

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