2025 高教社杯全国大学生数学建模竞赛

承 诺 书

我们仔细阅读了《全国大学生数学建模竞赛章程》和《全国大学生数学建模竞赛参赛规则》(以下简称"竞赛章程和参赛规则",可从 http://www.mcm.edu.cn 下载)。

我们完全清楚,在竞赛开始后参赛队员不能以任何方式,包括电话、电子邮件、"贴吧"、QQ群、微信群等,与队外的任何人(包括指导教师)交流、讨论与赛题有关的问题,无论主动参与讨论还是被动接收讨论信息都是严重违反竞赛纪律的行为。

我们完全清楚,在竞赛中必须合法合规地使用文献资料和软件工具,不能有任何侵犯知识产权的行为。否则我们将失去评奖资格,并可能受到严肃处理。

我们以中国大学生名誉和诚信郑重承诺,严格遵守竞赛章程和参赛规则,以保证竞赛的公正、公平性。如有违反竞赛章程和参赛规则的行为,我们将受到严肃处理。

我们授权全国大学生数学建模竞赛组委会,可将我们的论文以任何形式进行公开展示(包括进行网上公示,在书籍、期刊和其他媒体进行正式或非正式发表等)。

我们参赛选择的题号(从 A/B/C/D/E 中选择一项填写):B				
我们的报名参赛队号(12位数字全国统一编号):				
参赛学校(完整的学校全称,不含院系名):				
参赛队员 (打印并签名): 1. 李冬阳				
2. 曹芷维				
3. 朱韵桐				
指导教师或指导教师组负责人 (打印并签名): 陈磊				
(指导教师签名意味着对参赛队的行为和论文的真实性负责)				
日期: 2025 年9月7日				

(请勿改动此页内容和格式。此承诺书打印签名后作为纸质论文的封面,注意电子版论文中不得出现此页。以上内容请仔细核对,如填写错误,论文可能被取消评奖资格。)

赛区评阅编号:	全国评阅编号:	
(由赛区填写)	(全国组委会填写)

2025 高教社杯全国大学生数学建模竞赛

编号专用页

赛区评阅记录(可供赛区评阅时使用):

	 · \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \ \	 12/19/4	
评阅人			
备注			

送全国评阅统一编号:

(赛区组委会填写)

(请勿改动此页内容和格式。此编号专用页仅供赛区和全国评阅使用,参赛队打印后装订到纸质论文的第二页上。注意电子版论文中不得出现此页。)

全国大学生数学建模竞赛论文模板

摘要

本文围绕碳化硅外延层厚度的测量这一问题,以**红外干涉法**为主要手段,针对双光 束干涉和多光束干涉的不同情景分别建立数学模型并设计厚度求解方案,旨在制定一套 科学、准确、可靠的碳化硅外延层厚度测试标准。

对于问题一,基于光在外延层-衬底只发生一次反射的双光束干涉的情景,我们利用干涉的基本原理,由几何关系推得光程差,进而推导出双波束相位差,并利用**斯涅尔折射定律**和干涉条件下的相位差所满足的关系式,建立起红外光谱的波长、外延层的折射率和红外光的入射角等参数与外延层厚度相关联的数学模型,为厚度计算提供理论基础。

对于问题二,基于问题一所建立的数学模型,设计了外延层厚度的算法,并将附件 1 和附件 2 的数据可视化处理,利用**傅里叶变换**提取周期。同时结合**菲涅尔公式**精确计算折射率数据,算得外延层厚度为???,通过模型的检验和计算过程的分析,验证模型的可靠性与准确性。

对于问题三,基于光学理论分析,推导出多光束干涉下反射率的特性及其发生的必要条件。多光束干涉情况下,反射率-波数图像表现出不对称性,但波谷分布位置与双光束干涉相同。利用此特性,对附件3和附件4中硅晶圆的反射率数据进行分析,准确计算硅外延层厚度为???。同时,提取多光束干涉的特征并设计相应数学模型及算法。计算结果表明,多光束干涉能提升厚度计算的精度。针对碳化硅晶圆片(附件1和附件2)数据分析,认为多光束干涉影响可忽略,仅发生双光束干涉。

该研究系统性地建立了双光束及多光束干涉模型,设计了相应的厚度求解方法,并通过实验数据验证,具有较高的科学性和应用价值。

关键字: 光的干涉 菲涅尔定律 高斯滤波 傅里叶变换 时间序列分析

一、问题重述

1.1 问题背景

碳化硅(SiC)作为第三代半导体材料,因其优异的物理与电学性能,在高温、高压、高频等极端工况下展现出巨大潜力。外延层厚度是 SiC 器件设计与制造中的关键参数,直接影响器件的核心性能指标。因此,建立一套无损、高精度、可重复的外延层厚度测试标准,对产业界与学术界均具有重要意义。

红外干涉法是目前主流的无损检测手段,利用 SiC 外延层与衬底层折射率不同的特性,发射红外光线并接受来自外延层与衬底层的反射光线,确定 SiC 外延层的厚度。其基本原理是: 红外光在 SiC 外延层表面与外延/衬底界面分别发生反射,两束反射光因光程差产生干涉条纹,通过分析反射光谱,间接计算外延层的厚度。

1.2 问题要求

问题 1 在仅考虑一次反射与透射的简化情形下,建立由红外光谱反演 SiC 外延层厚度的通用数学模型。

问题 2 利用问题一中我们提出的模型,利用附件 1、2 中的实测数据计算 SiC 外延 层厚度,并分析结果的可靠性。

问题 3 考虑多波束干涉的情况,调整上文提出的模型。利用适用于多波束干涉的模型计算附件 3、4 中的硅外延层厚度。同时,根据建立的数学模型,分析多波束干涉发生的条件,分析多波束干涉现象对于测量精度的影响,判断附件 1、2 中是否存在多波束干涉。

二、问题分析

2.1 问题一分析

红外干涉法测量碳化硅外延层厚度的核心在于双光束干涉现象。当红外光以特定入射角照射样品时,在外延层表面与衬底界面分别产生一束反射光。这两束光因传播路径不同形成光程差,其大小取决于外延层厚度、材料折射率及入射光波长。光程差导致两束光在探测器处发生相位叠加: 当相位相同时呈现相长干涉(反射率极大值),相位相反时则发生相消干涉(反射率极小值)。

另外,外延层折射率与入射光波长有关,即材料的色散现象。不同波长的入射光在 材料中经历不同的折射行为,这使得光程差成为波长的某种复合函数。这一特性导致反 射光谱呈现周期性振荡现象——反射率随波长变化形成明暗交替的干涉条纹,即反射率 函数呈现出波动的特性。条纹的振荡频率与外延层厚度直接关联:厚度越大,光谱振荡 越密集:厚度越小,振荡越稀疏。

因此,反射率振荡曲线的特征提取是厚度计算的关键。通过分析震荡曲线的特性可建立振荡周期特征与外延层厚度的定量映射关系,即所求数学模型。

2.2 问题二分析

对于问题二,

2.3 问题三分析

对于问题三,

三、模型假设

为简化问题,本文做出以下假设:

- 假设1材料均匀:假设外延层是厚度均匀、光学性质各向同性的介质,且其上、下表面是光滑的理想平行平面。
 - 假设 2 折射率假设: 假设入射介质为空气, 其折射率 n_0 恒定为 1。
 - 假设 3 光源假设: 入射的红外光可视为理想的单色平行光。

四、符号说明

符号	说明	单位
d	外延层厚度	μm
n	折射率	无单位
heta	入射角	度 (°)
$ heta_2$	折射角	度 (°)
Δd	光程差	μm
λ	波长	μm
$ ilde{ u}$	波数	cm^{-1}

五、问题一的模型的建立和求解

5.1 模型建立

5.1.1 双光束干涉的基本原理

光具有波动性,当两列(或更多)频率相同、振动方向相同、相位差恒定的相干光波在空间相遇时,会发生干涉现象。反射光1为入射光在空气-外延层界面直接反射的光,反射光2为入射光在透射过空气-外延层界面,在外延层-衬底界面反射,然后透射过空气-外延层界面射出的光,两光束实际为同一光源发出,相干性良好。

由于反射光 2 比反射光 1 多走一段光程,这个固定的光程差导致两束光之间产生了一个恒定的相位差,当光束由空气(光疏介质)进入外延层(光密介质)反射光有π的相位突变(半波损失),虽然我们无法判断当光由外延层进入衬底时是否会发生半波损失,但在两种情况下两束光由于半波损失造成的附加的相位差是一定的。综上,光程差和半波损失共同造成的相位差是恒定的,又因为两束光具有高度相关性,所以当两束光在空间中相遇时会发生干涉现象。

由于外延层的折射率会随着波长的改变而变化,所以当入射光的波数改变时,两束 光之间的光程差会发生改变,进而。若光程差为半波长的偶数倍,此时发生干涉相长, 反射光增强而产生明纹;若光程差为半波长的奇数倍,此时发生干涉相消,反射光减弱 而产生暗纹(需解释为啥)。综上,随着波数的增加,会形成明暗相间的干涉条纹,进 而体现在反射率-波数函数曲线的振荡周期性变化,其中函数的极大值对应明纹,极小 值对应暗纹。

由于半波损失带来的相位差是一定的,不会对函数曲线的振荡周期产生影响,因此不会影响本文所建立模型中外延层厚度的计算。所以后文中两束光的相位差简化为只由 光程差所造成的相位差。

5.1.2 数学模型建立

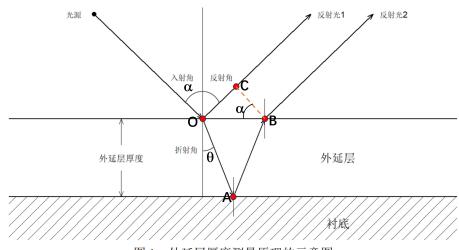


图 1 外延层厚度测量原理的示意图

图 1

考虑如图所示的双光束干涉几何结构,设入射光在介质界面发生折射后,形成两束相干光:一束经上表面反射(光程记为 L_1),另一束经下表面反射后返回(光程记为 L_2)。两束光在空气中叠加产生干涉条纹。根据几何关系,可得光程差 $\Delta L = L_2 - L_1$ 满足:

$$\Delta L = n_2 \cdot (AO + AB) - n_1 \cdot OC \tag{1}$$

其中:

- n_1 : 入射介质(如空气)的折射率;
- n_2 : 外延层(如 SiC)的折射率;
- d: 外延层厚度;
- α: 入射角 (空气中);
- *θ*: 折射角 (外延层内);
- AO, AB: 外延层内光线传播路径长度;
- OC: 空气中反射路径在水平方向的投影长度。

由几何对称性及折射定律,进一步可得:

$$AB = AO = \frac{d}{n_2 \sin \theta} \tag{2}$$

$$OC = OB \cdot \tan \alpha = 2 \cdot AO \cdot \sin \theta \cdot \tan \alpha = 2d \cdot \frac{\tan \alpha}{n_2}$$
 (3)

由于斯涅尔折射定律:

$$n_1 \sin \alpha = n_2 \sin \theta \tag{4}$$

联立 (1) (2) (3) (4), 并代入 $\tan \alpha = \frac{\sin \alpha}{\cos \alpha}$, 解得:

$$\begin{split} \Delta L &= 2d \left(\frac{1}{\sin \theta} - \frac{n_1 \sin \alpha}{n_2 \cos \alpha} \right) \\ &= 2d \left(\frac{n_2}{n_1 \sin \alpha} - \frac{n_1 \sin \alpha}{n_2 \cos \alpha} \right) \quad (\text{R}\lambda \sin \theta) \end{split}$$

由于 $n_1 \approx 1$ (空气),该式可进一步简化为:

$$\Delta L = 2d\sqrt{n_2^2 - \sin^2 \alpha} \tag{5}$$

相位差:

$$\Delta \phi = 2\pi \frac{\Delta L}{\lambda} \tag{5}$$

干涉相长-"明纹"情况下双光束的相位差所满足的条件:

$$\frac{2\pi}{\lambda}\Delta L = 2 \cdot m \cdot \pi \quad (m = 1, 2, 3, \ldots)$$
 (6)

干涉相消-"暗纹"情况下双光束的相位差所满足的条件:

$$\frac{2\pi}{\lambda} \Delta L = (2 \cdot m + 1) \cdot \pi \quad (m = 1, 2, 3, ...)$$
 (7)

在实际观测中,我们发现 SiC 外延层的折射率会随着波长的变化而变化,在第二问的求解中,我们将会考虑波长对于折射率的影响。在此处,我们认为在波数变化不大的一段范围内,折射率可以视为常数。因此我们的结论是 (带初相位 φ):

$$d = \frac{m(\lambda + \varphi)}{2\sqrt{n_2^2 - \sin \alpha^2}} \tag{8}$$

通过观测数据的两个峰值的间距,或者波谷(把波长换算为波数)。有:

$$2v_1d\sqrt{n_2^2 - \sin\alpha^2} = m\tag{9}$$

$$2v_2d\sqrt{n_2^2 - \sin\alpha^2} = m + 1 \tag{10}$$

(9)(10)作差得:

$$2(v_2 - v_1)d\sqrt{n_2^2 - \sin\alpha^2} = 1 \tag{11}$$

令 $|v_1 - v_2| = \Delta T$, 并整理得到外延层厚度 d 的表达式为:

$$d = \frac{1}{2\Delta T \sqrt{n_2^2 - \sin \alpha^2}} \tag{12}$$

综上所述: 厚度 d 由波数差 ΔT , 折射率 n_2 , 以及入射角 α 确定, 三者关系如下:

$$\begin{cases}
d = \frac{1}{2\Delta T \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \alpha}} \\
|v_1 - v_2| = \Delta T \\
n_2 = f(v)
\end{cases} \tag{13}$$

其中 f(v) 为波数与折射率的关系函数,该函数与材料本身性质有关。

六、第二问的模型的建立和求解

由第一问可以得到厚度计算的基本模型,针对给出的 SiC 材料红外干涉法的数据,我们将通过数据预处理、折射率函数求解、周期提取、模型验证等步骤,应用第(1)问的模型并求解。

6.1 数据可视化与预处理

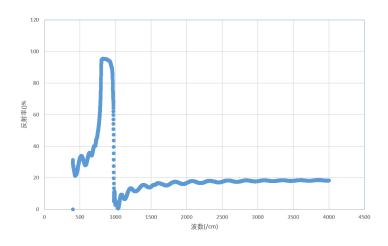


图 2 附件 1 反射率-波数图

绘制附件一的图像,我们明显看到,附件 1 数据在波数在 500-1000cm⁻¹ 范围有着明显的突变,附件 2 的数据特征与之类似。通过查询论文 [1],我们得知,SiC 外延样品的反射光谱可分为四个光谱区域,

- 500-700 cm⁻¹: 厚度振荡区,对材料本身杂志等成分敏感;
- 700-1000 cm⁻¹: 余辉带, 具有高吸收率;
- 1000-1500 cm⁻¹: 过渡区,介于吸收与透明之间;
- $> 1500 \text{ cm}^{-1}$: 透明区,能够较好的显示厚度产生的振荡。

因此,我们选取波数在1500cm⁻¹以上的数据进行分析。

6.1.1 菲涅尔公式

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。由于附件1和附件2使用的是同一块块碳化硅晶圆片,故可以假设载流子浓度一定,折射率仅与波长有关。

菲涅耳公式描述了光在不同介质分界面上的反射和折射的振幅、相位等关系。能够结合光的反射、折射等光学现象的观测数据来得到折射红外光谱的波长等参数有关。这两个公式给出了 R_s 和 R_p 的具体表达式。

• s-偏振反射率 (R_s):

$$R_s = \left| \frac{n_1 \cos \theta_i - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t} \right|^2$$

• p-偏振反射率 (R_n):

$$R_p = \left| \frac{n_2 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_2 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t} \right|^2$$

其中, n_1 为入射介质的折射率, n_2 为折射介质的折射率, θ_i 为入射角度, θ_t 为折射角度。 R_s 和 R_p 分别是 s-偏振光 (TE 波) 和 p-偏振光 (TM 波) 的表达式。我们认为,红外干涉法所使用的光为非偏振光,反射率 $R = \frac{1}{2}(R_s + R_p)$ 。

与式(4)进行联立,我们解得:

$$R = \frac{K}{K+1} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{n_1 \cos \theta_i - \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i}}{n_1 \cos \theta_i + \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i}} \right)^2 + \left(\frac{n_2^2 \cos \theta_i - n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i}}{n_2^2 \cos \theta_i + n_1 \sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i}} \right)^2 \right]$$
(14)

6.1.2 计算折射率

上文提到,波数在 1500cm⁻¹ 以上时,SiC 可视为透明介质,即光线射向 SiC 表面时只会发生反射、透射而不会吸收。又由于本题的假设中,仅考虑双光束干涉,所以我们认为在双光束干涉近似下,透明介质(如 SiC,无吸收)薄膜的反射率由两束相干光叠加决定:第一束为上表面直接反射光,其强度 R_0 依赖入射角 θ_0 ,取式 (13) 菲涅尔反射率 R_0 ,其中 θ 为膜内折射角,满足式 (4) n_0 sin θ_0 = n sin θ ; 第二束光强度为 R_1 = $R_0(1-R_0)^2$ 。二者相位差为 $\phi = \frac{4\pi}{2} nd \cos \theta$ 。总反射率为:

$$R = R_0 + R_1 - 2\sqrt{R_0 R_1} \cos \phi \tag{15}$$

反射率随 $d \times \lambda$ 或 θ_0 呈周期性变化。观察式 (14),我们发现 SiC 外延层反射率随波数变化的图象可进行分解为两个部分:第一部分是与波数无关的常数项,第二部分是与波数

相关的项。利用傅里叶变换,我们将附件1、2的数据分解为了波动部分和趋势部分,如图所示:

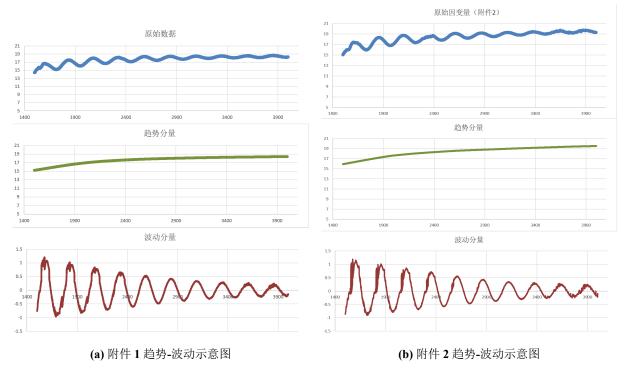


图 3

图中趋势部分的大小代表 R_0+R_1 的大小,波动部分的振幅代表 $2\sqrt{R_0R_1}$ 的大小。 对范围内的 R_0 和 R_1 进行求解,我们可以得到 R_0 随波束变化的函数图象,如图所示:

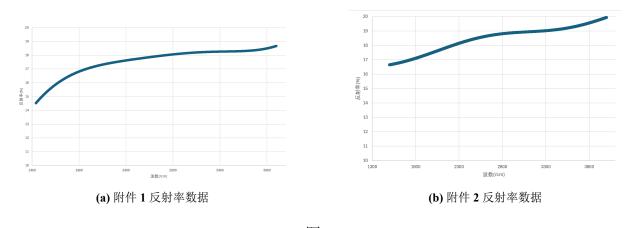


图 4

接着,分别在10°(附件1)和15°(附件2)的情境下代入式(13)求得数值解,如图,以下是附件1和附件2的折射率计算结果:

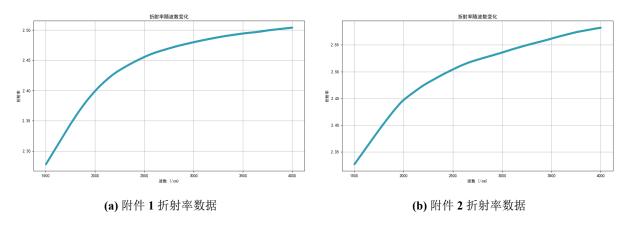


图 5

6.2 计算 d

们提取出了附件 1 函数的周期性变化的周期,通过(什么方法)得到最优 T 通过最优 T 我们根据公式,我们带入附件 1 求出的 T,附件 1 的角度 15 度,以及相对应的折射率最终计算出 d 的结果为:没计算出来

6.3 验证

从题目得知,附件一和附件二是基于同一块材料所做的两次实验,两次实验的不同在于入射角角度不同。所以,理论上讲,我们使用附件一和附件二计算出来的 d 是相同的。基于这个物理事实,我们选择使用使用附件二,用处理附件一的方法处理附件二,得出 d 值,然后比较二者的相对偏差。如果 d 的相对偏差在可接受程度之内,说明我们的模型具有可靠性。第二,我们还通过,求附件一和附件二的 d 的均值,然后反代入我们的模型,看最终数据与我们附件一和附件二的偏差程度,若偏差程度在可接受程度内,则说明模型具有一定的可靠性。第三,我们还可以进行灵敏度分析,进一步验证模型的可靠性。(这里思路有了,但还没想好)

6.3.1 附件 2 验证

我们把附件 2 按照上面的方法再次求出: 计算相对偏差率: 我们发现相对偏差率小于 1

6.3.2 灵敏度分析

因为我们只有附件一和附件二的数据,所以我们不知道改如何进行灵敏度分析,这 里我建议直接调教 AI,让 AI 看看能不能进行灵敏度分析,如果能,直接赢了好吧。

6.4 总结

经过三次验证,我们的模型相对偏差多少,置信度区间多少,然后夸一夸,也可以再分析不足(比如在我们的折射率使用的就是一个周期内波数中点的折射率,这个会产生一部分的误差)

七、问题三的模型的建立和求解

7.1 必要条件

光波的入射条件:光波必须是从折射率较低的介质(如空气)垂直入射到外延层与 衬底的界面上,才能保证反射和透射产生明显的干涉效应。

多次反射:光波必须在外延层和衬底的界面之间反射多次。每次反射后,光波的传播路径和相位都会发生变化,形成干涉图样。

相位反转:每次反射都会导致相位的变化,尤其是在光波从折射率较大的介质(外延层)反射回折射率较小的介质(空气或衬底)时,会发生半波相位反转。

干涉条件:为了形成清晰的干涉图样,光波的反射路径差必须满足干涉条件。具体为:

$$2n_2d = m\lambda_2$$
 或 $2n_2d = \left(m + \frac{1}{2}\right)\lambda_2$

其中, n_2 是外延层的折射率,d 是外延层的厚度, $\lambda_2 = \frac{\lambda}{n_2}$ 是光在外延层中的波长,m 为整数,表示干涉级数。

多光東干涉的贡献:每一次反射的光波都会对总干涉图样产生贡献,干涉强度是各反射光波幅度和相位的叠加。

外延层的折射率与波长:外延层的折射率和光的波长对干涉效果有重要影响。不同的折射率和波长会改变光波传播的速度,从而影响干涉条纹的形成。

7.2 模型求解

Step1:

Step2:

Step3:

7.3 求解结果

八、模型的分析与检验

- 8.1 灵敏度分析
- 8.2 误差分析

九、模型的评价

- 9.1 模型的优点
 - 优点 1
 - 优点 2
 - 优点 3
- 9.2 模型的缺点
 - 缺点1
 - 缺点 2

参考文献

[1] ÉVA NAJBAUER E. Uncovering the secrets of sic epilayers[J/OL]. Compound Semi-conductor Magazine, 2024, 2024(4). https://compoundsemiconductor.net/article/119394/Uncovering_the_secrets_of_SiC_epilayers.

附录 A 文件列表

文件名	功能描述
example.py	问题一程序代码

附录 B 代码

example.py

```
import math
import numpy as np
def calculate_shadow_vertices(sunlight_dir, mirror_normal, L, W, H):
   计算太阳光照射到地面上的反射镜后, 在地面上投射的阴影的四个顶点坐标。
   参数:
     sunlight_dir (tuple): 太阳光方向向量 (dx, dy, dz)
     mirror_normal (tuple): 镜面法向量 (nx, ny, nz)
     L (float): 反射镜的长度(沿局部x轴方向)
     W (float): 反射镜的宽度(沿局部y轴方向)
     H (float): 安装高度 (z坐标)
   返回:
     list of tuples: 四个阴影顶点的坐标(x, y)
  # 将输入向量转换为单位向量
  sun_dx, sun_dy, sun_dz = [v/np.linalg.norm(sunlight_dir) for v in sunlight_dir]
  nx, ny, nz = [v/np.linalg.norm(mirror_normal) for v in mirror_normal]
  # 计算镜面坐标系 (局部坐标系)
  # 局部z轴为镜面法线方向
  local_z = np.array([nx, ny, nz])
   # 创建局部x轴(假设初始方向为全局x轴投影到镜面)
  global_x_proj = np.array([1, 0, 0]) - np.dot([1, 0, 0], local_z) * local_z
  if np.linalg.norm(global_x_proj) < 1e-6:</pre>
      global_x_proj = np.array([0, 1, 0]) - np.dot([0, 1, 0], local_z) * local_z
  local_x = global_x_proj / np.linalg.norm(global_x_proj)
  # 创建局部v轴 (通过叉乘)
  local_y = np.cross(local_z, local_x)
  # 计算镜面四个顶点在全局坐标系中的坐标
```

```
vertices_local = [
   (-L/2, -W/2, 0),
   (L/2, -W/2, 0),
   (L/2, W/2, 0),
   (-L/2, W/2, 0)
]
# 转换到全局坐标系并抬升到高度H
vertices_global = []
for v in vertices_local:
   # 局部坐标到全局坐标的转换: 中心在 (0, 0, H)
   global_v = np.array([0, 0, H]) + v[0]*local_x + v[1]*local_y + v[2]*local_z
   vertices_global.append((global_v[0], global_v[1], global_v[2]))
def project_point(x, y, z):
   """将三维点投影到地面(z=0)"""
   if math.isclose(sun_dz, 0, abs_tol=1e-9):
      raise ValueError("太阳光方向水平,无法计算阴影。")
   t = z / sun_dz
   return (x - t*sun_dx, y - t*sun_dy)
# 投影四个顶点
print([(f"{v[0]:.4f}", f"{v[1]:.4f}", f"{v[2]:.4f}") for v in vertices_global])
return [project_point(*v) for v in vertices_global]
```