

二维相关谱在环境科学中的应用与展望

杨仁杰¹, 连增艳¹, 董桂梅¹, 杨延荣¹, 吴楠¹, 杨帆¹, 刘新媛¹, 杨静慧^{2*}

1. 天津农学院工程技术学院, 天津 300384

2. 天津农学院园艺园林学院, 天津 300384

摘要 近年来,随着世界经济的快速发展,大量有害物质排放到环境中,全球环境问题日益严重。光谱检测分析技术由于其快速、便捷、可实现实时现场原位分析检测的特点,已经广泛的应用于水质、大气和土壤环境的检测分析。环境系统是一个开放复杂的体系,容易受到很多因素的影响,常规一维光谱技术难以从复杂的环境体系中提取感兴趣组分的特征信息。二维相关谱技术表征的是随特定外扰变化的信息,不仅能提取复杂环境中微弱的、被覆盖的特征光谱信息,而且还可以提供这些特征信息之间的关系。在综述二维相关谱技术近些年新发展的基础上,详细介绍了该技术在水、土壤和空气环境分析中的应用,其中包括水中农药残留、水中有机污染物定性定量分析、海洋黏液物质和海洋泡沫的形成机理;土壤中有有机污染物定量分析、土壤污染物修复吸附机理;大气中气溶胶形成机理,污染气体定性定量分析。最后,详细介绍了二维相关谱在环境中有机质分子特性及与其他金属离子相互作用机理研究中的应用,指出二维相关谱在环境科学领域研究中具有广阔的应用前景。

关键词 二维相关谱;环境科学;污染物;应用

中图分类号: X55 **文献标识码:** R **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)06-1672-05

引言

随着全球经济的快速发展,以及工农业生产的扩大,大量的废水、废气、有害物质被排放到水、大气和土壤中,给人们赖以生存的环境产生了很大的影响。这些排放的有害物质进入环境不仅严重威胁人体的健康,而且也破坏了自然生态系统,已成为制约全球经济和良好生存环境可持续发展的最重要的因素之一。2013年以来,我国四分之一国土都受到雾霾的影响,人们谈之色变的PM_{2.5},严重影响到国民的生活活动和身体健康。为了保护环境,建立全方位的环境保护大战略,我国国务院分别于2013年,2015年和2016年先后出台了“大气十条”、“水十条”和“土十条”,要求各部门开展环境污染的全面普查和动态监测。因此,探索一种快速、便捷、可实时现场原位分析的环境污染检测方法,对于全面监测环境污染状况,预防环境污染事件发生以及环境的修复都具有十分重要的意义。

目前,对于环境中污染物的检测常用的方法有化学分析

法、光谱法、色谱和质谱等方法,但就快速便捷而言,光谱检测方法有明显优势,因此被广泛地应用于环境污染物的毒理学和形态学分析、污染物的定性定量分析、及污染物在环境中的迁移转化和修复等研究中。但环境是一个由生物和非生物所组成的复杂体系,一方面常规一维谱在检测分析过程中容易受很多因素的干扰,无法对感兴趣的待测组分特征信息进行有效提取;另一方面常规一维谱无法对环境中污染物分子基团之间的相互作用机理进行有效解析。而二维相关谱表征的是随外部扰动变化的特征信息,可有效提取复杂环境体系中待测组分的特征信息,相对于一维谱具有高的光谱分辨率,高的图谱解析能力,已被广泛应用于各个领域的分析检测中^[1-5]。同时,结合同步谱和异步谱,可以明确研究体系中各分子基团变化的顺序,特别适合研究污染物分子在环境中的演化和迁移规律、污染物修复过程中分子之间相互作用机理等。近些年来,随着二维相关谱技术的发展,国内外环境领域的学者采用相关谱技术开展了很多研究,取得一系列研究成果,为该技术在环境领域的检测分析奠定了基础。

本文在论述二维相关谱技术理论和方法最新发展的基础

收稿日期:2018-04-16,修订日期:2018-09-10

基金项目:国家自然科学基金项目(41771357,21607114,81471698),天津市自然科学基金项目(18JCYBJC96400,14JCYBJC30400,16JCQNJC08200),天津科技计划项目(17ZXYENC0080)和天津农学院科学研究基金项目(2017-D-03)资助

作者简介:杨仁杰,1978年生,天津农学院工程技术学院副教授 e-mail: rjyang1978@163.com

* 通讯联系人 e-mail: jinghuiyang2@aliyun.com

上,详细综述了该技术在水环境、土壤环境和大气环境检测分析中的应用,特别是在研究环境中有机质分子特性及与其他金属离子相互作用机理中的应用,并对其应用前景进行了展望。

1 二维相关谱技术的原理及发展

根据 Noda 理论,根据研究目标的需要,选择合适的外扰,并采集研究体系随外扰变化的一维动态光谱矩阵 $\mathbf{A}(m \times n)$,基于式(1)和式(2)进行相关计算,分别得到研究体系随外扰变化的同步和异步二维相关谱矩阵 $\Phi(\nu_1, \nu_2)$ 和 $\Psi(\nu_1, \nu_2)$

$$\Phi(\nu_1, \nu_2) = \frac{1}{m-1} \mathbf{A}^T \mathbf{A} \quad (1)$$

$$\Psi(\nu_1, \nu_2) = \frac{1}{m-1} \mathbf{A}^T \mathbf{N} \mathbf{A} \quad (2)$$

式中 m 为动态光谱数, n 为光谱变量数, T 表示转置, \mathbf{N} 为 Hilbert-Noda 矩阵。

自 1986 年 Noda 提出二维相关红外谱概念之后,该技术很快就拓展到拉曼、荧光、紫外等其他光谱学领域中,并衍生了两种不同光谱技术的相关—异谱相关谱技术,可以获得更全面的信息及不同谱学响应之间的关系^[6-7]。随着广义相关谱理论的发展,又衍生了三种新的相关谱分析技术:样品二维相关,杂化二维相关和移动窗口二维相关谱技术。样本相关谱技术是以样本为外扰,能提供研究体系中不同组分浓度之间变化的相互关系^[8]。杂化相关谱技术表征研究体系在多个外扰协同作用下,各外扰引起特征信息的变化以及这些变化之间的关系,在应用中具有实际意义^[9]。移动窗口二维相关谱技术表征的是大光谱数据中光谱强度在外扰变量方向上的变化,确定光谱强度随外扰突变的特征扰动点,在研究相变过程确定相变点方面具有优势^[10-11]。

众所周知,结合同步和异步二维相关谱,可以简单的推断出研究体系中吸光度变化的顺序。但在实际操作中,特别是对于存在大量交叉峰的研究体系,该方法就显得效率低下,而且容易出错。为了解决上述问题,提高分析效率,人们提出了修订二维相关谱(modified 2D correlation spectrum)方法^[12],其中包括 2DCDS(2D codistribution spectroscopy)技术,全相角图谱(global phase angle)、修订异步二维相关谱(sign-adjusted asynchronous spectrum),和融合二维相关谱(merged 2D correlation spectrum)等方法。为了提取复杂体系中单组份的特征光谱信息,实现其图谱解析,发展了投影二维相关谱技术^[13](projection 2D correlation analysis);为了解决同步谱对重叠峰分辨率低的问题,发展了 Double 二维相关谱技术^[14]。

2 二维相关谱在环境科学中的应用

2.1 水环境检测分析中的应用

Gu 等以未被辛硫磷杀虫剂污染水的近红外光谱作为参考谱,对随水溶液中辛硫磷浓度变化的一维动态近红外光谱

进行相关计算,选择随辛硫磷浓度外扰变化敏感的 $5\,364.8 \sim 7\,552.9 \text{ cm}^{-1}$ 区间建立了水中辛硫磷农药的偏最小二乘判别模型,所建模型对校正集和预测集样品的判别正确率分别为 93.3% 和 97.8%^[15]。同时,也研究水中杀螟硫磷农药的二维近红外相关谱特性,选择随外扰杀螟硫磷农药浓度变化敏感的 $5\,365 \sim 6\,757$ 和 $6\,944 \sim 7\,800 \text{ cm}^{-1}$ 波数区间,建立了判别水中杀螟硫磷农药的数学模型,指出其所建立的方法对水中农药检测限可达 $1 \mu\text{g} \cdot \text{mL}^{-1}$ ^[16]。周长宏等以水溶液中多环芳烃(PAHs)浓度为外扰,构建二维相关荧光光谱,基于同步和异步谱交叉峰的正负和有无,实现了混合水溶液中蒽、菲、芘重叠荧光峰的有效解析,指出:基于二维相关荧光光谱技术对环境重叠的、相互覆盖的多组分 PAHs 荧光峰解析是可行的,可推广到复杂环境中其他污染物的检测分析^[17]。Yang 等将同步二维相关荧光光谱与多维偏最小二乘(N-PLS)方法结合对水中蒽和芘浓度进行同时测定,研究结果表明:基于二维荧光相关谱的 N-PLS 模型比三维荧光谱的 N-PLS 模型能提供更好的分析结果^[18]。

为了研究海洋中神秘团状黏液物质如何形成, Mecozzi 等人工合成了黏液物质,并采用二维相关红外和紫外-可见吸收光谱对其形成过程进行了研究^[19]。对于 *Asparagopsis armata* 和棕色藻类混合合成的黏液,在同步二维红外相关谱中,两种黏液物质在 $3\,350 \text{ cm}^{-1}$ 处都存在较强的自相关峰,其主要来自—OH 基团的吸收,表明羟基在形成稳定的黏液物质过程中起着关键的作用;在 $1\,125 \text{ cm}^{-1}$ (碳水化合物)和 $1\,650 \text{ cm}^{-1}$ (蛋白质)处出现弱的自相关峰,表明碳水化合物和蛋白质对黏液物质的形成具有促进作用。结合异步二维红外相关谱,指出在黏液形成过程中羟基基团与碳水化合物和蛋白质中的—C—O 基团,以及脂族化合物的脂肪链基团并不是线性关系变化,即羟基基团起重要关键作用,其余基团起辅助作用。最后,通过异谱红外-紫外相关谱研究了当海水中存在铜和铅离子时,对黏液形成的影响。同时, Mecozzi 等在采集不同基地海洋泡沫的基础上,采用 double 二维相关谱技术研究了海洋泡沫分子结构特征及各分子基团之间的相互作用,指出不同基地海洋泡沫结构不同取决于极性(氢键)基团和碳水化合物蛋白质和脂质等非极性基团(范德瓦尔斯和 $\pi-\pi$)之间的相互作用^[20]。Chen 等以吸附时间为外扰,基于二维红外相关谱研究了不同 pH 值条件下腐殖酸(HA)与二氧化钛纳米颗粒(TiO_2 NPs)之间的相互作用,揭示了吸附机理,指出:通过二维相关谱技术,可以明确二氧化钛纳米颗粒吸附过程中各官能团发生的顺序,有助于更好的理解其在水环境中的归属、特性及环境效应^[21]。

2.2 土壤环境检测分析中的应用

针对土壤中 PAHs 污染现状,杨仁杰等建立一种基于二维相关荧光光谱土壤中 PAHs 的检测方法^[22]。以土壤中典型的 PAHs 蒽和菲为研究对象,以激发波长为外扰,构建二维相关荧光光谱。在此基础上建立了定量分析土壤中蒽和菲浓度的 N-PLS 模型,对蒽的校正均方根误差(RMSEC)和预测均方根误差(RMSEP)分别为 4.33×10^{-4} 和 $5.55 \times 10^{-4} \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$;对菲的 RMSEC 和 RMSEP 分别为 5.20×10^{-4} 和 $4.80 \times 10^{-4} \text{ g} \cdot \text{g}^{-1}$ 。最后,为了比较,建立了三维荧光的 N-PLS

模型。研究表明：基于二维相关荧光光谱直接检测土壤中 PAHs 污染物不仅可行，而且能提供更好的分析结果。同时，作者分别以土壤粒径大小和含水率为外扰，构建了二维相关荧光光谱，研究了土壤粒径和含水率对 PAHs 荧光特性的影响^[23]，提出通过建立 PAHs 荧光强度、瑞利散射光强度与土壤理化参数之间的关系，有可能实现土壤理化参数对 PAHs 荧光强度影响的校正。

Yan 等基于二维相关红外光谱技术，以 K 离子饱和并均一化处理后的蒙脱土为吸附剂，研究了不同 PH 值条件下吸附质恩诺沙星抗菌药在蒙脱土界面的吸附机理^[24]。结合同步和异步谱推断：在酸性条件下，吸附过程官能团发生的顺序为：1 302 cm^{-1} 处峰 ($-\text{NH}^+$) \rightarrow 1 264 cm^{-1} (COOH) 和 1 394 cm^{-1} (COO^-)。同时，作者还研究了蒙脱土界面对黄腐酸和恩诺沙星吸附(双溶质吸附)过程的二维相关谱图，推断 1 264 cm^{-1} (COOH) 处峰强度先于 1 302 cm^{-1} ($-\text{NH}^+$) 发生变化，指出：恩诺沙星的哌嗪氨基在酸性条件下与黄腐酸发生了相互作用，黄腐酸的存在改变了恩诺沙星官能团的吸附顺序。

2.3 大气环境检测分析中的应用

Ofner 等采用二维相关谱技术分别研究了在高低浓度 Cl_2 和 α -pinene 下，卤素诱导气溶胶(XOA)形成过程中光化学属性的变化。对于低浓度条件，XOA 形成过程中分子官能团发生的顺序为：C—Cl 键形成和 HCl 释放 \rightarrow C=O 键和 CO_2 释放；对于高浓度条件：C—Cl 键形成 \rightarrow 羧酸或羰基化合物的形成；烯烃 C=C 伸缩振动尖锐吸收(1 650) \rightarrow C=O 键的形成，指出：二维相关谱技术可以用于二次有机气溶胶的生长机理研究^[25]。赵安新等采用二维相关红外光谱技术对多组分混合气体中同分异构体重叠峰进行了有效解析。二维相关光谱技术也被应用于定量分析空气中污染物浓度反演波长的选择。汪曦等基于二维红外相关谱研究了大气中 SO_2 、NO 和 NO_2 的光谱特征，确定了最优定量波数区间。李红莲等以温度为外扰，对不同温度下 SO_2 差分吸收截面数据进行同步相关计算，优选 300.5~310 nm 波长范围用于天津大学校园内空气中 SO_2 气体的测定中，指出经与优选前相比，优选后平均测量误差和相关系数都得到明显改善[可参考本刊 34(10): 2623; 29(7): 1835; 33(9): 2383]。

2.4 环境中有机质分子特性及与其他金属离子相互作用研究中的应用

Abdulla 等基于二维相关谱技术研究了 Elizabeth River/Chesapeake Bay 的高分子量溶解有机物的动力学特征，发现其主要是由具有相似骨架结构但官能团有显著差异的三种化合物组成，指出：二维相关谱是一种强大的生物地球化学分析工具，可以用来研究复杂有机物在环境中的迁移及所引起的环境效应变化^[26]。Li 等采用二维红外相关谱技术研究了 Lake Superior 湖中 0~10 cm 沉积岩中有机质组分随深度的变化，研究表明，脂肪酸酯和碳水化合物随深度的增加快速发生降解，降解顺序为蛋白质中的羧基(脂肪酯和酰胺) \rightarrow 碳水化合物 \rightarrow 粘土和生物硅中的芳香化合物^[27]。Hur 等以紫外线辐射时间为外扰，研究了腐殖酸和黄腐酸随时间的降解变化，确认两种腐殖质具有三个吸收带，其发生的顺序

为：290~400 nm \rightarrow 200~250 nm \rightarrow 250~290 nm^[28]。

同时，二维相关谱技术也被应用到环境中有机质(DOM)与金属的相互作用研究中。张鹏和何小松将同步荧光和移动窗口二维相关谱技术结合，研究了填埋垃圾渗滤液中溶解有机质在不同环境介质中分子构型的变化^[29]。Xu 等将二维相关谱技术与紫外-可见吸收光谱结合，分别研究了从植物体内提取的 MDOM 和藻类提取中 ADOM 与重金属的络合过程，指出 Cu 离子比 Zn 离子更容易与多环芳香族发色团发生络合反应^[30]。Chen 等采用同谱二维相关红外、荧光光谱以及异谱红外-荧光相关谱技术研究了 Cu 离子与腐殖酸络合过程中相互作用机理及相关基团信息顺序变化^[31]。Nakashima 等利用二维相关荧光光谱技术研究了腐殖酸与 Ca^{2+} 和 Pb^{2+} 之间的相互作用，表明两个波带来自不同组分，并揭示了腐殖酸组成结构的变化次序^[32]。与其他金属离子相比，铝离子作为起凝剂，不仅可以与腐殖酸发生配合，也可吸附 $\text{Al}(\text{OH})_{3(s)}$ 表面的腐殖酸。因此，Jin 等利用铝离子的混凝特性，基于二维相关谱技术研究了其与腐殖酸之间的相互作用。在 pH 为 5 时，混凝过程中腐殖酸结构变化顺序为：1 715 cm^{-1} (羧酸 C=O) \rightarrow 1 610 和 1 406 cm^{-1} (COO^-) \rightarrow 1 562 cm^{-1} (氨基酸 II 带 NH 变形) \rightarrow 1 104 cm^{-1} (脂肪族羟基 C—OH)；在 pH 为 7 时，混凝过程中腐殖酸结构变化顺序为：1 390 \rightarrow 1 582 cm^{-1} (COO^-) \rightarrow 1 065 cm^{-1} (脂肪族羟基 C—OH)^[33]。Yu 等采用二维红外相关谱技术研究长期施肥处理(21 年)土壤中溶解有机质与 $\text{Al}(\text{III})$ 的络合机理，指出相对于三维荧光平行因子分析，二维相关谱技术同时可提供与 $\text{Al}(\text{III})$ 发生络合反应的荧光类和非荧光类物质信息^[34]。Wen 等采用二维相关谱技术对短期(3 年)和长期(22 年)施肥土壤中溶解有机质中与 $\text{Al}(\text{III})$ 的相互作用进行了研究，指出施肥改变了有机质与 $\text{Al}(\text{III})$ 的络合特征，但不同肥料对其影响机理不同^[35]。Sun 等通过二维相关谱技术研究土壤中 Cd 离子与 DOM 相互作用，指出：在有机肥处理下，Si 和 Fe 矿物对 DOM 与 Cd 离子的结合起关键作用，而在 NPK 肥料处理下，Si—O 和 Fe—O 基团对二者的结合不产生影响^[36]。

3 前景展望

从上述国内外研究进展可以看出，二维相关谱技术已经在环境科学的诸多领域得到应用。生命与环境质量密不可分，随着二维相关谱技术的发展，将该技术与其他技术结合起来研究环境科学问题是将来重要的发展方向。

(1)对环境物质间相互作用研究方面，二维相关谱反映的是环境中物质组成和分子结构随外扰的动态变化，因此在研究环境中复杂物质间相互作用动力学过程具有很好的应用前景，特别是在研究环境中有机质与其他物质间相互作用方面具有独特优势^[37]。

(2)对环境中污染物检测方面，可以通过二维相关谱技术选择随待测污染物浓度变化敏感的、相关性高的光谱区间来建立定量分析环境中污染物的数学模型。同时，相对于常规光谱技术，二维相关谱技术不仅能提供各官能团的特征信息，而且还能提供各官能团之间相互作用信息，因此将

2T2D(two-trace two-dimensional)相关谱技术^[38]与多维化学计量学结合对环境中污染物浓度进行定量分析,可以提供较好的分析结果。

(3)对环境生态修复方面,二维相关谱技术不仅能对环境体系中不同官能团重叠信息进行有效解析,而且能确定修复过程中污染物不同分子基团的降解顺序,为揭示污染物降解途径和动力学过程提供新的思路。

总之,随着二维相关谱技术应用领域的不断拓展,会不断涌现出新的理论和方法,以及与其他分析技术、光谱预处理技术和化学计量学技术更紧密的结合,使得该技术不断发展和完善。笔者有理由相信二维相关谱技术必将在环境污染物的迁移和转化机理、污染物的定性定量分析、环境修复等方面取得更迅速的发展。

References

- [1] Noda I. *Journal of Molecular Structure*, 2014, 1069: 3.
- [2] Noda I. *Journal of Molecular Structure*, 2014, 1069: 23.
- [3] Yang Renjie, Liu Rong, Xu Kexin, et al. *Anal. Methods*, 2013, 5: 5949.
- [4] Yang Renjie, Liu Rong, Xu Kexin, et al. *Applied Spectroscopy*, 2013, 67(12): 1363.
- [5] Shashilov V A, Ledev I K. *Journal of Raman Spectroscopy*, 2009, (40): 1749.
- [6] Amari T, Ozaki Y. *Macromolecules*, 2002, 35(21): 8020.
- [7] Kubelka J, Pancoska P, Keiderling T A. *Applied Spectroscopy*, 1999, 53(6): 666.
- [8] Sasic S, Muszynski A, Ozaki Y. *J. Phys. Chem. A*, 2000, 104: 6380.
- [9] Wu Y, Jiang J H, Ozaki Y. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2002, 106(11): 2422.
- [10] Sasic S, Ozaki Y. *Appl. Spectrosc.*, 2003, 57: 996.
- [11] Sasic S, Katsumoto Y, Sato N, et al. *Anal. Chem.*, 2003, 75: 4010.
- [12] Noda I. *Journal of Molecular Structure*, 2016, 1124: 29.
- [13] Noda I. *Journal of Molecular Structure*, 2010, 974(1-3): 116.
- [14] Noda I. *Journal of Molecular Structure*, 2010, 974(1-3): 108.
- [15] Gu C, Tang Q, Xiang B, et al. *Analytical Letters*, 2015, 48(9): 1481.
- [16] Gu C, Xiang B, Xu J. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2012, 97: 594.
- [17] ZHOU Chang-hong, ZHAO Mei-rong, YANG Ren-jie, et al(周长宏, 赵美容, 杨仁杰, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2016, 36(2): 449.
- [18] Yang R, Dong G, Sun X, et al. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2018, 190: 342.
- [19] Mecozzi M, Pietroletti M, Gallo V, et al. *Marine Chemistry*, 2009, 116(1-4): 18.
- [20] Mecozzi M, Pietroletti M. *Environmental Science and Pollution Research*, 2006, 23(22): 22418.
- [21] Chen W, Qian C, Liu X Y, et al. *Environmental Science & Technology*, 2014, 48(19): 11119.
- [22] YANG Ren-jie, WANG Bin, DONG Gui-mei, et al(杨仁杰, 王斌, 董桂梅, 等). *Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)*, 2019, 39(3): 818.
- [23] YANG Ren-jie, DONG Gui-mei, YANG Yan-rong, et al(杨仁杰, 董桂梅, 杨延荣, 等). *Optics and Precision Engineering(光学精密工程)*, 2016, 24(11): 2665.
- [24] Yan W, Zhang J, Jing C. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2013, 390(1): 196.
- [25] Ofner J, Kamilli K A, Held A, et al. *Faraday Discussions*, 2013, 165: 135.
- [26] Abdulla H A, Minor E C, Hatcher P G. *Environmental Science & Technology*, 2010, 44(21): 8044.
- [27] Li H, Minor E C, Zigah P K. *Organic Geochemistry*, 2013, 58: 125.
- [28] Hur J, Jung K Y, Jung Y M. *Water Research*, 2011, 45(9): 2965.
- [29] ZHANG Peng, HE Xiao-song(张鹏, 何小松). *Environmental Chemistry(环境化学)*, 2016, 35(7): 1500.
- [30] Xu H, Yu G, Yang L, et al. *Journal of Hazardous Materials*, 2013, 263: 412.
- [31] Chen W, Habibul N, Liu X Y, et al. *Environmental Science & Technology*, 2015, 49(4): 2052.
- [32] Nakashima K, Xing S, Gong Y, et al. *Journal of Molecular Structure*, 2008, 883: 155.
- [33] Jin P, Song J, Wang X C, et al. *Journal of Environmental Sciences*, 2018, 64: 181.
- [34] Yu G H, Wu M J, Wei G R, et al. *Environmental Science & Technology*, 2012, 46(11): 6102.
- [35] Wen Y, Li H, Xiao J, et al. *Chemosphere*, 2014, 111: 441.
- [36] Sun F S, Polizzotto M L, Guan D X, et al. *Journal of Hazardous Materials*, 2017, 326: 18.
- [37] Park Y, Jin S, Noda I, et al. *Journal of Molecular Structure*, 2018, 1168: 1.
- [38] Noda I. *Journal of Molecular Structure*, 2018, 1160: 471.

Application and Prospect of Two-Dimensional Correlation Spectroscopy in Environmental Science

YANG Ren-jie¹, LIAN Zeng-yan¹, DONG Gui-mei¹, YANG Yan-rong¹, WU Nan¹, YANG Fan¹, LIU Xin-yuan¹, YANG Jing-hui^{2*}

1. College of Engineering and Technology, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300384, China

2. College of Horticulture and Gardening, Tianjin Agricultural University, Tianjin 300384, China

Abstract In recent years, with the rapid development of world economy, a large number of harmful substances are discharged into the environment, and the global environmental problems are becoming increasingly serious. Spectroscopic methods have been widely used in the detection and analysis of water quality, atmosphere and soil environment due to their speed, simplicity for real-time, in-situ field analysis. However, the environment system is an open and complex system, which is easily affected by many factors, so it is difficult to extract the characteristic information of the interesting components from the complex environment system based on the conventional one-dimensional spectroscopy. Two-dimensional (2D) correlation spectroscopy, which presents characteristic spectral information changes in response to the special external, can not only extract the weak and covered spectral information in the complex environment, but also provide the relationship between these peaks. On the basis of a review of the new development of 2D correlation spectroscopy in recent years, the application of the technology in the analysis of water, soil and atmosphere environment was introduced in detail, including pesticide residues in water, qualitative and quantitative analysis of organic pollutants in water, the formation mechanism of marine mucus and foam, the quantitative analysis of organic pollutants in soil, the mechanism of repairing and adsorption for soil pollutants; the formation mechanism of aerosol in atmosphere, and the qualitative and quantitative analysis of polluted gases. Finally, it was introduced in detail that the application of 2D correlation spectroscopy to the study of the molecular characteristics of organic matter and the interaction mechanism with other metal ions in the environment. It was pointed out that 2D correlation spectroscopy has broad application prospects in the field of environmental science.

Keywords Two-dimensional correlation spectroscopy; Environmental science; Pollutants; Application

(Received Apr. 16, 2018; accepted Sep. 10, 2018)

* Corresponding author