DIN EN ISO 11238:2018-11 (D)

Medizinische Informatik - Identifikation von Arzneimitteln - Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen Informationen zu Stoffen (ISO 11238:2018); Deutsche Fassung EN ISO 11238:2018

Inhalt

Seite

Europäisches Vorwort 4

Vorwort 5

Einleitung 6

1 Anwendungsbereich 9

2 Normative Verweisungen 9

3 Begriffe 9

4 Symbole und Abkürzungen 25

5 Beschreibung der Grundsätze und Verfahren der Informationsmodellierung 27
5.1 Allgemeine Betrachtungen 27
5.2 Überblicksdiagramme zu den Begriffen 28
5.3 Abschnitt High-Level-Diagramme 29
5.4 Detaillierte Diagramme 29
5.5 Beziehungen zwischen Klassen 30
5.6 Anmerkungen 32
5.7 Attribute 32
5.8 Nachrichtenaustauschformat 32
5.9 Konformitätsterminologie und –kontext in Bezug auf ISO 11238 und ISO/TS 19844 33

6 Anforderungen 33
6.1 Allgemeines 33
6.2 Begriffe für die eindeutige Identifikation und Beschreibung von Stoffen 34
6.3 Begriffe für die Beschreibung festgelegter Stoffe 35
6.3.1 Beziehung zwischen Stoffen und Gruppen festgelegter Stoffe 37
6.4 Benennung von Stoffen 38
6.5 Anforderungen an eindeutige Identifikatoren 39
6.6 Bestehende Identifikatoren und Darstellung der Molekülstruktur 40

7 Stofftypen 40
7.1 Allgemeines 40
7.2 Elementsätze, die mehreren Stofftypen gemeinsam sind 40
7.2.1 Struktur 40
7.2.2 Isotope 40
7.2.3 Modifikation 41
7.2.4 Referenzinformationen 42
7.2.5 Ursprungsmaterial 43
7.2.6 Taxonomie 44
7.2.7 Authentisierung pflanzlicher Arzneimittel 44
7.2.8 Stoffcodes 45
7.3 Chemische Stoffe 45
7.4 Proteinstoffe 46
7.5 Nukleinsäurestoffe 49
7.6 Polymere Stoffe 50
7.7 Strukturell verschiedenartige Stoffe 51
7.8 Stoffgemisch 54

8 Definierende festgelegte Stoffe 55
8.1 Allgemeines 55
8.2 Festgelegte Stoffe der Gruppe 1 56
8.3 Festgelegte Stoffe der Gruppe 2 59
8.4 Festgelegte Stoffe der Gruppe 3 61
8.5 Festgelegte Stoffe der Gruppe 4 62
8.5.1 Allgemeines 62
8.5.2 Name der festgelegten Stoffe der Gruppe 4 63
8.5.3 Qualität 63
8.5.4 Verwendung von Analysedaten 64
8.5.5 Herstellung 64
8.5.6 Version und Spezifikation 65

Anhang A (informativ) Bestehende Identifikatoren und Darstellungen der Molekülstruktur 69
A.1 Identifikatoren 69
A.1.1 Allgemeines 69
A.1.2 CAS-Nummern 69
A.1.3 InChI und InChIKey 69
A.1.4 EC-Nummer 69
A.1.5 UNII 70
A.1.6 ASK-Nummer 70
A.1.7 EV-Code 70
A.2 Darstellung der Molekülstruktur 70
A.2.1 Allgemeines 70
A.2.2 Molfile 71
A.2.3 SMILES 71
A.2.4 InChI 72
A.2.5 Dateiformate CDX und CDXML 72

Literaturhinweise 73