

神経剤の加水分解反応の計算化学による考察

(科学警察研究所¹⁾) ○大塚 麻衣¹・宮口 一¹

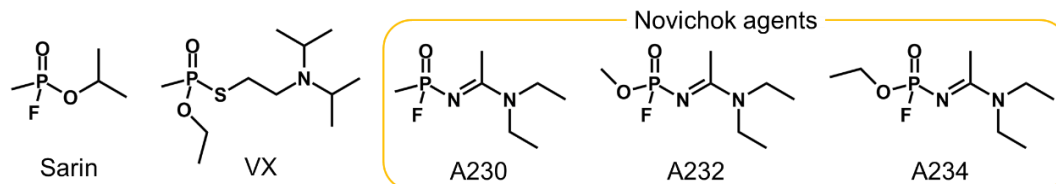
Theoretical evaluation of the hydrolysis reactions of nerve agents (¹ *National Research Institute of Police Science*) ○Mai Otsuka¹, Hajime Miyaguchi¹

Nerve agents are highly toxic organophosphorus compounds. Although the production, use, and storage of them are restricted internationally, they have still been used in terrorist attacks and crimes. Moreover, new class of nerve agents, novichok agents, were used very recently. From the social security perspective, the detailed investigation of the hydrolysis behavior of nerve agents including novichok agents is necessary. Nevertheless, experiments using real compounds are virtually impossible because they are extremely toxic and strictly controlled by law. Thus, we calculated hydrolysis reactions under basic conditions and compared the results of novichok agents with those of conventional nerve agents. Novichok agents and sarin have F atom as the leaving group in common. However, according to our calculations, novichok agents showed similar activation energies to VX and they might be resistant to hydrolysis reaction.

Keywords : *Nerve agents, Chemical warfare agents, Theoretical calculation, Density functional theory*

神経剤は、極めて高い毒性を有する有機リン系化合物である。それらの製造や使用は国際的に厳しく規制されている¹⁾が、テロや犯罪で使用される事案が発生しており、日本国内で使用された例もある。このような事案が発生した際に、除染や使用証明を適切に行うためには、神経剤の加水分解反応についての詳細な知見が必要となる。しかし、神経剤は極めて高い毒性を有することに加え、法律によりその取扱いが厳しく規制されているため、神経剤を使用した加水分解実験を行うことは困難である。そこで本研究では、ごく最近に規制対象に追加された神経剤であるノビチョクを含む神経剤の加水分解反応について、計算化学により考察することとした²⁾。

除染に用いられる可能性が高い条件として塩基性条件を想定し、気相中(MP2/6-311++G**//B3LYP/6-31+G**) または 溶媒中 (PCM(solvent)/MP2/6-311++G**//PCM(solvent)/B3LYP/6-31+G**)での各神経剤と OH^- との反応について計算を行った(Gaussian 09 または Gaussian 16 を使用)。その結果、ノビチョクは脱離基としてサリンと同じ F 原子を有するものの、加水分解反応の活性化エネルギーはサリンよりも VX に近く、加水分解を受けにくいことが明らかとなった。



1) Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, Chemical Weapon Convention, <http://www.opcw.org> (accessed 7 December 2021).

2) M. Otsuka*and H. Miyaguchi, *Chem. Phys. Lett.*, **2021**, 785, 139116.