
基于连续波峰干涉级数与反射光谱包络线法的外延层厚度研究

摘要

外延层厚度是半导体材料性能的关键参数，其精确测量对外延生长过程的调控和器件性能的优化至关重要。对此本文分别建立了双光束和多光束干涉下的外延层厚度求解模型，同时提出了基于实验数据的外延层厚度求解算法。

针对问题一：本文主要建立了双光束干涉下的外延层厚度求解模型。首先，为得到外延层厚的求解式，本文建立了光程差计算模型。依据斯涅尔定律以及入射角、折射角和外延层折射率之间的关系，推导出光程差表达式。考虑到存在半波损失，本文建立了半波损失修正模型对光程差进行修正。其次，由于外延层折射率并非常数，本文对 Sell meier 方程进行修正，得到了依据入射光波长求解外延层折射率的经验方程。最后，将干涉形成明纹或暗纹的条件与修正后的光程差表达式联立，推导得到了外延层厚度的求解表达式。

针对问题二：本文设计了基于连续波峰干涉级数的外延层厚度求解算法。首先，在求解外延层厚度之前，需要利用附件 1 与附件 2 中的波峰波谷数据，用最小二乘法对 Sell meier 修正方程中的参数进行拟合求解，得到外延层折射率关于入射光波长的解析表达式。其次，在得到了外延层厚度的具体取值后，利用附件 1 和附件 2 相邻波峰波谷的数据，由基于连续波峰干涉级数的外延层厚度求解算法，得到外延层的厚度 $d = 14.4278 \mu m$ 。最后，为了验证所求结果的合理性，本文建立了在双光束干涉下的反射率求解模型，将所求外延层的厚度代入反射率求解算法得到拟合曲线，并与实验数据曲线对比，得到拟合的均方根误差分别为 0.211 和 0.227。

针对问题三：本文建立了多光束干涉下反射率计算模型，以分析多光束干涉产生的必要条件。首先，本文从机理上重新分析了每条反射光线的光强，推导得到了多光束干涉条件下的反射光强与入射光强表达式，并建立多光束干涉下反射率求解模型。基于该模型分析了多光束干涉产生的必要条件与多光束干涉对外延层厚度测量精度的影响，同时依据推导得到的反射率求解模型与附件 3 和附件 4 的图像，得出其实验测量时出现了多光束干涉。其次，本文进一步建立了基于反射光谱包络线法求解的多光束干涉下外延层厚度求解模型，利用三次样条插值法拟合测试数据中的波峰波谷数据点，求得每个波长对应的反射率极值，并代入多光束干涉下外延层厚度求解模型，得到外延层厚度为 $d = 13.328 \mu m$ 。接着，为验证所求厚度的正确性，将得到的外延层厚度代入多光束干涉下反射率求解模型中，得到对附件 3 和附件 4 数据的拟合图像的均方根 RMSE 误差分别为 0.0864 和 0.1053，验证了结果的合理性。最后，本文认为多光束干涉会出现在附件 1 附件 2 的测试结果中，为消除影响，用多光束干涉下外延层厚度求解模型和反射率求解模型，对附件 1 附件 2 的实验数据重新求解，得到修正后的外延层厚度 $d = 20.81 \mu m$ ，对附件 1 附件 2 实验数据拟合的均方根误差为 0.058 和 0.049。

关键词：外延层厚度求解模型；三次样条插值；Sell meier 方程；包络线法

一、问题重述

1.1 问题背景

近年来，第三代半导体材料碳化硅因其优异的物理性能，在功率器件、高温高频器件等领域展现出巨大潜力，受到学术界和工业界的广泛关注。碳化硅外延层的质量是决定器件性能的关键因素之一，而外延层厚度作为核心参数，直接影响着器件的电学特性、击穿电压及可靠性。因此，建立一套科学、准确、可靠的碳化硅外延层厚度测试标准至关重要。红外干涉法作为一种无损伤的检测方法，凭借其高精度、非破坏性的优势，成为外延层厚度测量的理想选择。该方法基于外延层与衬底因掺杂浓度差异导致的折射率差异，利用红外光在两界面产生的干涉效应来确定外延层厚度。考虑到外延层折射率随掺杂载流子浓度和红外光波长的变化而变化，如何准确地利用红外干涉法，结合这些参数，对不同类型的碳化硅外延层进行精确的厚度测量，并建立相应的质量控制标准，是当前需要解决的问题。

1.2 问题要求

(1) 针对外延层和衬底界面只进行一次反射和透射所产生干涉条纹的情形，建立描述外延层厚度的数学模型。

(2) 针对第一问中所建立的外延层厚度数学模型，依据附件 1 附件 2 所给出的在入射角度为 10° 和 15° 下碳化硅晶圆片的光谱实测数据，设计确定外延层厚度的算法，并分析得到的结果的可靠性。

(3) 针对光波在外延层界面和衬底界面会产生多次反射和透射，从而形成多光束干涉的现象，推导产生多光束干涉的必要条件，并分析多光束干涉对外延层厚度计算精度可能产生的影响。同时，进一步依据推导得到的多光束干涉产生的必要条件，判断附件 3 与附件 4 中的实验数据是否出现了多光束干涉的情况，并建立求解硅外延层厚度的数学模型，设计相关算法计算结果。最后，评估多光束干涉的情况是否出现在了附件 1 与附件 2 实验测试的数据当中，影响了碳化硅外延层厚度的计算精度，请消除该影响并给出消除影响后的外延层厚度计算结果。

二、问题分析

2.1 问题一的分析

针对题目要求的光线只经过一次反射和透射的情形，本文需要明确红外光束在空气-外延层界面和外延层-衬底界面两次主要反射光之间的干涉产生原因，建立几何光学模型，分析入射角、折射角和折射率之间的关系，并利用斯涅尔定律连接角度和折射率，同时由几何关系计算出这两束光在传播路径上的光程差，因为题目说明外延层

的折射率不是常数，而是与其载流子浓度和红外光谱波长等参数有关，由于载流子浓度数据难以获得，故本文假设忽略了载流子浓度对折射率构成的影响，利用现有附件中的实验数据构建经验方程，根据红外光线波长的变化对外延层折射率进行修正。接着，考虑到物理反射过程中可能会发生半波损失，需要引入修正项来对光程差进行修正。最终，将干涉形成明纹或暗纹的条件与修正后的光程差表达式联立，推导得到外延层厚度的求解表达式。

2.2 问题二的分析

针对问题二，本文对附件中的实验数据进行了初步分析，绘制了入射角在 10° 和 15° 下的反射率随波数变化曲线，由图像观察到在 750 到 1000cm^{-1} 的波数范围内反射率存在急剧变化的异常波动，鉴于异常波动只占实验数据的少部分，故本文只选取波数大于 1500cm^{-1} 的占实验数据大部份的具有明显振荡周期且稳定的实验数据作为研究对象。本文发现不同角度下的反射率曲线其峰值和谷值的位置非常接近，这些极值点对应于两条光线在反射后发生相长干涉和相消干涉的条件，而其物理本质由光程差决定。

基于上述原理，本文的求解思路可以如下设计：首先，提取两入射角下反射率曲线的多个极值点波数，利用其对应关系联立方程组求解。每组极值点都可以得到一个包含未知厚度 d 和外延层折射 $n_s(\lambda)$ 的方程。而求解该方程之前首先需要利用数据拟合求解本文所建立的折射率 n_s 修正模型，得到修正模型后便依据波长求解出折射率。在获得折射率模型后，代入光程差公式即可求解得到外延层厚度 d ，但由于干涉级数 m 未知，本文进一步设计了干涉级数求解算法，通过遍历可能的 m 的取值，评估得到的外延层厚度的稳定性与一致性，确定最终的干涉级数与外延层厚度。

为验证求解厚度的合理性，本文由机理出发构建了反射率求解模型，将用算法求解到的外延层厚度代入反射率求解模型中，观察拟合图像与实验数据是否吻合。

2.3 问题三分析

问题三要求本文探究多光束干涉产生的必要条件，首先由直观分析光线在薄膜上下界面进行多次反射和透射时，如果每次到达界面时仍有足够的能量被反射，则会形成无数条反射光，即发生多光束干涉现象。对此，本文需要在机理上逐条分析各反射光线的振幅，进一步由数学化简，得到总反射光振幅的解析表达式，进而得到总反射光强和多光束干涉下反射率的精确表达式，通过对表达式进行深入分析，得到多光束干涉产生的必要条件。

为了判断附件 3 与附件 4 中硅晶圆片的实验测试结果是否出现多光束干涉的现象，本文绘制了入射角在 10° 和 15° 下的反射率随波数变化曲线，通过对曲线的波峰波谷变化趋势对本文推到的多光束干涉必要条件是否吻合，判断是否发生了多光束干涉，进一步的，本文建立了适用于多光束干涉下的外延层厚度模型，求解得到外延层厚度，同时为了验证结果的合理性，本文同样建立了适用于多光束干涉下的反射率求解模型，

将求得的外延层厚度代入反射率求解模型，得到拟合曲线图，依据拟合曲线与实验数据的拟合情况，验证结果的合理性。

最后，为了验证多光束干涉是否会出现附件 1 与附件 2 的实验测试中，本文利用建立的多光束干涉下的外延层厚度模型和反射率求解模型重新对第二问的数据进行的求解与交叉验证，并与未考虑多光束干涉的求解结果进行比较。

三、模型假设

为了适当地对模型进行合理简化，本文给出如下假设：

1. 假设空气-外延层与外延层-衬底两界面光学上平整，相互平行且尺寸远大于光斑以便于建立干涉模型并消除边缘去率的影响。
2. 假设环境为空气且折射率约为 1，同时测量期间温度恒定以消除外界介质波动与热折射率引起的相位漂移。
3. 假设载流子浓度近似均匀，且外延层载流子浓度低，衬底浓度高，原因是这样可以使两层的光学常数存在明显差异，从而在外延层-衬底界面产生足够强的反射，确保与表面的反射光线形成可见的干涉条纹
4. 假设各层物质光学性质各向同性且忽略碳化硅衬底可能存在的吸收，以避免考虑光线在各层传播时方向改变的情况来简化模型。

四、符号说明

符号	说明	单位
ΔL	光程差	μm
λ	入射光波长	μm
n_0	空气介质的折射率	无量纲
n_s	外延层介质折射率	无量纲
n_1	衬底层介质折射率	无量纲
θ_i	入射角角度	rad
θ_s	折射角角度	rad
d	外延层厚度	μm
m	干涉级数	无量纲
R	界面反射率	无量纲
R_{max}	反射率局部最大值	无量纲
R_{min}	反射率局部最小值	无量纲
δ	相位差	无量纲
r_1	空气-外延层界面的反射系数	无量纲
r_2	外延层-衬底界面的反射系数	无量纲

五、模型的建立与求解

5.1 问题一模型的建立与求解

5.1.1 模型准备

由图 1 所示，本文利用红外干涉法测量碳化硅外延层厚度，其核心主要计算是由光源处散发的红外光在空气-外延层界面发生反射形成的光束 1 与穿过外延层并经过外延层-衬底界面反射最终在空气-外延层界面折射形成的光束 2 在空间叠加形成的干涉条纹，干涉条纹的示意图如图 2 所示。

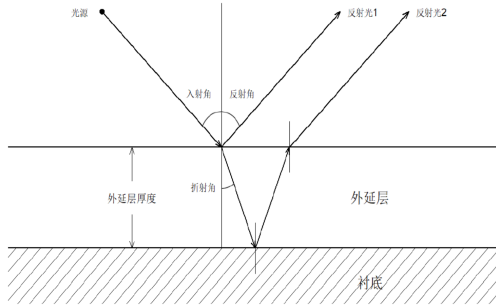


图 1 外延层厚度测量原理示意

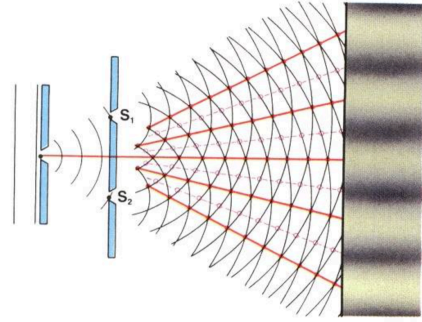


图 2 干涉现象示意图

反射光 1 与反射光 2 以如图 2 所示的波的形式传播时，当两束光波在空间某一点相遇时，若其相位差满足一定条件时，会分别形成明纹或暗纹。明纹和暗纹形成需要满足的条件为：

$$\Delta L = k\lambda, \quad (1)$$

$$\Delta L = (2k + 1)\lambda/2, \quad (2)$$

其中 k 的取值为 $1, 2, 3, \dots$ ， ΔL 为光线 1 与光线 2 的光程差， λ 表示光源发出的红外光波长。当光程差 ΔL 满足(1)式时，即达到干涉的最大值，形成明纹，当 ΔL 满足(2)式时，达到干涉的最小值，形成暗纹。

(1)(2)式中的光程差 ΔL 是指反射光 1 与反射光 2 由于走过的路径和介质的不同，所造成的光线传播有效距离之差。

5.1.2 光程差计算模型

为了利用红外干涉法求解碳化硅外延层厚度，需要首先计算红外光线经过空气-外延层界面和外延层-衬底界面反射后生成的反射光 1 与反射光 2 的光程差。两束反射光的传播路径示意图如图 3 所示。

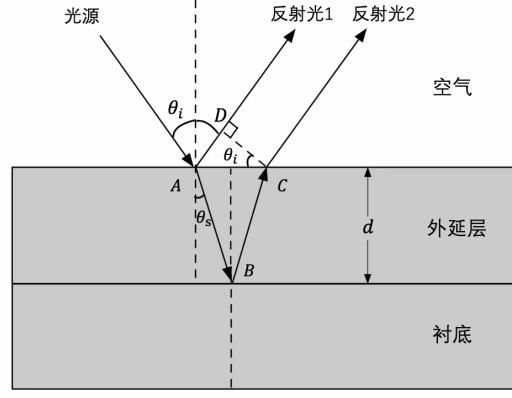


图 3 光线传播路径示意图

由图 3 所示，与反射光 1 相比，反射光 2 穿过外延层并在外延层-衬底界面反射回来，依据路线 AB，BC 以及 AD 即为两束光线所传播的不同路径差别^[1]。

光线 1 和光线 2 的光程差 ΔL 可表示为^[1]

$$\Delta L = n_s(AB + BC) - n_0 AD, \quad (3)$$

其中 n_s 表示此时外延层的折射率， n_0 表示空气介质的折射率。AB，BC 和 AD 为实际传播距离，具体表达式为：

$$\begin{cases} AB = d \tan \theta_s \\ AC = 2d \tan \theta_s \\ AD = 2d \tan \theta_s \sin \theta_i, \end{cases} \quad (4)$$

其中， d 表示外延层的厚度，单位为 μm ， θ_i 表示入射光线 1 与外延层上表面发生反射的入射角， θ_s 表示入射光线 1 在外延层下的折射角。

由斯涅尔定律可以得到入射角与折射角的正弦值与对应光线传播介质的折射率之间的关系为

$$n_0 \sin \theta_i = n_s \sin \theta_s. \quad (5)$$

故由(5)式得到

$$\sin \theta_s = \frac{n_0}{n_s} \sin \theta_i. \quad (6)$$

基于(6)式由三角恒等式可以得到

$$\cos \theta_s = \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_s} \sin \theta_i \right)^2}. \quad (7)$$

将(4)式(6)式以及(7)式代入(3)可以得到光程差 ΔL 的两种形式的具体表达式为

$$\begin{cases} \Delta L = \frac{2d}{\sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_s} \sin \theta_i \right)^2}} \left(n_s - \frac{n_0^2}{n_s} \sin^2 \theta_i \right) \\ \Delta L = 2d n_s \cos \theta_s, \end{cases} \quad (8)$$

其中(8)式的两个公式完全等价。

5.1.3 半波损失修正模型

当红外光从光疏介质射向光密介质时会发生半波损失，光线从空气层到外延层可能会发生一次半波损失，在外延层经过衬底反射可能会产生一次斑驳损失，故两束光的光程需要修改为

$$L_1 = n_0 AB + N_1 \frac{\lambda}{2} \quad (9)$$

$$L_2 = n_5 (AB + BC) + N_2 \frac{\lambda}{2}, \quad (10)$$

其中， L_1 表示光线 1 发生 N_1 次半波损失后的光程， L_2 表示光线 2 发生 N_2 次半波损失后的光程，令 $N = N_2 - N_1$ ，则(6)式可修改为

$$\Delta L = 2dn_s \cos \theta_s + N \frac{\lambda}{2}, \quad (11)$$

其中 N 为两束反射光所经历的半波损失之差。 N 的具体取值需要由空气层、外延层以及衬底层的折射率决定。

5.1.4 外延层折射率修正模型

由色散现象可知，外延层在不同波长的光线的照射下，其相应的折射率 n_s 也会发生变化，为了建立描述外延层厚度的数学模型，本文基于 Sell meier 方程建立对外延层的折射率修正模型，以依据不同的入射光波长得到对应的外延层折射率。

Sell meier 方程是一个经验公式，用于描述介质的折射率随入射光波长的变化关系，Sell meier 方程的一般形式如下：

$$n^2(\lambda) = 1 + \frac{B_1 \lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2 \lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3 \lambda^2}{\lambda^2 - C_3}, \quad (12)$$

其中 λ 表示真空中入射光波长， n 为介质的折射率， B_1 、 B_2 、 B_3 、 C_1 、 C_2 和 C_3 为 Sell meier 系数，这些系数由实验拟合得来。

依据红外光波长较短、能量大的性质，将 Sell meier 方程修正为如下形式^{[2][3]}：

$$n_s^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} - D\lambda^2, \quad (13)$$

其中，引入常数 A 用于调整基线与高频时的折射率，引入 $D\lambda^2$ 用于对远红外进行修正，用于描述远红外吸收带对色散的影响。 n_s 利用 Sell meier 修正方程进行求解将在问题二中进行。

5.1.5 外延层厚度模型

当反射光线 1 与反射光线 2 相互干涉形成明纹或暗纹时，可联立(1)式与(8)式得到：

$$2dn_s \cos \theta_s + N\lambda_0 = m\lambda_0, \quad (14)$$

其中 λ_0 表示光线干涉达到最值时的红外线波长， n_s 表示波长为 λ_0 时的外延层折射率， m 表示干涉级数， θ_s 为红外线进入外延层的折射角。(14)式中 λ_0 与 m 的取值将在第二问中由附件数据与本文设计的算法得到。

故由(14)式可以得到外延层厚度计算公式为

$$d = \frac{(m - N)\lambda_0}{2n_s \cos\theta_s}. \quad (15)$$

综上，结合本文所建立的光程差计算模型以及外延层折射率计算模型可以得到第一问外延层厚度数学模型为：

$$\begin{cases} d = \frac{(m - N)\lambda_0}{2n_s \cos\theta_s} \\ n_s^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} - D\lambda^2 \\ \Delta L = 2dn_s \cos\theta_s + N\frac{\lambda}{2} \\ \cos\theta_s = \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_s} \sin\theta_i\right)^2} \\ \sin\theta_s = \frac{n_0}{n_s} \sin\theta_i. \end{cases}$$

5.2 问题二算法的设计与求解

5.2.1 附件数据分析

本文分析了在入射角为 10° 与 15° 下光线反射率随红外光波数的变化，并绘制了变化曲线图：

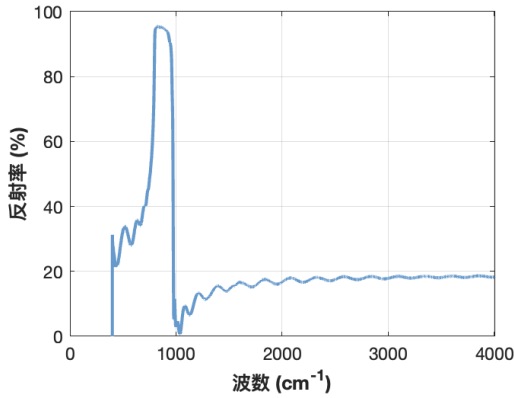


图 4 入射角 10° 下波数-反射率图

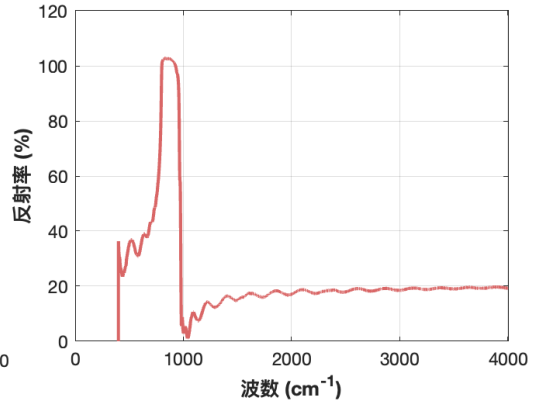


图 5 入射角 15° 下波数-反射率图

由图 4 图 5 可以看出，在入射角改变的前提下，两幅图都有大致相同的反射率随温度的变化趋势，同时两幅图都展现了一个非常明显的特征，即在波数为 750 到 1000cm^{-1} 的范围内材料的反射率极剧上升，随后又极剧下降。这种现象是典型的余晖带 Reststrahlen Band 特征^[6]，即峰值对应的波数区域 750 到 1000cm^{-1} 的范围是外延层材料晶格振动的共振频率，此时空气-外延层表面的反射率会非常大。

因为异常波动的波数范围只占实验数据的少部分，故本文主要利用波数大于 1500cm^{-1} 的占大部分的波数-反射率数据对外延层厚度进行计算。将附件 1 与附件 2 中波数大于 1500cm^{-1} 的数据放在一副图中进行研究，得到如下图 6 所示

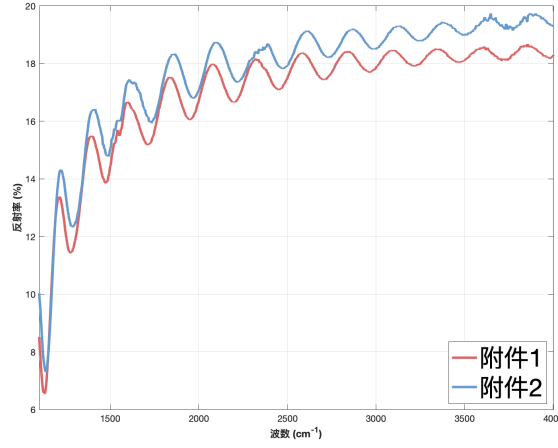


图 6 峰值对比图

由图 6 可以看出入射角 10° 下波数-反射率曲线与入射角 15° 下波数-反射率曲线的反射率峰值位置非常接近，且图中两条曲线的极大值与极小值都呈现周期性的振荡，当曲线到达局部极大值时，干涉达到最大，为明纹，当曲线到达局部极小值时，干涉达到最小，为暗纹，故图局部位置极值数据需要满足：

$$\Delta L = 2dn_s \cos \theta_s = m\lambda. \quad (16)$$

(16)式表明极值处需要满足明暗纹形成条件， m 为 $1/2$ 的奇数倍或偶数倍。

取图中蓝色曲线局部峰值与图中对应接近的红色曲线的局部峰值的数据为一组，共取 16 组，32 个数据得到如下数据表。

表 1 附件 1 对应峰值数据表

波峰序号	1	2	3	4	5	6	7	8
波数	1212.04	1277.13	1391.39	1713.92	1835.42	1950.64	2081.78	2198.93
波峰序号	9	10	11	12	13	14	15	16
波数	2452.53	2582.22	2705.64	2837.74	2965.50	3088.92	3217.65	3344.93

表 2 附件 2 对应峰值数据表

波峰序号	1	2	3	4	5	6	7	8
波数	1221.20	1291.11	1404.41	1730.80	1853.26	1970.41	2098.17	2219.66
波峰序号	9	10	11	12	13	14	15	16
波数	2475.67	2607.29	2734.08	2865.70	2988.64	3125.08	3249.95	3374.82

将表 1 与表 2 中相同波峰序号的波数值代入(14)式可以得到计算式：

$$\begin{cases} \Delta L_{1i} = 2dn_{s_{1i}}(\lambda) \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_{s_{1i}}(\lambda)} \sin \theta_1 \right)^2} = m_{1i} \lambda_{1i} \\ \Delta L_{2i} = 2dn_{s_{2i}}(\lambda) \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_{s_{2i}}(\lambda)} \sin \theta_2 \right)^2} = m_{2i} \lambda_{2i}, \end{cases} \quad (17)$$

(17)式中 θ_1 为 10° ， θ_2 为 15° ， ΔL_{1i} 表示入射角 10° 下所取的 16 个反射率峰值对应的光线的光程差， ΔL_{2j} 表示入射角为 15° 下所取的 16 个反射率峰值对应的光线的光程差， $n_{s_{1i}}$ 表示表 1 第*i*个波峰对应的光线在外延层的折射率， m_{1i} 表示入射角 10° 下的第*i*个波

峰对应的光线的干涉级数, λ_{1i} 为对应的光线波长。同时对表 1 与表 2 对应数据进行作差处理, 得到波峰位置差异图

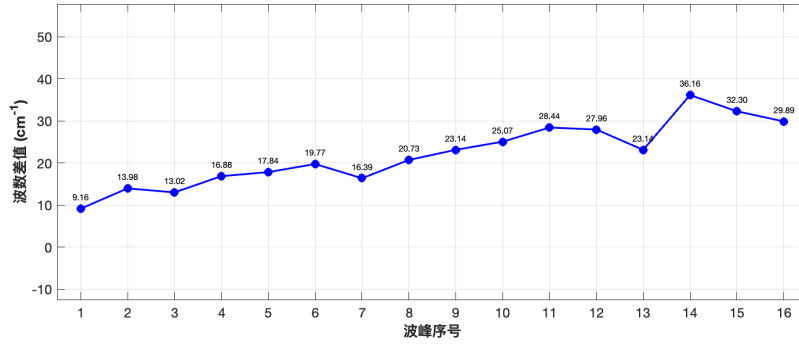


图 7 附件 1、2 波峰位置差异图

由图 6 与图 7 可以看出两条曲线的反射率峰值位置非常接近, 位置差异仅在 10 到 40cm^{-1} 之间, 依据实验数据得到的波数接近的现象, 本文推断其干涉级次 m_1 与 m_2 相等。根据薄膜干涉理论, 因为干涉级次 m 是一个必须为整数的物理量, 如果对应序号的两个峰值源自不同的干涉级次, 那么即使入射角仅有 5° 的变化, 其波数差值也应呈现出一个较大的、离散的跳跃。然而, 实际观测到的是波数仅发生微小且连续的偏移, 这表明该偏移是由入射角的微小变化所导致, 而峰值本身源于同一个干涉级次 m 。因此, 可以得到

$$m_{1i} = m_{2i}. \quad (18)$$

5.2.2 外延层折射率模型求解

由上节对于附件 1 与附件 2 中实验数据的分析, 本将主要针对表 1 与表 2 中的波峰相关数据对外延层折射率修正模型中 Sell meier 修正式(8)式的参数 A、B 和 C 进行拟合求解, 得到外延层折射率 n_s 随入射光波长变化的函数。

联立(17)式与(18)式得到

$$\frac{n_{s1i} \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_{s1i}} \sin \theta_1\right)^2}}{n_{s2i} \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_{s2i}} \sin \theta_2\right)^2}} = \frac{\lambda_{1i}}{\lambda_{2i}}. \quad (19)$$

进一步将(19)式化简, 并与 Sell meier 修正式(13)式联立得到

$$\begin{cases} \frac{n_{s1}^2 - \sin^2 \theta_1}{n_{s2}^2 - \sin^2 \theta_2} = \frac{\lambda_1^2}{\lambda_2^2} \\ n_s^2 = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C}. \end{cases} \quad (20)$$

将(20)式整理得到

$$E_1 = \lambda_{2i}^2 \left(A + \frac{B\lambda_1^2}{\lambda_1^2 - C} - \sin^2 \theta_1 \right) \quad (21)$$

$$E_2 = \lambda_{1i}^2 \left(A + \frac{B\lambda_2^2}{\lambda_2^2 - C} - \sin^2\theta_2 \right). \quad (22)$$

(21)式与(22)式分别定义了两个中间量 E_1 与 E_2 ，对于(19)式与(20)式需要利用表1与表2的16组数据对参数A、B和C拟合使得 E_1 与 E_2 值尽可能相等，为此构建损失函数 E_{error}

$$E_{error} = (E_2 - E_1)^2. \quad (23)$$

综上，本文为求解 Sell meier 修正式中的参数A、B和C，构建了一个以 E_{error} 为目标函数的优化问题，即寻找到一组最优的A、B和C的参数值，使得 E_{error} 的值达到最小，这意味着 E_1 与 E_2 对于表1与表2中所有数据点都尽可能相同，从而让求得的 Sell meier 修正式能够同时解释这两组数据。

本文采用了非线性最小二乘法对A、B和C进行了拟合求解，求解的伪代码思路如下表

表3 算法1 最小二乘法拟合

Input: 初始参数猜测: $\mathbf{x}_0 = [A_0, B_0, C_0]$, 参数下界 lb , 参数上界 ub , λ_1 : θ_1 等于 10° 下实验峰值波长数组, λ_2 : θ_2 等于 15° 下实验峰值波长数组
Output: 最优拟合参数 $[A, B, C]$
For $i = 1$ to 最大迭代次数 $Maxi$ 计算当前参数的成本值: $error_vector = cost_function(x)$ 计算当前误差平方和 E_{error} : $sum_squared_error = sum(error_vector^2)$ If $sum_squared_error <$ 当前最佳误差: 更新当前最佳参数: $best_x = x$ 更新当前最佳误差: $best_error = sum_squared_error$ 更新参数 x 确保 x 在范围 $[lb, ub]$ If 参数或误差变化 $<$ 容忍度 退出循环
Return: $best_x$

最终由 MATLAB 求解得到 A, B 和 C 的值为 2.003721, 0.000161, 0.010329, 折射率模型 $n_s(\lambda)$ 为:

$$n_s = 2.003721 + \frac{0.000161\lambda_2^2}{\lambda_2^2 - 0.010329}. \quad (24)$$

5.2.3 外延层厚度求解算法设计

得到折射率模型 $n_s(\lambda)$ 模型之后对于第一问中建立的外延层厚度模型(14)式的变式

$$2dn_s \sqrt{1 - \left(\frac{n_0}{n_s} \sin\theta_i \right)^2} = m\lambda_0 \quad (25)$$

对于(25)式，只需确定反射率峰值对应光线波长 λ_0 的干涉级数 m 即可唯一确定一个外延层厚度 d 。对此，本文利用表 1 与表 2 中的连续波峰处干涉级数 m 的对应关系以及其波长来寻找该波长对应的干涉级数 m ，本文主要利用表 1 后八组连续的波峰数据进行求解，求解的思路流程如下：

1. 输入数据：从实验数据中选取一段连续的，相邻的波峰值波长，本文即选取表 1 中的后 8 组数据，记为集合 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_8\}$ 。
2. 干涉级次假设：假设第一个波长对应的 λ_1 对应的干涉级次为 m ，由于这些峰是连续的，后续每个峰对应的级次将依次增加 $1/2$ ，因此 λ_i 的级次为 $m_i = m + (i - 1)/2$ 。
3. 计算外延层厚度：对于当前假设的 m ，利用公式(25)和每个 (λ_i, m_i) 对，分别计算出一个外延层厚度 d_i ，得到 8 个厚度值。
4. 评估稳定性：计算这 8 个厚度值 d_i 的方差，方差越小，说明这 8 个厚度值 d_i 的差异越小，即这 8 个 d_i 的值越接近，计算结果越稳定可靠。
5. 迭代优化与结果输出：遍历所有可能的整数 m ，从 0 开始，向上递增，同时重复步骤 2 到 4，最终得到使得方差最小的那个 m ，即找到了选取的连续的，相邻的波峰值波长对应的正确的干涉级数，此时计算出正确的干涉级数 m 求解得到的 d_i 的平均值作为本文求解得到的外延层厚度 d 。

该求解方法的算法流程图如下：

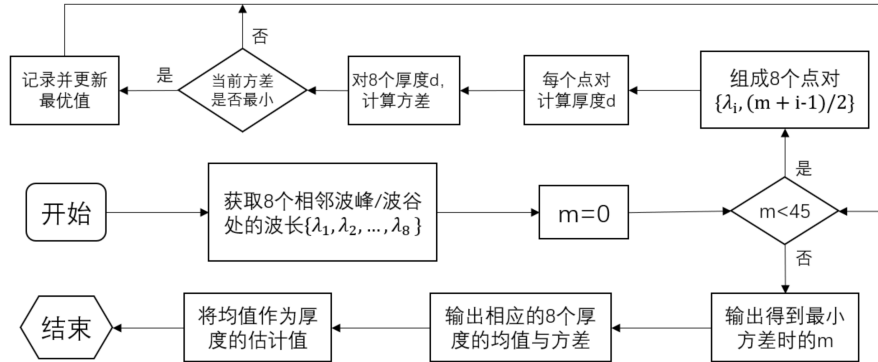


图 8 干涉级数迭代求解算法流程图

综上，该求解方法的核心即为正确的干涉级数 m 会使得由连续波峰计算出来的厚度值大小一致，而错误的 m 会使得计算出来的厚度值离散很大。

由 MATLAB 依据图 8 所示的求解思路遍历求解得到如下图 9 和图 10 的结果图：

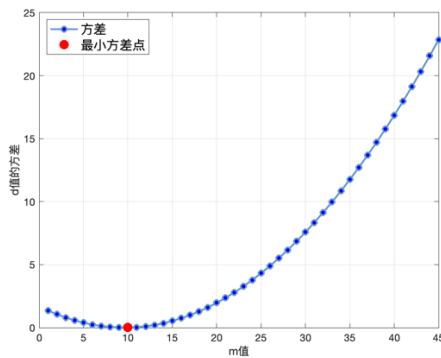


图 9 干涉级数 m -方差图

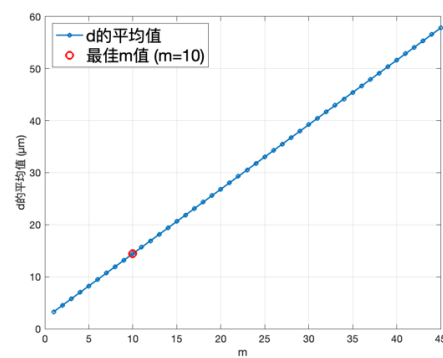


图 10 干涉级数 m -厚度均值图

由图 9 可知干涉级数 m 方差曲线有一条明显的极小值点，极小值点处的 m 即为波峰序号 9 对应波长的正确干涉级数， $m=10$ 并且由图 10 知对应的外延层厚度 d 为 $14.4278\mu m$ 。同时，图 10 干涉级数 m -厚度均值呈现为直线也验证了(25)式计算的正确性与此算法的正确性。

5.2.4 结果可靠性分析

为了分析计算结果 $d = 14.4278 \mu m$ 的可靠性，本文进一步的建立了反射率求解模型。

图 3 中反射光 1 的振幅表达式为^[5]

$$A_1 = A_0 r_1 \exp(-i\pi), \quad (26)$$

其中 A_0 为入射光线的振幅， r_1 为空气-外延层界面反射系数， $\exp(-i\pi)$ 为相位偏移项。反射光 2 的振幅表达式为

$$A_2 = A_0 t_1 t_1' r_2 \exp(-i(\pi + \delta)), \quad (27)$$

其中 t_1 表示光线从空气到外延层的透射系数， t_1' 表示光线从外延层到空气的透射系数， r_2 表示外延层-衬底界面的反射系数， δ 为相位差表达式为

$$\delta = \frac{2\pi\Delta L}{\lambda}. \quad (28)$$

则总反射振幅 $A = A_1 + A_2$ ，反射光光强 I_R 的表达式为

$$I_R = AA^* = I_0 [r_1^2 + t_1 t_1' r_1 r_2 e^{i\delta} + t_1 t_1' r_1 r_2 e^{-i\delta} + (t_1 t_1' r_2)^2].$$

由斯托克斯倒逆关系 $t_1 t_1' = (1 - r_1^2)$ ，反射率 R 的表达式为

$$R = r_1^2 + 2(1 - r_1^2)r_1 r_2 \cos\delta + (1 - r_1^2)^2 r_2^2. \quad (29)$$

为了方便求解，取近似

$$\begin{cases} r_1 = \frac{n_0 \cos\theta_i - n_s \cos\theta_s}{n_0 \cos\theta_i + n_s \cos\theta_s} \\ r_2 = \frac{n_s \cos\theta_s - n_1 \cos\theta_2}{n_s \cos\theta_s + n_1 \cos\theta_2} \end{cases}, \quad (30)$$

将求得的外延层厚度 d 与附件 1 和附件 2 的实验数据代入反射率求解模型中，绘制得到如下拟合图像图 11 与图 12:

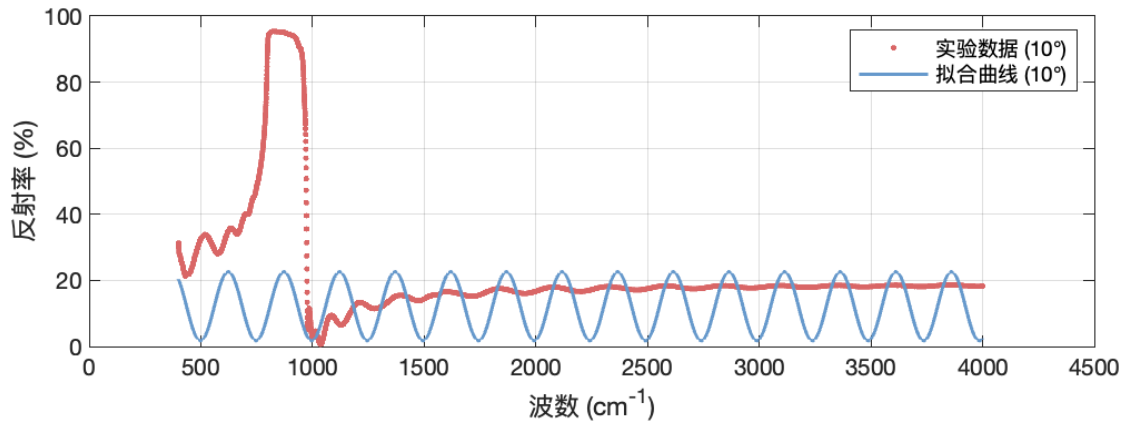


图 11 附件 1 数据拟合图

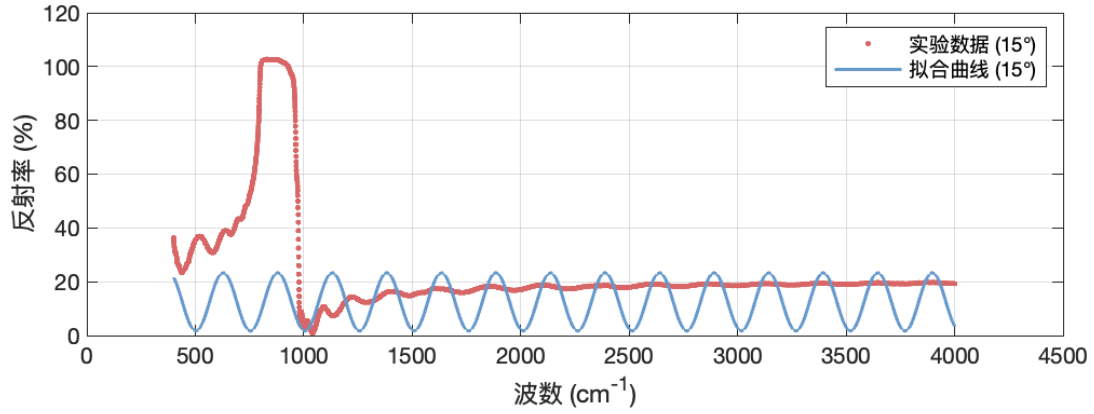


图 12 附件 2 数据拟合图

由图 11 与图 12 的拟合图像可以看出拟合曲线的峰值位置与实验数据的峰值位置相对应，但峰值大小有较大差距，拟合的均方根误差 RMSE 分别为 0.211 和 0.227，说明拟合存在一定差距，可能外延层厚度的测量还受其他因素影响。

5.3 问题三模型的建立与求解

5.3.1 多光束干涉的必要条件

与第一问中的双光束干涉相比，多光束干涉的区别在于最后反射出来的光线不止两条，而是有无数多条，这就要求光线在外延层反射后传播到达C点时光线不会完全透射出去，即光线到达C点时的反射率要足够大，使得光线能够被进一步反射，为此，要探究多光束干涉产生的必要条件，需要研究光线在各层分解面的反射率与折射率等性质。如下图 11 为多光束反射的示意图：

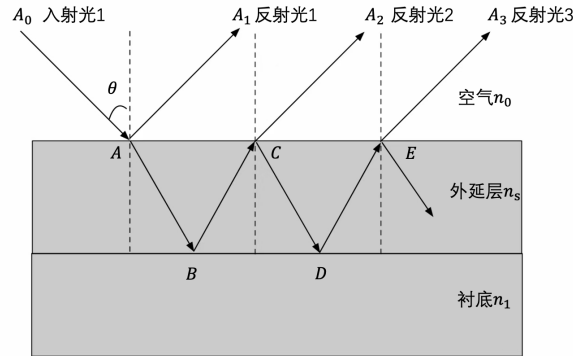


图 13 多光束反射示意图

对于入射光线 1 第一次经过空气-外延层界面反射得到的反射光 2，其振幅可表示为

$$A_1 = A_0 r_1 \exp(-i\pi), \quad (31)$$

其中， A_0 表示入射光的初始振幅，包含了光波强度与初始相位的信息， $\exp(-i\pi)$ 为相位延迟因子，用于补充半波损失带来的影响， r_1 为空气-外延层界面的反射系数，表示光有多少能量被反射。

反射光 2 在外延层-衬底界面反射并在空气-外延层界面透射后的振幅大小可表示为

$$A_2 = A_0 t_1 t_1' r_2 \exp(-i(\pi + \delta)), \quad (32)$$

其中 t_1 表示光线从空气到外延层的透射系数, t_1' 表示光线从外延层到空气的透射系数, r_2 表示外延层-衬底界面的反射系数, δ 为相位差。

同理, 反射光 3 的振幅可以表示为

$$A_3 = A_0 t_1 t_1' r_2 r_1' r_2 \exp(-2i(\pi + \delta)).$$

依次计算后续反射光线的振幅 A_4 、 A_5 、 $A_6 \dots$, 并将所有反射光线作和, 得到

$$A = A_1 + A_2 + A_3 + \dots + A_n. \quad (33)$$

将所有求得的反射光振幅表达式代入(33)式中得到

$$A = A_0 \left\{ r_1 e^{-i\pi} + t_1 t_1' r_2 e^{-i(\pi+\delta)} \left[1 + r_1 r_2 e^{-i(\pi+\delta)} + (r_1 r_2 e^{-i(\pi+\delta)})^2 + \dots \right] \right\}. \quad (34)$$

化简(34)式得到

$$A = A_0 \frac{r_1 + r_2 e^{-i\delta}}{1 + r_1 r_2 e^{-i\delta}}. \quad (35)$$

因为光强 I 的等于副振幅 A 模的平方, 即 $I = |A|^2$, 结合(26)式可以得到总反射光强 I_R 可以表示为

$$I_R = I_0 \frac{r_1^2 + 2r_1 r_2 \cos \delta + r_2^2}{1 + 2r_1 r_2 \cos \delta + r_1^2 r_2^2}. \quad (36)$$

故反射率 R 的表达式为

$$R = \frac{I_R}{I_0} = \frac{r_1^2 + 2r_1 r_2 \cos \delta + r_2^2}{1 + 2r_1 r_2 \cos \delta + r_1^2 r_2^2}. \quad (37)$$

反射率 R 表示反射光的强度与入射光强度的比值, 同时由已知总反射光的强度可以进一步得到透射光强度的表达式即

$$I_T = I_0 - I_R = \frac{(1 - r_1^2)(1 - r_2^2)}{1 + r_1^2 r_2^2 + 2r_1 r_2 \cos \delta} I_0. \quad (38)$$

将三角函数转换公式 $\cos \delta = \cos^2 \frac{\delta}{2} - \sin^2 \frac{\delta}{2}$, $\sin^2 \frac{\delta}{2} + \cos^2 \frac{\delta}{2} = 1$ 代入(28), 反射率 R 的表达式可转化为

$$R = \frac{(r_1 + r_2)^2 \cos^2 \frac{\delta}{2} + (r_1 - r_2)^2 \sin^2 \frac{\delta}{2}}{(1 + r_1 r_2)^2 \cos^2 \frac{\delta}{2} + (1 - r_1 r_2)^2 \sin^2 \frac{\delta}{2}}. \quad (39)$$

基于上述对于 I_T , I_R 与 R 的推理, 会发生多光束干涉的重要条件即是光线到达 C 点时光线不会被完全透射出去。发生多光束干涉的其中一个必要条件即为

$$I_T = I_0 - I_R \neq 0 \quad (40)$$

$$R = \frac{I_R}{I_0} \neq 1. \quad (41)$$

满足(40)(41)两个约束即可说明光线在空气-外延层界面与外延层-衬底界面之间不断反射, 同时每次接触到空气-外延层界面时都有一部分光线会透射出去, 确保了会有多条光束反射出去。

5.3.2 多光束干涉厚度精度影响

依据(37)式在多光束干涉情形下反射率表达式为

$$R = \frac{I_R}{I_0} = \frac{r_1^2 + 2r_1r_2\cos\delta + r_2^2}{1 + 2r_1r_2\cos\delta + r_1^2r_2^2}$$

对于(37)式当 r_1, r_2 较大时，多次反射光振幅叠加导致 R 的振荡幅度显著增大，峰谷更加尖锐。双光束干涉下的反射率计算式(29)忽略了高阶反射项，会映入系统误差。

由多光束干涉反射率 R 的极大值与极小值可以分别表示为^[6]

$$\begin{cases} R_{max} = \frac{(r_1 + r_2)^2}{(1 + r_1r_2)^2} \\ R_{min} = \frac{(r_1 - r_2)^2}{(1 - r_1r_2)^2} \end{cases} \quad (42)$$

其中极大值 R_{max} 在 $\delta = 0, \cos^2(0) = 1, \sin^2(0) = 0$ 时成立，极小值 R_{min} 在 $\delta = \pi$ 时， $\cos^2(\pi/2) = 0, \sin^2(\pi/2) = 1$ 时成立。由(42)式可以看出当界面反射率较高时，多光束模型的 R_{max} 和 R_{min} 与双光束干涉的结果差异显著，导致双光束模型误判极值位置，进而使厚度计算偏离真实值。

5.3.3 实验数据分析

对附件 3 与附件 4 中的实验数据用滤波器进行去噪处理，并将去噪后的实验数据绘制为如下图 14 与图 15 所示。

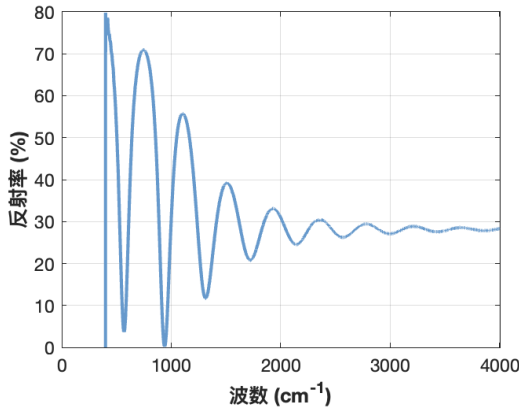


图 14 附件 3 波数-反射率曲线图

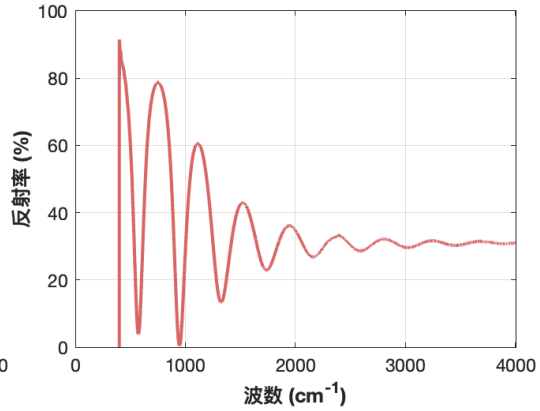


图 15 附件 4 波数-反射率曲线图

由图 14 与图 15 可以看出在入射光波长较短光强较大时，反射率峰值的振荡非常明显且尖锐，而与双光束干涉相比，多光束干涉涉及多次光线的反射，光线之间相互叠加后会产生高对比度的干涉图样，即反射率波峰和波谷值会非常明显，而这与图 12 与图 13 中所呈现的反射率变化趋势相吻合，表明在附件 2 与附件 3 的实验测试时发生了多光束干涉。

5.3.4 多光束干涉下外延层厚度模型

为了计算在多光束干涉情况下的外延层厚度，需要重新建立外延层厚度求解模型。

由于假设外延层的吸收忽略不计，故有 $|r_1| > |r_2|$ ，同时，考虑到 r_1 与 r_2 的正负，可以将(42)式改写

$$\frac{r_1 - r_2}{1 - r_1 r_2} = \sqrt{R_{min}}, \quad \frac{r_1 + r_2}{1 + r_1 r_2} = -\sqrt{R_{max}}. \quad (43)$$

将(43)式合并消去 r_2 整理得到等式：

$$(\sqrt{R_{max}} - \sqrt{R_{min}})r_1^2 + 2(1 - \sqrt{R_{max}R_{min}})r_1 + (\sqrt{R_{max}} + \sqrt{R_{min}}) = 0. \quad (44)$$

将(44)式求解得到

$$r_1 = \frac{-1 + \sqrt{R_{max}R_{min}} \pm \sqrt{4(1 - \sqrt{R_{max}R_{min}})^2 - 4(\sqrt{R_{max}} - \sqrt{R_{min}})^2}}{(R_{max} - R_{min})}. \quad (45)$$

考虑到 $|r_1| < 1$ ，故 r_1 的表达式为

$$r_1 = \frac{-1 + \sqrt{R_{max}R_{min}} + \sqrt{4(1 - \sqrt{R_{max}R_{min}})^2 - 4(\sqrt{R_{max}} - \sqrt{R_{min}})^2}}{(R_{max} - R_{min})}. \quad (46)$$

进一步可以得到

$$n_s = \frac{1 - r_1}{1 + r_1} n_0. \quad (47)$$

假设 R_{max} 与 R_{min} 为连续函数，由(46)式知对于每一个入射光波长 λ 都会有对应一个 r_1 ，进而有一个唯一对应的折射率 n_s ，有 R_{max} 与 R_{min} 可以计算出 n_s 的具体值，进一步可由 R_{max} 与 R_{min} 写出出外延层厚度的表达式：

$$d = \frac{M\lambda_1\lambda_2}{2[n_s(\lambda_1)\lambda_2 - n_s(\lambda_2)\lambda_1]}, \quad (48)$$

其中， M 表示的是两个反射率极大值或者极小值之间的干涉条纹数目， λ_1 和 λ_2 表示所取两个极大值或极小值对应的波长， $n_s(\lambda_1)$ 和 $n_s(\lambda_2)$ 表示相应的折射率。

综上，本文便针对发生多光束干涉情况下计算外延层厚度的数学模型：

$$d = \frac{M\lambda_1\lambda_2}{2[n_s(\lambda_1)\lambda_2 - n_s(\lambda_2)\lambda_1]} \quad \begin{cases} n_s = \frac{1 - r_1}{1 + r_1} n_0 \\ r_1 = \frac{-1 + \sqrt{R_{max}R_{min}} + \sqrt{4(1 - \sqrt{R_{max}R_{min}})^2 - 4(\sqrt{R_{max}} - \sqrt{R_{min}})^2}}{(R_{max} - R_{min})} \end{cases}$$

5.3.5 硅外延层厚度求解

依据上文建立的光束干涉下外延层厚度模型求解出硅外延层厚度，首先需要依据附件3与附件4中实验所测得的数据，拟合求解出峰值点的 R_{max} 与 R_{min} ，因为三次样条插值法对离散点的拟合曲线有较好的光滑性，故本文先对附件3的实验数据利用三次样条插值法来拟合图像中极大值与极小值的包络线，进而求得对应的 R_{max} 和 R_{min} 。

依据图 12 取图中的 8 组极大值点和 8 组极小值点用三次样条插值法进行拟合，用于拟合的极致点坐标如下表 4：

表 4 插值拟合点对应坐标表

极大值波数 σ	波长 λ	极小值波数 σ	波长 λ
741.977	0.709079	937.717	0.00230297
1105.49	0.567868	1314.73	0.116735
1504.69	0.391484	1721.64	0.208009
1927.98	0.330789	2144.94	0.245144
2346.94	0.303920	2568.24	0.262403
2782.78	0.294254	2996.84	0.2709
3213.97	0.28848	3419.65	0.275715
3650.59	0.286300	3850.67	0.277113

由 MATLAB 用三次样条插值法进行拟合后得到如下图 14 的拟合曲线包络图：

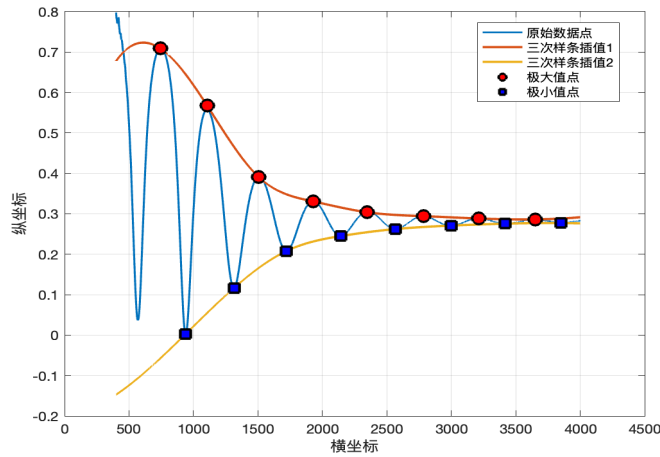


图 16 插值拟合包络图

由图 16 所示得到的两条光滑的三次样条插值拟合曲线对表 4 所取极值点数据有很好的拟合效果，通过图上两条曲线便可以求得任意的入射波长 λ 对应的反射率最值 R_{max} 与 R_{min} 。

利用表 4 中两两相邻一组的极大值或极小值点数据求解得到 R_{max} 与 R_{min} 代入多光束干涉下的外延层厚度模型公式中得到厚度，其中利用极大值点求解得到的外延层厚度为 16.225、13.237、12.778 和 11.856，利用极小值点求解得到的外延层厚度为 14.896、12.844、12.789 和 11.401。

将求解得到的 8 组外延层厚度取平均值即为本文在多光束干涉情形下求解得到的外延层厚度，最终结果为 $d = 13.328\mu m$ 。

5.3.6 外延层厚度结果验证分析

为了验证本文在多光束干涉条件下求解得到的外延层结果 $d = 13.328\mu m$ 的正确性，本文设计了两种验证方法，第一种是用附件 4 中的实验测量数据，重新按照本文

建立的多光束干涉外延层厚度求解模型计算外延层厚度，比较两者结果。第二种是建立多光束干涉下的反射率模型，将求解得到的 d 代入模型中得到拟合图像并进行比较。

对于验证方法一，与用附件 3 的求解过程相同，最终得到的外延层厚度为 $13.550\mu\text{m}$ ，与用附件 3 计算出来的结果几乎相同，验证了求解结果的合理性。

对于验证方法二，本文建立了多光束干涉下的反射率模型：

$$R = \frac{I_R}{I_0} = \frac{r_1^2 + 2r_1r_2\cos\delta + r_2^2}{1 + 2r_1r_2\cos\delta + r_1^2r_2^2}$$

$$\begin{cases} r_1 \approx r_s = \frac{n_1\cos\theta_1 - n_2\cos\theta_2}{n_1\cos\theta_1 + n_2\cos\theta_2} \\ \delta = \frac{4\pi n(\lambda)dcos\theta_2}{\lambda} \\ r_2 = \frac{\sqrt{R_{max}} - r_1}{1 - \sqrt{R_{max}}r_1} \end{cases}$$

反射式 R 即为上文推导得到的(37)式，在参数说明中为简化计算，将反射系数 r_1 近似为s波垂直偏振的反射系数 r_s ， δ 表示相位差， r_2 的表达式由(43)式推导得到。

将附件 3 与附件 4 中的实验数据代入多光束干涉下的反射率模型中得到求解结果的与实验数据的拟合图像如图 15 与图 16 所示：

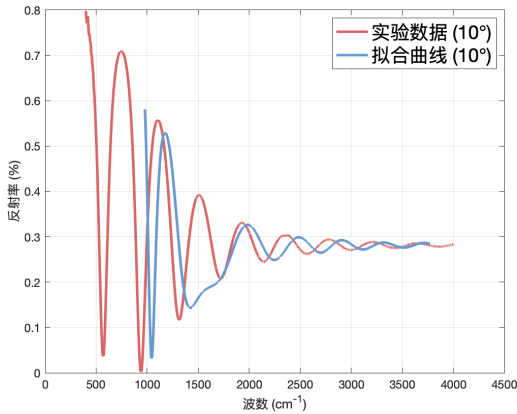


图 17 附件 3 数据拟合图

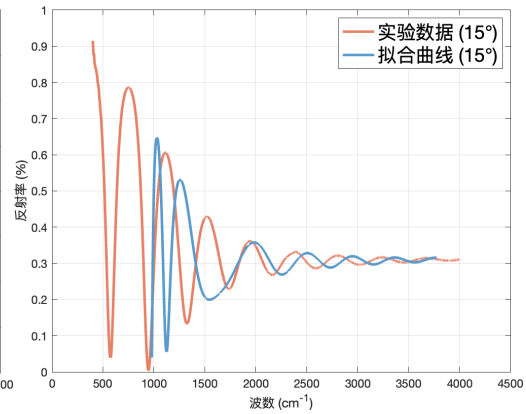


图 18 附件 4 数据拟合图

由图 17 与图 18 可以看出多光束干涉下的反射率模型的拟合曲线与实验数据曲线的波动趋势大抵相同，同时，两幅图拟合的均方根误差 RMSE 分别为 0.0864 与 0.1053，说明代入 $d = 13.328$ 的反射率模型有较好的拟合成果，再次验证了外延层厚度计算的正确性。

5.3.7 问题二模型修正求解

依据第二问只发生一次反射透射产生干涉条纹的情形而未考虑多光束干涉的影响，本文建立的模型对实验数据的拟合效果较差。故本文认为多光束干涉也会出现在附件 1 与附件 2 的实验测试中，影响了碳化硅外延层的计算精度。

为了消除多光束干涉模型对外延层厚度计算的影响，本文利用上文建立的多光束干涉下硅外延层厚度求解模型与包络线法重新对附件 1 与附件 2 中的数据进行求解，得到的三次样条插值拟合图，如图 19 和图 20 所示。

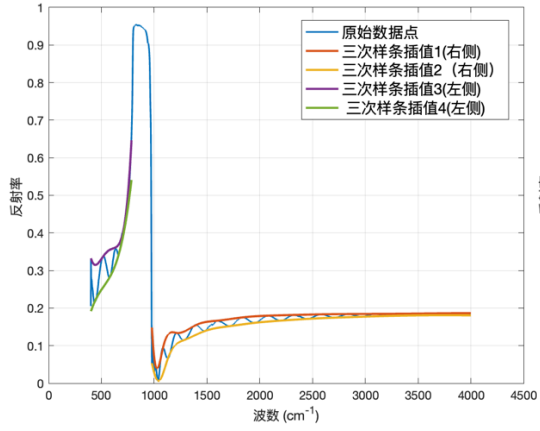


图 19 附件 1 极值点插值拟合包络图

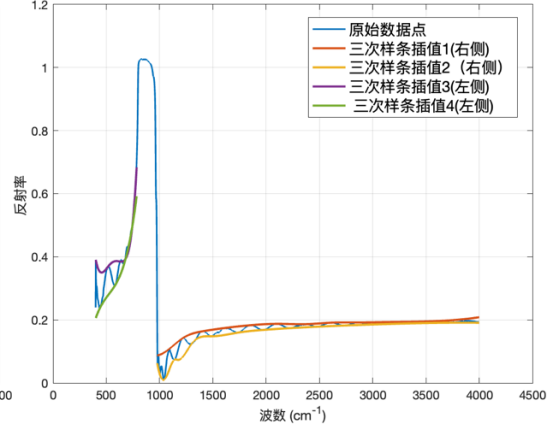


图 20 附件 2 极值点插值拟合包络图

利用拟合图像得到各极值点处的 R_{max} 与 R_{min} ，代入多光束干涉下硅外延层厚度求解模型，得到附件 1 与附件 2 求解的外延层厚度为 $20.81\mu m$ 和 $20.29\mu m$ 。

同时，将得到的修正后的外延层厚度代入多光束干涉下的反射率模型，得到如下图 21 与图 22 的拟合图像：

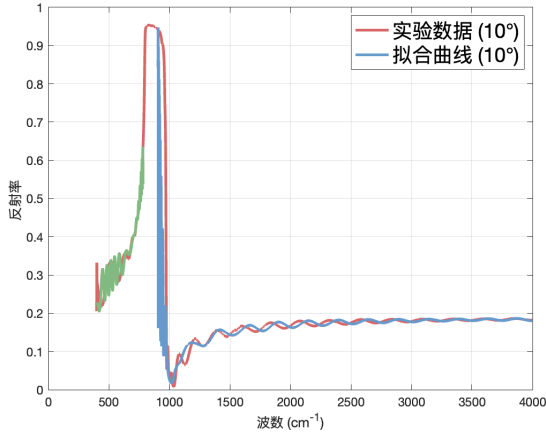


图 21 修正后附件 1 拟合图

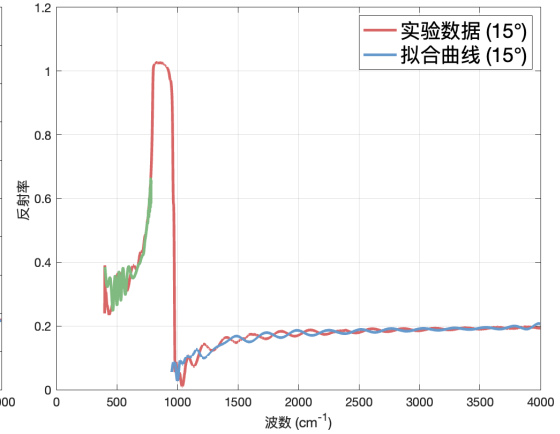


图 22 修正后附件 2 拟合图

图 21 与图 22 中红色曲线表示实验数据，蓝色与绿色曲线表示拟合数据。由于 Reststrahlen Band 特征，无法对全波数段利用包络线法进行求解，本文在反射率最大值处将图像分左右段，进行拟合，即蓝色与绿色曲线。由图可以直观的看出，将进行多光线干涉修正后得到的外延膜厚度 d ，代入多光束干涉下的反射率模型后，展现出非常好的拟合效果，均方根误差 RMSE 分别为 0.058 和 0.049。与未进行多光线干涉修正得到的结果图 10 相比，修正后均方根误差大大降低。这进一步说明附件 1 与附件 2 的测试数据中出现了多光束干涉。

六、模型和评价与推广

6.1 模型优点

1. 本文建立的模型具有全面性和适应性，模型覆盖了双光束和多光束干涉两种情况，能够灵活应对不同情况。问题一建立了光程差计算、半波损失修正和折射率修正的完整框架，问题三进一步推导了多光束干涉的必要条件，增强了模型的物理基础。
2. 本文建立了完善的结果验证机制，利用两组实验数据交叉验证外延层厚度的准确性，同时，本文进一步建立反射率求解模型，对外延层厚度进行第二层合理性检验。
3. 本文利用多光束干涉下的外延层厚度模型和反射率求解模型重新求解第二问时，与实验数据有非常好的拟合结果。

6.2 模型缺点

1. 本文利用多光束干涉下的外延层厚度模型和反射率求解模型重新求解第二问时，由于 Reststrahlen Band 特征，无法对全波段利用包络线法进行求解，而是在反射率最大值处将图像分左右段，进行拟合。此时，左段中明显的波峰波谷较少且集中，幅度变化大，不能完美拟合出反射率峰值 R_{max} 与 R_{min} ，故左端反射率拟合的均方根误差较大。
2. 折射率参数拟合所用到的 Sell meier 修正方程对于极值点提取严重依赖实验数据质量。附件 1-2 中 $750\text{--}1000\text{ cm}^{-1}$ 波段异常数据被剔除，若数据噪声更大，算法稳定性可能下降。

6.3 模型推广

1. 可以引入机器学习优化参数拟合，比如利用神经网络替代最小二乘法拟合 Sell meier 修正方程的参数，减少数据依赖性。
2. 扩展模型可以考虑温度效应和吸收损失，通过修正相位差 δ 的表达式提高极端环境精度。

七、参考文献

- [1] 用红外干涉法测量砷化镓外延层的厚度[J].仪器仪表通讯,1973,(02):7-10+6.
- [2] 桑梅,薛挺,于建,等.周期极化 KTP 晶体光参量振荡特性研究[J].光子学报,2003,(11):1286-1290.
- [3] D. Y. Zhang et al., "Study of the nonlinear optical properties of 7.5 mol% Nb:KTP crystals," in IEEE Journal of Quantum Electronics, vol. 35, no. 10, pp. 1447-1450, Oct. 1999.
- [4] DeepSeek, DeepSeek-R1-671B, 深度求索 (DeepSeek), 2025-09-06.
- [5] 郭小花,张明霞.多光束干涉的扩展研究[J].天水师范学院学报,2016,36(05):13-14.
- [6] 刘朝霞,楚合营,黄新成,等.反射光谱包络线法测量光电薄膜的光学常数和厚度[J].大学物理实验,2015,28(03):11-14+31.DOI:10.14139/j.cnki.cn22-1228.2015.03.004.

八、附录

支撑材料的文件列表
(1) T2.m (2) T2_fj3.m (3) T3_fj2.m (4) T3_fj1.m (5) T3_fj4.m (6) AI 工具使用详情.pdf (7) SG 滤波附件 1.xlsx (8) SG 滤波附件 2.xlsx
程序 1: T2.m
<pre> %利用新的反射率函数求解厚度 clear;clc;close all; % 读取数据 data1 = readmatrix('附件 1.xlsx'); data2 = readmatrix('附件 2.xlsx'); % 提取波数和反射率数据 wavenumber1 = data1(2:end,1); R1 = data1(2:end,2) / 100; % 转换为小数形式 wavenumber2 = data2(2:end,1); R2 = data2(2:end,2) / 100; % 转换为小数形式 R=[R1,R2]; lambda_a=1e4./wavenumber1; lambda_b=1e4./wavenumber2; n0=1.0; n2=2.65; % 实验测量的谐振波长位置 (波数 cm⁻¹) w1 = [1212.04, 1277.13,1391.39,1713.92, 1835.42,1950.64, 2081.78,2198.93,2452.53, 2582.22, 2705.64,2837.74,2965.50, 3088.92,3217.65, 3344.93]; </pre>

```

w2      =      [1221.20,1291.11,      1404.41,1730.80,      1853.26,1970.41,
2098.17,2219.66,2475.67,      2607.29,      2734.08,2865.70,2988.64,      3125.08,
3249.95,3374.82];

% 转换为波长 (μm)
lambda1 = 1e4./w1;
lambda2 = 1e4./w2;

% 合并所有实验数据点
lambda_all = [lambda1, lambda2];

% 初始参数猜测
x0 = [2.6, 0.01, 0.1, 0.0001]; % [A, B, C, D]

theta1 = 10;
theta2 = 15;

% 参数约束
lb = [2.0, 0.0001, 0.01, 0];
ub = [4.0, 10, 100, 1.2];

% 拟合选项
options = optimset('Display','iter', 'TolFun',1e-7, 'TolX',1e-7, 'MaxIter',1000, 'Algorithm','trust-region-reflective');

% 使用最小二乘法拟合
x_fit = lsqnonlin(@(x) cost_function(x, lambda1, lambda2, theta1, theta2), x0, lb, ub,
options);

% 输出拟合结果
A = x_fit(1);
B = x_fit(2);
C = x_fit(3);
D = x_fit(4);

fprintf('拟合得到的 Sellmeier 参数:\n');
fprintf('A = %.6f\n', A);
fprintf('B = %.6f\n', B);
fprintf('C = %.6f\n', C);
fprintf('D = %.6f\n', D);

```



```

% 计算 d 的值
w_1 = w1(9:16);
w_2 = w2(9:16);
lambda_1 = 1e4./w_1;
lambda_2 = 1e4./w_2;

n = 8; % 数据点数量
theta_1 = deg2rad(theta1);
theta_2 = deg2rad(theta2);

% 计算折射率
n_lambda = sellmeier_model(x_fit, lambda_2); %利用入射角为 15 度时的数据

% 计算 d 值（对于每个 m 值）
for m = 10:40
    m_i = m + (0:n-1)*0.5;

    % d 计算
    d = m_i .* lambda_2 ./ (2 * n_lambda .* sqrt(1 - (sin(theta_2)./n_lambda).^2));

    fprintf('m = %d, d = [%s] μm\n', m, num2str(d, '%.4f'));
end

% 成本函数
function error = cost_function(x, lambda1, lambda2, theta1, theta2)
    theta_1 = deg2rad(theta1);
    theta_2 = deg2rad(theta2);

    % 计算两个角度下的谐振条件
    n1 = sellmeier_model(x, lambda1);
    n2 = sellmeier_model(x, lambda2);

    % 计算谐振条件 ( $m\lambda = 2nd \cos\theta$ )
    % 这里假设 m 相同，通过比较两个角度的差异来拟合
    LHS = 2 * n1 .* sqrt(1 - (sin(theta_1)./n1).^2) ./ lambda1;
    RHS = 2 * n2 .* sqrt(1 - (sin(theta_2)./n2).^2) ./ lambda2;

    % 误差为两者的差异
    error = LHS - RHS;
end

```

```

% Sellmeier 色散模型
function n = sellmeier_model(x, lambda)
    A = x(1);
    B = x(2);
    C = x(3);
    D = x(4);

    % Sellmeier 方程:  $n^2 = A + B\lambda^2/(\lambda^2 - C) - D\lambda^2$ 
    n_sq = A + B * (lambda.^2) ./ (lambda.^2 - C) - D.*lambda.^2;

    n=sqrt(abs(n_sq));

end

% 使用拟合得到的 Sellmeier 参数计算 d 值
A_fit = x_fit(1);
B_fit = x_fit(2);
C_fit = x_fit(3);
D_fit = x_fit(4);

function ns = doping_dispersion_model(A, B, C , D,lambda)

    n_sq = A + B * (lambda.^2) ./ (lambda.^2 - C) - D.*lambda.^2;
    ns=sqrt(abs(n_sq));
end

n_points=8;
% 计算折射率（使用拟合参数）
n_lambda = sqrt(A_fit + B_fit * (lambda_2.^2) ./ (lambda_2.^2 - C_fit) -
D_fit.*lambda_2.^2);

% 初始化存储结果
d_results = zeros(31, n_points); % 31 个 m 值，每个有 8 个 d 值
d_variance = zeros(31, 1); % 存储每个 m 值对应的 d 方差

% 计算每个 m 值对应的 d 和方差
for m = 1:45

```

```

idx = m; % 索引从 1 开始

theta_2 = deg2rad(theta2);
m_i = m + (0:n_points-1)*0.5;

% 正确计算 d 值
%  $d = m\lambda / (2n \cos\theta) = m\lambda / (2n \sqrt{1 - \sin^2\theta/n^2})$ 
d = m_i .* lambda_2 ./ (2 * n_lambda .* sqrt(1 - (sin(theta_2)./n_lambda).^2));

d_results(idx, :) = d;
d_variance(idx) = var(d); % 计算方差

fprintf('m = %d, d = [%s]  $\mu\text{m}$ , 方差 = %.6f\n', m, num2str(d, '%.4f '), d_variance(idx));
end

% 找到方差最小的 m 值
[min_variance, min_idx] = min(d_variance);
best_m = min_idx ;
best_d_values = d_results(min_idx, :);
best_d_mean = mean(best_d_values);

fprintf('\n 最佳 m 值: %d\n', best_m);
fprintf('最佳 m 值对应的 d 方差: %.6f\n', min_variance);
fprintf('最佳 d 值: [%s]  $\mu\text{m}$ \n', num2str(best_d_values, '%.4f '));
fprintf('d 的平均值: %.4f  $\mu\text{m}$ \n', best_d_mean);
fprintf('d 的标准差: %.4f  $\mu\text{m}$ \n', std(best_d_values));

ns1 = doping_dispersion_model(A, B, C ,D,lambda_a); %折射率
ns2 = doping_dispersion_model(A, B, C ,D,lambda_b);

d=14.2885; %15 度数据拟合厚度

figure;
subplot(2,1,1);
plot(lambda_a,ns1,'r-','LineWidth',1.5);
xlabel('横坐标: 波长(10 度)');
ylabel('纵坐标: 折射率');
grid on;

```

```

subplot(2,1,2);
plot(lambda_b,ns2,'r','LineWidth',1.5);
xlabel('横坐标: 波长(15 度)');
ylabel('纵坐标: 折射率');

grid on;

%模型验证
R_fit_1 = main_model_dispersion(ns1, d, lambda_a, n0, n2, theta1);
R_fit_2 = main_model_dispersion(ns2, d, lambda_b, n0, n2, theta2);

res1=sum((R1-R_fit_1).^2)/length(R1);

RMSE1=sqrt(res1);

res2=sum((R2-R_fit_2).^2)/numel(R2);
RMSE2=sqrt(res2);

fprintf('RMSE1(10 度)为: %.3f\n',RMSE1);

fprintf('RMSE2 (15 度) 为: %.3f\n',RMSE2);

soft_blue = [0.4, 0.6, 0.8];
soft_red = [0.85, 0.4, 0.4];
soft_green = [0.5, 0.7, 0.5];
soft_purple = [0.7, 0.5, 0.7];

% 绘制结果
figure;
subplot(2,1,1);
plot(wavenumber1, R1*100, '.', 'Color', soft_red, 'MarkerSize', 6); hold on;
plot(wavenumber1, R_fit_1*100, '-', 'Color', soft_blue, 'LineWidth', 1.5);
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 (%)');
legend('实验数据 (10°)', '拟合曲线 (10°)');
grid on;

subplot(2,1,2);
plot(wavenumber2, R2*100, '.', 'Color', soft_red, 'MarkerSize', 6); hold on;

```

```

plot(wavenumber2, R_fit_2*100, '-', 'Color',soft_blue,'LineWidth', 1.5);
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 (%)');
legend('实验数据 (15°)', '拟合曲线 (15°)');
grid on;

soft_blue = [0.4, 0.6, 0.8];
soft_red = [0.85, 0.4, 0.4];
soft_green = [0.5, 0.7, 0.5];
soft_purple = [0.7, 0.5, 0.7];

% 绘制方差随 m 值变化
figure;
plot(1:45, d_variance, 'o-', 'Color',soft_blue, 'LineWidth', 2, 'MarkerFaceColor', 'b');
hold on;
plot(best_m, min_variance, 'ro', 'MarkerSize', 10, 'MarkerFaceColor', 'r');
xlabel('m 值');
ylabel('d 值的方差');
% title('不同 m 值对应的 d 值方差');
grid on;
legend('方差', '最小方差点', 'Location', 'northwest', 'FontSize', 14);

% 绘制最佳 m 值对应的 d 值
figure;
plot(1:n_points, best_d_values, 'b-o', 'LineWidth', 2, 'MarkerFaceColor', 'b');
hold on;
plot([1 n_points], [best_d_mean best_d_mean], 'r--', 'LineWidth', 2);
xlabel('数据点序号');
ylabel('d 值 (μm)');
title(sprintf('m = %d 时对应的 d 值', best_m));
grid on;
legend('d 值', '平均值');

function R = main_model_dispersion(ns, d, lambda, n0,n2, theta_i_deg)

    %光程差
    theta_i=deg2rad(theta_i_deg);

    sin_theta_s=(n0./ns).*sin(theta_i);

```

```

cos_theta_s=sqrt(1-sin_theta_s.^2);

sin_theta_2=(ns./n2).*sin_theta_s;

cos_theta_2=sqrt(1-sin_theta_2.^2);

delta_L=2*d.*ns.*cos_theta_s;

%相位延迟
delta=2*pi*delta_L./lambda;

%0-1 反射
r1=abs(n0*cos(theta_i)-ns.*cos_theta_s)/(n0*cos(theta_i)+ns.*cos_theta_s);

%1-2 反射
r2 = (ns.*cos_theta_s - n2*cos_theta_2) ./ (ns.*cos_theta_s + n2*cos_theta_2);

%反射率
R=r1.^2+2*(1-r1.^2).*r1.*r2.*cos(delta)+(1-r1.^2).*r2.^2;

end

```

程序 2: T3_fj3.m

```

clear; clc; close all;

%包络法求 d 附件三
% 读取数据
data1 = readmatrix('附件 3');

%空气折射率
n1=1.0;

%角度
theta1=10;

```

```

% 波数
w1 = data1(2:end, 1);

% 反射率
r1 = data1(2:end, 2) / 100;

% 附件三的极值点
data_3_max = [741.977, 0.709079;
              1105.49, 0.567868;
              1504.69, 0.391484;
              1927.98, 0.330789;
              2346.94, 0.30392;
              2782.78, 0.294254;
              3213.79, 0.28848;
              3650.59, 0.2863];
data_3_min = [937.717, 0.00230297;
              1314.73, 0.116735;
              1721.64, 0.208009;
              2144.94, 0.245144;
              2568.24, 0.262403;
              2996.84, 0.2709;
              3419.65, 0.275715;
              3850.67, 0.277113];

x=data_3_max(:,1);
y=data_3_max(:,2);

m=data_3_min(:,1);
n=data_3_min(:,2);

n_interp=spline(m,n,w1);

y_interp=spline(x,y,w1);

% 绘制原始数据点和插值曲线
figure;

```

```

plot(w1, r1, '-', 'MarkerSize', 8, 'LineWidth', 1.5); % 原始数据点
hold on;
plot(w1, y_interp, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(w1, n_interp, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
% 标出 data_3_max 的点（用红色圆圈）
scatter(data_3_max(:,1), data_3_max(:,2), 100, 'ro', 'filled', 'LineWidth', 2, 'MarkerEdgeColor', 'k');

% 标出 data_3_min 的点（用蓝色方块）
scatter(data_3_min(:,1), data_3_min(:,2), 100, 'bs', 'filled', 'LineWidth', 2, 'MarkerEdgeColor', 'k');

grid on;
xlabel('波数 (cm-1) ');
ylabel('反射率 ');
% title('三次样条插值拟合');
legend('原始数据点', '三次样条插值 1', '三次样条插值 2', '极大值点', '极小值点', 'Location', 'Best');

% 判断多光束干涉条件
R_max1 = max(r1);
R_min1 = min(r1);
V1 = (R_max1 - R_min1) / (R_max1 + R_min1);

if V1 >= 0.8
    fprintf('附件三 V1= %.2f, 出现多光束干涉\n', V1);
else
    fprintf('附件三 V1= %.2f, 未出现明显多光束干涉\n', V1);
end

N=lyg(y_interp,n_interp); %10 度

%求出外延层折射率 n2

n2=(1+N)./(1-N).*n1;

function N=lyg(Rmax,Rmin)

```

```

        N=(1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))-sqrt((1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))).^2-
(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin))).^2))./(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin)));
    end

    lambda_3=1e4./w1;

function d=main_fun(lambda1,lambda2,n1,n2)
    M=1;
    d=(M*lambda1*lambda2)/(2*abs(n1*lambda2-n2*lambda1));

end

data_1 = [3169, 4041, 4944, 5831, 6744];
data_2 = [3621, 4499, 5387, 6265, 7158];
lambda_1 = zeros(5,1);
lambda_2 = zeros(5,1);
n_1 = zeros(5,1);
n_2 = zeros(5,1);
d_max=zeros(4,1);
d_min=zeros(4,1);

for i=1:5
    lambda_1(i)=lambda_3(data_1(i));
    n_1(i)=n2(data_1(i));
    lambda_2(i)=lambda_3(data_2(i));
    n_2(i)=n2(data_2(i));
end

for i=1:4

    d_max(i) = main_fun(lambda_1(i), lambda_1(i+1),  n_1(i), n_1(i+1));

    d_min(i) = main_fun(lambda_2(i), lambda_2(i+1),  n_2(i), n_2(i+1));

end

```

```

d=13.52;

R3=test_fun(lambda_3,n2,theta1,n1,y_interp,d);

fprintf('极大值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_max));

fprintf('极小值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_min));


res=sum((r1(1200:7000)-R3(1200:7000)).^2)/length(r1);

RMSE=sqrt(mean(res));

fprintf('均方根误差:  %.4f\n',RMSE);


soft_blue = [0.4, 0.6, 0.8];
soft_red = [0.85, 0.4, 0.4];
soft_green = [0.5, 0.7, 0.5];
soft_purple = [0.7, 0.5, 0.7];


figure;
plot(w1,r1,'-','Color',soft_red,'LineWidth',2.5);
hold on;
plot(w1(1200:7000),R3(1200:7000),'-','Color',soft_blue,'LineWidth',2.5);
xlabel('波数 (cm^{-1})');
ylabel('反射率 (%)');
legend('实验数据 (10° )', '拟合曲线 (10° )','FontSize',18);
grid on;


function R=test_fun(lambda,n2,theta_i_deg,n1,Rmax,d)

    %光程差
    theta_i=deg2rad(theta_i_deg);

    sin_theta_2=(n1./n2).*sin(theta_i);

```

```

cos_theta_2=sqrt(1-sin_theta_2.^2);

delta_L=2*d.*n2.*cos_theta_2;

%相位延迟
delta=2*pi*delta_L./lambda;

r_1=(abs(n1*cos(theta_i)-
n2.*cos_theta_2))./(n1*cos(theta_i)+n2.*cos_theta_2);

r_2=(sqrt(abs(Rmax))-r_1)./(1-sqrt(abs(Rmax)).*r_1);

up=(r_1.^2+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_2.^2);
down=(1+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_1.^2.*r_2.^2);

for i=1:length(lambda)
    if down(i)<=0
        down(i)=1;
    end
end
R=up./(down);
end

```

程序 3:T3_fj2.m

```

clear;clc;close all;
%SG 滤波后使用包络法求解 d,即使用新的 R 函数---附件二

data2 = readmatrix('SG 滤波附件 2.xlsx');

wavenumber2 = data2(2:end,1);
R2 = data2(2:end,2) / 100; % 转换为小数形式

n0=1.0;

data_2_max=[
    % 862.025,1.02609;
    % 901.558,1.01659;
    % 957.002,0.907976;
    % 968.09,0.584105;
    988.339,0.0879397;

```

```

% 1093.92,0.107129;
1088.14,0.107091;
1222.17,0.143026;
1403.92,0.163797;
1609.79,0.174136;%2511
1853.74,0.183026;%3017
2098.65,0.187414;%3525
2385.51,0.186561;%4120
2612.59,0.191165;%4591
2866.67,0.191818;
3127.49,0.193038;
3378.19,0.194183;
3645.28,0.196913;
];

data_2_min=[
    982.554,0.0548735;
    1001.36,0.0279954;
    1040.41,0.00992004;
    1136.83,0.0730766;
    1173.8,0.0730709;
    1301.23,0.124412;
    1484.92,0.147966;
    1734.17,0.159523;%2769
    1971.86,0.168138;%3255
    2215.33,0.173668;%3767
    2479.53,0.178314;%4315
    2732.64,0.182153;%4840
    2985.27,0.185168;
    3254.77,0.187945;
    3496.79,0.189891;];

x1=data_2_max(:,1);
y1=data_2_max(:,2);

m1=data_2_min(:,1);
n1=data_2_min(:,2);

y1_interp=spline(x1,y1,wavenumber2);
n1_interp=spline(m1,n1,wavenumber2);

N=lyg(y1_interp,n1_interp);

```

```

data_2_max_left=[
    401.603,0.390504;%5
    518.758,0.36879;%241
    639.769,0.390618;%492
    702.926,0.401611;
    697.623,0.399694;%619
    % 738.121,0.4527;
    % %731.853,0.446994;%690
    735.228,0.485311;%696
    773.797,0.615187;
    % 806.581,0.947442
];

data_2_min_left=[435.834,0.234254;%66
    579.986,0.307663;%364
    664.357,0.375361;%547
    710.158,0.432392;%644
    % 739.567,0.453974%706
    741.495,0.491458%660
    % 782.957,0.63092
];

x1_r=data_2_max_left(:,1);
y1_r=data_2_max_left(:,2);

m1_r=data_2_min_left(:,1);
n1_r=data_2_min_left(:,2);

y1r_interp=spline(x1_r,y1_r,wavenumber2);
n1r_interp=spline(m1_r,n1_r,wavenumber2);

X=data2(5:800,1);% 5-696

M=data2(5:800,1); %66-706
%选择多项式次数
degree1=4;
degree2=3;

%对 data_2_max_left 拟合
p_max=polyfit(x1_r,y1_r,degree1);

```

```

y_fit=polyval(p_max,X);

%对 data_2_min_left 拟合
p_min=polyfit(m1_r,n1_r,degree2);
n_fit=polyval(p_min,M);

N1=lyg(y_fit,n_fit);
% 绘制原始数据点和插值曲线
figure;
plot(wavenumber2, R2, '-', 'MarkerSize', 8, 'LineWidth', 1.5); % 原始数据点
hold on;
plot(wavenumber2(1200:end), y1_interp(1200:end), 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(wavenumber2(1200:end), n1_interp(1200:end), 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(X, y_fit, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(M, n_fit, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
grid on;
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 ');
% title('三次样条插值拟合');
legend('原始数据点', '三次样条插值 1(右侧)', '三次样条插值 2 (右侧)', '三次样条插值 3(左侧)', '三次样条插值 4(左侧)', 'Location', 'Best', 'FontSize', 14);

theta2 = 15;

ns=real((1+N)./abs((1-N)).*n0);
ns_l=real((1+N1)./abs((1-N1)).*n0);

lambda_4=1e4./wavenumber2;

data_1=[2511,3017,3525,4120,4591];
data_2=[2769,3255,3767,4315,4840];
lambda_1 = zeros(5,1);
lambda_2 = zeros(5,1);
n_1 = zeros(5,1);
n_s = zeros(5,1);

```

```

d_max=zeros(4,1);
d_min=zeros(4,1);

for i=1:5
    lambda_1(i)=lambda_4(data_1(i));
    n_1(i)=ns(data_1(i));
    lambda_2(i)=lambda_4(data_2(i));
    n_2(i)=ns(data_2(i));
end

for i=1:4
    d_max(i) = main_fun(lambda_1(i), lambda_1(i+1), n_1(i), n_1(i+1));

    d_min(i) = main_fun(lambda_2(i), lambda_2(i+1), n_2(i), n_2(i+1));
end

fprintf('极大值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_max));

fprintf('极小值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_min));

ds_r=(mean(d_max+d_min)/2);

fprintf('平均厚度为 : %.2f\n', ds_r);

ds_l=149.34;

R_2=real(test_fun(lambda_4,ns,theta2,n0,y1_interp,ds_r));
R_2_l=real(test_fun(lambda_4(5:800),ns_l,theta2,n0,y_fit,ds_l));

R_N=R_2(1150:7460);

R2_N=R2(1150:7460);

res1=(sum((R_N-R2_N).^2))/length(R_N);
%
RMSE_r=sqrt(res1);

w2=wavenumber2(1150:7460);

```

```

w2_N=wavenumber2(5:796);
R_2_L=R_2_l(5:796);
R_N_1=R2(5:796);
res=(sum((R_N_1-R_2_L).^2))/length(R_N_1);
RMSE_l=sqrt(res);
fprintf('右侧均方根误差:  %.4f\n',RMSE_r);
fprintf('左侧均方根误差:  %.4f\n',RMSE_l);

soft_blue = [0.4, 0.6, 0.8];
soft_red = [0.85, 0.4, 0.4];
soft_green = [0.5, 0.73, 0.5];
soft_purple = [0.7, 0.5, 0.7];
soft_orange = [0.95, 0.6, 0.3];

% 绘制结果
figure;
plot(wavenumber2, R2, '-','Color',soft_red, 'LineWidth', 2.5);
hold on;
plot(w2, R_N, '-','Color',soft_blue, 'LineWidth', 2.5);
hold on;
plot(w2_N, R_2_L, '-','Color',soft_green, 'LineWidth', 2.5);
hold on;
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 ');
legend('实验数据 (15° )', '拟合曲线 (15° )','FontSize',18);
grid on;

function d=main_fun(lambda1,lambda2,n1,n2)
    M=1;
    d=(M*lambda1*lambda2)/(2*abs(n1*lambda2-n2*lambda1));

end

function N=lyg(Rmax,Rmin)

    N=(1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))-sqrt((1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))).^2-
(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin))).^2))./(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin)));
end

```



```

function R=test_fun(lambda,n2,theta_i_deg,n1,Rmax,d)

    %光程差
    theta_i=deg2rad(theta_i_deg);

    sin_theta_2=(n1./n2).*sin(theta_i);

    cos_theta_2=sqrt(1-sin_theta_2.^2);

    delta_L=2*d.*n2.*cos_theta_2;

    %相位延迟
    delta=2*pi*delta_L./lambda;

    r_1=(abs(n1*cos(theta_i)-
n2.*cos_theta_2))./(n1*cos(theta_i)+n2.*cos_theta_2);

    r_2=(sqrt(abs(Rmax))-r_1)./(1-sqrt(abs(Rmax)).*r_1);

    up=(r_1.^2+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_2.^2);
    down=(1+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_1.^2.*r_2.^2);

    for i=1:length(lambda)
        if down(i)<=0
            down(i)=1;
        end
    end
    R=up./(down);
end

```

程序 4:T3_fj1.m

```

clear;clc;close all;
%包络法求解 d --附件 1
% 读取数据
data1 = readmatrix('SG 滤波附件 1.xlsx');

% 提取波数和反射率数据
wavenumber1 = data1(2:end,1);
R1 = data1(2:end,2) / 100; % 转换为小数形式

```

```
n0=1.0; %空气折射率
```

```
%极值右侧优化拟合
```

```
data_1_max=[  
    985.447,0.115408;  
    1012.93,0.0467269;  
    1083.32,0.0942152;%1426  
    1213.97,0.133827;%1690  
    1393.32,0.154533;%2062  
    1599.66,0.16648;%2490  
    1837.35,0.175251;%2983  
    2075.99,0.179769;%3478  
    2322.36,0.181737;%3989  
    2580.29,0.183427;%4524  
    2833.4,0.184179;  
    3092.78,0.184558;  
    3341.07,0.184986;%-----  
    3610.57,0.185723;  
    3853.56,0.186361  
];
```

```
data_1_min=[  
    979.179,0.0524271;  
    999.426,0.0283412;  
    1035.69,0.0064851;%1320  
    1129.6,0.065557;%1515  
    1282.43,0.114747;%1832  
    1481.06,0.138934;%2244  
    1712.48,0.151833;%2724  
    1948.23,0.160612;%3213  
    2193.63,0.16656;%3722  
    2445.3,0.171094;%4244  
    2709.5,0.174553;  
    2962.61,0.176909;  
    3217.65,0.179046;  
    3477.03,0.180476;  
    3709.41,0.180983;  
];
```

```

x=data_1_max(:,1);
y=data_1_max(:,2);

m=data_1_min(:,1);
n_1=data_1_min(:,2);

y_interp=spline(x,y,wavenumber1);
n_interp=spline(m,n_1,wavenumber1);

N=lyg(y_interp,n_interp);

%极值左侧尝试拟合
data_1_max_left=[
    401.603,0.332402;%5
    515.383,0.337416;%241
    636.394,0.358722;%492
    702.926,0.401611;
    697.623,0.399694;%619
    % 738.121,0.4527;
    % %731.853,0.446994;%690
    734.746,0.450185;%696
    780.029,0.622442;
    % 806.581,0.947442
    ];

data_1_min_left=[431.012,0.213433;%66
    574.683,0.280397;%364
    662.91,0.340862;%547
    709.676,0.400585;%644
    % 739.567,0.453974%706
    717.39,0.406794%660
    % 782.957,0.63092
    ];

x1=data_1_max_left(:,1);
y1=data_1_max_left(:,2);

m1=data_1_min_left(:,1);
n1=data_1_min_left(:,2);

y1_interp=spline(x1,y1,wavenumber1);

```

```

n1_interp=spline(m1,n1,wavenumber1);

X=data1(5:800,1);% 5-696

M=data1(5:800,1); %66-706
%选择多项式次数
degree1=4;
degree2=3;

%对 data_1_max_left 拟合
p_max=polyfit(x1,y1,degree1);
y_fit=polyval(p_max,X);

%对 data_1_min_left 拟合
p_min=polyfit(m1,n1,degree2);
n_fit=polyval(p_min,M);

N1=lyg(y_fit,n_fit);
% 绘制原始数据点和插值曲线
figure;
plot(wavenumber1, R1, '-', 'MarkerSize', 8, 'LineWidth', 1.5); % 原始数据点
hold on;
plot(wavenumber1(1200:end), y_interp(1200:end), 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(wavenumber1(1200:end), n_interp(1200:end), 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(X, y_fit, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(M, n_fit, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
grid on;
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 ');
% title('三次样条插值拟合');
legend('原始数据点', '三次样条插值 1(右侧)', '三次样条插值 2 (右侧)', '三次样条插值 3(左侧)', '三次样条插值 4(左侧)', 'Location', 'Best', 'FontSize', 14);

theta1 = 10;

ns=real((1+N)./abs((1-N)).*n0);

```

```

ns_1=real((1+N1)./abs((1-N1)).*n0);

lambda_3=1e4./wavenumber1;

%
data_1 = [2490,2983, 3478, 3989, 4524];
data_2 = [2244,2724,3213,3722,4244];
% data_1=[5,241,492,619,690];
% data_2=[66,364,547,644,660];

lambda_1 = zeros(5,1);
lambda_2 = zeros(5,1);
n_1 = zeros(5,1);
n_s = zeros(5,1);
d_max=zeros(4,1);
d_min=zeros(4,1);

for i=1:5
    lambda_1(i)=lambda_3(data_1(i));
    n_1(i)=ns(data_1(i));
    lambda_2(i)=lambda_3(data_2(i));
    n_2(i)=ns(data_2(i));
end

for i=1:4

    d_max(i) = main_fun(lambda_1(i), lambda_1(i+1),  n_1(i), n_1(i+1));

    d_min(i) = main_fun(lambda_2(i), lambda_2(i+1),  n_2(i), n_2(i+1));

end

fprintf('极大值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_max));

fprintf('极小值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_min));

ds_r=(mean(d_max+d_min)/2);
%
fprintf('平均厚度为 : %.2f\n', ds_r);

```

```

ds_r=20.81;%拟合得到的右侧厚度
ds_l=149.34;
R_2=real(test_fun(lambda_3,ns,theta1,n0,y_interp,ds_r));

R_2_l=real(test_fun(lambda_3(5:800),ns_l,theta1,n0,y_fit,ds_l));

R_N=R_2(1052:7460);
%
R2_N=R1(1052:7460);

res1=(sum((R_N-R2_N).^2))/length(R_N);
%
RMSE_r=sqrt(res1);

w1=wavenumber1(1052:7460);
w1_N=wavenumber1(5:796);
R_2_L=R_2_l(5:796);
R_N_l=R1(5:796);
res=(sum((R_N_l-R_2_L).^2))/length(R_N_l);
RMSE_l=sqrt(res);
fprintf('右侧均方根误差:  %.4f\n',RMSE_r);
fprintf('左侧均方根误差:  %.4f\n',RMSE_l);

% 绘制结果
figure;

soft_blue = [0.4, 0.6, 0.8];
soft_red = [0.85, 0.4, 0.4];
soft_green = [0.5, 0.73, 0.5];
soft_purple = [0.7, 0.5, 0.7];
soft_orange = [0.95, 0.6, 0.3];

plot(wavenumber1, R1, '-', 'Color', soft_red, 'LineWidth', 2.5);
hold on;
plot(w1, R_N, '-', 'Color', soft_blue, 'LineWidth', 2.5);
hold on;
plot(w1_N, R_2_L, '-', 'Color', soft_green, 'LineWidth', 2.5);
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 ');
legend('实验数据 (10°)', '拟合曲线 (10°)', 'FontSize', 18);

```

```

grid on;

function d=main_fun(lambda1,lambda2,n1,n2)
    M=1;
    d=(M*lambda1*lambda2)/(2*abs(n1*lambda2-n2*lambda1));

end

function N=lyg(Rmax,Rmin)

    N=(1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))-sqrt((1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))).^2-
(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin))).^2))./(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin)));
end

function R=test_fun(lambda,n2,theta_i_deg,n1,Rmax,d)

    %光程差
    theta_i=deg2rad(theta_i_deg);

    sin_theta_2=(n1./n2).*sin(theta_i);

    cos_theta_2=sqrt(1-sin_theta_2.^2);

    delta_L=2*d.*n2.*cos_theta_2;

    %相位延迟
    delta=2*pi*delta_L./lambda;

    r_1=(abs(n1*cos(theta_i)-
n2.*cos_theta_2))./(n1*cos(theta_i)+n2.*cos_theta_2);

    r_2=(sqrt(abs(Rmax))-r_1)./(1-sqrt(abs(Rmax)).*r_1);

    up=(r_1.^2+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_2.^2);
    down=(1+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_1.^2.*r_2.^2);

    for i=1:length(lambda)

```

```

        if down(i)<=0
            down(i)=1;
        end
    end
    R=up./(down);
end

```

程序 5:T3_fj4.m

```

clear; clc; close all;

%附件四用包络法拟合求 d
% 读取数据

data2 = readmatrix('附件 4');

%空气折射率
n1=1.0;

% 波数
w2 = data2(2:end, 1);

theta2=15; %入射角

% 反射率
r2 = data2(2:end, 2) / 100;

% 附件四的极值点
data_4_max = [749.2094, 0.787810;%726
               1111.76, 0.606475;%1478
               1522.04, 0.429993;%2329
               1947.751, 0.361534;%3212
               2387.442,0.332884;%4124
               2802.544,0.321648;%4985
               3245.127,0.316754;%5903
               3648.177,0.315577];%6739
data_4_min = [946.395, 0.00349331;%1135
               1324.38, 0.1333013;%1919
               1728.388, 0.229701;%2757
               2158.92, 0.268079;%3650

```



```

2586.56,0.286476;%4537
3018.53,0.296242;%5433
3462.08,0.302497;%6353
3854.04,0.306918];%7166

%提取 data 中的横纵坐标

x1=data_4_max(:,1);
y1=data_4_max(:,2);

m1=data_4_min(:,1);
n1=data_4_min(:,2);

%三次样条法
y1_interp=spline(x1,y1,w2);
n1_interp=spline(m1,n1,w2);

% 绘制原始数据点和插值曲线
figure;
plot(w2, r2, '-', 'MarkerSize', 8, 'LineWidth', 1.5); % 原始数据点
hold on;
plot(w2, y1_interp, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
hold on;
plot(w2, n1_interp, 'LineWidth', 2); % 插值曲线
% 标出 data_4_max 的点（用红色圆圈）
scatter(data_4_max(:,1), data_4_max(:,2), 100, 'ro', 'filled', 'LineWidth', 2, 'MarkerEdgeColor', 'k');

% 标出 data_4_min 的点（用蓝色方块）
scatter(data_4_min(:,1), data_4_min(:,2), 100, 'bs', 'filled', 'LineWidth', 2, 'MarkerEdgeColor', 'k');

grid on;
xlabel('波数 (cm-1)');
ylabel('反射率 ');
% title('三次样条插值拟合');

```

```

legend('原始数据点', '三次样条插值 1', '三次样条插值 2', '极大值点', '极小值点',
'Location', 'Best');

% 判断多光束干涉条件
R_max2 = max(r2);
R_min2 = min(r2);
V2 = (R_max2 - R_min2) / (R_max2 + R_min2);

if V2 >= 0.8
    fprintf('附件四 V2= %.2f, 出现多光束干涉\n', V2);
else
    fprintf('附件四 V2= %.2f, 未出现明显多光束干涉\n', V2);
end

N=lyg(y1_interp,n1_interp); %15 度

%求出外延层折射率 n2

n2=(1+N)./(1-N).*n1;

function N=lyg(Rmax,Rmin)

    N=(1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))-sqrt((1-sqrt(abs(Rmax.*Rmin))).^2-
(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin))).^2))./(sqrt(abs(Rmax))-sqrt(abs(Rmin)));
end

lambda_4=1e4./w2;

function d=main_fun(lambda1,lambda2,n1,n2)
    M=1;
    d=(M*lambda1*lambda2)/(2*abs(n1*lambda2-n2*lambda1));

end

% data_1 = [726, 1478, 2329, 3212, 4124, 4985, 5903, 6739];
% data_2 = [1135, 1919, 2757, 3650, 4537, 5433, 6353, 7166];
data_1 = [3212, 4124, 4985, 5903, 6739];
data_2 = [ 3650, 4537, 5433, 6353, 7166];

```

```

lambda_1 = zeros(5,1);
lambda_2 = zeros(5,1);
n_1 = zeros(5,1);
n_2 = zeros(5,1);
d_max=zeros(3,1);
d_min=zeros(3,1);

for i=1:5
    lambda_1(i)=lambda_4(data_1(i));
    n_1(i)=n2(data_1(i));
    lambda_2(i)=lambda_4(data_2(i));
    n_2(i)=n2(data_2(i));
end

for i=1:4

    d_max(i) = main_fun(lambda_1(i), lambda_1(i+1), n_1(i), n_1(i+1));

    d_min(i) = main_fun(lambda_2(i), lambda_2(i+1), n_2(i), n_2(i+1));

end

fprintf('极大值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_max));

fprintf('极小值拟合外延层厚度: %.3f\n', mean(d_min));

d=13.55;

R4=test_fun(lambda_4,n2,theta2,n1,y1_interp,d);

res=sum((r2(1200:7000)-R4(1200:7000)).^2)/length(r2);

RMSE=sqrt(mean(res));

fprintf('均方根误差: %.4f\n',RMSE);

soft_blue = [0.35, 0.6, 0.8];
soft_red = [0.9, 0.5, 0.4];

```

```

soft_green = [0.5, 0.7, 0.5];
soft_purple = [0.7, 0.5, 0.7];

figure;
plot(w2,r2,'-','Color',soft_red,'LineWidth',2.5);
hold on;
plot(w2(1200:7000),R4(1200:7000),'-','Color',soft_blue,'LineWidth',2.5);
xlabel('波数 (cm^{-1})');
ylabel('反射率 (%)');
legend('实验数据 (15°)', '拟合曲线 (15°)', 'FontSize', 18);
grid on;

function R=test_fun(lambda,n2,theta_i_deg,n1,Rmax,d)

    %光程差
    theta_i=deg2rad(theta_i_deg);

    sin_theta_2=(n1./n2).*sin(theta_i);

    cos_theta_2=sqrt(1-sin_theta_2.^2);

    delta_L=2*d.*n2.*cos_theta_2;

    %相位延迟
    delta=2*pi*delta_L./lambda;

    r_1=(abs(n1*cos(theta_i)-
n2.*cos_theta_2))./(n1*cos(theta_i)+n2.*cos_theta_2);

    r_2=(sqrt(abs(Rmax))-r_1)./(1-sqrt(abs(Rmax)).*r_1);

    up=(r_1.^2+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_2.^2);
    down=(1+2.*r_1.*r_2.*cos(delta)+r_1.^2.*r_2.^2);

    for i=1:length(lambda)
        if down(i)<=0
            down(i)=1;
        end
    end
    R=up./(down);
end

```