ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО

ПО ТЕХНИЧЕСКОМУ РЕГУЛИРОВАНИЮ И МЕТРОЛОГИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ СТАНДАРТ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ГОСТ Р 8.1031— 2024

Государственная система обеспечения единства измерений

БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ ПСИХОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ МЕТАБОЛИТОВ

Общие требования (требования к достоверности данных, полноте информации, актуализации и содержанию)

Издание официальное

Москва
Российский институт стандартизации
2024

gost.e-ecolog.ru

Предисловие

1 РАЗРАБОТАН Федеральным государственным бюджетным учреждением «Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы» (ФГБУ «ВНИИМС»)

2 ВНЕСЕН Техническим комитетом по стандартизации ТК 53 «Основные нормы и правила по обеспечению единства измерений»

3 УТВЕРЖДЕН И ВВЕДЕН В ДЕЙСТВИЕ Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 14 февраля 2024 г. № 209-ст

4 ВВЕДЕН ВПЕРВЫЕ

*Правила применения настоящего стандарта установлены в статье 26 Федерального закона от 29 июня 2015 г. № 162-ФЗ «О стандартизации в Российской Федерации». Информация об изменениях к настоящему стандарту публикуется в ежегодном (по состоянию на 1 января текущего года) информационном указателе «Национальные стандарты», а официальный текст изменений и поправок — в ежемесячном информационном указателе «Национальные стандарты». В случае пересмотра (замены) или отмены настоящего стандарта соответствующее уведомление будет опубликовано в ближайшем выпуске ежемесячного информационного указателя «Национальные стандарты». Соответствующая информация, уведомление и тексты размещаются также в информационной системе общего пользования — на официальном сайте Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии в сети Интернет (*gost.e-ecolog.ru

© Оформление. ФГБУ «Институт стандартизации», 2024

Настоящий стандарт не может быть полностью или частично воспроизведен, тиражирован и распространен в качестве официального издания без разрешения Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии

ОКС 17.020

Поправка к ГОСТ Р 8.1031—2024 Государственная система обеспечения единства измерений. Библиотеки масс-спектров психоактивных соединений и их метаболитов. Общие требования (требования к достоверности данных, полноте информации, актуализации и содержанию)

В каком месте	Напечатано	Должно быть
Предисловие	2 ВНЕСЕН Техническим комитетом по стандартизации ТК 53 «Основные нормы и правила по обеспечению единства измерений»	2 ВНЕСЕН Техническим комитетом по стандартизации ТК 180 «Государственная служба стандартных справочных данных»

(ИУС № 9 2024 г.)

НАЦИОНАЛЬНЫЙ СТАНДАРТ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Государственная система обеспечения единства измерений

БИБЛИОТЕКИ МАСС-СПЕКТРОВ ПСИХОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ МЕТАБОЛИТОВ

Общие требования (требования к достоверности данных, полноте информации, актуализации и содержанию)

State system for ensuring the uniformity of measurements. Libraries of mass spectra of psychoactive compounds and their metabolites. General requirements (requirements for data reliability, completeness of information, updating and content)

Дата введения — 2024—12—01

1 Область применения

Настоящий стандарт распространяется на библиотеки масс-спектров (далее — библиотеки) психоактивных соединений и их метаболитов в системе стандартных справочных данных Государственной службы стандартных справочных данных о физических константах и свойствах веществ и материалов и устанавливает требования к достоверности данных, размещаемых в библиотеки, полноте информации данных, актуализации библиотек и их содержанию.

Стандарт предназначен для применения при подготовке таблиц стандартных и рекомендованных справочных данных.

Настоящий стандарт разработан в целях реализации требований к библиотекам психоактивных соединений и их метаболитов, стандартным справочным данным, на основе которых они создаются, в соответствии со статьей 21 [1] и с учетом положений ГОСТ Р 8.795, и другими нормативными документами.

2 Нормативные ссылки

В настоящем стандарте использована нормативная ссылка на следующий стандарт:

ГОСТ Р 8.795 Государственная система обеспечения единства измерений. Методики идентификации химических веществ методом хромато-масс-спектрометрии. Общие требования

Примечание — При пользовании настоящим стандартом целесообразно проверить действие ссылочных стандартов в информационной системе общего пользования — на официальном сайте Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии в сети Интернет или по ежегодному информационному указателю «Национальные стандарты», который опубликован по состоянию на 1 января текущего года, и по выпускам ежемесячного информационного указателя «Национальные стандарты» за текущий год. Если заменен ссылочный стандарт, на который дана недатированная ссылка, то рекомендуется использовать действующую версию этого стандарта с учетом всех внесенных в данную версию изменений. Если заменен ссылочный стандарт, на который дана датированная ссылка, то рекомендуется использовать версию этого стандарта с указанным выше годом утверждения (принятия). Если после утверждения настоящего стандарта в ссылочный стандарт, на который дана датированная ссылка, внесено изменение, затрагивающее положение, на которое дана ссылка, то это положение рекомендуется применять без учета данного изменения. Если ссылочный стандарт отменен без замены, то положение, в котором дана ссылка на него, рекомендуется применять в части, не затрагивающей эту ссылку.

Издание официальное

3 Термины и определения

В настоящем стандарте применены термины по ГОСТ Р 8.795, а также следующие термины с соответствующими определениями:

3.1

аналит: Компонент, искомый или определяемый в пробе вещества или материала объекта аналитического контроля.

[ГОСТ Р 52361—2018, статья 20]

3.2 **библиотеки масс-спектров веществ:** Набор масс-спектров с сопутствующей информацией, включающей условия их получения, статус, критерии идентификации веществ, алгоритмы сравнения, для решения задач идентификации анализируемых веществ.

Примечание — Масс-спектры, содержащиеся в библиотеке, являются общепринятыми научными и практическими данными, к которым обращаются пользователи библиотеки в своей профессиональной деятельности; условиями помещения масс-спектра в библиотеку являются его многократные воспроизведения разными исследователями, на разных приборах, в различных условиях.

3.3

Государственная служба стандартных справочных данных о физических константах и свойствах веществ и материалов; ГСССД: Служба, осуществляющая деятельность по разработке и внедрению стандартных справочных данных о физических константах и свойствах веществ и материалов в науке и технике в целях обеспечения единства измерений на основе применения указанных стандартных справочных данных, а также по ведению соответствующих разделов Федерального информационного фонда по обеспечению единства измерений.

[[1] статья 21, пункт 10]

3.4

масс-спектр: Условное отображение совокупности распределенных в пространстве и (или) во времени ионных пучков или пакетов исследуемого вещества, разделенных по значениям отношения массы иона к его заряду.

[ГОСТ 15624—75, статья 1]

3.5

массовое число иона: Целое число атомных единиц массы иона, равное сумме протонов и нейтронов иона.

[ГОСТ 15624—75, статья 5]

3.6 **психоактивные соединения и их метаболиты:** Вещества, влияющие на функции центральной нервной системы и приводящие к изменению психического состояния.

Примечание — К ним относятся психофармакологические средства, используемые в психиатрии, и наркотические вещества, в том числе приведенные в [2].

4 Общие требования

4.1 Общие положения

Библиотеки подразделяют на две группы:

- библиотеки, используемые в газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ/МС);
- библиотеки для тандемных масс-спектрометров, с применением высокоэффективных жидкостных хроматографов для ввода пробы и предварительного разделения веществ (ВЭЖХ-МС/МС).

Данные в библиотеки размещаются после их аттестации в ранге стандартных справочных данных.

Тандемные масс-спектры индивидуальных компонентов являются уникальными характеристиками веществ, применяемыми при масс-спектрометрическом анализе, для определения целевого вещества или состава смеси. Целевые компоненты в образцах следует определять путем сравнения экспериментальных данных с библиотеками, полученными и валидированными ранее.

Библиотека должна включать в себя руководство пользователя библиотекой, в котором излагаются область применения, порядок пользования библиотекой, требования к размещаемой информации, порядок пополнения, удаления информации, актуализации данных, условия доступа к информации и другие сведения.

4.2 Требования к достоверности стандартных справочных данных в виде масс-спектров аналитов

Для составления таблиц стандартных справочных данных следует использовать данные, полученные методами ГХ/МС, времяпролетной тандемной масс-спектрометрии высокого разрешения, ВЭЖХ-МС/МС. Для получения спектров следует использовать масс-спектрометры утвержденного типа и прошедшие поверку.

Должны быть указаны условия получения спектров.

Масс-спектры должны быть получены в условиях воспроизводимости или внутрилабораторной прецизионности. Масс-спектр, помещаемый в библиотеку, должен быть общедоступным, достоверным и перепроверенным результатом работы научных или практикующих авторов/коллективов (предпочтительно, чтобы они не зависели друг от друга). Достоверность полученных данных должна быть оценена.

Каждый масс-спектр должен сопровождаться необходимой для идентификации информацией:

- отношения массы к заряду;
- наименование анализируемого вещества;
- при наличии матрицы — наименование матрицы;
- наименование средства измерений, обозначение типа средства измерений согласно [3];
- условия измерений — энергия ионизации (энергия электронного удара), растворитель и т. д.;
- отчет, содержащий идентификационные данные масс-спектрометра, детектора, на котором проводились измерения, системы ввода пробы.

4.3 Требования к полноте информации и содержанию библиотек психоактивных соединений и их метаболитов

4.3.1 Библиотека с уникальным наименованием

Должна быть приведена область действия библиотеки, ее назначение. Например, библиотека предназначена для достоверной идентификации сильнодействующих, наркотических и психоактивных веществ, востребованных в экспертно-криминалистических лабораториях, и применяемых для обеспечения единства измерений в экспертно-криминалистической деятельности.

4.3.2 Объем информации, предоставляемой библиотекой

Объем информации, предоставляемой библиотекой пользователям, должен быть однозначно изложен. Например, информационное обеспечение сотрудников токсикологических, экспертно-криминалистических лабораторий об имеющихся масс-спектрах сильнодействующих веществ, которые могут применяться для идентификации (при наличии стандартного образца утвержденного типа — для количественного определения концентрации) определяемых субстанций. Или, например, предоставление информации пользователям об источниках получения субстанции, применяемой для записи масс-спектра (наличие сертификата субстанции); ФИО, звание, должность, стаж работы на масс-спектрометре, место работы оператора, вносящего масс-спектр в библиотеку; наименование прибора, на котором был записан масс-спектр и т. д.

4.3.3 Требования к функциям, выполняемым библиотекой

4.3.3.1 Ввод, редактирование, просмотр информации.

4.3.3.2 Поиск информации по пикам масс-спектра, дате, наименованию субстанции, номеру CAS (при наличии в сопроводительных документах к субстанции), молекулярной массе, массе протонированного иона, массе иона-предшественника, ФИО оператора, наименованию прибора, на котором был записан масс-спектр и т. д.

4.3.3.3 Разграничение доступа к информации для авторизованных и неавторизованных пользователей, при необходимости.

4.3.3.4 Реализация возможности обмена информацией между пользователями библиотеки с целью обеспечения возможности для любого пользователя идентифицировать неизвестное соединение, масс-спектр которого им записан на его приборе, путем обращения к данным из библиотеки.

4.3.3.5 Обеспечение возможности формирования поисковых запросов с использованием как минимум следующих критериев:

- присутствие в масс-спектре одного или нескольких ионов с заданной массой;

- соответствие массы анализируемого соединения массе соединения из библиотеки;
- присутствие в аннотации химического соединения из библиотеки одного или нескольких ключевых терминов, заданных пользователем.

4.3.4 Требования к организации входных данных

Входные данные для размещения в библиотеке должны быть представлены в виде таблицы масс-спектра (зависимости интенсивности сигнала от отношения масс к заряду аналита) или в виде любого легко распаковываемого файла, или масс-спектр может быть загружен как график со значениями *m/z* по оси *x* и интенсивностью (имп./с) по оси *y*.

Полученный масс-спектр должен являться характерным спектром данного вещества, т. е. он должен быть получен при анализе любых веществ, содержащих данное соединение.

Необходимо предоставлять как минимум следующие данные об операторе, записавшем масс-спектр: ФИО, должность, стаж работы на масс-спектрометре, место работы оператора.

Необходимо предоставлять как минимум следующие данные о средстве измерений, на котором записан масс-спектр: наименование, номер, данные о последней поверке в соответствии с приведенными в [3], условия записи спектра (режим ионизации, полярность, растворитель и т. д.).

Необходимо загружать сертификаты на субстанции (если это сделать невозможно, следует кратко указать причину) с минимальными сведениями — наименование, молекулярная формула, молекулярная масса. Максимальные сведения — сертификат производителя с наименованием субстанции, каким-либо регистрационным номером в известной базе данных, номер CAS вещества, указание чистоты субстанции, определенных примесей, дата записи. Для субстанций без сертификатов рекомендуется указывать географический регион происхождения субстанции.

4.3.5 Требования к организации выходных данных

Выходные данные библиотеки должны быть представлены в виде спектра, таблицы, файла.

Файл масс-спектра должен иметь расширение, которое позволит его открыть в виде, совместимом с программным обеспечением (ПО) других масс-спектрометров, чтобы полученный из библиотеки масс-спектр можно было загрузить в ПО прибора пользователя и сравнить с масс-спектрами, предустановленными в ПО прибора.

4.3.6 Требования к информационной и программной совместимости

Библиотека должна быть совместима с ПО масс-спектрометров, используемых на территории Российской Федерации.

4.3.7 Требования к защите информации

К редактированию масс-спектров и информации по ним допускаются только авторизованные пользователи, права определяет владелец библиотеки.

4.3.8 Требования к интерфейсу

Интерфейс должен быть интуитивно понятным для пользователя.

4.3.9 Требования к наполнению библиотеки

Библиотека должна быть легко пополняемой — каждый пользователь, выполняющий измерения на масс-спектрометре, должен иметь возможность выкладывать полученные им масс-спектры в открытый свободный доступ. Форматы данных должны быть совместимыми.

4.4 Требования к актуализации библиотек психоактивных соединений и их метаболитов

4.4.1 Актуализация данных, форматов представления данных, регистрационных сведений, форм представления результатов и другой информации, содержащейся в библиотеке, осуществляется для поддержания соответствия методологического обеспечения функционирования библиотеки потребностям пользователей, приведения данных библиотеки в соответствие с современными требованиями нормативных документов в области обеспечения единства измерений, с федеральным законодательством, иными нормативными правовыми актами, а также для повышения качества выполнения библиотекой своего функционала.

4.4.2 Разработчику библиотеки следует ее поддерживать в актуальном состоянии и пересматривать ее характеристики с заданной периодичностью по результатам мониторинга применения национальных стандартов.

4.4.3 При необходимости одновременно с актуализацией библиотеки вносятся изменения во взаимосвязанные с ней данные и документы.

4.4.4 Данные, размещенные в библиотеку, могут быть признанными утратившими силу и размещены в архив библиотеки в случаях, если взамен размещенных, появились новые данные, полученные

на том же оборудовании, но имеющие более высокий уровень достоверности или в других обоснованных случаях. Однако, рекомендуется перемещать данные в архив только после тщательной оценки рисков и принятия соответствующего задокументированного решения.

4.4.5 При обнаружении конфликта интересов при публикации данных, они перемещаются в архив с возможностью возвращения в активную область после положительного урегулирования вопроса.

4.4.6 Актуализацию библиотеки осуществляют согласно порядку, изложенному в руководстве пользователя библиотекой.

4.5 Требования к процессу получения количественного содержания аналита в образце для анализа

Измерения количественного содержания аналита возможно только при условии использования внутреннего стандарта, калибратора, а при измерениях, проводимых в сфере государственного регулирования по обеспечению единства измерений (см. [1], статья 1) только при наличии стандартного образца аналита или стандартных справочных данных.

Библиография

[1] Федеральный закон от 26 июня 2008 г. № 102 «Об обеспечении единства измерений»

[2] Перечень наркотических средств, психотропных веществ и их прекурсоров, подлежащих контролю в Российской Федерации, утвержденный Постановлением Правительства Российской Федерации от 30 июня 1998 г. № 681

[3] Федеральный информационный фонд по обеспечению единства измерений gost.e-ecolog.ru registry

УДК 389.14:006.354 ОКС 17.020

Ключевые слова: библиотеки масс-спектров, психоактивные вещества, Государственная служба стандартных справочных данных о физических константах и свойствах веществ и материалов, ГСССД

Редактор *Е.В. Якубова*
Технический редактор *И.Е. Черепкова*
Корректор *И.А. Королева*
Компьютерная верстка *И.А. Налейкиной*

Сдано в набор 15.02.2024. Подписано в печать 12.03.2024. Формат 60×84⅛. Гарнитура Ариал.
Усл. печ. л. 0,93. Уч.-изд. л. 0,74.

Подготовлено на основе электронной версии, предоставленной разработчиком стандарта

Создано в единичном исполнении в ФГБУ «Институт стандартизации»
для комплектования Федерального информационного фонда стандартов,
117418 Москва, Нахимовский пр-т, д. 31, к. 2.
gost.e-ecolog.ru gost.e-ecolog.ru

ОКС 17.020

Поправка к ГОСТ Р 8.1031—2024 Государственная система обеспечения единства измерений. Библиотеки масс-спектров психоактивных соединений и их метаболитов. Общие требования (требования к достоверности данных, полноте информации, актуализации и содержанию)

В каком месте	Напечатано	Должно быть
Предисловие	2 ВНЕСЕН Техническим комитетом по стандартизации ТК 53 «Основные нормы и правила по обеспечению единства измерений»	2 ВНЕСЕН Техническим комитетом по стандартизации ТК 180 «Государственная служба стандартных справочных данных»

(ИУС № 9 2024 г.)

gost.e-ecolog.ru