

深空极低温服役环境下材料力学/物理性能低成本快速评价方法研究进展

麻建坐^{1,2} 李卫国¹ 高 鸿³ 杨梦卿¹ 张续耀¹

(1 重庆大学航空航天学院, 重庆 400030)

(2 重庆工业职业技术学院, 重庆 401120)

(3 中国空间技术研究院, 北京 100094)

文 摘 随着我国空间探测卫星、深空探测飞行器等国家战略装备的快速发展,宇航材料的服役环境越来越苛刻,常常面临极端低温的考验。然而低温下材料的力学/物理性能和常温相比有很大差异,极低温使役环境下材料力学/物理性能评价成为人们关注的重点问题。本文着重对基于力-热能量密度等效原理而发展的深空极低温服役环境下材料屈服强度、弹性模量、理想拉伸强度、硬度等力学性能的低成本快速评价方法研究进展进行了总结和回顾;同时,介绍了力-热能量密度等效原理在低温下半导体材料的带隙能、折射率、拉曼频移,金属材料磁晶各向异性常数等物理性能的低成本快速评价方面的推广应用情况。该评价方法为实现地面实时监测在轨航天器中关键材料的主要力学/物理性能提供了有效途径,为国家高端技术装备建设中关键材料的设计、可靠性评价和实时性能监测等提供重要的手段。

关键词 深空极低温,力学性能,物理性能,评价方法

中图分类号:TP306

DOI:10.12044/j.issn.1007-2330.2021.05.006

Research Progress on Low-cost Rapid Evaluation Method of Mechanical and Physical Properties of Materials at Extremely Low Temperature in Deep Space

MA Jianzuo^{1,2} LI Weiguo¹ GAO Hong³ YANG Mengqing¹ ZHANG Xuyao¹

(1 College of Aerospace Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030)

(2 Chongqing Industry Polytechnic College, Chongqing 401120)

(3 China Academy of Space Technology, Beijing 100094)

Abstract With the rapid development of China's space exploration satellites, deep space exploration vehicles and other national strategic equipment, the service environment of aerospace materials become increasingly strict. The aerospace materials often subjected to extreme low temperature. However, the mechanical and physical properties of materials at low temperature are very different from those at normal temperature. The evaluation of mechanical and physical properties of materials at extremely low temperature have become the focus of people's attention. Recent development in low-cost rapid evaluation method for the mechanical properties of materials at the extremely low temperature in deep space are summarized and reviewed in this paper. A novel modeling idea named Force-Heat Energy Density Equivalence Principle has been applied to characterize the mechanical properties of materials at extremely low temperature, such as yield strength, elastic modulus, ideal tensile strength and hardness. In addition, the extended application of Force-Heat Energy Density Equivalence Principle in the low-cost rapid evaluation of the physical properties, such as the band gap energy, refractive index, Raman frequency shift of semiconductor materials and the magnetocrystalline anisotropy constant of metallic materials at low temperature is

收稿日期:2021-07-13

基金项目:国家自然科学基金(11672050);重庆市基础研究与前沿探索项目(cstc2018jcyjAX0475);重庆市教委科学技术研究项目(KJQN201903210)

第一作者简介:麻建坐,1983年出生,博士,副教授,研究方向为材料温度相关性性能。E-mail:jzma@cqu.edu.cn

通信作者:李卫国,1976年出生,博士,教授,研究方向为极端环境下材料力学性能。E-mail:wgli@cqu.edu.cn

通信作者:高鸿,1980年出生,博士,高级工程师,研究方向为航天器用材料的规划、测试技术、质量及可靠性。E-mail:gaohong_cast@sina.com

also introduced. In particular, this evaluation method provides an effective way to monitor the main mechanical and physical properties of key materials in orbit on the ground in real time. It provides important means for the design, reliability evaluation and real-time performance monitoring of key materials in national high-end equipment.

Key words Extreme low temperature in deep space, Mechanical properties, Physical properties, Evaluation method

0 引言

随着我国空间探测卫星、深空探测飞行器等高端装备的快速发展,对宇航材料的低温服役性能提出了越来越苛刻的要求^[1-3]。在低温环境条件下,材料的力学/物理性能和常温相比有很大差异^[4],了解并评价材料在低温下的力学、物理特性已成为人们关注的重点问题,对航天器结构设计和服役安全性至关重要。

目前我国在低温环境下常用的金属材料有奥氏体不锈钢、铝、铜、钛合金以及镍基合金等^[5]。服役温度对金属材料的力学性能影响十分显著,大量学者为了研究金属材料的低温力学性能已开展了相关实验研究工作,并取得了系列进展^[4,6-7]。然而极低温力学性能测试需要对被测试样营造极低温环境,目前获取极低温(4.2~77 K)的主要手段是使用液氮作为致冷介质,我国市场上的氦气主要依靠进口^[4],而西方强国将氦气列为战略储备物质限制出口^[4]。此外,极低温力学性能测试还依赖于在极低温下可以工作的传感器(如应变、位移、扭角等变形传感器)的发展,目前的实验条件还不能完全满足工程应用的需求^[1,7]。与此同时,目前常用的力学性能测试需制备标准试件,属破坏性实验,不能实现实时在线测量。因此,进一步丰富和深入研究材料低温性能表征理论方法,建立材料低温性能理论表征模型,通过易获取的量对材料低温下难以获取的力学性能进行表征和低成本评价非常必要且重要。

半导体材料、磁存储和磁致伸缩材料等被广泛应用于航空航天、微电子、信息存储等高新技术领域^[8-10],在其应用中,常遭受低温环境,而其物理性能受温度影响十分显著,致使以上这些材料体系的研制及在高端装备上的应用依赖于对其低温物理性能理论表征上的突破,开展材料低温物理性能理论表征研究具有重要的意义。

本文总结与评述深空极低温服役环境下材料力学/物理性能低成本快速评价方法方面的研究工作。囿于篇幅,同时为避免面面俱到,着重介绍极低温环境下材料屈服强度、弹性模量、理想拉伸强度、硬度等力学性能的低成本快速评价方法;极低温下半导

体材料的禁带宽度、折射率、拉曼频移以及金属材料磁晶各向异性常数等物理性能的低成本快速评价方法方面近年来本课题组的研究进展。最后对材料力学/物理性能低成本快速评价方法研究进行展望,并为材料力学/物理性能低成本快速评价的进一步研究提供建议。

1 材料低温下屈服行为快速评价方法

金属材料在低温下的应用越来越广泛,作为决定材料安全服役的关键指标——屈服强度,对温度非常敏感,特别是当前对复杂热环境下邻近屈服点设计的需求愈发强烈,因此对温度相关性屈服强度的精确获取提出了更迫切的需求,相关研究成为当前高新科技最活跃的领域之一。目前,对低温屈服强度的获取仍主要依赖于实验手段,需制备标准试件,属破坏性实验,难以实现在线测量,也面临着耗时耗力等问题;而现有的温度相关性屈服强度理论模型包含大量拟合参数,致使其使用仍依赖于不同温度下大量实验的开展且不利于工程应用,如何定量表征温度对力学性能的影响是一个亟需解决的难题。因此,建立温度相关性屈服准则并建立相应的理论表征模型,通过易获取的量对材料难以获取的力学性能进行表征和低成本评价,具有重要的理论意义和工程应用价值。

1.1 金属材料温度相关性屈服强度快速评价方法

基于力与热能均可破坏材料化学键的物理事实,李卫国等^[11]提出了如下可定量考虑温度对材料力学性能影响的新方法——力-热能量密度等效原理,主要思想是:(1)对一种特定材料,认为其存在一个储能极限,即材料发生破坏时对应一个固定不变的能量最大值,这个最大值可以用应变能表征,也可以用热能表征;(2)从对材料破坏效果讲,材料储存的热能与应变能之间存在一种定量的等效关系。力-热能量密度等效原理为材料高温断裂强度理论表征开辟了新途径,并已在多种材料体系的温度/尺寸相关性力学/物理性能等的理论表征上获得应用^[8-9,12-19]。为航空航天、核工业、微电子等领域高端装备上关键材料的应用、设计及可靠性评价方面提供了理论基础和技术储备。

基于力-热能量密度等效原理^[11],李卫国等^[12,20]提出了一个新的温度相关性屈服准则:“不同温度时,无论在何种应力状态下,当变形体单位体积弹性形变能量与相应温度下与弹性形变能量等效的热能之和达到某一固定不变的定值时,材料进入塑性状态”,由此可得下式:

$$W_{\text{Total}} = W_d(T) + KW_T(T) \quad (1)$$

式中, W_{Total} 为单位体积材料屈服时对应的储能极限定值, $W_d(T)$ 和 $W_T(T)$ 分别为 T 温度下的弹性形变能和储存的热能, K 为等效系数。进而李卫国等^[12,20]首次建立了如下适用于宽温域下无需拟合参数的屈服强度理论分析模型:

$$\sigma_y(T) = \left[\frac{(1 + \nu(T_0))E(T)}{(1 + \nu(T))E(T_0)} \left(1 - \frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_m} c_p(T) dT} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \sigma_y(T_0) \quad (2)$$

式中, $\sigma_y(T)$ 为 T 温度下材料的屈服强度, $\nu(T)$ 和 $E(T)$ 为材料的温度相关性泊松比和弹性模量, $\sigma_y(T_0)$ 、 $E(T_0)$ 和 $\nu(T_0)$ 分别为任意一个参考温度 T_0 下的屈服强度、弹性模量和泊松比, $c_p(T)$ 为材料的温度相关性定压比热容, T_m 为材料的熔点。该模型得到了实验的很好验证^[12]。基于此模型[式(2)],考虑低温下的相应机制,李卫国课题组对高熵合金低温屈服强度进行了评价并与实验结果吻合的很好,同时,在上述分析模型[式(2)]基础上,李卫国课题组系统地研究了控制金属材料屈服强度的各种机制及其随温度的演化规律,构建了可考虑应变率、细晶强化、

$$\tau_c(T) = \tau_c(T_0) \left\{ G(T)/G(T_0) \times \left[1 - \frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_m} c_p(T) dT} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

式中, $\tau_c(T)$ 为温度相关性临界分切应力, $G(T)$ 为材料的温度相关剪切模量, $\tau_c(T_0)$ 和 $G(T_0)$ 分别为任意一个参考温度 T_0 下的临界分切应力和剪切模量, $c_p(T)$ 为材料的温度相关性定压比热容, T_m 为材料的熔点。可以看出,模型[式(3)]无任何拟合参数。模型建立了不同温度下临界分切应力与任意参考温度下临界分切应力、定压比热容和剪切模量之间的定量关系。在式(3)中,定压比热容可以在材料手册中找到,温度相关性剪切模量可以通过实验或材料手册容易获得。基于该模型[式(3)],通过易获取参考温度下的临界分切应力及不同温度下的剪切模量可以方便快速地评价不同温度下的临界分切应力,如图1所示^[17]。

相变、晶界滑移、固溶强化等机制及其组合影响的系列理论模型^[12-13,15],实现了对各项强化机制的解耦分析。鉴于室温下屈服强度易获取,温度相关性弹性模量可以通过非破坏性实验方便地获取,且弹性模量的某些测量方法不受样品尺寸局限,可在位测量、简单方便、测试费用低,故基于此工作可制造出一种简单、有效的能对不同温度下服役中材料屈服强度在线无损测量的测试设备,为材料屈服强度的在线无损测量与实时监控提供了一种新技术和快速评价方法^[12]。

1.2 金属材料温度相关性临界分切应力快速评价方法

临界分切应力(CRSS)是晶体材料滑移系开动所需的最小切应力,其数值大小体现了材料抵抗塑性变形的能力^[21]。多晶体材料屈服临界分切应力不仅能够反映材料本身的强度,而且利用屈服临界分切应力还可以预判多晶体材料力学性能各向异性规律^[21]。临界分切应力对温度有非常明显的相关性。开展晶体材料的温度相关性临界分切应力理论表征模型研究,对研究不同温度下多晶体材料的力学性能具有重要意义。

基于力-热能量密度等效原理^[11],李卫国、麻建坐等^[17]提出以下假设:金属中位错滑移开动时对应单位体积存储的能量存在一个最大值,这个最大能量包含弹性变形能和热能,弹性变形能与相应热能之间存在一个等效关系,并建立了金属材料温度相关性临界分切应力理论分析模型^[17]:

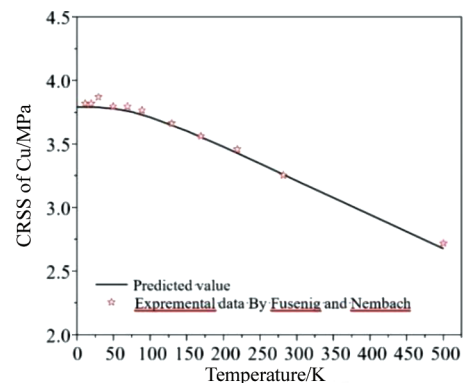


图1 纯Cu在4.2~500 K下的临界分切应力预测值与实验值^[22]对比^[17]

Fig. 1 Comparison between the predicted value and experiment data^[22] of CRSS for pure Cu from 4.2 K to 500 K^[17]

1.3 金属玻璃温度相关性压缩屈服强度快速评价方法

基于力-热能量密度等效原理^[11],李卫国、张先贺等^[20,23]对于金属玻璃(BMGs),提出了对应剪切变形区(STZ)失稳时的临界屈服能量密度准则^[20,23],建立了不同温度下BMGs压缩屈服强度分析模型^[20,23]:

$$\sigma_c(T) = \sigma_c(T_0) \left[1 - \left(1 - f_g \right) \frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_g} c_p(T) dT + f_g \int_0^{T_0} c_p(T) dT} \right] \frac{\gamma_c(T)}{\gamma_c(T_0)} \quad (4)$$

式中, $\sigma_c(T)$ 和 $\sigma_c(T_0)$ 分别为温度 T 和 T_0 下BMGs的压缩屈服强度, $\gamma_c(T)$ 和 $\gamma_c(T_0)$ 分别为温度 T 和 T_0 下临界剪切应变, $f_g=G(T_g)/G(0)$,即BMGs在玻璃化转变温度 T_g 和0 K下剪切模量的比值,可以取作常数0.85^[24], $c_p(T)$ 为定压比热容。利用德拜模型可以计

算模型[式(4)]中BMGs的定压比热容 $c_p(T)$ ^[20,23]:

$$c_p(T) = \frac{9Nk_B}{M} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (5)$$

式中, N 、 k_B 和 θ_D 分别为阿佛加德罗常数、玻尔兹曼常数和德拜温度。 θ_D 可由式(6)获取^[25]:

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{9N}{4V\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\left(\frac{\rho}{B + 4G/3} \right)^{\frac{3}{2}} + 2 \left(\frac{\rho}{G} \right)^{\frac{3}{2}} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (6)$$

式中, h 和 V 分别为普朗克常数和摩尔体积, ρ 、 B 和 G 分别为常温下密度、体积模量和剪切模量。

利用模型[式(4)]对 $Zr_{41.25}Ti_{13.75}Ni_{10}Cu_{12.5}Be_{22.5}$ 、 $Zr_{50.7}Cu_{28}Ni_9Al_{12.3}$ 、 $Zr_{60}Ni_{25}Al_{15}$ 等BMGs的低温压缩屈服强度的预测评价结果与实验结果^[26-28]对比如图2所示^[20,23]。结果表明,预测评价结果与实验数据吻合较好,且参考温度的选择不影响模型预测的结果,因此基于模型[式(4)]可以利用易获取的室温下的BMGs压缩屈服强度方便地评价低温下的压缩屈服强度。

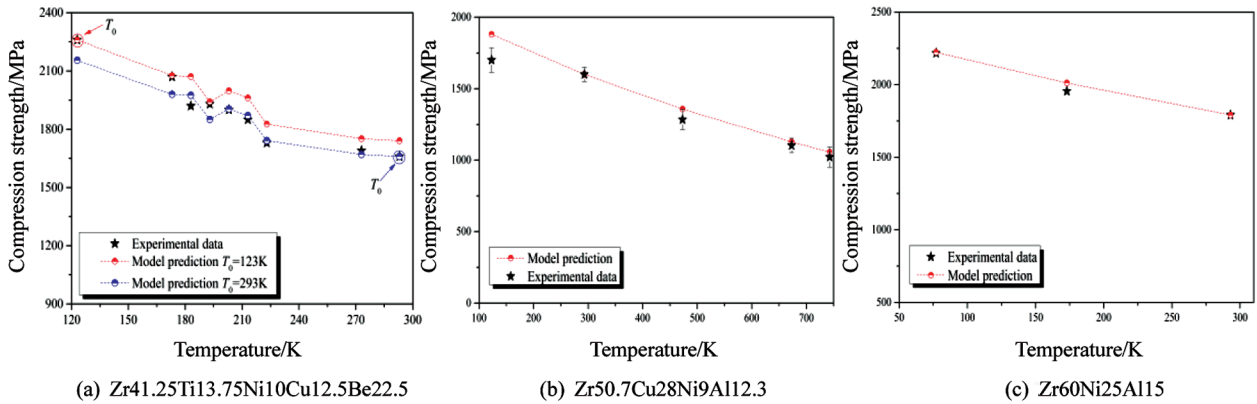


图2 不同温度下BMGs压缩屈服强度理论结果与实验数据^[26-27]对比^[20,23]

Fig. 2 Comparison of theoretical results and experiment data^[26-27] of compressive strength for BMGs at different temperature^[20,23]

2 材料低温下弹性模量快速评价方法

2.1 金属材料低温下弹性模量快速评价方法

在力-热能量密度等效原理^[11]的基础上,李卫国、寇海波等^[14,29]建立了块体材料不同温度下弹性模量理论模型:

$$E(T) = \frac{\left(1 + \int_0^{T_0} \alpha(T) dT \right)^3}{\left(1 + \int_0^T \alpha(T) dT \right)^3} \times \left(1 - \frac{\int_{T_0}^T c_v(T) dT}{\int_{T_0}^{T_m} c_v(T) dT + \Delta_{fus} H} \right)^{\frac{1}{2}} E(T_0) \quad (7)$$

式中, $E(T)$ 和 $\alpha(T)$ 分别温度相关性弹性模量和线膨胀系数[$\alpha(T)$ 可以从手册^[30]中查到],定容比热容 $c_v(T)$ 和熔点 T_m 可以从手册^[31]中查到,熔化热 $\Delta_{fus}H$ 可以从手册^[32]中查到, $E(T_0)$ 为任意参考温度下的弹性模量。不同温度下金属材料的弹性模量、弹性常数和剪切模量均可由模型[式(7)]评价^[14,29]。

以弹性常数为例,低温下模型预测结果和实验值对比如图3和图4所示^[14,29]。

此模型为预测不同温度尤其是极低温下弹性模量提供了一种新的方法。

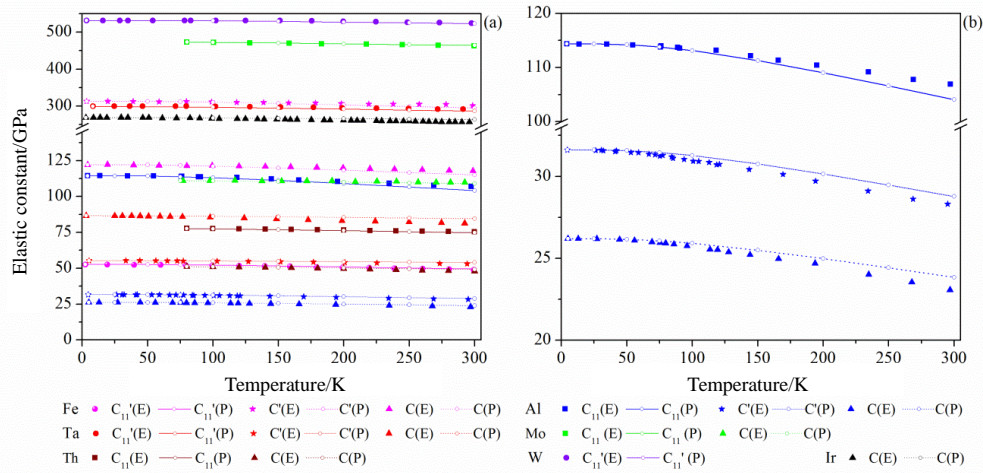


图3 低温下金属材料弹性常数理论预测值(线)和实验值(点)^[33-38]对比^[14,29]

$$C_{11}' = 0.5(c_{11} + c_{12} + 2c_{44}), C' = 0.5(c_{11} - c_{12}), C = c_{44}, \text{ and } C_{11} = c_{11}$$

Fig. 3 Comparison of theoretical results (line) and experiment data^[33-38] (symbols) of elastic constants at low temperature^[14,29]

$$C_{11}' = 0.5(c_{11} + c_{12} + 2c_{44}), C' = 0.5(c_{11} - c_{12}), C = c_{44}, \text{ and } C_{11} = c_{11}$$

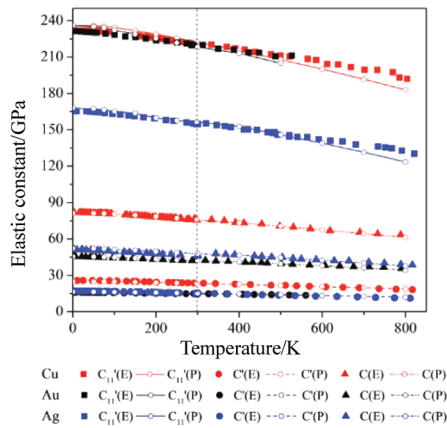


图4 Cu、Au、Ag弹性常数理论预测值(线)和实验值(点)^[39-41]对比^[14,29]

Fig. 4 Comparison of theoretical results (line) and experiment data^[39-41] (symbols) of Cu、Au、Ag^[14,29]

2.2 金属玻璃低温下弹性模量快速评价方法

基于力-热能量密度等效原理^[11],李卫国、张先贺等^[20,23]建立了BMGs温度相关性弹性模量模型^[23]:

$$E(T) = E(0) \left[1 - 0.15 \times \int_0^T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx dT / \int_0^{T_g} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx dT \right] \quad (8)$$

式中, $E(T)$ 为温度相关性弹性模量, $E(0)$ 为0 K下的弹性模量,德拜温度 θ_D 可通过式(6)计算得到。利用此模型[式(8)],多种BMGs剪切模量、弹性模量的模型评价结果(实线)与实验值(点)^[42-44]对比如图5所示^[20,23]。计算中相关参数可在文献[44]中找到。模型预测结果与相关学者研究结果^[45-46]及实验数据相吻合。因此,模型[式(8)]能很好地预测评价BMGs不同温度下特别是极低温下的弹性模量。

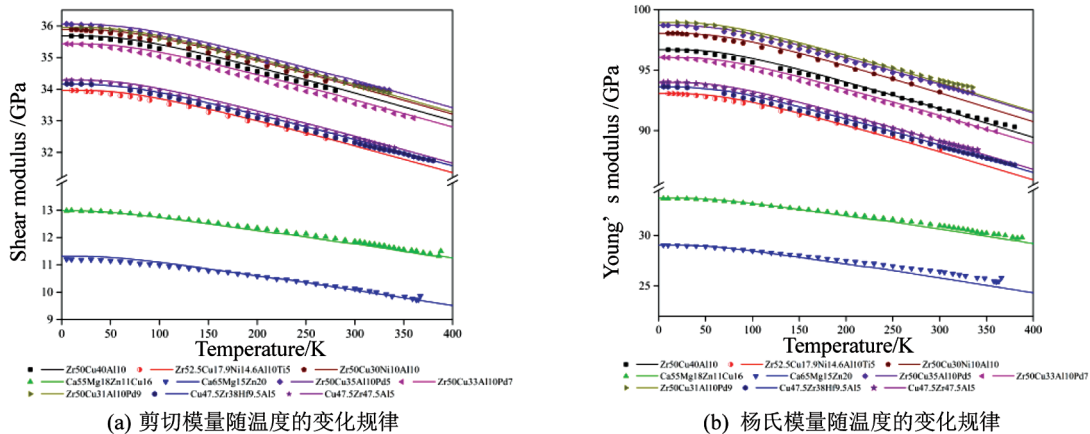


图5 多种BMGs剪切模量、弹性模量随温度的变化规律^[20,23],实验数据来自文献^[42-44]

Fig. 5 Shear modulus G and Young's modulus E as a function of temperature for BMGs^[20,23], the experimental data are from literature^[42-44]

3 材料低温下理想拉伸强度快速评价方法

固体的理想拉伸强度是材料在没有缺陷(如位错、裂纹和杂质)时所能达到的最大拉应力。基于力-热能量密度等效原理^[11],李卫国、成天宝等^[47]针对单晶材料在不同温度下拉伸失效时提出了温度相关性临界失效能密度准则(CFEDP)和温度相关性临界应变准则(CSP)^[47]。

采用CFEDP失效准则,主应力方向与 (x,y,z) 坐标轴平行时,李卫国、成天宝等^[47-48]建立了不同温度下对任意 $[hkl]$ 方向的立方单晶单轴理想拉伸强度模型:

$$\sigma_{[hkl]_t}(T) = \sigma_{[hkl]_t}(T_0) \left\{ \frac{1}{E_{[hkl]}(T_0)} E_{[hkl]}(T) \times \left[1 - \frac{1}{\int_{T_0}^{T_m} c_p(T) dT + \Delta H_M} \int_{T_0}^T c_p(T) dT \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

式中, $\sigma_{[hkl]_t}(T)$ 和 $E_{[hkl]}(T)$ 分别为温度相关性理想拉

伸强度和任意晶体学方向弹性模量, $c_p(T)$ 为定压比热容。 $\sigma_{[hkl]_t}(T_0)$ 和 $E_{[hkl]}(T_0)$ 分别为任意温度下理想拉伸强度和任意晶体学方向弹性模量, ΔH_M 为融化热, T_m 为材料熔点。

采用CSP失效准则,主应力方向与 (x,y,z) 坐标轴平行时,李卫国、成天宝等^[47-48]建立了不同温度下对任意 $[hkl]$ 方向的立方单晶单轴理想拉伸强度模型:

$$\sigma_{[hkl]_t}(T) = \left[\frac{1}{E_{[hkl]}(T_0)} \sigma_{[hkl]_t}(T_0) - \varepsilon_{th}(T) \right] E_{[hkl]}(T) \quad (10)$$

式中, $\varepsilon_{th}(T) = \alpha(T)(T - T_0)$, $\alpha(T)$ 为线胀系数。

以上两个模型[式(9)]与[式(10)]的预测结果与其他学者的计算结果^[49-53]对比如图6所示^[47-48]。可以看出第一性原理分子动力学(AI MD)方法存在较大偏差,故低温下理论模型[式(9)]与[式(10)]预测的理想拉伸强度更合理。

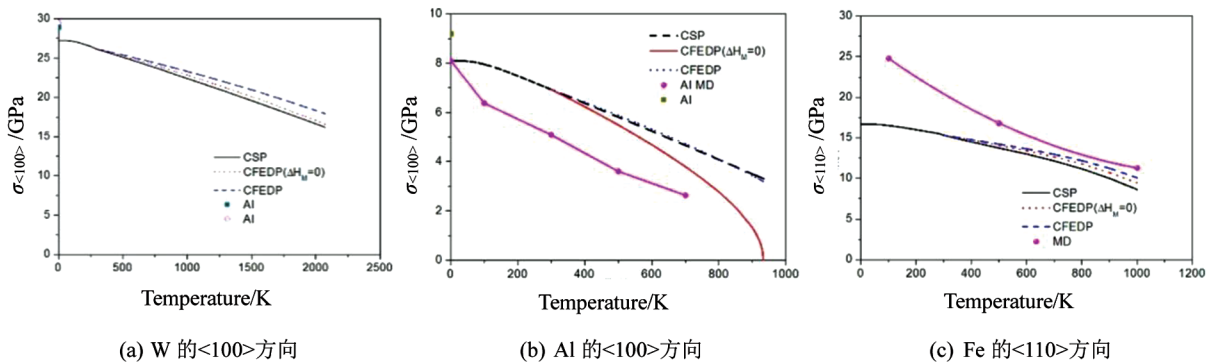


图6 不同温度下单轴理想拉伸强度

Fig. 6 Uniaxial ideal tensile strength at different temperature

4 材料低温下硬度快速评价方法

基于金属材料温度相关性屈服强度模型^[12],结合金属硬度与屈服强度之间存在的关系^[54],李卫国、徐念东等^[55]建立了温度相关性硬度理论模型:

$$H(T) = H(T_0) \left(1 - \frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_m} c_p(T) dT + \Delta H_M} \right)^{\frac{3}{4}n} \quad (11)$$

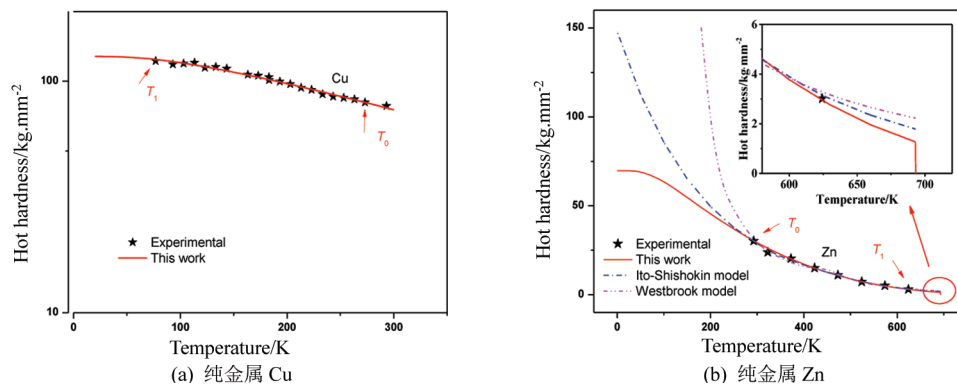


图7 室温以下纯金属Cu^[59]和纯金属Zn^[60]的硬度随温度的变化

Fig. 7 The temperature-dependent hardness of Cu^[59] and Zn^[60] at temperatures below RT

式中, $H(T)$ 为温度相关性硬度, $H(T_0)$ 为任意参考温度下的硬度,参数 n 可以通过再选择一个参考温度 T_1 下的硬度值 $H(T_1)$ 反推获取。模型中的定压比热容

(c_p)在室温至熔点的温度范围可以直接通过查询材料手册获取^[56],模型预测结果与实验值对比如图7所示^[55]。从图中可以看出模型预测结果与实验值取得

了很好的一致性,且当温度接近绝对零度时预测结果曲线斜率趋近于零,符合热力学第三定律。而Ito-Shishokin模型^[57]与Westbrook模型^[58]预测的硬度值随着温度接近绝对零度而急剧增加,这显然是不合理的。这也说明Ito-Shishokin模型与Westbrook模型不适用于外推预测金属材料在不同温度下的硬度。模型[式(11)]可对绝对零度到熔点这一宽温度范围的硬度进行很好地预测与评价,高温下硬度实验值与预测值对比可见文献[55]。

5 材料低温下物理性能快速评价方法

通过建立不同形式相关联能量间的等效关系,赋予力-热能量密度等效原理中各能量项不同的物理意义,李卫国等^[11]将提出的力-热能量密度等效原理成功拓展应用于半导体材料、磁存储材料等的温度相关性物理性能理论表征,为低温下半导体材料、磁存储材料物理性能的快速评价开辟了新途径。

5.1 半导体材料低温下带隙能快速评价方法

带隙能是半导体材料中一个非常重要的电学物

理量。基于力-热能量密度等效原理^[11],李卫国、耿培基等^[8]将考虑温度对材料性能影响的建模思想应用到半导体材料中,从能量等效的角度,建立了如下温度相关性带隙能理论模型^[8]:

$$E_g(T) = \left\{ E_g(T_0) - \left[E_g(T_0) - E_g(T_1) \right] \left(\frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_1} c_p(T) dT} \right) \right\} \left(1 + \frac{\int_0^T \alpha(T) dT}{\int_0^{T_1} \alpha(T) dT} \right)^3 \quad (12)$$

式中, $E_g(T)$ 是温度相关性的带隙能, $E_g(T_0)$ 和 $E_g(T_1)$ 是任意两个参考点 T_0 和 T_1 的带隙能, $c_p(T)$ 是温度相关性定压比热容, $\alpha(T)$ 是半导体材料的温度相关性线膨胀系数,该模型[式(12)]同时考虑了两个主要因素(晶格膨胀和声-电相互作用)对带隙能的影响。模型预测结果与实验值对比如图8所示^[61-70]。该模型[式(12)]可以很好地预测半导体材料低温下的带隙能,为确定不同温度下半导体的带隙能提供了一种简便的方法。

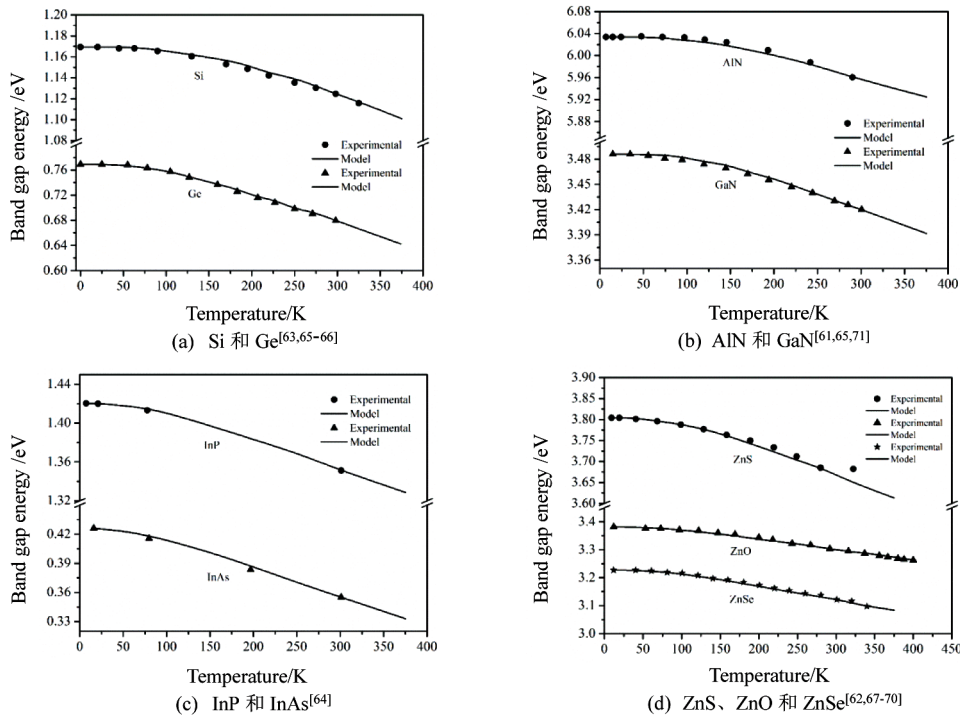


图8 温度相关性带隙能理论值(线)与实验值(点)对比

Fig. 8 Comparison of theoretical results (line) and experiment data (symbols) of temperature dependent band gap energy

5.2 半导体材料低温下折射率快速评价方法

折射率在表征半导体材料的光学特性中起着非

常重要的作用。李卫国、耿培基等^[9]建立了可综合考虑红移和温度影响的折射率模型:

$$n(T) = n(T_0) \sqrt[4]{ \frac{\left(1 + \int_0^T \alpha(T) dT \right)^3}{\left\{ 1 - \left[1 - E_g(T_1)/E_g(T_0) \right] \left(\frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_1} c_p(T) dT} \right) \right\} \left(1 + \int_0^{T_0} \alpha(T) dT \right)^3} } \quad (13)$$

式中, $n(T)$ 为 T 温度下的折射率, $n(T_0)$ 为参考温度 T_0

下的折射率, $\alpha(T)$ 为材料的线胀系数, $E_g(T_1)$ 为 T_1 温

度下的能带, $E_g(T_0)$ 为 T_0 温度下的能带, $c_p(T)$ 为温度相关性的定压比热容, 可以方便地从现有文献中查到。模型预测结果如图 9 所示, 模型预测结果和现有

的实验结果^[72-75]取得了非常好的一致性。该模型利用一个容易获取的参考点就可以简单方便地预测不同温度下半导体材料的折射率, 为不同温度下半导体材料折射率的预测提供一种简单方便的方法。

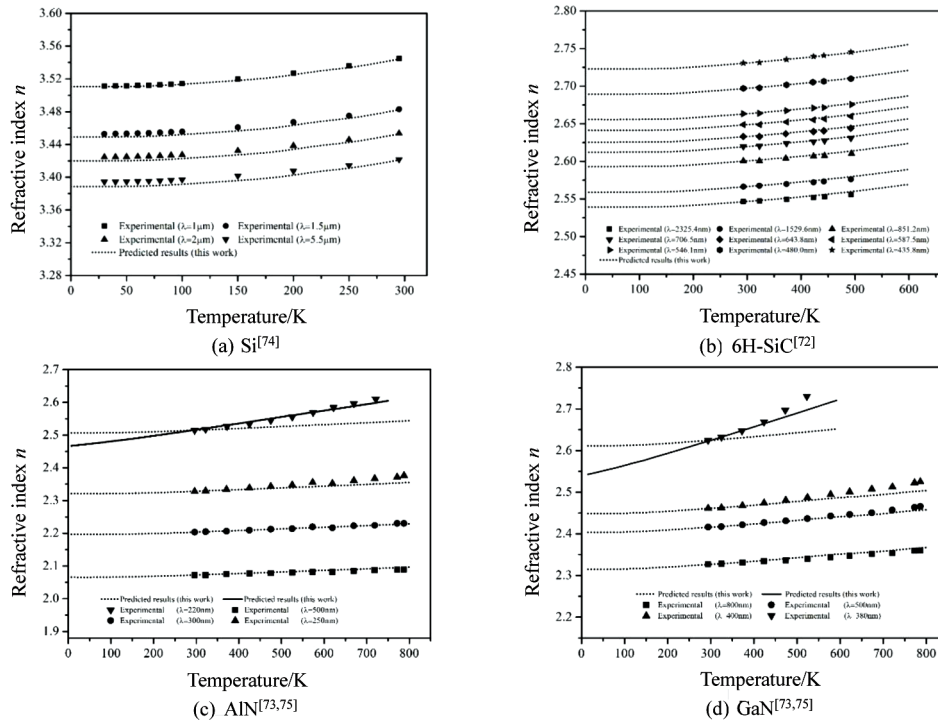


图 9 温度相关性折射率理论值(线)与实验值(点)对比

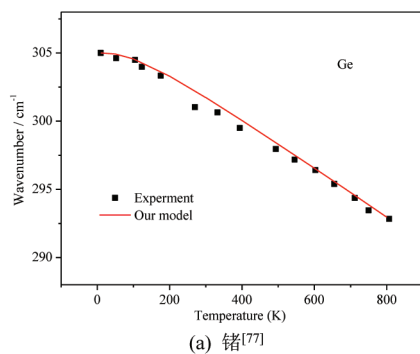
Fig. 9 Comparison of theoretical results (line) and experiment data (symbols) of temperature dependent refractive index

5.3 半导体材料低温下拉曼频移快速评价方法

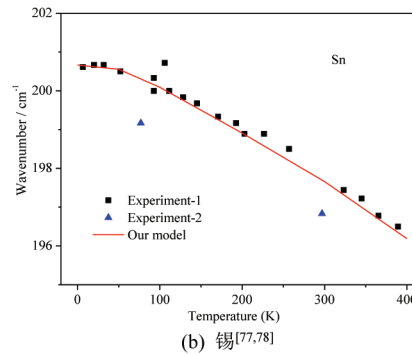
半导体材料中, 原子的振动行为对研究其非线性光学和电学性质是有重要意义的, 例如电子-声子耦合, 声子-光子相互作用, 声子传输、热传导和热稳定性等。研究不同温度下半导体材料的拉曼频移是非常必要的。基于力-热能量密度等效原理^[11], 李卫国、张续耀等^[76]

假设热能与拉曼频移之间存在定量的等效关系, 建立了可计及温度影响的半导体材料拉曼频移模型^[76]:

$$\omega(T) = \omega(T_0) \left(1 - \frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_B} c_p(T) dT + \Delta H_M + \Delta H_B} \right) \quad (14)$$



(a) 锗^[77]



(b) 锡^[77,78]

图 10 锗^[77]和锡^[77-78]的温度相关性拉曼频移

Fig. 10 Temperature dependent Raman frequency shift of Ge^[77] and Sn^[77-78]

式中, $\omega(T)$ 为温度 T 下的拉曼频移, $\omega(T_0)$ 为参考温度 T_0 下的拉曼频移, $c_p(T)$ 为温度相关性的定压比热容, 可以方便地从现有文献中查到, T_B 为材料的沸点, ΔH_M 为材料的熔化热, ΔH_B 为材料的汽化热。模型预测结果如图 10 所示^[76], 模型预测结果和现有的

实验结果^[77-78]取得了非常好的一致性。该模型[式(14)]揭示了半导体材料拉曼频移和材料沸点、熔化热、汽化热以及热熔之间的内在联系。利用一个容易获取的参考点就可以简单方便地预测不同温度下半导体材料的拉曼频移。

5.4 材料低温下磁晶各向异性常数快速评价方法

磁性材料作为一种功能材料,在现代科学技术中起着至关重要的作用^[79]。磁晶各向异性常作为衡量在信息科学领域有着广泛应用的磁存储材料和磁致伸缩材料宏观磁性能的重要指标^[79]。在科学研究中通常利用磁晶各向异性常数来表征磁晶各向异性性能。大量研究结果表明温度对磁晶各向异性常数有很大影响^[80-82]。因此,研究磁晶各向异性常数随温度的演化规律能为磁性功能材料的设计和应用提供理论依据^[79],具有重要的意义^[83]。李卫国、董攀等^[10]将力-热能量密度等效原理^[11]拓展应用于温度相关性磁晶各向异性常数的理论表征,假设单位质量材料存在由内能和磁晶各向异性性能组成的最大储能极限,同时,磁晶各向异性性能与内能之间存在等效关系,建立了如下温度相关性一阶磁晶各向异性常数理论表征模型^[10]:

$$K_1(T) = \frac{K_1(T_0)}{1 + \int_{T_0}^T \beta(T) dT} - \left(\frac{K_1(T_0)}{1 + \int_{T_0}^T \beta(T) dT} - \frac{K_1(T_1)}{1 + \int_{T_1}^T \beta(T) dT} \right) \frac{\int_{T_0}^T c_p(T) dT}{\int_{T_0}^{T_1} c_p(T) dT} \quad (15)$$

式中, $K_1(T)$ 为温度相关性一阶磁晶各向异性常数, $K_1(T_0)$ 和 $K_1(T_1)$ 分别是参考温度 T_0 和 T_1 下的一阶磁晶各向异性常数, $\beta(T)$ 是温度相关性体膨胀系数, $c_p(T)$ 是温度相关性定压比热容。模型所需的定压比热容、体膨胀系数容易从材料手册或其他文献中获取。模型预测结果与实验值对比如图11所示,模型预测结果与实验结果吻合很好,为预测铁磁性金属在不同温度下的一阶磁晶各向异性常数提供了一种实用方便的途径,避免了在极低温度下实验的困难。

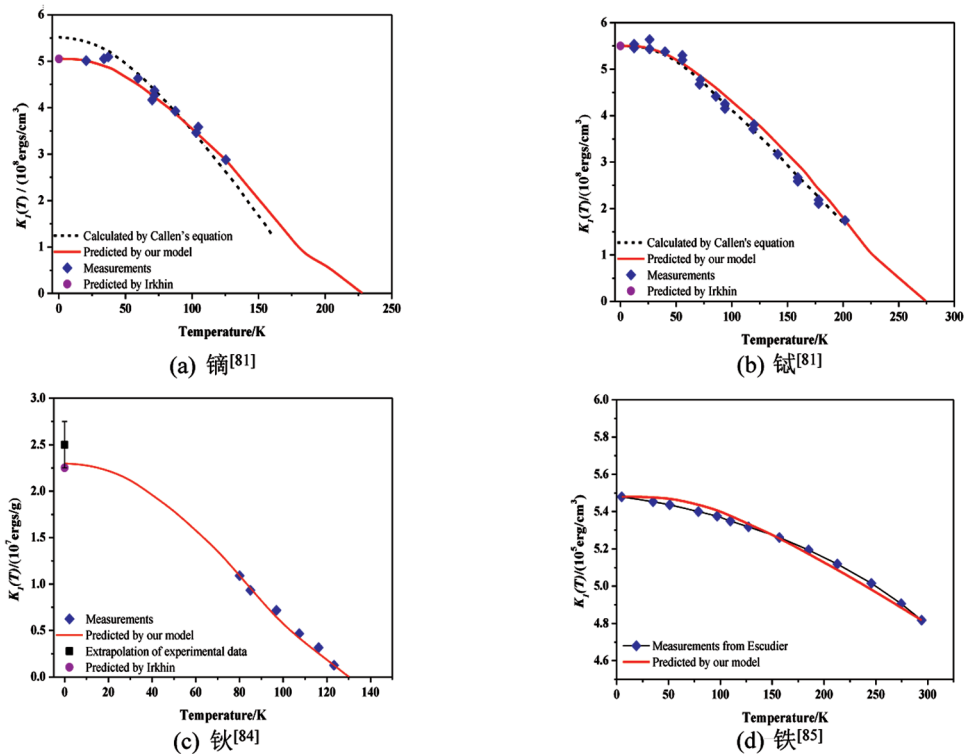


图11 温度相关性一阶磁晶各向异性常数理论值与实验值对比

Fig. 11 Comparison of theoretical results (line) and experiment data (symbols) of temperature dependent first order magnetocrystalline anisotropy constant

6 总结与展望

综上所述,利用力-热能量密度等效原理,已经对深空极低温服役环境下材料屈服强度、弹性模量、临界分切应力等力学性能;半导体材料的带隙能、折射率、拉曼频移,金属材料磁晶各向异性常数等物理性能进行了很好的表征和低成本快速评价。为实现地面实时监测在轨航天器中关键材料的主要力学、物理性能提供了有效途径,为国家高端技术装备建宇航材料工艺 <http://www.yhclgy.com> 2021年 第5期

设中关键材料的设计、可靠性评价和实时性能监测等提供重要的手段。后续的研究工作可以从以下几个方面入手进行考虑。

(1)系统研究并表征不同低温环境下复合材料的弹性模量、强度及失效破坏模式,考虑温度、基体微裂纹、界面损伤、低温热循环和冷却速率等因素对复合材料性能参数如变形、失效强度和渗漏率等非线性影响,建立具有深刻物理背景且适用于不同服

役环境的低温复合材料力学性能理论表征方法。

(2)在极低温复合材料性能预测方面,选取合适的方法来建立高效可靠的评估模型,以便提供低温复合材料力学性能快速评价的方法,促进实现低温复合材料从基础研究向应用研究的转变。

(3)利用力-热能量密度等效原理,通过不同超常环境下相对应的其他形式能量的等效方式,也可拓展应用于超高/低温、热冲击、高热流、强辐照、极高真空、超高压、强磁场、强化学环境、高过载和高应变速率等及其组合更广泛超常环境下材料服役行为的理论表征和评价,解决更广泛领域面临的问题,为我国高端战略装备的发展提供理论支撑和技术支持。

参考文献

[1] 朱建炳. 空间低温制冷技术的应用与发展[J]. 真空与低温, 2010(4): 187-192.

ZHU J B. The application and development of space cryogenic refrigeration technology [J]. Vacuum & Cryogenics, 2010(4): 187-192.

[2] 李卫国, 邵家兴, 寇海波, 等. 材料高温力学性能理论表征方法研究进展[J]. 固体力学学报, 2017(2): 4-34.

LI W G, SHAO J X, KOU H B, et al. Research progress on the theoretical characterization methods for the high-temperature mechanical properties of materials [J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2017(2): 4-34.

[3] 邵家兴. 陶瓷纤维及其增强复合材料的高温强度理论表征方法研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2019.

SHAO J X. Theoretical characterization methods on the high temperature strength of ceramic fibers and their reinforced composites[D]. Chongqing: Chongqing University, 2019.

[4] 刘春立, 何涛, 富大欣. 航天结构材料低温力学性能测试技术[J]. 低温工程, 1999(3): 17-21.

LIU C L, HE T, FU D X. Testing technique of mechanical properties of aerospace structural materials at cryogenic temperature conditions[J]. Cryogenics, 1999(3): 17-21.

[5] 王磊. 超低温用NiCuCrMoTiAlNb镍基合金微观结构及塑性变形机理[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学, 2015.

WANG L. Microstructure and plastic deformation mechanism of cryogenic NiCuCrMoTiAlNb Nickel-based alloys [D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2015

[6] 赵稼祥. 航天材料低温性能测试技术[J]. 宇航材料工艺, 1986(5): 68-74.

ZHAO J X. Testing technology for low temperature performance of aerospace materials [J]. Aerospace Materials & Technology, 1986(5): 68-74.

[7] 甘智华, 陶轩, 刘东立, 等. 日本空间液氦温区低温技术的发展现状[J]. 浙江大学学报(工学版), 2015, 49(10): 1821-1835.

GAN Z H, TAO X, LIU D L, et al. Development status of space cryogenic technology at liquid helium temperature in Japan [J]. Journal of Zhejiang University (Engineering Science), 2015, 49(10): 1821-1835.

[8] GENG P J, LI W G, ZHANG X H, et al. A novel

theoretical model for the temperature dependence of band gap energy in semiconductors [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2017, 50(40): 40LT02.

[9] GENG P J, LI W G, ZHANG X Y, et al. Effects of temperature and redshift on the refractive index of semiconductors [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 124(3): 035703.

[10] DONG P, LI W G, ZHENG S F, et al. Temperature dependent first order magnetocrystalline anisotropy constant model for ferromagnetic metals [J]. Materials Research Express, 2020, 6(12): 126114.

[11] LI W G, YANG F, FANG D N. The temperature-dependent fracture strength model for ultra-high temperature ceramics [J]. Acta Mechanica Sinica, 2010, 26(2): 235-239.

[12] LI W G, ZHANG X H, KOU H B, et al. Theoretical prediction of temperature dependent yield strength for metallic materials [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2016, 105: 273-278.

[13] LI W G, MA J Z, KOU H B, et al. Modeling the effect of temperature on the yield strength of precipitation strengthening Ni-base superalloys [J]. International Journal of Plasticity, 2019, 116: 143-158.

[14] LI W G, KOU H B, ZHANG X H, et al. Temperature-dependent elastic modulus model for metallic bulk materials [J]. Mechanics of Materials, 2019, 139: 103194.

[15] KOU H B, LI W G, MA J Z, et al. Theoretical prediction of the temperature-dependent yield strength of solid solution strengthening nickel-based alloys [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2018, 140: 83-92.

[16] ZHANG X H, LI W G, DENG Y, et al. Strength criterion and temperature dependent strength model of metallic glasses [J]. International Journal of Solids And Structures, 2019, 163: 242-251.

[17] MA J Z, LI W G, SHAO J X, et al. Temperature-dependent critical resolved shear stress model for (Cu-Au)-Co alloys in pure shear mode [J]. Philosophical Magazine, 2018, 98(4): 251-261.

[18] DENG Y, LI W G, WANG R ZH, et al. Temperature dependent first matrix cracking stress model for the unidirectional fiber reinforced ceramic composites [J]. Journal of the European Ceramic Society, 2017, 37(4): 1305-1310.

[19] ZHANG X, LI W, WU D, et al. Size and shape dependent melting temperature of metallic nanomaterials [J]. Journal of Physics-Condensed Matter, 2019, 31(7): 075701.

[20] 张先贺. 金属材料温度相关性尺寸相关性屈服强度理论表征方法研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2019.

ZHANG X H. Theoretical characterization on temperature dependent and size dependent yield strength of metallic materials [D]. Chongqing: Chongqing University, 2019.

[21] 宗鑫, 毛卫民, 朱国辉, 等. 基于晶体学模型估算单相多晶体材料屈服临界分切应力 [J]. 塑性工程学报, 2013, 20(6): 103-107.

ZONG X, MAO W M, ZHU G H, et al. Estimation of critical resolved shear stress of single-phase polycrystallites based on crystallographic model [J]. Journal of Plasticity

Engineering, 2013, 20(6): 103–107.

[22] FUSENIG K D, NEMBACH E. Dynamic dislocation effects in precipitation-hardened materials [J]. Acta Metallurgica Et Materialia, 1993, 41(11): 3181–3189.

[23] ZHANG X H, LI W G, LI Y, et al. Theoretical prediction of temperature dependent shear modulus of bulk metallic glasses[J]. Intermetallics, 2017, 91: 86–89.

[24] LU Z B, LI J G, SHAO H, et al. The correlation between shear elastic modulus and glass transition temperature of bulk metallic glasses[J]. Applied Physics Letters, 2009, 94(9): 091907.

[25] WANG W H, WEN P, ZHAO D Q, et al. Relationship between glass transition temperature and Debye temperature in bulk metallic glasses [J]. Journal of Materials Research, 2003, 18(12): 2747–2751.

[26] LIU Z Y, WANG G, CHAN K C, et al. Temperature dependent dynamics transition of intermittent plastic flow in a metallic glass. I. Experimental investigations [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 114(3): 185502.

[27] HUANG Y J, ZHENG W, HE F et al. The temperature dependent dynamic mechanical response of a ZrCuNiAl bulk metallic glass [J]. Materials Science & Engineering A, 2012, 551(8): 100–103.

[28] LI Y H, ZHANG W, DONG C, et al. Effects of cryogenic temperatures on mechanical behavior of a $Zr_{60}Ni_{25}Al_{15}$ bulk metallic glass[J]. Materials Science & Engineering A, 2013, 584(9): 7–13.

[29] 寇海波. 金属材料温度相关性弹性模量, 屈服强度及单相陶瓷抗热冲击性能研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2019.

KOU H B. Study on elastic modulus and yield strength of metallic materials and thermal shock resistance of single-phase ceramics[D]. Chongqing: Chongqing University, 2019.

[30] GRAY D E. American institute of physics handbook [M]. New York: McGraw-Hill Book Company, 1963.

[31] 梁英教, 车萌昌, 刘晓霞, 等. 无机物热力学数据手册[M]. 沈阳: 东北大学出版社, 1994.

LIANG Y J, CHE M CH, LIU X X, et al. Thermodynamic data manual for inorganic materials[M]. Shenyang: Northeastern University Press, 1994.

[32] HAYNES W M. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 94th edition[M]. New York: CRC Press, 2013.

[33] ARMSTRONG P E, CARLSON O N, SMITH J F. Elastic constants of thorium single crystals in the range 77–400 K [J]. Journal of Applied Physics, 1959, 30(1): 36–41.

[34] RAYNE J, CHANDRASEKHAR B. Elastic constants of iron from 4.2 to 300 K[J]. Physical Review, 1961, 122(6): 1714.

[35] FEATHERSTON F H, NEIGHBOURS J R. Elastic constants of tantalum, tungsten, and molybdenum [J]. Physical Review, 1963, 130(4): 1324–1333.

[36] KAMM G N, ALERS G A. Low-temperature elastic moduli of aluminum[J]. Journal of Applied Physics, 1964, 35(2): 327–330.

[37] DICKINSON J M, ARMSTRONG P E. Temperature dependence of the elastic constants of molybdenum [J]. Journal of Applied Physics, 1967, 38(2): 602–606.

[38] VARSHNI Y P. Temperature dependence of the elastic constants[J]. Physical Review B, 1970, 2(10): 3952.

[39] OVERTON J R W, GAFFNEY J. Temperature variation of the elastic constants of cubic elements. I. Copper [J]. Physical Review, 1955, 98(4): 969.

[40] NEIGHBOURS J, ALERS G. Elastic constants of silver and gold[J]. Physical Review, 1958, 111(3): 707.

[41] CHANG Y A, HIMMEL L. Temperature dependence of the elastic constants of Cu, Ag, and Au above room temperature [J]. Journal of Applied Physics, 1966, 37(9): 3567–3572.

[42] ZHANG Z, KEPPENS V, LIAW P K, et al. Elastic properties of Zr-based bulk metallic glasses studied by resonant ultrasound spectroscopy[J]. Journal of materials research, 2007, 22(2): 364–367.

[43] ZHANG Z, KEPPENS V, SENKOV O N, et al. Elastic properties of Ca-based bulk metallic glasses studied by resonant ultrasound spectroscopy [J]. Materials Science and Engineering: A, 2007, 471(1–2): 151–154.

[44] ZHANG Z Y, KEPPENS V, LIAW P K et al. Elastic properties of Zr-based bulk metallic glasses studied by resonant ultrasound spectroscopy [J]. Journal of Materials Research, 2007, 22(2): 364–367.

[45] KHONIK V, MITROFANOV Y P, LYAKHOV S, et al. Relationship between the shear modulus G , activation energy, and shear viscosity η in metallic glasses below and above T_g : Direct in situ measurements of G and η [J]. Physical Review B, 2009, 79(13): 132204.

[46] LEIBFRIED G, LUDWIG W. Theory of anharmonic effects in crystals[J]. Solid State Physics, 1961, 12: 275–444.

[47] CHENG T B, LI W G, FANG D N. Modeling of the temperature-dependent ideal tensile strength of solids [J]. Physica Scripta, 2014, 89(8): 085803.

[48] 成天宝. 先进高温材料强度和抗热震性能研究 [D]. 重庆: 重庆大学, 2016.

CHENG T B. Strength and thermal shock resistance of advanced high-temperature materials [D]. Chongqing: Chongqing University, 2016.

[49] SOB M, WANG L G, VITEK V. Theoretical tensile stress in tungsten single crystals by full-potential first-principles calculations [J]. Materials Science And Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure And Processing, 1997, 234: 1075–1078.

[50] ROUNDY D, KRENN C R, COHEN M L, et al. The ideal strength of tungsten [J]. Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties, 2001, 81(7): 1725–1747.

[51] ZHOU W, ZHANG Y, SUN H, et al. Ideal strength and structural instability of aluminum at finite temperatures [J]. Physical Review B, 2012, 86(5): 054118.

[52] CLATTERBUCK D M, KRENN C R, COHEN M L, et al. Phonon instabilities and the ideal strength of aluminum [J]. Physical Review Letters, 2003, 91(13): 135501.

[53] KOTRECHKO S, OVSJANNIKOV A. Temperature dependence of the yield stress of metallic nano-sized crystals [J]. Philosophical Magazine, 2009, 89(33): 3049–3058.

[54] TORRES H, VARGA M, RIPOLL M R. High

temperature hardness of steels and iron-based alloys [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2016, 671: 170–181.

[55] XU N D, LI W G, MA J Z, et al. Modeling of temperature-dependent hardness for pure FCC and HCP metals [J]. *International Journal of Applied Mechanics*, 2020, 12(2): 2050022.

[56] LI Y D. *Practical handbook of thermodynamic data for inorganic compounds*, 2nd ed [M]. Beijing: Metallurgy Industry Publishing House, 2002.

[57] LOZINSKII M G. *High temperature metallography* [J]. Pergamon Press, 1961: 241–318.

[58] WESTBROOK J H. Temperature dependence of the hardness of pure metals [J]. *Transactions of the American Society for Metals*, 1953, 45: 221–248.

[59] HUANG Z, GU L Y, WEERTMAN J R. Temperature dependence of hardness of nanocrystalline copper in low-temperature range [J]. *Scripta materialia*, 1997, 37(7): 1071–1075.

[60] ATSUMASA O, YASUHISA Y, RENPEI Y. Hot-hardness and indentation creep characteristics of pure metals [J]. *Tetsu To Hagane—Journal of the Iron and Steel Institute of Japan*, 1987, 73(9): 1186–1192.

[61] FENEBERG M, LEUTE R A, NEUSCHL B, et al. High-excitation and high-resolution photoluminescence spectra of bulk AlN [J]. *Physical Review B*, 2010, 82(7): 075208.

[62] PEJOVA B, ABAY B, BINEVA I. Temperature dependence of the band-gap energy and sub-band-gap absorption tails in strongly quantized ZnSe nanocrystals deposited as thin films [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2010, 114(36): 15280–15291.

[63] ALEX V, FINKBEINER S, WEBER J. Temperature dependence of the indirect energy gap in crystalline silicon [J]. *Journal of Applied Physics*, 1996, 79(9): 6943–6946.

[64] O'DONNELL K P, CHEN X. Temperature dependence of semiconductor band gaps [J]. *Applied Physics Letters*, 1991, 58(25): 2924–2926.

[65] PÄSSLER R. Limiting Debye temperature behavior following from cryogenic heat capacity data for group-IV, III–V, and II–VI materials [J]. *Physica Status Solidi*, 2010, 247(1): 77–92.

[66] CA MASSEL J, AUVERGNE D. Temperature dependence of the fundamental edge of germanium and zinc-blende-type semiconductors [J]. *Physical Review B*, 1974, 12(8): 3258–3267.

[67] YE CH H, FANG X SH, WANG M, et al. Temperature-dependent photoluminescence from elemental sulfur species on ZnS nanobelts [J]. *Journal of Applied Physics*, 2006, 99(6): 063504.

[68] PÄSSLER R, GRIEBL E, RIEPL H, et al. Temperature dependence of exciton peak energies in ZnS, ZnSe, and ZnTe epitaxial films [J]. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(8): 4403–4411.

[69] LI J W, YANG L W, ZHOU Z F, et al. Mechanically stiffened and thermally softened raman modes of ZnO crystal [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2010, 114(4): 1648–1651.

[70] TSOI S, LU X, RAMDAS A K, et al. Isotopic-mass dependence of the A, B, and C excitonic band gaps in ZnO at

low temperatures [J]. *Phys. Rev. B*, 2006, 74(16): 165203.

[71] SHAN W, SCHMIDT T J, YANG X H, et al. Temperature dependence of interband transitions in GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition [J]. *Applied Physics Letters*, 1995, 66(8): 985–987.

[72] XU C H, WANG S H, WANG G, et al. Temperature dependence of refractive indices for 4H- and 6H-SiC [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(11): 248–253.

[73] WATANABE N, KIMOTO T, SUDA J. The temperature dependence of the refractive indices of GaN and AlN from room temperature up to 515 degrees C [J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 104(10): L1998.

[74] FREY B J, LEVITON D B, MADISON T J. Temperature-dependent refractive index of silicon and germanium [C]. *Conference on Optomechanical Technologies for Astronomy pt. 2*; 20060524–31; Orlando, FL(US), 2006.

[75] WATANABE N, KIMOTO T, SUDA J. Thermo-optic coefficients of 4H-SiC, GaN, and AlN for ultraviolet to infrared regions up to 500 °C [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2012, 51(11R): 112101.

[76] ZHANG X Y, LI W G, DENG Y, et al. Temperature dependent Raman frequency model for monoatomic crystals [J]. *Materials Research Express*, 2018, 6(1): 015904.

[77] MENÉNDEZ J, CARDONA M. Temperature dependence of the first-order Raman scattering by phonons in Si, Ge, and -Sn: Anharmonic effects [J]. *Physical Review B*, 1984, 29(4): 2051–2059.

[78] BUCHENAUER C J, CARDONA M, POLLAK F H. Raman scattering in gray tin [J]. *Physical Review B*, 1971, 3(4): 1243–1244.

[79] 张云. 磁性功能材料的磁晶各向异性与物性分析 [D]. 湘潭大学, 2015.

ZHANG Y. Magnetic anisotropy energy and property analysis of magnetic functional materials [D]. Xiangtan University, 2015.

[80] YANG T T, YANG J J, ROBINSON L B. Temperature dependence of ferromagnetic anisotropy energy in cubic crystals [J]. *Solid State Communications*, 1973, 13(1): 53–57.

[81] RHYNE J J. Magnetic anisotropy of terbium and dysprosium [J]. *Journal of Applied Physics*, 1967, 38(3): 1379–1380.

[82] VISNYAKOV Y, IVANNIKOV V, LEVITIN R, et al. Determination of the magnetic uniaxial anisotropy constants of holmium from magnetization measurements in fields up to 240 kOe [J]. *SOV PHYS JETP*, 1970, 30(6): 1059–1061.

[83] BOHR J. Magnetic X-ray scattering: a new tool for magnetic structure investigations [J]. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 1990, 83(1–3): 530–534.

[84] VISHNYAKOV Y S, IVANNIKOV V L, LEVITIN R Z, et al. Determination of the magnetic uniaxial anisotropy constants of holmium from magnetization measurements in fields up to 240 koe [J]. *Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1969, 30: 1059.

[85] WOHLFARTH E P. *Handbook of ferromagnetic materials* [M]. 1980: 1–70.