



**Somos calidad,
somos USC**

Tendencias de la espectroscopia infrarrojo cercano (NIRS) en el estudio de hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) en diferentes matrices

Autor

Juan Felipe Cuellar Ramírez

**Título por el que opta
Químico**

Directora

MSc. Sandra Patricia Castro Narvéez

Grupo de Investigación

Electroquímica y Medio ambiente (GIEMA)

**Línea de Investigación
Alimentos y Fármacos**

**Facultad de Ciencias Básicas
Química**

**Universidad Santiago de Cali
Santiago de Cali - Colombia**

2025

IMPACTOS

IMPACTO	PRODUCTO	BENEFICIARIO(S)
Científico	Modelo Quimiométrico Optimizado para la cuantificación de PAHs con NIRS.	Comunidad científica. Permite nuevas hipótesis y líneas de investigación sobre métodos de análisis rápidos, no destructivos y más ecológicos.
Tecnológico	Alcance tecnológico de Sensores NIR Portátil/Integrado de bajo costo y alta velocidad.	Industria, sectores ambientales que implementen la técnica para sus análisis de rutina
Técnico	Acercamiento a los protocolos Analíticos estandarizados para la detección de PAHs en matrices específicas (por ejemplo: suelo, aceite, agua).	Industria, sectores ambientales que implementen la técnica para sus análisis de rutina.
Ambiental	Aplicaciones a los sistema de Monitoreo Rápido de Suelos/Aguas Contaminadas por derrames de hidrocarburos.	Comunidades con problemas ambientales, organizaciones ambientales, industria.
Social	Establecer impactos de la herramienta de Control de Calidad Alimentaria (ejemplo para aceites comestibles o productos ahumados).	Comunidad en general, empresas reguladoras de la calidad ambiental, de alimentos.

Tendencias de la espectroscopia infrarrojo cercano (NIRS) en el estudio de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) en diferentes matrices

Juan Felipe Cuellar Ramírez

juan.cuellar02@usc.edu.co

Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente, Programa de Química,
Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali.
Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali-Colombia.

RESUMEN

La creciente preocupación por la contaminación ambiental y alimentaria por Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos (PAHs), compuestos de alta carcinogenicidad cuya detección actual es costosa y lenta mediante cromatografía, exige el desarrollo de métodos de análisis más rápidos y sostenibles. Este artículo presenta una revisión sistemática que evaluó y consolidó las aplicaciones de la espectroscopia infrarrojo cercano (NIRS) y la quimiometría para la detección, cuantificación y caracterización rápida, no destructiva y precisa de PAHs. La revisión se centró en 38 artículos científicos publicados entre 2018 y 2025 e indexados en bases de datos clave (Elsevier, Cell Press, ScienceDirect, Scopus) y motores de búsqueda como Google Scholar y Scielo. Los hallazgos confirman la versatilidad de NIRS con aplicaciones que abarcan desde el monitoreo de suelos y aguas contaminadas por la extracción de crudo y el desarrollo de fotocatalizadores, hasta el estudio de la presencia de PAHs en objetos astronómicos como la galaxia NGC 2782. En última instancia, la revisión valida el potencial de NIRS para el desarrollo de sensores portátiles de bajo costo, lo que representa un avance crucial para la vigilancia ambiental eficiente y la seguridad alimentaria.

Palabras clave: Quimiometría. Métodos no destructivos, Sensores Portátiles, Vigilancia Ambiental y alimentaria.

Trends in near-infrared spectroscopy (NIRS) in the study of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in different matrices

ABSTRACT

Growing concern about environmental and food contamination by polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), highly carcinogenic compounds that are currently detected using costly and time-consuming chromatography, calls for the development of faster and more sustainable analytical methods. This article presents a systematic review that evaluated and consolidated the applications of near-infrared spectroscopy (NIRS) and chemometrics for the rapid, non-destructive, and accurate detection, quantification, and characterization of PAHs. The review focused on 38 scientific articles published between 2018 and 2025 and indexed in key databases (Elsevier, Cell Press, ScienceDirect, Scopus) and search engines such as Google Scholar and Scielo. The findings confirm the versatility of NIRS with applications ranging from monitoring soils and waters contaminated by oil extraction and the development of photocatalysts to studying the presence of PAHs in astronomical objects such as the galaxy NGC 2782. Ultimately, the review validates the potential of NIRS for the development of low-cost portable sensors, representing a crucial advance for efficient environmental monitoring and food safety.

Keywords: Chemometrics. Non-destructive methods, Portable Sensors, Environmental and Food Monitoring

HIGHLIGHTS

- Innovaciones en técnicas analíticas y quimiométricas sobre espectroscopia infrarrojo cercano.
- Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) y su problemática ambiental: una variedad de enfoques científicos.
- Modelos teóricos y computacionales simulan la emisión de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) en nebulosas para astroquímica

1. INTRODUCCIÓN

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) son un grupo de contaminantes orgánicos conformados por múltiples anillos aromáticos fusionados y se pueden clasificar en dos grupos: bajo peso molecular (naftaleno, fluoreno, fenantreno) y alto peso molecular que presentan mayor biodisponibilidad en el medio ambiente y se constituyen en cuatro o más anillos aromático fusionados (Konstantinova et al., 2020). Los PAHs se producen principalmente durante actividades antropogénicas como la exploración/transporte de petróleo y combustión incompleta de materia orgánica. Son compuestos con baja volatilidad a temperatura ambiente insolubles en agua con alta persistencia en sistemas acuáticos (Sampaio et al., 2021)

Concentraciones elevadas de PAHs pueden ocasionar efectos inmediatos como náuseas, vómito, desorientación, entre otros (Mallah et al., 2021). Sin embargo, exposiciones prolongadas puede causar problemas respiratorios, sensibilidad en la piel, debido a la unión de receptor aril-hidrocarburo que puede conducir a modificaciones funcionales en la transcripción genética (Tang et al., 2023). Algunos PAHs pueden generar teratogenicidad (Freije et al., 2022), carcinogenicidad (Vijayanand et al., 2023), homeostasis ósea e inmunotoxicidad (Xi et al., 2022), deficiencia en la capacidad de reproducción (Kumar & Singh, 2022), asma bronquial (Wong et al., 2018), entre otras afecciones.

Las preocupaciones de la calidad del medio ambiente y la salud se vislumbran en diferentes iniciativas internacionales. Así, en de los objetivos del desarrollo sostenible definido en la agenda 2030 de la Organización de las Naciones Unidas (ONU) se establece la necesidad de garantizar atención sanitaria de calidad y promover el bienestar para todas las edades generando indicadores (ONU, 2015). Asimismo, el Parlamento Europeo y el Consejo de la Unión Europea presenta la “Directiva (UE) 2024/2881 de 23 de octubre de 2024” relacionada con la calidad del aire y una atmósfera más limpia en Europa. Para el año 2030 se esperan resultados positivos al llevar a cabo el “Plan de acción de contaminación cero» en el que pretenden reducir en más del 55% el impacto a la salud por causa de la contaminación atmosférica” (Directive, 2024).

La contaminación ambiental, especialmente por hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), ha representado un desafío global porque afecta tanto a la naturaleza como a la salud humana y se ha demostrado que causan toxicidad, carcinogénesis, mutaciones (Zhang et al., 2023). Se generan principalmente por actividades antropogénicas y su acumulación se presenta en diversas matrices, como sedimentos fluviales, alimentos procesados, aire urbano y sobre todo en suelos de explotación petrolera (Adade et al., 2024). Diversas estructuras moleculares se han reportado por la agencia de protección ambiental de los estados unidos (US EPA) como “contaminantes prioritarios”: Benzo[a]pyrene, Naphthalene, Phenanthrene, entre otras. Su peculiaridad que las hace especial es su prevalencia en los ecosistemas acuáticos, terrestres y atmosféricos. (Jacq et al., 2024). Según el Inventario Nacional de Emisiones de Contaminantes NPRI (1994-2018), se han liberado a la atmosfera un total 8449 toneladas de emisiones de PAHs de las cuales el 98% fue en el aire y menos del 1% en agua o suelo (Berthiaume et al., 2021). La American Chemical Society Published revelo que Asia, Europa, y América del norte fueron los mayores contribuyentes en las concentraciones de PAHs con 25%, 45% y 27% respectivamente (Wang et al., 2010).

La determinación cuantitativa y/o cualitativa de PAHs se ha realizado por gravimetría (M Pons-Jiménez , A Guerrero-Peña, J Zavala-Cruz, 2011), micro extracción de fase solida (Zhao et al., 2023), cromatografía de gases (Guangyu Dong et al., 2025), espectrometría de masas (Arena et al., 2024), espectrofluorometria (Lei et al., 2021),

entre otros. Los métodos anteriores, requieren procedimientos de química húmeda altamente sensibles para la detección e identificación de PAHs, como lo es la cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC-MS), si bien son eficaces y selectivos, también son costosos, lentos y necesitan una preparación de muestra compleja y destructiva impidiendo el análisis rápido y a gran escala in situ (Sales et al., 2023).

En particular, la CG-MS requiere pretratamiento de la muestra (secado, trituración, tamizado) seguido de las etapas de extracción, purificación o limpieza del extracto, llevando a una concentración adecuada del analito para su posterior determinación instrumental (Alassali et al., 2020). La extracción suele realizarse por hidrólisis alcalina y disolvente orgánico (extracción líquido-líquido), fase sólida y/o extracción de fluidos supercríticos. Lo anterior, hace que estos procesos sean lentos, costosos, dispendiosos y poco amigables con el medio ambiente. En contraste, la espectroscopia en el infrarrojo cercano (NIRS) se proyecta como una técnica prometedora dada su versatilidad en diferentes muestras análisis en tiempo real con equipos de bajo costo y no requiere gastos económicos en tratamientos de muestras.

En las últimas décadas, el uso de la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) ha incrementado significativamente. Esta técnica se basa en la interacción de la luz infrarroja (con longitudes de onda entre 780 y 2500 nm) con los enlaces moleculares, midiendo las vibraciones armónicas de compuestos orgánicos, principalmente C-H, N-H y O-H. La implementación del NIRS no solo optimiza los procesos de análisis al ser más rápida y menos invasiva que las técnicas tradicionales, sino que también garantiza el cumplimiento con las actualizaciones normativas vigentes, contribuyendo de manera crucial para el aseguramiento de la integridad de los seres humanos frente a la exposición a estos contaminantes. (Lou et al., 2024). La NIRS se sitúa a la vanguardia como una tecnología poderosa para caracterizar y monitorear las propiedades físicas y químicas de las moléculas (Lemmens et al., 2020) se destaca por su capacidad para proporcionar análisis rápidos y no destructivos de sustancias especialmente orgánicas. Modelos estadísticos como Distribución normal estándar (SNV), Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales (PLSR), derivada de Savitzky-Golay, Regresión de Vectores de Soporte (SVR), Random Forest (RF), análisis de componentes principales (PCA), prueba t pareada y técnicas como espectroscopia de reflectancia difusa (DRS) (Lei et al., 2021), FT-NIR (Argiriadis et al., 2024), imágenes hiperespectrales (Jacq et al., 2024); han aplicados en múltiples estudios relacionados con espectroscopia infrarrojo cercano.

La aplicabilidad de la NIRS en detección de PAHs abarca distintas áreas ampliando el rango de operación para industrias como petroquímica (Olatunde, 2021), (Bingari et al., 2023), agricultura y sus alimentos (Klimkowicz-Pawlas & Debaene, 2020), geoquímica (Karimian et al., 2024), bioquímica (Guimei Dong et al., 2024), nanotecnología (Jin et al., 2020), astroquímica (Anand et al., 2020) con los avances de telescopios de alta resolución se ha podido evidenciar PAHs en la formación y disipación energética del medio interestelar (ISM) y discos protoplanetarios. (Lange et al., 2024). Dados los diferentes estudios reportados de NIRS aplicados a la determinación de PAHs es necesario hacer un análisis sobre las aplicaciones cuantitativas en diferentes matrices como suelos (M. Li et al., 2021), aguas (Guangyu Dong et al., 2025) o investigaciones en astroquímica (K. Li et al., 2024) donde se identifique las ventajas, desventajas, proyecciones, correlaciones con métodos clásicos o primarios de análisis. Asimismo, relacionar la portabilidad y acoples con otras técnicas que incluyen espectroscopia Raman, ultravioleta y fluorescencia. Esta revisión ofrece un análisis enfocado en la técnica de detección rápida, no destructiva y eficiente que puede monitorear PAHs en diferentes matrices (suelo, sedimento, aceites comestibles e incluso el espacio exterior) in situ y a gran escala gracias a los nuevos diseños portables.

2. METODOLOGÍA

Selección de la Literatura

La revisión bibliográfica sobre la detección de PAHs con NIRS, se efectuó en bases de datos tales como Elsevier, Cell Press, ScienceDirect, Scopus y motores de búsqueda académicos como Google Scholar y Scielo. Se centró en la búsqueda de artículos de investigación en inglés y español entre 2018 y 2025. Se siguieron directrices de la declaración PRISMA (Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses) y se formuló la pregunta de investigación con ayuda del formato PICO (Problema, Intervención, Comparación y Outcome/Resultado) Tabla 1.

Tabla 1. Proyección de la búsqueda bibliométrica mediante formato PICO

Problema (P)	Contaminación causada por hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) en diferentes matrices, especialmente por actividades antropogénicas
Intervención (I)	Técnica NIRS complementada con espectroscopia Raman, UV-VIS, FT-NIR, DRS, ATR-FTIR
Comparación (C)	Métodos analíticos primarios como la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masa (CG-MS)
Outcome/resultado (O)	Validación de modelos predictivos como regresión lineal y no lineal, modelos de aprendizaje automático, prueba T pareada y otras herramientas quimiométricas logrando alto coeficiente de determinación e diferentes estudios.

Criterios de Inclusión y Exclusión:

La búsqueda utilizará palabras clave y combinaciones de NIRS con “PAHs in soil”, “PAHs in wáter”, “PAHs in sediment”, “PAHs in galaxies”, “PAHs environmental samples”, “PAHs portables analysis”, para la inclusión del análisis no se considerarán revisiones. Se consideraron artículos con calidad que en su contenido presentaban discusiones estadísticas de la técnica NIRS. Se utilizarán conectores Booleanos tales como “and”, “or” entre las palabras claves. Se excluyeron estudios que no respondían a la pregunta de investigación, que se encuentran fuera de la línea de tiempo propuesta en la revisión sistemática.

Análisis de los Datos:

Los resultados de la revisión se condensaron en una matriz Excel que incluyó la extracción de información específica tales como técnica NIRS, parámetros, muestra, métodos de calibración, comparación de métodos primarios, alcances, limitaciones. Se efectuará comparación del estudio de variables fisicoquímicas, precisión de PAHs con la NIRS vs. métodos tradicionales, eficiencia operativa, tiempo de análisis, costos operativos y beneficios económicos a largo plazo. Se dará respuesta a las aplicaciones de la NIRS en las industrias petroquímica, agricultura, nanotecnología y astroquímica.

Los resultados de la revisión se orientaron hacia establecer las tendencias de nuevos avances tecnológicos de la NIRS para PAHs abarcando las técnicas estadísticas utilizadas para la autenticación de los reportes tales como métodos de correlación, validación y predicción en las diferentes matrices y procedimientos de los métodos establecidos.

3. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Características generales de los estudios revisados

La espectroscopía en el infrarrojo cercano al estudio PAHs se ha consolidado como una herramienta versátil, no destructiva y de alta reproducibilidad, capaz de detectar y caracterizar compuestos orgánicos complejos mediante la interpretación de sobretonos y combinaciones vibracionales en el rango de 780-2500 nm. Técnicas potentes como espectroscopia NIR/FT-Raman, NIR/SERS, VIS-NIR, ATR-FTIR, código de software RADMC-3D y cámara de infrarrojo (IRC) a bordo del satélite AKARI. Los estudios se realizaron en lugares como: Australia, Bélgica, Brasil, Canadá, China, Corea Del Sur, Egipto, España, Francia, Hungría, India, Irán, Japón, Nigeria, Polonia, Reino Unido, Taiwán. En los diferentes reportes bibliométricos se apoyaron en datos quimiométricos y modelos predictivos utilizaron herramientas como regresiones estadísticas (PLRS) y modelos de aprendizaje automático para la calibración y predicción de concentraciones de PAHs y alcanos en diferentes matrices. En la revisión realizada se encontraron un total de 58 referencias científicas, que posteriormente fueron analizadas y proyectadas para la revisión sistemática, finalmente se aceptaron 41 referencias científicas (Figura 1) que cumplieron a cabalidad con los criterios de inclusión.

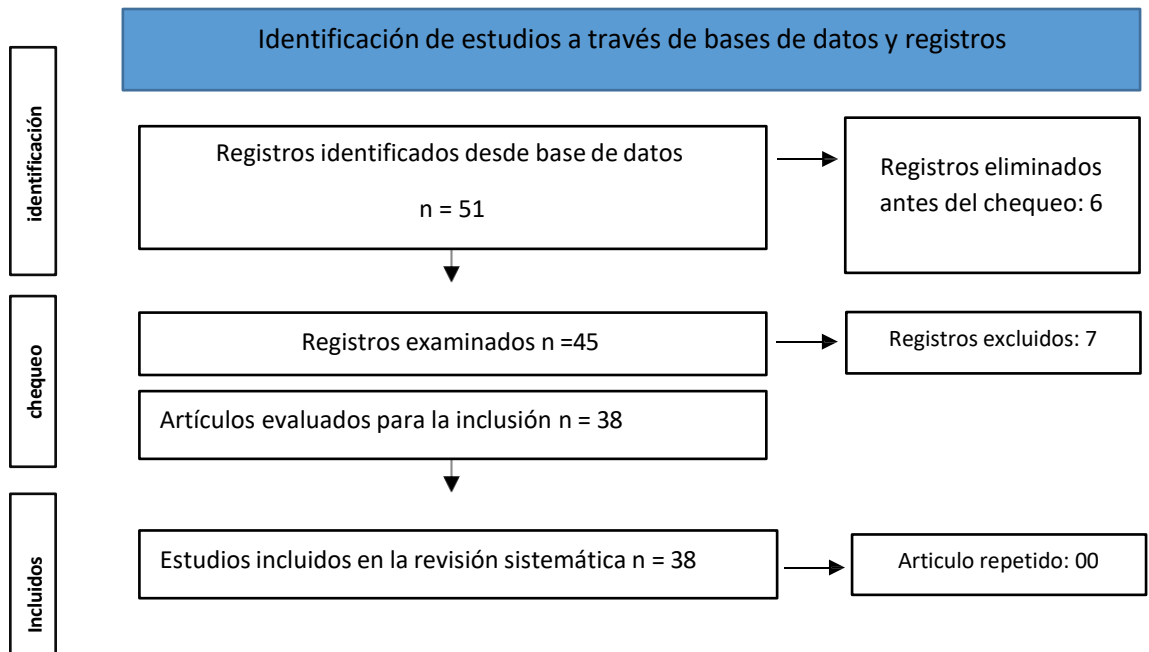


Figura 1. Diagrama de flujo PRISMA

En la Tabla 2 se listan un total de 38 artículos, en los cuales se detalla la cantidad de publicaciones correspondientes a cada revista científica. Las revistas con el mayor número de artículos publicados fueron Spectrochimica Acta - Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Astronomy and Astrophysics, Science of the Total Environment y Food Chemistry.

Tabla 2. Revista y número de artículos revisados.

No	Revista científica	Artículos
1	Angewandte Chemie - International Edition	2
2	Applied Spectroscopy	2
3	Astronomy and Astrophysics	2
4	Chemosphere	1
5	Environmental Pollution	2
6	Environmental Research	1
7	European Journal of Soil Science	1
8	Food Chemistry	4
9	Fuel	1
10	Geochimica et Cosmochimica Acta	1
11	Heliyon	1
12	Industrial and Engineering Chemistry Research	1
13	Journal of Near Infrared Spectroscopy	1
14	Microchemical Journal	3
15	Molecules	1
16	Nanophotonics	1
17	Polymers	1
18	Science of the Total Environment	4
19	Soil and Sediment Contamination	1
20	Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy	5
21	The Astrophysical Journal	2

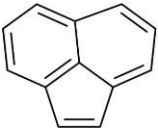
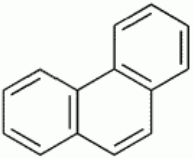
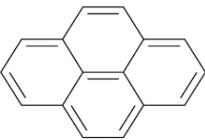
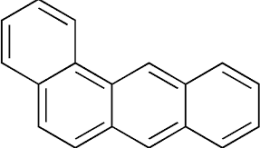
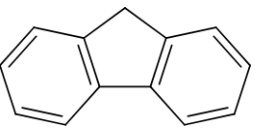
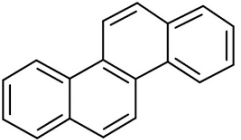
Definición e Impacto de los PAHs

Los Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos (PAHs) son una vasta familia de compuestos orgánicos constituidos por dos o más anillos de benceno fusionados que solo contienen átomos de carbono e hidrógeno. Se originan principalmente de la combustión incompleta o pirólisis de material orgánico, tanto de fuentes naturales (incendios forestales) como antropogénicas, siendo estas últimas las más preocupantes (emisiones vehiculares, quema de biomasa, procesos industriales, y la cocción de alimentos a altas temperaturas, como el ahumado). Su estructura molecular les confiere una alta estabilidad, baja solubilidad en agua y una naturaleza lipofílica, lo que facilita su persistencia en el medio ambiente y su acumulación en matrices complejas como suelos, sedimentos y organismos vivos. Por ello, los PAHs son clasificados como Contaminantes Orgánicos Persistentes (COPs)

La determinación y cuantificación precisa de los PAHs es de vital importancia debido a su reconocido carácter tóxico, mutagénico y carcinogénico para la salud humana y ecosistemas. La Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC) clasifica varios PAHs, como el Benzo[α]pireno, como cancerígenos para humanos. Su presencia en la cadena trófica, el agua potable, el aire y los alimentos representa un riesgo directo para la salud pública, lo que obliga a las agencias regulatorias internacionales (como la EPA y la Unión Europea) a establecer límites máximos de concentración muy estrictos. En este contexto, la rápida y precisa determinación de estos compuestos en diversas matrices es esencial para el monitoreo ambiental, la vigilancia de la seguridad alimentaria, la gestión

de derrames de petróleo y la toma de decisiones informadas para proyectos de remediación de sitios contaminados. Se estima que son más de 400 moléculas de PAHs que se han descubierto debido a la industrialización y urbanización, son compuestos químicos peligrosos formados por anillos aromáticos unidos entre si formando estructuras lineales, angulares o de racimos. (Vijayanand et al., 2023). La siguiente tabla relaciona PAHs con mayor impacto ambiental y en la salud pública:

Tabla 3. Relación de algunos PAHs de alto impacto ambiental y en la salud.

Compuesto	Características	Toxicidad IARC
<p>Acenaftileno</p>  <p>$C_{12}H_8$ 152.1 g/mol P_f: 92°C P_e: 279°C n_D: 1.619</p>	<p>Componente estable, combina un puente de etileno con naftaleno, es un intermediario importante que se aplica en diversos mecanismos de síntesis orgánica y se utiliza para la fabricación de pigmentos, colorantes y polímeros sofisticados.</p>	3
<p>Fanantreno</p>  <p>$C_{14}H_{10}$ 178.2 g/mol P_f: 101°C P_e: 340°C n_D: 1.5943</p>	<p>Presenta tres anillos bencénicos fusionados, altas concentraciones en zonas contaminadas con PAHs. Las concentraciones de fanantreno en corrientes extremadamente contaminadas, como los efluentes petroleros, pueden alcanzar los 9,9 g/L.</p>	2B
<p>Pireno</p>  <p>$C_{16}H_{10}$ 202.2 g/mol P_f: 151 °C P_e: 404 °C n_D: 1.70</p>	<p>Constituido por cuatro anillos bencénicos. Se produce por la combustión incompleta de combustibles fósiles, así como por pirólisis o gasificación a altas temperaturas de 800-1000 °C. Se encuentra en las aguas residuales y residuos urbanos.</p>	2B
<p>Benz(a)antraceno</p>  <p>$C_{18}H_{12}$ 228.3 g/mol P_f: 162 °C P_e: 438 °C n_D: 1.73</p>	<p>Sólido particulado, es uno de los PAHs más peligrosos, descubierto como carcinógeno para los humanos. Compuesto hidrófobo con cuatro anillos. Presente en la atmósfera debido a la combustión de madera y combustibles puede depositarse en el agua o el suelo. Se adhiere a la materia en suspensión y se acumula en los órganos de especies acuáticas principalmente en tejidos ricos en grasa.</p>	2B
<p>Fluoreno</p>  <p>$C_{13}H_{10}$ 166.2 g/mol P_f: 116 °C P_e: 296 °C n_D: 1.636</p>	<p>Formado por dos anillos bencénicos fusionados con un anillo central de cinco miembros, es la base para numerosos derivados sintéticos, como la fluorenona o los polímeros basados en fluoreno, que se utilizan en la fabricación de materiales orgánicos emisores de luz (OLEDs) y otros dispositivos electrónicos orgánicos.</p>	3
<p>Criseno</p>  <p>$C_{18}H_{12}$ 228.2 g/mol P_f: 255 °C P_e: 449 °C n_D: 1.74</p>	<p>Sólido, particulado de cuatro anillos bencénicos fusionados. Posee una estructura angular, el sistema de anillos está completamente conjugado y plano que le confiere alta estabilidad aromática y fluorescencia intensa. Es lipofílico, parcialmente soluble en tolueno y benceno. Tiene baja solubilidad en agua y baja presión de vapor, es uno de los PAHs más persistentes en el medio acuático.</p>	2B

IARC: Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC), 2B: Posiblemente carcinógeno para el ser humano, 3: Posiblemente carcinógeno para el ser humano, P_f: Punto de fusión, P_e: Punto de ebullición, N_D: Índice de refracción.

Espectroscopia de Infrarrojo cercano (NIRS)

El rango espectral del infrarrojo (NIR) cercano comprendido entre 780 y 2500 nm se asocia principalmente con sobretonos y combinaciones armónicas de vibraciones moleculares fundamentales. A diferencia de la región del infrarrojo medio absorciones en el NIR son de menor energía e intensidad, lo que exige instrumentos de alta sensibilidad. Las bandas de absorción proporcionan información valiosa sobre la composición química y la estructura molecular, ya que reflejan sutiles variaciones en la densidad electrónica y en la polarizabilidad de los enlaces. En el estudio de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), este rango permite analizar la presencia de enlaces característicos y su grado de conjugación, aspectos determinantes en sus propiedades ópticas y electrónicas.

Las vibraciones de los enlaces C-H, O-H y N-H permiten la interpretación de los espectros en esta región. Los enlaces C-H, presentes en los PAHs, exhiben bandas de primer y segundo sobretono en torno a 1650-1850 nm y 1150-1250 nm, respectivamente, reflejando la naturaleza aromática y la rigidez estructural del sistema. Los enlaces O-H y N-H, por su parte, muestran absorciones amplias e intensas debido al acoplamiento vibracional con puentes de hidrógeno, útiles para identificar contaminantes o sustituyentes polares derivados de PAHs. El incremento del número de anillos fusionados, se incrementa la deslocalización electrónica, lo que modifica los modos de vibración y tiende a desplazar las bandas hacia longitudes de onda mayores. Esta correlación permite establecer vínculos entre la estructura molecular, la energía de transición y la actividad óptica, esenciales para comprender el comportamiento fotoquímico y la reactividad de los PAHs.

Aplicación de la NIRs para detectar PAHs en diferentes matrices

Suelos

La identificación y el análisis cuantitativo de PAHs en suelos es un área de estudio que adquiere prioridad debido a su impacto ambiental y de salud pública, lo que genera una creciente demanda de metodologías analíticas eficientes. La detección indirecta de estos contaminantes se encuentra a la vanguardia de las técnicas analíticas modernas y es gracias a la fuerte señal espectral emitida en la región del infrarrojo cercano de ciertas moléculas orgánicas con un mínimo o nulo pretratamiento de la muestra. La NIRs emerge como una técnica moderna y sofisticada fundamental para la gestión y preservación de suelos expuestos a una variedad de actividades antropogénicas especialmente en escenarios de alto impacto como el arado intensivo en suelos agrícolas o los sitios afectados por la extracción de petróleo. (Klimkowicz-Pawlas & Debaene, 2020)

El monitoreo rápido para evaluar el riesgo de contaminación in situ facilita la toma de decisiones para la gestión ambiental en lugares propensos a la acumulación de PAHs. Un complemento indispensable para NIRs es la aplicación quimiométrica en softwares especializados capaces de preparar y analizar conjuntos de datos espectrales complejos, que son matrices de miles de puntos de absorbancia/transmitancia/emisión (intensidades) frente a longitudes de onda/números de onda (variables). Para ello se siguen una serie de operaciones antes de aplicar algoritmos multivariantes como el preprocesamiento de los espectros para mejorar la señal-ruido. La siguiente tabla resume los alcances de algunos estudios:

Tabla 4. Aplicaciones de la NIRs en el análisis de PAHs en suelos

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Chen & Tien (2020).	Espectrómetro portátil (MIR-DRIFT)	Suelos contaminados con hidrocarburos petrolíferos (diesel) (713 y 54 790 mg/kg)	Longitudes de onda 1000 a 2500 nm (NIR de onda corta y media). Resolución: 2 nm.	Correlación MIR-DRIFT y concentraciones de TPH (GC/MS); análisis del impacto de variables ambientales	GC/MS y kits de campo turbidimétricos
Dong, et al. (2021).	Reflectancia difusa en el infrarrojo cercano	Suelos con fenantreno (8 mg/g) y diferentes porcentajes de humedad	No se especifican detalles	Corrección intensidad de fluorescencia y absorbancia NIR; construcción de modelo lineal. Correlación R ² Pasa de 0.86 a 0.99 después de la corrección. Errores relativos entre 0.44 a 13%	No se realiza una comparación con otras técnicas o matrices; el enfoque se centra en mitigar el efecto de la humedad mediante NIR.

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Douglas et al., 2019.	Espectrómetro Foss NIRSystems 6500	Muestras secadas y molidas de suelo contaminado por petróleo del Delta del Níger, Nigeria	Rango espectral: 400-2500 nm. Resolución: ~2 nm. Modo reflectancia difusa.	Alcanos/PAHs: PLSR: $R^2=0.36/0.56$, RMSEP 66.66/1.21 mg/kg RP 1.29/1.55 RF: $R^2=0.58/0.71$ RMSEP 53.95 / 0.99 mg/kg, RPD 1.59/1.99	En suelos, la humedad y minerales son interferencias más significativas que en aceites o ceras..
Douglas et al., 2018	Espectrómetro ASD FieldSpec® 3, rango espectral 350-2500 nm, modo de reflectancia difusa.	Suelo contaminado con hidrocarburos totales del petróleo (TPH), recolectado en el Delta del Níger, Nigeria.	Muestras secas, molidas y escaneadas en condiciones de laboratorio. Preprocesamiento: normalización, derivada, suavizado.	RF: $R^2 \approx 0.85$, RPD=2.61, RMSEP=68.4 mg/kg PLSR: $R^2=0.63$, RPD=2.55, RMSEP=107.5 mg/kg	VIS-NIR comparado con métodos de referencia (SUSE-GC).
Douglas, et al., 2018a.	VIS-NIR AgroSpec Rango:305 a 2200 nm. ASD Rango: 350 a 2500 nm.	Suelos texturas distintas de la granja experimental de la Cranfield University, Reino Unido, contaminados crudo de Alaska (8 450 mg/kg TPH) y envejecimiento a 21 °C.	Los escaneos vis-NIR en diferentes estados de envejecimiento temporal y control sin contaminación inicial (TC).	Random Forest (RF) $R^2=0.92$ RPD: 3.79 RMSEP): 108.56 mg/kg TPH PLSR y PCA para evaluar la capacidad de discriminación espectral El ASD superó al AgroSpec (tec5) en discriminación espectral mediante PCA..	Referencia GC-MS
Karimian, et al., 2024.	VIS-NIR ASD Field Spec 4	Suelos superficiales (0-10 cm) cercanos a lagunas Shadegan, Sur de Irán, contaminados por hidrocarburos totales (TPH)	Rango: 350-2500 nm (visible + NIR). Resolución: 3 nm (350-1000 nm); 10 nm (1000-2500nm). Iluminación de lámpara halógena y medición con fibra óptica.	PLSR, Validación cruzada, preprocesamiento (SNV, detrending, Savitzky-Golay). Desempeño: SVM > RF > PLS. SVM en validación: $r^2=0.85$, RMSEP=1.59 %, RPD = 2.6	No hay comparación detallada con otras técnicas. MIR+Vis-NIR proporcionaría resultados más completos/precisos.
Lei, et al., 2021.	Espectroscopia de reflectancia difusa NIR	Suelo contaminado con benzo[ghi]perileno (1 mg/g)	No se especifican detalles como tipo de instrumento, rango espectral o configuración experimental	Regresión lineal entre la intensidad de fluorescencia y la concentración del compuesto R^2 mejoró de 0.90 a 0.95 tras la corrección. RMSEP predicción pasa de 35.7 % a 8.71 %	No hay comparación directa con otras técnicas o matrices; el enfoque se centra en corregir interferencias relacionadas con el tipo de suelo.
Li, et al., 2021.	Espectrómetro FT-NIR Thermo Nicolet iS50	Suelo, usado como medio para cuantificar dos PAHs específicos: antraceno y fluoranteno	Rango:1000-2500 nm. Resolución: 4 cm^{-1} . Modo reflectancia difusa. Muestras secadas, molidas y homogeneizadas antes de la medición	PLS (siPLS) identificar bandas espectrales relevantes Algoritmos: SPA, GA o PSO El modelo siPLS-GA mostró excelente desempeño externo y en validación cruzada: Antraceno: $R^2 \approx 0.9830$ RMSE ≈ 0.5897 mg/g Fluoranteno: $R^2 \approx 0.9849$ RMSE ≈ 0.4739 mg/g	Mayor complejidad que en ceras o estalagmitas debido a interferencia de la humedad y materia orgánica del suelo.
Olatunde, 2021.	Espectrómetro Ger3700 VNIR, reflectancia difusa (DRS).	Suelo agrícola de Reino Unido (Wisley, "WIS") y suelos del sudoeste de Inglaterra ("SWE"); muestras contaminadas con diesel (ETPH), (205 mg/kg a 20 000 mg/kg)	Rango: 350-2500 nm Detector de silicio (350-1050 nm) y detectores InGaAs (1050-1900 nm y 1900-2500 nm), Medidas en laboratorio en habitación oscura, con fuente de luz cuarzo halógena proyectada a 45°, panel de referencia Spectralon	PLSR entre espectros VNIR (predictoras X) y ETPH en \log_{10} (variable Y); validación con conjuntos independientes. PCA para discriminación de suelos según SOC y contaminación WIS (uni-geológica) Validación $R^2 = 0.97$, RPD = 4.5, error %PE = 1.5 % SWE (geológica) $R^2=0.72$, RPD=1.4%	Técnicas analítica convencional GC/FID

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
			calibrado al 100 % antes de cada medición	PE=9.8 % Modelos por grupos SOC (LOW, MED, HIGH): validación $R^2 = 0.91-0.97$; RPD= 3.3-5.5.	
Zhang, et al., 2023.	NIR de reflectancia difusa junto con espectroscopia de fluorescencia para corregir interferencias.	Suelo, preparado con distintas concentraciones de materia orgánica (ácido húmico)	Se utilizó reflectancia en NIR difuso a 4672 cm^{-1} como factor de calibrado.	Curvas estándar de fluorescencia antes y después de la corrección usando NIR. Error relativo medio predicho mejoró de 27.46 % a 9.00 % con corrección.	No se comparó con otras matrices; el enfoque fue corregir interferencias de suelo en fluorescencia.
Shen, et al. (2021).	Espectrómetro portátil ASD FieldSpec® 4 (Analytical Spectral Devices, USA)	Suelos contaminados con hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs).	Rango espectral: 350-2500 nm (Vis-NIR). Fibra óptica de contacto, iluminación con lámpara halógena. Cada muestra medida en múltiples repeticiones, espectros promediados. 1400 nm y 1900 nm (agua del suelo). 1700-1800 nm y 2100-2300 nm (absorciones de C-H y C=C características de compuestos aromáticos).	Análisis multivariante y quimiometría: PCA (análisis de componentes principales). PLS-DA (Partial Least Squares - Discriminant Analysis). LDA (Linear Discriminant Analysis). Redes neuronales y algoritmos de clasificación supervisada. Modelos con alta capacidad discriminativa de diferentes tipos y concentraciones de PAHs. Precisión de clasificación superior al 85-90 %.	
Deng et al., 2025	espectroscopia de fluorescencia combinada con espectroscopia de reflectancia difusa en el infrarrojo cercano (NIR)	Suelo, al que se le agregó ácido húmico. Concentración de fenantreno 5 mg/g	Se destaca una banda específica en NIR: 4672 cm^{-1} , utilizada como factor de calibración para corregir la interferencia de la materia orgánica	Errores relativos promedio antes de corrección: 27.46 %, después de corrección: 9.00% en muestras desconocidas	
Klimkowicz-Pawlas, & Debaene, (2020).	Se empleó espectroscopia de reflectancia difusa VIS-NIR	Suelo agrícola con alta presión antropogénica (Polonia), dominado por arenas limosas (loamy sands) y bajo contenido orgánico..	Rango VIS-NIR (350-2500 nm) Relevante: "pequeño pico" en torno a 2210 nm.	Preprocesamiento espectral: SNV y derivada primera (Savitzky-Golay). PCA: estructura de datos. PLS-R: validación cruzada Capacidad para clasificar muestras contaminadas (por encima de $600 \mu\text{g}/\text{kg}$) con 79.7 % de precisión	Métodos convencionales (como GC-MS).
dos Reis Medeiros, et al., (2024).	Telops Hyper-Cam LW (imaging FTIR en el LWIR): cámara hiperespectral de infrarrojo térmico	Suelos arcillosos, arenosos y dolomíticos, con hidrocarburos (aceites) de diferentes API.	Resoluciones espectrales ($\approx 7.7-11.8 \mu\text{m}$) se empleó fuentes internas de calibración radiométrica.	PCA y Modelos Lineales Generalizados Mixtos (GLMM). Parametrización de las "bandas características" por su profundidad geométrica sin informar específicamente su posición espectral vs. tiempo de exposición, temperatura y concentración de hidrocarburos.	El uso de TIR ha sido poco explorado, por lo que este estudio aporta nuevo conocimiento sobre TIR comparado con técnicas más comunes

PLSR (Partial Least Squares Regression), PLS (Partial Least Squares), Random Forest Regression (RF), SPA (Successive Projection Algorithm), GA (Genetic Algorithm) o PSO (Particle Swarm Optimization), reflectancia difusa en el infrarrojo medio (MIR-DRIFT)

La literatura revisada demuestra que la NIRs y su extensión al visible (vis-NIR) y al infrarrojo medio (MIR) se han consolidado como herramientas analíticas eficaces para la detección y cuantificación de hidrocarburos del petróleo (TPH) y PAHs en suelos contaminados. En general, los estudios coinciden en la viabilidad del uso de técnicas ópticas no destructivas como alternativa rápida y económica a los métodos cromatográficos tradicionales. Por ejemplo, Douglas et al. (2018, 2019) y

Karimian et al. (2024) demostraron que la espectroscopía vis-NIR, combinada con algoritmos de regresión multivariante como Partial Least Squares Regression (PLSR) y Random Forest (RF), puede predecir concentraciones de TPH con coeficientes de determinación superiores a 0.80 y valores de RPD mayores de 2.5, lo que sugiere un poder predictivo robusto para fines de monitoreo ambiental.

En términos instrumentales, los rangos espectrales empleados abarcan 350-2500 nm, lo cual permite registrar tanto las transiciones electrónicas del visible como los sobretonos y combinaciones vibracionales del NIR, principalmente de los enlaces C-H presentes en los hidrocarburos. Las bandas más frecuentemente identificadas se ubican en torno a 1700-1800 nm y 2200-2300 nm, asociadas a estiramientos asimétricos y combinaciones de los grupos metileno y metilo (-CH₂- y -CH₃) (Li et al., 2021; Karimian et al., 2024). Adicionalmente, algunos trabajos incorporan la corrección del efecto de humedad y materia orgánica, factores críticos en la señal espectral de suelos. En este sentido, Dong et al. (2021) y Zhang et al. (2023) propusieron estrategias de calibración que emplean la reflectancia NIR (5184 y 4672 cm⁻¹, respectivamente) como factor correctivo, reduciendo el error relativo de predicción de más del 30 % a valores cercanos al 9 %. Este enfoque de normalización espectral refuerza la utilidad del NIR no solo como método de detección directa, sino también como herramienta auxiliar para mejorar la precisión de técnicas ópticas complementarias como la fluorescencia. En la siguiente tabla se resaltan los rangos espectrales de interés.

Tabla 5. Rangos espectrales de interés para análisis NIRs de suelos contaminados con PAHs

Rango de Número de Onda (cm ⁻¹)	Tipo de Vibración	Implicaciones Químicas
4000 - 4700 cm ⁻¹ (Hombro / Picos agudos)	Bandas de combinación de C-H	Relacionadas con la presencia de grupos alifáticos CH ₂ , CH ₃ o aromáticos CH
5260 - 4545 cm ⁻¹ (Pico pronunciado)	Banda de Combinación (estiramiento y deformación)	Frecuentemente asociada a moléculas de H ₂ O (agua) en la muestra ya sea libre o ligada. (Bingari et al., 2023)
6250 - 5880 cm ⁻¹ (Pico secundario)	Primer sobretono de Tensión C-H (Aromático)	Es el primer armónico de la vibración de tensión C-H fundamental de los anillos aromáticos, que ocurre en el MIR
8000 - 12000 cm ⁻¹ (Región de base creciente)	Segundo sobretono C-H	Típica de vibraciones armónicas de mayor energía de los enlaces CH

Los avances metodológicos también reflejan una evolución en el tratamiento estadístico de los datos espectrales. Mientras que los primeros estudios se apoyaban exclusivamente en regresión PLSR o en análisis exploratorios (PCA), investigaciones más recientes integran modelos híbridos y algoritmos de aprendizaje automático como Support Vector Machines (SVM), Genetic Algorithms (GA) o Particle Swarm Optimization (PSO) (Li et al., 2021; Karimian et al., 2024). Estos enfoques han permitido optimizar la selección de variables espectrales relevantes, por ejemplo, mediante siPLS-GA, y aumentar la exactitud en la predicción de PAHs específicos como antraceno y fluoranthene (R² = 0.98). Asimismo, Douglas et al. (2019) destacaron la superioridad de los modelos RF frente a PLSR para capturar comportamientos no lineales en los espectros complejos de suelos contaminados, con mejoras en el R² de 0.56 a 0.71 y una reducción del error medio cuadrático de predicción.

La comparación con métodos de referencia (GC-MS, GC-FID) refuerza la validez analítica de la espectroscopía NIR. Okparanma et al. (2014) demostraron que los mapas de concentración de PAHs generados mediante vis-NIR no presentaron diferencias estadísticamente significativas (p > 0.05) respecto a los obtenidos por GC-MS, con un coeficiente de Kappa entre 0.19 y 0.56, indicando buena concordancia espacial. De modo similar, Douglas et al. (2018) y Chen & Tien (2020) subrayan que, aunque la precisión cuantitativa del NIR puede ser inferior a la de la cromatografía convencional, su rapidez, portabilidad y bajo costo la convierten en una herramienta viable para cribado y monitoreo in situ. Entre las limitaciones comunes, los estudios coinciden en que la variabilidad del suelo, especialmente su textura, contenido de humedad y materia orgánica, puede comprometer la robustez de los modelos. Olatunde (2021) evidenció que la precisión predictiva (R² = 0.97, RPD = 4.5) disminuye significativamente en suelos geológicamente heterogéneos (R² = 0.72, RPD = 1.4). Sin embargo, el autor propone la construcción de calibraciones locales y modelos específicos por tipo de suelo, lo cual podría mejorar la generalización de las predicciones.

La revisión resalta el papel emergente de la espectroscopía NIR y vis-NIR como una herramienta estratégica para el análisis ambiental de PAHs y TPH. Su carácter no destructivo, la posibilidad de implementación portátil y la capacidad de análisis multicomponente la posicionan como una

alternativa sostenible frente a los métodos tradicionales. A futuro, las líneas de investigación más prometedoras apuntan hacia la integración de NIR con técnicas de fluorescencia y MIR, el uso de modelos multitemporales para evaluar procesos de envejecimiento de contaminantes (Douglas et al., 2018), y la incorporación de inteligencia artificial para optimizar la calibración en condiciones reales de campo.

La Figura 2 muestra, a modo de ejemplo, los principales picos de absorción identificados en los rangos de 1640-1760 nm (6097 a 5681 cm^{-1}), los cuales pueden asociarse con los estiramientos simétricos y asimétricos de los grupos metileno ($-\text{CH}_2-$) y metilo ($-\text{CH}_3$) presentes en los compuestos hidrocarbonados del petróleo. De manera análoga, la banda observada entre 2240 y 2440 nm (4464 a 4098 cm^{-1}) corresponde a la denominada “meseta de hidrocarburos”, característica de los suelos contaminados con derivados del petróleo, y atribuida a combinaciones y sobretonos de vibraciones C-H detectables en la región NIR, particularmente en muestras con presencia de diésel (Olatunde, 2021).

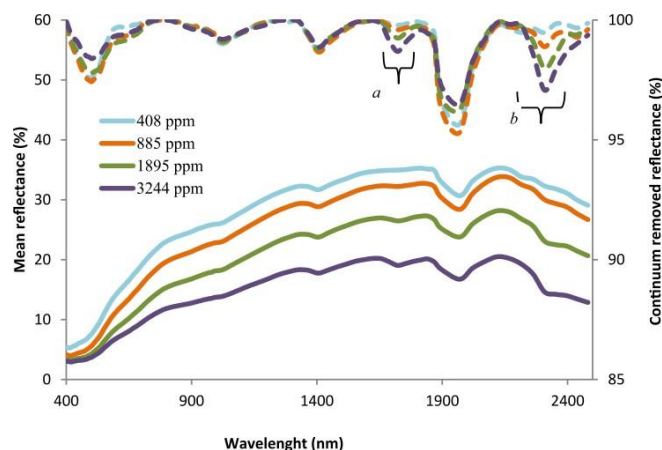


Figura 2. Espectros VNIR de suelos contaminados con diésel.

Reflectancia media (líneas rectas) y continuo eliminado (líneas discontinuas) (Olatunde, 2021).

La implementación de técnicas analíticas como espectroscopia de reflectancia difusa visible e infrarroja cercana (VNIR DRS) y el diseño de herramientas modernas de medición como espectrómetro mineral infrarrojo portátil (PIMA) y MicroNIR busca caracterizar la contaminación por PAHs de manera eficiente. Su principal ventaja es que permiten reducir significativamente los costos y el tiempo de análisis en comparación con los métodos de laboratorio tradicionales, facilitando así la toma de decisiones en tareas de remediación. La siguiente tabla muestra algunas aplicaciones en suelos contaminados con PAHs.

En el estudio de dos Reis Medeiros et al., (2024), se empleó un sistema hiperespectral Telops Hyper-Cam LW (FTIR en el rango térmico de 7.7-11.8 μm) para analizar la variación temporal de la emisividad de sustratos minerales impregnados con hidrocarburos. Mediante el uso de Análisis de Componentes Principales (PCA) y Modelos Lineales Generalizados Mixtos (GLMM), los autores demostraron la sensibilidad del TIR para detectar la evolución espectral en función de variables como temperatura, tiempo y concentración del contaminante. Aunque no se comparó directamente con el NIR, el trabajo resalta la complementariedad de ambos enfoques y posiciona al TIR como una alternativa prometedora para el monitoreo ambiental.

Petroquímica

Los estudios de Lou et al. (2024) y Bingari et al. (2023) representan avances significativos en la aplicación de la espectroscopia de reflectancia NIR para la detección, cuantificación y monitoreo espacial de contaminantes hidrocarbonados. Ambos estudios coinciden en resaltar la capacidad de la NIR para identificar señales vibracionales asociadas a los enlaces C-H característicos de compuestos del petróleo, pero difieren en su enfoque metodológico y en el rango de concentración evaluado. Mientras Lou et al. (2024) se centraron en la detección de niveles extremadamente bajos de contaminación (178-1716 mg/kg) mediante una estrategia de substracción espectral diagnóstica, Bingari et al. (2023) desarrollaron un índice espectral empírico (“Oil Index”) para visualizar la distribución tridimensional del petróleo en suelos artificialmente contaminados.

En el estudio de Lou et al. (2024), se utilizó la espectroscopia NIR de campo bajo con reflectancia difusa permitió detectar patrones espectrales imperceptibles en los análisis convencionales. La

aplicación de la substracción espectral reveló dos regiones diagnósticas a resaltar (2290-2370 nm y 1700-1780 nm), donde se observaron formas cóncavas en suelos con contaminación baja (< 200 mg/kg) y valles asimétricos en forma de “W” en concentraciones altas (> 1000 mg/kg). Este enfoque amplió la sensibilidad del método NIR entre 10 y 50 veces respecto al análisis de espectros originales, permitiendo detectar hidrocarburos incluso por debajo del límite de detección típico de 200 mg/kg. Los autores destacan que este “*workflow*” espectral no requiere modelos quimiométricos avanzados como PLSR o RF, sino que se basa en el análisis visual y la parametrización de patrones específicos, lo que simplifica su aplicación en campo y en entornos donde no se dispone de bases de datos calibradas. Sin embargo, el método exige espectros de referencia limpios y un control riguroso de las condiciones del suelo, lo cual podría limitar su generalización a escenarios naturales más complejos.

Por otro lado, Bingari et al. (2023) abordaron el problema desde una perspectiva experimental y cuantitativa, empleando un sistema NIR de reflectancia difusa con sondas en profundidad para la medición de suelos sintéticos de diferentes texturas (arena fina y gruesa), con contenidos de petróleo del 5 a 30 %. A partir del análisis espectral (1100-2300 nm), los autores definieron un índice de petróleo (*Oil Index*) basado en la proporción entre la absorción principal del petróleo (cerca a 1720 nm) y una región visible inactiva. Los resultados evidencian una correlación en suelos secos ($R^2 \geq 0.98$), mientras que la presencia de humedad redujo la precisión del modelo, aunque el índice permitió visualizar el desplazamiento subterráneo del contaminante. Este hallazgo es relevante, pues introduce la posibilidad de monitorear tridimensionalmente la migración del petróleo en el subsuelo sin recurrir a técnicas destructivas como perforaciones o extracciones químicas.

Ambos estudios confirman que la región NIR contiene información suficiente para distinguir variaciones en la composición del suelo inducidas por hidrocarburos. Sin embargo, mientras Lou et al. (2024) optimizaron la detección en concentraciones bajas mediante técnicas de realce espectral, Bingari et al. (2023) demostraron la viabilidad del mapeo volumétrico y la integración de la NIR con modelos empíricos simples. Las ventajas comunes incluyen la no destructividad, rapidez de adquisición, portabilidad del equipo y capacidad de análisis in situ, aunque persisten limitaciones ligadas a la humedad del suelo, la heterogeneidad textural y la dependencia de calibraciones específicas.

De manera prospectiva, ambos autores plantean oportunidades convergentes: Lou et al. (2024) sugieren la integración de la substracción espectral con sensores remotos o portátiles para extender su aplicación en monitoreo ambiental y detección temprana; mientras que Bingari et al. (2023) proponen la combinación de su índice con modelos quimiométricos avanzados (PLSR, machine learning o visión hiperespectral) para mejorar la sensibilidad en suelos húmedos y concentraciones menores al 5 % de petróleo. En conjunto, estos enfoques consolidan el papel del NIR como herramienta analítica y de monitoreo en la gestión ambiental de suelos contaminados, mostrando una transición desde métodos descriptivos hacia estrategias predictivas, multiescalares y de alta resolución espacial.

Karimian y colaboradores establecen que el modelo Máquina de Vectores de Soporte (SVM) superó a otras técnicas de modelado multivariante en la predicción precisa de los niveles totales de hidrocarburos de petróleo (TPH) en el suelo; esto respalda el potencial del NIRS para campos como petroquímica. (Karimian et al., 2024).

Tabla 6. Resumen de estudios de NIRs en PAHs para muestras aplicadas en la industria petroquímica

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Lou, et al., 2024.	Espectroscopio NIR convencional (reflectancia difusa)	Suelo contaminado con hidrocarburos del petróleo a niveles bajos (TPH entre ~178 y 1 716 mg/kg) Espectro diagnóstico mediante substracción	Regiones1: 2 290-2 370 nm. Región 2: 1 700-1 780 nm exhibieron patrones: Forma cóncava hacia abajo en contaminación baja (<200 mg/kg) Valles de absorción “en W” asimétricos en contaminación alta (>1 000 mg/kg).	Análisis visual y parametrización de características espectrales (sin modelos PLS o RF) La técnica detecta contaminación con niveles tan bajos como ~178 mg/kg; sensibilidad ~10-50 veces mayor que métodos basados en espectro original	En contraste con métodos tradicionales que usan espectro original, esta técnica de substracción permite revelar señales que de otra manera estarían por debajo del umbral de detección de NIR clásico

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Bingari, et al 2023.	Espectroscopía NIR en reflectancia difusa, con sonda para medir espectros en profundidad	Suelos de laboratorio de distintas texturas (arena fina/coarse) y contenidos variables de agua y petróleo crudo sintético al 5-30 % Mezclas artificiales de suelo seco y húmedo conteniendo petróleo sintético.	Sondas para perfiles 3D subsuperficiales. Rango: ~1100-2300 nm Desarrollo de "Oil Index" definido entre la principal absorción del petróleo en NIR (~1720 nm) y bandas en ~1400 y ~1900 nm de agua y suelos orgánicos; una región visible inactiva.	Regresiones polinómicas entre Oil Index y contenido de petróleo: Suelos secos: $R^2 \geq 0.98$ contenido de petróleo del 5-30 % Suelos húmedos la correlación fue menor.	En comparación con métodos tradicionales (boreholes, extracción química).
Karimian et al., 2024	Espectroscopía NIR en reflectancia difusa	Muestras preparadas en laboratorio	Se registraron espectros en el rango NIR (~1100-2300 nm).	Rango de NIR (principalmente para bandas vibracionales de C-H)	
Santos, et al., (2022).	Portable micro-NIR comparado con un instrumento de sobremesa.	Muestras de crudos brasileños (n = 182), caracterizadas según propiedades físico-químicas	Portátil: Rango: 11 000 a 6 000 cm^{-1} . Mesa: El rango de 6 000-4 000 cm^{-1} es relevante porque incluye los primeros sobretonos de enlaces S-H, O-H, C-H y N-H	Modelos de regresión: PLS y SVR. El modelo para asfaltenos (Asp) mejor respuesta con NIR portátil. Para las demás propiedades (API gravity, TSC, BNC, saturados, aromáticos, resinas), el instrumento de sobremesa fue superior.	Comparación NIR portátil vs mesa.
Barea-Sepúlveda, et al., (2022).	NIRS	Muestras de gasolina con dos números de octano: RON-95 y RON-98	No se mencionan regiones espectrales específicas de relevancia para NIRS	HCA para análisis no supervisado. SVM y RF ambos con validación cruzada Fusión de datos de bajo nivel HS-MS eNose y NIRS HCA con datos de HS-MS eNose mostró agrupaciones claras SVM + eNose logró 100 % clasificación correcta (CV). RF + fusión de datos alcanzó la mejor precisión en el conjunto de prueba. La fusión de HS-MS eNose y NIRS logró también 100 % de precisión	Comparación de respuesta NIRS con diferentes técnicas estadísticas
Sales, et al., (2023)..	Portátil MicroNIR (handheld NIR), Espectrómetro de sobremesa FT-NIR y FT-IR	Muestras comunes de gasolina, de distintas marcas comerciales	Se excluyeron regiones espectrales con alta incertidumbre	PCA; discriminación par a par con SIMCA Discriminación completa (sin falsos positivos) en: 96.3% con NIR portátil, 93.4 % con FT-NIR, 93.7 % con FT-IR, comparado con 95.7 % para propiedades fisicoquímicas y 99.2 % para curvas de destilación	

SVR (Support Vector Regression)
HCA (Análisis jerárquico de conglomerados)
SVM (Support Vector Machine) y RF (Random Forest),

Sedimentos de lagos y ríos

La NIRs es una herramienta de gran importancia para la determinación de PAHs en muestras sedimentarias. Los cuerpos de aguas naturales o artificiales, ya sean lagos, ríos, estanques, lagunas, son susceptibles a la acumulación de sustancias tóxicas que se suspenden en el fondo y persisten a lo largo de los años aumentando el riesgo de futuras removilizaciones, por ejemplo, en una inundación o por actividades antropogénicas como el dragado, lo que conlleva a un impacto negativo para el ecosistema acuático. La siguiente tabla relaciona las condiciones de la aplicación NIRS en muestras de sedimentos de lagos o suelos cercanos a ellos.

Tabla 7. Resumen de estudios de NIRs en PAHs para muestras aplicadas en sedimentos de lagos y ríos

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Jacq, et al., (2024).	Cámara hiperespectral VIS-NIR (visible y near-infrared)	Sedimentos de pantano/lago (Martot Pond, tributario del río Eure hacia Sena) Núcleos (cores) de sedimento depositado en el fondo	Rango VIS-NIR (~400-1000 nm), extendido a SWIR hasta ~2500 nm. Pigmentos, óxidos, compuestos orgánicos (clorofila a, etc.) usados como indicadores correlativos	PLS u otro enfoque predictivo correlacionando espectros con concentraciones de PAH Validación $R^2 \approx 0.85$; Predicción: RMSEP=1.64 mg/kg	Métodos tradicionales (extracción/GC-MS).
Zhang, et al., (2022).	Sistema Raman con excitación dual: láser comercial de 785 nm más un láser adicional de 808 nm para generar un campo electromagnético extra fuerte, combinado con sustratos coloidales de nano-urchins Au/Ag (nanorizos metálicos) en suspensión	Agua de lago real, filtrada y centrifugada antes de ensayos Solución acuosa con PAHs	Excitación Raman: 785 nm (0-1 W) sobre Au/Ag Nus Picos Raman en: • Pyreno: $\sim 590 \text{ cm}^{-1}$ • Antraceno: $\sim 395 \text{ cm}^{-1}$, 755 cm^{-1} • Nitropyreno: $\sim 554 \text{ cm}^{-1}$, 646 cm^{-1}	Modelado cuantitativo a través de calibración lineal entre intensidad de pico Raman y concentración logarítmica ($R^2 \geq 0.9969$ en pyreno) Límite de detección de pyreno hasta $\sim 10^{-9}$ M; respuesta lineal con $R^2 \approx 0.9969$	Mejora significativa respecto a SERS convencional en VIS o NIR único.
Argiriadis, et al., (2024)	Espectroscopía FT-NIR Bruker MPA reflectancia difusa	Espeleotemas seccionados longitudinalmente, (estalagmitas) de cuevas tropicales en Australia.	Rango: 800-2500 nm. Resolución: 8 cm^{-1} . 1700-1800 nm (enlaces C-H). 2100-2300 nm (combinaciones C-H y C=C). Bandas ligadas a vibraciones de grupos aromáticos.	PLSR, PCA Validación cruzada para modelos predictivos R^2 ajustados a 0.70-0.85	correlación entre espectros NIR y concentraciones de PAHs determinadas por GC-MS.

Regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR).
PCA (Análisis de Componentes Principales).

Las estalagmitas constituyen depósitos minerales que crecen gradualmente en el interior de las cuevas, registrando en sus capas sucesivas información ambiental a lo largo del tiempo. En este contexto, un estudio reciente desarrollado en la región de Kimberley, Australia Occidental (Argiriadis et al., 2024) abordó la necesidad de comprender la escala y extensión de los incendios forestales mediante el análisis de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) preservados en estalagmitas. Para ello, se aplicó el Índice Normalizado de Quema (NBR), definido como $NBR = (NIR-SWIR) / (NIR + SWIR)$, a partir de datos espectrales obtenidos con NIRs. Esta metodología permitió mapear las cicatrices de áreas afectadas por incendios y correlacionarlas con los niveles cuantitativos de PAHs

detectados en los depósitos minerales, aportando evidencia directa del vínculo entre la actividad de fuego y la acumulación de contaminantes orgánicos en el registro espeleotemático.

Por otro lado, la validación de un método analítico de alta resolución espectral fue presentada por Jacq et al. (2024), quienes emplearon imágenes hiperespectrales en el rango infrarrojo combinadas con la técnica quimiométrica de Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales (PLSR). Este enfoque permitió revelar gradientes espaciales de acumulación de PAHs en el transecto sedimentario de la laguna Martot (Francia). Los autores reportaron una fuerte concordancia entre los datos obtenidos por NIRS y los valores de referencia determinados por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), con coeficientes de determinación de $R^2 = 0,89$ en calibración y $R^2 = 0,85$ en validación, así como un error cuadrático medio de validación (RMSEV) de 0,21 en espacio logarítmico (1,64 mg/kg) y un rV/S de 0,74 ($p < 0,05$). Estos resultados demuestran la robustez y capacidad predictiva del modelo PLSR aplicado a datos hiperespectrales, consolidando a la espectroscopía NIR como una herramienta eficaz para la cuantificación no destructiva de contaminantes orgánicos en matrices ambientales complejas.

La aplicación de técnicas ópticas avanzadas como la espectroscopía en el visible e infrarrojo cercano (VIS-NIR), la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIR) y la espectroscopía Raman mejorada por superficie (SERS) ha permitido ampliar el rango de detección y caracterización de contaminantes hidrocarbonados en distintas matrices ambientales. Investigaciones como las de Jacq et al. (2024) y Zhang et al. (2022) han demostrado la versatilidad y el potencial de estas técnicas, tanto para la cuantificación precisa de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) en sedimentos y aguas naturales, como para el monitoreo tridimensional del petróleo en suelos contaminados. Aunque cada estudio aborda contextos experimentales distintos, todos coinciden en la relevancia de los métodos ópticos por su carácter no destructivo, rapidez analítica y capacidad de mapeo espacial o espectral en tiempo real.

En el trabajo de Jacq et al. (2024), el uso de imágenes hiperespectrales VIS-NIR permitió mapear la distribución espacial de PAHs en núcleos de sedimentos del estuario del Sena, alcanzando una resolución micrométrica (40 a 300 μm) y una predicción quimiométrica robusta ($R^2=0.85$; $\text{RMSEP}=1.64 \text{ mg/kg}$) mediante modelos PLS. Este enfoque no solo permite estimar concentraciones de contaminantes de manera rápida y no invasiva, sino que también posibilita la reconstrucción volumétrica de depósitos contaminados y su correlación con variables ópticas (pigmentos, óxidos y compuestos orgánicos). En comparación con técnicas clásicas como GC-MS, el método ofrece mayor resolución espacial y menor tiempo analítico, lo que lo convierte en una herramienta prometedora para la reconstrucción ambiental y sedimentológica de contaminaciones históricas. No obstante, la dependencia de calibraciones robustas y la necesidad de correcciones por relieve superficial siguen siendo limitaciones metodológicas que restringen su aplicación masiva fuera del laboratorio.

Por su parte, el estudio de Zhang et al. (2022) representa un hito tecnológico en la detección ultrasensible de PAHs no adsorbidos en fase acuosa, mediante un sistema SERS potenciado por doble excitación láser (785 nm + 808 nm) y el uso de nano-urchins de Au/Ag como amplificadores plasmónicos. Este diseño generó una potenciación de señal 34 veces superior a la obtenida con un solo láser, permitiendo la detección de pyreno a niveles de 10^{-9} M y correlaciones lineales casi perfectas ($R^2 \approx 0.9969$). La innovación reside en que el sistema elimina la necesidad de funcionalizar químicamente los sustratos y reduce la fluorescencia de fondo, facilitando la detección directa en agua natural filtrada. Además, su capacidad para discriminar múltiples PAHs en una sola medición evidencia el potencial de la SERS dual para el monitoreo simultáneo y en sitio de contaminantes traza en cuerpos de agua. Sin embargo, la complejidad instrumental del sistema —que requiere sincronización óptica precisa y control térmico para evitar la degradación de los nanomateriales— aún limita su portabilidad y escalabilidad operativa. A continuación, se puede observar el espectro RAMAN de las muestras de Pireno y su curva de calibración obtenida por Zhang y colaboradores.

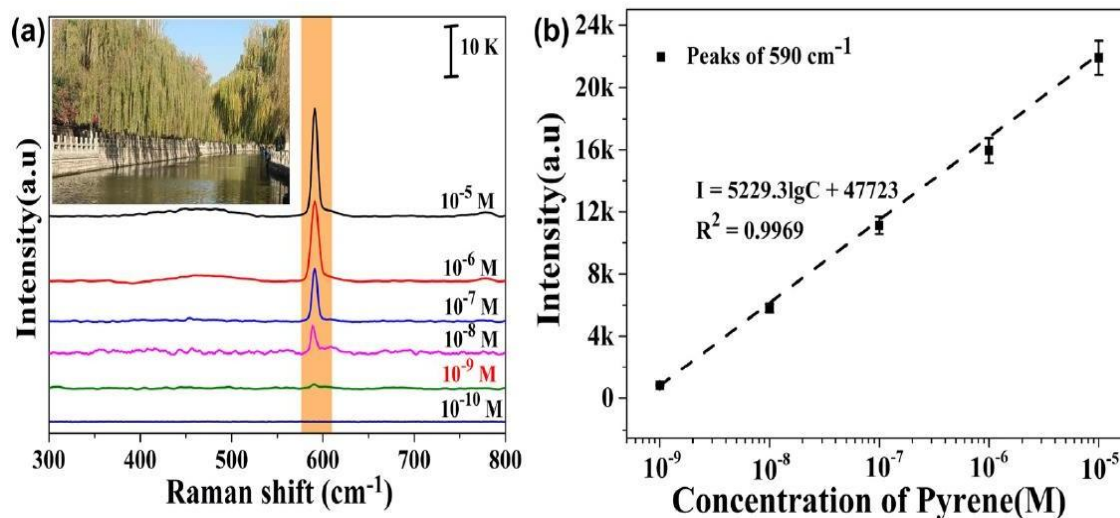


Figura 1. (a) Espectro Raman de moléculas de Pireno en diferentes concentraciones en solución con agua de lago, (b) Curva de calibración de la intensidad en función de la concentración de Pireno. (Zhang et al., 2022).

En conjunto, los estudios ilustran una tendencia clara hacia la integración de métodos espectroscópicos multiescalares y multimodales para abordar la complejidad de los PAHs y TPHs en matrices naturales. Mientras Jacq et al. (2024) avanza hacia la cuantificación espacial de contaminantes en sólidos, Zhang et al. (2022) optimizan la detección a nivel molecular en soluciones reales. Estas aproximaciones, basadas en principios ópticos complementarios, abren la puerta al desarrollo de sistemas híbridos portátiles, capaces de combinar resolución espectral, espacial y temporal para una vigilancia ambiental más precisa, rápida y sostenible. La convergencia entre la hiperespectroscopía, la quimiometría y la nanotecnología redefine así el papel del NIR y SERS como herramientas estratégicas en la evaluación integral de la contaminación por hidrocarburos aromáticos policíclicos en el ambiente. La mayoría de los estudios en matrices como aguas de laguna han empleado métodos predictivos como Regresión de componentes principales (PCR), Regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) y técnicas de aprendizaje automático como Bosques aleatorios (RF), Regresión de máquina de vectores de soporte (SVR).

Aplicaciones de NIRS en sistemas astroquímicos

En astrofísica, la distribución de energía espectral (SED) es una herramienta esencial para describir cómo la energía total de un objeto celeste se distribuye en función de la longitud de onda o la frecuencia. Su integración, expresada como

$$F_{bol} = \int F_{\lambda} d\lambda = \int F_{\nu} d\nu,$$

permite determinar el flujo bolométrico (F_{bol}), directamente relacionado con la temperatura efectiva, la composición y la dinámica radiativa del sistema. En el espectro infrarrojo, la emisión se divide convencionalmente en tres regiones con distintos orígenes físicos: VIS/NIR (1-3 μm): dominada por la radiación de la estrella central; MIR (3-25 μm): asociada al polvo caliente y al disco interno; FIR (25-200 μm): correspondiente al polvo frío del disco externo. Estas regiones, cuando se integran en una SED, ofrecen una visión completa de los mecanismos energéticos y químicos en sistemas como los discos protoplanetarios (PPDs) y las nebulosas planetarias (PNs), donde los PAHs actúan como trazadores de la evolución del polvo y la radiación.

El conjunto de investigaciones analizadas refleja cómo el uso del infrarrojo cercano (NIR) y medio (MIR) ha evolucionado desde la simulación teórica hasta la observación empírica y el análisis estadístico aplicado a diferentes escalas astrofísicas. En todos los casos, las longitudes de onda estudiadas (3 y 11 μm en emisiones asociadas a PAHs, y extendiéndose hasta 24 μm en algunos estudios MIR) han permitido caracterizar procesos físicos como la ionización, la distribución del polvo y la variabilidad estelar. La siguiente tabla resume particularidades de estos estudios.

Tabla 8. Resumen de estudios de NIRs en PAHs para muestras aplicadas en sistemas astroquímicos

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Lange, et al., (2024).	IFU de JWST/NIRSpec o MIRI, y VLT/VISIR-NEAR	Discos protoplanetarios alrededor de estrellas tipo Herbig Ae/Be	Simulación del perfil espectral de emisión de PAHs en IR (3-20 μm), proyecta posible IR alrededor de 3.3 μm , 6 μm y 11.3 μm modelos de ionización y tamaño molecular con posible uso espacial con JWST	el estudio se apoya en simulación física de discos (radiative transfer) y análisis de perfiles radiales sintéticos,	Se compara la información obtenida por análisis de SED.
Esposito, et al., (2024).	cálculos teóricos basados (DFT/anharmonic),	isómeros computados de CN-PAHs (17 isómeros de 4 PAHs y benceno), sin muestras físicas.	Regiones destacadas en alta resolución (FWHM $\approx 1 \text{ cm}^{-1}$): 700-950, 1100-1300, 2000-2500, 3400-3600 cm^{-1} . Regiones menos afectadas por sustitución ciano: 2950-3200 cm^{-1} (estiramiento fundamental CH) y 5950-6200 cm^{-1} (primer sobretono CH) Bandas clave: intensa y única alrededor de 2300 cm^{-1} (CN stretch), muy distintiva para CN-PAHs	análisis cualitativo comparativo entre espectros simulados de CN-PAHs versus PAHs puros.	No se compara NIR experimental con otras matrices o técnicas.
Anand, et al., (2020).	TIFR Near Infrared Camera-II (TIRCAM2), con detector InSb montado en el telescopio óptico Devasthal (DOT).	Objetos astronómicos: las nebulosas planetarias NGC 7027 y BD +30° 3639.	imágenes con filtros J ($\approx 1.2 \mu\text{m}$), H ($\approx 1.65 \mu\text{m}$), K ($\approx 2.19 \mu\text{m}$), PAH (3.28 μm) y nBL (3.59 μm), con calibración fotométrica utilizando estrellas estándar, corrección de frames oscuros, flat-fields y reducción aplicada mediante IRAF y DAOPHOT-II. 3.28 μm (PAH C-H stretch, banda aromática). 3.59 μm (nBL), referencia de continuo.	El análisis fue cualitativo y morfológico. Se aplicó análisis de imágenes, construcción de contraste.	No se aplicó comparación con otras matrices; el enfoque fue puramente observacional en NIR.
Onaka, et al., (2018).	Infrared Camera (IRC) a bordo del satélite AKARI.	Se observan dos galaxias en fusión: NGC 2782 (Arp 215) y NGC 7727 (Arp 222).	El canal NIR fue operado en modo punteado (pointed). NIR ($\sim 2 \mu\text{m}$) a MIR ($\sim 24 \mu\text{m}$ o más), énfasis en bandas de 7-15 μm (PAHs) y datos hasta más allá de 24 μm .	Uso de comparaciones cuantitativas.	Se enfoca más bien en los resultados obtenidos con el IRC.
Yang, et al., (2018).	2MASS (NIR), Spitzer e WISE (MIR)	La muestra consiste en 773 candidatos a RSG compilados desde literatura previa.	Los datos provinieron de catálogos públicos: 2MASS, Spitzer/SAGE e WISE/ALLWISE + NEOWISE-R. 12 bandas NIR-MIR abarcando desde 2MASS, pasando por Spitzer, hasta WISE, además de S9W.	Confirmación de candidatos mediante CMD, SED y análisis de la variabilidad temporal en MIR. Correlaciones estadísticas entre variabilidad en MIR, tasa de pérdida de masa, brillo y color .	El estudio se basa íntegramente en fotometría de catálogos NIR-MIR.

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Mattioda, et al., (2005).	Espectrómetro NIR	PAHs en estado sólido Muestras puras de PAHs Espacio Comparación con espectros de PAHs observados en regiones del espacio interestelar	Bandas NIR características en 1.0-1.8 μm , asociadas con modos vibracionales de C-H y C-C	No se especificaron análisis estadísticos	Comparación con espectros de PAHs observados en regiones del espacio interestelar

Lange et al. (2024) utilizó el código de transferencia radiativa RADMC-3D para recrear modelos de SED en discos protoplanetarios, con el objetivo de anticipar los resultados que podrían obtenerse mediante observaciones del telescopio espacial James Webb (JWST). Se evaluaron dos configuraciones: Disco suave (Smooth Disc): con abundancia total de PAHs en fase gaseosa del 1% respecto al medio interestelar, mientras que el 99% restante se halla congelado en granos de polvo y el Disco con “gap” de PAHs: caracterizado por una deficiencia de PAHs en el disco interno y abundancia normal en el disco externo. Mediante simulaciones radiativas en 3, 6 y 11 μm , demostrando que los perfiles radiales de emisión PAHs siguen leyes de potencia dobles que diferencian regiones internas y externas de discos protoplanetarios. Aunque carece de métricas estadísticas (p. ej., R^2 o errores cuantitativos), se resalta la necesidad de observaciones espacialmente resueltas con instrumentos como JWST/NIRSpec o VLT/VISIR-NEAR. Los resultados sugieren que las futuras imágenes espaciales de alta resolución del JWST/NIRSpec o MIRI podrían validar las predicciones teóricas, resolviendo diferencias entre la SED integrada y la estructura espacial real del disco.

Esposito et al. aplicaron cálculos anarmónicos de alta resolución (700-6200 cm^{-1} , equivalentes a $\sim 1.6\text{-}14 \mu\text{m}$), identificando una banda distintiva en $\sim 2300 \text{cm}^{-1}$ (CN stretch) que diferencia a los CN-PAHs de los PAHs puros. Sus simulaciones muestran cómo un aumento del ensanchamiento espectral (de 1 a 15 cm^{-1} FWHM) puede hacer desaparecer las firmas moleculares, revelando la importancia crítica de la resolución espectral en la astroquímica observacional. Anand et al. (2020) aplicaron observaciones NIR con el instrumento TIRCAM2, instalado en el telescopio óptico Devasthal (DOT, 3.6 m), para analizar las nebulosas planetarias NGC 7027 y BD +30° 3639. Las imágenes fueron obtenidas en filtros de banda ancha (1200, 1650 y 2190 nm) y filtros de banda estrecha centrados en 3280 nm, correspondiente a la emisión aromática característica de los PAHs. Los resultados muestran diferencias morfológicas y de excitación notables: NGC 7027 es una nebulosa joven, rica en carbono y de alta excitación electrónica, con morfología elíptica multipolar y una población de PAHs altamente ionizados y BD +30° 3639, también joven y rica en carbono, presenta baja excitación electrónica, una forma anular simétrica y una población de PAHs neutros y recientemente formados. El uso del contraste fotométrico entre la banda de emisión PAH (3.28 μm) y el continuo (3.59 μm) permitió distinguir espacialmente las regiones aromáticas activas dentro de las nebulosas, confirmando la utilidad del NIR para detectar y mapear PAHs desde tierra, incluso sin espectros detallados.

A una escala mayor, Onaka et al. (2018) integraron observaciones NIR-MIR (1.8-26.5 μm) con la cámara IRC a bordo de AKARI, relacionando las emisiones de PAHs (7-15 μm) con la formación estelar en galaxias en fusión. Aunque sin reportar métricas formales, los autores muestran una correspondencia cuantitativa entre la tasa de formación estelar (SFR) derivada del MIR y las obtenidas con líneas ópticas (H α) y [C II] 158 μm , validando la coherencia del método.

Finalmente, el estudio estadístico de Yang et al. (2018) abarca 12 bandas NIR-MIR (2-24 μm) provenientes de 2MASS, Spitzer y WISE, aplicando correlaciones entre brillo, color y variabilidad en una muestra de 773 supergigantes rojas (RSGs). Aunque no se emplearon técnicas de modelado avanzado, el análisis de correlación permitió identificar una tendencia clara: la variabilidad MIR aumenta con la tasa de pérdida de masa, confirmando la relación entre actividad estelar y polvo circunestelar. Los estudios revisados muestran una evolución metodológica desde el modelado físico y espectroscópico hacia el análisis observacional y estadístico multibanda. Las longitudes infrarrojas, especialmente entre 3 y 15 μm , emergen como el rango clave para identificar y caracterizar PAHs, mientras que las bandas largas (hasta 24 μm) permiten evaluar procesos de polvo y variabilidad. Aunque la mayoría de los trabajos carece de métricas estadísticas comparables (R^2 , SNR o incertidumbres), sus resultados ofrecen bases sólidas para futuros análisis cuantitativos.

Otras aplicaciones

El uso de la NIRs y sus variantes ha demostrado un notable avance en la caracterización, detección y control de contaminantes orgánicos e inorgánicos en distintas matrices ambientales e industriales. Diversos autores han explorado su aplicación combinando metodologías instrumentales y quimiométricas, lo que ha permitido ampliar su campo de acción desde la identificación de hidrocarburos en diferentes matrices hasta la predicción de calidad alimentaria y la evaluación de procesos de descontaminación. La siguiente tabla muestra un resumen de los alcances de la revisión:

Tabla 9. Resumen de estudios de NIRs en PAHs en otras muestras como alimentos, parafinas, plásticos, etc.

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
Hattori, et al., 2024..	Computacional de moléculas PAHs dopadas con dos átomos de boro (dithieno-diboraperylenos) Calculos TD-DFT	Simulación de soluciones diluidas en tolueno, usadas para medir espectros UV/Vis y emisión fotoluminiscente en NIR.	Emisión detectada alrededor de 724 nm; cuantificada espectroscópicamente con medida de rendimiento cuántico ($\phi \approx 0.40$)	No se aplicaron técnicas estadístico-quimiométricas; se utilizaron criterios computacionales.	Respuesta PAHs dopados y sin dopar con boro
Park, et al., (2024).	UV-Vis-NIR: ATR-FTIR:	Katsuobushi: atún listado (skipjack) ahumado y seco con distintos números de tratamientos de ahumado	No se detallan rangos específicos ni condiciones instrumentales en los resúmenes accesibles	PCA, PLS-DA, HCA PLSR alta correlación entre datos espectrales (FTIR y NIR) y metabolitos identificados por referencia ($R^2 > 0.95$)	GC-MS
Barea-Sepúlveda, Met al., (2024).	Espectrómetro Vis-NIR ASD FieldSpec® 4	Mezclas de parafinas y microparafinas derivadas del petróleo, usadas en aplicaciones industriales y alimentarias. Blends de ceras sólidas, preparados en condiciones controladas de laboratorio.	Rango: 350-2500 nm. Resolución: 3 nm (350-1000 nm), 10 nm (1000-2500 nm). Mediciones con iluminación halógena y fibra óptica de contacto. Se desarrolló una aplicación web interactiva para procesamiento de datos. 1200-1250 nm y 1700-1800 nm (absorciones relacionadas con enlaces C-H). 2100-2300 nm (sobretonos y combinaciones de C-H y C-C).	Modelos de regresión: PLSR, SVR y RF. Algoritmo Boruta y Algoritmo Genético (GA), y El modelo Boruta-PLS mostró el mejor desempeño: $R^2 = 0.9925$ con $RMSE = 2.972$ (test set), y $R^2 = 0.9977$ con $RMSE = 1.814$ (validación externa).	No se detalla.
Adade, et al., (2024).	Espectrómetro FT-NIR Bruker Tensor 27 con accesorio de reflectancia difusa (DRIFT).	Aceites comestibles (vegetales). Aceites contaminados artificialmente con diferentes concentraciones de benzo[b]fluoranteno	Rango espectral: 1000-2500 nm. Resolución: 4 cm^{-1} . Muestras medidas directamente sin preparación compleja.	PCA, PLSR, SVM Selección de variables con CARS y SPA. 1200-1250 nm y 1700-1800 nm (vibraciones C-H aromáticas). 2100-2300 nm (sobretonos y combinaciones C-H y C=C).	No se detalla.
Hui Jiang, et al., 2025.	Espectrómetro FT-NIR de Thermo Fisher Scientific,	Aceite de maní (peanut oil). contaminadas, con cinco tipos de contaminantes minerales (diesel, queroseno, lubricante, aceite de motor, aceite	Rango espectral $4000\text{-}10000 \text{ cm}^{-1}$. Se realizaron tres escaneos por muestra para asegurar reproducibilidad.	Cualitativa PLS-DA, KNN, SVM y redes neuronales (BPNN). El modelo PLS-DA logró 100% de exactitud en distinguir	No se detalla

Referencia	Equipo NIR	Matriz	Condiciones NIR	Técnicas estadísticas	Comparación
		mineral blanco) en concentraciones entre 0,5 mg/kg a 30 mg/kg.		muestras contaminadas de limpias. Cuantitativa: PLS-DA: 100 % de exactitud entre contaminado y no contaminado. SVR: $R > 0.98$ para contaminantes como diesel, aceite mineral blanco y lubricante. PLSR: $R_p = 0.9335$ queroseno y $R_p = 0.9270$ aceite de motor	
Alassali, et al., (2020).	Espectrómetro FT-NIR Bruker (Billerica, MA, EE. UU.).	Plásticos de HD-PE, retirados de contenedores de aceite, analizados tanto en estado original y después de extracción supercrítica	Triple escaneo por muestra (256 escaneos cada uno), resolución: 16 cm^{-1} .	Aumentos en: $10,730 \text{ cm}^{-1}$ (-OH, humedad); $8,960 \text{ cm}^{-1}$ (C=C, vinilo segundo sobretono); $8,250 \text{ cm}^{-1}$ (-CH ₂ -segundo sobretono simétrico). Disminución en: $5,600 \text{ cm}^{-1}$ (-CH ₃ - primer sobretono simétrico)	GC-MS.
Jin, et al., (2020).	Espectroscopía de reflectancia difusa UV-vis-NIR	Compuesto $\text{BiO}_2\text{-x/Ag}_3\text{PO}_4$ sobre nanotubos de carbono (CNT), diseñado para la remoción de PAHs (como naftaleno y pireno)	Evalúa la capacidad de absorción óptica del composite bajo irradiación de banda ancha (visible y NIR)	En comparación con sus componentes individuales ($\text{BiO}_2\text{-x}$ o Ag_3PO_4 solos), el composite destaca por tener una menor brecha de banda, lo que mejora la absorción óptica y la eficiencia fotocatalítica en el rango visible-NIR.	caracterización, como FT-IR, Raman, XRD, SEM con mapeo, TEM, y pruebas fotocatalíticas

UV-Vis-NIR: Espectroscopía ultravioleta-visible-infrarrojo cercano. ATR-FTIR: Fórmula transformada de infrarrojo (espectroscopía por reflexión total atenuada. PCA (Análisis de Componentes Principales). PLS-DA (Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales – Análisis Discriminante). HCA (Análisis de Agrupamiento Jerárquico) PLSR (Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales. Random Forest (RF). SVM (Support Vector Machine).

Hattori (2024) centra sus estudios en el diseño molecular de compuestos emisores NIR mediante cálculos TD-DFT y verificación experimental. Las moléculas desarrolladas, basadas en PAHs dopados con boro, exhibieron emisión estable en torno a 724 nm, lo que evidencia el potencial del NIR para el diseño de materiales optoelectrónicos. Este estudio destaca la convergencia entre química computacional y espectroscopía, subrayando la capacidad predictiva teórica frente al enfoque empírico tradicional.

En el ámbito alimentario, Park, Yu, Ko y Park (2024) aplicaron técnicas combinadas de UV-Vis-NIR y ATR-FTIR junto con herramientas quimiométricas (PCA, PLS-DA, HCA y PLSR) para predecir la calidad del *katsuobushi* según el número de tratamientos de ahumado. Los resultados indicaron que la NIR ofreció mayor capacidad predictiva ($R^2P > 0.95$) que la FTIR, lo cual refuerza la superioridad de la región NIR para el análisis de compuestos orgánicos complejos en alimentos. De forma similar, Barea-Sepúlveda, Calle, Ferreiro-González y Palma (2024) implementaron modelos de aprendizaje automático (PLSR, SVR y Random Forest) sobre datos Vis-NIR para caracterizar mezclas de ceras de petróleo, logrando precisiones de predicción superiores al 99 % ($R^2 = 0.9977$). Estos resultados

demuestran la solidez de la combinación entre espectroscopía NIR y algoritmos de selección de variables para aplicaciones industriales automatizadas.

Por otra parte, Adade et al. (2024) desarrollaron un método rápido para la detección del contaminante benzo[b]fluoranteno (BbF) en aceites comestibles, utilizando un sistema FT-NIR Bruker Tensor 27 en modo reflectancia difusa. Mediante PCA, PLSR, SVM y selección de variables (CARS, SPA), alcanzaron coeficientes de predicción superiores al 0.90 en la cuantificación de BbF, lo que valida la utilidad del NIR para el monitoreo de contaminantes en alimentos grasos, donde la interferencia por humedad es mínima. En la misma línea, Jiang, Meng, Deng y Zhu (2025) reportaron un desempeño sobresaliente del FT-NIR para detectar aceites minerales en aceite de maní, alcanzando una exactitud del 100 % en clasificación mediante PLS-DA y valores de R_p superiores a 0.98 con SVR para distintos contaminantes. Estos estudios confirman la eficacia del NIR para el control de calidad y la detección de contaminantes orgánicos en matrices alimentarias complejas.

El potencial del NIR también ha sido explorado en materiales no alimentarios. Alassali, et al. (2020) evaluaron la extracción supercrítica con CO_2 como método de descontaminación de plásticos HD-PE usando FT-NIR. Aunque su análisis fue principalmente cualitativo, la variación de absorbancia en bandas como $10\,730\text{ cm}^{-1}$ (-OH) y $8\,960\text{ cm}^{-1}$ (C=C) permitió evidenciar que el tratamiento no degradaba el polímero. Esto demuestra la utilidad del NIR no solo para detección de contaminantes, sino también para verificar la integridad estructural de materiales sometidos a procesos de limpieza o reciclaje.

Por otro lado, la espectroscopía Raman en el rango NIR ha mostrado ventajas analíticas relevantes. Schrader (1991) utilizó un sistema NIR-FT-Raman (1064 nm) para caracterizar hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), obteniendo espectros libres de interferencia por fluorescencia. Este trabajo pionero cimentó la base para el uso del NIR en análisis de petróleo y derivados, destacando su capacidad para generar huellas espectrales limpias y reproducibles. De manera más reciente, Jin et al. (2020) aplicaron espectroscopía UV-vis-NIR de reflectancia difusa para estudiar compuestos fotocatalíticos ($\text{BiO}_2\text{-x/Ag}_3\text{PO}_4\text{/CNT}$) en la degradación de PAHs, demostrando una absorción extendida hacia el infrarrojo cercano y una eficiencia de remoción del 90 % bajo irradiación visible y NIR, lo que amplía las posibilidades del NIR hacia aplicaciones fotocatalíticas y energéticas.

En conjunto, los estudios revisados confirman que la espectroscopía NIR, especialmente cuando se acopla a modelos estadísticos avanzados como PLS, PCA, SVR o redes neuronales, constituye una herramienta robusta, rápida y no destructiva para el análisis de contaminantes, la predicción de calidad y la caracterización de materiales. Aunque cada aplicación presenta desafíos específicos — como la necesidad de preprocesamiento espectral o la dependencia de la matriz—, la tendencia general apunta hacia una integración creciente del NIR en entornos de control industrial y ambiental. En comparación con técnicas como FTIR o Raman, el NIR ofrece una mayor penetración óptica y menor interferencia por agua, características que lo convierten en una opción versátil para sistemas complejos, desde suelos contaminados hasta aceites alimentarios o polímeros reciclados.

Comparación con otras técnicas analíticas y aplicaciones futuras

La NIRs ha emergido como una herramienta prometedora para el análisis de PAHs en matrices ambientales y biológicas, ofreciendo ventajas que la diferencian de técnicas más tradicionales como GC-MS, HPLC, FTIR o UV-Vis. A diferencia de estas últimas, NIRS permite obtener información espectral de manera rápida y no destructiva, con mínima preparación de muestra, lo que la hace particularmente atractiva para estudios de monitoreo ambiental en campo. La portabilidad de los equipos NIR facilita la obtención de datos en tiempo real, mientras que su capacidad para analizar múltiples componentes simultáneamente la convierte en una opción eficiente para evaluaciones de grandes volúmenes de muestras o estudios de tendencia espacial y temporal de PAHs.

Sin embargo, la sensibilidad y selectividad de NIRS no alcanzan los niveles de técnicas cromatográficas de referencia. Por ejemplo, GC-MS y HPLC proporcionan una identificación específica de los compuestos y permiten cuantificaciones precisas incluso a niveles de trazas, mientras que NIRS requiere calibraciones cuidadosas y modelos predictivos robustos para lograr resultados fiables. En este sentido, los modelos quimiométricos, como la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR) o técnicas multivariantes avanzadas, son fundamentales para correlacionar los espectros NIR con las concentraciones de PAHs, minimizando la interferencia de matrices complejas y mejorando la precisión de la cuantificación.

A pesar de estas limitaciones, NIRS encuentra aplicaciones complementarias o incluso alternativas viables en contextos específicos. En estudios de monitoreo ambiental, por ejemplo, puede utilizarse

como método de screening previo para identificar áreas contaminadas, optimizando recursos antes de realizar análisis confirmatorios con GC-MS o HPLC. Asimismo, es útil en investigaciones exploratorias y estudios longitudinales de sitios afectados por incendios forestales, derrames de petróleo o contaminación sedimentaria, donde la rapidez, la capacidad de análisis no destructivo y la posibilidad de mapear grandes áreas son criterios esenciales. De hecho, la integración de NIRS con técnicas quimiométricas y sensores portátiles permite una aproximación más eficiente a la vigilancia ambiental, facilitando la identificación de tendencias y la evaluación de riesgos sin comprometer la integridad de las muestras.

La aplicación más robusta se encuentra en el monitoreo ambiental, específicamente en la detección y cuantificación de PAHs en suelos contaminados por derrames o procesos industriales. Sin embargo, el estudio abre puertas a aplicaciones innovadoras: la detección de PAHs en aceites comestibles (seguridad alimentaria), el desarrollo de nuevos fotocatalizadores para la eliminación de compuestos específicos (Naftaleno, Pireno) y su rol como una herramienta remota en la Astroquímica para identificar la presencia de estas moléculas en el espacio. En resumen, la revisión valida el NIRS no solo como una herramienta de apoyo, sino como una tecnología capaz de liderar la vigilancia rápida, económica y ecológica de la contaminación por PAHs.

4. CONCLUSIONES

Aunque la NIRs enfrenta desafíos inherentes relacionados con su sensibilidad, resolución espectral y capacidad de discriminación en matrices complejas, su adaptabilidad tecnológica, junto con su compatibilidad con técnicas quimiométricas avanzadas, la posicionan como una herramienta con gran potencial para el estudio de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs). La optimización continua de modelos predictivos, la integración con sistemas de monitoreo inteligentes y el desarrollo de sensores portátiles representan oportunidades clave para consolidar a la NIRS como una alternativa viable, rápida y eficiente dentro del análisis ambiental de contaminantes orgánicos. La NIRS se confirma como una técnica versátil y complementaria para el análisis de PAHs, especialmente cuando se requiere rapidez, capacidad de análisis *in situ* y reducción de costos operativos. Si bien no sustituye completamente a métodos de referencia de alta resolución como GC-MS o HPLC para la identificación individual de compuestos, su mayor valor reside en la obtención de información cuantitativa preliminar en tiempo real y con una preparación mínima de muestra. Estas ventajas facilitan su integración en estrategias analíticas combinadas, donde puede actuar como un método de cribado rápido antes de análisis confirmatorios más detallados.

Las variantes espectroscópicas, Vis-NIR, FT-NIR y NIR-SERS, amplían aún más su aplicabilidad, consolidándose como herramientas no destructivas, con mínimo pretratamiento de muestra y alta reproducibilidad para la predicción, detección y cuantificación de PAHs en matrices tan diversas como suelos, sedimentos, aceites, alimentos y sistemas industriales o astrofísicos. Las absorciones en esta región se asocian principalmente con sobretonos y combinaciones de las vibraciones fundamentales de los enlaces C-H y O-H, características tanto de los PAHs como de las matrices orgánicas en las que suelen encontrarse. La aplicación de enfoques quimiométricos avanzados – como PLSR para regresión y cuantificación, PLS-DA y SVM para clasificación y discriminación, o RF y SVR para el tratamiento de no linealidades– ha sido fundamental para convertir los datos espectrales en información analíticamente útil. Estas herramientas han permitido que los resultados obtenidos mediante NIRS se acerquen progresivamente en precisión y reproducibilidad a los generados por técnicas instrumentales convencionales, reafirmando su papel como una alternativa sostenible, ágil y tecnológicamente escalable para el estudio y monitoreo de PAHs en diferentes contextos ambientales.

5. AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, a la Fuente Inagotable de la Creación, de donde emana el entendimiento y el conocimiento infinito. A la fuerza de la razón y el discernimiento que guían la búsqueda incansable de la verdad que intercede entre la teoría y la realidad. Y a todos aquellos fenómenos aún por descubrir pero que fueron como chispa para encender el combustible del pensamiento y encontrar respuestas en la revisión sistemática.

Mi más sincero y profundo agradecimiento a la profesora Sandra Patricia Castro Narváez, mi tutora de grado. Su guía estratégica, la calidez de su apoyo y su riguroso profesionalismo, capaz de aterrizar las ideas más abstractas, fueron esenciales. Por su compromiso, por cada corrección detallada y por desafiarme a continuar por las vías de la excelencia, este logro es también suyo.

6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Adade, S. Y. S. S., Lin, H., Johnson, N. A. N., Qianqian, S., Nunekpeku, X., Ahmad, W., ... & Chen, Q. (2024). Rapid qualitative and quantitative analysis of benzo (b) fluoranthene (BbF) in shrimp using SERS-based sensor coupled with chemometric models. *Food Chemistry*, 454, 139836. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.139836>
- Alassali, A., Aboud, N., Kuchta, K., Jaeger, P., & Zeinolebadi, A. (2020). Assessment of Supercritical CO₂ Extraction as a Method for Plastic Waste Decontamination. *Polymers*, 12(6), 1347. <https://doi.org/10.3390/polym12061347>
- Anand, R. K., Rastogi, S., Kumar, B., Ghosh, A., Sharma, S., Ojha, D. K., & Ghosh, S. K. (2020). Detection of PAH and nBL features in planetary nebulae NGC 7027 and BD +30° 3639 with TIRCAM2 instrument on 3.6 m DOT. *Journal of Astrophysics and Astronomy*, 41(1). <https://doi.org/10.1007/s12036-020-09644-9>
- Arena, A., Ferracane, A., Zoccali, M., Tranchida, P. Q., & Mondello, L. (2024). A dilute-and-inject liquid-gas chromatography-mass spectrometry method for the analysis of sixteen polycyclic aromatic hydrocarbons in extra-virgin olive oil. *Analytica Chimica Acta*, 1312(May), 342740. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2024.342740>
- Argiriadis, E., Denniston, R. F., Ondei, S., Bowman, D. M. J. S., Genuzio, G., Nguyen, H. Q. A., ... Barbante, C. (2024). Polycyclic aromatic hydrocarbons in tropical Australian stalagmites: a framework for reconstructing paleofire activity. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 366, 250-266. <https://doi.org/10.1016/j.gca.2023.11.033>
- Barea-Sepúlveda, M., Calle, J. L. P., Ferreiro-González, M., & Palma, M. (2024). Machine learning-based approaches to Vis-NIR data for the automated characterization of petroleum wax blends. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 310, 123910. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2024.123910>
- Barea-Sepúlveda, M., Ferreiro-González, M., Calle, J. L. P., Barbero, G. F., Ayuso, J., & Palma, M. (2022). Comparison of different processing approaches by SVM and RF on HS-MS eNose and NIR Spectrometry data for the discrimination of gasoline samples. *Microchemical Journal*, 172, 106893. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2021.106893>
- Berthiaume, A., Galarneau, E., & Marson, G. (2021). Polycyclic aromatic compounds (PACs) in the Canadian environment: Sources and emissions. *Environmental Pollution*, 269, 116008. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.116008>
- Bingari, H. S., Gibson, A., Butcher, E., Teeuw, R., & Couceiro, F. (2023). Application of near infrared spectroscopy in sub-surface monitoring of petroleum contaminants in laboratory-prepared soils. *Soil and Sediment Contamination: An International Journal*, 32(4), 400-416. <https://doi.org/10.1080/15320383.2022.2095978>
- Chen, C. S., & Tien, C. J. (2020). Factors affecting in situ analysis of total petroleum hydrocarbons in contaminated soils by using a mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Chemosphere*, 261, 127751. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.127751>
- Deng, J., Jiang, H., & Chen, Q. (2025). Qualitative and quantitative analysis of mineral oil pollution in peanut oil by Fourier transform near-infrared spectroscopy. *Food Chemistry*, 469, 142590. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.142590>
- Dong, G., Li, X., Yang, R., Yang, Y., Liu, H., & Wu, N. (2021). Correction method of effect of soil moisture on the fluorescence intensity of polycyclic aromatic hydrocarbons based on near-infrared diffuse reflection spectroscopy. *Environmental Pollution*, 269, 116150. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.116150>
- Dong, Guangyu, Jiang, L., Nie, L., Liao, J., Geng, X., Liu, W., Meng, D., Xu, M., Liu, N., Zhou, Q., & Chen, C. (2025). Sensitive measurement of polycyclic aromatic hydrocarbons based on strong enrichment from magnetic covalent organic framework before high performance liquid chromatography analysis. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 13(2), 115389. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.115389>
- Dong, G. Yu, Y., Yang, Y., Cui, M., & Yang, R. (2024). Correction of the Effect of Humic Acids on the Fluorescence Detection of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by Combination Spectroscopy. *Applied Spectroscopy*, 1-7. <https://doi.org/10.1177/00037028241250011>

- dos Reis Medeiros, S. C., Scafutto, R. D. P. M., & de Souza Filho, C. R. (2024). Temporal analysis of emissivity variation of mineral substrates impregnated with hydrocarbons: Significance for oil exploration and environmental pollution monitoring. *Fuel*, 375, 132590. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132590>
- Douglas, R. K., Nawar, S., Alamar, M. C., Coulon, F., & Mouazen, A. M. (2019). Rapid detection of alkanes and polycyclic aromatic hydrocarbons in oil-contaminated soil with visible near-infrared spectroscopy. *European Journal of Soil Science*, 70(1), 140-150. <https://doi.org/10.1111/ejss.12567>
- Douglas, R. K., Nawar, S., Alamar, M. C., Mouazen, A. M., & Coulon, F. (2018). Rapid prediction of total petroleum hydrocarbons concentration in contaminated soil using vis-NIR spectroscopy and regression techniques. *Science of the Total Environment*, 616, 147-155. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.10.323>
- Douglas, R. K., Nawar, S., Cipullo, S., Alamar, M. C., Coulon, F., & Mouazen, A. M. (2018). Evaluation of vis-NIR reflectance spectroscopy sensitivity to weathering for enhanced assessment of oil contaminated soils. *Science of the Total Environment*, 626, 1108-1120. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.01.122>
- Esposito, V. J., Allamandola, L. J., Boersma, C., Bregman, J. D., Fortenberry, R. C., Maragkoudakis, A., & Temi, P. (2024). Anharmonic IR absorption spectra of the prototypical interstellar PAHs phenanthrene, pyrene, and pentacene in their neutral and cation states. *Molecular Physics*, 122(7-8), e2252936. <https://doi.org/10.1080/00268976.2023.2252936>
- Freije, S. L., Enquobahrie, D. A., Day, D. B., Loftus, C., Szpiro, A. A., Karr, C. J., Trasande, L., Kahn, L. G., Barrett, E., Kannan, K., Bush, N. R., LeWinn, K. Z., Swan, S., Alex Mason, W., Robinson, M., & Sathyanarayana, S. (2022). Prenatal exposure to polycyclic aromatic hydrocarbons and gestational age at birth. *Environment international*, 164, 107246. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2022.107246>
- Hattori, I., Hagai, M., Ito, M., Sakai, M., Narita, H., Fujimoto, K. J., ... & Yamaguchi, S. (2024). In Silico Screening and Experimental Verification of Near-Infrared-Emissive Two-Boron-Doped Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *Angewandte Chemie*, 136(22), e202403829. <https://doi.org/10.1002/ange.202403829>
- Jacq, K., Debret, M., Gardes, T., Demarest, M., Humbert, K., & Portet-Koltalo, F. (2024). Spatial distribution of polycyclic aromatic hydrocarbons in sediment deposits in a Seine estuary tributary by hyperspectral imaging. *Science of The Total Environment*, 950, 175306. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.175306>
- Jiang, H., Meng, F., Deng, J., & Zhu, J. (2025). Detecting fossil oil contaminants in peanut oil using NIR spectroscopy: Enhanced feature selection through mutual information and Shapley Additive Explanations. *Infrared Physics & Technology*, 105960. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2025.105960>
- Jin, J., Sun, J., Lv, K., Guo, X., Liu, J., Bai, Y., Huang, X., Liu, J., & Wang, J. (2020). Oxygen-Vacancy-Rich BiO₂-x/Ag₃PO₄/CNT Composite for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) Removal via Visible and Near-Infrared Light Irradiation. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 59(13), 5725-5735. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c00232>
- Karimian, F., Ayoubi, S., Khalili, B., Mireei, S. A., & Al-Mulla, Y. (2024). Using visible and near infrared spectroscopy and machine learning for estimating total petroleum hydrocarbons in contaminated soils. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 32(4-5), 152-162. <https://doi.org/10.1177/09670335241269168>
- Klimkowicz-Pawlas, A., & Debaene, G. (2020). Screening risk assessment of agricultural areas under a high level of anthropopressure based on chemical indexes and VIS-NIR spectroscopy. *Molecules*, 25(14), 3151. <https://doi.org/10.3390/molecules25143151>
- Konstantinova, E., Minkina, T., Sushkova, S., Antonenko, E., & Konstantinov, A. (2020). Levels, sources, and toxicity assessment of polycyclic aromatic hydrocarbons in urban topsoils of an intensively developing Western Siberian city. *Environmental Geochemistry and Health*, 42(1), 325-341. <https://doi.org/10.1007/s10653-019-00357-9>
- Kumar, N., & Singh, A. K. (2022). Impact of environmental factors on human semen quality and male fertility: a narrative review. *Environmental Sciences Europe*, 34(1), 6. <https://doi.org/10.1186/s12302-021-00585-w>
- Lange, K., Dominik, C., & Tielens, A. G. G. M. (2024). The need for spatially resolved observations of polycyclic aromatic hydrocarbons in protoplanetary discs. *Astronomy & Astrophysics*, 686, A181. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202347580>
- Lei, T., Li, X., Zhang, J., Yang, R., Dong, G., Yang, Y., & Liu, H. (2021). Correction for the effect of soil types on the fluorescence intensity of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 257, 119807. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.119807>

- Lemmens, A. K., Rap, D. B., Thunnissen, J. M., Gruet, S., Steber, A. L., Panchagnula, S., ... & Rijs, A. M. (2020). Far-IR absorption of neutral polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs): Light on the mechanism of IR-UV ion dip spectroscopy. *The journal of physical chemistry letters*, 11(21), 8997-9002. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.0c02714>
- Li, K., Li, A., Yang, X. J., & Fang, T. (2024). Infrared emission of specific polycyclic aromatic hydrocarbon molecules: indene. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 529(4), 4425-4432. <https://doi.org/10.1093/mnras/stae704>
- Li, M., Feng, Y., Yu, Y., Zhang, T., Yan, C., Tang, H., Sheng, Q., & Li, H. (2021). Quantitative analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil by infrared spectroscopy combined with hybrid variable selection strategy and partial least squares. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 257. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.119771>
- Lou, Q., Lei, M., Wang, Y., Wang, S., Guo, G., Xiong, W., ... & Coulon, F. (2024). Diagnostic features emerging in near-infrared reflectance spectroscopy for low petroleum hydrocarbon pollution after spectral subtraction. *Science of The Total Environment*, 928, 172264
- Mallah, M. A., Mallah, M. A., Liu, Y., Xi, H., Wang, W., Feng, F., & Zhang, Q. (2021). Relationship Between Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Cardiovascular Diseases: A Systematic Review. *Frontiers in Public Health*, 9(December). <https://doi.org/10.3389/fpubh.2021.763706>
- Olatunde, K. A. (2021). Determination of petroleum hydrocarbon contamination in soil using VNIR DRS and PLSR modeling. *Heliyon*, 7(4). DOI: 10.1016/j.heliyon.2021.e06794
- Onaka, T., Nakamura, T., Sakon, I., Wu, R., Ohsawa, R., Kaneda, H., ... Roellig, T. L. (2018). Near-infrared to Mid-infrared Observations of Galaxy Mergers: NGC 2782 and NGC 7727. *The Astrophysical Journal*, 853(1), 31. DOI 10.3847/1538-4357/aaa004
- Park, M., Yu, J. Y., Ko, J. A., & Park, H. J. (2024). Application of UV-Vis-NIR and FTIR spectroscopy coupled with chemometrics for quality prediction of katsuobushi based on the number of smoking treatments. *Food chemistry*, 442, 138604. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.138604>
- Sales, R. D. F., Barbosa-Patricio, L. C., da Silva, N. C., e Brito, L. R., da Silva, M. E. F., & Pimentel, M. F. (2023). Gasoline discrimination using infrared spectroscopy and virtual samples based on measurement uncertainty. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 303, 123248. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2023.123248>
- Sampaio, G. R., Alves, S., Almeida, A. P. De, Pinaffi-Ianglely, A. C. C., Rogero, M. M., Camargo, A. C. De, & Torres, E. A. F. S. (2021). Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Foods : Biological Effects , Legislation , Occurrence , Analytical Methods , and Strategies to Reduce Their Formation. *International Journal of Molecular Sciences*, 22(6010), 1-30. <https://doi.org/10.3390/ijms22116010>
- Santos, F. D., Vianna, S. G., Cunha, P. H., Folli, G. S., de Paulo, E. H., Moro, M. K., ... & Filgueiras, P. R. (2022). Characterization of crude oils with a portable NIR spectrometer. *Microchemical Journal*, 181, 107696. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2022.107696>
- Schrader, B. (1991). Raman Spectroscopy of Mineral Oil Products. Part I: NIR/FT-Raman Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *Applied Spectroscopy*, 45(8), 1230-1232
- Shen, Z., Wang, H., Yu, Q., Li, Q., Lu, X., & Kong, X. (2021). On-site separation and identification of polycyclic aromatic hydrocarbons from edible oil by TLC-SERS on diatomite photonic biosilica plate. *Microchemical Journal*, 160, 105672. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105672>
- Tang, K. T., Chen, P. A., Lee, M. R., Lee, M. F., & Chen, Y. H. (2023). The relationship between exposure to polycyclic aromatic hydrocarbons and adult atopic dermatitis. *Asian Pacific Journal of Allergy and Immunology*, 41(4), 311-317. <https://doi.org/10.12932/ap-210720-0926>
- Vijayanand, M., Ramakrishnan, A., Subramanian, R., Issac, P. K., Nasr, M., Khoo, K. S., ... & Ravindran, B. (2023). Polyaromatic hydrocarbons (PAHs) in the water environment: A review on toxicity, microbial biodegradation, systematic biological advancements, and environmental fate. *Environmental research*, 227, 115716. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.115716>
- Wang, R., Tao, S., Wang, B., Yang, Y., Lang, C., Zhang, Y., Hu, J., Ma, J., & Hung, H. (2010). Sources and pathways of polycyclic aromatic hydrocarbons transported to alert, the Canadian High arctic. *Environmental Science and Technology*, 44(3), 1017-1022. <https://doi.org/10.1021/es902203w>

- Wong, T. H., Lee, C. L., Su, H. H., Lee, C. L., Wu, C. C., Wang, C. C., Sheu, C. C., Lai, R. S., Leung, S. Y., Lin, C. C., Wei, Y. F., Wang, C. J., Lin, Y. C., Chen, H. L., Huang, M. S., Yen, J. H., Huang, S. K., & Suen, J. L. (2018). A prominent air pollutant, Indeno[1,2,3-cd]pyrene, enhances allergic lung inflammation via aryl hydrocarbon receptor. *Scientific Reports*, 8(1), 1-11. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-23542-9>
- Xi, X., Ye, Q., Fan, D., Cao, X., Wang, Q., Wang, X., Zhang, M., Xu, Y., & Xiao, C. (2022). Polycyclic Aromatic Hydrocarbons Affect Rheumatoid Arthritis Pathogenesis via Aryl Hydrocarbon Receptor. *Frontiers in Immunology*, 13(March), 1-14. <https://doi.org/10.3389/fimmu.2022.797815>
- Yang, M., Bonanos, A. Z., Jiang, B. W., Gao, J., Xue, M. Y., Wang, S., ... & Gavras, P. (2018). Red supergiant stars in the Large Magellanic Cloud-II. Infrared properties and mid-infrared variability. *Astronomy & Astrophysics*, 616, A175. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201832833>
- Zhang, H., Lei, T., Li, X., Yang, R., Dong, G., & Yang, Y. (2023). A strategy to reduce the effect of organic matter on fluorescence intensity for improving the detection accuracy of polycyclic aromatic hydrocarbons in soil. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 293, 122446. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2023.122446>
- Zhang, M., Tian, Y., Jiao, A., Ma, H., Wang, C., Zheng, L., ... Chen, M. (2022). Synergistic double laser beam-boosted liquid-NIR-SERS for ultralow detection of non-adsorptive polycyclic aromatic hydrocarbons in lake water. *Nanophotonics*, 11(12), 2875-2889. DOI: 10.1515/nanoph/2022/0010
- Zhao, Y., Hu, K., Yang, C., Liu, X., Li, L., Li, Z., ... & Zhang, S. (2023). Covalent organic framework@ Ti3C2Tx composite as solid phase microextraction coating for the determination of polycyclic aromatic hydrocarbons in honey samples. *Analytica Chimica Acta*, 1237, 340581. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2022.340581>