



港股研究 | 公司深度 | 晶泰控股 (02228.HK)

晶泰控股：AI for Science 探界者，加速迈向商业兑现新阶段

报告要点

在持续深耕 AI for Science 的科技企业引领下，以生物学为代表的科学智能正在进入一个高产出、快迭代的应用落地期，有望迎来多场景涌现。公司层面，AI+机器人+Multi-Agent 深度融合，飞轮效应重塑研发范式，看好公司平台化加速、技术与产品能力不断强化，持续关注新签订单进展情况。

分析师及联系人



宗建树

SAC: S0490520030004

SFC: BUX668



刘思缘

晶泰控股 (02228.HK)

2026-04-27

晶泰控股：AI for Science 探界者，加速迈向商业兑现新阶段

港股研究 | 公司深度

投资评级 买入 | 首次

晶泰控股：AI for Science 物质发现领域开路先锋

公司成立于 2015 年，定位基于 AI+量子物理和机器人驱动的创新型研发平台。(1) 首次实现年度盈利。2025 年公司全年实现营收 8.03 亿元，同比增长 201%，年内利润首次转正，达 1.35 亿元，同比增长 109%。得益于 2025 年 6 月底公司与美国初创药企 DoveTree 签署合作协议，若单独剥离该订单确收金额，同比增长约 65%，增速仍然亮眼。(2) 业务升级：2025 年公司原智能化解决方案业务升级为 AI for Science(AI4S)智慧解决方案，从机器人与算法交付升级为面向多领域、全流程的智能化研发体系。我们认为当前公司在全球顶级药企的深度认可不断提升，伴随公司不断向综合性 AI4S 平台过渡，我们看好公司以高研发效率进入高速成长通道，业务向非药领域扩展打开空间，订单有望持续落地贡献增长动能。

鉴往知来：差异化切入实现稀缺卡位，从单点算法到构筑闭环

公司发展历程大致分为几个阶段：(1) 2015-2017：初创期，明确技术路径与战略定位，以晶型预测打开与大厂的合作，初步奠定根基。(2) 2018-2022 年：快速成长期，技术深耕+多领域验证，公司进入快速发展期，数据飞轮初步形成，自动化程度加深。(3) 2023 年-2024 年：订单爆发期，多项订单落地，商业化进程与平台化打造均加速，不断探寻新领域。(4) 2025 年至今：加速进入商业兑现期。当前公司是行业内极少数同时拥有量子物理算法、湿实验室验证以及自动化实验室能力的企业，凭借全维度的技术闭环与充沛的资金，在药物研发效率和综合竞争实力上有望持续提升。

产品能力：AI+机器人+Multi-Agent 深度融合，飞轮效应重塑研发范式

公司改变传统研发范式，基于 AI 模型预测—机器人执行湿实验—数据反哺 AI—Multi-Agent 调度不断强化自身产品能力。(1) 基本能力夯实：公司已有八个自主开发的 AI 基本生成模型，在此基础上构建超过 200 个 AI 模型，可在不同场景下定制特定参数，以满足客户多样化和不断发展的需求。(2) 增长空间大：公司前瞻布局全流程智能化研发体系，实现精准卡位，现已形成显著先发优势，构建高壁垒的闭环生态。未来，伴随行业对 AI 赋能认知的持续深化，平台化布局有望转化为持续贡献增长动能。

投资建议

行业层面，在持续深耕 AI for Science 的科技企业引领下，以生物学为代表的科学智能正在进入一个高产出、快迭代的应用落地期，有望迎来多场景涌现。公司层面，看好公司平台化加速、技术与产品能力不断强化，持续关注新签订单与管线进展情况，预计 2026-2028 年营业收入为 9/12/16 亿元，同比增长 16%、29%、32%，对应当前 PS 为 35/27/21x，首次覆盖，给予“买入”评级。

风险提示

- 1、下游需求不及预期的风险；
- 2、技术落地与研发进度不及预期的风险；
- 3、市场竞争加剧的风险；
- 4、合作项目推进不及预期的风险；
- 5、盈利预测假设不成立或不及预期的风险。

公司基础数据

当前股价 (HKD) 8.32

注：股价为 2026 年 4 月 24 日收盘价



更多研报请访问
长江研究小程序

目录

晶泰控股：AI for Science 物质发现领域开路先锋，AI 制药行业领军者	7
创始团队基因决定公司定位，赋能新药研发等领域关键节点.....	7
从概念验证到规模化收入，2025 年首次实现盈利	10
鉴往知来：技术路径稀缺卡位，从单点算法到构筑闭环	12
2015-2017 算法奠基：明确差异化技术路径，“第一性原理+AI”	12
2018-2022 加速成长：拓宽业务外延，干湿一体构筑数据飞轮.....	15
2023-2024 业务加速：人机协作与模型继续优化，数据驱动进入业务多点爆发	19
2025 年以来：加速进入商业兑现，全球视野下的技术井喷与生态构建	21
产品能力：AI+机器人+Multi-Agent 深度融合，飞轮效应重塑研发范式	26
AI 基座能力持续夯实，Multi-Agent 矩阵重塑研发范式.....	26
药物发现：平台价值持续释放、加速抢占前沿药物模态制高点.....	27
AI4S 解决方案：从解决方案到平台赋能的工程化落地	31
打开非药的星辰大海：多领域迁移与持续整合并购	33
前途似海：AI for Science 时代已来.....	34
行业空间与阶段：超长坡道、多领域渗透、仍处早期.....	34
竞争要素：成熟度早期，高质量数据构建至关重要	37
何以突围：布局专有数据获取+模型闭环迭代+实验自动化.....	39
风险提示.....	42

图表目录

图 1：创始人团队来自 MIT.....	7
图 2：公司重要股东持股与参控股子公司一览（截至 2025 年 6 月 30 日）	8
图 3：公司原“智能化解决方案”业务升级，并更名为“AI for Science(AI4S)智慧解决方案”	9
图 4：公司营业收入（百万元）及其同比增速（%）	10
图 5：公司净利润（百万元）及其同比增速（%）	10
图 6：公司分业务收入（百万元）及其同比增速（%）	10
图 7：公司分业务收入占比（%）	10
图 8：2021 年以来公司分地区收入（百万元）及同比增速（%）	11
图 9：2021 年以来公司分地区收入占比（%）	11
图 10：2021 年以来公司毛利率（%）迎来改善拐点，持续向好.....	11
图 11：公司各项目费用率（%）进入常态化投入周期	11
图 12：公司融资和经营活动现金流量净额（百万元）	12
图 13：公司月均现金消耗（千万元）改善明显	12
图 14：公司重大历史事件复盘.....	12
图 15：Deloitte 跟踪的 12 家世界大型制药公司 IRR 在 5 年内下行约 6 个百分点.....	13
图 16：一张图看懂药物研发“双十定律”：十年周期+十亿英镑=1 个药物.....	13
图 17：下图为不同机理作用的结晶过程，实际操作中，各类参数会以不同的形式参与到结晶过程中、过程与机理更加	

复杂.....	14
图 18: 晶体结构预测 (Crystal Structure Prediction, CSP) 的完整计算流程.....	14
图 19: 公司晶型预测流程与能力.....	15
图 20: 一张图看懂公司“纵横发展”战略.....	16
图 21: 药物发现四阶段.....	16
图 22: 传统合成需要不断试错, 占据 50~60% 的研发时间, DMTA 循环亟需新范式提速.....	17
图 23: 湿实验室工作流程.....	17
图 24: 公司参与 Paxlovid 研发.....	18
图 25: 自主实验室是连接虚拟计算与实验的核心枢纽, 为干湿闭环.....	19
图 26: 基于硬件与软件类别的自动化实验室级别分类.....	19
图 27: 2021-2023 年公司智能化-固态研发业务收入 (百万元) 及增速 (%).....	20
图 28: 2021-2023 年公司智能化-自动化化学合成业务收入 (百万元) 及增速 (%).....	20
图 29: 2021-2023 年公司项目数量 (个).....	20
图 30: 2021-2023 年公司年末客户数 (个) 与留存率 (%).....	20
图 31: 公司 AI+机器人跑通干湿实验 DMTA 闭环与效率提升.....	21
图 32: 公司 AI+机器人实验室实景图.....	21
图 33: AI 模型预测能力优于专家, 引领范式变革.....	22
图 34: 通过 AI+机器人模式, 打造行业独有的“高通量实验-高质量数据-高智能模型”飞轮.....	22
图 35: 公司综合技术平台工作流程.....	23
图 36: 相比传统人工方法, AI+量子物理方法极大提高新药发现的成功率、速度、规模和新颖性.....	24
图 37: 公司的“干湿”闭环平台工作流与 Multi Agent.....	25
图 38: 2025 年重要商业化/管线进展.....	26
图 39: AI 模型预测—机器人执行湿实验—数据反哺 AI-Multi-Agent 调度.....	26
图 40: 公司模型矩阵夯实“专家大脑”, 不断拓展新型药物.....	27
图 41: 小分子药物发现平台: 全流程驱动新药发现, 从分子设计到生物测试闭环.....	27
图 42: 小分子药物发现平台.....	28
图 43: XFF、XFEP 和 Xpose 可根据不同应用场景定制化应用赋能新型药物及材料发现.....	28
图 44: XFEP 与其他市售软件通量对比.....	29
图 45: XFEP/XFF 软件的精度与市售软件对比.....	29
图 46: ProteinGPT 的工作机制.....	29
图 47: 大分子 (主要是抗体) 药物发现平台.....	30
图 48: 公司固态研发方案相较传统人工方法的优势.....	31
图 49: 灵动勺攻克微量固体加样难题.....	32
图 50: AI4S 智能机器人实验室持续突破多行业标杆客户.....	32
图 51: 科研范式迭代进展.....	34
图 52: AI4S 应用领域广度横跨几乎所有科学问题.....	35
图 53: 每年新发布的生物 AI 模型数量 (单位: 个).....	36
图 54: AI 在生命科学领域中的市场规模及复合增速 (单位: 亿美元).....	36
图 55: 生成式 AI 软件与服务在材料科学领域的全球市场规模 (单位: 亿美元).....	36
图 56: 2018-2030E 全球及中国材料科学研究开支 (单位: 十亿美元).....	37
图 57: 2018-2030E 全球自动化研发实验室市场 (单位: 十亿美元).....	37
图 58: 中国 AI4S 相关支持政策数量变化(2017-2025 年) (单位: 项).....	37

图 59: AI for Science 行业尚处于从萌芽到加速爆发的早期阶段, 成熟时间可能在 2030 年以后.....	38
图 60: 利用 AI for Science 数据基础设施持续生产 AI Ready 的数据.....	39
图 61: 商业模式大致可以划分出四象限.....	40
图 62: AlphaFold 3.....	41
表 1: 公司核心团队信息一览.....	7
表 2: 公司核心业务结构与商业模式.....	9
表 3: AI 药物研发合作客户 (部分).....	18
表 4: 十家主要人工智能药物发现公司的技术能力.....	23
表 5: 公司持续搭建新型药物 AI 平台, 抢占前沿领域制高点.....	30
表 6: 公司未来分子研发前景展望.....	33
表 7: 生物学领域进展引领科学智能落地前沿.....	35
表 8: 谷歌 DeepMind 领衔科学智能技术演进.....	41
表 9: 公司利润敏感性分析.....	42

晶泰控股：AI for Science 物质发现领域开路先锋，AI 制药行业领军者

晶泰控股成立于 2015 年，定位基于 AI+量子物理和机器人驱动的创新型研发平台，为制药及材料科学等产业的全球和国内公司提供药物及材料科学研究解决方案及服务。

创始团队基因决定公司定位，赋能新药研发等领域关键环节

创始人团队来自华人 MIT 物理学家，年轻且学术实力强劲，公司成立于美国。公司由温书豪、马健、赖力鹏联合创立，3 位创始人均为 MIT 博士后，团队具备深厚的量子物理、计算机科学与药物研发跨学科背景。

图 1：创始人团队来自 MIT



资料来源：公司官网，长江证券研究所

创始人团队的物理学背景决定了企业的差异化技术路径和战略定位。量子物理与 AI 的关系，本质上是 AI 实现搜索广度、建立研究增量空间，量子物理在此基础上建立深度、为 AI 保证泛化精度。技术路径上，公司以量子物理第一性原理为根基；战略定位上，成长于医药赛道而不囿于之，基于物理学视角，对分子发现与物质合成环节赋能，面向所有有此需求的领域（如材料、农业、消费品等）提供服务。

表 1：公司核心团队信息一览

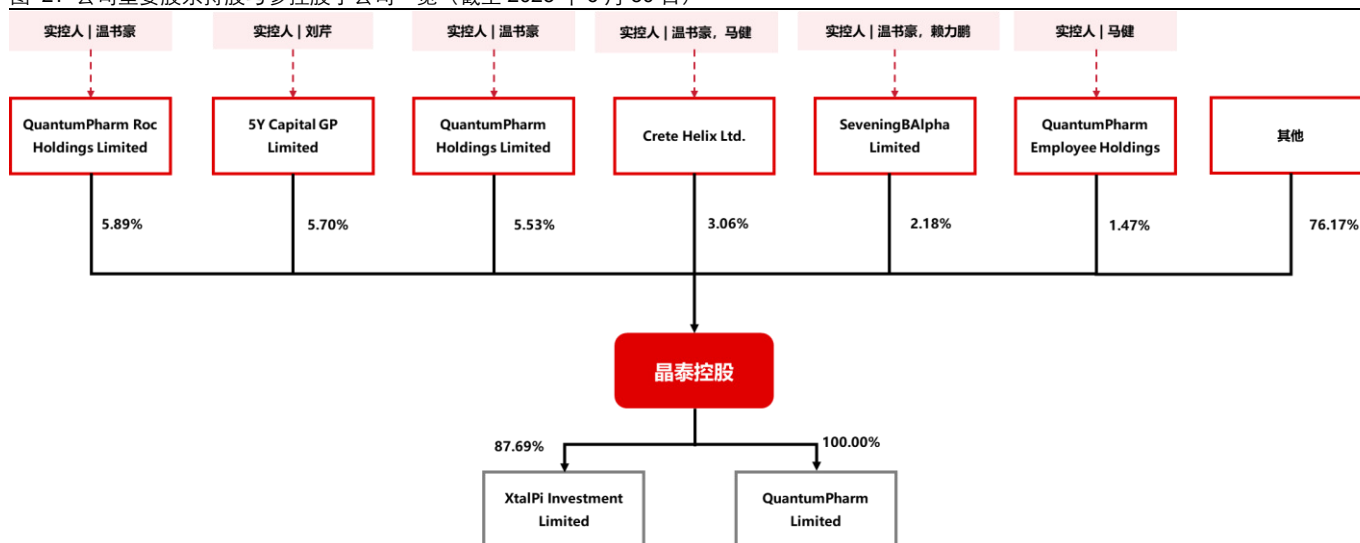
姓名	职务	学历	出生年份	个人简历
温书豪	董事长 创始人	博士	1982	主要负责监督公司的整体全球业务管理及资本市场策略。于创立集团之前，温博士于 2010 年 2 月至 2013 年 4 月在加州大学河滨分校担任博士后研究学者。彼于 2013 年 4 月至 2015 年 2 月在麻省理工学院担任博士后研究员。于 2005 年 6 月获中国科学技术大学物理化学硕士学位，2010 年 1 月获中国科学院大连化学物理研究所物理化学博士学位。温博士是一位知名量子物理学家，在计算物理及量子化学领域拥有逾 14 年的研究经验，并已发表论文 36 篇，引用次数超 2100 次。2020 年，温博士被评为《财富》中国 40 位 40 岁以下的商界精英之一。2023 年 4 月，温博士被评为深圳市十大杰出青年企业家之一。
马健	首席执行官 创始人	博士	1985	主要负责监督公司的整体营运及管理。于创立集团之前，2014 年 6 月在麻省理工学院完成博士后研究。马博士分别于 2007 年 6 月及 2012 年 6 月获得中国浙江大学物理学学士学位及博士学位。马博士已在国际领先的科学期刊上发表 30 篇论文。马博士于 2019 年被《麻省理工科技评论》评为 35 岁以下科技创新人才。马博士亦被评为深圳市地方级领军人才及深圳市海外高层次人才。
赖力鹏	首席创新官 创始人	博士	1983	主要负责监督公司的人工智能开发。于创立集团之前，于 2012 年 4 月至 2012 年 8 月，彼在 Epic Systems Corporation 担任软件开发人员。于 2012 年 9 月至 2014 年 9 月，赖博士在新加坡科技设计大学-麻省理工学院 (SUTD-MIT) 研究生奖学金

项目中担任博士后助理。赖博士于 2006 年 7 月获得中国北京大学物理与数学双学士学位。赖博士分别于 2007 年 12 月及 2012 年 3 月获得芝加哥大学物理学硕士学位及博士学位。赖博士曾在《物理评论快报》等权威期刊上发表多篇论文，并被评为深圳市海外高层次人才。

资料来源：IFind，长江证券研究所

股权结构呈现出“创始人主导+战略投资者赋能”的鲜明特征。截至 2025 年 6 月 30 日，创始人团队持股比例 23.37%，内部股东集中度高、相对稳定。2025 年 5 月 26 日，联合创始人团队自愿延长所持股票禁售期一年，禁售股份占公司已发行股本的 14.71%，体现其对公司长期发展的信心和责任感。

图 2：公司重要股东持股与参控股子公司一览（截至 2025 年 6 月 30 日）



资料来源：IFind，长江证券研究所

公司主营业务为药物发现解决方案和智能自动化解决方案¹（亦称 AI4S 智慧解决方案），赋能药研领域和其他领域的关键节点。全流程赋能、多环节盈利，卖铲模式构筑基本盘。公司主要收入来源包括合作企业交付的预付款、技术服务费、里程碑付款和销售分成，以及设备销售费。

公司业务划分：（1）药物发现解决方案。涵盖药物发现及研究全过程，就新型药物发现工作为各类生物技术与制药公司和学术机构提供模块独立解决方案或与之合作。

（2）AI for Science 智慧解决方案（原“智能自动化解决方案”）。2025 年以前，该业务主要包括固态研发服务及自动化化学合成等服务。固态研发服务涵盖计算服务（晶体结构和形态预测，以及结晶用共聚物和载体的筛选）、湿实验室实验服务（固态研发）及两者综合解决方案。

¹ 注：2025 年业绩公告中，基于业务升级，公司将原“智能化解决方案”业务更名为“AI for Science(AI4S) 智慧解决方案”，该业务包含“AI4S 智能机器人实验室”（原 XtalPi 解决方案）与“AI4S 智能服务”两大板块。由于数据、复盘受限等原因，本文复盘中我们仍主要以“智能化解决方案”称呼，两者不做特别区分。

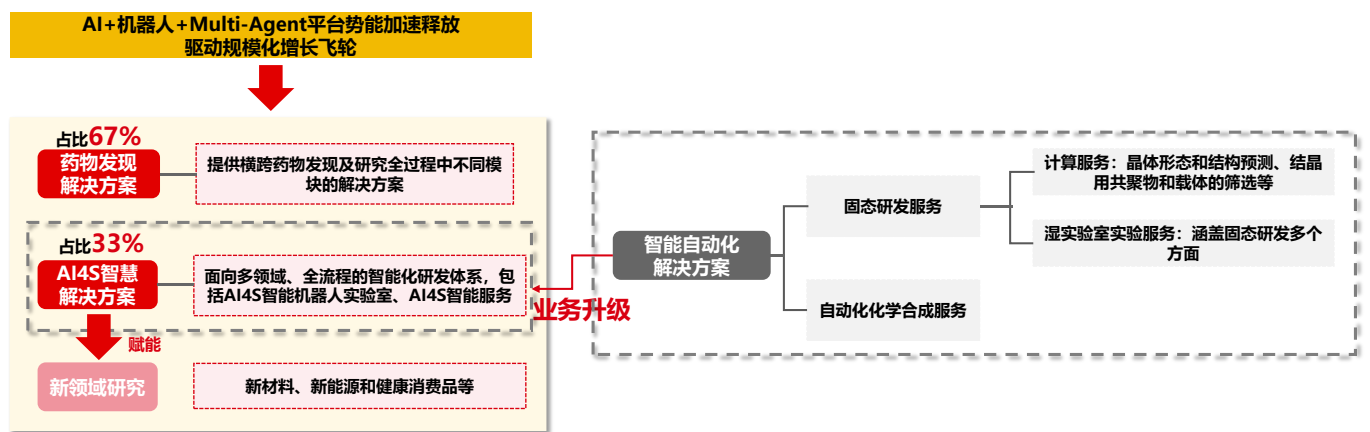
表 2: 公司核心业务结构与商业模式

业务	产品与服务内容	赋能行业/模式	收入模式	一般期限	IPO 前合约 累计数量	运作时间轴
药物发现 解决方案	覆盖药物发现及研究全过程 靶点验证>>苗头化合物识别>>先导化合物生成>>先导化合物优化>>临床前候选化合物推荐	小分子、抗体、多肽、ADC 及 PROTAC 等多种模式 与若干药物开发者合作，共同研究各种治疗靶点。	服务费模式，签约一年内确收 1) 预付款：合约价值的 15% 2) 里程碑付款：取决于候选药物开发阶段，通常于签署合约后 18 个月内确收 3) 特许权使用费：根据相关药物商业化收入水平，收取获得个数至低两位数的费用。	一次性，通常 1~3 年 (2~8 个里程碑)	150	【小分子】 开始研发:2017Q2 概念验证:2019Q1 商业化收入:2019Q4 【抗体】 开始研发:2021Q1 概念验证:2022Q2 商业化就绪:2022Q2 产生收入:2022Q4
智能自动化 解决方案	专注于人工智能及自动化赋能的新型药物及材料发现及研究	药物及材料科学研究 自动化化学合成服务	1) 预付款或首次付款; 2) 最终付款完成服务后的期末付款。 订阅模式，订阅期内可下达工单，根据全职人力工时费率进行月度或季度付款。	一次性，通常 6 个月内 经常性，通常 0.5~1 年	398 242	开始研发:2015Q4 概念验证:2016Q4 商业化就绪:2017Q1 产生收入:2017Q2 开始研发:2021Q2 概念验证:2021Q4 商业化收入:2021Q4

资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

业务升级：2025 年业绩公告中，基于业务升级，公司将原“智能化解决方案”业务更名为“AI for Science(AI4S)智慧解决方案”，从机器人与算法交付升级为面向多领域、全流程的智能化研发体系。(1) 机器人硬件+智能算法替代人工实验，提升客户研发效率；(2) 规模化落地中持续打磨机器人实验与 AI 能力，构建以 AI 模型、机器人实验室、智能 Agent 为核心的 AI4S 智能化平台，打通供应链、分子设计、合成、筛选与工艺优化全链条。

图 3: 公司原“智能化解决方案”业务升级，并更名为“AI for Science(AI4S)智慧解决方案”



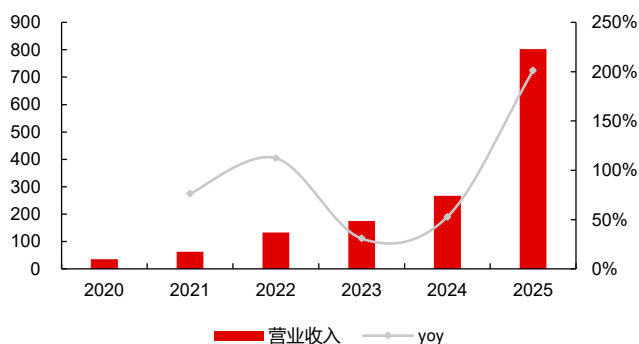
资料来源：公司年报，公司投资者演示材料，公司招股说明书，长江证券研究所（注：收入占比为截至 2025 年年报数据）

从概念验证到规模化收入，2025 年首次实现盈利

收入高增，首次实现年度盈利。2025 年公司全年实现营收 8.03 亿元，同比增长 201%，年内利润首次转正，达 1.35 亿元，同比增长 109%。2025 年公司收入跃升，增量达 5.4 亿元，直接原因主要得益于 2025 年 6 月底公司与美国初创药企 DoveTree 签署合作协议，并于年内确认第一阶段首付款 5100 万美元（折合人民币约 3.65 亿元），该订单收入贡献全年营收约 45%。若单独剥离该订单确收金额，剩余收入约为 4.4 亿元，同比增长约 65%，增速仍然亮眼。

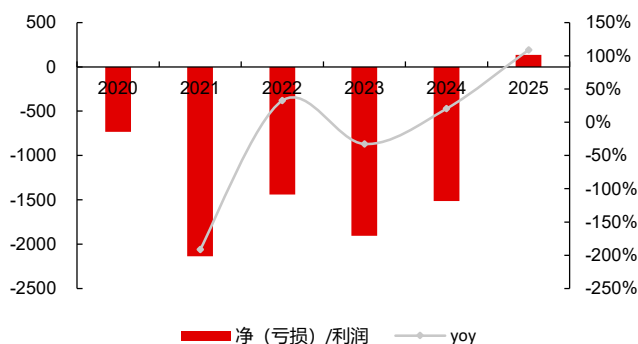
我们认为订单背后迎来业绩拐点的关键在于，当前公司在全球顶级药企的深度认可不断提升，我们看好公司以高研发效率进入高速增长通道，业务从制药向非药领域扩展打开空间，订单有望持续落地贡献增长动能。

图 4：公司营业收入（百万元）及其同比增速（%）



资料来源：iFinD，长江证券研究所

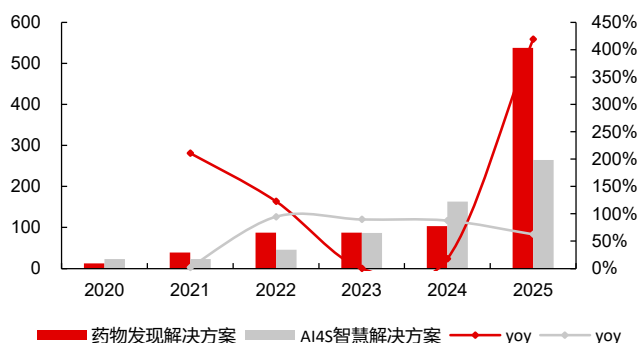
图 5：公司净利润（百万元）及其同比增速（%）



资料来源：iFinD，长江证券研究所

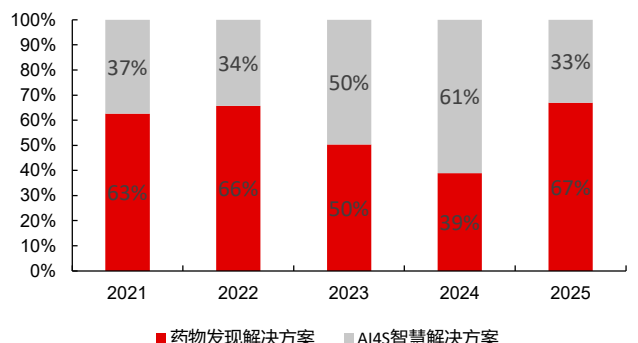
分业务看，2025 年公司药物发现解决方案实现营收 5.38 亿元，同比增长 419%；AI4S 智慧解决方案实现收入 2.65 亿元，同比增长 63%，得益于 DoveTree 订单第一阶段里程碑确收，药物发现解决方案贡献公司 67% 的收入，同比 2024 年收入占比跃升约 28%。

图 6：公司分业务收入（百万元）及其同比增速（%）



资料来源：iFinD，长江证券研究所

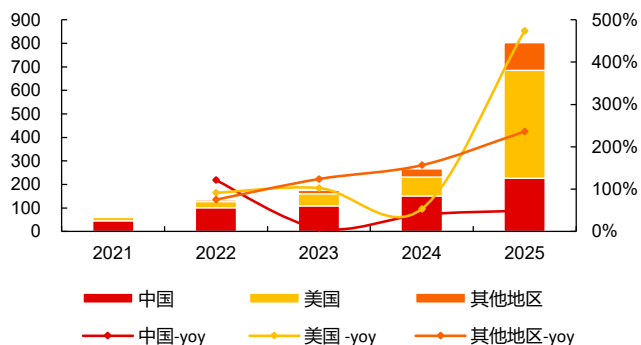
图 7：公司分业务收入占比（%）



资料来源：iFinD，长江证券研究所

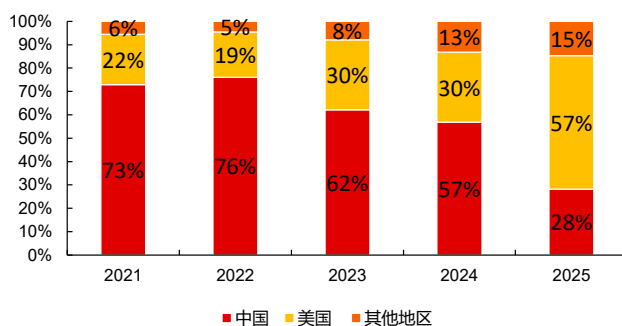
分地区看，2025 年公司收入主要由海外贡献，过往则由中国地区贡献主要收入。

图 8：2021 年以来公司分地区收入（百万元）及同比增速（%）



资料来源：公司招股说明书，公司年报，长江证券研究所

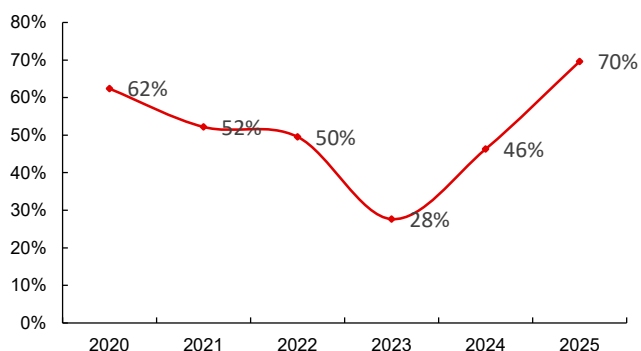
图 9：2021 年以来公司分地区收入占比（%）



资料来源：公司招股说明书，公司年报，长江证券研究所

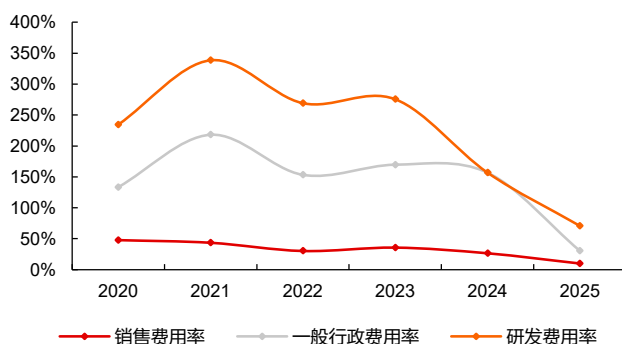
研发费用率迎来下降拐点，整体费用率呈大幅改善趋势。2024 年以来，公司整体费用率得到改善，我们认为得益于公司订单落地不断确收，叠加技术基座成熟、研发效率提高，平台能力被验证后，耗材与人员研发投入均带来规模优化。整体看，公司 2025 年销售、一般行政、研发费用率分别为 10.1%、30.3%、70.9%，同比去年-16.5/-126.5/86.1pct，公司各类费用有望迎来常态化投入周期。

图 10：2021 年以来公司毛利率（%）迎来改善拐点，持续向好



资料来源：公司招股说明书，公司年报，长江证券研究所

图 11：公司各项目费用率（%）进入常态化投入周期

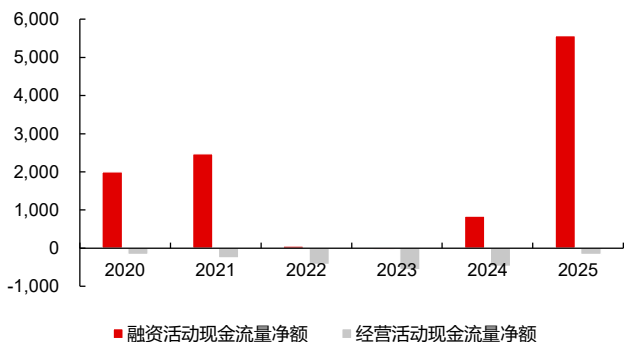


资料来源：公司招股说明书，公司年报，长江证券研究所

资金面储备充裕，现金流安全边际显著。截至 2025 年 12 月 31 日，集团现金余额高达 70.7 亿元，2025 年公司先后三次配售，1 月以 4.28 港元/股募资 11.3 亿港元，2 月以 6.10 港元/股募资 20.9 亿港元，8 月以 9.28 港元/股募资约 26 亿港元。我们认为公司具备跨周期的现金流保障，为持续研发投入与业务扩张提供了坚实的资金基础。

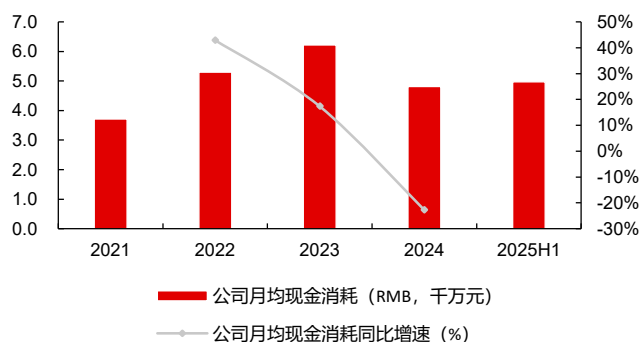
当前公司迈入规模化发展的全新增长阶段，迎来需求拐点，长期来看，若能伴随新签订单持续落地，公司业绩有望持续向好，释放较大弹性。

图 12: 公司融资和经营活动现金流量净额 (百万元)



资料来源: iFinD, 长江证券研究所

图 13: 公司月均现金消耗 (千万元) 改善明显



资料来源: 公司公告, 长江证券研究所

鉴往知来: 技术路径稀缺卡位, 从单点算法到构筑闭环

复盘公司十年发展史, 可以将公司发展历程大致分为几个阶段: (1) 2015-2017: 初创期, 明确技术路径与战略定位, 以晶型预测打开与大厂的合作, 初步奠定根基。(2) 2018-2022 年: 快速成长期, 技术深耕+多领域验证, 公司进入快速发展期, 数据飞轮初步形成, 自动化程度加深。(3) 2023 年-2024 年: 订单爆发期, 多项订单落地, 商业化进程与平台化打造均加速, 不断探寻新领域。(4) 2025 年至今: 加速进入商业兑现期。

图 14: 公司重大历史事件复盘



资料来源: 公司官网, 长江证券研究所

2015-2017 算法奠基: 明确差异化技术路径, “第一性原理+AI”

从晶型预测切入, 寻找适合计算物理的击球区

行业困境: 2015 年前后, 制药侧 IRR (研发投资回报率) 长期下行, 研发失败消耗大量研发成本。根据 Deloitte 报告, 2010~2015 年 12 家世界大型制药公司 IRR 在 5 年内下降约 6 个百分点, 原因是项目失败带来的研发成本增长速度>新药收入增长, 旧有研发模式与技术路径逐渐达到瓶颈, 且药物研发长周期、高投入、慢反馈的现象愈发严重。

图 15: Deloitte 跟踪的 12 家世界大型制药公司 IRR 在 5 年内下行约 6 个百分点



Note: 'Other' comprises licensing costs and tax rates.

资料来源: Deloitte, 长江证券研究所

“双十困境”（一款新药研发需要十年以上，投入研发资金高达十亿美元，而成功率只有 1%）亟待突破。

图 16: 一张图看懂药物研发“双十定律”：十年周期+十亿英镑=1 个药物

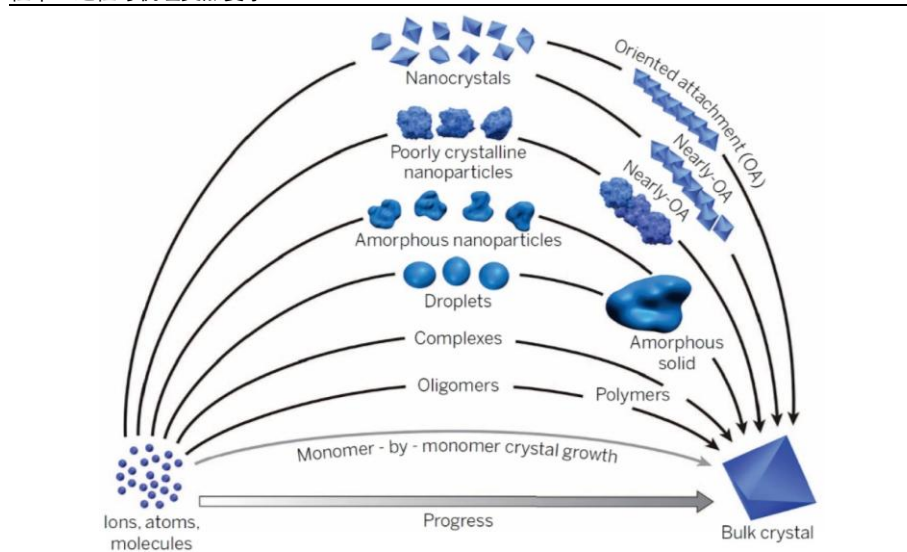


资料来源: 《Drug development: the journey of a medicine from lab to shelf》-The Pharmaceutical Journal (2021), 长江证券研究所

差异化切入点：从制药的细分领域看，晶型发现领域天然适合与 AI 相结合。获取结构稳定、性质优良的可开发晶型是药物研发的必要过程之一。由于晶体结构天然受量子力学规则高度约束，长期以来，结晶被认为是一门由研究者经验驱动的科学。相同的分子通过不同构象、不同的堆积方式，会形成不同性质的晶体，真实的药物结晶过程可能是由多种机理共同作用的结果。

换句话说，传统晶型发现是一个依赖“摇烧瓶”的运气和概率游戏，当前的理论方法难以预测真实的结晶过程。因此，传统晶型筛选是通过大量的筛选实验，来尽可能多得获得不同的固体形态。这样的研发模式过于依赖人工经验，会耗费大量的物料、时间和人力，且易造成经验性遗漏，而这样的场景天然与 AI 适配。

图 17: 下图为不同机理作用的结晶过程, 实际操作中, 各类参数会以不同的形式参与到结晶过程中、过程与机理更加复杂

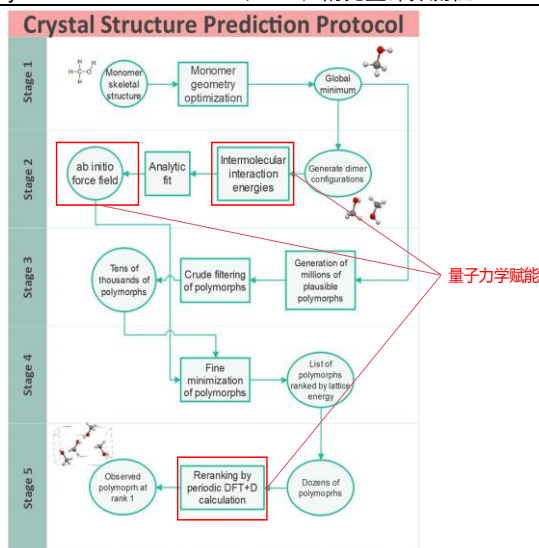


资料来源: 晶研谈, 长江证券研究所

公司避开生化黑盒, 利用自身优势切入受量子力学强约束的“晶型预测”。第一, 晶体结构天然受量子力学规则高度约束, 创始团队的物理学背景核心优势明显。第二, 晶型预测所需数据可实现自建。虽然最终仍需要实验数据校验和补充, 但理论上晶型预测模型的数据来源可以主要由量子力学模拟生成, 而不必高度依赖药企历史实验数据。

量子力学赋能下的 CSP 完整计算流程框架可以大致分为 5 个步骤, “量子力学计算→构建力场模型→大规模晶型搜索→再用量子力学精修”。公司初期通过晶体学规则构建多种晶体的堆积方式、以量子力学计算捕捉电子效应、训练出更准的经典力学力场, 再用 AI 物理模型处理并得到相关结论。由此, 公司成立初期就初步具备自建晶型预测相关数据的能力。总结来看, 传统的 AI 公司训练 workflow 是“数据→模型”, 而公司的模式可以简化为“物理→数据→模型”, 初步实现数据自生成。

图 18: 晶体结构预测 (Crystal Structure Prediction, CSP) 的完整计算流程



资料来源: 《Reliable crystal structure predictions from first principles》Rahul Nikhar, Krzysztof Szalewicz (2022), 长江证券研究所

辉瑞盲测 100%胜率，算法初步验证、开启商业化

公司早期产品为晶体结构预测平台 XtalCSP，大幅节约了样品量，同时缩短研发周期。

(1) 2~3 周内提供常见小分子的晶体结构预测结果（传统实验方法通常需要两个月），其每年可验证 70+种实验形态；(2) 自主研发、配备全局搜索算法，并覆盖所有理论稳定形态。XtalCSP 不依赖实验，可交叉验证实验并降低多晶体系的风险。(3) 相较于传统方法更快部署云计算资源、筛选晶体结构及精准、高效地确定其稳定性；(4) 可用于开展热力学稳定性评估、可推荐溶剂、可用于更复杂的分子体系。

与辉瑞打下合作根基，从晶型预测向药物研发进军。2016 年，公司在辉瑞举办的全球晶体结构盲测比赛中作为唯一一家 100%准确率的参赛选手斩获冠军，把 3 种药物、14 个结构以及其性质全都预测准确，且传统需要数月的研发过程压缩到了几天。基于此次技术胜利，2017 年公司与辉瑞正式在多晶筛选与选择等领域开始合作。2018 年双方签订合作协议，开始长达十年的战略合作伙伴关系，并开始专属化力场等领域进行合作

图 19：公司晶型预测流程与能力



资料来源：晶研谈，长江证券研究所

由此公司证明了自身逻辑可行性，商业化加速。本次盲测，公司证明了只要底层的物理方程（量子力学）设定正确，即使没有任何公开数据投喂（盲测），AI 模型在微观物理世界也不会产生幻觉。辉瑞的背书为公司后期引来各类顶级资本的加注，并为其后续撬动强生、礼来等全球 Top 药企打下了坚实的信任基座。

2018-2022 加速成长：拓宽业务外延，干湿一体构筑数据飞轮

复盘本阶段，我们发现公司战略重点与发展特点在于药物发现业务的场景持续拓展与其内部自动化硬件的落地，两者相互支撑赋能。

该阶段的特征是纵向深耕+横向拓展，公司用于实验室不断拓宽物质发现的能力边界、湿实验室协同构建自动化与数据飞轮²。

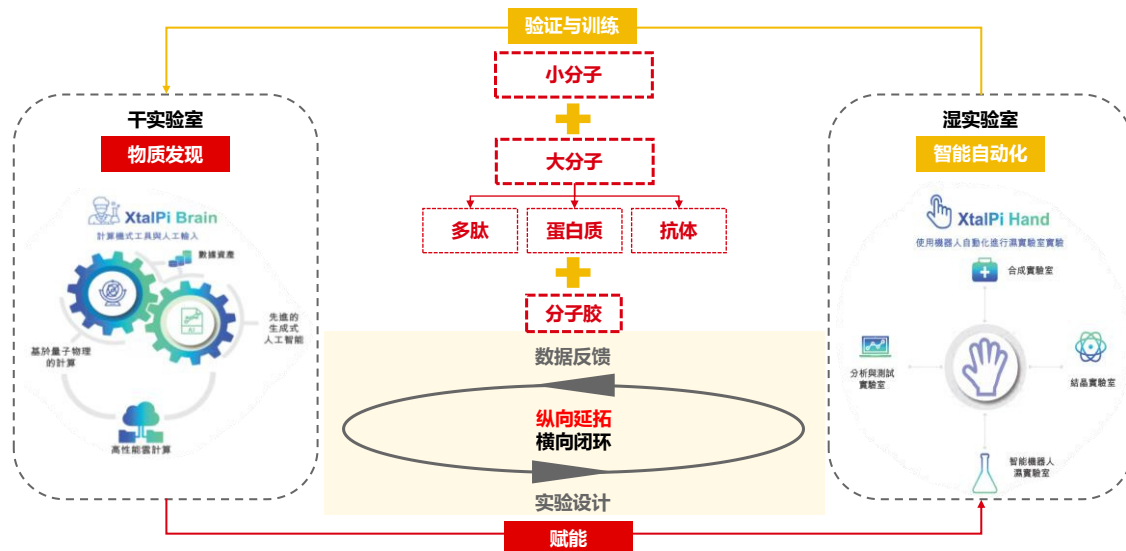
(1) 纵向丰富研发模态：从晶型预测起家拓展到小分子，再到蛋白质、抗体和多肽等大分子，物质发现模态不断丰富，形成更加完善的分子探索空间与产品矩阵；

(2) 横向拓展湿实验与自动化硬件：保证优质高通量数据不间断供给，不断提升湿实验室的自动化能力，形成能够对外交付的一整套解决方案与能力。

²干实验和湿实验是现代生物学、化学及药物研发中两种相辅相成的研究手段。干实验指使用计算机、算法、数学模型和公共数据库进行数据分析、仿真模拟的研究；湿实验指在实验室环境中进行液体操作、处理生物样本或化学试剂的传统实验，如细胞培养。

(3) 能力底座复用：此外，由于底层原理与技术相通，公司推出 XtalPi 研发解决方案 (AI4S 智慧解决方案的雏形)，向多种材料领域等其他高价值行业提供研发解决方案。

图 20：一张图看懂公司“纵横发展”战略



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所（注：干实验指不接触实体样本，计算机算法进行建模、拟合、预测等；湿实验指动手操作实体样本的传统实验）

一米宽、百米深：纵向挖掘药物模态，横向落地智能自动化能力，构造干湿闭环

药物发现方面，公司基于量子物理计算和 AI 技术打造的干实验室平台，专注于开发对特定疾病相关靶点具有药物活性功能的分子。涵盖小分子、多肽到分子胶等多种药物模式的药物发现全过程，包括分子设计、苗头化合物 (Hit) 生成、先导化合物 (Lead) 生成、临床前候选化合物 (PCC) 生成与优化等。干实验室持续挖掘新场景，赋能环节从 2018 年之前的晶型预测不断发展到为药企提供更加丰富的模态发现，打开新增长空间。

图 21：药物发现四阶段

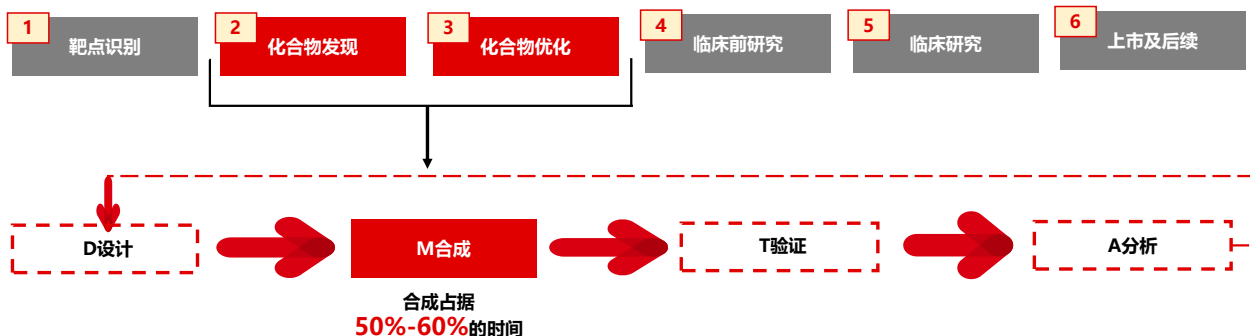


资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

智能自动化方面，2021 年是公司发展的重要转折点。意识到客户的实验验证需求以及自身对高通量、高质量数据反哺的需求，2018 年公司着手建立湿实验设施，切入

用户固态研发、合成与实验研究环节，2021 年进一步扩大湿实验室并增强自动化，以比人工作业更快的速度生成丰富的数据。公司干湿闭环布局早，先发构筑数据护城河，走在时代科研范式的前列。

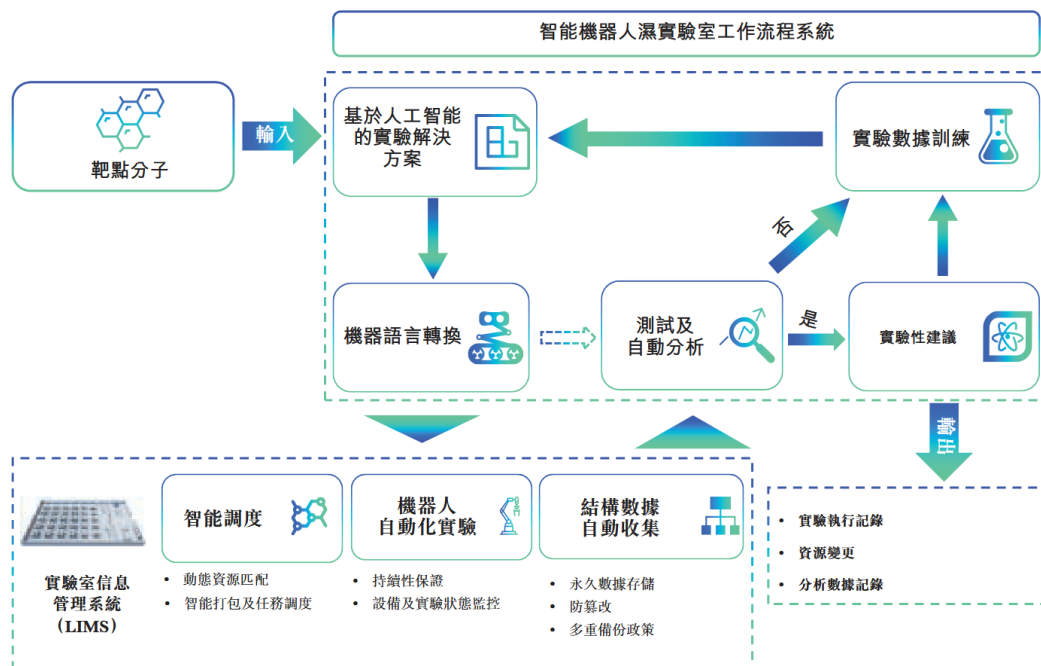
图 22：传统合成需要不断试错，占据 50~60%的研发时间，DMTA 循环亟需新范式提速



资料来源：《合成化学研究新范式》晶泰科技（2025），长江证券研究所

为什么说 2021 年是一个关键节点？此时公司开始研发并使用机器人进行高通量化学实验，同时积累的高质量数据又被用于验证 AI 设计的分子，并循环回溯训练 AI，形成一个完整的闭环生态系统，从而大幅提升 AI 迭代速度、准确性和实验效率。湿实验室解决的是行业“数据孤岛”和“验证难”的痛点。自己产生的数据训练自己的模型，形成“预测-验证-优化”的闭环，飞轮一旦转起，壁垒会越来越高。好比一家餐厅，不仅菜谱（算法）好，还拥有自己的顶级食材供应链（实验数据），做出的菜（候选分子）自然更有保障。

图 23：湿实验室工作流程



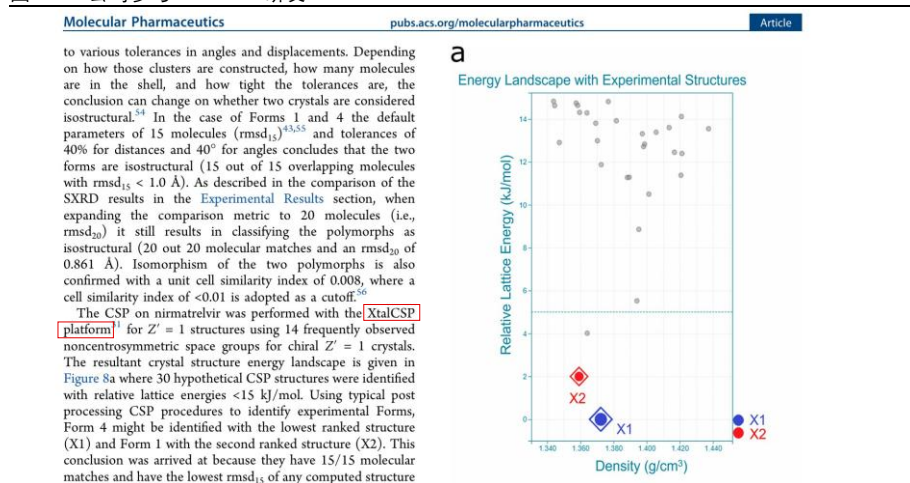
资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

干湿实验室的协同标志着数据飞轮雏形出现，药物发现效率提升，药企看到提效新希望、订单数量增长立竿见影；另一方面，为了进一步优化湿实验效率，公司开始研发自动化实验室，并完成自动化站原型机的开发及概念验证。

从 2021 年开始，公司能力验证与商业化明显加速：

(1) 2021 年赋能新冠新药，极大加速上市进程。2021 年全球第一款获 FDA 批准上市的口服固体新冠药物 Paxlovid 由辉瑞研发，其中公司与其展开关键合作，显著缩短研发时间，仅用六周确认候选药物的优势晶型。公司为复杂晶型结构的确认与优化做出证明，辉瑞设计的晶体结构是室温下最稳定的，适合大规模量产。中期临床研究显示在 18-65 岁高危人群中，轻型和普通型患者在确诊 3 天内服用 Paxlovid 可有效降低住院及死亡风险达 89%，具有良好治疗效果。该药在 2022 年销售额 189 亿美元。**世界曾卫生组织高度推荐 Paxlovid，并称其为“迄今为止治疗高危患者的最好选择”。**

图 24：公司参与 Paxlovid 研发



资料来源：《Tale of Two Polymorphs: Investigating the Structural Differences and Dynamic Relationship between Nirmatrelvir Solid Forms (Paxlovid)》Maryam Sadat Sadeghi 等 (2024)，长江证券研究所

(2) 2021 年加速构建起全球范围内的用户生态。公司与一批国际大药企在 2019-2021 年之间陆续开展相关合作，并不断拓宽合作内容，为公司筑起先发优势，同时自身数据与能力也得到持续打磨和增强，为后续持续合作打下基础。

表 3：AI 药物研发合作客户（部分）

公司类别	公司	人工智能合作伙伴	最早合作年份	合作交易要点
全球公司	辉瑞	XtalPi、Atomwise、Concerto HealthAI、IBM Watson、Insilico Medicine	2016 年	与 XtalPi 合作加快 Paxlovid 的开发，并于 2021 年在六周内成功确认药物晶体结构；与 Atomwise 合作发现三种靶蛋白的潜在候选药物
全球公司	拜耳	XtalPi、Huma AI、Exscientia、Blackford Analysis	2020 年	与 Exscientia 合作，为治疗心血管及肿瘤疾病的潜在候选药物确定及优化新型先导结构；于 2023 年收购 Blackford Analysis，推动放射学创新，并于临床工作流程中采用人工智能技术
全球公司	默沙东	XtalPi、Atomwise、Numerate、PathAI	2012 年	与 XtalPi 合作研究不同聚合物添加剂对盐酸二甲双胍晶型习性的影响；与 Numerate 合作，为一个未公开的心血管疾病靶点开发新药线索
全球公司	强生/Janssen	XtalPi、BenevolentAI、Celsius Therapeutics、IktoS	2016 年	与 XtalPi 合作，验证具有特定靶点定义特性的分子苗头化合物，并利用 XtalPi 的 ID4 平台缩短 DMTA 周期；与 BenevolentAI 合作，将测试中的小分子化合物用于药物发现
全球公司	礼来	XtalPi、Autowise、Verge Genomics、Nimbus	2021 年	与 Verge Genomics 合作，开展肌萎缩侧索硬化新疗法及治疗方法的研究；与 XtalPi 合作，利用 XtalPi 的集成人工智能能力及机器人平台识别及开发小分子同类首创疗法

全球公司	吉利德	Insitro	2019年	与 Insitro 合作，用化学方法开发最多五种非酒精性脂肪肝的拟议疗法
中国公司	海思科医药	XtalPi	2021年	与 XtalPi 合作，将其人工智能能力及新型“实验+计算”方法应用于固态研究，进一步加快其创新药物研发项目的突破及进展
中国公司	翰森	XtalPi、望石智慧、深势科技	2019年	与望石智慧合作，设计及发现肿瘤及中枢神经系统等多个治疗领域的潜在候选药物
中国公司	恒瑞	XtalPi、Iktos	2021年	与 Iktos 合作，利用其基于人工智能的从头新药设计软件加速小分子药物的发现并优化先导化合物
中国公司	上海医药	XtalPi、阿尔法分子科技	2021年	与阿尔法分子科技合作，利用其智能药物开发平台精确预测靶蛋白结构，进行同类首创 GPCR 药物的研发
中国公司	恩华药业	深势科技	2022年	与深势科技合作，将其中枢神经系统（CNS）药物研发经验与深势科技的人工智能药物发现平台相结合，促进其 CNS 药物的研发

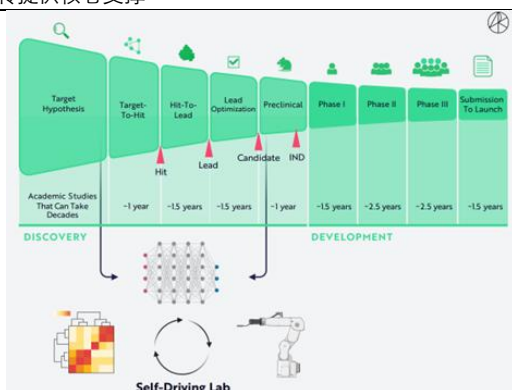
资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

2023-2024 业务加速：人机协作与模型继续优化，数据驱动进入业务多点爆发

该阶段，公司进一步明确重心，提出“自主实验室”（Self-driving lab）概念，干湿实验自主化与闭环进一步提升。该阶段公司开始开发仿生灵巧手等设备，解决粉末分装等精细操作难题，实现实验流程的柔性化与自主决策。区别于传统自动化（如流水线式标准化操作），自主化强调 AI 驱动的动态路径规划与实时反馈调整，以适应复杂多变的化学研究场景。

2025 年初，《Nature》期刊将“Self-driving Laboratories（自驱动实验室）”列为 2025 年最值得关注的全球七大突破性技术之一。自动化实验室与计算机生成式探索相结合的范式，正属于目前最领先的 Level 5，底层工作流循环往往遵循“设计（Design）-构造（Build）-测试（Test）-总结（Learn）”。在这个场景中：（1）AI 算法负责假设生成、实验设计和数据分析，并进行迭代循环；（2）机器人负责执行这些实验，从物料准备到数据采集，实现全过程的自动化。

图 25：自主实验室是连接虚拟计算与实验的核心枢纽，为干湿闭环高速运转提供核心支撑



资料来源：《Big Ideas 2025》ARK Invest（2025），长江证券研究所

图 26：基于硬件与软件类别的自动化实验室级别分类



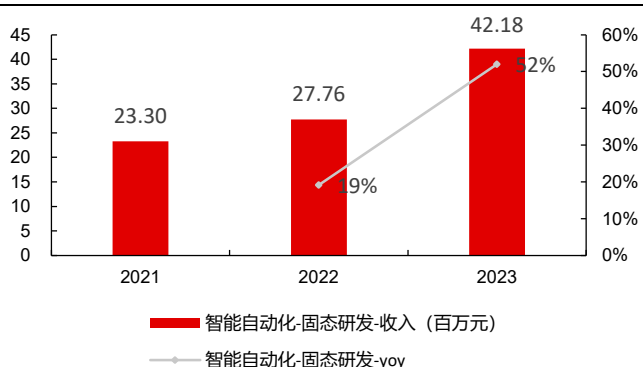
资料来源：《Self-Driving Laboratories for Chemistry and Materials Science》Gary Tom 等（2024），长江证券研究所

传统的自动化合成平台在实验室中已存在数十年，但更注重高通量的特定任务，而非自动化和整合整个实验流程。如今大多数实验室自动化仍需大量人工干预，以便在仪器间转移材料、排查故障并解读结果，才能开始下一个实验步骤，这样可以压缩单个任务，而不压缩端到端的周期。

闭环自动化实验的引入，标志着研发范式从线性验证向高频迭代系统升级。通过自动化实验平台与 AI 调度系统，构建“设计—实验—数据—模型更新”的闭环，使实验由被动验证工具转变为主动数据生成引擎。一方面显著提升验证吞吐与迭代速度，另一方面实现高质量数据的持续沉淀，推动模型与实验协同进化，成为 AI 制药体系中决定效率上限的关键基础设施。

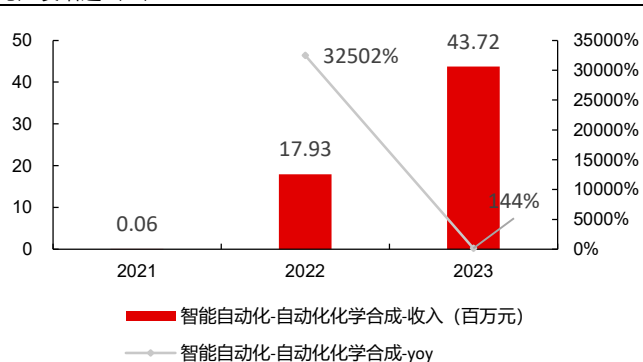
从该阶段开始，智能自动化订单开始持续落地，营收加速释放。智能自主实验平台是研究合成和固体形态的基础，同时提升研发效率、质量、安全和多样性。从业务面看，基于智能实验室，公司由此打开两项新业务增长点：（1）固态研发服务；（2）自动化化学合成服务。两项业务在 2023 年由大订单驱动放量，公司智能自动化营收不断提高。

图 27：2021-2023 年公司智能自动化-固态研发业务收入（百万元）及增速（%）



资料来源：公司年报，长江证券研究所

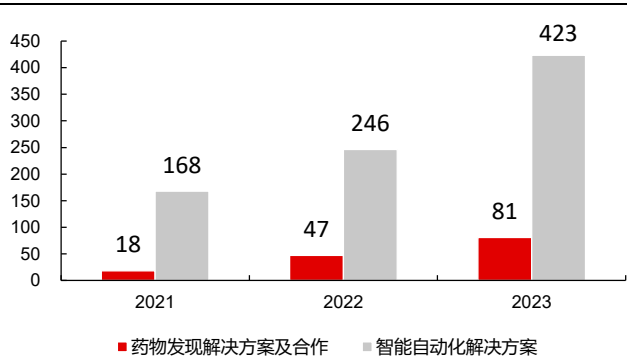
图 28：2021-2023 年公司智能自动化-自动化化学合成业务收入（百万元）及增速（%）



资料来源：公司年报，长江证券研究所

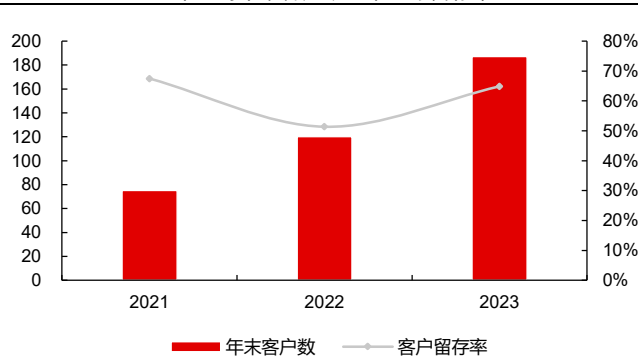
客户粘性验证 AI 能力。公司积攒了广泛的生态客户，MNC 一旦接入高通量系统便产生极高粘性。2021 年后，公司智能自动化解决方案亦与迎来项目与客户数的高峰，留存率接近 70%证实公司交付能力与用户需求粘性极高。

图 29：2021-2023 年公司项目数量（个）



资料来源：公司招股书，长江证券研究所

图 30：2021-2023 年公司年末客户数（个）与留存率（%）



资料来源：公司招股书，长江证券研究所

总结来看，2023 年公司开始进入爆发期：开发了用于蛋白质预测的 ProtenGPT；与礼来达成了高达 2.5 亿美元的 AI 小分子药物发现合作；业务边界也从药研拓展至新能源、新材料等领域。同时于 2024 年港交所上市。

2025 年以来：加速进入商业兑现，全球视野下的技术井喷与生态构建

2025 公司加速进入商业兑现期，迎来业务升级。

AI+机器人跑通干湿实验 DMTA 闭环，AI4S 智能化平台初具雏形

速率上看，AI+机器人加速跑通 DMTA (设计—合成—检测—分析)闭环。(1) 效率方面，平台拥有 30+功能模块，可灵活组合及定制开发，实现高通量精准实验，7×24 小时执行实验并记录数据，协助乃至替代人工实验，人效提升 5 倍、数据收集能力提升 40 倍。

(2) 质量方面，人机结合的自动化合成场景下，实验可复现率大于 95%。(3) 安全方面，平台可避免实验人员直接接触危险反应。(4) 多样性方面，平台可覆盖 80%常见反应类型，可控制反应温度从 0 到 150 摄氏度的变化，兼容固体和液体的精准计量，也可进行无水无氧等操作。

图 31：公司 AI+机器人跑通干湿实验 DMTA 闭环与效率提升



资料来源：晶泰科技官网，长江证券研究所

图 32：公司 AI+机器人实验室实景图



资料来源：公司官网，长江证券研究所

能力上看，公司通过机器人实验室积累了包含大量负反应数据在内的全维度实验数据，打破传统研发仅依赖正样本的瓶颈，模型在正负样本预测上均展现出超越人类专家的性能。

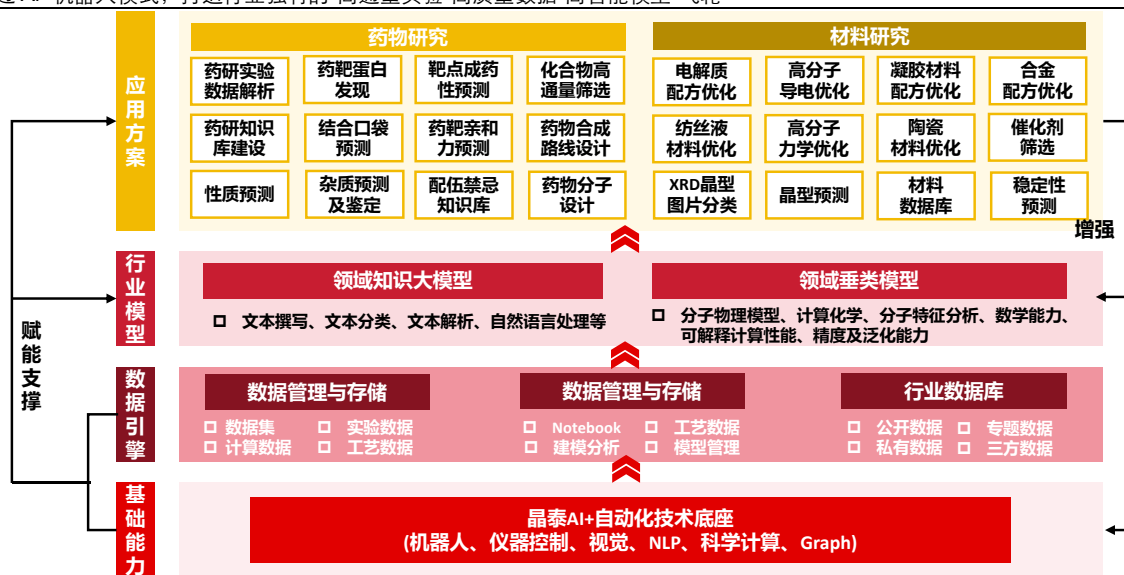
图 33: AI 模型预测能力优于专家, 引领范式变革

	Suzuki Coupling 137 位化学家 vs AI		SNAr Reactions 131 位化学家 vs AI		Sonogashira Coupling 177 位化学家 vs AI	
正样本 预测结果	AI 模型	89%	AI 模型	81%	AI 模型	86%
	第一组化学家	84%	第一组化学家	81%	第一组化学家	60%
	第二组化学家	78%	第二组化学家	73%	第二组化学家	57%
负样本 预测结果	AI 模型	81%	AI 模型	89%	AI 模型	86%
	第一组化学家	39%	第一组化学家	49%	第一组化学家	60%
	第二组化学家	48%	第二组化学家	38%	第二组化学家	51%

资料来源: 晶泰控股, 长江证券研究所

进一步深层分析, 公司的 AI+机器人模式, 本质是先行打造“高通量实验-高质量数据-高智能模型”飞轮, 让公司的技术底座的产品矩阵通过高质量数据不断完善、补全。公司形成的高质量数据驱动的垂域 AI4S 模型或将成为行业的新颠覆性力量。

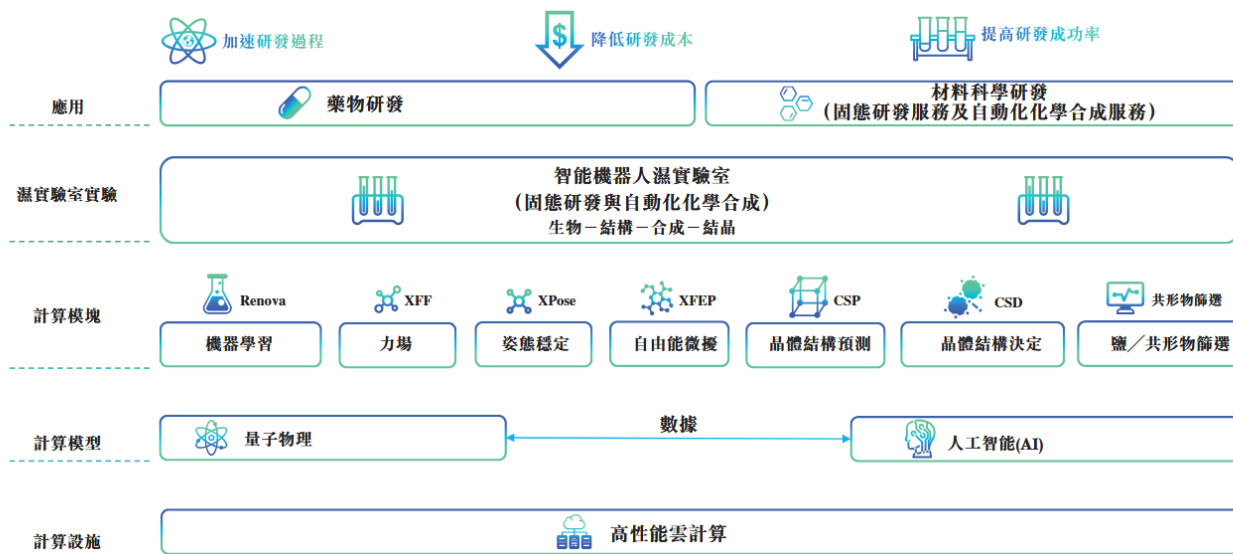
图 34: 通过 AI+机器人模式, 打造行业独有的“高通量实验-高质量数据-高智能模型”飞轮



资料来源: 沃根 AI, 头豹研究院, 长江证券研究所

干湿实验闭环背后的逻辑是 AI+机器人重塑科研范式。技术路径上, 公司的智能自主实验平台以 AI 为大脑, 完成反应预测与实验设计, 并以机器人为手, 完成化学执行和数据治理。平台突破加样、移液、视觉判断等化学自动化核心技术, 为客户定制化解决方案, 同时 7×24 小时高效完成实验数据收集。

图 35：公司综合技术平台工作流程



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

核心能力：“量子物理+AI+机器人”全栈式技术闭环，实现精准卡位

通过复盘，我们基本能归纳出公司的核心竞争能力——公司能吸引礼来、拿下近 60 亿美元大单，靠的不是单一优势，而是一个环环相扣的“量子物理+AI+机器人”全栈式技术闭环。

(1) 模型精准度 (物理驱动)：公司以底层量子物理算法为核心，分子结构预测的源头更精准，形成独特技术壁垒。**(2) 解决方案效率 (AI 赋能)：**对数以十亿计的分子进行快速初筛，效率相比传统方法大幅提升，切中药企希望降本提速的核心痛点，商业价值明确，是其吸引合作的核心能力之一。**(3) 场景落地与数据闭环 (机器人验证)：**公司依托自有智能自动化实验室快速完成 AI 预测分子的合成与测试。产生的高质量数据又能回头训练 AI 模型，形成 DMAT 自我强化飞轮。公司通过更准的算法、更快的筛选、更实的验证，构建了一个目前看来难以被简单复制的技术体系。在 AI 制药的高景气赛道中实现差异化的有利卡位。

当前公司是行业内极少数同时拥有量子物理算法、湿实验室验证以及自动化实验室能力的企业，凭借全维度的技术闭环与充沛的资金，在药物研发效率和综合竞争实力上有望持续提升。

表 4：十家主要人工智能药物发现公司的技术能力

公司	地点	背景	AI 应用	量子物理能力	湿实验室能力	自动化实验室能力	筹集资金 (百万美元) (1)
XtalPi	中国	本公司	药物及材料科学研究、固态研发、自动化实验室	✓	✓	✓	732
公司 F	香港	一家总部位于香港、临床阶段的端到端生成式人工智能赋能的生物科技有限公司	靶点发现、药物设计	✓	✓	✓	401
公司 G	英国	一家总部位于英国、于纳斯达克上市的制药技术公司，利用患者至上的人工智能更快地发现及设计出更好的药物	靶点发现、化合物筛选	✓	×	✓	374
公司 D	美国	一家总部位于美国、于纳斯达克上市的临床阶段生物科技公司，通过整合生物	靶点发现、化合物筛选	×	✓	✓	465

		学、化学、自动化、数据科学及工程学领域的技术创新，解码生物学					
公司 I	英国	一家总部位于英国、于阿姆斯特丹证券交易所上市的人工智能赋能的新型药物发现公司	靶点发现、化合物筛选、药物重定位	✓	×	×	292
公司 A	美国	一家总部位于美国的数据驱动型药物发现及开发公司，利用机器学习及高通量生物学改造药物研发	靶点发现、化合物筛选、临床试验设计	×	×	×	643
公司 B	美国	一家总部位于美国、于纳斯达克上市的临床阶段精准医药公司	靶点调制假设、苗头化合物发现及先导化合物生成、先导化合物优化	×	×	×	550
公司 C	加拿大	一家总部位于加拿大、于纳斯达克上市的抗体药物发现公司	靶点发现、化合物筛选、化合物合成	×	×	×	517
公司 E	美国	一家总部位于美国的生物科技公司，利用高质量的患者数据及强大的人工智能技术改造药物研发	靶点发现、药物设计	×	×	×	460
公司 H	美国	一家总部位于美国，于纳斯达克上市的临床阶段精准肿瘤学公司	靶点发现、药物重定向	×	×	×	300

资料来源：公司招股说明书，弗若斯特沙利文，长江证券研究所（注：(1) 指截至 2023 年 12 月 31 日筹集的首次公开发售前资金，根据公共领域的取整数数字计算得出。）

相比传统人工方法，AI+量子物理方法极大提高新药发现的成功率、速度、规模和新颖性。

图 36：相比传统人工方法，AI+量子物理方法极大提高新药发现的成功率、速度、规模和新颖性

对比要素	传统人工方法	基于AI的方法	基于量子物理的方法	公司能力（量子物理+AI）
成功率	苗头化合物到临床前候选化合物总体成功率为 51%	苗头化合物到临床前候选化合物总体成功率估计 > 70%	能够预测分子系统的关键特性，因而能提高药物发现的成功率。	苗头化合物到临床前候选化合物成功率由 8.5%增至36% 小分子结合构象预测精度高达约 56%(1.0埃) （最先进商业方案约为30%）
速度	苗头化合物至先导化合物 1) 发现过程约 2.5年 ，新候选疗法发现周期一般 4~6年 2) 涉及约 5000种 分子的合成和测试 3) 湿实验大约需要 1年 评估晶体形态状况	苗头化合物至先导化合物 1) 发现过程约 10个月 ，新候选疗法发现周期一般 2~3年 ，比传统方法缩短30%~50%，降低约25%~50%总成本 2) 仅涉及合成 几百种 分子 3) 湿实验测试周期与消耗资源均减少	自始生成计算机式数据以训练AI模型，可识别、优先考虑及优化有潜力的候选药物，从而加速药物发现进程及降低整体研发成本。	苗头化合物至先导化合物 1) 发现过程 2个月内 2) 2~3周 内提供普通小分子的晶体结构预测结果 3) 标准化和自动化湿实验室预计加快药物研发的化学合成和实验进程
规模	湿实验室实验合成和分析 不超过几千个 分子	筛选出数十亿种潜在分子和化合物，并根据药物特性对其进行高效排序	自始生成大规模数据资产，将对关键分子特性的计算扩展到超过十亿个分子的超大构想集。更大范围内高效地发现创新型候选药物。	透过AI采样进一步拓宽潜在治疗起点漏斗，以虚拟方式 创建数千万个 分子。
新颖性	据估计，在目前已知的约4,000个疾病相关靶点中，目前的治疗药物库仅作用于其中约四分之一的靶点。药物研发的整体新颖性受限。	更大的新型药物及材料的化学空间，极大地促进创新。	能够准确地描述分子系统的相互作用，在没有任何训练集的情下从头设计潜在新靶点。	截至2023年12月31日，约有39个针对各种治疗领域的进行中药物发现项目，其中一些项目旨在解决新型靶点问题，或确定新的作用机制及或新的化学骨架。

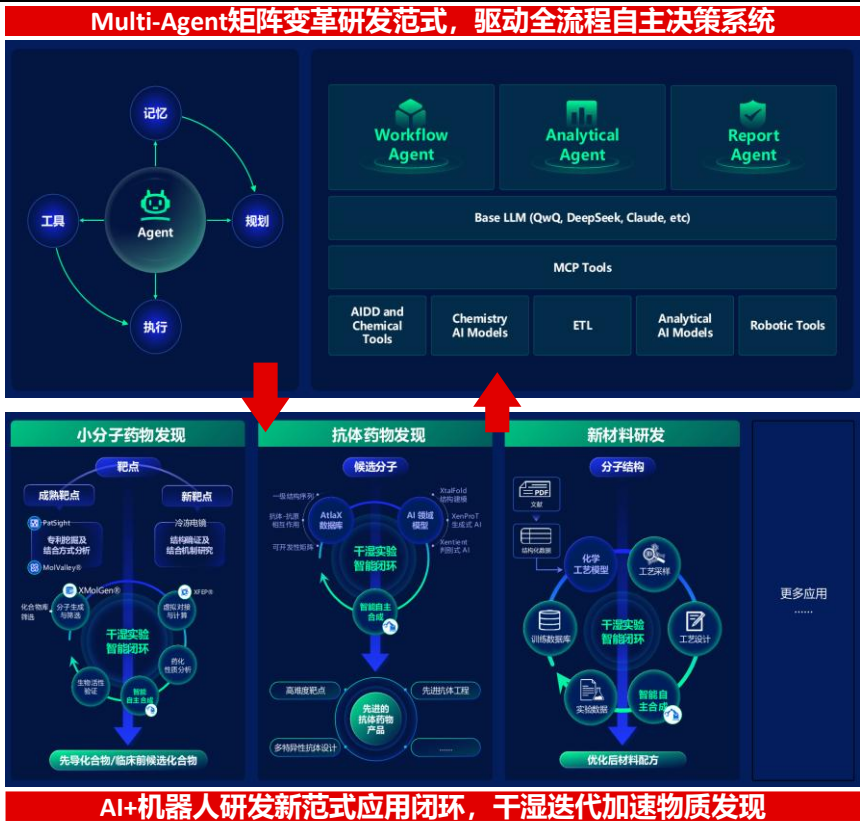
资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

高质量数据是核心底层资产，支撑闭环

高质量、规模化、专用化数据是 AI 模型进化的核心关键，公司不断夯实生物数据资产壁垒，为飞轮运转提供支撑：(1) 多模数据智能挖掘底座：多模态 Layout 模型复杂文档识别准确率 95.3%；研发领域专用 32B 大模型性能超越 GPT-4o，实现“数据不出域”与成本双优；OCSR 光学化学结构识别模型达行业 SOTA 标准。(2) 化学反应高质量数据平台：搭建数据挖掘 Agent，实现反应步骤数据精细化提取，识别精确率>95%；已结构化处理数十万篇专利，为 AI 模型与机器人实验提供高质量训练支撑。(3) 大分子高质量数据平台：抗体数据挖掘 Agent，普通及 VHH 抗体提取精确率>99%，亲和力识别精确率 98%；构建大规模氨基酸序列的抗体专利数据库。

以数据驱动的研发创新能力获国家级认可。2025 年由国家数据局主办的“数据要素 X”大赛全国总决赛中，公司凭“AI+机器人技术赋能药物研发数据要素构建及应用”项目，从全国超过 2.2 万个参赛项目中脱颖而出，获全国总决赛一等奖。

图 37：公司的“干湿”闭环平台工作与 Multi Agent



资料来源：晶泰控股，长江证券研究所

生态客户绑定不断加深，多条管线取得进展

2025 年公司商业化进展与管线进展加速：1)赋能及孵化的 5+款全球 first-in-class/best-in-class 创新管线进入临床阶段或 IND-enabling 阶段；2)多项重磅合作落地，累计合作金额高达数百亿人民币，在 AI 应用领域稳居行业领先地位；3)2025 年创收客户数同比增长 62%；4)累积开发超 200+行业 AI 模型，2025 年成功拓展新型药物创新平台领域，进一步巩固全栈能力壁垒；5)智能体每周独立自主推进上万次化合物实验，实现研发闭环；6)成功拓展新材料及消费健康等新领域。

图 38: 2025 年重要商业化/管线进展

业务	类型	合作方/赋能方	目前进展	领域
商业化进展		DoveTree	正在共同推进管线，进展顺利，双方合作已进入深入执行阶段，并共同搭建下一代复杂分子平台，针对多个难成药靶点进行药物研发	生物医药
		礼来 (Eli Lilly)	大分子项目及多靶点平台授权合作推进顺利，3.45亿美元的多靶点战略合作及平台授权协议	生物医药
		甘李药业	A驱动的多肽创新药全球战略合作已达成，合作聚焦代谢疾病领域	生物医药
		国内某生物科技公司	围绕新型放射性靶向药物开展深度合作，利用 PepiX™ 设计多肽前体，共同开发新一代多肽核素药物	生物医药
		国内某药物递送公司	围绕口服多肽药物开发开展合作，结合AI分子设计+递送技术，提升口服多肽利用度与稳定性	生物医药
药物发现		希格生科	AI+类器官全球首款弥漫性胃癌靶向药物SIGX1094临床期推进顺利，预计2026年三季度进入II期；SIGX2649临床前研究完成，拟提交IND	生物医药
		莱芒生物	赋能AI+代谢重编程技术平台，代谢增强型CD19 CAR-T及TIL等管线取得临床突破，部分项目已获IND批件	生物医药
		某领先生物制药公司	双方三项新药合作中，2项已进入IND-enabling阶段，另1项预计2026年上半年启动	生物医药
		某领先生物制药公司 (免疫代谢方向)	原发性高草酸尿症项目已获FDA孤儿药和儿科罕见病资格；IBD口服小分子抑制剂推进至IND-enabling	生物医药
		剂泰科技	NanoForge和AiTEM等平台持续推进，MTS-105获得FDA孤儿药资格，MTS-004已达到III期主要终点	生物医药
		智擎生技	新一代PRMT5抑制剂PEP08已获澳大利亚和中国台湾地区临床批准，达成里程碑，并进入一期临床	生物医药
		ReviR溪砾科技	赋能罕见病新药研发里程碑跨越，RTX-117已获中美临床批件并取得FDA孤儿药资格，2026年3月启动期临床	生物医药
AHS智能机器人实验室	商业化进展	巴斯夫 (BASF)	交付配方稳定性测试智能工作站	材料/化工
		总部位于印第安纳波利斯的全球领先制药公司	交付 NeoDispenser 智能微量粉末分装系统和智能化化合物管理系统	生物医药
		国内某央企	签署千万元级合作，提供新型催化材料研发智能化高通量平台	材料/化工
		罗氏 (Roche)	交付智能化化合物仓储系统	生物医药
		赫力昂 (Haleon)	交付智能样品前处理系统	消费健康
AHS智能服务	商业化进展	JW Pharmaceutical	提供智能自主药物合成和工艺研发系统	生物医药
		良渚实验室	交付从合成到检测的全流程智能生物材料研发平台	生物材料
		多家大型制药企业	整体服务复购率超过75%；核心技术模型落地多个客户案例，获得高度认可	生物医药

资料来源：公司公告，长江证券研究所

产品能力：AI+机器人+Multi-Agent 深度融合，飞轮效应重塑研发范式

AI 基座能力持续夯实，Multi-Agent 矩阵重塑研发范式

公司改变传统研发范式，且新一套范式打磨成熟，即：AI 模型预测—机器人执行湿实验—数据反哺 AI—Multi-Agent 调度。

图 39: AI 模型预测—机器人执行湿实验—数据反哺 AI-Multi-Agent 调度



资料来源：晶泰控股，长江证券研究所

深化产业合作,持续升级AI药物发现模型。公司开发多个可进行自主决策的Multi Agent,提升实验效率和准确性。公司已有八个自主开发的AI基本生成模型,在此基础上构建

超过 200 个 AI 模型，可在不同场景下定制特定参数，以满足客户多样化和不断发展的需求。

图 40：公司模型矩阵夯实“专家大脑”，不断拓展新型药物

核心平台 (部分)	应用领域	功能	时间	所有权
基于AI算法				
ID4Inno 包括ID4Idea和ID4Gibbs	药物发现-小分子	D4Inno是一个实现闭环的AI药物研发计算平台，能够实现药物与靶标相互作用的高精度预测。ID4Idea用于小分子的生成、选择和评估，拥有超过200个人工智能模型。ID4Gibbs是基于物理建模和第一性原理计算的高精度量子物理模型。	2018年	独立开发专有
XupremAb 包括XtalFold和XpeedPlay	药物发现-大分子-抗体	涵盖抗体药物发现流程中不同的重要功能。XtalFold是抗原-抗体复合物结构预测算法，具有前所未有的可能性和准确性。XpeedPlay是人工智能赋能的噬菌体展示平台，能够超高速生成苗头抗体。	2021年	独立开发专有
ProteinGPT	药物发现-大分子-蛋白质	一种生成式算法药物和新材料设计工具，可应用于：(i)根据特定的靶蛋白序列生成结合蛋白；(ii)根据特定的预设标准生成抗体库；(iii)根据特定的改进要求，优化某些抗体。ProteinGPT通过将大语言模型(LLM)纳入其算法进行了升级。	2022年	独立开发专有
PepiX	药物发现-大分子-多肽	整合精准AI设计、快速的自动化合成以及高通量湿实验建库和筛选三大核心优势，PepiX™可提供空间广、周期快、精度高且满足临床需求的多肽分子研发解决方案。	2025年	独立开发专有
Xglue	药物发现-小分子-分子胶	已成功孵化若干管线，覆盖自免、炎症、肿瘤和中枢神经系统等多个疾病领域，靶点的选择经过临床验证，且分子胶可覆盖传统的“不可成药靶点”，具有全球首创性。	2025年	独立开发专有
基于量子物理计算				
XtalCSP	固态研发-晶型预测	晶体结构预测平台，配备全局搜索算法，涵盖所有理论稳定形态。XtalCSP是不依赖实验的平台，可交叉验证实验并降低多晶体系的风险	2015年	独立开发专有
XFF	分子力场	用于设计参数全局优化的新一代通用分子力场	2018年	与辉瑞联合开发共同拥有
XFEP	药物-靶点亲和力预测	高精度及高通量的结合亲和力预测平台，旨在大规模评估候选分子与其生物靶点之间的结合亲和力	2018年	独立开发专有
XPose	自由能结合模式预测	能够结合不同采样及评估算法的优势，更精准预测小分子靶点-配体的结合构象	2021年	独立开发专有
Xtalgazer	固态研发-结晶研发	由四个平台构成：1) XtalCSP, 2) 结晶策略推荐平台, 3) 自动化固态化学筛选平台；4) MicroED微晶电子衍射平台 定位新一代药物结晶研发平台，按照药物开发流程，可以提供包括固态化学计算、药物结晶实验研究和晶体结构解析的整体解决方案，全球仅有的同时覆盖上述领域的高水平平台	2024年	独立开发专有
机器人自动化实验室				
ChemPlus	固态研发&自动化化学合成	ChemPlus能灵活、高通量地处理各种固体样品，可实现智能参数调整，支持全过程数据追踪	2022年	独立开发专有
Orbit	自动化化学合成	面向实验室场景全栈自研的数字化平台，提供了完整的开发框架与技术栈支持。已针对化学细分场景定制开发了 30 余款“Chemist小工具”，用于解决合成研发中的数据交互与流转的问题；同时，可将内部研发的十余项创新成果集成到该平台，直接赋能合成研发。	2026年	独立开发专有

资料来源：公司招股说明书，晶泰智药，晶研谈，晶泰科技服务号，长江证券研究所

药物发现：平台价值持续释放、加速抢占前沿药物模式制高点

小分子药物发现与设计：全流程驱动新药发现

图 41：小分子药物发现平台：全流程驱动新药发现，从分子设计到生物测试闭环



资料来源：晶泰控股，长江证券研究所

核心产品为 ID4Inno 小分子药物发现平台：依托 200+垂类模型，具备强大研发及定制化能力。包括：(1) AI 模型 ID4Idea：构建药物发现不同场景的数字化流程和智能化算法，拥有 200+AI 垂类模型，定制化完成分子发现；(2) 物理模型 ID4Gibbs：包括 XFF、XPose、XFEP。

图 42: 小分子药物发现平台



资料来源：晶泰科技官网，药时代，长江证券研究所

核心技术为 XFF、XFEP 和 Xpose: 是基于量子物理计算能力构成的核心计算模块，聚合成为物理模型 ID4Gibbs，可根据不同应用场景定制化应用，为新型药物及材料的关键化学空间提供高效、准确的探索和开发。

(1) XFF: 自主开发的下一代通用分子力场，**训练化合物数量较公开学术力场高出约两个数量级**，在 DrugBank 和 PubChem 上分子覆盖率均超过 90%。能力上，在分子能量、几何结构、分子间相互作用和溶液/靶点环境行为预测精度优于 GAFF2 和 OpenFF2 等主流开源力场;在 31 个公开蛋白-配体数据集、1079 对配体预测中达到 **0.95 kcal/mol 整体精度**，并在同类首创靶点项目中较开源/学术力场可**节省约 80% 的化学合成工作**。

(2) XFEP: 自研大规模结合亲和力预测平台，融合高精度 FEP、增强采样、统计分析、自研 XFF 与 AI 模型，可在云端高通量评估候选分子与靶点结合强度。每年可评估约 24 万个分子的结合亲和力，**约为其他知名生物科技和制药公司 FEP 能力的 10-100 倍**，**并通过算法优化将传统 FEP 成本降低约 75%**。

(3) Xpose: 自研结合模式预测平台，通过模拟药物-靶点复合物自由能来预测小分子与靶点的正确结合构象。对小分子结合构象的高精度预测准确率约 56% (≤ 1.0 埃)，**显著高于最先进商业方案的 30%**。

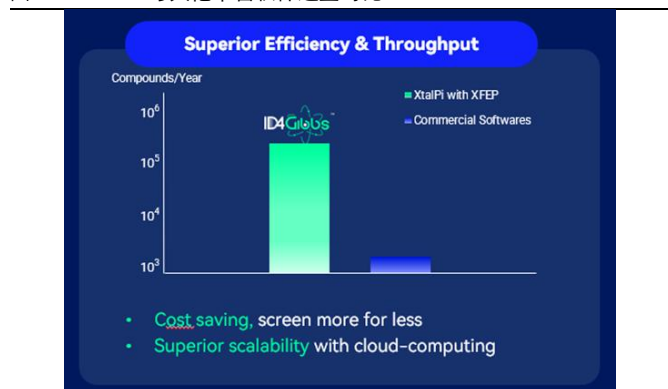
图 43: XFF、XFEP 和 Xpose 可根据不同应用场景定制化应用赋能新型药物及材料发现



资料来源：晶泰控股，长江证券研究所

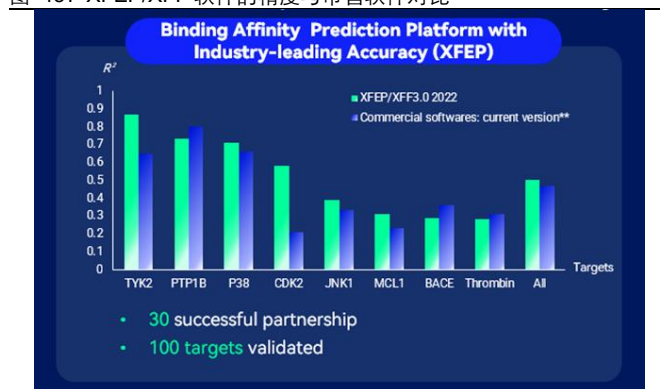
案例：定制化筛选解决难成药靶点 GPX4。 依托多样性领先同行的特大虚拟化合物库，以及精度更高(成功率超 90%)、通量更高(大规模云平台能力保证 5000 个分子/天的亲和力和评估通量)的 XFEP 技术,公司最终实现在 1 天内完成特大化合物库的药效团匹配,而传统虚拟筛选流程仅打分环节耗时就长达 3 个月。

图 44: XFEP 与其他市售软件通量对比



资料来源：晶泰科技，长江证券研究所

图 45: XFEP/XFF 软件的精度与市售软件对比



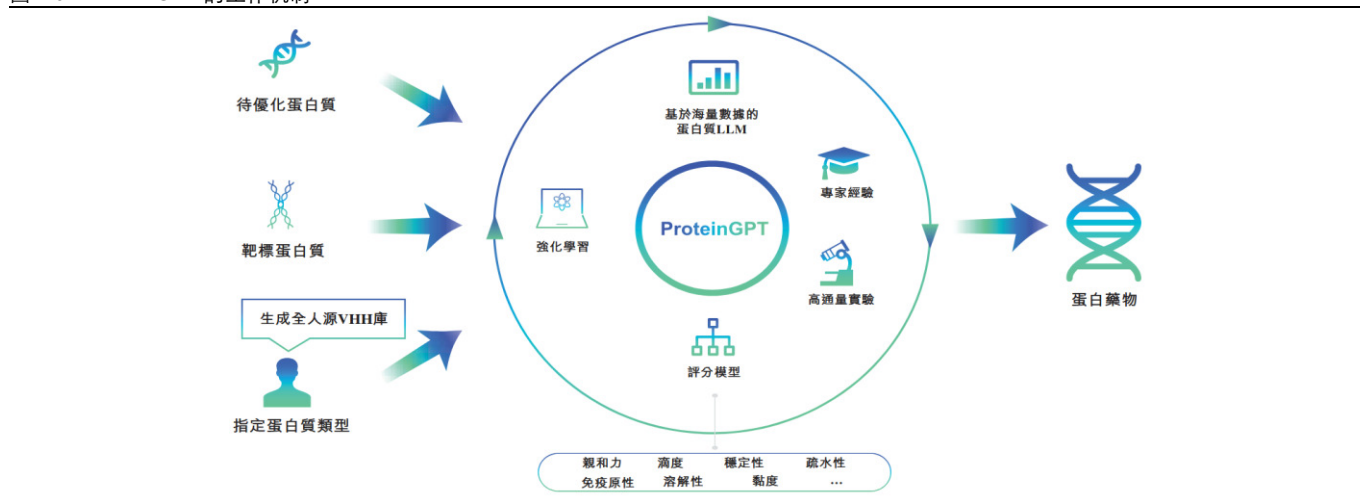
资料来源：晶泰科技，长江证券研究所

大分子药物发现：抗体发现持续突破

核心产品之一：ProteinGPT，基于 LLM 自主开发、面向蛋白/抗体设计。 核心价值在于把海量蛋白序列预训练、内部实验数据沉淀与自动化湿实验验证打通，形成“生成-筛选-验证-再训练”的闭环，加速抗体等生物大分子研发。

(1) **训练数据壁垒：**约 2.8 亿条未标记蛋白序列、几十亿条公开抗体序列及内部抗体 NGS 数据训练模型，并结合噬菌体展示、自动化实验平台持续生产高质量专有数据，非通用大模型厂商或单一 CRO 容易复制。(2) **能力壁垒：**可生成约 1,000 亿个候选 VHH 抗体序列，随机抽测 26 个序列中有 25 个成功表达，**表达成功率达 96.1%，显著高于行业平均水平。**同时，AI 生成序列平均表达量达到 59.6 mg/L，高于阳性对照组的 37.1 mg/L，约 80% 的序列满足可药用性疏水性要求，且人源化水平整体优于对照组，提升候选分子的可开发与成药质量。

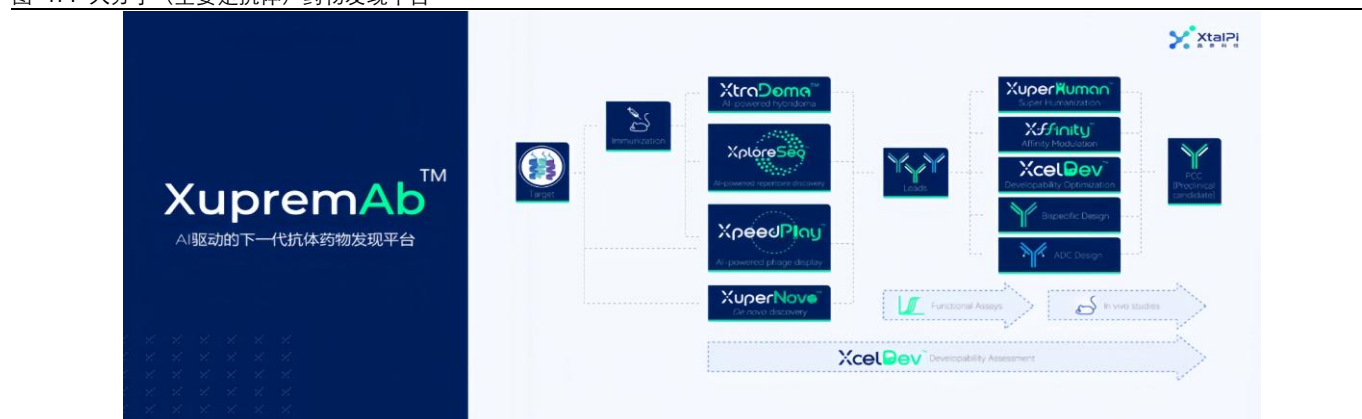
图 46: ProteinGPT 的工作机制



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

核心产品之二：XupremAb，定位 AI 驱动的下一代创新抗体药物发现平台。将 AI 和经典的抗体发现技术有机融合于抗体药物发现的多个环节，为客户提供基于靶点的临床前候选抗体的一体化药物发现服务。此外，**公司自研抗原-抗体复合物结构预测算法/AI 抗体研发平台 XtalFold，核心对标 AlphaFold。**核心价值在于仅基于序列信息，就能以较高概率、高精度预测抗原-抗体复杂结构，解决结构建模问题（抗体药物研发中最难的问题之一），2025 年 XtalFold 推出 Ultra 模式，**显著增强复杂生物大分子建模能力**，抗原-抗体复合物结构预测场景中的准确率提升约 10 个百分点。

图 47：大分子（主要是抗体）药物发现平台



资料来源：晶泰科技官网，药时代，长江证券研究所

公司持续搭建新型药物 AI 平台，抢占前沿领域制高点，2025 年新增模态平台：(1) 分子胶平台。(2) 多肽研发平台。(3) 核酸平台。

表 5：公司持续搭建新型药物 AI 平台，抢占前沿领域制高点

平台/技术	对应新型模态	赋能机制	进展（截至 2025）
分子胶平台	小分子	平台通过 AI 学习大规模蛋白互作模式，精准识别具有分子胶潜高效 DMTA 闭环显著缩短探索周期，构建百万级虚拟分子库及具有高度化学多样性的 POI-E3 组合，并将计算驱性的分子实体库；多个靶点获得高活性、高选择性且具备专利新颖性的 Hit 分动的理性设计与超大规模化学空子，验证了平台的通用性和可规模化能力。目前在拓展新体系及 Direct-to-间的系统化探索结合，形成协同 Biology 能力模块。 放大效应	
PepiX 多肽平台	多肽	已赋能多肽药物早期研发、功能性肽类产品开发及化妆品新功效成分发现等多个融合生成式 AI 分子设计、自动领域，成果显著： 化合、成、万亿级肽库与高通量筛	(1) 建成 2,000+ 非天然氨基酸单体库，口服肽预测模型性能超行业水准； 选，建立“AI 设计-合成验证” (2) 核心管线推进顺利，多肽透脑递送分子验证具备高血脑屏障穿透性；可口服迭代体系，实现多肽药物研发的降糖多肽保健产品完成放大生产及慢性毒理研究即将申报，减脂多肽完成功效与高效率、高精度和高成功率 短期毒理验证，降尿酸多肽正开展药学工艺、质量控制研究及体内药效试验，支撑后续申报工作。
Kodexia 核酸平台	RNA	AI 驱动 siRNA 序列发现与化学修饰平台，构建“序列筛选同步推荐修饰优化-功能验证”端到端闭环	(1) 基于 mRNA2vec 技术，仅需设计 15 条候选序列，即精准筛选出蛋白表达量大幅提升的高效 5'UTR 载体，明显压缩研发的试错成本与周期。 (2) 保持稳定性的同时优化了表达水平，为个性化 mRNA 药物研发铺平道路
虚拟细胞平台	虚拟细胞	专注于利用生物学数据搭建虚拟细胞平台	于 2025 年战略孵化无界进化，目前，无界进化已启动早期融资相关工作，为下一阶段研发蓄力。

资料来源：公司公告，长江证券研究所

AI4S 解决方案：从解决方案到平台赋能的工程化落地

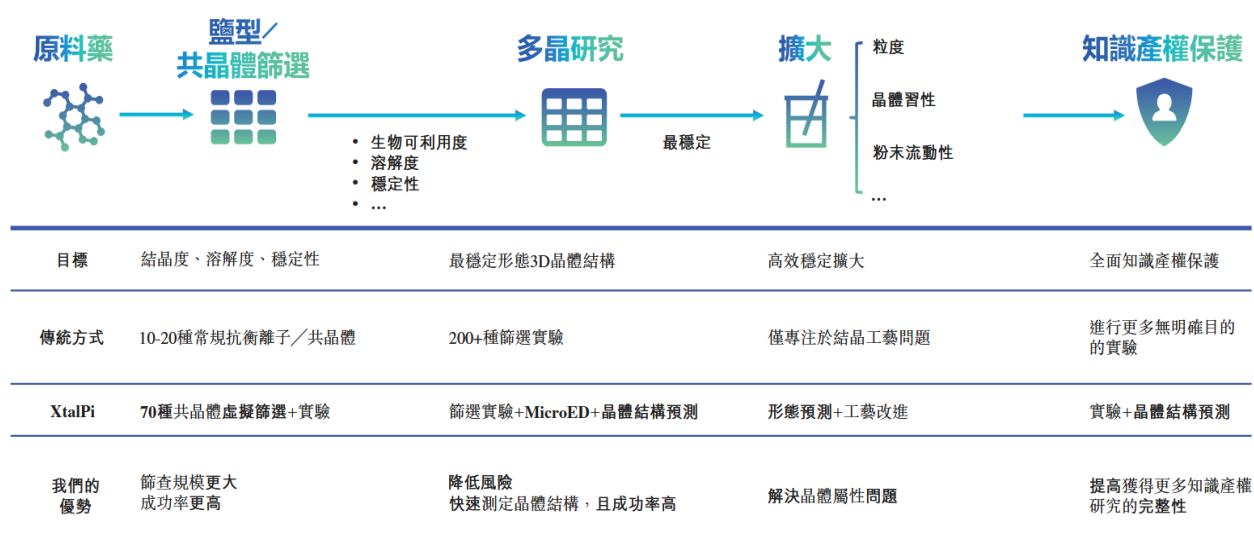
AI4S 智能机器人实验室&智能服务：先进的固研能力与自动化体系，加速多领域研发效率

2025 年，公司将原“智能机器人解决方案”业务更名为“AI for Science (AI4S)智慧解决方案”，该业务包含“AI4S 智能机器人实验室”（原 XtalPi 解决方案）与“AI4S 智能服务”两大板块。**AI4S 智慧解决方案**从过去机器人与算法交付，升级为面向生物医药、新材料等领域的全流程智能化研发体系。

● AI4S 智能机器人实验室

(1) 业界领先的固研能力。(i) 2~3 周内提供常见小分子的晶体结构预测结果（传统实验方法通常需要两个月），其每年可验证 70+种实验形态；(ii) 自主研发、配备全局搜索算法，并覆盖所有理论稳定形态。XtalCSP 不依赖实验，可交叉验证实验并降低多晶体系的风险。(iii) 相较于传统方法更快部署云计算资源、筛选晶体结构及精准、高效地确定其稳定性；(iv) 可用于开展热力学稳定性评估、可推荐溶剂、可用于更复杂的分子体系。

图 48：公司固态研发方案相较传统人工方法的优势



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

(2) 机器人技术突破：灵动勺攻克微量固体加样难题，得到全球顶级客户认可。公司机器人实验室的核心技术包括：(i) 先进的视觉感知算法：实时分析粉末特性，实现对不同类型粉末的精准识别与处理；(ii) 智能数据库：构建了全面的粉末属性数据库，具有极强学习能力，不断优化粉末处理策略。(iii) 粉末分析基座大模型：在多样化粉末数据集上训练调优的专用 AI 模型，准确预测粉末特性和行为分析。(iv) 与机器人无缝连接：与粉末分装等机器人系统无缝连接，并根据视觉反馈调整参数和控制策略。

图 49：灵动勺攻克微量固体加样难题



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

● AI4S 智能服务：全流程智能平台驱动商业化加速，复购率超 75%

持续突破多行业标杆客户。2025 年在生物医药与新材料两大核心领域均取得突破性商业化进展。(1) 整体服务复购率超过 75%；(2) 核心技术模型落地多个客户案例，建立 29 种反应类型的可合成性预测及反应条件推荐 AI 模型(SureRXN)，实际应用反应成功率超 85%；(3) 搭建 AI 图谱分析算法，实现 70%以上样本自主标注；(4) 针对 HTE 高通量平台(XtalCurve)构建条件推荐及产率预测模型，成功交付；(5) 开发高压及中压分离算法，已落地多个客户案例并获广泛好评。

图 50：AI4S 智能机器人实验室持续突破多行业标杆客户



资料来源：晶泰控股，长江证券研究所

打开非药的星辰大海：多领域迁移与持续整合并购

生物医药行业正迎来 AI 基础设施驱动的深度变革，这一结构性机遇将为产业研发范式重塑带来广阔空间，公司凭借 AI+机器人+Multi-Agent 深度融合，前瞻布局全流程智能化研发体系，实现精准卡位，现已形成显著先发优势，构建高壁垒的闭环生态。未来，伴随行业对 AI 赋能认知的持续深化，平台化布局有望转化为持续贡献增长动能。

当前，平台泛化能力显现，公司将制药逻辑复用于农业化学、电池材料、化妆品及精细化工等领域，成为上述行业智能化转型的核心基座。

我们认为未来公司支柱是现有业务的自然演变。公司从早期专注于提供固态研发服务，到现阶段扩大固态研发和药物及新材料发现服务，未来有望成功过渡到提供智能自动化解决方案及研发解决方案为核心驱动。

验证维度上来看，“AI+机器人+Multi-Agent”飞轮系统在药物研发领域完成充分验证，核心能力开始向消费健康、新材料等赛道加速外溢，实现从能力复制到战略拓展的升级，标志公司平台具备跨行业赋能的通用价值。(1) 消费健康领域：2025 年自研两款针对生发固发需求的创新外用分子；(2) 光伏领域：2026 年 1 月与晶科能源共同成立合资公司，共建全球首个“AI 决策-机器人执行-数据反馈”全闭环叠层电池智造线。(3) 农业领域：圆满完成数千亩的治理效果验证，树立全球荒漠治理新标杆。

表 6：公司未来分子研发前景展望

未来领域	细分领域	技术与合作落地
未来材料	全球物质结构预测大赛	公司加冕剑桥晶体数据库中心(CCDC)举办的 7th CSP bind test，此次大赛涉及光电材料分子、生物医药分子、农药分子等多个材料体系，公司均展现了全球领先的技术实力。
	固态研究应用拓展	公司将固态研究的技术能力拓展到材料领域，在电化学材料、高分子聚合物材料、陶瓷氧化物材料方面都与相关行业公司有合作项目开展，并且部分项目已完成交付并取得收入。
	新能源材料	2024 年，公司与协鑫集团签订为期 5 年的战略研发合作协议，共同开发多种新能源材料领域的 AI 大模型，优化钙钛矿等新能源新材料，推进产业升级。公司亦为北京大学交付了电解液研发智能解决方案，该解决方案可以大规模地进行电解液配方实验，获取大量的配方和测试数据，这些数据将用于算法的训练和优化，能够准确、高效地完成电解液的配方和测试。
	化工催化剂材料	公司已经成功为中国石化集团公司下属研究院交付了高通量合成和催化剂分析前处理解决方案，提高了生产效率，分析速度以及操作安全性，并减少人工操作的错误。
	材料微观机理	2024 年，公司战略孵化了深度原理(Deep Principle)该公司创始团队来自 MIT 通过生成式 A 和量子化学深入解析材料微观世界运行机理，公司与深度原理正在深入合作，共同加速新化学反应和新材料的开发。
	碳基材料	2025 年公司与方大炭素新材料科技股份有限公司(「方大炭素 1」)签署战略合作协议，双方将以 A 为核心驱动力，推动高端碳基材料智能化研发，为我国「人工智能+」国家战略落地及新型工业化建设注入强劲动能。
	超级塑料	2025 年公司还孵化投资了赋生物(Future Bio)该公司创始团队来自加州大学伯克利分校致力于利用可再生生物质或废弃原料，生产环保且易回收的生物基塑料等。公司与赋生物共同开发兼具优越性能和超高分解回收率的环保塑料，推动材料科学领域绿色可持续发展。
未来农业	东南亚 AI 产业发展	公司与实力雄厚的印尼头部企业金光集团达成战略合作将在多个工业领域展开合作共同推进亚太地区人工智能赋能解决方案的未来发展。
	沙漠治理	公司联合孵化企业绿技行(上海)农业科技有限公司(「绿技行」)，已经在中国及中东地区，通过公司研发的新材料技术成功实现沙漠土壤改良。
	AI 种业	2025 年公司与广东恒健控股及山东省寿光蔬菜达成合作，共同建设智能育种科研平台，运用量子物理与 AI 算法优化基因组选择，培育高价值新型种子产品，助力农业产业升级
未来消费品	生物化肥	2025 年公司与美国 Kula Bio 签订千万级研发合作订单，双方将结合晶泰的 AI 和自动化技术以及 Kula Bio 在微生物领域的深厚技术，共同开发新型生物肥料，推动可持续高效农业发展。
	消费品	2025 年，公司与工信部中小企业发展促进中心达成战略合作，双方将开展「人工智能+」行动，赋能包括美妆消费品、生物医药、前沿新材料、农业科技等行业，推动 A 赋能在更广泛的工业领域落地

资料来源：公司年报，长江证券研究所

未来通过持续收购、投资、孵化，积极打造多元生态圈，有望进一步拓宽能力外延。公司围绕上下游关键产业链和技术，孵化和投资了数家创新型公司，包括 Geode、默达生物、希格生科及莱芒生物。2025 年 6 月完成收购英国 Liverpool Chiro Chem (LCC)

技术公司。LCC 源自英国利物浦大学，持续聚焦数据驱动的药物发现领域，在高通量、微量分子建库领域积累完整技术解决方案，与公司 AI4S 实验平台的大规模分子建库技术形成优势互补，此次收购有望进一步提升公司服务海外客户的能力。

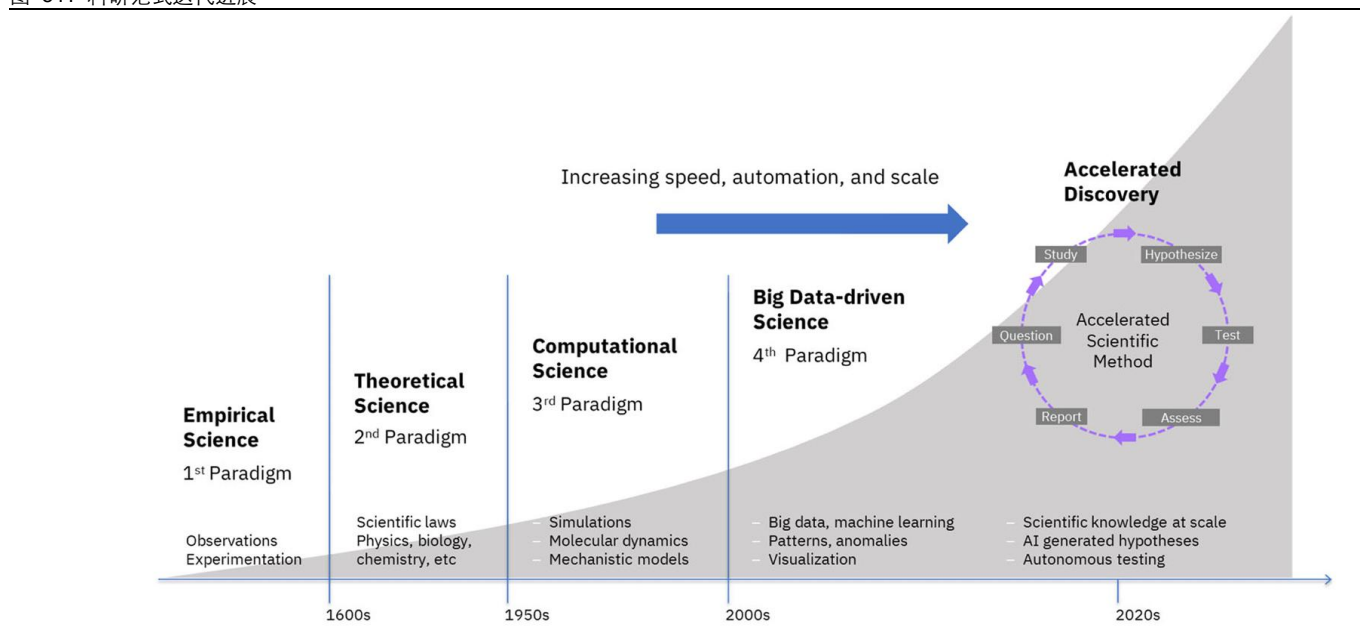
前途似海：AI for Science 时代已来

基于前文复盘，公司的主要核心竞争力在于以差异化精准卡位和高质量数据实现科研范式变革、初步生态闭环。放眼行业，AI for Science 时代已然来临，目前行业位于萌芽成长期，未来前途似海。

行业空间与阶段：超长坡道、多领域渗透、仍处早期

AI for Science 科研时代已然来临。人类科研范式遵循技术爆炸式的发展，经过从实验归纳总结、理论推演建模、计算模拟仿真到数据科学驱动的演进，已来到第五种科研范式——AI for Science (AI4S)，即基于人工智能技术的科学研究。**接下来，AI for Science 或将迈向“垂类大模型 + 自动化实验”的新时期。**医药行业从 CADD 向 AIDD 转变是典型案例，从更长远的角度看，科学研究的主导模式将逐渐从人类驱动转向以智能体为核心的新范式，

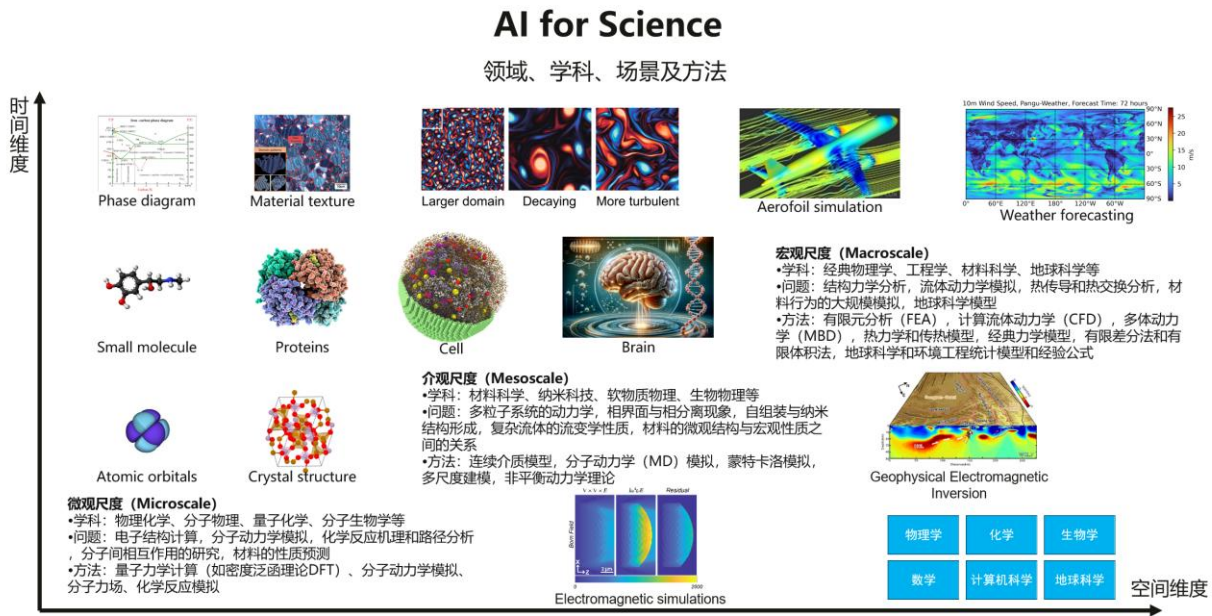
图 51：科研范式迭代进展



资料来源：Natruie-《Accelerating materials discovery using artificial intelligence, high performance computing and robotics》(2022)，长江证券研究所

AI4S 的应用领域广度横跨几乎所有科学问题。AI4S 具有显著的跨学科特征，已逐步渗透至药物发现、材料科学、能源催化、气候模拟等多个核心科学领域。其本质在于，将传统依赖实验驱动的科学问题转化为“计算+数据驱动”的问题求解范式，因此理论上适用于所有可以被建模与数据化的科学场景。这种“方法论级别”的迁移，意味着 AI4S 并非单一行业机会，而是具备平台属性的技术革命。展望未来，AI4S 智能服务平台可广泛赋能医药、化学与化工、新材料、新能源等多个研发场景，市场空间达万亿美元级别。

图 52: AI4S 应用领域广度横跨几乎所有科学问题



资料来源: 黄大年茶思屋科技网, 长江证券研究所

在持续深耕 AI for Science 的科技企业引领下, 以生物学为代表的科学智能正在进入一个高产出、快迭代的应用落地期

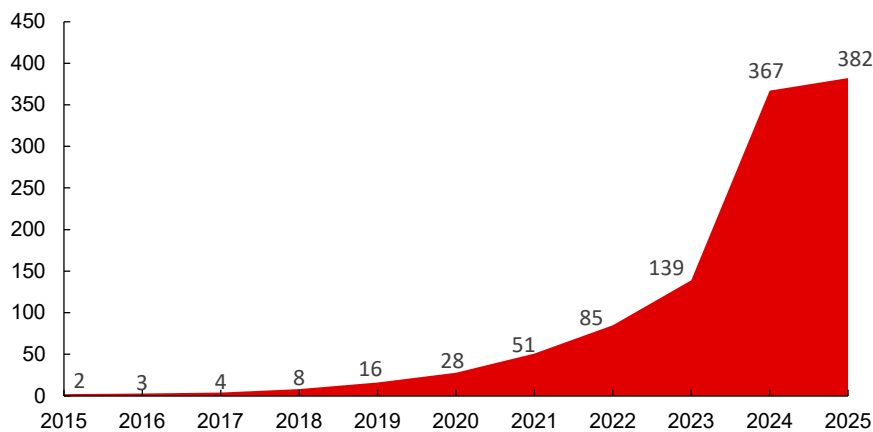
表 7: 生物学领域进展引领科学智能落地前沿

领域	应用成就	案例/进展
AI+生物学	单细胞行为的 AI 生成与分析获得全新发现	谷歌和耶鲁大学联合发布 270 亿参数单细胞分析基础模型 C2S-Scale, 生成了关于癌细胞行为的全新假设, 并在多次体外实验中得到验证。这展示了利用 AI 提出原创科学假设的潜力, 有望据此探索出开发抗癌方法的新途径。
AI+生物学	蛋白质生成式模拟和预测体系更加完善	微软 BioEmu 模型在蛋白质动力学模拟方面填补了空白, 并实现了高达 10 万倍的模拟速度提升。中科院团队提出整合结构和进化约束的反向折叠蛋白质预测模型, 为蛋白质工程开辟新路径, 相关成果发表于《Cell》期刊。
AI+生物学	AI 辅助基因组学研发体系初步构建	谷歌通过 10 年持续研发和探索, 逐步构建了从基因测序、读取和变异识别, 到基因表达预测和致病潜力评估, 再到疾病基因检测和诊断的 AI 基因组学研究和应用体系。
AI+医学	AI 辅助病理检测拓展新疾病场景	腾讯生命科学实验室与广州医科大学第一附属医院、广州呼吸健康研究院联合研发的 DeepGEM 病理大模型, 已在肺癌基因突变预测中完成大规模验证, 只需常规病例切片图像, 1 分钟内完成肺癌基因突变预测, 精准度达 78%-99%。
AI+医学	AI 检测基因突变进一步工具化	谷歌发布 DeepSomatic 工具集用于肿瘤细胞中基因变异的识别, 适用于白血病、乳腺癌、肺癌等癌症类型, 识别准确率均优于现有方案。
AI+医学	AI 驱动药物研发迈过临床 I 期阶段	北京大学第三医院等多家医院与剂泰科技联合进行 AI 优化候选药物 MTS-004 成为国内首款完成 III 期临床的 AI 赋能制剂新药, 药物预计面向渐冻症、脑卒中等神经系统疾病。
AI+材料学	超导材料等 AI 自动化发现	前 OpenAI 和 Deepmind 成员创立 Periodicabs 开展新型超导材料等 AI 自动化发现。孵化自北大深研院深港河套科创中心的鼎犀智创正构建 RhinoWise 材料创新平台, 开展新能源、半导体等领域关键材料创新。
AI+气象学	提前预警气象灾害、	DeepMind 的飓风 AI 模型已成功预测“梅利莎”等超强飓风的路径和强度变化帮助美国及周边国家提前预警。
AI+物理学	推导宇宙物质新性质	黑洞理论物理学家 Alex Lupsasca 利用 GPT-5 在半小时内在推导出黑洞理论新特性。核聚变初创公司 CFS 利用谷歌开源 TORAX 工具来辅助研发 SPARC 核聚变装置。
AI+数学和计算机科学	解决数学难题	数学研究人员利用 GPT5 探索解决历史数学难题-埃尔德什难题, 谷歌基于 AlphaEvolve 推进数学和理论计算机科学, 英伟达开源模型系统 GenCluster 获得 IOI 2025 竞赛金奖。

资料来源: 腾讯研究院, 长江证券研究所

行业有望步入涌现阶段，形成规模化格局。随着资本注入、技术成本下降、AI Infra 的能力提升，多个项目正从单点原型走向平台化应用落地。当前 AI4S 细分赛道中生物学较为成熟；在材料科学等方向，部分公司开始提供商业服务或平台工具。

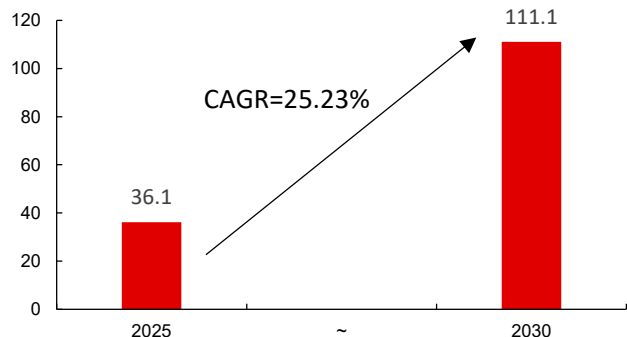
图 53：每年新发布的生物 AI 模型数量（单位：个）



资料来源：《Building biology-native data infrastructure for the AI era》Andrew Hedin (2026)，长江证券研究所

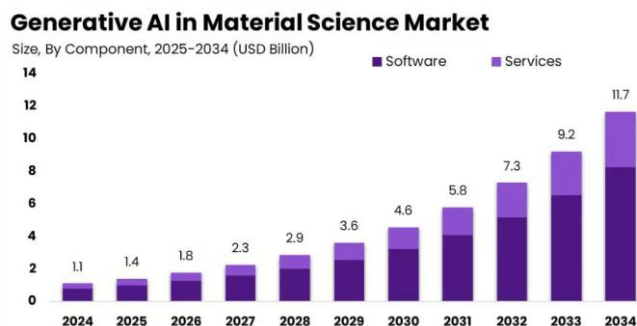
单个细分子市场渗透率低、成长性极高，其中成熟度相对较高的生命科学方向在 2030 年有望突破百亿美元。

图 54：AI 在生命科学领域中的市场规模及复合增速（单位：亿美元）



资料来源：Mordor Intelligence，长江证券研究所

图 55：生成式 AI 软件与服务在材料科学领域的全球市场规模（单位：亿美元）

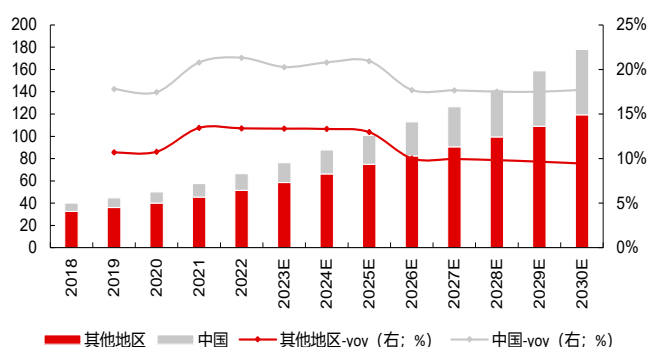


资料来源：Market.us，长江证券研究所

市场长期天花板也取决于科研与产业研发支出。AI4S 直接锚定全球科研与产业研发支出。以医药领域为例，全球单个创新药的 average 研发成本已超过 20 亿美元，研发周期普遍在 10 年以上，而 AI 技术若能够在分子筛选、靶点发现或临床试验设计等环节提升效率，即便是边际优化，也将释放出极为可观的经济价值。在这一逻辑下，AI4S 的潜在空间实际上是对万亿美元级研发投入的效率重估。

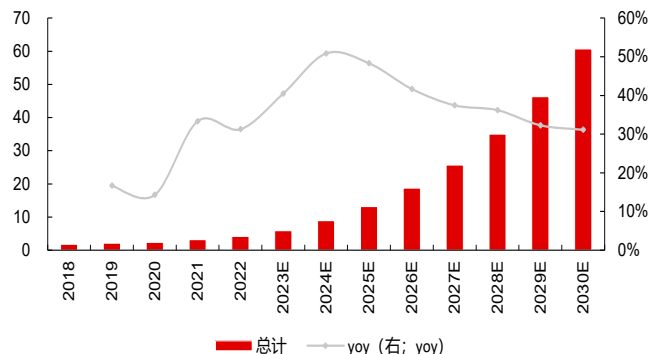
我国对全社会研发经费投入明确提升，中国 AI4S 有望提速。“十五五”规划开篇明确，“十五五”时期是夯实中国式现代化基础、全面发力的关键五年，而高水平科技自立自强，正是这一阶段发展的核心战略支撑，要求全社会研发经费投入年均增长 7% 以上，基础研究经费投入占研发经费投入比重实现明显提高，重点领域关键核心技术快速突破，产出一批重大原创性、标志性、引领性科技成果。“十五五”期间，AI4S 有望从“科研辅助工具”真正成长为引领科学范式变革、驱动产业升级的核心生产力。

图 56：2018-2030E 全球及中国材料科学研究研发开支（单位：十亿美元）



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

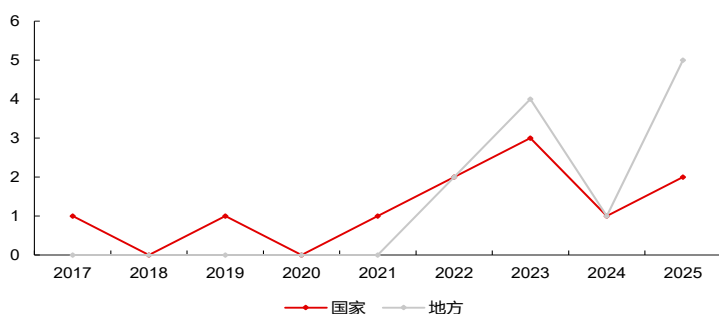
图 57：2018-2030E 全球自动化研发实验室市场（单位：十亿美元）



资料来源：公司招股说明书，长江证券研究所

政策正在加速落地，《国务院关于深入实施“人工智能+”行动的意见》为 AI for Science 的发展提供了明确的政策牵引和战略空间。文件将“人工智能+科学技术”列为重点方向，提出要“加速科学发现进程、驱动技术研发模式创新”，并从模型能力、数据供给、算力体系等方面强化基础支撑。这意味着国家正从顶层制度上，为 AI 深度融入科研体系创造条件，使科学研究进入“智能原生”阶段，即科研体系在设计之初就嵌入智能能力，让 AI 成为科学发现的基础组件，而非外部工具。

图 58：中国 AI4S 相关支持政策数量变化(2017-2025 年) (单位：项)



资料来源：《2025 中国 AI4S 行业发展蓝皮书》弗若斯特沙利文（2025），长江证券研究所

竞争要素：成熟度早期，高质量数据构建至关重要

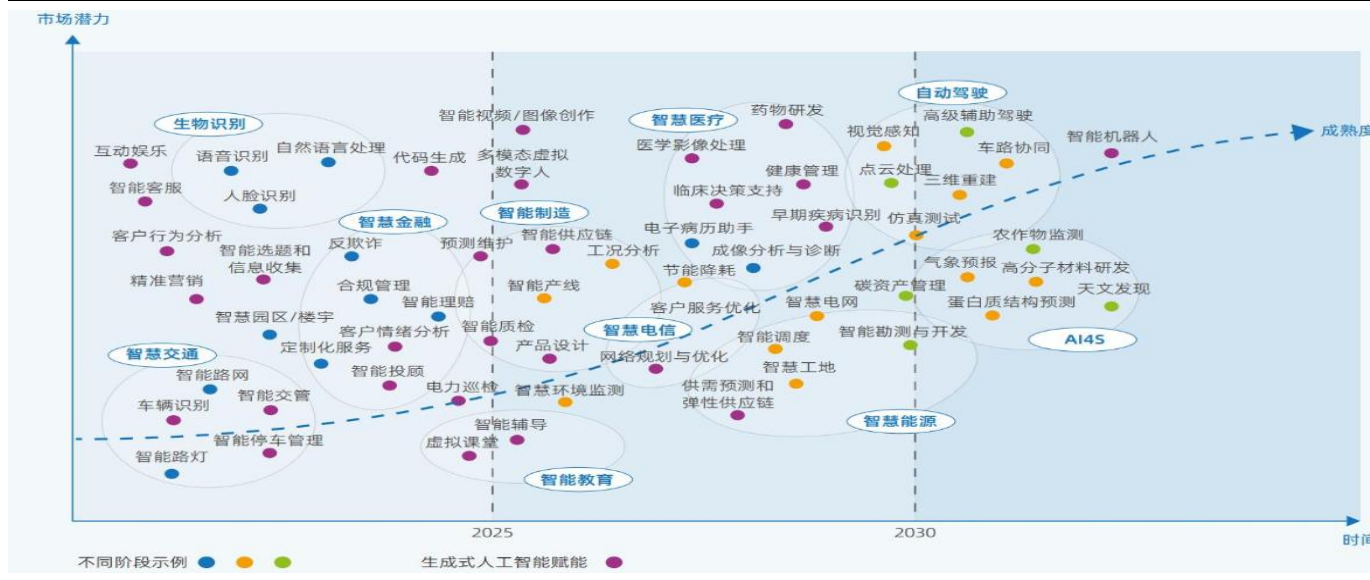
需求侧，科学研究本身具有问题空间无限的特征。以药物发现为例，可探索的分子组合数量呈指数级增长，而传统实验方法在时间与成本约束严苛，大量潜在有效分子难以被探索。此外，药物研发周期长、成功率低、成本高昂，AI 技术若能在任一环节实现边际改进，其需求便具有持续扩张的内生动力。AI4S 具有接近无限的潜在空间与需求。

供给侧，高质量供给极为有限。首先，科学数据与互联网数据存在本质差异，科学数据规模更小、获取成本更高、标准化程度更低，同时伴随大量噪声与不确定性，可用于训练高性能模型的数据是稀缺资产。其次，单纯模型输出无法直接转化为科学成果，需通过实验验证形成闭环，而具备“AI+实验”一体化能力的供给有限。最后，AI4S 对跨学科人才的要求极高，进一步限制有效供给的扩张速度。

发展阶段来看，行业整体尚处于从萌芽到加速爆发的早期阶段。阶段的特征是学术原型纷呈，少数产业化先行者出现，算力与自动化基础设施仍在建设期，应用场景多且碎片

化。我们认为这和云计算、深度学习初期具有相似性：绝对规模小但增长斜率陡峭，且技术进步正在持续拓展应用边界。

图 59：AI for Science 行业尚处于从萌芽到加速爆发的早期阶段，成熟时间可能在 2030 年以后



资料来源：IDC，浪潮信息，长江证券研究所

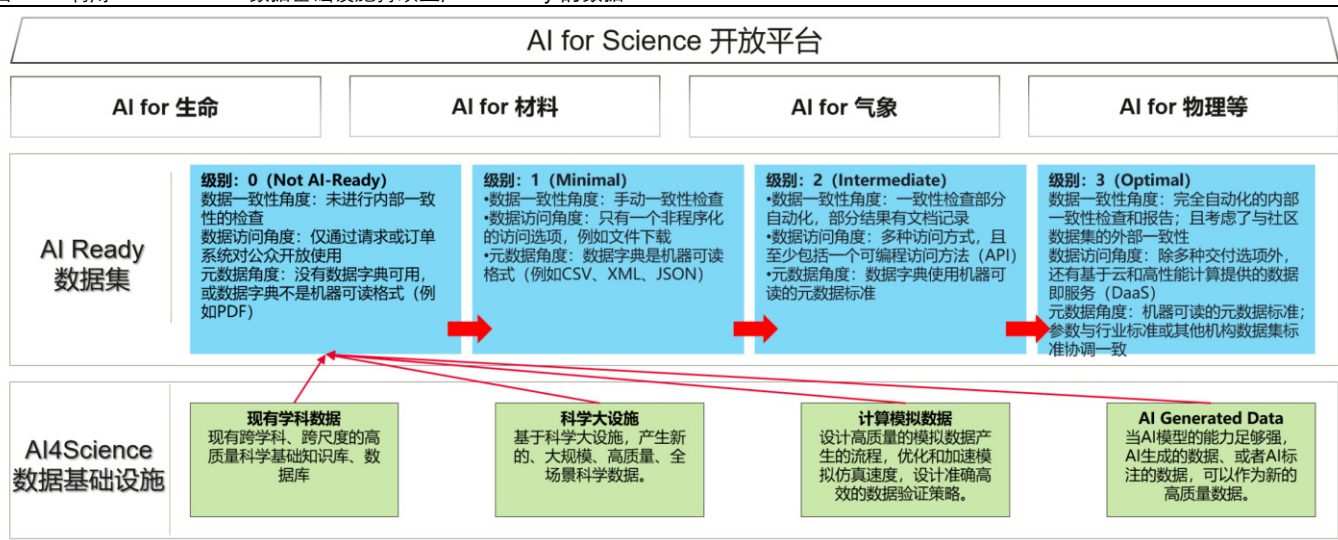
因此，行业发展阶段与供需矛盾决定了行业核心竞争要素是模型的更深一层，即数据与闭环体系。通用 AI 领域，模型能力往往是决定竞争格局的关键因素，但在 AI4S 中，数据与实验闭环能力正在成为更为关键的竞争要素。

(1) **高质量科学数据**：具有强专属性与不可复制性，且涉及到跨学科、多尺度整合，尤其是**实验失败数据与长期积累的结构化数据**，是难以通过公开渠道获取的，往往需要通过长期实验积累或与产业方深度合作获得，从而形成天然壁垒。

(2) **AI4S 的验证能力**：将模型输出通过实验体系进行验证，并将结果反馈至模型迭代中，才能形成真正有效的技术闭环。闭环和飞轮的效率直接决定技术进步速度与商业化能力。

(3) **行业 know-how**：科学问题因其高度专业性，单纯依赖通用模型难以捕捉其中的复杂机制，需结合领域知识进行建模与约束。因此，具备深厚行业理解的团队，在模型应用与结果解释上具有显著优势。

图 60：利用 AI for Science 数据基础设施持续生产 AI Ready 的数据



资料来源: 黄大年茶思屋科技网, 长江证券研究所

总结来看, AI4S 的最终目标不仅仅是让科学研究变得更有效率, 更是要从根本上改变科学发现的过程。主要追求两方面的突破、以打开新的商业化空间:

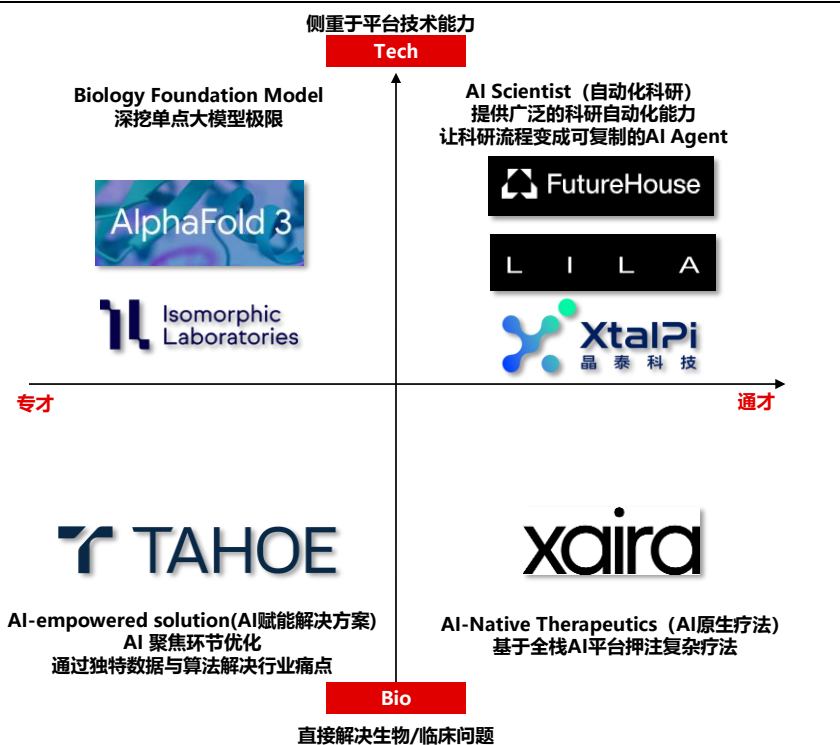
(1) **加速科学发现:** 传统科学研究依赖于“提出假设-实验验证”的漫长循环。AI 可以通过分析海量数据、模拟复杂系统, 在几分钟或几小时内完成过去可能需要数年才能完成的计算和预测, 从而极大地缩短发现周期。AlphaFold 将预测蛋白质结构的时间从数年缩短到了几秒。

(2) **颠覆研究方法:** AI4S 不再仅仅是验证人类提出的假设。AlphaEvolve 已经能够自主地发现全新的、人类从未想到的数学算法。AI 正在从一个“回答问题”的工具, 进化为一个能够“提出新见解”的合作伙伴, 从根本上改变了科学家探索未知的方式, 带来新增长空间。

何以突围: 布局专有数据获取+模型闭环迭代+实验自动化

什么样的玩家能够从早期的 AI4S 赛道中占据优势? 构造 AI4S 四象限, 梳理值得关注的方向和赛道。横轴评估在生物医药研发流程中的广度和深度。越靠近左侧, 产品则就越偏单点聚焦; 越靠近右侧, 产品则越偏全流程的技术平台; 纵轴评估企业交付的产品是侧重于平台技术能力 (Tech), 还是直接解决生物/临床问题 (Bio)。越靠近图的上方, 越接近技术方案本身的交付, 并不要求公司自己完整实现疗法; 越往下方, 则是需要完整开发一个药物/疗法。

图 61：商业模式大致可以划分出四象限



资料来源：海外独角兽，长江证券研究所

当前，药物发现的价值正在从传统 CRO 与药企的“手工试错”转移到掌握数据、模型飞轮与自动化实验室的 AI 原生公司手中。这意味着需要布局专有数据获取+模型闭环迭代+实验自动化。两类玩家或值得重点关注。

第一类具备较高潜力的是以 AI 为核心驱动的原生科技公司，闭环能力最强，最接近商业化兑现。这类公司通常从底层架构上即围绕数据与模型闭环进行设计，通过自建或合作方式获取实验能力，从而实现技术与业务的深度耦合。其优势在于路径清晰、迭代速度快，一旦在某一细分领域实现突破，具备较强的放大效应。

第二类值得关注的是垂直领域企业的深度突围。随着自动化实验室 (self-driving lab) 的发展，数据生产本身正在被工业化与规模化，这意味着未来数据壁垒的核心不再只是“存量数据”，而是“持续生产高质量数据的能力”。能够控制这一环节的玩家，将在长期竞争中占据更有利位置。

第一类公司的典型是当谷歌的 DeepMind。背后对应的正是“基础模型+科研智能体+自主实验室”的 AI 驱动科研范式逐步形成。谷歌 DeepMind 引领的技术突破，点燃了全球科学智能的技术研发和行业应用热潮。生物学则成为了进展最快的科研领域，材料学、物理学、气象学、计算机和数学紧随其后。在 AlphaFold 之前，AI 在科研中的角色更像一个高级工具，进行处理数据、加速计算、辅助分析。AlphaFold 证明了另一种可能——AI 在部分科学任务上已展现出超出传统流程的预测和搜索能力。目前，AlphaFold 数据库已发布超过 2 亿个蛋白结构预测条目，极大拓展了结构生物学可用资源。

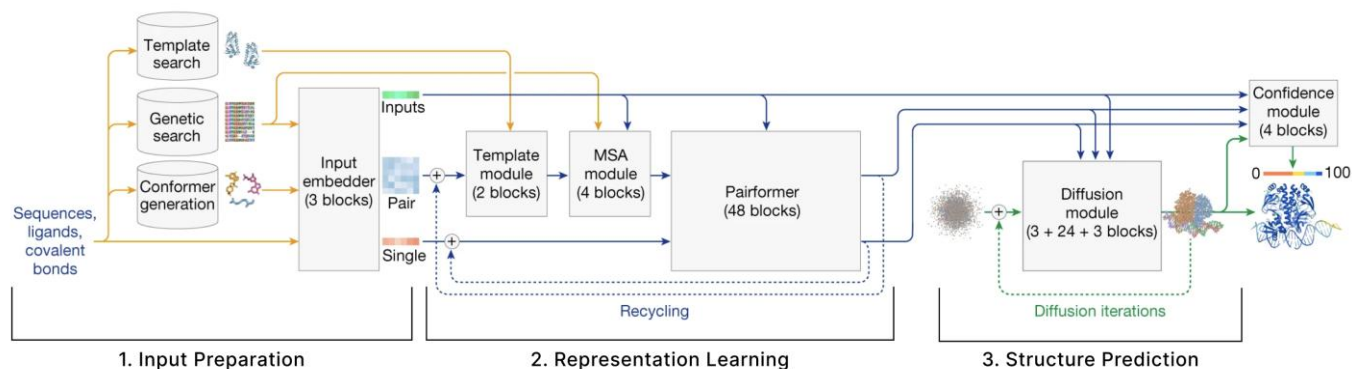
表 8: 谷歌 DeepMind 领衔科学智能技术演进

模型和工具体系	领域	核心逻辑	成就与影响
AlphaFold	生物大分子	利用深度学习解决高维生物大分子的构象空间问题	标志着蛋白质结构预测问题的实质性解决，其不仅斩获 2024 年诺贝尔化学奖，更成为现代生物学的数字基础设施
WeatherNext	气象学	实现气象学数据驱动对数值模拟的“降维打击”	WeatherNext 2 在 99.9% 的预测变量与时间跨度上，准确率均优于欧洲中期天气预报中心(ECMWF)的 HRES 系统，且推理速度提升了数个数量级
GNoME	材料学	GNoME 利用深度学习在无机晶体空间中进行了海量搜索，预测了数百万种稳定的新材料结构，	其规模相当于人类过去几十年实验发现总和的数倍，为电池技术与超导材料的研发提供了庞大的候选库
AlphaQubit	量子计算	将 Transformer 架构应用于量子纠错	在量子计算领域，显著降低量子计算芯片的量子比特读数错误
AlphaEvolve	数学和计算机学	推动数学和计算机学从逻辑推理到算法的自我进化。	通过引入进化计算范式，致力于打破人类设计算法的局限，自动搜索并发现更高效的机器学习算法与损失函数，实现从“人工设计”到“自动发现”的元层级跨越

资料来源：腾讯研究院，长江证券研究所

Alpha Fold3 成功是 AI4S 的标志性事件。它解决了困扰生物学界长达 50 年的蛋白质三维结构预测难题，将过去需要数月甚至数年冷冻电镜实验才能解析的结构，缩短到计算机上的快速预测。蛋白质结构决定功能，AlphaFold 的突破意味着我们能更快地理解生命过程、设计新药。技术上，引入 Diffusion Model 简化了流程，减少了对多序列比对 (MSA) 的依赖，并拓宽了输入分子类型。其训练数据源自公开的 PDB 数据库，并辅以合成数据增强泛化能力。越来越多的生物医药的公司正在把 AF3 融入 workflows 中。

图 62: AlphaFold 3



资料来源：Github，长江证券研究所

风险提示

- 1、下游需求不及预期的风险。市场对制药与材料科学的智能化解决方案需求受多种因素影响，若需求发生重大转变或现有产品的需求下降，可能导致公司订单减少。
- 2、技术落地与研发进度不及预期的风险。若公司未能跟上技术趋势，研发成果不足预期，则产品竞争力可能会下降，可能对公司收入与利润产生负面影响。
- 3、市场竞争加剧的风险。伴随 AI 技术普及，市场可能不断新进竞争对手，若公司产品竞争力、市场投入情况不足以应对，则可能会导致市场份额减少。
- 4、合作项目推进不及预期的风险。若合作方因战略调整、资金问题等终止项目，或延迟支付首付款、里程碑款项，将直接导致收入确认滞后、现金流承压，影响盈利预期兑现。
- 5、盈利预测假设不成立或不及预期的风险：

在对公司进行盈利预测及投资价值分析时，我们以公司药物发现解决方案与 AI4S 智慧解决方案业务进展顺利、行业发展持续向好等为前提，对公司未来营收业绩进行预测，基于以上假设我们预测公司 2026/2027/2028 年的营收为 9/12/16 亿元，同比增长 18%/29%/32%。

若以上假设不成立或不及预期我们盈利预测及估值结果可能出现偏差，具体影响包括但不限于公司业绩不及我们预期，估值结果偏高等。极端悲观假设下，若新签订单进展不及预期、行业竞争格局恶化等负向影响因素出现，则公司未来收入/业绩增速或受影响。假设极端悲观情况下，我们预测 2026-2028 年公司营收为 9/10/12 亿元，同比增速分别为 6%/18%/15%。

表 9：公司利润敏感性分析

单位：亿元	基准情形				悲观情形		
	2025A	2026E	2027E	2028E	2026E	2027E	2028E
营业收入	8	9	12	16	9	10	12
YOY	201%	16%	29%	32%	6%	18%	15%
毛利率	70%	67%	66%	67%	44%	43%	45%
归母净利润	1	-2	-2	-1	-4	-4	-3
YOY	108%	-266%	24%	11%	-423%	2%	11%

资料来源：公司公告，长江证券研究所

投资评级说明

行业评级 报告发布日后的 12 个月内行业股票指数的涨跌幅相对同期相关证券市场代表性指数的涨跌幅为基准，投资建议的评级标准为：

看 好： 相对表现优于同期相关证券市场代表性指数

中 性： 相对表现与同期相关证券市场代表性指数持平

看 淡： 相对表现弱于同期相关证券市场代表性指数

公司评级 报告发布日后的 12 个月内公司的涨跌幅相对同期相关证券市场代表性指数的涨跌幅为基准，投资建议的评级标准为：

买 入： 相对同期相关证券市场代表性指数涨幅大于 10%

增 持： 相对同期相关证券市场代表性指数涨幅在 5%~10%之间

中 性： 相对同期相关证券市场代表性指数涨幅在-5%~5%之间

减 持： 相对同期相关证券市场代表性指数涨幅小于-5%

无投资评级： 由于我们无法获取必要的资料，或者公司面临无法预见结果的重大不确定性事件，或者其他原因，致使我们无法给出明确的投资评级。

相关证券市场代表性指数说明：A 股市场以沪深 300 指数为基准；新三板市场以三板成指（针对协议转让标的）或三板做市指数（针对做市转让标的）为基准；香港市场以恒生指数为基准。

办公地址

上海

Add /虹口区新建路 200 号国华金融中心 B 栋 22、23 层
P.C / (200080)

武汉

Add /武汉市江汉区淮海路 88 号长江证券大厦 37 楼
P.C / (430023)

北京

Add /朝阳区景辉街 16 号院 1 号楼泰康集团大厦 23 层
P.C / (100020)

深圳

Add /深圳市福田区中心四路 1 号嘉里建设广场 3 期 36 楼
P.C / (518048)

分析师声明

本报告署名分析师以勤勉的职业态度，独立、客观地出具本报告。分析逻辑基于作者的职业理解，本报告清晰地反映了作者的研究观点。作者所得报酬的任何部分不曾与，不与，也不将与本报告中的具体推荐意见或观点而有直接或间接联系，特此声明。

法律主体声明

本报告由长江证券股份有限公司及其附属机构（以下简称「长江证券」或「本公司」）制作，由长江证券股份有限公司在中华人民共和国大陆地区发行。长江证券股份有限公司具有中国证监会许可的投资咨询业务资格，经营证券业务许可证编号为：10060000。本报告署名分析师所持中国证券业协会授予的证券投资咨询执业资格证书编号已披露在报告首页的作者姓名旁。

在遵守适用的法律法规情况下，本报告亦可能由长江证券经纪（香港）有限公司在香港地区发行。长江证券经纪（香港）有限公司具有香港证券及期货事务监察委员会核准的“就证券提供意见”业务资格（第四类牌照的受监管活动），中央编号为：AXY608。本报告作者所持香港证监会牌照的中央编号已披露在报告首页的作者姓名旁。

其他声明

本报告并非针对或意图发送、发布给在当地法律或监管规则下不允许该报告发送、发布的人员。本公司不会因接收人收到本报告而视其为客户。本报告的信息均来源于公开资料，本公司对这些信息的准确性和完整性不作任何保证，也不保证所包含信息和建议不发生任何变更。本报告内容的全部或部分均不构成投资建议。本报告所包含的观点、建议并未考虑报告接收人在财务状况、投资目的、风险偏好等方面的具体情况，报告接收者应当独立评估本报告所含信息，基于自身投资目标、需求、市场机会、风险及其他因素自主做出决策并自行承担投资风险。本公司已力求报告内容的客观、公正，但文中的观点、结论和建议仅供参考，不包含作者对证券价格涨跌或市场走势的确定性判断。报告中的信息或意见并不构成所述证券的买卖出价或征价，投资者据此做出的任何投资决策与本公司和作者无关。本研究报告并不构成本公司对购入、购买或认购证券的邀请或要约。本公司有可能会与本报告涉及的公司进行投资银行业务或投资服务等其他业务(例如:配售代理、牵头经办人、保荐人、承销商或自营投资)。

本报告所包含的观点及建议不适用于所有投资者，且并未考虑个别客户的特殊情况、目标或需要，不应被视为对特定客户关于特定证券或金融工具的建议或策略。投资者不应以本报告取代其独立判断或仅依据本报告做出决策，并在需要时咨询专业意见。

本报告所载的资料、意见及推测仅反映本公司于发布本报告当日的判断，本报告所指的证券或投资标的的价格、价值及投资收入可升可跌，过往表现不应作为日后的表现依据；在不同时期，本公司可以发出其他与本报告所载信息不一致及有不同结论的报告；本报告所反映研究人员的不同观点、见解及分析方法，并不代表本公司或其他附属机构的立场；本公司不保证本报告所含信息保持在最新状态。同时，本公司对本报告所含信息可在不发出通知的情形下做出修改，投资者应当自行关注相应的更新或修改。本公司及作者在自身所知情形范围内，与本报告中所评价或推荐的证券不存在法律法规要求披露或采取限制、静默措施的利益冲突。

本报告版权仅为本公司所有，本报告仅供意向收件人使用。未经书面许可，任何机构和个人不得以任何形式翻版、复制和发布给其他机构及/或人士（无论整份和部分）。如引用须注明出处为本公司研究所，且不得对本报告进行有悖原意的引用、删节和修改。刊载或者转发本证券研究报告或者摘要的，应当注明本报告的发布人和发布日期，提示使用证券研究报告的风险。本公司不为转发人及/或其客户因使用本报告或报告载明的内容产生的直接或间接损失承担任何责任。未经授权刊载或者转发本报告的，本公司将保留向其追究法律责任的权利。

本公司保留一切权利。