

# 中华人民共和国国家计量技术规范

JJF1818-202X

## 拉曼光谱仪校准装置校准规范

Calibration Specification for

Calibration Device of Raman Spectrometers

(征求意见稿)

XXXX-XX-XX 发布

XXXX-XX-XX 实施

国家市场监督管理总局 发布

# 拉曼光谱仪校准装置 校准规范

JJF1818-202X

代替 JJF1818-2020

Calibration Specification for

Calibration Device of Raman Spectrometers

归口单位：全国医学计量技术委员会

主要起草单位：中国计量科学研究院

江西省检验检测认证总院计量科学研究院

参加起草单位：黑龙江省计量检定测试院

贵州省计量测试院

本规范委托全国医学计量技术委员会负责解释

**本规范主要起草人：**定翔（中国计量科学研究院）

付彦哲（中国计量科学研究院）

衷梦芹（江西省检验检测认证总院计量科学研究院）

**参加起草人：**汤秀华（黑龙江省计量检定测试院）

周选超（贵州省计量测试院）

张吉焱（中国计量科学研究院）

# 目 录

引 言.....	II
1 范围.....	1
2 引用文件.....	1
3 术语和计量单位.....	1
4 概述.....	2
5 计量特性.....	2
5.1 标准硅片拉曼频移.....	2
5.2 标准聚苯乙烯拉曼频移.....	2
5.3 横向检测模体特征宽度.....	2
5.4 纵向检测模体特征深度.....	2
6 校准条件.....	3
6.1 环境条件.....	3
6.2 测量标准及其他配套设备.....	3
7 校准项目和校准方法.....	3
7.1 外观检查.....	3
7.2 标准硅片拉曼频移.....	3
7.3 标准聚苯乙烯拉曼频移.....	3
7.4 特征宽度.....	3
7.5 特征深度.....	4
8 校准结果表达.....	5
8.1 校准记录.....	5
8.2 校准结果的处理.....	5
9 复校时间间隔.....	6
附录 A 拉曼光谱仪校准装置校准原始记录（推荐）格式样式.....	7
附录 B 校准证书内页（推荐）格式样式.....	9
附录 C 标准硅片拉曼频移测量不确定度评定示例.....	11
附录 D 横向检测模体特征宽度测量不确定度评定示例.....	15

# 引 言

JJF 1071《国家计量校准规范编写规则》、JJF 1001《通用计量术语及定义》、JJF 1059.1《测量不确定度评定与表示》共同构成支撑本校准规范修订工作的基础性系列文件。

本规范参考了JJF1544-2024《拉曼光谱仪校准规范》、GB/T 40219-2021《拉曼光谱仪通用规范》的规定。

除编辑性修改外，本规范主要技术变化如下：

- 修改了引言、概述；
  - 增加了空间分辨力、特征宽度、特征深度等计量术语；
  - 增加了标准聚苯乙烯、横向检测模体、纵向检测模体的计量特性要求和校准方法、删除了标准玻璃的计量特性要求和校准方法；
  - 增加了测量标准的位移示值计量特性要求、删除了相对强度计量特性要求；
  - 修改了环境条件，放宽了温度和湿度要求；
  - 增加了“9 复校时间间隔”中的推荐复校时间间隔；
  - 根据上述对校准项目和校准方法的修改，对附录中原始记录格式、证书内页格式和不确定度评定进行了修订（见附录A、附录B、附录C、附录D）。
- 本规范历次版本发布情况：
- JJF 1818-2020。

# 拉曼光谱仪校准装置校准规范

## 1 范围

本规范适用于拉曼光谱仪校准装置的校准。

## 2 引用文件

本规范引用了下列文件：

JJF1544-2024 拉曼光谱仪校准规范

GB/T 40219-2021 拉曼光谱仪通用规范

凡是注日期的引用文件，仅注日期的版本适用于本规范；凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本规范。

## 3 术语和计量单位

GB/T 40219-2021《拉曼光谱仪通用规范》界定的以及下列术语和定义适用于本规范。

### 3.1 拉曼散射 Raman scattering

由分子振动、固体中的光学声子等激发与激光相互作用所产生的非线性散射，散射光与激发光的波长不同。

[来源：GB/T 40219-2021，3.1]

### 3.2 拉曼频移 Raman shift

拉曼散射光相对于激发光的频率变化，以相对波数表示，简称“频移”，单位为  $\text{cm}^{-1}$ 。

[来源：GB/T 40219-2021，3.2，修改]

### 3.3 拉曼散射强度 intensity of Raman scattering

拉曼散射光谱信号的强度，通常指光子数。

[来源：GB/T 40219-2021，3.5]

### 3.4 峰位 peak position

拉曼散射光谱波峰的中心位置，常以相对波数表示，单位为  $\text{cm}^{-1}$ 。

[来源：JJF 1544-2024，3.5]

### 3.5 空间分辨力 spatial resolution

显微成像式拉曼光谱仪对微小物体的分辨能力，分为横向分辨力和纵向分辨力，单位为微米 ( $\mu\text{m}$ )。

[来源: JJF 1544-2024, 3.8]

### 3.6 横向空间分辨力 lateral spatial resolution

显微成像式拉曼光谱仪在水平方向上的成像分辨力, 简称“横向分辨力”, 单位为  $\mu\text{m}$ 。

### 3.7 纵向空间分辨力 depth spatial resolution

显微成像式拉曼光谱仪在垂直方向(轴向)上的成像分辨力, 简称“纵向分辨力”, 又称“轴向分辨力”, 单位为  $\mu\text{m}$ 。

### 3.8 特征宽度 characteristic width

横向检测模体表面图形的特征宽度, 单位为  $\mu\text{m}$ 。

### 3.9 特征深度 characteristic depth

纵向检测模体表面图形的特征深度, 单位为  $\mu\text{m}$ 。

## 4 概述

拉曼光谱仪校准装置是校准拉曼光谱仪的专用装置, 由标准硅片、标准聚苯乙烯、横向检测模体、纵向检测模体、低压原子谱线灯组成。其中:

标准硅片用于校准显微成像式拉曼光谱仪的频移和强度, 标准聚苯乙烯用于校准便携式拉曼光谱仪和手持式拉曼光谱仪的频移和强度, 横向检测模体用于校准显微成像式拉曼光谱仪的横向分辨力和横向距离误差, 纵向检测模体用于校准显微成像式拉曼光谱仪的纵向分辨力和纵向距离误差。低压原子谱线灯发出的原子谱线是自然基准, 用于校准拉曼光谱仪的光谱分辨力和频移。

## 5 计量特性

### 5.1 标准硅片拉曼频移

拉曼频移实际值的不确定度优于:  $U=0.5 \text{ cm}^{-1}$  ( $k=2$ )。

### 5.2 标准聚苯乙烯拉曼频移

拉曼频移实际值的不确定度优于:  $U=2.0 \text{ cm}^{-1}$  ( $k=2$ )。

### 5.3 横向检测模体特征宽度

特征宽度的不确定度优于:  $U= (0.4\mu\text{m}+0.4\% \cdot W)$  ( $W$  为特征宽度) ( $k=2$ )。

### 5.4 纵向检测模体特征深度

特征深度的不确定度优于:  $U= (0.4\mu\text{m}+0.4\% \cdot D)$  ( $D$  为特征深度)。

注: 以上所有指标不适用于合格性判别, 仅供参考。

## 6 校准条件

### 6.1 环境条件

6.1.1 环境温度：（10~30）℃；

6.1.2 相对湿度：≤80%；

### 6.2 测量标准及其他配套设备

拉曼光谱校准装置：

1) 拉曼频移：（110~4000） $\text{cm}^{-1}$ ， $U \leq 1.0 \text{ cm}^{-1}$ （ $k=2$ ）（其中  $520\text{cm}^{-1}$  处  $U \leq 0.2\text{cm}^{-1}$ （ $k=2$ ））；

2) 位移：（1~100） $\mu\text{m}$ ，MPE：±（ $0.2\mu\text{m}+0.2\% \cdot L$ ）（ $L$  为位移）。

## 7 校准项目和校准方法

### 7.1 外观检查

通过目视检查，确认标准硅片、标准聚苯乙烯、横向检测模体、纵向检测模体和原子谱线灯外观完好，表面无明显划痕或缺陷。

### 7.2 标准硅片拉曼频移

在 633nm 激光波长下，用拉曼光谱校准装置测量标准硅片  $520 \text{ cm}^{-1}$  附近的拉曼散射信号，重复测量 6 次并记录该峰位的频移值，取其平均值作为频移测量实际值：

$$\bar{\nu} = \frac{\sum_{i=1}^6 \nu_i}{6} \quad (1)$$

式中： $\bar{\nu}$ —拉曼频移测量结果平均值， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\nu_i$ —第  $i$  次拉曼频移测量值， $\text{cm}^{-1}$ 。

### 7.3 标准聚苯乙烯拉曼频移

在 633nm 激光波长下，用拉曼光谱校准装置测量标准聚苯乙烯的拉曼散射信号，重复测量 6 次并记录主要拉曼峰峰位的频移值，取其平均值作为频移测量实际值：

$$\bar{\nu} = \frac{\sum_{i=1}^6 \nu_i}{6} \quad (2)$$

式中： $\bar{\nu}$ —拉曼频移测量结果平均值， $\text{cm}^{-1}$ ；

$\nu_i$ —第  $i$  次频移测量结果， $\text{cm}^{-1}$ ；

### 7.4 特征宽度

用拉曼光谱校准装置测量横向检测模体的特征宽度。调节样品方位使硅与金属的边界线与  $y$  方向平行。可采用直接瞄准法或拉曼扫描法测量模体的特征宽度。采用直接瞄准法时，在显微镜下观察模体，用光标瞄准硅和金属边界并记录其对应的  $x$  坐标。采用拉曼扫描法时，扫描步长不大于横向分辨力的  $1/5$ ，测量硅  $520\text{cm}^{-1}$  附近的拉曼峰。以距离为横轴，峰高为纵轴绘制曲线，得到仪器在  $x$  方向上的阶跃响应函数曲线。将该曲线对距离微分，得到线扩展函数曲线，记录曲线峰值对应的  $x$  坐标。分别记录两个边界线的  $x$  坐标，根据公式 (3) 计算得到特征宽度值：

$$W = |x_1 - x_2| \quad (3)$$

式中： $W$ — 特征宽度测量结果， $\mu\text{m}$ ；

$x_1$ — 位置 1 硅和金属边界对应的  $x$  坐标， $\mu\text{m}$ ；

$x_2$ — 位置 2 硅和金属边界对应的  $x$  坐标， $\mu\text{m}$ 。

重复测量 3 次，根据公式 (4) 计算得到特征宽度平均值：

$$\bar{W} = \frac{\sum_{i=1}^3 W_i}{3} \quad (4)$$

式中： $\bar{W}$ — 特征宽度平均值， $\mu\text{m}$ ；

$W_i$ — 第  $i$  次特征宽度测量值， $\mu\text{m}$ 。

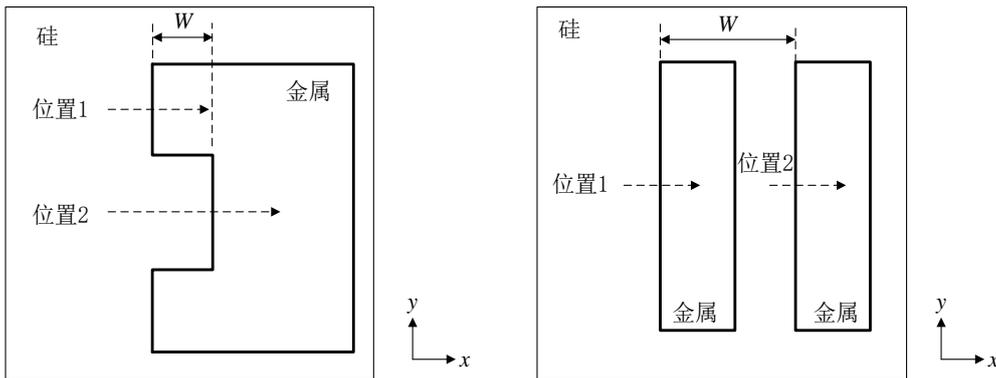


图 1 特征宽度测量方法示意图

## 7.5 特征深度

用拉曼光谱校准装置测量纵向检测模体的特征深度。按图 3 所示 3 个位置进行扫描测量，测量硅  $520\text{cm}^{-1}$  附近的拉曼峰，记录硅拉曼信号峰值对应的  $z$  方向坐标。根据公式 (5) 计算得到特征深度值：

$$D = \left| \frac{z_1 + z_3}{2} - z_2 \right| \quad (5)$$

式中： $D$ —特征深度测量结果， $\mu\text{m}$ ；

$z_1$ —位置1硅拉曼信号峰值对应的 $z$ 坐标， $\mu\text{m}$ ；

$z_2$ —位置2硅拉曼信号峰值对应的 $z$ 坐标， $\mu\text{m}$ ；

$z_3$ —位置3硅拉曼信号峰值对应的 $z$ 坐标， $\mu\text{m}$ 。

重复测量3次，根据公式（6）计算得到特征深度平均值：

$$\bar{D} = \frac{\sum_{i=1}^3 D_i}{3} \quad (6)$$

式中： $\bar{D}$ —特征深度平均值， $\mu\text{m}$ ；

$D_i$ —第 $i$ 次特征深度测量值， $\mu\text{m}$ 。

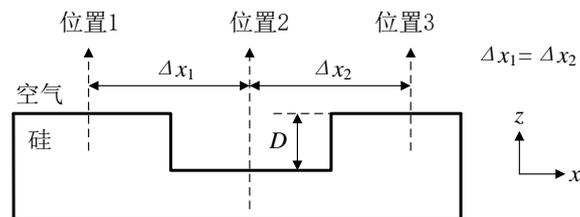


图2 特征深度测量方法示意图

## 8 校准结果表达

### 8.1 校准记录

校准记录推荐格式参见附录A。

### 8.2 校准结果的处理

校准证书内页推荐格式参见附录B，校准证书应至少包括以下内容：

- a) 标题：“校准证书”；
- b) 实验室名称和地址；
- c) 进行校准的地点（如果与实验室的地址不同）；
- d) 校准证书的唯一性标识（如编号），每页及总页数的标识；
- e) 客户的名称和地址；
- f) 被校仪器的描述和明确标识（如型号、产品编号等）；
- g) 进行校准的日期，如果与校准结果的有效性和应用有关时，应说明被校对象的可接收日期；

h) 如果与校准结果的有效性应用有关时，应对被校样品的抽样程序进行说明；

i) 校准所依据的技术规范的标识，包括名称及代号；

j) 本次校准所用测量标准的溯源性及有效性说明；

k) 校准环境的描述；

l) 校准结果及其测量不确定度的说明；

m) 对校准规范的偏离的说明；

n) 校准证书或校准报告签发人的签名、职务或等效标识；

o) 校准结果仅对被校对象有效的声明；

p) 未经实验室书面批准，不得部分复制证书的声明。

## 9 复校时间间隔

由于复校时间间隔的长短是由仪器的使用情况、使用者、仪器本身质量等诸多因素所决定的，因此送校单位可根据实际使用情况自主决定复校时间间隔。

复校时间间隔建议为 12 个月。

## 附录 A

## 拉曼光谱仪校准装置校准原始记录（推荐）格式样式

客户名称		证书编号			
客户地址		校准地点			
仪器名称		制造厂			
型号		出厂编号			
环境温度		相对湿度			
接收日期		校准日期			
校准所依据的技术文件					
校准使用的测量标准及其他设备	名称	测量范围	不确定度/准确度等级/最大允许误差	证书编号	证书有效期
校准员		核验员			

1. 外观检查结果：\_\_\_\_\_。

2. 标准硅片拉曼频移

标准硅片拉曼频移测量值/cm <sup>-1</sup>						平均值/cm <sup>-1</sup>

3. 标准聚苯乙烯拉曼频移

标准聚苯乙烯拉曼频移测量值/cm <sup>-1</sup>						平均值/cm <sup>-1</sup>

## 4 特征宽度

位置 1 坐 标 ( $\mu\text{m}$ )	位置 2 坐 标 ( $\mu\text{m}$ )	特征深度 测量值 ( $\mu\text{m}$ )	特征深度 平均值 ( $\mu\text{m}$ )	扩展不确定度 ( $k=2$ ) ( $\mu\text{m}$ )

## 5 特征深度

位置 1 坐 标 ( $\mu\text{m}$ )	位置 2 坐 标 ( $\mu\text{m}$ )	位置 3 坐 标 ( $\mu\text{m}$ )	特征深度 测量值 ( $\mu\text{m}$ )	特征深度 平均值 ( $\mu\text{m}$ )	扩展不确定度 ( $k=2$ ) ( $\mu\text{m}$ )



## 校准证书第 3 页

证书编号: XXXX-XXXX

校准结果

1. 外观检查结果: \_\_\_\_\_。

2. 标准硅片拉曼频移

拉曼频移 ( $\text{cm}^{-1}$ )	不确定度 ( $k=2$ ) ( $\text{cm}^{-1}$ )

3. 标准聚苯乙烯拉曼频移

拉曼频移 ( $\text{cm}^{-1}$ )	不确定度 ( $k=2$ ) ( $\text{cm}^{-1}$ )

4. 特征宽度

特征宽度 ( $\mu\text{m}$ )	不确定度 ( $k=2$ ) ( $\mu\text{m}$ )

5. 特征深度

特征宽度 ( $\mu\text{m}$ )	不确定度 ( $k=2$ ) ( $\mu\text{m}$ )

接下页  
第 x 页 共 x 页

## 附录 C

### 标准硅片拉曼频移测量不确定度评定示例

依据 JJF 1059.1-2012《测量不确定度评定与表示》的要求，给出标准硅片拉曼频移测量不确定度评定示例，其中包括各标准不确定度分量的评定与分析、合成标准不确定度以及扩展不确定度的计算。

标准聚苯乙烯拉曼频移的不确定度可参照本例进行评定。

#### C.1 数学模型

用拉曼光谱校准装置测量标准硅片的相对频移时，拉曼频移的相对波数等于激光波数与绝对波数之差，可建立如下数学模型：

$$\nu = \nu_L - \nu_A \quad (\text{C.1})$$

式中： $\nu$ -拉曼光谱频移相对波数；

$\nu_L$ -激光波长的绝对波数；

$\nu_A$ -拉曼光谱的绝对波数。

各输入量的灵敏系数计算如下：

$$c(\nu_L) = \frac{\partial(\nu)}{\partial \nu_L} = 1 \quad (\text{C.2})$$

$$c(\nu_A) = \frac{\partial(\nu)}{\partial \nu_A} = -1 \quad (\text{C.3})$$

各输入量引入的标准不确定度 $|c(\nu_L)|u(\nu_L)$ 为 $|c(\nu_A)|u(\nu_A)$ 之和。

$u(\nu_L)$ 和 $u(\nu_A)$ 互不相关，因此有：

$$u_c = \sqrt{u^2(\nu_L) + u^2(\nu_A)} \quad (\text{C.4})$$

#### C.2 测量不确定度的来源

根据测量模型及具体测量过程，其不确定度来源主要包括以下几个方面：

##### (1) 测量重复性引入的不确定度

该项不确定度来源主要由激光波长的波动、CCD 的探测噪声等随机因素引入，通过多次重复测量可以计算出这些误差引入的测量不确定度。

##### (2) 仪器分辨力引入的不确定度

仪器测量波数的分辨力（最小分度）会引入测量误差。

分辨力引入的不确定度远小于重复性引入的不确定度，可忽略。

### (3) 测量仪器引入的不确定度

该项不确定度主要来自测量仪器本身，可从上一级计量校准证书中得到。

### (4) 激光波长引入的不确定度

拉曼光谱校准装置使用氩氦激光器，其激光波长的波动可能引入测量不确定度，可用过理论计算得到。

### (5) 样品非均匀性引入的不确定度

样品本身的非均匀性可能导致样品各处测得的拉曼光谱频移有所差异，可通过实验测定得到。

### (6) 样品方向引入的不确定度

样品本身的晶向不同可能导致测得的拉曼光谱频移有所差异，可通过实验测定得到。

## C.3 测量不确定度的评定

### (1) 测量重复性引入的不确定度

随机误差会引入测量不确定度。重复测量 10 次，实验标准差为  $0.05\text{cm}^{-1}$ 。取平均值作为测量结果，测量重复性引入的标准不确定度  $u_1$  为：

$$u_1(\nu) = 0.05\text{cm}^{-1} / \sqrt{6} \approx 0.02\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.5})$$

### (2) 仪器分辨力引入的不确定度

仪器测量拉曼频移的分辨力为  $0.01\text{cm}^{-1}$ ，按均匀分布计算，引入的标准不确定度为：

$$u_R = 0.01\text{cm}^{-1} \times 0.29 \approx 0.003\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.6})$$

分辨力引入的不确定度远小于重复性引入的不确定度，可忽略。

### (3) 测量仪器引入的不确定度

拉曼光谱校准装置在  $520\text{cm}^{-1}$  附近的拉曼频移测量不确定度为  $0.2\text{cm}^{-1}$  ( $k=2$ )，引入的标准不确定度为：

$$u_1 = 0.2\text{cm}^{-1} / 2 = 0.1\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.7})$$

### (4) 激光波长引入的不确定度

在测量拉曼光谱校准装置的拉曼频移时，拉曼光谱校准装置使用氩氦激光器，其激光波长对应于氩原子谱线的  $632.81646\text{nm}$ 。根据理论计算，该谱线的增

益宽度为 1500MHz，故激光器频率变化范围小于 1500MHz。绝对波数与波长为倒数关系，氦氖激光器波长对应的绝对波数为  $15802.37\text{cm}^{-1}$ ：

$$\nu_L = \frac{1}{\lambda_L} = \frac{f_L}{c} \quad (\text{C.8})$$

式中  $c$  为光速，则：

$$u(\nu_L) = \frac{u(f_L)}{c} = \frac{1.5 \times 10^9 \text{Hz}/2}{3 \times 10^8 \text{m/s}} = 2.5\text{m}^{-1} = 0.025\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.9})$$

激光波长引入的标准不确定度为：

$$u_L = 0.025\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.10})$$

#### (5) 非均匀性引入的不确定度

非均匀性可能导致样品各处测得的拉曼光谱频移有所差异。以标准硅片为例，在整个样品区域随机取 10 个点随机测量，每个测量点重复测量 3 次取平均值以减少随机误差的影响，测量结果如下：

表 C.1 标准硅片非均匀性测量结果

测量位置	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
频移/ $\text{cm}^{-1}$	520.35	520.21	520.27	520.69	520.44	520.46	520.37	520.29	520.22	520.31

由于每个样品单独定值，只需考虑样品单元内均匀性引入的不确定度。每个点的 3 次测量结果为 1 组，10 组测量结果的组间标准偏差即为样品单元内均匀性标准偏差。根据贝塞尔公式计算得到标准差为  $0.14\text{cm}^{-1}$ ：

引入的标准不确定度  $u_H$  为：

$$u_H = 0.14\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.11})$$

#### (6) 样品方向引入的不确定度

样品本身的晶向不同可能导致测得的拉曼光谱频移有所差异。以标准硅片为例，以  $0^\circ$ 、 $90^\circ$ 、 $180^\circ$ 、 $270^\circ$  方向和随机选取 4 个方向进行测量，每个方向重复测量 3 次取平均值以减少随机误差的影响，测量结果如下：

表 C.2 不同样品方向下的标准硅片测量结果

测量方向	$0^\circ$	$90^\circ$	$180^\circ$	$270^\circ$	随机 1	随机 2	随机 3	随机 4
频移/ $\text{cm}^{-1}$	520.27	520.45	520.40	520.12	520.42	520.37	520.33	520.50

根据贝塞尔公式计算得到测量结果实验标准差为  $0.10\text{cm}^{-1}$ ，样品方向引入的标准不确定度  $u_D$  为：

$$u_D = 0.12\text{cm}^{-1} \quad (\text{C.12})$$

## (7) 合成标准不确定度

各不确定度来源相互独立，且灵敏系数的绝对值均为 1，则：

$$u_c(\nu) = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_L^2 + u_H^2 + u_D^2} \approx 0.21 \text{ cm}^{-1} \quad (\text{C.13})$$

## (8) 扩展不确定度

扩展不确定度  $U$  等于包含因子  $k$  与合成标准不确定度  $u_c$  之积，在此取  $k=2$ 。

$$U = ku_c = 2 \times 0.21 \text{ cm}^{-1} \approx 0.5 \text{ cm}^{-1} (k = 2) \quad (\text{C.14})$$

## (9) 报告结果

由上述测量结果的计算和分析，可得拉曼频移测量结果的扩展不确定度为：  
 $0.5 \text{ cm}^{-1}(k=2)$ 。

## 附录 D

## 横向检测模体特征宽度测量不确定度评定示例

依据 JJF 1059.1-2012《测量不确定度评定与表示》的要求，给出横向检测模体特征宽度测量不确定度评定示例，其中包括各标准不确定度分量的评定与分析、合成标准不确定度以及扩展不确定度的计算。

纵向检测模体特征深度的不确定度可参照本例进行评定。

## D.1 测量模型

用拉曼光谱校准装置测量横向检测模体的特征宽度时，可建立如下测量模型：

$$W = |x_1 - x_2| \quad (\text{D.1})$$

式中： $W$ — 特征宽度测量结果， $\mu\text{m}$ ；

$x_1$ — 位置 1 硅和金属边界对应的  $x$  坐标， $\mu\text{m}$ ；

$x_2$ — 位置 2 硅和金属边界对应的  $x$  坐标， $\mu\text{m}$ 。

各输入量的灵敏系数计算如下：

$$c(x_1) = \frac{\partial(W)}{\partial x_1} = 1 \quad (\text{D.2})$$

$$c(x_2) = \frac{\partial(W)}{\partial x_2} = 1 \quad (\text{D.3})$$

各输入量引入的标准不确定度 $|c(x_1)|u(x_1)$ 为 $|c(x_2)|u(x_2)$ 和。

$u(x_1)$ 和 $u(x_2)$ 互不相关，因此有：

$$u_c = \sqrt{u^2(x_1) + u^2(x_2)} \quad (\text{D.4})$$

## D.2 测量不确定度来源

根据测量模型及具体测量过程，其不确定度来源主要包括以下几个方面：

## (1) 测量重复性引入的不确定度

该项不确定度来源主要由扫描测量过程中位移台的定位误差、拉曼信号强度测量噪声、机械振动等随机因素引入，通过重复测量可以计算出这些误差引入的测量不确定度。

## (2) 检测模体方向误差引入的不确定度

扫描测量前应将硅和金属边界调节至与扫描方向垂直，方向误差会引入特征宽度的测量误差。

## (3) 位移台步进值引入的不确定度

位移台步进值会引入距离测量误差。

#### (4) 测量仪器引入的不确定度

该项不确定度主要来自测量仪器本身，可从上一级的计量校准证书中得到。

### D.3 测量不确定度评定

#### (1) 测量重复性引入的不确定度

$u(x_1)$ 和 $u(x_2)$ 是两次位置测量重复性引入的不确定度，实际测量时，可直接按照两者差值结果的重复性 $u_1(W)$ 来评估其对特征宽度测量结果的影响。以测量横向检测模体的 $10.0\mu\text{m}$ 特征宽度为例，重复测量三次，测量结果如下：

表 D.1 特征宽度测量结果

位置 1 坐标 ( $\mu\text{m}$ )	位置 2 坐标 ( $\mu\text{m}$ )	特征宽度测量值 ( $\mu\text{m}$ )	特征宽度平均值 ( $\mu\text{m}$ )
0.53	10.59	10.06	10.08
0.55	10.65	10.10	
0.59	10.66	10.07	

根据极差法计算重复性引入的不确定度：

$$s = \frac{R}{C} = \frac{0.04 \mu\text{m}}{1.69} \approx 0.023 \mu\text{m} \quad (\text{D.5})$$

式中： $R$ ——测量结果中最大值与最小值之差；

$C$ ——极差系数。

重复性引入的不确定度为：

$$u_1(W) = \frac{0.023 \mu\text{m}}{\sqrt{3}} \approx 0.013 \mu\text{m} \quad (\text{D.6})$$

#### (2) 方向误差引入的不确定度

测量特征宽度时，调节横向检测模体的硅和金属边界与扫描测量方向垂直，可借助显微镜视场下的光标线辅助调节对齐。

以短距离测量情况下（见图 1（a））为例进行计算。以 100 倍显微物镜为例进行估算，通过观察视场下的光标与硅-金属边界的对齐，可保证在  $100\mu\text{m}$  长度内的对齐误差不超过  $\pm 1\mu\text{m}$ ，换算为角度误差为  $\pm 0.01\text{rad}$ ，如图 D.1 所示。假设位置 1 和位置 2 之间的  $y$  坐标差值为  $10\mu\text{m}$ ，方向误差引入的特征宽度测量误差不大于角度误差与  $10\mu\text{m}$  的乘积，即  $\pm 0.1\mu\text{m}$ 。按均匀分布估计，方向误差引入的不确定分量为：

$$u_2(\overline{W}) = \frac{0.1}{2\sqrt{3}} \approx 0.028 \mu\text{m} \quad (\text{D.7})$$

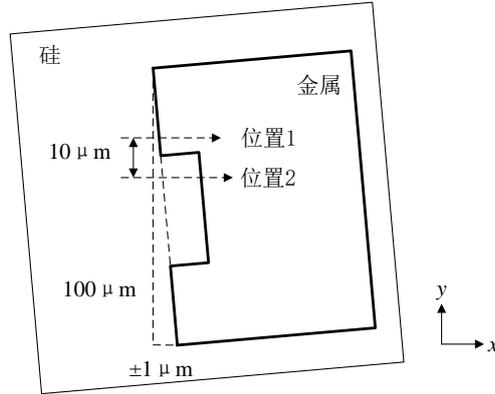


图 D.1 方向误差引入的横向距离不确定度分量示意图

在长距离测量情况下（见图 1（b））仅存在余弦误差分量，可忽略不计。

(3) 位移台步进值引入的不确定度

位移台步进值为  $0.01\mu\text{m}$ ，其引入的不确定度为：

$$u_3(W) = \frac{0.01 \mu\text{m}^{-1}}{2\sqrt{3}} \approx 0.003 \mu\text{m}^{-1} \quad (\text{D.8})$$

(4) 测量仪器引入的不确定度

$u_4(W)$  是测量仪器本身引入的标准不确定度。该项可由拉曼光谱校准装置的证书中得到，位移示值最大允许误差为  $\pm (0.2\mu\text{m} + 0.2\%)$ 。特征宽度为  $10\mu\text{m}$  距离时最大允许误差为  $\pm 0.22\mu\text{m}$ ，取：

$$u_4(W) = 0.13\mu\text{m} \quad (\text{D.9})$$

(5) 合成标准不确定度

以上各分量可近似不相关，重复性和位移台步进值引入的不确定度只取其中较大值，故合成标准不确定度  $u_c$  可通过下式进行合成计算：

$$u_c = \sqrt{u_1^2(W) + u_2^2(W) + u_4^2(W)} = \sqrt{0.013^2 + 0.028^2 + 0.13^2} \approx 0.13 \mu\text{m} \quad (\text{D.10})$$

(6) 扩展不确定度

扩展不确定度  $U$  等于包含因子  $k$  与合成标准不确定度  $u_c$  之积，在此取  $k=2$ 。

$$U = k u_c = 2 \times 0.13 \approx 0.3 \mu\text{m} \quad (k=2) \quad (\text{D.11})$$

中华人民共和国  
国家计量技术规范  
XXXXXXXXXX 校准规范  
**JJFXXXX—XXXX**  
国家市场监督管理总局发布