月表典型矿物中红外光谱特征随粒径与测量方法的变化规律

张梦远[1,2]，杨亚洲[1]，何雨旸[3]，邹永廖[1]，刘洋[1,2]

1(中国科学院国家空间科学中心，太阳活动与空间天气学全国重点实验室 北京 100190)
2(中国科学院大学，地球与行星科学学院，北京 100049)
3(中国科学院地质与地球物理研究所，北京 100029)

摘　要　遥感光谱探测是识别天体物质成分与物理状态的重要手段。中红外反射光谱的克里斯琴森特征、剩余射线带特征和透明特征是识别矿物成分和物理状态的关键指标，但不同实验室测量方式导致的光谱特征偏移和粒径效应差异制约了模型的适用性。本研究对具有五个粒径区间（<26, 26~43, 43~74, 74~125, 125~200 μm）的月表典型矿物橄榄石、辉石、斜长石样品，分别开展单颗粒显微反射、粉末堆积样品双锥式漫反射及定向-半球积分反射光谱测试，系统对比六类中红外光谱参数。结果表明三种光谱存在系统性差异，定向-半球积分反射更适用于粒径预测，且存在跨方法通用的光谱参数。这些定量差异明确了各方法的适用范围与数据互用性条件，为遥感光谱模型构建与解译提供了方法学依据。

关键词　月表矿物，中红外光谱，光谱特征、粒径效应、测量方法

中图分类号　O433(光谱学)

Effects of Particle Size and Measurement Technique on Mid-Infrared Spectral Characteristics of Typical Lunar Minerals

Mengyuan Zhang[1,2], Yazhou Yang[1], Yuyang He[3], Yongliao Zou[1], Yang Liu[1,2]

1(State Key Laboratory of Solar Activity and Space Weather, National Space Science Center, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190, China)
2(College of Earth and Planetary Sciences, University of Chinese Academy of Science, Beijing, 100049, China)
3(Institute of Geology and Geophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029)

Abstract　Remote sensing is a crucial technique for identifying the composition and physical state of materials on celestial surfaces. Among various methods, mid-infrared (MIR) spectroscopy

* 基金项目：国家自然科学基金（42374218, 41441804）与北京市科技新星计划
投稿日期：2026 年 2 月 2 日
E-mail: yangyazhou@nssc.ac.cn

最新录用

ranging from 2.5 μm to 25 μm offers significant diagnostic capability for determining mineral crystal structures, chemical composition, and physical states, as it falls within the molecular vibrational spectral region where the stretching and bending vibrations of chemical bonds provide a direct response to these properties. Spectral indicators such as the Christiansen Feature (CF), Reststrahlen Bands (RBs), and Transparency Feature (TF) in MIR reflectance spectra collectively form a spectroscopic framework for identifying mineral composition and physical properties like particle size. Currently, laboratory measurements of MIR reflectance spectra primarily include bi-conical diffuse reflectance, directional-hemispherical integrated reflectance, and micro-reflectance techniques. However, constrained by experimental conditions and sample states, existing models for mineral identification and particle-size prediction are often built on data acquired through different measurement methods, without sufficient cross-method validation, which may lead to systematic shifts in spectral features and variations in particle-size effects, thereby limiting the extrapolation applicability and cross-method interoperability of such models. To address this issue, this study selected typical lunar surface minerals—olivine, pyroxene, and plagioclase—prepared as samples across five characteristic particle-size ranges (<26 μm, 26~43 μm, 43~74 μm, 74~125 μm, 125~200 μm), and performed spectroscopic measurements using micro-reflectance on single particle, bi-conical diffuse reflectance and directional-hemispherical reflectance on powdered samples. By extracting and comparing six key MIR spectral parameters, including CF parameters, RBs parameters, TF parameters, band ratio ($R_{7.7\ \mu m}/R_{10\ \mu m}$), K-value, and weak absorption bands, we quantitatively revealed the systematic offsets and particle-size dependencies of these parameters across different measurement methods. For example, results indicate that the three methods exhibited systematic differences, that directional-hemispherical reflectance is more suitable for particle-size prediction, and that cross-method consistent spectral parameters (e.g., the final RB peak position) exist. Furthermore, this study clarified the respective applicability and data interoperability conditions of micro-reflectance, bi-conical diffuse reflectance, and directional-hemispherical reflectance methods for particle-size prediction and mineral identification. These findings provide essential methodological support for the construction and interpretation of remote-sensing spectral models in lunar and planetary exploration missions.

Key words Lunar surface minerals, Mid-infrared spectroscopy, Spectral features, Particle size effect, Measurement methods

最新录用

0 引言

月表物质组成及其演化历史研究在很大程度上依赖于光谱探测技术。作为典型的分异型石质天体，月球经岩浆洋分异与结晶固化后形成了相对完整的核-幔-壳结构，并由于内部热量有限、缺乏持续的全球性构造活动而得以较好保存[1-3]。后期的火山活动与撞击过程将不同深度的物质搬运暴露至月表，使其成为研究行星内部组成与演化过程的天然窗口。由于月球返回样品采样点覆盖面积有限，遥感光谱观测与实验室光谱测试相结合仍然是解译全月表物质组成与物理状态的主要手段。其中，建立可靠的光谱模型是实现精细化解译的关键。橄榄石、辉石和斜长石是月表最为主要的造岩矿物。在月球岩浆演化的不同阶段形成岩石的主要矿物及元素组成特征会存在系统性的差异[2]。通常，富镁铁和富硅矿物端元分别代表岩浆演化初期深部物质和晚期浅表层物质。厘清不同类型物质的光谱特征，对于揭示月球形成与演化具有重要指示意义。

在行星遥感观测中，可见-近红外（Visible and Near-Infrared, VNIR, 0.4~2.5 μm）反射光谱因技术成熟、探测条件相对简便，且多数硅酸盐矿物在该波段具有明确的特征吸收峰，而被广泛应用于各类行星探测任务的矿物识别中。该波段的光谱特征主要源于矿物中过渡性金属离子（如 Fe^{2+}）的电子跃迁过程[4, 5]。然而，对于不含或少含过渡金属元素的矿物（如斜长石），其在 VNIR 波段中缺乏直接的诊断特征，通常只能通过间接的方式进行推断，从而限制了矿物组成判识的准确性[4]。

相比之下，中红外波段（Mid-Infrared, MIR，2.5~25 μm）属于分子振动光谱，主要反映物质中化学键的伸缩与弯曲等振动特征，对晶体结构与化学组成具有直接响应[6, 7]。其中，硅酸盐矿物的 MIR 光谱对 SiO_4^{2-}四面体的连接方式及 SiO_2 含量变化尤为敏感。随着矿物 SiO_2 含量的增加以及 SiO_4^{2-}四面体结构由岛状、链状/层状向架状转变[8]，最强的一组 Si-O 伸缩振动特征逐渐变强，其对应的克里斯琴森特征（Christiansen Feature, CF）峰位由 9 μm 系统性向短波方向移动至约 7.5 μm[8-10]。此外，在 8.5~12 μm 和 16.5~25 μm 波段分别由 Si-O 伸缩与弯曲振动引起的剩余射线带（Reststrahlen Bands, RBs），其峰位与形态在不同种类硅酸盐矿物之间也具有显著差异。对于细颗粒样品，多重散射效应增强，常在 12~13 μm 区间及附近出现明显的透明特征（Transparency Feature, TF），且该特征对颗粒尺寸高度敏感。除了由基频振动产生的 CF 和 RB 等强特征外，在 4.8~7 μm（2080~1430 cm^{-1}）存在由合频与倍频效应及 Si-O-Si 桥键振动产生的弱吸收复合带[6, 11]，也可用来反映矿物成分的细微变化[12]。因此，CF 峰位、RB 峰位与形态、TF 显著度及弱吸收带特征共同构成了鉴别矿物成分及其物理状态（尤其是颗粒粒径）的重要中红外光谱判据[13-15]。

在实际行星遥感观测中，由于天体的热辐射在热红外波段显著增强，中红外光谱通常以热发射信号为主[10]。例如，月球勘测轨道飞行器（LRO）上搭载的 Diviner Lunar Radiometer Experiment 多通道热红外辐射计，正是利用 7.8 μm、8.25 μm 和 8.55 μm 波段的热发射数据，成功识别了月表高度演化的富硅物质[16]，并进一步实现了主要氧化物的全月分布制图[17]。我国即将实施的嫦娥 7 号任务，将搭载覆盖谱段范围更宽（0.45~10 μm）、谱段更多的光谱仪载荷。已经发射的天问 2 号小行星探测任务所搭载的热辐射光谱仪则进一步将谱段拓展至 50 μm，进一步凸显了 MIR 波段在未来月球与深空探测中的重要科学价值[18]。

然而，将实验室光谱数据直接应用于轨道遥感解译仍面临根本性挑战。遥感观测到的光谱特征受矿物成分、颗粒物理状态（如尺寸与孔隙度等）以及观测几何角度等多种因素共同影响，具有显著多解性。实验室光谱测量通常以反射光谱为主，且存在双锥式漫反射、定向-半球积分漫反射和显微反射等多种测试方式。不同方法获得的中红外光谱特征可能存在系统性偏差，进而影响实验室数据与遥感观测结果之间的定量衔接精度。因此，系统厘清不同实验室测量方法对中红外光谱特征的影响机制，尤其是它们对矿物成分及颗粒尺寸等关键信息的表征能力，对于提升遥感数据定量反演的可靠性具有重要意义。

在实验室中红外光谱测试中，直接测量样品的热发射光谱通常需要复杂的加热与真空环境控制，而测量其反射光谱在技术上更为便捷和稳妥[10, 19, 20]。为建立实验室反射光谱与轨道热红外遥感观测之间的桥梁，常假定观测表面处于热平衡状态，并基于基尔霍夫定律（ε=1-R） 来实现反射率（R）与热发射率（ε）之间的相互转换[20, 21]。其中，反射率 R 的准确获取是前提，而测量方法的选择对此有决定性影响。

目前，实验室 MIR 反射光谱测量主要基于三类方法：

（1）双锥式漫反射法（BCR: bi-conical reflectance）：该测量条件下，入射光束与观测视场均呈锥形，得到的是双锥式反射率。该方法是对月壤等粉末颗粒类样品进行测量的常用方法，被广泛应用于经典行星光谱库（如 RELAB 光谱库）的构建[22, 23]。基于此方法所测数据，Salisbury 等[9]建立了以 CF 峰位为核心的火成岩类型判别体系。

（2）定向-半球积分漫反射法（DHR: directional-hemispherical reflectance）：该方法测量的是定向-半球反射率，即特定方向入射光在上半球空间所有方向上反射的总比例。其结果可通过基尔霍夫定律（ε=1-R）直接转换为发射率，被视为连接反射与发射光谱的“黄金标准”[19]。以此方法间接得到的热发射光谱为轨道热红外仪器（如月球勘测轨道飞行器的 Diviner 辐射计）提供了可直接对比的“地面真值”。但由于该测试所需配置要比双锥式漫反射复杂，因而也有研究直接将双锥式反射率代入到基尔霍夫定律中来获得样品的热发射率[20]，其可能引起的偏差尚需通过控制性对比实验来进行评估。

（3）显微 FTIR 反射光谱法：该技术利用红外显微镜实现对单颗粒或微米尺度区域的反射光谱测量。它不仅为珍稀样品（如月球返回样品、陨石等）提供了无损分析手段，更重要的是，其测量的光谱主要反映颗粒尺度的“单次散射”行为，为理解复杂粉末堆积样品光谱中的多重散射效应提供了独特视角[13, 15]。

橄榄石、辉石和斜长石是月表的主要造岩矿物，厘清其光谱特征随不同测量方式与物理状态的变化规律，是准确解译月球遥感光谱探测数据的基础。已有研究表明，测量方法会显著影响光谱形态。例如，Lane 等[24]指出，同一样品的热发射、镜面反射与漫反射光谱在 RB 特征的形态上存在系统性差异。更为关键的是，将 Salisbury 等[25]的石英双锥式反射光谱、定向-半球反射光谱与 Christensen 等[26]测量的石英发射光谱进行对比，结果显示双锥式反射光谱在短波区域（如 1000~1300 cm^{-1}）存在异常特征，与发射光谱和定向-半球反射光谱不一致。最近，Yang 等[13]对比 200~500 μm 嫦娥 5 号月壤样品单颗粒（橄榄石、辉石、斜长石、玻璃）的显微 FTIR 光谱与 Apollo 粉末样品的 BCR 光谱，发现二者 CF 峰位基本一致，但由于单颗粒测量几乎无多重散射，其光谱中普遍缺失粉末样品中常见的 TF。与此同时，颗粒尺寸已被证实是影响中红外光谱特征的另一关键参数。研究表明，粒径变化会系统性影响 CF 峰位、RB 强度与形态以及 TF 的出现与否[11, 27-29]，并催生了新的应用方法。例如，通过测量不同粒径样品的 DHR 并转换为发射率，Xiao 等[30]提出了一种基于热红外光谱曲线形态反演月球颗粒粒径的新模型。

综上所述，现有研究已分别肯定了 BCR、DHR 与显微 FTIR 三种红外光谱测量方法的价值，并对颗粒尺寸等关键参数的影响进行了探讨。然而，对于同一套具有明确矿物学意义的月表典型样品，在系统改变其颗粒尺寸的条件下，上述三种方法所获取的中红外反射光谱特征（如 CF 峰位、RB 强度与形态、TF、弱吸收带等）是否会呈现定量化、系统性的差异？这些差异又将如何影响基于不同实验室光谱数据反演矿物成分与粒径等关键信息的准确性与可靠性？相关问题仍缺乏系统性的研究。

基于以上背景，本研究选取月表典型硅酸盐矿物橄榄石、辉石与斜长石，制备了涵盖从风化细尘到原始粗岩屑的五个特征粒径区间（<26 μm, 26~43 μm, 43~74 μm, 74~125 μm, 125~200 μm）的标准化样品序列，该粒径范围的选取基于月壤粒径的客观分布规律、体散射与表面散射的物理机制划分、以及与遥感数据及前人研究对比的需求。并同步采用显微反射、

双锥式漫反射与定向-半球积分漫反射三种方法进行中红外反射光谱测量。通过系统对比分析，旨在定量揭示三种不同测量方法在表征月表矿物中红外光谱特征及其粒径依赖性方面的共性与差异，并评估不同方法所测数据在粒径反演等定量应用中的适用边界与不确定性。本研究不仅有助于深化对行星物质红外光谱学基本规律的理解，也将为实验室测量规范的建立、多源光谱数据的有机融合及中红外遥感数据的高精度解译提供实验依据与方法学支撑。

1 红外光谱测试实验

1.1 样品制备

1.1.1 月表典型矿物样品选取及纯度验证

本研究选取月表最主要的三种硅酸盐矿物橄榄石（Olivine，Olv）、辉石（Pyroxene，Pyx）、斜长石（拉长石 Labradorite，Lab）作为研究对象。橄榄石与辉石样品均产自河北省，与 Xu 等[31]文中所用样品相同。样品制备过程中，首先对厘米级或毫米级矿物颗粒进行初步筛选，肉眼剔除异样颗粒。所获得的高质量红外光谱本身（特征谱带显著且无杂质峰）进一步佐证了样品的高纯度。所有三种光谱测量方法均使用同一组制备完成的样品，以确保数据对比的基础一致性。

1.1.2 不同尺寸样品的制备方法

样品制备包括研磨、筛分、烘干三个步骤。首先使用玛瑙研钵进行研磨，随后将研磨后的粉末以无水乙醇作为分散介质，通过一系列标准筛网进行湿法筛分，得到以下五个特征粒径区间的样品：<26 μm、26~43 μm、43~74 μm、74~125 μm 及 125~200 μm。

该粒径范围的选取基于三个原则。其一，基于月壤粒径分布：Apollo 月壤的平均粒径约为 60 μm，中值粒径为 40~130 μm[29, 32]，月尘主要分布于 30 nm~20 μm 之间[33]。据此，本研究将<26 μm、26~125 μm、125~200 μm 分别定义为风化细尘、月壤主体、粗粒碎屑端元。其二，基于散射机制划分：Salisbury & Wald（1992）[34]研究表明，细颗粒（<5 μm）体散射显著增强，粗颗粒（75~250 μm）表面散射占主导。结合 Hapke（2012）[35]辐射传输理论，本研究将 26~43 μm 作为体散射贡献显著的基准粒级，将 43~74 μm 作为散射机制过渡区间，将 74~125 μm 和 125~200 μm 作为表面散射主导的粗粒端元。其三，基于与遥感数据及前人研究的对比：Donaldson Hanna 等（2012）[36]使用细颗粒（<25 μm）样品建立了实验室光谱与 Diviner 数据的关联，表明细颗粒组分是实验室-遥感关联的关键粒级。Shirley & Glotch（2019）[29]和 Xiao 等（2025）[30]的研究为本研究提供了粒度划分参考，本研究在此基础上将细粒端细化至 26 μm，增设 43~74 μm 过渡粒级，并将粗粒端聚焦于 125~200 μm。该序列覆盖了从体散射主导演化至表面散射主导的完整机制序列，为考察粒径对散射机制的影响提供了实验框架。在比较三种测量方法时，26~43 μm 作为基准检验方法一致性，<26 μm 测试探测极限，43~74 μm 和 74~125 μm 观察方法差异随散射机制的变化，125~200 μm 评估表面散射主导条件下的方法性能。此外，<26 μm 和 26~43 μm 与实验室-遥感关联的基准粒度范围一致[36]，43~74 μm 和 74~125 μm 对应 Apollo 月壤中值粒径主体范围[32]，125~200 μm 对应月壤相对粗粒组分。研究结果可为理解粒径对 MIR 光谱的影响提供实验数据，为月球遥感数据的矿物反演和粒度校正提供参考。

筛分后的样品置于 120°C 的真空干燥箱中持续烘干 4 小时，以彻底去除吸附水及有机挥发分，避免其对中红外光谱（尤其 3 μm 与 6 μm 波段附近）造成干扰[6, 37]。

在显微 FTIR 光谱测量中，将少量干燥样品颗粒稀疏地撒在洁净的镀金载玻片表面，确保颗粒彼此分离，以获取单颗粒或小颗粒团的光谱。对于 BCR 和 DHR 测量，则将粉末样品分别装入专用样品杯，并使用刮刀式样品板沿样品杯边缘将粉末表面轻轻刮平并轻微压实（见图 1, 2）。该方法可最大程度降低因装样密度差异引入的光谱变异，保证光谱测量的可重复性与代表性。

最新录用

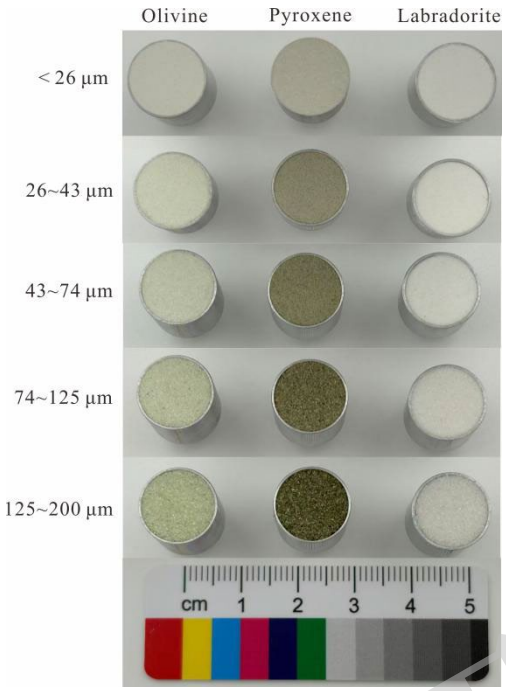


图 1 粉末样品双锥式漫反射测试样品照片

Fig. 1 Photograph of the samples used for bi-conical diffuse reflectance measurements

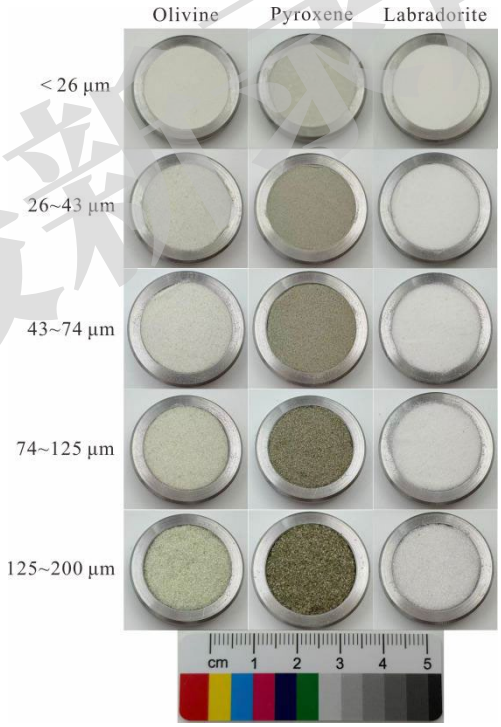


图 2 粉末样品定向-半球积分反射测试样品照片

Fig. 2 Photograph of the samples used for directional-hemispherical reflectance measurements

1.2 实验仪器与方法

本研究分别采用显微反射、BCR 与 DHR 三种测量方法，对五个不同尺寸分布的橄榄石、辉石和拉长石样品进行中红外反射光谱测量。

1.2.1 显微反射光谱测量

在对单颗粒进行显微光谱测试时，使用的是由 Nicolet iS50 + Nicolet RaptIR 组成的显微 FTIR 光谱系统。测试过程中，iS50 FTIR 光谱仪干涉仪调制后的红外光经过多功能切换镜反射，并经由 KBr 窗片导入 RaptIR 显微系统。样品反射信号由显微系统中经液氮冷却的 MCT-A 探测器接收（见图 3）。该信号综合了样品表面散射、体散射与衍射效应，对颗粒形态、表面粗糙度及测量光斑大小较为敏感。光谱测量范围为 4000~606 cm^{-1}（2.5~16.5 μm）。由于光斑尺寸最小设置为 20 μm，此时光通量较小，为获取较高信噪比数据，设置分辨率为 16 cm^{-1}，扫描次数为 500 次。在该分辨率下，弱吸收带处对应的波长间隔为 0.005~0.008 μm，在 CF 特征处为 0.013~0.016 μm，在 RB 特征处为 0.0153~0.0278 μm。显微系统配有封闭外罩，光谱仪内部持续吹扫干燥氮气，以最大程度减少大气中水汽和二氧化碳的吸收干扰。测量时，将各粒径区间（0~26 μm、26~43 μm、43~74 μm、74~125 μm、125~200 μm）的粉末样品分散于镀金载玻片上。根据粒径区间依次选用正方形光斑进行测试，光斑尺寸分别设定为 20 μm、35 μm、60 μm、100 μm、160 μm，以确保每个粒级的探测区域能覆盖具有统计代表性的颗粒，同时避免混入干扰信号。测试过程中以金镜作为反射率定标基准。

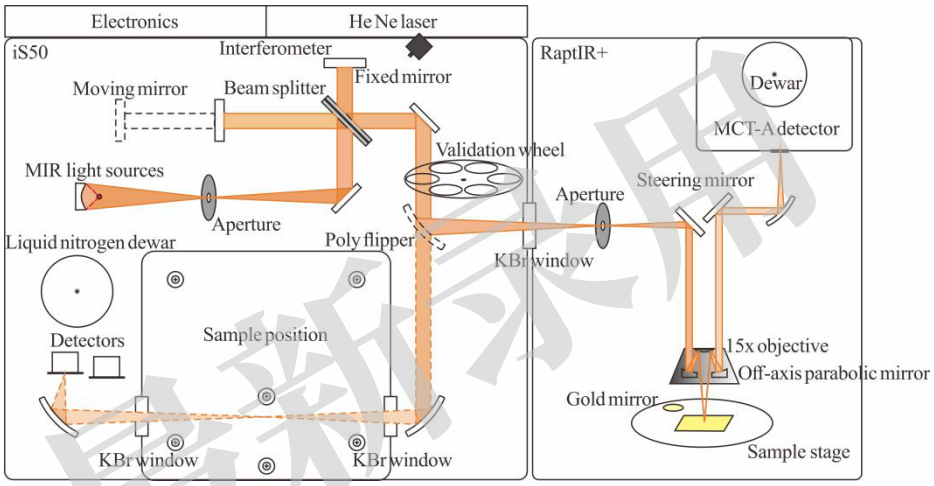


图 3 基于 Nicolet iS50+RaptIR 显微系统的光路绘制的显微 FTIR 反射光谱测试原理示意图

Fig. 3 Schematic diagram of the micro-FTIR reflectance spectral measurement setup based on the optical path of the Nicolet iS50 + RaptIR microscope system used in this experiment

1.2.2 BCR 光谱测量

采用与 Nicolet iS50 光谱仪适配的 EasiDiff 漫反射附件（图 4）对粉末堆积样品进行漫反射光谱测量。该附件置于 iS50 光谱仪样品仓内（图 3），光源发出的红外光经干涉仪调制后由右侧入射，通过离轴抛物面镜反射并聚焦至样品表面，反射信号经多次反射后被 DTGS 检测器接收（图 4）。测量条件为：波段范围 4000~400 cm^{-1}。由于 BCR 模式下，粉末堆积样品信号强度高，因此采用较高的光谱分辨率 4 cm^{-1} 和适中的扫描次数 100 次。4 cm^{-1} 分辨率在弱吸收带处对应的波长间隔为 0.0013~0.002 μm，在 CF 处为 0.0029~0.0038 μm，在 RB 处为 0.0034~0.0064 μm，在 TF 处为 0.0065~0.008 μm。样品表面高度一致，光斑尺寸固定。测试过程中，整个附件密闭于光谱仪样品仓内，系统持续通入干燥氮气，以最大程度抑制大气中水汽和二氧化碳的吸收干扰。测试过程中以漫反射金板作为反射率定标基准。

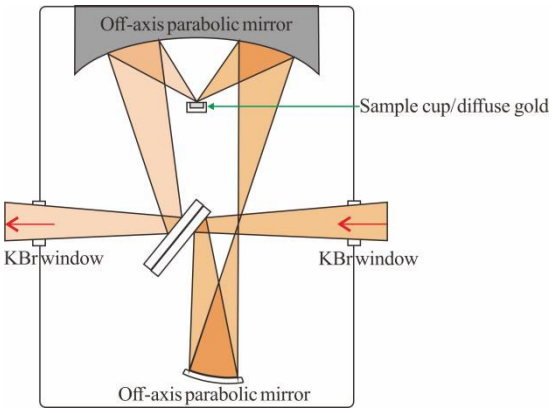


图 4 双锥式漫反射测试原理示意图

Fig. 4 Schematic diagram of the bi-conical diffuse reflectance measurement setup

1.2.3 DHR 光谱测量

采用与 iS50 光谱仪适配的 PIKE Mid-IR IntegratIR 下置式积分球附件（图 5）进行粉末堆积样品的 DHR 光谱测量。该球附件置于 iS50 光谱仪样品仓位置（图 3），干涉仪调制后的红外光由右侧入射，经 12°反射镜导向内嵌于积分球底部的样品或定标金板，散射信号进入直径 3 英寸的内部镀金积分球腔体（具有近似朗伯散射特性），最终由积分球独立配备的 MCT-B 探测器采集全半球空间（立体角为 2π）的信号。测量条件为：波段范围 5000~600 cm^{-1}。由于积分球系统光路较长且存在多次反射，能量损失较大，因此在光谱分辨率为 4 cm^{-1} 基础上，将扫描次数增加至 200 次以提高信噪比。4 cm^{-1} 分辨率在弱吸收带处对应的波长间隔为 0.0013~0.002 μm，在 CF 处为 0.0029~0.0038 μm，在 RB 处为 0.0036~0.0069 μm，在 TF 处为 0.0069~0.008 μm。测试过程中镜面反射排除端口保持关闭（图 5），因此所测定向-半球反射光谱包含镜面反射和漫反射的贡献。样品表面高度一致，光斑尺寸固定。由于积分球附件无法完全封闭于样品仓内，测试过程中样品仓处于敞口状态，但 iS50 光谱仪主机内部持续通入干燥氮气，以最大程度减少大气中水汽和二氧化碳的影响。测试过程中以漫反射金板作为反射率定标基准。

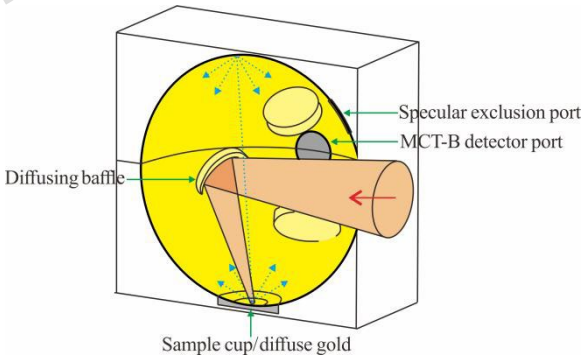


图 5 定向-半球积分反射测试原理示意图

Fig. 5 Schematic diagram of the directional-hemispherical integrated reflectance measurement setup

1.3 数据处理方法

为系统比较三种测量方法在不同粒径下的光谱差异，并实现高精度、可重复的定量分析，

所有原始反射率数据均经过统一预处理，以消除系统误差并提取客观、定量化的光谱特征参数。

1.3.1 原始光谱预处理

每次测量前，光谱仪系统均预热 30 分钟以上，以确保在测量过程中系统的稳定性。显微 FTIR、BCR、DHR 三种方法获取的数据，均为除以相同条件下金镜或漫反射金板反射信号的相对反射率光谱，并通过对多次扫描结果进行平均来消除系统随机噪声的影响。所有测量均通过光谱仪软件自动执行了大气（H_2O, CO_2）吸收线的校正。

由于三种测量方法的原始光谱有效覆盖范围存在差异，为确保后续特征提取与对比分析在完全相同的波段上进行，将所有预处理后的光谱数据统一截断至 4000~606 cm^{-1}（2.5~16.5 μm）范围。此范围完整涵盖了硅酸盐矿物 MIR 光谱的最主要特征区，包括 CF、强 RB 及 TF，是系统性对比分析的基础。

1.3.2 光谱特征参数的定量提取

尽管三种测量方法的光谱分辨率和扫描次数存在差异，但调整扫描次数主要是为了消除随机噪声，提高光谱数据的信噪比，在扫描次数都足够多的情况下，扫描次数的不同不会对定量分析结果产生影响。另外，本研究统一采用六阶多项式拟合与一阶导数零点定位的方法提取峰位与强度，而非直接读取原始光谱极值点。该处理方法可有效消除分辨率差异引起的峰位偏移和噪声干扰，确保不同测量方法间光谱特征参数的可比性。为量化光谱差异，定义并提取以下六类关键 MIR 光谱特征参数。

（1）Christiansen 特征参数（CF 峰位/CF position、CF 强度/CF intensity）：在 7.7~9.0 μm （1300~1111 cm^{-1}）区间识别反射率全局最小值，以该点为中心，向两侧扩展约 0.3~0.4 μm，确定局部区间。此区间范围能完整涵盖 CF 特征的主要部分，同时排除无关波段干扰。在该区间内，使用 6 次多项式对原始反射率光谱进行最小二乘拟合。该多项式阶数的选择基于 CF 特征形态的复杂度，足以描述其特征曲线，同时避免过拟合。拟合曲线的一阶导数零点对应反射率最小值的准确位置，其波长即为 CF 峰位值，对应反射率值为 CF 强度值。以下参数提取峰位时均采用拟合后的曲线确定峰位与强度。

（2）剩余射线带特征参数（RB 峰位/RB position、RB 强度/RB intensity、RB 面积/RB area）：针对硅酸盐矿物在 7.7~12.8 μm（1300~782 cm^{-1}）的强 RB 特征，提取反射峰最高点的反射率值及其对应波长，分别作为 RB 强度与 RB 峰位。在 RB 特征波段内，以两侧波谷连成的直线作为连续统基线，计算光谱曲线与连基线之间的积分面积作为 RB 面积。若 RB 右侧吸收峰不明显，则取光谱二阶导数极小值处的波长作为吸收峰峰位。根据强 RB 特征两侧波谷的平均吸收强度与 RB 最大反射率计算 RB 半高宽（FWHM）参数。

（3）透明特征参数（TF 峰位/TF position、TF 显著度/TF prominence）：在 11.5~13 μm （870~770 cm^{-1}）区间识别可能出现的反射峰。若存在明显峰形，则记录其对应波长为 TF 峰位，并计算峰顶反射率与相邻两波谷反射率平均值的差值为 TF 显著度。若 TF 呈肩峰形态，则提取该区间一阶数值导数极大值对应的波长为 TF 拐点，作为 TF 峰位。显微 FTIR 光谱中普遍缺失 TF，该参数记录为“N.D.”。

（4）波段反射率比值（$R_{7.7\ \mu m}/R_{10\ \mu m}$）：提取 7.7 μm 和 10 μm 处反射率，计算其比值。该比值对粉末堆积样品散射特性与有效光程高度敏感，常用于表征颗粒尺寸效应。

（5）*K*-value[30]：定义为$(\varepsilon_{CF}-\varepsilon_{1500})/(\omega_{CF}-1500)$，其中 ε_{CF} 与 ε_{1500} 分别为 CF 峰位处和 1500 cm^{-1}）处的发射率值（由 $1-R$ 计算得到），ω_{CF} 为 CF 峰位对应的波数。该参数通过量化 CF 峰位至 6.67 μm 区间的光谱曲线陡峭程度，来敏感地反映颗粒尺寸信息。

（6）弱吸收带分析（overtones）：针对 4.8~7 μm 波段的弱吸收特征，以吸收峰右肩为基准构建水平基线，去除基线后提取主要子峰 weak band 1 与 weak band 2 的峰位与吸收深度，对比三种方法及不同粒径下这些弱带的显现情况。

2 结果与分析

2.1 不同测量方法对中红外反射光谱特征的影响

为分析测量方法对中红外反射光谱的影响，以橄榄石样品为主要对比对象，辉石和拉长石样品作简要说明：使用显微 FTIR 测量单个粗颗粒（橄榄石 155×217 μm、辉石 148×167 μm、拉长石 76×95 μm，其光谱最能反映本征吸收特征），同时采用 BCR 与 DHR 测量 26~43 μm 粉末堆积样品。通过比较三者光谱差异，可直接揭示测量方法对光谱特征的影响。

2.1.1 粉末堆积样品的 BCR 与 DHR 光谱对比

图 6a 所示 26~43 μm 橄榄石粉末的测试结果。BCR 光谱与 DHR 光谱在整体反射率与关键特征上均存在系统性差异：（1）DHR 光谱整体反射率更高，但在 CF 处反射率更低（更接近于 0），表明其更适用于通过基尔霍夫定律计算样品的发射率[20, 38]；（2）DHR 光谱对比度更强，其 RB 面积为 3.36，显著高于双锥式漫反射光谱的 1.5；（3）DHR 光谱 RB 特征峰数量更少，BCR 光谱在约 9.95 μm 处存在一个弱的反射峰，而在 DHR 光谱中则未出现。二者虽在 CF 峰位（8.88 μm 与 8.92 μm）、4.8~7 μm 弱吸收带及 11.15 μm RB 肩峰等特征上基本一致，但 DHR 光谱的 RBs 反射峰（9.45、10.16、10.59、11.94 μm）相较于 BCR 的结果（9.33、9.91、10.13、10.53、11.93 μm）数量减少，且整体向长波方向偏移。由颗粒间多重散射主导的 TF（12.94 μm）在 DHR 光谱中更为显著（显著度 0.025 vs. 0.016）（表 1, 2）。

如图 6b, c 所示，26~43 μm 辉石与拉长石粉末堆积样品的 BCR 与 DHR 光谱显示了与橄榄石相似的规律：DHR 光谱整体反射率与光谱对比度更高，DHR 与 BCR 光谱在 CF 处反射率相近，均接近于 0；DHR 光谱 RB 特征峰数量更少，BCR 光谱在 DHR 光谱的 RB1 反射峰短波长侧分别存在 1 处（拉长石）与 2 处（辉石）反射峰。整体上 DHR 光谱 RBs 峰位向长波长方向偏移。DHR 光谱的 TF 显著度大（图 6b, c）。详细参数见表 1, 2。

这些差异主要源于积分球系统中光经历更充分的多次散射与传播，从而更完整地反映样品的体积散射特性[26, 35, 39]。

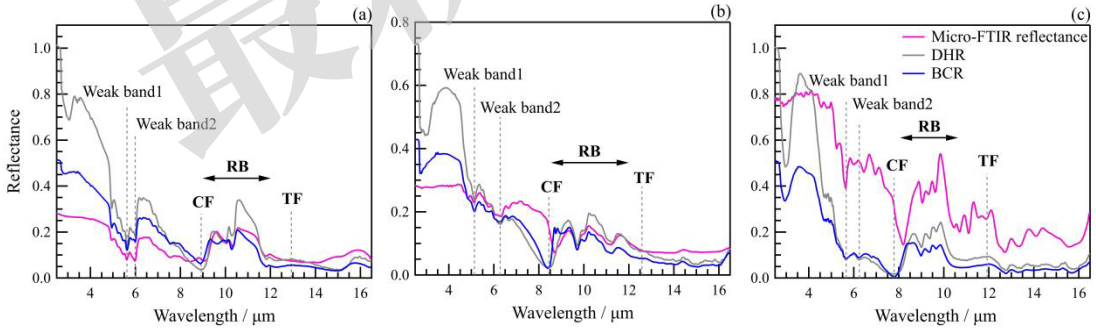


图 6 三种方法测得的三种矿物 MIR 光谱对比。（a）橄榄石；（b）辉石；（c）拉长石。显微 FTIR 光谱中单颗粒粒径：橄榄石 155×217 μm、辉石 148×167 μm、拉长石 76×95 μm；BCR 与 DHR 光谱中均为 26~43 μm 粉末

Fig. 6 Comparison of mid-infrared spectra of three typical lunar-type minerals obtained by three measurement techniques. (a) Olivine; (b) Pyroxene; (c) Labradorite. The single particle sizes for micro-FTIR spectra are 155×217 μm (olivine), 148×167 μm (pyroxene), and 76×95 μm (labradorite). For both BCR and DHR spectra, the particle size is 26–43 μm powder

2.1.2 单颗粒与粉末堆积样品反射光谱对比

对橄榄石单颗粒样品与 26~43 μm 粉末堆积样品进行的反射光谱对比分析表明，二者整体谱形上相似，但在反射率、吸收深度及光谱对比度上存在显著差异。单颗粒光谱整体反射

率较低（<0.2），且在短波长区域（<5 μm）的光谱对比度明显偏低。相比之下，粉末堆积样品在短波长区域反射率显著更高（>0.3），整体呈现出更高的光谱对比度（图 6a）。显微 FTIR 光谱显示，橄榄石单颗粒的本征吸收特征（如 CF 峰、RBs 及 4.8~7 μm 的弱吸收带）清晰可见，但 CF 吸收峰短波长侧出现了一个异常反射峰，导致 CF 峰位红移至 9.07 μm（图 6）。单颗粒光谱中，弱吸收带的两个主要合频/倍频吸收峰位于 5.62 μm 与 5.99 μm，RBs 峰位分别为 9.60、10.16、10.57 和 11.98 μm，并在 11.15 μm 附近亦存在 RB 肩峰。这些峰位与 DHR 光谱的测量结果基本吻合，且其 RB 半高宽（2.13）与粉末堆积样品相近。然而，单颗粒样品在 4.80~6.17 μm 波段的弱吸收带更深（深度为 0.57），且 RB 面积（0.64）显著小于粉末堆积样品。此外，在单颗粒光谱中，未检测到 13 μm 附近的 TF 反射峰。2.9 μm 附近则存在微弱的 OH/H_2O 吸收特征（图 6a, 表 1-3）。

辉石单颗粒光谱的整体反射率低于粉末堆积样品，而拉长石单颗粒光谱的整体反射率则显著高于粉末堆积样品。辉石和拉长石单颗粒的本征吸收特征（如 CF 峰、RBs 及弱吸收带）清晰可见，CF 峰位也存在异常偏移（辉石约 0.26 μm；拉长石约 0.41 μm），且单颗粒光谱中均未检测到 TF 反射峰，2.9 μm 附近则存在较弱 OH/H_2O 吸收特征。除拉长石单颗粒弱吸收带~6.44 μm 吸收峰较 DHR 与 BCR 测量结果更偏向长波外，其余弱吸收带主要吸收峰峰位、RBs 峰位与 DHR 光谱的测量结果基本吻合。单颗粒样品的弱吸收带更深，且 RB 面积显著小于粉末堆积样品（图 6b, c）。以上详细光谱特征参数见表 1-3。

单颗粒光谱中 CF 吸收峰短波长侧的异常反射峰导致 CF 峰位红移（图 6）的现象可能与单颗粒表面形貌的不规则性以及晶体取向有关。例如，由于橄榄石晶体在不同晶轴方向的折射率存在差异[40]，因此沿不同轴向测量的单颗粒反射光谱特征峰位也会发生变化。而对于粉末堆积样品，其由取向随机分布的矿物颗粒组成，因此其反射光谱代表了各晶轴方向光谱特征的平均效应。

2.2 三种测量方法中尺寸对矿物光谱特征的影响

2.2.1 尺寸对矿物 DHR 光谱特征的影响

随着粒径增大，橄榄石、辉石和拉长石粉末堆积样品的 DHR 光谱呈现系统性变化趋势。整体而言，除 RB 区域外，全波段反射率逐渐降低，而 RB 区域的反射率则逐渐增高。与此同时，CF 吸收峰随之展宽，其短波长侧的光谱斜率绝对值逐渐减小[30]。弱吸收带与 RBs 的峰位整体保持稳定，而 CF 峰位则呈现无规律的轻微蓝移，最大偏移量约 0.1 μm。此外，光谱中的 TF 随粒径增大而减弱：该特征在<26 μm 的细颗粒样品中最为明显，而在 74~125 μm 及 125~200 μm 的粗颗粒区间则完全消失。唯一例外的是，<26 μm 橄榄石样品光谱缺失 RB4（11.94 μm）（表 1, 图 7）。

值得注意的是，弱吸收带的第一个主吸收峰（橄榄石：~5.62 μm；辉石：~5.14 μm；拉长石：~5.66 μm）的深度随粒径增大呈先增大后减小的趋势，且其与粒径呈现良好的二次多项式拟合关系（拟合 R^2 为 0.80~0.90）。三种矿物的吸收深度均在粒径约 80 μm 时达到最大值（图 8）。

表1 DHR反射中红外光谱特征

Table 1 Mid-infrared spectral features measured by directional-hemispherical integrated reflectance

样品	Size/μm	Weak band				CF		RBs										TF	
		Weak band1 position/μm	Weak band1 depth	Weak band2 position/μm	Weak band2 depth	CF position/μm	CF intensity	RB1 position/μm	RB1 intensity	RB2 position/μm	RB2 intensity	RB3 position/μm	RB3 intensity	RB4 position/μm	RB4 intensity	RB area	RB FWHM	TF position /μm	TF prominence
橄榄石	<26	5.63	0.26	5.99	0.30	8.91	0.05	9.42	0.17	10.14	0.15	10.62	0.21	N.D.	N.D.	2.90	2.20	12.82	0.09
	26~43	5.62	0.37	5.99	0.48	8.92	0.04	9.45	0.20	10.16	0.22	10.59	0.34	11.95	0.09	3.36	2.04	12.93	0.03
	43~74	5.62	0.38	5.99	0.51	8.91	0.03	9.48	0.22	10.16	0.26	10.58	0.40	11.94	0.11	3.80	1.33	12.73	0.02
	74~125	5.62	0.37	5.99	0.57	8.86	0.03	9.47	0.19	10.16	0.25	10.57	0.39	11.94	0.10	3.20	1.28	N.D.	N.D.
	125~200	5.61	0.25	5.98	0.52	8.87	0.02	9.56	0.23	10.17	0.33	10.57	0.51	11.93	0.14	2.99	1.30	N.D.	N.D.
辉石	<26	5.14	0.09	6.29	0.04	8.45	0.03	9.31	0.12	9.93	0.10	10.24	0.14	11.54	0.11	2.49	2.87	12.31	0.03
	26~43	5.14	0.18	6.28	0.12	8.44	0.02	9.29	0.17	9.92	0.14	10.23	0.20	11.53	0.13	2.27	2.78	12.58	0.01
	43~74	5.14	0.21	6.28	0.13	8.43	0.02	9.28	0.17	9.91	0.14	10.24	0.20	11.53	0.13	2.13	2.86	N.D.	N.D.
	74~125	5.14	0.21	6.30	0.11	8.41	0.02	9.29	0.18	9.91	0.16	10.24	0.22	11.56	0.15	1.52	2.85	N.D.	N.D.
	125~200	5.14	0.19	6.30	0.08	8.35	0.02	9.25	0.19	9.92	0.17	10.24	0.23	11.54	0.15	1.23	2.91	N.D.	N.D.
拉长石	<26	5.66	0.10	6.25	0.05	7.79	0.02	8.60	0.15	9.21	0.14	9.54	0.16	9.86	0.17	2.60	1.90	11.76	0.09
	26~43	5.66	0.19	6.24	0.11	7.79	0.02	8.66	0.19	9.19	0.19	9.52	0.22	9.86	0.24	3.21	1.73	11.92	0.04
	43~74	5.66	0.19	6.24	0.11	7.77	0.02	8.66	0.19	9.19	0.20	9.52	0.23	9.86	0.25	3.18	1.75	11.93	0.01
	74~125	5.66	0.14	6.25	0.09	7.71	0.02	8.67	0.20	9.19	0.21	9.52	0.24	9.86	0.27	3.03	1.75	N.D.	N.D.
	125~200	5.66	0.06	6.27	0.04	7.76	0.02	8.67	0.22	9.18	0.23	9.53	0.26	9.85	0.29	2.75	1.73	N.D.	N.D.

注 N.D.代表不存在相应特征值

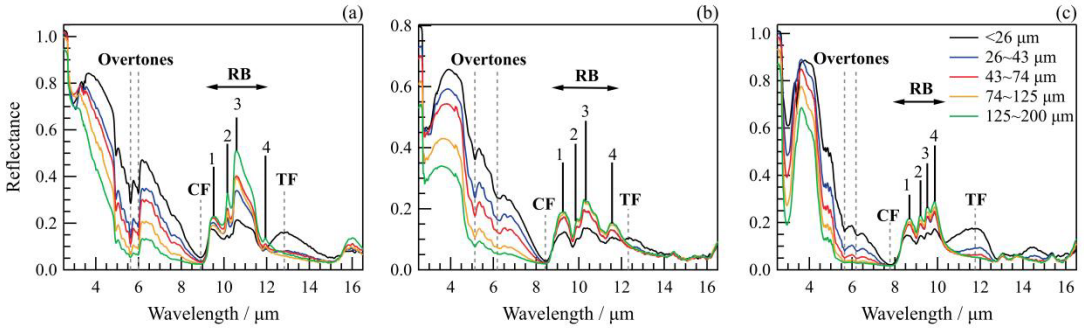


图 7 三种月表典型矿物（橄榄石、辉石、拉长石）不同粒径粉末堆积样品的中红外 DHR 光谱。（a）橄榄石；（b）辉石；（c）拉长石。各子图中灰色虚线标示参考光谱（26~43 μm 粉末）的特征峰位：弱吸收带的合频/倍频吸收峰、CF 吸收峰、TF 特征峰；黑色水平箭头标示 RB 特征区域；数字代表不同的 RB 峰位

Fig. 7 Mid-infrared DHR spectra of three typical lunar-type minerals (olivine, pyroxene, and labradorite) powders with different particle sizes. (a) Olivine; (b) Pyroxene; (c) Labradorite.In each panel, the gray dashed lines indicate the characteristic band positions derived from the reference spectra (26~43 μm powders): the combination/overtone absorption bands within the weak absorption region, the CF absorption peak, and the TF peak; the black horizontal arrows mark the RB spectral region. The numbers denote the positions of different RB

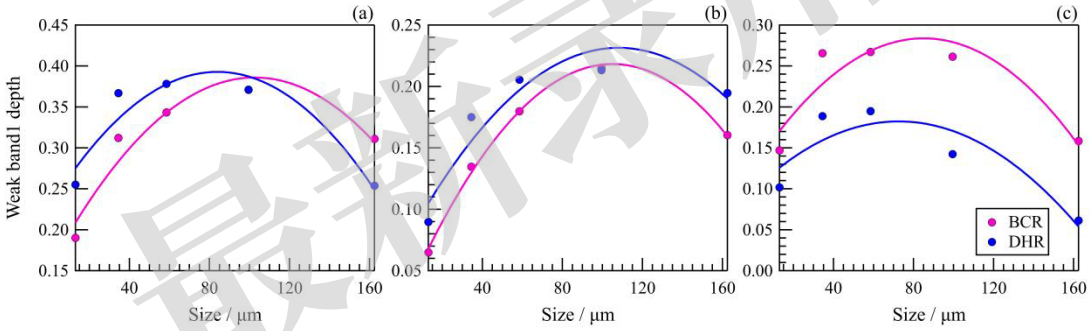


图 8 三种月表典型矿物弱吸收带第一个主吸收峰（Weak band 1）深度随粒径变化关系。（a）橄榄石；（b）辉石；（c）拉长石。各子图中数据点分别对应 BCR 与 DHR 光谱测量结果，同色曲线为对应的指数拟合趋势线

Fig. 8 Variation in the absorption depth of the first major band within the weak absorption region (Weak band 1) with particle size for three typical lunar-type minerals. (a) Olivine; (b) Pyroxene; (c) Labradorite. In each panel, the data points correspond to measurements from the BCR and DHR methods, respectively; the curves in corresponding colors represent the exponential fitting trends

2.2.2 尺寸对矿物 BCR 光谱特征的影响

在橄榄石、辉石和拉长石的粉末堆积样品 BCR 光谱中，粒径增大引发了一系列系统性变化。整体而言，全波段反射率随粒径增大呈现降低趋势（125~200 μm 的橄榄石和辉石除外）。CF 特征峰随之逐渐展宽，其短波侧光谱斜率的绝对值减小，而 CF 峰位本身则呈现无规律的微弱蓝移，最大偏移约 0.07 μm（表 2，图 9）。与此同时，光谱的 TF 逐渐减弱：该特征在<26 μm 的细颗粒样品中最为明显，而在粒径大于 74 μm 的粗颗粒样品中则完全消失。弱吸收带的第一个主吸收峰（橄榄石：~5.62 μm；辉石：~5.13 μm；拉长石：~5.65 μm）的

深度随粒径增大也呈先增大后减小的趋势，且与粒径呈现较好的二次多项式拟合关系（拟合 R^2 为 0.85~1）。三种矿物的吸收深度均在粒径约 100 μm 时达到最大值（图 8）。

值得注意的是，<26 μm 的细颗粒矿物光谱在 RB 特征上与其他粒径样品存在显著差异。与 DHR 光谱相比，在 BCR 模式下，橄榄石光谱的 RB 特征峰在谱形与数量上呈现多种变化：<26 μm 的橄榄石样品呈现出三个正常的 RB 峰（RB1、RB3、RB4）但缺失 RB5，而粒径大于 26 μm 的样品，则在正常 RB1 与 RB3 之间（约 9.2 μm 处）出现一个异常 RB2 峰。对于辉石，所有粒径样品的 RB 峰数量与峰位虽保持一致，但<26 μm 样品的 RB3 与 RB2 的相对反射强度与其他粒径样品不同。对于拉长石，粒径大于 26 μm 的样品中，由<26 μm 样品所呈现的正常 RB1 峰，分裂为一对近似对称的 RB1 和 RB2 双峰，且其反射强度减弱约一半（表 2, 图 9）。

2.2.3 尺寸对矿物显微 FTIR 反射光谱特征的影响

如图 10 所示，对于尺寸小于 10 μm 的单颗粒，其显微 FTIR 反射光谱表现为强镜面反射信号上叠加微弱的吸收特征，且吸收强度随粒径增大而增强。不同矿物单颗粒呈现出正常光谱形貌所需的临界尺寸存在差异，其反射率变化趋势及共振峰形态也不相同。这些异常谱形（如单一反射峰或成对出现的交叉峰）普遍被认为源于颗粒尺寸与红外波长相当所激发的米氏共振模式，颗粒的尺寸与形态是其主要控制因素[41]。在所有观测的单颗粒光谱中，均未发现透明特征（TF）。

橄榄石单颗粒的整体反射率随尺寸增大呈先降、后升、再降的非单调变化趋势（反射率变化范围：0.02~1），分别在 142×162 μm 与 217×276 μm 处达到极小值。弱吸收带（主峰位于 5.61 与 5.98 μm，其峰位不随颗粒尺寸变化）的深度则持续增大，该特征自尺寸为 44×61 μm 的单颗粒开始出现，至 113×118 μm 时变得明显，而在尺寸<26 μm 的颗粒中则完全缺失。光谱特征的出现顺序为：RB 特征最早出现（于 111×118 μm 的颗粒上），而包含清晰 CF 峰的完整正常谱形则出现较晚，仅在 142×162 μm 与 155×217 μm 两个颗粒上观测到。小于或大于此尺寸范围的颗粒，其光谱在 CF 区域表现为单一反射峰（<26 μm）或一对位于 8.77 μm 与 9.41 μm 的对称交叉峰（26~43 μm）。值得注意的是，正常谱形中 CF 峰位恰好对应于上述异常结构的峰位（即单一反射峰的位置或交叉峰的峰谷）。CF 峰的尖锐度与整体反射率呈正相关（表 3, 图 10a）。

辉石单颗粒的整体反射率随尺寸增大呈先降后升的趋势（反射率变化范围：0.01~1），并在颗粒尺寸为 193×195 μm 时达到极小值。弱吸收带（主峰位于 5.12、6.30 μm，不随颗粒尺寸变化）的深度总体呈持续增大的趋势（193×195 μm 的颗粒除外）；该特征自尺寸为 33×43 μm 的 单颗粒开始出现，在 120×122 μm 时变得明显，而在尺寸<26 μm 颗粒中则缺失。RB 特征最早出现（于 82×85 μm 的颗粒），而包含清晰 CF 峰的完整正常谱形最早见于 120×122 μm 的颗粒。小于此尺寸的颗粒，其光谱在约 8.42 μm 处呈现单一反射峰，其长波侧的吸收谷对应于正常 CF 峰位。CF 峰的尖锐度与整体反射率呈正相关，且在 233×364 μm 的颗粒上观察到其 CF 峰位发生明显蓝移（表 3, 图 10b）。

拉长石单颗粒的整体反射率随尺寸增大呈先降、后升、再降的趋势（反射率变化范围：0.01~1），分别在尺寸为 166×188 μm 与 152×258 μm 时达到极小值。弱吸收带的深度与整体反射率呈正相关变化，其主峰（位于 5.63 与 6.44 μm，不随颗粒尺寸变化）自尺寸为 29×38 μm 的单颗粒开始出现，在 32×52 μm 时变得明显，在尺寸<26 μm 的颗粒中则缺失。RB 特征最早出现（于 47×56 μm 的颗粒），而完整正常谱形最早见于 76×95 μm 的颗粒。尺寸更小的颗粒，其光谱在约 7.72 μm 处呈现单一反射峰，该反射峰长波长侧的吸收谷对应于正常 CF 峰位。CF 峰的尖锐度与整体反射率正相关，且在 152×258 μm 颗粒上观察到 CF 峰位发生明显蓝移（表 3, 图 10c）。

表2 BCR反射中红外光谱特征

Table 2 Mid-infrared spectral features measured by bi-conical diffuse reflectance

样品	Size/μm	Weak band				CF		RBs												TF	
		Weak band1 position/μm	Weak band1 depth	Weak band2 position/μm	Weak band2 depth	CF position/μm	CF intensity	RB1 position/μm	RB1 intensity	RB2 position/μm	RB2 intensity	RB3 position/μm	RB3 intensity	RB4 position/μm	RB4 intensity	RB5 position/μm	RB5 intensity	RB6 position/μm	RB6 intensity	RB area	RB FWHM	TF position/μm	TF prominence
橄榄石	<26	5.63	0.19	5.99	0.22	8.87	0.08	9.34	0.22	N.D.	N.D.	10.12	0.17	10.53	0.21	N.D.	N.D.	N.D.	N.D.	1.37	1.97	12.89	0.06
	26~43	5.62	0.31	5.99	0.39	8.88	0.06	9.33	0.17	9.91	0.16	10.13	0.17	10.53	0.21	11.93	0.05	N.D.	N.D.	1.53	2.18	12.95	0.02
	43~74	5.62	0.34	5.99	0.45	8.87	0.05	9.36	0.16	9.92	0.16	10.14	0.17	10.53	0.22	11.94	0.05	N.D.	N.D.	1.63	2.14	12.77	0.01
	74~125	5.62	0.37	5.99	0.53	8.86	0.02	9.36	0.10	9.94	0.12	10.14	0.13	10.53	0.18	11.93	0.04	N.D.	N.D.	1.26	2.04	N.D.	N.D.
	125~200	5.61	0.31	5.98	0.54	8.82	0.01	9.36	0.12	9.99	0.16	10.15	0.18	10.53	0.24	11.93	0.06	N.D.	N.D.	1.32	1.62	N.D.	N.D.
辉石	<26	5.14	0.06	6.31	0.04	8.39	0.03	8.71	0.21	8.83	0.23	9.31	0.18	9.91	0.14	10.22	0.17	11.50	0.11	1.63	1.94	12.31	0.01
	26~43	5.14	0.13	6.30	0.10	8.40	0.02	8.70	0.15	8.82	0.15	9.35	0.15	9.90	0.11	10.22	0.14	11.52	0.09	1.70	2.26	12.70	0.01
	43~74	5.14	0.18	6.29	0.13	8.39	0.01	8.70	0.13	8.83	0.14	9.35	0.13	9.89	0.10	10.23	0.12	11.49	0.08	1.60	2.28	N.D.	N.D.
	74~125	5.14	0.22	6.30	0.15	8.40	0.00	8.70	0.09	8.83	0.10	9.37	0.11	9.91	0.08	10.23	0.10	11.52	0.07	1.48	3.04	N.D.	N.D.
	125~200	5.14	0.16	6.31	0.10	8.38	0.01	8.70	0.19	8.83	0.20	9.38	0.22	9.91	0.18	10.22	0.21	11.50	0.13	1.40	3.03	N.D.	N.D.
拉长石	<26	5.65	0.15	6.24	0.06	7.79	0.02	8.40	0.26	N.D.	N.D.	9.16	0.17	9.48	0.19	9.83	0.18	N.D.	N.D.	1.43	1.78	11.78	0.06
	26~43	5.65	0.27	6.23	0.16	7.79	0.01	8.41	0.15	8.63	0.15	9.17	0.13	9.50	0.14	9.85	0.14	N.D.	N.D.	1.51	1.93	11.96	0.03
	43~74	5.65	0.27	6.23	0.17	7.77	0.00	8.42	0.14	8.63	0.15	9.17	0.13	9.51	0.14	9.84	0.14	N.D.	N.D.	1.53	1.96	11.81	0.01
	74~125	5.65	0.26	6.23	0.17	7.76	0.00	8.48	0.12	8.67	0.13	9.17	0.11	9.52	0.13	9.85	0.13	N.D.	N.D.	1.34	1.98	11.63	0.00
	125~200	5.66	0.16	6.26	0.09	7.74	0.00	8.43	0.13	8.65	0.14	9.17	0.12	9.51	0.13	9.85	0.14	N.D.	N.D.	1.14	1.97	N.D.	N.D.

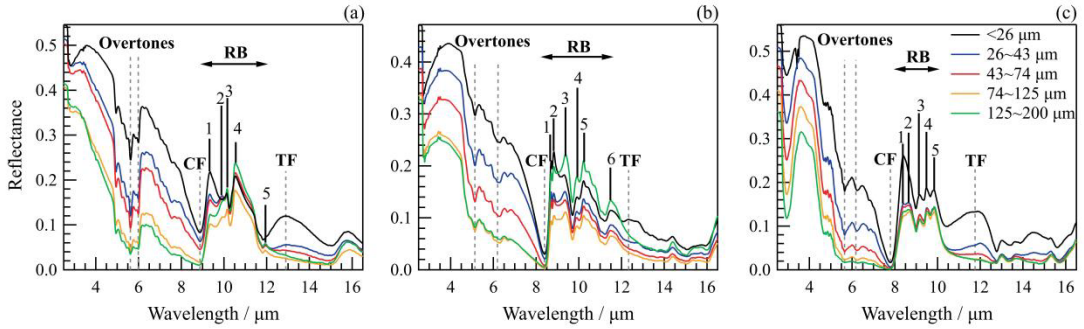
注 N.D.代表不存在相应特征值

表3 显微FTIR反射光谱特征参数

Table 3 Mid-infrared spectral features measured by micro-FTIR reflectance

样品	Size/μm	Weak band				CF		RBs										TF	
		Weak band1 position/μm	Weak band1 depth	Weak band2 position/μm	Weak band2 depth	CF position/μm	CF intensity	RB1 position/μm	RB1 intensity	RB2 position/μm	RB2 intensity	RB3 position/μm	RB3 intensity	RB4 position/μm	RB4 intensity	RB area	RB FWHM	TF position/μm	TF prominence
橄榄石	155×217	5.61	0.29	5.98	0.57	9.07	0.08	9.60	0.20	10.16	0.16	10.57	0.22	11.98	0.10	0.64	2.13	N.D.	N.D.
辉石	148×167	5.12	0.12	6.30	0.15	8.70	0.07	9.32	0.14	10.23	0.16	11.61	0.13	N.D.	N.D.	0.90	2.81	N.D.	N.D.
拉长石	76×95	5.63	0.25	6.44	0.14	8.19	0.15	8.88	0.42	9.20	0.38	9.48	0.42	9.85	0.54	1.43	1.48	N.D.	N.D.

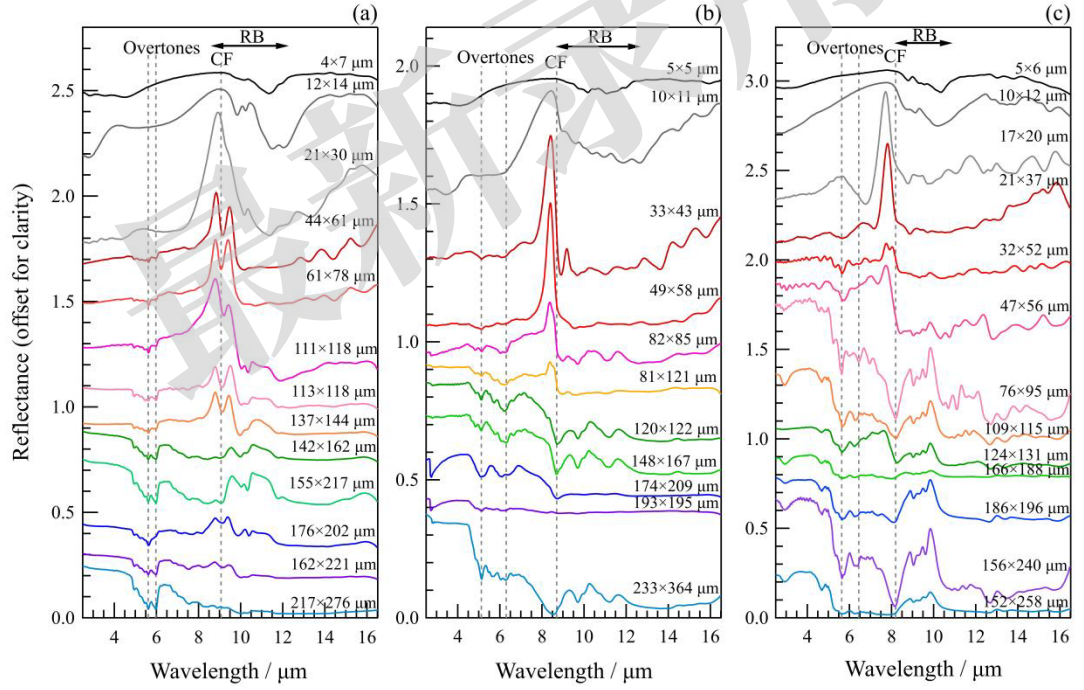
注 N.D.代表不存在相应特征值



451

452 图 9 三种月表典型矿物（橄榄石、辉石、拉长石）不同粒径粉末堆积样品的中红外 BCR
453 光谱。（a）橄榄石；（b）辉石；（c）拉长石。各子图中灰色虚线标示参考光谱（26~43
454 μm 粉末）的特征峰位：弱吸收带的合频/倍频吸收峰、CF 吸收峰、TF 特征峰；黑色水平
455 箭头标示 RB 特征区域；数字代表不同的 RB 峰位

456 Fig. 9 Mid-infrared BCR spectra of three typical lunar-type minerals (olivine, pyroxene, and
457 labradorite) powders with different particle sizes. (a) Olivine; (b) Pyroxene; (c) Labradorite .In
458 each panel, the gray dashed lines indicate the characteristic band positions derived from the
459 reference spectra (26~43 μm powders): the combination/overtone absorption bands within the
460 weak absorption region, the CF absorption peak, and the TF peak; the black horizontal arrows
461 mark the RB spectral region. The numbers denote the positions of different RB



462

463 图 10 不同尺寸样品在显微 FTIR 测量方法下的中红外反射光谱。（a）橄榄石；（b）辉
464 石；（c）拉长石。图中灰色虚线分别代表尺寸为 155×217 μm 的橄榄石、148×167 μm 的辉
465 石和 76×95 μm 的拉长石正常中红外光谱的弱吸收带合频/倍频吸收峰位、CF 峰位和 TF 峰
466 位；黑色水平箭头代表 RB 区域

467 Fig. 10 Mid-infrared micro-FTIR reflectance spectra of single particles of three typical lunar-type
468 minerals (olivine, pyroxene, and labradorite) with different sizes. (a) Olivine ; (b) Pyroxene; (c)
469 Labradorite. In each panel, the gray dashed lines indicate the characteristic band positions derived
470 from the reference spectra (representing normal spectral shapes): the combination/overtone

absorption bands within the weak absorption region, the CF absorption peak, and the TF peak; the black horizontal arrows mark the RB spectral region. The reference spectra are obtained from (a) a 155×217 μm olivine particle, (b) a 148×167 μm pyroxene particle, and (c) a 76×95 μm labradorite particle, respectively

2.3 基于三种测量方法的矿物光谱特征对比

在光谱矿物识别中，CF 峰位与 RB 峰位是关键诊断参数。鉴于这些峰位受粒径影响较小，为明晰测量方法本身的影响，本节以 26~43 μm 粉末堆积样品的反射光谱（BCR 与 DHR）及具有典型谱形的单颗粒显微 FTIR 光谱（橄榄石：155×217 μm；辉石：148×167 μm；拉长石：76×95 μm）为例，定量对比三种测量方法下不同矿物的特征峰位（CF、RB1 和 RB 最后峰位）变化规律（图 11, 12）。

2.3.1 CF 峰位对比

三种测量方法均显示，从橄榄石、辉石到拉长石（即硅含量增加），CF 峰位发生系统性蓝移。具体而言，显微 FTIR 光谱的 CF 峰位分别为 9.07 μm（橄榄石）→8.70 μm（辉石）→8.19 μm（拉长石）；BCR 与 DHR 光谱的 CF 峰位几乎完全重合，分别为 8.88/8.92 μm（橄榄石）→8.40/8.44 μm（辉石）→7.79/7.79 μm（拉长石）。相比之下，单颗粒显微 FTIR 光谱的整体 CF 峰位较两种粉末堆积样品的测量结果向长波方向偏移约 0.15~0.41 μm。相邻矿物类型间的 CF 峰位变化量均约为 0.5 μm（图 11 与图 12）。

2.3.2 RB1 峰位对比

三种方法下，RB1 峰位随矿物序列同样呈现蓝移趋势，但不同方法间的绝对峰位及变化幅度存在差异。显微 FTIR 光谱的 RB1 峰位为 9.60 μm（橄榄石）→9.32 μm（辉石）→8.88 μm（拉长石）；BCR 光谱为 9.34 μm→8.70 μm→8.41 μm；DHR 光谱为 9.45 μm→9.29 μm→8.66 μm。DHR 光谱与显微 FTIR 光谱的变化趋势较为接近，尤其是辉石样品的峰位几乎重合；而 BCR 光谱在辉石处的 RB1 峰位与另两种方法相差约 0.6 μm（图 11 与图 12）。

2.3.3 RB 最后峰位对比

三种测量方法均观测到 RB 最后峰位（RB last）随矿物序列蓝移。显微 FTIR 光谱的 RB 最后峰位为 11.98 μm（橄榄石）→11.61 μm（辉石）→9.85 μm（拉长石）；BCR 与 DHR 光谱的峰位高度一致，分别为 11.93/11.95 μm→11.52/11.53 μm→9.85/9.86 μm。三种测试光谱的变化趋势几乎重合，差异<0.08 μm。橄榄石、辉石和拉长石之间的变化量分别为 0.4 μm、1.7 μm（图 11 与图 12）。

2.3.4 水的吸附能力对比

本文所测矿物均为名义上不含水的硅酸盐矿物，但在测试过程中，由于暴露于大气环境中，其表面可能会吸附大气中的水汽，并在光谱的 3 μm 附近形成吸收特征[13]。如图 11 所示，在三种不同测量方式下，单颗粒显微光谱在 3 μm 处的吸收特征最弱，而 DHR 光谱在 3 μm 处的吸收峰最强。这表明，对于水含量较低的样品，采用 DHR 测量方式可能有助于增强水相关特征的检测。此外，在这三种矿物中，拉长石样品具有最为显著的 3 μm 吸收特征，表明其对大气水汽的吸附能力要远强于橄榄石与辉石[42]。

值得注意的是，辉石与拉长石样品在~6.1 μm 存在微弱的吸收，而橄榄石在三种测量方法下均未检测到该吸收（图 7, 9, 11）。因此，该吸收应主要归因于硅酸盐矿物硅氧键的和频/倍频振动，而非水分子的弯曲振动。

最终录用

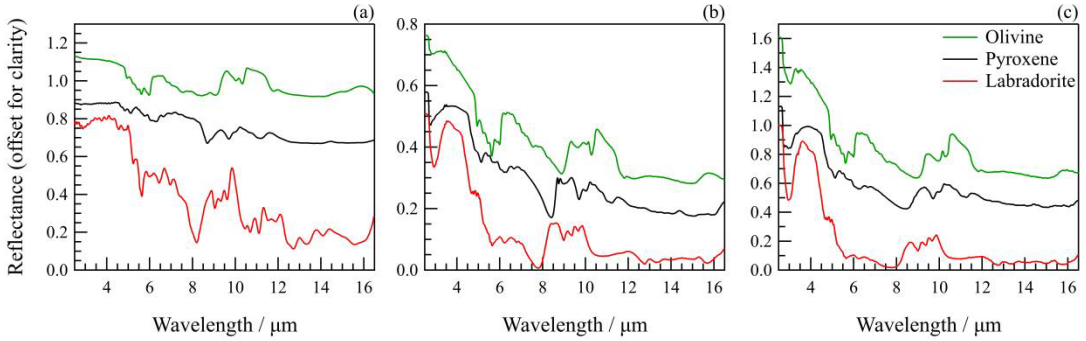


图 11 三种典型月表矿物在三种测量方法下的中红外光谱对比。（a）显微 FTIR 光谱（单颗粒：橄榄石 155×217 μm、辉石 148×167 μm、拉长石 76×95 μm）；（b）BCR 光谱（26~43 μm 粉末）；（c）DHR 光谱（26~43 μm 粉末）

Fig. 11 Comparison of the mid-infrared spectra of three typical lunar minerals obtained by three measurement methods. (a) Micro-FTIR spectra of olivine (155×217 μm), pyroxene (148×167 μm), and labradorite (76×95 μm); (b) BCR spectra of 26~43 μm powder samples of olivine, pyroxene, and labradorite; (c) DHR spectra of 26~43 μm powder samples of olivine, pyroxene, and labradorite

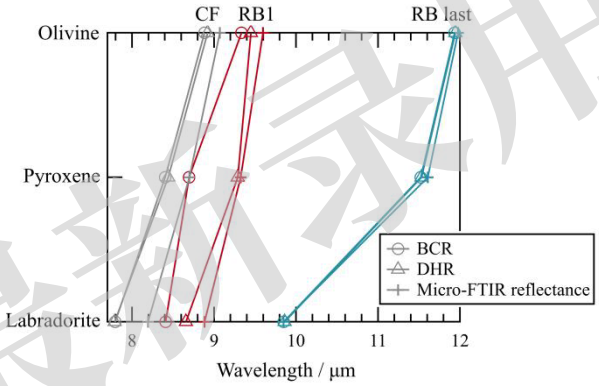


图 12 三种测试方法下橄榄石、辉石与拉长石的特征峰位随矿物类型的变化。显微 FTIR 光谱（单颗粒：橄榄石 155×217 μm、辉石 148×167 μm、拉长石 76×95 μm）；BCR 与 DHR 光谱（26~43 μm 粉末）。图中对比了 CF、RB1 及 RB 最后峰（RB last）的峰位，并以不同颜色标记

Fig. 12 Variation of characteristic band positions (CF, RB1, and RB last) of olivine, clinopyroxene, and labradorite with mineral composition under three measurement methods. Micro-FTIR spectra (single grains: olivine 155 × 217 μm, pyroxene 148 × 167 μm, labradorite 76 × 95 μm); BCR and DHR spectra (26–43 μm powders). The positions are color-coded by band type

2.4 三种测量方法的适用性与局限性

2.4.1 显微红外光谱测试的颗粒尺寸适用范围

基于前述结果，获取具有正常谱形所需的最小单颗粒尺寸因矿物而异：橄榄石需达到约 142×162 μm，辉石需约 120×122 μm，而拉长石仅需约 76×95 μm。这一“正常谱形粒径阈值”按橄榄石→辉石→拉长石的顺序递减，可能与其折射率差异导致的光散射行为不同有关。低于此阈值的颗粒，其光谱在 CF 区域通常表现为单一反射峰（橄榄石：~8.93 μm；辉石：~8.42 μm；拉长石：~7.72 μm）或成对的对称交叉峰（橄榄石：8.77 μm 与 9.41 μm）。综合考量，

最新录用

对于常见硅酸盐矿物，建议显微 FTIR 测试选用粒径不小于 150 μm 的颗粒，以保证特征峰的清晰可辨。若研究目标侧重观测 4.8~7 μm 波段的弱吸收带，则所需的最小颗粒尺寸可适当放宽：橄榄石约为 115 μm，辉石约为 120 μm，拉长石则仅需约 40 μm。

2.4.2 BCR 与 DHR 的颗粒尺寸效应

粉末堆积样品的 BCR 与 DHR 光谱随粒径变化呈现相反的 RB 强度变化趋势（见 2.2.1 与 2.2.2 节）。这源于 RB 特征主要由 Si-O 的伸缩振动引起的共振散射决定，该区域的反射强度对体积散射更为敏感[34]：在 BCR 测量中，探测信号以镜面反射为主；大颗粒因表面更平滑而产生更强的镜面反射，而细颗粒因经历更显著的多重散射，其所测信号中体积散射的贡献比例相对更高，因此细颗粒的 RB 区域强度相对更强。与之相对，在用积分球进行 DHR 测量时，光线在颗粒间经历更多次的传播与散射，导致大颗粒样品反射信号中体积散射的占比相较于细颗粒更高，因而大颗粒的 RB 区域强度更高。

为定量对比两种方法的粒径效应差异，本研究采用 Xiao 等[30]提出的 *K*-value 参数进行指数衰减模型拟合（图 13）。以各粒径范围的中间值作为代表粒径进行分析，结果显示三种矿物的拟合优度均较高（R^2 为 0.98~1），但 BCR 光谱的 *K*-value 在更小粒径处即趋于饱和。在未饱和区间内，对应于同一 *K*-value 的粒径预测差异表现为：橄榄石（约 48 μm）> 辉石（约 30 μm）> 拉长石（约 24 μm）。因此，在建立粒径预测模型时，应优先选用积分球测试数据，尤其对于橄榄石；而在应用现有模型时，必须确保待测样品的测试方法与建模方法完全一致，否则将严重影响预测精度。

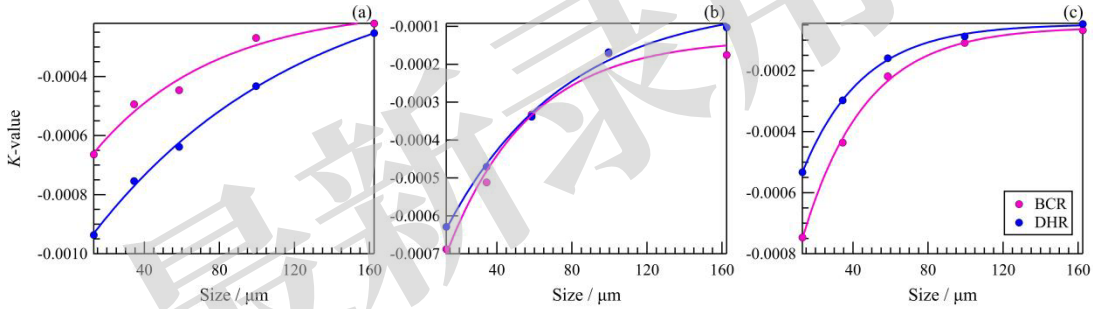


图 13 三种矿物 BCR 与 DHR 光谱的 *K*-value 随粒径变化图。（a）橄榄石；（b）辉石；（c）拉长石。各子图中圆点代表实测结果，同色曲线为对应的指数拟合趋势线

Fig. 13 Variation of the K-value parameter with particle size for three typical lunar-type minerals. (a) Olivine; (b) Pyroxene; (c) Labradorite. In each panel, the data points correspond to measurements from the BCR and DHR methods, respectively. The curves in corresponding colors represent the exponential fitting trends

对于橄榄石，两种方法在 *K*-value 上的差异可通过反射率比值 $R_{7.7\ \mu m}/R_{10\ \mu m}$ 进行有效校正。该比值与粒径的指数衰减模型拟合效果优异（R^2 约为 0.99），且在 0~200 μm 范围内，两种测量方法下该比值随粒径的变化趋势高度一致（见图 14a）。据此，我们建立了通用的预测模型：$y=0.234+1.885e^{-0.025x}$（$R^2=0.976$）。这表明，当测量方法受限时，可选择对方法不敏感的光谱参数（如 $R_{7.7\ \mu m}/R_{10\ \mu m}$）进行稳健的粒径预测。

最新录用

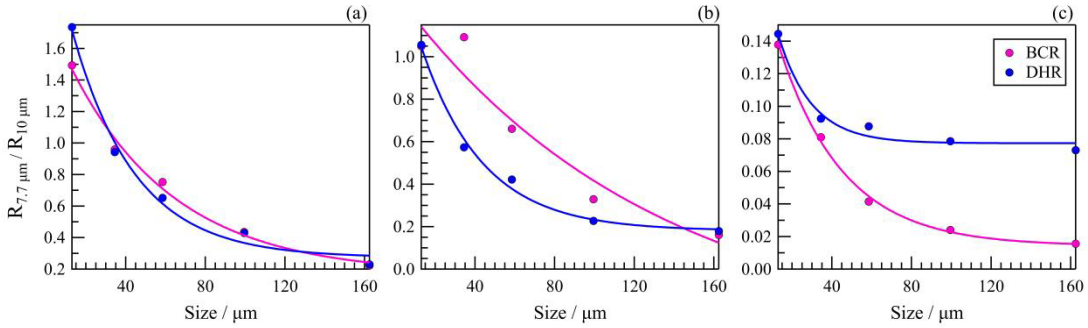


图 14 三种月表典型矿物的反射率比值 $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$ 随粒径变化关系。（a） 橄榄石 $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$–粒径关系；（b） 辉石 $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$–粒径关系；（c） 拉长石 $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$–粒径关系。各子图中圆点分别对应 BCR 与 DHR 测量结果，同色曲线为对应的指数拟合趋势线

Fig. 14 Variation of the reflectance ratio $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$ with particle size for three typical lunar-type minerals. (a) $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$ versus particle size for olivine; (b) $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$ versus particle size for pyroxene; (c) $R_{7.7\,\mu m}/R_{10\,\mu m}$ versus particle size for labradorite. In each panel, the data points correspond to measurements from the bi-conical diffuse reflectance and integrating sphere directional-hemispherical reflectance methods, respectively; the curves in corresponding colors represent the exponential fitting trends

此外，研究发现不同矿物对同一预测参数的响应存在显著差异。例如，在 0~200 μm 范围内，辉石的 RB 面积与粒径呈良好的线性关系且无饱和现象（DHR 测试：y=-0.0088x+2.58, R^2=0.96），而橄榄石和拉长石的 RB 面积则几乎不随粒径变化（图 15b）。这一结果表明，试图采用单一光谱参数普适性地预测所有矿物粒径的思路仍有待探索。未来的粒径反演模型需充分考虑矿物特异性，通过筛选或加权对不同矿物最敏感的光谱参数，才能实现更精准、通用的粒径预测。

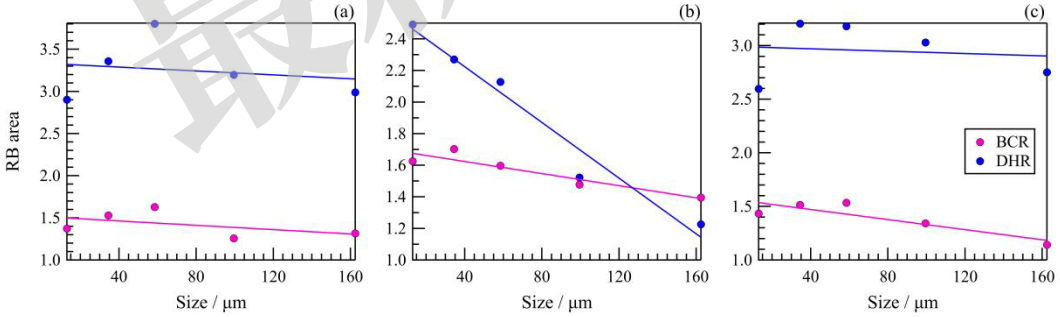


图 15 三种月表典型矿物的 RB 面积随粒径变化关系。（a） 橄榄石 RB 面积–粒径关系；（b） 辉石 RB 面积–粒径关系；（c） 拉长石 RB 面积–粒径关系。各子图中数据点分别对应 BCR 与 DHR 测量结果，同色曲线为对应的指数拟合趋势线

Fig. 15 Variation of the RB area with particle size for three typical lunar-type minerals. (a) RB area versus particle size for olivine; (b) RB area versus particle size for pyroxene; (c) RB area versus particle size for labradorite. In each panel, the data points correspond to measurements from the BCR and DHR methods, respectively; the curves in corresponding colors represent the exponential fitting trends

2.4.3 三种测量方法在物质成分分析中的适用性

在利用中红外光谱进行矿物成分识别时，测量方法的选择对特征峰位的解译具有决定性

最新版

影响。对于粉末堆积样品，虽然其 CF 与 RB 特征峰位虽不随粒径显著变化，但如 2.3 节所示，相同粒径样品（以 26~43 μm 为例）在不同测量方法下会呈现系统性峰位偏移，这意味着不能将同一种识别标准直接应用于不同测试方法获取的数据。具体而言，在使用 CF 峰位及 RB 最后峰位识别矿物时，BCR 与 DHR 结果高度一致；在使用 RB1 峰位时，DHR 光谱则与显微 FTIR 光谱趋势更为接近；而在使用 RB 最后峰位时，三种测量方法光谱趋势几乎完全一致。然而，各方法的应用存在明确限制：显微 FTIR 光谱因在 CF 峰附近常伴生异常反射峰，导致其 CF 峰位整体向长波方向平均偏移约 0.3 μm（此偏移量与不同矿物间的 CF 峰位变化量级相当），故在依据 CF 参数识别矿物成分时应避免采用此方式。此外，特征峰位对测量方法的敏感度与矿物类型有关，表现为辉石>拉长石>橄榄石。在本研究涉及的三类矿物中，橄榄石、辉石和拉长石的 RB 最后峰位在三种测试方式间均表现出良好的一致性和可解译性，能够综合使用不同测量方法的光谱识别矿物成分。综上，在对粉末或颗粒样品进行物质成分光谱解译时，除需选择代表性粒径外，还必须依据目标矿物及所用诊断参数，审慎选择与之匹配的光谱测量方法。

2.4.4 对嫦娥 7 号与天问 2 号光谱探测数据解译的启示

嫦娥 7 号与天问 2 号任务均配备了涵盖热红外谱段的光谱仪，其最长波段分别达到了 10 μm 和 50 μm。因此，嫦娥 7 号光谱仪所能探测的主要中红外光谱特征包括 CF 与 RB1，而天问 2 号光谱仪则可对本文所分析的 CF 及所有 RB 特征进行探测。在实验室内对目标天体表面可能出现的物质进行模拟观测，是准确解译即将获取的遥测光谱数据的关键。就 CF 而言，BCR 与 DHR 两种测量方式的结果基本一致，而单颗粒显微反射测量结果易受颗粒表面形貌等因素的影响，与前两种测量方式的结果差异较大。因此，若以 CF 峰位为判别指标，选用 BCR 与 DHR 测量结果来构建定量或半定量反演模型均可。而对于 RB1 特征，三种测量方式的结果差异较大。考虑到实际遥测信号主要为热辐射信号，热发射率（ε）与 DHR 之间更为符合基尔霍夫定律（ε=1-R_{DHR}），在构建相关反演模型时，宜采用 DHR 方式测量的数据为基础。而对于 RB 最后峰位（9.8~12 μm），三种测量方式的结果基本一致，因此可以作为重要的成分判别指标。

理论上，物质的热发射率与温度无关，但在高真空环境下，月球及小行星表面物质之间往往存在热梯度效应[43]，并非处于充分的热平衡状态。因此基于遥感探测数据得到的表观热反射率与基于实验室室温反射光谱利用基尔霍夫定律（ε=1-R）得到的等效热发射率之间可能存在一定差异。在应用于遥感数据解译时，应考虑热梯度效应，并结合热梯度模型进行校正。

3 结论

本研究通过显微 FTIR、双锥式漫反射（BCR）及定向-半球反射（DHR）三种方法，系统测量了橄榄石、辉石和拉长石在五种粒径范围（<26、26~43、43~74、74~125、125~200 μm）的中红外反射光谱。通过定义并提取六类关键光谱参数，定量对比分析了测试方法、矿物种类与颗粒尺寸对光谱特征的影响，主要结论如下：

（1）单颗粒光谱与粉末堆积样品光谱存在系统性差异。显微 FTIR 测得的单颗粒光谱在 CF 峰附近易出现异常反射峰，导致 CF 峰位整体红移约 0.3 μm，且缺乏由颗粒间多重散射引起的透明特征（TF）。

（2）粉末堆积样品的两种反射光谱在谱形上差异显著。以橄榄石为例，BCR 光谱在 RB1 与 RB3 之间常出现一个异常 RB2 反射峰，导致其 RB 峰数量多于 DHR 光谱。

（3）颗粒尺寸效应具有显著的方法依赖性。显微 FTIR 光谱形态与单颗粒尺寸密切相关，为获取可靠的本征光谱，建议选用粒径大于 150 μm 的颗粒。对于 DHR 与 BCR 光谱，

其弱吸收带、CF 及 RB 峰位随粒径未发生明显偏移，其最大变化值分别为 0.03、0.10、0.14 μm；TF 特征随粒径增大而减弱，在大于 74 μm 的样品中基本消失。但二者 RB 反射强度随粒径的变化趋势相反（分别为正相关与负相关）。此外，BCR 光谱在粒径>26 μm 时，RB1 峰常分裂为一对强度减半的对称反射峰。基于 *K*-value 参数的定量分析进一步表明，两种粉末测试方法间的粒径效应差异程度表现为橄榄石（最大差异约 48 μm）>辉石（约 30 μm）>拉长石（约 24 μm）。

（4）在粒径预测的方法选择与参数优化方面，建议优先使用 DHR 测试数据建立预测模型，尤其对于橄榄石样品更为重要。应用现有模型时，须保证测试方法与建模方法完全一致，否则将显著降低预测精度。当测量方法受限时，可选用对测试方式不敏感的光谱参数进行预测，例如橄榄石的反射率比值 $R_{7.7\ \mu m}/R_{10\ \mu m}$ 在两种测试方法下表现出良好的一致性，其通用指数预测模型为 $y=0.234+1.885e^{-0.025x}$（$R^2=0.976$）。研究同时发现，不同矿物适用的预测参数存在显著差异：辉石的 RB 面积在 0~200 μm 范围内与粒径呈现良好的线性关系且无饱和现象（定向-半球反射光谱模型为 $y=-0.0088x+2.58$，$R^2=0.96$），而橄榄石与拉长石的 RB 面积则对粒径变化不敏感。

（5）在成分识别的方法与参数选择上，使用显微 FTIR 时必须选用尺寸合适的单颗粒，而粉末堆积样品的 CF 与 RB 峰位受粒径影响极小。特征峰位对测试方法的敏感度顺序为辉石＞拉长石＞橄榄石，其中橄榄石、辉石与拉长石的 RB 最后峰位在三种方法间均表现出一致性，可用于跨方法解译。

最新录用

参考文献

[1] TAYLOR S R, MCLENNAN S M. Planetary Crusts[M]. New York: Cambridge University Press, 2009

[2] SHEARER C K, HESS P C, WIECZOREK M A, *et al*. Thermal and magmatic evolution of the moon[J]. *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, 2006, **60**(1): 365-518

[3] NEAL C R, GADDIS L R, JOLLIFF B L, *et al*. New Views of the Moon 2[M]. Chantilly: Mineralogical Society of America, 2023

[4] CLARK R N. Spectroscopy of rocks and minerals, and principles of spectroscopy[M]//RENCZ A N. Manual of Remote Sensing, Volume 3, Remote Sensing for the Earth Sciences. New York: John Wiley and Sons, 1999

[5] BURNS R G. Mineralogical Applications of Crystal Field Theory[M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.

[6] FARMER V C. The Infrared Spectra of Minerals[M]. London: Mineralogical Society, 1974

[7] CHRISTENSEN P R, ANDERSON D L, CHASE S C, *et al*. Thermal emission spectrometer experiment: mars observer mission[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 1992, **97**(E5): 7719-7734

[8] ZHAO S R, BIAN Q J, WANG Q Y. Crystallography and Mineralogy[M]. Beijing: Higher Education Press, 2017

[9] SALISBURY J W, WALTER L S. Thermal infrared (2.5-13.5 μm) spectroscopic remote sensing of igneous rock types on particulate planetary surfaces[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1989, **94**(B7): 9192-9202

[10] YANG Y Z, MILLIKEN R E, BRAMBLE M S, *et al*. Laboratory thermal emission spectral measurement and calibration methods for planetary science research[J]. *Chinese Journal of Space Science*, 2024, **44**(2): 270-286

[11] SALISBURY J W, WALTER L S, VERGO N. Mid-infrared (2.1-25 μm) spectra of minerals[R]. Reston: U.S. Geological Survey, 1987

[12] HAMILTON V E. Thermal infrared emission spectroscopy of the pyroxene mineral series[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2000, **105**(E4): 9701-9716

[13] YANG Y Z, JIANG T, LIU Y, *et al*. A micro mid‐infrared spectroscopic study of Chang'e‐5 sample[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2022, **127**(8): e2022JE007453

[14] HAMILTON V E. Thermal infrared (vibrational) spectroscopy of Mg–Fe olivines: a review and applications to determining the composition of planetary surfaces[J]. *Geochemistry*, 2010, **70**(1): 7-33

[15] ZENG X J, LI X Y, MARTIN D, *et al.* Micro‐FTIR spectroscopy of lunar pyroclastic and impact glasses as a new diagnostic tool to discern them[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2019, **124**(12): 3267-3282

[16] GLOTCH T D, LUCEY P G, BANDFIELD J L, *et al*. Highly silicic compositions on the moon[J]. *Science*, 2010, **329**(5998): 1510-1513

[17] MA M, LI B Z, CHEN S B, *et al*. Global estimates of lunar surface chemistry derived from LRO diviner data[J]. *Icarus*, 2022, **371**: 114697

[18] LI B C, WANG W G, ZHANG Y G, *et al*. Design and preliminary verification of asteroid thermal emission spectrometer for Tianwen-2[J]. *SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica*, 2025, **55**(7): 279508

[19] SALISBURY J W, WALD A, D'ARIA D M. Thermal-infrared remote sensing and Kirchhoff's law: 1. Laboratory measurements[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1994, **99**(B6): 11897-11911

[20] BRAMBLE M S, YANG Y Z, PATTERSON W R, *et al*. Radiometric calibration of thermal emission data from the Asteroid and Lunar Environment Chamber (ALEC)[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2019, **90**(9): 093101

[21] NICODEMUS F E. Directional reflectance and emissivity of an opaque surface[J]. *Applied Optics*, 1965, **4**(7): 767-775

[22] PIETERS C M, HIROI T. RELAB (Reflectance Experiment Laboratory): A NASA multiuser spectroscopy facility[C]//Proceedings of the 35th Lunar and Planetary Science Conference. Houston: Lunar and Planetary Institute, 2004: 1720

[23] MILLIKEN R E, HIROI T, SCHOLES D, *et al*. The NASA reflectance experiment LABoratory (RELAB) facility: an online spectral database for planetary exploration[C]//Proceedings of Astromaterials Data Management in the Era of Sample-Return Missions Community Workshop. Tucson: LPI, 2021

[24] LANE M D, GLOTCH T D, DYAR M D, *et al.* Midinfrared spectroscopy of synthetic olivines: Thermal emission, specular and diffuse reflectance, and attenuated total reflectance studies of forsterite to fayalite[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2011, **116**(E8): E08010

[25] SALISBURY J W, WALTER L S, VERGO N, *et al*. Infrared (2.1-25 μm) Spectra of Minerals[M]. Baltimore: Johns Hopkins Univ. Press, 1991

[26] CHRISTENSEN P R, BANDFIELD J L, HAMILTON V E, *et al*. A thermal emission spectral library of rock‐forming minerals[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2000, **105**(E4): 9735-9739

[27] HAPKE B. Bidirectional reflectance spectroscopy: 1. Theory[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1981, **86**(B4): 3039-3054

最新录用

[28] CLARK R N, ROUSH T L. Reflectance spectroscopy: quantitative analysis techniques for remote sensing applications[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1984, **89**(B7): 6329-6340

[29] SHIRLEY K A, GLOTCH T D. Particle size effects on mid‐infrared spectra of lunar analog minerals in a simulated lunar environment[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2019, **124**(4): 970-988

[30] XIAO Y, LIU B, REN X, *et al*. A new method to predict particle sizes of lunar or s-type asteroid surfaces based on the laboratory thermal-infrared data[J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 2025, **25**(5): 055004

[31] XU Z Y, YANG Y Z, ZHANG L L, *et al*. High energy electron irradiation promotes the space weathering process on the nearside of the Moon[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2025, **669**: 119588

[32] CARRIER III W D. Lunar soil grain size distribution[J]. *The Moon*, 1973, **6**(3/4): 250-263

[33] ZHANG Sensen, WANG Shijie, LI Xiongyao, *et al*. Properties and harmfulness of lunar dust: a review[J]. *Earth Science(Journal of ChinaUniversity of Geosciences)*, 2013, **38**(2): 339-350 (张森森, 王世杰, 李雄耀, 等. 月尘的性质及危害评述[J]. 地球科学(中国地质大学学报), 2013, **38**(2): 339-350)

[34] SALISBURY J W, WALD A. The role of volume scattering in reducing spectral contrast of reststrahlen bands in spectra of powdered minerals[J]. *Icarus*, 1992, **96**(1): 121-128

[35] HAPKE B. Theory of Reflectance and Emittance Spectroscopy[M]. New York: Cambridge University Press, 2012

[36] DONALDSON HANNA K L, WYATT M B, THOMAS I R, *et al*. Thermal infrared emissivity measurements under a simulated lunar environment: application to the diviner lunar radiometer experiment[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2012, **117**(E12): E00H05

[37] SALISBURY J W, D'ARIA D M. Infrared (8-14 μm) remote sensing of soil particle size[J]. *Remote Sensing of Environment*, 1992, **42**(2): 157-165

[38] RUFF S W, CHRISTENSEN P R, BARBERA P W, *et al*. Quantitative thermal emission spectroscopy of minerals: a laboratory technique for measurement and calibration[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1997, **102**(B7): 14899-14913

[39] NICODEMUS F E, RICHMOND J C, HSIA J J. Geometrical Considerations and Nomenclature for Reflectance[M]. Washington: United States. Government Printing Office, 1977

[40] YANG Y Z, ZHANG H, WANG Z W, *et al*. Optical spectroscopic characterizations of laser irradiated olivine grains[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 2017, **597**: A50

[41] MOERSCH J E, CHRISTENSEN P R. Thermal emission from particulate surfaces: a comparison of scattering models with measured spectra[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 1995, **100**(E4): 7465-7477

[42] ICHIMURA A S, ZENT A P, QUINN R C, *et al*. Hydroxyl (OH) production on airless planetary bodies: Evidence from H+/D+ ion-beam experiments[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2012, **345-348**: 90-94

[43] EMERY J P, SPRAGUE A L, WITTEBORN F C, *et al*. Mercury: Thermal modeling and mid-infrared (5-12 μm) observations[J]. *Icarus*, 1998, **136**(1): 104-123

第一作者：张梦远 女，2002 年 6 月 28 日出生于河南省周口市，现为中国科学院国家空间

录用稿

科学中心硕士研究生，主要研究方向为行星光谱学、无大气天体表面的空间风化作用等。
E-mail: zhangmengyuan23@mails.ucas.ac.cn



通信作者：杨亚洲 男，1990 年 9 月出生于湖北省孝感市，现为中国科学院国家空间科学中心研究员，主要研究方向为行星光谱学、无大气天体表面的空间风化作用等。E-mail: yangyazhou@nssc.ac.cn



最新录用