

Ein modernes Informationssystem für die toxikologische Analytik auf der Basis des (IV + V)*-Systems

**H.-J. Battista¹, E. Bertha², G. Kerschhacker², I. Mistrik³, W. Koch⁴
und W. Wegscheider⁴**

¹Institut für Gerichtliche Medizin, Universität Innsbruck, Müllerstr. 4, A-6020 Innsbruck, Österreich

²Institut für Maschinelle Dokumentation, Forschungsgesellschaft Joanneum, A-8010 Graz, Österreich

³Gesellschaft für Information und Dokumentation, D-6900 Heidelberg, Bundesrepublik Deutschland

⁴Technische Universität Graz, A-8010 Graz, Österreich

A Modern Information System for Analytical Toxicology Based on the (IV + V) System

Summary. After a short description of the background and fundamentals, a program system for a microcomputer is described that permits the implementation of a laboratory-specific database and information system. Due to standardized program and data structures and compatibility with different hardware, as well as portability, similar laboratories have the potential of carrying out cooperative studies on a national and international basis.

Key words: Laboratory data system – Toxicology, information system for a personal computer

Zusammenfassung. In der vorliegenden Arbeit wird nach kurzer Diskussion der Vorgeschichte und der Grundlagen ein Programmsystem für Personal-Computer vorgestellt, welches den Aufbau eines laborspezifischen Datenbank- bzw. Informationssystems erlaubt und gleichzeitig aufgrund seiner standardisierten Programm- und Datenstrukturen und der Kompatibilität zu bzw. Portabilität auf verschiedenen Hardwaresystemen die Grundlage zu einer nationalen und internationalen Zusammenarbeit von gleichartig interessierten Fachkollegen bietet.

Schlüsselwörter: Datenbanksystem, laborspezifisch – Toxikologie, Programmsystem für Personal-Computer

* (IV + V) ... Informations-Vermittlung und -Verarbeitung
Sonderdruckanfragen an: H.-J. Battista (Adresse siehe oben)

Die Toxikologie umfaßt ein weitgespanntes interdisziplinäres Arbeitsgebiet, welches infolge der Komplexität der Materie sehr weiträumig fachübergreifend ist. Dementsprechend wird in der chemisch-analytischen und forensischen Toxikologie eine große Anzahl verschiedener Untersuchungs- und Analysemethoden angewendet, um die zur Lösung eines bestimmten Falles erforderlichen analytischen Daten zu ermitteln und durch die Interpretation dieser Daten gewisse diagnostisch oder forensisch relevante Schlüsse zu ziehen. Aufgrund der Vielzahl der Stoffe und Substanzen, die nachgewiesene oder potentielle Giftwirkungen zeigen, ist eine umfassende, rasch verfügbare Information für viele Arbeiten unumgänglich notwendig. Zu den Untersuchungen und Beurteilungen im Rahmen von akuten Vergiftungsfällen, sei es nach Einlieferung eines bewußtlosen, möglicherweise vergifteten Patienten in ein Krankenhaus, sei es bei der Aufklärung eines unerwarteten plötzlichen Todesfalles, kommen vermehrt Fragestellungen hinsichtlich gesundheitlicher Schädigungen durch – vor allem chemische – Umwelteinflüsse vor, bei welchen sich sowohl der Nachweis als auch die Klärung des kausalen Zusammenhanges als noch wesentlich schwieriger erweist als bei akuten Vergiftungen. Zusätzlich werden die gesetzlichen Regelungen, Verordnungen und Normungen beim Umgang mit potentiell schädlichen Substanzen immer zahlreicher und unübersichtlicher, so daß auch hier mit den üblichen Nachschlagewerken nicht mehr in jedem Fall das Auslangen gefunden wird [1].

Diese Notwendigkeiten haben in den einzelnen Laboratorien schon bald zu Sammlungen verschiedenster Daten, Literaturstellen und Vorschriften geführt, wobei diese Sammlungen je nach Bedarf nach verschiedensten Gesichtspunkten, und oft methodisch nicht vergleichbar, angelegt wurden. Daher sind solche Sammlungen für andere auch nur beschränkt oder gar nicht zugänglich [2, 3, 4]. Eine große Hilfe bieten die kommerziell angebotenen großen Datenbanken im Bereich der Umwelteinflüsse und der Toxikologie. Eine gute Übersicht geben hier die Artikel von Bridges [5] und Posner [6].

Im deutschen Sprachraum existiert, zugänglich über DIMDI (Deutsches Institut für medizinische Dokumentation und Information), die Datenbank für Gifte und Vergiftungen (Giftpool). Dies ist eine Faktenbank, die von DIMDI in Zusammenarbeit mit dem Bundesgesundheitsamt (BGA) und den Giftinformations- und Behandlungszentren in der Bundesrepublik Deutschland aufgebaut wurde. Ebenfalls bei DIMDI wird seit 1976 das nach dem „Indexline“-Konzept von v. Clarmann [7] aufbereitete und verschlüsselte Material einiger Giftinformationszentren hinsichtlich Giftinformationen und Behandlungsmethoden, Vergiftungsverläufen, Analysenvorschriften, Gutachten usw. erfaßt. Diese Datenbank umfaßt über 10000 Datensätze für Stoffdaten und ca. 70000 bis 80000 Kasuistikdatensätze. Dabei wurden bei der Auswertung von 40000 eingespeicherten Vergiftungsfällen des Giftnotrufes München mehr als 8000 verschiedene, für die Vergiftungen relevante Stoffnamen gefunden, von denen mehr als die Hälfte nur ein einziges Mal vorkamen [8]. Allein diese Zahlen zeigen die Notwendigkeit eines kontrollierten Thesaurus an Verbindungsnamen, der auch die Möglichkeit bieten sollte, die einzelnen Chemikalien und Wirkstoffe automatisch sowohl einzelnen chemischen Verbindungsgruppen, als auch einzelnen Indikationsgruppen zuzuordnen.

Große Datenbanken geben dem Untersucher natürlich bei der Lösung eines großen und fest umrissenen Problems – wenn auch mitunter mit gewisser zeitlicher Verzögerung – ausgezeichnete Mittel in die Hand, sich über die bereits bearbeiteten Aspekte seines Problems eingehend zu informieren, jedenfalls dann, wenn die Substanz oder Substanzgruppe, um die es geht, bekannt ist. Gänzlich anders liegen die Verhältnisse aber, wenn der chemisch-analytisch arbeitende Toxikologe auf der Suche nach zunächst unbekanntem Schadstoff ist, die gewisse biologische Wirkung gezeigt haben oder die in einem konkreten Fall für schwere oder gar tödliche Vergiftungen verantwortlich sein könnten. Geht man nämlich vom Problem des „General Unknown“, das heißt der zunächst unbekanntem Substanz oder Substanzen aus, die bei einem Vergifteten nachzuweisen sein sollten, so sind die Suchmöglichkeiten bei den bisher genannten Datenbanken sehr stark eingeschränkt. Ebenso muß man bei jedem angebotenen „Current Awareness Service“ damit rechnen, entweder jeweils nur ein sehr kleines Segment der den Toxikologen betreffenden Themenkreise überschauen zu können, oder aber einen großen Prozentsatz an nicht relevanter Information mit in Kauf nehmen zu müssen.

Wie aus dem bisher Gesagten hervorgeht, erfordert die Bearbeitung toxikologisch-analytischer Fragestellungen und ihre anschließende Bewertung und Interpretation die Verfügbarkeit einer großen Anzahl von Einzelinformationen, die sich prinzipiell in drei große Gebiete gliedern:

- Literatur
- Substanzdaten
- Falldaten

Literatur

Hier ist in erster Linie die spezielle Literatursammlung eines Laboratoriums gemeint, die auf die spezielle Arbeitsschwerpunkte und Anforderungen Rücksicht nimmt. Neben Publikationen, die sich mit chemisch-toxikologischer Analytik, toxikologischen Substanzdaten und ähnlichem beschäftigen, fallen hierunter auch gesetzliche Regelungen, Verordnungen, Normen und Gerichtsentscheidungen. Die Dokumentation von Literaturstellen ist im Gegensatz zur später zu besprechenden Faktendokumentation wesentlich einfacher, da jedem Zitat eine eindeutige Kennung und damit eine unverwechselbare Fundstelle zugeordnet werden kann.

Substanz- und Falldaten

In diese Kategorie ist das gesamte Spektrum an *substanzspezifischen Daten*, wie chemisch-physikalische Eigenschaften, Spektren, analytische Daten und Toxizitätswerte sowie Symptome bei Vergiftungen mit den entsprechenden Substanzen einzuordnen. Daneben fallen hier auch *Falldaten* an, wobei sowohl der Vergiftungsverlauf als auch die relevanten Wirkstoffspiegel angegeben und Verweise auf Kombinationswirkungen aufgenommen werden sollten. Hier ist eine

eindeutige Zuordnung aufgrund der Streuung der analytischen Daten nicht mehr möglich, so daß es erforderlich ist, Algorithmen zu erarbeiten, die unter Berücksichtigung dieser Streuungen und Schwankungsbreiten trotzdem eine gute Zuordnung ermöglichen [9, 10].

Im Endausbau soll das (IV+V)-System auch eine Methodendatei umfassen. Darin werden Algorithmen aufgenommen, die auf die in den beiden ersten Abschnitten genannten Daten zugreifen können und es ermöglichen, zielführende und relevante Korrelationen herzustellen bzw. mit Hilfe der Fülle von Daten, die moderne, insbesondere computerisierte Analysengeräte liefern, statistisch abgesicherte Ergebnisse abzuleiten.

Gegenwärtig geübte Problemlösungen

In den meisten Laboratorien wurde bisher versucht, diesen Anforderungen mit Hilfe von manuellen bzw. konventionellen Dokumentationshilfsmitteln zu genügen. Hierzu zählen Tabellen, Stellkarteien, Randloch- und Sichtlochkarteien sowie periodisch erscheinende Publikationen (beispielsweise E. G. C. Clarke (1969): *Isolation and Identification of Drugs*; R. K. Müller (1976): *Die toxikologisch-chemische Analyse*; I. Sunshine (1969): *Handbook of analytical toxicology*; F. R. Preusz (1979): *Gadamer's Lehrbuch der chemischen Toxikologie und Anleitung zur Ausmittlung der Gifte*).

Der Nachteil dieser Datensammlungen war und ist, daß sie jeweils primär auf die Erfordernisse eines bestimmten Laboratoriums ausgerichtet waren und Substanzdaten enthielten, die mit den verschiedensten, nicht standardisierten Analysemethoden, hauptsächlich gaschromatographischen und dünnschichtchromatographischen Systemen, gewonnen worden waren, während die gedruckten Sammlungen sehr schnell ihre Aktualität verloren. Abgesehen davon, daß es dem einzelnen Laboratorium bei der Vielzahl der toxikologisch relevanten Substanzen, die in den letzten Jahren auf den Markt kamen, gar nicht mehr möglich war, mit einigemmaßen wirtschaftlichem Einsatz jede Substanz entsprechend durchzuanalysieren und zu dokumentieren, wurde auch infolge der Datenfülle die Korrelation von Analyseergebnissen mit den vorhandenen Tabellen und Karteien immer schwieriger, und es hing immer mehr von der Erfahrung des Analytikers ab, ob eine Substanz anhand dieser gesammelten Daten identifiziert werden konnte.

Die weitere Entwicklung vollzog sich auf zwei parallelen Wegen: Einerseits wurde immer klarer, daß es erforderlich war, die chemisch-toxikologischen Analysemethoden zu standardisieren, so daß jedes Laboratorium, das sich dieser Methoden bediente, in etwa die gleichen Ergebnisse erhalten konnte. Weiters wurde mit der zunehmenden Verfügbarkeit von Computerleistung versucht, diese Datenfülle entsprechend zu speichern und zugänglich zu machen. Vorarbeiten auf diesem Gebiet leisteten Kazyak [11], Berninger [4], zum Teil in Zusammenarbeit mit Möller [12], in neuerer Zeit Daldrup et al. [13], Sachs [14] sowie Maier und Derksen [3].

Curry hat als einer der ersten erkannt, daß gerade im Sektor der forensisch- und chemisch-toxikologischen Untersuchungen möglichst umfassende und doch

spezialisierte Informationsmöglichkeiten geschaffen werden müßten, um die Arbeit des Toxikologen zu rationalisieren und die Ergebnisse entsprechend absichern zu können. So wurde im Forschungsinstitut des englischen Home Office (HOCRE) eine eigene „Information Division“ geschaffen, deren Aufgabe es ist, in Zusammenarbeit mit den hauseigenen Experten der einzelnen Fachgebiete die für die Arbeit der Laboratorien relevanten neuen wissenschaftlichen Arbeiten ausfindig zu machen, diese an die einzelnen Laboratorien zu verteilen und auch so aufzubereiten, daß der Zugang bei der Bearbeitung verschiedenster Problemstellungen jeweils rasch und problemlos möglich ist. Neben dieser Sammlung relevanter Literaturstellen wurde auch die Sammlung der verschiedensten Daten und Vergleichsmaterialien organisiert und der planmäßige und leichte Zugriff gesichert. Beschreibungen und Übersichten finden sich in den Arbeiten von Emerson [15], Brown et al. [16], Brown und Evett [17] sowie Brown [18].

Auch in kleineren Forschungseinheiten und Instituten, die nicht die Möglichkeiten und den Rückhalt des oben beschriebenen englischen Systems haben, wuchsen trotz der vielen zur Verfügung stehenden Datenbanken und Literaturdienste die Probleme bei der übersichtlichen Aufbewahrung und Speicherung der bei Recherchen und bei der laufenden Arbeit erhaltenen Literatur- und vor allem auch Faktendaten. So wurde immer wieder versucht, unterstützt durch die EDV-Abteilungen der einzelnen Universitäten (z. B. [3, 14]), später durch die immer kostengünstiger zur Verfügung stehenden Mini- und Microcomputer, labor- bzw. institutseigene Systeme zu implementieren, um die eigene Arbeit entsprechend zu unterstützen. Inzwischen gibt es eine Unzahl von Arbeiten, die computerisierte Sammlungen von speziellen Literaturzitationen und auch Faktendaten bzw. Substanzdaten beschreiben. Der große Nachteil aller dieser Systeme ist, daß sie jeweils nur nach den Möglichkeiten und Bedürfnissen eines bestimmten Institutes konzipiert sind und daß eine Kompatibilität und damit Austauschbarkeit der Daten mit anderen Fachinstituten und Fachkollegen praktisch nicht möglich ist. Die vielen Bemühungen zeigen jedoch deutlich den Bedarf für dezentrale Laborcomputer-Systeme, welche einerseits dem einzelnen Untersucher als „Elektronisches Notizbuch“ dienen können und andererseits ohne viel Doppelarbeit den Austausch von Literaturzitationen und Faktendaten unter einer größeren Anzahl von Beteiligten ermöglichen sollten (z. B. [19]).

Die bereits verschiedentlich durchgeführte isolierte Erstellung von Anwendungen und Programmen im Rahmen der toxikologischen Analytik führt dazu, daß die gleichen Daten in verschiedensten Formen, Listen und Dateien auftauchen können, womöglich noch unter verschiedenen Namen. Andererseits ist es aufgrund der – vorwiegend universitären – Struktur der interessierten Institute und Abteilungen nicht so wie bei zentral organisierten Institutionen – wie dem englischen Home Office – möglich, eine entsprechende Datenbank zentral einzurichten und benützen zu lassen, da dem verschiedenste rechtliche, organisatorische und personelle Probleme entgegenstehen. Ein zielführender Weg könnte jedoch sein, ein gemeinsam benützbare Programmsystem zur Verfügung zu stellen, welches dem einzelnen Toxikologen die Möglichkeit bietet, aufgrund vereinheitlichter Strukturen und Programme eine Vereinfachung sei-

ner Dokumentation, eine Zeitersparnis bei der Programmierung und beim Änderungsdienst zu erreichen und gleichzeitig auf die Daten der Kollegen, die unter gleichen systematischen Bedingungen erhoben wurden, Zugriff zu haben. Aus dieser Struktur ergeben sich folgende Vorteile:

1. Aufbau vergleichbarer Datenbestände
2. Für alle akzeptable Systematik
3. Kompatibilität der maschinellen Hilfsmittel
4. Bessere Erfassung der „grauen Literatur“
5. Evidenthaltung selbst hergestellter Dokumentationen über bestimmte Problemstellungen

Das im folgenden beschriebene Programmsystem wurde im Hinblick auf diese Zielsetzungen konzipiert und implementiert, und sollte die Grundlage zu einer intensivierten Zusammenarbeit der einzelnen Institute und Labors auf dem Gebiet der toxikologisch-analytischen Datensammlungen bieten.

Zur Entwicklung anwendungsorientierter Informations- und Dokumentationssysteme

Faßt man ein Informations- und Dokumentationssystem (IuD-System) als Informationssystem auf, das aus zwei Hauptkomponenten, nämlich einem IS&R- (information storage and retrieval) System und einer Datenbank, welche die Dokumentbeschreibung enthält, besteht, so kann man zwei Funktionsbereiche unterscheiden, nämlich Ein/Ausgabe-orientierte und datenbankorientierte Funktionen.

Die Unterstützung dieser beiden Bereiche durch Methoden und Hilfsmittel der angewandten Informationstechnik erfolgte bisher zeitlich verschieden. So brachten bereits die 60er Jahre auf dem Gebiet der Datenbanken die Entwicklung praktikabler Datenmodelle mit sich, von denen das relationale Modell für IuD-Systeme immer mehr an Bedeutung gewinnt. Bei diesem Modell entspricht die Benutzerübersicht in mehreren Punkten direkt den IuD-Erfordernissen: Attribute entsprechen bibliographischen Feldern, Primärschlüssel definieren die Ordnung von Haupteinträgen, Sekundärschlüssel jenen von Registern. Damit ist es möglich, Erkenntnisse der Datenbankentwicklung unmittelbar für IuD-Anwendungen einzusetzen, wie dies beispielsweise die Verwendung einer Teilmenge von Sequel [20] als Abfragesprache in Dokumentationssystemen zeigt. Weitere Fortschritte bei der Entwicklung von Datenbanksystemen und damit unmittelbar bei Dokumentationssystemen sind bedingt durch das Aufkommen billiger und schneller Massen- und Hauptspeicher.

Während nun bei den Datenbankoperationen in den letzten Jahren wesentliche methodische und theoretisch fundierte Fortschritte zu verzeichnen waren, hinkte der Komfort bei den Ein/Ausgabeoperationen bei IuD-Systemen lange hinten nach. Bis zum Ende der 70er Jahre noch war beispielsweise die Lochkarte ein gängiges Speichermedium bei der Dokumenteingabe und – denkt man an das ISTOC-System [21] – auch bei verschiedenen Auswertungen.

Mit dem Aufkommen von Mikrocomputern mit leistungsfähiger Peripherie (Bildschirme, Massenspeicher, Drucker) hat sich aber seit Beginn der 80er Jahre auch im Informations- und Dokumentations-Wesen einiges geändert. So gibt es bereits eine Reihe von „Werkzeugen“, die Ein- und Ausgabe-prozesse unterstützen: Mikroprozessoren und Textverarbeitungssysteme sollen hier genannt sein. Doch derartige Hilfsmittel sind zum Teil für andere Anwendungen konzipiert worden, so daß ihr Einsatz bei der Lösung von Dokumentationsproblemen oft nicht geringe Anpassungs- oder Programmierarbeiten notwendig macht. So ist zum Beispiel die Implementierung eines bibliographischen Regelwerkes mit Berücksichtigung aller Kontrollmechanismen, die sich auf eine bibliographische Einheit, Datenfelder, Zeichensätze etc. beziehen, mit bisherigen Standardprogrammen kaum bewältigbar, man muß eine komfortable Datenerfassung unter Verwendung einer gängigen Programmiersprache noch weitgehend selbst programmieren.

Allerdings bieten derzeit am Softwaremarkt befindliche Programme für Mikrocomputer, wie dBase II/III, Open Access, Framework, usw. bereits zahlreiche Möglichkeiten, bibliographische Applikationen zu implementieren, vorausgesetzt, man lernt in diesen Systemen zu „programmieren“. Im Bereich der Toxikologie kommt neben der Verarbeitung reiner Textdaten noch das Problem hinzu, numerische Daten manipulieren zu müssen. Einfache Verarbeitungsmöglichkeiten, wie sie Tabellenverarbeitungsprogramme bieten, reichen hier nicht aus; es werden statistische Verfahren, Klassifizierungsalgorithmen und ähnliches benötigt. Man ist also wieder gezwungen, Datenschnittstellen zu schaffen, um zu speziellen Verarbeitungssystemen (Bsp.: BMDP, SPSS) kompatibel zu sein. Der Einsatz verschiedener abgeschlossener, wenn auch zueinander über Datenschnittstellen kompatibler Systeme kann IuD-Probleme lösen (Bsp.: Wordstar-dBase), erfordert aber entsprechende Erfahrung bei der Handhabung, eine Voraussetzung, die beispielsweise einem Toxikologen als „Endbenutzer“ eines IuD-Systemes nicht generell zugemutet werden kann.

Um Dokumentationssysteme anwenderfreundlich zu gestalten, ist es notwendig, einzelne Komponenten zu einem einheitlichen System zu integrieren und dem Benutzer über eine geeignete Manipulationssprache zugänglich zu machen. So bietet das bereits zu Beginn der 70er Jahre entwickelte Dokumentationssystem MODOK [22] einen hohen Integrationsgrad bibliographischer Funktionen, vor allem bei der Aufbereitung von gedruckten Ausgaben (Kataloge, Bibliographien, Register). Eine Erweiterung durch Datenbank- und Dialogfunktionen (bei Datenerfassung und -abfrage) war das ursprüngliche Ziel des (IV+V)-Entwurfs, wobei bereits bei den ersten Planungen (1978/79) als Einsatz-Hardware Mikrocomputer in Erwägung gezogen wurden. Schienen solche Ideen zum damaligen Zeitpunkt noch etwas verfrüht, so bestätigt der heutige Entwicklungsstand der Mikrocomputer die Zielrichtung der bereits vor rund einem halben Jahrzehnt begonnenen Entwicklung. Mit derzeit erhältlichen Mikrocomputern ist es kein technisches Problem mehr, IuD-Arbeitsplätze auszustatten, welche für mehrere Teilnehmer den Aufbau und die Abfrage von Datenbanken mit mehreren zehntausend Dokumentationseinheiten, den Anschluß an Informationsnetze oder die Aufbereitung von bibliographischen End- und Zwischenprodukten zulassen.

Eigenschaften und Funktionen des (IV+V)-Systems

Mit der Entwicklung eines computerunterstützten Informationsvermittlungs- und -verarbeitungssystems (Kurzbezeichnung: (IV+V)-System) für den Einsatz auf Mikro- und Minicomputern wurden folgende Anforderungen erfüllt:

Die Hauptzielsetzung war es, Wissenschaftlern, Managern und Informationsvermittlern wie Dokumentaren, Bibliothekaren usw. einen Satz von Werkzeugen zur Verfügung zu stellen, der es ermöglicht, ein spezifisches IuD-System für den Einsatz am Arbeitsplatz zu entwickeln. Mit diesem IuD-System können lokal gehaltene Datenbestände aufgebaut, verarbeitet und ausgegeben werden. Es ist auch ein einfacher Zugriff zu Informationen möglich, die in externen Datenbanken verfügbar sind. Hauptmerkmale des (IV+V)-Systems sind Portabilität, Adaptierbarkeit und Kompatibilität.

Die geforderte maximale *Portabilität*, definiert als die Fähigkeit, ein und dieselbe Software auf Hardware verschiedener Hersteller in möglicherweise unterschiedlichen Konfigurationen ablauffähig zu machen, wurde durch die Verwendung einer höheren Programmiersprache zur Software-Entwicklung erreicht, d.h. das gesamte (IV+V)-System ist in UCSD PASCAL [23] geschrieben. Der vom PASCAL Compiler erzeugte Zwischencode (p-Code) wird mittels Interpretationssoftware (p-Code Interpreter) auf dem vom Benutzer gewählten Computer ausgeführt. Mit dem (IV+V)-System wurde nicht ein spezifisches IuD-System geschaffen, sondern ein Werkzeugkasten (Toolbox) zur Generierung von spezifischen IuD-Systemen, ohne jedesmal die Software modifizieren zu müssen. Man spricht dabei von Applikationsgenerierung durch einen geschulten Benutzer. So ist es mit den vorhandenen generischen Systemfunktionen möglich, IuD-Systeme für verschiedene Anwendungsbereiche zu schaffen. Das Anwendungsspektrum erstreckt sich dabei von IuD-Systemen zum Management von Textdaten (z. B. bibliographischer Systeme) bis hin zur Dokumentation numerischer Faktendaten. Für die angestrebte *Kompatibilität* gilt folgende Definition: Zwei Informationssysteme sind funktional kompatibel, wenn die Benutzer (z. B. Informationsvermittler) dieselbe Klasse von Operationen ((IV+V)-Funktionen) durchführen können. Die dem (IV+V)-Benutzer zur Verfügung stehenden generischen Systemfunktionen ermöglichen es ihm, kompatible IuD-Funktionen zu erstellen.

Durch die im Systementwurf begründete *Modularität* mit der Definition von einheitlichen Schnittstellen wurde eine weitgehende Entflechtung der Systemfunktionen erreicht, und so die Grundlage für einfache Modifizier- und Erweiterbarkeit sowie Wartungsfreundlichkeit geschaffen.

Abbildung 1 zeigt das (IV+V)-Architekturmodell mit den drei grundsätzlichen Bereichen: Hardware, Basissoftware und Anwendersoftware. Das Kernstück des (IV+V)-Systems stellt der Datenbankmodul dar, der eine Implementierung des von Codd [24] vorgeschlagenen *relationalen Datenbankmodells* ist. Dieser Softwareteil stellt eine Schnittstelle (System Function Interface – SFI) zur Verfügung, an der alle Funktionen in Form von Datenpaketen von anderen Software-Moduln aufgerufen werden können.

An der Benutzerschnittstelle kann auf der Basis eines einheitlichen *Maskenkonzeptes* jede Systemfunktion mit Hilfe von benutzergesteuerten Bildschirm-

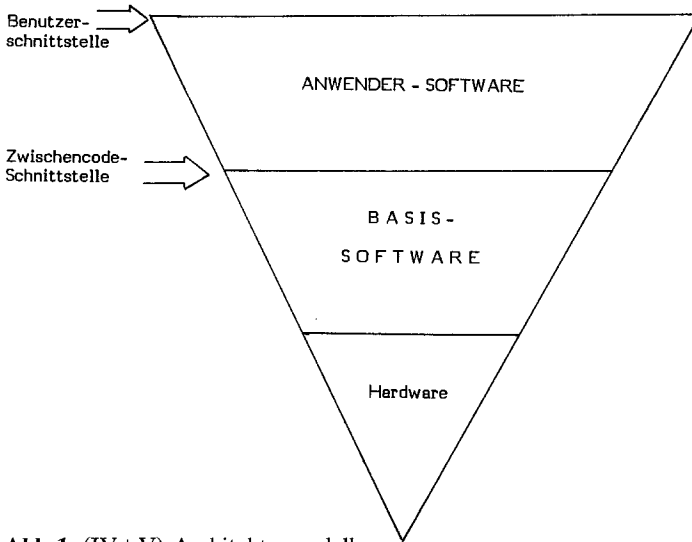


Abb.1. (IV + V)-Architekturmodell

dialogen angesprochen werden. So dienen Folgen von Masken zur Relisierung der Primärdateneingabe, zur Auswahl von Endbenutzerfunktionen (Menüselektion) wie auch zur Spezifikation von Druckbildern. Diese Maskendialoge, ebenso wie die Definition der Datenbank (log. Datenbankentwurf) und die Definition der Datenausgabeformulare und Manipulationsvorschriften, werden zum Zeitpunkt der Applikationsgenerierung erstellt und bilden zusammen ein Endbenutzersystem.

Realisierung eines toxikologischen Informationssystems mit Hilfe des (IV + V)-Systems

Das Informationssystem für toxikologische Analytik umfaßt drei Teilsysteme, nämlich

- Substanzdaten
- Literaturdaten und
- Falldaten.

Eine Gesamtübersicht bietet Abb.2.

Mit Hilfe der Substanzdaten sollen aufgrund von ähnlichen analytischen Charakteristiken gängiger Methoden chemische Substanzen identifiziert werden können. Die Literaturdatenbank enthält gesammelte Zitate einschlägiger Publikationen, die zum gezielten Wiederfinden mit Schlagwörtern und Klassifikationscodes versehen werden können. In der Falldatenbank können anonymisierte Vergiftungsfälle mit den Analyseergebnissen der untersuchten Asservate gespeichert werden.

Die drei Teilsysteme enthalten unterschiedliche Datentypen und Strukturen. In der Substanzdatei sind jeder chemischen Substanz die Analyseergeb-

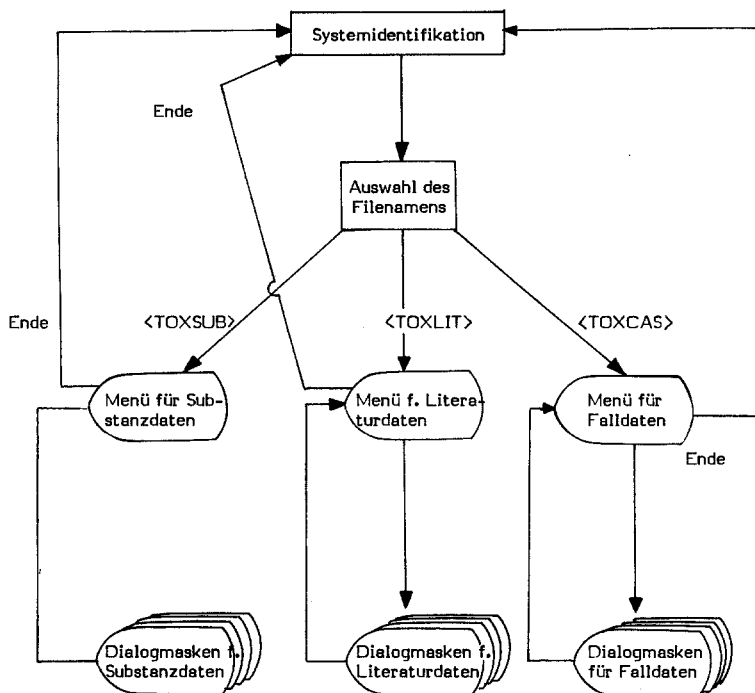


Abb. 2. Übersicht über den allgemeinen Aufbau des Informationssystems für toxikologische Analytik mit seinen drei Teilsystemen für Substanzdaten, Literatur und Vergiftungsfälle

nisse (numerische Werte) der einzelnen Analysenmethoden zugeordnet. Die Literaturdatenbank steht als Beispiel für bibliographische Daten. Die Falldatenbank zeigt die Verwendung von Codes, da fast alle Informationen verschlüsselt eingegeben werden. Nur wenige Datenelemente enthalten Langtext, und dabei muß die Benutzerunterstützung von Systemen durch ausführliche Erläuterungen großzügig angelegt werden.

Trotz der unterschiedlichen Datentypen wurde versucht, jedes der Teilsysteme gleich zu gestalten, d. h. sie sind sehr ähnlich aufgebaut und im Benutzen konsistent. So werden z. B. in den Hauptmenüs in allen drei Teilen folgende Funktionen angeboten:

- Eingabe
- Korrektur
- Ausgabe
- Löschen

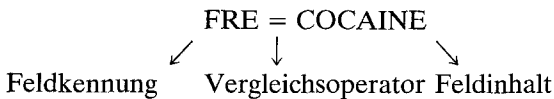
eines logischen Datensatzes. In der Substanzdatenbank bedeutet ein logischer Datensatz eine einzelne chemische Substanz, in der Literaturdatenbank das Zitat einer Publikation und in der Kasuistik einen Vergiftungsfall.

Unter *Eingabe* versteht man das Einfügen eines neuen Datensatzes in die Datenbank. Die Funktion *Korrektur* erlaubt einen oder mehrere Datensätze hintereinander zu modifizieren, d. h. Feldinhalte zu ändern oder zu löschen und weitere Felder auszufüllen. Diejenigen Datensätze, die korrigiert werden sollen, müssen vorher über eine Suche ausgewählt werden. Mit der *Ausgabe* kön-

nen die durch eine *Suche* qualifizierten Datensätze auf dem Bildschirm angezeigt werden. Bei Bedarf können sie auch auf einen angeschlossenen Drucker ausgegeben werden. Mit der *Löschfunktion* können gezielt bestimmte Datensätze aus der Datenbank eliminiert werden.

Die Suche, die in den Funktionen Korrektur, Ausgabe und Löschen verwendet wird, erlaubt das Verknüpfen von Suchtermen mit den logischen Operatoren *und* (*), *oder* (+) und *und nicht* (-), wobei drei Ebenen von Klammern zulässig sind. Ein Suchterm besteht aus der Feldkennung, einem Vergleichsoperator und dem zu suchenden Feldinhalt.

Zum Beispiel:



Als Vergleichsoperatoren können auch die arithmetischen Operatoren <, >, <=, >=, ≠ und der Bereichsoperator > < verwendet werden. Die Suche nach Textteilen (Maskierung rechts und/oder links) ist nur beim Vergleichsoperator „=" zulässig. Als Maskierungszeichen wird „\$“ benutzt.

Einfache zulässige Suchbeispiele

1. Gesucht werden Publikationen des Verfassers Max v. Clarmann, die im Jahre 1980 und folgenden erschienen sind.

PE = „\$CLARMANN\$“*

PD ≥ „1980“

Feldkennungen:

PE... Person, PD... Publikationsdatum

2. Gesucht werden Publikationen über Suchtgiftmißbrauch, die in den Jahren von 1980 bis 1982 erschienen sind.

(TI = „\$DRUG ABUSE\$“+

IT = „\$SUCHTGIFT\$“)*

PD > < „1980|1982“

Feldkennungen:

TI... Titel, IT... Indexterm, PD... Publikationsdatum

3. Gesucht werden Arbeiten in deutscher Sprache über Alkohol, wobei im Titel nach dem Wort Alkohol und in den Schlagworten nach Ethanol recherchiert werden soll.

LA = „GERM“*

(TI = „\$ALKOHOL\$“+

IT = „\$ETHANOL\$“)

Feldkennungen:

LA... Sprache, TI... Titel, IT... Indexterme

Um dem Benutzer die Arbeiten mit dem System zu erleichtern, wurden mehrere Arten von Unterstützung implementiert.

1. Aufruf von Hilfsmasken bei Bedarf
z. B.: Bei der Suche kann eine Maske mit Feldkennungen aufgerufen werden oder im System Kasuistik Codetabellen.
2. Zu jedem Datenfeld kann über eine Funktionstaste eine Hilfszeile mit 80 Zeichen Kurztext sichtbar gemacht werden.
3. Der Hilfetext kann bereits in die Dialogmasken eingebaut sein, z. B. welche Werte pro Feld zugelassen sind oder wie der Dialog weitergeführt werden soll.
4. Aufgrund von Menüauswahl ist gezieltes Steuern von Dialogmasken möglich. So werden in der Literatur nur die für den Publikationstyp relevanten Masken geliefert.

Kennwörter schützen das System vor unberechtigter Benutzung. Eine Systemidentifikation (SYSTID) öffnet den Einstieg in alle drei Teilsysteme. Über den jeweiligen Datenbanknamen, der mit einer Benutzerkennung gekoppelt ist, kann auf die Daten zugegriffen werden, und diese können entsprechend der ausgewählten Funktion manipuliert werden.

Die Beispiele der Dialogmasken in den Abbildungen sind englisch. Um ein deutsches System zu implementieren, müssen nur deutsche Dialogmasken verwendet werden.

Substanzdaten

In der Substanzdatei muß jede chemische Substanz durch ihre Registriernummer (CAS registry number) und den internationalen Freinamen (registered international non-proprietary name) definiert werden. Tabelle 1 gibt eine Übersicht über alle Datenfelder dieses Teilsystems. Sie beinhalten nicht nur Information zu Bezeichnungen und Nomenklatur der jeweiligen Substanz, sondern auch zu ihrer analytischen Identifizierung, sowie zum klinischen Bild bei Vergiftungen. Mehrere analytische Systeme sind für die Methoden Dünnschichtchromatographie (10 DC-Systeme), für die Gaschromatographie (10 GC-Systeme) und für die Farbreaktionen (10 Farbreaktionen) vorgesehen. Die Spektren (UV, IR und MS) lassen beliebig viele Werte zu, wobei es freilich empfehlenswert ist, die Anzahl der Wellenlängen bzw. m/e-Werte der Leistungsfähigkeit der tatsächlich konfigurierten Hardware anzupassen.

Das Teilsystem Substanzen offeriert dem Benutzer zwei prinzipielle Möglichkeiten, in der Datei zu arbeiten (Abb. 3).

A Substanzweise oder

B Methodenweise

„Substanzweise“ bedeutet, daß alle Datenfelder zu einer Substanz inklusive der Werte für alle Verfahren in der gewählten Funktion (Eingabe, Korrektur, Ausgabe und Löschen) vom System angeboten werden. Methodenweise heißt, daß nur diejenigen Werte eines ausgewählten Verfahrens für die in einer Suche qualifizierten Substanzen bearbeitet werden können. Methodenweiser Zugriff gilt für die Funktionen Eingabe, Korrektur und Ausgabe auf Schirm.

Folgende Beispiele erläutern den Suchprozeß im Teilsystem „Substanzdaten“: Die chemische Analyse mit Dünnschichtchromatographie hat für eine unbekannte Substanz in einem bestimmten Laufmittel („Nr. 3“) einen R_F -Wert

Tabelle 1. Datenfelder des Teilsystems „Substanzdaten“

CAS-Registry Nummer
Internationaler Freiname
Summenformel
Synonyma
Methodische Hinweise
Extraktionsverfahren
R _F -Werte für Dünnschichtchromatographie
R _F -Werte für Gaschromatographie
Farbreaktionen
UV-Spektren (Wellenlängen/Extinktionswerte) im sauren, basischen und neutralen Milieu
IR-Spektren (Wellenzahlen/Absorptionswerte, Literaturangabe)
Massenspektren (m/e-Werte für relative Intensitäten, Literaturangabe)
Grenzkonzentrationen in Blut und Urin für den therapeutischen, toxischen und letalen Bereich
Symptome

		TEXT FIELDS							
		1	2	3	4	5	6	7	8
		1234567890	1234567890	1234567890	1234567890	1234567890	1234567890	1234567890	1234567890
1									1
2									2
3									3
4									4
5	INPUT:		by substance				IS		5
6			by method				IM		6
7									7
8	UPDATE:		by substance				US		8
9			by method				UM		9
10									10
11	OUTPUT:		on screen						11
12			by substance				SS		12
13			by method				SM		13
14			on printer				OP		14
15									15
16	DELETE:		of substances				DS		16
17									17
18									18
19	File switch						empty		19
20	End						E		20
21									21
22						Select:			22
23									23
24									24

Abb.3. Hauptmenü für Substanzdaten: Funktionen für substanz- und methodenweise Bearbeitung

von 0.11 ergeben. Die Datenbank soll dazu verwendet werden, um möglichst schnell eine komplementäre Analysemethode zu finden, die es ermöglicht, unter allen Substanzen mit $R_F \sim 0.11$ die richtige herauszufinden. Dazu ist der erste Schritt die Selektion aller Substanzen mit $R_F \sim 0.11$:

DC = „\$10“+

DC = „\$11“+

DC = „\$12“

Durch Einbeziehung von $R_F = 0.10$ und $R_F = 0.12$ kann der mögliche Fehler bei der Bestimmung von R_F -Werten berücksichtigt werden. Das Ergebnis der Suche wird nun „methodenweise“ am Bildschirm aufgezeigt. Alternativ dazu ist auch ein Ausdruck aller Daten zu den gefundenen Substanzen möglich. Wird

etwa die Methode „Gaschromatographie“ gewählt, so zeigt sich sehr schnell, ob ein GC-System zur Unterscheidung der gefundenen Substanzen geeignet ist. Anstelle der verwendeten Intervallsuche ist folgende Formulierung möglich:
 $DC > < „_{30} |_{35}“$
 Hierbei werden alle Substanzen mit $0.30 \leq R_f \leq 0.35$ gefunden.

Literatur

Das Teilsystem Literatur erlaubt es, Literaturzitate wissenschaftlicher Publikationen einzuspeichern, nach verschiedenen Kriterien wieder zu finden und auszugeben. Es stellt kein Katalogisierungssystem für alle bibliographischen Feinheiten dar, sondern soll dem Toxikologen ein System an die Hand geben, mit dem er seine Literatursammlung sinnvoll verwenden kann, ohne mit komplizierten Regelwerken vertraut zu sein. Daher wurde bei der Implementation großer Wert auf Benutzerführung gelegt.

Folgende Typen und Literaturzitate können verarbeitet werden:

1. Bücher und Monographien
2. Teile aus Büchern (z. B. Kapitel aus einem Buch)
3. Zeitschriftenartikel

Tabelle 2 gibt eine Übersicht über die wichtigsten Datenfelder im Teilsystem „Literatur“. Mit den Feldern Titel, Verfasser, Auflage, Erscheinungsort, Seiten usw. wird das bibliographische Zitat beschrieben. Mit den Feldern Schlagworte, Klassifikationscodes usw. kann die Publikation inhaltlich erschlossen werden.

In der Funktion Eingabe muß der Benutzer aus dem obigen Menü entsprechend seiner Publikation eine Auswahl treffen, die ihm in der weiteren Folge nur jene bibliographischen Datenfelder anbietet, die für den jeweiligen Typ relevant sind. Das heißt, daß durch geeignete Steuerung in den Dialogmasken die formale Erfassung der Publikationen syntaktisch richtig sein muß, die essentiellen Datenfelder des jeweiligen Typs müssen ausgefüllt werden. So werden nur für den Publikationstyp Zeitschriftenartikel die Datenfelder Zeitschriftenartikel, ISSN und Band/Heft angeboten (Abb. 4). Sind die bibliographischen Angaben gemacht, kann der Inhalt des Dokumentes in folgenden Feldern beschrieben werden:

Klassifikationscodes,
 Schlagwörter,
 Inhaltsangabe (Abstract) und
 Bemerkungen

Die Anzahl der Klassifikationscodes und der Schlagwörter ist nicht beschränkt, ebenso gibt es keine Zeilenlimitierung bei Abstracts. Am Bildschirm selbst ist nur der Inhalt eines Teilbereiches, eine Art Fenster, sichtbar, das aber beliebig nach oben oder unten verschoben werden kann.

Um Datenaustausch zwischen einschlägigen Institutionen möglich zu machen, wurde der Literaturdatenbank das von der Unesco entwickelte „CCF = Common Communication Format“ [25] zugrunde gelegt. CCF stellt einen Standard für bibliographische Titelerfassung dar und verwendet die ISO Norm 2709 als physikalisches Austauschformat.

Tabelle 2. Datenfelder des Teilsystems „Literaturdaten“

Dokumentnummer
Eingabeidentifikation
Erfassungsdatum
Sprache
Dokumenttyp
ISBN
ISSN
Titel
persönlicher Verfasser
korporativer Verfasser
Zeitschriftentitel
Auflage
Verlag
Verlagsort
Erscheinungsdatum
Teil
Band/Heft
Illustrationsvermerk
Seiten
Klassifikationscodes
Schlagworte
Inhaltsangabe
Bemerkungen

Damit kann erreicht werden, daß Daten, die mit dem (IV+V)-System erfaßt wurden, auch von Benutzern anderer Systeme übernommen und mit geringem Aufwand in deren Systeme eingespielt werden können.

Falldaten

Die Test-Implementation des Eingabesystems für Vergiftungsfälle fußt auf dem Indexline Handbuch [7].

Die Besonderheiten der Kasuistik liegen dabei darin, daß mit Ausnahme der Datenfelder „Gifte“, „Suffix“, „Therapie“, „Klinisches Bild“, „Verlauf“ und „Bemerkungen“ alle anderen Felder Verschlüsselungen oder Analysenwerte enthalten. Dieser Tatsache Rechnung tragend wurde ein Eingabesystem konzipiert, das es auch einem Benutzer, der mit der v. Clarmann'schen Nomenklatur noch nicht vertraut ist, erlaubt, formal richtige Eingaben ins System zu machen. Das konnte einerseits dadurch erreicht werden, daß für alle Felder, die Codes enthalten, der Wertevorrat überprüft wird. Zum anderen wurden zu jedem Feld so viele Hilfemasken installiert, wie notwendig sind, um die Codes und die Langtexte aufzunehmen. Weist das System bei der Dateneingabe einen Code als nicht zulässig zurück, so kann sofort in der entsprechenden Hilfemaske nachgesehen werden, welche Eingaben erlaubt sind. Abbildung 5 zeigt

```

Number : 6
=====
RI      : 83102366
IC      : IBK
ED      : 19831013
DI      : 02
LA      : eng
BL      : 3
JT      : J.CHROMATOGR.
PD      : 1982
QP      : 239
PG      : 239-243
II      : PENTAZOCIN
        /
        / SUCHTGIFTE
        /
        / BESTIMMUNG
        /
        / HPLC
        /
        / CHROMATOGRAPHIE
        /
        / FLUESSIG
        /
        / EXTRAKTION
        /
        / BLUT
        /
        / PLASMA
        /
S1      : 1
TI      : HIGH-PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHIC ANALYSIS OF
        PENTAZOCINE IN BLOOD AND PLASMA
        PENTAZOCIN
TIL     : A
PE      : ANDERSON,K.D.
RO      : 1
PEL     : A
PE      : ILETT,K.F.
RO      : 1
PEL     : A

```

Abb.4. Beispiel für die Ausgabe eines Literaturzitates im Systemformat

```

                                TEXT FIELDS
                                1         2         3         4         5         6         7         8
12345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
11|                                     | 1
21|                                     | 2
31|                                     | 3
41|Document number:  -----   Date of entry:  -----   Identification:  -----| 4
51|                                     | 5
61|Type of document:  --         Source:         --         Year:         -----| 6
71|                                     | 7
81|Codeletter:       --         Code:         -----   Key/pois.archive:  -----| 8
91|                                     | 9
101|Applicat.category:  --         Supplier of data:  --         Place/Region:  -----|10
111|                                     |11
121|                                     |12
131|                                     |13
141| Source of information:                                     |14
151| Here you use a code to indicate who owns the information. (There are more |15
161| than 1000 different possibilities in using an alphanumeric key).         |16
171| Following codes are fixed:                                     |17
181|                                     |18
191| ZF  Giftnotruf Freiburg                                     ZM  Giftnotruf Muenchen |19
201|   z.H. Prof.Dr. Gaedeke                                     z.H. PD Dr. von Clarwann |20
211|   Mathildenstr. 1                                         Isamaningerstr. 22       |21
221|   D-7800 Freiburg                                         D-8000 Muenchen 80       |22
231|                                     Continue/Back/End/Next field (C/B/E/N) |23
241|                                     |24
1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
                                1         2         3         4         5         6         7         8

```

Abb.5. Erste Eingabemaske für Falldaten mit erster Hilfemaske für das Feld „Quelle“

zum Feld „Quelle (Source)“ eine solche Hilfemaske, in der der Benutzer auch eine Anweisung findet, wie er in diesen Hilfemasken einfach vor- und zurückblättern kann. Das Hauptmenü bietet einen eigenen Zweig an, in dem die Codes mit ihren entsprechenden Langtexten gewartet werden können. Werden

Suchergebnisse ausgegeben, so können statt der Codes die Langtexte eingesteuert werden.

Mit Hilfe eines geeigneten Dialogs konnte auch die Zuordnung mehrerer Asservate zu einem Gift ermöglicht werden. Für jedes weitere Gift können diese Eingabemasken so oft wiederholt werden, bis der Benutzer alle Gifte mit den zugehörigen Asservaten eingegeben hat und im Dialog weiter fortschreitet. Die Anzahl der Asservate pro Gift und die Zahl der Gifte pro Vergiftung wurden nicht beschränkt.

Schlußfolgerungen

Mit dem beschriebenen Datenbanksystem in seiner speziell für die klinische und analytische Toxikologie konzipierten Version wird Besitzern entsprechend ausgerüsteter Personal-Computer (notwendiger Konfigurationsumfang siehe Anhang) die Möglichkeit geboten, Sammlungen von Literaturangaben und Substanzdaten, die auf ihre speziellen Erfordernisse zugeschnitten sind, anzulegen und bei Bedarf auszuwerten. Das geschieht in einem System, das eine optimale Kompatibilität und Standardisierung gewährleistet, um Daten zwischen einzelnen Benutzern oder Benutzern und einer Zentrale auszutauschen. Zusätzlich wird einerseits der Zugriff auf externe Datenbanken zur Durchführung großer Recherchen ermöglicht, andererseits die Eingabe von Falldaten in einem INDEXLINE-kompatiblen Format unterstützt [7]. Bei der Konzeption des Systems wurde bewußt darauf verzichtet, Bibliotheken von Massenspektren oder Infrarotspektren und die entsprechenden Suchalgorithmen zu integrieren, da hier ausgereifte Systeme kommerziell erhältlich sind und heutzutage kaum mehr als ein Massenspektrometer oder großes Infrarotgerät ohne entsprechenden Rechner und passende Software gekauft wird. Es wurde aber die Möglichkeit offen gelassen, Massenspektren und Infrarotspektren in kurzer Form (Massenzahl und Intensität bzw. Wellenzahl und Intensität) mit abzuspeichern, um eine gewisse Verbindungsmöglichkeit zu schaffen und auch einfacher ausgestatteten Laboratorien eine Nutzung von Spektrenbibliotheken zu ermöglichen.

Ausblick

Mit dem vorgestellten Programmsystem wird dem Benutzer ein Werkzeug zur Verfügung gestellt, mit dessen Hilfe er – gegebenenfalls in Zusammenarbeit mit Fachkollegen – ohne selbst programmieren zu müssen, in der Lage sein sollte, ein auf seine spezifischen Bedürfnisse zugeschnittenes Laborinformationssystem aufzubauen. Aufgrund der rasanten Entwicklung der toxikologischen Kenntnisse wird eine solche Sammlung immer unvollständig bleiben müssen. Auf der Basis nationaler und internationaler Zusammenarbeit wird es nun Aufgabe der Fachkollegen sein, auf dieser Grundlage aufzubauen und Methoden und Algorithmen zu entwickeln, die das System den Bedürfnissen besser anpassen. Gleichzeitig werden Möglichkeiten der Zusammenarbeit und des Datenaustausches gefunden werden müssen, die das System immer auf den aktuellsten Stand zu halten erlauben.

Anhang

Hardwareanforderungen für das (IV + V)-System:

Mikroprozessor:

Mit einer Wortbreite von 16 bit, besser sind 32 Bit

Memory:

Minimum 192 KByte, 256 K und mehr verbessern die Systemleistung

Interface:

Eine serielle Schnittstelle (V24) als Kommunikationsinterface

Peripherie:

Harddisk (Rigid oder removeable) mit einer Backup-Möglichkeit (z. B. Floppy) und einer minimalen Speicherkapazität von 5 MByte oder mehr (anwendungsabhängig)

CRT-Terminal mit Tastatur

Weiters ist eine minimale Software-Ausstattung auf der Zielhardware notwendig:

- Ein auf der ausgewählten Zielanlage verfügbares (einfaches) Betriebssystem mit Macro-Assembler und Debugger, um einen p-code-Interpreter implementieren oder anpassen zu können.
- Peripherie-Handler, insbesondere für Massenspeicher und Bildschirmterminal
- Vollständige Dokumentation bzgl. Hardware und Software

Literatur

1. Battista HJ, Vycudilik W, Udermann H, Jaritz N, Koch W (1981) Studie zum Aufbau eines toxikologisch-chemischen Dokumentationssystems TOXDOC, erstellt im Auftrag des Bundesministeriums für Wissenschaft und Forschung, vorgelegt im Dezember 1981
2. Müller RK, Erge R (1975) Maschinenlochkartendokumentation der Literatur über toxikologisch-chemische Analytik, Toxikologie und angrenzende Gebiete. Kriminalistik und forensische Wissenschaften 20: 183–196
3. Maier RD, Derksen J (1984) Computereinsatz in der praxisbezogenen forensisch-toxikologischen Analytik. Z Rechtsmed 92: 159–168
4. Berninger H (1985) Computerprogramm zur Korrelation von UV-Spektren und dünn-schichtchromatographischen Daten. (Persönl. Mitteilg.)
5. Bridges K (1981) Environmental health and toxicology: An introduction for the on-line-searcher. Online, pp 27–34
6. Posner G (1984) Review: Übersicht über wichtige Datenbankanbieter und Datenbanken im medizinisch-naturwissenschaftlichen Bereich. Zentralbl Rechtsmed 27: 63–142
7. INDEXLIN-Handbuch Version 1.01 vom 22. 3. 1984, hrsg von DIMDI (Deutsches Institut für medizinische Dokumentation und Information, Köln)
8. Fabricius W, Radetzki G (1981) Abschlußbericht zum Forschungsvorhaben „Untersuchungen zur Auswertung bereits dokumentierten Datenmaterials über Vergiftungsfälle und die Stoffe und Zubereitungen, die bei Bedarfsgegenständen zur Vergiftung führen“. Bundesgesundheitsamt, Berlin
9. Schepers PGAM, Franke JP, De Zeeuw RA (1983) System evaluation and substance identification in systematic toxicological analysis by the mean list length approach. J Anal Toxicol 7: 272–278

10. Wehinger G (1983) Substanzidentifizierung durch ein Programm zur Korrelation verschiedener Dateien mit Analysenparametern. Vortrag beim Workshop 1983 „Das elektronische Notizbuch“ der GTFCh in Innsbruck
11. Kazyak L (1974) Information exchange and computerized data retrieval for toxicology. *J Forens Sci* 19: 147–154
12. Berninger H, Möller MR (1977) Retentionsindices zur gaschromatographischen Identifizierung von Arzneimitteln. *Arch Toxikol* 37: 295–305
13. Daldrup TF, Michalke P (1981) Kombination von Dünnschichtchromatographie, Gaschromatographie (OV-1 & OV-17) und HPLC (RP-18) zur schnellen Erkennung von Arzneimitteln, Rauschmitteln und verwandten Verbindungen. *Fresenius Z Anal Chem* 308: 413–427
14. Sachs H (1982) Austausch von Labordaten zwischen den Instituten und Möglichkeiten der Dokumentation über Kleinrechner. Vorgetragen bei der Tagung der Süddeutschen Rechtsmediziner in Stuttgart 1982
15. Emerson VJ (1975) Information in forensic science. *J Forens Sci Soc* 15: 257
16. Brown C, Evett IW, Marriott KG (1984) The development of ASCIF2: A computerized forensic science literature retrieval system. *J Forens Sci Soc* 24: 49–59
17. Brown C, Evett IW (1985) Experiences in the operation of a forensic science computer time-sharing system. *J Forensic Sci Soc* 25: 39–52
18. Brown C (1983) Computer retrieval systems for analytical information in forensic science. *Trends Anal Chem* 2 (6): 125–128
19. Heller STR, Potenzzone R Jr, Milne GWA, Fisk C (1981) Computers in analytical chemistry. *Trends Anal Chem* 1 (3): 62–65
20. Chamberlin DD, Astrahan MM, Eswaran KP, Griffiths PP, Lorie RA, Mehl JW, Reisner P, Wade BW (1976) SEQUEL 2: A unified approach to data definition, manipulation, and control. *IBM J Res Develop*, pp 560–569
21. Müller RK, Erge R, Wehran H-J, Zschocke D (1973) Proposal of a scientific information system for the literature on toxicological-chemical analytics (ISTOC). *Zacchia* 48: 1–12
22. Koch W (1979) Der Informations- und Dokumentationsprozeß: Modell und Praxis. Bericht Rechenzentrum Graz (Bd 93) Graz 1979
23. UCSD-PASCAL, user's manual. University of California San Diego, CA 92126
24. Codd EF (1970) A relational model of data for large shared data banks. *Commun ACM* 13: 377
25. CCF (1984) The common communication format. Ed. by Peter Simmons and Alan Hopkinson for the General Information Programme and UNISIST. Paris, Unesco (PGI-84/WS/4), p 185

Eingegangen am 10. Juli 1985