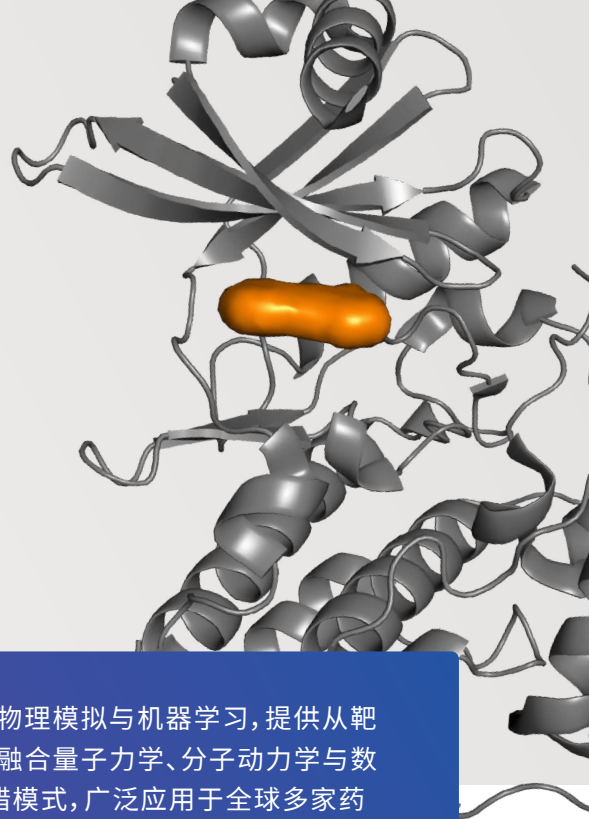


Schrödinger 药物发现领域的 计算科学平台



“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

以量子力学方法精确求解电子结构，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。

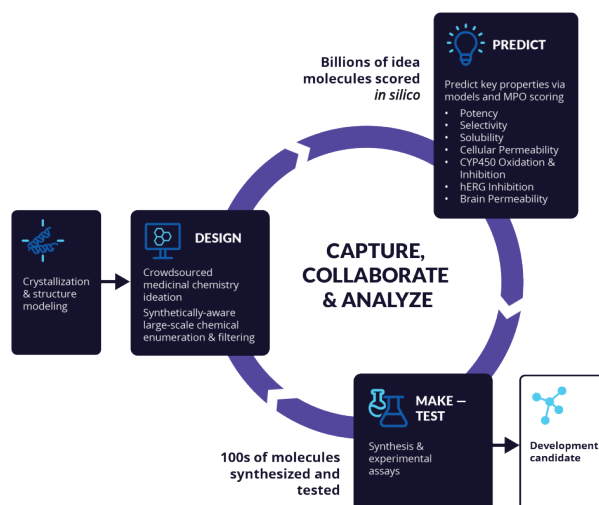


行业广泛认可

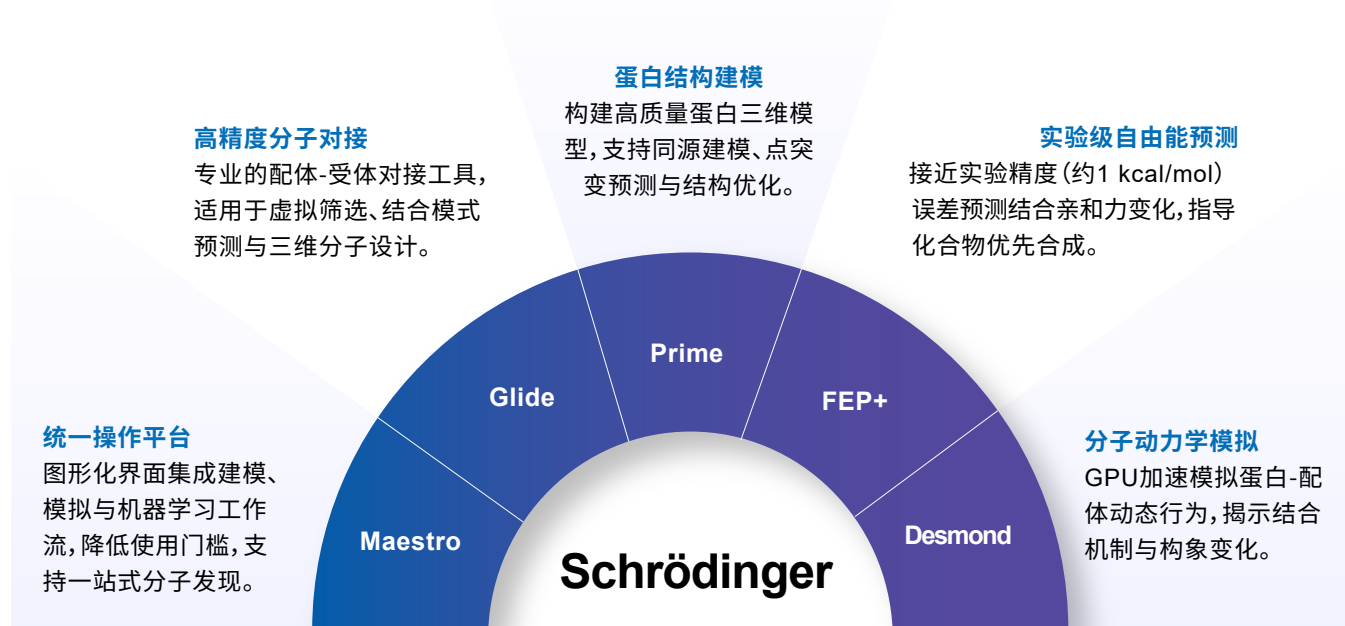
全球1350+家学术机构，营收前20大制药公司全部授权使用。

核心工作流：“设计-预测-合成-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, Phase, Shape Screening	高通量筛选，借助主动学习与GPU加速，可在24小时内完成十亿级化合物库筛选
精确分子对接	Glide, Prime, Induced Fit Docking	通过精准对接与构象优化，获得实验级的可靠结果。
自由能微扰 (FEP+)	FEP+	实验精度预测结合，支持先导化合物优化。
分子建模	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、多肽、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。
分子生成	DeepAutoQSAR, Generative Glide	基于深度学习的自动QSAR建模与生成式对接，快速产生具有目标活性及类药性的全新分子结构，拓展化学空间探索。

Schrödinger: 以计算开启药物发现的新纪元



扫码关注源资科技



扫码关注Schrödinger

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 上海市长宁区天山路18号701

北京分公司 北京市顺义区安泰大街融慧园15-3

重庆分公司 重庆市渝中区大坪英利国际壹号楼2719