

Chemical.AI

武汉智化科技有限公司

● SHAPE THE FUTURE OF CHEMISTRY ●

智化科技简介

武汉智化科技有限公司 (Chemical.AI) 于2018年成立，是一家AI赋能化学的研发型公司，研发利用人工智能技术、化学大数据和机器学习相结合来大幅度提高化学科研效率的工具，致力于打造化合物智能规划平台。



智化科技核心能力



计算机辅助合成路线设计

经过8年的研发，结合化学专业知识和AI技术，我们采用数据驱动的方法独立发明了该算法。该解决方案是由化学家为化学家们研发的。



预测逆向合成

该系统遵循路线规划的工作流，这是研究过程的一部分。它可以在几秒钟到几分钟内设计出合成路线，具有很高的可行性和多样性。



专业的服务

使用自定义算法促进有价值的数​​据（例如ELN）集成和反应预测。此外，还可以进行大批量分子的可合成性评估以及相应API的开发。



化合物报价

通过快速的成本分析或估算来无缝规划路线。它可以使用自动生成的基于模板的报告来进行报价和团队共享。

智化科技能力优势

查找报告的路线并预测新路线

几分钟之内一键生成多种合成路线

部署在本地服务器上以提高安全性

整合客户的ELN和BB数据



智化科技产品亮点

快速搜索和多样性

考虑立体化学和保护策略，数分钟内即可预测未报告/未报告靶分子的多种途径

互动路线设计

利用您的经验并通过更改反应条件或选择不同的键断裂位置来定制路线。

反应的可行性

有关预测反应的参考文献，其中考虑了反应位点和反应类型的相似性

为什么选择 Chemical.AI作为 计算机辅助合成 路线设计

友好的用户界面

无需安装即可在浏览器中快速开始搜索。易于设置参数，管理任务和检查路线详细信息

整合ELN

在保证数据安全性的同时，将ELN数据集成到本地服务器中以充分利用它

适合您的工作流程

将路线导出为CDX或PDF或图片，与同事共享并讨论

THANK YOU!