

PbTe 열전재료에 형성된 HgTe 나노개제물의 석출거동: 초기 격자 불일치의 형성, 이론적 계산 및 실험적 증명

김경호¹, 권태형¹, 박수한¹, 안형근², 이만종^{1,a}

¹ 건국대학교 신기술융합학과

² 건국대학교 전기공학과

Precipitation Behaviors of HgTe Nanoinclusions Formed in Thermoelectric PbTe: Initial Induced Lattice Mismatch, Theoretical Calculation and Experimental Verification

Kyungho Kim¹, Tae Hyung Kwon¹, Su Han Park¹, Hyungkeun Ahn², and Man-Jong Lee^{1,a}

¹ Department of Advanced Technology Fusion, Konkuk University, Seoul 143-701

² Department of Electrical Engineering, Konkuk University, Seoul 143-701

(Received June 3, 2011; Revised June 13, 2011; Accepted June 13, 2011)

Abstract: A highly strained nanostructure comprising crystallographically aligned HgTe nanoinclusions and a surrounding PbTe matrix has been synthesized using a precipitation process of supersaturated HgTe-PbTe alloys. From the early precipitation stage, HgTe nanoinclusions take disk shape, which is transformed from initial HgTe nuclei, although there is no lattice constant difference of the two end components at standard state. As a primary reason for the morphological transformation of the initial spherical HgTe nuclei to HgTe nanodisks, the induced lattice mismatch is suggested. On the condition that the HgTe nanodisks maintain perfect coherent nature with PbTe matrix, the stress-free lattice constant of constrained HgTe nanodisks has been calculated based on the defined concept of the strain-induced tetragonality, the linear elasticity and the actual measurement in HRTEM images.

Keywords: HgTe nano-disk, PbTe-HgTe, Precipitation, Lattice mismatch, Strain-induced tetragonality

1. 서론

지난 수십 년 동안 상 분리 합금에서의 석출거동 및 석출물 형태 변화 연구가 다양하게 진행되어 왔고 [1-5], 컴퓨터 모델링을 통한 분석적 연구와 결합되어 많은 기술적 진전이 이루어졌다 [6-10].

한편, 금속의 강화를 위해 개발/적용된 G-P (Guinier-preston) zone [11,12] 개념을 이용한 나노

구조의 제작은 나노크기를 갖는 제 2상이 3차원으로 배열된 구조의 효과적인 간편 제작기법이라는 관점으로 매우 중요하며, 실제로 이상적인 나노벌크 구조의 간편 제작에 특히 유용하다. 본 연구자는 이와 같은 석출을 이용한 나노구조 제조 개념이 화합물 반도체 시스템에서도 적용될 수 있음을 보고하였다 [13,14]. 특히, PbTe 기지상 내부에서 HgTe의 석출거동은 PbTe 기지상과 결정학적으로 $\{100\}_{\text{HgTe}} \parallel \{100\}_{\text{PbTe}}$ 및 $\langle 100 \rangle_{\text{HgTe}} \parallel \langle 100 \rangle_{\text{PbTe}}$ 의 형태로 이루어지며, 매우 빠

a. Corresponding author; leemtx@konkuk.ac.kr

른 확산 속도를 나타내는 금속계 합금과 상이하게 화합물 반도체 결정 격자의 매우 제한된 확산거동으로 인해 형성된 나노 개체물이 고온에서 장시간 안정하게 존재하므로 화합물 반도체 석출형 나노구조가 열전재료에 응용성이 큼을 제시하였다 [14].

이와 같은 저차원 나노구조의 개념은 특히 열전재료 분야에서 강조되고 있다 [15]. 즉, 열전재료 내부에 무수히 많은 반도체 나노점들을 형성시킴으로써 나노 개체물에 의한 포논 산란을 기대할 수 있으며, 전기전도도의 감소를 최소한으로 하는 동시에 큰 열전도도의 감소를 얻을 수 있어 열전재료의 성능지수가 비약적으로 증가되는 특성을 얻을 수 있기 때문이다. 현재, 이와 관련하여 효과적인 나노구조를 제어하기 위한 많은 연구들이 보고되고 있다 [16-18].

본 연구에서는 PbTe 내부에 형성되는 HgTe 나노 석출상의 크기 및 형태변화에 대한 고찰한다. 특히, PbTe-HgTe 시스템의 석출 거동을 자세히 고찰하기 위해서 고해상도 전자현미경(HRTEM)을 이용한 분석을 주로 수행하였으며, HgTe 나노 석출상의 격자 이미지의 관찰, 원자 면간 거리 평가, 격자 면 변위 특성의 분석을 통해 석출되는 나노상의 세부 결정학적 특성을 평가하였다.

2. 실험 방법

본 실험의 자세한 실험과정은 참고문헌 [13,14]에 제시하였다. PbTe(99.999%)와 HgTe(99.999%)를 석영관 내부에 진공 밀봉하고 1,000℃에서 5시간 가열/용융시켜 HgTe의 함량이 2.5 mol%인 잉곳(PbTe-2.5HgTe라 함)을 제작하였다. 제작된 PbTe-2.5HgTe는 공융온도인 600℃에서 48시간 이상 열처리하여 단일상을 형성시키고, 공기 중 급랭을 통해 과냉각 PbTe-2.5HgTe 고용체를 제작하였으며, 300℃에서 10분에서 100시간 동안 열처리하여 HgTe의 핵형성/성장을 유도하였다.

일반 TEM을 이용하여 석출 거동을 분석하였으며 자세한 격자이미지의 관찰을 위해 고해상도 TEM (Philips EM430 SuperTwin HRTEM, 250 kV)을 사용하여 나노개체물의 크기, 형태 및 격자면의 분석을 수행하였다. 비교적 소량의 HgTe가 첨가되었고, HgTe와 PbTe의 격자 유사성에 기인한 회절 피크의 중첩으로 XRD (x-ray diffraction)분석은 불가능하였고, 주로 콘트라스트 차이에 의한 격자 구조 분석에 중점을 두었다.

3. 결과 및 고찰

일반적으로 안정한 상태에서 HgTe($a=6.456 \text{ \AA}$)와 PbTe($a=6.462 \text{ \AA}$)는 FCC 기반 결정구조이며 상온에서 두 상의 격자상수의 차이가 거의 없다. PbTe의 경우 강한 이온결합 특성으로 Rock salt(RS) 구조를 갖으며, HgTe의 경우 공유결합성이 강하며 zinc-blende(ZB) 구조를 나타낸다. 이와 같은 결합의 차이로 두 화합물은 유사 이성분계 상평형 특성을 갖는다.

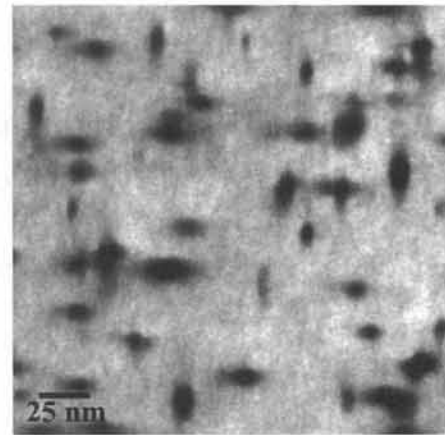


Fig. 1. Conventional TEM micrographs showing typical images taken at the [200] from the PbTe-2.5 HgTe alloy aged at 300℃ for 10 min.

본 연구에서는 G-P 1 zone과 유사한 나노구조를 형성시키기 위해 3단계 열처리 공정, 즉 공융온도에서 고용화 열처리, 상온으로의 급랭, 그리고, 300-400℃에서의 열처리를 통해 벌크형 나노구조 샘플을 제작하였다.

그림 1은 출발조성인 PbTe-2.5HgTe를 300℃에서 10분 동안 열처리 하였을 경우 TEM 이미지를 나타내고 있으며 그림 2는 동일 조성의 시편을 300℃에서 5시간 열처리 하였을 경우 TEM 이미지를 나타내고 있다. 특히, 본 나노구조는 100시간 이상 열처리 이후에도 나노구조의 변화가 거의 없는 구조를 유지하였다. 본 석출과정의 HgTe와 PbTe는 구조인자(structure factor)가 거의 유사하므로 그림에서 보이는 것은 정확한 석출물의 크기가 아닌 콘트라스트 차이 이미지이다. 그림과 같이 초기 석출단계에서는 원형의 개체물이 존재하는 것이 관찰되었으며(그림 1), 열처리 시간이 증가할 경우 초기 구형 석출물이 디스크형으로

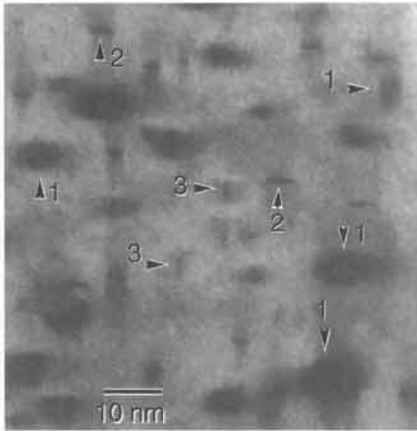


Fig. 2. Conventional TEM micrographs showing typical images taken at the [200] from the PbTe-2.5 HgTe alloy aged at 300°C for 50 h.

전이되는 것을 알 수 있다(그림 2). 이와 같은 현상은 두 물질 사이의 격자상수가 매우 큰 경우 발생하는 전형적인 석출 현상이며, 본 실험 결과에 따라 석출/형성되는 HgTe의 결정구조가 안정한 ZB형 구조가 아닌 다른 형태의 결정구조라 가정을 하였다.

그림 3(a)는 그림 2 TEM 이미지의 일정 영역을 HRTEM으로 관찰한 격자 이미지로 그림에서 보듯이 PbTe의 기지상에 HgTe 나노디스크가 전자빔의 방향과 평행하게 배열된 것을 보여주고 있다. 또한 표시된 회절 패턴에서 각 주요 회절점을 연결하는 회미한 선(streak)들이 관찰되며 이것은 디스크형의 개재물이 존재한다는 것을 의미한다. 그림 3(b)는 그림 3(a)의 IFFT (inverse fourier transform) 이미지이며, 그림 3(c)는 그림 3(b)의 박스 부분에서 원자의 평균 면간 거리 및 표준편차의 계산 결과를 표시한다.

그림 3(a)에서 몇 가지 특이한 결과를 관찰할 수 있다. 나노디스크는 완벽한 정합구조를 보이고 있으며 구조의 변화 즉 원형의 초기 개재물에서 디스크로 변하는 과정에서 디스크 상의 일부 격자가 많은 변형을 나타내고 있다. 또한, 디스크의 턱 부분의 콘트라스트가 사라진 것으로 판단할 때 이 방향의 초기 변형에너지는 효과적으로 감소한 것을 알 수 있다. 그림 3(a)에 표시된 바와 같이 디스크 주변의 결정격자가 형태 전이와 관련된 응력 관계에 의해 입방정과 다소 차이가 나는 형태를 나타내고 있음을 알 수 있다. 즉, 디스크 두께 방향의 격자 면간 거리가 형태

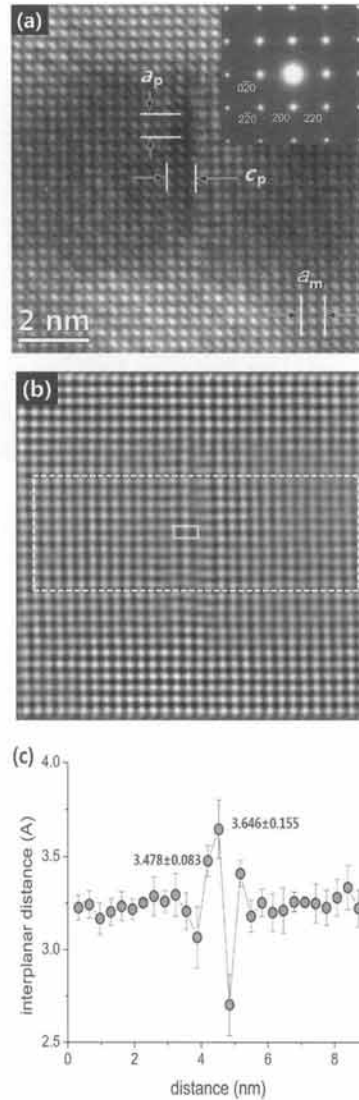


Fig. 3. (a) HRTEM image of selected HgTe nanodisk, (b) IFFT image of (a), (c) Atomic displacement in (b).

변이와 관련하여 전단 변형 및 격자 피팅에 의한 팽창 효과로 일반적인 면간 거리인 a_p 와 비교하여 다소 팽창된 면간거리 c_p 를 확인할 수 있다. 이 효과는 금속계 합금의 시효과정에서 디스크형의 정합 석출물이 형성될 때 관찰되며 본 연구에서는 이 현상을 ‘변형 유도 정방화 (strain induced tetragonality)’라 정의한다. c_p 값을 효과적으로 측정하기 위해서 그림 3(c)와 같이 IFFT된 이미지에서 PbTe의 (200) 면간 거리인 3.231 Å을 기준으로 실제 측정된 (200) 평균 면간 거리와 표준편차를 표시하였다.

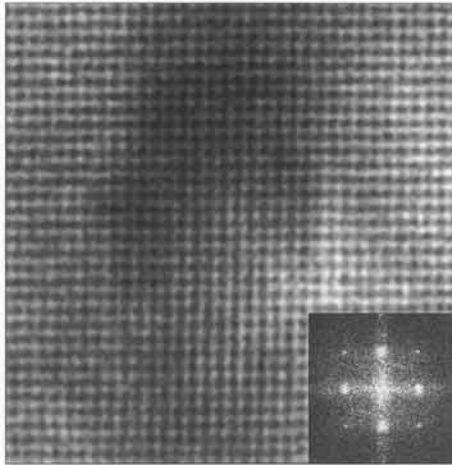


Fig. 4. HRTEM image of selected HgTe nanodisk aligned perpendicular to electron beam direction.

Table 1. Elastic constants of compounds from Ref. [19], (at room temperature and in units of 10^{10}J/m^3).

Constant\Mater.	PbTe	HgTe
C_{11}	10.80	5.48
C_{12}	0.76	3.81
C_{44}	1.34	2.04
ξ^*	5.49	-1.18

* The elastic anisotropy parameter (ξ) was calculated using $\xi = (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})/C_{44}$.

즉, 그림 3(c)는 디스크 주변에서 면간거리의 변화를 보여주고 있으며 가장 최대가 되는 c_p 값은 $7.123 \pm 0.119 \text{ \AA}$ 로 측정되었다. 즉 정합 디스크가 형성되면서 디스크는 전단힘(shear force)에 의해 내부 팽창이 일어나서 일부 격자에서 정방정화가 발생하고 있는데 이것은 서로 격자상수가 다른 입방형 석출물이 입방형의 기지상에 석출할 경우 나타나는 현상으로 금속계 석출물에서 보고된 바 있다 [6].

전자빔과 수직 방향으로 배열된 HgTe 나노디스크는 일반적으로 두께가 매우 작으므로 관찰이 매우 어려우나 그림 4는 그와 같은 HgTe 나노디스크의 HRTEM 이미지이다. 그림 3(a)의 디스크와는 달리 디스크의 표면에서는 원자면의 상대적 변형이 크지 않음을 알 수 있으며 변형은 오직 두께방향(그림 4의 두께 z 방향)으로 인가되고 있으며 본 보고에서는 다루지 않지만 이와 같은 비등방성 나노스트레인의 체계적인 분석이 필요할 것이다.

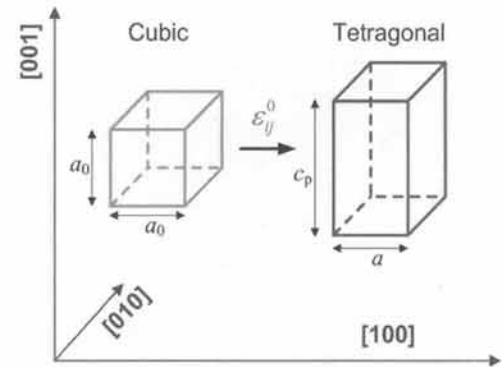


Fig. 5. A schematic model of the crystal lattice rearrangement showing the cubic-to-tetragonal phase transformation.

일반적으로 구형에서 디스크로의 형태 변화는 전통적인 Eshelby 이론으로 잘 설명된다 [20]. 표면에너지를 최소가 되는 초기 구형 입자가 성장할 경우, 두 상의 격자 불일치가 크다면 입자 크기가 증가할수록 격자 불일치에 기인한 큰 변형에너지가 형성된다. 이와 같은 큰 에너지를 최소화시키기 위해서 탄성학적으로 무른(soft) 방향 즉 ξ 가 음인 방향(표 1)으로 석출물이 재배열되어 플레이트형의 형태로 변할 경우 시스템의 에너지를 최소화 할 수 있다. 그러나 본 연구의 경우 두 상의 격자상수 차이가 정상상태에서 거의 없으므로 이와 같은 디스크의 형성이 불가능할 것으로 판단되나, 실험결과 초기 구형의 HgTe 결정이 안정한 ZB를 갖지 않고 모상인 PbTe와 에피형(RS형)으로 석출된다고 가정하면 격자불일치가 유도되며 실험으로 얻어진 디스크형 변이를 설명할 수 있다. 즉 석출된 HgTe가 모상과 큰 격자상수 불일치가 존재하므로 매우 큰 탄성에너지를 최소화 하기위해 HgTe가 $\xi < 0$ 인 100방향으로 배열되면 최소의 변형에너지를 얻을 수 있다. 이 현상을 자세히 고찰하기 위해 다음과 같이 탄성석출이론을 적용하여 초기 HgTe의 격자불일치에 대한 고찰을 수행하였다.

석출되는 상이 기지상과 큰 격자불일치를 갖는 경우, 정합 석출된 상의 결정격자 형태는 무 응력(stress-free) 상태의 격자와 다르며 그 차이는 격자불일치에 따른 탄성에너지의 차이에 기인된다. 만일 격자 불일치가 크고 계면에너지가 작을 경우, 정합 석출물은 최소의 변형에너지를 갖기 위해 판상의 형태로 존재해야 한다 [20]. 일반적인 판상형 정합 석출물의 경우 형태 변이가 발생하기 이전의 형태로 돌아가기 위한 균일한 탄성 변

형이 형성된다. 이 경우, 석출물의 형태변화 이전 및 이후의 결정 habit 면이 같으므로 무 응력 상전이 변형 (stress-free transformation strain) ϵ_0^0 은 개재물 내의 탄성변형과 같다. 즉, 개재물의 총 변형과 석출 habit면은 각각 invariant면 변형과 invariant면으로 정의할 수 있으며, invariant면 변형은 invariant면과 수직인 벡터 \mathbf{n}_0 와 전단(shear) 벡터 $\mathbf{S}(\mathbf{n}_0)$ 로 표시된다. 이때, 판상형 정합 석출물 내부 균일 변형은 식(1)과 같다 [20].

$$u_j^0 = \mathbf{S}_i(\mathbf{n}_0)n_j^0 \tag{1}$$

그림 5에서 표시한 바와 같이, 입방격자에서 정방격자로 결정격자가 재배열될 경우 ϵ_0^0 는 다음과 같은 텐서로 표시되며,

$$\epsilon_{ij}^0 = \begin{pmatrix} \epsilon_{11}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11}^0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33}^0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

이것은 입방형 모 결정의 직교 좌표계의 [100], [010], [001]을 표시한다. 여기서, $\epsilon_{33}^0 = (c_p - a_0)/a_0$, $\epsilon_{11}^0 = (c_p - a_0)/a_0$ 로 정의되며, c_p 와 a_0 (a_p)는 정방형격자 형태(즉, 속박된)를 갖는 HgTe 나노디스크의 결정 격자상수이며 ϵ_0^0 는 무 응력 입방형 HgTe 석출상의 격자상수이다. 또한, 식 2에 의해 응력텐서 σ^0 는 다음의 형태로 표시된다.

$$\sigma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11}^0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33}^0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

여기서, 각 텐서 성분은

$$\sigma_{11}^0 = (c_{11} + c_{12})\epsilon_{11}^0 + c_{12}\epsilon_{33}^0 \tag{4}$$

그리고

$$\sigma_{33}^0 = 2c_{11}\epsilon_{11}^0 + c_{11}\epsilon_{33}^0 \tag{5}$$

로 정의된다.

이 때, 위 식들에 의해 전단 벡터 $\mathbf{S}(\mathbf{n}_0)$ 는 간단히

$$\mathbf{S}_i(\mathbf{n}_0) = \Omega_{i3}(\mathbf{n}_0)\sigma_{33}^0 \tag{6}$$

로 표시되며 $\mathbf{n}_0 = (0,0,1)$ 이다. 또한 텐서 $\Omega_{ij}(\mathbf{n}_0)$ 의 모든 off-diagonal 성분은 $\mathbf{n}_0 = (0,0,1)$ 에서 모두 상쇄되므로 식 6은 다음 식으로 표현될 수 있고,

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}_0) = ((0,0,\Omega_{33}(\mathbf{n}_0))\sigma_{33}^0)_{\mathbf{n}_0=(0,0,1)} \tag{7}$$

모든 상쇄 조건을 고려할 경우, habit 면의 전단 벡터 $\mathbf{S}(\mathbf{n}_0)$ 는 다음 식과 같이 간단히 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\mathbf{n}_0) &= \left(0, 0, \frac{\sigma_{33}^0}{c_{11}} \right) \\ &= \left(0, 0, \epsilon_{33}^0 + 2\frac{c_{12}}{c_{11}}\epsilon_{11}^0 \right). \end{aligned} \tag{8}$$

또한, HgTe은 매우 소프트한 특성을 갖는 음의 anisotropy factor ξ (즉, $\mathbf{n}_0 = (0,0,1)$)를 가지며, $\epsilon_{11}^0 = \epsilon_{22}^0 = \epsilon_{33}^0 = \epsilon_0^0$ 이 성립되므로 식 8은 더욱 간단히 다음과 같이 표시된다.

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}_0) = \left(0, 0, \epsilon_0^0 \left(1 + 2\frac{c_{12}}{c_{11}} \right) \right). \tag{9}$$

상이 재배열될 경우, 모상의 결정격자 변환 \mathbf{r} 은 habit 면에서 결정 격자의 변환 없이 \mathbf{r}' 으로 전이되며 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{S}(\mathbf{n}_0)(\mathbf{n}_0\mathbf{r}) \tag{10}$$

따라서, 식 10과 모 입방 상 단위격자의 기본 위치 벡터인 $\mathbf{r}_1 = (a_0, 0, 0)$, $\mathbf{r}_2 = (0, a_0, 0)$, $\mathbf{r}_3 = (0, 0, a_0)$ 를 고려하면 형성되는 정방형 단위격자의 새로운 기본 벡터는

$$\begin{aligned} \mathbf{r}'_1 &= \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r}'_2 = \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}'_3 &= \left[0, 0, a_0 + a_0\epsilon_0^0 \left(1 + 2\frac{c_{12}}{c_{11}} \right) \right] \end{aligned} \tag{11}$$

로 정의된다. 여기서, \mathbf{r}'_1 , \mathbf{r}'_2 및 \mathbf{r}'_3 는 위와 같은 변이에 의해 형성되는 정방형 격자의 격자상수이다. 따라서, 정합 판상형 입방상의 개재물은 다소 정방정 형태의 격자를 가지며, 격자상수 사이의 관계는 다음과 같이 정의할 수 있다 [21].

$$\begin{aligned} a_p &= a_0 \\ c_p &= a_0 \left(1 + \epsilon_0^0 + 2\epsilon_0^0 \frac{c_{12}}{c_{11}} \right) \end{aligned} \tag{12}$$

$$\frac{c_p}{a_p} = 1 + \epsilon_0^0 + 2\epsilon_0^0 \frac{c_{12}}{c_{11}} \tag{13}$$

식 13에서 c_p/a_p 의 값을 본 연구에서 ‘변형 유도 정방화 (strain induced tetragonality)’라고 정의하였다. 한편 이 값은 HRTEM으로 실험적 직접 측정이 가능하므로 초기의 무 응력 변형(stress-free strain) 즉 유도된 격자불일치 ϵ_0 를 HgTe 상의 탄성상수(표 1)로부터 계산할 수 있음을 알 수 있다.

그림 3(a)-3(c)의 HRTEM 이미지로부터 속박 디스크의 두께 방향과 수직인 방향으로의 격자상수(a_p)는

PbTe 기지상의 격자상수(a_m)와 같은 6.462 Å로 측정되었으며, 두계방향과 평행인 격자상수는 7.123±0.119 Å으로 측정되었다. 따라서, 디스크의 중심에서 측정된 최대 c_p/a_p 값(1.1023±0.0184)과 표 1에 제시된 탄상계수로 식 13을 사용하여 초기 격자 불일치, 즉, 무응력 변형은 0.0586±0.0106으로 계산되었으며 이로 부터 초기 HgTe 석출물의 격자상수가 6.0831±0.0682 Å로 계산되었다. 즉 안정한 ZB 구조인 상의 격자 상수와 비교하여 약 5.86%의 격자불일치가 존재함을 이론적 및 실험적으로 제시할 수 있었다. 한편, 보고된 벌크형 RS 구조 HgTe의 격자상수는 5.83 Å이며 본 계산에서는 다소 상이한 값을 나타내는데 이것은 본 계산에 사용한 디스크형 HgTe의 크기가 매우 작은 이유인 것으로 어느 정도의 오차가 포함됨을 알 수 있다. 그러나, 본 이론적 유도/계산 및 실험적 HRTEM 관찰을 통해 초기 HgTe 핵은 격자상수가 6.0149-6.1513 Å인 입방형의 구조로 석출됨을 제시할 수 있으며 또한 디스크 형성에 충분한 격자 불일치가 초기에 형성된다는 본 연구의 가정을 증명하고 있다.

4. 결론

본 연구는 G-P zone과 유사한 방법으로 열전 재료인 PbTe의 내부에 HgTe 나노 개체물을 간편한 열처리 공정만으로 효과적으로 형성시켰다. 초기 석출 단계에서 관찰되는 구형의 입자는 성장하면서 디스크형의 HgTe 석출물로 형태 변이됨이 관찰되었고, 이 현상을 설명하기 위해 초기에 형성되는 HgTe가 안정한 ZB형 HgTe 상이 아닌 기지와 에피형 관계를 갖는 RS형 HgTe이라 가정하였으며 형성된 정합 나노디스크의 변형 유도 정방화와 탄성응력해석을 통해 이론적인 관계식을 제시하였고 HRTEM을 이용한 격자변위의 실제 측정을 통해 초기 격자불일치가 약 5.86%로 존재함을 증명하였다. 이와 같은 간편 형성 HgTe-PbTe계 나노구조는 내부에 존재하는 HgTe 나노디스크는 물론 내부에 형성된 응력장에 의해 열전소재로 응용될 수 있을 것으로 판단한다.

감사의 글

이 논문은 2008년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업

(No. NRF-2008-331-D00271)입니다. 또한 이 논문은 국토해양부의 U-City 석·박사과정 지원 사업으로 지원되었습니다.

REFERENCES

- [1] A. G. Khachatryan and G. A. Shatalov, *Sov. Phys. JETP*, 29, 557 (1969).
- [2] L. J. Walpole, *Proc. Roy. Soc.*, A300, 270 (1967).
- [3] R. J. Asaro and D. M. Barnett, *J. Mech. Phys. Solids*, 23, 77 (1975).
- [4] W. C. Johnson, M. B. Berkenpas, and D. B. Laughlin, *Acta Metall.*, 36, 3149 (1988).
- [5] J. K. Lee, D. M. Barnett, and H. I. Aaronson, *Metall. Trans.*, A8, 963 (1977).
- [6] A. G. Khachatryan, S. Semenovskaya and T. Tsakalakos, *Phys. Rev.*, B52, 15909 (1995)
- [7] F. Soisson, A. Barbu and G. Martin, *Acta Mater.*, 44, 3789 (1996).
- [8] Y. Wang, D. Banerjee, C. C. Su, and A. G. Khachatryan, *Acta Mater.*, 46, 2983 (1998).
- [9] G. Rubin and A. G. Khachatryan, *Acta Mater.*, 47, 1995 (1999).
- [10] R. Muller and D. Gross, *Comp. Mater. Sci.*, 16, 53 (1999).
- [11] M. Karlik and B. Jouffrey, *Acta Mater.*, 45, 3251 (1997).
- [12] L. Löchte, A. Gitt, G. Gottstein, and I. Hurtado, *Acta Mater.*, 48, 2969 (2000).
- [13] M. J. Lee and C. U. Kim, *Nano. Letters.*, 3, 1607 (2003).
- [14] M. J. Lee, *Metal Mater. Int.*, 9, 83 (2003).
- [15] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, and B. O'Quinn, *Nature*, 413, 597 (2001).
- [16] B. C. Sales, *Mater. Res. Soc. Bull.* 23, 15 (1998).
- [17] B. Wölfing, C. Kloc, J. Teubner, and E. Bucher, *Phys. Rev. Lett.*, 86, 4350 (2001).
- [18] A. I. Boukai, Y. Bunimovich, J. T. Kheli, J. K. Yu, W. A. Goddard III, and J. R. Heath, *Nature*, 451, 168 (2007).
- [19] G. Simons, H. Wang, *Handbook on single crystal elastic constants and calculated aggregate properties* (MIT Press, 1971).
- [20] T. Mura, *Micromechanics of Defects in Solids*, (Martinus Nijhoff, Hague, Netherland, 1987).
- [21] A. G. Khachatryan, *Theory of structural transformations in solids* (John Wiley & Sons, New York, 1983).