

IDENTIFIKACE POTENCIÁLNÍCH ORGANICKÝCH FOSFOROVÝCH OTRAVNÝCH LÁTEK

Enquist, J., Hesso, A. et al.: Identification of Potential Organophosphorus Warfare Agents. The Ministry of Foreign Affairs of Finland, Helsinki 1979

Studie kolektivu devíti autorů převážně z helsinské university vznikla na základě požadavku finského ministerstva zahraničí pod vedením profesora J. K. Miettinen, ředitele odboru pro vědu a technologii poradního sboru pro odzbrojení.

Je věnována výběru instrumentálních metod a odpovídajících referenčních dat na základě jejich vhodnosti k standardnímu užití k identifikaci potenciálních organických fosforových bojových otravných látek ve stopových množstvích.

Vývoj analytických postupů pro stopová kvan-
ta k verifikaci otravných látek se v posledních letech rychle rozvíjí. Citlivost, reprodukovatelnost a spolehlivost nových přístrojových analytických postupů vzrostla, takže prakticky každá chemická substance může být zjištěna, identifikována a stanovena ve velmi nízkých koncentracích i v komplikovaných vzorcích.

Ověření přítomnosti nebo nepřítomnosti otravných látek, jejich prekurzorů nebo rozkladných produktů je dnes principiálně možné každou technicky vysoce vyspělou a dokonale vybudovanou analytickou laboratoří z jakéhokoliv podezřelého vzorku. Moderní analytické metody, široce využívané ve stopové analýze v oboru životního prostředí, reziduí pesticidů a

v obdobných oborech jsou po modifikaci vhodné i pro verifikaci bojových otravných látek.

Aby byly získány spolehlivé výsledky a aby se zamezilo falešným interpretacím analytických údajů v neznámých vzorcích, je nutno postupovat standardizovanými postupy s využíváním odkazů na rozsáhlou banku dat.

Vypracování takového analytického programu, mezinárodně použitelného, je velmi významné pro řešení všech technických problémů spojených s chemickým odzbrojením, snížením zásob a národní a mezinárodní kontrolou a ověřením těchto opatření.

Tato práce, vydaná finským ministerstvem zahraničí, vypracovaná z jeho popudu jako vklad pro práci výboru pro odzbrojení, je počinem, který má přispět k zákazu chemických zbraní a jejich kontrole. Je založena na experimentálních pracích zahájených v r. 1973 finskou skupinu pro „vývoj národní báze pro kontrolu chemických zbraní k možnému budoucímu mezinárodnímu použití“.

Studie se člení do šesti kapitol, obsahujících po úvodu zdůvodnění volby analytických technik, modelových sloučenin, výběr nejvhodnějších referenčních dat a popis navrhovaného identifikačního postupu a závěry. V dodatcích jsou obsaženy referenční údaje o 57 potenciál-

ních nervových jedech a aplikace navrženého identifikačního postupu a několik rejstříků.

Autoři se ve výběru analytických metodik orientují na plynovou chromatografii na skleněné kapilární koloně s vysokou rozlišovací schopností (HRGC). Pro důkaz struktury jednotlivých komponent separovaných HRGC jsou nejvhodnější hmotnostně spektrometrické techniky. Úspěšně se použily elektronová (EI) a chemická ionizační (CI) technika pro analytické identifikace stop a chemická ionizační hmotnostní spektrometrie (NICIMS).

I přes nižší citlivost (ve srovnání s hmotnostní spektrometrií) pro předběžnou kvalitativní a kvantitativní charakteristiku vzorků podezřelých na přítomnost organických fosforových nervových jedů vypadá jako užitečné využití jaderné magnetické rezonance, zvláště ^{31}P a ^{19}F NMR spektroskopie, zatímco ostatní běžně užívané techniky, jako ^1H a ^{13}C NMR spektrometrie a infračervená spektroskopie mají jen velmi omezené použití pro nízkou citlivost a nutné úpravy vzorku.

Pro tuto práci autoři v mikroměřítku syntetizovali 57 potenciálních nervově paralytických látek, a to O-alkylmethylfluorofosfonátů, O-alkylethylfluorofosfonátů, O-alkyl-N, N-dimethylamidokyanfosfátů, O-alkyl-S-(2-dialkylaminoethyl)-alkylthiofosfonátů a 4-alkyl-2,6,7-trioxa-1-fosfabicyklo[2.2.2]oktanů a jejich 1-oxidů a 1-sulfidů.

Z uvedeného je vidět, že zvláště pokud jde o předposlední skupinu vysoce perkutánně účinných látek a poslední skupinu nových nervových jedů, které neinhibují cholinesterázy, autoři se orientují skutečně na nejnovější látky.

Vlastní analytický soubor dat je založen na

plynové chromatografii s kapilární skleněnou kolonou. Jako detektory se používají plamen-ionizační detektor (FID), alkalický plamen-ionizační detektor (AFID), fotoionizační detektor (PID), plamenofotometrický detektor (FPD) s měřením odezvy na fosfor a síru. Identifikace se provádí retenčními parametry (tj. relativními retenčními časy, RRT a retenčními indexy) a ve spojení s hmotnostní spektrometrií.

Na základě toho se navrhuje obecné schéma identifikačního systému, zahrnujícího odběr vzorku, jeho úpravu a obohacení, dále je zařazen test na inhibici cholinesterázy, obecná analýza P a F s použitím NMR spektrometrie $^{31}\text{P}/^{19}\text{F}$, dále organická stopová analýza s použitím plynové chromatografie s detektory FID, AFID, PID s retenčními ukazateli a konečně studium jednotlivých komponent s použitím hmotnostní spektrometrie při využití modelových sloučenin.

Nejcennější částí, představující banku dat, jsou dodatky obsahující referenční údaje o jednotlivých sloučeninách. Na uvedených datech je cenná jejich rozsáhlost, přesnost a popis experimentálních podmínek. O rozsahu a hutnosti práce svědčí, že vedle textu je na 199 stranách obsaženo 141 obrázků a 319 tabulek.

Práce zaujme svou komplexností, experimentální dokonalostí při orientaci na nejprogresivnější instrumentální postupy. Představuje tak vysoce kvalifikovaný vklad finských chemiků při snaze o chemické odzbrojení a jeho verifikaci. Může být využita všemi vojenskými i průmyslovými laboratořemi, které se s jejím použitím mohou začlenit do systému ochrany proti chemickým zbraním.

Plk. doc. Ing. Jiří Matoušek, DrSc.