

爱思唯尔
DRAA联盟 Reaxys数据库2020-2022年续订方案

2020年1月1日 – 2022年12月31日

项目负责人: 王庆伟
产品负责人: 向安民、俞靓

2019年9月24日

目录

一、	Reaxys数据库介绍	3
1.	Reaxys数据库设计理念	3
2.	Reaxys数据库主要特色	3
3.	Reaxys数据库的数据覆盖范围	6
4.	Reaxys数据库的更新概览	7
二、	DRAA联盟用户Reaxys八年用量分析和价格回顾	9
三、	DRAA联盟2020-2022年Reaxys数据库爱思唯尔DRAA价格方案	10
1.	定级方案与说明	10
2.	2020-2022年度现有用户续订方案（计价货币单位：美元）	11
3.	2020-2022年度新订用户订购方案（计价货币单位：美元）	11
4.	2020-2022年度Reaxys药理学模块订购方案（计价货币单位：美元）	11
四、	付款代理商说明	12
五、	服务与售后支持	12
1.	服务及售后支持范围	12
2.	Reaxys数据库的客户服务，以及中国支持团队成员列表	13

一、Reaxys 数据库介绍

Reaxys是由化学专家们在充分考虑到化学工作者的科研流程, 以及使用习惯后开发设计出的, 面对大化学科研领域的在线信息解决方案。其前身是世界上著名的贝尔斯坦(Beilstein)和盖默林(Gemelin)手册, 距今已超过240年的历史, Reaxys截止到2019年已经有31年的历史。Reaxys在Beilstein基础上整合了盖墨林(Gmelin)和专利化学数据库(PCD)以及化学相关期刊的内容, 能帮助用户快速全面的查询化合物的理化数据, 设计经济、高效的合成路线, 最大程度的节省时间和资金成本。其收录的数据范围涵盖有机合成、药物化学、天然产物化学、无机化学和金属有机化学, 并将化学反应, 化合物物性数据, 合成线路设计进行无缝对接, 使科技检索工作更加高效、精准, 并以其强大的检索功能和深入的核心信息摘录为化学研究注入新的生机。

1. Reaxys数据库设计理念

Reaxys产品团队均来自化学行业的专家, 有多年的研发经验和数据库设计经验。他们充分理解化学家如何工作, 将化学家最常用的物质和反应作为检索中心, 并结合先进的索引、数据挖掘技术和分类学方法, 将文献全文中的物质结构、理化性质、反应过程、分析结果等与化学相关的所有信息进行摘录和整理, 用最直观的方式呈现给用户, 极大的节省了使用者文献查询的时间, 提高了文献检索的效率。

2. Reaxys数据库主要特色

1) 最全的有机化学、无机化学、金属有机化学事实与数值型数据库

只有拥有结构和反应事实以及被可信文献引用报道的数据才会被Reaxys收录。Reaxys专注于经过实验验证的可以直接应用的反应和物质信息, 从而帮助科研人员节省时间, 避免错误的尝试。

2) Reaxys中的Quick Search, 能帮助化学工作者快速获取所需答案

Reaxys中的Quick Search页面中可以快速通过关键词与结构获取化学相关信息。如下图1与图2, 就是在Quick Search中的一个检索快速获得物质溶解度的一个检索, 可利用一个简单的短语即可快速获得到所需要的答案:

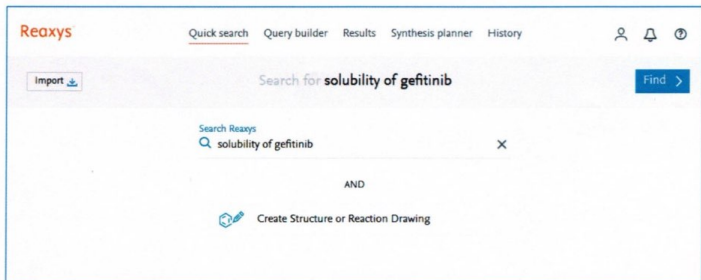


图1: Reaxys中的Quick Search中快速检索

Reaxys

Quick search Query builder Results Synthesis planner History

1 Substances, 5,196 Documents, 105 Reactions, 1,059 Targets

Reaxys - 1

1 gefinib
C₂₂H₂₅N₅O₃ 446,909 894,953 184475-35-2

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Bioactivity (All)

Physical Data - 71

Spectra - 60

Other Data - 2,939

Preparations - 69 >

Reactions - 105 >

Targets - 1,059 >

Documents - 5,196 >

Hit Data - 1

Solubility (MCS) - 1 hits out of 1

Solubility, g·L ⁻¹	Saturation	Temperature (Solubility (MCS), °C)	Solvent (Solubility (MCS))	Reference
0.0021	in pure solvent	20	water	Zhao, Feng; Lin, Zhaoqiang; Wang, Feng; Zhao, Wei; Dong, Xiaochun - [Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 2013, vol. 23, # 19, p. 5385 - 5388] Full Text Cited 19 times Details Abstract

Show/Hide columns

图2: Reaxys中快速获得答案

3) 检索结果的高度集中整理, 更方便核心信息的收集和对比

Reaxys将来自16,000多种化学相关学科期刊、全球7大专利局、10,000多本相关专著的核心信息进行收录和整理, 用户可通过简单检索, 获取该主题所有数据信息, 而无需逐篇阅读全文。如下图3, 在Reaxys中获取化合物的“电化学”数据, Reaxys会将文献中, 涉及“电化学”的数据直接提取和分类整理出来, 直接呈现, 无需阅读全文, 节省全文下载、逐篇阅读, 自我筛选的时间。

Electrochemical Characteristics - 20 hits out of 20

Description (Electrochemical Characteristics)	Solvent (Electrochemical Characteristics)	pH-value (Electrochemical Characteristics)	Temperature (Electrochemical Characteristics), °C	Comments (Electrochemical Characteristics)	Product (Electrochemical Characteristics)	Reference
oxidation	further solvent(s)		25	saturated calomel electrode (SCE) potential diagram 0.1 M NaOH		Ma, Guojun; Yan, Hongling; Shi, Jingping; Geng, Xu; Lu, Zhongli; Li, Cao - [Journal of Catalysis, 2008, vol. 240, # 1, p. 134 - 140] Full Text Cited 58 times Details Abstract
oxidation	water	3	59.84	transmitted electronic 2, saturated calomel electrode (SCE) -0.05 V - 0.05 V	492,294, 395288	Gomes, Da Silva; Pereira, Mendonça, Costa - [Electrochimica Acta, 2004, vol. 49, # 11, p. 2315 - 2340] Full Text Cited 8 times Details Abstract
oxidation	water	3	59.84	transmitted electronic 2, saturated calomel electrode (SCE) -0.1 V - 0 V	492,294, 395288	Gomes, Da Silva; Pereira, Mendonça, Costa - [Electrochimica Acta, 2004, vol. 49, # 11, p. 2315 - 2340] Full Text Cited 8 times Details Abstract
oxidation	acetonitrile, pyridine			saturated silver chloride electrode, potential diagram 0.1 mol/L Bu4NClO4		Bernecke, Störmer - [Russian Chemical Bulletin, 2000, vol. 49, # 7, p. 1178 - 1184] Full Text Cited 8 times Details Abstract
oxidation	acetonitrile, further solvent(s)			saturated silver chloride electrode, potential diagram 0.1 mol/L Bu4NClO4		Bernecke, Störmer - [Russian Chemical Bulletin, 2000, vol. 49, # 7, p. 1178 - 1184] Full Text Cited 8 times Details Abstract
oxidation	acetonitrile, acetonitrile			saturated silver chloride electrode, potential diagram 0.1 mol/L Bu4NClO4		Bernecke, Störmer - [Russian Chemical Bulletin, 2000, vol. 49, # 7, p. 1178 - 1184] Full Text Cited 8 times Details Abstract
oxidation	aq. HClO4	11 - 13		transmitted electronic 2, saturated silver chloride electrode, potential diagram 0.1 M NaOH/0.01M NaCl - 401 mV - 401 mV	492,294	Gilchik, Anthony; Evans, S. Edward; Dennis, Emily; Shawcross, Curtis - [Journal of Physical Chemistry B, 1998, vol. 102, # 34, p. 6499 - 6506] Full Text Cited 34 times Details Abstract

Show/Hide columns

图3: Reaxys中直接浏览电化学参数信息

4) Reaxys中的Query Builder, 能帮助化学工作者利用不同的条件组合获取答案

Reaxys中的Query Builder提供180个字段和字段组的检索, 这些字段完全涵盖了有机化学、

无机化学、金属有机化学的主要分类。利用这些字段, 不仅可以在Reaxys中进行正向检索, 即: 对已知化合物进行信息查询; 还同时支持逆向检索, 即: 只知道需要满足的必备条件, 反向查询满足该条件的化合物。正是因为Reaxys对全文文献中的核心数据的提炼与分类, 才使得其成为化学家们最为常用的信息获取工具。如下图4, 检索明确报道过的, 具备“立体选择性催化特性”的, 且含有“铁”原子的化合物, 在Reaxys中可利用“催化研究”与“分子式”两个字段进行联合检索即可快速获取相关内容, 便可以用于化学材料的研究。

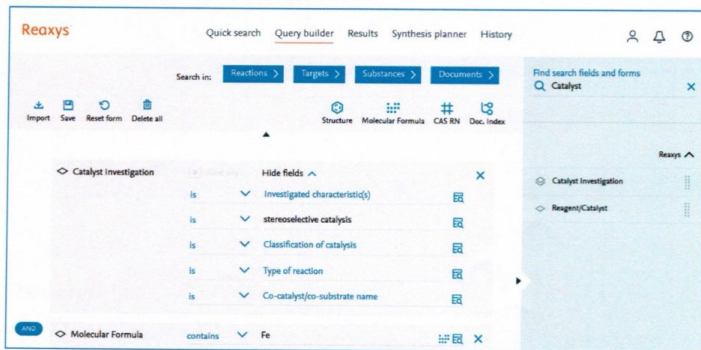


图4: Reaxys中的反向物质查询

5) Reaxys中功能强大的结构面板, 能帮助化学工作者定义复杂结构

Reaxys中的结构面板, 给予了化学工作者定义化学结构时无限的自由度, 允许定义多种可变结构, 如基团的不定位取代, R基团的自定义, Not Atom定义, 并可针对结构中特定需求, 精准定义原子, 键的属性。如下图5, 就是一个复杂的结构定义, 该结构中需要有多多个不同的R基团。

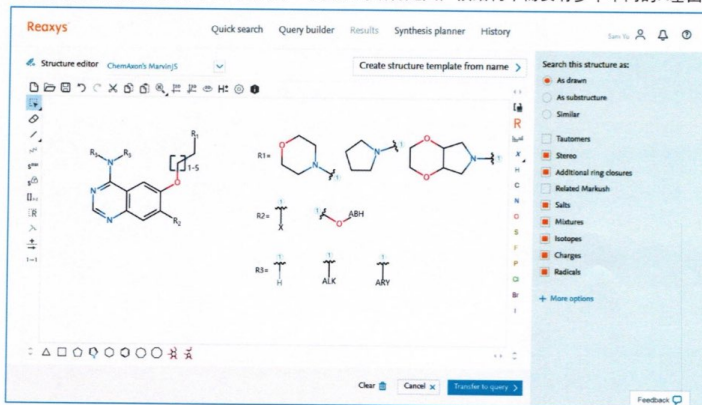


图5: Reaxys中的复杂结构设计

6) Reaxys中的合成路线设计

Reaxys中收录了4,970多万个反应的反应结构与条件,同时开发出了符合科研人员使用习惯的合成路线设计功能,包括手动设计与自动设计两种模式。自动模式中Reaxys对4,970多万个反应进行大数据分析和索引,根据产率优先和引用优先原则,在4,970多万个反应中进行优化配置而来,一次提供最多10条的指定条件的反应路线。设计出来的合成路线也可以手动修改,极大提升了化学家进行化合物路线设计时的效率。手动模式,则可依据有机合成人员的习惯,手动添加符合条件的合成路线。如下图6,是一张用手动设计制作出来的合成路线:

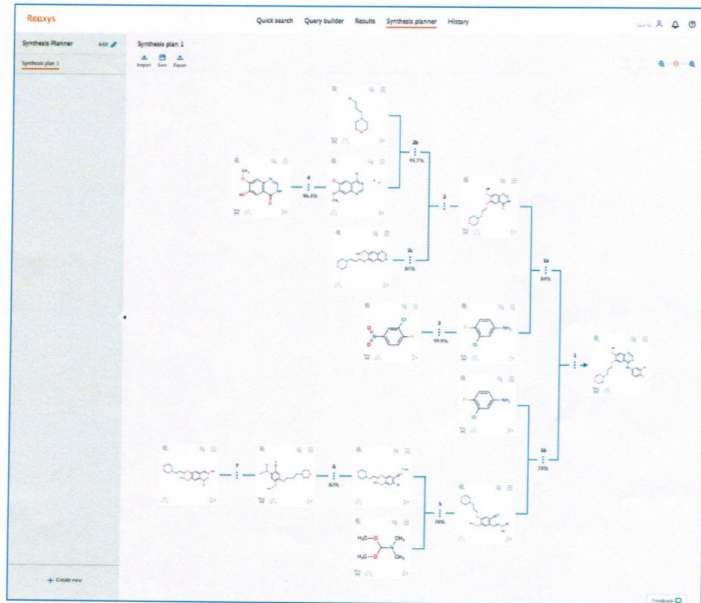


图6: Reaxys中的合成路线设计

7) 无并发用户数限制,无用量限制

Reaxys采用IP段授权使用方式,无并发用户数限制,无用量限制。最大程度满足学术用户对信息快速获取的需求,满足学校范围内全体师生研究数据查询的需要。

8) 数据的延展交互

Reaxys收录的16,000多种涉及化学领域的期刊,用户可以直接从Reaxys中获取全文链接,在全文相关授权允许的情况下,直接链接到全文,省去多次文献检索的时间。

3. Reaxys数据库的数据覆盖范围

Reaxys数据库的前身是德国久负盛名的贝耳斯坦(Beilstein)和盖默林(Gmelin)数据库。2010

年, Elsevier将Beilstein和Gmelin数据库以及专利数据库用全新的界面通过在线方式推出后, 更名为Reaxys数据库。因此, Reaxys数据库是收录时间跨度最大的化学工具库。2016年爱思唯尔在接纳众多科研人员意见后, 对Reaxys进行改版, 改版后的Reaxys在获取结果的效率, 有了较大幅度的提升。同时于2018年10月, Reaxys与ChemDraw进行联合, 在现有Reaxys系统中, 内嵌了全球范围内化学家最为熟悉的ChemDraw绘图软件, 极大的提高了化学结构绘制的便捷性。截止2018年12月, Reaxys数据库的收录数据和相关参数如下所示:

Reaxys 主要技术参数

访问方式	网页访问, IP授权, 支持用户注册和个性化设置
支持浏览器	Microsoft IE 11, FireFox 49 and Google Chrome 53, Edge 27及以上
收录数据时间跨度	1771年至今
数据来源范围	专利数据库, 专著, 16,121种同行评定的期刊
涵盖反应数量	超过4,880万种
涵盖物质数量	超过12,000万条
涵盖引文数量	超过5,857万条
数据收录原则	经过实验验证的事实型数据
更新频率	文献每天更新, 专利每周更新
交互性	提供化学品供应商信息, 专利全文直接获取, 原文链接
特色功能	自动合成路线设计, 生物活性数据, 国内化学品供应商信息

Reaxys收录期刊涵盖与化学相关的16个学科, 分别为:

- 农业及生命科学 Agriculture and Life Sciences
- 生物化学, 分子生物学 Bio-chemistry and Molecular Biology
- 化学工程 Chemical Engineering
- 化学 Chemistry
- 牙科学 Dentistry
- 宇宙科学 Earth and Planetary Sciences
- 能源 Energy
- 工程 Engineering
- 环境 Environmental Science
- 免疫学及微生物学 Immunology and Microbiology
- 材料科学 Materials Science
- 药学 Medicine
- 神经系统科学 Neuroscience
- 药理学及毒理学 Pharmacology, Toxicology and Pharmaceutics
- 物理学和天文学 Physics and Astronomy
- 兽医学 Veterinary

4. Reaxys数据库的更新概览

截至2018年12月, 自2016年以来Reaxys在内容方面的升级有:

1) 专利覆盖范围的升级

新增亚洲三大专利局, 分别是中国专利(包括中国台湾)、日本专利和韩国专利。2016年12月, 完成日本专利和韩国专利的追溯; 2017年12月, 完成中国专利的追溯;

2) 原文中核心信息摘录范围的升级

从原有核心数据库(约1,200种)的原文摘录范围扩增至16,121种期刊的全文信息摘录。通过计算机Text Mining技术和人工校对, 将16,121种期刊原文中与化学相关的物质、反应、实验过程、结果分析、图标等内容收集整合到Reaxys中, 帮助用户节省阅读原文的时间, 提高检索效率;

3) 商业信息的来源的升级

与Labnetwork(览博网)合作, 连同底层数据, 直接获取中国试剂供应商库存信息, 同时还与Sigma-Aldrich进行对接, 帮助用户节省试剂购买查询时间;

截至2018年12月, 自2016年以来Reaxys在功能方面的更新:

1) 新版Reaxys的发布与优化

2016年爱思唯尔在接纳众多科研人员意见后, 对Reaxys进行改版, 改版后的Reaxys在获取结果的效率上, 有了较大范围的提升, 简化使用方法, 同时去除Java插件的安装, 以适用于更多的浏览器。全球范围内已经在2018年完成了新老Reaxys版本的切换。下图是新版Reaxys简洁的界面:

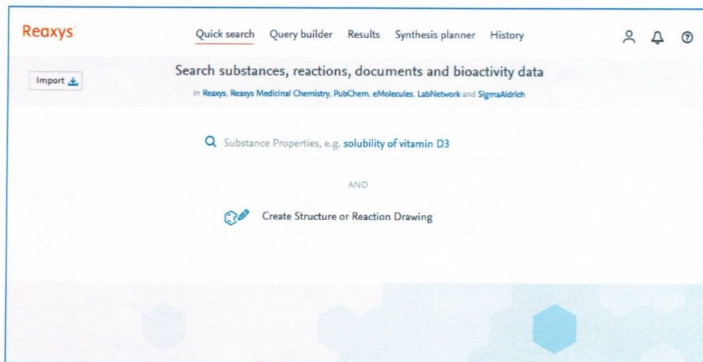


图7: 新版Reaxys登录界面

2) ChemDraw结构面板的融合

2018年7月, 与ChemDraw进行联合, 在现有Reaxys系统中, 内嵌了全球范围内化学家最为熟悉的ChemDraw绘图软件, 同时可以很方便的交互使用, 极大的提高了化学结构绘制的便捷性。

3) Auto Suggested的发布

2018年7月, Reaxys推出Auto Suggested功能, 在任何使用关键词检索的时候, 会向用户推

荐使用词汇, 帮助用户更好的找到关键内容。

2019年全年, Reaxys计划做以下方面更新:

1) Auto Suggested中新增生物医药类词表

根据产品部的计划, 在2019年上半年, Reaxys内部的检索词表会进行大规模的扩增, 新增爱思唯尔旗下的全球最大的生物医学数据库Embase的Emtree词表, 用于生物医药类文献的精准获取。

2) 供应商商业信息的直接获取

计划在2019年上半年, Reaxys会继续整合商业信息, 可以直接获取化学品价格, 库存, 而无需跳转至供应商主页获取相关信息。

3) 核心数据摘取速度的提升,

Reaxys计划在2019年对于文献中的核心数据摘录速度进行提升, 相比之前可以节省30%的时间, 有利于帮助科研人员更快的获取到全文中的关键数据, 所有数据的抓取无核心期刊与非核心期刊的区别, 全部一视同仁。

二、DRAA 联盟用户 Reaxys 八年用量分析和价格回顾

截至2019年1月, DRAA联盟有31家高校为Reaxys数据库的现有用户。根据Reaxys用量服务器的统计, 我们将2011年至2018年连续八年的Reaxys总用量进行分析, 非自然年份订购用户按月折算, 结果如下:

2011-2018年DRAA联盟Reaxys用量一览			
年份	总检索次数	DRAA集团总价格 (美元)	单次检索价格 (美元)
2011	484,358 (14 所)	\$326,939	\$0.67
2012	852,032 (15 所)	\$377,837	\$0.44
2013	963,622 (16 所)	\$429,459	\$0.45
2014	1,982,575 (18 所)	\$513,410	\$0.26
2015	1,791,786 (19 所)	\$583,656	\$0.33
2016	2,180,765 (20 所)	\$655,366	\$0.30
2017*	2,107,088 (22 所)	\$751,756	\$0.36
2018*	2,066,172 (28 所)	\$921,174	\$0.45

2017年与2018年, 均有高校属于非自然年订购, 金额按月折算价格, 2018全年新增6家订购用户, 2019年1月, 又新增3家自然年订购用户。



从总体趋势来看, Reaxys即使在内容和功能大量更新的情况下, 单次检索成本比较平稳。2017-2018单次检索成本的变化, 主要有以下两点原因:

- 2017-2018, Reaxys 新平台的推广和转换, 使得科研人员获取信息的速度更快, 检索效率明显加快, 包括检索次数和检索时间的同时减少。根据全球范围内的大量数据的分析和比对, 用量平均降低超过 25%, 表面上造成的单次检索成本同比上升 33%, 而更加实际的原因是检索效率和获得信息的明显提高。
- 2017-2018, Reaxys 用户数量增幅达到 40%, 大量新订用户的加入, 对单次检索费用的增加也有直接的影响。

综合以上的分析, 近几年的Reaxys检索成本是平稳的, 同时Reaxys新版本也极大的提高了检索效率, 节省了使用人员的时间成本。

三、DRAA 联盟 2020-2022 年 Reaxys 数据库爱思唯尔 DRAA 价格方案

感谢中国高校联盟多年来对爱思唯尔科技部以及Reaxys数据库的支持, 期望后续更好的合作。2020年1月1日至2022年12月31日订购方案如下:

1. 定级方案与说明

- 1) 方案起始日期范围为2020年1月1日至2022年12月31日。
- 2) 新加入集团的成员, 合同期与集团合同期保持一致, 首年度按照实际开始月份按月折算收取费用。
- 3) 在本方案有效期内, 爱思唯尔为有意向订购Reaxys数据库的DRAA集团新用户三个

免费试用。

- 4) Reaxys数据库采用IP地址授权的网页访问模式, 没有并发用户数量限制。
- 5) Reaxys数据库的定价在基于全球标准价格和中国区折扣的基础上, 根据学校化学、材料、生命科学和医学及相关专业的人数(包括教师、工作人员、职员、博硕士生)和科研实力情况, 具体分级如下(DRAA集团当前用户级别保持不变):

级别	相关研究人员数量	是否有化学相关学科博士学位授予点及联合博士学位授予点
特小型	<= 150	否
小型	150- 300	是
中型	300-1000	是
大型	>1001	是

2. 2020-2022年度现有用户续订方案(计价货币单位: 美元)

免责声明:

本方案仅供爱思唯尔与DRAA联盟探讨Reaxys爱思唯尔价格框架。本方案提及的所有价格均为爱思唯尔美元定价, 代理商拥有确定其与DRAA成员最终价格的权利。

DRAA 集团现有用户2020-2022年的续订价格每年的增长幅度为5.00%。集团中用户若采用非自然年订购合同, 费用根据实际使用年份的对应月份进行费用折算。

3. 2020-2022年度新订用户订购方案(计价货币单位: 美元)

新用户订购, 按照所属级别, 爱思唯尔DRAA价格方案如下:

级别	2019 年价格	2020 年价格	2021 年价格	2022 年价格
特小型	\$28,064	\$29,467	\$30,941	\$32,488
小型	\$36,688	\$38,522	\$40,449	\$42,471
中型	\$43,662	\$45,845	\$48,137	\$50,544
大型	\$50,514	\$53,040	\$55,692	\$58,476

以上提及的所有价格均为爱思唯尔美元定价, 最终人民币价格由代理商和DRAA成员的商务流程结果决定。汇率与付汇手续费参照DRAA集团对代理商招标结果执行。考虑到中国相关政策的变化, 爱思唯尔会适当调整代理商的代理费。

4. 2020-2022年度Reaxys药学模块订购方案(计价货币单位: 美元)

爱思唯尔根据药学科研人员的需求, 在Reaxys的基础上, 2013年推出Reaxys药学模块(Reaxys Medicinal Chemistry, 简称RMC), 该模块能高效的帮助药学科研人员获取期刊和专利中报道的生物活性数据, 属于加载在Reaxys数据库上的一个可选附属模块, RMC模块DRAA订购方案如下:

- 1) 方案起始日期范围为2020年1月1日至2022年12月31日。

- 2) 现有RMC客户，每年的增长幅度与Reaxys相同，为5.00%。如按照5.00%计算涨幅后得到的价格高于当年DRAA RMC模块价格，则按照当年DRAA RMC模块价格进行计算。
- 3) 新定用户RMC模块的定价，将基于Reaxys DRAA 2020-2022年方案价格，根据药学相关专业的人数（包括教师、工作人员、职员、博硕士生）和科研实力情况，按照Reaxys价格相关的比例进行计算，具体计算比例如下：

级别	相关药学人数	RMC价格执行比例
大型	>800	46%
中型	200-800	38%
小型	100-200	30%
特小型	<100	22%

*若无药学相关专业博士学位授予点及联合博士学位授予点，可以直接定义为特小型。

*订购RMC的前提需要先订购Reaxys，原有订购Reaxys的高校，新订RMC的价格和同时新增Reaxys/RMC的价格一致，即按照新增客户的方式来处理RMC的价格，从2020年1月1日开始，新增RMC的价格如下：

级别	2019 年价格	2020 年价格	2021 年价格	2022 年价格
特小型	\$6,174	\$6,483	\$6,807	\$7,147
小型	\$11,006	\$11,556	\$12,134	\$12,741
中型	\$16,592	\$17,422	\$18,293	\$19,207
大型	\$23,236	\$24,398	\$25,618	\$26,899

以上提及的所有价格均为爱思唯尔美元定价，最终人民币价格由代理商和DRAA成员的商务流程结果决定。汇率与付付手续费参照DRAA集团对代理商招标结果执行。考虑到中国相关政策的变化，爱思唯尔会适当调整代理商的代理费。

四、付款代理商说明

爱思唯尔数据库指定如下公司作为DRAA联盟成员订阅爱思唯尔Reaxys数据库的付款代理商。代理商承诺遵守《高校图书馆数字资源采购联盟章程与工作规范》，履行《高校图书馆数字资源采购联盟第四次代理商中标合同》，请各图书馆自行考虑和抉择。

1. 中国教育图书进出口公司
2. 北京中科进出口有限责任公司
3. 中国图书进出口(集团)总公司
4. 中国国际图书贸易集团有限公司
5. 中国科技资料进出口总公司

五、服务与售后支持

1. 服务及售后支持范围

- 1) 爱思唯尔将提供中英文同等法律效力的使用协议；使用协议适用法律为中国法律；仲裁机构为中国香港地区的仲裁机构，仲裁语言为中英文同等法律效力。

2) Reaxys数据库售后服务内容:

- a) Reaxys中国支持团队可为中国高校联盟的所有用户提供每年1-2次的现场培训, 须提前预约;
 - b) 每个学年提供不少于4场的网络培训, 采用案例的形式, 分难易阶段进行, 提供给所有的DRAA集团成员参加;
 - c) 继续开展高端的学术活动, 包括Reaxys PhD Prize (从2012年以来, 举办5届以上), Reaxys-Chem学术周 (2018和2019年连续举办), 服务高校师生的国际交流和发表高质量的学术论文, 提高学术研究产出, 并会联合图书馆加强推广;
 - d) 同时计划联合医药行业里面优秀的企业加强在高校大学生, 特别是研究生中的宣传推广, 举办全国性或者区域内的知识竞赛, 协助图书馆提高学术的信息素养, 并为后续就业服务。
- 3) 爱思唯尔客户支持部将努力在一个工作日内响应客户有关Reaxys的疑问, Reaxys中国支持团队为中国高校联盟的所有用户提供最晚2个工作日的服务响应承诺。
- 4) 按用户要求及时向用户提供使用统计数据; 按DRAA通知日期及时向DRAA提交各成员馆的使用统计数据, 且保证提交数据的质量 (准确性, 完整性); 如果在实现COUNTER标准上有进展, 及时告知DRAA。
- 5) 提供CERNET专线访问, 订购用户在协议期间的专线访问费将被免除。
- 6) 根据客户实际情况, 可进行登录方式选择:
- a) 访问方式一: 对于没有发生过多次过量下载 (2次/年, 一个合同期内累计不超过3次), 可以采用IP段授权使用方式, 没有并发用户数限制, 也没有用量限制。
 - b) 访问方式二: 对于频繁连续发生多次过量下载 (2次/年, 一个合同期内累计超过3次), 根据产品部的要求, 为了防止可能的产品知识产权侵犯, 也为了不妨碍绝大多数用户的正常使用, 并且能够实行有效的追查和监管, 经与用户、大学图书馆协商后, 可以选择IP段内采用账号注册的登陆方式, 仍然没有并发用户数限制, 也没有用量限制。

2. Reaxys数据库的客户服务, 以及中国支持团队成员列表

1) 爱思唯尔客户服务联系信息:

电话: 010-85208765

E-mail: sginfo@elsevier.com

服务时间: 周一到周五 (节假日除外) 北京时间9:00 -- 17:00

2) 中国支持团队成员列表

姓名	职位	联系电话	电子邮箱	分管区域
向安民	中国区生命科学解决方案负责人	13501896830	a.xiang@elsevier.com	所有客户
俞靓	生命科学解决方案客户顾问	18930408012	s.yu.2@elsevier.com	北京市, 重庆市, 安徽省, 四川省, 黑龙江, 吉林省, 辽宁省, 山东省, 云南省, 广东省, 江西省, 陕西省, 甘肃省, 青海省, 河北省, 新疆维吾尔自治区, 西藏自治区, 宁夏回族自治区
吴鹏	生命科学解决方案客户顾问	15021270371	p.wu.1@elsevier.com	上海市, 天津市, 江苏省, 浙江省, 海南省, 湖北省, 福建省, 山西省, 广西省, 河南省, 湖南省, 贵州省, 内蒙古自治区

Reaxys数据库DRAA集团采购方案签名页 (2020.01.01-2022.12.31)

1. 牵头单位

集团采购牵头单位: 北京大学图书馆

联系人 章琳, 电话: 010-62767165, Email: zhl@calis.edu.cn

2. 谈判组成员

姓名	单位/职务	签字
别立谦	北京大学图书馆/副馆长	别立谦
王金玲	北京大学医学图书馆/副馆长	王金玲
徐 璟	上海交通大学图书馆/副馆长	徐璟

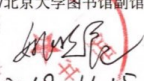
3. 数据库提供方

Reaxys数据库由爱思唯尔公司提供, 数据库提供方签字:

数据库联系人	数据库负责人
[姓名] 俞轶 [职务] 生命科学解决方案咨询顾问 电话: +86-21-61333055 手机: +86-18930408012 传真: +86-21-61333010 邮箱: s.yu.2@elsevier.com 地址: 上海市长宁区天山西路567号神州智慧天地5楼A-1室 励德爱思唯尔信息技术(北京)有限公司上海分公司 邮编: 200335	[姓名] Gino Ussi [职务] Research Solution Sales执行副总裁 Executive Vice President RSS, Elsevier 签字/Signature:  日期/Date:

4. DRAA 秘书处

该数据库方案已通过DRAA理事会审核, 由北京大学图书馆代章。

秘书处联系人	秘书处负责人
李莹 电话: 010-62755595-120 邮箱: liy@calis.edu.cn 地址: 北京市海淀区颐和园路5号北京大学图书馆135-G 邮编: 100871	姚晓霞 DRAA副理事长/北京大学图书馆副馆长 签章/Signature:  日期/Date: 2019.11.15 

Reaxys 数据库及附属药学模块 RMC 评估报告

2019 年 9 月

1 数据库简介

Reaxys 是由化学专家在充分考虑到化学工作者的科研流程, 根据使用习惯而开发设计、面对大化学科研领域的在线信息解决方案。其前身是世界上著名的贝尔斯坦(Beilstein)和盖默林(Gemelin)手册, 距今已超过 240 年的历史。截止到 2019 年, Reaxys 已有 31 年的历史。Reaxys 在 Beilstein 基础上整合了盖墨林(Gmelin)和专利化学数据库(PCD)以及化学相关期刊的内容, 能帮助用户快速全面的查询化合物的理化数据, 设计经济、高效的合成路线, 最大程度的节省时间和资金成本。其收录的数据范围涵盖有机合成、药物化学、天然产物化学、无机化学和金属有机化学, 并将化学反应、化合物物性数据、合成线路设计进行无缝对接, 使科技检索工作更加高效、精准, 并以其强大的检索功能和深入的核心信息摘录为化学研究注入新的生机。

Reaxys 药学模块 (Reaxys Medicinal Chemistry, 简称 RMC), 是爱思唯尔根据药学相关科研人员的需求, 于 2013 年推出的加载在 Reaxys 数据库上的一个可选附属模块。该模块能高效的帮助药学相关科研人员获取期刊和专利中报道的生物活性数据, 同时能快速获取药物活性与结构之间的关系, 使得药学工作者数据分析和获取更加高效。

截止至 2019 年 5 月底, Reaxys 数据库包含超过 4,997 万个反应, 超过 1.28 亿种化合物, 5,938 万条文献, 涵盖 16,000 多种化学期刊全文, 全球 7 大专利局文献, 10,000 本相关专著, 包含图书、会议论文等多种类型资源, 涵盖化学、生命科学、环境科学、药理学、材料科学等 16 个学科领域, 同时 Reaxys 还集成 eMolecules, PubChem, LabNetwork(览博网, 中国最大医药 CRO 公司开发), SigmaAldrich (全球最为著名的生命科学、化学试剂服务提供商) 数据库内容, 提供统一检索和访问。

2 Reaxys 资源内容与数量

2.1 资源数量

截止 2019 年 5 月, Reaxys 中包含:

反应数量: 49,977,181

物质数量: 128,598,501 (包括 Reaxys 独有、PubChem 和 eMolecules 中的物质数据)

文献数量: 59,382,244

期刊数量: 16,121

RMC 中生物活性数据: 36,667,544

与上一个合同期相比, 资源数量对比如下:

统计时间	摘录文献数据			化学相关摘录数据		
	总文献数量	期刊数量	专利数量	物质数量	反应数量	物性数量
2019.5	59,382,244	16,121	WO/EP/US/CN/JP/KR/TW	128,598,501	49,977,181	>5 亿
2016.12	53,768,017	16,098	WO/EP/US/CN/JP/KR	43,045,262	42,955,338	>5 亿

Reaxys 中的专利数据分为历史专利数据与深度专利数据:

- 历史专利数据, 涵盖 1803 年至 1980 年有机化学相关的专利信息, 专利摘要包括物质及反应数据, 专利引用信息包含专利号, 专利年, 国家代码。
- 深度专利数据, 涵盖 1976 年至今的英文专利信息, 分别来自世界专利局 (WO), 欧洲专利局 (EP), 以及美国专利局 (US)。自 2016 开始, “深度专利数据”新增日本专利局 (JP), 韩国专利局 (KR), 中国专利局 (CN) 及中国台湾专利局 (TW), 开始对日文, 韩文, 中文语种描述的结构、反应、理化性质进行提炼加工, 并逐渐进行专利信息回溯。
- 不同类型专利数据覆盖年限如下:
历史专利数据覆盖时间范围: 1803 年----1980 年
深度专利数据涵盖的时间范围:
世界专利 WO: 1978 年---至今
欧洲专利 EP: 1978 年---至今
美国专利 US: 1978 年---至今
日本专利 JP: 2010 年---至今
韩国专利 KR: 2010 年---至今
中国专利 CN: 2015 年---至今
中国台湾专利 TW(新增): 2015 年---至今
有机化学相关信息: 1959 年---至今
无机及金属有机相关信息: 1817 年---至今

Reaxys 附属药理学模块 (RMC) 资源内容:

RMC 中的数据, 全部源自期刊与专利, 截止 2019 年 5 月, RMC 从超过 128,000 篇药理学专利, 以及超过 354,000 篇药理学相关文献提炼:

- 36,667,544 个活性数据
- 超过 6,500,000 具有活性的化合物
- 超过 26,000 药物靶点
- 超过 5,400 生物物种

2.2 2018 年 Reaxys 平台主要功能更新及 2019 年计划更新

- 新版 Reaxys 的界面优化, 现行 Reaxys 界面会更加贴近使用人员的习惯。
- 现行 Reaxys 系统中, 内嵌了全球范围内最为化学家熟悉的 ChemDraw 绘图软件, 极大

的提高了化学家们结构绘制的便捷性。

- 关键词 Auto Suggested 的引入, 在任何使用关键词检索的时候, 会向用户提供推荐使用词汇, 帮助用户更好的找到关键内容。
- Reaxys 2019 年产品开发部计划更新内容
 - Auto Suggested 中新增生物医药类词表, Reaxys 内部的检索词表会进行大规模的扩增, 新增 Elsevier 旗下全球最大的生物医学数据库 Embase 中的 Emtree 词表, 用于生物医药类文献的检索和信息精准获取。
 - 供应商商业信息的直接获取, Reaxys 会继续整合商业信息, 可以直接获取化学品价格, 库存, 而无需跳转至供应商主页获取相关信息。
 - 加速从文献中摘录数据的速度, 项目完成后, 相比之前摘录速度会提高 30%, 便于科研人员更快的获取全文中的数据, 且无核心期刊/非核心期刊的区别。

3 Reaxys 资源检索系统与功能

3.1 数据库访问方式

采用网络访问方式, 提供专线访问, IP 段控制, 无并发用户限制和检索量限制。

3.2 服务平台

- 灵活的检索方式, 支持 180 多种不同的字段和字段组的检索, 类别包括: 结构/子结构, 分子式检索, 各类物性检索, 天然产物检索, 各类文本检索等
- 提供全文链接: 检索到的数据均提供原文链接, 方便用户进一步查询
- 友好的使用界面: 更具化学工作者的使用习惯和 workflow 设计的操作界面, 友好易用, 可与第三方化学软件所化结构式相互兼容
- 专业性强: 能根据用户的检索条件, 进行合成路线的自动设计, 和查找相似的合成路线, 尤其是自动合成路线设计功能, 可以在短时间内根据产率优先和引用优先的原则, 为用户提供 10 条无重复的全合成路线
- 更新频率: 期刊类文献数据每日更新, 专利文献数据每周更新。

4 Reaxys 集团情况及使用统计分析

4.1 成员馆情况

DRAA 自 2004 年开始集团采购, 最初成员 9 家, 2018 年底为 28 家。至 2019 年 1 月, 集团成员增长到 31 家。

	2016	2017	2018	2019.1
成员数	20	22	28	31

4.2 集团使用成本

	总检索次数	检索成本
2016	2,180,765	\$0.30
2017*	2,107,088	\$0.36
2018*	2,064,172	\$0.45

*说明：2017 年与 2018 年，均有高校属于非自然年订购，按月折算。

从总体趋势来看，Reaxys 即使在内容和功能大量更新的情况下，单次检索成本较为平稳。2017-2018 单次检索成本的变化，主要有以下两点原因：

- 2017-2018 年，Reaxys 新平台的推广和转换，使得科研人员获取信息的速度更快，检索效率明显提高，体现在检索次数和检索时间的同时减少。根据全球范围内使用统计数据的分析和比对，用量平均降低超过 25%。
- 2017-2018 年，集团新增用户增长较快，部分新增学校的用量相对较少，集团整体检索成本有所增加。

5 RMC 模块订购情况及使用分析

5.1 RMC 模块订购情况

RMC 模块自 2017 年正式在中国高校进行推广，目前有 6 家高校单独订购 RMC 模块。

5.2 已订购成员馆的使用情况

RMC 模块加载在 Reaxys 数据库上，是对于物质生物活性数据和药学数据的大量补充，因此，统计指标采用药物化学中 SAR（构效关系）制作次数与活性数据点击次数之和，以反映药学研究人员对 RMC 模块使用情况和实际的帮助。

截至 2019 年 5 月，DRAA 成员已有 6 家高校订购使用情况如下：

	用户数	SAR 制作次数	物质检索次数	检索量 (SAR+物质检索)	检索成本
2017*	1	16	870	886	\$7.43
2018*	3	361	13,942	14,303	\$1.33
2019.1-5 月*	6	1111	58,199	59,310	\$0.43

*说明：2017 年，2018 年均有高校属于非自然年订购，按月折算，2019 年数据截至 5 月底

6 Reaxys 与 RMC 模块集团采购方案

2020-2022 年，延续 2017-2019 年采购方案，现有集团成员级别保持不变，2020-2022 年 Reaxys 数据库方案要点：

- 用户分级：根据学校化学、生命科学和医学、材料及相关专业的人数（包括教师、工作人员、职员、博硕士生）和科研实力具体分级；现有集团成员级别保持不变。
- 合同期：2020 年 1 月 1 日至 2022 年 12 月 31 日，三年。新成员与集团合同期保持一致，首年度费用按月折算。
- 年涨幅：5%。

RMC 药学模块方案要点:

- Reaxys 药学模块 (Reaxys Medicinal Chemistry, 简称 RMC), 属于加载在 Reaxys 数据库上的一个可选附属模块, 可选择订购。
- 用户级别: 根据药学相关专业的人数 (包括教师、工作人员、职员、博硕士生) 和科研实力情况分级, 现有用户级别保持不变。
- 合同期: 2020 年 1 月 1 日至 2022 年 12 月 31 日, 三年。
- 年涨幅: 5%。

7 结论

作为专业性较强的商业数据库, 对高校图书馆而言, Reaxys 数据库属于研究级资源, 是化学、医学、生物、材料以及相关学科不可缺少的数据库。

Reaxys 数据库收录的化学数据, 是在化学领域较为领先的信息资源, 收录的历史数据和深度数据较为独特, 平台提供的化合物结构式检索, 以及专业性较强的物质合成路线功能, 可以使教学科研人员能够更快更准确的得到相关的数据。

RMC 模块中收录的生物活性数据, 除了摘录数据外, 还将错综复杂的数据进行了标准化处理, 为药学工作者提供了一站式检索与分析平台。