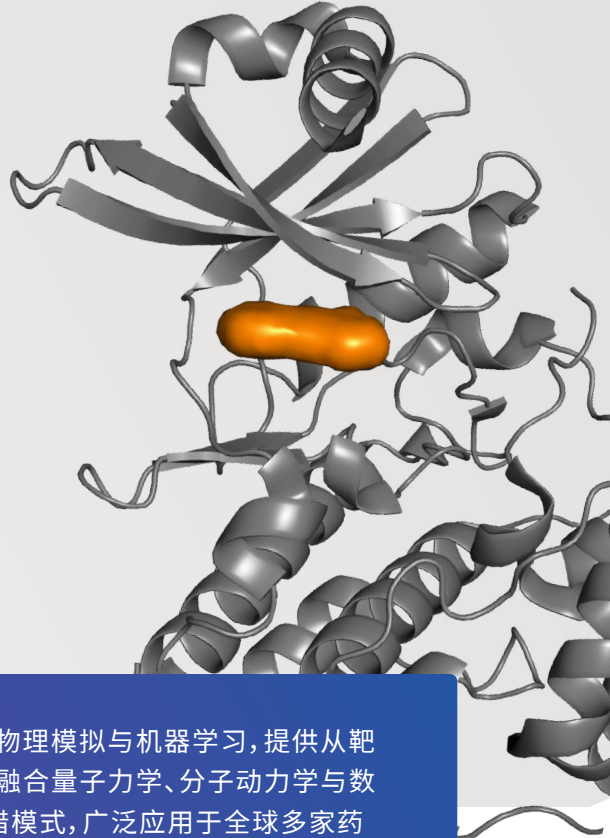


Schrödinger 药物发现领域的 计算科学平台



“ Schrödinger是计算机辅助药物设计领域的核心平台，集成了物理模拟与机器学习，提供从靶点识别到候选化合物发现的全流程计算解决方案。其平台深度融合量子力学、分子动力学与数据科学，帮助科学家实现“预测优先”的药物设计，替代传统试错模式，广泛应用于全球多家药企与科研机构。

”

软件特色与优势



第一性原理计算

基于量子化学与分子力学，探索全新化学空间。



统一可视化平台

Maestro界面简化任务设置与复杂体系分析。



模块协同

多工具 (如Glide+Prime) 协同解决复杂问题。

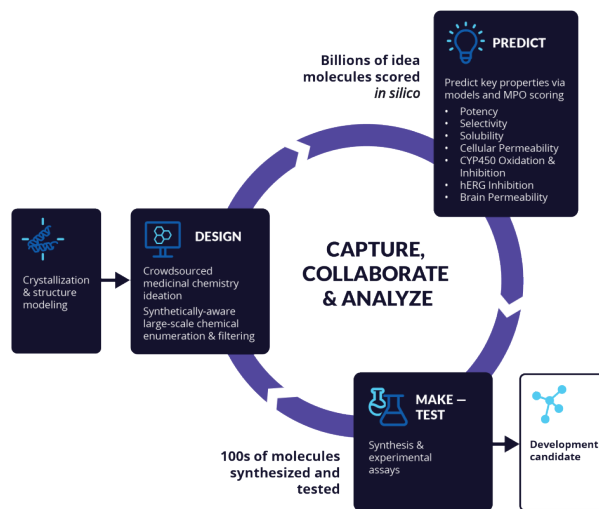


行业广泛认可

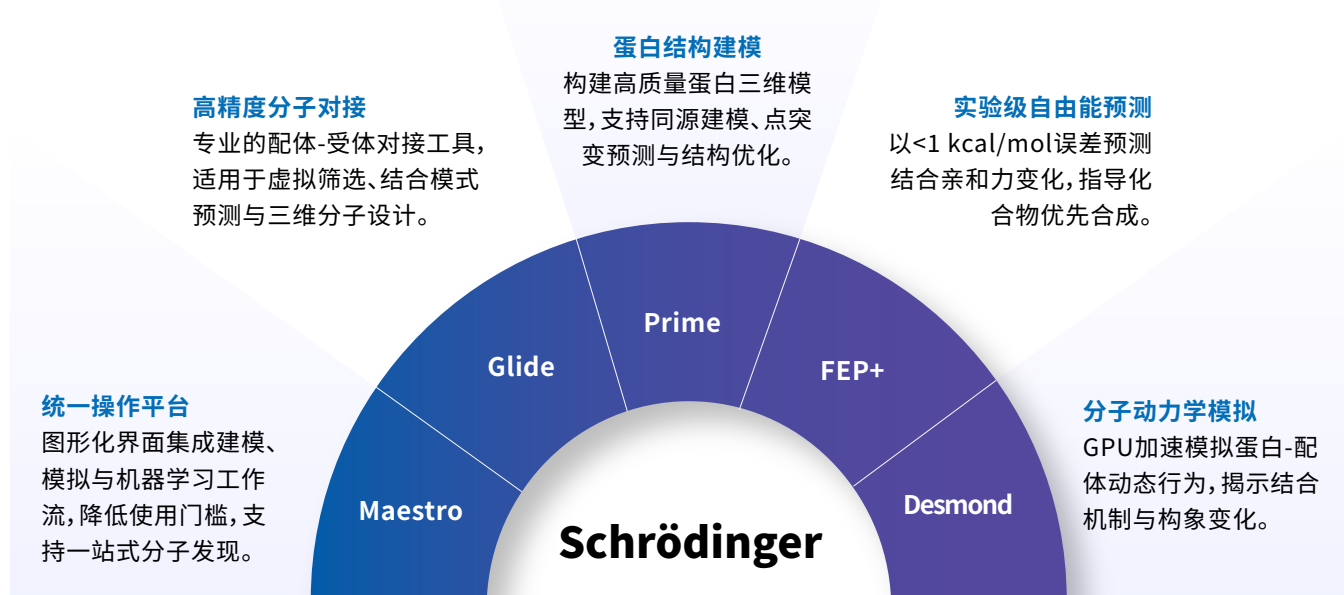
被哈佛、MIT、斯坦福、清华等机构及制药企业广泛使用。

核心工作流：“设计-预测-测试”

Schrödinger平台支持分子设计、预测分析与实验验证的闭环研发流程，通过高精度计算工具优先筛选出值得合成的候选分子，显著提升研发效率。



核心模块概览



药物研发应用一览

应用领域	核心模块	功能简介
虚拟筛选	Glide, LigPrep, QikProp, Epik	高通量筛选, 每日可处理超150万化合物。
精确分子对接	Glide, Prime, Induced Fit Docking, PIPER	通过精准对接与构象优化, 获得实验级的可靠结果。
药效团生成	Phase, Confgen, MacroModel	无需受体结构, 仅凭配体信息进行药物设计。
ADME/Tox预测	QikProp, Membrane Permeability	快速评估吸收、分布、代谢、排泄与毒性性质。
自由能微扰 (FEP+)	FEP+	实验精度预测结合, 支持先导化合物优化。
分子模拟	Prime, MacroModel, Desmond	精确建模以优化蛋白、核酸、抗体等生物大分子结构。
生物制剂平台	BioLuminate	用于抗体、核酸、酶等生物制剂的综合发现平台。
量子力学计算	QSite, Jaguar	对关键位点进行精确的电子结构计算。

Schrödinger: 以计算开启药物发现的新纪元



源资信息科技(上海)有限公司

+86-21-32504385

www.tri-ibiotech.com

support@tri-ibiotech.com

上海总公司

北京分公司

重庆分公司

上海市长宁区天山路18号701

北京市顺义区安泰大街融慧园15-3

重庆市渝中区大坪英利国际壹号楼2719