E DIN EN ISO 11238:2026-02 (D/E)

Erscheinungsdatum: 2026-01-23

Medizinische Informatik - Identifikation von Arzneimitteln - Dateielemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen Informationen zu Stoffen (ISO/DIS 11238:2026); Deutsche und Englische Fassung prEN ISO 11238:2026

Health informatics - Identification of medicinal products - Data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated information on substances (ISO/DIS 11238:2026); German and English version prEN ISO 11238:2026

Inhalt

Seite

Europäisches Vorwort 7

Vorwort 8

Einleitung 9

1 Anwendungsbereich 12

2 Normative Verweisungen 12

3 Begriffe 12

4 Symbole und Abkürzungen 27

5 Beschreibung der Grundsätze und Verfahren der Informationsmodellierung 29
5.1 Allgemeine Betrachtungen 29
5.2 Überblicksdiagramme zu den Begriffen 29
5.3 Abschnitt High-Level-Diagramme 30
5.4 Detaillierte Diagramme 30
5.5 Beziehungen zwischen Klassen 31
5.6 Anmerkungen 34
5.7 Attribute 34
5.8 Konformitätsterminologie und –kontext in Bezug auf dieses Dokument und ISO/TS 19844 35

6 Anforderungen 35
6.1 Allgemeines 35
6.2 Begriffe für die eindeutige Identifikation und Beschreibung von Stoffen 35
6.3 Begriffe für die Beschreibung festgelegter Stoffe 37
6.3.1 Allgemeines 37
6.3.2 Beziehung zwischen Stoffen und Gruppen festgelegter Stoffe 39
6.4 Benennung von Stoffen 40
6.5 Anforderungen an eindeutige Identifikatoren 41
6.6 Bestehende Identifikatoren und Darstellung der Molekülstruktur 42

7 Stofftypen 42
7.1 Allgemeines 42
7.2 Elementsätze, die mehreren Stofftypen gemeinsam sind 42
7.2.1 Struktur 42
7.2.2 Isotope 42
7.2.3 Modifikation 43
7.2.4 Referenzinformationen 44
7.2.5 Ursprungsmaterial 45
7.2.6 Taxonomie 46
7.2.7 Authentisierung pflanzlicher Arzneimittel 47

7.2.8 Stoffcodes ... 47
7.3 Chemische Stoffe ... 47
7.4 Proteinstoffe ... 49
7.5 Nukleinsäurestoffe ... 51
7.6 Polymere Stoffe ... 52
7.7 Strukturell verschiedenartige Stoffe ... 53
7.8 Stoffgemisch ... 56

8 Definierende festgelegte Stoffe ... 57
8.1 Allgemeines ... 57
8.2 Festgelegte Stoffe der Gruppe 1 ... 58
8.3 Festgelegte Stoffe der Gruppe 2 ... 61
8.4 Festgelegte Stoffe der Gruppe 3 ... 63
8.5 Festgelegte Stoffe der Gruppe 4 ... 65
8.5.1 Einleitende Bemerkungen zum Abschnitt über den Status von festgelegten Stoffen der Gruppe 4 ... 65
8.5.2 Allgemeines ... 65
8.5.3 Name der festgelegten Stoffe der Gruppe 4 ... 66
8.5.4 Qualität ... 66
8.5.5 Verwendung von Analysedaten ... 66
8.5.6 Herstellung ... 67
8.5.7 Version und Spezifikation ... 68

Anhang A (informativ) Bestehende Identifikatoren und Darstellungen der Molekülstruktur ... 72
A.1 Identifikatoren ... 72
A.1.1 Allgemeines ... 72
A.1.2 CAS-Nummern ... 72
A.1.3 InChI und InChIKey ... 72
A.1.4 EC-Nummer ... 72
A.1.5 UNII ... 73
A.1.6 ASK-Nummer ... 73
A.1.7 EV-Code ... 73
A.2 Darstellung der Molekülstruktur ... 74
A.2.1 Allgemeines ... 74
A.2.2 Molfile ... 74
A.2.3 SMILES ... 75
A.2.4 InChI ... 75
A.2.5 Dateiformate CDX und CDXML ... 75

Literaturhinweise ... 76

Bilder

Bild 1 — Legende für die Farbcodierung der Modellklassen ... 29

Bild 2 — Beispiel für ein Überblicksdiagramm zu den Begriffen ... 30

Bild 3 — Beispiel für ein High-Level-Diagramm ... 30

Bild 4 — Beispiel für ein detailliertes Diagramm ... 31

Bild 5 — Assoziation ... 31

Bild 6 — Multiplizität ... 32

Bild 7 — Vererbung/Verallgemeinerung ... 32

Bild 8 — Anzeige von vererbten Attributen ... 33

Bild 9 — Als ein Kommentar zu einem Diagramm verwendete Anmerkung 34

Bild 10 — High-Level-Informationsmodell von Stoffen 37

Bild 11 — High-Level-Informationsmodell zu Stoffen — festgelegten Stoffen 39

Bild 12 — Grundstoff und festgelegte Stoffgruppenbeziehungen von Triamcinolonacetonid 40

Bild 13 — Informationsmodell für Stoffnamen 41

Bild 14 — Informationsmodell für Struktur und Isotop 43

Bild 15 — Informationsmodell für Modifikation 44

Bild 16 — Informationsmodell für Referenzinformationen 45

Bild 17 — Informationsmodell für Ursprungsmaterialinformationen 46

Bild 18 — Informationsmodell für Stoffcodes 47

Bild 19 — Informationsmodell für die Klasse „Chemischer Stoff“ 49

Bild 20 — Informationsmodell für den Proteinstoff 51

Bild 21 — Informationsmodell für den Nukleinsäurestoff, High-Level-Ansicht 52

Bild 22 — Informationsmodell für den polymeren Stoff 53

Bild 23 — Informationsmodell für strukturell verschiedenartige Stoffe 56

Bild 24 — Informationsmodell für das Stoffgemisch 57

Bild 25 — High-Level-Informationsmodell für die festgelegten Stoffe der Gruppe 1 60

Bild 26 — High-Level-Informationsmodell für die festgelegten Stoffe der Gruppe 2 62

Bild 27 — Modell der erweiterten Herstellungsinformationen für die festgelegten Stoffe der Gruppe 2 63

Bild 28 — Informationsmodell für festgelegte Stoffe der Gruppe 3 64

Bild 29 — Informationsmodell für festgelegte Stoffe der Gruppe 4 65

Bild 30 — Detailliertes Informationsmodell für die festgelegten Stoffe der Gruppe 4 66

Bild 31 — Informationsmodell für Herstellung 68

Bild 32 — Informationsmodell/Ansicht der Spezifikation für festgelegte Stoffe der Gruppe 4 69