

Informationssystem Chemikalien des Bundes und der Länder

Benutzerhandbuch Recherchesysteme

Version 1

Versionskontrolle

Datum	Änderung bzw. Kommentar	Version	Bearbeiter
19.01.2022	Erste Version bereitgestellt	1	UBA

Tabelle 1: Dokumenthistorie

Inhalt

1	Einleitung.....	4
1.1	Systembeschreibung und Dokumentinhalte.....	4
1.2	Zugangsvoraussetzungen und Aufruf von ChemInfo.....	4
2	Anmeldung und Registrierung am Recherchesystem	5
2.1	Anmeldung und Auswahl des Systems.....	5
2.2	Registrierung	6
2.3	Persönliche Daten, Registrierung und Kennwort ändern.....	8
2.4	Abmeldung	10
3	Stoffsuche	11
3.1	Auswahl des Systems	11
3.2	Startseite und Schnellsuche	11
3.3	Recherchebereich und Allgemeines zur Suche	12
3.4	Stoffsuche mit Suchoptionen Struktur- und Volltextsuche	14
3.5	Speziessuche	16
3.6	Zitatsuche	17
3.7	Gefahrzettelsuche.....	18
3.8	Expertensuche.....	19
3.8.1	Allgemeines und Aufruf	19
3.8.2	Tabellarische Suche	19
3.8.3	Abfrage-Suche.....	21
4	Suchergebnisse und Dossier	25
4.1	Suchergebnisse	25
4.1.1	Anzeige der Suchergebnisse.....	25
4.1.2	Suchergebnisse speichern und laden	26
4.1.3	Suchergebnisse als Tabelle exportieren	27
4.1.4	Suchergebnisse als Dossier exportieren.....	28
4.2	Dossier	29
4.2.1	Feedback zum Stoff geben.....	31
5	Abbildungsverzeichnis	33
6	Tabellenverzeichnis	35
7	Glossar	36
8	Indexverzeichnis	39

1 Einleitung

1.1 Systembeschreibung und Dokumentinhalte

Als zentrale Umweltbehörde Deutschlands betreibt das Umweltbundesamt ein chemisches Stoffinformationssystem unter dem Namen „Informationssystem Chemikalien des Bundes und der Länder“, kurz „ChemInfo“. Es ist eine Weiterentwicklung des seit mehr als 20 Jahren bestehenden Systems „Gemeinsamer zentraler Stoffdatenpool des Bundes und der Länder (GSBL)“.

Das Stoffinformationssystem ist eine Datenbank für chemische Stoffe mit internationalisierten Eigenschaften zu deren Identifikation, Klassifizierung und Bewertung. Neben rein chemischen Stoffeigenschaften beinhaltet es so bspw. auch Daten zur Gefahrgut-, Arbeits- und Gesundheitsschutz-bezogenen Einstufung von Stoffen.

Die Stoffinformationen im System werden von Nutzer aus Bund und Ländern sowie beteiligte Lieferanten, Produzenten und Instituten innerhalb eines gemeinsamen Redaktionssystems gepflegt. Der Abruf von Informationen zu Stoffen ist über angebundene Recherchesysteme im Internet möglich, welche die Stoffdaten und Recherchefunktionen aufbereitet für verschiedenen Interessengruppen anbieten.

Im vorliegenden Dokument wird das Recherchesystem näher beschrieben mit Augenmerk auf dessen Bedienung. Auf fachliche Aspekte der komplexen und verschiedenen Standards der Klassifizierung von Stoffen wird im Dokument nicht näher eingegangen.

1.2 Zugangsvoraussetzungen und Aufruf von ChemInfo

ChemInfo ist eine Web-Anwendung, auf die über einen Browser zugegriffen wird. Es bestehen daher Mindestvoraussetzungen für die einsetzbaren Browser verschiedener Hersteller und Versionen.

- Unterstützt werden alle HTML5, ES2015 und CSS3 fähigen aktuellen Browser (inkl. Anzeige der Bildformate PNG, GIF, JPEG und SVG, keine textbasierten Browser) ab deren Versionen aus dem Jahr 2017.
- Das System ist auf den Einsatz an Arbeitsplatzrechnern (Desktop-Computer, Notebooks) ausgelegt und optimiert, insbesondere in Bezug auf die Bildschirmgröße und Auflösung (Querformat). Eine Nutzung an mobilen Endgeräten wird nicht explizit ausgeschlossen, ist aber nicht Fokus der Anwendung. Funktions-Einschränkungen auf derartigen Geräten sind also möglich.
- Bezüglich aktueller Betriebssysteme bestehen keine Einschränkungen, solange diese die oben genannten Anforderungen an den Browser unterstützen.

Jeder Interessent kann nach Aufruf des Systems als anonymer Nutzer nach Stoffen recherchieren. Für den Zugriff auf zielgruppenspezifische Funktionen und Inhalte ist eine Anmeldung und vorherige Registrierung beim Systembetreiber erforderlich.

Zum Aufruf des Systems öffnen Sie die Ihnen übermittelte URL / Adresse des zu nutzenden Recherchesystems in einem Browser.

2 Anmeldung und Registrierung am Recherchesystem

2.1 Anmeldung und Auswahl des Systems

Für den Zugriff auf zielgruppenspezifische Funktionen und Inhalte des Recherchesystems wechseln Sie über die Anmeldeschaltfläche rechts oben auf die Anmelde-Maske.



Abbildung 1: Anmeldung am Recherchesystem

Melden Sie sich mit Ihrem Benutzernamen und Ihrem Passwort am System an. Sofern Sie noch niemals am Recherchesystem angemeldet waren oder die Nutzungsbedingungen von ChemInfo geändert wurden, blendet das System ein Kontrollkästchen auf der Anmeldemaske ein. Eine Anmeldung ist dann erst möglich, wenn der Haken zur Annahme der Nutzungsbedingungen gesetzt wurde.

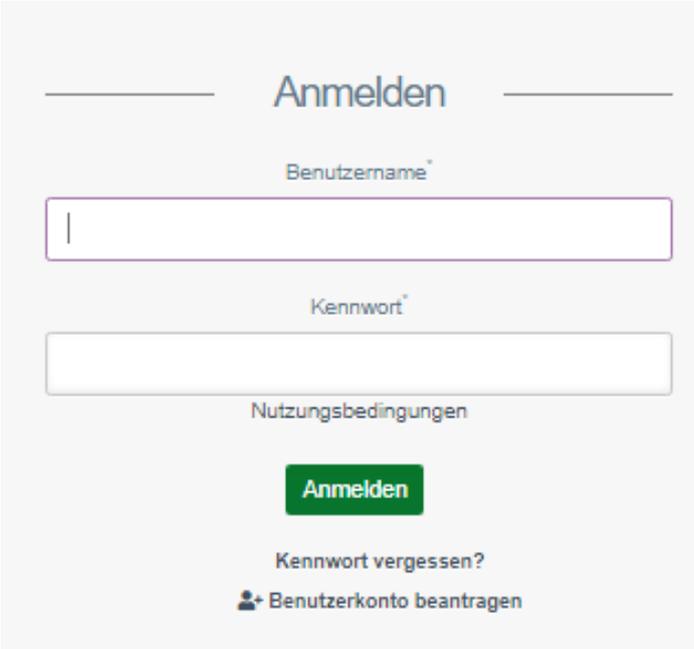


Abbildung 2: Anmeldemaske

Sofern Sie aufgrund Ihrer Tätigkeiten bzw. Zuständigkeiten für den Zugriff auf zielgruppenspezifische Systeme berechtigt wurden, kann das gewünschte System nach erfolgter Anmeldung über das oben links befindliche Dropdown gewechselt werden.

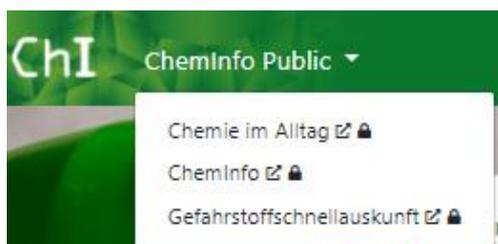


Abbildung 3: Wechsel des Systems / Produkts / Katalogs

2.2 Registrierung

Sofern Sie noch kein Nutzerkonto zur Anmeldung an ChemInfo besitzen und Zugriff zusätzliche Funktionen oder zielgruppenspezifische Inhalte benötigen, müssen Sie sich auf der Anmelde-Maske über den Link „Benutzerkonto beantragen“ registrieren lassen.

Dabei wird zwischen dem öffentlichen und nichtöffentlichen Bereich (Vollzugriff) unterschieden. Der öffentliche Bereich enthält Zusatzfunktionen wie das Speichern von Trefferlisten zu einer Suche. Für die meisten Nutzer ist dies die passende Auswahl. Wenn Sie nicht wissen, welchen Bereich der richtige für Sie ist, dann wählen Sie „nur öffentlicher Bereich“.

Der Vollzugriff muss erst durch eine/n Bearbeiter/in freigegeben werden. Füllen Sie deshalb das Anmeldeformular vollständig und korrekt mit Ihren Daten aus. Benötigen Sie zusätzliche Rechte, so begründen Sie dies im Kommentarfeld.

Nutzerkonto beantragen

Hinweis: Bitte beachten Sie, dass Sie auch ohne Anmeldung im öffentlichen Bereich (ChemInfo public) recherchieren können. Mit einer Anmeldung haben Sie zusätzlich die Möglichkeit, Feedback zu Stoffdaten zu geben und Stoffdossiers herunterzuladen. Als Behördenmitarbeitende sind Sie für die ChemInfo-Vollrecherche und für die Gefahrstoffschnellauskunft (Vollzugriff) berechtigt. Dafür müssen Sie erst durch uns freigeschaltet werden.

Angaben zum Nutzer

Vorname* Nachname*

Bitte geben Sie Ihren persönlichen Namen ein, Sie werden als Ansprechpartner für diesen Account geführt.

Benutzername*

Der Benutzername darf nur Buchstaben (außer ä, ö, ü und ß), Zahlen und die Sonderzeichen -_@+ enthalten. Sie können einen persönlichen oder einen Gruppenaccount (z. B. Freiwillige Feuerwehr Muecheln) erstellen. Auf diesen dürfen alle, die der Gruppe angehören, nach Freischaltung zugreifen. Bitte wählen Sie einen aussagekräftigen Namen (z. B. Feuerwehr_Muecheln).

E-Mail* E-Mail bestätigen

Bitte geben Sie nach Möglichkeit eine dienstliche E-Mail-Adresse an.

Postleitzahl* Ort* Straße / Nr.*

Bitte geben Sie nach Möglichkeit eine dienstliche Adresse an.

Telefon*

Bitte geben Sie nach Möglichkeit eine dienstliche Telefonnummer an.

nur öffentlicher Bereich Vollzugriff (Freigabe erforderlich)

Für den Vollzugriff (inkl. GSA) sind nur Behördenmitarbeitende und Einsatzkräfte aus BOS-Einheiten / Blaulichtorganisationen des Bundes und der am Projekt beteiligten Ländern berechtigt.

Kommentar

Ich akzeptiere die Nutzungsbedingungen.

Abbildung 4: Beantragung eines Zugangs zum öffentlichen Bereich des Systems

Der Vollzugriff umfasst, je nach gegebenen Berechtigungen zusätzliche Daten in anderer Aufbereitung. Dies richtet sich vor allem an Behörden oder Organisationen wie Feuerwehren, Technisches Hilfswerk usw., die erweiterte oder zusätzliche Daten benötigen.

Um Zugang zu erlangen, müssen Sie dazu Angaben über die Organisation, zu der Sie gehören, und deren Eingliederung (Auswahl aus Bund, jeweiliges Bundesland oder andere) machen.

Bitte prüfen Sie vor dem Absenden des Antrages genau die unter Behörde sowie Land/Bereich gemachten Angaben. Bei falschen Angaben kann es zu einer verzögerten Anlage Ihres Anmeldekontos bis hin zur Abweisung Ihrer Registrierung kommen. Stellen Sie sicher, dass Sie Kontaktdaten angegeben haben, über die Sie bei etwaigen Rückfragen auch erreichbar sind.

nur öffentlicher Bereich
 Vollzugriff (Freigabe erforderlich)

Für den Vollzugriff (inkl. GSA) sind nur Behördenmitarbeitende und Einsatzkräfte aus BOS-Einheiten / Blaulichtorganisationen des Bundes und der am Projekt beteiligten Ländern berechtigt.

Kommentar

Angaben zur zuständigen Behörde

Zuständige Behörde*

Postleitzahl

Ort

Straße / Nr.

Telefon

E-Mail

Website

Bitte geben Sie hier die Kontaktdaten Ihrer zuständigen Behörde an (z. B. Kreisverwaltung Saalekreis). Sie unterstützen uns damit bei der Prüfung, ob Sie ehrenamtlich tätig sind. Sollten Sie eine dienstliche E-Mail-Adresse verwenden, sind keine zusätzlichen Kontaktdaten Ihrer zuständigen Behörde erforderlich. Sollten Sie weder eine dienstliche E-Mail-Adresse noch einen Kontakt in einer zuständigen Behörde nennen können, werden wir einen Dienstausweis/Mitgliederausweis o. ä. von Ihnen erfragen.

Land/Bereich*

Zusätzliche Produkte (nicht öffentlich)

- ChemInfo (Intern)
- Gefahrstoffschneellauskunft (GSA)
- ChemInfo2Klontest (Intern_Kopie)

Nähere Informationen zu unseren Produkten erhalten sie direkt unter www.chemikalieninfo.de

Demozugang

Ich akzeptiere die Nutzungsbedingungen.

Speichern

Abbildung 5: Beantragung eines Zugangs zum gesicherten Bereich des Systems

Nach dem Speichern bearbeiten die Zuständigen Ihren Antrag und erstellen einen Nutzerkonto für Sie oder lehnen den Antrag ab.



Abbildung 6: Beantragung eines Zugangs zum gesicherten Bereich des Systems

Sobald ein Nutzerkonto für Sie erstellt wurde, erhalten Sie eine E-Mail mit einem Confirmation-Link an die von Ihnen angegebene E-Mail-Adresse, welcher nach einer Weile abläuft. Kontrollieren Sie zeitnah regelmäßig Ihren E-Mail-Ordner und gegebenenfalls auch Ihren Spam-Ordner.

Nachdem Sie den Link in einem Browser geöffnet haben, werden Sie aufgefordert, ein Passwort zu vergeben und dieses zu bestätigen.



The screenshot shows a web form titled "Kennwort vergeben". Below the title is a sub-header: "Bitte geben Sie ein Kennwort und dessen Wiederholung ein, um die Registrierung abzuschließen." There are two input fields: the first is labeled "Kennwort*" and the second is labeled "Kennwortwiederholung*". Below the second field is a blue button labeled "Speichern".

Abbildung 7: Confirmation-E-Mail nach Registrierung und Nutzerfreischaltung

Das System weist Sie darauf hin, falls Ihr Passwort nicht die Mindestanforderungen erfüllt. Im Auslieferungszustand muss für ein akzeptables Passwort

- mindestens 7 Zeichen lang und
- mindestens 1 Groß- und 1 Kleinbuchstabe und
- mindestens 1 Sonderzeichen und
- mindestens 1 Ziffer

enthalten sein.

Erfüllt dieses Passwort die Mindestanforderungen an die Sicherheit, so können Sie sich danach an der Anwendung mit Ihrem Nutzernamen und Passwort anmelden.

2.3 Persönliche Daten, Registrierung und Kennwort ändern

Zur Änderung Ihrer persönlichen Daten, Zugriffen auf zielgruppenspezifische Inhalte und Funktionen sowie zur Änderung ihres Kennwortes rufen Sie den Menüeintrag „Benutzerprofil anzeigen“ an den Nutzeroptionen oben rechts auf.

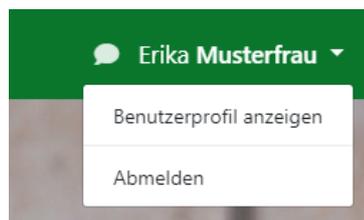


Abbildung 8: Nutzeroptionen

Über die linke Navigation (Eintrag „*Mein Profil*“) können Sie die Daten aktualisieren und ggf. auch Zugriff auf weitere zielgruppenspezifische Funktionen und Inhalte beantragen.

 Mein Profil

Der Account ist aktiv.

UserName

HansWurst

Vorname*

Hans

Nachname*

Wurst

E-Mail*

testitester@gmp.de 

Telefon

12345678

Postleitzahl

00001

Ort

Fleischhausen

Straße

Hauptstraße 3

Sprache

Deutsch (Deutschland) 

Newsletterabonnement

Produkte (bestätigt)

ChemInfo (Intern)

Produktanfragen

Gefahrstoffschneidkunit (GSA)

ChemInfo Public (Public)

Chemie im Alltag (CiA)

Speichern

Zurücksetzen

Abbildung 9: Persönliche Daten

Neben den persönlichen Daten ist es hier auch möglich, den E-Mail-Newsletter für aktuelle Benachrichtigungen zu abonnieren oder abzubestellen (siehe das entsprechende Kontrollkästchen auf der Seite).

Für eine Passwort-Änderung wählen Sie den Eintrag „*Kennwort ändern*“ aus der linken Navigation.

Passwort ändern

Bitte geben Sie Ihr aktuelles sowie ein neues Passwort und dessen Wiederholung ein, um die Änderung abzuschließen.

altes Passwort*

neues Passwort*

Passwortwiederholung*

Speichern

Abbildung 10: Maske zum Ändern des eigenen Passwortes

2.4 Abmeldung

Sind Sie am System angemeldet, finden Sie die Funktion zur Abmeldung vom System in den Nutzeroptionen oben rechts.

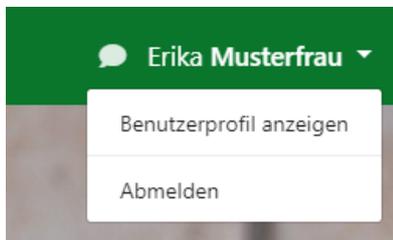


Abbildung 11: Nutzeroptionen

3 Stoffsuche

3.1 Auswahl des Systems

Stellen Sie vor dem Ausführen einer Suche sicher, das gewünschte System gewählt zu haben, sofern Sie Zugriff auf eines oder mehrere mit zielgruppenspezifischen Inhalten und Funktionen besitzen. Das System kann nach erfolgter Anmeldung über das oben links befindliche Dropdown gewechselt werden.



Abbildung 12: Wechsel des Systems / Produkts / Katalogs

Systeme mit zielgruppenspezifischen Inhalten und Funktionen sind durch den Betreiber konfigurierbar bezüglich der möglichen Suchwerkzeuge, angezeigter Stoffmerkmale und Sachverhalte in der Ergebnisdarstellung, dem Design und Layout des Systems wie auch der Beschriftung einzelner Ein- und Ausgabefelder. Systeme können sich daher von den Darstellungen in dieser Dokumentation unterscheiden, das Prinzip der Bedienung der Suche und Ausgabe der Ergebnisse ist jedoch überall grundsätzlich gleich. Nicht jedes System verfügt über alle der folgend beschriebenen Suchfunktionen, mindestens jedoch über die Schnell- und Stoffsuche.

3.2 Startseite und Schnellsuche

Auf der Startseite der Recherchesystem finden Sie Informationen zum System, Ankündigungen und Benachrichtigungen sowie eine Schnellsuche, die nach Begriffen im Namen von Stoffen sucht und dabei keinerlei andere Stoffmerkmale/Sachverhalte berücksichtigt. Zur Startseite gelangen sie immer über den ChemInfo-Link im Footer der Anwendung.

Geben Sie zur Suche nach einem Stoff Ihren Suchbegriff ein.

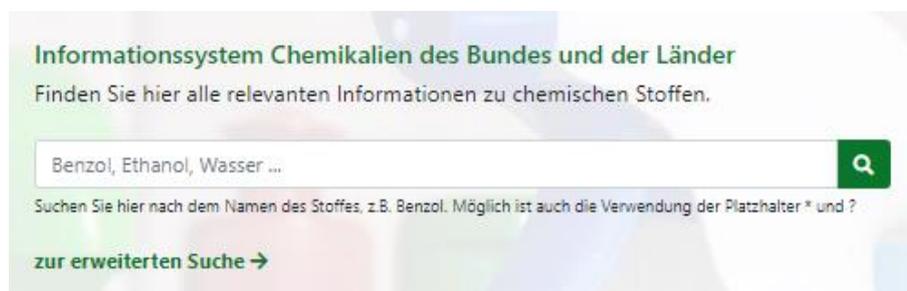


Abbildung 13: Schnellsuche

Über den Link „zur erweiterten Suche“ sowie nach der Ausführung der Suche gelangen Sie in den Recherchebereich des Portals mit weiteren Suchfunktionen bzw. der Anzeige der Suchergebnisse der Schnellsuche.

3.3 Recherchebereich und Allgemeines zur Suche

Im Recherchebereich stehen Ihnen erweiterte Suchwerkzeuge zur Verfügung, welche vom Betreiber zielgruppenspezifisch konfiguriert sind. Sie finden diese oben auf der Symbolleiste.

The screenshot shows the ChemInfo Public search interface. At the top, there is a navigation bar with 'Stoffsuche', 'Gefahrzettelsuche', and 'Expertensuche' tabs. The main search form is titled 'Stoffsuche Suchformular' and includes fields for 'Stoffname' (containing 'Benzol'), 'Summenformel', 'CAS-Nummer', 'UN-Nummer', 'GSBL-Nummer', and 'Chemische Struktur'. A 'Volltextsuche' field is also present. Below the search form, there are sorting options and a 'Suchen' button. The search results section shows two entries for 'Benzol', each with a chemical structure icon and a list of identifiers (GSBL-RN, CAS-RN, Stoffart).

Abbildung 14: Recherchebereich mit Suchfunktionen und den Suchergebnisse

Suchwerkzeug	Beschreibung
Stoffsuche	Die Stoffsuche dient zur Suche nach Stoffen anhand einzelner erfasster Stoffeigenschaften bzw. Klassifizierungen zu diesen. In der Fachsprache wird hierfür der Begriff Sachverhalte genutzt.
Volltextsuche	Eine Volltextsuche durchsucht nicht bestimmte einzelne erfasste Sachverhalte, sondern alle.
Struktursuche	In ChemInfo sind auch alle als chemische Strukturzeichnungen erfassten chemischen Zusammensetzungen von Stoffen durchsuchbar. Über einen Strukturzeichendialog kann man Strukturen visualisiert erstellen und im Zuge einer Suche als Haupt- oder Zusatzbedingung nutzen. Dabei ist es weiterhin möglich, auf 100%ige Übereinstimmung, Ähnlichkeit oder eine Suche in Teilstrukturen zu setzen.
Gefahrzettelsuche	Über die Gefahrzettelsuche sucht man nach Stoffen anhand ihrer Gefahrklassen-Einstufung.
Zitatsuche	Bei der Zitatsuche werden die erfassten Quellenangaben durchsucht. Entsprechend gibt es hier andere Felder zur Angabe der Such-Parameter.

Speziessuche	Bei der Speziessuche werden die hinterlegten Lebewesen / Organismen durchsucht. Entsprechend gibt es auch hier andere Felder zur Angabe der Such-Parameter.
Expertensuche	Eine Expertensuche gestattet das Durchsuchen des Datenbestandes anhand der Angabe von Suchabfragen direkt gegen das Datenmodell. Entsprechend muss man eine grundlegende Kenntnis zu Stoffklassifikationen besitzen, um sie effektiv einsetzen zu können.

Tabelle 2: Suchwerkzeug im Recherchesystem

Für die Suchfunktionen gilt allgemein:

- Alle Suchwerkzeuge arbeiten nicht mit Case-Sensitivität, d. h. es wird nicht zwischen Groß- und Kleinschreibung unterschieden. Eine Ausnahme hiervon ist das Merkmal Summenformel (Hill), da enthaltenen Kleinbuchstaben in chemischen Symbolen eine andere Bedeutung zukommt als ihren großbuchstabigen Pendanten.
- Während alle Suchwerkzeuge in der Lage sind, auch Wortbestandteile zu finden oder die Nutzung von Platzhaltern unterstützen, beruhen Volltextsuchen technisch bedingt immer auf ganzen Worten. Enthaltenen Worte Zeichen wie einen Bindestrich oder generell andere Zeichen als Zahlen und Buchstaben, müssen auch diese bei Volltextsuchen angegeben werden.
Bei einer Volltextsuche wird ein Wort als Zeichenfolge ohne Leerzeichen oder Satzzeichen betrachtet. Das Auftreten eines nicht alphanumerischen Zeichens kann ein Wort während einer Suche unterbrechen. Da es sich bei der zugrundeliegenden Volltextsuche um ein wortbasiertes Modul handelt, wird die Interpunktion im Allgemeinen nicht berücksichtigt und beim Durchsuchen des Indexes ignoriert. Daher würde eine Volltextsuche nach "Wasser-Stoff" auch einen Wert finden, der den Text „Der Stoff löst sich nicht in Wasser“ enthält.
- Alle Suchwerkzeuge arbeiten auf dem aktiven von Datenpflegern freigegebenen Datenbestand und finden daher keine Inhalte, welche aus aktuellen noch nicht freigegebenen Änderungen an Stoffen im Redaktionssystem resultieren.
- Angebotene Suchfelder sind durch den Betreiber generell und im speziellen für zielgruppenspezifische Inhalte und Funktionen konfigurierbar und können insbesondere auch im Zuge von Produkt-Verbesserungen daher von den Abbildungen in dieser Dokumentation leicht oder stärker abweichen.

Als Ergebnis von Stoffsuchen werden Stoffe im Recherchesystem als Dossier dargestellt. Ein Dossier dient zur Anzeige von Sachverhalten (Eigenschaften, Klassifizierungen, Stoffmerkmalen).

Ein Stoff gehört immer einer Stoffart an. In ChemInfo unterscheidet man zwischen Einzelinhaltsstoffen, Komponentenstoffen und Stoffklassen.

3.4 Stoffsuche mit Suchoptionen Struktur- und Volltextsuche

Die Stoffsuche (erreichbar über einen Link auf der Startseite oder der Schaltfläche „*Stoffsuche*“ in der Symbolleiste) bietet neben der Suche im Stoffnamen Felder zur Suche in auch anderen Stoffmerkmalen sowie eine Struktur- und Volltextsuche an.

The screenshot shows a search interface with the following elements:

- Stoffname:** A text input field containing "Benzin".
- Suchhinweis:** "Suchen Sie hier nach dem Namen des Stoffes, z.B. Benzol. Möglich ist auch die Verwendung der Platzhalter * und ?"
- Suchfelder:**
 - Summenformel:** An empty text input field.
 - CAS-Nummer:** An empty text input field.
 - UN-Nummer:** An empty text input field.
 - GSL-Nummer:** An empty text input field.
 - Chemische Struktur:** A button labeled "Struktur zeichnen" followed by a dropdown menu set to "Exakt".
- Options:**
 - Nur Rechtsstoffklassen suchen
 - Small text: "Dies ist eine Enthält-Suche auf das Feld LIFO/LIFO"
 - Small text: "Hier wird nur im Feld UNNR gesucht"
 - Small text: "Mit Hilfe eines grafischen Editors können Sie hier eine chemische Struktur zeichnen und danach suchen."
- Volltextsuche:** An empty text input field.
- Buttons:** A green "Suchen" button and a "Aktuelle Treffer verfeinern" dropdown menu.

Abbildung 15: Beispiel: Einfache Suche inkl. Volltextsuche

Über die „*Suchen*“-Schaltfläche kann eine neue Suche im gesamten Datenbestand ausgeführt werden. Über die Schaltfläche „*Aktuelle Treffer verfeinern*“ erfolgt eine Suche in den Ergebnissen der zuletzt ausgeführten Suche. Gefundene Stoffe werden nach erfolgter Suche in den Suchergebnissen angezeigt. Aus den Suchergebnissen kann zu den Dossiers gefundener Stoffe gewechselt werden.

- Wird über mehrere Merkmale gesucht, werden alle Suchfelder UND-verknüpft.
- Möchte man nach einem Begriff über alle erfassten Merkmale/Sachverhalte zu Stoffen suchen, gibt man den Suchbegriff im Feld „*Volltextsuche*“ ein. Man kann dieses Feld daher auch nutzen, wenn das eigentlich gewünschte Merkmal zur Eingrenzung bei der Suche nicht angeboten wird, erhält u. U. dann aber eine recht breitgefächerte Treffermenge. Alternativ stehen die anderen Suchwerkzeuge zur Verfügung.
- Anstatt eine Suche innerhalb der Stoffsuche auszuführen, kann man das Formular auch zur Erfassung erster Suchparameter verwenden und diese über die Dropdown an der Schaltfläche „*Suchen*“ in die tabellarische Expertensuche oder die Expertensuche in Abfragesprache übernehmen

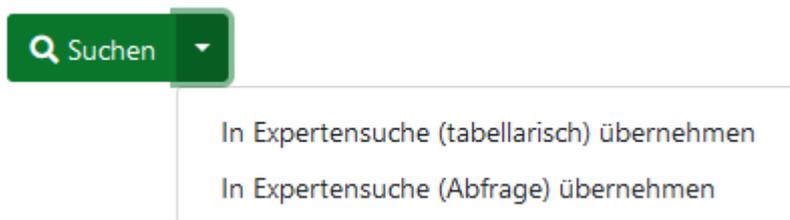


Abbildung 16: Übernahme in Expertensuche

- Zur Vereinfachung der Suche bieten nahezu alle Suchfelder zwei unterstützende Funktionen an. Zum ersten eine Vorschlagsliste mit den im System am häufigsten vorkommenden Werten, welche während der Eingabe Vorschläge macht und zum zweiten eine Nachschlagefunktion über das  Symbol am Feld. Im sich öffnenden Dialog (siehe Abbildung 17: Nachschlagefunktion innerhalb der Suche) werden alle in der Stoffdatenbank vorhandenen

Merkmalswerte aller Stoffe zum Durchblättern sowie durchsuchen angeboten. Auch wird in der Spalte Häufigkeit angezeigt, wie viele Stoffe über einen gefundenen Wert verfügen. Zur Übernahme in die Suchmaske ist der Link des gesuchten Wertes anzuklicken.

- Möchte man die in der Stoffdatenbank als Formeln erfassten chemischen Zusammensetzungen von Stoffen durchsuchen, gibt man die Suchstruktur über die Schaltfläche „*Struktur zeichnen*“ an (siehe Abbildung 18: Ketcher-Editor für chemische Formeln) und entscheidet danach über das zugehörige Dropdown-Feld, ob eine Suche auf exakte Übereinstimmung, Ähnlichkeit oder vollständigem Enthaltensein der eigenen gezeichneten Struktur ausgeführt werden soll. Die Schaltfläche gestattet das Entfernen einer erstellten Suchstruktur, so dass lediglich die anderen Suchparameter wieder zum Greifen kommen.

Summenformel (LIFO,LIFO) x

Häufigkeit	Wert
1	C H2 B N Na
1	C H2 Cl F
1	C H2 Cl I
1	C H2 Cl2 O2 S
1	C H2 Cl4 Si
2	C H2 Co2 O5
1	C H2 Cu2 O5
1	C H2 F2
2	C H2 Hg I2
1	C H2 O3

Gehe zu Los Zeige Eintrag 311 bis 320 von 9.021 Zurück Weiter Abbrechen

Abbildung 17: Nachschlage-Funktion innerhalb der Suche

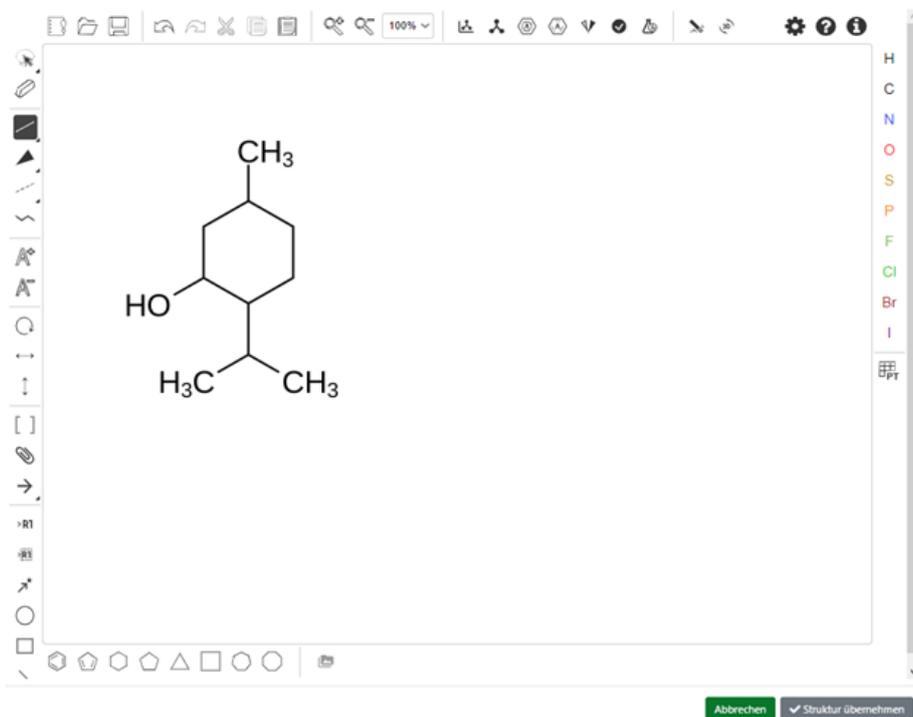


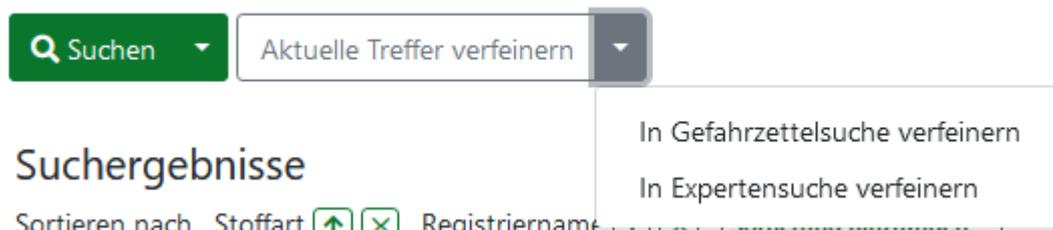
Abbildung 18: Ketcher-Editor für chemische Formeln

Eine Beschreibung zur Verwendung des Editors ist bei dessen Hersteller zu finden.

Externer Link: <http://lifescience.opensource.epam.com/ketcher/>

Bitte beachten Sie auch die allgemeinen Hinweise zur Suche im Kapitel 3.3 Recherchebereich und Allgemeines zur Suche.

Das System bietet auch die Möglichkeit, eine Suche nach und nach zu verfeinern. Dabei kann nach einer erfolgten Suche eine weitere Suche auf Basis der vorherigen Treffermenge durchgeführt werden. Die verfügbaren Optionen finden Sie unter „Aktuelle Treffer verfeinern“.



3.5 Speziessuche

Sofern freigeschaltet, kann in der Stoffdatenbank auch nach dem Bezug von Stoffen zu einer bestimmten Spezies gesucht werden. Der Begriff Spezies steht allgemein für ein Lebewesen / einen Organismus. Zur Speziessuche gelangt über die Schaltfläche „Speziessuche“ in der Symbolleiste.

Suchformular

Spezies-Name	<input type="text"/>	Spezies-Nummer	<input type="text"/>
Namensart	<input type="text"/>	Ebene	<input type="text"/>
	<input type="text"/>	ICS-Nummer	<input type="text"/>
<input type="button" value="Suchen"/>		<input type="button" value="Aktuelle Treffer verfeinern"/>	

Abbildung 19: Speziessuche

Die Suchfunktionalitäten entsprechen im Wesentlichen den Beschreibungen zur Stoffsuche (siehe 3.4 Stoffsuche mit Suchoptionen Struktur- und Volltextsuche) und zur Suche allgemein (siehe 3.3 Recherchebereich und Allgemeines zur Suche), wobei hier keine Struktur oder Volltextsuche möglich ist. Auch die Funktionen zur Übernahme erfasster Suchparameter in andere Suchwerkzeuge stehen bei der Speziessuche zur Verfügung.

3.6 Zitatsuche

Sofern freigeschalten, kann in der Stoffdatenbank auch nach eingepflegten Zitaten gesucht werden. Neben Stoffen können in der Stoffdatenbank auch Zitate zu Stoffen gepflegt werden. Zitate dienen zur Aufnahme von Quellenangaben. Zur Zitatsuche gelangt über die Schaltfläche „Zitatsuche“ in der Symbolleiste.

Suchformular

Autoren	<input type="text"/>	Titel	<input type="text"/>	Zeitschrift	<input type="text"/>
Coden	<input type="text"/>	Jahr	<input type="text"/>	Patentanmelder	<input type="text"/>
<input type="button" value="Suchen"/>		<input type="button" value="Aktuelle Treffer verfeinern"/>			

Abbildung 20: Zitatsuche

Die Suchfunktionalitäten entsprechen im Wesentlichen den Beschreibungen zur erweiterten Suche (siehe 3.4 Stoffsuche mit Suchoptionen Struktur- und Volltextsuche) und zur Suche allgemein (siehe 3.3 Recherchebereich und Allgemeines zur Suche), wobei hier keine Struktur oder Volltextsuche möglich ist. Auch die Funktionen zur Übernahme erfasster Suchparameter in andere Suchwerkzeuge stehen bei der Zitatsuche zur Verfügung.

3.7 Gefahrzettelsuche

Sofern freigeschaltet, kann in der Stoffdatenbank auch nach der Einstufung von Stoffen in Gefahrstoffklassen gesucht werden. Zur Gefahrzettelsuche gelangt über die Schaltfläche „Gefahrzettelsuche“ in der Symbolleiste.

Suchformular

<input type="checkbox"/>  Klasse 1.1: Stoffe und Gegenstände, die massenexplosionsfähig sind	<input type="checkbox"/>  Klasse 1.2: Stoffe und Gegenstände, die die Gefahr der Bildung von Splittern, Spreng- und Wurfstücken aufweisen, aber nicht massenexplosionsfähig sind	<input type="checkbox"/>  Klasse 1.3: Stoffe und Gegenstände, die eine Feuergefahr und eine geringe Gefahr durch Splitter-, Spreng- und Wurfstücke besitzen	<input type="checkbox"/>  Klasse 1.4: Stoffe und Gegenstände mit geringer Explosionsgefahr	<input type="checkbox"/>  Klasse 1.5: Sehr unempfindliche massenexplosionsfähige Stoffe	<input type="checkbox"/>  Klasse 1.6: Extrem unempfindliche nicht massenexplosionsfähige Stoffe
<input type="checkbox"/>  Klasse 4.3: Stoffe, die in Berührung mit Wasser entzündbare Gase entwickeln	<input type="checkbox"/>  Klasse 5.1: Entzündend (oxidierend) wirkende Stoffe	<input type="checkbox"/>  Klasse 5.2: Organische Peroxide	<input type="checkbox"/>  Klasse 6.1: Giftige Stoffe	<input type="checkbox"/>  Klasse 6.2: Ansteckungsgefährliche Stoffe	<input type="checkbox"/>  Klasse 7A: Radioaktive Stoffe, Kategorie I-WEISS, Dosisleistung Außenseite Verpackung max. 0,005 mSv/h

Abbildung 21: Gefahrzettelsuche

Anders als in den anderen Suchen wählt man im Suchformular lediglich die interessierenden Gefahrstoffklassen durch Setzen eines Häkchens aus und bekommt nach erfolgter Suche alle zugehörigen Stoffe aufgelistet. Werden mehrere Klassen ausgewählt, so werden wie in den anderen Suchen auch nur Stoffe gefunden, die beide enthalten (UND-Verknüpfung).

Auch diese Suche gestattet die Übernahme der Suchparameter in andere Suchwerkzeuge wie unter 3.4 Stoffsuche mit Suchoptionen Struktur- und Volltextsuche allgemein beschrieben. Bitte beachten Sie auch die allgemeinen Hinweise zur Suche im Kapitel 3.3 Recherchebereich und Allgemeines zur Suche.

3.8 Expertensuche

3.8.1 Allgemeines und Aufruf

Sofern aktiviert, können Nutzer mit tieferen Kenntnissen von Stoffklassifikationen alle Inhalte der Stoffdatenbank in beliebigen Kombinationen durchsuchen. Als Werkzeuge stehen dabei eine tabellarische Suche und eine Abfragesuche zur Verfügung. Während man seine Suchanfrage bei der Abfragesuche über eine SQL-artige Syntax formuliert, gestattet die tabellarische Suche eine Low-Code-artige Erfassung der Abfrage durch Angabe und Verknüpfung einzelner Abfragebedingungen. Zur Expertensuche gelangt man über die Schaltfläche „*Expertensuche*“ in der Symbolleiste.

3.8.2 Tabellarische Suche

Tabellarisch Abfrage

Suche nach: Stoff Spezies Zitat

Verknüpfung	Suchschlüssel	Operator	Wert
	INDEX.NAME	=	Benzin
Und	INDEX.CAS	=	100-03-8

Struktur
✓ Die Suche enthält eine Struktur.

Verknüpfung* Operator* Ähnlichkeit

Abbildung 22: Tabellarische Expertensuche

Innerhalb einer tabellarischen Suche kombiniert man Merkmale und deren Felder aus dem Datenmodell zu Suchabfragen. Zu durchsuchende Merkmale/Felder lassen sich zeilenweise über geeignete Operatoren mit Suchbegriffen verknüpfen und logisch verketteten. Über die Schaltfläche „*Suchen*“ führt man die Suche im Anschluss aus. Liegt bereits eine Treffermenge vor, kann die Suche nach Modifizierung der Suchparameter per Schaltfläche „*Aktuelle Treffer verfeinern*“ auch innerhalb der Treffermenge ausgeführt werden.

Zur Erfassung einer Suchabfrage geht man folgendermaßen vor:

- Im ersten Schritt ist auszuwählen ob Stoffe, Spezies oder Zitate durchsucht werden sollen.
- Zeilenweise erfasst man im Anschluss einzelne Suchbedingungen zu Merkmalen oder Merkmalsfeldern und beachtet bereits mögliche zu setzende Klammerungen für logische Verkettungen. Bedingungen lassen sich über die Schaltfläche hinzufügen bzw. über die einzelnen Schaltflächen gegebenenfalls auch entfernen oder in der Verkettung verschieben.
 - In der Spalte „*Suchschlüssel*“ gibt man das Merkmal oder per Punkt getrennt *Merkmal.Feld* an. Die Namen der Merkmale und Felder müssen denen des Datenmodells entsprechen. Zur Vereinfachung der Eingaben verfügen die Suchschlüssel über eine Autovervollständigungsfunktion und eine Merkmalsauswahl, die über die Schaltfläche aufgerufen werden. In der Merkmalsauswahl werden alle durchsuchbaren Merkmale und Felder in lesbarer Form angeboten und können per Klick auf selbige (sowohl Merkmal als auch Feld) in die Suchschlüssel übernommen werden.

- Möchte man nach einem Begriff über alle erfassten Sachverhalte zu Stoffen suchen, ist als Merkmal „INDEX.BASIC“ anzugeben (Volltextsuche).
- Aus der Spalte Operator wählt man die anzuwendende Vergleichsfunktion. Möglich sind hier je nach dem Datentyp eines Feldes „existiert“, „existiert nicht“, „ist gleich“, „ist ungleich“, „ist größer als“, „ist kleiner als“, „ist größer oder gleich“, „ist kleiner oder gleich“, „beginnt mit“, „endet auf“, „beinhaltet“ sowie „Volltext“. „Existiert“ sowie „existiert nicht“ prüft auf das Vorhandensein von Informationen zu einem Merkmal oder Feld, während die anderen ausschließlich bei Feldinhalten angewendet werden können. Textsuchen unterstützen mit allen Operatoren außer „Volltext“ die Verwendung der Platzhalter * (0...n beliebige Zeichen) und ? (exakt 1 beliebiges Zeichen).
- In der Spalte „Wert“ gibt man den gesuchten Begriff an. Auch die Eingabefelder zu den Suchbegriffen verfügen über eine Autovervollständigungsfunktion und Werteauswahl.
- Die einzelnen zeilenweise erfassten Suchbedingungen können über die Spalten mit den Klammer-Auf- und Klammer-Zu-Symbolen sowie der Verknüpfungsspalte logisch verkettet werden.
 - Als Verknüpfung stehen *Und*, *Oder*, *Ohne* sowie *Link* zur Verfügung. Diese sind in Kapitel 3.8.3 genauer erklärt.
 - Die einzelnen Bedingungen können geklammert werden
- Möchte man als eine weitere Bedingung die chemische Struktur der Stoffe durchsuchen, kann man die gesuchte Struktur über die Schaltfläche „Struktur zeichnen“ erstellen und entscheidet danach über weitere Suchangaben.
 - Eine Beschreibung zur Verwendung des Editors ist bei dessen Hersteller zu finden. Externer Link: <http://lifescience.opensource.epam.com/ketcher/>
 - Nach der Übernahme der Struktur werden die weiteren Angaben zur Struktursuche freigeschaltet und man kann den Grad bzw. die Genauigkeit des Strukturvergleichs angeben.
 - Die *Exaktsuche* vergleicht auf eine vollständige Übereinstimmung der chemischen Zusammensetzung.
 - Die *Ähnlichkeitssuche* vergleicht auf einen bestimmten Grad der Übereinstimmung der chemischen Zusammensetzung, ohne dass die Suchstruktur 1:1 getroffen werden muss. Der Einfachheit halber ist 0,9 vorausgewählt. Die Angabe entspricht der Mindestähnlichkeit nach der sogenannten Tanimoto-Distanz.
 - Bei einer *Teilstruktursuche* müssen die gezeichneten Suchstrukturen in den Stoffstrukturen vollständig enthalten sein. Der gesuchte Stoff kann aber aus weiteren Bestandteilen und Strukturen bestehen.
 - Die Schaltfläche „Struktur zurücksetzen“ gestattet das Entfernen einer erstellten Suchstruktur, so dass lediglich die anderen Suchparameter wieder zum Greifen kommen.
- Über den Dropdown-Eintrag „In Expertensuche (Abfrage) übernehmen“ an der „Suchen“-Schaltfläche überführt das Recherchesystem alle getätigten Eingaben in die systemeigene Such-Syntax und wechselt auf das Abfrage-Register, so dass man die Suchklausel im Anschluss dort erweitern und ausführen kann.
- Gleichermaßen kann man erfasste Suchparameter aus anderen Suchwerkzeugen über Dropdowns an deren Suchen-Schaltfläche in die Tabellarische Suche übernehmen.

3.8.3 Abfrage-Suche

Tabellarisch Abfrage

Suche nach: Stoff Spezies Zitat

INDEX.NAME = "Benzin" and INDEX.CAS = "100-03-8"

Struktur
 ✓ Die Suche enthält eine Struktur.

Verknüpfung * Operator * Ähnlichkeit

Suchen Aktuelle Treffer verfeinern Struktur zeichnen Struktur zurücksetzen

Abbildung 23: Ausführung einer Profisuche

Das Recherchesystem unterstützt die Abfrage mit einer SQL ähnlichen systemeigenen Syntax. Jede Suchart kann in eine Abfrage-Suche übersetzt werden. Die Funktionalität entspricht weitestgehend der tabellarischen Suche. Im Folgenden werden die einzelnen Möglichkeiten der systemeigenen Syntax anhand von Beispielen erklärt:

Textsuche

Beispiele:

- `RNAME.RNAME = "Benzol"`
- `RNAME.RNAME = "*ester" / RNAME.RNAME *= "ester"` (Alle Stoffe, deren Registriernamen auf **...ester** enden)

Die Textsuche durchsucht ein oder mehrere Textfelder nach einem bestimmten Text. Sie unterscheidet dabei keine Groß- und Kleinschreibung. Für die Operatoren `=`, `<>`, `!=`, `*=*`, `*=` oder `=*` besteht die Möglichkeit der Verwendung der Platzhalter `*` (0...n beliebige Zeichen) und `?` (genau 1 beliebiges Zeichen).

Operator	Beschreibung
<code>=</code>	gleich
<code><> / !=</code>	ungleich
<code>~</code>	Volltextsuche, alle Begriffe sind enthalten
<code>*=*</code>	enthält
<code>*=</code>	endet mit
<code>=*</code>	beginnt mit
<code>></code>	größer (in lexikografischer Sortierung)
<code>>=</code>	größer oder gleich (in lexikografischer Sortierung)
<code><</code>	kleiner (in lexikografischer Sortierung)
<code><=</code>	kleiner oder gleich (in lexikografischer Sortierung)

Suche nach Summenformeln

Beispiel:

- `LIFO.LIFO = "C9H8Cl?O3"`

Einen Spezialfall stellt die Suche nach Summenformeln dar. Sie funktioniert ähnlich wie die reine Textsuche. Bei der Suche nach Summenformeln wird jedoch die Groß- und Kleinschreibung beachtet, d.h. Chlor muss auch als `Cl` geschrieben werden. `?` und `*` ersetzen stets nur vollständige Elementnamen und/oder die Anzahl der Elemente. D.h. mit `C?` oder `C*` werden nur Stoffe gefunden, deren Summenformel mit dem Element Kohlenstoff beginnt.

Suche nach	C ₉ H ₈ Cl ₂ O ₃ gefunden?
<code>C9H8?O3</code>	ja
<code>C9H8Cl?O3</code>	ja
<code>C9*O3</code>	ja
<code>C9H8Cl*</code>	ja
<code>C9?O3</code>	nein
<code>C9H8C?O3</code>	nein
<code>C9H8C*</code>	nein

Numerische Suche

Beispiele:

- `GSBL.GSBLRN = "21203|21279"`
- `FINF.MW_UWRT > "127,6"`
- `FINF.MW_UWRT > "1,276E2"`
- `FINF.MW_UWRT > 1,276E2`

Unterstützt wird die wissenschaftliche Schreibweise: `1,276E2` entspricht dabei $1,276 \times 10^2$. Der numerische Wert kann, muss aber nicht in Anführungszeichen gesetzt sein. Einen Sonderfall stellt die Suche nach mehreren ganzzahligen Werten dar. Die Werte können durch das Symbol `|` getrennt werden und müssen zwingend in Anführungszeichen gesetzt werden. Ein Treffer muss in dem Feld einen der angegebenen Werte enthalten. Auch die Negation unter Verwendung von `<>` / `!=` ist möglich. Das Feld darf dann keinen der angegebenen Werte enthalten.

Operator	Beschreibung
<code>=</code>	gleich / ist enthalten in
<code><></code> / <code>!=</code>	ungleich / ist nicht enthalten in
<code>></code>	größer
<code>>=</code>	größer oder gleich
<code><</code>	kleiner
<code><=</code>	kleiner oder gleich

Datumssuche

Beispiel:

- `GSBL.ERSTDAT <= "01.01.1998"`

Operator	Beschreibung
=	gleich
<> / !=	ungleich
>	größer
>=	größer oder gleich
<	kleiner
<=	kleiner oder gleich

Suche nach Feldern / Merkmalen / Oberbegriffen

Beispiele:

- `WGK` (Alle Stoffe, die Daten zum Merkmal Wassergefährdungsklasse enthalten)
- `WGK.CASRN !!*` (Alle Stoffe, die keine Werte im Feld CAS-Nummer des Merkmals Wassergefährdungsklasse enthalten)
- `WH` (Alle Stoffe, die Daten zu Merkmalen unterhalb des Oberbegriffs Wasserrecht enthalten)

Operator	Beschreibung
	existiert
!!*	existiert nicht

Verknüpfung und Klammerung

Die Suche unterstützt 4 Arten der Verknüpfung:

- `A oder B/A or B` ermittelt alle Objekte, die mindestens eine der Bedingungen A oder B erfüllen. Beispiel: `RNAME.RNAME = "Benzol" oder RNAME.RNAME = "Benzene"` ermittelt alle Stoffe mit Registriernamen **Benzol**.
- `A und B/A and B` ermittelt alle Objekte, die beide Bedingungen A und B erfüllen. Beispiel: `RNAME.RNAME = "Benzol" und GSBL.STAR = "Stoffklasse"` ermittelt die **Stoffklassen** mit Registriernamen **Benzol**.
- `A link B` ermittelt alle Sachverhalte, die beide Bedingungen A und B erfüllen. Beispiel: `RNAME.RNAME = "Benzol" link RNAME.SPR = "Deutsch"` ermittelt alle Stoffe mit mindestens einem Registriernamen **Benzol**, der die Sprachkennung **Deutsch** hat.
- `A ohne B/A not B` ermittelt alle Objekte, die die Bedingung A erfüllen, nicht jedoch die Bedingung B. Beispiel: `RNAME.RNAME = "Benzol" ohne GSBL.STAR = "Stoffklasse"` ermittelt alle Stoffe mit Registriernamen **Benzol**, die keine **Stoffklasse** sind.

Weiterhin besteht die Möglichkeit der Klammerung von Ausdrücken. Beispiel: $(RNAME.RNAME = "Benzol" \text{ oder } RNAME.RNAME = "Benzene") \text{ und } GSBL.STAR = "Stoffklasse"$ ermittelt alle **Stoffklassen** mit Registriernamen **Benzol** oder **Benzene**.

Bei der Auswertung gilt folgende Vorrangsregel: (...) vor **link** vor **ohne** vor **und** vor **oder**.

Kontextwechsel

Das System unterstützt die Suche innerhalb der folgenden 4 Kontexte: **Stoff**, **Zitat**, **Spezies** und **Lieferant**. Werden nun Teile einer Abfrage oder die gesamte Abfrage in einem anderen Kontext formuliert, erfolgt ein Kontextwechsel. Beispiel: Eine Suche nach $RNAME.RNAME = "Benzol"$ und $GSBL.STAR = "Stoffklasse"$ (beides Felder von Stoffen) mit Zielkontext **Zitat** ermittelt sämtliche Zitate, auf die in **Stoffklassen** mit Registriernamen **Benzol** verwiesen wird.

Es lassen sich auch mehrere Kontexte in einer Abfrage kombinieren. Beispiel: Eine Suche nach $(RNAME.RNAME = "Benzol" \text{ und } GSBL.STAR = "Stoffklasse") \text{ und } ZIT.JAHR < 2000$ mit Zielkontext **Zitat** ermittelt sämtliche Zitate, auf die in **Stoffklassen** mit Registriernamen **Benzol** verwiesen wird und die vor dem Jahr 2000 erschienen sind.

Es wird empfohlen, die Teile einer Abfrage zu klammern, die vollständig in einem anderen Kontext ausgewertet werden soll. Eine implizite Klammerung und damit eine gemeinsame Auswertung erfolgt nur für die auf einer Klammerungs- und Verknüpfungsebene am weitesten links stehenden Ausdrücke mit dem gleichen Kontext. Beispiel: $RNAME.RNAME = "Benzol"$ und $GSBL.STAR = "Stoffklasse"$ und $ZIT.JAHR < 2000$ mit Zielkontext **Zitat** wird ausgewertet wie $(RNAME.RNAME = "Benzol" \text{ und } GSBL.STAR = "Stoffklasse") \text{ und } ZIT.JAHR < 2000$.

4 Suchergebnisse und Dossier

4.1 Suchergebnisse

4.1.1 Anzeige der Suchergebnisse

Nach Ausführung einer Suche werden gefundene Stoffe unterhalb der Suchmasken angezeigt.

Suchergebnisse

Sortieren nach [GSBL-RN](#) [CAS-RN](#) [Sortierung hinzufügen](#)

Zeige Treffer 1 bis 4 von 4

The screenshot displays four search results for 'Wasser' (Water). Each result is presented in a light blue box with a large chemical formula 'H₂O' on the left. The results are as follows:

GSBL-RN	Stoffart	Registriername	CAS-RN	Summenformel (Hill)	Molekulargewicht (Literaturwertstring)
22682	Einzelinhaltsstoff	Wasser water	2732-18-5 7732-18-5 7732-41-4	H ₂ O	18,0153 g/mol
244759	Stoffklasse	Wasser			
248548	Stoffklasse	Wasser			
312862	Stoffklasse	Wasser AQUA Wasser, destilliert			

At the bottom of the results, there is a dropdown menu set to '25' and the text 'Einträge pro Seite'.

Abbildung 24: Suchergebnisse

Der Betreiber kann hierfür unterschiedliche Ansichten bereitstellen, welche die in der Liste anzuzeigenden Stoffmerkmale und Felder definieren. Über ein Auswahlfeld auf der Symbolleiste können Sie auf die für Sie am besten geeignete Ansicht umschalten.



Abbildung 25: Wechsel der Ansicht

Um die Anzeige größere Ergebnismengen weitergehend zu optimieren, ist es möglich, die Sortierung über die Pfeilsymbole pro angezeigtem Merkmal bzw. Feld anzupassen und Sortierfelder per Dropdown zuzufügen bzw. Kreuz-Schaltfläche zu entfernen.

Sortieren nach GSBL-RN ↑ × Sortierung hinzufügen ▾

Zeige Treffer

Angaben zur Stoffart	
CAS-RN	
Gefahrzettel	
Molekulargewicht (Literaturwertestring)	<u>22682</u>
Registriername	Einzelinhaltsstoff
Stoffart	Wasser
Summenformel (Hill)	water
UN-Nr.	7732-18-5

Abbildung 26: Anpassen der Sortierung

Zur Anzeige aller Stoffmerkmale eines Stoffes im Dossier klickt man den Namen oder die GSBL-RN Nummer innerhalb der Suchergebnisse an.

Über die Symbolleiste ist weiterhin möglich, die Ergebnisliste oder Dossiers aller gefundenen Stoffe zu exportieren sowie die Suchanfrage und Ergebnisliste zu speichern und später erneut zu laden.

Trefferlisten ▾

- Aktuelle Suchanfrage und Trefferliste speichern
- Gespeicherte Suchanfragen und Trefferlisten
- Trefferliste exportieren
- Stoffdossiers exportieren

Abbildung 27: Exporte und Speichern von Trefferlisten

4.1.2 Suchergebnisse speichern und laden

Zum Speichern der Ergebnisliste (Aufruf siehe Abbildung 27: Exporte und Speichern von Trefferlisten) werden Name und optional eine mögliche Beschreibung abgefragt.

Aktuelle Suchanfrage und Trefferliste speichern ×

Name *

Beschreibung

Abbrechen Speichern

Abbildung 28: Speichern von Suchergebnissen

Ihre gespeicherte Suchanfragen und Ergebnislisten werden in einer Tabelle angezeigt (Aufruf siehe Abbildung 27: Exporte und Speichern von Trefferlisten).

Meine Suchanfragen

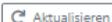
Name	Beschreibung	Treffer	Letzte Ausführung			
AB3003-WASSSERISTNASS		4	25.08.2021 12:41:51			
Benzin	Wird teuer	2	25.08.2021 12:58:46			

Abbildung 29: Gespeicherte Suchergebnisse

Innerhalb dieser kann die Trefferliste per „Öffnen“-Schaltfläche nochmals angezeigt, die Suchanfrage per „Aktualisieren“-Schaltfläche erneut gegen den aktuellen Datenbestand ausgeführt, oder beides per „Löschen“-Schaltfläche gelöscht werden.

4.1.3 Suchergebnisse als Tabelle exportieren

Zum Exportieren der Suchergebnisse (Aufruf siehe Abbildung 27: Exporte und Speichern von Trefferlisten) wird eine Maske eingeblendet, innerhalb der sie die gewünschten Felder bearbeiten und das Ausgabeformat wählen können.

Trefferliste exportieren ×

Verwenden Sie die folgenden Einstellungen, um die angezeigten Felder und das gewünschte Dateiformat für den Export der aktuellen Trefferliste anzupassen.

Felder

GSBL-RN × Stoffart × Registriername × CAS-RN × UN-Nr. × Summenformel (Hill) ×
Molekulargewicht (Literaturwertestring) × Brandgefahr ×

Wählen Sie die Felder für den Export der Trefferliste aus.

Dateiformat

Kommaseparierte Liste (*.csv) ▼

Wählen Sie das Dateiformat für den Export der Trefferliste aus.

Export starten

Abbildung 30: Suchergebnisse exportieren

Über die Kreuz-Symbole können Felder entfernt werden. Es können außerdem weitere Felder hinzugefügt werden. Nach dem Eintippen erster Zeichen im Eingabefeld erscheint eine gefilterte Auswahl der passenden Merkmale/Felder, aus welchen ausgewählt werden kann.

Als Ausgabeformate kann zwischen CSV, Excel und PDF gewählt werden.

4.1.4 Suchergebnisse als Dossier exportieren

Zum Exportieren ganzer Dossiers (Aufruf siehe Abbildung 27: Exporte und Speichern von Trefferlisten) sind die gewünschten zu exportierenden Treffer in der Ergebnisliste zunächst durch Setzen eines Häkchens zu markieren.

<input checked="" type="checkbox"/>	Benzin	
	GSBL-RN	254570
	Registriername	Benzin
	Stoffart	Stoffklasse
<input checked="" type="checkbox"/>	OTTOKRAFTSTOFF	
	GSBL-RN	21114
	Registriername	MOTOR SPIRIT or GASOLINE or PETROL OTTOKRAFTSTOFF
	CAS-RN	86290-81-5
	Stoffart	Stoffklasse

Abbildung 31: Markieren der als Dossier zu exportierenden Treffer

Danach kann der Export am Seitenbeginn gestartet werden.

Hinweis

Bitte wählen Sie im nächsten Schritt die Treffer für den Stoffdossier-Export aus und klicken Sie dann auf den unten stehenden Button "Stoffdossiers exportieren".

Stoffdossiers exportieren (2)

Abbildung 32: Starten des Dossier Exports

Für den Export ist abschließend noch auszuwählen, welche der Stoffmerkmale und Felder in die Dossiers aufgenommen werden sollen und welches Ausgabeformat erzeugt werden soll.

Stoffdossiers exportieren ×

Verwenden Sie die folgenden Einstellungen, um die angezeigten Felder und das gewünschte Dateiformat für den Dossier-Export der ausgewählten Treffer anzupassen.

Stoffdossier-Ansicht

[Alle Merkmale] ▼

Wählen Sie die Stoffdossier-Ansicht für den Export aus.

Felder

- IDENTMERKMALE (AL)
- RECHTSEIGENSCHAFTEN (RE)
- RECHTSEIGENSCHAFTEN (Selbsteinstufungen) (RES)
- ERSTEINSAZ: GEFAHREN (EEG)
- ERSTEINSAZ: MASSNAHMEN (EEM)
- NUMERISCH CHEMISCHE DATEN (DC)

Wählen Sie die Felder für den Export der Stoffdossiers aus.

Dateiformat

Microsoft Word (*.docx) ▼

Wählen Sie das Dateiformat für den Export der Stoffdossiers aus.

Export starten

Abbildung 33: Angaben zum Dossier Export

„[Alle Merkmale]“ bedeutet, dass grundsätzlich alle Merkmale aller Stoffe in die Ausgabe einbezogen werden sollen. „[Nur Treffer]“ schränkt auf diejenigen ein, in denen ihre Suchbegriffe gefunden wurden. Neben diesen Systemansichten kann es weitere, von den Administratoren vorgefertigte Ansichten geben.

Neben diesen Angaben kann die Ausgabe auch weitergehend über Wahl bzw. Abwahl von Oberbegriffen, Merkmalen und Feldern aus dem Datenmodell beeinflusst werden. Als Ausgabeformate stehen Word oder PDF zur Verfügung.

4.2 Dossier

Ins Dossier gelangt man nach Anwahl eines Stoffes in einer Trefferliste.



Abbildung 34: Dossier mit zugeklappten Hierarchieebenen

Das Stoffdossier ist die Gesamtheit aller Informationen zu einem Stoff. Die Gliederung/Hierarchie der Informationen ist über ein Datenmodell definiert und setzt sich aus den folgenden Bausteinen zusammen.

Baustein	Beschreibung
Oberbegriff	Ein Oberbegriff (bspw. „Identmerkmale“) gruppiert eine Menge von Merkmalen oder ist anderen Oberbegriffen hierarchisch übergeordnet. Oberbegriffe können in bis zu drei Ebenen tief hierarchisch gegliedert sein.
Merkmal	Merkmale (bspw. Registriernamen) fassen Stoffinformationen zu logischen Einheiten zusammen. Jedes Merkmal definiert einen Aspekt bzw. eine Eigenschaft eines Stoffes. Daten werden, um ihren kontextgebundenen Sinn nicht zu zerstören, merkmalsbezogen angezeigt.
Sachverhalt	Soweit ein Merkmal (und seine enthaltenen Felder) für einen Stoff mit Daten belegt ist, wird von einem Sachverhalt gesprochen. Es können mehrere Ausprägungen eines Merkmals für denselben Stoff existieren. Es handelt sich dann um verschiedene Sachverhalte zum Merkmal eines Stoffes. Im Dossier werden diese zur Verdeutlichung immer grau hinterlegt als Sachverhalt x von y existierenden Sachverhalten angezeigt.
Feld	Felder (bspw. GSBL-NR oder Quelle) sind Bestandteile eines Merkmals und nehmen die zum Speichern vorgesehenen Werte auf.

Tabelle 3: Datenmodell-Bausteine

Zum Verständnis der obigen Datenmodell-Bausteine siehe auch Abbildung 35: Dossier mit aufgeklappten Hierarchieebenen.

Im Stoffdossier werden nur tatsächlich erfasste Stoffdaten angezeigt. Nicht belegte Felder, Merkmale wie auch Oberbegriffe und leere Hierarchiepfade werden nicht angezeigt.

Klappt man ein Hierarchieelement auf, werden die existierenden Elemente der darunterliegenden Hierarchieebene angezeigt. Die verschiedenen Hierarchieebenen werden zur besseren Wahrnehmung farblich unterschiedlich dargestellt. Gelb hinterlegt sind alle diejenigen Felder eines Stoffes, in denen die in der Suchabfrage verwendeten Suchbegriffe gefunden wurden.

Wasser Stofffeedback geben Ansicht: [Alle Merkmale]

IDENTMERKMALE ^

ALLGEMEINE MERKMALE (REALE STOFFE UND STOFFKLASSEN)

STOFF 1 von 1

GSBL-RN	22682
Stoffart	Einzelinhaltsstoff
MOL-Datei	22682.mol
Bild	
Ersteingang	05.06.2002 09:13:14
Neueingang	16.11.2019 18:52:52

STOFFTYP 1 von 1

Stofftyp	Reinstoff
Ersteingang	11.08.2002 10:33:26
Neueingang	12.11.2019 16:07:16
Bearbeiter	Pitulle
Quelle	LANU/SH (Identdaten_SH)

REGISTRIERNAME 1 von 5

Registriernamen	Namensart	Sprachkennung
1 Wasser	Trivialname	Deutsch
2 Wasser	chemische Bezeichnung	Deutsch
3 Wasser	systematischer Name	Deutsch
4 water	Trivialname	Englisch
5 water	IUCLID-Name	Englisch

SONSTIGE NAMEN 1 von 1

Name	Namensart	Sprachkennung
1 WATER	IUCLID-Name	Englisch

Inhaltsverzeichnis

- IDENTMERKMALE (3)
 - Allgemeine Merkmale (Reale Stoffe und Stoffklassen) (5)
 - Stoff
 - Stofftyp
 - Registriernamen (5)
 - Sonstige Namen (17)
 - Name einer Stoffklasse
 - Strukturabhängige Informationen (3)
 - Formelinformationen (erzeugt)
 - Formelinformationen (andere)
 - International Chemical Identifier
 - Verweis auf andere Datenbanken (2)
 - CAS-RN (7)
 - Verweis auf sonstige andere Datenbanken (3)
 - RECHTSEIGENSCHAFTEN (4)
 - STOFFEIGENSCHAFTEN: VERWENDUNG / VERPACKUNG
 - STOFFEIGENSCHAFTEN: VERHALTEN / GEFÄHREN (2)
 - ERSTEINSAZ: MASSNAHMEN (4)
 - PHYSIKALISCH-CHEMISCHE DATEN (15)

Abbildung 35: Dossier mit aufgeklappten Hierarchieebenen

Im rechten Bereich *Inhaltsverzeichnis* wird die Hierarchieebene zum Stoff angezeigt. Scrollt man durchs Dossier, wandert die Hervorhebung auf das / den am Fensterbeginn angezeigte/n Oberbegriff/Merkmal/Sachverhalt mit. Gleichermaßen kann man sich durch Anklicken der Einträge im Inhaltsverzeichnis durch ein Dossier bewegen.

Im Beispiel oben und werden die Sachverhalte zu einem Merkmal (siehe *Registriernamen*) tabellarisch dargestellt und es existieren mehr als ein Registriernamen (1-5). Über die Symbole hinter den Merkmalsnamen kann die Darstellung der erfassten Sachverhalte in eine Listenansicht umgeschaltet werden. Es werden dann in der Regel deutlich mehr Felder zum Merkmal / Sachverhalt angezeigt. Eine Tabelle zeigt je nach Konfiguration meist nur die wesentlichen Felder eines Merkmals/Sachverhalts, ist jedoch oft übersichtlicher.

REGISTRIERNAME 1 von 5

Registriernamen	Wasser
Namensart	Trivialname
Sprachkennung	Deutsch
Ersteingang	17.07.2002 09:54:56
Neueingang	12.11.2019 16:07:16
Bearbeiter	C. Gast
Qualität	public chemiat gsa
Quelle	LUBW/BW (EGVO432_2012_real) LANU/SH (Identdaten_SH) UBA (Identvorhaben_Franke) LAU/ST (TRGS608) LAU/ST (TRGS608_real) DDBST GmbH (Thermophysikalische Daten) BIG (BIG) UBA (BZA)

Abbildung 36: Listenansicht des Merkmals Registriernamen mit Sachverhalt 1 von 5

Über die Symbolleiste der Dossiers stehen weitere Funktionalitäten zur Verfügung.

Ansichtsfiler

Über eine Klappliste lässt sich zwischen verschiedenen Ansichten umschalten.



Abbildung 37: Ansichtsumschalter im Dossier

Immer vorhanden ist dort die Anzeige aller erfassten Informationen zu einem Stoff (*Alle Merkmale*). Immer vorhanden ist auch eine Beschränkung der anzuzeigenden Informationen auf diejenigen Sachverhalte, in denen ihre Suchbegriffe gefunden wurden (*Nur Treffer*). Weitere Ansichten können je nach Konfiguration eines Systems existieren.

Stoff bearbeiten

Für Mitarbeitende mit Berechtigung auf das Redaktionssystem von ChemInfo, in dem Stoffe direkt bearbeitet werden können, kann über eine Schaltfläche in dieses zur Bearbeitung des Stoffes / Zitates / Spezies gewechselt werden. Das Redaktionssystem wird in einen neuen Browser-Tab geladen.



Abbildung 38: Stoff im Redaktionssystem bearbeiten

Stoffdossier exportieren

Über diese Schaltfläche kann ein einzelnes Stoffdossier exportiert werden. Die Funktion ist identisch mit der Funktion **Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.** und unter REF_Ref83390668 \r \h 4.1.4 näher beschrieben.



Abbildung 39: Einzelnes Stoffdossier exportieren

4.2.1 Feedback zum Stoff geben

Über die Stofffeedback Schaltfläche kann jeder Nutzer Hinweise geben oder Fragestellungen und Diskrepanzen zu einem Stoff und seinen Sachverhalten abklären lassen. Das Feedback wird an die zuständigen Stoffpfleger weitergeleitet und von diesen bearbeitet.



Abbildung 40: Feedback Schaltfläche

Zur Erfassung des Feedbacks werden im Dossier zunächst Hinweise zum Vorgang eingeblendet, welcher sich wie folgt darstellt.

Vor jedem Sachverhalt und Feld werden im Dossier Kontrollkästchen eingeblendet. Die betroffenen Sachverhalte und Felder sind zu markieren. Sie werden dann automatisch in das Feedback übernommen

IDENTMERKMALE ^

ALLGEMEINE MERKMALE (REALE STOFFE UND STOFFKLASSEN)

STOFF 田

1 von 1

GSBL-RN	22682
Stoffart	Einzelinhaltsstoff
MOL-Datei	22682.mol
Bild	H₂O

Abbildung 41: Markieren eines Sachverhalts fürs Feedback

Zum Feedback Dialog gelangt man im Anschluss am Seitenende per Schaltfläche „Zum Feedback-Dialog“.

Feedback

Sie haben hier die Möglichkeit, Feedback zu Sachverhalten des aktuellen Dossiers zu geben.

Kategorie *

Keine passende Kategorie

Betreff *

Beschreibung *

Stoff-ID *

22682

Merkmal *

Stoff

Sachverhalte *

1058940

Priorität *

Normal

Anhang

Wählen Sie eine Datei aus

Durchsuchen

Hier können Sie eine Datei (z.B. Screenshot) anhängen.

Ich möchte per E-Mail informiert werden, wenn das Feedback abgeschlossen wurde.

Absenden

Abbildung 42: Stoff-Feedback geben

Anzugeben sind eine Kategorie, der Betreff, eine Beschreibung sowie die Priorität. Alle Eingabefelder zum Stoff/Merkmal/Sachverhalt sollten bereits vorgelegt sein.

Bei Bedarf kann über die Schaltfläche „Durchsuchen“ auch eine Datei als Anhang angefügt werden, bevor man das Feedback über die *Absenden*-Schaltfläche versendet.

5 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Anmeldung am Recherchesystem	5
Abbildung 2: Anmeldemaske	5
Abbildung 3: Wechsel des Systems / Produkts / Katalogs	5
Abbildung 4: Beantragung eines Zugangs zum öffentlichen Bereich des Systems	6
Abbildung 5: Beantragung eines Zugangs zum gesicherten Bereich des Systems	7
Abbildung 6: Beantragung eines Zugangs zum gesicherten Bereich des Systems	7
Abbildung 8: Confirmation-E-Mail nach Registrierung und Nutzerfreischaltung	8
Abbildung 9: Nutzeroptionen	8
Abbildung 10: Persönliche Daten	9
Abbildung 11: Maske zum Ändern des eigenen Passwortes	10
Abbildung 12: Nutzeroptionen	10
Abbildung 13: Wechsel des Systems / Produkts / Katalogs	11
Abbildung 14: Schnellsuche	11
Abbildung 15: Recherchebereich mit Suchfunktionen und den Suchergebnisse	12
Abbildung 16: Beispiel: Einfache Suche inkl. Volltextsuche	14
Abbildung 17: Übernahme in Expertensuche	14
Abbildung 18: Nachschlage-Funktion innerhalb der Suche	15
Abbildung 19: Ketcher-Editor für chemische Formeln	16
Abbildung 20: Speziessuche	17
Abbildung 21: Zitatsuche	17
Abbildung 22: Gefahrzettelsuche	18
Abbildung 23: Tabellarische Expertensuche	19
Abbildung 24: Ausführung einer Profisuche	21
Abbildung 25: Suchergebnisse	25
Abbildung 26: Wechsel der Ansicht	25
Abbildung 27: Anpassen der Sortierung	26
Abbildung 28: Exporte und Speichern von Trefferlisten	26
Abbildung 29: Speichern von Suchergebnissen	26
Abbildung 30: Gespeicherte Suchergebnisse	27
Abbildung 31: Suchergebnisse exportieren	27
Abbildung 32: Markieren der als Dossier zu exportierenden Treffer	28
Abbildung 33: Starten des Dossier Exports	28
Abbildung 34: Angaben zum Dossier Export	28
Abbildung 35: Dossier mit zugeklappten Hierarchieebenen	29
Abbildung 36: Dossier mit aufgeklappten Hierarchieebenen	30
Abbildung 37: Listenansicht des Merkmals Registriername mit Sachverhalt 1 von 5	30
Abbildung 38: Ansichtsumschalter im Dossier	31
Abbildung 39: Stoff im Redaktionssystem bearbeiten	31
Abbildung 40: Einzelnes Stoffdossier exportieren	31
Abbildung 41: Feedback Schaltfläche	31
Abbildung 42: Markieren eines Sachverhalts fürs Feedback	32

Abbildung 43: Stoff-Feedback geben 32

6 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Dokumenthistorie	2
Tabelle 2: Suchwerkzeug im Recherchesystem	13
Tabelle 4: Datenmodell-Bausteine.....	29

7 Glossar

Begriff	Beschreibung
Datenmodell	<p>Das fachliche Datenmodell bezeichnet die von der Fachseite festgelegte Struktur, wie Stoffdaten fachlich abgebildet werden.</p> <p>Im Gegensatz zum Stoffbegriff bildet das fachliche Datenmodell die gesamte, den Stoffdaten zu Grunde liegende Struktur (Taxonomie der Merkmale) inkl. zugehöriger fachlicher Eigenschaften (Datentypen, Feldlängen, Multiplizitäten, etc.) ab.</p> <p>Das fachliche Datenmodell beinhaltet alle Merkmale, zugehörige Oberbegriffe und Felder sowie die Beziehungen untereinander, welche für einen Stoff vorhanden sind und mit Daten gefüllt werden können.</p> <p>Das fachliche Datenmodell ist sozusagen der Bauplan für einen Stoff in der Stoffdatenbank, da er dessen Struktur vorgibt.</p>
Datenpflege	<p>Datenpflege beschreibt den Prozess der Aktualisierung (Ergänzung, Änderung, Löschung) des Stoffdatenbestandes durch manuelle, UI-unterstützte Eingabe oder durch das halb-automatisierte Überführen eines durch einen Datenlieferanten bereitgestellten Datenbestandes in den lokalen Datenbestand (Importe folgen erst nach Ausbaustufe 2).</p>
Datenpfleger	<p>Beschreibt einen Nutzer der Redaktion, der im Namen eines Lieferanten für einen definierten Bereich der Stoffdatenbank Datenpflege betreibt.</p>
Einzelinhaltsstoff	<p>Einzelinhaltsstoffe haben keinen Firmenbezug. Reine Stoffe mit Firmenbezug werden als Komponentenstoffe bezeichnet. Die Daten „reiner“ Produkte weichen i.d.R. von denen der Reinstoffe bzw. Einzelinhaltsstoffe ab.</p>
Feld	<p>Felder müssen Bestandteile eines jeden Merkmals sein und nehmen die zum Speichern vorgesehenen Werte auf. In jedem Merkmal muss mindestens ein Feld mit Inhalt belegt sein.</p>
GSBL	<p>Abkürzung für „Gemeinsamer zentraler Stoffdatenpool des Bundes und der Länder“. Es ist der Name für das Altsystem.</p>
Identdaten	<p>Beziehen sich auf alle Merkmale und die enthaltenen Informationen, welche zur Registrierung bzw. Identifizierung der Stoffe genutzt werden (z. B. Stoffname).</p>
Identmerkmal	<p>Sind jene Merkmale eines Stoffes, die zur Identifizierung dienen. Für Chemiker sind dies in erster Linie Strukturformel und wissenschaftlicher Name bei Realstoffen.</p>
Komponentenstoff	<p>Siehe Einzelinhaltsstoff</p>

Landesadministrator	Ein Landesadministrator verwaltet die Nutzer und Nutzerkonteneinträge innerhalb eines Landes bzw. Organisationsbereiches. Länder/Organisationsbereiche und deren Administratoren werden in der Nutzerverwaltung definiert.
Lieferant	Synonym zu Datenlieferant
Merkmal	Merkmale fassen Stoffinformationen zu logischen Einheiten zusammen. Jedes Merkmal definiert einen Aspekt bzw. eine Eigenschaft eines Stoffes. Daten werden, um ihren kontextgebundenen Sinn nicht zu zerstören, merkmalsbezogen erfasst, geliefert, exportiert und einem Nutzer angezeigt.
Nachschlagetabelle	Bei der Erfassung von Sachverhalten kommt es häufig vor, dass sich Datenbankeinträge wiederholen bzw. eine abgeschlossene Anzahl von möglichen Ausprägungen definiert sein soll, um Fehler zu reduzieren. Darüber hinaus sind bei einigen Merkmalen einheitliche, fachlich vordefinierte Termini zu verwenden, um Sachverhalte korrekt und nach Stand der Wissenschaft zu beschreiben. Eine globale Anpassung der Einträge von Nachschlage- und Einheitentabellen, welche sich über alle Stoffe auswirken soll, die diesen Eintrag verwenden, kann über die Feedbackfunktion dem Administrator als „Verbesserungsmaßnahme“ vorgeschlagen werden.
Oberbegriff	Der Oberbegriff gruppiert eine Menge von Merkmalen oder ist anderen Oberbegriffen hierarchisch übergeordnet. Oberbegriffe können in bis zu drei Ebenen tief hierarchisch gegliedert sein.
Recherche	Beschreibt einen Teilbereich (Subsystem) des Neusystems, welcher die Suche nach Stoffen gegen die lokale Stoffdatenbank ermöglicht. Ggf. können auch externe Stoffdatenbanken einbezogen werden.
Redaktion	Beschreibt ein Subsystem, welches für die Datenpflege genutzt wird.
Regelwerk	Der Begriff Regelwerk steht nicht mit dem Begriff Regel in Zusammenhang. Regelwerk bezieht sich auf rechtliche Regelungen vom Gesetzgeber für Gesetze, Verordnungen und Richtlinien.
Sachverhalt	Soweit ein Merkmal (und seine enthaltenen Felder) für einen Stoff mit Daten belegt ist, wird von einem Sachverhalt gesprochen. Existieren mehrere Ausprägungen eines Merkmals für denselben Stoff, handelt es sich um verschiedene Sachverhalte, auch wenn ggf. die Quellenangabe und der Lieferant sich gleichen.
Stoff	Ein Stoff ist in der Stoffdatenbank der Repräsentant einer reinen Substanz, Mischung oder Stoffklasse, welche eindeutig identifiziert werden kann. Die Daten zu einem Stoff bzw.

	<p>die Sachverhalte stammen zumeist aus unterschiedlichen Quellen. Dem Stoff zugeordnet ist eine GSBL-Registrierungsnummer (GSBLRN), die den Stoff innerhalb des Neusystems eindeutig identifiziert. Eine eindeutige Stoffidentifikation ist Voraussetzung für die Registrierung von Stoffen im Neusystem. Stoffe, für die keine vollständigen Identifizierungsmerkmale erfasst wurden, können nicht registriert werden. Wird das gleiche Stoffgemisch bzw. Produkt von zwei verschiedenen Herstellern hergestellt, dann werden beide mit verschiedenen GSBLRN im GSBL geführt.</p>
Stoffdossier	Gesamtheit aller Informationen zu einem Stoff
Stoffliste	Beschreibt eine Zusammenstellung von Stoffen, z. B. resultierend aus einer Abfrage (Treffermenge/ Trefferliste von Stoffen) oder die Auswahl für einen folgenden Daten-Export.
Zitat	Die Quelle gibt an, in welcher Literaturstelle der entsprechende Sachverhalt eines Merkmales veröffentlicht worden ist. Als Quellen gelten wissenschaftliche Zeitschriften, Handbücher, Gesetzestexte, Fachberichte und Datenbanken.

8 Indexverzeichnis

- Abmeldung 10
- Administrator 37
- Ähnlichkeitssuche 20
- Anhang 32
- Anmeldung 4, 5, 6, 11
- Aufruf 4, 19, 26, 27, 28
- Bearbeitung 13, 31
- ChemInfo 4, 5, 6, 11, 12, 13, 19, 31
- Datenmodell 13, 19, 28, 29, 36
- Datenpfleger 36
- Dossier 13, 25, 26, 28, 29, 30, 31, 32
- Editor 15, 16
- Entfernen 15, 20, 27
- Exaktsuche 20
- Export 28, 38
- Feedback 31, 32
- Feld 14, 15, 19, 25, 29, 32, 36
- Fundstelle 38
- Groß- und Kleinschreibung 13
- GSBL 4, 26, 29, 36, 38
- Hierarchie 29
- Ketcher 15, 16
- Klammer 20
- Kommentar 2
- Konfiguration 30, 31
- Lieferant 37
- Literatur 38
- Login 4, 5, 6, 11
- Logout 10
- Löschen 15, 20, 27
- Merkmal 13, 14, 19, 20, 25, 29, 30, 32, 36, 37
- Merkmalsauswahl 19
- Merkmalssuche 19
- Modell 13, 19, 28, 29, 36
- Nachschlagetabelle 37
- Newsletter 9
- Oberbegriff 29, 30, 37
- Platzhalter 12
- Produkt 13, 38
- Profisuche 12, 20, 21
- Quellenangabe 38
- Rolle
 - Datenpfleger* 36
- Sachverhalt 29, 30, 32, 37, 38
- Spezies 16, 19, 31
- Start 4, 19, 26, 27, 28
- Startseite 11, 14
- Stoff 11, 13, 20, 29, 30, 31, 32, 36, 37, 38
 - Suche* 11, 12, 14, 17, 18
- Stoffdossier 13, 25, 26, 28, 29, 30, 31, 32
- Stoffinformationssystem 4, 5, 6, 11, 12, 13, 31
- Struktursuche 12, 15, 20
- Suche 6, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 25, 37
 - Ahnlichkeits-* 20
 - Exakt-* 20
 - Profi-* 12, 20, 21
 - Stoff-* 11, 12, 14, 17, 18
 - Struktur-* 12, 15, 20
 - Tabellen-* 19, 25, 26
 - Teilstruktur-* 20
 - Volltext-* 12, 14, 17, 18, 20
 - Zitat-* 12, 13, 17
- Syntax 19, 20
- Tabellensuche 19, 25, 26
- Teilstruktursuche 20
- UND 14, 18
- Verwerfen 15, 20, 27
- Volltextsuche 12, 14, 17, 18, 20
- Voraussetzungen 4
- Zitat 38
- Zitatsuche 12, 13, 17
- Zugangsvoraussetzungen 4