



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 116202996 A

(43) 申请公布日 2023.06.02

(21) 申请号 202310122919.7

G01N 21/3563 (2014.01)

(22) 申请日 2023.02.16

G01N 21/3581 (2014.01)

(71) 申请人 桂林理工大学

G01N 1/44 (2006.01)

地址 541006 广西壮族自治区桂林市雁山区雁山街319号

G01N 21/73 (2006.01)

申请人 中国科学院地球化学研究所  
南宁理工学院

(72) 发明人 彭艳华 唐红 夏志鹏 曾小家  
陈国柱 莫冰 王茜

(74) 专利代理机构 北京中济纬天专利代理有限公司 11429

专利代理师 郭萍

(51) Int. Cl.

G01N 21/55 (2014.01)

G01N 21/31 (2006.01)

权利要求书2页 说明书7页 附图2页

(54) 发明名称

基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法

(57) 摘要

本发明提供了一种基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法,包括以下步骤:(1)制备一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品作为标准样品;(2)采集各标准样品的反射光谱,计算各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度;(3)以样品中单质金属铁含量为纵坐标,以所述吸收深度为横坐标,拟合得到样品中单质金属铁含量与所述吸收深度之间的换算关系式;(4)采集月壤样品的反射光谱,计算月壤样品的反射光谱在2000nm波长处吸收带的吸收深度,然后由样品中单质金属铁含量与所述吸收深度之间的换算关系式计算出月壤样品中的单质金属铁含量。本发明可实现月壤中单质金属铁含量的无损、简单、高效和低成本测定。

1. 基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法, 其特征在于, 包括以下步骤:

(1) 制备标准样品

制备一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品作为标准样品;

(2) 光谱测试及吸收深度计算

分别采集各标准样品的反射光谱, 由式 (III) 计算各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度,

$$d = \frac{R_r - R_l}{\lambda_r - \lambda_l} \lambda_{est} + \frac{R_l \lambda_r - R_r \lambda_l}{\lambda_r - \lambda_l} - R_{est} \quad (III)$$

式 (III) 中,  $d$  为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度,  $\lambda_l$ 、 $\lambda_r$  和  $\lambda_{est}$  分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点的波长,  $R_l$ 、 $R_r$  和  $R_{est}$  分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点的反射率;

(3) 确定单质金属铁含量与吸收深度之间的换算关系

以样品中单质金属铁含量为纵坐标, 以样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度为横坐标, 点绘各标准样品中单质金属铁含量与各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的关系, 并拟合得到样品中单质金属铁含量与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的换算关系式;

(4) 测试月壤样品中的单质金属铁含量

采集月壤样品的反射光谱, 根据采集到的月壤样品的反射光谱, 由式 (III) 计算月壤样品的反射光谱在2000nm波长处吸收带的吸收深度;

根据月壤样品在2000nm波长处的吸收带的吸收深度, 由步骤 (3) 确定的样品中单质金属铁含量与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的换算关系式计算出月壤样品中的单质金属铁含量。

2. 根据权利要求1所述基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法, 其特征在于, 在采集各标准样品和月壤样品的反射光谱时, 采集各标准样品和月壤样品在400~2150nm波段范围内的反射光谱。

3. 根据权利要求1所述基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法, 其特征在于, 步骤 (1) 中制备一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品的方法如下:

① 称取将石墨和模拟月壤装入坩埚中, 将坩埚置于高温气氛炉中, 在真空条件下将高温气氛炉加热至1550~1600℃, 保温3~4h, 取出坩埚, 淬火冷却, 即得含单质金属铁的玻璃质样品;

② 将含单质金属铁的玻璃质样品粉碎, 用磁选仪对玻璃进行磁选, 得到有磁性样品和无磁性样品;

③ 用电感耦合等离子体光发射光谱仪测定有磁性样品的总铁含量, 利用铁穆斯堡尔谱测定有磁性样品中单质金属铁的比例, 计算得到有磁性样品中单质金属铁的质量百分数;

④ 将不同质量比的有磁性样品和无磁性样品混合均匀, 得到一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品。

4. 根据权利要求3所述基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法, 其特征在于, 所述模拟月壤为模拟月壤CLRS-2。

5. 根据权利要求1至4中任一权利要求所述基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法,其特征在于,在采集各标准样品和月壤样品的反射光谱时,对各标准样品和月壤样品的反射光谱至少进行3次采集各,以各次采集的各标准样品的反射光谱信号的平均值,以及各次采集的月壤样品的反射光谱信号的平均值,作为计算各标准样品和月壤样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度。

6. 根据权利要求1至4中任一权利要求所述基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法,其特征在于,步骤(3)中,在点绘各标准样品中单质金属铁含量与各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的关系之后,通过二次拟合得到样品中单质金属铁含量与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的换算关系式。

## 基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法

### 技术领域

[0001] 本发明属于月壤成分分析领域,涉及一种基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法。

### 背景技术

[0002] 由于月球表面缺乏大气层和磁场等的保护作用,月球表面直接暴露于太空环境中,长期受到陨石和微陨石的高速撞击,以及宇宙射线和太阳风粒子的持续轰击,这些作用会诱导单质金属铁的形成。通过电子显微镜研究发现,这些太空风化成因的单质金属铁( $\text{Fe}^0$ )的粒径通常在几十至几百个纳米之间。随着月壤在太空环境中暴露时间的增加,它们会逐渐成熟,其中生成的单质金属铁的含量也会随之增加。反之,单质金属铁的含量可以反映月壤成熟度的高低。因此,单质金属铁的丰度对评估太空风化以及月球风化层的演化有非常重要的意义。

[0003] 目前,获得月球样品中单质金属铁丰度的方法常见的有三种。方法1,首先利用化学测试的手段测试样品中的全铁( $\text{FeO}$ )含量,然后通过铁穆斯堡尔谱获得样品中单质金属铁占全铁含量( $\text{Fe}^0/\text{FeO}$ )的百分比,根据全铁含量和单质金属铁占全铁含量的百分比以及具体样品的实际质量,可计算得到样品中单质金属铁的含量。方法2,先利用化学测试的手段获取样品中的全铁( $\text{FeO}$ )含量,然后进行磁性测试,利用铁磁共振(FMR)来测试月壤样品中铁的信号强度( $I_s$ ),将测试得到的全铁含量和铁的信号强度值代入经验公式计算得到单质金属铁的含量。方法3,通过测试样品的反射率光谱,然后根据反射率值结合Hapke辐射传输模型来反演样品中单质金属铁的含量。

[0004] 上述的方法1和方法2均需要利用到化学分析法以获取全岩中的 $\text{FeO}$ 含量,该化学分析法通常为有损测试,还可能会污染样品,并且操作复杂耗时,对于珍稀的月球样品而言,这并不是最可取的方法。同时,穆斯堡尔谱的测试成本十分高昂,会导致月壤中单质金属铁的测试成本过高,不利于推广应用。方法2中的FMR只能检测粒径在约4~33nm的单质金属铁,无法检测粒径大于33nm的单质金属铁,因而基于FMR的计算结果难以准确代表样品中单质金属铁的总含量。方法3在利用Hapke模型反演单质金属铁含量之前,需要详细测定组成月壤样品的所有矿物的各项光学参数,前期准备工作繁琐复杂。并且,研究发现Hapke模型对粒径较小的纳米级单质金属铁有较好的反演效果,对于粒径大于50nm单质金属铁的反演结果并不理想,因此,对于含有大量较粗颗粒单质金属铁的月壤样品,其反演结果与实际单质金属铁含量会存在较大误差。

[0005] 综上所述,现有研究方法存在有损、误差大、操作复杂繁琐以及成本过高等明显的局限性,导致它们在研究月壤中单质金属铁含量的工作中的应用不广泛。在未来若干年,我国将继续实施月球探测工程,发射“嫦娥六号”探测器,完成月球极区采样返回,发射小行星探测器,完成近地小行星采样和主带彗星探测,完成火星采样返回,木星系探测等等关键技术的攻关。在深空探测的大背景下,全面而深入地认识月壤物质成分,将有助于月球科学的发展以及月球工程的顺利开展。因此,开发简单、高效、低成本且无损的月壤中单质金属铁

含量测试方法显得尤为必要。

### 发明内容

[0006] 针对现有测试月球样品中单质金属铁含量的方法存在的有损、误差大、操作复杂繁琐以及成本过高等局限,本发明提供了一种基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法,以在不借助于其他辅助手段的基础上,实现月壤中单质金属铁含量的无损、简单、高效和低成本测定。

[0007] 为实现上述发明目的,本发明采用的技术方案如下:

[0008] 基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法,包括以下步骤:

[0009] (1) 制备标准样品

[0010] 制备一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品作为标准样品;

[0011] (2) 光谱测试及吸收深度计算

[0012] 分别采集各标准样品的反射光谱,由式(III)计算各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度,

$$[0013] \quad d = \frac{R_r - R_l}{\lambda_r - \lambda_l} \lambda_{est} + \frac{R_l \lambda_r - R_r \lambda_l}{\lambda_r - \lambda_l} - R_{est} \quad (III)$$

[0014] 式(III)中,d为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度, $\lambda_l$ 、 $\lambda_r$ 和 $\lambda_{est}$ 分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点的波长, $R_l$ 、 $R_r$ 和 $R_{est}$ 分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点的反射率;

[0015] (3) 确定单质金属铁含量与吸收深度之间的换算关系

[0016] 以样品中单质金属铁含量为纵坐标,以样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度为横坐标,点绘各标准样品中单质金属铁含量与各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的关系,并拟合得到样品中单质金属铁含量与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的换算关系式;

[0017] (4) 测试月壤样品中的单质金属铁含量

[0018] 采集月壤样品的反射光谱,根据采集到的月壤样品的反射光谱,由式(III)计算月壤样品的反射光谱在2000nm波长处吸收带的吸收深度;

[0019] 根据月壤样品在2000nm波长处的吸收带的吸收深度,由步骤(3)确定的样品中单质金属铁含量与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的换算关系式计算出月壤样品中的单质金属铁含量。

[0020] 上述技术方案步骤(2)中,反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度的计算公式的确定过程如下:

[0021] 首先,假设连接反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩和右肩两点的直线方程如式(I)所示,

$$[0022] \quad f(\lambda) = a\lambda + b \quad (I)$$

[0023] 式(I)中, $\lambda$ 是波长,a和b是常数,f( $\lambda$ )是对应的是反射率。

[0024] 然后,反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度d可以由式(II)表示,

$$[0025] \quad d = f(\lambda_{est}) - R_{est} \quad (II)$$

[0026] 式(II)中, $\lambda_{est}$ 代表反射光谱在2000nm波长处的吸收带的最低点(吸收谷的谷底)

对应的波长,  $R_{est}$  代表代表反射光谱在2000nm波长处的吸收带的最低点(吸收谷的谷底)对应的反射率;

[0027] 如果反射光谱在2000nm波长处的吸收带(吸收谷)的左肩、右肩和谷底对应的波长和反射率都是已知的,那么根据公式(I)~(II),反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度d可以由式(III)表示,

$$[0028] \quad d = \frac{R_r - R_l}{\lambda_r - \lambda_l} \lambda_{est} + \frac{R_l \lambda_r - R_r \lambda_l}{\lambda_r - \lambda_l} - R_{est} \quad (III)$$

[0029] 式(III)中,d为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度, $\lambda_l$ 、 $\lambda_r$ 和 $\lambda_{est}$ 分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点的波长, $R_l$ 、 $R_r$ 和 $R_{est}$ 分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点的反射率。

[0030] 上述技术方案中,在采集各标准样品和月壤样品的反射光谱时,采集各标准样品和月壤样品在400~2150nm波段范围内的反射光谱。

[0031] 上述技术方案中,可利用可见-近红外分光光度计采集各标准样品和月壤样品的反射光谱。

[0032] 上述技术方案中的步骤(1)中,一种可行的制备一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品的方法如下:

[0033] ①称取将石墨和模拟月壤装入坩埚中,将坩埚置于高温气氛炉中,在真空条件下将高温气氛炉加热至1550~1600℃,保温3~4h,取出坩埚,淬火冷却,即得含单质金属铁的玻璃质样品;

[0034] ②将含单质金属铁的玻璃质样品粉碎,用磁选仪对玻璃进行磁选,得到有磁性样品和无磁性样品;

[0035] ③用电感耦合等离子体光发射光谱仪测定有磁性样品的总铁含量,利用铁穆斯堡尔谱测定有磁性样品中单质金属铁的比例,计算得到有磁性样品中单质金属铁的质量百分数;

[0036] ④将不同质量比的有磁性样品和无磁性样品混合均匀,得到一系列单质金属铁含量不同的模拟月壤样品。

[0037] 进一步地,上述技术方案中,所述模拟月壤为模拟月壤CLRS-2。

[0038] 上述技术方案中,在采集各标准样品和月壤样品的反射光谱时,对各标准样品和月壤样品的反射光谱至少进行3次(例如3~5次)采集,以各次采集的各标准样品的反射光谱信号的平均值,以及各次采集的月壤样品的反射光谱信号的平均值,作为计算各标准样品和月壤样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度。

[0039] 上述技术方案的步骤(3)中,在点绘各标准样品中单质金属铁含量与各标准样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的关系之后,通过二次拟合得到样品中单质金属铁含量与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的换算关系式。

[0040] 与现有技术相比,本发明提供的技术方案产生了以下有益的技术效果:

[0041] 1. 本发明提供了基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法,以月壤样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带吸收深度值为基础来确定月壤样品中单质金属铁的含量,整个测定过程中只需用到可见-近红外分光光度计进行反射光谱采集,无需借

助其他辅助测试手段,不仅测试成本低,而且测定过程不会对珍贵的月壤样品造成污染,属于无损、无污染测试。同时,在进行反射光谱采集前,无需对月壤样品进行任何前处理,也不需要测试月壤组成矿物的各项光学参数,操作简便快捷,可以避免大量繁杂的准备工作。第三,因该方法只需收集月壤样品的反射光谱数据,对月壤样品的需求量少,只需毫克级的月壤样品量即可实现测定。第四,该方法以反射光谱为基础进行单质金属铁的含量测试,由于反射光谱不容易受到样品粒径的影响,因而适用的月壤样品的粒径范围宽,可以解决现有技术基于FMR的方法存在的无法检测粒径大于33nm的单质金属铁的不足,以及结合反射率值和Hapke辐射传输模型的方法存在的对粒径大于50nm单质金属铁的反演结果不理想的问题。

[0042] 2.本发明的方法只需要加之该方法只需要~2000nm波段的反射光谱数据,对光谱数据需求量少,因此本发明的方法还可应用于遥感光谱数据解译,对于更深入地了解 and 认识月球的物质组成和演化过程等具有重要的意义。

### 附图说明

[0043] 图1的(a)(b)两图分别是实施例制备的无磁性样品和有磁性样品的实物照片。

[0044] 图2的(a)(b)两图分别是实施例制备的有磁性样品和无磁性样品的<sup>57</sup>Fe共振吸收穆斯堡尔谱图,(a)图中的红色子谱(图中箭头指向的子谱)对应于单质金属铁,(b)图中的子谱均为Fe<sup>2+</sup>,未检测到单质金属铁的信号。

[0045] 图3是样品C1~C9的反射光谱图,其中各反射光谱曲线上的数字代表样品中单质金属铁的百分含量。

[0046] 图4是单质金属铁含量与吸收深度之间的拟合关系图。

### 具体实施方式

[0047] 下面通过实施例对本发明提供的基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法作进一步说明。有必要指出,以下实施例只用于对本发明作进一步说明,不能理解为对本发明保护范围的限制,所属领域技术人员根据上述发明内容对本发明做出一些非本质的改进和调整进行具体实施,仍属于本发明的保护范围。

[0048] 下述实施例中,采集样品光谱所用的仪器为Cary 500可见-近红外分光光度计。每个样品均测试3次,以3次测试得到的光谱信号的平均值作为最终的信号值。

[0049] 实施例

[0050] 本实施例中,提供本发明所述基于反射光谱吸收深度测定月壤中单质金属铁含量的方法。

[0051] 1. 制备标准样品

[0052] 在该步骤中,制备单质金属铁含量不同的多个模拟月壤样品,即制备单质金属铁含量不同的多个标准样品。制备时用到的初始原料包括:中国科学院地球化学研究所制备的高钛月海模拟月壤CLRS-2和市场购买的高纯石墨,其中,模拟月壤CLRS-2的矿物成分主要包括基性火山玻璃、钛铁矿、橄榄石、辉石和斜长石,其化学成分见表1。

[0053] 表1模拟月壤CLRS-2的XRF测试结果(wt.%)

[0054]	SiO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MnO	MgO	CaO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	烧失量	合计
[0055]	40.64	6.79	12.07	19.29	0.22	7.68	9.50	2.26	0.83	0.19	0.50	99.97

[0056] 单质金属铁含量不同的多个模拟月壤样品的制备过程如下:

[0057] (1) 按石墨与模拟月壤CLRS-2的质量比为1.0:27.0的比例称取石墨与模拟月壤CLRS-2,装入坩埚中,将坩埚置于高温气氛炉中,保持高温气氛炉处于真空条件,加热至1600℃,保温4h,从高温气氛炉中取出坩埚,快速淬火冷却,即获得含单质金属铁的玻璃质样品。

[0058] (2) 将含单质金属铁的玻璃质样品粉碎,用磁选仪对玻璃进行磁选,将有磁性(C<sub>h</sub>)和无磁性(C<sub>n</sub>)的部分进行分离。

[0059] 分离得到的有磁性(C<sub>h</sub>)和无磁性(C<sub>n</sub>)部分的照片见图1,其中,C<sub>n</sub>样品的照片如图1的(a)图所示,C<sub>h</sub>样品的照片如图1的(b)图所示,(b)图的颜色明显深于(a)图,这是由于C<sub>h</sub>样品中含有不透明单质金属铁成分所造成的。

[0060] (3) 利用电感耦合等离子体光发射光谱仪(OES)测定C<sub>h</sub>样品和C<sub>n</sub>样品的总铁(FeO)含量,利用铁穆斯堡尔谱(FeMS)测定C<sub>h</sub>样品和C<sub>n</sub>样品中的单质金属铁的比例,样品的总铁含量与样品中单质金属铁的比例的乘积即为样品中单质金属铁的质量百分数。

[0061] C<sub>h</sub>样品和C<sub>n</sub>样品的<sup>57</sup>Fe共振吸收穆斯堡尔谱图如图2所示,其中的(a)(b)两图分别代表C<sub>h</sub>样品和C<sub>n</sub>样品,(a)图中的红色子谱对应于单质金属铁,(b)图中的子谱均为Fe<sup>2+</sup>,未检测到单质金属铁的信号。分析测试结果见表2。从表2中可以看到,样品C<sub>n</sub>样品中单质金属铁含量为0wt.%,C<sub>h</sub>样品中单质金属铁含量为0.36wt.%。

[0062] 表2C<sub>h</sub>样品和C<sub>n</sub>样品的单质金属铁含量

	FeMS		OES FeO (wt.%)	Fe <sup>0</sup> (wt.%)
	Area (%)	Fe <sup>0</sup> /FeO (%)		
C <sub>h</sub> 样品	Fe <sup>2+</sup> doublet	14.20	1.36	0.36
		59.24		
	α-Fe doublet	26.56		
C <sub>n</sub> 样品	Fe <sup>2+</sup> doublet	47.55	1.34	0.00
		34.38		
		18.08		
	α-Fe doublet	0.00		

[0064] 注:Fe<sup>0</sup>为单质金属铁的简写

[0065] (4) 按一定的比例称取C<sub>h</sub>样品和C<sub>n</sub>样品,然后将二者充分混合均匀,得到单质金属铁含量分别为0wt%、0.05wt.%、0.10wt.%、0.15wt.%、0.20wt.%、0.25wt.%、0.30wt.%和0.36wt.%的样品C1~C9,即制备得到了9个单质金属铁含量不同的标准样品。具体取样比例见表3。

[0066] 表3制备不同单质金属铁含量的样品C1~C9时C<sub>h</sub>与C<sub>n</sub>样品的混合比例



样品	Fe <sup>0</sup> (wt.%)	混合比例 (wt.%)	
		C <sub>h</sub> 样品	C <sub>n</sub> 样品
C1	0.00	0.00	100.00
C2	0.05	13.89	86.11
C3	0.10	27.78	72.22
[0067] C4	0.15	41.67	58.33
C5	0.18	50.00	50.00
C6	0.20	55.56	44.44
C7	0.25	69.44	30.56
C8	0.30	83.33	16.67
C9	0.36	100.00	0.00

[0068] 2. 光谱测试及吸收深度计算

[0069] (1) 利用可见-近红外分光光度计逐一采集样品C1~C9在400~2150nm波段范围内的反射光谱,样品C1~C9的反射光谱图如图3所示,图3中各反射光谱曲线上的数字代表样品中单质金属铁的百分含量。

[0070] (2) 根据步骤(1)采集到的各样品的光谱数据,计算各样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度d,d的计算公式如式(III):

$$[0071] \quad d = \frac{R_r - R_l}{\lambda_r - \lambda_l} \lambda_{est} + \frac{R_l \lambda_r - R_r \lambda_l}{\lambda_r - \lambda_l} - R_{est} \quad (III)$$

[0072] 式(III)中, $\lambda_l$ 、 $\lambda_r$ 和 $\lambda_{est}$ 分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点(吸收谷的谷底)的波长; $R_l$ 、 $R_r$ 和 $R_{est}$ 分别为反射光谱在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点(吸收谷的谷底)的反射率。样品C1~C9在2000nm波长处的吸收带的左肩、右肩对应的波长( $\lambda$ )和反射率(R)值以及吸收深度(d)值见表4。

[0073] 表4样品C1~C9在2000nm波长处吸收带特征

样品	Fe <sup>0</sup> 含量 (wt.%)	左肩		吸收带最低点		右肩		d
		$\lambda$ ( $\mu$ m)	R (%)	$\lambda$ ( $\mu$ m)	R (%)	$\lambda$ ( $\mu$ m)	R (%)	
C1	0.00	1.603	59.129	1.962	57.873	2.126	59.204	1.308
C2	0.05	1.599	51.952	1.955	51.164	2.127	52.103	0.890
C3	0.10	1.602	47.431	1.956	46.814	2.130	47.764	0.841
[0074] C4	0.15	1.601	43.585	1.950	43.032	2.130	43.876	0.745
C5	0.18	1.600	40.011	1.948	39.745	2.135	40.593	0.645
C6	0.20	1.600	38.799	1.966	38.405	2.129	38.939	0.491
C7	0.25	1.596	34.110	1.959	33.714	2.116	34.221	0.474
C8	0.30	1.598	30.616	1.950	30.354	2.130	30.871	0.431
C9	0.36	1.601	28.076	1.953	27.737	2.124	28.109	0.361

[0075] 3. 确定单质金属铁含量M与吸收深度d之间的换算关系

[0076] 以样品中单质金属铁含量为纵坐标,以样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度为横坐标,点绘样品C1~C9的单质金属铁含量与样品C1~C9的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度之间的关系,并进行二次拟合得到样品中单质金属铁含量M与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度d之间的换算关系式M=

$0.35d^2-0.94d+0.63$ ,拟合结果如图4所示。由图4可知,拟合函数的决定系数 $R^2$ 高达0.95,说明拟合效果非常好。

[0077] 4. 测试未知月壤样品中的单质金属铁含量

[0078] (1) 利用可见-近红外分光光度计采集月壤样品在400~2150nm波段范围内的反射光谱;

[0079] (2) 分析步骤(1)采集到的月壤样品的反射光谱在2000nm波长处吸收带的特征,包括:在2000nm波长处吸收带的左肩、右肩和吸收带最低点(吸收谷的谷底)对应的波长 $\lambda_1$ 、 $\lambda_r$ 和 $\lambda_{est}$ ,在2000nm波长处吸收带吸收谷的左肩、右肩和吸收带最低点(吸收谷的谷底)对应的反射率 $R_1$ 、 $R_r$ 和 $R_{est}$ 。根据公式(III)计算月壤样品的反射光谱在2000nm波长处吸收带的吸收深度d。

[0080] (3) 根据月壤样品在2000nm波长处的吸收带的吸收深度,由步骤3确定的样品中单质金属铁含量M与样品的反射光谱在2000nm波长处的吸收带的吸收深度d之间的换算关系式 $M=0.35d^2-0.94d+0.63$ ,即可计算出月壤样品中的单质金属铁含量。

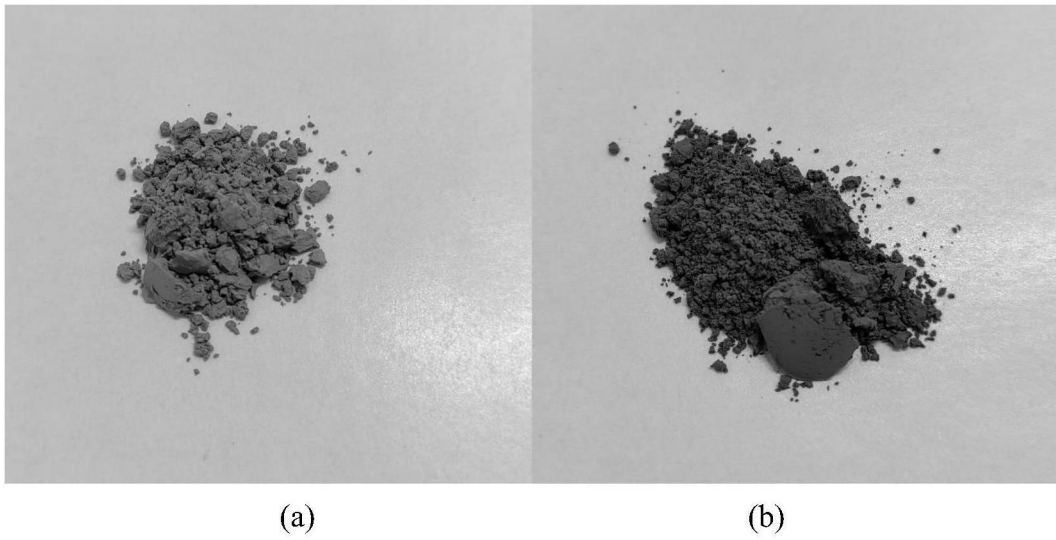


图1

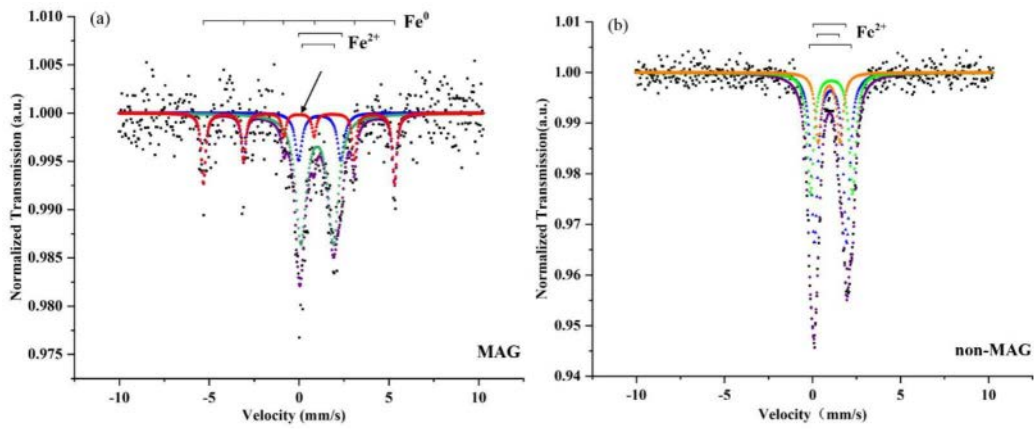


图2

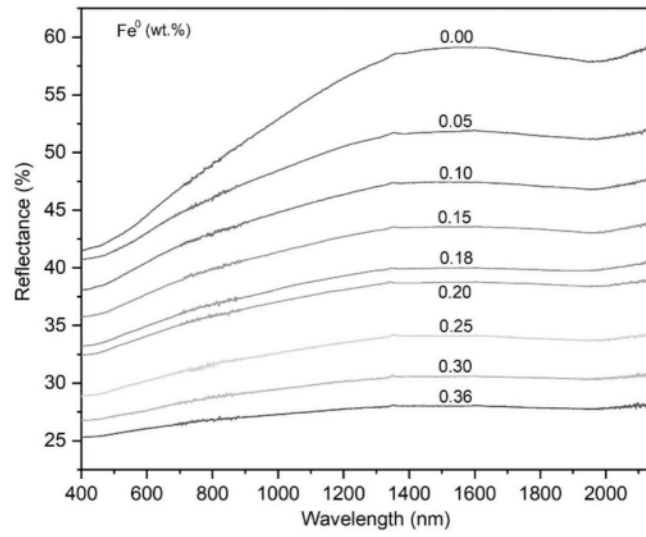


图3

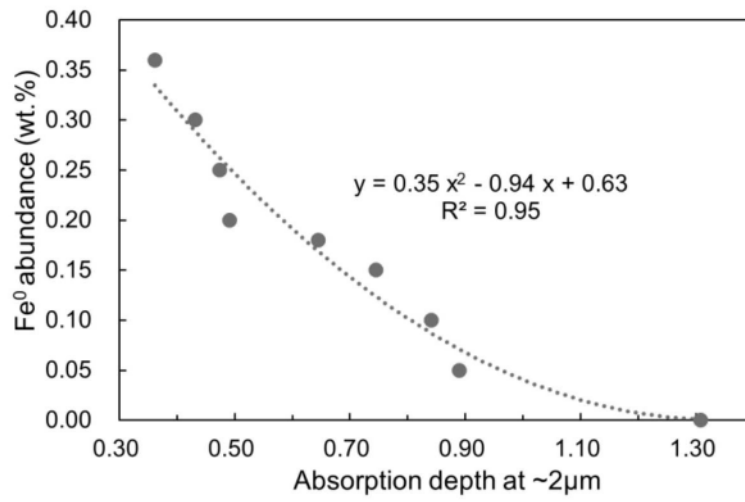


图4