

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