

DIN EN ISO 11238

ICS 35.240.80

Ersatz für
DIN EN ISO 11238:2013-03

**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**

Health informatics –
Identification of medicinal products –
Data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated
information on substances (ISO 11238:2018);
German version EN ISO 11238:2018

Informatique de santé –
Identification des produits médicaux –
Éléments de données et structures pour l'identification unique et l'échange d'informations
réglementées sur les substances (ISO 11238:2018);
Version allemande EN ISO 11238:2018

Gesamtumfang 78 Seiten

DIN-Normenausschuss Medizin (NAMed)

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (EN ISO 11238:2018) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 215 „Health informatics“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 251 „Medizinische Informatik“ erarbeitet, dessen Sekretariat von NEN (Niederlande) gehalten wird.

Das zuständige deutsche Normungsgremium ist der Arbeitsausschuss NA 063-07-03 AA „Terminologie“ im DIN-Normenausschuss Medizin (NAMed).

Für die in diesem Dokument zitierten internationalen Dokumente wird im Folgenden auf die entsprechenden deutschen Dokumente hingewiesen:

ISO 8601	siehe	DIN ISO 8601
ISO 11238:2012	siehe	DIN EN ISO 11238:2013-03
ISO 11239	siehe	DIN EN ISO 11239
ISO 11240	siehe	DIN EN ISO 11240
ISO 11615	siehe	DIN EN ISO 11615
ISO 11616	siehe	DIN EN ISO 11616
ISO 21090	siehe	DIN EN ISO 21090
ISO/TS 19844	siehe	DIN CEN ISO/TS 19844 (DIN SPEC 13261)
ISO/TS 20440	siehe	DIN CEN ISO/TS 20440 (DIN SPEC 13262)
ISO/TS 20443	siehe	DIN CEN ISO/TS 20443 (DIN SPEC 13263)
ISO/TS 20451	siehe	DIN CEN ISO/TS 20451 (DIN SPEC 13264)

Änderungen

Gegenüber DIN EN ISO 11238:2013-03 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- a) inhaltliche und terminologische Anpassung an den mit dieser Norm korrelierten Implementierungsleitfaden DIN CEN ISO/TS 19844;
- b) Erweiterung des Abschnittes über Begriffe, Symbole und Abkürzungen;
- c) Aufnahme eines neuen Abschnitts zur Beschreibung der Grundsätze und Verfahren der Informationsmodellierung;
- d) Überarbeitung des Abschnitts über die Eingliederung der festgelegten Stoffe;
- e) Aufnahme eines neuen Unterabschnitts über die Beziehung zwischen Stoffen und festgelegten Stoffen;
- f) Aufnahme eines neuen Unterabschnitts über die Authentifizierung von pflanzlichen Arzneimitteln;

- g) Erweiterung des Unterabschnitts über strukturell verschiedenartige Stoffe;
- h) Erweiterung der Unterabschnitte über die festgelegten Stoffe der Gruppen 1 bis 4;
- i) in Anhang A Aufnahme eines neuen Unterabschnitts über den Identifikator „EV Code“;
- j) Überarbeitung des Literaturverzeichnisses;
- k) Aktualisierung sämtlicher Bilder;
- l) generelle redaktionelle Überarbeitung.

Frühere Ausgaben

DIN EN ISO 11238: 2013-03

Nationaler Anhang NA (informativ)

Literaturhinweise

DIN CEN ISO/TS 19844, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Implementierungsleitfaden für Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen Informationen von Stoffen*

DIN CEN ISO/TS 20440, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Implementierungsleitfaden für ISO 11239 Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen Informationen über pharmazeutische Darreichungsformen, pharmazeutische Konventionseinheiten, Verabreichungswegen und Verpackungen*

DIN CEN ISO/TS 20443, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Implementierungsleitfaden für ISO 11615 Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen Arzneimittelinformationen*

DIN CEN ISO/TS 20451, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Implementierungsleitfaden für ISO 11616 Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen pharmazeutischen Produktkennzeichen*

DIN EN ISO 11238:2013-03, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Struktur und kontrollierte Vokabularien zur Identifikation und Beschreibung von Substanzen und Inhaltsstoffen (ISO 11238:2012); Deutsche Fassung EN ISO 11238:2012*

DIN EN ISO 11239, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Struktur und kontrollierte Vokabularien zur Identifikation von pharmazeutischen Darreichungsformen, pharmazeutischen Konventionseinheiten, Anwendungsarten und Verpackungen*

DIN EN ISO 11240, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Datenelemente, Struktur und kontrolliertes Vokabular für Maßeinheiten*

DIN EN ISO 11615, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen Arzneimittelinformationen*

DIN EN ISO 11616, *Medizinische Informatik — Identifikation von Arzneimitteln — Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen pharmazeutischen Produktkennzeichen*

DIN EN ISO 21090, *Medizinische Informatik — Harmonisierte Datentypen für den Datenaustausch im Gesundheitswesen*

DIN ISO 8601, *Datenelemente und Austauschformate — Informationsaustausch — Darstellung von Datum und Uhrzeit*

Deutsche Fassung

Medizinische Informatik —
Identifikation von Arzneimitteln —
Datenelemente und Strukturen zur eindeutigen
Identifikation und zum Austausch von vorgeschriebenen
Informationen zu Stoffen
(ISO 11238:2018)

Health informatics —
Identification of medicinal products —
Data elements and structures for
the unique identification and exchange of
regulated information on substances
(ISO 11238:2018)

Informatique de santé —
Identification des produits médicaux —
Éléments de données et structures pour
l'identification unique et l'échange d'informations
réglementées sur les substances
(ISO 11238:2018)

Diese Europäische Norm wurde vom CEN am 24. Juli 2018 angenommen.

Die CEN-Mitglieder sind gehalten, die CEN/CENELEC-Geschäftsordnung zu erfüllen, in der die Bedingungen festgelegt sind, unter denen dieser Europäischen Norm ohne jede Änderung der Status einer nationalen Norm zu geben ist. Auf dem letzten Stand befindliche Listen dieser nationalen Normen mit ihren bibliographischen Angaben sind beim CEN-CENELEC-Management-Zentrum oder bei jedem CEN-Mitglied auf Anfrage erhältlich.

Diese Europäische Norm besteht in drei offiziellen Fassungen (Deutsch, Englisch, Französisch). Eine Fassung in einer anderen Sprache, die von einem CEN-Mitglied in eigener Verantwortung durch Übersetzung in seine Landessprache gemacht und dem Management-Zentrum mitgeteilt worden ist, hat den gleichen Status wie die offiziellen Fassungen.

CEN-Mitglieder sind die nationalen Normungsinstitute von Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, der ehemaligen jugoslawischen Republik Mazedonien, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, den Niederlanden, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, der Schweiz, Serbien, der Slowakei, Slowenien, Spanien, der Tschechischen Republik, der Türkei, Ungarn, dem Vereinigten Königreich und Zypern.



EUROPÄISCHES KOMITEE FÜR NORMUNG
EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION
COMITÉ EUROPÉEN DE NORMALISATION

CEN-CENELEC Management-Zentrum: Rue de la Science 23, B-1040 Brüssel

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

Europäisches Vorwort

Dieses Dokument (EN ISO 11238:2018) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 215 „Health informatics“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 251 „Medizinische Informatik“ erarbeitet, dessen Sekretariat von NEN gehalten wird.

Diese Europäische Norm muss den Status einer nationalen Norm erhalten, entweder durch Veröffentlichung eines identischen Textes oder durch Anerkennung bis Februar 2019, und etwaige entgegenstehende nationale Normen müssen bis Februar 2019 zurückgezogen werden.

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. CEN ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren.

Dieses Dokument ersetzt EN ISO 11238:2012.

Entsprechend der CEN-CENELEC-Geschäftsordnung sind die nationalen Normungsinstitute der folgenden Länder gehalten, diese Europäische Norm zu übernehmen: Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, die ehemalige jugoslawische Republik Mazedonien, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Kroatien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, Schweiz, Serbien, Slowakei, Slowenien, Spanien, Tschechische Republik, Türkei, Ungarn, Vereinigtes Königreich und Zypern.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO 11238:2018 wurde von CEN als EN ISO 11238:2018 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Vorwort

ISO (die Internationale Organisation für Normung) ist eine weltweite Vereinigung nationaler Normungsorganisationen (ISO-Mitgliedsorganisationen). Die Erstellung von Internationalen Normen wird üblicherweise von Technischen Komitees von ISO durchgeführt. Jede Mitgliedsorganisation, die Interesse an einem Thema hat, für welches ein Technisches Komitee gegründet wurde, hat das Recht, in diesem Komitee vertreten zu sein. Internationale staatliche und nichtstaatliche Organisationen, die in engem Kontakt mit ISO stehen, nehmen ebenfalls an der Arbeit teil. ISO arbeitet bei allen elektrotechnischen Themen eng mit der Internationalen Elektrotechnischen Kommission (IEC) zusammen.

Die Verfahren, die bei der Entwicklung dieses Dokuments angewendet wurden und die für die weitere Pflege vorgesehen sind, werden in den ISO/IEC-Direktiven, Teil 1 beschrieben. Es sollten insbesondere die unterschiedlichen Annahmekriterien für die verschiedenen ISO-Dokumentenarten beachtet werden. Dieses Dokument wurde in Übereinstimmung mit den Gestaltungsregeln der ISO/IEC-Direktiven, Teil 2 erarbeitet (siehe www.iso.org/directives).

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. ISO ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren. Details zu allen während der Entwicklung des Dokuments identifizierten Patentrechten finden sich in der Einleitung und/oder in der ISO-Liste der erhaltenen Patenterklärungen (siehe www.iso.org/patents).

Jeder in diesem Dokument verwendete Handelsname dient nur zur Unterrichtung der Anwender und bedeutet keine Anerkennung.

Eine Erläuterung zum freiwilligen Charakter von Normen, der Bedeutung ISO-spezifischer Begriffe und Ausdrücke in Bezug auf Konformitätsbewertungen sowie Informationen darüber, wie ISO die Grundsätze der Welthandelsorganisation (WTO) hinsichtlich technischer Handelshemmnisse (TBT) berücksichtigt, enthält der folgende Link: www.iso.org/iso/foreword.html.

Dieses Dokument wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 215, *Health informatics*, erarbeitet.

Diese zweite Ausgabe ersetzt die erste Ausgabe (ISO 11238:2012[2]), die technisch überarbeitet wurde.

Einleitung

Dieses Dokument wurde als Reaktion auf einen weltweiten Bedarf an international einheitlichen Spezifikationen für medizinische Produkte entwickelt. Sie ist Teil einer Gruppe von fünf Normen und vier Technischen Spezifikationen, die gemeinsam die Grundlage für die eindeutige Identifikation von Arzneimitteln bilden. Bei diesen Normen und Technischen Spezifikationen handelt es sich um:

ISO 11615[3], *Health informatics — Identification of medicinal products — Data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated medicinal product information*

ISO 11616[4], *Health informatics — Identification of medicinal products — Data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated pharmaceutical product information*

ISO 11238, *Health informatics — Identification of medicinal products — Data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated information on substances*

ISO 11239[5], *Health informatics — Identification of medicinal products — Data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated information on pharmaceutical dose forms, units of presentation, routes of administration and packaging*

ISO 11240[6], *Health informatics — Identification of medicinal products — Data elements and structures for the unique identification and exchange of units of measurement*

ISO/TS 19844, *Health informatics — Identification of medicinal products — Implementation guidelines for data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated information on substances*

ISO/TS 20440[7], *Health informatics — Identification of Medicinal Products — Implementation guide for ISO 11238 data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated information on pharmaceutical dose forms, units of presentation, routes of administration and packaging*

ISO/TS 20443[8], *Health informatics — Identification of Medicinal Products — Implementation guide for ISO 11615 data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated medicinal product information*

ISO/TS 20451[9], *Health informatics — Identification of Medicinal Products — Implementation guide for ISO 11616 data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated pharmaceutical product information*

Diese Normen zur Identifikation von Arzneimitteln unterstützen die Aktivitäten von Arzneimittelbehörden weltweit. Zu diesen Aktivitäten gehören eine Reihe von Tätigkeiten im Zusammenhang mit der Entwicklung, der Zulassung und dem Lebenszyklus-Management von Arzneimitteln sowie die Pharmakovigilanz und das Risikomanagement.

Um die Hauptaufgaben der Arzneimittelzulassung und der Pharmakovigilanz erfüllen zu können, müssen Produktinformationen zu Arzneimitteln zuverlässig und auf robuste Weise ausgetauscht werden können. Die Normen zur Identifikation von Arzneimitteln unterstützen daher folgende Interaktionen:

- zwischen einzelnen Arzneimittelbehörden, z. B. Europäische Arzneimittelagentur — U.S. Food and Drug Administration (FDA) oder umgekehrt; und zwischen der Europäischen Arzneimittelagentur und den zuständigen nationalen Behörden in der EU und umgekehrt;
- zwischen Pharmaunternehmen und Arzneimittelbehörden, z. B. „Pharmaunternehmen A“ — Health Canada;

- zwischen dem Sponsor einer klinischen Prüfung und einer Arzneimittelbehörde, z. B. „Universität X“ — Österreichische Agentur für Gesundheit und Ernährungssicherheit (AGES);
- zwischen einer Arzneimittelbehörde und weiteren Beteiligten, z. B. Medicines and Health Care Products Regulatory Agency (MHRA) — National Health Service (NHS) in Großbritannien;
- zwischen Arzneimittelbehörden und weltweit gepflegten Datenquellen, z. B. Pharmaceutical and Medical Device Agency (PMDA) — für die Zuweisung von Stoffidentifikatoren verantwortliche Organisation.

Anwendungen, bei denen eine zuverlässige Identifikation und Rückverfolgung der Verwendung von Arzneimitteln und der in Arzneimitteln verwendeten Bestandteile notwendig ist, werden durch eindeutige Identifikatoren, die in Übereinstimmung mit den Normen zur Identifikation von Arzneimitteln erstellt wurden, unterstützt.

Dieses Dokument bietet eine Struktur, die die Zuweisung und Pflege eindeutiger Identifikatoren für alle Stoffe in Arzneimitteln ermöglicht. Dieses Dokument legt die allgemeinen Regeln zur Definition und Unterscheidung von Stoffen dar und stellt ein High-Level-Modell für Stoffe und festgelegte Stoffe bereit, um die Organisation und Erfassung von Daten zu unterstützen.

Es wird davon ausgegangen, dass die Implementierung die ISO/TS 19844 und die HL7-Nachrichtenübermittlung (siehe 5.8) nutzen wird, um für jeden in einem Arzneimittel enthaltenen Stoff einen stabilen, nicht-semantischen eindeutigen Identifikator zu erzeugen. Weiterhin wird für die Generierung der globalen Identifikatoren der einzelnen Stoffe voraussichtlich eine einzige Organisation verantwortlich sein, die die definierenden Elemente vorhält, auf denen die Stoffidentifikatoren beruhen. Auf Ebene der festgelegten Stoffe kann aufgrund der proprietären Art eines Großteils der Informationen ein regionalerer Ansatz erforderlich sein.

Die Verwendung des Identifikators ist für die Beschreibung von in Arzneimitteln enthaltenen Stoffen auf globaler Ebene von wesentlicher Bedeutung. Die Entwicklung einer Nomenklatur für Stoffe oder festgelegte Stoffe ist nicht Aufgabe dieses Dokuments, allerdings können derzeit gebräuchliche und offizielle Stoffbezeichnungen auf die einzelnen Identifikatoren abgebildet werden.

Die in Arzneimitteln verwendeten Bestandteile reichen von einfachen Chemikalien über genetisch veränderte Zellen bis hin zu tierischen Geweben. Diese Stoffe eindeutig zu identifizieren, ist besonders schwierig. Das vorliegende Dokument definiert Stoffe auf der Grundlage ihrer wissenschaftlichen Identität (d. h. was sie sind), und nicht auf der Grundlage ihrer Verwendung oder ihres Herstellungsverfahrens. Zur Definition der Stoffe werden Molekülstrukturen oder sonstige unveränderliche Eigenschaften wie taxonomische, anatomische und/oder fraktionierungsbezogene Informationen herangezogen. Dieses Dokument enthält fünf Typen von Einzelstoffen und eine Klasse Stoffgemische, die ausreichen, um alle Stoffe zu definieren. Obgleich es sicher möglich ist, Stoffe auch anders zu definieren oder zu klassifizieren, verwendet dieses Dokument den Ansatz eines minimal strukturierten wissenschaftlichen Konzepts mit Konzentration auf die kritischen Elemente, die zur Unterscheidung zweier Stoffe erforderlich sind. Häufig kommt es beim Mischen von Stoffen zu Wechselwirkungen; aufgrund ihrer veränderlichen Art und Ausprägung sind diese supramolekularen Wechselbeziehungen auf Stoffebene in dem vorliegenden Dokument jedoch bewusst nicht behandelt. Dieses Dokument ermöglicht auch die Erfassung mehrerer Begriffe, die sich auf einen Stoff beziehen, sowie einer Vielzahl von Referenzinformationen, die zur Klassifizierung von Stoffen genutzt werden könnten oder die Beziehung zwischen einem Stoff und einem anderen herstellen.

Zusätzlich zur Stoffebene stellt dieses Dokument Elemente zur Erfassung weiterer Informationen über Stoffe bereit, die definierende Merkmale festgelegter Stoffe bilden. Dazu gehören Qualität, Hersteller, Herstellungsspezifikationen sowie Elemente zur Erfassung von Informationen über Stoffe, die im Handel oft miteinander kombiniert werden, jedoch streng genommen kein Arzneimittel darstellen. Auf Ebene der festgelegten Stoffe stellen vier Gruppen von Elementen Informationen bereit, die zur Rückverfolgung und Beschreibung von Stoffen in Arzneimitteln wesentlich sind.

Die Grundbegriffe in den Normen, die für die Arzneimittelzulassung und den pharmazeutischen Bereich entwickelt werden, verwenden zahlreiche Benennungen in unterschiedlichen Zusammenhängen. Die in diesem Dokument vorgestellten Informationsmodelle zeigen Elemente und deren Beziehungen untereinander, die zur Definition von Stoffen notwendig sind. Die Benennungen und Definitionen in dem vorliegenden Dokument sind für die Begriffe anzuwenden, die erforderlich sind, um Informationen zu Stoffen in zulassungsbedürftigen Arzneimitteln eindeutig identifizieren, charakterisieren und austauschen zu können.

Die in diesem Dokument verwendeten Begriffe sollen die Auslegung und Anwendung rechtlicher und zulassungsbezogener Anforderungen erleichtern, sie gelten jedoch unbeschadet jeglicher rechtsverbindlicher Dokumente. Im Zweifelsfall oder bei möglichen Kollisionen ist den Begriffen in den rechtsverbindlichen Dokumenten Vorrang einzuräumen.

In diesem Dokument wird „% (V/V)“ anstelle von „% Volumenanteil“ verwendet.

VORSICHT — Dieses Dokument ist farbig. Beim Drucken sollte das berücksichtigt werden.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument stellt ein Informationsmodell zur Definition und Identifikation von in Arzneimitteln enthaltenen oder zu medizinischen Zwecken verwendeten Stoffen bereit, einschließlich Nahrungsergänzungsmitteln, Lebens- und Futtermittelzusatzstoffe und Kosmetika. Das Informationsmodell kann im human- und tiermedizinischen Bereich angewandt werden, da die Prinzipien übertragbar sind. Es wird auf weitere Normen und externe Terminologiequellen verwiesen, die für dieses Dokument gelten.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente werden im Text in solcher Weise in Bezug genommen, dass einige Teile davon oder ihr gesamter Inhalt Anforderungen des vorliegenden Dokuments darstellen. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO/TS 19844:2018, *Health informatics — Identification of medicinal products (IDMP) — Implementation guidelines for ISO 11238 for data elements and structures for the unique identification and exchange of regulated information on substances*

3 Begriffe

Für die Anwendung dieses Dokuments gelten folgende Begriffe.

ISO und IEC unterhalten terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen:

- ISO Online Browsing Platform: unter <http://www.iso.org/obp>
- IEC Electropedia: unter <http://www.electropedia.org/>

3.1

Adjuvans

(en: adjuvant)

Komponente, die die Immunantwort auf ein Antigen potenziert und/oder dieses so moduliert, dass die gewünschte Immunantwort erreicht wird

3.2

aktiver Marker

(en: active marker)

Konstituente oder Gruppen von Konstituenten eines (pflanzlichen) Stoffes (frisch), eines pflanzlichen Arzneimittels, eines pflanzlichen Präparats oder eines pflanzlichen Produkts, die zu Kontrollzwecken dienen und von denen allgemein angenommen wird, dass sie zur therapeutischen Wirkung beitragen

Anmerkung 1 zum Begriff: Aktive Marker sind nicht gleichzusetzen mit analytischen Markern oder Leitmarkern, die ausschließlich der Identifikation oder Kontrolle dienen.

3.3

Allergen

(en: allergen)

besorgniserregendes Material, das als Bestandteil oder in einem Produkt verwendet wird, das in atopischen Individuen eine Überempfindlichkeitsreaktion vom Typ I oder eine allergische Reaktion auszulösen kann

Anmerkung 1 zum Begriff: In diesem Dokument ist die Definition auf ein Molekül (einen Stoff) festgelegt, das/der eine Immunglobulin E (IgE)-Reaktion und/oder eine allergene Reaktion vom Typ I induzieren kann.

3.4

Allergoide

(en: allergoids)

Allergenextrakte, die chemisch modifiziert wurden (z. B. durch Formaldehyd oder Glutaraldehyd), um die Allergenität zu reduzieren, während die Immunogenität beibehalten wird

Anmerkung 1 zum Begriff: Formaldehyd und Glutaraldehyd reagieren mit primären Aminogruppen in der Polypeptidkette des Allergens, was zu intramolekularen und intermolekular querverbundenen hochmolekulargewichtigen Allergen-Polymeren führt; auf diese Art sollten konformative IgE-Epitope zerstört werden, während lineare T-Zellen-Epitope unbeeinträchtigt bleiben.

3.5

Analysedaten

(en: analytical data)

Satz von Elementen zur Beschreibung und Erfassung der Verfahren und Referenzmaterialien, die bei der Bestimmung der Reinheit, Wirkstärke oder Identität eines festgelegten Stoffes angewandt werden

3.6

analytische Marker

(en: analytical marker)

Konstituente oder Gruppen von Konstituenten, die analytischen Zwecken dienen

Anmerkung 1 zum Begriff: Aktive Marker sind nicht gleichzusetzen mit analytischen Markern oder Leitmarkern, die ausschließlich der Identifikation oder Kontrolle dienen.

3.7

ATC-Code

Anatomisch-therapeutisch-chemischer Klassifizierungscode

Substanz-Klassifizierungscode

(en: ATC Code, Anatomical Therapeutic Chemical Classification code, substance classification code)

Code zur Klassifikation von Arzneimitteln

Anmerkung 1 zum Begriff: Er wird vom WHO Collaborating Centre for Drug Statistics Methodology (WHOC) kontrolliert (WHO-Kooperationszentrum für die Methodologie von Arzneimittelstatistiken)¹⁾.

Anmerkung 2 zum Begriff: Dieses pharmazeutische Kodierungssystem unterteilt Arzneimittel in verschiedene Gruppen entsprechend dem Organ oder System, auf das sie wirken und/oder deren therapeutischen, pharmakologischen und chemischen Eigenschaften. Jeder ATC-Code der untersten Stufe steht für pharmazeutisch verwendete Stoffe oder eine Kombination von Stoffen in einer einzelnen Indikation (oder Verwendung). Dies bedeutet, dass ein Arzneimittel mehr als einen Code haben kann: Acetylsalicylsäure wird beispielsweise als Arzneimittel für orale Behandlung mit A01AD05 bezeichnet, als Thrombozytenhemmer mit B01AC06 und als Analgetikum und Fiebermittel mit N02BA01. Andererseits teilen sich verschiedene Marken denselben Code, wenn sie über dieselben aktiven Stoffe und Indikationen verfügen.

3.8

CAS-Indexname

Indexname des Dienstes für Chemikalien-Kurzbeschreibungen

CAS-Registername

(en: CAS Index name, Chemical Abstracts Service Index name, CAS Registry name)

Identifikator, der normalerweise einen einzelnen Stoff kennzeichnet

Anmerkung 1 zum Begriff: Für weitere Erläuterungen siehe A.1.2.

1) https://www.whocc.no/atc/structure_and_principles/

3.9

CAS-Registernummer

CAS-Nummer²⁾

(en: CAS Registry Number/CAS number)

eindeutiger numerischer Identifikator eines Stoffes im CAS-Registersystem

Anmerkung 1 zum Begriff: Für weitere Erläuterungen siehe Unterabschnitt A.1.2.

3.10

chemische Bindung

(en: chemical bond)

Zustand, der eintritt, wenn Kräfte, die zwischen zwei Atomen oder Atomgruppen wirken, zur Bildung einer stabilen, unabhängigen molekularen Einheit führen

3.11

chemischer Stoff

(en: chemical substance)

Stofftyp, der durch eine stöchiometrische oder unstöchiometrische einfache Molekülstruktur definiert ist und kein Protein und keine Nukleinsäure ist

Anmerkung 1 zum Begriff: Chemische Stoffe gelten allgemein als „kleine“ Moleküle mit Salzen, Solvaten oder Ionen, die mit einer eindeutigen oder repräsentativen Struktur beschrieben werden können.

3.12

chiraler Stoff

(en: chiral substance)

Stoff, dessen Molekülstruktur sich nicht auf ihr Spiegelbild abbilden lässt

3.13

Co-Kristalle

(en: co-crystals)

homogene (einphasige) kristalline Strukturen, die aus zwei oder mehr Komponenten in einem bestimmten stöchiometrischen Verhältnis bestehen, wobei die Anordnung im Kristallgitter nicht auf ionischen Bindungen basiert

3.14

Komponente

(en: component)

Stoff, der Teil einer Mischung ist und der auf der Ebene „festgelegte Stoffe der Gruppe 1“ ein Mehrstoffmaterial definiert

BEISPIEL Dimeticon und Siliziumdioxid sind die Komponenten von Simeticon. Humaninsulin und Protamin sind die Komponenten in Isophan-Insulin.

Anmerkung 1 zum Begriff: Komponenten werden verwendet, um Mehrstoffmaterialien zu beschreiben.

3.15

Zusammensetzungs-Stöchiometrie

(en: composition stoichiometry)

quantitatives Verhältnis zwischen den chemischen Elementen oder Anteilen, aus denen sich ein Stoff zusammensetzt

BEISPIEL Dinatriumhydrogenphosphat-Heptahydrat und Dinatriumhydrogenphosphat-Dihydrat sind als unterschiedliche Stoffe definiert, da sie sich in der Zusammensetzungs-Stöchiometrie unterscheiden.

2) <https://www.cas.org/content/chemical-substances/faqs>

3.16

Konfiguration

(en: configuration)

Verfahren zur Kennzeichnung der dreidimensionalen Anordnung von Atomen an einem stereogenen Kohlenstoff-, Phosphor-, Schwefel- oder Stereozentrum

3.17

Konstituente

(en: constituent)

in einem festgelegten Stoff oder Grundstoff enthaltener Stoff

Anmerkung 1 zum Begriff: Konstituenten können Verunreinigungen, Abbauprodukte, Extraktionslösemittel, Wirkstoffträger, aktive Marker oder Leitsubstanzen, Grundstoffe oder Einzelstoffe sein, die gemeinsam vermischt werden, um ein Mehrstoffmaterial zu ergeben.

Anmerkung 2 zum Begriff: Konstituenten müssen im Informationsmodell der festgelegten Stoffe der Gruppe 1 einer Rolle und einer Menge zugeordnet sein. Mit Hilfe von Konstituentenspezifikationen sind Komponenten als auch Grenzwerte, die im Hinblick auf ein bestimmtes Material für Verunreinigungen oder ähnliche Stoffe gelten, zu beschreiben.

BEISPIEL Der Stoff Triamcinolonacetonid ist der Grundstoff (Konstituente) des Stoffes der festgelegten Stoffe der Gruppe 1, Triamcinolonacetonid, mikronisiert.

Anmerkung 3 zum Begriff: Die Konstituente-Komponente ist Teil einer Mischung, die zu einer homologen Gruppe von einzelnen Komponenten gehört, die als Grundstoffe für die Herstellung eines allergenen Extrakts beschrieben werden.

3.18

kontrolliertes Vokabular

(en: controlled vocabulary)

endlicher Vorrat von Werten, die die einzig zulässigen Werte für ein Datenelement darstellen

Anmerkung 1 zum Begriff: Bei den zulässigen Werten kann es sich um Codes, Text oder Zahlen handeln.

[QUELLE: CDISC Clinical Research Glossary V10.0, 2016, modifiziert][16].

3.19

Copolymer

(en: copolymer)

Polymer mit mehr als einer Art einer einzelnen sich wiederholenden Einheit, die durch kovalente Bindungen miteinander verknüpft sind

Anmerkung 1 zum Begriff: Copolymere werden durch Copolymerisation oder sequentielle Polymerisation zweier oder mehrerer verschiedener Monomere gebildet. Copolymere können vorliegen als zufällig, statistisch, alternierend, periodisch, Block, Kreuz, Pfropf oder gemischt.

3.20

kritischer Prozessparameter

(en: critical process parameter)

Verarbeitungsparameter, dessen Variabilität einen Einfluss auf ein kritisches Qualitätsattribut hat und daher überwacht oder kontrolliert werden muss, um sicherzustellen, dass das Verfahren die gewünschte Qualität liefert

Anmerkung 1 zum Begriff: Ein Herstellungsparameter wird als „kritisch“ angesehen und ist erforderlich für die Herstellung eines Stoffes oder eines festgelegten Stoffs, z. B. Einbeziehen eines chromatographischen Schritts zum Entfernen oder Reduzieren von Verunreinigungen, Viren.

Anmerkung 2 zum Begriff: Der kritische Prozess ist an den Typ des Herstellungsverfahrens gebunden.

3.21

Zytokin

(en: cytokine)

kleines, von Zellen freigesetztes Protein, das eine spezifische Auswirkung auf die Interaktionen zwischen Zellen, auf die Kommunikation zwischen Zellen oder auf das Verhalten von Zellen hat

3.22

Polymerisationsgrad

(en: degree of polymerization)

durchschnittliche Anzahl von Monomeren oder sich wiederholenden Einheiten in einem Polymerblock oder einer Polymerkette

Anmerkung 1 zum Begriff: Gilt sowohl für Homopolymere als auch für Blockcopolymere, bei denen der Polymerisationsgrad innerhalb eines Blocks gemeint ist.

3.23

unterschiedliche Herkunft

(en: diverse origin)

bezieht sich auf Materialien, die nicht gemeinsam isoliert werden bzw. nicht das Ergebnis des gleichen Prozesses sind

3.24

Arzneimittel-Extraktionsverhältnis

(en: drug extract ratio)

Verhältnis der Menge des (pflanzlichen) Stoffes (frisch) oder der pflanzlichen Arznei zur Menge des resultierenden pflanzlichen Präparats

3.25

Enhancer

(en: enhancer)

cis-wirkende DNA-Sequenz, die die Nutzung einiger eukaryotischer Promotoren verstärkt und in jeder Orientierung und jeder Lage im Bezug zum Promotor (upstream oder downstream) wirken kann

3.26

Extraktionsverhältnis für Allergene

(en: extract ratio for allergens)

Extraktionsverhältnis, das die relativen Verhältnisse (m/V) von allergenen Ursprungsmaterialien und Lösemitteln anzeigt

Anmerkung 1 zum Begriff: Dieses Verhältnis ist eine minimale Anforderung für Allergene, für die es nicht genügend Patienten gibt, um die gesamte allergene Aktivität *in vivo* oder *in vitro* zu bestimmen.

3.27

Extraktionslösemittel

(en: extraction solvents)

Lösemittel, die für das Extraktionsverfahren verwendet werden

3.28

Fraktion

(en: fraction)

einzelner Anteil eines Materials, der aus einer komplexen Matrix gewonnen wird und dessen Zusammensetzung sich von derjenigen des Vorgängermaterials unterscheidet

Anmerkung 1 zum Begriff: Dieser Begriff wird zur Beschreibung von Ursprungsmaterial verwendet und ist dahingehend rekursiv, dass eine Folgefraktion aus einer Vorgängerfraktion gewonnen werden kann.

BEISPIEL Serum-Immunglobulin in polyklonales IgG ist ein Beispiel für eine rekursive Fraktionierung.

3.29

Gen

(en: gene)

Grundeinheit der Erbinformation, die aus Ketten von Nukleotid-Basenpaaren in spezifischen Sequenzen besteht, die ein Protein oder eine Protein-Untereinheit kodiert

3.30

Genelement

(en: gene element)

einzelnes Element innerhalb eines Gens, wie zum Beispiel Promotor, Enhancer, Silencer oder Codierungssequenz

3.31

Glykosylierung

(en: glycosylation)

enzymatischer Prozess, der Saccharide oder Oligosaccharide an Stoffe bindet

3.32

Glykosylierungstyp

(en: glycosylation type)

signifikante Unterschiede in der Glykosylierung zwischen Organismenklassen

Anmerkung 1 zum Begriff: Dies unterscheidet das Muster der Glykosylierung über die Typen von Organismen, z. B. von Menschen, Säugetieren und Vögeln. Der Glykosylierungstyp ist ein definierendes Element, wenn ein glykosyliertes Protein als Stoff vorliegt.

3.33

Qualität

(en: grade)

Gruppe von Spezifikationen, die die Qualität eines Stoffes oder eines festgelegten Stoffes angeben

3.34

Ernten

(en: harvesting)

Verfahren des Sammelns von (pflanzlichen) Stoffen (frisch) oder Teilen von botanischem Material vom Feld oder Verfahren zum Sammeln von viralem oder bakteriellem Material von seiner Produktions-/Herstellungsstätte

3.35

homöopathische Ursubstanzen

(en: homeopathic stocks)

Stoffe, Produkte von Präparaten, die als Ausgangsmaterial für die Herstellung homöopathischer Präparate verwendet werden.

Anmerkung 1 zum Begriff: Eine Ursubstanz ist üblicherweise eine der folgenden: eine Urtinktur oder ein Glycerinmazerat, für Rohmaterialien botanischer, zoologischer oder menschlicher Herkunft, oder der Stoff selbst, im Fall von Rohmaterialien chemischer oder mineralischer Herkunft.

3.36

Homopolymer

(en: homopolymer)

Polymer, das eine einzelne strukturelle sich wiederholende Einheit aufweist

3.37

Isotop

(en: isotope)

Varianten chemischer Elemente, die sich durch die Atommasse unterscheiden, dieselbe Protonenanzahl und eine unterschiedliche Neutronenanzahl im Kern haben

Anmerkung 1 zum Begriff: Radionuklide oder Nuklide mit einem nicht natürlichen Isotopenverhältnis werden in der Strukturdarstellung mit der Nuklidzahl angegeben. Isotope natürlicher Häufigkeit werden durch ein einfaches Elementsymbol dargestellt.

BEISPIEL ^{13}C bezeichnet ein Kohlenstoffatom mit der Atommasse 13.

3.38

Erzeugnis

(en: manufactured item)

qualitative und quantitative Zusammensetzung des in der Verpackung des Arzneimittels enthaltenen Produkts

Anmerkung 1 zum Begriff: Ein Arzneimittel kann ein oder mehrere Erzeugnisse enthalten. In vielen Fällen entspricht das Erzeugnis dem pharmazeutischen Produkt. Es gibt jedoch Fälle, in denen das (die) Erzeugnis(se) vor Verabreichung an den Patienten (als das pharmazeutische Produkt) einer Umwandlung unterzogen wird (werden), und die beiden sind in diesem Fall nicht identisch.

3.39

Hersteller

(en: manufacturer)

Organisation, die die Erlaubnis für den Herstellungsprozess innehat

Anmerkung 1 zum Begriff: In diesem Dokument bezieht sich die Definition auf ein Unternehmen, die für die Herstellung des Stoffes verantwortlich ist.

3.40

Herstellung

(en: manufacturing)

Produktionsprozess eines Stoffes oder Arzneimittels von der Beschaffung sämtlicher Materialien über alle Verarbeitungsstufen hinweg

Anmerkung 1 zum Begriff: Erfasst werden der kritische Prozess, kritische Prozessschritte, die Ausgangs- und Verarbeitungsmaterialien sowie kritische Produktionsparameter.

3.41

Material

(en: material)

Gebilde, das Masse besitzt, Raum einnimmt und aus einem oder mehreren Stoffen besteht

3.42

Arzneimittel

(en: medicinal product)

pharmazeutisches Produkt oder Kombination von pharmazeutischen Produkten, die dem Menschen (oder Tieren) verabreicht werden kann, um Krankheiten zu behandeln oder zu vermeiden mit dem Ziel/Zweck der Erstellung einer medizinischen Diagnose oder um physiologische Funktionen wiederherzustellen, zu berichtigen oder zu modifizieren

Anmerkung 1 zum Begriff: Ein Arzneimittel kann in der Verpackung ein oder mehrere Erzeugnisse und ein oder mehrere pharmazeutische Produkte enthalten. In bestimmten Regionen kann ein Arzneimittel auch als ein Stoff oder eine Kombination von Stoffen definiert sein, die zur Erstellung einer medizinischen Diagnose verwendet werden können.

3.43

Mikroheterogenität

(en: microheterogeneity)

gemeinsam isolierte Stoffe, die kleinere Abweichungen in der Struktur zwischen im Wesentlichen identischen Stoffen aufweisen, die isolierte bzw. Ursprungsmaterialien (z. B. Sequenzheterogenität) und/oder posttranslationale Modifikationen wie Glykosylierung sind

Anmerkung 1 zum Begriff: Mikroheterogenität ist kein definierendes Merkmal, kann aber eines auf der Informations-ebene der festgelegten Stoffe der Gruppe 1 sein, z. B. Unterschiede in Glykanen.

Anmerkung 2 zum Begriff: Mikroheterogenität besteht aus der Veränderlichkeit des Glykosylierungstyps (biantennär, triantennär), dem Ausmaß der Glykosylierung an einer gegebenen Stelle („Site Occupancy“), der Sequenzheterogenität aufgrund von Polymorphismus im Ursprungsmaterial, Translationsfehlern oder einer variablen proteolytischen Verarbeitung oder anderem.

3.44

Stoffgemisch

(en: mixture)

polydisperser Stofftyp, der eine Kombination aus einzelnen, gemeinsam isolierten oder im selben Syntheseprozess hergestellten Stoffen ist

Anmerkung 1 zum Begriff: Einzelstoffe unterschiedlicher Herkunft, die zusammengeführt werden, ohne dass sich eine chemische Umwandlung vollzieht, sind als Mehrstoffmaterialien (festgelegte Stoffe der Gruppe 1) und nicht als Stoffgemisch definiert.

BEISPIEL 1 Gentamicin wird definiert als ein Stoffgemisch aus Gentamicin C1, Gentamicin C1A, Gentamicin C2, Gentamicin C2A und Gentamicin C2B. Glycerylmonoester können definiert werden als ein Stoffgemisch aus zwei Einzelstoffen, die sich in der Veresterungsposition unterscheiden. Simeticon, das aus Dimeticon und Siliziumdioxid besteht, wird nicht als ein Stoffgemisch definiert, da es sich hier um unterschiedliche Materialien handelt, die zusammengeführt werden, um ein Mehrstoffmaterial zu bilden.

BEISPIEL 2 Glycerylmonoester könnten als eine Mischung von zwei einzelnen Stoffen definiert werden, die sich in der Position der Veresterung unterscheiden.

Anmerkung 2 zum Begriff: Ein Stoffgemisch könnte für eine homologe Gruppe strukturell verschiedenartiger Einzelstoffe verwendet werden, die als Ausgangsmaterialien für die Zubereitung eines Allergenextrakts verwendet werden. Der Extrakt wird genauer beschrieben durch Verwendung der Klasse „Ursprungsmaterial“, Elementgruppe „Fraktionsbeschreibung“ (Allergenpräparat), die aus den strukturell verschiedenartigen Einzelstoffen (Ausgangsmaterialien) als Grundstoffe erhalten wird. Dieser Stoff (Allergenextrakt) ist das Ergebnis desselben (synthetischen) Verfahrens, und daher wird der Extrakt als Stoffgemisch angesehen.

3.45

Anteil

(en: moiety)

Einheit in einem Stoff, die eine vollständige, kontinuierliche Molekülstruktur aufweist

BEISPIEL Die Stärke eines Arzneimittels basiert oft auf dem sogenannten aktiven Anteil des Moleküls, der für die physiologische oder pharmakologische Wirkung des Arzneimittelstoffs verantwortlich ist. Für einen eindeutigen Anteil sollten die freie Säure und/oder freie Base als der Anteil verwendet werden, auf dem die Stärke beruht.

Anmerkung 1 zum Begriff: Der aktive Anteil eines stöchiometrischen oder unstöchiometrischen Stoffmoleküls wird als derjenige Teil des Moleküls betrachtet, der die Base, die freie Säure oder der Ionenmolekülteil eines Salzes, Solvats, Chelats, Clathrats, Molekülkomplexes oder Esters ist.

3.46

Molekülformel

(en: molecular formula)

chemische Formel, die die Gesamtanzahl und Art von Atomen in einem Molekül zur Angabe von atomaren Verhältnissen (die numerischen Anteile von Atomen einer Art gegenüber denen anderer Arten) zeigt, die eine Möglichkeit des Ausdrucks von Informationen über die Anteile von Atomen in einer von ihnen gebildeten chemischen Verbindung darstellt, unter Verwendung einer Reihe von chemischen Elementsymbolen, Zahlen und eventuell anderen Symbolen

Anmerkung 1 zum Begriff: Die Molekülformel könnte andere Symbole wie runde Klammern, Bindestriche, eckige Klammern und Zeichen für Plus (+) und Minus (–) enthalten. Diese sind auf einzelne typographische Zeilen von Symbolen begrenzt und können hoch- und tiefgestellte Zeichen enthalten. Eine chemische Formel enthält keine Wörter (z. B. wird Glukose als $C_6H_{12}O_6$ dargestellt).

Anmerkung 2 zum Begriff: Molekülformeln werden in Übereinstimmung mit dem Hill-System/der Hill-Notation niedergeschrieben, sodass die Anzahl der Kohlenstoffatome in einem Molekül als erstes, die Anzahl der Wasserstoffatome danach und dann die Anzahl aller anderen chemischen Elemente nacheinander in alphabetischer Reihenfolge genannt werden. Wenn die Formel keinen Kohlenstoff enthält, werden alle Elemente, auch Wasserstoff, in alphabetischer Reihenfolge notiert.

Anmerkung 3 zum Begriff: Anorganische Säuren und Metallsalze werden ohne Ladungen oder Verbindungen dargestellt: Beispielsweise jeweils $HClO_4$ und $KMnO_4$. Falls Metallsalze oder anorganische Säuren mehrere Metalle beinhalten, werden die Symbole für Metalle in alphabetischer Reihenfolge dargestellt, z. B. K_2NaPO_4 .

3.47

Molekülformel nach Anteil

(en: molecular formula by moiety)

Möglichkeit des Ausdrucks der Molekülformel eines stöchiometrischen oder unstöchiometrischen Stoffs, der aus zwei oder mehreren Anteilen besteht, wobei die Molekülformel jedes Anteils durch einen Punkt getrennt beschrieben werden muss.

Anmerkung 1 zum Begriff: Die Molekülformel des chemischen Salzes Amlodipin-Besilat ist als $C_{20}H_{25}ClN_2O_5 \cdot C_6H_6O_3S$ beschrieben.

Anmerkung 2 zum Begriff: In nicht-zyklischen Strukturen wie Nitroprussidnatrium: $Na_2[Fe(CN)_5(NO)] \cdot 2H_2O$, wird eine nicht-zyklische Struktur in der folgenden Reihenfolge erstellt:

- das Symbol des zentralen Atoms wird links angeordnet;
- ionische Liganden mit Kationen zuerst, dann Anionen;
- neutrale Liganden.

3.48

Molekülfragment

(en: molecular fragment)

Teil eines Moleküls mit einer oder mehreren Bindungsstellen an andere Fragmente oder Anteile

Anmerkung 1 zum Begriff: Molekülfragmente werden bei der Beschreibung von Polymeren zur Darstellung von Substituenten sowie in strukturellen Modifikationen eines Stoffes verwendet.

3.49

Molekülstruktur

(en: molecular structure)

eindeutige Darstellung der Anordnung von Atomen

Anmerkung 1 zum Begriff: Zur Definition von Stoffen werden die dreidimensionalen Konformationen nicht erfasst. Einzelne Konformationen oder Konformere von Stoffen werden nur entweder allgemein für Proteine (d. h. denaturiert) erfasst, oder wenn eine bestimmte Rotation um eine Einfachbindung so beschränkt ist, dass die beiden unterschiedlichen Konformere voneinander isolierbar sind und sich bei Raumtemperatur nicht ineinander umwandeln (z. B. substituierte Biphenyle).

Anmerkung 2 zum Begriff: Diese Darstellung sollte im Allgemeinen in eine graphische Darstellung übertragbar sein.

3.50

Molekülmasse

(en: molecular weight)

Masse eines Moleküls eines homogenen Stoffes oder mittlere Masse von Molekülen, die einen heterogenen Stoff umfassen, der aus der Molekülstruktur oder der Molekülformel abgeleitet ist

Anmerkung 1 zum Begriff: Sie wird als die Summe der beteiligten Atommassen multipliziert mit der Anzahl der Atome dieses Elements in der Molekülformel berechnet. Die Einheit der Atommasse ist die Einheit der Molekülmasse und schließt die Art der Molekülmasse (g/mol) ein.

Anmerkung 2 zum Begriff: Für stöchiometrische Chemikalien wird die Molekülmasse mit den Standardmassen für jedes der Elemente aus der Molekülformel berechnet. Die Molekülmasse bezieht sich auf die gesamte Struktur oder einen Anteil oder ein Fragment.

Anmerkung 3 zum Begriff: Die Einheit der Molekülmasse ist die Einheit der Atommasse oder Dalton. Die Art der Molekülmasse sollte immer erfasst werden.

Anmerkung 4 zum Begriff: Bei Polymeren gibt es mehrere unterschiedliche Arten der Molekülmasse (mittlere Masse, mittlere Anzahl usw.).

Anmerkung 5 zum Begriff: Für einen Stoff, der im Arzneibuch nicht beschrieben ist, kann ein Massenspektrum bereitgestellt werden, um die berechnete Molekülmasse nachzuweisen.

3.51

monodisperser Stoff

(en: monodisperse substance)

Einzelstoff, der eine homogene Molekülmasse aufweist, d. h. er hat keine Verteilung von Ketten mit unterschiedlichem Molekülmassen innerhalb der Gesamtmasse

3.52

Mehrstoffmaterial

(en: multi-substance material)

Einzelstoffe oder festgelegte Stoffe unterschiedlicher Herkunft, die zusammengebracht werden, ohne eine chemische Umwandlung zu erfahren

BEISPIEL Materialien wie Humaninsulin-Isophan, Simeticon, Aluminiumlacke, Nicotin-Polacrilix und phosphatgepufferte Salzlösung sind Mehrstoffbestandteile.

Anmerkung 1 zum Begriff: Jeder Stoffteil des Mehrstoffmaterials ist ein Grundstoff des Mehrstoffmaterials und muss zuerst registriert werden. Das Mehrstoffmaterial wird auf der Informationsebene der festgelegten Stoffe der Gruppe 1 erfasst.

3.53

mehrstoffiges Ausgangsmaterial

(en: multi-substance starting material)

Stoffgemisch von Mehrstoffen, aus denen ein anderer Stoff hergestellt wird

BEISPIEL Wässriger Extrakt eines Stoffgemisches einer homologen Gruppe von allergenem Ursprungsmaterial.

3.54

Nukleinsäurestoff

(en: nucleic acid substance)

Stofftyp, der definiert werden kann durch eine lineare Sequenz von Nukleosiden, die typischerweise durch Phosphat- oder phosphatähnliche Diesterbindungen miteinander verbunden sind

Anmerkung 1 zum Begriff: Die Art des Nukleinsäurestoffes, z. B. Ribonukleinsäure (RNA) und Desoxyribonukleinsäure (DNA), wird ebenfalls identifiziert. Oligonukleotide und Genelemente, z. B. Promotoren, Enhancer, Kodierungssequenzen und Silencer, sind als Nukleinsäurestoffe definiert.

3.55

offizieller Name

(en: official name)

von einer offiziellen Registrierungsstelle/Organisation vergebener Name

3.56

Organismus

(en: organism)

einzelnes Lebewesen anatomischer Herkunft, das auf Reize reagieren, sich reproduzieren, wachsen und eine Homöostase beibehalten kann

3.57

Teil

(en: part)

Entität anatomischer Herkunft und Stelle des Ursprungsmaterials in einem Organismus

Anmerkung 1 zum Begriff: Entität ist eine Sache mit bestimmter und unabhängiger Existenz.

3.58

pharmazeutisches Produkt

(en: pharmaceutical product)

qualitative und quantitative Zusammensetzung eines Arzneimittels in der zur Verabreichung zugelassenen Dosierungsform in Übereinstimmung mit den zulassungsbezogenen Produktinformationen

Anmerkung 1 zum Begriff: In vielen Fällen entspricht das pharmazeutische Produkt dem Erzeugnis. Es gibt jedoch Fälle, in denen das Erzeugnis vor Verabreichung an den Patienten (als pharmazeutisches Produkt) einer Umwandlung unterzogen werden muss, und die beiden sind in diesem Fall nicht identisch.

3.59

physikalische Form

(en: pharmaceutical form)

physikalischer Zustand, entweder gasförmig, flüssig oder fest, und Art der Organisation bei Feststoffen

Anmerkung 1 zum Begriff: Feststoffe können entweder kristallin oder amorph sein und können Polymorphismus zeigen. Amorphes Material ist durch das Fehlen ausgeprägter Reflexionen im Röntgenpulverbeugungsmuster (XRPD) gekennzeichnet. Polymorphismus, der die Fähigkeit von kristallinen Materialien ist, in mehr als einer Form zu existieren, kann ebenfalls erfasst werden.

3.60

polydisperser Stoff

(en: polydisperse substance)

Einzelstoff, der mehrere zugehörige Entitäten enthält

Anmerkung 1 zum Begriff: Polydisperse Stoffe umfassen Polymere, Stoffgemische und strukturell verschiedenartige Materialien, die aus einer einzelnen Quelle isoliert wurden. Chemische Stoffe, Proteine und Nukleinsäuren mit definierten Sequenzen werden nicht als polydisperse Stoffe beschrieben.

3.61

Polydispersität

(en: polydispersity)

Maß für den Bereich der Molekülmassen in einem polymeren Stoff

Anmerkung 1 zum Begriff: Die Dispersität von Polymeren wird üblicherweise als das Verhältnis des Gewichtsmittels zum Zahlenmittel der Molekülmasse berechnet.

3.62

Polymerkonnektivität

(en: polymer connectivity)

Typen der Copolymer-Sequenz (Polymerkonnektivität), die entweder zufällig, statistisch, alternierend, periodisch, als Block-, Pfropf- oder Misch-Copolymer vorliegen können

3.63

polymerer Stoff

(en: polymer substance)

polydisperser Stofftyp, der strukturelle Wiederholungseinheiten enthält, die durch kovalente Bindungen verbunden sind

Anmerkung 1 zum Begriff: Monodisperse Proteine und Nukleinsäuren mit definierten Sequenzen dürfen nicht mit Hilfe der Polymerstoffelemente definiert werden.

3.64

posttranslationale Modifikation

(en: post-translational modification)

Veränderung eines Proteins, die üblicherweise *in vivo* während oder nach einer Translation auftritt

Anmerkung 1 zum Begriff: Die posttranslationale Modifikation wird innerhalb der Strukturdarstellung beschrieben und nicht als Modifikation eines Proteins.

3.65

Potenzierung

(en: potentization)

Verfahren durch dem Lösen und Zerreibungen aus homöopathischen Ursubstanzen in Übereinstimmung mit homöopathischen Herstellungsverfahren gewonnen werden: dies bedeutet sukzessive Lösungen und Abfolgen oder sukzessive, geeignete Zerreibungen oder eine Kombination aus den zwei Verfahren

Anmerkung 1 zum Begriff: Die Anzahl der Potenzierungsschritte definiert den Grad der Verdünnung; zum Beispiel bedeuten „D3“, „3DH“ oder „3X“ drei Dezimal-Potenzierungsschritte (1:1 000 verdünnt) und „C3“ oder „3CH“ bedeutet drei Zentesimal-Potenzierungsschritte (1:1 000 000 verdünnt).

3.66

Verarbeitungsmaterial

(en: processing material)

Materialart, die für den Herstellungsprozess wesentlich ist und nicht im erhaltenen Material enthalten ist, jedoch als Konstituente im erhaltenen Material präsent sein kann