

YANG Yazhou, MILLIKEN Ralph E, BRAMBLE Michael S, PATTERSON William R, ZOU Yongliao, LIU Yang. Laboratory Thermal Emission Spectral Measurement and Calibration Methods for Planetary Science Research (in Chinese). *Chinese Journal of Space Science*, 2024, 44(2): 270–286. DOI:10.11728/cjss2024.01.2023-0116

行星科学研究中热发射光谱的实验 测量与定标方法*

杨亚洲¹ MILLIKEN Ralph E² BRAMBLE Michael S²
PATTERSON William R² 邹永廖¹ 刘洋¹

1(中国科学院国家空间科学中心 空间天气学国家重点实验室 北京 100190)

2(布朗大学地球环境与行星科学学院 普罗维登斯 02912)

摘要 准确的物质组成信息是解译行星体形成与演化历史的关键, 可见-近红外遥感光谱探测一直是获取行星表面成分的主要技术手段. 在热红外谱段光谱特征更为丰富, 因此随着探测技术的发展, 其在行星探测中得到越来越多的应用. 尤其是在目前已经实施与立项的国内外小行星探测任务中, 都将热发射光谱仪作为核心载荷之一. 为了更好地对将来获取的热发射光谱数据进行解译, 建立科学合理的数据处理与定标方案是必不可少的. 本文对用于行星科学研究的热发射光谱测量装置的设计、测量及数据处理方法进行了系统分析. 针对低温、真空条件下热发射测量过程中样品辐射信号与仪器辐射信号难以分离的问题, 提出并论证了基于傅里叶变换红外光谱仪原始测量信号-干涉图的数据处理方法. 该方法可以更为有效地分离出样品实际辐射信号, 从而获得更为准确的发射率光谱数据. 研究结果可为国内相关热发射测量装置的设计与搭建以及未来天问二号等探测数据的处理与科学解译提供参考.

关键词 行星探测, 热发射, 光谱, 实验室测量, 定标

中图分类号 O433

Laboratory Thermal Emission Spectral Measurement and Calibration Methods for Planetary Science Research

YANG Yazhou¹ MILLIKEN Ralph E² BRAMBLE Michael S²
PATTERSON William R² ZOU Yongliao¹ LIU Yang¹

1(State Key Laboratory of Space Weather, National Space Science Center, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190)

2(Department of Earth, Environmental, and Planetary Sciences, Brown University, Providence 02912)

* 中国科协青年人才托举工程 (2021QNRC001)

2023-10-22 收到原稿, 2023-11-19 收到修定稿

©The Author(s) 2024. This is an open access article under the CC-BY 4.0 License
(<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Abstract Accurate information regarding the surface composition is crucial for understanding the formation and evolution history of planetary bodies. Visible and near-infrared remote sensing spectroscopic techniques have long been used for the detection of surface composition. However, in the thermal infrared spectral range, various types of planetary surface materials exhibit richer spectral features. With the development of thermal emission spectroscopic techniques, it has been increasingly used in planetary exploration. Particularly, in the ongoing and planned asteroid exploration missions, thermal emission spectrometers are employed as key payloads. In order to better interpret the thermal emission spectral data to be obtained in the future, it is essential to establish scientifically reasonable data processing and calibration schemes. This paper provides a comprehensive overview on the design of thermal emission spectral measurement devices for planetary science research, the measurement process, and data reduction methods. To obtain accurate emissivity spectra data, the challenge of distinguishing sample radiation signals from instrument radiation during thermal emission measurements must be properly addressed first. Especially, for measurements conducted under low-temperature and vacuum conditions that are similar to the surface conditions of the Moon and asteroids. This paper proposes and demonstrates a data reduction method based on interferograms, which are the original signals measured by FTIR spectrometer. This method can effectively separate the actual radiation signal from the samples, thus yielding more accurate emissivity spectra data. The insights derived from this study can serve as valuable references for the development and construction of thermal emission measurement devices and can facilitate the processing and scientific interpretation of data from future missions such as Tianwen-2.

Key words Planetary exploration, Thermal emission, Spectroscopy, Laboratory measurements, Calibration

0 引言

准确的物质成分信息是对行星体的形成与演化历史进行解译的关键。不论是月球、火星还是小行星,样品都比较匮乏,采样返回代价高,遥感观测仍然是主要探测手段,其中遥感光谱技术是获取行星表面物质组成最为有效的探测手段^[1,2]。虽然光谱探测只能获取天体表面的成分信息,但是行星体自形成后通常会经历持续的撞击过程,不同程度的撞击会挖掘暴露出行星体内部不同深度的物质^[3-5]。另外,一些较大行星体内部的火山作用也会将不同深度的物质带到行星表面^[6,7]。因此,通过遥感光谱探测也可获取行星体内部不同深度的物质成分特征,从而对整个行星的圈层结构与演化过程进行约束。行星表面物质还是记录天体与空间环境相互作用的重要载体,太阳风、高能粒子等空间环境要素对表面物质的影响都会在其光谱中显现出来^[8]。

就产生机制而言,光谱可以分为吸收光谱、反射光谱与热发射光谱三种类型。在对石质行星表面物质的光谱探测中,以反射光谱与热发射光谱为主。反射测量获取的是观测表面反射的太阳光或其他光源的

光强信号,而热发射测量获取的是观测表面自身辐射出的光强信号,两者在强度与谱段分布上通常存在显著差异。以月表为例,图1为照射到月表的太阳光辐照度、月表反射的太阳光与自身热辐射光强的对比。其中,太阳光辐照度数据基于地球轨道实测结果得到^[9],月表反射光强采用太阳辐照度乘以月表平均反照率 0.136^[10]计算得到。太阳光强度与温度为 5700 K 左右的黑体辐射光强相当,其能量主要集中在 2.5 μm 以下的可见-近红外 (Visible and Near-Infrared, VNIR) 波段。在 5 μm 以上的中红外 (Mid-Infrared, MIR) 波段,太阳光强度基本可以忽略,经过月表散射后就更弱了,相比之下月表热辐射的能量则要强得多。假定月表白天的平均温度为 390 K^[11],月表物质的发射率为 0.97,利用普朗克黑体辐射公式可近似计算得到月表的热发射光强度。基于波长形式的黑体辐射公式如下^[12]:

$$B(\lambda, T) = \frac{2hc^2/\lambda^5}{e^{hc/\lambda kT} - 1}. \quad (1)$$

其中, B 表示温度为 T 的黑体辐射辐亮度,对应量纲为 $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{nm}^{-1}$; T 为黑体温度,量纲为 K; h 为普朗克常数, $h=6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$; k 为 Boltzmann 常数,

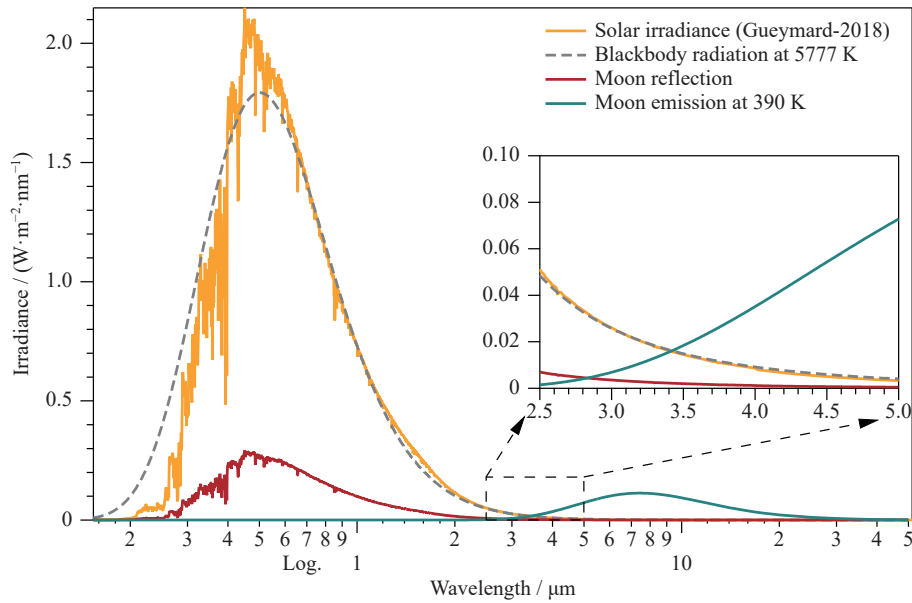


图1 可见-近红外与中红外波段月表反射太阳光与自身热发射的光强分布

Fig. 1 Light reflected and emitted from the Moon surface in the visible and near-infrared and mid-infrared wavelengths

$k=1.381 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$; c 为光速, $c=2.998 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. 在利用黑体辐射公式计算太阳照射到月表的光强时, 还需要乘以太阳在 1 AU 处的立体角 $\Omega_{\text{sun}}^{[12]}$, 有

$$\Omega_{\text{sun}} = \pi \cdot r_{\text{sun}}^2 / D^2. \quad (2)$$

式中, r_{sun} 为太阳的半径, D 为太阳距离地球的距离. 本文中两者的取值分别为

$$r_{\text{sun}} = 695700 \text{ km}, D = 149597871 \text{ km}.$$

从图1可以看到, 在 MIR 谱段测到的主要是月表自身热发射的信号, 而在 $2.5 \sim 5 \mu\text{m}$ 波段往往既有反射的太阳光信号, 也有月表热发射的贡献.

在 VNIR 波段范围内 ($0.4 \sim 2.5 \mu\text{m}$), 很多硅酸盐矿物的反射光谱都具有吸收峰, 可作为矿物类型识别的诊断性特征^[13]. 如图2(a)所示, 月表常见矿物——橄榄石、辉石、斜长石及钛铁矿在绝对反射率、吸收峰特征上具有明显的差异. VNIR 波段的吸收峰主要是由于矿物中所含过渡性金属离子外层电子跃迁时吸收相应频率的光子所产生的^[13,14]. 在晶体场的影响下, 这些金属离子外层电子轨道会分裂产生多个不同能级, 具体分裂方式与金属离子周围配位体的类型、位置及对称度等密切相关^[14]. 因此, 即使所含金属离子相同, 不同矿物的吸收特征也会有差异. 例如图2(a)中所示的橄榄石、辉石和斜长石的吸收峰均

是由于其晶体内部所含 Fe^{2+} 所致, 但是晶体场环境的不同导致三者吸收峰峰位存在明显差异. 通过对其吸收峰峰位、峰深等参数进行分析^[15-18], 同时结合相关光谱模型 (例如 Hapke 模型) 可以对目标区域的矿物类型及含量分布进行定量或半定量评估^[19-21]. VNIR 反射光谱探测在技术上相对易于实现, 因此被广泛应用于各类月球与行星探测任务中. 但是除了这些具有明显 VNIR 吸收特征的主要硅酸盐造岩矿物外, 还有很多其他类型的物质在 VNIR 谱段并没有诊断性特征. 例如月表出露的富含 SiO_2 的火山碎屑堆积单元^[22], 碳质小行星上可能出现的有机物类物质等^[23], 均难以利用 VNIR 反射光谱技术进行有效探测.

VNIR 反射光谱的局限主要在于很多重要的非过渡性金属元素 (Si, O, Al, Mg 和 Ca 等) 不能直接产生 VNIR 吸收峰, 其存在只能通过间接的推断得知^[13]. 而在 MIR 谱段 ($5 \sim 25 \mu\text{m}$), 光谱特征主要是由物质中分子振动所产生的^[25]. 基本上所有的硅酸盐、碳酸盐、硫酸盐、磷酸盐、氧化物和氢氧化物类矿物都在中红外反射光谱中具有独特的吸收特征 (在热发射光谱中表现为发射峰)^[13,26-30]. 这些特征对应的基频振动与矿物中主量元素的组成和晶体结构密切相关. 矿物结构主要由阴离子团 (SiO_4^{2-} , CO_3^{2-} , SO_4^{2-} 和 PO_4^{3-} 等) 的类型及其连接方式决定^[31]. 例如硅酸盐矿物中

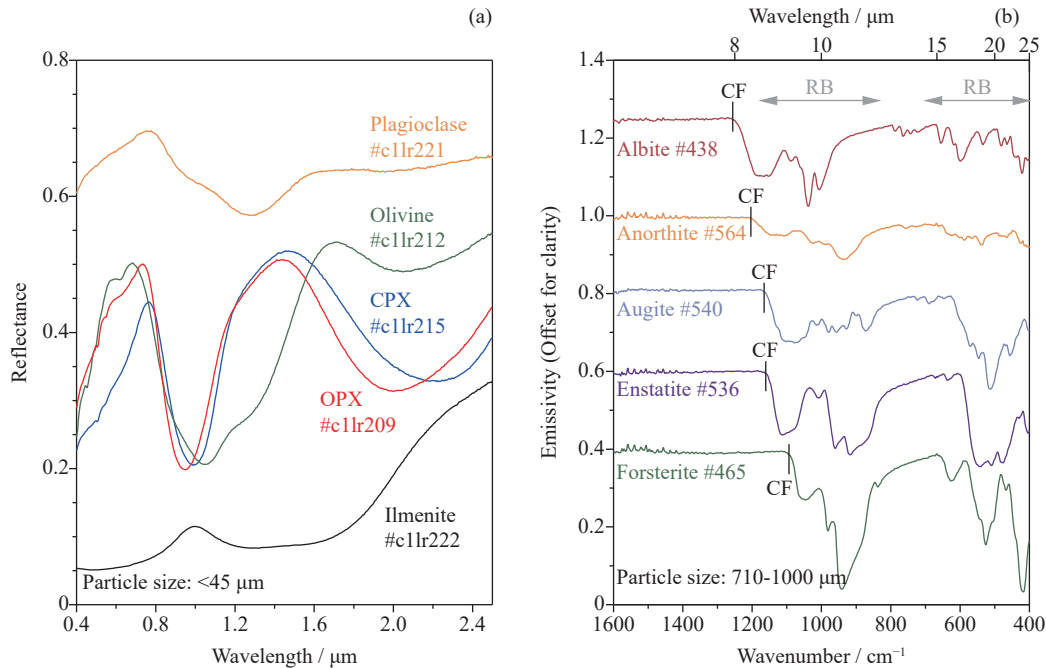


图 2 月表主要矿物的可见-近红外反射光谱与热红外发射光谱. 光谱数据分别源自 RELAB^[24] 与 ASU 光谱数据库 (<http://speclib.asu.edu/>), #后编号为对应的光谱数据 ID

Fig. 2 Visible and near-infrared reflectance and thermal infrared emission spectra of typical lunar-type minerals.

The spectral data are collected from the RELAB^[24] and ASU spectral databases (<http://speclib.asu.edu/>), respectively. The numbers after # are the corresponding spectral data ID in those two database

络阴离子团 SiO_4^{2-} 以四面体形式存在, 其作为矿物晶体的基本构造单位在不同硅酸盐中基本保持不变, 但因连接方式的不同而形成了具有岛状(如橄榄石)、链状(如辉石)、层状(如云母)或架状(如石英)结构的矿物^[31]. MIR 反射光谱吸收峰会随着成分与晶体结构的变化而发生系统性的偏移. 例如 Si-O 键的伸缩振动通常出现在 $8\sim 12\ \mu\text{m}$ 波长范围内^[32,33], 而随着晶格中化学键强度的增加, 吸收峰会偏移向频率较高(短波长)方向. 通常 Si-O 伸缩振动产生的吸收峰波长会按照链状>层状>架状的顺序连续地从 $11\ \mu\text{m}$ 减小到 $9\ \mu\text{m}$ ^[22].

MIR 光谱对于矿物晶体结构与化学组成的分析具有广泛应用价值^[34]. 在实验室内, 可以利用人造红外光源(例如 Global-碳化硅棒)对样品进行中红外反射光谱测量. 但是对于实际的行星探测, 探测器能够获取的中红外信号主要源自行星表面的热辐射(见图 1). 对于处于热平衡状态的天体表面, 其以热发射形式释放的能量与其吸收的能量一致, 因此常用基尔霍夫定律描述反射率与热发射率之间的关系, 即 $\epsilon=1-R$, 其中 ϵ 为样品的热发射率, R 为样品的反射率. 在反射光

谱中表现为吸收峰的波段, 在热发射光谱中将以发射峰的形式呈现. 图 2(b) 为主要硅酸盐造岩矿物橄榄石、辉石与斜长石的热发射光谱, 可以看到相比 VNIR 反射光谱, MIR 波段的光谱特征更为丰富.

在 MIR 谱段, CF (Christiansen Feature) 与剩余射线带 RB (Reststrahlen Bands) 是硅酸盐矿物最为显著的特征^[35]. CF 一般出现在矿物折射率实部经历快速变化并接近于 1 的波段位置, 表现为反射率极小值或发射率极大值^[19]. 硅酸盐类物质的主要 CF 峰位一般出现在 $7.5\sim 9\ \mu\text{m}$ 之间, 与最强的 Si-O 伸缩振动有关^[35]. 硅酸盐中 Si-O 的伸缩振动会在 $8.5\sim 12\ \mu\text{m}$ 之间产生一个强的 RB, 而 Si-O 的弯曲振动会在 $16.5\sim 25\ \mu\text{m}$ 之间产生一个弱的 RB (见图 2b). CF 峰位与 RB 谱段的峰位、峰形均可作为矿物成分的诊断性指标^[33,36,37].

热发射光谱探测除了可以获取行星表面物质成分等信息外, 还能帮助理解行星表面的热物理特性^[34], 可以与 VNIR 反射光谱技术互为补充. 在 20 世纪 60 年代, 已有研究使用地基望远镜对月球进行了热红外观测^[38,39]. 美国月球勘测轨道器 LRO (Lunar Re-

connaissance Orbiter) 上搭载的 Diviner 热辐射探测器与火星全球探测器 MGS(Mars Global Surveyor) 上搭载的热发射光谱仪 (TES) 的成功应用, 极大地扩展了对于月球与火星表面成分的认识^[22,40-42]. 随着热发射光谱探测技术的发展, 其在行星探测任务中得到越来越多的应用. 目前在已经实施的美国小行星探测任务 (OSIRIS-REx 与 Lucy) 以及阿联酋火星探测任务 (Hope) 中, 热发射光谱仪都被作为核心科学载荷之一^[43-45]. 中国的嫦娥七号月球探测任务与天问二号小行星探测任务已经立项, 天问二号任务将对一颗近地小行星 (2016 HO3) 与一颗主带彗星 (311 P) 开展详细绕飞探测并进行采样^[46,47]. 以上两个探测任务均将搭载热发射光谱仪载荷, 用来获取目标天体的表面物质组成、表壤层结构与辐射特性等信息.

无论是针对探测任务前期的科学目标论证, 或是研制阶段热发射光谱类载荷指标的确定, 还是为将来的遥测数据处理方法的构建与科学解译, 在地面实验室建立相应的可以模拟小行星表面低温、真空环境的热发射光谱测量装置都是很有必要的. 目前国内热发射测量装置主要是针对航空、材料领域的应用需求设计的^[48-51], 其适用的样品温度通常比较高 (1000 K 量级), 此时对应的背景辐射占比会弱很多. 而对于行星

科学研究相关的地质类样品 (如岩石、矿物、陨石、月壤等) 进行的热发射测量通常要在尽可能低的温度下进行, 以免样品因过度加热而被破坏^[52-54]. 目前国内尚缺少针对行星科学研究的热发射光谱测量系统, 本文旨在对实验室热发射光谱测量与定标方法进行系统梳理, 并以国外相关实验装置的实测数据为例, 对基于干涉图的数据处理方法进行评估, 以期与国内相关热发射测量装置的设计和搭建以及未来天问二号等探测数据的处理与科学解译提供参考.

1 热发射光谱测量装置与测量方案

早期的实验研究表明, 热发射光谱可能会受到不同真空条件的影响^[52,53,55-57]. 尤其是在像月球与小行星表面那样的低温真空条件下, 表面物质会存在热梯度, 从而影响热发射光谱测量结果. 因此, 在实验室模拟低温真空条件对行星表面相似物进行控制性热发射光谱测量, 对于真实的行星探测数据解译具有重要意义.

1.1 热发射光谱测量装置

用于行星科学研究的热发射测量装置一般由两个重要部件组成 (见图 3): 傅里叶变换红外 (FTIR) 光谱仪; 可抽真空与制冷的样品腔^[58,59]. 因为样品的热发射信号一般很弱, 所以需要尽可能隔绝外界辐射

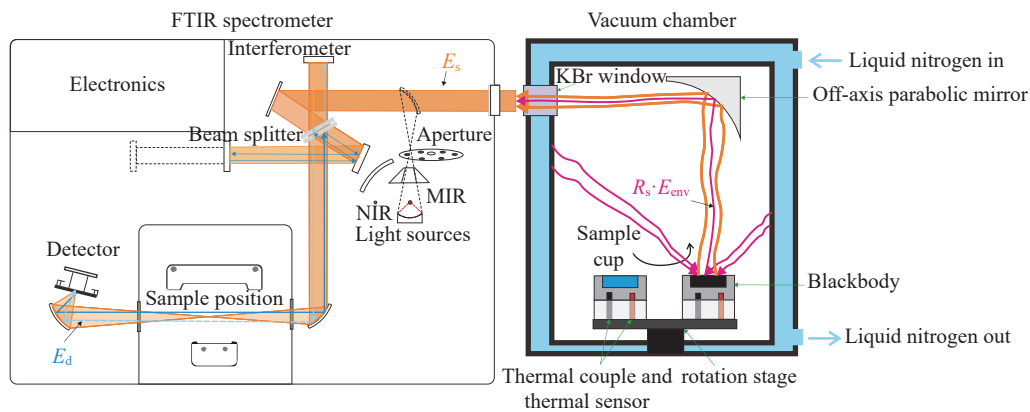


图 3 热发射测量装置的组成与辐射信号光路 (E_s 表示从样品表面辐射与反射出的能量; E_d 表示由探测器辐射出的经干涉仪调制后又反射到探测器的能量; R_s 为样品表面反射率, $R_s \cdot E_{env}$ 表示样品腔内部环境辐射能量经样品表面反射后进入探测器的能量. 左边 FTIR 光谱仪光路图是基于 Bruker VertexTM 光谱仪内部光路图绘制的)

Fig. 3 Configurations for general setup of thermal emission measurement device and the optical path of emitted light. E_s represents the energies emitted and reflected by the sample surface. E_d represents the energy emitted from the detector that is modulated by the interferometer and then reflected back to the detector. R_s is the reflectance of sample surface, and $R_s \cdot E_{env}$ represents the energy emitted by the internal environment of the chamber and reflected by the sample (The optical path diagram of the FTIR spectrometer in the left is based on the internal configuration of the Bruker VertexTM spectrometer)

的影响. 同时还需要对样品或黑体进行加热, 提高信号强度. 真空腔中的样品经过加热后会向外辐射红外光, 由镀金曲面镜反射后进入 FTIR 光谱仪, 再经过干涉仪调制后进入探测器中. 真空腔窗口通常需要用 KBr 窗片以提高红外光的通过率. 相关设计可参考牛津大学的 PASCAL^[59,60] 以及布朗大学的 ALEC 实验测量装置^[55], 相关装置的基本技术参数列于表 1.

1.2 FTIR 光谱仪测量信号组成

FTIR 光谱仪是热发射光谱测量装置的核心部件, 在利用其进行热发射与反射光谱测量时, 所获取的信号中源自样品与仪器环境辐射的贡献比例存在明显不同, 因此相应的测量及定标方式也存在差异. 在进行反射光谱测量时, 通常只需将样品的测量信号 (D_s) 与相同观测条件下定标板测量信号 (D_{ref}) 的比值, 乘以定标板的绝对反射率 (R_{ref}) 可以得到样品的反射率, 即

$$R(\lambda) = \frac{D_s(\lambda)}{D_{\text{ref}}(\lambda)} \cdot R_{\text{ref}}(\lambda). \quad (3)$$

其中, λ 为波长, D 为无量纲的测量信号 (Digital Number, DN).

发射率为物质的一种固有特征, 其定义为某个物体表面热发射的能量 (E_s) 与相同温度下黑体表面热

发射的能量 (E_{bb}) 的比值^[19], 即

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{E_s(\lambda, T)}{E_{\text{bb}}(\lambda, T)}. \quad (4)$$

式中, ε 为发射率, λ 为波长, E 为辐射能量 (辐亮度), T 为温度. 理论上只需要在相同温度下, 分别获取样品与黑体辐射能量对应的 DN 值, 就可以得到样品的热发射率, 即

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{D_s(\lambda, T)}{D_{\text{bb}}(\lambda, T)}. \quad (5)$$

式中, D_s 和 D_{bb} 为不包含仪器及环境辐射的样品与黑体的真实 DN 值. 但是在实际测量过程中, 存在两个难点: 一是 FTIR 光谱仪测量的热辐射信号中除样品辐射外, 源自光谱仪自身及样品腔内部环境的辐射贡献不可忽略; 二是低温真空条件下, 样品 (尤其是粉末样品) 与黑体的温度难以保持一致^[52].

如图 3 所示, 在进行热发射测量时, 光谱仪的测量信号 D_m 由两部分组成: 一部分为样品的辐射能量 E_s , 另一部分为源自光谱仪自身辐射的能量 E_d ^[44,58]. 对于光谱仪辐射的能量, 只有经过干涉仪调制过的部分才会对测量结果产生影响. 未经干涉仪调制的信号在测量得到的干涉图中表现为常数, 经过傅里叶变换后不会对最终的结果产生影响^[61]. Christensen 等^[44] 经过深入分析与实验验证后发现, 测量信号中光谱仪

表 1 热发射测量装置的指标参考
Table 1 Some references for thermal emission measurement device

指标类型	ALEC ^[52]	PARSEC ^[54]	PASCAL ^[59,60]
FTIR 光谱仪型号	Nicolet TM Nexus 870	Nicolet TM 6700	Bruker TM Vertex 70 V
分束器	KBr	KBr	宽谱段 T240/3
探测器类型	DTGS	DLA-TGS	宽谱段 DTGS
光谱范围	400~4000 cm ⁻¹	400~2200 cm ⁻¹	6000~50 cm ⁻¹
温度传感器与温控精度	铂电阻温度计, <1 K	(未提及)	铂电阻温度计, ±0.3 K
样品腔真空度	<10 ⁻⁴ mbar	10 ⁻⁵ mbar	<10 ⁻⁴ mbar
样品杯底部加热	电阻加热 最高可达约 620 K	电阻加热	电阻加热
顶部模拟太阳光照	卤钨灯: 功率可调 照射角度: 30°	卤钨灯: 功率可调 照射角度: 55°	卤钨灯: 功率可调 照射角度: 55°
样品腔最低温度	约 85 K	<150 K	<125 K
低温真空中测量时 样品温度设定值	底部加热+顶部加热: 350~500 K	底部加热+顶部加热: 约 350 K	底部加热+顶部加热: 亮温 350±3 K
低温真空中测量时 黑体温度设定值	低温: 约 85 K 高温: ≥500 K	低温: 330±0.5 K 高温: 370±0.5 K	低温: 340 K 高温: 360 K

注 ALEC: Asteroid and Lunar Environmental Chamber at Brown University. PARSEC: Planetary and Asteroid Regolith Spectroscopy Environmental Chamber at Stony Brook University. PASCAL: Planetary Analogue Surface Chamber for Asteroid and Lunar Environments at Oxford University.

辐射的能量主要来自探测器本身的辐射 (主要指 DTGS 类的常温型探测器), 而且 FTIR 光谱仪测量到的信号实际上是样品与探测器辐射信号的差值, 即

$$D_m(\lambda, T) = [E_s(\lambda, T) - E_d(\lambda)] \cdot F(\lambda). \quad (6)$$

式中, D_m 为仪器测量到的信号, 无量纲; E_s 与 E_d 分别为样品与探测器辐射的能量, 辐亮度; F 为仪器响应函数. 其中来自样品的能量 E_s 通常也由两部分组成, 除了样品本身的辐射能量外, 样品腔内部环境辐射的光经样品表面反射后也会进入探测器中 (见图 3), 有

$$E_s(\lambda, T) = \varepsilon_s(\lambda) \cdot B(\lambda, T_s) + R_s(\lambda) \cdot E_{\text{env}}(\lambda, T_{\text{env}}). \quad (7)$$

式中, ε 为发射率, B 为给定温度下黑体辐射的能量 (辐亮度), R 为反射率, T 为温度, E_{env} 为样品腔内部环境辐射到样品表面的能量. 式 (6)(7) 被广泛应用于热发射测量数据的处理与分析中^[44,52,58,59]. 式 (6) 对应的详细原理将在下文中结合探测器与样品辐射信号光路分析以及实际测量结果进行说明.

不论是测量反射光谱还是热发射光谱, 光谱仪的辐射能量 E_d 都存在, 但在进行反射光谱测量时, 这部分能量可以忽略. 进行反射光谱测量时需要有一个外部光源, 中红外谱段所用的光源通常为 Globar(SiC 棒), 通电后可以将其加热到 1000~1600℃, 其辐射特性与黑体非常相似^[62]. 当使用常温型的 DTGS 类探测器时, 其辐射的能量与一个处于常温下 (约 300 K) 的黑体所辐射的能量相当, 远比红外光源的辐射能量弱. 图 4 为利用普朗克黑体辐射公式计算得到的相应温度下红外光源与仪器辐射 (主要来自探测器) 的能量对比. 基于波数的黑体辐射公式表达式如下:

$$B(\nu, T) = \frac{2hc^2\nu^3}{e^{hc\nu/kT} - 1}. \quad (8)$$

式中, ν 为波数, 量纲为 cm^{-1} , 其余各常数参数取值与式 (1) 中相同.

从图 4 中可以看出, 随着波长的增大, 来自探测器与红外光源辐射的能量差异逐渐减小^[63]. 但由于探测器辐射的光首先要经过样品表面散射后才能进入干涉仪中, 经过干涉仪调制反射后需要再次经样品表面散射才有可能进入探测器中. 经过这一系列过程, 这部分能量 (E_d) 会变得更弱. 因此可以认为反射光谱测量过程中获得的信号主要来自样品或定标板反射的红外光源能量, 所以可根据式 (3) 直接用两者测量信号 (DN 值) 的比值代表样品的反射率. 而在热发

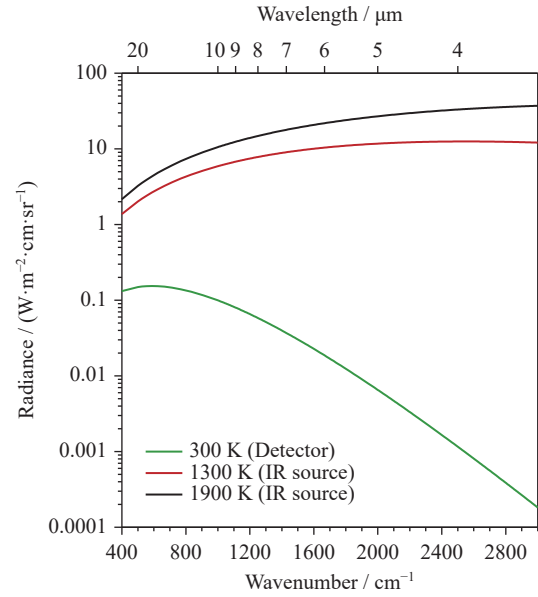


图 4 基于普朗克黑体辐射公式计算得到的探测器与红外光源辐射能量对比

Fig. 4 Comparison of radiation energy between detector and infrared light source calculated based on the Planck blackbody radiation formula

射光谱测量过程中, 没有外部光源, 样品信号源自其自身的热辐射. 在行星科学研究中, 为尽可能避免破坏样品, 一般加热时会尽量设定较低的温度 (约 350 K)^[52-54], 从而导致样品辐射信号与探测器辐射信号之间的差异较小. 因此, 探测器辐射能量不能被忽略, 并且必须将其精确扣除掉才能得到准确的样品辐射信号.

1.3 样品腔环境辐射的扣除

前文已阐明样品辐射能量 E_s 中还包含了样品腔内部环境辐射的贡献 ($R_s \cdot E_{\text{env}}$), 当前扣除此部分比较简单有效的方式是降低腔体内部温度, 抑制样品腔环境辐射. 在布朗大学的 ALEC 与牛津大学的 PASCALE 热发射测量装置中^[52,53,59,60], 样品腔体内壁与外壁之间有一层空心通道, 可以允许液氮在其中流通 (见图 3), 从而达到降低腔体内部温度的目的. 通常在正式测量时, 样品腔体内部温度与液氮温度相近 (约 85 K). 在如此低温条件下, 样品腔体内部辐射的能量可以忽略不计, 因此式 (6) 与式 (7) 可合并为

$$D_m(\lambda, T) = [\varepsilon_s(\lambda) \cdot B(\lambda, T_s) - E_d(\lambda)] \cdot F(\lambda) = D_s(\lambda, T) - D_d(\lambda). \quad (9)$$

通常认为 $E_d(\lambda)$ 是恒定的, 因为光谱仪自身一般

处于热平衡状态. 如果能够将这部分能量从测量信号 $D_m(\lambda, T)$ 中分离出来, 得到样品自身的辐射信号 $D_s(\lambda, T)$, 则可直接利用测量信号 (DN 值) 计算样品的热发射率, 即

$$\varepsilon_s(\lambda) = \frac{E_s(\lambda, T)}{E_{bb}(\lambda, T)} = \frac{D_s(\lambda, T)/F(\lambda)}{D_{bb}(\lambda, T)/F(\lambda)} = \frac{D_s(\lambda, T)}{D_{bb}(\lambda, T)}. \quad (10)$$

因此, 热发射测量数据处理的关键是将仪器辐射信号从总的测量信号中扣除.

1.4 仪器辐射信号的扣除

在实际测量中, 可以通过以下三种方法将样品信号从实际测量信号中分离出来.

方法 1 二温法 分别在两个不同温度 T_1 与 T_2 下对样品与黑体各进行两次测量, 然后将两次测量信号相减以消除不随样品温度变化的仪器辐射信号 $D_d(\lambda)$. 发射率是物质的固有特征, 与物质的温度无关, 因此有

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{D_s(\lambda, T_1)}{D_{bb}(\lambda, T_1)} = \frac{D_s(\lambda, T_2)}{D_{bb}(\lambda, T_2)} = \frac{D_s(\lambda, T_1) - D_s(\lambda, T_2)}{D_{bb}(\lambda, T_1) - D_{bb}(\lambda, T_2)}. \quad (11)$$

依据式 (9) 可以得到

$$D_s(\lambda, T_1) = D_m(\lambda, T_1) + D_d(\lambda). \quad (12)$$

$$D_s(\lambda, T_2) = D_m(\lambda, T_2) + D_d(\lambda). \quad (13)$$

对黑体进行测量时也按照公式 (12) 和 (13), 将式 (12) 减去式 (13) 可以将仪器辐射信号 D_d 消除掉, 再利用式 (11) 即可计算得到样品的发射率. 这一方法不用将测得的 DN 值转换成辐亮度进行计算, 因此不需要知道仪器的响应函数. 但是需要对样品与黑体各进行两次测量, 且要求样品与黑体的温度一致. 而在实际测量中, 很难保证二者温度是一致的. 尤其是在真空条件下, 对颗粒样品进行加热时, 热量得不到有效的传导, 很难使样品达到设定的温度值^[52,58].

方法 2 改进版二温法 相比样品, 黑体的温度更容易控制, 且理想黑体各波段的热发射率始终为 1, 因此可以先在不同温度下对黑体进行两次测量以获取仪器的响应函数. 结合式 (9) 有

$$F(\lambda) = \frac{D_{bb}(\lambda, T_2) - D_{bb}(\lambda, T_1)}{B(\lambda, T_2) - B(\lambda, T_1)}. \quad (14)$$

其中, $F(\lambda)$ 为仪器响应函数; $B(T_1)$, $B(T_2)$ 分别表示温度为 T_1 与 T_2 时黑体的辐射能量, 可以利用式

(8) 计算得到. 当得到仪器响应函数后, 可以通过对黑体的测量来确定 $E_d(\lambda)$, 即

$$E_d(\lambda) = B(\lambda, T) - \frac{D_m(\lambda, T)}{F(\lambda)}. \quad (15)$$

其中, $D_m(\lambda, T)$ 代表黑体温度为 T 时的实际测量信号, $B(\lambda, T)$ 为利用黑体辐射公式计算得到的温度为 T 时黑体的辐亮度, F 为利用式 (14) 得到的仪器响应函数.

方法 3 低温黑体法 将整个样品腔包括黑体用液氮进行冷却, 这时黑体本身辐射的能量基本可以忽略, 这样探测器测到的信号主要为探测器自身的辐射信号, 即 D_d .

由于二温法中样品的温度不易控制, 在实际应用中方法 2 与方法 3 更好一些. 但不论哪种方法, 要获得准确的样品热发射率都需要具备以下条件: 一是好的黑体, 测量时采用的人工黑体发射率要尽可能接近 1, 并且没有吸收特征; 二是准确的温度数据, 即使很小的温度偏差也会对最终的热发射率结果产生较大影响. 对黑体进行测量时, 0.1 K 的温度偏差足以产生可观测到的影响^[58]. 下面将利用黑体辐射公式 (8) 对温度的影响进行初步评估, 方法如下.

(1) 将一个黑体视为样品, 用普朗克公式计算得到温度为 T 时黑体的辐亮度曲线;

(2) 将另一个黑体视为参考, 同样用普朗克函数计算其在温度为 $T+dT$ 时的辐亮度曲线, dT 即为温度差异;

(3) 二者辐亮度的比值即为样品黑体的发射率, 如果 $dT=0$, 则得到的发射率应在所有波段都为 1.

设定两个不同的样品温度 ($T=300$ K, 500 K), 以及两个不同的温度偏差 ($dT=1$ K, 2 K), 计算得到的黑体发射率曲线如图 5 所示. 从图 5 中可以看出, $dT=1$ K 时, 得到的发射率已发生明显的偏差, 而且样品温度越低, 同等温度偏差造成的影响越大, 尤其是在波长较短谱段. 因此尽量确保黑体与样品温度的准确性, 对于最终热发射率的反演至关重要. 另外, 若利用低温黑体法获取仪器响应函数, 尽量提高黑体温度有利于减小温度偏差带来的影响.

1.5 传统数据处理方法存在的问题

无论是改进版二温法还是低温黑体法, 都是基于式 (6) 计算发射率的^[44,52,58]. 而式 (6) 隐含着来自样品的能量 (E_s) 始终强于来自探测器的能量 (E_d) 这一前

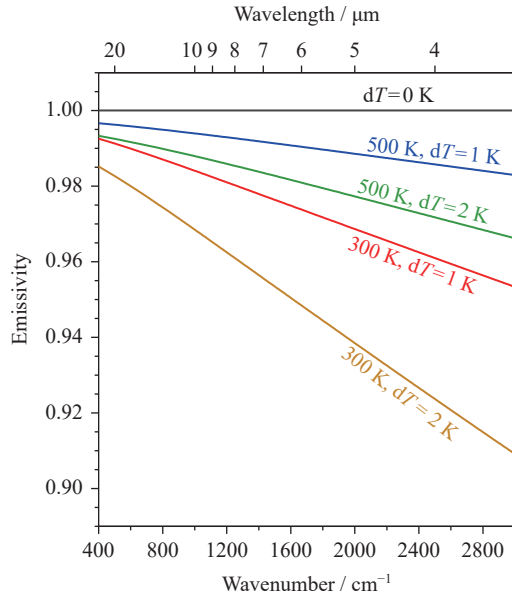


图 5 温度偏差对发射率的影响

Fig. 5 Effects of temperature differences on the derived emissivity

提条件, 因为光谱仪最终得到的测量信号 D_m 始终是正值。在这种情况下, 式 (6) 的严格表达式应改为

$$D_m(\lambda, T) = |E_s(\lambda, T) - E_d(\lambda)| \cdot F(\lambda) = |D_s(\lambda, T) - D_d(\lambda)| \cdot F(\lambda). \quad (16)$$

在真空环境下进行实验测量时, 由于样品颗粒之间无法进行有效的热传导, 通常难以将样品加热到设定的温度^[52,53,56], 导致样品的辐射信号可能会比仪器本身的辐射信号还要弱^[64]。另外, 不同样品的辐射特性也存在差异, 有一些样品加热后, 可能在某些波段范围内辐射能量强于仪器辐射能量 ($E_s > E_d$), 而在另一些波段范围内又比仪器辐射能量弱 ($E_s < E_d$)。二者的辐射强度曲线存在谱段交叉, 这时很难将来自光谱仪探测器的这部分能量从测量信号中准确分离出去^[64]。

结合使用布朗大学 ALEC 实验装置进行的一些实际测量案例进行说明。在低温真空条件下将黑体加热到不同温度并进行测量, 所用探测器为常温型 DT-GS 探测器。测量前先对腔体进行抽真空并用液氮进行冷却处理。待温度稳定后 (约 85 K), 首先对处于液氮温度下的黑体进行测量, 然后设定不同的温度间隔逐步加热黑体, 每次待温度稳定后再进行测量^[52]。图 6 和图 7 给出的是对两个不同自制黑体进行测量的结果。

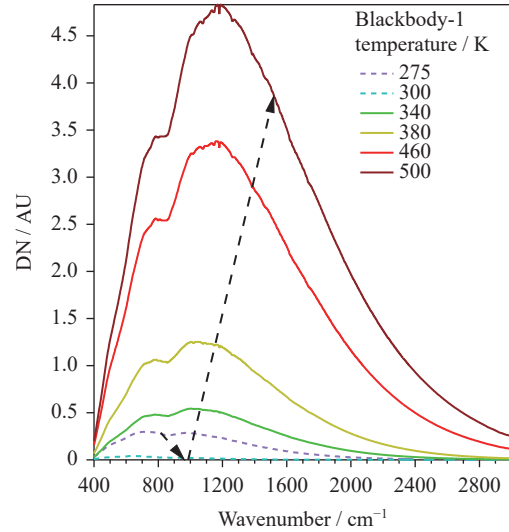


图 6 低温真空条件下将黑体 1 加热至不同温度测得的信号 (箭头所示方向为黑体温度逐渐升高的方向)

Fig. 6 Signals measured by heating blackbody-1 to different temperatures under cold vacuum conditions.

The arrows in the plot indicate the increasing trend of the blackbody's temperature

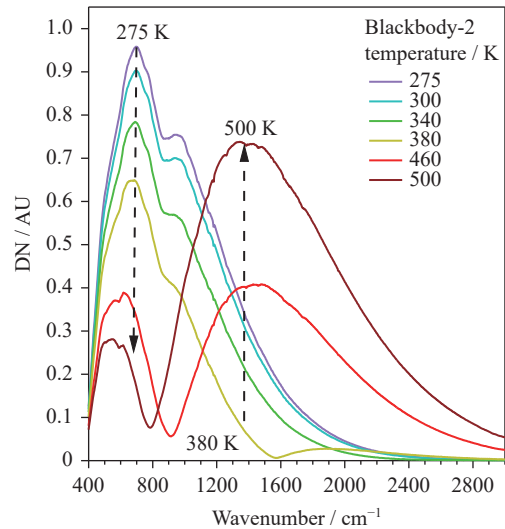


图 7 低温真空条件下将黑体 2 加热至不同温度测得的信号 (箭头所示方向为黑体温度逐渐升高的方向)

Fig. 7 Signals measured by heating blackbody-2 to different temperatures under cold vacuum conditions.

The arrows in the plot indicate the increasing trend of the blackbody's temperature

从图 6 可以看到, 黑体 1 温度从 275 K 升高至常温 300 K 的过程中, 所测信号强度逐渐减弱; 在 300 K 时, 信号强度趋近于 0; 从 300 K 升高至 500 K

的过程中, 所测信号逐渐增强. 这表明光谱仪所测信号 D_m 确实如式 (9) 所描述, 为样品辐射信号与探测器辐射信号的差值, 而探测器的辐射信号强度与温度为 300 K 左右的黑体辐射信号强度相当.

黑体 2 因为顶部开口较小, 在相同温度下光谱仪测得的信号比黑体 1 弱. 从图 7 可以看到, 黑体 2 的光谱仪测量信号强度随着温度变化呈现出更为复杂的变化趋势. 在温度从 275 K 升高至 340 K 的过程中, 光谱仪所测信号强度在所有测量波段范围内均逐渐减小. 而当温度升高至 380 K 时, 在 $400 \sim 1600 \text{ cm}^{-1}$ 范围内光谱信号依然在减小, 但是在 $1600 \sim 3000 \text{ cm}^{-1}$ 范围内光谱信号开始增大. 在温度从 460 K 升高至 500 K 的过程中, 在 $400 \sim 800 \text{ cm}^{-1}$ 波段范围内, 光谱信号强度依然在逐渐减弱; 在 $>800 \text{ cm}^{-1}$ 波段范围内, 测量信号开始增大. 这一测量结果表明: 在实际测量过程中存在这种可能, 即在有些波段范围内 $E_s > E_d$, 而在该波段范围之外 $E_s < E_d$. 在这种情况下, 无论是采用二温法、改进版二温法, 还是低温黑体法, 都难以将样品信号从所测光谱信号中分离出来, 也就难以获得准确的样品发射率光谱.

Brown 等^[65]曾提出在干涉图的基础上进行加减, 然后对处理后的干涉图进行傅里叶变换将其转换成光谱, 消除可能的相误差影响. Yang 等^[64]对基于干涉图与基于光谱 DN 值的热发射数据处理结果进行了较详细的对比分析, 在下文中将结合实际测量中的示例进行说明.

2 基于干涉图的数据处理方法

FTIR 光谱仪测得的原始信号为干涉图, 即经过干涉后的所有探测谱段的综合光强对光程差的投图. 干涉信号经过切趾、相位校正、傅里叶变换等一系列处理后才能得到无量纲的“光谱”, 即 DN 值对波数的投图^[61,66]. 对于低温真空下的热发射测量数据, 在干涉图的基础上进行加减, 然后对处理后的干涉图进行傅里叶变换将其转换成光谱, 理论上能更为有效地分离出样品信号^[64].

前文已经阐明在低温真空条件下, 与样品信号混在一起的主要是来自光谱仪探测器的辐射信号 (E_d). 因为光谱仪包括里面的探测器一般是处于热平衡状态的, 所以 E_d 在测量过程中基本是恒定的. 通过采用低温黑体法可以先获得 E_d 对应的干涉信号图, 然后

再对样品进行测量, 只需将总的干涉信号减去 E_d 对应的干涉信号就可以分离出样品的真实干涉信号. 理论上温度越低越好, 从可实现性上考虑, 可用液氮对腔体进行冷却, 达到低温的效果. 根据本文的测试结果, 经液氮冷却后腔体的温度稳定在 85 K 左右, 此时可对探测器的干涉信号进行直接测定. 需要注意的是, 这里主要是针对常温型 DTGS 检测器, 如果采用液氮制冷的 MCT 检测器, 理论上探测器的辐射可以忽略. 但在前期的实验中, 在换用 MCT 探测器后, 仍有少量仪器辐射信号残留, 因此具体还需结合实际测量结果进行判定.

2.1 FTIR 光谱仪基本原理

为更好地阐明基于干涉图的数据处理方法, 对干涉图相关基本原理进行简要说明. 干涉仪是 FTIR 光谱仪的核心部件, 通常采用迈克逊干涉仪, 其基本结构如图 8 所示, 由一个定镜、一个动镜和一个半透半反的分束器组成^[61]. 定镜位置固定不动, 动镜可沿轴线移动. 光束照到分束器上时会被分成两束分别照射到定镜和动镜上, 经过镜面反射后会在分束器处重新相会而发生干涉. 当动镜从一端运动到另一端时, 从动镜和定镜反射回来的光所经过的光程不一样, 随着光程差的变化, 二者会逐渐发生相长干涉或相消干涉. 干涉强度取决于两者的波长与光程差. 图 8 中 $x=0$ 时表示动镜和定镜与分束器的距离相同, 此时两束光的光程差为 0. 当动镜移动 Δx 时, 两束光的光程差为 Δx 的两倍. 随着 Δx 的变化, 干涉信号强度也会随之变化. 探测器测得的信号代表的是两束光经过干涉之后的强度, 干涉信号强度可以视为光程差的函数.

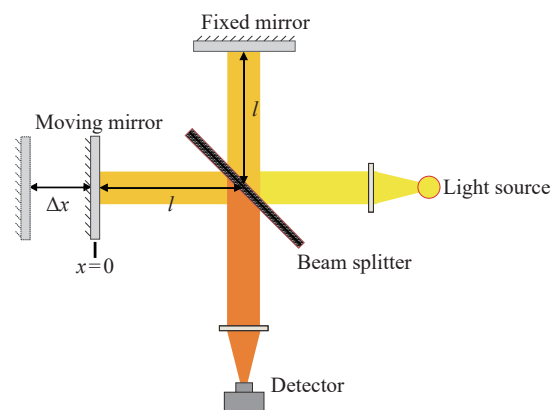


图 8 迈克逊干涉仪光路

Fig. 8 Schematic diagram for Michelson interferometer

2.2 单色光与连续光源的干涉信号

对于单色光, 干涉信号强度可以表示为

$$I(x) = \frac{1}{2}S(\lambda) + \frac{1}{2}S(\lambda) \cdot \cos(2\pi x/\lambda). \quad (17)$$

式中, $I(x)$ 为所测干涉信号 (interferogram) 强度; $S(\lambda)$ 是波长为 λ 的入射光的光强; x 为光程差. 其干涉图带有调制信号信息的主要是右侧的余弦函数部分, 左侧为常数项, 不影响后续的傅里叶变换结果, 一般作为基线直接扣除掉^[61].

对于连续宽谱带光源, 其干涉信号为所有波段单色光的干涉信号相加, 可用积分形式表示如下 (只考虑余弦项部分):

$$I(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} S(\nu) \cdot \cos(2\pi\nu x) d\nu, \quad (18)$$

$$S(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} I(x) \cdot \cos(2\pi\nu x) dx. \quad (19)$$

式中, $\nu=1/\lambda$, 为波数, 代表频率域; x 为光程差, 代表空间域. 在空间域对 $I(x)$ 信号进行周期性采集, 再通过傅里叶变换就可以获取频率域信息, 即不同谱段的光强 $S(\nu)$. 在实际操作中, 一般会在光谱仪中加一个单色激光光源 (例如 633 nm 激光), 利用激光的相消或相长干涉来控制信号的采集, 实现严格的等间距周期性信号采集. 实际测量中动镜的移动距离有限, 因此需要对干涉信号 $I(x)$ 进行切趾、相位校正及傅里叶变换等一系列处理^[61], 才可以得到相应的光谱信号, 即 $S(\nu)$.

2.3 干涉图中的相位偏差

以往的热发射数据处理方法都是在 $S(\nu)$ 的基础上分离样品信号与仪器辐射信号的^[52,58], 而 $S(\nu)$ 中并没有保存原始干涉信号的相位信息. 式 (18) 表示的是没有相位偏差的干涉信号, 此时在光程差为 0 的位置 (Zero Path Difference, ZPD), 所有波段的光均会发生相长干涉. 在 ZPD 位置干涉信号最强, 其他不同光程差对应的干涉信号强度围绕 ZPD 呈左右对称分布.

但是实际上两束干涉光之间通常会存在一定的相位偏差^[61], 因此干涉函数一般表示为

$$I(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} S(\nu) \cdot \cos[2\pi\nu x + \varphi(\nu)] d\nu. \quad (20)$$

其中, $\varphi(\nu)$ 表示相位偏差. 因为相位偏差的存在, 实际测量的干涉信号图可能会呈现非对称的特征.

图 9 给出的是一组基于理论计算得到的红外光源光谱与干涉信号示例. 其中图 9(a) 为基于普朗克

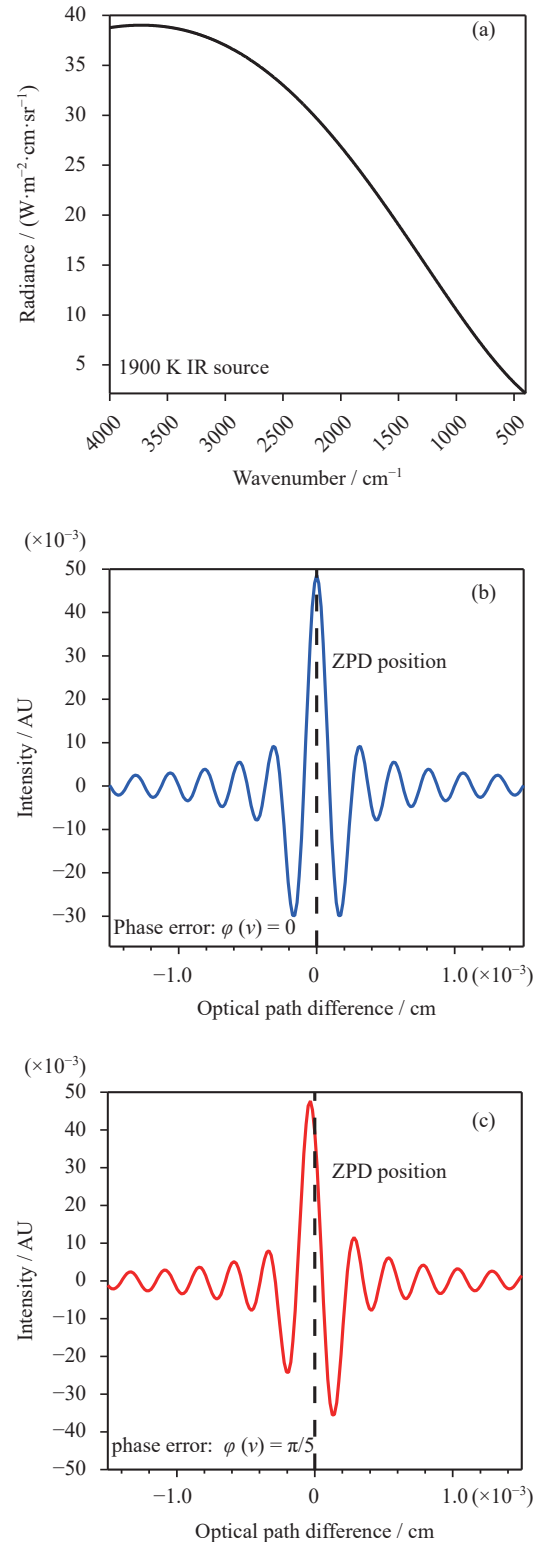


图 9 基于理论公式计算得到的红外光源光强与包含不同相位偏差的干涉信号示例

Fig. 9 Spectra of infrared light source and corresponding interferograms with or without phase error based on theoretical calculations

黑体辐射公式 (8) 计算得到的温度为 1900 K 的黑体辐射光强. 图 9(b) 为基于式 (18) 计算得到的不包含相位偏差的干涉图, 可以看到干涉信号强度是围绕 ZPD 位置呈左右对称的. 图 9(c) 为基于式 (20) 计算得到的当两束干涉光的相位偏差 $\varphi(\nu)=\pi/5$ 时的干涉图, 此时干涉信号已经明显不对称, 这也是实际测量中常有的情况. 因此, 在对于干涉信号进行傅里叶变换以获得光谱数据 $S(\nu)$ 之前, 一般都需要进行相位校正处理^[61].

2.4 黑体与探测器辐射的实测干涉信号图

图 10 为低温真空条件下分别将黑体 1 加热到不同温度下测得的干涉信号与直接测量的探测器辐射信号的对比. 探测器的干涉信号 (I_d) 为采用前文所述低温黑体法直接测量得到的. 从图 10(a) 中可以看出, 当黑体温度为 300 K 时, 实测干涉信号 (I_m) 强度为 0, 表明源自黑体辐射的信号与仪器辐射信号正好相互抵消. 当黑体温度低于 300 K 时 (如图 10 中所示的 275 K), I_m 与 I_d 具有相同的相位, 并且 $I_m < I_d$, 这表明此时黑体的实际辐射信号强度要比探测器辐射强度弱. 而当黑体温度高于 300 K 时, I_m 与 I_d 正好存在着 180° 的相位差, 并且随着黑体温度的增加, I_m 越来越强. 这一实测结果也证实, 每个样品的实测信号实际上是源自样品的辐射信号与源自探测器的辐射信号的差值, 如式 (6) 所述.

2.5 基于干涉图进行仪器辐射信号扣除的合理性

Christensen 等^[44] 认为, 仪器的辐射信号主要源自探测器本身的辐射, 因此源自样品辐射与源自仪器辐射的两个干涉信号之间存在 180° 的相位差. 探测器与样品可以视为两个独立的光源, 二者发出的光经过干涉仪调制后的干涉过程也是相互独立的. 图 11 给出的是干涉仪中光束经过透射与反射后的相位变化. 需要注意的是, 此处的相位并没有意义, 只有发生干涉的两束光的相位差会影响最终的干涉信号强度. 理论上光束经过动镜或定镜的垂直反射后会产生 180° 的相位变化, 穿过半透半反分束器时不产生相位变化, 而被分束器反射时会产生 90° 的相位变化^[44,61]. 从图 11 中可以看到, 外部光源的光经过干涉仪分束后再发生干涉时, 两束干涉光的相位偏差为 0; 探测器辐射的光经过分束后发生干涉时, 两束光的相位偏差为 180° . 动镜移动对内外两个光源干涉光的光程差的影响是相同的, 因此当从样品辐射过来的光经过分束再会聚时, 若发生相长干涉 (相位差为 0), 则源自探测器辐射的两束光将正好发生相消干涉 (相位差为 π). 因此, 探测器的干涉信号可以表示为

$$I_d(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} S_d(\nu) \cdot \cos[2\pi\nu x + \theta(\nu) + \pi] d\nu = -\frac{1}{2} \int_0^{+\infty} S_d(\nu) \cdot \cos[2\pi\nu x + \theta(\nu)] d\nu. \quad (21)$$

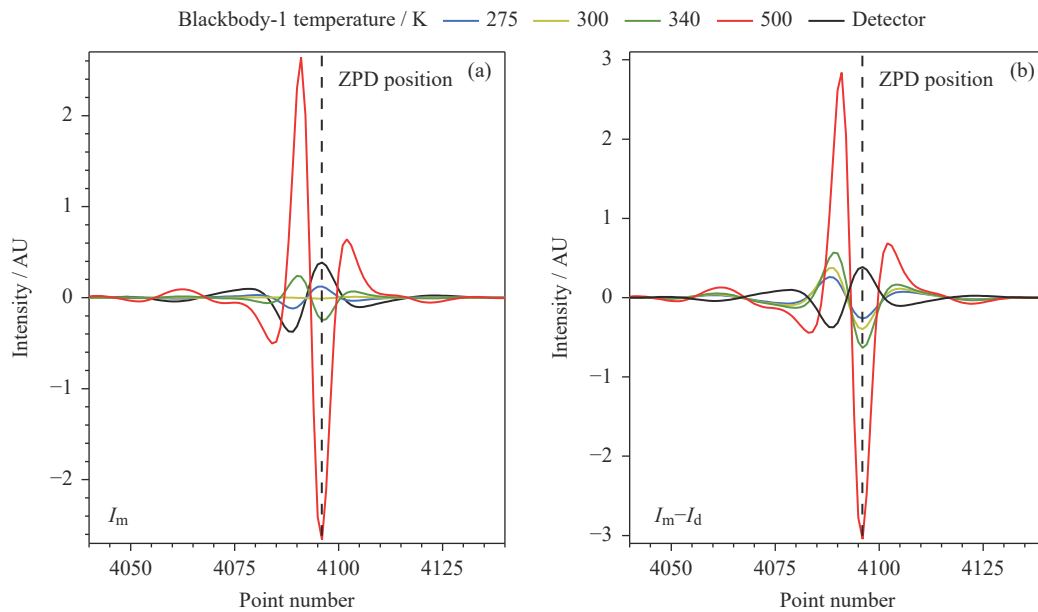


图 10 探测器与不同温度下黑体的实测干涉信号对比

Fig. 10 Comparison of measured interferograms between the detector and the blackbody with varied temperatures

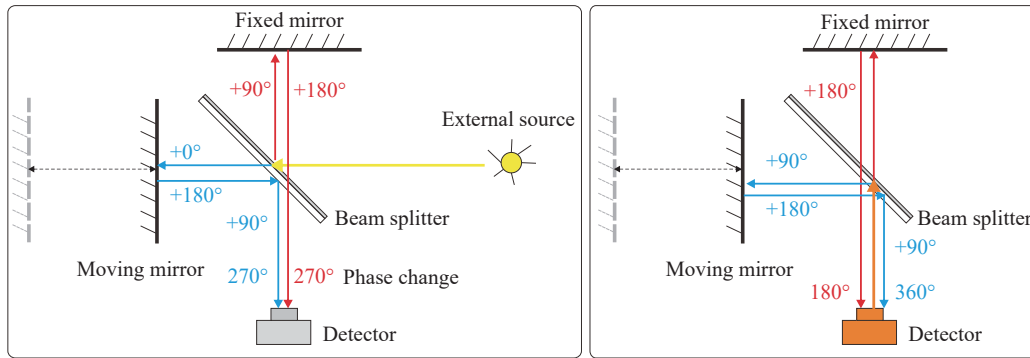


图 11 源自外部光源与探测器本身辐射的光经过分束器后的相位变化

Fig. 11 Phase changes of the radiation light from the external light source and the detector itself after passing through the beam splitter

式中, $I_d(x)$ 表示探测器辐射光的干涉信号, $S_d(\nu)$ 表示探测器辐射光强, $\theta(\nu)$ 表示固有相位偏差.

样品与探测器视为两个相互独立的光源, 二者的干涉信号可以分别处理, 而实际的总体干涉信号可视为样品与探测器干涉信号之和, 即

$$I_m(x) = I_s(x) + I_d(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} S_s(\nu) \cdot \cos[2\pi\nu x + \varphi(\nu)] d\nu - \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} S_d(\nu) \cdot \cos[2\pi\nu x + \theta(\nu)] d\nu. \quad (22)$$

其中, $I_m(x)$ 为总体测量信号, $I_s(x)$ 为样品的实际干涉信号, $S_s(\nu)$ 为样品的实际辐射光强, $\varphi(\nu)$ 与 $\theta(\nu)$ 分别为样品与探测器辐射的光经过分束器调制后产生的固有相位偏差. 因此, 测量到的信号始终是样品实际辐射信号与探测器辐射信号之间的差值. 当 $\varphi(\nu) = \theta(\nu)$ 时, 式 (22) 可表示为

$$I_m(x) = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} [S_s(\nu) - S_d(\nu)] \cdot \cos[2\pi\nu x + \varphi(\nu)] d\nu. \quad (23)$$

此时式 (16) 才能成立, 因为 $D_s - D_d$ 与 $S_s(\nu) - S_d(\nu)$ 在各波段均具有一一对应关系. 如果 $\varphi(\nu) \neq \theta(\nu)$, 则 $I_m(x)$ 中将包含两个不同的相位偏差信息, 其经过傅里叶变换后得到的 D_m 不能视为 D_s 与 D_d 的差值, 因其并不与实际的辐射光强 $S_s(\nu) - S_d(\nu)$ 一一对应. 此时, 应先在干涉图的基础上对探测器辐射信号进行分离.

式 (22) 中 $I_m(x)$ 与 $I_d(x)$ 均可以通过直接测量获得, 因此样品的实际干涉信号可通过二者相减得到, 即

$$I_s(x) = I_m(x) - I_d(x). \quad (24)$$

在干涉图层面, 不需要考虑探测器辐射强度与样品实际辐射强度是否存在谱段交叉等问题.

获得样品的实际干涉信号后, 对其进行傅里叶变换等处理即可获得样品的实际辐射光谱, 即 D_s . 图 12 为先在干涉图层面扣除探测器辐射信号, 再进行傅里叶变换等处理后得到的两个自制黑体在不同温度下的真实光谱强度信号. 可以看到经过校正后的信号更加合理, 两个黑体的真实辐射信号均随着黑体温度的增加而持续增强, 而不是像图 6 与图 7 中那样存在复杂的变化趋势. 另外, 探测器的辐射信号与黑体 1 在温度为 300 K 时的辐射信号基本一致, 再次证明仪器的辐射强度与常温黑体的辐射强度相当. 需要指出的是, 光束经过干涉仪后的具体相位变化要根据不同光谱仪中干涉仪的制作方式进行具体分析^[61].

3 样品实际温度的获取

在有效分离出样品的真实辐射信号后, 要获取准确的发射率数据还需要解决另一个难题, 即样品的真实温度. 不论是实际的行星热发射探测, 还是实验室的热发射测量, 都会面临这一问题. 无大气天体表面经过长期不同尺度的撞击与空间风化过程后, 往往会覆盖一层由细颗粒组成的表壤层^[67]. 而在低温真空环境下, 表壤层颗粒之间无法进行有效的热传导, 颗粒之间还可能存在着热梯度^[52,53,68], 因此即使使用温度传感器插入表壤层进行直接测定也不一定能够获取最表层物质的准确温度. 在地面实验测量过程中对样品进行加热时, 一般会尽可能地使样品均匀受热并达到稳定的设定温度值. 为克服低温真空条件下样品颗粒

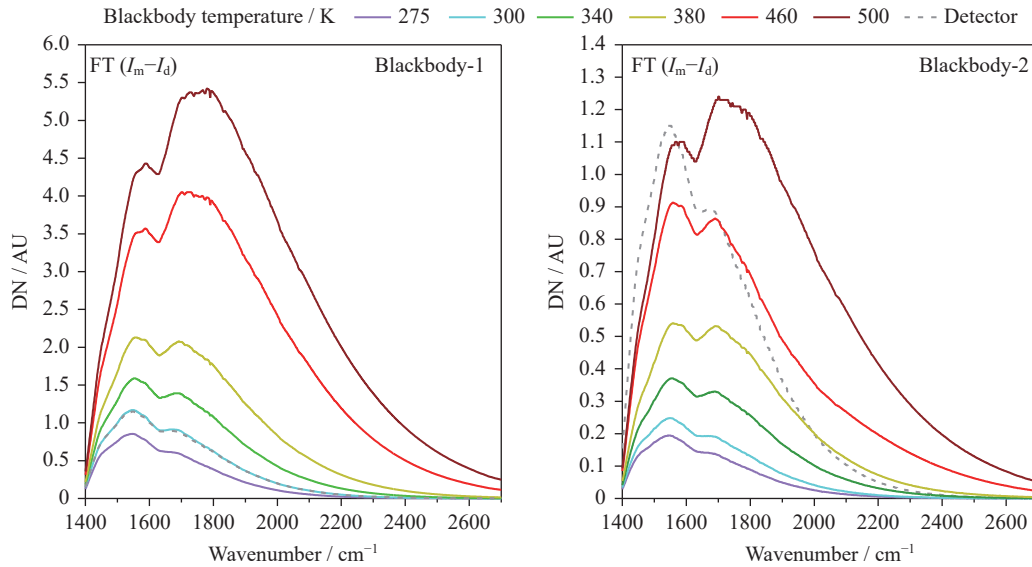


图 12 在干涉图层面扣除仪器辐射信号后再进行傅里叶变换等处理得到的两个自制黑体在不同温度下的实际辐射信号

Fig. 12 Actual radiation signals of two self-made blackbodies at different temperatures with the instrument radiation signal subtracted based on their interferograms

间热梯度的影响,除了从样品台底部通过热电阻等方式进行加热外,还会在样品腔顶部加装一台卤钨灯模拟太阳光照,从顶部进行加热^[52,59]。即便如此,温度传感器获取的温度与样品表面的实际温度仍可能存在差异。因此,在实际测量中,样品温度的获取更多的还是采用辐射亮温估算法^[58]。

在前文中已经阐明如何获取仪器的响应函数,结合分离出的样品实际辐射信号 D_s 可以得到样品的实际辐射能量 E_s 。对于行星表面出露的绝大多数矿物样品,在其 CF 波段附近的发射率接近 1,此时该物质可近似视为黑体,可以利用普朗克公式反算其温度。每一个波段都会得到一个温度值,基于以往研究经验,或者先对目标样品进行常规的中红外反射光谱测量,可以大致划定一个包含 CF 峰位的波段范围,在该波段范围内反演温度的极大值即可作为样品的真实温度 T_s ^[58]。基于 T_s 与 E_s 可以直接采用式 (4) 计算样品的发射率光谱,其中对应温度下黑体辐射能量 E_{bb} 可以利用普朗克黑体辐射公式计算得到。

4 结语

不论是针对探测任务规划前期科学目标的论证,或者研制阶段热发射光谱类载荷指标的确定,还是为将来的遥测数据处理方法进行构建与科学解译,在地

面实验室建立相应的可以模拟月球与小行星表面低温、真空环境的热发射光谱测量装置都是很有必要的。对热发射测量过程与数据处理方法开展预先研究对于搭建相应实验装置是十分必要的。本文对行星科学研究中用到的热发射光谱测量装置设计进行了介绍,同时对热发射测量过程与数据处理方法进行了总结。针对热发射测量过程中样品辐射信号与仪器辐射信号难以分离的问题,提出并论证了基于干涉图的数据处理方法,该方法可以更为有效地分离出样品实际辐射信号,从而获得更为准确的发射率光谱数据。本文分析结果可为国内相关热发射测量装置的设计和搭建以及未来天问二号等探测数据的处理与科学解译提供参考。

参考文献

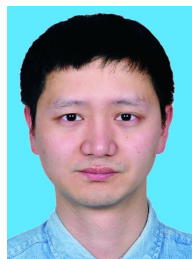
- [1] SHKURATOV Y, KAYDASH V, KOROKHIN V, *et al.* Optical measurements of the Moon as a tool to study its surface[J]. *Planetary and Space Science*, 2011, **59**(13): 1326-1371
- [2] CLARK R N, ROUSH T L. Reflectance spectroscopy: Quantitative analysis techniques for remote sensing applications[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1984, **89**(B7): 6329-6340
- [3] LEMELIN M, LUCEY P G, MILJKOVIĆ K, *et al.* The compositions of the lunar crust and upper mantle: Spectral analysis of the inner rings of lunar impact basins[J].

- Planetary and Space Science*, 2019, **165**: 230-243
- [4] MILJKOVIĆ K, WIECZOREK M A, COLLINS G S, *et al.* Excavation of the lunar mantle by basin-forming impact events on the Moon[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 2015, **409**: 243-251
 - [5] MORIARTY DANIEL P III, DYGERT N, VALENCIA S N, *et al.* The search for lunar mantle rocks exposed on the surface of the Moon[J]. *Nature Communications*, 2021, **12**(1): 4659
 - [6] HESS P C, PARMENTIER E M. A model for the thermal and chemical evolution of the Moon's interior: Implications for the onset of mare volcanism[J]. *Earth and Planetary Science Letters*, 1995, **134**(3/4): 501-514
 - [7] JOLLIFF B L, GILLIS J J, HASKIN L A, *et al.* Major lunar crustal terranes: Surface expressions and crust-mantle origins[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2000, **105**(E2): 4197-4216
 - [8] PIETERS C M, NOBLE S K. Space weathering on airless bodies[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2016, **121**(10): 1865-1884
 - [9] GUEYMARD C A. Revised composite extraterrestrial spectrum based on recent solar irradiance observations[J]. *Solar Energy*, 2018, **169**: 434-440
 - [10] MATTHEWS G. Celestial body irradiance determination from an underfilled satellite radiometer: application to albedo and thermal emission measurements of the Moon using CERES[J]. *Applied Optics*, 2008, **47**(27): 4981-4993
 - [11] WILLIAMS J P, PAIGE D A, GREENHAGEN B T, *et al.* The global surface temperatures of the Moon as measured by the Diviner Lunar Radiometer Experiment[J]. *Icarus*, 2017, **283**: 300-325
 - [12] FONTENLA J, WHITE O R, FOX P A, *et al.* Calculation of solar irradiances. I. Synthesis of the solar spectrum[J]. *The Astrophysical Journal*, 1999, **518**(1): 480-499
 - [13] CLARK R N. Spectroscopy of rocks and minerals and principles of spectroscopy[M]//Remote Sensing for the Earth Sciences: Manual of Remote Sensing. New York: John Wiley and Sons, 1999: 3-58
 - [14] BURNS R G. Mineralogical Applications of Crystal Field Theory[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1993
 - [15] CLOUTIS E A, GAFFEY M J, JACKOWSKI T L, *et al.* Calibrations of phase abundance, composition, and particle size distribution for olivine-orthopyroxene mixtures from reflectance spectra[J]. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 1986, **91**(B11): 11641-11653
 - [16] GAFFEY M J, BELL J F, BROWN R H, *et al.* Mineralogical variations within the S-type asteroid class[J]. *Icarus*, 1993, **106**(2): 573-602
 - [17] YANG Y Z, LIN H L, LIU Y, *et al.* The effects of viewing geometry on the spectral analysis of lunar regolith as inferred by in situ spectrophotometric measurements of Chang'E-4[J]. *Geophysical Research Letters*, 2020, **47**(8): e2020GL087080
 - [18] ZHANG X Y, ZHU M H, BUGIOLACCHI R. Mafic minerals in the South Pole-Aitken basin[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2019, **124**(6): 1581-1591
 - [19] HAPKE B. Theory of Reflectance and Emittance Spectroscopy[M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2012
 - [20] LI S, LI L. Radiative transfer modeling for quantifying lunar surface minerals, particle size, and submicroscopic metallic Fe[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2011, **116**(E9): E09001
 - [21] Yang Y Z, Li S, Milliken R E, *et al.* Phase functions of typical lunar surface minerals derived for the Hapke model and implications for visible to near-infrared spectral unmixing[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2019, **124**(1): 31-60
 - [22] GLOTCH T D, LUCEY G, BANDFIELD J L, *et al.* Highly silicic compositions on the Moon[J]. *Science*, 2010, **329**(5998): 1510-1513
 - [23] KAPLAN H H, MILLIKEN R E, ALEXANDER C M O D, *et al.* Reflectance spectroscopy of insoluble organic matter (IOM) and carbonaceous meteorites[J]. *Meteoritics & Planetary Science*, 2019, **54**(5): 1051-1068
 - [24] MILLIKEN R E, HIROI T, SCHOLLES D, *et al.* The NASA Reflectance Experiment Laboratory (RELAB) facility: An online spectral database for planetary exploration[C]. *LPI Contributions*, 2021, **2654**
 - [25] HARRIS D C, BERTOLUCCI M D. Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy[M]. New York: Dover Publications, 1989
 - [26] BISHOP J L, LANE M D, DYAR M D, *et al.* Reflectance and emission spectroscopy study of four groups of phyllosilicates: smectites, kaolinite-serpentines, chlorites and micas[J]. *Clay Minerals*, 2008, **43**(1): 35-54
 - [27] CHRISTENSEN 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
 - [28] COOPER B L, SALISBURY J W, KILLEN R M, *et al.* Midinfrared spectral features of rocks and their powders[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2002, **107**(E4): 1-1-1-17
 - [29] LANE M D. Mid-infrared emission spectroscopy of sulfate and sulfate-bearing minerals[J]. *American Mineralogist*, 2007, **92**(1): 1-18
 - [30] DU P X, YUAN P, LIU J C, *et al.* Clay minerals on Mars: An up-to-date review with future perspectives[J]. *Earth-Science Reviews*, 2023, **243**: 104491
 - [31] ZHAO Shanrong. Crystallography and Mineralogy[M]. 3rd Edition, Beijing: Higher Education Press, 2017 (赵珊茸. 结晶学及矿物学 [M]. 3 版. 北京: 高等教育出版社, 2017)
 - [32] NOEL Y, CATTI M, D'ARCO P, *et al.* The vibrational

- frequencies of forsterite Mg_2SiO_4 : an all-electron ab initio study with the CRYSTAL code[J]. *Physics and Chemistry of Minerals*, 2006, **33**(6): 383-393
- [33] 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
- [34] 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
- [35] 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
- [36] 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
- [37] 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
- [38] HUNT G R, SALISBURY J W. Mid-infrared spectroscopic observations of the Moon[J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1969, **264**(1150): 109-139
- [39] MURCRAY F H, MURCRAY D G, WILLIAMS W J. Infrared emissivity of lunar surface features: 1. Balloon-borne observations[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1970, **75**(14): 2662-2669
- [40] CHRISTENSEN R, BANDFIELD J L, HAMILTON V E, *et al.* Mars Global Surveyor Thermal Emission Spectrometer experiment: Investigation description and surface science results[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2001, **106**(E10): 23823-23871
- [41] GREENHAGEN B T, LUCEY G, WYATT M B, *et al.* Global silicate mineralogy of the Moon from the Diviner lunar radiometer[J]. *Science*, 2010, **329**(5998): 1507-1509
- [42] RUFF S W, CHRISTENSEN R R, BLANEY D L, *et al.* The rocks of Gusev Crater as viewed by the Mini-TES instrument[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2006, **111**(E12): E12S18
- [43] AMIRI H E S, BRAIN D, SHARAF O, *et al.* The emirates mars mission[J]. *Space Science Reviews*, 2022, **218**(1): 4
- [44] CHRISTENSEN P R, HAMILTON V E, MEHALL G L, *et al.* The OSIRIS-REx thermal emission spectrometer (OTES) instrument[J]. *Space Science Reviews*, 2018, **214**(5): 87
- [45] OLKIN C B, LEVISON H F, VINCENT M, *et al.* Lucy mission to the Trojan asteroids: Instrumentation and encounter concept of operations[J]. *The Planetary Science Journal*, 2021, **2**(5): 172
- [46] LIU B, LIU X D, JIA X Y, *et al.* Active asteroid 311P/PanSTARRS: Rotational instability as the origin of its multitails?[J]. *The Astronomical Journal*, 2023, **166**(4): 156
- [47] XU L, LI H, PEI Z Y, *et al.* A brief introduction to the international lunar research station program and the interstellar express mission[J]. *Chinese Journal of Space Science*, 2022, **42**(4): 511-513
- [48] LIU Zhanyi, XU Ting, ZHANG Weijing, *et al.* Measurement study on surface emissivity of thermal protection material[J]. *Journal of Rocket Propulsion*, 2019, **45**(4): 79-84,90 (刘占一, 许婷, 张魏静, 等. 热防护材料表面发射率测试研究 [J]. *火箭推进*, 2019, **45**(4): 79-84,90)
- [49] WANG Xinbei. Study on Measurement of Spectral Emissivity of Materials based on Fourier Infrared Spectrometer[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2007 (王新北. 基于傅立叶红外光谱仪的材料光谱发射率测量技术的研究 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2007)
- [50] YUAN Zundong, ZHANG Junqi, ZHAO Jun, *et al.* Precision measurement facility of material spectral emissivity[J]. *Chinese Journal of Scientific Instrument*, 2008, **29**(8): 1659-1664 (原遵东, 张俊祺, 赵军, 等. 材料光谱发射率精密测量装置 [J]. *仪器仪表学报*, 2008, **29**(8): 1659-1664)
- [51] ZHANG. Lan, ZHANG Shukun, CAI Jing. A study on the measurement method of material emissivity based on Fourier transform infrared spectroscopy[J]. *Industrial Metrology*, 2015, **25**(4): 16-18,35 (张岚, 张术坤, 蔡静. 基于傅里叶红外光谱仪的材料发射率测量方法研究 [J]. *工业计量*, 2015, **25**(4): 16-18,35)
- [52] 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
- [53] DONALDSON HANNA K L, THOMAS I R, BOWLES N E, *et al.* Laboratory emissivity measurements of the plagioclase solid solution series under varying environmental conditions[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2012, **117**(E11): E11004
- [54] 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
- [55] DONALDSON HANNA K L, GREENHAGEN B T, PATTERSON W R, *et al.* Effects of varying environmental conditions on emissivity spectra of bulk lunar soils: Application to Diviner thermal infrared observations of the Moon[J]. *Icarus*, 2017, **283**: 326-342
- [56] 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
- [57] LOGAN L M, HUNT G R. Emission spectra of particulate silicates under simulated lunar conditions[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1970, **75**(32): 6539-6548
- [58] 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
- [59] THOMAS I R, GREENHAGEN B T, BOWLES N E, *et al.* A new experimental setup for making thermal emission measurements in a simulated lunar environment[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2012, **83**(12): 124502
- [60] DONALDSON HANNA K L, BOWLES N E, WARREN T J, *et al.* Spectral characterization of Bennu analogs using PASCALE: A new experimental set-up for simulating the near-surface conditions of airless bodies[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2021, **126**(2): e2020JE006624
- [61] GRIFFITHS P R, DE HASETH J A. Fourier Transform Infrared Spectrometry[M]. 2nd ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007
- [62] SÜSS B, RINGLEB F, HEBERLE J. New ultrarapid-scanning interferometer for FT-IR spectroscopy with microsecond time-resolution[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2016, **87**(6): 063113
- [63] LI Ximing, LI Wenjun, GU Zhehan, *et al.* Effect on environment radiation in measurements for spectral emissivity at medium and low temperatures[J]. *Acta Metrologica Sinica*, 2014, **35**(1): 10-12 (李希明, 李文军, 顾喆涵, 等. 在中低温条件下环境辐射对光谱发射率测量的影响 [J]. *计量学报*, 2014, **35**(1): 10-12)
- [64] YANG Y, MILLIKEN R E, PATTERSON W R, *et al.* Data reduction of FTIR thermal emission measurements under cold vacuum conditions: Processing of interferograms vs. spectra[C]//49th Annual Lunar and Planetary Science Conference. The Woodlands, Texas, 2018
- [65] BROWN R J, YOUNG B G. Spectral emission signatures of ambient temperature objects[J]. *Applied Optics*, 1975, **14**(12): 2927-2934
- [66] STUART B H. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications[M]. Chichester, UK: John Wiley & Sons, 2004
- [67] PAPIKE J J, SIMON S B, LAUL J C. The lunar regolith: Chemistry, mineralogy, and petrology[J]. *Reviews of Geophysics*, 1982, **20**(4): 761-826
- [68] LUCEY P G, GREENHAGEN B T, SONG E, *et al.* Space weathering effects in Diviner Lunar Radiometer multispectral infrared measurements of the lunar Christiansen Feature: Characteristics and mitigation[J]. *Icarus*, 2017, **283**: 343-351

作者简介



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副研究员, 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