

文章编号: 1000-5862(2019)03-0287-07

# 基底材料对嵌入型 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的应变场影响

安志伟, 周 行\*

(江西师范大学物理与通信电子学院, 江西 南昌 330022)

**摘要:** 埋嵌型纳米颗粒在生长的过程中会受到周围基质材料对其施加的应力作用, 应力的大小不仅会对纳米颗粒的晶格结构和物理性能产生影响, 还与纳米颗粒的尺寸大小息息相关. 因此, 研究埋嵌在不同薄膜材料中的纳米颗粒生长过程中的应变场分布对于调控纳米颗粒的物理性能有着重要的意义. 该文利用脉冲激光沉积和快速退火技术成功地制备了分别镶嵌在非晶氧化铝薄膜、非晶氧化镓薄膜和非晶二氧化硅薄膜中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒, 并利用透射电子显微镜观察这些球形纳米颗粒. 为了研究纳米颗粒的尺寸与应力大小之间的关系, 采用有限元算法分别模拟仿真了这些纳米颗粒的应变场分布, 并对结果进行了系统的分析. 研究发现:  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒在不同薄膜材料生长过程中均受到非均匀应变作用, 而且纳米颗粒的尺寸及应变场分布与纳米颗粒周围基质材料的杨氏模量和泊松比密切相关. 在不同基质材料中生长的纳米颗粒所受到的应变场分布也有所不同, 这为调控纳米颗粒的晶格结构和形貌以及物理性能提供了一个新思路.

**关键词:**  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒; 应变; 有限元算法; 薄膜

**中图分类号:** O 469 **文献标志码:** A **DOI:** 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2019.03.12

## 0 引言

纳米材料(nano material)是指 3 维空间中至少有 1 维处于纳米尺度范围或者由该尺度范围的物质为基本结构单元所构成的超精细颗粒材料的总称. 其中至少在 1 个维度上小于 100 nm 的颗粒又被称为纳米量级的微观颗粒, 简称纳米颗粒. 随着研究的不断深入, 研究人员发现当粒子粒径减小时, 表面原子数迅速增加, 比表面积也随之增大, 极大地影响了纳米粒子的性能<sup>[1-2]</sup>. 因此, 对于纳米颗粒的研究也成为了现代科学领域的研究热点, 同时也给新材料的研发带来了新的机遇和挑战<sup>[3]</sup>. 而在众多纳米颗粒中, 磁性纳米颗粒是一种拥有广泛应用前景的高级复合材料.

近年来, 科学界对于磁性纳米颗粒做了大量的研究, 与其有关的应用更是层出不穷, 主要集中在磁存储、磁性流体<sup>[4]</sup>、催化<sup>[5]</sup>、磁共振成像<sup>[6]</sup>、环境修复<sup>[7]</sup>以及生物医学等诸多科学领域. 其中四氧化三铁( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ )由于具有良好的磁性、电性、催化性、生物相容性和低毒性等特点而在材料化学领域中更是

引起了广泛的研究兴趣<sup>[8]</sup>. 对于  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  磁性纳米颗粒的研究也逐渐深入.

为了获得最佳的性能, 并合成高质量的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米晶体, 科研人员做了大量的研究工作. 然而,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米晶体在制备过程中的常见问题是团聚现象, 这主要是由  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒之间的磁性引力引起的, 而且  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子的团簇结构会使其不稳定. 此外,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子具有较强的各向异性偶极子吸引力和较高的表面能量(由于其纳米尺寸), 导致范德华引力和斥力之间的平衡失效, 从而使纳米颗粒出现不稳定的分散<sup>[9]</sup>. 最近, 人们发现镶嵌在介电材料中的纳米颗粒, 可以较好地解决纳米颗粒的团聚问题. 与此同时, 随着纳米颗粒的生长, 其周围的基质材料也会对纳米颗粒施加相应的应变场<sup>[10-12]</sup>, 而这种现象会使纳米颗粒的微观结构以及形貌发生变化, 从而使纳米粒子的某些性能(如光学性能、电学性能、磁学性能、催化性能等<sup>[13]</sup>)发生改变. 与此同时, 可以通过改变应变场的大小来改变纳米颗粒的形貌和微观结构, 这种调控手法也为改善器件性能提供了思路<sup>[13-14]</sup>.

本文利用脉冲激光沉积(PLD)和快速退火技术

收稿日期: 2019-01-22

基金项目: 国家自然科学基金(51761017, 51661012, 51461019)资助项目.

通信作者: 周 行(1988-), 男, 江西南昌人, 博士, 主要从事纳米材料研究. E-mail: 408958049@qq.com

制备埋嵌在不同基质中(非晶  $\text{Al}_2\text{O}_3$  薄膜、非晶  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  和非晶  $\text{SiO}_2$  薄膜)的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒,通过透射电子显微镜观察这些纳米颗粒,并用有限元算法系统(FEA, Finite Element Analysis)模拟  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒在这些非晶薄膜中生长过程受到的应变场分布. 由于  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒在不同类型薄膜材料中受到的应变场分布有较大的区别,纳米颗粒的尺寸也与周围材料的杨氏模量和泊松比密切相关,因此,本文系统地分析了  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的生长环境对其尺寸大小以及应变场分布的影响,并进一步地研究其内在关联,探索应变场与纳米颗粒之间的调控关系,实现对纳米颗粒的物理和化学性能进行有效地调控.

## 1 实验

在脉冲激光沉积的过程中,利用 KrF 脉冲激光器产生高能脉冲辐射在高真空的环境下冲击烧蚀固体靶. 其中脉冲激光器的输出能量为 300 mJ,准分子脉冲激光的波长为 248 nm,频率为 10 Hz,腔体的真空度约为  $1 \times 10^{-7}$  Torr. 脉冲激光与靶材相互作

用产生等离子羽状物,随后靶材表面已熔化的物质通过等离子羽状物进行转移,沉积在基片的表面并生成相应的薄膜. 实验所使用的靶材是由基底靶材和  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  方形靶材组合而成,分别为  $\text{Al}_2\text{O}_3$  和  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  组合靶材、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$  和  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  组合靶材、 $\text{SiO}_2$  和  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  组合靶材. 其中基底靶材是用高纯度(99.99%)的基底材料制成直径为 40 mm、厚度为 3 mm 的圆柱形薄片,并且在边缘处挖出一个宽度为 8 mm、长度为 15 mm 的长方形缺口. 而  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  方形靶材则是用高纯度(99.99%)的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  制成宽度为 8 mm、长度为 15 mm、厚度为 3 mm 的小块长方形薄片,与基底靶材的缺口完全吻合,保证组合后的靶材正好是一个完整的圆柱形薄片. 如图 1 所示. 在激光烧蚀固体靶的过程中,让组合靶材围绕靶材圆心位置的中心轴缓慢地进行旋转,使得激光能够交替烧蚀 2 种靶材与之相互作用,沉积得到相应的薄膜. 将沉积好的薄膜样品进行快速退火处理,在氮气氛围中将样品加热至 600  $^{\circ}\text{C}$  高温并保温 5 min,再让样品迅速冷却至常温,最终得到在 3 种不同基底环境下生长的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒.

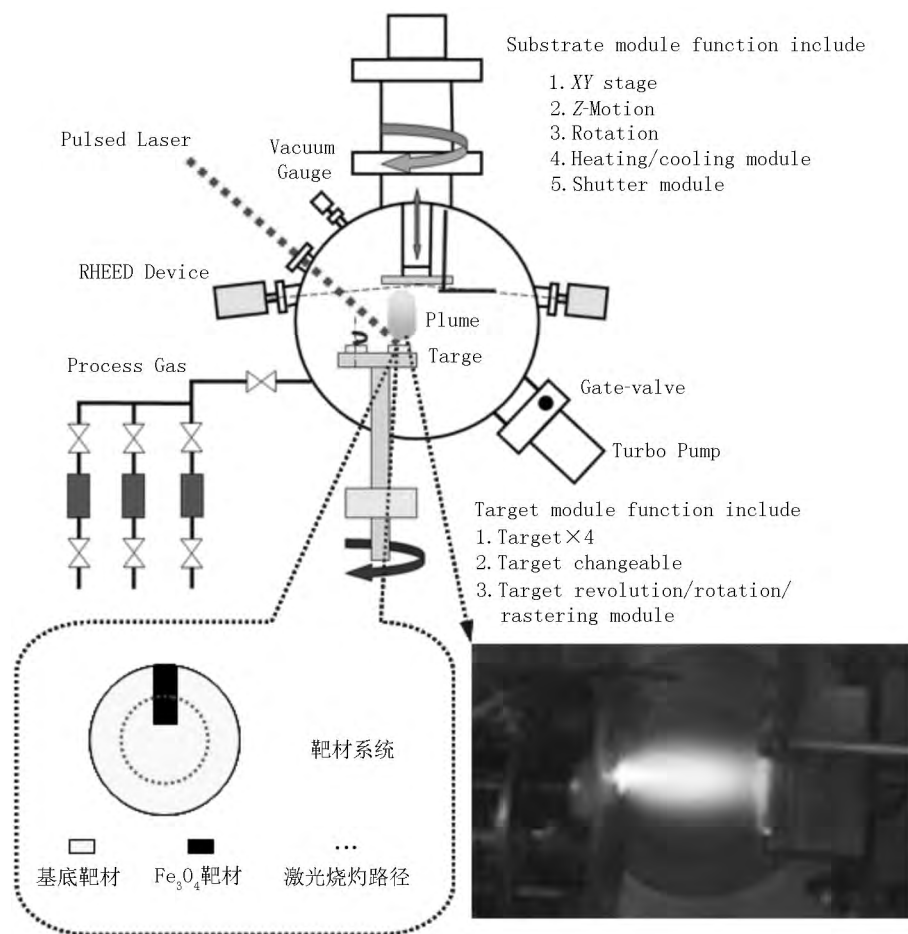
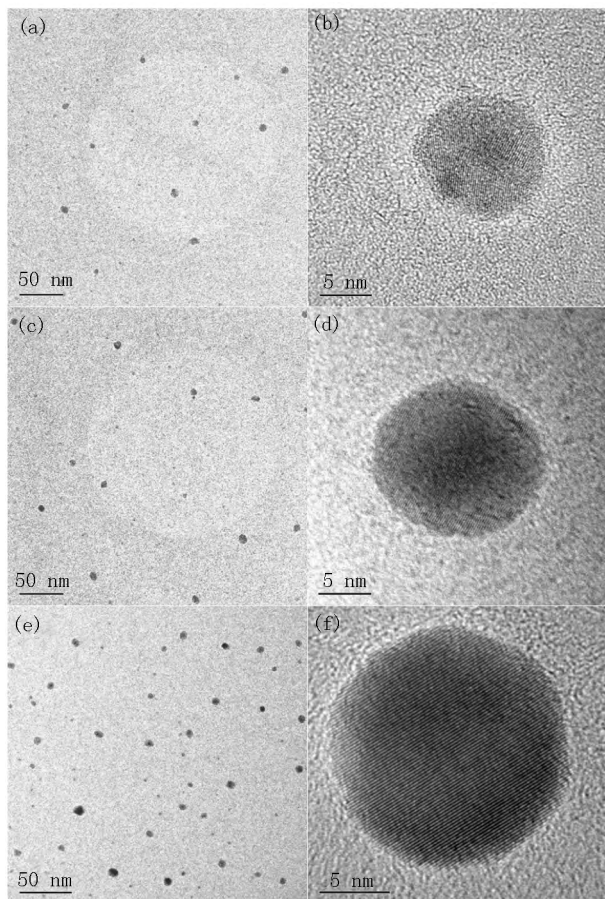


图 1 脉冲激光沉积系统示意图

使用 2010JEOL 高分辨透射电子显微镜(HR-TEM) 观察这些  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的晶格结构. 图 2 中的(a)和(b)、(c)和(d)、(e)和(f)分别为生长在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  基质、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$  基质和  $\text{SiO}_2$  基质中  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的低分辨以及高分辨率透射电子显微镜图像.



(a) 生长在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的透射电子显微镜图像; (b) 生长在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的高分辨透射电子显微镜图像; (c) 生长在  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的透射电子显微镜图像; (d) 生长在  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的高分辨透射电子显微镜图像; (e) 生长在  $\text{SiO}_2$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的透射电子显微镜图像; (f) 生长在  $\text{SiO}_2$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的高分辨透射电子显微镜图像.

图 2 生长在不同基质的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的 TEM 图

从图 2 可以看出,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$  和  $\text{SiO}_2$  都是以原子态的形式分布在薄膜当中,而  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  呈球状纳米颗粒均匀分布在非晶态基质中. 通过高分辨率透射电子显微镜图像可以看出,这些  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒都有着清晰的晶格结构. 对比在 3 种不同基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒,在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒尺寸最小,其直径大小约为 13 nm; 在  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒尺寸居中,其直径大小约为 15 nm; 在  $\text{SiO}_2$  基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒尺寸最

大,其直径大小约为 17 nm. 与此同时,从图 2(b) 中还可以观察到  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的晶格发生了畸变,这是因为埋嵌型纳米颗粒在生长的过程中,受到了周围基质材料的应变挤压而导致的. 由此可见,在相同的实验条件下,采用不同的基底材料会导致纳米颗粒的尺寸发生变化,还会对纳米颗粒的晶格造成影响. 因此,这种埋嵌型的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒不仅会受到周围基质材料对其所施加的应力作用,而且影响其应力大小的因素也和周围基质材料有着密切的关系.

## 2 模拟仿真

一般情况下,埋嵌在基质材料中纳米颗粒的生成及其生长机理如下: 在高温环境中,若外界环境提供了足够多的表面能,则纳米颗粒形成新核的速度会逐步增加,同时其数量也会急剧地增长,从而产生大量的新晶核. 不仅如此,随着温度的升高,晶核周围的原子会在表面扩散的作用下继续向晶核附着,最终生长成一个更大的纳米颗粒. 对于埋嵌在基质材料中的纳米颗粒,在其生长过程中总是不可避免地受到应变场的影响.

为了进一步研究  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒受到的应变场和周围基质材料之间的关联,本文采用计算机模拟仿真的方式对生长在基质材料中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒所受到的应力进行模拟分析. 就目前而言,广泛使用的模拟仿真方法至少有 3 种,如数值有限元法、原子模拟方法和解析连续力学方法等. 然而,在这些方法中,原子模拟方法的计算量大,计算过程过于繁复,比较适用于小体系系统的模拟; 而解析连续力学方法又只能模拟一些比较简单的物理模型,无法对纳米颗粒的应变场分布做出精细模拟. 有限元分析是用较简单的问题代替复杂问题后再求解; 它将求解域看成是由许多被称为有限元的小的互连子域组成,对每一单元假定一个合适的(较简单的)近似解,然后推导求解在这个域中总的满足条件(如结构的平衡条件),从而得到问题的解. 因为实际问题被较简单的问题所代替,该解并不是准确解,而是近似解. 由于大多数实际问题难以得到准确解,而有限元不仅计算精度高,而且能适应各种复杂形状,因此,利用有限元分析对纳米颗粒的应变场分布进行模拟仿真成为了最佳选择. 随着研究的深入,利用有限元来模拟纳米颗粒的应变分布已成为近些年来的关注焦点<sup>[15-16]</sup>. 与此同时,利用连续弹性有限元法和原子应变计算方法对纳米材料进行模拟仿真,这

也逐渐成为一种研究趋势<sup>[17-18]</sup>.

通过有限元分析(FEA),模拟生长在 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{SiO}_2$ 这3种不同基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒所受到的应力,研究 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒周围的应变场分布情况,并分析纳米颗粒与其生长环境之间的内在联系.在 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的生长过程中,受到周围非晶基质对其施加的应力.因此,应变模型可以根据以下设想进行建模:将一个球形且各向同性的线弹性纳米颗粒放置在一个无限大且各向同性的线弹性薄膜中(模拟纳米颗粒埋嵌在非晶态薄膜中的状态).由于周围薄膜材料中的原子不能迅速地适应纳米颗粒在生长过程中的体积变化,因而导致了纳米颗粒受到了周围薄膜材料对其施加的压缩应变<sup>[19]</sup>.利用该模型可以分别模拟埋嵌在不同基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒所受到的应变场强度分布<sup>[20-22]</sup>.在使用有限元算法(ANSYS软件)进行模拟仿真的过程中,将球形 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的位置设定在中心区域,将其周围非晶薄膜的边界设定成无限大, $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{SiO}_2$ 的杨氏模量分别为172.0、360.0、200.0、55.6 GPa,泊松比分别为0.34、0.24、0.30、0.16<sup>[3 23-24]</sup>.

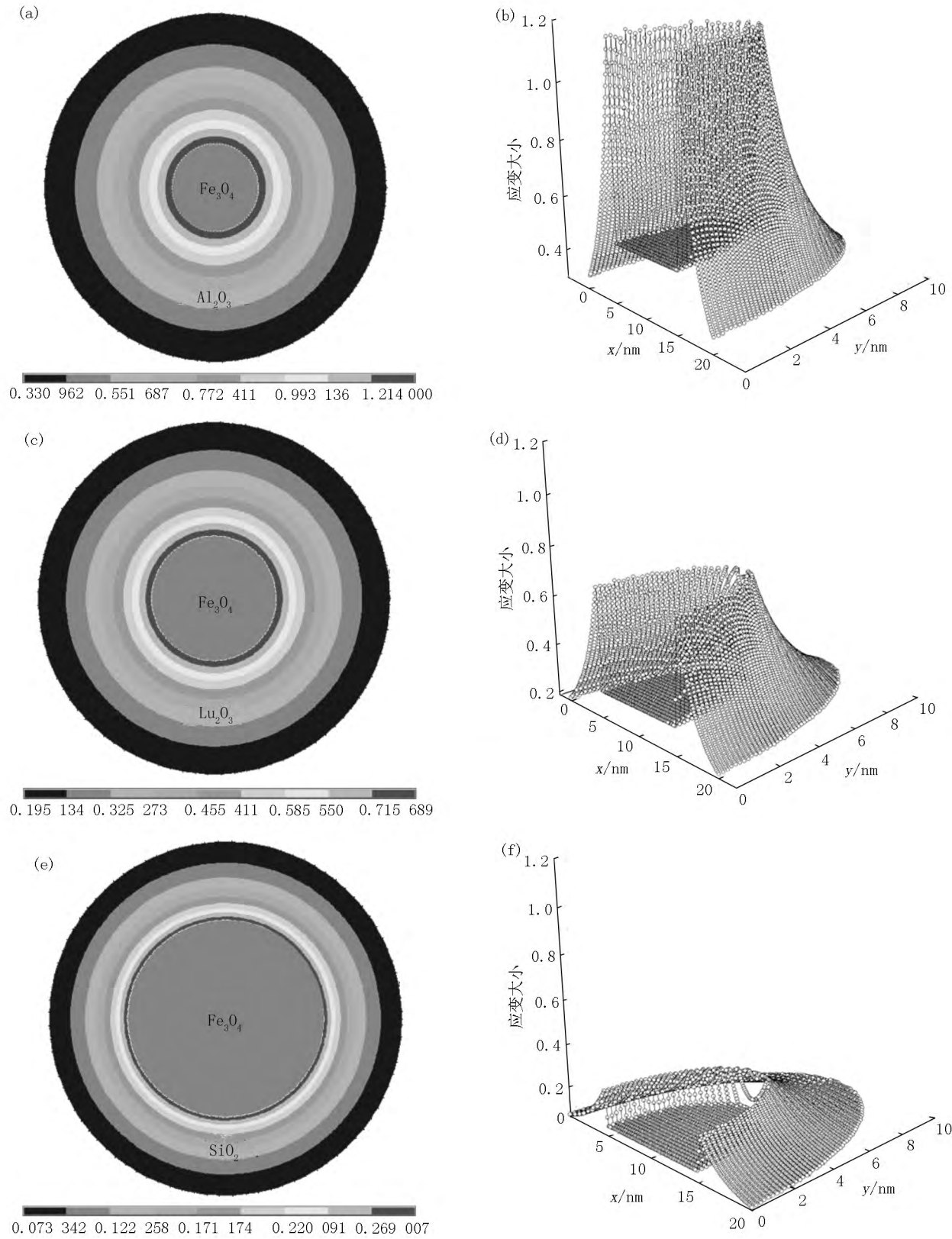
### 3 讨论分析

图3(a)、图3(c)和图3(e)分别是球形 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒埋嵌在非晶态的 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{SiO}_2$ 薄膜中的 $x$ - $y$ 剖面的应变场分布图.通过图中的标注可以非常清晰地看到,在3种非晶薄膜材料中, $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒均受到了非均匀偏应变作用.图3(b)、图3(d)和图3(f)分别是球形 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒埋嵌在非晶态的 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{SiO}_2$ 薄膜中的 $x$ - $y$ 剖面的应变强度图.可以清晰地看到, $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒均受到周围基质对其施加的压缩应变,而且 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒表面受到的应变均大于 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒内部受到的应变.对比3种基质中的纳米颗粒所受到的应力大小,埋嵌在 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒所受到的应力最大,埋嵌在 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒所受到的应力次之,埋嵌在 $\text{SiO}_2$ 基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒所受到的应力最小.同时还可以看出,埋嵌在 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒尺寸最小,埋嵌在 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒尺寸居中,埋嵌在 $\text{SiO}_2$ 基质中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒尺寸最大.这与实验结果非常吻合.该现象出现的原因是周围基质材料的杨氏模量以及泊松比不同所导致的.这是因为在温度升高时,由于热胀冷缩的缘故使得纳米颗粒会发生膨胀从而向周围逐步生长;在

生长过程中,由于周围基质材料中的原子不能迅速地适应纳米颗粒的体积变化,因此纳米颗粒会受到周围薄膜材料的挤压应变作用.其中杨氏模量越大的基质材料对纳米颗粒施加的压缩应变越强,纳米颗粒的生长也会受到严重影响,最终使得纳米颗粒的尺寸相对较小;而杨氏模量越小的基质材料对纳米颗粒施加的压缩应变越弱,对于纳米颗粒的约束也相对较弱,因此纳米颗粒的尺寸也会更大.纳米颗粒的产生机制通常可以用以下解释来说明:当温度升高时,原子成核的几率会增加,进一步使得纳米颗粒的密集度也会逐步变大.当拥有了足够的表面能时,产生新晶核的速度会增大,纳米颗粒的数量也会快速上涨.不仅如此,随着温度的升高,晶核周围的原子会在表面扩散的作用下继续向晶核附着,最终生长成一个更大的纳米颗粒<sup>[25]</sup>.由于在热膨胀过程中,使得纳米颗粒的晶格不匹配.因此,对于埋嵌在基质材料中的纳米颗粒来说,在其生长过程中总是不可避免地受到周围基质材料对其施加的压缩应变作用<sup>[26-27]</sup>.这说明 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒受到周围基质材料对其施加的压缩应变是因为 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的体积膨胀所导致的.详细的压缩应力计算方法如下:纳米颗粒的应变状态可以看作是将体积 $V_p$ 的非应变粒子插入体积 $V_c$ 的非应变矩阵腔中的结果.因为 $V_p$ 与 $V_c$ 之间的不匹配从而产生了应力 $P$ .在球形颗粒和空腔形状的情况下,取值为 $P = (V_p - V_c) / (S_p V_p + S_c V_c)$ ,且 $S_c = 1/K_p$ , $S_p = 3/(4G)$ <sup>[28]</sup>,其中 $K_p$ 和 $G$ 分别为颗粒的压缩模量以及基体的剪切模量.粒子的应变状态是由体积的逐渐收缩引起的.当应力从0增加到 $P$ 时, $V_p$ 减小到受力粒子的实际体积 $V$ .

从应力函数 $P$ 可以完全解释 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒在 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基体中比在 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{SiO}_2$ 基体中承受更大的压缩应力.设相同的 $V_p$ ( $V_c$ )在 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基体中,同样的纳米颗粒(压缩模量相同)嵌入 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 和 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基体,由于基体剪切模量的不同,会产生不同的压缩应力.随着基体剪切模量的增加,应力 $P$ 单调增加.由于 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 的剪切模量(在600℃时约为152.0 GPa)远大于 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 的剪切模量(在600℃时约为65.5 GPa)和 $\text{SiO}_2$ 的剪切模量(在600℃时约为32.6 GPa),因此, $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒在 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基体中的压缩应力要大于在 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 基体和 $\text{SiO}_2$ 基体中的压缩应力.这是造成生长在 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 基体中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的键长要比生长在 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 基体和 $\text{SiO}_2$ 基体中的 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的键长更短以及晶格更容易发生畸变的重要原因.因此,基体环境的影响对埋嵌型 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒的键长缩短起着至关重要的作用.与此同时,有关 $\text{Fe}_3\text{O}_4$ 纳米颗粒在不

同基质材料中的压缩应变研究也对  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的热动态性能有着十分重要的意义。



(a)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  基质中的截面应变分布; (b)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子局限在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  基质中的  $x$ - $y$  平面应变曲线; (c)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子在  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  基质中的截面应变分布; (d)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子局限在  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  基质中的  $x$ - $y$  平面应变曲线; (e)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子在  $\text{SiO}_2$  基质中的截面应变分布; (f)  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子局限在  $\text{SiO}_2$  基质中的  $x$ - $y$  平面应变曲线。

图 3 生长在不同基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子的应变分布模拟示意图

## 4 结论

通过脉冲激光沉积的方式和 3 种不同的组合靶材制备薄膜,再利用快速退火技术使纳米颗粒生长,得到了生长在  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Lu}_2\text{O}_3$ 、 $\text{SiO}_2$  这 3 种不同基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒.然后用透射电子显微镜观察这些  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的晶格结构,并发现其尺寸有着明显的变化.为了分析  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的尺寸与所受应力之间的关系,进一步研究应变场和周围基质材料之间的内在关联,采用了有限元算法软件 (ANSYS) 对这些生长在不同基质中的  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒应变场分布分别进行模拟仿真,结果发现  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒在生长过程中受到基质材料对其施加的非均匀应变作用,而且周围基质材料的杨氏模量越大,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒所受到应变场的影响也越大,生长过程中所受到的限制作用也越强,这极大地约束了  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的尺寸大小.由此可见,对  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米颗粒的应变场分布进行完善地研究和分析,可以实现对纳米颗粒的物理和化学性能进行有效地调控.

## 5 参考文献

- [1] Fujii M, Inoue Y, Hayashi S, et al. Hopping conduction in  $\text{SiO}_2$  films containing C, Si, and Ge clusters [J]. *Applied Physics Letters*, 1996, 68(26): 3749-3751.
- [2] Franzo G, Irrera A, Moreira E C, et al. Electroluminescence of silicon nanocrystals in MOS structures [J]. *Applied Physics A Mater Sci Process*, 2002, 74(1): 1-5.
- [3] Yuan Cailei, Cai Hui, Lee P S, et al. Tuning photoluminescence of Ge/ $\text{GeO}_2$  core/shell nanoparticles by strain [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2009, 113(46): 19863-19866.
- [4] Chikazumi S, Taketomi S, Ukita M, et al. Physics of magnetic fluids [J]. *J Magn Magn Mater*, 1987, 65(2/3): 245-251.
- [5] Lu Anhui, Schmidt W, Matoussevitch N, et al. Nanoengineering of a magnetically separable hydrogenation catalyst [J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2004, 35(43): 4303-4306.
- [6] Li Zhen, Li Wei, Gao Mingyuan, et al. One-pot reaction to synthesize biocompatible magnetite nanoparticles [J]. *Adv Mater*, 2005, 17(8): 1001-1005.
- [7] Lin Pochiao, Yu Chingching, Wu Huanting, et al. A chemically functionalized magnetic nanoplatform for rapid and specific biomolecular recognition and separation [J]. *Bio-macromolecules*, 2013, 14(1): 160-168.
- [8] Nor Aida Zubir, Christelle Yacou, Julius Motuzas, et al. Structural and functional investigation of graphene oxide- $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanocomposites for the heterogeneous Fenton-like reaction [EB/OL]. [2018-10-13]. <https://www.nature.com/articles/srep04594>.
- [9] Gye Seok An, Jin Soon Han, Jae Rok Shin, et al. In situ synthesis of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ @ $\text{SiO}_2$  core-shell nanoparticles via surface treatment [J]. *Ceramics International*, 2018, 44(1): 12233-12237.
- [10] Choi W K, Ng V, Ng S P, et al. Raman characterization of germanium nanocrystals in amorphous silicon oxide films synthesized by rapid thermal annealing [J]. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(3): 1398-1403.
- [11] Wellner A, Paillard V, Bonafos C, et al. Stress measurements of germanium nanocrystals embedded in silicon oxide [J]. *Journal of Applied Physics*, 2003, 94(9): 5639-5642.
- [12] Chew H G, Zheng Feihu, Choi W K, et al. Influence of reductant and germanium concentration on the growth and stress development of germanium nanocrystals in silicon oxide matrix [J]. *Nanotechnology*, 2007, 18(6): 065302.
- [13] Ren Wei, Yang Yurong, Diéguez O, et al. Ferroelectric domains in multiferroic  $\text{BiFeO}_3$  films under epitaxial strains [J]. *Physical Review Letters*, 2013, 110(18): 187601.
- [14] Jin Zuanming, Xu Yue, Zhang Zhengbing, et al. Strain modulated transient photostriction in La and Nb codoped multiferroic  $\text{BiFeO}_3$  thin films [J]. *Applied Physics Letters*, 2012, 101(24): 242902.
- [15] Liu G R, Dai K Y, Nguyen-Thoi T. A smoothed finite element method for mechanics problems [J]. *Computational Mechanics*, 2007, 39(6): 859-877.
- [16] Valery I L, Alexander V I, Ameeth K P. Phase-field modeling of fracture in liquid [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 110(3): 033531.
- [17] Jiang Zixiong, Zhang Qiulong, Yuan Cailei. Simulation of strain distribution of GaAs nanoparticles with growth in different environment [J]. *Acta Photonica Sinica*, 2013, 42(2): 186-190.
- [18] Barrett D, Madsen S, Lassern B, et al. Comparison of wurtzite atomistic and piezoelectric continuum strain models: Implications for the electronic band structure [J]. *Superlattices Microstruct*, 2010, 47(1): 134-138.
- [19] Zhang Qiulong, Jiang Zixiong, Yuan Cailei, et al. Strain distribution of Ni nanoparticles embedded in  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ultra-thin film [J]. *Scientia Sinica Physica*, 2012, 42(7): 711-715.
- [20] Benabbas T, Androussi Y, Lefebvre A. A finite-element study of strain fields in vertically aligned InAs islands in GaAs [J]. *Journal of Applied Physics*, 1999, 86(4):

- 1945-1950.
- [21] Pei Qingxiang ,Lu Chen ,Wang Y Y. Effect of elastic anisotropy on the elastic fields and vertical alignment of quantum dots [J]. Journal of Applied Physics ,2003 ,93 ( 3 ) : 1487-1492.
- [22] Shin H ,Lee W ,Yoo Y H. Comparison of strain fields in truncated and un-truncated quantum dots in stacked InAs/GaAs nanostructures with varying stacking periods [J]. Journal of Physics Condensed Matter ,2003 ,15 ( 22 ) : 3689.
- [23] Yuan Cailei ,Jiang Zixiong ,Ye Shuangli. Strain-induced matrix-dependent deformation of GaAs nanoparticles [J]. Nanoscale 2014 6( 2 ) : 1119-1123.
- [24] Yuan Cailei ,Ye Shuangli ,Xu Bo ,et al. Strain induced tetragonal  $\text{SrTiO}_3$  nanoparticles at room temperature [J]. Applied Physics Letters 2012 ,101( 7 ) : 071909.
- [25] Yuan Cailei ,Lee Pooi See ,Ye Shuangli. Formation ,photoluminescence and charge storage characteristics of Au nanocrystals embedded in amorphous  $\text{Al}_2\text{O}_3$  matrix [J]. Europhysics Letters 2007 80( 6 ) : 67003.
- [26] Hofmeister H ,Dubiel M ,Goj H ,et al. Microstructural investigation of colloidal silver embedded in glass [J]. Journal of Microscopy ,1995 ,177( 3 ) : 331-336.
- [27] Voronkov V V ,Falster R. Strain-induced transformation of amorphous spherical precipitates into platelets: application to oxide particles in silicon [J]. Journal of Applied Physics 2001 89( 11 ) : 5965-5971.
- [28] Wu Runsheng ,Luo Xingfang ,Yuan Cailei ,et al. Dielectric matrix imposed stress/strain effect on photoluminescence of Ge nanocrystals [J]. Solid State Communications , 2009 ,149( 15/16 ) : 598-601.

## The Effect of Substrate Material on the Strain Field of Embedded $\text{Fe}_3\text{O}_4$ Nanoparticles

AN Zhiwei ZHOU Hang\*

( College of Physics and Communication Electronics ,Jiangxi Normal University ,Nanchang Jiangxi 330022 ,China)

**Abstract:** Embedded nanoparticles will be subjected to the stress imposed by surrounding matrix materials during their growth. The stress of nanoparticles is not only affect the lattice structure and physical properties of nanoparticles but also closely related to the size of nanoparticles. So it is fundamentally nessary to study the strain distribution of nanoparticles embedded in different thin films.  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles embedded in the amorphous  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ,  $\text{Lu}_2\text{O}_3$  and  $\text{SiO}_2$  matrix are fabricated by using pulsed laser deposition and rapid thermal annealing ,respectively. The results from transmission electron microscope also reveal that the complete isolation of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles embedded in amorphous these matrixs. In order to study the relationship between the size of nanoparticles and the size of stress ,the strain field distribution of these nanoparticles is simulated by finite element method ,and the results are analyzed systematically. Finite element calculations clearly indicate that the  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticle incurs a net deviatoric strain. The size and strain field distribution of nanoparticles are closely related to Young's modulus and poisson's ratio of the materials around nanoparticles. The strain field distribution of nanoparticles grown in different matrix materials is also different ,which provides a new idea for regulating the lattice structure ,morphology and physical properties of nanoparticles.

**Key words:**  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticle; strain; finite element calculations; thin films

( 责任编辑: 冉小晓)