已知 Sellmeier 公式为

$$n^2 = 1 + \sum_{j=1}^m \frac{A_j \lambda_j^2}{\lambda^2 - \lambda_j^2} \tag{1}$$

现在取三阶,即

$$n^{2}(\lambda) = 1 + \frac{B_{1}\lambda^{2}}{\lambda^{2} - C_{1}^{2}} + \frac{B_{2}\lambda^{2}}{\lambda^{2} - C_{2}^{2}} + \frac{B_{3}\lambda^{2}}{\lambda^{2} - C_{3}^{2}}$$
(2)

所以,在拟合的过程中,需要将 B_1,C_1 等6个参数待定。

网页上给出的色散公式为

$$n^{2}(\lambda) = 1 + \frac{0.6961663\lambda^{2}}{\lambda^{2} - 0.0684043^{2}} + \frac{0.4079426\lambda^{2}}{\lambda^{2} - 0.1162414^{2}} + \frac{0.8974794\lambda^{2}}{\lambda^{2} - 9.896161^{2}}$$
(3)

整个过程如下:

- ①获取波长 λ 和折射率 n 的数据。本文通过网络爬虫,将网页上的 101 组数据保存下来,具体数据可以查看 data.txt 文件;
 - ②确定所要拟合函数的表达式,本文取式(2);
 - ③使用 python 第三方库 scipy 进行非线性拟合。

按照式(3),波长和折射率的曲线如图 1所示。按照式(2),并给 6 个参数设置取值范围,拟合后波长和折射率的曲线如图 2所示。为了能够有对照组,同样按照式(2),但不给其参数设置取值范围,得到拟合后的曲线如图 3所示。原始的 Sellmeir 公式以及将参数取值范围限制后拟合的曲线对比,如图 4所示。

因此,最终拟合后的式子为:

$$n^{2}(\lambda) = 1 + \frac{0.6999999\lambda^{2}}{\lambda^{2} - 0.0699999^{2}} + \frac{0.4099999\lambda^{2}}{\lambda^{2} - 0.1857398^{2}} + \frac{0.8\lambda^{2}}{\lambda^{2} - 9.999999^{2}}$$
(4)

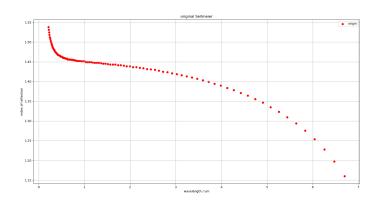


图 1: 原始Sellmeir公式曲线

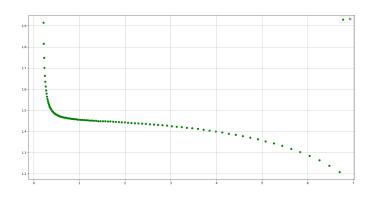


图 2: 参数限制取值范围拟合后Sellmeir公式曲线

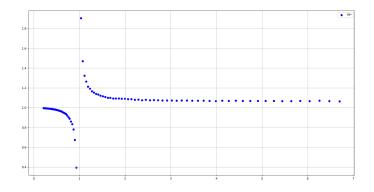


图 3: 参数取值无限制拟合后Sellmeir公式曲线

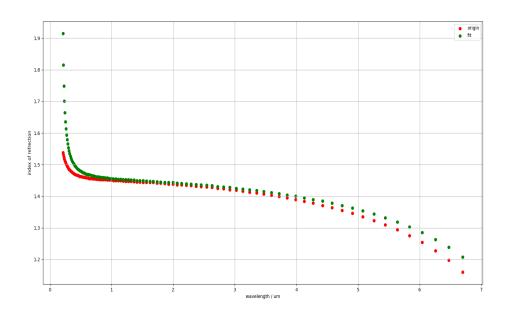


图 4: 原始以及拟合后Sellmeir公式曲线对比