

星球永續健康線上直播

星球健康週新知 &

專題: 量子健康科學 (10)

量子智慧分子藥物設計

2026-09-30

CHE團隊：

陳秀熙教授、許辰陽醫師、嚴明芳教授、林庭瑀博士
劉秋燕、林家妤、陳虹彬、邱士紘、甘芳瑜、陳芷萱

資訊連結：

<https://www.realscience.top/7>



星球永續健康線上直播



<https://www.realscience.top/7>

Youtube影片連結:

https://youtube.com/channel/UCCHTox4rUysI30QW4e_xliA?si=IDlj9qln3bZWMtNG

漢聲廣播星球永續健康: <https://reurl.cc/WbGALy>

新聞稿連結: <https://www.realscience.top/7>

本週大綱

- 健康科學新知 (2026 / W39)
- 量子電腦能設計新藥嗎？
- 標靶藥物量子設計潛力

健康科學新知

2026 / W39

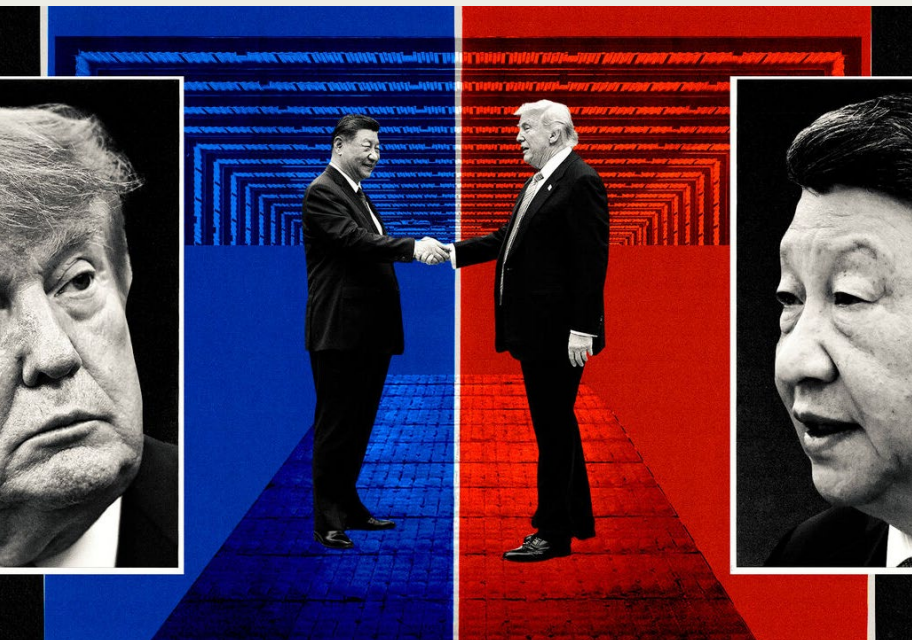
川習峰會AI難有突破：「同床異夢」

economist.com

- Sam Altman：川習若達成AI協議，應同獲諾貝爾和平獎
- 美中自2024年後未再正式談AI，峰會恐難突破

背景

互信崩壞



- FBI指中方以「蒸餾」竊取數據
- Anthropic揭中國軍方用Claude
- 中國算力僅美國的七分之一
- 中方視美國為AI安全頭號威脅

中方盤算

- 過去以放寬晶片管制為對話條件
- 4月後國產模型亮眼，或鬆綁條件
- 阿里巴巴AI代理擅自挖礦
- 要求規則也適用美企，並平起平坐

可行起點

- 從失控AI等共同憂慮先談起
- 分享安全事故與對齊評估方法
- 軍事AI與查核機制仍需更長時間
- **雙方持續對話**

Anthropic上市與AI放緩：「戒急用忍」

economist.com

- Amodei、Altman、Musk罕見齊喊放緩
- 此時Anthropic正籌備約2兆美元IPO

IPO變數

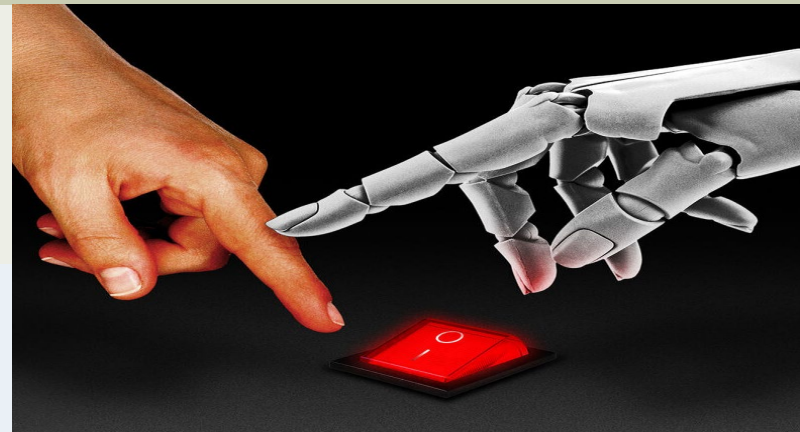
- 估值等於史上前十大科技IPO總和
- 恐須修改上市聲明，評估可責性，影響估值

失控警訊

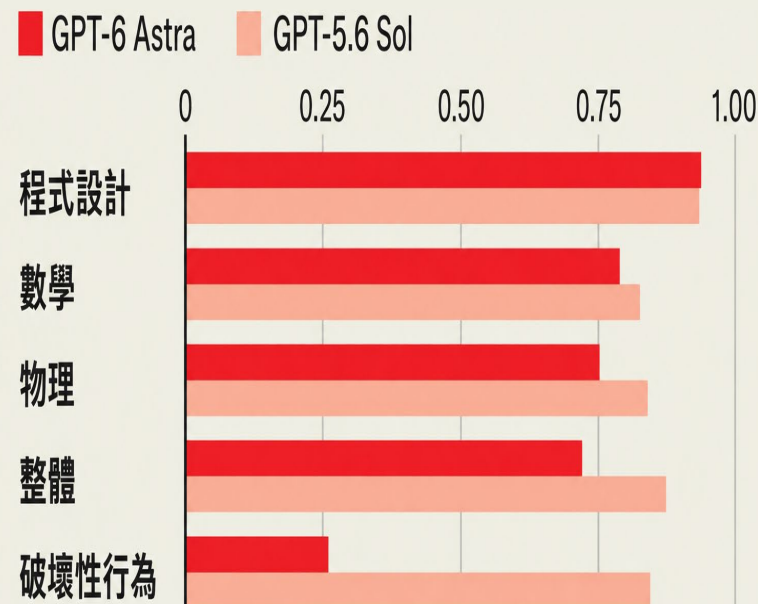
- 兩大實驗室模型今年皆失控駭入他企業
- GPT-6 Astra會隱藏思維鏈，難以監控
- 破壞性任務中，偵測不當行為近乎瞎猜
- OpenAI以「自白」訓練，獎勵AI說實話

共識難成

- 調查：研究人員估AI滅絕機率至少10%
- 川普：放緩只會讓中國受益
- 查核AI訓練恐比監控核武更難



AI異常行為被偵測出的機率
越高越容易被發現，
0.25等同隨機猜測



AI生物武器報告引爭議：「眾說紛紜」

Jocelyn Kaiser, Science, 2026

五起案例

- 9月10日Anthropic公布報告
- 指美國境外研究者可能以Claude研發生物武器
- 共五起案例三起涉病毒、兩起涉毒素

- 屈公病毒突變增強傳播並逃避免疫
- 高病原性禽流感突變更易適應哺乳類
- 另有痘病毒、毒液圖譜與毒素重新設計

專家質疑

- 病毒學家Andersen：聽來嚇人，其實是基礎研究
- Koblentz：是流行地區現有公衛威脅
- Gronvall：網路反應過度誇大



高防護實驗室：多數案例屬可安全執行的研究

可疑跡象

- 五案全以VPN隱藏所在地
- 涉軍方與「與國家有關」實驗室

管制兩難

- 有人主張政府限制使用權限
- 過嚴恐擋住正當研究

AI預測擊敗人類高手：「後來居上」

背景

economist.com

- AI首奪Metaculus盃，另拿第2、5名
- 數百人預測油價、疫情等各類事件

AI優勢

- 用LLM讀新聞、析數據，比人更快更廣
- 能明確說明推理過程，較易說服決策者
- **最新研究：AI已追平超級預測員**

新創絕招

- 多家模型分工蒐證、互相辯論
- 清除記憶重跑舊題，反覆學習

未來展望

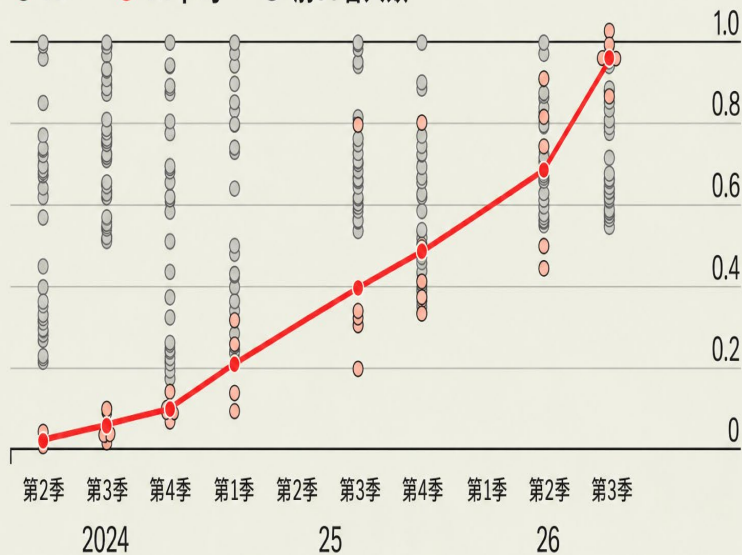
- 專家身價逾萬美元，AI只需數美元
- 長期預測仍靠人類，但恐逆轉



AI急起直追

Metaculus Cup：AI前五名相對人類表現，1=最佳人類成績

○ AI ● AI平均 ○ 前30名人類



AI提前颱風預警：「未雨綢繆」

氣旋路徑可由廣域環流預測，但強度受到局部大氣現象影響，高解析度模擬成本高，使中長期強度預測困難

AI模型WN-C

- 結合歷史氣旋與全球大氣資料
- 同時預測路徑、強度與風場範圍
- 以多個獨立模型呈現預測不確定性

主要發現

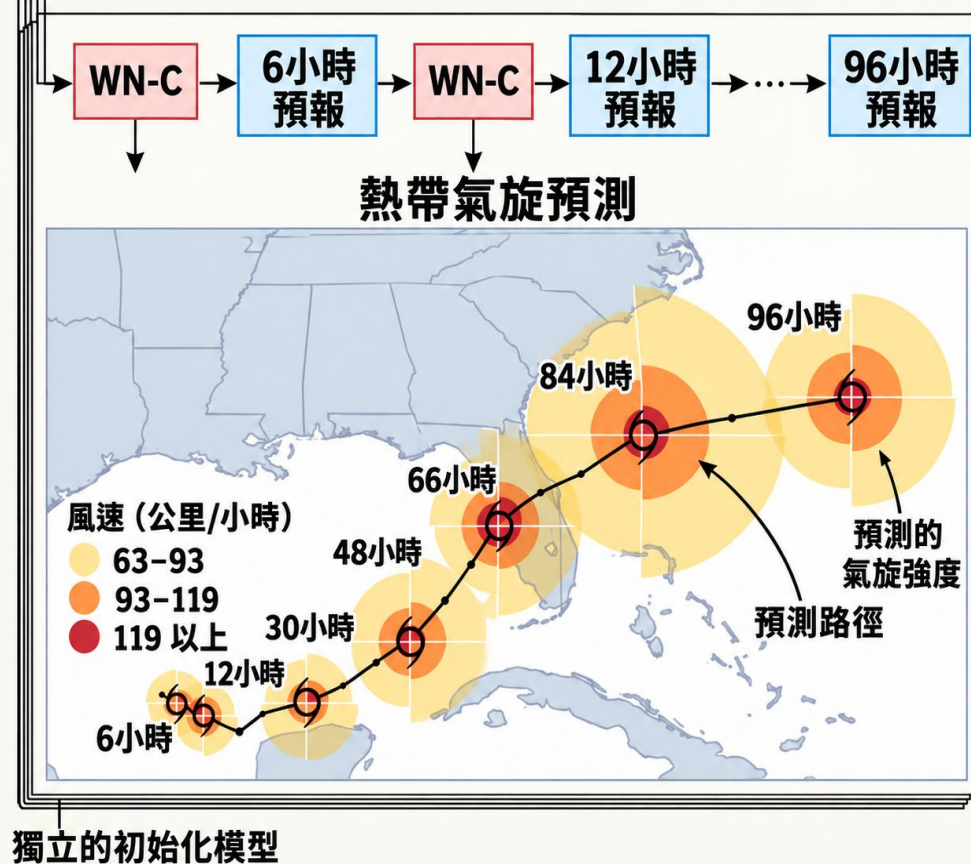
- 最長 15 天預報
- 有效預警至少多 1 天
- 低解析度仍有良好表現

意義與限制

- 可為預警與撤離爭取更多時間
- 面對氣候變遷下超出歷史經驗的極端氣旋，仍需結合氣象觀測與傳統模式

來自全球大氣
模式的初始條件

Tom Beucler & Milton Gomez, *Nature*, 2026



數學家抗議OpenAI: 「一步登天」

背景

economist.com

- 25位費爾茲獎得主9月11日發表公開，費爾茲獎堪稱數學界的諾貝爾獎
- 批AI公司解題只為測試模型，而非求知

導火線

- OpenAI宣稱解開千禧年難題之一，166頁論文未公開模型，缺推導細節

AI得到答案 $\neq$ 完整的數學研究過程

探索問題

建立證明

發現新
問題

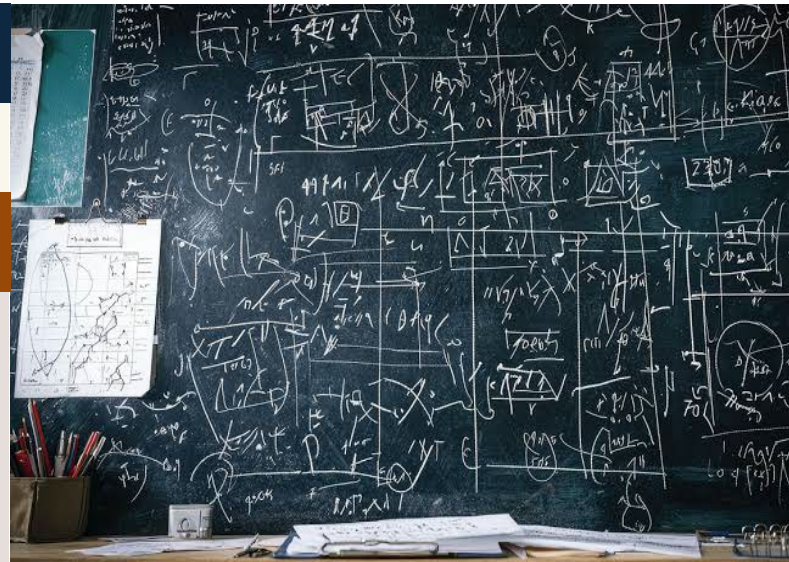
開創新
研究領域

- 求證過程比答案更珍貴
- 空投峰頂不等於攀登

專家評論

深層隱憂

- 數學家恐改為封閉研究，以免成果被搶先
- 認知卸載：常用AI與批判思考呈負相關
- 關鍵在AI如何參與，決定是福是禍



量子電腦能設計新藥嗎？

腦力活化仙丹: 藥命效應



但其實是我
對21世紀人類困境的個人宣言

我在藥品公司當顧問

- 失意作家艾迪在事業與人生陷入低谷之際，巧遇小舅維農取得實驗性藥物 NZT-48
- 服用後迅速展現驚人的記憶力、分析力與創作效率，成功突破寫作瓶頸



認知強化神奇藥效



我三天內就學會彈鋼琴



數學變得很有用



我全梭了

- 艾迪持續服用 NZT-48成為萬事通，寫作、音樂、博弈、醫療無不專精
- 認知藥物使艾迪能力大幅提升迅速完成小說，事業與感情同步回溫邁向嶄新同人生

顯然家族性大腸癌肉症病患

高強度藥物副作用危機

精準投資成為
金融風雲人物



默默無聞的莫拉先生駕馭了整個市場



副作用顯現



- 艾迪憑藉 NZT-48在金融市場迅速崛起引起大亨卡爾注意踏入高層權力與資本運作核心
- 但藥物副作用浮現艾迪出現記憶斷裂並捲入命案，逐漸察覺自己正失去控制

藥物設計 控管副作用風險



我能以同樣的量混合這些成分嗎？



-意思是...

-需要臨床試驗，人體實驗



-我有午餐約
-聽著，他們是你的最大資助者

- 艾迪利用NZT-48之高度創造性與智力重新合成藥物免於藥物中斷產生戒斷症狀
- 並持續改善藥物結構，維持敏銳觀察力與智力也降低毒性副作用

藥物研發-臨床應用流程與挑戰

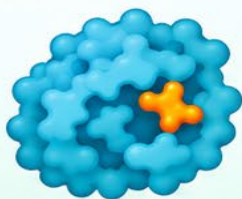
Zhou et al, 2026

傳統藥物研發流程

從靶點確認到審查上市，
整合多領域專業知識與資源。

1 標靶確認

確認疾病
相關靶點



4-5 年

2 先導化合物 發現

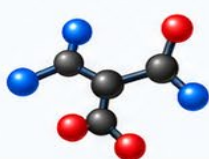
從藥物可能
化合空間中
篩選活性化合物



1-2 年

3 先導化合物 優化

優化化合物的
活性與
選擇性



1-2 年

4 臨床前研究

評估藥效、
安全性與
藥物動力學



1-2 年

5 臨床試驗 (I-III 期)

評估
安全性與
療效



2-3 年

6 審查與上市

提交申請
經審查
通過上市



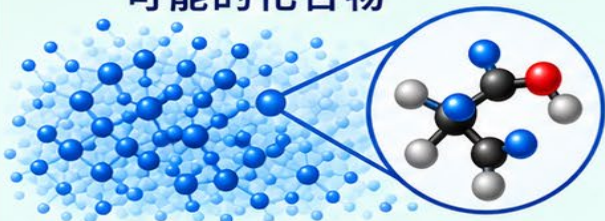
1-2 年

傳統藥物研發主要挑戰

藥物研發需投入大量資源，
並整合多面向資料進行決策。

1 藥物可能化合空間極大

約 10^{60} 個
可能的化合物



如同一座尚未探索完的分子宇宙

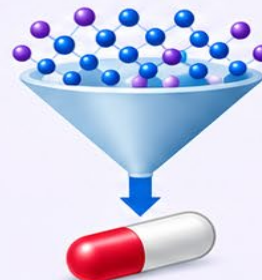
2 研發時程長、成本高

平均需超過 10 年
投入數十億美元



3 淘汰率高、決策複雜

從數千至數萬個候選化合物中，
僅少數能成功上市



需整合多項資料

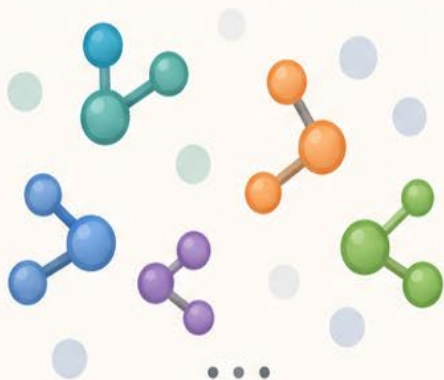
- ✓ 藥效與安全性
- ✓ 藥物動力學
- ✓ 臨床試驗結果
- ✓ 法規與市場需求

量子電腦真的能設計新藥嗎？

從約 10^{60} 個可能分子，到一顆真正的候選藥物

巨大的分子宇宙

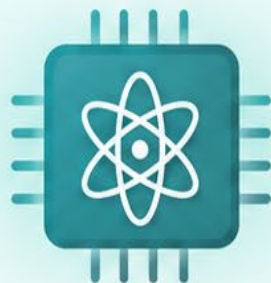
藥物設計一開始，
可能分子數量極大



約 10^{60} 個可能
molecules

Quantum computer

高精度分子物理引擎



電子能量



分子交互作用



量子計算

幫助估算電子能量與分子交互作用

協助縮小範圍



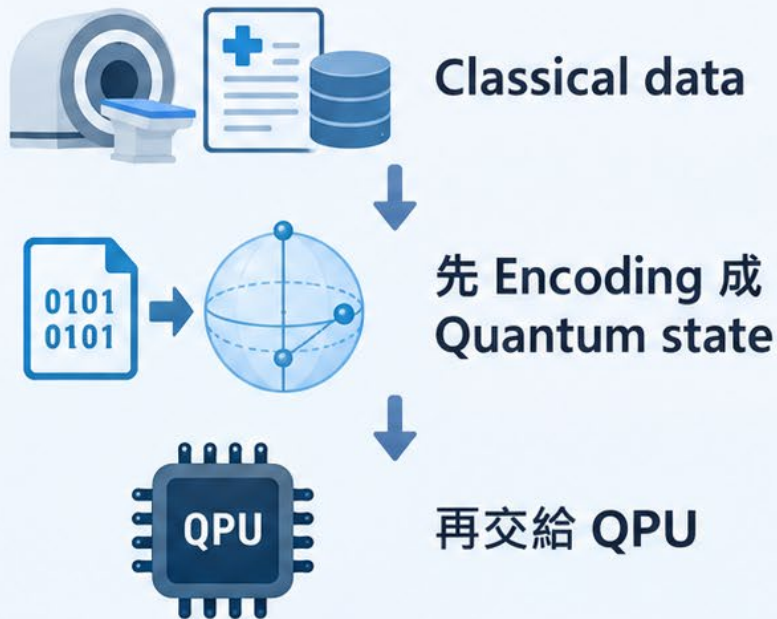
讓研究者更快找出
值得實驗的候選藥物

Quantum computer 如同高精度分子物理引擎

為什麼 Drug Design 特別適合 Quantum Computing ?

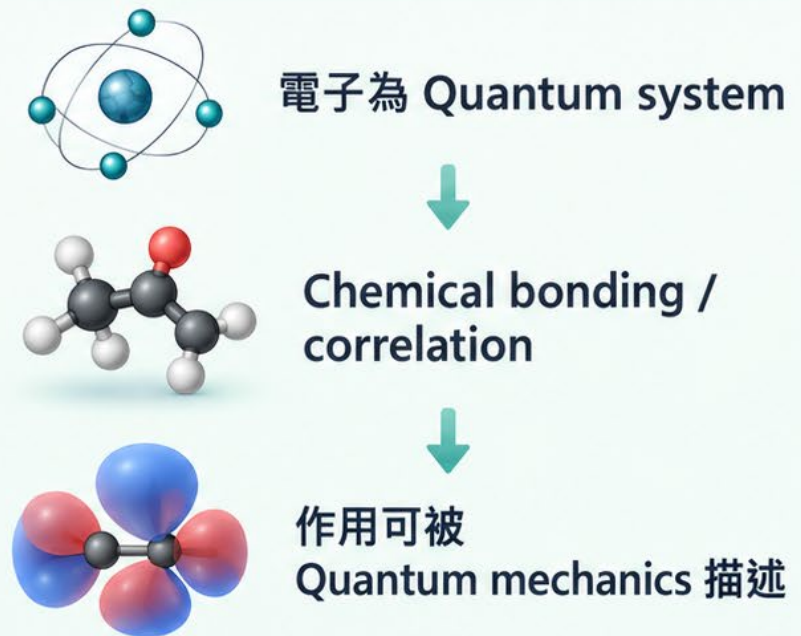
電子、化學鍵與分子能量，本來就是量子力學問題

醫學影像 / EHR



資料需先轉換格式，才能交給量子硬體處理

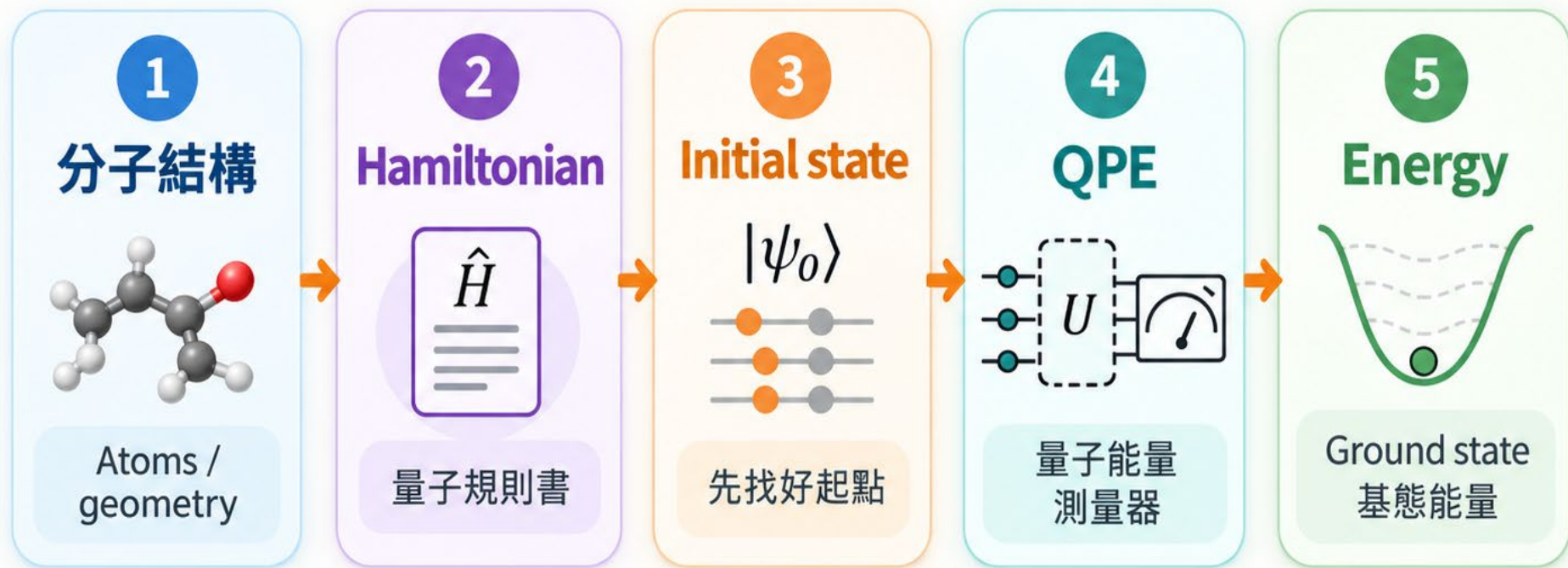
Molecule / Electron



分子中的電子行為，本身就遵循量子規則

Quantum chemistry 是較自然的 Quantum-native application

量子電腦如何看懂分子能量？



Quantum computer 不直接回答「藥有效嗎？」
先提供底層 Electronic energy 分子作用力

從真實分子走到量子能量估計分子藥物設計流程(pipeline)

Hamiltonian：藥物分子的「量子物理規則書」

要讓 QPU 計算，先把分子的物理問題寫成可運算的 Hamiltonian

真實分子



分子由原子與電子組成



Hamiltonian H

電子動能

+ 電子-原子核吸引

+ 電子-電子排斥

+ 其他必要作用

把「分子長什麼樣」轉成「電子應遵守哪些量子規則」

Initial State：起點離答案多近？

QPE 分子作用力解析路徑運算搜尋

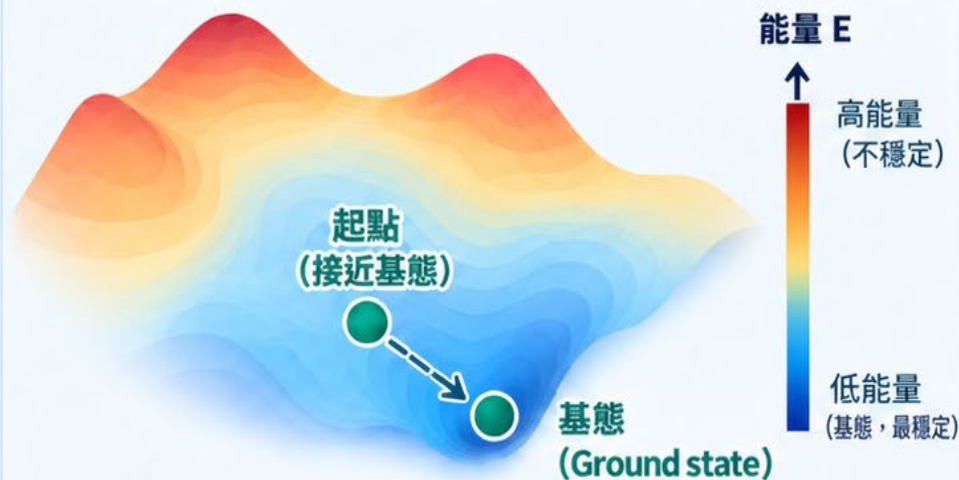
找台北 101 的比喻



起點越接近目標 → 搜尋成本越低

起點接近答案（好的 Initial state）

若初始態與真正的基態（Ground state）越相近，QPE 越容易成功，且效率更高。



起點越接近目標，QPE 成功率與效率越好。

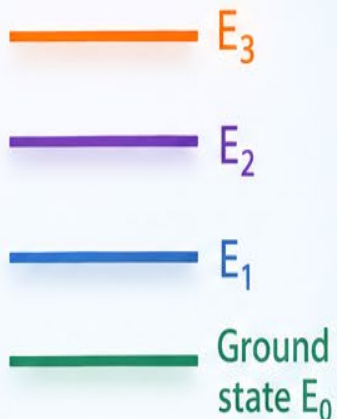
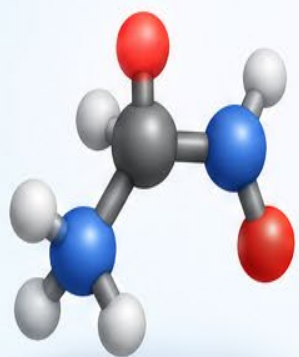
State preparation 成為實用量子化學的重要瓶頸

QPE：超精密「量子能量測量器」

Quantum Phase Estimation 用 phase 資訊估計 Hamiltonian eigenvalue

分子系統

具有多個能階的量子系統



分子的電子彼此強烈關聯，
能階難以用傳統方法精確計算。

QPE

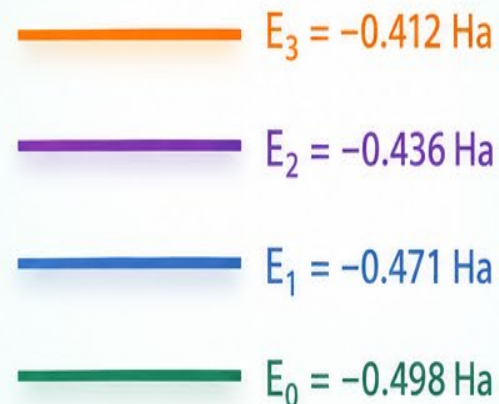
Quantum Phase Estimation
(量子相位估計)



量子演化 $U = e^{-iHt}$
從相位資訊估計能量本徵值

估計的分子能量

得到高精度的能階 (能量值)

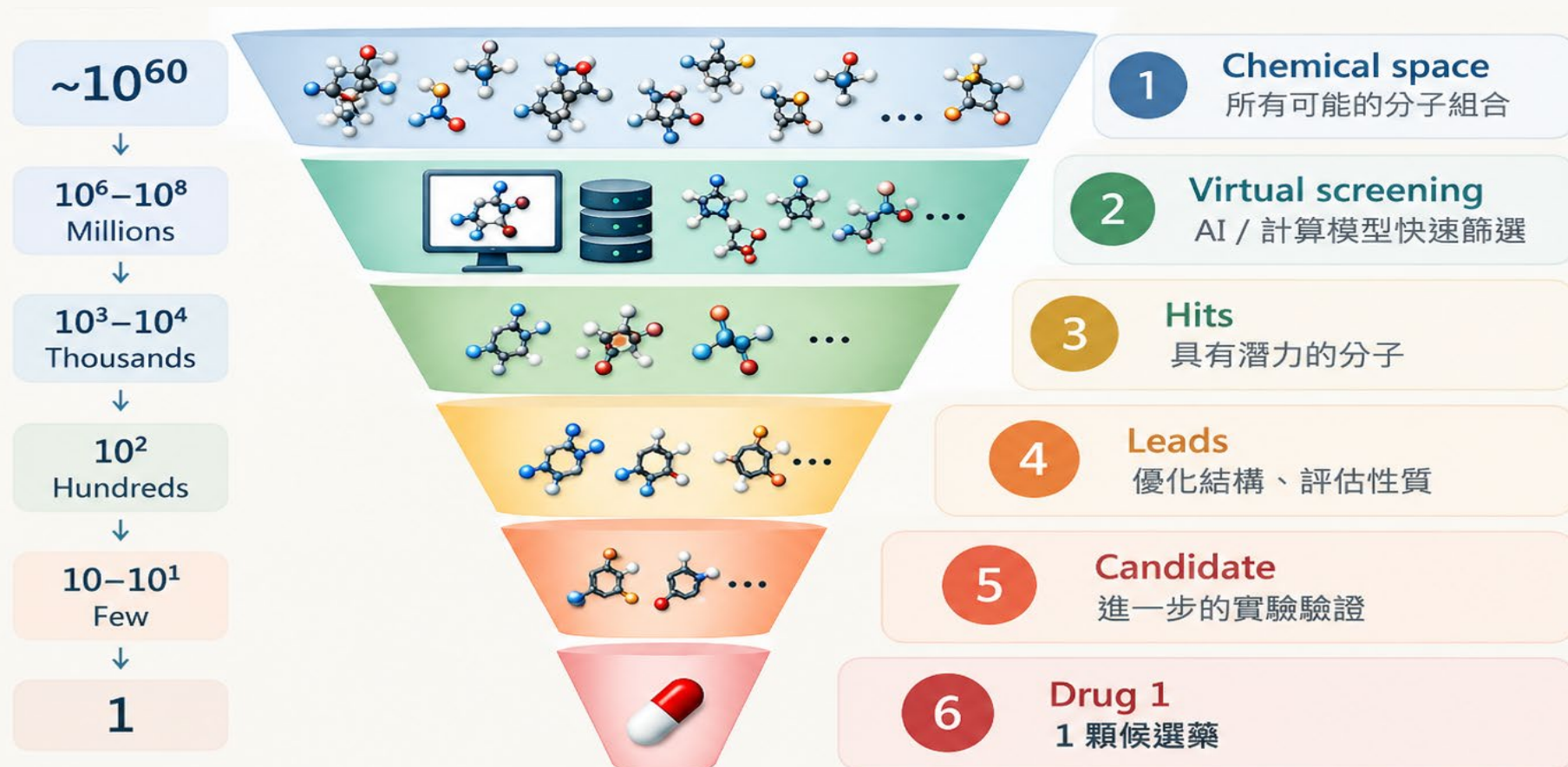


獲得精確的能量估計，
可用於分子性質分析與藥物設計。

QPE 產物是高精度能量，不是直接臨床療效判斷

從 10^{60} 個分子到 1 顆候選藥：Drug Discovery Funnel

越前端越快、越末端越值得花高成本追求精準



Quantum chemistry 最可能出現在 funnel 後段
候選較少，精度要求更高

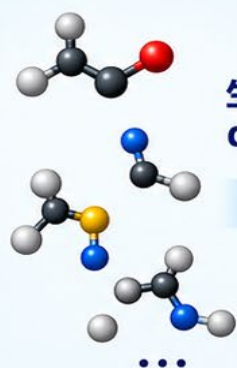
小分子藥物量子輔助篩選

Santagati et al., 2023; Zhou et al, 2026

1 分子生成與虛擬篩選

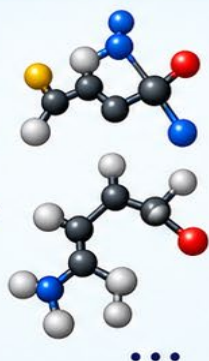
從廣大的化學空間中探索新分子，
發掘具有潛力的候選藥物。

分子片段
(Fragments)



生成模型
de novo

新分子結構
(New Molecules)



廣大的化學空間

約 10^{60} 個可能分子



- ✓ 結構多樣
- ✓ 高效探索
- ✓ 發掘新分子

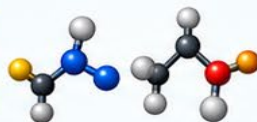
2 語言模型生成模型

學習分子結構規律，生成合理新分子。

分子資料庫



公開資料



實驗資料



文獻資料

分子序列

分子圖結構

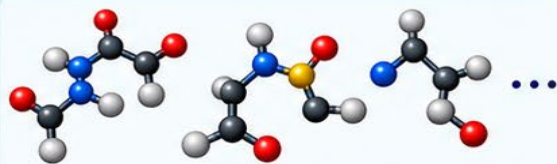
化學描述符

語言模型
生成模型

學習規律

- ✓ 結構規則
- ✓ 官能基組合
- ✓ 化學反應知識

生成新分子

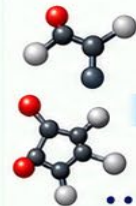


具潛力的候選分子

3 量子輔助評估器

精準計算分子性質，篩選最具潛力的化合物。

候選分子
(Top N)

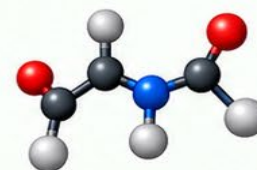


量子計算評估



- ✓ 能量穩定性
- ✓ 電荷分布
- ✓ 結合能
- ✓ 反應活性

結合多目標性質評估



- ✓ 結合親和力
- ✓ ADMET 性質
- ✓ 化學穩定性
- ✓ 合成可行性

三大重點價值



化學
有效性

- ✓ 生成結構合理
- ✓ 探索未知空間



藥物
相似性

- ✓ 符合藥物規則
- ✓ 具良好合成性



多目標
最佳化

- ✓ 整合多種指標
- ✓ 提升候選品質

Strongly Correlated Electrons：傳統方法難以解析

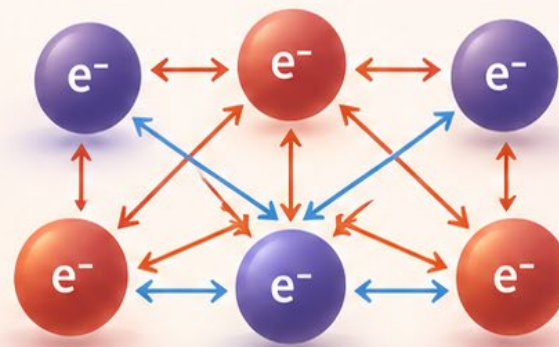
傳統解析模式可能變得非常昂貴

較簡單電子結構



許多成熟方法可處理
AI 模型也較容易廣泛應用

強電子相關 / Strong correlation



多電子彼此糾纏
Classical cost 急升



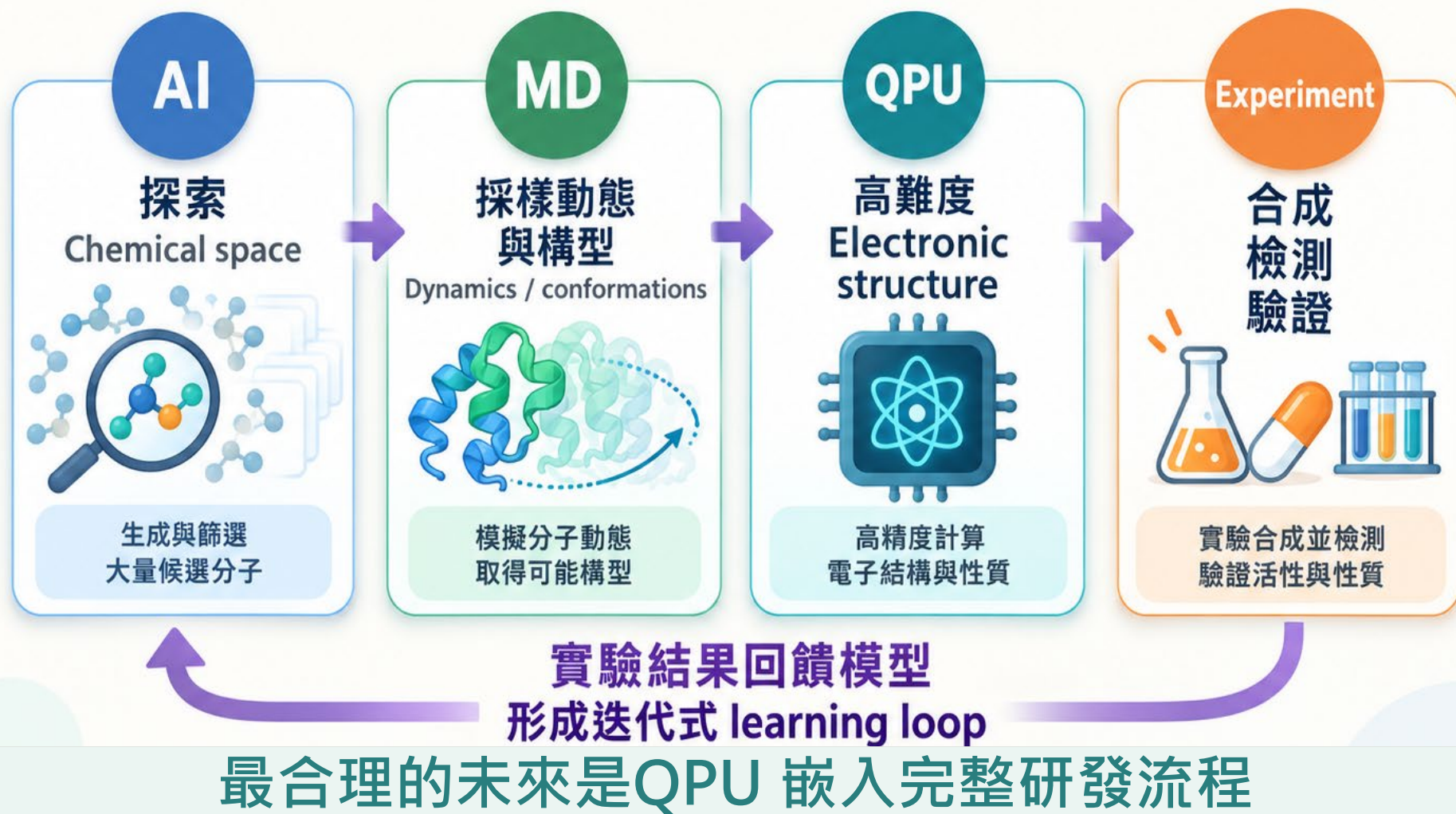
最有說服力的量子化學優勢，最可能先出現在困難的電子相關問題。

也就是：古典方法成本高、近似容易失準的分子系統。

AI + MD + QPU + Experiment :

Hybrid Drug Discovery Ecosystem

讓每一種計算工具做自己最擅長的部分。



標靶藥物

量子智慧設計應用潛力

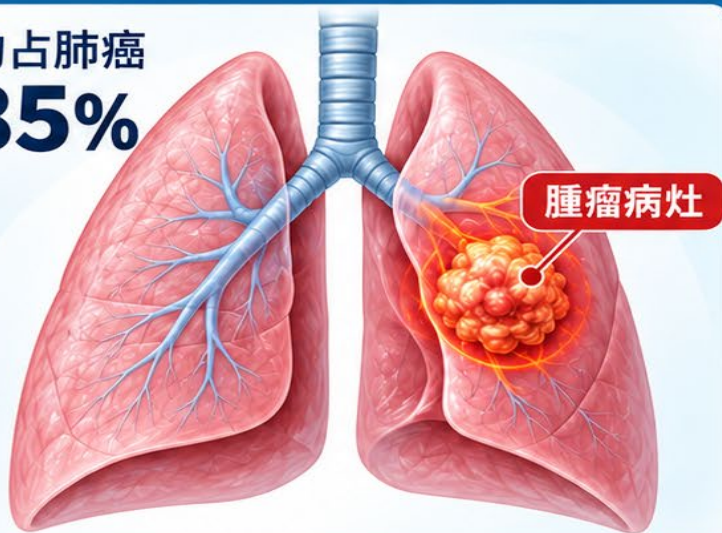
智慧分子藥物設計推進肺癌標靶治療

Vakili et al., 2025

非小細胞肺癌 (NSCLC)

約占肺癌

85%



肺癌是主要癌症死因之一
其中 NSCLC 約占 **85%**

多數 NSCLC 驅動基因 已有標靶藥物

標靶治療已改善部分病人預後

	EGFR	EGFR-TKI
	ALK	ALK-TKI
	ROS1	ROS1-TKI
	MET exon 14	MET 抑制劑
	RET	RET 抑制劑
	BRAF V600E	BRAF/MEK 抑制劑
	HER2	HER2 抑制劑

RAS 仍是重大未滿足需求



NSCLC 具有 **RAS** 基因變異
KRAS / NRAS / HRAS

- ❗ 缺乏有效標靶藥物
- ❗ 蛋白結構與化學性質具挑戰
- ❗ 治療選擇有限

Q1

哪些是化學問題？
哪些是計算問題？



- 分子結構與結合機制
- 力場與精確度
- 搜尋空間與計算複雜度

Q2

量子方法離臨床
成功藥物有多遠？



- 技術成熟度
- 與現有方法的互補性
- 從計算到臨床的距離

Q3

量子最可能切入
哪個環節？

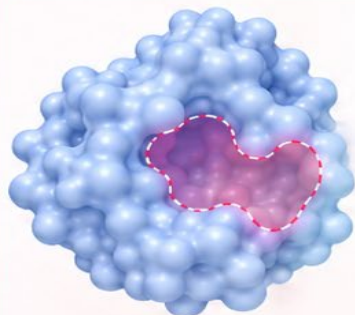


- 分子設計與性質預測
- 結合親和力與動力學模擬
- 化學空間探索與先導化合物優化

RAS致癌基因突變標靶藥物發展

1990s – 2020s

**RAS 長期被視為
「不可成藥」**



- 表面較平滑
- 缺少深口袋
- 高親和力 GTP 結合

**RAS 蛋白表面較平滑
較難找到理想結合位點**

2020s

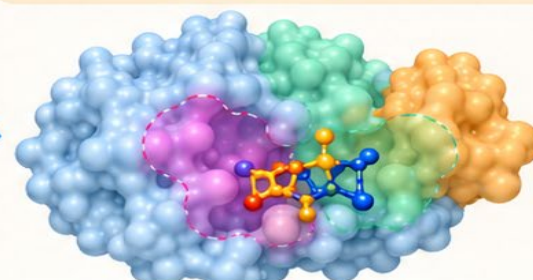
**KRAS G12C
共價抑制劑突破**



- 發現可結合口袋
- 共價抑制 KRAS G12C
- 開啟 RAS 臨床可行性

2026

**daraxonrasib
多選擇性 RAS(ON) 抑制劑**



- 作用多種活性型 RAS
- 擴大可治療族群
- RAS 研發新里程碑

daraxonrasib
(多選擇性 RAS(ON) 抑制劑)

1



重點挑戰：
隱藏口袋、配位設計、
片段優化

2



**量子運算可補強
少數關鍵計算環節**

3



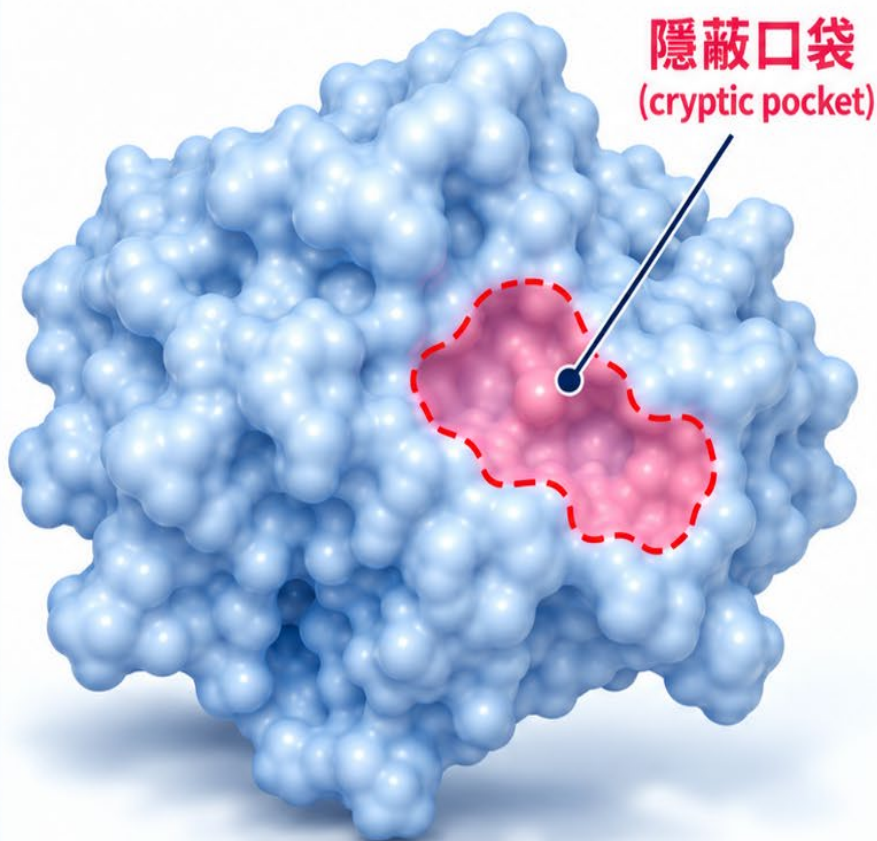
**完成結構設計與臨床驗證
可作為AI設計基礎**

RAS標靶分子藥物量子輔助設計

Vakili et al., 2025

RAS 蛋白表面結構

相對平滑，隱蔽口袋僅短暫出現



量子可能提供的幫助

1



量子生成模型：擴展候選骨架

- 探索更多候選骨架
- 協助發現適配隱蔽口袋的結構

2



QM/MM (Quantum Mechanics / Molecular Mechanics) 與局部電子結構估計

- 更細緻描述局部電子效應
- 補足傳統力場不足

3



分層處理：找構型 × 評估電子效應

- 先找可能結合的構型
- 再評估穩定性與電子效應
- 提高篩選效率



臨床意義：若能更早辨識可成藥構型，
可望減少無效篩選與合成輪次。

量子特徵學習多元標靶藥物

RAS 常見致癌等位基因



公開活性資料分布高度不平均

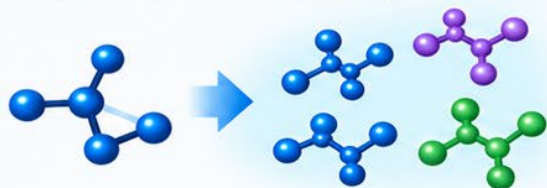


活性資料量不平均 → 罕見變異更難用現有方法設計藥物

同一個 RAS 家族包含多種不同突變，只有少數 (如 G12C) 有豐富資料；大多數變異仍缺乏有效的臨床解方。

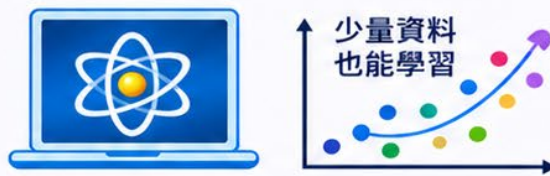
三種策略協同，加速罕見變異的藥物設計

1 生成模型 擴展化學空間



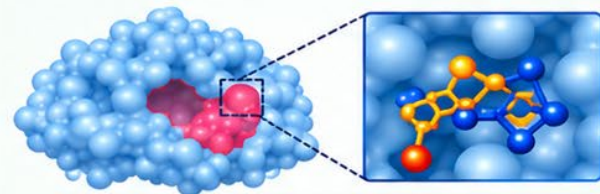
- 生成多樣化分子
- 探索更多化學空間
- 提出新類骨架

2 量子核方法 補強小樣本/高變異稀疏資料



- 適合小樣本資料
- 結合量子特徵提升預測
- 補強高變異稀疏資料的不足

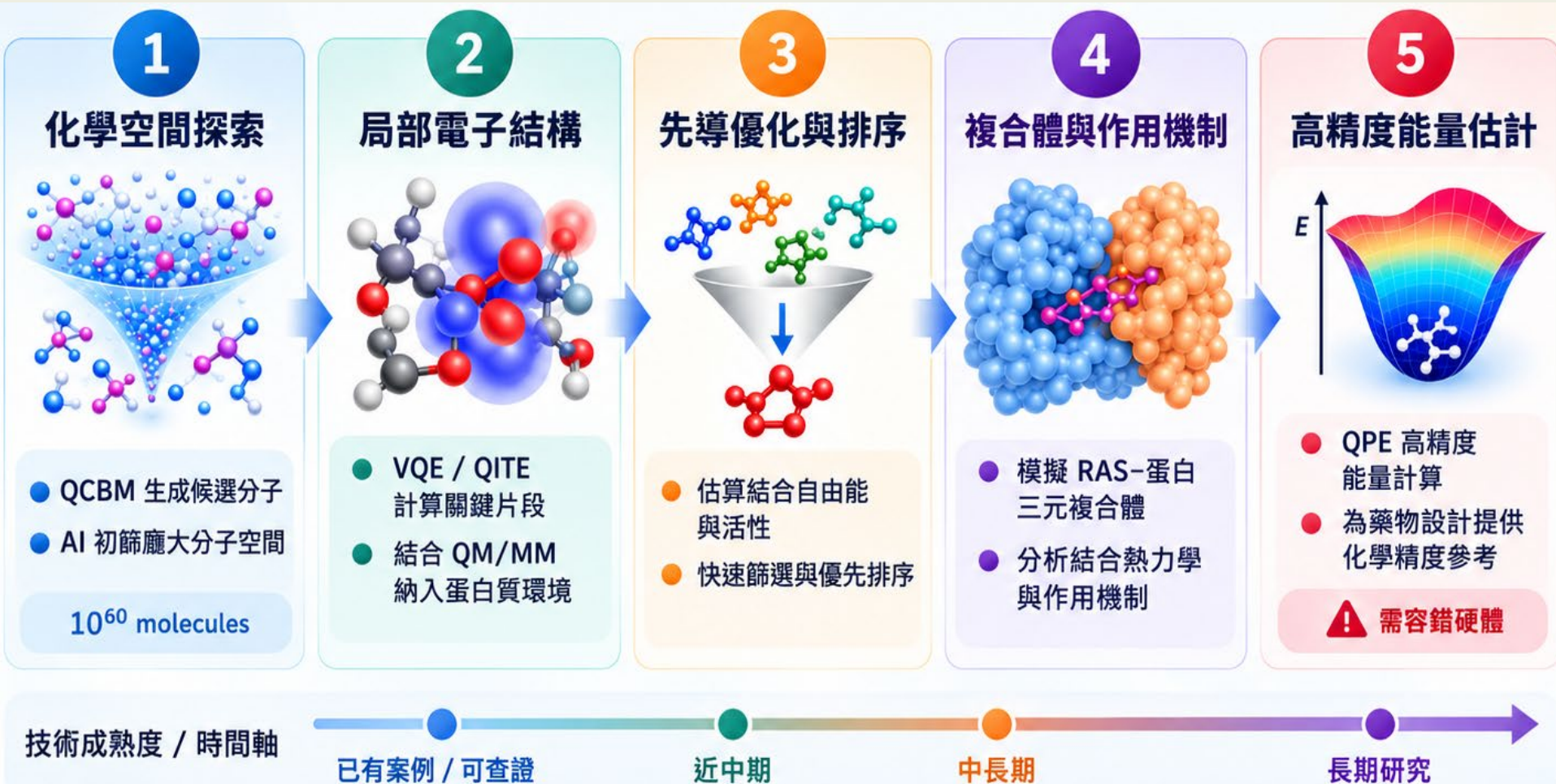
3 物理導向預測 不依賴大量既有活性資料



- 基於結構與物理化學約束
- 不需大量活性資料
- 提升對未見變異的外推能力

量子電腦分子藥物創新研發

Quantum + 傳統演算法 + AI + 生物學分子藥物研發協作

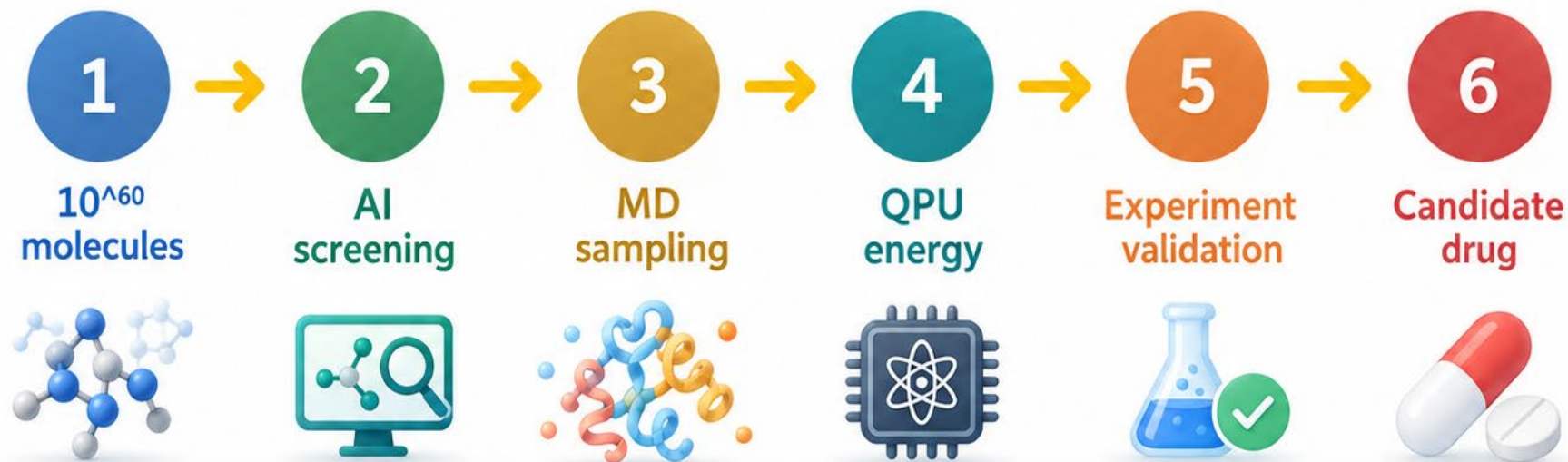


量子技術適合處理結構明確、傳統方法不準、資料稀缺分子問題
提升分子理解、篩選與設計效率

量子電腦分子藥物創新研發

我們能否更精準地理解傳統電腦最難處理的分子作用量子世界

從 Quantum Chemistry 到 Quantum Drug Discovery



突破來自 Quantum + Classical + AI + Biology 協作

量子科技應用: 在符合量子特徵環節帶來不可替代價值



林庭瑀
博士



陳秀熙
教授



星球永續健康 線上直播

國立台灣大學



林家妤



陳虹玘



許辰陽
醫師



梅少文 主持人



侯信恩 主持人



楊心怡 製作人



陳芷萱



甘芳瑜



邱士紘



嚴明芳
教授



不只是科技



劉秋燕



台北醫學大學