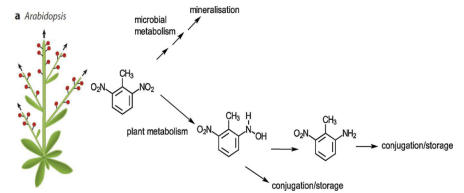


英国帝国理工学院发现硝基芳烃的还原代谢产物可通过食物链分布于环境中

硝基芳香类炸药如三硝基甲苯(TNT)和二硝基甲苯(DNT)都是对环境构成严重威胁的污染物,目前大量研究都是围绕TNT开展的,关于DNT知之甚少。帝国理工学院采用拟南芥(*Arabidopsis thaliana*)揭示了DNT四种异构体在植物体内的毒性,然后通过用DNT处理的拟南芥植物喂养蚜虫(Aphid),并暴露出与宿主植物相似的DNT异构体的毒性模式,从蚜虫体内回收代谢物,证明代谢物通过食物链的潜在运转。

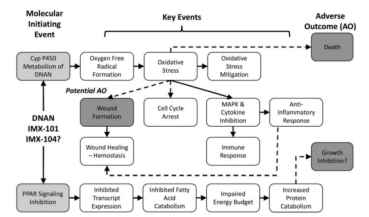
来源: Nisar N, Cheema K J, Powell G, et al. Reduced metabolites of nitroaromatics are distributed in the environment via the food chain[J]. *Journal of hazardous materials*, 2018, 355: 170-179.



美国陆军工程师研究和发展中心研究了IMX-101和IMX-104组分对于黑头呆鱼的毒性及协同作用机制

美国陆军的明确目标之一就是使用新的不敏感弹药(IMs)取代传统弹药。IMs化学品的毒性数据正在迅速扩大,但IMs通常为混合物,目前对混合物毒理则知之甚少。美国陆军工程师研究和发展中心(ERDC)采用转录组学方法探索DNAN、NTO、NQ及IMX-101和IMX-104弹药配方的毒性作用机制。结果表明DNAN是IMX-101毒性最有效的成分,NTO和NQ在IMX-101暴露中没有与DNAN协同作用,各成分毒性具有独立性。IMX-104配方的毒性受DNAN和RDX协同作用影响,二者的氧化应激缓解途径(Nrf2)存在的协同反应与交互作用。

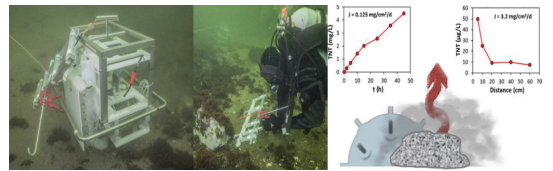
来源: Gust K A, Lotufo G R, Stanle J K, et al. Transcriptomics provides mechanistic indicators of mixture toxicology for IMX-101 and IMX-104 formulations in fathead minnows (*Pimephales promelas*). *Aquatic toxicology*, 2018, 199: 138-151.



德国基尔海洋研究中心研究了有毒弹药化合物在海洋中的溶解行为

德国基尔海洋研究中心在波罗的海建立了一个独特的海洋研究场地,用于研究弹药外壳腐蚀后有毒弹药化合物(MC,如TNT、RDX、DNB等)在海洋环境中的溶解通量。通过海底培养箱内弹药表面附近的MC溶解浓度来获得MC的原位溶解通量。结果显示,TNT、RDX及DNB的溶解通量分别为0.0047~0.277、0~0.11、0.00047~1.45 mg·cm⁻¹·d⁻¹。虽然在该研究的原位溶解通量大多低于实验室测试的溶出率,但结果仍清楚表明MC从水下弹药释放到波罗的海的水体中。

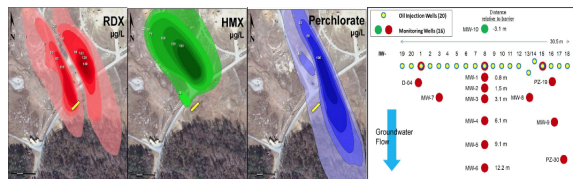
来源: Beck A J, Van der Lee E M, Eggert A, et al. In situ measurements of explosive compound dissolution fluxes from exposed munition material in the Baltic Sea[J]. *Environmental science & technology*, 2019, 53(10): 5652-5660.



美国奥普蒂姆联邦服务中心研究了被动式原位生物屏障用于处理地下水中硝胺炸药和高氯酸盐污染

美国奥普蒂姆联邦服务中心研究了被动式乳化油生物屏障和pH缓冲试剂在低pH含水层中修复RDX、HMX及ClO₄⁻污染的可行性。通过将特制乳化油和缓冲液注入浅层地下水土壤中形成生物屏障有效隔绝了爆炸物在地下水中的迁移行为,使爆炸物的浓度降低超过90%。这种具有pH缓冲作用的乳化油生物载体非常适合于露天焚烧/开放爆炸场地、弹药测试场地及爆炸物处理/训练等区域使用,并且不用考虑含水层中地下岩石不均匀性造成的影响。该方法除了注入pH缓冲试剂和乳化油基质外,不需要特殊操作及维护,并且对场所正在进行的没有影响。

来源: Fuller M E, Hedman P C, Lippincott D R, et al. In situ biobarrier for treatment of comingled nitramine explosives and perchlorate in groundwater on an active range[J]. *Journal of hazardous materials*, 2019, 365: 827-834.



中国工程物理研究院化工材料研究所研究了老黄素家族酶代谢TNT的分子机制

TNT污染已成为世界性环境问题。生物降解具有经济和绿色环保等优点,是最具潜力的消除TNT的方法之一。目前生物降解TNT多是通过硝基还原路径,得到的代谢产物仍然有毒,甚至比TNT更毒。近年发现的老黄素家族酶可以通过苯环还原路径实现TNT的去芳香化,有望实现TNT的开环降解。中国工程物理研究院化工材料研究所的研究人员通过分子动力学模拟方法,揭示了老黄素家族酶代谢TNT过程中关键步骤的分子机制,即 π - π 相互作用竞争机制。基于该分子机制,可以借助定点突变等策略实现老黄素酶家族完全矿化TNT,为TNT的生物修复提供新的思路。

源自: Zhilin Yang, Tong Wei, Hui Huang, et al. Insights into the Biotransformation of 2,4,6-trinitrotoluene by the Old Yellow Enzyme Family of Flavoproteins. A Computational Study[J]. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21: 11589-11598.

(中国工程物理研究院化工材料研究所 徐晓明 供稿)

