Knowledge and Solutions in Chemistry and Life Sciences

molecular modeling and (q)sar
computational toxicology
information management
quality by design
multivariate analysis

consulting services
training activities
in silico predictions
contract research
software solutions

www.s-in.it

S-IN Soluzioni Informatiche is an Italian company offering a range of services in scientific informatics: consultancy, contract research, training, *in silico* predictions, and acting as distributors of specialist software for Life Sciences. We work closely with numerous companies, research centres and international organizations in the sectors of chemistry, pharmaceuticals, food and cosmetics, and are specialized in Molecular Modeling, (Q)SAR Analysis, Computational Toxicology, Data Storage and Management of chemical information, Quality by Design and Multivariate Analysis.
Our project teams are formed by experts from a variety of sectors who work closely together, combining scientific and computational expertise with chemical data management. The result is a cross-fertilization of experiences that allows us to respond with practical and precise solutions to a wide range of requirements.
We are exclusive distributors in Italy for a number of highly rated software solutions producers, chosen thanks to our extensive experience amassed over the years, and our careful analysis of market demand and state of the art technology in our sectors of interest.
We offer support in selecting and installing software, providing also consulting and training for their implementation and utilization.

molecular modeling and qsar

Our molecular modeling team is a group of experts in computational chemistry, computational toxicology and computer-aided drug design.
We collaborate on pre-clinical research projects with other scientists in chemistry, biology and pharmacology, using approaches such as virtual screening, hit-to-lead and lead optimization through structure and ligand based design, ADMET profiling predictions and QSAR Analysis.

computational toxicology

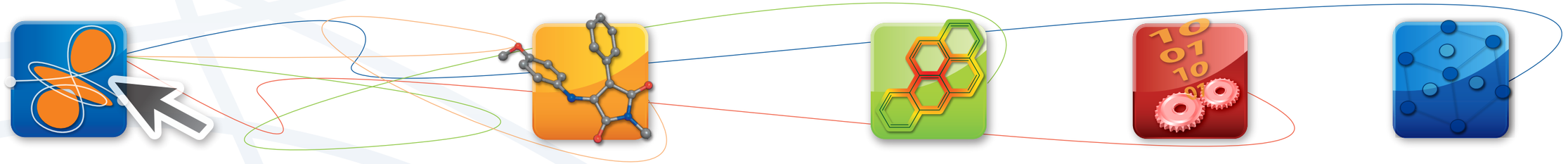
The computational toxicology team is made up of computational chemistry and toxicology experts in both legislation and research for this area. We provide *in silico* predictions of physicochemical properties and (eco)toxicology predictions, in line with current legislation. We also offer training and consultancy on a variety of methodologies – QSAR, read-across and expert systems – and find the right software solutions to meet your specific requirements.

chemical data storage and management

This team is formed by experts with a range of multidisciplinary skills: computing, database design and development, business and solutions analysis, computational chemistry and toxicology, multivariate analysis. We offer support and software, desktop and enterprise solutions, for the storage, management and analysis of chemistry based data. The archived information includes a variety of data typologies: from molecular structures, to toxicity, biological activity and above all live spectra.

quality by design

Our team comprises experts in DOE (design of experiments) techniques and MVA (multivariate data analysis), applied to R&D and industrial facility related issues, and have considerable experience in the chemistry, pharmaceutical, food and biomedical areas. We provide specific software solutions and consulting services to optimize products, processes, and for fine tuning validation; we select the most appropriate multivariate method for each data set, and then we analyze and interpret results.



S-IN Soluzioni Informatiche è una società italiana che offre servizi di consulenza, ricerca su contratto, formazione, predizioni *in silico* e distribuzione software nell'ambito delle Scienze per la Vita. Collaboriamo con aziende, centri di ricerca ed enti internazionali del settore chimico, farmaceutico, cosmetico e alimentare. Le nostre aree di competenza sono la Modellistica Molecolare, l'Analisi (Q)SAR, la Tossicologia Computazionale, l'Archiviazione e la Gestione di dati di tipo chimico, il Quality by Design e l'Analisi Multivariata.
I nostri team di progetto sono formati da esperti in differenti settori che collaborano tra loro: uniamo competenze scientifiche a competenze informatiche nell'ambito della gestione dei dati correlati alla chimica. Il risultato è una sinergia tra le diverse esperienze che ci mette in grado di rispondere in modo pratico e preciso a molteplici esigenze.
Siamo distributori esclusivi per l'Italia di alcune importanti case produttrici di soluzioni software, selezionate grazie all'esperienza maturata negli anni e ad una attenta analisi dell'offerta del mercato e dello stato dell'arte nei diversi settori. Offriamo supporto nella fase di selezione e installazione, forniamo consulenza e formazione per l'implementazione e l'utilizzo.

Il nostro team di modellistica molecolare è formato da esperti di chimica computazionale, tossicologia computazionale e computer-aided drug design. Collaboriamo con ricercatori in chimica, biologia e farmacologia a progetti di ricerca in fase pre-clinica utilizzando approcci di virtual screening, di hit-to-lead e di lead optimization basati su tecnologie di structure- e ligand-based design, predizione di profili ADMET e analisi QSAR.

Il nostro team è formato da esperti di chimica e tossicologia computazionale, applicata sia in ambito normativo che in ambito di ricerca. Forniamo predizioni *in silico* di proprietà chimico-fisiche ed (eco)tossicologiche in conformità con le normative vigenti, formazione e consulenza sulle varie metodologie – QSAR, read-across e expert systems – e adeguate soluzioni software selezionate in base alle diverse esigenze.

Il nostro team è formato da esperti con molteplici competenze: informatica, progettazione e sviluppo di database, business e solutions analysis, tossicologia e chimica computazionale, analisi multivariata. Offriamo supporto e soluzioni software, desktop ed enterprise, per l'archiviazione, la gestione e l'analisi di dati di origine chimica. I dati archiviati includono informazioni integrate di diversa natura: strutture molecolari, tossicità, attività biologica e spettri.

Il nostro team è formato da esperti con competenze nelle metodologie DOE (design of esperiments) ed MVA (multivariate data analysis), applicate a problematiche R&D e di impianto industriale, e con esperienza nei settori chimico-farmaceutico, alimentare e biomedico. Forniamo specifiche soluzioni software e consulenza per l'ottimizzazione di un prodotto, di un processo, per la messa a punto di un test di robustezza; valutiamo il metodo multivariato più adatto per lo studio di ciascun set di dati, effettuiamo l'analisi e forniamo l'interpretazione dei risultati.

www.s-in.it

Consult our website www.s-in.it for information on our training courses, workshops or webinars, and events where we are present. The News section provides updates on the upgrades and release of new software, regulations and legislation, and the most recent techniques and methods in the sectors of interest.

Al nostro sito web www.s-in.it è possibile trovare maggiori informazioni sulle nostre attività quali corsi di formazione, partecipazione ad eventi, organizzazione di workshop e webinar. Inoltre la sezione news viene costantemente aggiornata con notizie che riguardano gli upgrade e le release di nuovi software, le normative vigenti, le tecniche e metodi più recenti nei diversi settori.

via G. Ferrari 14, I-36100 Vicenza, Italy | tel. +39 0444 1821160, fax +39 0444 1821169 | info@s-in.it | **www.s-in.it**