

Schrödinger

Purpose: Drug design,
Molecular Dynamics

Latest version: 2022-2

Licence: ⚠ Must be
provided by the user.

Proprietary

License

Website: https://www.schrodinger.com/_ext-link

Schrödinger is a suite of programs for drug design, bioinformatics and molecular dynamics.

Schrödinger is a highly modular suite of programs for a variety of simulation, design, visualisation, docking, modelling and bio/chemoinformatics purposes. Several distributions focus on drug design, materials science, biological systems and data treatment and visualisation, providing tools for pre- and post-processing, interfaces, analysis and optimisation for custom workflows between the programs and integrated environments. Schrödinger suites contain programs also available as stand-alone releases, such as *Desmond* or *Jaguar*.

Available modules:

- Canvas: Entorn de treball enfocat a la quimioinformàtica.
- ConfGen: Anàlisi conformacional de molècules.
- Desmond: Dinàmiques moleculars d'alt rendiment.
- Epik: Predicció dels estats de protonació del lligand mitjançant càlculs del pKa.
- Glide: Docking lligand-receptor per virtual screening.
- Jaguar: Modelització ab initio de molècules petites.
- Jaguar pKa: Predicció de pKa en dissolució aquosa mitjançant mètodes ab initio.
- LigPrep: Generació d'estructures 3D de lligands a partir de models 2D.
- MacroModel: Modelització molecular (minimització, dinàmica, anàlisi conformacional...).
- Phase: Generació de farmacòfors per ligand-based drug design.
- Shape Screening: Eina per a buscar similituds de manera ràpida i eficient. A fast and efficient tool for shape-based superposition and similarity searching.
- Prime: Predicció d'estructura de proteïnes, permetent també generar models de receptor per structure-based drug design.
- QikProp: Predicció de propietats ADME de candidats a fàrmacs.
- QSite: Càlcul de mecanismes de reacció mitjançant metodologia QM/MM.

- SiteMap: Identificació de centres actius de manera ràpida i acurada.
 - Strike: Predicció de relacions estructura-activitat (QSAR).
 - OPLS3: Per a paràmetres precisos de camps de forces.
 - KNIME: Conjunt d'eines per a l'automatització de processos i d'anàlisi de dades.
-