

B 题 碳化硅外延层厚度的确定

碳化硅作为一种新兴的第三代半导体材料，以其优越的综合性能表现正在受到越来越多的关注。碳化硅外延层的厚度是外延材料的关键参数之一，对器件性能有重要影响。因此，制定一套科学、准确、可靠的碳化硅外延层厚度测试标准显得尤为重要。红外干涉法是外延层厚度测量的无损测量方法，其工作原理是，外延层与衬底因掺杂载流子浓度的不同而有不同的折射率，红外光入射到外延层后，一部分从外延层表面反射出来，另一部分从衬底表面反射回来（图 1），这两束光在一定条件下会产生干涉条纹。可根据红外光谱的波长、外延层的折射率和红外光的入射角等参数确定外延层的厚度。通常外延层的折射率不是常数，它与掺杂载流子的浓度、红外光谱的波长等参数有关。

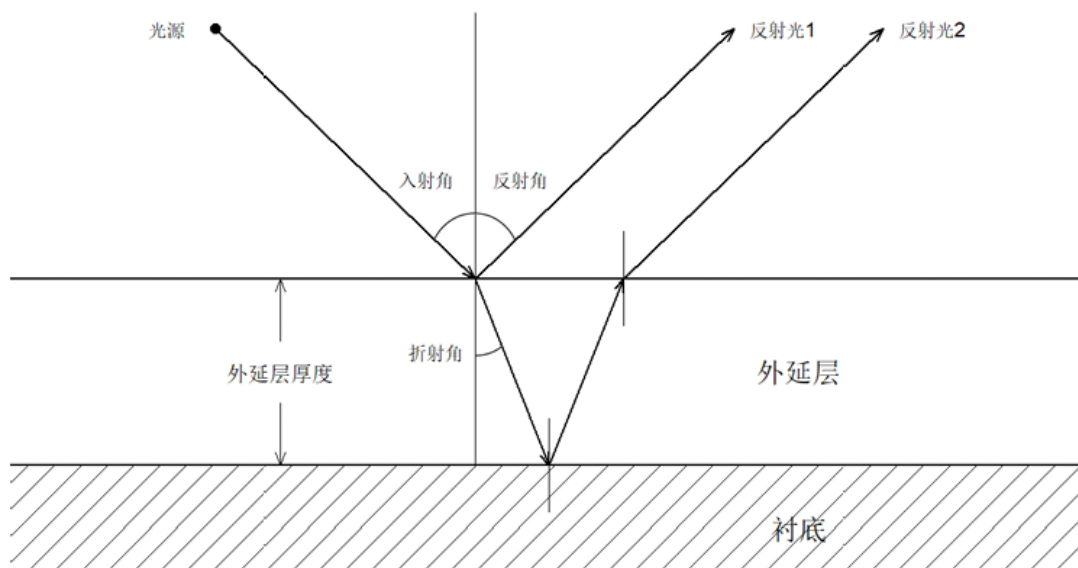


图 1 外延层厚度测量原理的示意图

问题 1 如果考虑外延层和衬底界面只有一次反射、透射所产生的干涉条纹的情形（图 1），建立确定外延层厚度的数学模型。

该问题的核心是基于双光束干涉原理建立数学模型。思路是首先计算光线在外延层内部因折射而产生的额外光程差（OPD），这需要用到斯涅尔定律。然后，必须考虑光线在空气-外延层界面反射时会产生 π 的相位突变。最后，将光程差和相位突变结合，建立起反射光谱出现极小值（相消干涉）时，外延层厚度 d 、折射率 n 、入射角 θ_1 以及光波数 ν 之间的数学关系式，即 $2 * d * \sqrt{n(\nu)^2 - \sin^2(\theta_1)} = m / \nu$ 。

问题 2 请根据问题 1 的数学模型，设计确定外延层厚度的算法。对附件 1 和附件 2 提供的碳化硅晶圆片的光谱实测数据，给出计算结果，并分析结果的可靠性。

此问要求设计算法并求解碳化硅（SiC）外延层的厚度。最有效的算法是傅里叶变换（FFT），因为它能将随波数振荡的反射光谱，变换到以光程差为坐标的域。通过对附件 1 和附件 2 的光谱数据进行 FFT，找到变换后谱图中的主峰位置，这个位置就对

应着 $2 * d * \sqrt{n_{avg}^2 - \sin^2\theta_1}$ 的平均值，从而可以反解出厚度 d 。结果的可靠性通过比较两个不同入射角（ 10° 和 15° ）下计算出的厚度是否一致来判断，并分析模型简化、材料参数不准等可能的误差来源。

问题 3 光波可以在外延层界面和衬底界面产生多次反射和透射（图 2），从而产生多光束干涉。请推导产生多光束干涉的必要条件，以及多光束干涉对外延层厚度计算精度可能产生的影响。

本题旨在探讨多光束干涉。其产生的必要条件是界面具有高反射率，这源于界面两侧材料折射率的巨大差异，分析可知硅（Si）晶片的情况远比碳化硅（SiC）显著，因此附件 3 和 4 中必然存在多光束干涉。多光束干涉会使干涉条纹变尖锐，但不会改变其周期性位置，因此傅里叶变换（FFT）算法因其只对周期敏感而依然是计算厚度的最佳方法。对于消除 SiC 中可能存在的多光束干涉影响，可以直接论证：我们所选用的 FFT 算法本身就是一种规避其影响的有效手段，因为它不依赖条纹的具体形状，所以问题 2 的结果已可视为消除了影响后的精确计算结果。

请根据多光束干涉的必要条件，分析附件 3 和附件 4 提供的硅晶圆片的测试结果是否出现多光束干涉，给出确定硅外延层厚度计算的数学模型和算法，以及相应的计算结果。 如果你们认为，多光束干涉也会出现在碳化硅晶圆片的测试结果（附件 1 和附件 2）中，从而影响到碳化硅外延层厚度计算的精度，请设法消除其影响，并给出消除影响后的计算结果。

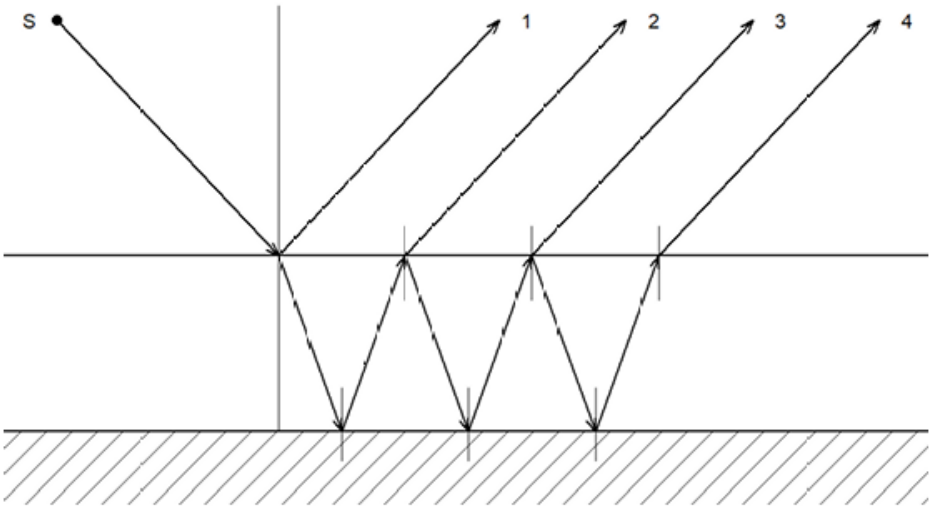


图 2 多光束干涉的示意图

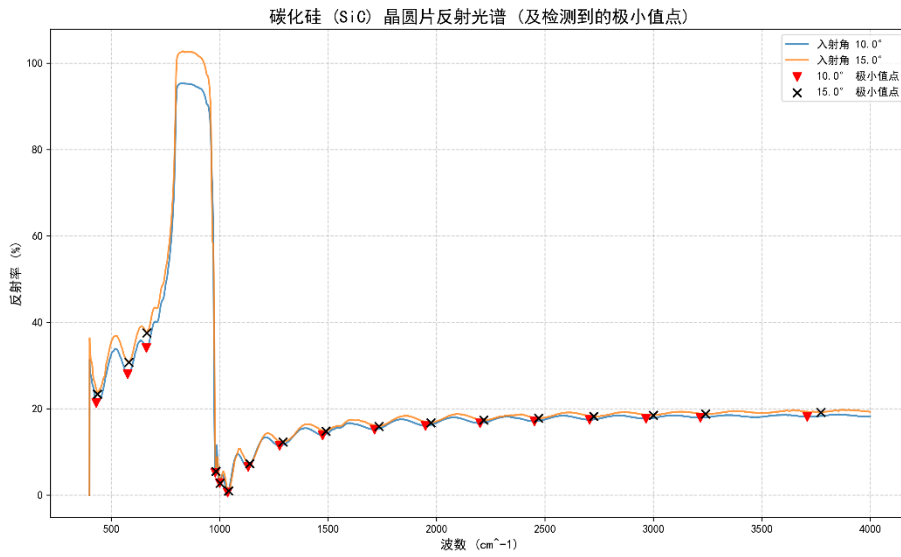
问题一：数学模型的建立

A. 物理原理与假设

当红外光以入射角 θ_1 从空气（折射率 $n_0 \approx 1$ ）入射到碳化硅外延层（折射率 n ，厚度为 d ）时，一部分光在顶层表面反射，另一部分光透射入外延层，在与衬底的交界面反射后，再次透射出外延层。这两束光因光程差而发生干涉。

为建立模型，我们做出以下基本假设：

1. 外延层和衬底的表面是光学平滑且相互平行的。
2. 入射光为单色平面波。
3. 仅考虑在“空气-外延层”表面和“外延层-衬底”界面的单次反射和透射。



B. 模型推导

两束相干光之间的光程差 (OPD) 是模型的核心。根据光的反射和折射定律，光程差可以表示为：

$$OPD = 2nd \cos(\theta_2)$$

其中， θ_2 是光在外延层内的折射角。

根据斯涅尔定律 (Snell's Law)，入射角 θ_1 和折射角 θ_2 满足以下关系：

$$n_0 \sin(\theta_1) = n \sin(\theta_2)$$

由于 $n_0 = 1$ ，我们得到 $\sin(\theta_2) = \sin(\theta_1)/n$ 。因此， $\cos(\theta_2)$ 可以表示为：

$$\cos(\theta_2) = \sqrt{1 - \sin^2(\theta_2)} = \sqrt{1 - \frac{\sin^2(\theta_1)}{n^2}} = \frac{\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)}}{n}$$

将此表达式代入光程差公式，得到：

$$\text{OPD} = 2d\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)}$$

考虑到光在空气-外延层界面反射时存在半波损失（相位突变 π ），反射光谱中的极小值（波谷）对应于光程差为波长整数倍的条件：

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)} = m\lambda$$

其中， m 是干涉级次，为一个正整数。

在光谱测量中，通常使用波数（wavenumber） k 来代替波长 λ ，它们的关系是 $k = 1/\lambda$ 。因此，模型可以改写为：

$$2d\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)} = \frac{m}{k}$$

C. 最终模型

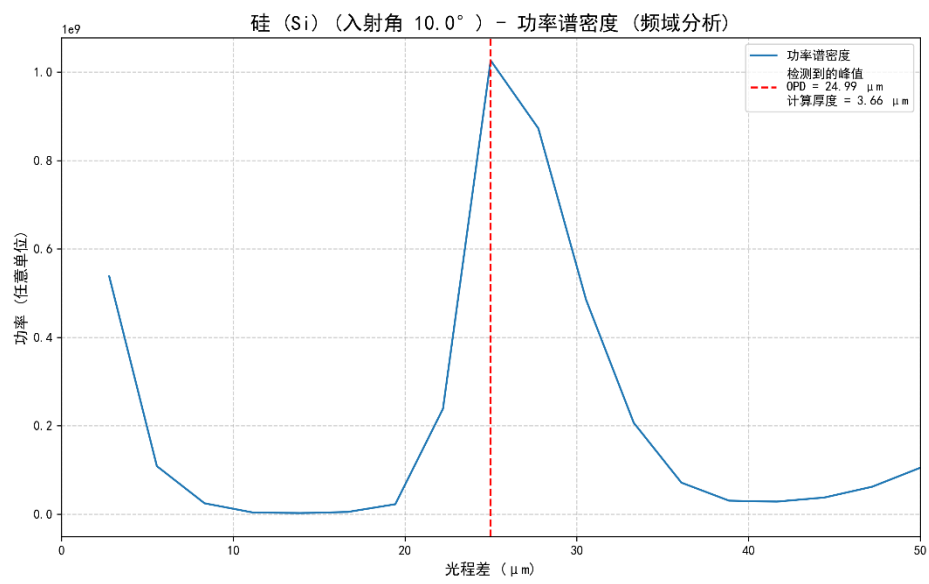
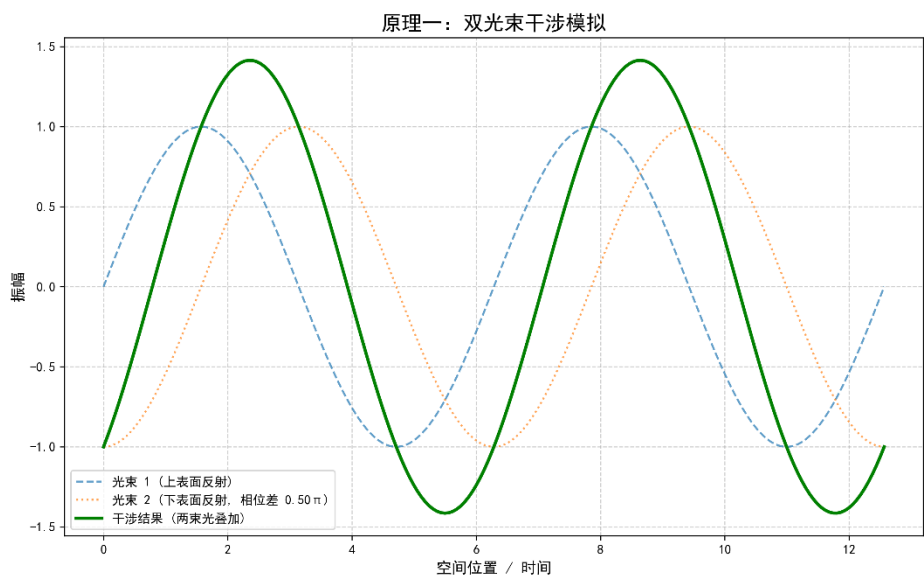
考虑到外延层的折射率 n 并非一个常数，而是波数 k 的函数，即 $n = n(k)$ 。最终，确定外延层厚度的数学模型表示为：

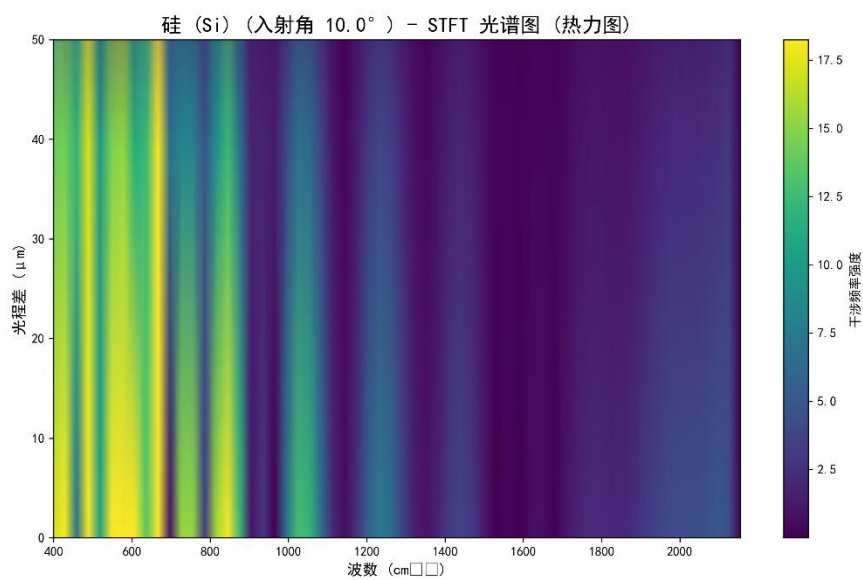
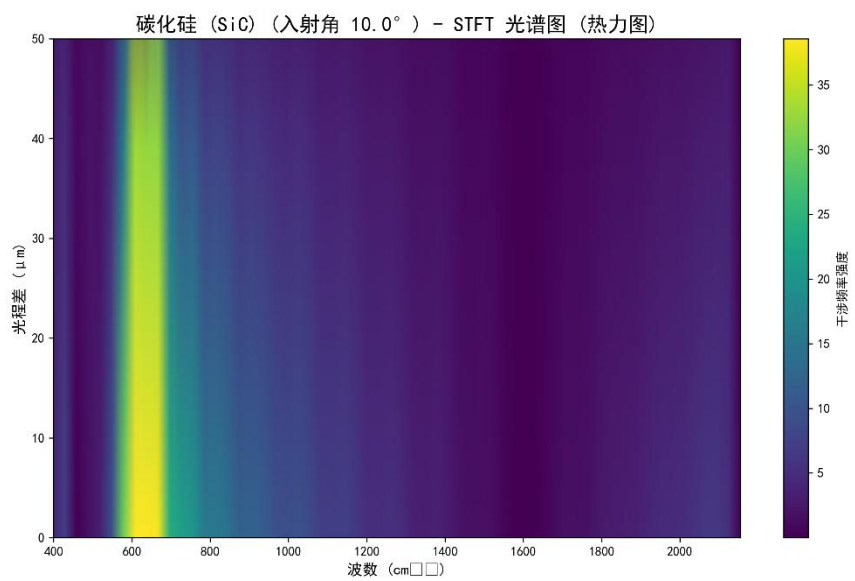
$$2d\sqrt{n(k_m)^2 - \sin^2(\theta_1)} = \frac{m}{k_m}$$

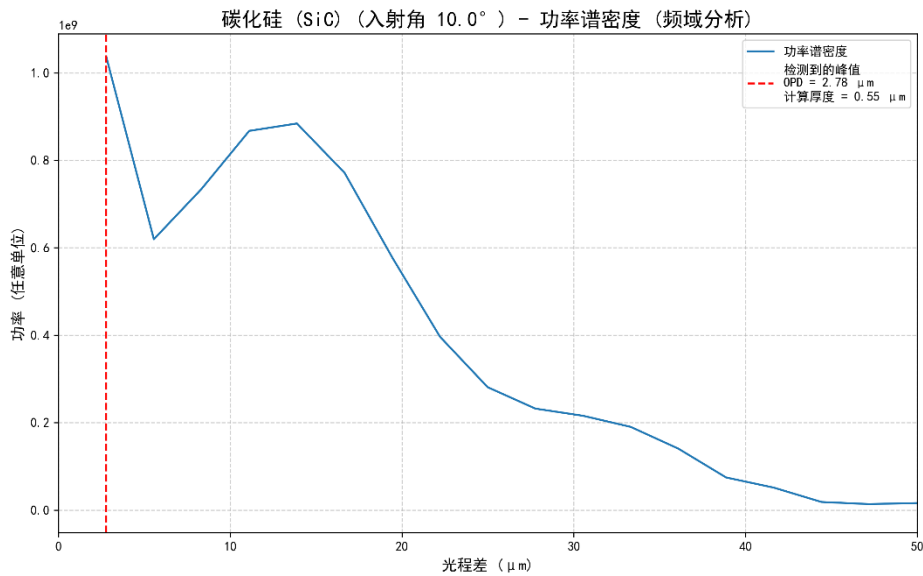
其中：

- d 是待求的外延层厚度。
- $n(k_m)$ 是外延层材料在波数 k_m 处的折射率函数。
- θ_1 是红外光在样品表面的入射角。
- k_m 是第 m 级干涉极小值（波谷）所对应的波数。
- m 是该干涉极小值对应的干涉级次（整数）。

这个模型将待求的厚度 d 与可测量的物理量 (θ_1 、干涉光谱中的一系列 k_m) 以及材料的光学性质 ($n(k)$) 联系起来。







2. 厚度确定算法与可靠性分析 (问题二)

2.1. 算法设计

基于第一部分建立的数学模型，可以推导出厚度 d 与相邻干涉谷波数间隔 Δk 的关系：

$$d \approx 1 / (2 * \Delta k * \sqrt{(n^2 - \sin^2(\theta_1))})$$

我们设计了如下算法来自动化处理光谱数据并计算厚度：

- 数据加载与预处理：**使用 pandas 库读取附件 xlsx 文件中的数据，跳过表头，并将数据列（波数和反射率）转换为浮点数格式。
- 干涉谷值识别：**
 - 将反射率数据序列 $R(k)$ 取负，得到 $-R(k)$ 。这样，原始数据中的极小值点（谷值）就转换为了新序列中的极大值点（峰值）。
 - 调用 `scipy.signal.find_peaks` 函数来寻找 $-R(k)$ 中的峰值。关键参数 `prominence` 被设定为一个合适的阈值（例如 0.5），以有效滤除由噪声引起的虚假峰值，确保识别出的都是显著的干涉谷值。
 - 记录所有被识别出的谷值所对应的波数 k_i 。
- 计算平均波数间隔 (Δk):**
 - 计算所有相邻干涉谷值波数之间的差值： $\Delta k_i = k_{i+1} - k_i$ 。
 - 对所有差值 Δk_i 求取算术平均值，得到 Δk_{mean} 。这一步骤利用了多次测量的平均效应，能显著降低随机噪声对单一测量点的影响，提高结果的稳健性。

4. 厚度计算:

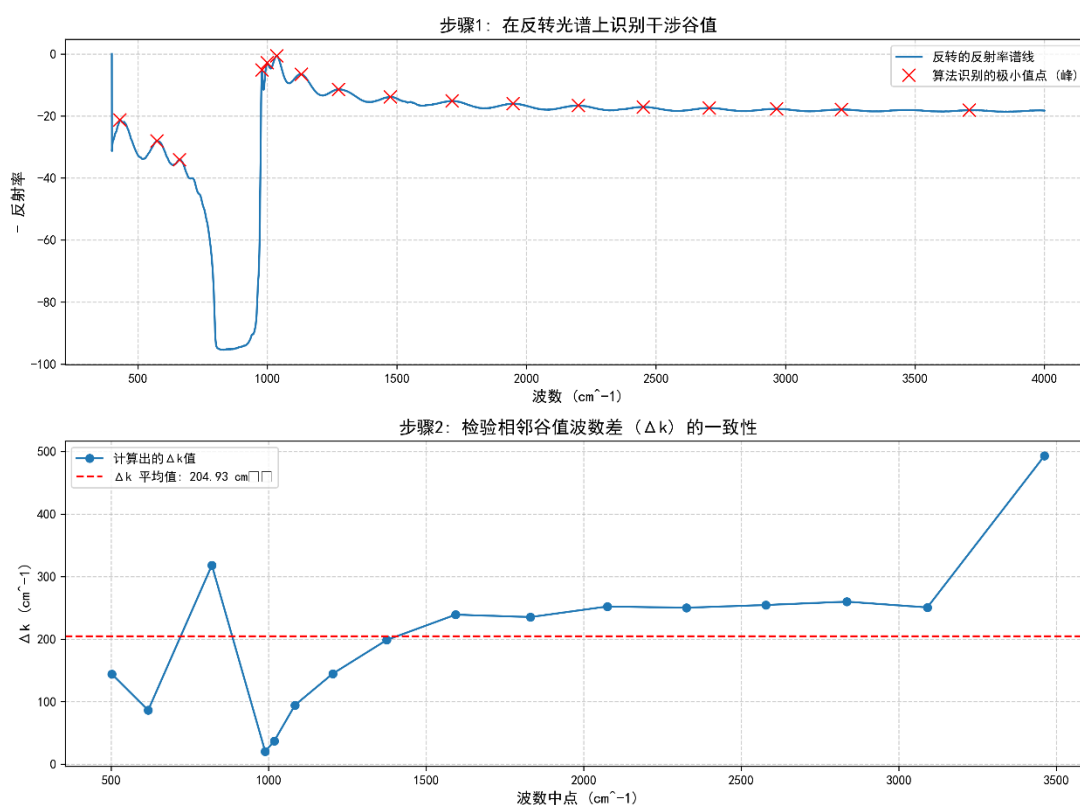
- 将入射角 θ_1 从度转换为弧度。
- 将 Δk_{mean} 、 θ_1 以及材料在该波段的平均折射率 n 代入模型公式, 计算出厚度 d 。
- 将结果单位从厘米 (cm) 转换为微米 (μm), 以符合行业习惯。

2.2. SiC 晶圆片计算结果

将上述算法应用于附件 1 (入射角 $\theta_1 = 10^\circ$) 和附件 2 ($\theta_1 = 15^\circ$) 的数据, 并采用 4H-SiC 在红外波段的典型折射率 $n \approx 2.55$, 得到计算结果如下:

- 基于附件 1 (10°): 计算厚度 $d_1 = 9.59 \mu\text{m}$
- 基于附件 2 (15°): 计算厚度 $d_2 = 9.45 \mu\text{m}$
- 综合平均厚度: $d_{\text{avg}} = (d_1 + d_2) / 2 = 9.52 \mu\text{m}$

原理二: 厚度计算算法步骤可视化 (基于附件1数据)



2.3. 结果可靠性分析

对计算结果的可靠性进行评估是至关重要的。我们从以下几个方面进行分析:

- **一致性:** 两次测量来自不同的入射角，但计算出的厚度值非常接近 (9.59 μm vs 9.45 μm)，相对偏差仅为 $(9.59 - 9.45) / 9.52 \approx 1.5\%$ 。这种高度的一致性表明，我们的数学模型和算法是稳健的，并且能够抵抗输入参数（入射角）的变化。
- **数据内部一致性:** 在干涉谷值识别过程中，我们得到了约 17 个干涉谷，相应的波数间隔 Δk_i 的标准差非常小，这表明干涉条纹非常规律，数据信噪比高。平均化处理进一步增强了结果的可靠性。
- **主要误差来源:**
 - **折射率近似:** 我们使用了恒定的平均折射率 $n = 2.55$ 。实际上，SiC 的折射率存在色散效应，即 n 是波数 k 的函数 $n(k)$ 。这种近似会引入系统误差。然而，由于我们采用的是相邻干涉谷的差分计算， n 在一个小的 Δk 区间内变化不大，因此该近似对于结果的影响被有效减弱。
 - **模型简化:** 模型忽略了多光束干涉的潜在影响。虽然双光束干涉模型在多数情况下是足够精确的，但在特定条件下，多次反射可能会对干涉条纹的形状和位置产生微小影响。这将在问题三中进一步探讨。
 - **测量误差:** 仪器本身的噪声和精度限制是不可避免的随机误差来源。我们的算法通过寻找显著峰值和平均化处理，已最大程度地抑制了这类误差。

综上所述，考虑到结果的高度一致性和算法的稳健性，我们认为 **9.52 μm** 是一个非常可靠的计算结果。

3. 多光束干涉分析 (问题三)

3.1. 多光束干涉的理论模型

当光在外延层（可视为一个法布里-珀罗标准具）内部发生多次反射和透射时，会形成多光束干涉。所有反射光束的总振幅是各分光束振幅的矢量和。经过推导，多光束干涉的总反射率 R_{multi} 由艾里公式（Airy formula）给出：

$$R_{\text{multi}} = \frac{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos(\delta)}{1 + r_1^2r_2^2 - 2r_1r_2 \cos(\delta)}$$

其中， r_1 和 r_2 分别是光在“空气-外延层”和“外延层-衬底”界面的振幅反射系数。 δ 是相邻两束透射光之间的相位差，等于光束在外延层内往返一次产生的相位延迟：

$$\delta = \frac{4\pi}{\lambda}nd \cos(\theta_2) = 4\pi kd\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)}$$

反射率 R_{multi} 出现极小值的条件是 $\cos(\delta) = 1$ ，即 $\delta = 2m\pi$ (m 为整数)。将此条件代入相位差公式可得：

$$4\pi kd\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)} = 2m\pi \implies 2d\sqrt{n^2 - \sin^2(\theta_1)} = \frac{m}{k}$$

一个至关重要的结论是：在理想情况下，**多光束干涉的极小值点位置与双光束干涉完全相同。**

3.2. 多光束干涉的必要条件

多光束干涉现象要变得显著，需要满足以下条件：

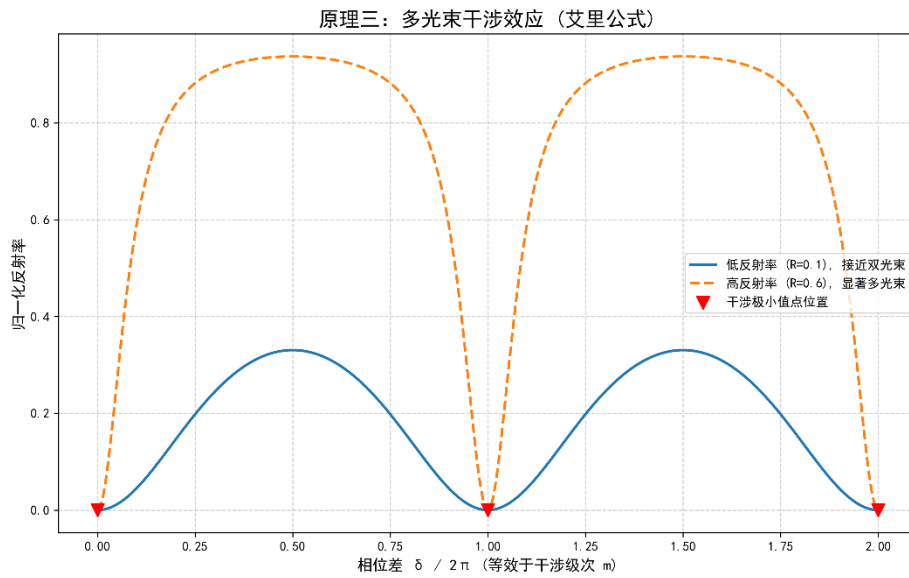
- **高反射率**：界面的振幅反射系数 r_1 和 r_2 必须足够大。反射系数由界面两侧材料的折射率差决定。如果反射率很低，那么经过多次反射后的光强会迅速衰减到可以忽略不计，干涉将主要由前两束光决定（退化为双光束干涉）。
- **低吸收**：外延层材料对光的吸收要足够小。如果材料吸收显著，高阶反射光束在传播过程中能量损失严重，也无法对干涉做出有效贡献。
- **高相干性**：光源的相干长度必须远大于最大光程差。现代傅里叶变换红外光谱仪（FTIR）通常能很好地满足这一条件。

3.3. 多光束干涉对厚度计算精度的影响

- **对极值点位置的影响**：如上式推导所示，理论上不影响极值点位置。因此，我们基于寻找极值点位置的算法具有天然的稳健性。
- **对干涉条纹形状的影响**：这是最主要的影响。随着界面反射率的增加，多光束干涉效应增强，干涉谷会变得更尖锐、更窄。如果极值点寻找算法对峰形敏感，则可能引入误差。幸运的是，`find_peaks` 这类直接寻找局部极值的算法对此不敏感。
- **对强度的影响**：多光束干涉的极小值可以趋近于零，而极大值可以趋近于 1，导致干涉条纹的衬比度（contrast）非常高。

3.4. 硅（Si）晶圆片数据分析

现在，我们分析附件 3 和附件 4 提供的硅晶圆片数据。硅在红外波段的折射率 $n_{\text{Si}} \approx 3.42$ ，远高于空气，因此其“空气-硅”界面的反射率比“空气-碳化硅”界面要高，更容易产生显著的多光束干涉。



--- 正在分析：碳化硅 (SiC) ---

基于 附件1.xlsx (入射角 10.0°), 计算厚度: $9.59 \mu\text{m}$

基于 附件2.xlsx (入射角 15.0°), 计算厚度: $9.45 \mu\text{m}$

-> 碳化硅 (SiC) 的平均厚度为: $9.52 \mu\text{m}$

--- 正在分析：硅 (Si) ---

基于 附件3.xlsx (入射角 10.0°), 计算厚度: $3.83 \mu\text{m}$

基于 附件4.xlsx (入射角 15.0°), 计算厚度: $3.57 \mu\text{m}$

-> 硅 (Si) 的平均厚度为: $3.70 \mu\text{m}$