

陈林,唐红,李雄耀,等.基于1.4 μm 红外光谱测量磷灰石结构水的定量方法探讨[J].地球科学进展,2016,31(4):403-408,doi:10.11867/j.issn.1001-8166.2016.04.0403.[Chen Lin,Tang Hong, Li Xiongyao, et al. The quantitative IR spectroscopic determination of OH in apatite based on 1.4 μm [J]. Advances in Earth Science 2016, 31(4):403-408,doi:10.11867/j.issn.1001-8166.2016.04.0403.]

基于1.4 μm 红外光谱测量磷灰石结构水的定量方法探讨*

陈林^{1,2},唐红^{1*},李雄耀¹,欧阳自远¹,王世杰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,贵州 贵阳 550081;2.中国科学院大学,北京 100049;3.中国科学院地球化学研究所环境地球化学国家重点实验室,贵州 贵阳 550081)

摘要:水在地球科学各个领域以及行星演化和太空探索中都是非常重要的物质。我国嫦娥-3号的近红外光谱数据在1.4 μm 附近出现了微弱的峰,可能代表了水的存在。为了定量计算其水含量,以磷灰石为研究对象,通过对磷灰石结构水在1.4 μm 和2.8 μm 红外光谱相关性的分析和验证,获得了其在1.4 μm 红外光谱的摩尔吸收系数。磷灰石在1.4 μm 和2.8 μm 处的吸收峰与其晶体定向有关,当光矢量E平行于磷灰石晶体c轴时,根据Beer-Lambert定律,可用公式 $C = \omega A / \epsilon p d$ 定量计算磷灰石中水的含量。这一结果可为解译嫦娥-3号近红外光谱数据中水的信号提供借鉴。该方法能为月球其他矿物在近红外光谱中结构水的定量计算提供依据。

关键词:磷灰石;近红外光谱;结构水;摩尔吸收系数

中图分类号:P578 文献标志码:A 文章编号:1001-8166(2016)04-0403-06

1 引言

水在天体演化中具有重要的作用,直接影响着岩浆的物理化学特征以及矿物和熔体的热稳定性,如矿物中结构水对电导率的影响^[1]。另外,作为天体宜居性的重要因素,水的成因和特征对于地外生命环境以及演化具有重要的指示意义。一直以来,月球被认为是干燥的。然而最新的研究成果推翻了这个观点。近期印度的绕月飞行器中M³以及美国的Deep Impact和Cassini太空探测器,都监测到月球表面和月壤中含有不同形态的水(OH和H₂O)^[2~5]。对月球火山玻璃^[6]、月岩磷灰石^[7,8]和月壤胶结质玻璃^[9]的重新分析也发现了其中的

OH,揭示了月球内部有水的存在。这个发现意味着我们可能需要重新认识月球火山活动和演化的模式。同时月表水的存在,也为未来以月球为基地的太空探索提供了重要的资源。

红外光谱仪因其对水的高度灵敏性和价格便宜等因素,被广泛用于月球深空探测和月球样品测水实验。水在红外光谱中的位置包括中红外3和2.8 μm ,以及近红外2.2,1.9,1.4 μm 。例如,美国Cassini探测器中的可见-红外成像光谱仪便检测到水在3 μm 处的红外吸收峰,并在月球正面探测到可能来自月球矿物中OH在2.8 μm 附近的信号^[2]。Hui等^[10]分析了来自月球样品中斜长石在2.8 μm 的红外光谱,其含水量至少为 6×10^{-6} ,由此估算出

* 收稿日期:2016-01-30;修回日期:2016-03-15.

* 基金项目:国家自然科学基金项目“太阳风注入月表斜长石所生成水的形态和热稳定性模拟研究”(编号:41403057);贵州省科学技术基金项目“月表红外探测水赋存状态的模拟研究”(编号:黔科合J字[2013]2288号)资助。

作者简介:陈林(1990-),男,四川成都人,硕士研究生,主要从事月球与行星科学研究。E-mail: chenlin@mail.gyig.ac.cn

* 通信作者:唐红(1984-),女,四川内江人,副研究员,主要从事月球与行星科学研究。E-mail: tanghong@mail.gyig.ac.cn

月球岩浆洋初始的水含量为 320×10^{-6} , 残留的月球岩浆洋含水量可能达到 1.4 wt% (wt% 为重量百分含量)。我国嫦娥-3 号任务中玉兔月球车搭载了红外成像光谱仪^[11], 并获得了月球表面的近红外光谱数据, 其在 1.4 μm 出现的微弱信号可能是由于水的存在造成的, 从而引起了研究人员的注意。确认红外光谱 1.4 μm 处存在吸收峰, 并且展开含水矿物的近红外光谱特征的研究对解译嫦娥-3 号数据非常重要。如何利用 1.4 μm 处吸收峰定量计算水的含量也是数据解译中需要解决的关键问题之一。因此, 本文以磷灰石为研究对象, 来探讨基于 1.4 μm 红外光谱测量磷灰石结构水的定量方法。

在地球、月球^[7,8] 和火星^[12] 上, 磷灰石是常见的火成岩矿物, 能指示岩石成因、岩浆分异演化和成岩、成矿条件等。F、Cl、OH、C 和 S 在磷灰石中的含量可以反映晶体形成过程中的流体条件^[13,14]。对于月球科学, 特别是早期月球岩浆岩演化, 可以用磷灰石中的 OH 来计算其含水量^[8]。针对磷灰石 OH 含量在红外光谱中的定量计算, Wang 等^[15] 对地球中磷灰石晶体进行了分析测试, 用弹性反冲分析法计算了 5 个磷灰石样品的水含量, 从而得到了磷灰石在 2.8 μm 红外光谱中的摩尔吸收系数, 强度相关: $\varepsilon = (470 \pm 11) \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$, 面积相关: $\varepsilon = (2.31 \pm 0.06) \times 10^4 \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^2)$ 。

然而, 对于我国嫦娥-3 号而言, 红外成像光谱的探测范围为 0.45 ~ 2.4 μm 。因此, 通过实验得到磷灰石中 OH 在 1.4 μm 红外光谱的摩尔吸收系数, 可以帮助解译我国嫦娥-3 号探测数据关于水的定量计算。目前, 国内尚未有开展矿物中水(1.4 μm) 的近红外光谱定量计算的报道。为此, 本文针对这方面的空缺, 通过磷灰石展开近红外光谱实验研究, 得到了磷灰石 1.4 μm 近红外光谱的特征, 以及其含水量的计算公式。

2 样品及分析方法

2.1 样品和制备方法

样品来源于不同产地的宝石级磷灰石矿物晶体, 样品特征见表 1。

所有样品使用金刚石刀片切割成薄片。Levitt 等^[16] 证明了磷灰石中沿垂直 c 轴的 OH 键振动谱带并不存在, 而在平行时最大化, 所以样品垂直于 c 轴切割制备。由于 1.4 μm 的信号相对较弱, 为了适合仪器测量, 样品厚度需要得到控制, 通过多次数

表 1 样品特征

Table 1 Apatite samples and description

样品号	特征
1	直径约 11 mm, 长 18 mm, 显微镜下可见黑色包体
2	直径约 14 mm, 长 21 mm, 显微镜下可见沿 C 轴小的断裂
3	直径约 15 mm, 长 17 mm, 同样可见沿 C 轴的小断裂
4	直径约 14 mm, 长 15 mm, 表面肉眼可见黄褐色包体, 切片时可以去掉, 显微镜下可见细小断裂
5	直径约 13 mm, 长 22 mm, 内部有裂纹和断裂
6	直径约 9 mm, 长 14 mm, 和样品 3 类似

据对比, 发现样品厚度在 200 ~ 500 μm 处的红外光谱效果最好, 既可以得到完整的 2.8 μm 光谱, 也能进行 1.4 μm 的计算。薄片厚度的测量使用 SKCH-1 精密测厚仪, 测量精度为 0.001 mm。所有样品进行双面抛光, 用丙酮和乙醇清洗干净, 在烘箱中 105 $^{\circ}\text{C}$ 温度下烘烤 24 小时除去吸附水, 随后放在干燥箱准备上机实验。

2.2 分析方法

红外光谱获得是通过中国科学院地球化学研究所月球与行星科学研究中心的 Cary 5000 UV-Vis-NIR 分光光度计, 采用 PbSmart 检测器, 样品腔用氮气进行吹扫。仪器运行参数如下: X 模式, 纳米, Y 模式, %T; 开始: 3 300.00, 停止 800.00; 数据间隔 1 nm; 扫描速度: 1 200 nm/min; 采用双光束, 高狭缝。分析区域直径 1 mm, 进行双基线校正以扣除背景值干扰。光谱测试时选择干净均匀的部分, 避开包体、断裂等区域。

根据 Beer-Lambert 定律, 磷灰石中水的浓度可以通过以下公式计算: $C = \omega A / \varepsilon p d$ 。C 为含水量; ω 为 18.015 g/mol 的水; A 为线性吸光强度 A_{lin} 或者吸收峰面积 A_{im} ; ε 为磷灰石的摩尔吸收系数; ρ 为磷灰石密度(3 200 g/L); d 为薄片厚度, 单位 cm。

3 结果与讨论

3.1 实验结果

磷灰石中 OH 的基频吸收波段为 3 550 ~ 3 560 cm^{-1} , 为 OH 的伸缩振动, 积分区域选择 3 300 ~ 3 700 cm^{-1} ; OH 对应倍频的吸收波段为 7 200 ~ 7 300 cm^{-1} , 积分区域选择 7 150 ~ 7 350 cm^{-1} 。所有吸收光谱数值都是基于基线校正得到的, 均在 Origin 软件上进行操作。数据结果见表 2。

量子力学证明, 非谐振子的基频振动谱带的吸光度最强, 一级倍频谱带很弱, 一级倍频峰的吸光度比基频振动吸收峰的吸光度小 1 ~ 3 个数量级。2.8

表2 磷灰石近红外光谱数据
Table 2 Infrared spectrum properties of apatite

样品号	积分面积		半峰宽		峰高波数		强度		厚度/cm
	2.8 μm	1.4 μm							
1	76.378	0.129	69.298	25.320	3 554.9	7 246.4	0.8377	0.0048	0.037
2	35.626	0.070	59.310	26.870	3 557.5	7 246.4	0.4191	0.0023	0.024
3	66.682	0.134	52.046	29.595	3 557.5	7 246.4	0.8326	0.0046	0.052
4	76.614	0.144	60.193	27.265	3 558.7	7 246.4	0.8640	0.0049	0.048
5	48.585	0.082	57.930	26.000	3 558.7	7 246.4	0.5618	0.0030	0.042
6	45.603	0.086	53.602	25.275	3 560.0	7 246.4	0.5834	0.0032	0.046

μm 和 1.4 μm 处 OH 峰的强度信号相差巨大, 1.4 μm 红外光谱的强度信号只有 2.8 μm 的 5% 左右。6 个样品的积分面积和强度有所不同, 一方面由于厚度并不完全一样, 另一方面跟样品本身的含水量有着密切关系。此外, 半峰宽的不同也说明了样品的差异性, 但是, 这种差异并不是特别大, 说明 6 个样品在成因上具有一定相似性。

3.2 分析与讨论

3.2.1 2.8 μm 红外光谱特征

样品红外光谱数据通过 Origin 进行处理, 包括基线校正、积分面积计算等, 并对数据结果进行线性拟合。在计算中使用平滑且吸收峰明显的谱图, 对同一谱图使用不同的基线校正, 因其计算的水含量误差的变化为 1% ~ 5%, 因此基线校正的影响低于 10%, 相应带来的峰面积和峰高的影响就会更小。

磷灰石的振动谱可以看作由磷氧四面体、羟基离子以及晶格振动的各谱峰所组成。理论上, 磷灰石 OH 伸缩振动峰 ν_{OH} 出现在 3 572 cm^{-1} , 从实验结果来看, 6 个磷灰石样品在 2.8 μm 处的红外光谱谱峰位置发生了明显位移, 吸收峰波数向低频区位移至 3 550 ~ 3 560 cm^{-1} 。一方面由于磷灰石中其他元素的干扰, 如 F^- ; 另一方面是因为伸缩振动模式容易受到吸附水及空气中水汽的干扰。虽然磷灰石中存在 OH 基团, 但是分子间的 O-H 受到空间位阻影响, 氢键非常微弱, O-H 伸缩振动谱带就会变得非常尖锐, 整体峰形尖锐狭窄, 波段为 3 400 ~ 3 700 cm^{-1} , 强度最低为样品 2, 最大为样品 4。对于中红外光谱而言, 由于样品在分光光度计 2.8 μm 处的信号具有较强的吸收峰, 峰强度/厚度、峰面积/厚度的线性拟合非常好。

3.2.2 1.4 μm 红外光谱特征

图 2 是磷灰石 1.4 μm 红外光谱的光谱图, 相比于 2.8 μm 信号非常微弱, 但是 6 个样品的差异也呈现了出来。整体峰形开阔, 介于 7 200 ~ 7 300 cm^{-1} 。从图谱来看, 样品 4 和样品 1 的曲线更为

接近, 样品 2、样品 5 和样品 6 一致性更好, 样品 3 相对独立。由于信号微弱, 在数据处理和光谱图形上会增大误差, 1.4 μm 红外光谱峰强度/厚度、峰面积/厚度的线性拟合相对 2.8 μm 处要差一些。

3.2.3 1.4 μm 和 2.8 μm 红外光谱相关性分析

中红外区出现的吸收谱带主要是分子基频振动吸收谱带和指纹谱带, 而近红外区的吸收谱带基本上都是分子倍频振动和合频振动吸收谱带。分子吸收红外光发生基频振动的概率远远高于倍频振动和合频振动的概率。所以在近红外区, 一级倍频谱带的摩尔吸光系数一般比中红外区基频振动谱带的摩尔吸光系数小 1 ~ 2 个数量级。对于红外光谱定量计算公式而言: $C = \omega A / \epsilon \rho d$, 同一样品, 含水量是一样的, 采用 1.4 μm 和 2.8 μm 的红外光谱来定量计算时, 差异在摩尔吸收系数 ϵ 上。

如图 3, 在单位厚度面积上, 近红外和中红外的光谱数据同样有不错的线性拟合关系。所以, 当对 1.4 μm 和 2.8 μm 做比较时, C 相同, 两式相等: $\omega A_{\text{in}2.8} / \epsilon_{2.8} \rho d = \omega A_{\text{in}1.4} / \epsilon_{1.4} \rho d$, 那么两者摩尔吸收系数和面积之间就存在一种关系比值。由于 2.8 μm 的摩尔吸收系数已经知道了, 通过计算就能得到 1.4 μm 处与面积相关的摩尔吸收系数。

对于强度而言, 同样可以得到这种强度单位厚度化的线性拟合关系, 并且得到了非常好的线性关系。 $\omega A_{\text{in}2.8} / \epsilon_{2.8} \rho d = \omega A_{\text{in}1.4} / \epsilon_{1.4} \rho d$ 同样存在对应的强度和摩尔吸收系数之间的关系。从表 3 的计算结果来看, 强度相关时, 1.4 μm 的摩尔吸收系数结果更加一致。

3.2.4 磷灰石水定量计算方法

理论上, 6 个样品得到的面积相关摩尔吸收系数 ($\epsilon_{1.4}$) 是一样的, 强度相关的摩尔吸收系数也应该是同一个值。然而由于样品本身的差异以及实验误差的存在, 不可能得到一个恒值。但是, 当实验样本无限扩大, 2 组结果会分别趋近于某一数值。通

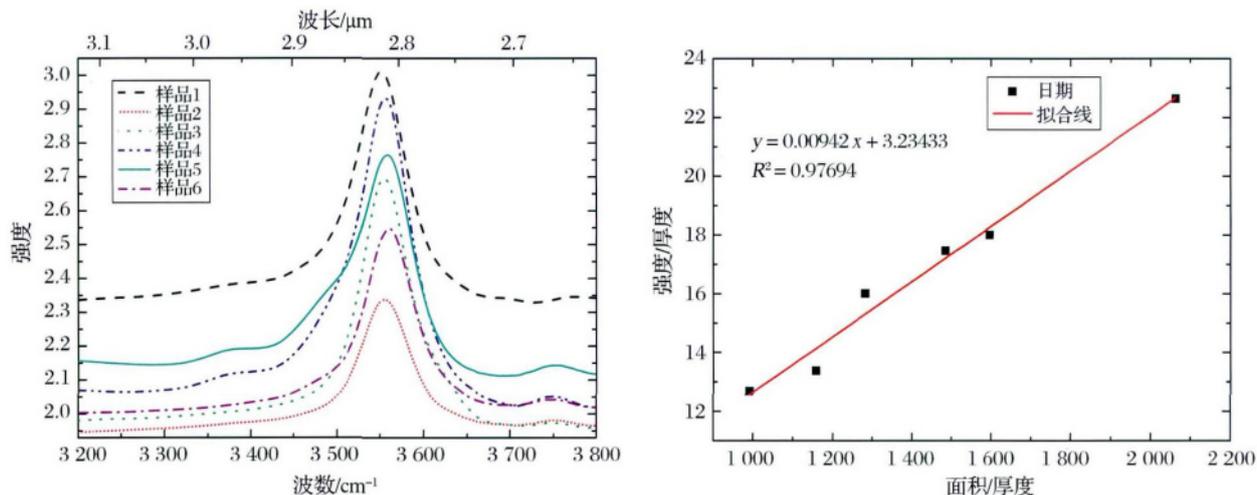


图1 磷灰石 2.8 μm 红外光谱图

Fig.1 Infrared spectra of apatite in 2.8 μm

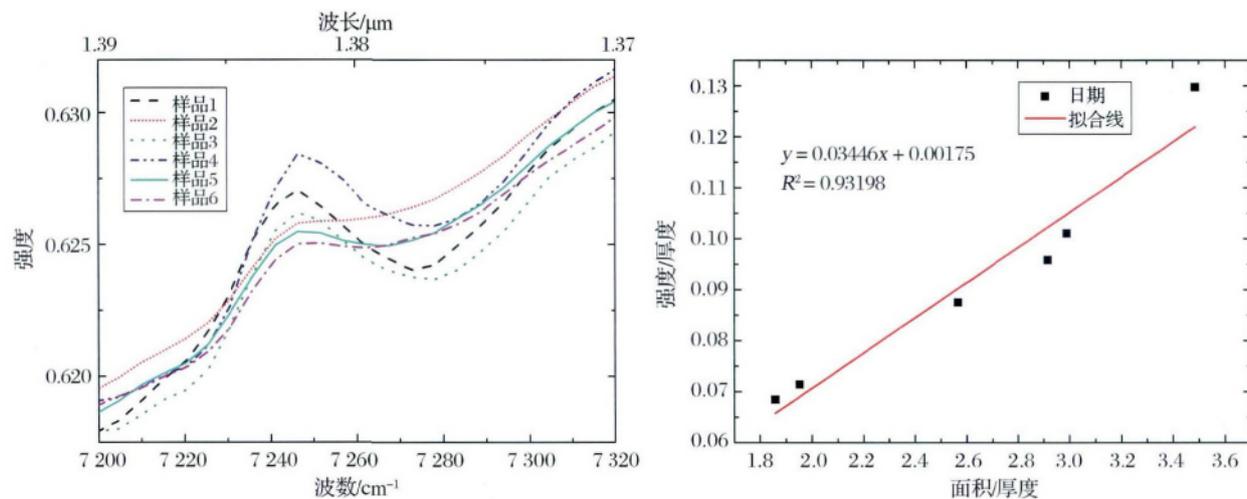


图2 磷灰石 1.4 μm 红外光谱图

Fig.2 Infrared spectra of apatite in 1.4 μm

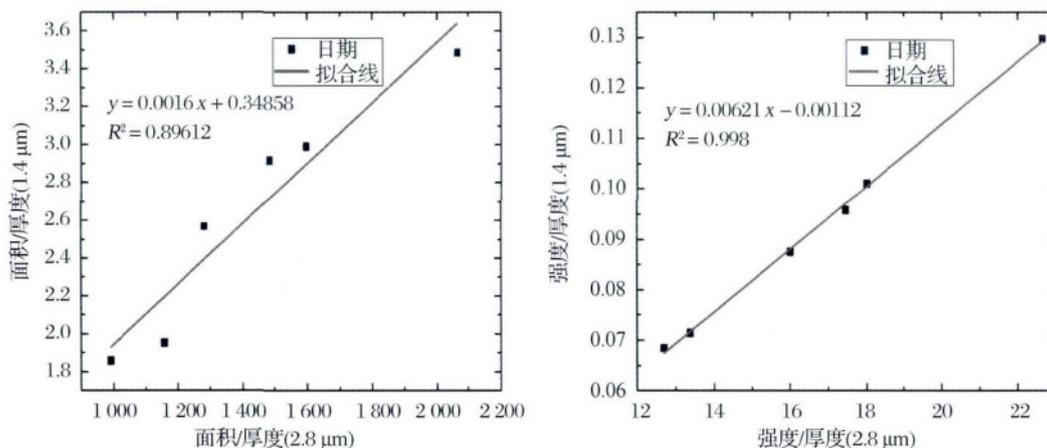


图3 磷灰石 1.4 ~ 2.8 μm 相关性

Fig.3 Correlation between 1.4 μm and 2.8 μm in apatite

表3 1.4 μm A_{int} 和 A_{lin} 摩尔吸收系数计算结果
Table 3 Calculation results of $\epsilon_{1.4}$ with A_{int} and A_{lin}

样品号	面积相关 $\epsilon/$	强度相关 ϵ
	$\text{L}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^2)$	$\text{L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$
1	39.01513 \pm 1.01338	2.692992 \pm 0.063027
2	45.38820 \pm 1.17891	2.579398 \pm 0.060369
3	46.24698 \pm 1.20122	2.568429 \pm 0.060112
4	43.26683 \pm 1.12381	2.638371 \pm 0.061749
5	38.98758 \pm 1.01266	2.50979 \pm 0.05874
6	43.30971 \pm 1.12493	2.537623 \pm 0.059391

过计算可以得到面积相关的摩尔吸收系数 $\epsilon_{1.4} = (42.7024 \pm 1.1089) \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^2)$; 强度相关的摩尔吸收系数 $\epsilon_{1.4} = (2.5878 \pm 0.06057) \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$ 。结果在可靠范围内,可以用于计算近红外光谱中磷灰石的含水量,分别用面积和强度计算6个样品近红外光谱中磷灰石的含水量(表4)。

表4 磷灰石样品含水量(wt%)
Table 4 Water content of apatite (wt%)

样品号	面积相关		强度相关	
	2.8 μm	1.4 μm	2.8 μm	1.4 μm
1	0.050	0.046	0.027	0.028
2	0.036	0.038	0.021	0.021
3	0.031	0.034	0.019	0.019
4	0.039	0.039	0.022	0.022
5	0.028	0.026	0.016	0.016
6	0.024	0.025	0.015	0.015
a	0.036	0.037	0.021	0.021
b	0.044	0.048	0.024	0.024

表4中2.8 μm 摩尔吸收系数采用2012年Wang等^[15]对于磷灰石的计算结果,对比本文1.4 μm 摩尔吸收系数计算所得的含水量,两者几乎接近,接近程度与1.4~2.8 μm 2种拟合程度一致。然而面积和强度在同一样品中结果相差较大,分析其原因,在采用Wang等^[15]的计算结果时,我们注意到他们在校正面积相关的摩尔吸收系数时线性拟合度并不理想,平均标准权重偏差(Mean Standard Weighted Deviation, MSWD)值达到4.894,而强度拟合的MSWD值只有0.846。造成这种较大差异的原因可能是吸收峰面积在不同样品之间的差异,因为磷灰石样品的不同,其半峰宽有一定变化,在面积进行积分的时候可能会造成MSWD值偏大。虽然在结果上存在一定偏差,但是考虑到1.4 μm 信号本身很微弱,特别是对于某些名义上的无水矿物,而面积信号相对强度信号而言更加强烈,对于嫦娥-3号的数据应当保留面积的计算方法。

为了验证实验数据的可靠性,我们重新制备了2组磷灰石样品a和b,分别采用本文和Wang等^[15]的摩尔吸收系数进行计算,得到结果为表4中的a和b,结果和本文基本一致,相对误差分别为3%和9%,说明此校正的1.4 μm 磷灰石的摩尔吸收系数符合计算要求。

4 结 论

通过6块磷灰石样品中结构水在1.4 μm 和2.8 μm 红外光谱的相关性分析,计算出了在1.4 μm 近红外光谱中关于面积和强度的摩尔吸收系数,强度相关: $\epsilon_{1.4} = (2.5878 \pm 0.06057) \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm})$,面积相关: $\epsilon_{1.4} = (42.7024 \pm 1.1089) \text{ L}/(\text{mol} \cdot \text{cm}^2)$ 。该结果经过验证表明其可用于近红外光谱磷灰石的含水量计算。为了得到更加可靠的数据结果,后续展开的工作是通过NanoSIMS定量计算磷灰石的含水量,结合样品的红外数据,独立得到2.8 μm 和1.4 μm 红外摩尔吸收系数,并且用来与前人的结果进行对比。该计算方法可以应用于其他矿物在近红外光谱中含水量的定量计算中,这对于我国嫦娥-3的红外成像光谱仪水的解译具有一定的参考价值。

参考文献(References):

- [1] Yang Xiaozhi, Xia Qunke, Yu Huimin, et al. The possible effect of hydrogen on the high electrical conductivity in the lower continental crust[J]. *Advances in Earth Science* 2006, 21(1): 31-38. [杨晓志, 夏群科, 于慧敏, 等. 大陆下地壳高电导率的起源: 矿物中的结构水[J]. *地球科学进展*, 2006, 21(1): 31-38.]
- [2] Clark R N. Detection of adsorbed water and hydroxyl on the Moon[J]. *Science* 2009, 326(5952): 562-564.
- [3] Pieters C M, Goswami J N, Clark R N, et al. Character and spatial distribution of OH/H₂O on the surface of the Moon seen by M3 on Chandrayaan-1[J]. *Science* 2009, 326(5952): 568-572.
- [4] Sunshine J M, Farnham T L, Feaga L M, et al. Temporal and spatial variability of lunar hydration as observed by the deep impact spacecraft[J]. *Science* 2009, 326(5952): 565-568.
- [5] Spudis P D, Bussey D B J, Baloga S M, et al. Initial results for the north pole of the Moon from Mini-SAR, Chandrayaan-1 mission[J]. *Geophysical Research Letters* 2010, 37(6): 401-408.
- [6] Saal A E, Hauri E H, Cascio M L, et al. Volatile content of lunar volcanic glasses and the presence of water in the Moon's interior. *Nature* 454, 192-195[J]. *Nature* 2008, 454(7201): 192-195.
- [7] Boyce J W, Yang L, Rossman G R, et al. Lunar apatite with terrestrial volatile abundances[J]. *Nature* 2010, 466: 466-469.
- [8] Greenwood J P, Itoh S, Sakamoto N, et al. Water in Apollo rock samples and the D/H of lunar apatite[J]. *Lunar and Planetary Science Conference* 2010, 41: 2439.
- [9] Liu Y, Guan Y, Zhang Y, et al. Direct measurement of hydroxyl

- in the lunar regolith and the origin of lunar surface water[J]. *Nature Geoscience* 2012, 5(11): 779-782.
- [10] Hui H, Peslier A H, Zhang Y, et al. Water in lunar anorthosites and evidence for a wet early Moon[J]. *Nature Geoscience* 2013, 6(3): 177-180.
- [11] Hu Yongyun, Tian Feng, Zhong Shijie, et al. Recent progresses in comparative planetology—Summary of the session of comparative planetology at the 3rd conference of Earth System Sciences [J]. *Advances in Earth Science* 2014 29(11): 1 298-1 302. [胡永云, 田丰, 钟时杰, 等. 比较行星学研究进展——第三届地球系统科学大会比较行星学分会综述[J]. 地球科学进展, 2014, 29(11): 1 298-1 302.]
- [12] Mccubbin F M, Nekvasil H. Maskelynite-hosted apatite in the Chassigny meteorite: Insights into late-stage magmatic volatile evolution in Martian magmas[J]. *American Mineralogist* 2008, 93(4): 676-684.
- [13] Mathez E A, Webster J D. Partitioning behavior of chlorine and fluorine in the system apatite-silicate melt-fluid[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 2005, 69(5): 1 275-1 286.
- [14] Webster J D, Tappen C M, Mandeville C W. Partitioning behavior of chlorine and fluorine in the system apatite-melt-fluid. II: Felsic silicate systems at 200 MPa[J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 2009, 73(3): 559-581.
- [15] Wang K L, Zhang Y, Naab F U. Calibration for IR measurements of OH in apatite[J]. *American Mineralogist* 2011, 96(8/9): 1 392-1 397.
- [16] Levitt S R, Condrate R A. The polarized infrared spectra of hydroxyl ion in fluorapatite[J]. *Applied Spectroscopy* 1970, 24(2): 288-289.

The Quantitative IR Spectroscopic Determination of OH in Apatite Based on 1.4 μm

Chen Lin^{1 2}, Tang Hong^{1*}, Li Xiongyao¹, Ouyang Ziyuan¹, Wang Shijie³

(1. Lunar and Planetary Science Research Center, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang 550081, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3. State Key Laboratory of Environmental Geochemistry, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang 550081, China)

Abstract: Water plays an important role in nearly every aspect of geological processes as well as in the evolution of planetary bodies. Chang E-3 NIR spectra appeared weak peak of OH in the vicinity of signal 1.4 μm , it may represent the presence of water. In order to quantitatively calculate the water content, apatite as the research object in the paper. Through analyzing and validating the infrared spectrum correlation between 1.4 μm and 2.8 μm of the structure water in the apatite, we obtained its molar absorption coefficient in the infrared spectrum of 1.4 μm . IR spectra were collected on oriented. When the light vector E is parallel to the c-axis of the apatite crystal, H₂O concentration in apatite can be related to measured IR absorbance as follows: $C = \omega A / \epsilon \rho d$, which based on Beer-Lambert's law. This result can provide reference for the interpretation of Chang E-3 near-infrared spectral data of water signal. This method can provide the basis for the quantitative calculation of structure water in the near infrared spectrum in other moon minerals.

Key words: Apatite; NIR; OH; Molar absorption coefficient.

* **Foundation item:** Project supported by the National Natural Science Foundation of China "The form and thermal stability of water in lunar plagioclase by solar wind implantation" (No. 41403057); The Guizhou Province Science and Technology Fund "Simulation of infrared detection of water occurrence state on lunar surface" (No. [2013]2288).

First author: Chen Lin(1990-), male, Chengdu City, Sichuan Province, Master student. Research area include Lunar and Planetary Sciences. **E-mail:** chenlin@mail.gyig.ac.cn

Corresponding author: Tang Hong(1984-), female, Neijiang City, Sichuan Province, Associate Professor. Research area include lunar and planetary sciences. **E-mail:** tanghong@mail.gyig.ac.cn