0254-6124/2022/42(1)-0117-10 *Chin. J. Space Sci.* 空间科学学报

TANG Hong, ZHOU Chuanjiao, LI Xiongyao, LIU Jianzhong, MO Bing, YU Wen, ZENG Xiaojia. Infrared Spectroscopic Detection of Organic Matter on the Surface of Asteroids (in Chinese). *Chinese Journal of Space Science*, 2022, **42**(1): 117–126. DOI:10.11728/cjss2022.01.201127103

小行星表面有机物的红外光谱探测方法*

唐 红[1,2,3] 周传娇[1,4] 李雄耀[1,2,3] 刘建忠[1,2,3]
莫 冰[1,2,3] 于 雯[1,2,3] 曾小家[1,3]

1(中国科学院地球化学研究所 月球与行星科学研究中心 贵阳 550081)

2(中国科学院比较行星学卓越创新中心 合肥 230026)

3(中国科学院太空制造技术重点实验室 北京 100094)

4(中国科学院大学 北京 100049)

摘 要 小行星的有机物记录了太阳系早期有机物的形成发展历史，为地球早期生命前体出现的研究提供了重要依据，对于研究生命起源和演化具有重要意义。本文综合分析了小行星表面可能存在的有机物成分、种类及其赋存状态，利用红外光谱开展地面模拟实验，探讨有机物的红外光谱特征及其影响因素。结果表明，不同类型有机物的红外光谱特征与其类型、结构、温度和压力等有关。研究确定了小行星表面主要有机物的红外光谱识别标志，初步提出了小行星有机物红外光谱探测仪器的基本指标参数。

关键词 小行星，有机物，红外光谱，探测方法

中图分类号 P148

Infrared Spectroscopic Detection of Organic Matter on the Surface of Asteroids

TANG Hong[1,2,3] ZHOU Chuanjiao[1,4] LI Xiongyao[1,2,3] LIU Jianzhong[1,2,3]
MO Bing[1,2,3] YU Wen[1,2,3] ZENG Xiaojia[1,3]

1(*Center for Lunar and Planetary Sciences, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang* 550081)

2(*Center for Excellence in Comparative Planetology, Chinese Academy of Sciences, Hefei* 230026)

3(*Key Laboratory of Space Manufacturing Technology, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100094)

4(*University of Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100049)

Abstract The organic matter in the asteroid has recorded the formation and evolution of organic matter in the early solar system, which provides an important basis for the research on the emergence of

* 国家自然科学基金项目（41773066），中国科学院青年创新促进会项目（2018435）和贵州省科技计划项目（[2020]1Z035）共同资助
2020-11-26 收到原稿，2021-11-13 收到修定稿

E-mail: tanghong@vip.gyig.ac.cn

early life precursors on Earth, and is significant for the origin and evolution of life. In this study, the composition, types and occurrence of possible organic matter in asteroids have been analyzed. The infrared spectra and influence factors of organic matter have been discussed by simulation experiments. Infrared spectra of three representative organic matter (*i.e.*, glycine, glucose, and eicosane) at different temperatures were obtained by in-situ infrared spectroscopy measurements under temperatures ranging from −60°C to 30°C in vacuum. In addition, the main types of organic matter of the Murchison carbonaceous chondrite were identified using the infrared spectrometer. The results show that the infrared spectral of different organic compounds are related to the types, structures, temperatures, and pressures. The identification marks of main organic matter on the surface of the asteroids have been determined. And the preliminary parameters of infrared spectrometer for exploring organic matter in asteroids are presented.

Key words Asteroid, Organic matter, Infrared spectra, Exploration methods

0 引言

小行星是围绕太阳轨道运行的固态小天体,大多数的运行轨道在火星与木星之间。根据小行星的反照率和光谱特征,可以将小行星划分为 C、D、F、P、G、K、T、B、M、Q、S、A、E、R、V 和其他型,其中 C、D、P、B、G 和 F 型小行星含有有机物。C 型小行星极暗,反照率约为 0.05,数量最多,主要由硅酸盐和碳(有机物)组成,在矿物上近似于碳质球粒陨石,被称为碳质小行星[1,2]。目前通过对碳质球粒陨石的研究以及地基红外光谱仪观测 C 型小行星的数据分析,在小行星上发现了大量不同种类的有机物[3]。小行星上有机物的研究具有重要科学意义。一方面,球粒陨石中的有机物是构成太阳星云的初始组分,经历了不同程度辐射、水蚀变和热变质等作用后,形成了现今组成复杂的有机物;另一方面,生命是在有机物和水的基础上形成的,这二者也普遍存在于小行星中,同时大部分已知的陨石有机物都能够在地球上找到对应的物质,小行星上的有机物是否与生命起源和演化有关,地球的生命起始物质是否来源于降落在地球表面的陨石中的有机物,这些都成为研究小行星有机物的重要目的[3,4]。总之,小行星上的有机物记录了太阳系最初有机物成分的形成发展历史,也为地球早期生命前体出现的研究提供了重要依据,这对于研究生命起源和演化具有重要意义。

有机波谱技术在有机化学和高分子化学研究及化合物结构鉴定中起着极为重要的作用,紫外光谱、荧光光谱、红外光谱、拉曼光谱、核磁共振氢谱和碳谱、有机色谱–质谱等已成为有机物研究中最常用的分析技术。对比这些技术方法,结合深空探测对小行星有机物的探测需求,红外光谱具有独特的优势,不用直接接触样品即可获得气态、液态和固态的红外吸收光谱特征,并且可以快速分辨不同有机物的结构和类型,此外红外光谱仪器相对简单,体积较小,灵敏度高,比较容易解译,因此在对小行星表面的有机物探测中,红外光谱法是目前最适合有效的方法之一。

1 小行星有机物的基本特征

1.1 小行星有机物的红外探测特征

小行星的光谱探测研究主要包括地基观测和空间探测两个途径。在小行星的空间探测中,目前共进行与小行星有关的探测 13 次,其中专门以小行星为目标的探测仅 5 次,探测的小行星共 18 个,实现采样返回的小行星 2 个。

Cruikshank 和 Brown[5] 利用 NASA 的红外望远镜设备获得了小行星 130 Elektra 的光谱数据,分析表明出现了 3.4 μm 附近较弱的 C-H 伸缩振动的吸收峰,最早确定了该小行星表面有碳氢有机物的存在,并通过与 Murchison 碳质球粒陨石中有机物红外光谱的特征比较,发现二者具有相似的光谱特征,推断该类碳质球粒陨石可能来源于该类小行星。随后有研究通过分析地基红外光谱数据发现了小行星 24 Themis 和 65 Cybele 表面有机物的存在。Rivkin 和 Emery[6] 以及 Campins 等[7] 对小行星 24 Themis 的 2～4 μm 红外光谱数据分析发现,小行星 24 Themis 表面存在

水冰和有机物, 其中 3.4 μm 和 3.5 μm 附近的吸收很可能来源于-CH_3 和-CH_2 的振动, 而 3.3 μm 附近的吸收则可能代表多环芳香烃。Licandro 等[8] 对小行星 65 Cybele 的 2～4 μm 红外光谱数据分析发现, 小行星 65 Cybele 表面含有水冰、复杂有机物和不含水的硅酸盐颗粒(见图 1[8])。光谱中 3.2～3.5 μm 的吸收峰代表了有机物的存在, 对不同成分有机物的建模研究表明, 可能含有 3 种不同种类的有机物质(见图 2[8]): (1)3.273～3.636 μm 的吸收峰主要由 C-H 的伸缩振动引起, 很可能为含有-CH_3、-CH_2 和-CH 三种基团的脂肪烃; (2)约 3.3 μm 附近的吸收峰代表了芳香烃 C-H 的伸缩振动, 建模分析表明其可能为六环芳

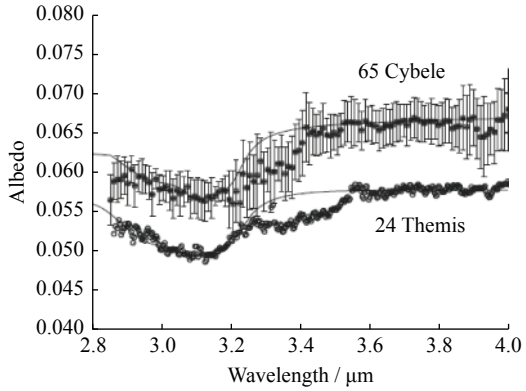


图 1　小行星 65 Cybele 和 24 Themis 的反射光谱

Fig. 1　Reflection spectra of Asteroids 65 Cybele and 24 Themis

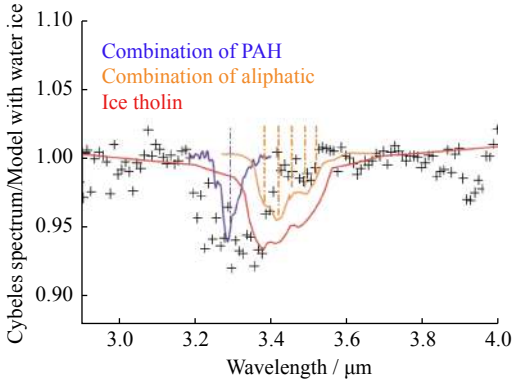


图 2　小行星 65 Cybele 在光谱 3.2～3.5 μm 波段的有机物建模分析 (包括脂肪烃、芳香烃和冰索林三种类型的有机物)

Fig. 2　Modeling analysis of organic matter of Asteroid 65 Cybele in the spectrum of 3.2～3.5 μm (including aliphatic hydrocarbon, aromatic hydrocarbon, and ice tholin)

香烃物质; (3)冰索林, 一种外太阳系天体中常见的杂聚合物分子, 是由太阳紫外辐射与冰和简单的有机物成分如甲烷或乙烷所形成的。

小行星空间探测的光谱数据分析和样品分析中也发现了有机物的存在。Sanctis 等[9] 和 Raponi 等[10] 通过对 Dawn 探测器搭载的可见/近红外光谱(VIR)数据分析发现, Ceres 的 Ernutet 陨石坑附近约 1000 km^2 区域内在 3.4 μm 处出现了明显的吸收特征, 认为是脂肪族物质的富集。NASA 的 Origins, Spectral Interpretation, Resource Identification, and Security—Regolith Explorer(OSIRIS-REx)探测器对小行星 101955 Bennu 进行了探测, Kaplan 等[11] 和 Ferrone 等[12] 报道了其可见红外光谱(OVIRS)在 3.4 μm 附近显示出一组复杂的吸收特征, 并与实验室的碳酸盐和陨石有机物的光谱进行了对比拟合, 认为其代表了碳酸盐和有机物的混合。Chan 等[13] 测试了 Hayabusa 返回的小行星 25143 Itokawa 样品(RA-QD02-0162 颗粒)的拉曼光谱和同位素组成, 发现存在地外来源的有机物, 主要为无序的多环芳香烃。

1.2　陨石中有机物的特征

由于碳质球粒陨石很可能来源于小行星带, 因此开展陨石有机物的研究, 对于研究生命前期有机质的形成与演化以及探索地球生命物质的起源具有重要意义。目前发现的碳质球粒陨石中普遍含有非常复杂的有机化合物, 包括脂肪烃、芳香烃、氨基酸、羧酸、磺酸、膦酸、醇类、醛类、酮类、糖相关类、胺类、酰胺、氮杂环、硫杂环及高分子物质, 其中 70% 为溶剂不可溶的类似干酪根的高分子物质($C_{100}H_{70\text{-}79}N_{3\text{-}4}O_{11\text{-}21}S_{1\text{-}5}$)[14], 其余 30% 为可溶的混合有机化合物[15]。这些有机化合物可能形成于原始太阳星云凝聚晚期低温和富含挥发分的环境。表 1 列出了 Murchison 碳质球粒陨石中的主要有机化合物及其含量[16]。

2　有机物的红外光谱特征及影响因素

根据对小行星探测光谱和陨石中有机物的特征研究可以得出, 小行星表面常见的含量较高的有机物类型有高分子、芳香烃、脂肪烃、羧酸、氨基酸、糖相关类、胺类和磺酸, 其含量和主要的官能团见表 2[16]。根据小行星距太阳的距离可以估算出主带小行星内

表 1 Murchison 碳质球粒陨石中的主要有机化合物及其含量

Table 1 Types and contents of main organic matter in Murchison carbonaceous chondrites

类型	含量 ($\times10^{-6}$)
高分子	14500
甲烷	0.14
脂肪烃	12～35
芳香烃	15～28
一元羧酸	332
二元羧酸	25.7
α-羟基羧酸	14.6
氨基酸	60
醇类	11
醛类	11
酮类	16
糖相关类	60
氨类	19
胺类	8
尿素	25
碱性氮杂环 (吡啶和喹啉)	0.05～0.5
吡啶甲酸	>7
二甲酰亚胺	>50
嘧啶类(尿嘧啶和胸腺嘧啶)	0.06
嘌呤类	1.2
苯并噻吩	0.3
磺酸	67
磷酸	1.5

表 2 小行星和陨石中常见的有机物及其含量和主要官能团

Table 2 Abundance and main functional groups of the common organics in asteroids and meteorites

类型	含量 ($\times10^{-6}$)	主要官能团
高分子	14500	—
芳香烃	15～28	=C-H
脂肪烃	12～35	C-H、C=C
一元羧酸	332	C=O、C-O
氨基酸	60	N-H
糖相关类	60	C-O、O-H、OC=O
二甲酰亚胺	>50	C-O、O-H、C=O
磺酸	67	S=O

小行星的表面最高温度一般为–60～30°C。小行星表面有机物存在于低温高真空环境中，这将对有机物的光谱探测造成一定影响。

2.1 有机物红外光谱模拟实验分析

在有机物红外光谱的实验模拟方面，本研究选取代表性的 3 种有机物即甘氨酸($C_2H_5NO_2$)、正二十烷($C_{20}H_{42}$)和葡萄糖($C_6H_{12}O_6$)，在低真空条件下从–60～30°C 间隔 10°C 分别进行其红外光谱测量，探讨了真空环境下温度对有机物红外光谱的影响。变温红外光谱测量采用的是岛津显微红外光谱仪 AIM-8800 结合低真空冷热台，真空度约为 1 Pa，测量的波数范围为 1000～4500 cm^{-1}，分辨率为 4 cm^{-1}。甘氨酸($C_2H_5NO_2$)、正二十烷($C_{20}H_{42}$)和葡萄糖($C_6H_{12}O_6$)三种有机物均为分析纯化合物，在红外光谱测量中，将这三种有机物分别与 110°C 下烘 24 h后的溴化钾进行研磨压片后进行透射光谱测量。

图 3 所示为甘氨酸($C_2H_5NO_2$)在–60～30°C 区间(间隔10°C)的红外光谱，甘氨酸在1000～4500 cm^{-1}范围内红外吸收频率共有 15 个，分布于 3 个频区：2600～3200 cm^{-1} 频区内有 6 个吸收频率，其中约 3105 cm^{-1} 为 N-H 振动频率，其余 5 个为 C-H 的伸缩振动频率；2100～2300 cm^{-1} 频区内有 2 个吸收频率，代表了 C=O 双键的振动频率；1000～1700 cm^{-1} 频区内有 7 个吸收频率，其中约 1600 cm^{-1} 为 N-H 弯曲振动频率，约 1498 cm^{-1}、1438 cm^{-1} 和 1395 cm^{-1} 均为 C-H 的弯曲振动频率，约 1330 cm^{-1} 为 C-N 的振动频率，约 1128 cm^{-1} 和 1043 cm^{-1} 为 C-OH 的振动频率。通过对比不同温度下甘氨酸的红外吸收频率，可以得出温度对甘氨酸的红外吸收频率影响很小，仅在 3105 cm^{-1} 和 2893 cm^{-1} 这两个吸收峰位，随着温度的降低，吸收频率有轻微红移，而在 2230 cm^{-1}

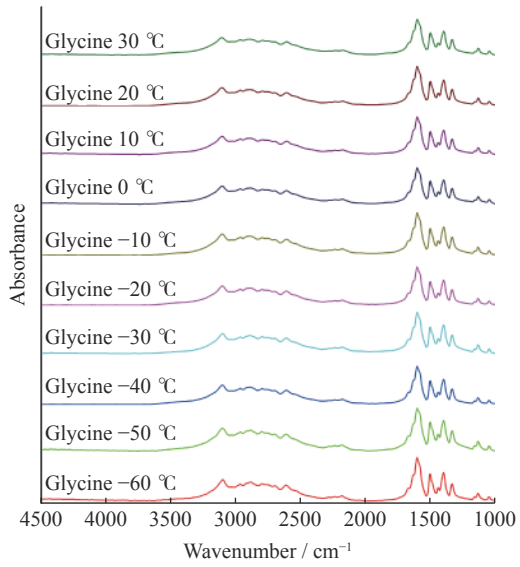


图 3 甘氨酸在–60～30℃ 的红外光谱

Fig. 3 Infrared spectra of glycine at –60～30°C

和 2172 cm^{-1} 这两个吸收峰位, 随着温度的降低, 吸收频率有轻微蓝移, 这表明温度的变化对于单键和双键的红外吸收频率影响存在一定差异。

图 4 所示为葡萄糖($C_6H_{12}O_6$)在–60～30°C 区间(间隔 10°C)条件下的红外光谱, 葡萄糖在 1000～4500 cm^{-1} 范围内红外吸收频率共有 16 个, 分布于 3 个频区: 2800～3500 cm^{-1} 频区内有 7 个吸收频率, 其中约 3445 cm^{-1}、3390 cm^{-1}、3320 cm^{-1} 和 3274 cm^{-1} 为 O-H 伸缩振动频率, 其余 3 个为 C-H 的伸缩振动频率; 1600～1700 cm^{-1} 频区内有 1 个吸收频率(约 1637 cm^{-1}), 代表了 C=O 双键的振动频率, 表明该葡萄糖为直链结构; 1000～1600 cm^{-1} 频区内有 8 个吸收频率, 其中约 1431 cm^{-1}、1377 cm^{-1} 和 1333 cm^{-1} 为 C-H 的弯曲振动频率, 其余 4 个均为 C-OH 的弯曲振动频率。通过对比不同温度下葡萄糖的红外吸收频率可以得出, 温度对葡萄糖的红外吸收频率影响很小, 仅对 O-H 伸缩振动的 4 个吸收峰位具有一定影响, 随着温度的降低, 吸收频率略有红移, 温度对 O-H 中氢键的影响相比其他键的影响更大。

图 5 所示为正二十烷($C_{20}H_{42}$)在–60～30°C 区间(间隔 10°C)条件下的红外光谱, 正二十烷在 1000～4500 cm^{-1} 范围内红外吸收频率共有 4 个, 分布于两个频区: 2800～3000 cm^{-1} 频区内有 3 个吸收频率, 均为 C-H 的伸缩振动频率; 1000～1600 cm^{-1} 频区内有 1 个吸收频率(约 1472 cm^{-1}), 为 C-H 的弯曲振动频率。通过对比不同温度下正二十烷的红外吸收频率, 可以发现温度几乎没有影响正二十烷的红外吸收频率。

对 Murchison 陨石进行红外光谱测量, 分析其可能存在的有机物类型。Murchison 陨石于 1989 年被发现降落在澳大利亚 Murchison 地区, 已成为国际上被研究最深入的陨石。Murchison 陨石属于碳质球粒陨石中的 CM_2 型陨石, 含有大量有机物, 已发现有几十种氨基酸的存在。随着研究的深入, Murchison 陨石越来越揭示出早期太阳系物质的复杂性与多样性[17-19]。为了减少地球环境的污染, 对该 Murchison 陨石进行了切割, 取其内部新鲜表面, 并利用氩离子对该表面 0.5 cm×0.5 cm 面积进行抛光处理, 随后利用显微红外光谱仪对该范围进行反射光谱测量, 共测量了 18 个点的位置。根据对该陨石 18 个位置的红外吸收光谱分析, 可初步推断出 4 种不同的有机物质: (1)特征吸收峰位约在 3000 cm^{-1}、2141 cm^{-1} 和 1907 cm^{-1} 位置的有机物, 该有机物含有多个 C=C 双键, 为含有苯环的芳香烃有机物(见图 6a); (2)特征吸收峰位约在 2850 cm^{-1} 和 1660 cm^{-1} 位置的有机物, 表明该有机物含有醛基 H-C=O, 可能为醛类物质(见图 6b); (3)特征吸收峰位约在 3400 cm^{-1}、2930 cm^{-1}、2850 cm^{-1}、1630 cm^{-1} 和 1440 cm^{-1} 位置的有机物, 表明该有机物含有 N-H、C-H、C=O 和 C-N 多个官能团, 为氨基酸(见图 6c); (4)特征吸收峰约为 3296 cm^{-1}、2928 cm^{-1}、1785 cm^{-1}、1666 cm^{-1} 和 1607 cm^{-1} 位置

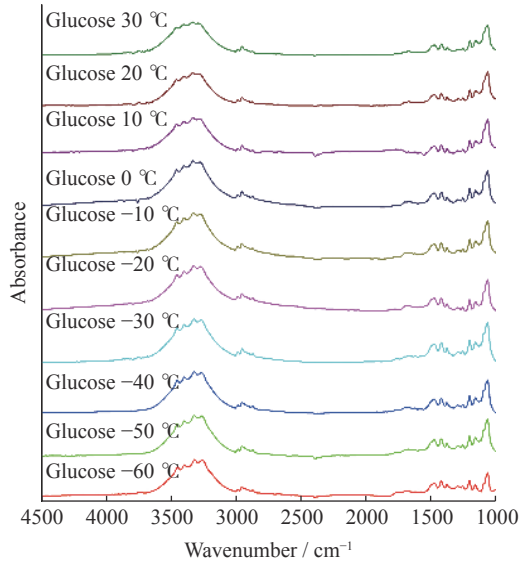


图 4　葡萄糖在–60～30°C 的红外光谱

Fig. 4　Infrared spectra of glucose at –60～30°C

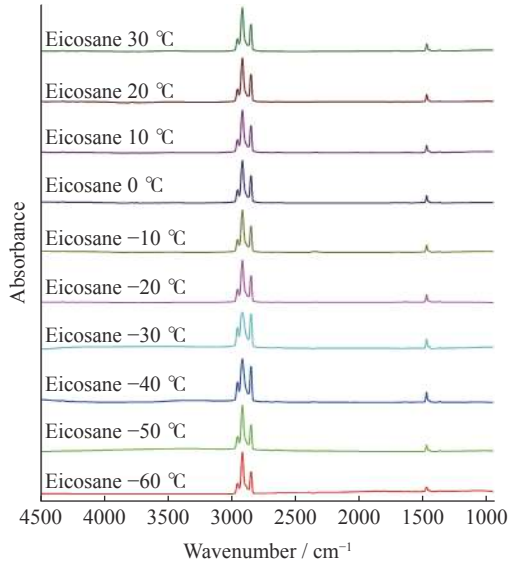


图 5　正二十烷在–60～30°C 的红外光谱

Fig. 5　Infrared spectra of eicosane at –60～30°C

的有机物，表明该物质含有 C-H、C=C 和 C=O 多个官能团，可能为不饱和酸类（见图 6d）。此外，所有红外光谱图在 1140～1190 cm^{-1} 均出现非常强且尖锐的吸收峰，该峰不属于有机物官能团的振动吸收，而属于硅酸盐矿物中 Si-O 的振动吸收，表明 Murchison 陨石中的有机物与硅酸盐物质共生。

综合上述，通过有机物和 Murchison 陨石的红外光谱模拟实验分析，可以得出以下结论。

甘氨酸（$C_2H_5NO_2$）、正二十烷（$C_{20}H_{42}$）和葡萄糖（$C_6H_{12}O_6$）三种有机物的红外分析结果表明，有机物主要官能团的强特征峰主要集中在 3 个频区，即 3000～3800 cm^{-1} 频区内的 X-H 伸缩振动、1500～1900 cm^{-1} 频区内的双键振动和 H-N 振动以及 400～1500 cm^{-1} 频区内的变角、摇摆和弯曲振动。在对有机物的类型和结构进行鉴定时应结合不同频区内的红外光谱特征峰进行综合分析判断。

Murchison 陨石含有 4 种不同的有机物，分别为含有苯环的芳香烃有机物、醛类物质、氨基酸物质和不饱和羧酸，并且这些有机物均与硅酸盐物质共生。

2.2 有机物红外光谱影响因素分析

小行星表面的有机物类型多样，不同类型的有机物都具有独特的红外吸收特征，其红外吸收光谱特征与有机物的类型、结构、温度和压力等有关。

（1）有机物类型。小行星表面可能含有非常复杂的有机化合物，包括脂肪烃、芳香烃、氨基酸、羧酸、磺酸、膦酸、醇类、醛类、酮类、糖相关类、胺类、酰胺、氮杂环、硫杂环及高分子物质等多种类型，不同类型的有机物含有不同的官能团，其红外光谱特征存在明显的差异，并且同一官能团不同类型的有机物，其红外光谱特征也存在一定差异，因此有机物的类型对其红外光谱特征具有重要影响，这是鉴别有机物类型的基础。

（2）结构。对于有机物而言，其结构的影响非常大，同一类型的有机物具有多种不同的结构。同分异构体指具有同样的化学键而不同原子排列的化合物现象。由于官能团所在位置发生了变化，其振动引起的红外吸收也会出现差异，因此有机物的结构对其红外光谱特征具有重要影响，这是鉴别有机物结构的基础。

（3）温度。温度对有机物红外吸收特征具有重要影响，特别是随着温度的变化，使得某些有机物发生了物相的改变，例如温度升高使得有机物从固态变为液态，或者从液态变为气态，而随着温度降低，有机物可能又从气态变为液态或从液态变为固态。随着物相的改变，有机物的红外吸收特征会发生明显变化。但是如果温度的变化不能引起物相改变，其有机物的

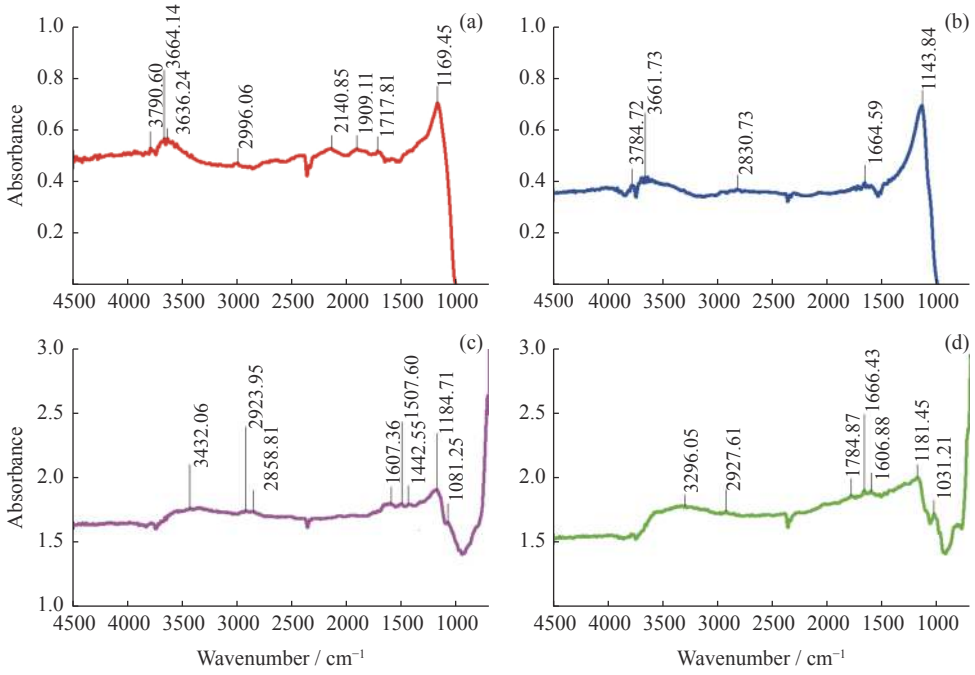


图 6 Murchison 陨石的红外光谱

Fig. 6 Infrared spectra of Murchison

红外吸收特征变化不大。

(4) 压力。压力会在一定程度上影响有机物的红外吸收特征。在小行星表面, 有机物都处于高真空环境中。该环境下的有机物可能会出现物相的变化, 造成红外吸收特征的改变。但是如果压力不能引起物相的改变, 其有机物的红外吸收特征变化不大。

综上所述, 有机物的红外光谱特征受到多种因素的影响, 主要包括有机物的类型、结构、温度和压力, 因此在对小行星表面有机物进行红外光谱特征分析时充分考虑这些因素的影响, 才能获得准确结果。

3　小行星有机物的红外光谱探测仪指标

3.1　红外光谱探测仪

目前月球与深空探测中的红外光谱仪发展迅速, 广泛应用于月球、火星、金星、类木行星、小行星和彗星等探测中, 主要用于对天体表面矿物、水、大气成分等进行鉴定。表 3 列出了目前国内外主要红外光谱探测仪的波段范围和光谱分辨率。

3.2　小行星有机物的红外光谱识别标志

为方便解析谱图和推导结构, 通常将红外光谱图按波数范围分为 4 大峰区, 每个峰区都对应于某些特征的振动吸收。第一峰区(2500～3700 cm^{-1})为 X-H 的伸缩振动; 第二峰区(1900～2500 cm^{-1})为叁键和累积双键的伸缩振动; 第三峰区(1500～1900 cm^{-1})为双键的伸缩振动以及 O-H 和 N-H 的弯曲振动; 除氢外的单键(Y-X)伸缩振动及各类弯曲振动位于第四峰区(500～1500 cm^{-1}), 不同结构的同一类化合物, 其红外光谱的差异主要在此峰区, 故又称指纹区, 但是其吸收强度一般比较弱, 仅对于特定分子是特征性的, 因此指纹频率可用于整个分子的表征。在中红外区,

表 3　国内外主要红外光谱仪的参数特征

Table 3　Parameter of several infrared spectrometers on spacecrafts

序号	光谱仪名称	探测器	探测对象	波段范围/μm	光谱分辨率/nm
1	Near-infrared 1 and 2 (NIR1/2)[20]	Lunar Crater Observation and Sensing Satellite	月球	1.35～2.25	35
2	Moon Mineralogy Mapper (M3)[21]	Chandrayaan-1	月球	0.42～3.0	10～40
3	Hyperspectral Imager (HySI)[22]	Chandrayaan-1	月球	0.4～0.92	15
4	Infrared Spectrometer (SIR1/2)[23]	SMART-1/Chandrayaan-1	月球	0.93～2.4	60
5	Observatoire pour la Minéralogie, l'Eau, les Glaces et l'Activité (OMEGA)[24]	Mars Express	火星	0.5～1.0 1.0～5.2	7 13～20
6	Spectroscopy for the Investigation of the Characteristics of the Atmosphere of Mars (SPICAM)[25]	Mars Express	火星	0.11～0.31 0.7～1.7	0.8 0.5～1
7	Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars (CRISM)[26]	Mars Reconnaissance Orbiter	火星	0.37～3.92	6.55
8	Spectroscopy for the Investigation of the Characteristics of the Atmosphere of Venus (SPICAV)[27]	Venus Express	金星	0.11～0.31 0.7～1.7 2.3～4.2	0.8 0.5～1 0.18～0.62
9	Visible and InfraRed Thermal Imaging Spectrometer (VIRTIS)[28]	Venus Express	金星	0.25～1.0 1.0～5.0	2 10
10	Visual and Infrared Mapping Spectrometer (VIMS)[29]	Cassini	土星及土星环	0.35～1.05 0.85～5.1	7 16
11	Visible and Near-Infrared Imaging Spectrometer (VNIS)[30]	嫦娥三号	月球	0.45～0.95 0.9～2.4	2～7 3～12
12	Near-Infrared Spectrometer (NIRS3)[31]	Hayabusa 2	小行星 162173 Ryugu	1.8～3.2	18
13	OVIRS[32]	OSIRIS-REx	小行星 101955 Bennu	0.4～0.9 0.9～1.9 1.9～4.3	<7.5 <13 <22
14	Visible and Near-Infrared Imaging Spectrometer (VNIS)[33]	嫦娥四号	月球	0.45～0.95 0.9～2.4	2.4～6.5 3.6～9.6

不同分子中相同基团的某种振动模式，如果振动频率基本相同，总是出现在某一范围较窄的频率区间，有相当强的红外吸收强度，且与其他振动频率分得开，这种振动频率称为基团频率[34]。基团频率受分子中其余部分影响较小，具有特征性，可用于鉴定该基团的存在，故用于结构分析。大多数基团频率出现在1330～4000 cm^{-1} 区间。由于每类有机物都含有其特定的官能团，这些官能团具有特有的红外吸收峰。在了解掌握这些特征吸收峰的基础上，可以根据红外光谱图，确认这些官能团的存在，从而判断有机物类型。按照不同元素的组合特征，有机物的官能团振动类型主要包括碳氢振动、碳碳振动、碳氧振动、氢氧振动、氮氢振动、氮氧振动、硫的有关振动、磷的有关振动、卤素的有关振动和硅的有关振动。

高分子、芳香烃、脂肪烃、羧酸、氨基酸、糖相关类、胺类和磺酸是目前小行星表面含量较多的有机物。在小行星表面有机物红外光谱探测的实验方案设计中，选取 4 种有机物类型，即芳香烃、烷烃(脂肪烃)、羧酸和氨基酸，进行红外光谱探测的方案设计，这是由于这 4 种有机物在小行星表面可能分布广泛，含量高，易于探测。

芳香烃包括 CH 和 C=C 两种官能团，其特征吸收主要包括芳环上的 C-H 伸缩振动和面外弯曲振动以及苯环上的 C=C 伸缩振动，相关振动频率出现范围为 3000～3100 cm^{-1}、1450～1600 cm^{-1} 和 680～860 cm^{-1}。

烷烃包括 CH_3、CH_2 和 CH 三种碳氢官能团，其特征吸收主要包括 CH_3 的伸缩振动和变角振动以及 CH_2 的伸缩振动，相关振动频率的出现范围为 2850～3000 cm^{-1} 和 1375～1465 cm^{-1}，前者吸收强度大于后者。

羧酸包括 OH、CO 和 C=O 三种官能团，其吸收特征主要包括 O-H 伸缩振动和弯曲振动、C-O 伸缩振动和 C=O 伸缩振动，相关的吸收频率的出现范围为 2500～3300 cm^{-1}、1680～1800 cm^{-1}、910～960 cm^{-1}。

氨基酸包括 NH、CH 和 CO-O 三种官能团，其吸收特征主要包括 N-H 的伸缩振动和弯曲振动、C-H 的伸缩振动和 CO-O 的伸缩振动，相关的吸收频率出现范围为 2000～3100 cm^{-1}、1590～1650 cm^{-1}、1480～1550 cm^{-1}。

这 4 种有机物类型的主要官能团和较强特征振动频率列于表 4 [34]，可以看出这 4 种有机物含有不同的特征官能团，其振动频率位置不同，可以很好地进行区分和识别，相应的特征红外识别标志如图 7 所示。

3.3 小行星有机物红外光谱探测仪器指标分析

(1) 光谱范围。通过调研可知，目前尚没有专门进行有机物探测的红外光谱仪，其光谱范围主要集中在短波红外范围内。根据本研究的实验分析结果，总结出芳香烃、烷烃、羧酸和氨基酸的特征红外识别标志，主要包含了 680～3300 cm^{-1} 范围内 3 个主要的频区，为能够更好地识别有机物类型，红外光谱仪光谱范围可设置为 650～3400 cm^{-1}，即 2.9～15.4 μm。

(2) 光谱分辨率。根据调研，目前红外光谱仪的光谱分辨率范围较大，最高达到 1 nm 左右，最低 60 nm。根据本课题的实验分析结果，不同范围的振动频率之

表 4 4 种有机物的主要官能团和较强的特征振动频率

Table 4 Main functional groups and strong vibration frequencies of the four organic matter

类型	主要官能团	特征振动频率/cm^{-1}
芳香烃	C=C、CH	3100～3000
		1600～1450
		860～680
烷烃	CH_3、CH_2	3000～2850
		1465～1375
羧酸	OH、CO、C=O	3300～2500
		1800～1680
		960～910
氨基酸	NH、CH、CO-O	3100～2000
		1650～1590
		1550～1480

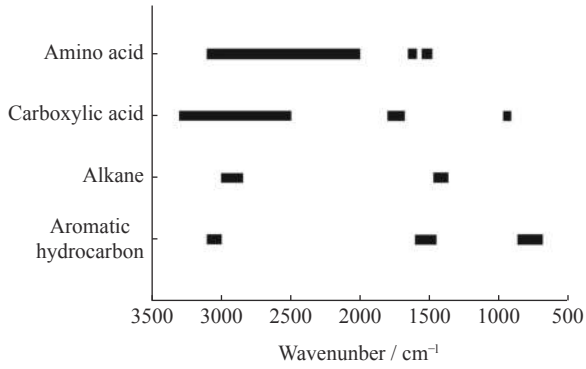


图 7 芳香烃、烷烃、羧酸和氨基酸的特征红外识别标志

Fig. 7 Infrared identification marks of aromatic hydrocarbons, alkanes, carboxylic acids, and amino acids

间最小差值为 15 cm^{-1}, 因此为了更好地区分有机物中不同官能团的振动频率, 进而更好地识别有机物的类型, 红外光谱仪的光谱分辨率可设置为优于 10 nm。

(3) 谱段数。由光谱范围和光谱分辨率可计算红外光谱仪的谱段数, 即谱段数等于谱段范围除以光谱分辨率, (15400–2900)/10=1250, 因此红外光谱仪的波段数为 1250。

(4) 光谱仪类型。光谱仪的选择与应用目标的光谱特性密切相关, 根据小行星表面有机物光谱探测的技术需求, 即需识别不同的有机官能团, 区分不同类型的有机物, 拟选择高光谱(Hyperspectral)型光谱仪。

(5) 分光类型。时空联合调制干涉成像光谱仪又称大孔径静态干涉成像光谱仪(LASIS), 基于 LASIS 原理的高光谱成像仪与普通相机的显著不同是在光路中放置一个横向剪切干涉仪。仪器全系统主要由前置光学系统、横向剪切干涉仪、成像镜及探测器组成, 其中前置光学系统的主要作用是压缩光束孔径, 缩小干涉仪的体积。该方案有极高的能量利用率, 充分保证该系统可以实现高的分辨率和信噪比, 并且系统中没有运动部件, 不需要进行运动补偿, 不会出现视场不连续。

(6) 系统定标。定标是遥感信息定量化的前提, 根据使用阶段的不同, 定标过程可分为发射前定标和在轨定标。发射前定标主要是实验室定标, 实验室定标通过积分球、辐射度计等搭建试验装置进行相对辐射、绝对辐射标和光谱定标, 验证光谱成像仪各项指标是否达到设计要求, 并为在轨定标提供参考数据。在轨定标主要采用星上定标的方式进行, 考虑到在轨空间环境变化和光学系统、探测器在轨性能的退化, 发射后定标十分重要, 其直接影响到仪器数据的真实性和遥感数据的辐射准确性。参考中国嫦娥三号和嫦娥四号搭载的可见–近红外光谱仪的定标不确定度[30,33], 红外光谱仪的定标不确定度可优于 4%。

表 5　小行星有机物红外光谱探测仪器初步设计结果
Table 5　Preliminary design of infrared spectrometer for exploring organic matter in asteroids

指标类型	初步设计结果
光谱范围	2.9～15.4 μm (650～3400 cm^{-1})
光谱分辨率	优于10 nm (12 cm^{-1})
谱段数	1250
光谱仪类型	高光谱
分光类型	时空联合调制干涉成像
定标不确定度	优于4%

综上所述, 小行星有机物红外光谱探测仪器的主要指标参数列于表 5。

4　结论

小行星有机物作为深空探测的重要研究内容, 对于研究生命起源和演化具有重要意义。本文在综合分析小行星表面有机物类型的基础上, 结合红外光谱开展地面模拟实验, 探讨了有机物的红外光谱特征及其影响因素, 确定了小行星表面几种主要有机物的红外光谱识别标志, 初步提出小行星有机物红外光谱探测仪器的主要指标参数, 这为未来中国小行星表面有机物探测及就位分析提供了重要的指导和参考。

参考文献

[1] MCFADDEN L A, WEISSMAN P R, JOHNSON T V. Encyclopedia of the Solar System[M]. 2 nd ed. Amsterdam: Academic Press, 2007

[2] XIAO Long. Planetarygeology[M]. Beijing: Geological Publishing House, 2013 (肖龙. 行星地质学[M]. 北京: 地质出版社, 2013)

[3] YANG Jing, LIN Yangting, OUYANG Ziyuan. Extraterrestrial organic compounds[J]. *Earth Science Frontiers*, 2014, **21**(6): 165-187 (杨晶, 林杨挺, 欧阳自远. 地外有机化合物[J]. 地学前缘, 2014, **21**(6): 165-187)

[4] FU Xiaohui, OUYANG Ziyuan, ZOU Yongliao. A review of the search for life in our Solar System[J]. *Earth Science Frontiers*, 2014, **21**(1): 161-176 (付晓辉, 欧阳自远, 邹永廖. 太阳系生命信息探测[J]. 地学前缘, 2014, **21**(1): 161-176)

[5] CRUIKSHANK D P, BROWN R H. Organic matter on asteroid 130 Elektra[J]. *Science*, 1987, **238**(4824): 183-184

[6] RIVKIN A S, EMERY J P. Detection of ice and organics on an asteroidal surface[J]. *Nature*, 2010, **464**(7293): 1322-1323

[7] CAMPINS H, HARGROVE K, PINILLA-ALONSO N, *et al*. Water ice and organics on the surface of the asteroid 24 Themis[J]. *Nature*, 2010, **464**(7293): 1320-1321

[8] LICANDRO J, CAMPINS H, KELLEY M, *et al*. (65) Cybele: detection of small silicate grains, water-ice, and organics[J]. *Astronomy and Astrophysics*, 2011, **525**: A34

[9] DE SANCTIS M C, AMMANNITO E, MCSWEEN H Y, *et al*. Localized aliphatic organic material on the surface of Ceres[J]. *Science*, 2017, **355**(6326): 719-722

[10] RAPONI A, DE SANCTIS M C, CARROZZO F G, *et al*. Organic material on Ceres: insights from visible and in-

frared space observations[J]. *Life* (*Basel*), 2020, **11**(1): 9

[11] KAPLAN H H, SIMON A A, EMERY J P, *et al*. Evidence of organics and carbonates on (101955) Bennu[C]//Proceedings of the 51 st Lunar and Planetary Science Conference. Woodlands: Lunar and Planetary Institute, 2020: 1050

[12] FERRONE S, CLARK B, KAPLAN H, *et al*. Visible-near-infrared observations of organics and carbonates on (101955) Bennu: Classification method and search for surface context[J]. *ICARUS*, 2021, **368**(1): 114579

[13] CHAN Q H S, STEPHANT A, FRANCHI I A, *et al*. Organic matter and water from asteroid Itokawa[J]. *Scientific Reports*, 2021, **11**(1): 5125

[14] ALEXANDER C M O'D, FOGEL M, YABUTA H, *et al*. The origin and evolution of chondrites recorded in the elemental and isotopic compositions of their macromolecular organic matter[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2007, **71**(17): 4380-4403

[15] MARTINS Z. Organic chemistry of carbonaceous meteorites[J]. *Elements*, 2011, **7**(1): 35-40

[16] SEPHTON M A. Organic compounds in carbonaceous meteorites[J]. *Natural Product Reports*, 2002, **19**(3): 292-311

[17] LAWLESS J G. Amino acids in the Murchison meteorite[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 1973, **37**(9): 2207-2212

[18] PIZZARELLO S, HUANG Y S, FULLER M. The carbon isotopic distribution of Murchison amino acids[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2004, **68**(23): 4963-4969

[19] PIZZARELLO S, WANG Y, CHABAN G M. A comparative study of the hydroxy acids from the Murchison, GRA 95229 and LAP 02342 meteorites[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2010, **74**(21): 6206-6217

[20] COLAPRETE A, SCHULTZ P, HELDMANN J, *et al*. Detection of water in the LCROSS ejecta plume[J]. *Science*, 2010, **330**(6003): 463-468

[21] GREEN R O, PIETERS C, MOUROULIS P, *et al*. The Moon Mineralogy Mapper (M^3) imaging spectrometer for lunar science: instrument description, calibration, on-orbit measurements, science data calibration and on-orbit validation[J]. *Journal of Geophysical Research:Planets*, 2011, **116**(E10): E00G19

[22] KUMAR A S K, CHOWDHURY A R. Hyper-Spectral Imager in visible and near-infrared band for lunar compositional mapping[J]. *Journal of Earth System Science*, 2005, **114**(6): 721-724

[23] BASILEVSKY A T, KELLER H U, NATHUES A, *et al*. Scientific objectives and selection of targets for the SMART-1 Infrared Spectrometer (SIR)[J]. *Planetary and Space Science*, 2004, **52**(14): 1261-1285

[24] BIBRING J P, SOUFFLOT A, BERTHÉ M, *et al*. OMEGA: observatoire pour la minéralogie, l'Eau, les glaces et l'Activité[M]//WILSON A. Mars Express: the Scientific Payload. Noordwijk: ESA Publications Division, 2004: 37-49

[25] BERTAUX J L, KORABLEV O, PERRIER S, *et al*. SPICAM on Mars Express: observing modes and overview of UV spectrometer data and scientific results[J]. *Journal of Geophysical Research:Planets*, 2006, **111**(E10): E10S90

[26] MURCHIE S, ARVIDSON R, BEDINI P, *et al*. Compact reconnaissance imaging spectrometer for mars (CRISM) on mars reconnaissance orbiter (MRO)[J]. *Journal of Geophysical Research:Planets*, 2007, **112**(E5): E05S03

[27] BERTAUX J L, NEVEJANS D, KORABLEV O, *et al*. SPICAV on Venus Express: three spectrometers to study the global structure and composition of the Venus atmosphere[J]. *Planetary and Space Science*, 2007, **55**(12): 1673-1700

[28] ARNOLD G E, KAPPEL D, HAUS R, *et al*. VIRTIS on Venus Express: retrieval of real surface emissivity on global scales[C]//Proceedings of SPIE 9608, Infrared Remote Sensing and Instrumentation XXIII. San Diego: SPIE, 2015

[29] BROWN R H, BAINES K H, BELLUCCI G, *et al*. The *Cassini* visual and infrared mapping spectrometer (VIMS) investigation[M]//RUSSELL C T. The Cassini-Huygens Mission. Dordrecht: Springer, 2004: 111-168

[30] HE Z P, WANG B Y, LÜ G, *et al*. Operating principles and detection characteristics of the Visible and Near-Infrared Imaging Spectrometer in the Chang 'E-3[J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 2014, **14**(12): 1567-1577

[31] IWATA T, KITAZATO K, ABE M, *et al*. NIRS3: the near infrared spectrometer on hayabusa2[J]. *Space Science Reviews*, 2017, **208**(1/2/3/4): 317-337

[32] SIMON-MILLER A A, REUTER D C. OSIRIS-REx OVIRS: a scalable visible to near-IR spectrometer for planetary study[C]//Proceedings of the 44th Lunar and Planetary Science Conference. Woodlands: Lunar and Planetary Institute, 2013: 1100

[33] LI C L, XU R, LV G, *et al*. Detection and calibration characteristics of the visible and near-infrared imaging spectrometer in the Chang'e-4[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2019, **90**(10): 103106

[34] WENG Shifu. Fourier Transform Infrared Spectroscopy[M]. 2nd ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2010 (翁诗甫. 傅里叶变换红外光谱分析[M]. 2版. 北京: 化学工业出版社, 2010)

(责任编辑: 宋雅娜)