRAS G12C、G12D、G12V 等突變代表不同位置或不同形式的胺基酸置換，而這



些變化可能改變蛋白質的局部結構、動態行為與藥物結合特性。因此，一個對 G12C 有效的藥物，並不代表對其他 KRAS 或 RAS 突變具有相同效果。對於較少見的突變型，往往缺乏大量實驗與臨床資料，傳統 AI 模型可能受到訓練資料不足的限制。相較之下，量子化學主要從物理與化學基本原理出發，因此未來若能與 AI 整合，可能有助於在小樣本、高異質性的情境下，針對不同突變型進一步分析其分子結構與藥物交互作用。

量子科技在藥物研發中的角色與 AI、分子動力學、生物學及化學知識形成互補。前端可由 AI 探索龐大的化學空間並產生候選分子；中間階段透過分子動力學分析藥物與標靶的動態交互作用；在需要處理電子結構、能量與化學鍵等問題時，再導入量子化學、量子演算法及量子處理器，協助進行先導化合物排序與最佳化。這些計算結果仍必須結合生物學與藥理學知識，才能判斷哪些候選分子真正具有進一步開發的價值。

任何候選藥物仍必須回到真實世界進行實驗驗證，包括藥物合成、細胞與動物研究，以及後續第一期、第二期與第三期臨床試驗，以確認安全性與療效。因此，未來的量子藥物研發更可能是一個混合式、跨領域的流程：AI 負責探索與生成，分子動力學負責模擬動態行為，量子計算處理特定的電子結構與能量問題，而實驗與臨床研究則負責最終驗證。以 RAS 這類長期難以標靶的蛋白質為例，這種整合式方法有機會提供新的分子設計與藥物開發方向。

以上內容將在 2026 年 9 月 30 日(三) 10:00 am 以線上直播方式與媒體朋友、全球民眾及專業人士共享。歡迎各位舊雨新知透過[星球永續健康網站專頁](#)觀賞直播！

- 星球永續健康網站網頁連結: <https://www.realscience.top/7>
- Youtube 影片連結: <https://reurl.cc/o7br93>
- 漢聲廣播電台連結: <https://reurl.cc/nojdev>
- 不只是科技: <https://reurl.cc/A6EXxZ>



講者：

陳秀熙教授/英國劍橋大學博士、許辰陽醫師、陳立昇教授、嚴明芳教授、林庭瑀博士



聯絡人：

林庭瑀博士 電話: (02)33668033 E-mail: happy82526@gmail.com

劉秋燕 電話: (02)33668033 E-mail: r11847030@ntu.edu.tw