

13. Kokina, T. A., Karavetskii, G. A., Leonov, L. V., et al. (1975). Issledovanie protsessa vzaimodeistviia stali s grafitom pri kontaktno-reaktivnoi paike [Investigation of the interaction process of steel with graphite at contact-reactive brazing]. *Konstruktivnye materialy na osnove uhleroda – Carbon-based structural materials*, 10, 176–182 [in Russian].

УДК 661.868.1:004.94:62-987

DOI: 10.33839/2708-731X-24-1-325-334

О.П. Людвіченко, асп.; **О.М. Анісін**, м.н.с.;
О.О. Лещук, І. А. Петруша, доктора технічних наук

*Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України, вул. Автозаводська, 2
04074, м. Київ e-mail: ludvial@ukr.net*

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВОГО СТАНУ АПАРАТА ВИСОКОГО ТИСКУ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ РОЗЧИННОСТІ НІТРИДУ ГАЛІЮ В ЗАЛІЗІ

З використанням комп'ютерного моделювання досліджено тепловий стан комірки апарата високого тиску, що використовують для визначення розчинності нітриду галію у залізі. Результати розрахунків представлені стаціонарними температурними полями в різних елементах апарата. Отримано, що при температурі в контрольній точці комірки в 1800 °С максимальний її перепад в об'ємі досліджуваних зразків нітриду галію і заліза становить 25 °С. Змодельована конфігурація комірки і визначені для неї умови нагрівання є прийнятними для експериментальних досліджень розчинності GaN в контакті із Fe в умовах високих тисків і температур.

Ключові слова: нітрид галію, апарат високого тиску, комірка високого тиску, метод скінченних елементів.

Нітрид галію – це широкосмуговий напівпровідник, що в теперішній час має зростаюче технологічне застосування. Так, в 2014 р. за винахід ефективних блакитних світлодіодів на основі GaN, що привели до появи яскравих та енергозберігаючих білих джерел світла, присуджено Нобелівську премію з фізики. Виготовлення таких світлодіодів потребує наявності монокристалічних підкладок з GaN для їх епітаксiального нарощування.

Створення ефективного способу кристалізації GaN є актуальним питанням, оскільки його фізичні властивості значною мірою визначаються виникненням різних дефектів. Серед методів вирощування GaN відома гiбридна парофазна епітаксія, що дозволяє кристалізувати GaN при атмосферному тиску та температурі 1000 °С зі швидкістю біля 100 мкм/год. Недосконалістю цього методу є висока дефектність вирощених кристалів, що виникає внаслідок залишкового напружено-деформованого стану як в кристалах, так і в підкладках, на яких вони зростають.

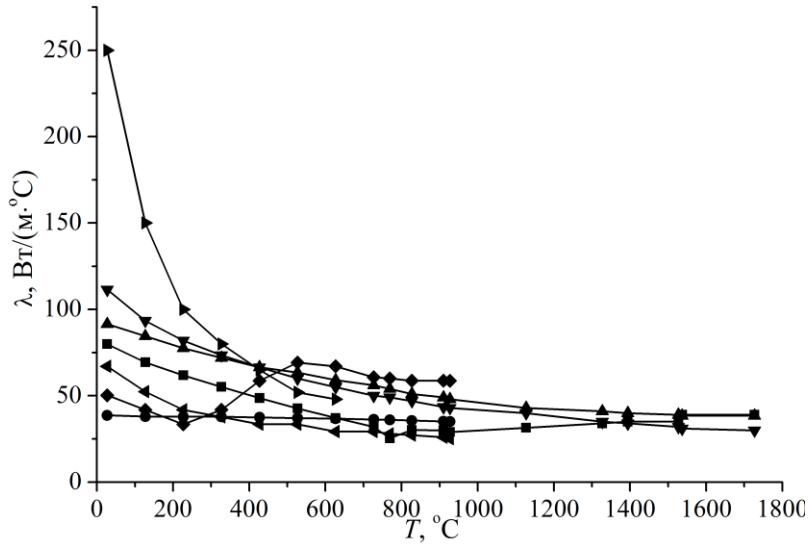
Іншим методом вирощування кристалів GaN є амонотермія з використанням надкритичного аміаку (NH₃) як розчинника для GaN при тиску 0,2–0,3 ГПа та температурі 600–800 °С. Серйозним недоліком цього методу є надзвичайно низька швидкість росту (1–2 мкм/год) та відносно низька чистота вирощених кристалів.

Перші високоякісні кристали GaN, які можуть бути використані для епітаксiального нарощування та виготовлення процесорних пристроїв, були отримані при температурі 1500 °С і тиску азоту 1 ГПа в газостатичній установці в Інституті фізики високих тисків Польської академії наук.

Новим підходом в отриманні нітриду галію є його кристалізація із багатокомпонентної розчин-розплавної системи Fe–Ga–N при високих тисках (~ 6 ГПа) і температурах (~ 1800 °С). Основною проблемою при розробці комірки до апарату високого тиску (АВТ) є

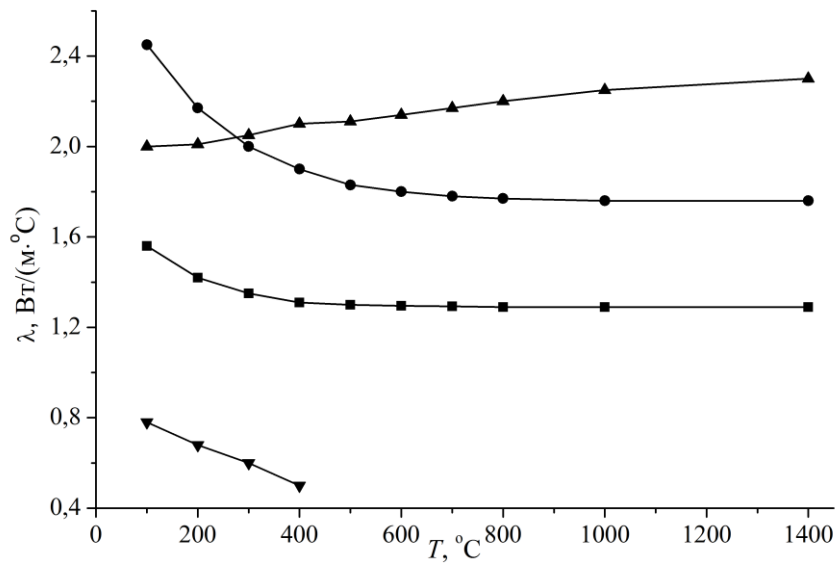
конструювання схеми її резистивного нагріву, що забезпечує необхідний розподіл температури в КВТ.

На рис. 1–4 наведено відповідні температурні залежності коефіцієнтів теплопровідності і електроопору, що були отримані апроксимацією табличних даних із доступних джерел інформації [1–15].



■ - армко-залізо, ● - сталь 30ХГСА, ▲ - графіт МГ-1, ▼ - графіт ГМЗ, ◆ - твердий сплав ВК6, ◀ - твердий сплав ВК15, ▶ - нітрид галію

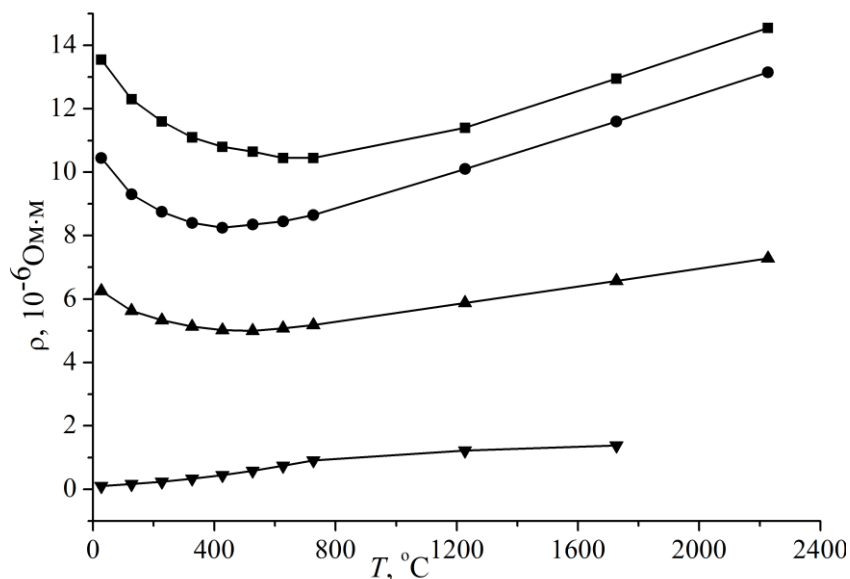
а



■ - літографський камінь пресований, ● - літографський камінь точений, ▲ - діоксид цирконію, ▼ - хлорид цезію

б

Рис. 1. Теплопровідність матеріалів складових елементів АВТ



■ - графіт МГ-1, ● - графіт ГМЗ, ▲ - графіт ГСМ-1 (за тиску 6 ГПа), ▼ – армко-залізо, сталь 30ХГСА, твердий сплав ВК6, твердий сплав ВК15

Рис. 2. Електроопір матеріалів складових елементів АВТ

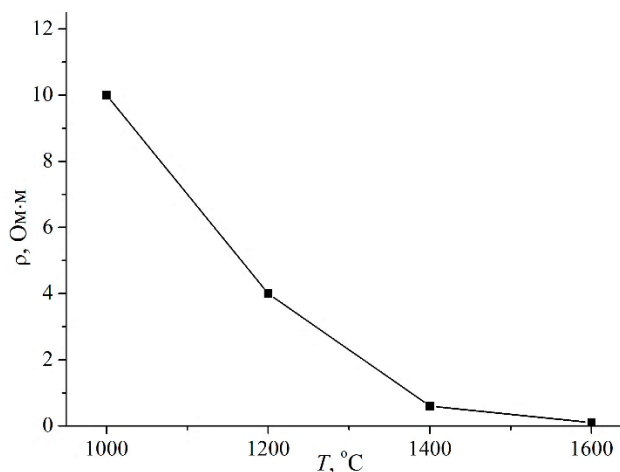


Рис. 3. Електроопір діоксиду цирконію

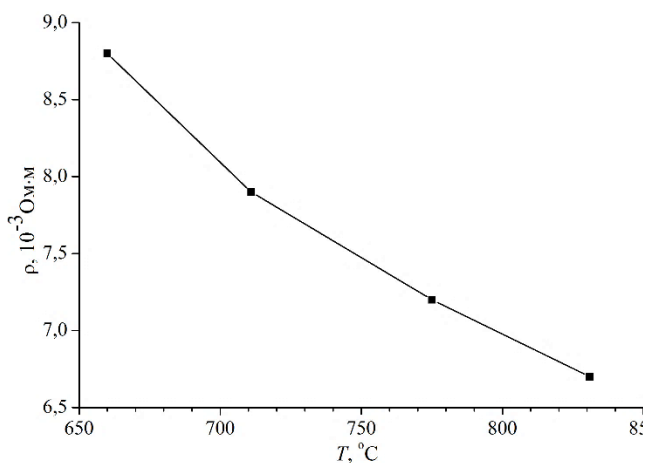


Рис. 4. Електроопір хлориду цезію

Аналізуючи представлені графіки зміни характеристик з температурою, можна констатувати наступні закономірності. Теплопровідність армко-заліза у порівнянні з теплопровідністю легованої сталі (рис. 1, а) значно більша за рахунок відсутності вуглецю і легуючих. З підвищенням температури теплопровідність залізовмісних матеріалів зменшується внаслідок значного впливу структурних перетворень і плавлення [13].

Значення коефіцієнтів теплопровідності графіту, твердого сплаву ВК15, нітриду галію (рис. 1, а), хлориду цезію, літографського каменю (рис. 1, б) з підвищенням температури зменшуються, натомість діоксиду цирконію – збільшуються (рис. 1, б). Теплопровідність твердого сплаву ВК6 (рис. 1, а) має коливальну залежність від температури.

Електроопір залізовмісних матеріалів, твердих сплавів (рис. 2) з підвищенням температури збільшується, а ізоляційних матеріалів – діоксиду цирконію (рис 3) і хлориду цезію (рис. 4) – навпаки, зменшується. В [14] відмічають, що електроопір діоксиду цирконію при температурі 25 °С становить 10^5 – 10^7 Ом·м, а при температурі 2000 °С він зменшується до 10^2 Ом·м, що відповідає електропровідному стану матеріалу.

Електроопір графіту (рис. 2) зменшується до температури ~ 500 °С, потім – монотонно збільшується. Електроопір нітриду галію – $4 \cdot 10^6$ Ом·м [15]. Електроопір літографського каменю приймали рівним $1 \cdot 10^5$ Ом·м.

Електро- і теплофізичні властивості композиційних матеріалів елементів КВТ (графіт + оксид цирконія, хлорид цезія + оксид цирконія) визначали за теорією стохастичних неоднорідних матеріалів [16]. Такий підхід є достатньо виправданим з огляду на попередній досвід з моделювання температурних полів в АВТ, що використовують для технологій отримання надтвердих матеріалів і виробів на їх основі [17–21]. Згідно з цією моделлю, коефіцієнт теплопровідності N -компонентної суміші визначається наступним чином:

$$\lambda^* = \left[\sum_{i=1}^N x_i^V (\lambda_i + 2\langle\lambda\rangle)^{-1} \right]^{-1} - 2\langle\lambda\rangle,$$

де x_i^V – об'ємна концентрація i -ї фази, λ_i – коефіцієнт теплопровідності i -ї фази, $\langle\lambda\rangle = \sum_{i=1}^N x_i^V \lambda_i$

Ефективне значення питомого електроопору композита підраховується як обернене значенню його питомої електропровідності $\rho^* = 1/\gamma^*$, де

$$\gamma^* = \left[\sum_{i=1}^N x_i^V (\gamma_i + 2\langle\gamma\rangle)^{-1} \right]^{-1} - 2\langle\gamma\rangle.$$

Таким чином, проведений аналіз літературних даних з електро- і теплофізичних властивостей матеріалів, що використовують в АВТ, засвідчив їх суттєву температурну залежність, що необхідно враховувати при моделюванні теплового стану комірки для дослідження розчинності нітриду галію.

Експериментальне визначення необхідних форм, складів та розмірів нагрівачів і елементів теплоізоляції комірки високого тиску (КВТ) є надзвичайно трудомістким та довготривалим. В цьому випадку доречно застосовувати методи комп'ютерного моделювання.

Використовуючи сучасні обчислювальні методики, можна достатньо детально аналізувати процес резистивного нагріву КВТ для створення в ній ефективних умов кристалізації GaN з урахуванням термобаричних залежностей провідних властивостей матеріалів, конфігурацій і складу провідних і ізоляційних елементів, схем охолодження елементів АВТ, фазового складу ростового об'єму.

Відомі безліч робіт, присвячених розрахунку полів електричного потенціалу і температури в АВТ різних типів [17–21]. Виділимо, зокрема, роботу [22], в якій розраховані теплові режими в АВТ типу «белт» з метою оцінки градієнтів температури в ростовому об'ємі для реалізації конвективного масопереносу в процесі вирощування кристалів нітриду галію.

Нагрів АВТ проводять прямим пропусканням електричного струму, а заданий температурний режим в комірці досягається балансом потужності джерел джоулевого тепла і тепловідводом в системі охолодження апарата. Тепловий стан комірки в такому випадку моделюється розв'язанням зв'язаної задачі електро- і теплопровідності, яка для стаціонарного випадку в припущенні про відсутність електричних зарядів описується системою нелінійних рівнянь:

$$\operatorname{div}[\gamma(T)\operatorname{grad}\phi] = 0, \quad (1)$$

$$\operatorname{div}[\lambda(T)\operatorname{grad}T] + \gamma(T)|\operatorname{grad}\phi|^2 = 0, \quad (2)$$

де γ – коефіцієнт електропровідності, T – температура, ϕ – потенціал електричного поля, λ – коефіцієнт теплопровідності, $\gamma(T)|\operatorname{grad}\phi|^2$ – питома потужність джерел джоулевого тепла. Рівняння (1, 2) доповнюються граничними умовами першого та другого роду (на поверхнях

S_ϕ , S_T та S_i , S_h відповідно), а також умовою конвективного теплообміну на поверхні S_α ($S_\phi + S_i = S_T + S_h + S_\alpha$):

$$\phi = \phi_{S_\phi}, \quad (3)$$

$$\mathbf{n} \cdot \gamma(T) \text{grad} \phi = -i_{S_i}, \quad (4)$$

$$T = T_{S_T}, \quad (5)$$

$$\mathbf{n} \cdot \lambda(T) \text{grad} T = -h_{S_h}, \quad (6)$$

$$\mathbf{n} \cdot \lambda(T) \text{grad} T = -\alpha_{S_\alpha} (T - \theta), \quad (7)$$

де i_{S_i} и h_{S_h} – щільність струму і тепловий потік по нормалі \mathbf{n} до поверхонь, α_{S_α} – коефіцієнт тепловіддачі, θ – температура зовнішнього середовища.

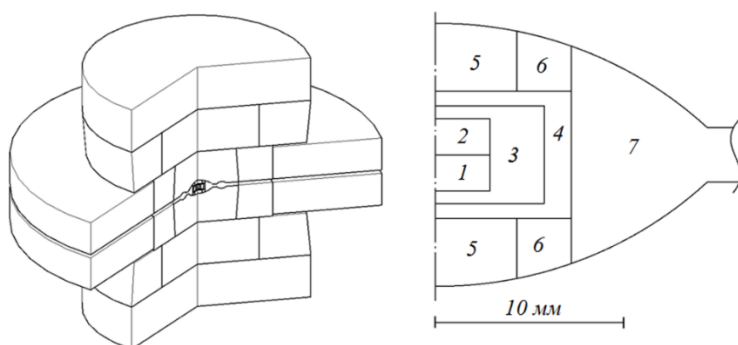


Рис. 5. Розрахункова схема АВТ типу «тороїд» (а) і комірки для проведення експериментів з визначення розчинності нітриду талію у розплаві заліза (б): 1 – залізо, 2 – GaN, 3 – $CzCl + ZrO_2$, 4 – графіт МГ-1, 5 – графіт+ ZrO_2 , 6 – пірофіліт, 7 – літографський камінь

апарата. Сітка елементів і граничні умови представлені на рис. 6. Відзначимо, що на поверхнях 23, 45, 67 задаються умови конвективного теплообміну при охолодженні повітрям, а на поверхнях 34, 56 – при охолодженні водою.

Результати розрахунків стаціонарних температурних полів в різних зонах АВТ представлені на рис. 7–9. Метою розрахунку було отримання в центрі комірки температури 1800 °С із одночасним забезпеченням якомога меншого перепаду температури в зоні досліджуваних зразків GaN і Fe (відповідно елементи 2 і 1 на рис. 5). В першому варіанті розрахунків, коли падіння напруги між підкладними плитами АВТ становило 3,65 В, максимальний перепад температури в зразках становив 30 °С (див. рис. 7, в). У другому варіанті (при напрузі 3,46 В) максимальний

Систему зв'язаних нелінійних рівнянь (1)–(7) вирішували методом скінченних елементів при покроковій корекції властивостей матеріалів і досягненні заданого критерію збіжності. В якості програмного забезпечення використовували власну розробку [20] та пакет ANSYS, що забезпечувало достовірність розрахунків.

Розрахункова схема АВТ показана на рис. 5. З огляду на осьову симетрію розглядали 1/2 частину

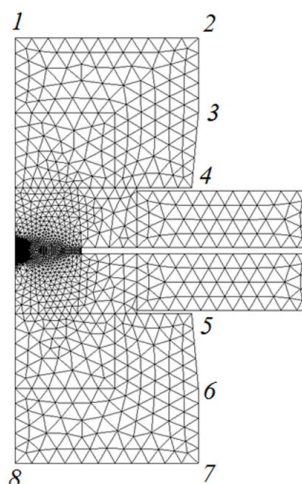
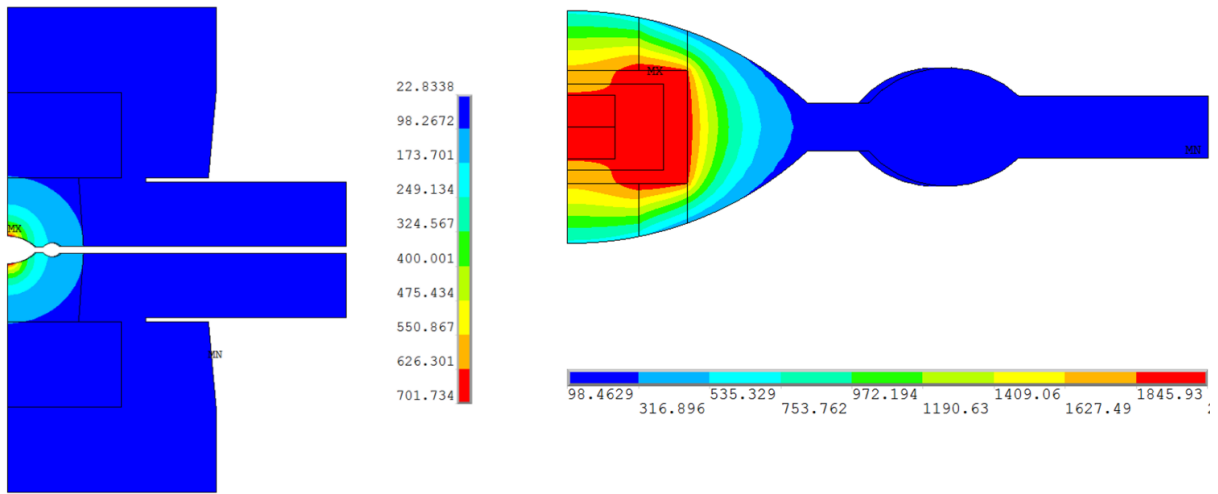


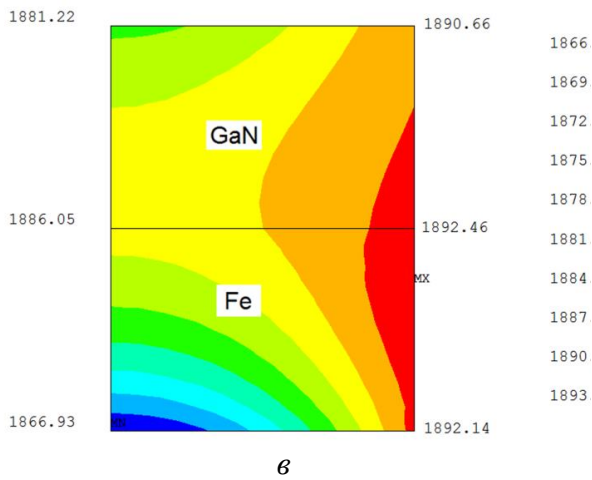
Рис. 6. Скінченноелементна сітка і граничні умови для задачі електро- і теплопровідності: $\phi_{12} = (3,65; 3,46; 3,40)$ В, $\phi_{78} = 0$ В, $T_{12} = T_{78} = 40$ °С, $\alpha_{23} = \alpha_{45} = \alpha_{67} = 50$ Вт/(м²·°С), $\alpha_{34} = \alpha_{56} = 7500$ Вт/(м²·°С), $\theta = 20$ °С

перепад температури становив 28 °С (див. рис. 8). І тільки при напрузі 3,4 В ми отримали як бажане значення температури (1800 °С) в центрі комірки, так і мінімальне значення максимального перепаду температури в об'ємі зразків GaN і Fe (25 °С) (див. рис. 9, б).



а

б



в

Рис. 7. Температурні поля в АВТ (а), комірни (б) і зоні досліджуваних зразків комірки (в) за падіння напруги в 3,65 В

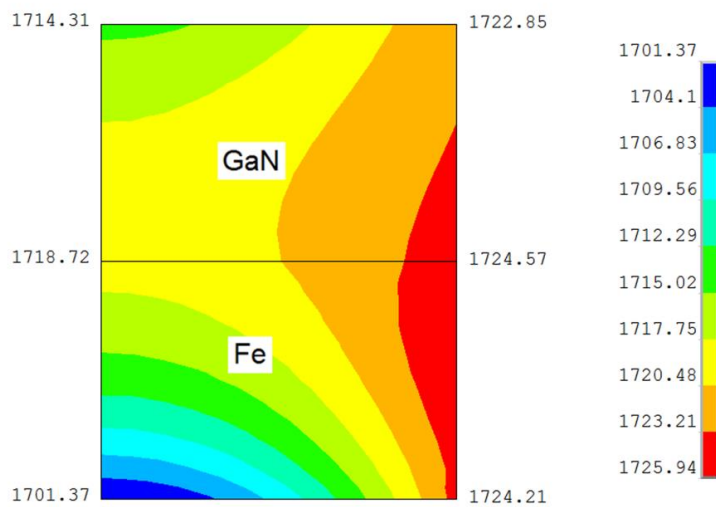


Рис. 8. Температурне поле в зоні досліджуваних зразків комірки за падіння напруги в 3,46 В

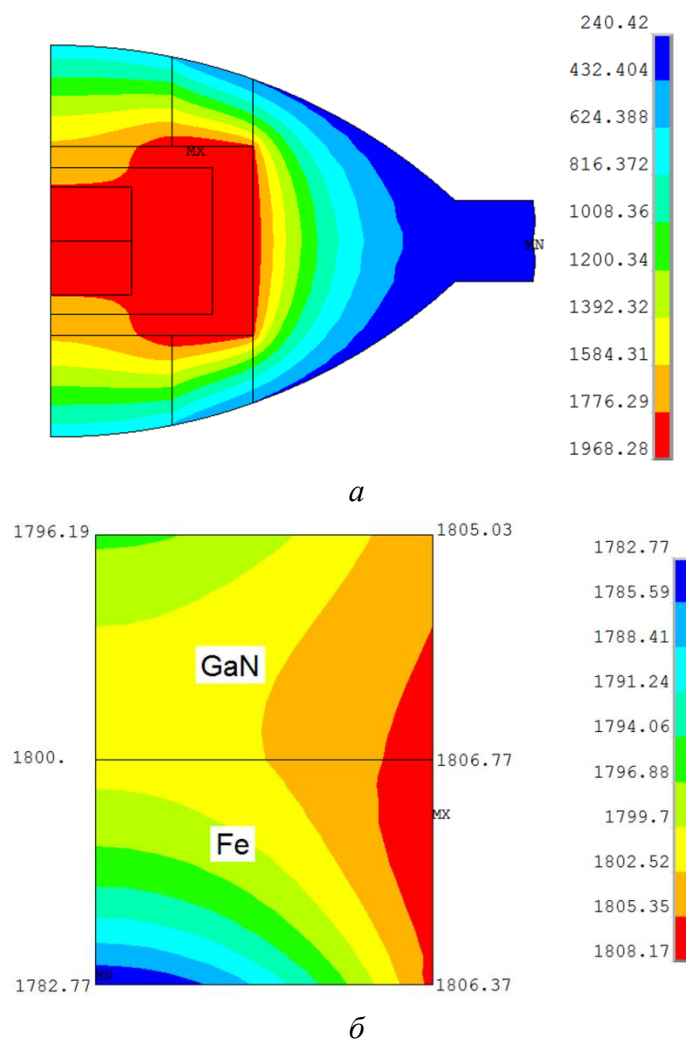


Рис. 9. Температурні поля в комірці (а) і зоні досліджуваних зразків комірки (б) за падіння напруги в 3,4 В

Отже, запропонована методика розрахунку теплового стану комірки АВТ дозволяє достатньо швидко отримувати розподіли температури в ній з урахуванням температурних залежностей провідних характеристик матеріалів, граничних умов різних типів, складності форм конструктивних елементів і їх композиційного складу.

О.Р. Liudvichenko, О.М. Anisin, О.О. Lyeshchuk, І.А. Petrusha

V.N. Bakul Institute for Superhard Materials of NAS of Ukraine

SIMULATION OF THE THERMAL STATE OF THE HIGH-PRESSURE APPARATUS IN THE STUDY OF THE SOLUBILITY OF GALLIUM NITRIDE IN IRON

The thermal state of the cell of the high-pressure apparatus used to determine the solubility of gallium nitride in iron was investigated using computer simulation. The results of calculations are presented by stationary temperature fields in various elements of the apparatus. It was found that at a temperature at the control point of the cell of 1800 °C its maximum difference in the volume of the studied samples of gallium nitride and iron is 25 °C. The simulated cell configuration and the heating conditions defined for it are acceptable for experimental studies of the solubility of GaN in contact with Fe under conditions of high pressures and temperatures.

Key words: *gallium nitride, high-pressure apparatus, high-pressure cell, finite element method.*

А.П. Людвиченко, А.М. Анисин, А.А. Лещук, И. А. Петруша

Институт сверхтвердых материалов им. В.М. Бакуля НАН Украины

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО СОСТОЯНИЯ АППАРАТА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ РАСТВОРИМОСТИ НИТРИДА ГАЛЛИЯ В ЖЕЛЕЗЕ

С использованием компьютерного моделирования исследовано тепловое состояние ячейки аппарата высокого давления, применяемой для исследования растворимости нитрида галлия в железе. Результаты расчетов представлены стационарными температурными полями в различных элементах аппарата. Определено, что при температуре в контрольной точке ячейки в 1800 °С максимальный ее перепад в объеме исследуемых образцов нитрида галлия и железа составляет 25 °С. Смоделированная конфигурация ячейки и определенные для нее условия нагрева являются приемлемыми для экспериментальных исследований растворимости GaN в контакте с Fe в условиях высоких давлений и температур.

Ключевые слова: нитрид галлия, аппарат высокого давления, ячейка высокого давления, метод конечных элементов.

Література

1. Шелудяк Ю. Е., Кашпоров Л. Я., Малинин Л. А., Цалков В. Н. Теплофизические свойства компонентов горючих систем. – М.: НПО «Информ ТЭИ», 1992. – 184 с.
2. Казанцев Е. И. Промышленные печи. Справочное руководство для расчетов и проектирования. 2-е изд., доп. и перераб. – М.: Металлургия, 1975. – 368 с.
3. Теплопроводность твердых тел: Справ. / Под ред. А. С. Охотина. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 320 с.
4. Свойства конструкционных материалов на основе углерода: Справ. / Под ред. В. П. Соседова. – М.: Металлургия, 1975. – 336 с.
5. Савицький О. В., Лисаковський В. В., Бовсунівський О. В. Електрорезистивні властивості графіту за високих тисків та високих температур // Породорозрушаючий і металлообробляючий інструмент – техніка і технологія його виготовлення і застосування. Сб. науч. тр. – Вып. 22. – К.: ИСМ им. В.Н. Бакуля НАН Украины, 2019. – С. 299–303.
6. Туманов В. И. Свойства сплавов системы карбид вольфрама – кобальт: Справ. – М.: Металлургия, 1971. – 96 с.
7. Hiroyuki Shibata, Yoshio Waseda, Hiromichi Ohta et al. / High thermal conductivity of gallium nitride (GaN) crystals grown by HVPE process // Mater. Trans. – 2007. – V. 48, N 10. – P. 2782–2786.
8. Исследование теплофизических свойств материалов реакционного сосуда и их влияния на работоспособность кристаллов алмаза и свойств примесей в них: Отчет о НИР / Ин-т сверхтв. материалов АН УССР. – К., 1978. – Т. 1. Исследование теплофизических свойств материалов реакционного сосуда. – 213 с.
9. Материалы для электротермических установок: Справ. Пособие / Под ред. М.Б. Гутмана. – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 296 с.
10. Физико-химические свойства окислов: Справ. / Под ред. Г. В. Самсонова. – М.: Металлургия, 1978. – 456 с.
11. Cui He, Cui-E Hu, Tian Zhang et al. Lattice dynamics and thermal conductivity of cesium chloride via first-principles investigation // Solid State Commun. – 2017. – V. 254. – P. 31–36.
12. Библик Е. Е., Быкова Л. М., Вавилов В. Г. и др. Новый справочник химика и технолога: Общие сведения. Строение вещества. Физические свойства важнейших веществ. Ароматические соединения. Химия фотографических процессов. Номенклатура

- органических соединений. Техника лабораторных работ. Основы технологии. Интеллектуальная собственность. – СПб: НПО «Профессионал», 2006. – 1464 с.
13. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах: Справ. – М.: Металлургия, 1989. – 384 с.
 14. Кржижановский Р. Е., Штерн З. Ю. Теплофизические свойства неметаллических материалов (окислы): Справ. книга. – Л.: Энергия, 1973. – 336 с.
 15. Самсонов Г. В. Нитриды. – Киев: Наук. думка, 1969. – 380 с.
 16. Хорошун Л. П., Маслов Б. П. Методы автоматизированного расчета физико-механических постоянных композиционных материалов. – К.: Наук. думка, 1980. – 156 с.
 17. Novikov N. V., Levitas V. I., Leshchuk A. A., Idesman A. V. Mathematical modeling of diamond synthesis process // High Pres. Res. – 1991. – V. 7. – P. 195–197.
 18. Leshchuk A. A., Novikov N. V., Levitas V. I. Computer simulation of physical and mechanical processes running in the reaction cells of high-pressure installations in the course of synthesis of diamonds // Strength Mater. – 2001. – V. 33, N 3. – P. 277–292.
 19. Leshchuk A. A. Computer-aided modeling of diamond crystallization regions in high-pressure apparatus // Int. Appl. Mechanics. – 2001. – V. 37, N 7. – P. 941–947.
 20. Lyeshchuk O. Computational modeling of superhard materials synthesis // Comp. Mater. Sci. – 2010. – V/ 49, N 1S. – P. S85–S94.
 21. Lyeshchuk O. O., Polotniak S. B., Novikov M. V. Thermomechanical approach to the modeling of HP–HT material processing // J. Phys. Conf. Ser. – 2012. – V. 377. – Art. 012095.
 22. Лещук А. А. Расчет распределений температуры в реакционной ячейке АД при кристаллизации нитрида галлия // Синтез, спекание и свойства сверхтвердых материалов. – К.: Ин-т сверхтв. материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2000. – С. 158–171.

Надійшла 07.06.21

References

1. Sheludiak, U.E., Kashporov, L.I., Malinin, L.A., Tsalkov, V.N. (1992). *Teplofizicheskie svoystva komponentov horuchikh sistem [Thermophysical properties of components of combustible systems]*. Moscow: NPO Inform TEI [in Russian].
2. Kazantsev, E.I. (1975). *Promishlennyye pechi. [Industrial ovens]*. Moscow: Metallurhiia [in Russian].
3. Ohotin, A.S. (1984). *Teploprovodnost tverdykh tel [Thermal conductivity of solids]*. Moscow: Energoatomizdat [in Russian].
4. Sosedov, V.P. (1975) *Svoystva konstruktsionnykh materialov na osnove ugleroda [Properties of structural materials based on carbon]*. Moscow: Metallurgiiia [in Russian].
5. Savitskyi, O.V., Lysakovskiy, V.V., Bovsunivskiy, O.V., (2019) Elektrozystyvni vlastyvoli hrafitu za vysokykh tyskiv ta vysokykh temperatur [Electroresistive power of graphite for high grips and high temperatures] *Porodorazrushaiushchii i metalloobrabatyvaiushchii instrument – tekhnika i tekhnologiiia ego izgotovleniia i primeneniia – Rock Destruction and Metal-Working Tools – Techniques and Technology of the Tool Production and Applications*, 22, 299–303 [in Ukrainian].
6. Tumanov, V. I. (1971) *Svoystva splavov sistemy karbid volframa – kobalt [Properties of alloys of the tungsten carbide – cobalt system]*. Moscow: Metallurhiia [in Russian].
7. Shibata, H., Waseda, Y., Ohta H., et al. (2007). High thermal conductivity of gallium nitride (GaN) crystals grown by HVPE process. *Mater. Trans.* 48, 10, 2782–2786.
8. Issledovaniye teplofizicheskikh svoystv materialov reaktzionnogo sosuda i ikh vliyaniya na rabotosposobnost' kristallov almaza i svoystv primesey v nikh [Investigation of the thermophysical properties of the materials of the reaction vessel and their influence on the performance of diamond crystals and the properties of impurities in them] (1978).

- Issledovanie teplofizicheskikh svoystv materialov reakcionnoho sosuda [Investigation of the thermophysical properties of the materials of the reaction vessel]. (V. 1). Kyiv: In-t sverkhstv. materialov im. V. N. Bakulya NAN Ukrainy [in Russian].*
9. Gutman, M. B. (1987). *Materialy dlia elektrotermicheskikh ustanovok [Materials for electrothermal installations]. Moscow: Energoatomizdat [in Russian].*
 10. Samsonov, G. V., (1978). *Fiziko-khimicheskie svoystva okislov [Physicochemical properties of oxides]. Moscow: Metallurgiya [in Russian].*
 11. Cui He, Cui-E Hu, Tian Zhang et al. (2017) Lattice dynamics and thermal conductivity of cesium chloride via first-principles investigation. *Solid State Commun*, 254, 31–36.
 12. Bibik, Ye. Ye., Bykova, L. M., Vavilov, V. G. et al. (2006). *Novyi spravochnik khimika i tekhnoloha: Obshchie svedeniia. Stroenie veshchestva. Fizicheskie svoystva vazhneishikh veshchestv. Aromaticheskie soedineniia. Khimiia fotohraficheskikh protsessov. Nomenklatura orhanicheskikh soedinenii. Tekhnika laboratornykh robot. Osnovy tekhnologii. Intellektualnaia sobstvennost. [New Handbook of Chemist and Technologist: General Information. The structure of matter. Physical properties of the most important substances. Aromatic compounds. Chemistry of photographic processes. Nomenclature of organic compounds. Laboratory technique. Fundamentals of technology. Intellectual property]. St. Petersburg: Professional [in Russian].*
 13. Zinovev, V. Ye. (1989). *Teplofizicheskie svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh [Thermophysical properties of metals at high temperatures]. Moscow: Metallurhiia [in Russian].*
 14. Krzhizhanovskii, R. Ye., Shtern, Z. YU. (1973). *Teplofizicheskie svoystva nemetallicheskih materialov (okisly) [Thermophysical properties of non-metallic materials (oxides)]. Leningrad: Energiya [in Russian].*
 15. Samsonov, G. V. (1969). *Nitridy [Nitrides]. Kyiv: Nauk. dumka [in Russian].*
 16. Khoroshun, L. P., Maslov, B. P. (1980). *Metody avtomatizirovannoho rascheta fiziko-mekhanicheskikh postoiannykh kompozitsionnykh materialov [Methods for automated calculation of physical and mechanical constants of composite materials]. Kyiv: Nauk. dumka [in Russian].*
 17. Novikov, N. V., Levitas, V. I., Leshchuk, A. A., Idesman, A. V. (1991). Mathematical modeling of diamond synthesis process. *High Pres. Res.*, 7, 195–197.
 18. Leshchuk, A. A., Novikov, N. V., Levitas, V. I. (2001). Computer simulation of physical and mechanical processes running in the reaction cells of high-pressure installations in the course of synthesis of diamonds. *Strength Mater.*, 33, 3, 277–292.
 19. Leshchuk, A. A. (2001). Computer-aided modeling of diamond crystallization regions in high-pressure apparatus. *Int. Appl. Mechanics*, 37, 7, 941–947.
 20. Lyeshchuk, O. (2010). Computational modeling of superhard materials synthesis. *Comp. Mater. Sci.*, 49, 1S, S85–S94.
 21. Lyeshchuk, O. O., Polotniak, S. B., Novikov, M. V. (2012). Thermomechanical approach to the modeling of HP–HT material processing. *J. Phys. Conf. Ser.*, 377, 012095.
 22. Lyeshchuk, O. O. (2000). Raschet raspredeleniy temperatury v reaktsionnoy yacheyke AVD pri kristallizatsii nitrida galliya [Calculation of temperature distributions in the reaction cell of HPA during crystallization of gallium nitride]. *Sintez, spekaniye i svoystva sverkhstverdykh materialov [Synthesis, sintering and properties of superhard materials]. A.A. Shulzhenko (Ed.); In-t sverkhstv. materialov im. V. N. Bakulya NAN Ukrainy. Kyiv [in Russian].*