

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***

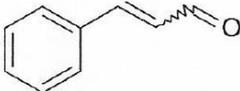
Cette base décrit les molécules utilisées dans les domaines de la parfumerie ou des arômes avec leurs propriétés organoleptiques. Elle mentionne aussi bien des produits commerciaux que des produits au stade de la recherche. Pour les produits commerciaux, une liste des fournisseurs est indiquée. La version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

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

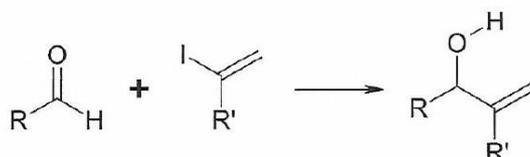
La base renvoie également à des références dans lesquelles cette réaction a été utilisée.

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

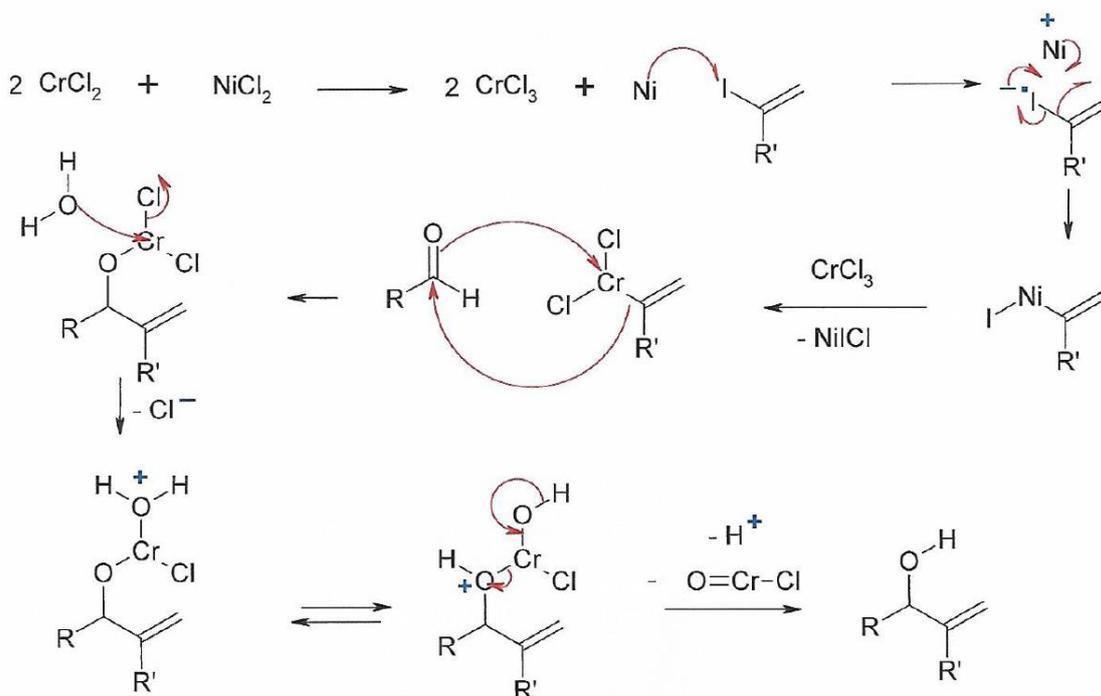
REACTION NAME:

Nozaki-Hiyama-Takai-Kishi reaction

EQUATION:



MECHANISM:



REAGENTS:

Aldehydes
Vinyl iodide

CONDITIONS:

Reagent (CrCl_2)
Catalyst (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

.....

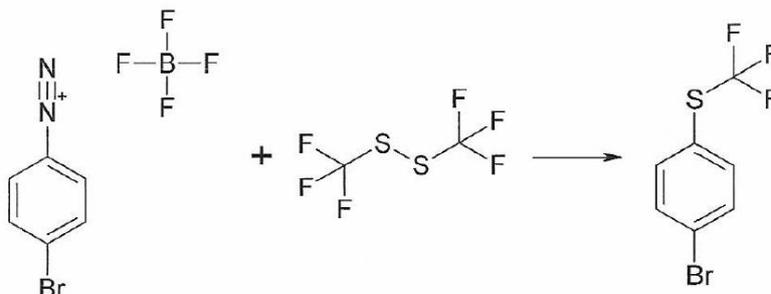
Possibilité de recherches multicritères

* 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)

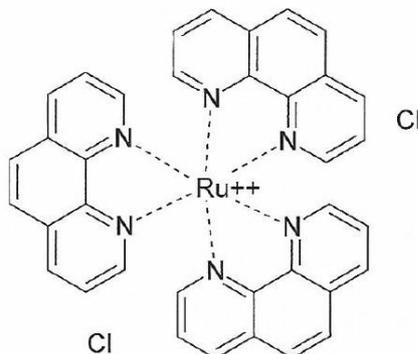
REACTION SOLVENT:

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***

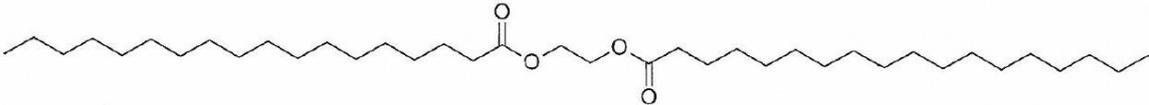
Cette base décrit les molécules utilisées dans les domaines de la cosmétique avec leurs propriétés physico-chimiques et les propriétés revendiquées. Elle mentionne principalement des produits commerciaux. Pour les produits commerciaux, une liste des fournisseurs est indiquée. La version 1.8 contient 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	
					EC NUMBER:	
					211-014-3	
					CHINA NUMBER:	
					5627	
					FLASH POINT (°C):	
					BOILING POINT (°C):	
					PRESSURE (mmHg):	
					CHIRALITY:	E-Z ISOMERS:
					No	No
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 (actifs ingrédients, excipients, biologiques,...)
- 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

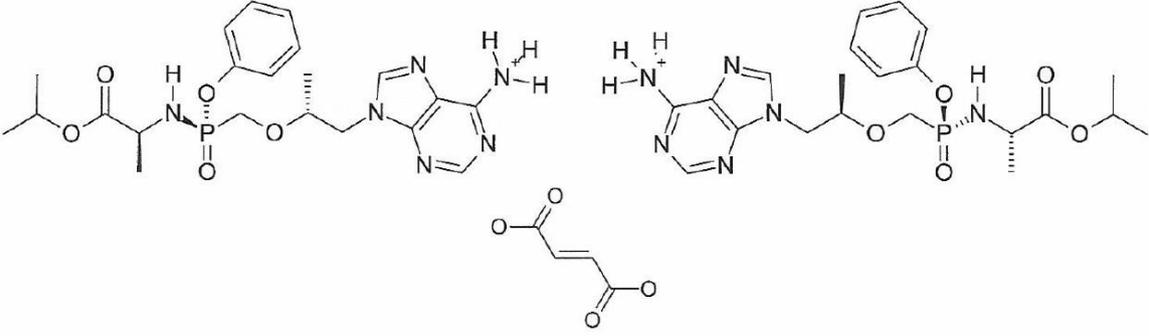
* Toutes les bases sont fournies sous forme de fichiers SDF/RDF reconnus par la majorité des logiciels de bases de données structurales.

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

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

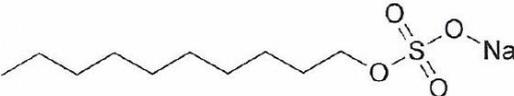
Recherche possible par

- 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.

 PARAPHARMACEUTICAL DATA BASE		ID:			
CHEMICAL NAME:					
Sodium monododecyl sulfate					
USES:		FUNCTIONS:			
Dermatology		Formulation (Surfactant)			
CHEMICAL STRUCTURE:					
					
NATURAL STRUCTURE:	AVAILABILITY:	FORMULA:	MOLECULAR WEIGHT:		
No	Commercial	$C_{10}H_{21}NaO_4S$	260.33		
NATURAL OCCURRENCE:		CAS NUMBER:			
		151-21-3			
OTHER NAMES:		FEMA NUMBER:			
Naterol N70 Naterol N95 Naterol P90-USP Sabosol LSS/P Sodium lauryl sulfate Sodium lauryl sulphate					
		ECHA NUMBER:			
		100.005.263			
		EC NUMBER:			
		205-788-1			
PARAPHARMACEUTICAL SPECIALITIES INGREDIENTS:		FLASH POINT (°C):			
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,					
PHARMACEUTICAL LABORATORIES:		INGREDIENT SUPPLIERS:			
France Omega Pharma (1)		Croda Cisme Ceba			
		CHIRALITY:			
		No			
		E-Z ISOMERS:			
		No			
MELTING POINT (°C):	DENSITY:	ABSORPTION:	RI:	LOG P:	TOXICITY-ECOTOXICITY:
POSOLOGY:			DOSAGE FORM:		
			Cream		
PROPERTIES-USES:					
Emulsifier Foaming					
COMMENTS:					
Addax mains Hycalia 75: moisturizer and anti-roughness cream (1).					
SOLUBILITY:		ORIGINATOR & APPLICATION DATE:		STATUS:	
		Standard Oil Development US 2393152 (16/07/1940)		Generic	

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

Renseignement auprès de 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