物理系统:
一个三层平面结构，自上而下分别为：

- **介质0**: 空气，折射率为 n_0。
- **介质1**: 外延层（薄膜），厚度为 d，复折射率为 $\tilde{n}_1$。
- **介质2**: 衬底，折射率为 n_2。

基本假设:

1. **界面理想化**: 假设外延层的上下两个界面都是光学平坦、光滑且相互平行的，忽略由粗糙度引起的光散射。
2. **介质性质**: 假设每一层介质都是均匀且各向同性的。
3. **光源性质**: 入射光为单色平面波。对于非单色光谱，我们逐一计算每个波长（波数）的情况。同时，假设入射光为**非偏振光**，即其振动方向在垂直和平行于入射面的分量（s-偏振和p-偏振）上能量相等。
4. **光学常数设定**:
   - **空气 (介质0)**: 绝对真空，为非吸收介质，其折射率 $n_0 = 1$。
   - **外延层 (介质1)**: 是一种**有吸收、有色散**的介质。因此，其折射率 $\tilde{n}_1$ 必须是一个随波长 λ 变化的**复数**，记为 $\tilde{n}_1(\lambda) = n_1(\lambda) + i k_1(\lambda)$。其中 $n_1(\lambda)$ 是折射率实部，$k_1(\lambda)$ 是消光系数。
   - **衬底 (介质2)**: 在所研究的波段内，假设其为**无吸收、无色散**的理想透明介质。因此，其折射率 n_2 是一个**实常数**。
5. **干涉条件**: 假设从外延层上表面反射的光（反射光1）与穿透外延层后从下表面反射的光（反射光2、3、4...）之间满足相干条件，能够发生干涉。

2. 物理推导过程

推导的核心是求解在上述三层模型中，总的反射光波振幅与入射光波振幅的比值（即总反射系数），其模的平方就是我们测量的反射率 R。

步骤 1: 光程差与相位差

- 一束光以入射角 θ_0 从空气射入外延层，根据**斯涅尔定律 (Snell's Law)**，其在介质1中的折射角 θ_1 满足：$n_0 \sin(\theta_0) = \tilde{n}_1 \sin(\theta_1)$。
- 在相邻两束反射光之间（例如图2中的光束1和光束2），光束2比光束1多走了在外延层内部来回一次的几何路径。这个过程产生的光程差 (OPD) 为：

$$\mathrm{OPD} = 2d\tilde{n}_1 \cos(\theta_1)$$

- 由此，两束相邻反射光之间的相位差 δ 为：

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda}\mathrm{OPD} = \frac{4\pi d\tilde{n}_1 \cos(\theta_1)}{\lambda}$$

  其中 λ 是光在真空中的波长。如果使用波数 ν (cm^{-1})，则 $\lambda = 1/\nu$，公式变为 $\delta = 4\pi d \nu \tilde{n}_1 \cos(\theta_1)$。

步骤 2: 界面反射与透射——菲涅尔方程 (Fresnel Equations)

光在不同介质界面上的反射和透射振幅由菲涅尔方程描述。我们需要考虑两个界面：

- **界面0→1**: 空气到外延层
- **界面1→2**: 外延层到衬底

对于非偏振光，我们需要分别计算s-偏振和p-偏振的情况。

- **s-偏振 (电场分量垂直于入射面)**:

$$r_{01s} = \frac{n_0 \cos(\theta_0) - \tilde{n}_1 \cos(\theta_1)}{n_0 \cos(\theta_0) + \tilde{n}_1 \cos(\theta_1)}$$

$$r_{12s} = \frac{\tilde{n}_1 \cos(\theta_1) - n_2 \cos(\theta_2)}{\tilde{n}_1 \cos(\theta_1) + n_2 \cos(\theta_2)}$$

- **p-偏振 (电场分量平行于入射面)**:

$$r_{01p} = \frac{\tilde{n}_1 \cos(\theta_0) - n_0 \cos(\theta_1)}{\tilde{n}_1 \cos(\theta_0) + n_0 \cos(\theta_1)}$$

$$r_{12p} = \frac{n_2 \cos(\theta_1) - \tilde{n}_1 \cos(\theta_2)}{n_2 \cos(\theta_1) + \tilde{n}_1 \cos(\theta_2)}$$

其中，`r01` 和 `r12` 分别代表在两个界面上的菲涅尔反射系数。

步骤 3: 多光束干涉求和

总的反射光是所有从上表面出射的反射光（图2中的1, 2, 3, 4...）的相干叠加。这是一个等比数列求和问题。总的反射振幅系数 `r` 可以表示为：

$$r = r_{01} + t_{01}t_{10}r_{12}e^{i\delta} + t_{01}t_{10}r_{12}^2r_{10}e^{i2\delta} + \dots$$

利用 `r₁₀ = -r₀₁` 和 `t₀₁t₁₀ = 1 - r₀₁²` 的关系，这个无穷级数可以被精确求和，得到多光束干涉的**总反射振幅系数**公式：

$$r = \frac{r_{01} + r_{12}e^{i\delta}}{1 + r_{01}r_{12}e^{i\delta}}$$

步骤 4: 计算总反射率

反射率 `R` 是反射光强与入射光强的比值，等于总反射振幅系数模的平方 (`R = |r|²`)。
由于入射光是非偏振的，总反射率是s-偏振和p-偏振反射率的算术平均值：

$$R_s = |r_s|^2 = \left| \frac{r_{01s} + r_{12s}e^{i\delta}}{1 + r_{01s}r_{12s}e^{i\delta}} \right|^2$$

$$R_p = |r_p|^2 = \left| \frac{r_{01p} + r_{12p}e^{i\delta}}{1 + r_{01p}r_{12p}e^{i\delta}} \right|^2$$

$$R_{total} = \frac{R_s + R_p}{2}$$

这就是最终我们用来与实验数据进行比较的理论反射率 `R`。

附注：问题1中提到的“只有一次反射”的情形，是上述模型的一个简化。它忽略了分母中的 `r₀₁r₁₂` *项，认为* `|r₀₁r₁₂| << 1`*，此时总反射振幅近似为* `r ≈ r₀₁ + r₁₂e^(iδ)`*。这被称为双光束干涉模型。而我们这里推导的是更精确的多光束干涉模型。*

---

3. 基本数学模型总结

综上所述，确定外延层厚度的基本数学模型由以下几个部分构成：

A. 外延层光学常数模型 (色散模型)
外延层的复折射率 `ñ₁(λ)` 随波长 `λ` 的变化关系需要用一个色散模型来描述。代码中采用了：

- **折射率实部** `n₁(λ)`: 使用**Sellmeier方程**描述：

$$n_1(\lambda)^2 = 1 + \frac{B_1\lambda^2}{\lambda^2 - C_1} + \frac{B_2\lambda^2}{\lambda^2 - C_2} + \frac{B_3\lambda^2}{\lambda^2 - C_3}$$

- **消光系数** `k₁(λ)`: 使用**幂律模型**描述：

$$k_1(\lambda) = A \cdot \lambda^B$$

B. 总反射率物理模型

总反射率 R 是关于波长 λ (或波数 ν) 的函数，并且依赖于一系列未知物理参数：

$$R(\lambda; d, n_2, \{B_i, C_i\}, A, B) = \frac{R_s + R_p}{2}$$

其中 R_s 和 R_p 由上述**步骤4**中的菲涅尔方程和多光束干涉公式完全定义。

C. 待定参数

整个模型中需要通过实验数据来确定的未知参数集合为：

- 外延层厚度: d
- 衬底折射率: n_2
- Sellmeier方程参数: B_1, C_1, B_2, C_2, B_3, C_3
- 吸收模型参数: A, B