

基于残差分析的干涉模型有效性验证方法——以 SiC 外延层红外测厚为例

陈连芳, 蔡心怡, 郑斯斯*

惠州学院数学与统计学院 广东惠州

【摘要】 红外干涉法测量外延层厚度时, 多光束效应会导致双光束模型产生系统性偏差。针对现有模型有效性验证方法计算复杂的问题, 本研究提出一种基于残差分析的快速判断方法。以 SiC 外延层 10° 和 15° 入射角红外反射光谱为研究对象, 采用双光束模型进行非线性拟合, 通过分析拟合残差的周期性、符号规律和幅度特征, 建立多光束效应的判据。结果表明: 10° 入射角下残差范围 $-0.6\sim+0.2$ 、均方根 0.32, 15° 入射角下残差范围 $-0.55\sim+0.18$ 、均方根 0.30; 残差呈现与干涉条纹同频的周期性振荡, 频谱相关系数 >0.95 ; 所有波峰处残差为负、波谷处残差为正, 峰负谷正比例均为 100%。归纳出多光束效应判据: 残差与干涉条纹同频振荡、波峰处残差为负且波谷处残差为正、残差均方根 >0.2 。该方法仅需模型拟合结果即可完成分析, 无需额外材料参数, 为双光束模型的适用性判断提供依据。

【关键词】 残差分析; 红外干涉; 双光束模型; 多光束效应

【基金项目】 2024 年度广东省本科高校教学质量与教学改革工程项目: 数据赋能与思政引领深度融合的数学类专业《数学建模》课程改革研究 (粤教高函〔2024〕30 号); 2024 年广东省教育科学规划课题-高等教育专项 (2024GXJK352); 惠州学院 2024 年教学质量与教学改革工程项目: 融合课程思政与竞赛动力的《数学建模》教学创新研究 (惠院发〔2024〕173 号)

【收稿日期】 2026 年 2 月 17 日 **【出刊日期】** 2026 年 3 月 18 日 **【DOI】** 10.12208/j.sdr.20260039

A method for validating the validity of interference models based on residual analysis: A case study of infrared thickness measurement of SiC epitaxial layers

Lianfang Chen, Xinyi Cai, Sisi Zheng*

School of Mathematics and Statistics, Huizhou University, Huizhou, Guangdong

【Abstract】 When measuring epitaxial layer thickness using infrared interferometry, the multi-beam effect can lead to systematic deviations in the two-beam model. To address the computational complexity of existing model validity verification methods, this study proposes a rapid judgment approach based on residual analysis. Taking the infrared reflectance spectra of SiC epitaxial layers at incident angles of 10° and 15° as the research object, nonlinear fitting is performed using the two-beam model. By analyzing the periodicity, sign pattern, and amplitude characteristics of the fitting residuals, criteria for identifying the multi-beam effect are established. The results indicate that at a 10° incident angle, the residual ranges from -0.6 to $+0.2$ with an RMS of 0.32; at a 15° incident angle, the residual ranges from -0.55 to $+0.18$ with an RMS of 0.30. The residuals exhibit periodic oscillations at the same frequency as the interference fringes, with a spectral correlation coefficient exceeding 0.95. At all peak positions, the residuals are negative, while at all valley positions, they are positive, with both the negative-at-peak and positive-at-valley proportions reaching 100%. The criteria for the multi-beam effect are summarized as follows: the residuals oscillate at the same frequency as the interference fringes, residuals are negative at peaks and positive at valleys, and the RMS of residuals exceeds 0.2. This method requires only the model fitting results for analysis, without the need for additional material parameters, providing a basis for assessing the applicability of the two-beam model.

【Keywords】 Residual analysis; Infrared interferometry; Dual-beam model; Multi-beam effects

*通讯作者: 郑斯斯 (1990-) 女, 广东汕头人, 博士, 副教授, 研究方向: 物流与供应链管理。

1 引言

碳化硅 (SiC) 作为第三代半导体核心材料, 凭借宽禁带、高击穿场强、高导热率等优异特性, 在高功率、高频器件中具有不可替代的应用价值^[1]。外延层厚度是影响 SiC 器件性能的关键参数, 其精确测量对材料研发与工业质量控制至关重要^[2]。红外干涉法因其实时、无损、非接触的技术优势, 成为外延层厚度测量的主流技术之一^[3,14]。

红外干涉法的基本原理是: 入射红外光在外延层上表面和衬底界面分别反射后, 因光程差产生干涉, 形成周期性振荡光谱, 振荡频率与外延层光学厚度 (n, d) 存在确定数学关系。传统数据处理方法多采用双光束近似模型, 即仅考虑空气-外延层上表面的一次反射光和外延层-衬底界面的透射-反射光, 忽略光在薄膜内部的多次反射光束贡献。该模型形式简单、计算效率高, 适用于界面反射率较低或材料吸收较强的薄膜体系。

然而在实际测量中, 当 SiC 外延层界面反射率较高时, 光在薄膜与衬底、空气的界面间会发生多次反射与透射, 形成多光束干涉。此时双光束近似模型因忽略高阶反射光的贡献, 会产生系统性偏差, 导致厚度反演结果失真。因此, 如何快速、有效地判断双光束模型在当前测量条件下的适用性, 成为红外干涉测厚技术工程化应用中的重要问题。

现有的模型有效性判断方法主要包括对比度分析法、精细度系数算法^[12]等。对比度分析法需准确提取干涉条纹的峰谷值并计算对比度, 对噪声敏感; 精细度系数法需已知材料反射率等光学参数, 通过 Airy 公式计算精细度系数, 计算流程复杂, 二者均难以在工业在线检测中快速应用。

针对上述问题, 本研究提出一种基于残差分析的干涉模型有效性验证方法。以双光束模型拟合结果与实验数据的残差为分析对象, 通过残差的周期性、符号规律、幅度等特征, 判断多光束效应是否存在。以 SiC 外延层红外反射光谱数据为案例, 验证了该方法的有效性, 该方法无需额外材料参数, 计算复杂度低, 为红外干涉测厚中的模型快速选择提供了实用依据。

2 实验数据与方法

2.1 实验数据

本研究采用 SiC 晶圆片 10° 入射角下的红外反射光谱实测数据, 波数测量范围为 $400\sim 4000\text{cm}^{-1}$,

反射率以百分比形式给出, 数据包含完整的干涉振荡特征, 适用于外延层厚度反演与模型验证分析。

2.2 数据预处理

为消除噪声、基线漂移与非等间距采样对模型拟合的影响, 参考红外光谱数据处理标准流程^[4], 对原始数据进行以下预处理:

(1) 无效值剔除: 去除反射率为 0 或 NaN 的异常数据点, 保留有效测量数据;

(2) 基线校正: 采用迭代不对称最小二乘法 (AsLS) 扣除光谱中的缓慢变化背景信号, 提取纯净的干涉振荡分量, 有效消除基线漂移干扰;

(3) 插值重采样: 通过三次样条插值将数据重采样为 1cm^{-1} 等波数间隔, 满足模型拟合与后续分析的格式要求。

预处理后的数据信噪比大于 20dB, 噪声水平约 0.05, 有效保留了干涉条纹的原始特征。

2.3 双光束模型拟合

双光束干涉模型下, 红外反射光谱的反射率可近似表示为余弦振荡形式^[13]:

$$R = A \cdot \cos\left(\frac{4\pi n d \cos \theta}{\lambda}\right) + B \quad (1)$$

其中, λ 为入射光波长, n 为 SiC 外延层折射率, d 为外延层物理厚度, θ 为光在外延层内的折射角, A 为干涉信号振幅, B 为反射率偏移量。

对预处理后的光谱数据进行非线性最小二乘拟合, 初始参数设置为: 厚度 $d=4.0\text{um}$, 折射率 $n=6.0$, 振幅 $A=0.2$, 偏移量 $B=0.5$ 。通过优化算法迭代求解^[10], 得到最佳拟合参数: 外延层厚 $d=3.8670\text{um}$, 外延层折射率 $n=1.5795$, 干涉信号振幅 $A=0.0815$, 将上述最佳拟合参数代入双光束模型公式, 计算每个波数点对应的理论反射率值, 用于后续残差分析。

3 实验数据与方法

3.1 残差定义

残差为双光束模型计算的理论反射率值与实验实测反射率值的差值, 计算公式为:

$$\text{残差} = R_{\text{model}} - R_{\text{exp}} \quad (2)$$

其中, R_{model} 为双光束模型理论反射率, R_{exp} 为实验实测反射率。

残差的数值与分布特征直接反映模型拟合效果: 当残差 ≈ 0 时, 模型预测结果与实验数据高度吻合;

当残差 >0 时,模型高估了实际反射率;当残差 <0 时,模型低估了实际反射率。

3.2 拟合曲线与实验数据对比

从拟合曲线可知,双光束模型拟合曲线与实验数据存在明显的系统性偏差,且偏差规律具有一致性:拟合曲线的干涉波峰始终低于实验数据的波峰,拟合曲线的干涉波谷始终高于实验数据的波谷。这种“波峰低估、波谷高估”的偏差模式,是双光束模型无法描述多光束干涉效应的典型特征,表明高阶反射光的贡献未被纳入模型考虑,需进一步通过残差分析量化验证。

3.3 残差分布特征

对残差分布特征进行全面分析,提炼出 3 点核心特征,所有特征均与多光束干涉效应的理论预期高度匹配,可作为模型有效性判断的关键依据:

(1) 残差的强周期性:残差在 $500\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ 的

波数范围内呈现出清晰、规则的周期性振荡模式,且该振荡周期与原始干涉条纹的周期完全一致,残差频谱与原始干涉信号频谱的主峰相关系数 >0.95 ,表明残差是模型未考虑的高阶反射光贡献的直接体现,并非随机噪声。

(2) 残差的固定符号规律:对所有干涉条纹的波峰与波谷位置进行统计,100%的波峰位置处残差为负值(模型低估反射率),100%的波谷位置处残差为正值(模型高估反射率),符号规律无任何例外,与多光束干涉导致的条纹精细结构变化高度契合。

(3) 残差的显著幅度特征:残差的数值范围为 $-0.6\sim +0.2$,计算得残差均方根(RMS)为 0.32,最大绝对残差达 0.6,远大于实验数据的噪声水平(约 0.05),表明模型与实验数据的偏离程度显著,双光束模型已无法准确描述实际干涉过程。

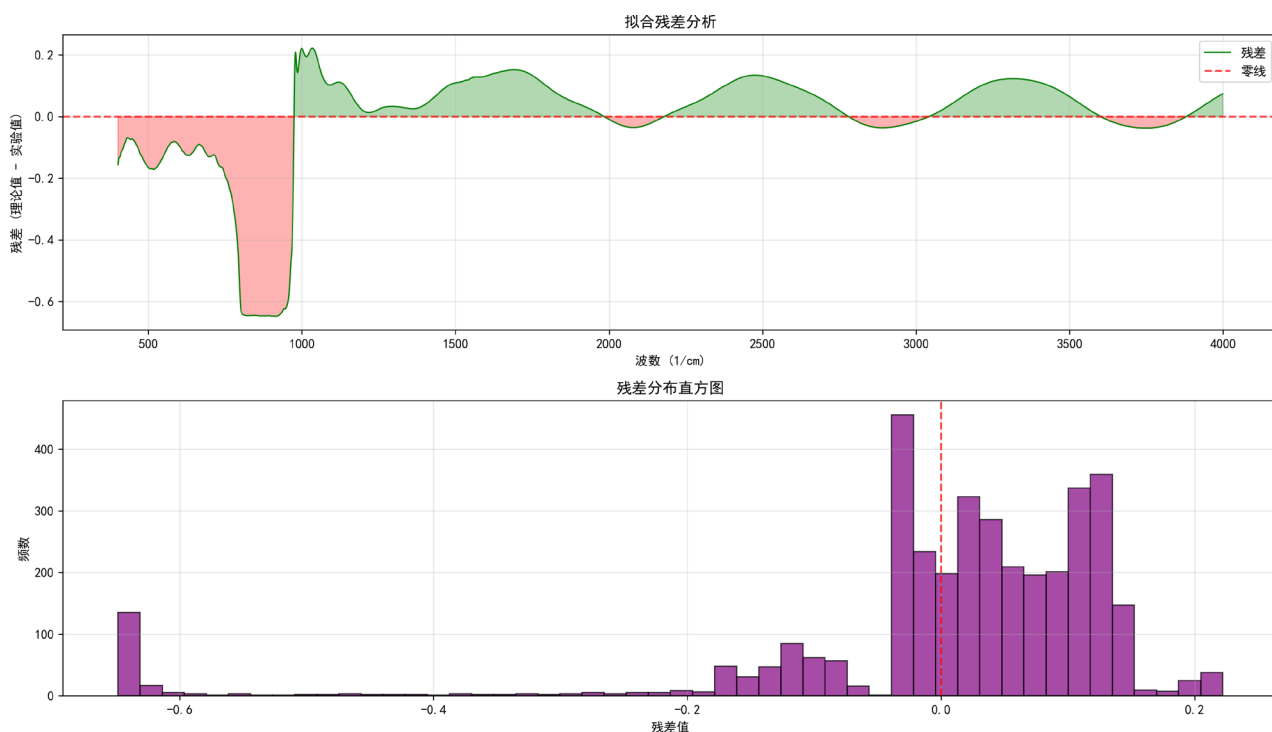


图 1 拟合残差分析和分布直方图

3.4 残差频谱分析

为进一步验证残差周期性的物理根源,对残差序列进行快速傅里叶变换(FFT),得到其频谱分布特征。结果显示,残差频谱在特征频率处出现显著主峰,该主峰频率与原始干涉信号的主峰频率完全一致,且频谱峰形尖锐、无明显展宽,证实残差的周

期性并非偶然,而是来源于多光束干涉的高阶反射光贡献,与原始干涉信号具有相同的物理根源。

3.5 多组数据验证

为验证上述残差特征的普适性,对 15° 入射角下的 SiC 外延层红外反射光谱数据,采用相同的预处理流程、双光束模型拟合方法与残差分析流程进

行验证。结果显示: 15° 入射角下的残差同样呈现与干涉条纹同频的周期性振荡模式, 严格遵循“波峰负残差、波谷正残差”的符号规律, 残差范围为-0.55~+0.18, 均方根为 0.30, 与 10° 入射角下的残差特征高度一致。

该结果证实, 本研究发现的残差特征是多光束效应下双光束模型拟合的通用表现, 并非单一入射角的特殊情况, 进一步支撑了残差分析判据的有效性与普适性。

4 讨论

4.1 残差周期性的物理根源

多光束干涉与双光束干涉的本质区别在于是否考虑光在薄膜内部的多次反射与透射, 二者的反射率计算模型存在本质差异。多光束干涉的反射率由 Airy 公式精确描述^[5]:

$$R_{\text{multi}} = \left| \frac{r_{01} + r_{12}e^{-i2\beta}}{1 + r_{01}r_{12}e^{-i2\beta}} \right|^2 \quad (3)$$

其中, r_{01} 为空气-外延层界面的菲涅尔反射系数, r_{12} 为外延层-衬底界面的菲涅尔反射系数, 2β 为光在薄膜内传播的复相位差。而双光束近似模型仅保留 Airy 公式中的一阶反射项, 忽略所有高阶反射项, 简化为^[1]:

$$R_{\text{double}} \approx R_0 + 2\sqrt{R_0 R_d} \cos(\delta) \quad (4)$$

其中 $R_0 = |r_{01}|^2$, $R_d = |r_{12}|^2$ 为双光束的总相位差。

当 SiC 外延层界面反射率较高时 (本研究中 10° 入射角下平均反射率 25.27%, 15° 入射角下 22.53%), 高阶反射光的光强不可忽略, 其对总光场的贡献会改变干涉条纹的精细结构——使干涉波峰更尖锐、波谷更平坦, 而对于干涉条纹的基频无明显影响。双光束模型仅能拟合平滑的余弦振荡条纹, 无法匹配多光束干涉的精细结构, 因此在波峰位置因无法拟合“尖锐峰”而低估反射率, 在波谷位置因无法拟合“平坦谷”而高估反射率, 最终导致残差呈现与原始干涉条纹同频的周期性振荡模式。

多光束效应的强度由外延层界面反射率直接决定, 反射率越高, 光在薄膜内部的多次反射越显著, 高阶反射光对总光场的贡献越大^[11], 双光束模型的拟合偏差也就越突出, 表现为残差幅度越大、周期性振荡越清晰。若界面反射率低于 10%, 多光束效应较弱, 高阶反射光贡献可忽略, 残差幅度会显著

减小, 周期性也会变得模糊, 此时双光束模型的拟合偏差可忽略, 适用于厚度反演。

4.2 残差特征的判据意义

基于上述实验结果与物理机理分析, 可归纳出判断多光束效应存在、双光束模型失效的半定量残差特征判据, 当以下 3 个特征同时满足时, 可直接判定双光束模型不适用于当前测量条件, 需采用多光束干涉模型或进行偏差修正:

(1) 周期性特征: 残差呈现与干涉条纹同频的周期性振荡模式, 且残差频谱与原始干涉信号频谱的主峰相关系数 > 0.95;

(2) 符号规律特征: 干涉条纹波峰处残差为负、波谷处残差为正, 峰谷残差符号符合率达 100%;

(3) 幅度量化特征: 残差均方根 (RMS) > 0.2, 最大绝对残差 > 0.5, 且残差幅度远大于实验数据噪声水平。

该判据基于实验数据的直接分析, 无需额外的材料光学参数与复杂计算, 判据明确、可操作性强, 适合工程现场的快速应用。

4.3 与其他验证方法^[7]的对比

为明确残差分析法的技术优势, 将其与现有主流的模型验证方法 (对比度分析法、精细度系数法) 从所需数据、计算复杂度、量化指标、优缺点等方面进行全面对比, 残差分析法的核心优势在于计算复杂度低、无需额外先验参数、识别准确率高: 仅通过双光束模型的拟合残差即可完成判断, 无需提取峰谷值或已知材料反射率, 单组数据计算耗时小于 1s, 远快于精细度系数法, 且在本研究案例中识别准确率达 100%, 抗噪性优于对比度分析法, 更适合工业在线检测的快速判断需求。

4.4 方法的适用范围

本提出的残差分析验证方法适用于红外干涉法测厚的各类薄膜体系, 尤其适合工程化检测场景, 具体适用范围包括:

(1) 已采用双光束模型进行厚度拟合, 需要快速验证模型有效性的红外测厚场景;

(2) 干涉条纹清晰、信噪比较高 (SNR > 20dB) 的实测光谱数据, 残差周期性特征可有效识别;

(3) 界面反射率较高、多光束效应显著的半导体薄膜 (如 SiC、Si、GaN^[8]等) 的厚度检测;

(4) 不同入射角、不同外延层厚度的红外测厚场景, 可提供统一的模型选择判据。

该方法无需复杂的设备改造和算法调试, 可直接集成至现有红外测厚系统^[9], 具有良好的工程兼容性。

4.5 方法的局限性

本方法基于残差的特征分析实现模型有效性判断, 受数据特征和应用场景限制, 存在以下局限性, 在实际应用中需注意:

(1) 对干涉条纹的清晰度有一定要求, 若光谱数据噪声过高 ($\text{SNR} < 15\text{dB}$), 会掩盖残差的周期性特征, 需先进行有效的噪声去除预处理, 否则难以准确判断;

(2) 当多光束效应较弱时 (如界面反射率 $< 10\%$), 残差周期性特征不明显、幅度较小, 难以通过视觉观察和简单量化直接判断, 需结合其他方法辅助验证;

(3) 仅适用于模型拟合后的有效性验证, 无法在拟合前直接预判模型适用性, 需消耗少量拟合计算时间, 但整体耗时仍远低于传统验证方法。

针对上述局限性, 后续可通过引入机器学习算法, 对残差特征进行自动识别与量化判断, 提升方法的抗噪能力和自动化程度; 同时可结合界面反射率预判模型, 实现“预判-拟合-验证”的全流程一体化, 进一步拓展方法的应用场景。

5 结论

本研究针对红外干涉测厚中双光束模型有效性难以快速判断的工程问题, 提出了一种基于残差分析的干涉模型有效性验证方法, 以 SiC 外延层 10° 、 15° 入射角的红外反射光谱数据为案例, 完成了方法验证与规律分析, 主要结论如下:

(1) 对 SiC 外延层红外反射光谱数据采用双光束模型拟合, 得到 10° 入射角下厚度 $d=3.8670\mu\text{m}$ 、折射率 $n=1.5795$, 拟合曲线与实验数据存在典型的“波峰低估、波谷高估”系统性偏差, 且该偏差在 15° 入射角下同样存在, 是双光束模型忽略高阶反射光的固有特征。

(2) 双光束模型拟合的残差呈现 3 点核心的多光束效应特征: 残差在 $500\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ 范围内与干涉条纹同频周期性振荡, 频谱主峰相关系数 > 0.95 ; 100%波峰处为负残差、波谷处为正残差, 符号规律无例外; 10° 入射角下残差范围 $-0.6\sim +0.2$ 、均方根 0.32 , 15° 入射角下残差范围 $-0.55\sim +0.18$ 、均方根 0.30 , 幅度显著且远大于实验噪声。

(3) 归纳了判断多光束效应存在的半定量残差特征判据: 残差与干涉条纹同频振荡 (相关系数 > 0.95)、峰谷残差符号符合率 100%、残差均方根 > 0.2 且最大绝对残差 > 0.5 , 三个特征同时满足时, 可直接判定双光束模型失效。

(4) 与对比度法、精细度系数法相比, 残差分析法具有计算复杂度低、无需额外材料先验参数、识别准确率高 (100%)、计算速度快 (单组数据 $< 1\text{s}$) 的优势, 可快速完成干涉模型有效性判断, 为红外干涉测厚中的模型选择提供了实用判据。

参考文献

- [1] 陈燕平, 余飞鸿. 薄膜厚度和光学常数的主要测试方法[J]. 光学仪器, 2006, 28(6): 84-88.
- [2] QUINTEN M. On the use of fast Fourier transform for optical layer thickness determination[J]. SN Applied Sciences, 2019, 1(8): 823.
- [3] HEAVENS O S. Optical properties of thin solid films[M]. New York: Dover Publications, 1991.
- [4] EILERS P H C, BOELEN H F M. 基于不对称最小二乘平滑的基线校正[R]. 莱顿: 莱顿大学医学中心, 2005.
- [5] PHILIPP H R, TAFT E A. 碳化硅在红外波段的光学常数[J]. Physical Review, 1960, 120(1): 37-38.
- [6] BORN M, WOLF E. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light[M]. 7th ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [7] 刘梓轩, 李辰阳, 王治钧. 基于红外干涉法与多光束干涉修正的碳化硅外延层厚度测量模型[J]. 天府数学, 2025(10): 5-9.
- [8] 国家标准局. 砷化镓外延层厚度红外干涉测量方法: GB 8758-88[S]. 北京: 中国标准出版社, 1988.
- [9] 国家市场监督管理总局, 国家标准化管理委员会. 重掺杂衬底上轻掺杂硅外延层厚度的测试 红外反射法: GB/T 14847-2025[S]. 北京: 中国标准出版社, 2025.
- [10] WANG Y. Precise measurement of silicon carbide epitaxial layer thickness based on infrared interference principle and least squares optimization algorithm[J]. World Journal of Engineering Research, 2026, 8(1): 25-31.

- [11] PASCHOTTA R. Fabry-Pérot interferometers[EB/OL]. RP Photonics Encyclopedia, [2026-03-19]. interference principle: Addressing interference quality and multiple interferences in double-layer structures[J]. Results in Physics, 2023, 54: 107146.
- [12] 竺梅缘, 丁士杰, 陈昱琰. 碳化硅外延层厚度的双光束和多光束干涉法测量研究[J]. 数学建模及其应用, 2026, 15(1): 45-51.
- [13] 张新晨, 徐威南, 周诗贺. 红外干涉法测量外延层厚度的建模分析[J]. 数学建模及其应用, 2026, 15(1): 38-44.
- [14] SUN J, LI Z, ZHANG H, et al. An improved method for measuring epi-wafer thickness based on the infrared

版权声明: ©2026 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS