



文章栏目：学术短评

DOI 10.12030/j.cjee.202009053

中图分类号 X131.2

文献标识码 A

王东升. 环境水化学过程光谱量子信息识别与定量表征技术[J]. 环境工程学报, 2020, 14(10): 2587-2588.

WANG Dongsheng. Identification of quantum optical information from environmental hydrochemical processes and its application in quantitative characterization[J]. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2020, 14(10): 2587-2588.

环境水化学过程光谱量子信息识别与定量表征技术

王东升^{1,2}

1. 中国科学院生态环境研究中心, 环境水质学国家重点实验室, 北京 100085

2. 中国科学院生态环境研究中心(义乌)长三角中心, 义乌 322001

作者简介: 王东升(1969—), 男, 博士, 研究员。研究方向: 环境水质学。E-mail: wgds@rcees.ac.cn

早在 20 世纪初, 普朗克、爱因斯坦等学者即提出了光的“波粒”二象性。但直到 20 世纪 80 年代, 随着理论化学计算和激光技术的快速发展, 为光的粒子属性研究提供了理论和实验条件, 光的量子属性才真正被广泛认知和利用。紫外-可见光吸收光谱、荧光光谱是分子内电子能级跃迁产生的光谱, 受分子振动、转动影响较为显著, 呈宽带光谱, 其量子属性目前仍未受到学术界足够的重视, 尤其是对于复杂体系^[1]。为此, 北京大学环境科学与工程学院晏明全研究员领衔的国际联合研究团队近年来基于光的“粒子”性视角, 阐明了水体中溶解性有机物 (dissolved organic matter, DOM) 在环境水化学过程中表现出的光谱响应信号所蕴含的微观物质结构、质子/电子转移过程等信息, 进而从量子尺度揭示水化学过程的本质, 从理论、方法、仪器装备到应用取得了系统性成果。相关成果相继发表在《Water Research》和《Environmental Science & Technology》等领域顶级期刊^[2-4]上。

DOM 主要来源于动植物残体腐烂、藻类繁殖代谢残余物及人为活动产物, 无论是在微观电子传递过程中还是在全球物质循环过程中均起到“中枢”作用。有关 DOM 的表征与行为效应控制, 一直是环境、地球化学、大气科学等相关学科领域的研究热点和难题。FT-MS、NMR、X-ray、FT-IR 等先进表征方法需要对环境样品进行浓缩、提纯等预处理, 不仅操作复杂, 而且会改变 DOM 的特性。紫外-可见吸收光谱技术具有灵敏度高、经济、操作便捷等优点, 被广泛应用于 DOM 的分析与监测。但由于 DOM 成分复杂、光团叠合干扰, 导致其紫外-可见吸收光谱强度随波长呈指数下降, 无明显的特征峰, 故此前的研究者仅基于 Beer-Lambert 线性光学经验定律, 利用 UV_{254} 、 DA_{272} 、 $E_3:E_5$ 等参数指示 DOM 的浓度、芳香类基团含量、分子大小等有限的信息。为克服上述难题, 晏明全团队通过实验方法和算法创新, 消除了惰性组分和相关环境过程的干扰, 识别出 DOM 中活性基团在特定环境过程中产生的微弱的光谱响应信号; 同时, 基于理论化学计算和飞秒激光瞬态光谱光学实验, 初步阐明了光谱信号与 DOM 微观物质结构、质子/电子转移及电子云轨道分布变化的内在关联, 从而突破了对 Beer-Lambert 定律的机械认识, 将光谱量子信息理论与水化学基本原理有机结合起来, 建立起水解(酸碱平衡)、络合、氧化等主要水化学反应过程定量表征和非线性描述方法体系(见图 1); 此外, 针对现有仪器不能满足新方法对实验精度要求的问题, 以实验室科学研究和外场在线监测为两大主要应用场景, 研制了水化学反应过程精确模拟与微量 DOM 在线监测仪器装备。上述新方法及新装备已成功应用于包括巴西亚马逊河、美国密西西比河、法国塞纳河、太平洋近海及深海, 我国长江、黄河、南水北调输配水等地表水, 以及地下

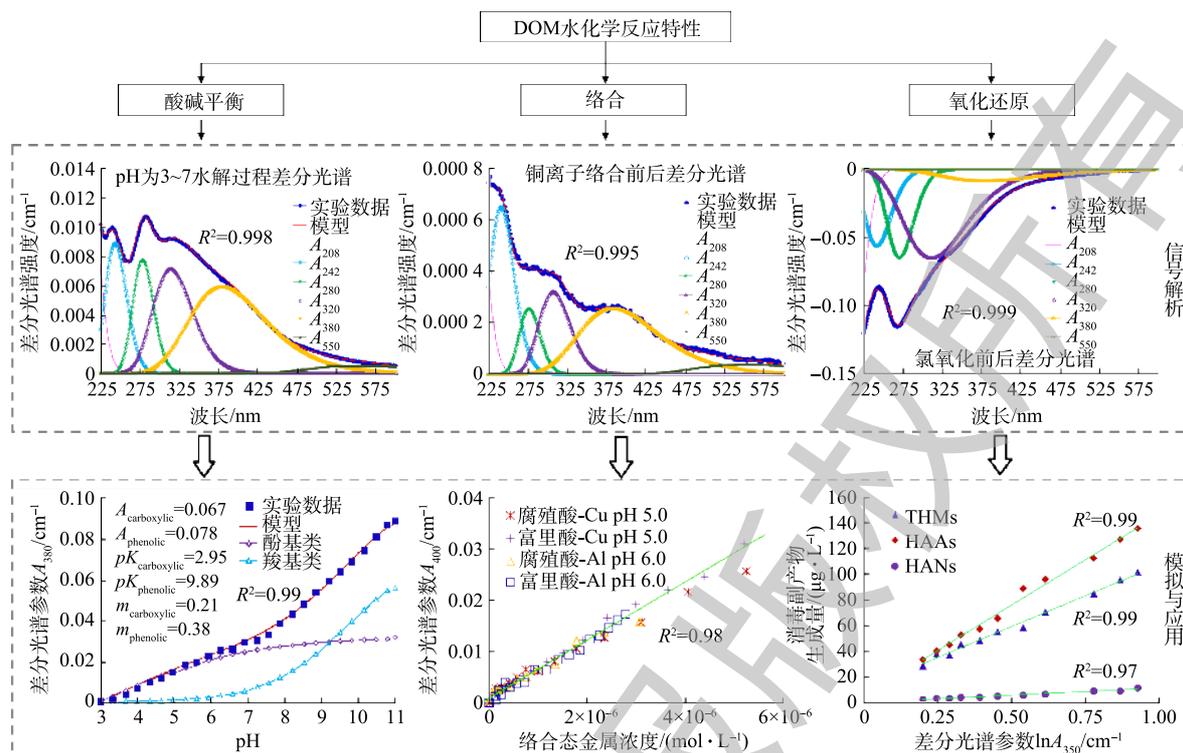


图1 基于紫外-可见光谱效应的DOM水化学特性表征与模拟方法体系示意图

Fig. 1 Sketch map of characterization and modeling the DOM hydrochemical properties using UV-vis spectroscopy

水、生活污水、工业废水等各类水体中DOM的特性研究。上述研究成果表明，针对环境学科的特点和需求，通过跨学科交叉研究，将物理、化学等相关学科前沿理论与环境问题有机结合，能显著拓展光谱技术的科学内涵和应用空间，从而使传统技术方法焕发出新的活力。



晏明全(1976—)，工学博士，北京大学环境科学与工程学院研究员，主要从事饮用水安全保障理论与技术、环境量子光学领域的研究与教学工作，在利用紫外-可见光谱技术(UV-vis)表征微量水溶性有机物(DOM)方面作出了具有特色的工作。主持并参与了国家重点研发项目、国家自然科学基金项目等课题10余项；发表论文80余篇；获日内瓦国际发明展金奖、中国产学研合作创新成果一等奖等多种奖项。E-mail: yanmq@pku.edu.cn

参考文献

- [1] RUGGENTHALER M, TANCOCNE-DEJEAN N, FLICK J, et al. From a quantum-electrodynamical light-matter description to novel spectroscopies[J]. *Nature Reviews Chemistry*, 2018, 2(3): 16.
- [2] YAN M Q, HAN X Z, ZHANG C Y. Investigating the features in differential absorbance spectra of NOM associated with metal ion binding: A comparison of experimental data and TD-DFT calculations for model compounds[J]. *Water Research*, 2017, 124: 496-503.
- [3] YAN M Q, KORSHIN G V. Comparative examination of effects of binding of different metals on chromophores of dissolved organic matter[J]. *Environmental Science & Technology*, 2014, 48: 3177-3185.
- [4] YAN M Q, KORSHIN G V, CLARET F, et al. Effects of charging on the chromophores of dissolved organic matter from the Rio Negro basin[J]. *Water Research*, 2014, 59: 154-164.

(本文编辑: 张利田)