



*Innovation*

# CDP DATA BASES

(Edition Janvier 2019)

CDP-INNOVATION  
G2C Business center, 63 Rue André Bollier, 69007 Lyon cedex 07, France  
Société par Actions Simplifiées au capital de 39000 €  
482 740 503 RCS Lyon

## **Fragrances and Flavor Data Base** (version 4.4) **5720 € HT\***


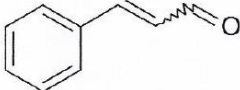
Cette base décrit les molécules utilisées dans les domaines de la parfumerie ou des arômes avec leurs propriétés organoleptiques. Elle mentionne aussi bien des produits commerciaux que des produits au stade de la recherche. Pour les produits commerciaux, une liste des fournisseurs est indiquée. La version 4.4 contient 4400 produits.

Recherche possible par

- structure
- noms chimiques
- noms usuels
- RN-Cas
- numéro FEMA
- numéro ECHA
- numéro EINECS
- propriétés olfactives
- propriétés organoleptiques
- limites de détection
- substantivité
- naturalité et l'occurrence du produit
- caractéristiques physico-chimiques
- fournisseurs industriels actuels
- fournisseurs industriels antérieurs
- occurrence

Possibilité de recherches multicritères

\* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.

 <b>FRAGRANCES AND FLAVORS DATA BASE</b>				ID:
<b>CHEMICAL NAME:</b> <p style="text-align: center;">3-Phenyl-2-propenal</p>				
<b>CHEMICAL STRUCTURE:</b> <div style="text-align: center;">  </div>				
<b>NATURAL STRUCTURE:</b>	<b>AVAILABILITY:</b>	<b>FORMULA:</b>	<b>MOLECULAR WEIGHT:</b>	
Yes	Commercial	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O	132.16	
<b>NATURAL OCCURRENCE:</b>			<b>CAS NUMBER:</b>	
Beer Cassia Celery seed Sour cherry Cinnamon Clove stem Cognac Guava Lemon balm Black tea Tomato Red wine			104-55-2-	
			<b>FEMA NUMBER:</b>	
			2286	
<b>NAMES:</b>			<b>ECHA NUMBER:</b>	
Aldehyde cinnamique naturel (153) Cassia aldehyde Cinnamal Cinnamaldehyde (44) Cinnamaldehyde natural (44) Cinnamic aldehyde (48,145,158) Cinnamic aldehyde FCC (186) <small>Cinnamic aldehyde natural (145,158,186)</small>			100.002.922	
			<b>EC NUMBER:</b>	
			203-213-9	
			<b>FLASH POINT (°C):</b>	
			71	
			<b>BOILING POINT (°C):</b>	
			250	
<b>SUPPLIERS:</b>		<b>EX SUPPLIERS:</b>		<b>PRESSURE (mmHg):</b>
Fleurchem (145) Mane (176) Prodasynt (153) SAFC Flavors & Fragrances (44) Symrise (158) Vigon (186)		Quest (48)		760.00
				<b>CHIRALITY:</b>
				No
				<b>E-Z ISOMERS:</b>
				Yes
				<b>LOG P:</b>
				1.900
<b>MELTING POINT (°C):</b>	<b>DENSITY:</b>	<b>ODOR THRESHOLD (ng/l air)</b>	<b>TASTE THRESHOLD (ng/l water)</b>	<b>SUBSTANTIVITY:</b>
-7.5	1.0480			212.0
<b>ODOR:</b>				
Sweet spicy, warm, woody cinnamic, cinnamon bark, phenolic clove-like with a fruity resinous nuance (4). Cinnamon, clove, spicy (44).				
<b>TASTE:</b>				
Sweet spicy, warm cinnamic, sweet medicinal with a fruityphenolic nuance (4). Cinnamon, spicy, fragrant, clove, sweet, cassia, burning, aromatic taste (44).				
<b>FRAGRANCE APPLICATIONS:</b>				
Gives a warm spicy twist. Particularly useful in white florals (48).				
<b>FLAVOR APPLICATIONS:</b>				
Cinnamon, spicy nuances, cola, spice blends, confections, oral care products and chewing gums (149).				

## **Names of Chemical Reactions** (version 0.49)

**637 € HT\***

La base Names of Chemical Reactions est à la fois un outil de créativité permettant de rechercher des méthodes de synthèse pour un produit, de retrouver des réactions parfois méconnues des chimistes actuels pour réaliser une transformation et un outil pédagogique d'autoformation décrivant les mécanismes. La version 0.49 décrit les mécanismes de 490 réactions avec leurs mécanismes.

Recherche possible par :

- nom de réaction
- structure (réactifs ou produits formés ou transformations souhaitées)
- intermédiaires réactionnels
- conditions
- mécanisme

Possibilité de recherches multicritères

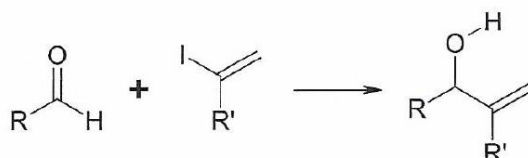
La base renvoie également à des références dans lesquelles cette réaction a été utilisée.

\* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.

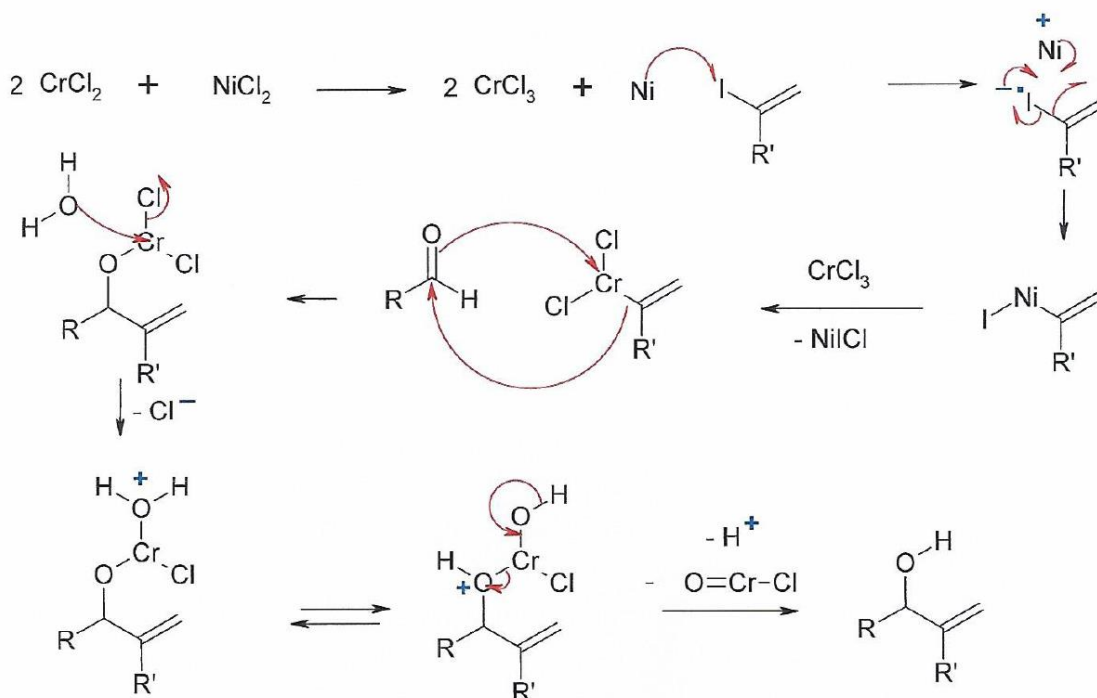
REACTION NAME:

Nozaki-Hiyama-Takai-Kishi reaction

EQUATION:



MECHANISM:



REAGENTS:

Aldehydes  
Vinyl iodide

CONDITIONS:

Reagent ( $\text{CrCl}_2$ )  
Catalyst ( $\text{NiCl}_2$ )  
Solvent (DMF, DMSO,...)

PRODUCTS:

Allylic alcohols

REACTION TYPES:

Coupling  
Nozaki-Hiyama-Takai-Kishi

LITERATURE:

1-Role of the Nozaki-Hiyama-Takai-Kishi reaction in the synthesis of natural products, A. Gil, F. Albericio, M. Alvarez\*, Chem. Rev., (2017), 117, 8420-8446.

COMMENTS:

## **Chemical Reactions** (version 1.5)

**750 € HT\***

Chemical Reactions est une compilation de réactions générales, récentes et originales de la littérature. Les réactions figurant dans la base ont également été retenues en raison de leurs rendements élevés, de leur caractère général. Cette version contient 1500 réactions récentes. Cette base est aussi un outil pour accroître la créativité.

Recherche possible par

- sous-structures
- réaction
- réactifs
- structure de ligands
- auteurs
- université

.....

Possibilité de recherches multicritères

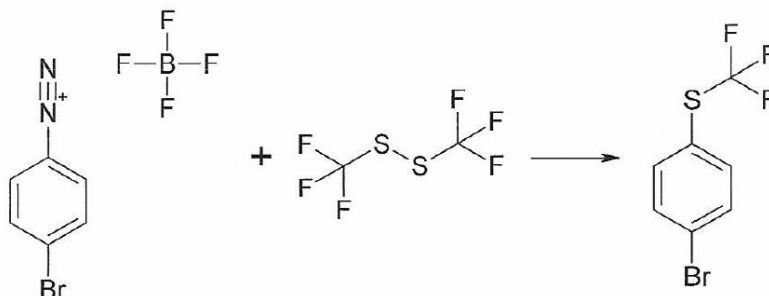
\* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.



TITLE:

Radical aromatic trifluoromethylthiolation: photoredox catalysis vs. base mediation

REACTION:



CONDITIONS:

t=1h  
1 Eq. of F3SSCF3  
0.5 mol% of [Ru(bpy)3]Cl2  
LED (450nm)

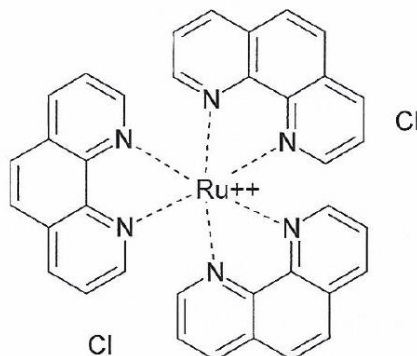
REACTION SOLVENT:

Dimethylsulfoxide

REACTION TEMPERATURE (°C):

20

CATALYST OR LIGAND:



YIELD (%):

58.0

CONVERSION (%):

SELECTIVITY (%):

ASYMMETRIC REACTION:

No

STEREOSELECTIVITY:

COMPOUND:

COMPOUND:

TRANSFORMATION:

Chemical

REACTION NAMES:

STRAINS OR ENZYMES OR PLANTS:

ELEMENT:

Ruthenium

Trifluoroythiomethylation

AUTHORS:

D. Koziakov, M. Majek, A. Jacobi von Wangelin\*

REVIEW:

Eur. J. Org. Chem., (2017), 6722-6725

ADDRESS

Institute of Organic Chemistry, University of Regensburg, Germany  
Department of Chemistry, University of Hamburg, Martin Luther King Platz 6, 20146 Hamburg, Germany

PATENT NUMBER:

APPLICATION DATE:

COMPANY:

CDP-INNOVATION

G2C Business center, 63 Rue André Bollier, 69007 Lyon cedex 07, France  
Société par Actions Simplifiées au capital de 39000 €  
482 740 503 RCS Lyon

# Cosmetics Data Base (version 1.8) **2700 € HT\***

Cette base décrit les molécules utilisées dans les domaines de la cosmétique avec leurs propriétés physico-chimiques et les propriétés revendiquées. Elle mentionne principalement des produits commerciaux. Pour les produits commerciaux, une liste des fournisseurs est indiquée. La version 1.8 contient 1800 produits.

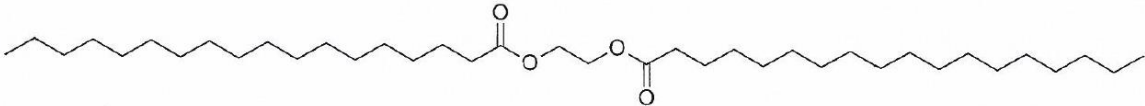
## Recherche possible par

- sous-structures
- noms chimiques
- noms usuels
- nom INCI
- RN-Cas
- numéro FEMA
- numéro ECHA
- numéro EINECS
- numéro enregistrement Chine
- propriétés INCI
- propriétés cosmétiques
- odeur
- solubilité
- données toxicologiques et ecotoxicologiques
- naturalité et l'occurrence du produit
- caractéristiques physico-chimiques dont le Log P
- fournisseurs industriels actuels
- fournisseurs industriels antérieurs

## Possibilité de recherches multicritères

\* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.



COSMETICS DATA BASE						ID:
CHEMICAL NAME:						
1,2-EthanediyI bis(octadecanoate)						
INCI NAME:					INCI CLASS:	
GLYCOL DISTEARATE					Emollient	
CHEMICAL STRUCTURE:						
						
NATURAL STRUCTURE:	AVAILABILITY:	FORMULA:	MOLECULAR WEIGHT:			
No	Commercial	$C_{38}H_{74}O_4$	595.01			
NATURAL OCCURRENCE:					CAS NUMBER:	
					627-83-8	
					FEMA:	
					ECHA NUMBER:	
					100.010.014	
NAMES:					EC NUMBER:	
Alkalmuls 504/V (45)					211-014-3	
Cithrol EGDS (9)						
1,2-EthanediyI bis(octadecanoate)						
Ethylene distearate						
Glycerol stearate					CHINA NUMBER:	
					5627	
COSMETICAL SPECIALITIES:					FLASH POINT (°C):	
Mackadet BWC-CL {cocamide MEA, cocamidopropyl betaine, disodium oleamido MEA-sulfosuccinate, glycol distearate, propylene glycol, sodium laureth sulfate, sodium lauryl sulfate} (45)						
Saboperl 500 {cocamide MEA, glycol distearate, laureth-10, sodium laureth					BOILING POINT (°C):	
SUPPLIERS:			EX SUPPLIERS:			
HallStar (3)						
Croda (9)						
Sabo (39)						
Solvay (45)						
MELTING POINT (°C):		DENSITY:	ABSORPTION:	RI:	LOG P:	TOXICITY-ECOTOXICITY:
62.0					16.120	Toxicological information: Acute oral toxicity LD50 (rat): dose
ODOR:						
PROPERTIES:						
Bodying agent (3).						
Emollient (45).						
USES:						
Facial cleansers, foot care, hair colorants, hair conditioners, liquid handsoaps, shampoos, shower gels, styling aids (3).						
SOLUBILITY:					MINIMUM INHIBITORY CONCENTRATION (PPM):	
Ethanol hot [9003-99-0]: soluble						
Isopropanol hot [67-63-0]: soluble						

# Pharma Data Base (version 0.7)

**1400 € HT\***

Cette base décrit les molécules utilisées dans les domaines de la pharma avec leurs propriétés physico-chimiques et pharmacologiques. Elle mentionne principalement des actifs, mais également des nutraceutiques ou des excipients. la version 0.7 comprend 700 produits. Tous les nouveaux produits récemment homologués par la FDA sont systématiquement enregistrés.

Recherche possible par

- structures ou sous-structures
- domaine thérapeutique
- par classe de composé (active ingrédients, excipients, biologics,..)
- noms chimiques
- noms usuels
- noms commerciaux
- RN-Cas
- numéro ECHA
- numéro EINECS
- propriétés pharmacologiques
- données toxicologiques et écotoxicologiques
- naturalité et l'occurrence du produit
- caractéristiques physico-chimiques dont le Log P
- fournisseurs industriels actuels
- fournisseurs industriels antérieurs
- produits génériques ou princeps avec date d'expiration des brevets

Possibilité de recherches multicritères


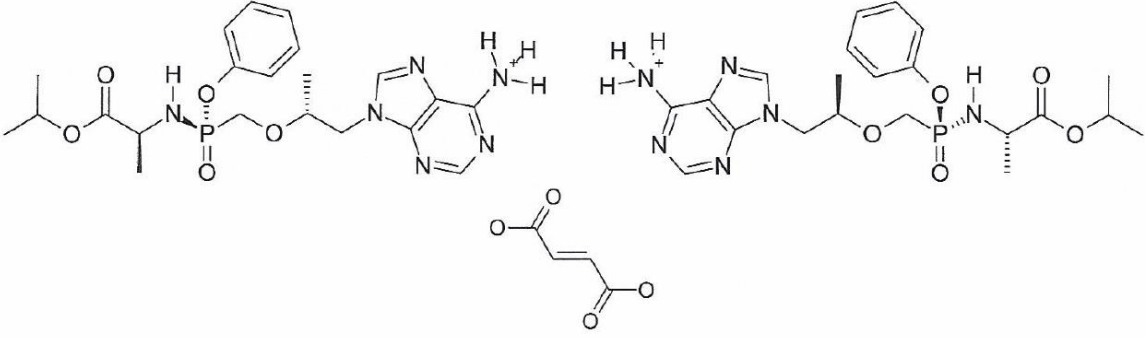
\* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.

CDP-INNOVATION

G2C Business center, 63 Rue André Bollier, 69007 Lyon cedex 07, France

Société par Actions Simplifiées au capital de 39000 €

482 740 503 RCS Lyon

 <b>PHARMA DATA BASE</b>						ID:
<b>CHEMICAL NAME:</b> Bis(propan-2-yl (2S)-2-[[[(2R)-1-(6-aminopurin-9-yl)propan-2-yl]oxymethyl-phenoxyphosphoryl]amino]propanoate) (E)-but-2-enedioate						503
<b>THERAPEUTIC USES:</b> Virology (Hepatitis B)				<b>CATEGORY:</b> Active ingredients		
<b>CHEMICAL STRUCTURE:</b> 						
<b>NATURAL STRUCTURE:</b> No		<b>AVAILABILITY:</b> Commercial See tenofovir alafenamide		<b>FORMULA:</b> C <sub>46</sub> H <sub>62</sub> N <sub>12</sub> O <sub>14</sub> P <sub>2</sub>		<b>MOLECULAR WEIGHT:</b> 1069.03
<b>NATURAL OCCURRENCE:</b>				<b>APPROVAL DATE:</b> EU 19/11/2015 EU 21/06/2016		<b>CAS NUMBER:</b> 1392275-56-7
<b>DCI AND OTHER NAMES:</b> Bis(propan-2-yl (2S)-2-[[[(2R)-1-(6-aminopurin-9-yl)propan-2-yl]oxymethyl-phenoxyphosphoryl]amino]propanoate) (E)-but-2-enedioic acid Bis(propan-2-yl (2S)-2-[[[(2R)-1-(6-aminopurin-9-yl)propan-2-yl]oxymethyl-phenoxyphosphoryl]a						<b>ATC CLASSIFICATION:</b> J05AF13
<b>BRAND NAME:</b> Biktarvy Descovy Genvoya Odefsey Vemlidy						<b>EC NUMBER:</b>
<b>PHARMACEUTICAL LABORATORIES:</b> France Gilead USA				<b>FLASH POINT (°C):</b>		
<b>API SUPPLIERS:</b>				<b>BOILING POINT (°C):</b>		
<b>API EX-SUPPLIERS:</b>				<b>PRESSURE (mmHg):</b>		
				<b>CHIRALITY:</b> Yes		
				<b>E-Z ISOMERS:</b> Yes		
<b>MELTING POINT (°C):</b>		<b>DENSITY:</b>		<b>ABSORPTION:</b>		<b>TOXICITY-ECOTOXICITY:</b>
<b>POSOLOGY:</b> Adult: 25 mg/day				<b>DOSAGE FORM:</b> Tablets		
<b>PROPERTIES-USES:</b> Nucleotide reverse transcriptase inhibitor						
<b>COMMENTS:</b> EU 19/11/2015: EMA approved Genvoya. EU 21/06/2016: EMA approved Odefsey.						
<b>SOLUBILITY:</b>				<b>ORIGINATOR &amp; APPLICATION DATE:</b> Gilead WO 2013025788 A1 (16/08/2011)		<b>STATUS:</b> Princeps (2031)

# Parapharmaceutical Data Base (version 0.1)

**200 € HT\***

Cette base décrit les molécules utilisées dans les domaines de la parapharmacie avec leurs propriétés physico-chimiques et les propriétés revendiquées. Elle mentionne principalement des produits commerciaux, pour lesquels une liste des fournisseurs est indiquée. La version 0.1 contient 100 produits.

Recherche possible par


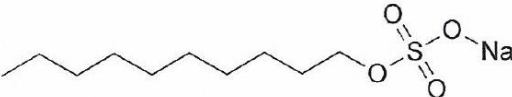
- sous-structures
- noms chimiques
- noms usuels
- spécialités parapharmaceutiques
- domaines d'utilisation
- laboratoires commercialisant les spécialités parapharmaceutiques
- RN-Cas
- numéro FEMA
- numéro ECHA
- numéro EINECS
- propriétés
- solubilité
- données toxicologiques et écotoxicologiques
- naturalité et l'occurrence du produit
- caractéristiques physico-chimiques dont le Log P
- fournisseurs industriels actuels
- fournisseurs industriels antérieurs



Possibilité de recherches multicritères

\* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.



 <b>PARAPHARMACEUTICAL DATA BASE</b>		ID:			
<b>CHEMICAL NAME:</b> Sodium monododecyl sulfate					
<b>USES:</b> Dermatology		<b>FUNCTIONS:</b> Formulation (Surfactant)			
<b>CHEMICAL STRUCTURE:</b> 					
<b>NATURAL STRUCTURE:</b> No	<b>AVAILABILITY:</b> Commercial	<b>FORMULA:</b> $C_{10}H_{21}NaO_4S$	<b>MOLECULAR WEIGHT:</b> 260.33		
<b>NATURAL OCCURRENCE:</b>		<b>CAS NUMBER:</b> 151-21-3			
<b>OTHER NAMES:</b> Naterol N70 Naterol N95 Naterol P90-USP Sabosol LSS/P Sodium lauryl sulfate Sodium lauryl sulphate		<b>FEMA NUMBER:</b>			
		<b>ECHA NUMBER:</b> 100.005.263			
		<b>EC NUMBER:</b> 205-788-1			
<b>PARAPHARMACEUTICAL SPECIALITIES INGREDIENTS:</b> Addax mains Hycalaia 75 {allantoin, aqua, bisabolol, butylphenyl methylpropional, butyrospermum parkii, C13-14 isoparaffin, cinnamic alcohol, citronellol, cetearyl alcohol, citric acid, coco-caprylate/caprata, coumarin, dimethiconol, geraniol, glycerin, hexyl cinnamal, imidazolidinyl urea, alpha-isomethyl ionone, laureth-7, limonene, linalool, methylparaben, parfum, polyacrylamide, propylparaben, retinyl palmitate, sodium cetearyl sulfate,		<b>FLASH POINT (°C):</b>			
		<b>BOILING POINT (°C):</b>			
		<b>PRESSURE (mmHg):</b>			
<b>PHARMACEUTICAL LABORATORIES:</b> France Omega Pharma (1)		<b>INGREDIENT SUPPLIERS:</b> Croda Cisme Ceba			
		<b>CHIRALITY:</b> No			
		<b>E-Z ISOMERS:</b> No			
<b>MELTING POINT (°C):</b>	<b>DENSITY:</b>	<b>ABSORPTION:</b>	<b>RI:</b>	<b>LOG P:</b>	<b>TOXICITY-ECOTOXICITY:</b>
<b>POSOLOGY:</b>			<b>DOSAGE FORM:</b> Cream		
<b>PROPERTIES-USES:</b> Emulsifier Foaming					
<b>COMMENTS:</b> Addax mains Hycalia 75: moisturizer and anti-roughness cream (1).					
<b>SOLUBILITY:</b>		<b>ORIGINATOR &amp; APPLICATION DATE:</b> Standard Oil Development US 2393152 (16/07/1940)		<b>STATUS:</b> Generic	

**N'hésitez pas à demander une démonstration au représentant de CDP-Innovation durant la formation**

Renseignement auprès de [info@cdp-innovation.com](mailto:info@cdp-innovation.com)

CDP-INNOVATION  
G2C Business center, 63 Rue André Bollier, 69007 Lyon cedex 07, France  
Société par Actions Simplifiées au capital de 39000 €  
482 740 503 RCS Lyon