

## 2023 年第 1 回 研究講演会 文献案内 ～ 薬づくりの新しい潮流を探る (暫定版)

はじめに

薬づくりの大切さは、誰にでも理解されるであろう。しかし、薬づくりの難しさを理解するには、健康や医療に関わる科学と技術を包括した研究開発の視点と、実際に薬が使われる臨床や薬事行政に関わる理解が必要である。

20 世紀までの歴史：

J. Drews, Drug Discovery: A Historical Perspective, Science, 287. 17 March, 1960, 2000

21 世紀における状況：これについては、ICA の関係者（神沼二真、多田幸雄、堀内正）による下記の訳書がある。

\*「薬づくりの真実～臨床から投資まで」(日経 BP 社より 7 月 18 日新装版発売予定) : Bartfai T and Lees GV (2006) Drug Discovery: from Bedside to Wall Street. Elsevier/Academic Press: Amsterdam.

\*\*「薬づくりの未来～危機を打破する R&D」、日経 BP 社、2014 年 : Bartfai T and Lees GV (2013) The Future of Drug Discovery: who decides which diseases to treat? Elsevier/Academic Press: Amsterdam

しかし、状況はさらに変化している。その変化を先導しているのは、薬づくりに関わる化学だけでなく、2003 年に完了が宣言された「ヒトゲノム解読計画」などに象徴されるゲノム解読技術と、基礎から臨床や体につける各種の健康などに関わる計測機器、さらにインターネットを含む情報・通信・計算技術である。

薬づくりは基本的に化学の領域の仕事である。その化学も、より根源的な物質科学である量子力学を基礎にしている。その量子力学も今世紀に入ってより、「量子力学の第 2 革命 (Second Quantum Revolution)」に見舞われ、また、情報科学と工学 Information Science & Engineering との関係を深めている。

そうした動きから、量子情報科学 Quantum Information Science や、それを基礎にした新しい概念に立った計算や計算機、すなわち人工知能 Artificial Intelligence、機械学習 Machine Learning、量子計算 Quantum Computing や量子計算機 Quantum Computer の開発への関

心が高まっている。薬づくり Drug Discovery は、そうした新しい研究の成果である技術を活用するための重要な応用領域だと認識されてきている。

以下は、そうした新しい潮流に関わる文献の例である。

.....









. . . . .

S. Mensa et al, **Quantum machine learning** framework for virtual screening in **drug discovery**: a prospective quantum advantage, *Learn.: Sci. Technol.* 4 015023, Mach 2023.  
DOI 10.1088/2632-2153/acb900

J. J. Postema et al. Hybrid quantum singular spectrum decomposition for time series analysis, *AVS Quantum Sci.* 5, 023803 (2023)  
<https://doi.org/10.1116/5.0139846>

A.I. Gircha et al. Hybrid quantum-classical machine learning for **generative chemistry and drug design**, *Scientific Reports*, 13:8250, 2023.  
<https://www.nature.com/articles/s41598-023-32703-4>

R. Santagati et al. Drug design on quantum computers, arXiv:2301.04114v1 [quant-ph] 10 Jan 2023  
<https://arxiv.org/pdf/2301.04114.pdf>

S. Luukkonen et al. Artificial intelligence in multi-objective drug design, *Current Opinion in Structural Biology*, Volume 79, April 2023, 102537