

# 外延层厚度模型

## 摘要

碳化硅作为一种新兴的第三代半导体材料，其中碳化硅外延层的厚度是外延材料的关键参数之一，因此精确求解碳化硅外延层厚度十分重要。

**针对问题一：**我们将问题一的模型分为三个部分：首先我们根据菲涅尔公式和折射定律得到了**折射率与反射率模型**，其用于计算实际的折射率。其次，根据题目所讲的折射率与载离子浓度和波长相关，我们通过**Drude**模型，推导出折射率与载离子浓度和波长之间的关系，建立起**折射率与载流子浓度和红外光谱波长模型**，用于计算后续算法求得的理论折射率。最后我们通过光程差和条纹级数等推导出**外延层厚度模型**。

**针对问题二：**首先我们根据问题一建立的折射率与反射率模型，求解附录内数据各波数对应的折射率，作出散点图，观察到附录内前两千会出现异常现象，查询到出现异常的原因后，我们对其做了剔除处理。然后我们按照模型一建立的折射率与载流子浓度和波长的模型，使用**非线性最小二乘法**进行数据拟合，得到归并参数的大致值，为了求得最接近于实际值的厚度，我们建立**优化模型**，其中决策变量为公式里的各项归并后的参数和载流子浓度，目标函数为厚度方差的最小值，约束条件为各参数对应实际的取值范围。对优化模型求解，得到所有系数。我们发现折射率的平方与波数的平方呈现周期性变化，因此我们根据残差做修正项得到最终按这个求得的折射率代入问题一外延层厚度模型，求解出附录 1 最终厚度为  $7.33\mu\text{m}$ ，附录 2 为  $7.34\mu\text{m}$ 。然后检验所建模型的可靠性，我们将附件 1 中的数据作为训练集，附件 2 中的数据作为测试集，从方差对比、相对误差的计算、结果稳定性等方面对模型得出的结果进行分析。

**针对问题三：**首先我们推导出多光束干涉必要条件为反射率足够大和射出光束要有恒定的相位差，然后通过两光束与多光束对比，得到对于多光束干涉，波峰确定更精确，对应求取外延层厚度更精准、降低干扰噪音，计算更加精准。接下来，我们通过反射率来判断硅外延层发生多光束干涉，结果为发生干涉，接着使用之前的模型进行厚度计算，得到附录 3 外延层厚度为  $2.53\mu\text{m}$ ，附录 4 的外延层厚度为  $2.45\mu\text{m}$ 。最后我们依旧通过反射率来判断是否发生干涉，得到反射率在 20% 附近，可能会发生多光束干涉，接着多光束干涉后各峰之间距离变窄了，会导致波峰选取有误，从而对厚度产生影响，我们对其进行特殊处理，得到消除结果后的附录 1 外延层厚度为  $8.13\mu\text{m}$ ，附录 2 外延层厚度为  $8.09\mu\text{m}$ 。

**关键词：**外延层厚度模型    折射率与反射率模型    非线性最小二乘法

# 一、问题分析

## 1.1 问题一的分析

问题一是在只考虑外延层和衬底界面只有一次反射、透射所产生干涉条纹的情形下，建立一个确定外延层厚度的数学模型。

首先，根据对题目的解读，本问要得到外延层厚度的模型，得出折射率是本问的关键。其次，查询相关参考文献，我们得到了两个与折射率相关的关系：1. 折射率与反射率之间的关系。2. 折射率与载流子浓度、红外光谱波长的关系。然后，我们运用折射率与反射率之间的关系得到折射率。最后，通过得到的折射率建立光程差-外延层厚度模型。对该模型进行分析时，我们考虑到由于光程未知，无法直接使用该模型得到外延层厚度，因此，我们重新建立了红外干涉-外延层厚度模型。

## 1.2 问题二的分析

根据问题一可知，计算折射率的方法有两种，我们先根据折射率与反射率之间的关系将折射率计算出来，得到折射率与波数的散点图。然后用波长、载流子浓度与折射率的关系对折射率与波数的散点图进行拟合。附件 1,附件 2 中给出的反射率数据有些反射率很大的点，为了不影响拟合的准确性，我们不考虑异常变化的这些点，直接从附件中第 2000 组数据进行计算。

理论上，附件 1，附件 2 中计算得到的外延层厚度应该为一个定值，但我们计算出的结果会存在一定的差异，因此，我们要通过优化算法，对我们的拟合函数进行优化，使通过这个函数求得的外延层厚度更加接近于实际厚度。我们根据问题一建立的红外干涉-外延层厚度模型求出波峰时的外延层厚度，并对计算出外延层厚度的数据求最小方差，此时的系数即为最优拟合函数的系数。

要检验所建模型的可靠性，我们将附件 1 中的数据作为训练集，附件 2 中的数据作为测试集，从方差对比、相对误差的计算、结果稳定性等方面对模型得出的结果进行分析。

## 1.3 问题三的分析

首先我们推导出多光束干涉必要条件为反射率足够大和射出光束要有恒定的相位差，然后通过两光束与多光束对比，得到对于多光束干涉，波峰确定更精确，对应求取外延层厚度更精准、降低干扰噪音，计算更加精准。接下来，我们通过反射率来判断硅外延层发生多光束干涉，结果为发生干涉，接着使用之前的模型进行厚度计算，得到附录 3 与附录 4 的外延层厚度。最后我们依旧通过反射率来判断是否发生干涉，得到反射率在 20%附近，可能会发生多光束干涉，接着多光束干涉后各峰之间距离变窄了，会导致波峰选取有误，从而对厚度产生影响，我们对其进行特殊处理，得到消除结果后的外延层数据。

# 二、模型假设

- 1、假设反射与折射时不考虑光的吸收与色散，即无能量损失。
- 2、假设两反射平面绝对平行，不会对光束的相位差产生影响。

### 三、符号说明

符号	说明	单位
$n_1$	空气折射率	—
$n_2$	外延层的折射率	—
$\theta_1$	光源到外延层的入射角	度
$\theta_2$	光源到外延层的折射角	度
$\varepsilon_\infty$	高频介电常数	—
$\varepsilon_0$	真空介电常数	法拉/米 (F/m)
$\gamma$	碰撞频率	赫兹 (Hz)
$\omega_p$	等离子体频率	赫兹 (Hz)
$\omega$	光束的频率	赫兹 (Hz)
$\lambda$	红外光谱的波长	微米 ( $\mu m$ )
$N$	载流子的浓度	立方厘米 <sup>-1</sup> ( $cm^{-3}$ )
$m^*$	载流子有效质量	千克 (kg)
$d$	外延层厚度	微米 ( $\mu m$ )

### 四、问题一模型的建立

问题一只考虑外延层和衬底界面只有一次反射、透射所产生干涉条纹的情形，我们就要根据外延层厚度与光程差的公式建立外延层厚度模型。首先，我们要得到外延层厚度的模型，计算出折射率是本问的关键。其次，查询相关的参考文献，我们得到了两个与折射率相关的关系：1.折射率与反射率之间的关系。2.折射率与载流子浓度、红外光谱波长的关系。然后，我们运用折射率与反射率之间的关系计算出折射率。最后，通过得到的折射率建立光程差-外延层厚度模型，对该模型进行分析时，我们考虑到由于光程未知，无法直接使用该模型得到外延层厚度，因此，我们重新建立了红外干涉-外延层厚度模型。

#### 4.1 折射率与反射率模型

根据题目中图 1 的信息，我们已知空气折射率为 $n_1$ ，该光源射到外延层的入射角为 $\theta_1$ ，设折射角为 $\theta_2$ ，外延层的折射率为 $n_2$ ，根据折射定律，我们可以得到这四个量之间的关系，公式如下

$$n_1 \cdot \sin \theta_1 = n_2 \cdot \sin \theta_2 \quad (1)$$

再根据菲涅尔公式<sup>[4]</sup>，我们根据这些量可以得出垂直于入射面的 $s$ 偏振反射率和平行于入射面的 $p$ 偏振反射率的表达式，公式如下

$$\begin{cases} R_s = \left( \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \right)^2 \\ R_p = \left( \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \right)^2 \end{cases} \quad (2)$$

由于该光束是全偏振光，我们可以使用菲涅尔公式，得到 $s$ 偏振反射率与 $p$ 偏振反射率，我们就可以推导出该光束的平均反射率，公式如下

$$R = \frac{R_s + R_p}{2} = \left[ \left( \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \right)^2 + \left( \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \right)^2 \right] / 2 \quad (3)$$

公式（3）即为折射率与反射率之间的关系。

## 4.2 折射率与载流子浓度和红外光谱波长模型

首先,根据题目可知外延层的折射率通常不是常数,它与掺杂载流子的浓度、红外光谱的波长等参数有关。根据Drude模型<sup>[2]</sup>,可以得出折射率与各个参数之间的关系,表达式如下

$$\begin{cases} n_2 = \sqrt{\text{Re}(\varepsilon(\omega))} \\ \varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \end{cases} \quad (4)$$

其中,  $\text{Re}(\varepsilon(\omega))$ 表示取 $\varepsilon(\omega)$ 的实部,  $n_2$ 为外延层的折射率,  $\varepsilon_\infty$ 为高频介电常数,  $\gamma$ 为碰撞频率,  $\omega_p$ 为等离子体频率

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m^*}$$

$\omega$ 为该光束的频率

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

其中,  $c$ 为光速,  $\lambda$ 为红外光谱的波长。

$$n_2 = \sqrt{\text{Re} \left( \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2 (\omega^2 - i\gamma\omega)}{\omega^4 + \gamma^2 \omega^2} \right)}$$

其中,  $N$ 为载流子的浓度,  $e$ 为元电荷,  $m^*$ 为载流子有效质量。整理得

$$n_2 = \sqrt{\varepsilon_\infty - \frac{N}{\varepsilon_\infty m^* \frac{4\pi^2 c^2}{e^2 \lambda^2} + \varepsilon_\infty m^* \frac{\gamma^2}{e^2}}} \quad (5)$$

其次,因为高频介电常数 $\varepsilon_\infty$ , 元电荷 $e$ , 载流子有效质量 $m^*$ 和光速 $c$ 都为常数,所以我们可以把这些量当成系数,将上述公式转化为外延层的折射率关于载流子的浓度和红外光谱的波长的关系,公式如下

$$n_2 = \sqrt{A - \frac{N}{\frac{B}{\lambda^2} + C}} \quad (6)$$

其中,

$$\begin{cases} A = \varepsilon_\infty \\ B = \varepsilon_\infty m^* \frac{4\pi^2 c^2}{e^2} \\ C = \varepsilon_\infty m^* \frac{\gamma^2}{e^2} \end{cases}$$

最后,用最小二乘法对上述公式进行拟合,得到合理的 $A$ ,  $B$ ,  $C$ 的值,即可得出折射率与载流子浓度、红外光谱波长之间的关系

### 4.3 外延层厚度模型

根据题意，我们作了外延层厚度测量原理示意图，如图 1 所示

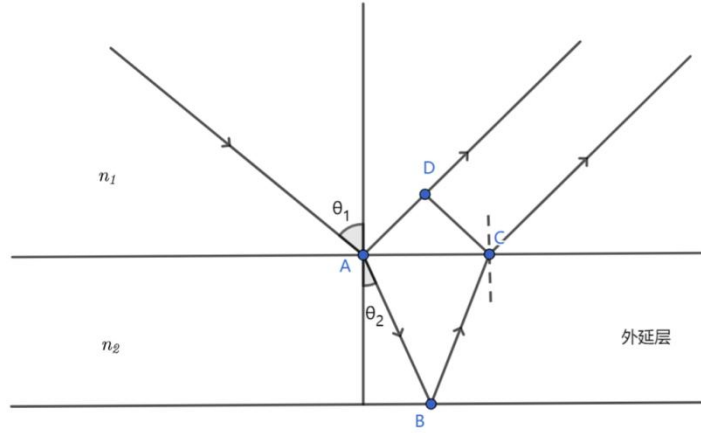


图 1 外延层厚度测量原理示意图

我们需要通过光程差 $\Delta\delta$ 求解外延层厚度 $d$ <sup>[3]</sup>，以下是我们推导光程差与外延层厚度的关系的过程。首先根据几何关系可以得到

$$\Delta\delta = AB + BC - AD = \frac{2d}{\cos\theta_2} \cdot n_2 - 2d \cdot \tan\theta_2 \cdot n_1 \sin\theta_1 + \phi_1 - \phi_2 \quad (7)$$

其中， $\phi_1 - \phi_2$ 为相移，指的是光在界面发生反射时，可能产生的额外相位变化。此处，我们暂时忽略相移，即让 $\phi_1 - \phi_2 = 0$ ，接着我们使用折射定律 $n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2$ 以及三角函数的相关关系对上述公式进行转化，得到如下公式

$$\Delta\delta = \frac{2d}{\cos\theta_2} \cdot n_2 - 2d \cdot \frac{\sin\theta_2}{\cos\theta_2} \cdot n_2 \sin\theta_2$$

化简可得

$$\Delta\delta = 2d \cdot n_2 \cdot \cos\theta_2$$

然后，考虑到光在界面反射时会发生相位变化引起半波损失，因此还需对上述公式补充半个波长

$$\Delta\delta = 2d \cdot n_2 \cdot \cos\theta_2 + \frac{\lambda}{2}$$

最后，求得外延层厚度

$$d = \frac{\Delta\delta - \frac{\lambda}{2}}{2n_2 \cos\theta_2} \quad (8)$$

我们对上述建立的光程差-外延层厚度模型进行分析，发现由于光程未知，无法直接使用该模型进行求解，因此，我们重新建立了红外干涉-外延层厚度模型。

由于问题 1 只需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，因此我们认为光在外延层和衬底界面不会被吸收也不会发生色散，当红外光入射到外延层时，一部分光从外延层表面反射出来，而另一部分会从衬底表面反射回来，这两束平行光存在相位差，在一定条件下会引起干涉现象，根据图 1，我们可以写出反射光的光程差公式

$$\Delta\delta = n_1(AB + BC) - n_2 AD = 2dn_2 \cos\theta_2 + \frac{\lambda}{2} = m\lambda_m \quad (9)$$

其中， $m$ 是产生条纹的级数， $\lambda_m$ 为级数为 $m$ 时对应红外光谱的波长，由于在反射

界面中会受到半波损失影响，当 $m$ 为 $\frac{1}{2}$ 的奇数倍时为相长干涉，当 $m$ 为 $\frac{1}{2}$ 的偶数倍时为相消干涉，即

$$m = \begin{cases} m' - \frac{1}{2}, & \text{相长干涉} \\ m', & \text{相消干涉} \end{cases}$$

由此，可以得出干涉的最大值和最小值的方程

$$2dn_2\cos\theta_2 = m\lambda_m \quad (10)$$

当 $m$ 为 $\frac{1}{2}$ 的奇数倍，即 $m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ 时，将有干涉的最大值；当 $m$ 为 $\frac{1}{2}$ 的偶数倍，即 $m = 1, 2, 3, \dots$ 时，将有干涉的最小值

因为任意级数与其对应波长的乘积是恒定的，即 $m \cdot \lambda_m$ 为定值，则 $m$ 可以用如下公式求解

$$m \cdot \lambda_m = (m + X) \cdot \lambda_{m+X} \Rightarrow m = \frac{X \cdot \lambda_{m+X}}{\lambda_m - \lambda_{m+X}} \quad (11)$$

其中， $X$ 为整数，表示 $\lambda_m$ 和 $\lambda_{m+X}$ 范围内的条纹数

然后，利用折射定律将公式（11）化简，最终得到外延层厚度 $d$ 的计算公式为

$$d = \frac{\frac{\lambda_m \cdot \lambda_{m+1}}{\lambda_m - \lambda_{m+1}}}{2 \sqrt{n_2^2 - \left(\frac{\sin \theta_1}{n_2}\right)^2}} \quad (12)$$

## 五、外延层厚度模型的求解

问题一得出了两种计算折射率的方法，我们先根据反射率将折射率计算出来，得到折射率与波数的散点图。然后用波长、载流子浓度与折射率的关系对散点图进行拟合。附件 1,附件 2 中给出的反射率数据有些反射率很大的点，为了不影响拟合的准确性，我们不考虑异常变化的这些点，直接从附件中第 2000 组数据进行计算。附件 1，附件 2 中计算得到的外延层厚度理论上为定值，但我们计算出的结果会存在一定的差异，因此，我们要通过优化算法，对我们的拟合函数进行优化，使通过这个函数求得的外延层厚度更加接近于实际厚度。我们根据问题一建立的红外干涉-外延层厚度模型求出波峰时的外延层厚度，并对计算出外延层厚度的数据求最小方差，此时的系数即为最优拟合函数的系数。要检验所建模型的可靠性，我们将附件 1 中的数据作为训练集，附件 2 中的数据作为测试集，从方差对比、相对误差的计算、结果稳定性等方面对模型得出的结果进行分析。

### 5.1 通过反射率得到折射率

根据问题一中得出的折射率与反射率之间的关系，如公式（3）所示，我们可以得到一个平均反射率 $R$ 关于 $n_2$ 的函数，

$$R = f(n_2)$$

我们发现直接通过这个公式求解 $n_2$ 计算困难且无法得到精确解，因此我们要对求解过程进行改进，首先，用 $r$ 记录对应频数的反射率的值，然后，让 $n_2$ 在 1 到 100 范围内每隔 0.0001 取一个值，代入函数 $f(n_2)$ 计算平均反射率，最后，将 $f(n_2)$ 与 $r$ 作差，找到结果在 $10^{-5}$ 之内的 $n_2$ 的值，即为在此反射率下的外延层折射

率

$$F(n_2) = |f(n_2) - r| \leq 10^{-5}, n_2 \in [1, 100] \quad (13)$$

根据这一思想，我们使用 matlab 进行编程近似地计算出每组数据对应的外延层折射率 $n_2$ 。由此得出折射率与波数的关系图如下

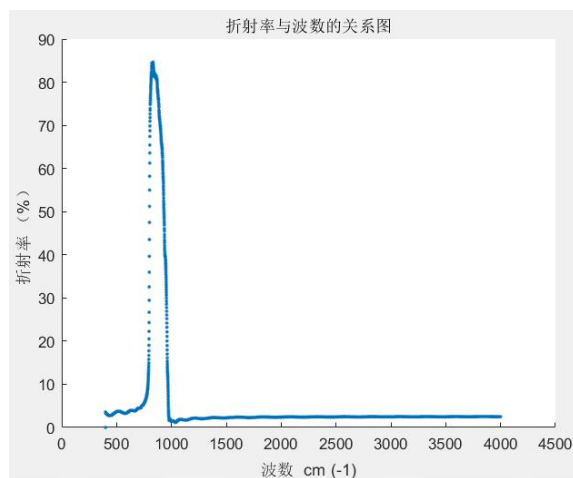


图 2 折射率与波数的关系图

## 5.2 用波长与浓度拟合折射率图像

### ➤ 数据预处理

我们根据附件 1、附件 2 中的数据得到波数与反射率关系的散点图，如图 3 所示，经过对两张图片数据的分析，我们发现前面一段反射率会异常升高，附件 2 中甚至有一部分反射率超过了 100%，而后半部分的反射率趋于稳定。经查询我们得知 SiC 材料在红外波段有固有特征吸收，导致碳硅键释放能量，对应着波数 1900 之前反射率异常的数据，因此，我们将跳过前段数据，直接从第 2000 组数据开始计算。经过数据处理后得到的散点图如图 4 所示

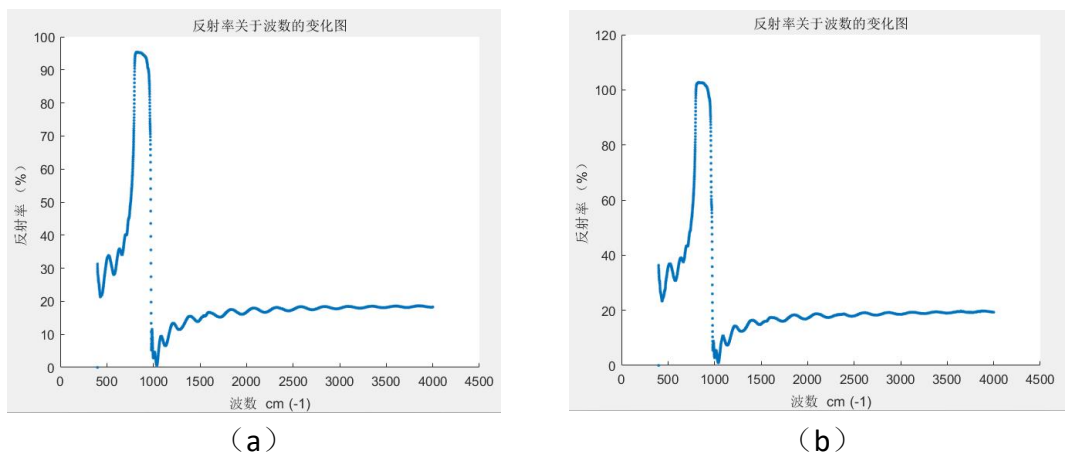


图 3 附件 1 (a) 附件 2 (b) 初始数据波数与反射率关系的散点图

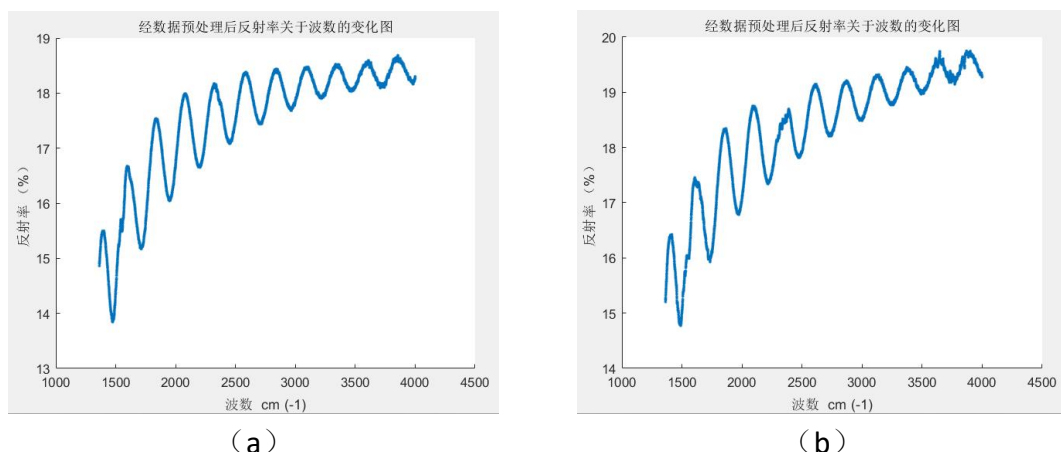


图 4 附件 1 (a) 附件 2 (b) 经数据处理后波数与反射率关系的散点图

## ➤ 函数图像拟合

为了提高模型的精确率，计算出每一组数据对应的折射率，我们用问题一中折射率与载流子浓度、红外光谱波长的关系，对经数据处理后波束与折射率关系的图像用非线性最小二乘法进行拟合，为了方便拟合计算，我们对公式 (6) 进行了平方处理，得到的公式如下

$$n_2^2 = A - \frac{N}{\frac{B}{\lambda^2} + C}$$

由于平方前后拟合对系数不会产生影响，所以用此公式拟合得出的系数与公式 (6) 拟合得出的系数相同。经过拟合，我们得到了一组近似的系数

$$\begin{cases} A = 6.4990 \\ B = 0.3081 \\ C = 0.1000 \\ N = 1.0000 \end{cases} \quad (14)$$

其中， $N$  的量级是  $10^{19}$ ， $B$  的量级是  $10^{13}$ ， $C$  的量级是  $10^{19}$

那么，外延层折射率与红外光谱的波长、载流子的浓度之间的关系如下

$$n_2 = \sqrt{6.499 - \frac{1}{\frac{0.3081}{\lambda^2} + 0.1}} \quad (15)$$

根据公式 (12) 计算后我们发现每个峰值会计算出不同的外延层厚度。由于附件 1 给出的数据是位于同一块碳化硅晶圆片上的点，因此附件中的每个峰值理论上计算出的外延层厚度也应该相等，而根据问题一的模型进行计算之后，我们发现每个峰值对应着不同的外延层厚度且分布不集中，附件 1 根据红外干涉-外延层厚度模型计算结果如表 1 所示，这说明运用上述模型计算会有误差。因此，我们要运用优化算法对得出的外延层厚度  $d$  进行优化，使  $d$  更接近于实际值。

干涉峰	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均值	方差
$d (\mu\text{m})$	10.00	9.27	8.38	8.45	7.67	7.76	8.09	7.85	7.88	8.08	8.34	0.50

表 1 根据红外干涉-外延层厚度模型得出的近似外延层厚度



### 5.3 优化模型的建立

由于理论上每个峰值计算出的外延层厚度应该相等，而问题一的模型进行计算后会得到不同的外延层厚度，因此，我们需要对问题一的模型进行优化，使我们得出的外延层厚度更加接近于实际厚度。

#### ● 决策变量

本文以与高频介电常数 $\varepsilon_\infty$ 相关的系数  $A$ ，与光速 $c$ ，载流子有效质量 $m^*$ 等参数相关的系数  $B$ ，与碰撞频率 $\gamma$ ，元电荷 $e$ 等参数相关的系数  $C$  以及载流子的浓度  $N$  作为决策变量。

#### ● 目标函数

本文的目的是要使求出的外延层厚度更接近于实际值，因此，本文以每个峰值求出外延层厚度的方差最小作为模型的目标。

首先，我们根据公式（6）得到了外延层折射率 $n_2$ 与红外光谱的波长、载流子的浓度之间的关系

$$n_2 = \sqrt{A - \frac{N}{\frac{B}{\lambda^2} + C}}, \text{ 其中, } \begin{cases} A = \varepsilon_\infty \\ B = \varepsilon_\infty m^* \frac{4\pi^2 c^2}{e^2} \\ C = \varepsilon_\infty m^* \frac{\gamma^2}{e^2} \end{cases}$$

其次，在公式（14）求出系数的 80%到 120%范围内，每次每隔 1%取一个值，其余系数不变，代入公式（6），重新拟合波数与折射率的图像。

然后，根据公式（12）得到第 $i$ 个波峰的外延层厚度 $d_i$

$$d_i = \left( \frac{\lambda_m \cdot \lambda_{m+1}}{\lambda_m - \lambda_{m+1}} \right) \left/ \left[ 2 \sqrt{n_2^2 - \left( \frac{\sin \theta_1}{n_2} \right)^2} \right] \right.$$

最后，计算 $d$ 的均值 $\bar{d}$ 和方差 $D(d)$ ，要找到使 $d$ 的方差最小时各个系数的值

$$\bar{d} = \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z d_i$$

$$D(d) = \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z (d_i - \bar{d})^2$$

其中， $z$ 为该束光干涉峰值的个数

综上，本问最终的目标函数为

$$\min D(d) \quad (16)$$

#### ● 约束条件

**约束 1:** 系数 $A, B, C, N$ 对应的符号是有实际的物理含义的，因此 $A, B, C, N$ 四个系数有一个范围

### 5.4 优化模型的求解

首先，我们将附件 1 作为训练集，通过拟合如图 5 所示折射率与波数的函数，使得方差 $D(d)$ 达到最小，找到此时系数 $A, B, C, N$ 的值

$$\begin{cases} A = 7.7578 \\ B = 0.4240 \\ C = 0.1200 \\ N = 0.8000 \end{cases}$$

其次，我们使用`matlab`对附件 1 计算出的折射率与波长拟合的效果如图 5 所示

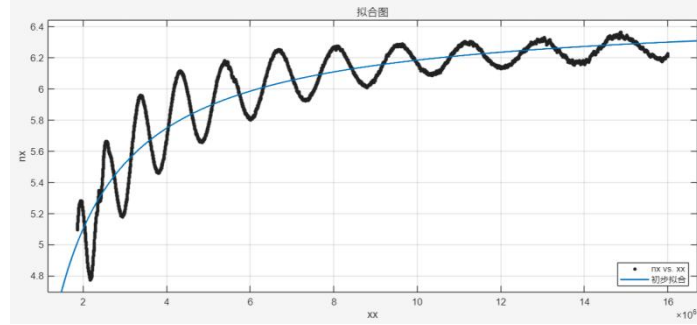


图 5 附件 1 拟合效果图

其中，横坐标为波数的平方（波长平方的倒数）即 $\frac{1}{\lambda^2}$ ；纵坐标为外延层折射率的平方，即 $n_2^2$ 。经过优化后，该模型的拟合度 $R^2$ 达到了 0.84，均方根误差 RMSE 为 0.15，我们得出的干涉峰对应厚度的结果如表 2 所示

干涉峰	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均值	方差
$d \text{ (}\mu\text{m)}$	8.24	7.89	7.33	7.49	6.83	6.96	7.27	7.07	7.09	7.29	7.35	0.17

表 2 优化后函数求得的附件 1 中每个干涉峰的外延层厚度

然后，我们将附件 2 作为测试集，检验通过附件 1 算出系数的可靠性。

## 5.5 改进优化算法

根据 $n_2^2$ 与 $\frac{1}{\lambda^2}$ 的散点图可以发现折射率的平方是随波数的平方周期性变化的，而我们上述优化模型直接对图像用一条曲线进行拟合，如图 5 所示，虽然拟合度达到了 0.84，但未反映实际的变化情况。因此，我们需要对上述优化模型进行修正。

经过如图 5 的拟合，我们根据实际值与理论值之间的差异画出了该模型残差与波数平方之间的关系图，如图 6 所示

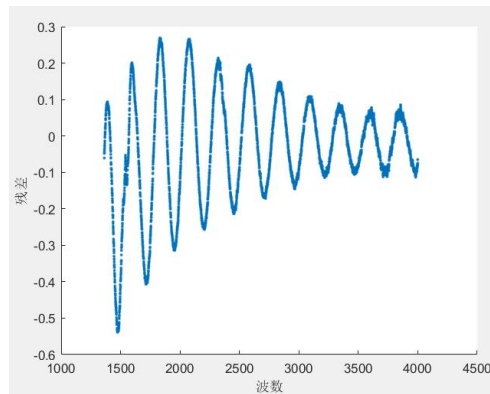


图 6 附件 1 拟合的残差

为了得到更加精确的结果，我们将残差作为修正项，将关于折射率的计算公式修正为

$$n_2^2 = A - \frac{N}{\frac{B}{\lambda^2} + C} + k(\lambda) \quad (17)$$

根据图 6 的残差图，我们可以看出残差关于波数平方的函数具有以下几条性质：

- 1、具有周期性
- 2、振幅会随波数平方的增大而减小
- 3、周期会随波数平方的增大而增大

根据这三条性质，我们猜测该修正项的表达式应为

$$k(\lambda) = a \sin(\omega t + \psi) + b$$

因为振幅和周期会随波数的平方发生改变，所以，我们要对残差关于波数平方的函数进行分段处理。

我们对每一段数据用最小二乘法进行拟合，找到合理的 $a, \omega$ 和 $\varphi$ 的值，图 7 展示了一段数据拟合的图像，这段数据的拟合率为 0.997，其余数据根同样根据最小二乘法拟合，得到每段数据对应拟合图像

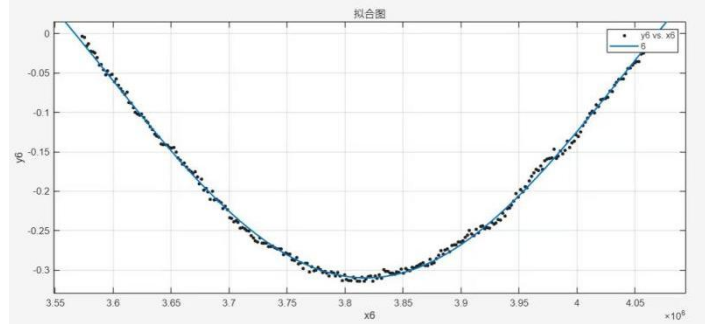


图 7 一段数据的残差拟合图像

除了找到每段对应的 $a, \omega, \psi$ 和 $b$ 的值，我们还计算了每一段的置信区间，我们最终得到残差拟合的结果如表 3 所示

波数平方范围	$a$	$\omega$	$\psi$	$b$
[0.0187, 0.0200]	0.2846	1.1159	39.1559	-0.1944
[0.0200, 0.0247]	0.2363	1.1597	-20.5835	-0.2821
[0.0247, 0.0270]	-0.0883	1.3699	-48.9667	0.1061
[0.0270, 0.0318]	-0.2656	0.9412	-53106	-0.1382
[0.0318, 0.0357]	0.2428	0.9247	-7.9327	0.0199
[0.0357, 0.0407]	-0.2589	0.8482	-0.2124	-0.0509
[0.0407, 0.0457]	-0.2561	0.8008	2.5642	0.0047
[0.0457, 0.0513]	0.2521	0.7499	-16.2527	-0.0002
[0.0513, 0.0571]	0.4451	-0.5175	-9.9386	-0.2531
[0.0571, 0.0634]	-0.1874	0.7287	-5.5458	-0.0188
[0.0634, 0.0701]	-0.1697	0.7035	-16.4019	0.0204
[0.0701, 0.0769]	-0.2076	0.5973	-2.3536	0.0427
[0.0769, 0.0841]	-0.13	0.6662	-7.4866	0.0123
[0.0841, 0.0919]	-0.1384	0.5966	29.6401	0.0047
[0.0919, 0.0992]	-0.1173	0.6021	-20.9546	-0.0126
[0.0992, 0.1080]	0.1923	0.4088	72.3932	0.0863

[0.1080, 0.1157]	0.3458	0.239	1.0166	-0.2689
[0.1157, 0.1255]	-0.1122	0.4729	-15.3794	0.0143
[0.1255, 0.1331]	0.1798	0.3534	28.9024	-0.1178
[0.1331, 0.1443]	0.0695	0.5671	-21.3306	-0.0317
[0.1443, 0.1529]	-0.1521	0.3259	4.7135	-0.0895
[0.1529, 0.1600]	0.0485	0.6788	67.4226	-0.0486

表 3 残差拟合结果

## 5.6 模型可靠性分析

### 5.6.1 附件 1 可靠性的分析

#### (1) 方差对比

为了增强模型的可靠性，我们改进了该优化算法，在计算折射率时引入了一个修正项，将原来的一条较为平滑的曲线变为具有周期性变化的曲线，使拟合的结果更加精确。改进优化算法后，我们得出附件 1 中的干涉峰对应外延层厚度的结果如表 4 所示

干涉峰	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均值	方差
$d (\mu\text{m})$	8.46	7.72	7.52	7.16	7.13	7.03	7.07	7.11	7.15	6.99	7.33	0.21

表 4 改进优化算法后函数求得的附件 1 中每个干涉峰的外延层厚度

通过对附件 1 优化前后方差的比较，我们发现优化后方差显著减小，这说明优化后更加接近于实际值。

#### (2) 相对误差

本问中的相对误差记为外延层厚度的实际值减理论值除以实际值得出的结果

$$\text{相对误差} = \frac{d_{\text{实}} - d_{\text{理}}}{d_{\text{实}}}$$

其中， $d_{\text{实}}$ 为根据折射率与反射率模型求出的实际值， $d_{\text{理}}$ 为根据折射率与载流子浓度和红外光谱波长模型拟合出的理论值。

### 5.6.1 附件 2 可靠性的分析

#### (1) 计算结果的稳定性

改进优化算法后，我们得出附件 2 中的干涉峰对应外延层厚度的结果如表 5 所示，通过对改进优化算法后训练集（附件 1）和测试集（附件 2）外延层厚度均值与方差的比较，我们发现训练集和测试集计算出的外延层厚度平均近似相等，因此，说明我们的模型十分稳定

干涉峰	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	平均值	方差
$d (\mu\text{m})$	8.58	7.58	7.36	7.16	7.42	6.91	7.10	7.53	6.66	7.07	7.34	0.27

表 5 改进优化算法后函数求得的附件 2 中每个干涉峰的外延层厚度

#### (2) 反射率对应情况

我们先用本问中拟合得到的函数计算出附件 2 中每个波长对应的折射率，再根据反射率与折射率的关系（如公式（3）所示）计算出反射率，最后将求得的反射率与附件 2 中给出的反射率进行对比，计算出的反射率都在 100%以内，说

明我们计算出的结果是合理的。

## 六、问题三模型的建立与求解

首先我们要对多光束干涉必要条件进行推导,然后通过两光束与多光束对比,得到对于多光束干涉,波峰确定更精确,对应求取外延层厚度更精准、降低干扰噪音,计算更加精准。接下来,我们通过反射率来判断硅外延层发生多光束干涉,结果为发生干涉,接着使用之前的模型进行厚度计算,得到附录 3 与附录 4 的外延层厚度。最后我们依旧通过反射率来判断是否发生干涉,得到反射率在 20% 附近,可能会发生多光束干涉,接着多光束干涉后各峰之间距离变窄了,会导致波峰选取有误,从而对厚度产生影响,我们对其进行特殊处理,得到消除结果后的外延层数据。

### 6.1 多光束干涉的必要条件

#### (1) 反射率大于某个临界

为产生多光束进行干涉,则光束需要在外延层内发生多次反射和透射,若反射率过小会导致光线无法生成多条光束进行干涉,同时反射率过小时也会导致反射光束的光强过小,从而影响干涉条纹锐度,降低条纹对比度,因此反射率需要大一些。

接下来我通过关于精细度系数 $F$ 进行解释,其中相关公式如下

$$\begin{cases} F = \frac{4R}{(1-R)^2} \\ \nabla\varphi \approx \frac{4}{\sqrt{F}} = \frac{2(1-R)}{\sqrt{R}} \end{cases} \quad (18)$$

其中,这个公式反映了峰宽度 $\nabla\varphi$ 与精细度系数 $F$ 的关系,精细度系数 $F$ 和反射率 $R$ 的关系,即 $\nabla\varphi$ 与 $R$ 的关系,当反射率增大时,峰宽度缩短如图 8,这样干涉条纹更加明显,满足多光束干涉形成。

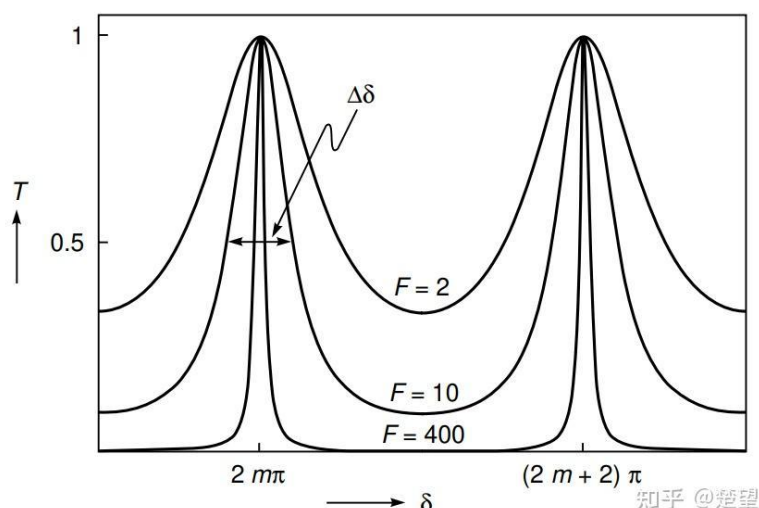


图 8 透射峰宽度随  $F$  的变化情况<sup>[4]</sup>

#### (2) 多光束干涉基本条件

发生干涉要求所有光束之间有稳定的相位差  $\Delta\phi$ , 相同的频率, 波的震动方向相同。如果界面不平整, 不同位置的光程差不同, 会导致相位关系混乱, 最终

使得干涉条纹模糊不清。所以依据假设 2 避免此情况产生影响，由于光束经同一个光源射出，这直接满足了干涉基本条件的后面两条，因此我们对相位差进行分析。

$$\begin{cases} \Delta\phi = \frac{2\pi\Delta\delta}{\lambda} = \frac{4\pi nd}{\lambda} \cos\theta \\ \Delta\phi = 2m\pi, m \in \mathbb{Z} \end{cases} \quad (19)$$

联立公式，得到薄膜厚度需要满足  $d = \frac{m\lambda}{2\cos\theta n}$ ，才能发生多光束干涉，即产生多光线干涉的必要条件。

综上，我们得到了多光束干涉的必要条件一个是反射率要尽量高，还有一个是薄膜厚度要满足  $d = \frac{m\lambda}{2\cos\theta n}$ 。

### (3) 计算精度产生的影响

我们通过翻阅文献，将双光束干涉和多光束干涉进行对比，得到多光束干涉与双光束干涉两者主要区别在于干涉条纹上是否有会出现更加尖锐的锋形，多光束干涉对条纹的峰谷处更加精确，并且提供了更多的拟合数据，因此我们通过算法拟合这些尖锐的震荡曲线，可以更好的得到精确的光程差。

综上，我们得出了多光束干涉对外延层厚度计算精度可能产生的影响：

- 1、波峰确定更精确，对应求取外延层厚度更精准。
- 2、降低干扰噪音，计算更加精准。
- 3、若只考虑双束：得到的条纹较宽，峰位判定不精确，同时可能低估外延层厚度

## 6.2 多光束干涉外延层厚度模型与求解

基于问题一，我们总结了多光束干涉的必要条件为反射率足够大且薄膜厚度要满足  $d = \frac{m\lambda}{2\cos\theta n}$ 。其中光束内必定满足特定薄膜厚度对应的波长，则判断能否发生多光束干涉我们需要通过反射率来判断，经过查询硅的折射率在 3.4 到 3.5 之间，通过反射率公式

$$R = |r|^2 = \left( \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2 \quad (20)$$

可以得到其反射率  $R$  在 30% 左右，反射率已满足多光束干涉需求。其中  $n_1$  为空气折射率，近似为 1， $n_2$  为外延层折射率，这里处于 3.4 到 3.5 之间。

我们先通过问题一中折射率与反射率的模型，进行求解各波数对应的折射率，然后依据问题一中求解外延层厚度的模型，代入公式 (3) 和公式 (12) 求解折射率，得到对应波峰的外延层厚度，接着取均值，即可得到该处的外延层厚度  $d$ 。

$$\begin{cases} R = \frac{R_s + R_p}{2} = \left[ \left( \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \right)^2 + \left( \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \right)^2 \right] / 2 \\ d = \frac{\frac{\lambda_m \cdot \lambda_{m+1}}{\lambda_m - \lambda_{m+1}}}{2 \sqrt{n_2^2 - \left( \frac{\sin \theta_1}{n_2} \right)^2}} \end{cases}$$

最后，我们代入数据计算得到附录 3 的外延层厚度为 2.53  $\mu\text{m}$ ，附录四外延

层厚度为  $2.45\mu\text{m}$ 。

### 6.3 修正多光束干涉外延层厚度模型

根据碳化硅的折射率在 2.6 左右，得到其反射率  $R$  在 20% 左右，可能会发生多光束干涉，接着多光束干涉后各峰之间距离变窄了，会导致波峰选取有误，从而对厚度产生影响，我们对其进行特殊处理，得到消除结果后的附录 1 外延层厚度为  $8.13\mu\text{m}$ ，附录 2 外延层厚度为  $8.09\mu\text{m}$ 。

## 七、模型的评价

### 7.1 模型的优点

- 1、对背景光造成的反射率异常进行了处理，计算得到的反射率受环境光线影响小，能有效抵抗噪声
- 2、推导过程严谨，假设合理贴合实际情况，综合考虑了多种变量因素对折射率的影响
- 3、模型各成分含义清晰易于理解

### 7.2 模型的缺点

模型的适用范围较为有限，且对拟合范围外的数据处理效果不佳

## 八、参考文献

- [1]刘家兴,刘高福,陈德良.菲涅尔公式讨论光波反射和折射时振幅的变化[J]物理通报.2021 (07)
- [2]DeepSeek,DeepSeek-V3,深度求索（DeepSeek），2025-09-05
- [3]苏润洲,陈小凡,汤冬华. 光程的概念与薄膜干涉中光程差的表示方法[J]高师理科学刊.1007-9831（2014）06-0043-03
- [4]<https://zhuanlan.zhihu.com/p/579184206>

# 附录

%问题二求解

clear;clc

boshu0=readmatrix("附件 1.xlsx",'Range','A2:A7470');

r0=readmatrix("附件 1.xlsx",'Range','B2:B7470');

theta=10/180\*pi;

x=(boshu0.^2)';%只要再取 2k+

for i=1:7469

lam(i)=(1/boshu0(i));

xuhao(i)=i;

end

%计算折射率观测值

r=r0./100;

s1=sin(theta);

c1=cos(theta);

n1=1;

for i=1:7469

ri=r(i);

for n20=1:0.0001:100%可能导致 n2 偏小

s2=n1^2\*s1^2/n20^2;

c2=sqrt(1-s2);

Rs=(n1\*c1-n20\*c2)^2/(n1\*c1+n20\*c2)^2;

Rp=(n20\*c1-n1\*c2)^2/(n20\*c1+n1\*c2)^2;

F=(Rs+Rp)/2-ri;



```

if abs(F)<=0.00001
    n2(i)=n20;
    break
end
end
end

n=n2.*n2;

nx=[];xx=[];

for i=2000:7469
    nx=[nx n(i)];
    xx=[xx x(i)];
end

%论文插图

%plot(r0,n2,'.')

%xlabel('反射率 (%) ')

%ylabel('折射率 (%) ')

%title('折射率与反射率的关系图')

%

%scatter(lam,n2,'.')

%xlabel('波长 (μm) ')

%ylabel('折射率 (%) ')

%title('折射率与波长的关系图')

%

%scatter(n2(2000:7469),boshu0(2000:7469),'.')

%ylabel('波数  cm^ (-1)')

%xlabel('折射率 (%) ')

```

```

%title('波数与折射率的关系图')

%

%scatter(boshu0(2000:7469),r0(2000:7469),'.')

%xlabel('波数  cm^ (-1)')

%ylabel('反射率  (%) ')

%title(['经数据预处理后反射率关于波数的变化图'])

```

```

%find peak 拟合寻找峰值对应波数

```

```

plot(xuhao,r0)

```

```

lis=[];

```

```

%找附件 1 峰对应

```

```

mmaaxx=[1950,2250,2800,3250,3800,4300,4800,5400,5900,6400,6950];

```

```

mmiinn=[2150,2650,3150,3650,4200,4700,5250,5750,6300,6850,7400];

```

```

%找附件 2 峰对应

```

```

%mmaaxx=[1950,2300,2850,3300,3850,4400,4900,5450,6000,6450,7000];

```

```

%mmiinn=[2200,2650,3200,3700,4250,4750,5350,5850,6400,7000,7400];

```

```

for tim=1:11

```

```

    xmin=mmaaxx(tim);

```

```

    xmax=mmiinn(tim);

```

```

    xx=xmin:xmax;

```

```

    yy=(r0(xx))';

```

```

    p=polyfit(xx,yy,2);

```

```

    y_fit=polyval(p,xx);

```

```

    for i=2:xmax-xmin

```

```

        if y_fit(i)>y_fit(i-1)&& y_fit(i)>y_fit(i+1)

```

```

            break

```

```

        end

    end

    clear xx yy p

    lis=[lis i+xmin];

    end

    for i=1:length(lis)-1

        m(i)=lam(lis(i+1))/(lam(lis(i))-lam(lis(i+1)));

        d(i)=m(i)*lam(lis(i))/(2*sqrt( (n2(lis(i)))^2 - (sin(theta))^2 ));%初始 d

    end

    dr=mean(d)

    var(d)


%初步拟合得到折射率关于载流子浓度与波长结果参数

A=6.4648;

B=0.3533;

C=0.1;

N=1;


%%

% 残差处理优化


for i=2000:7469

    nyu(i-1999)=A-N*10^19/(B*10^13*x(i)+C*10^19);

    nshi(i-1999)=n(i);

    cancha(i-1999)=nshi(i-1999)-nyu(i-1999);

    zhou(i-1999)=i;

```

```
end  
  
scatter(x(zhou),cancha,".")  
  
xlabel('波数方')  
  
%xlabel('序号')  
  
ylabel('原残差')%修正用 c()  
  
hold on  
  
cancha=0*x(zhou)  
  
plot(x(zhou),cancha,'r')
```

```
%取得 22 段的 23 个分界点
```

```
bound=[2011,2102,2429,2581,2872,3093,3356,3607,3869,4130,4394,4662,4925,518  
8,5459,5705,5988,6228,6519,6739,7050,7282,7468]
```

```
x1=x(bound(1):bound(2));  
  
y1=cancha(bound(1)-1999:bound(2)-1999);  
  
x2=x(bound(2):bound(3));  
  
y2=cancha(bound(2)-1999:bound(3)-1999);  
  
x3=x(bound(3):bound(4));  
  
y3=cancha(bound(3)-1999:bound(4)-1999);  
  
x4=x(bound(4):bound(5));  
  
y4=cancha(bound(4)-1999:bound(5)-1999);  
  
x5=x(bound(5):bound(6));  
  
y5=cancha(bound(5)-1999:bound(6)-1999);  
  
x6=x(bound(6):bound(7));  
  
y6=cancha(bound(6)-1999:bound(7)-1999);  
  
x7=x(bound(7):bound(8));  
  
y7=cancha(bound(7)-1999:bound(8)-1999);
```

```
x8=x(bound(8):bound(9));  
y8=cancha(bound(8)-1999:bound(9)-1999);  
x9=x(bound(9):bound(10));  
y9=cancha(bound(9)-1999:bound(10)-1999);  
x10=x(bound(10):bound(11));  
y10=cancha(bound(10)-1999:bound(11)-1999);  
x11=x(bound(11):bound(12));  
y11=cancha(bound(11)-1999:bound(12)-1999);  
x12=x(bound(12):bound(13));  
y12=cancha(bound(12)-1999:bound(13)-1999);  
x13=x(bound(13):bound(14));  
y13=cancha(bound(13)-1999:bound(14)-1999);  
x14=x(bound(14):bound(15));  
y14=cancha(bound(14)-1999:bound(15)-1999);  
x15=x(bound(15):bound(16));  
y15=cancha(bound(15)-1999:bound(16)-1999);  
x16=x(bound(16):bound(17));  
y16=cancha(bound(16)-1999:bound(17)-1999);  
x17=x(bound(17):bound(18));  
y17=cancha(bound(17)-1999:bound(18)-1999);  
x18=x(bound(18):bound(19));  
y18=cancha(bound(18)-1999:bound(19)-1999);  
x19=x(bound(19):bound(20));  
y19=cancha(bound(19)-1999:bound(20)-1999);  
x20=x(bound(20):bound(21));  
y20=cancha(bound(20)-1999:bound(21)-1999);  
x21=x(bound(21):bound(22));
```

```
y21=cancha(bound(21)-1999:bound(22)-1999);
```

```
x22=x(bound(22):bound(23));
```

```
y22=cancha(bound(22)-1999:bound(23)-1999);
```

```
%在曲线拟合器处理得到残差处理项相关参数
```

```
a=[0.2846,0.2363,-0.0883,-0.2656,0.2428,-0.2589,-0.2561,0.2521,0.4451,-0.1874,-  
0.1697,-0.2076,-0.1300,-0.1384,-0.1173,0.1923,0.3458,-0.1122,0.1798,0.0695,-  
0.1521,0.0485];
```

```
f=[39.1559,-20.5835,-48.9667,-53106,-7.9327,-0.2124,2.5642,-16.2527,-9.9386,-  
5.5458,-16.4019,-2.3536,-7.4866,29.6401,-20.9546,72.3932,1.0166,-  
15.3794,28.9024,-21.3306,4.7135,67.4226];
```

```
k=[1.1159,1.1597,1.3699,0.9412,0.9247,0.8482,0.8008,0.7499,-  
0.5175,0.7287,0.7035,0.5973,0.6662,0.5966,0.6021,0.4088,0.2390,0.4729,0.3534,0.56  
71,0.3259,0.6788];
```

```
z=[-0.1944,-0.2821,0.1061,-0.1382,0.0199,-0.0509,0.0047,-0.0002,-0.2531,-  
0.0188,0.0204,0.0427,0.0123,0.0047,-0.0126,0.0863,-0.2689,0.0143,-0.1178,-  
0.0317,-0.0895,-0.0486];
```

```
for i=2011:7469
```

```
    for j=1:22
```

```
        if i>=bound(j) && i<bound(j+1)
```

```
            zu=j;
```

```
        end
```

```
    end
```

```
        c(i)=a(zu)*sin(10^(k(zu)-6)*x(i)+f(zu))+z(zu);
```

```
end
```

```
for i=2011:7469
```

```
nyu(i-1999)=A-N*10^19/(B*10^13*x(i)+C*10^19)+c(i);
```

```
nshi(i-1999)=n(i);
```

```
cancha2(i-1999)=nshi(i-1999)-nyu(i-1999);
```

```
zhou(i-1999)=i;
```

```
end
```

```
%输出残差处理结果图
```

```
scatter(x(zhou),cancha2,".")
```

```
xlabel('波数方')
```

```
ylabel('改良后残差/原残差')
```

```
hold on
```

```
%%
```

```
%对参数进行优化求最佳 ABCN 以使 d 的方差最小
```

```
Ddn(1)=inf;
```

```
for A1=0.8*A:0.01*A:1.2*A
```

```
    for B1=0.8*B:0.01*B:1.2*B
```

```
        for C1=0.8*C:0.01*C:1.2*C
```

```
            for N1=0.8*N:0.01*N:1.2*N
```

```
                for i=1:length(lis)-1
```

```
                    nyh=sqrt(A1-N1/(B1*x(lis(i))+C1)+c(lis(i)));
```

```
                    m(i)=lam(lis(i+1))/(lam(lis(i))-lam(lis(i+1)));
```

```
                    dn(i)=m(i)*lam(lis(i))/(2*sqrt(nyh^2-(sin(theta))^2));
```

```
                end
```

```
            Ddn(2)=var(dn);
```

```
        if Ddn(2)<Ddn(1)
```

```
            Ddn(1)=Ddn(2);
```

```

        A0=A1;B0=B1;C0=C1;N0=N1;
    end
        end
    end
end
for i=1:10
    nfin(i)=sqrt(A0-N0/(B0*x(lis(i))+C0));
    m(i)=lam(lis(i+1))/(lam(lis(i))-lam(lis(i+1)));
    dfin(i)=m(i)*lam(lis(i))/(2*sqrt(nfin(i)^2-(sin(theta))^2));
end

```

%求 d 的置信区间、方差、相对误差进行可靠性分析

```

Dfin=var(dfin)
zxd=mean(dfin)-2.262*sqrt(Dfin/10)
z xu=mean(dfin)+2.262*sqrt(Dfin/10)
xd=(dr-mean(dfin))/dr

```

%%

% 以附件 2 为测试集检验可靠性

```

boshu2=readmatrix("附件 2.xlsx",'Range','A2:A7470');
r2=readmatrix("附件 2.xlsx",'Range','B2:B7470');
theta2=15/180*pi;n1=1;
xt=(boshu2.^2);%只要再取 2k+
for i=1:7469
    lam2(i)=(1/boshu2(i));

```



```

end

lis2=[2076,2510,2998,3498,4012,4539,5074,5596,6089,6648,7175];

for i=1:10

nt(i)=sqrt(A0-N0/(B0*xt(lis2(i))+C0)+c(lis2(i)));

mt(i)=lam2(lis2(i+1))/(lam2(lis2(i))-lam2(lis2(i+1)));

dt(i)=mt(i)*lam2(lis2(i))/(2*sqrt(nt(i)^2-(sin(theta2))^2));

end

```

%求外延层厚度平均值与置信区间用于检验可靠度

```

mean(dt)

zxd=mean(dt)-2.262*sqrt(var(dt)/10)

z xu=mean(dt)+2.262*sqrt(var(dt)/10)

```

%重新计算附件二反射率

% 以用于处理原来超过 100%的反射率和突变段反射率

```

for i=1:7469

nt2(i)=sqrt(A0-N0/(B0*xt(i)+C0)+c(i));

s1=sin(theta);

c1=cos(theta);

s2=n1^2*s1^2/nt2(i)^2;

c2=sqrt(1-s2);

Rs2=(n1*c1-nt2(i)*c2)^2/(n1*c1+nt2(i)*c2)^2;

Rp2=(nt2(i)*c1-n1*c2)^2/(nt2(i)*c1+n1*c2)^2;

R(i)=(Rs2+Rp2)/2;

end

R=R'

```

%问题三第二问求解

clear;clc

boshu0=readmatrix('附件 4.xlsx','Range','A2:A7470');

r0=readmatrix('附件 4.xlsx','Range','B2:B7470');

theta=15/180\*pi;

%求附件 4 的观测折射率与数据预处理

x=(boshu0.^2);%只要再取 2k+

for i=1:7469

lam(i)=(1/boshu0(i));

xuhao(i)=i;

end

r=r0./100;

s1=sin(theta);

c1=cos(theta);

n1=1;

for i=1:7469

ri=r(i);

for n20=1:0.0001:100%可能导致 n2 偏小

s2=n1^2\*s1^2/n20^2;

c2=sqrt(1-s2);

Rs=(n1\*c1-n20\*c2)^2/(n1\*c1+n20\*c2)^2;

Rp=(n20\*c1-n1\*c2)^2/(n20\*c1+n1\*c2)^2;

```

F=(Rs+Rp)/2-ri;
if abs(F)<=0.00001
    n2(i)=n20;
    break
end
end
end
n=n2.*n2;

```

```

%find peak
plot(xuhao,r0)
lis=[];
%附件 3 找峰对应的波数
%mmaaxx=[1,500,1200,2100,2950,3800,4700,5600,6400];
%mmiinn=[300,1000,1700,2550,3400,4300,5200,6100,7000];
%附件 3 找峰对应的波数
mmaaxx=[500,1300,2150,3000,3850,4750,5650,6500];
mmiinn=[1000,1700,2575,3450,4350,5250,6200,7200];
for tim=1:8
    xmin=mmaaxx(tim);
    xmax=mmiinn(tim);
    xx=xmin:xmax;
    yy=(r0(xx))';
    p=polyfit(xx,yy,2);
    y_fit=polyval(p,xx);
    for i=2:xmax-xmin

```

```

        if y_fit(i)>y_fit(i-1)&& y_fit(i)>y_fit(i+1)
            break
        end
    end
end
clear xx yy p
lis=[lis i+xmin];
end

%求解附件的 d 值
for i=1:length(lis)-1
    m(i)=lam(lis(i+1))/(lam(lis(i))-lam(lis(i+1)));
    d(i)=m(i)*lam(lis(i))/(2*sqrt( (n2(lis(i)))^2 - (sin(theta))^2 ));%初始 d
end
dr=mean(d)
var(d)

```