

19. Wort, C. J. H. (2016). Applications for superhard and ultra-hard materials. In V. Kanyanta (Ed.), *Microstructural correlations of hard, superhard, and ultrahard materials* (pp. 25–74). Springer.
20. Slipchenko, K., Bushlya, V., Stratiichuk, et al. (2022). Multicomponent binders for PCBN performance enhancement in cutting tool applications. *Journal of the European Ceramic Society*, 42, 4513–4527.
21. Can, A., Zhang, X., Bushlya, V., et al. (2021). *UK Patent GB 2591316 A. Sintered polycrystalline cubic boron nitride material.* (UK Patent GB 2591316 A).

УДК 661.868.1:004.94:62-987

DOI: 10.33839/2708-731X-28-1-217-227

О.П. Людвіченко, д-р філ.; **О.О. Лещук**, д-р техн. наук; **С.О. Гордєєв**, канд. техн. наук;
О.М. Анісін, м. н. с.

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

ВПЛИВ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ПРЕКУРСОРІВ І ЇХ РОЗЧИННИКІВ НА ТЕПЛОВИЙ СТАН КОМІРКИ АПАРАТА ВИСОКОГО ТИСКУ ПРИ КРИСТАЛІЗАЦІЇ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СПОЛУК СИСТЕМИ $A^{III}B^V$

За допомогою комп'ютерного моделювання досліджено тепловий стан комірки апарата високого тиску (АВТ), призначеної для вирощування кристалів $InGaN$. Розглянуто три типи розчинників: Fe , Fe_3N та $CoCr$. Проаналізовано вплив використання підкладки з Al_2O_3 на розподіл температури та градієнта температури в комірниці. Встановлено, що застосування підкладки з Al_2O_3 зменшує значення ΔT_{max} , ΔT_z та $gradT$ для всіх розглянутих випадків. Мінімум неоднорідності температурних полів досягається при використанні розчинника $CoCr$ у поєднанні з підкладкою Al_2O_3 ($\Delta T_{max} = 45^\circ C$, $\Delta T_z = 15^\circ C$; $gradT = 0,1-6,8^\circ C/мм$). У випадку використання розчинника Fe_3N необхідна модернізація електрорезистивної системи АВТ, оскільки за розрахунками $gradT$ перевищує $10^\circ C/мм$.

Ключові слова: розчинник, кристалізація $InGaN$, апарат високого тиску (АВТ), комірка, тепловий стан, комп'ютерне моделювання

Вступ

Твердотільні напівпровідники групи $A^{III}B^V$ є ключовими матеріалами сучасної електроніки та оптоелектроніки, оскільки поєднують високі електронні та оптичні характеристики, зокрема широкий спектр ширини забороненої зони, високу рухливість носіїв заряду, ефективне випромінювання світла, а також стійкість до високих температур і радіації.

Одержання високоякісних кристалів та тонких плівок таких сполук, як $GaAs$, InP , GaN , $InGaN$, $AlGaAs$ та їхніх твердих розчинів, є критично важливим для створення

- світлодіодів (LED),
- лазерних діодів (LD),
- сонячних елементів високої ефективності,
- мікрохвильових і надвисокочастотних транзисторів (HEMT),
- квантових структур (квантові точки, надгратки, квантові ями),
- фотодетекторів та ІЧ-сенсорів.

З огляду на широке впровадження енергоефективних технологій, розширення оптоволоконних комунікацій, розвиток світлодіодного освітлення, Li-Fi та електроніки для космічних застосувань, попит на вдосконалені $A^{III}B^V$ -матеріали продовжує стрімко зростати.

Серед напівпровідникових сполук групи $A^{III}B^V$ особливе місце займають нітриди групи III, зокрема GaN (нітрид галію) та його твердий розчин InGaN (індій-галій-нітрид). Ці матеріали мають широку пряму заборонену зону, високу теплопровідність, радіаційну стійкість та здатність ефективно випромінювати світло в ультрафіолетовому, синьому, зеленому та навіть червоному діапазоні спектрів. Завдяки цим властивостям GaN та InGaN є базовими матеріалами для світлодіодів (LED), лазерних діодів (LD), потужної електроніки та детекторів випромінювання.

На сьогодні існують такі методи отримання твердотільних напівпровідників групи $A^{III}B^V$ Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) [1], Molecular Beam Epitaxy (MBE) [2], Hydride Vapor Phase Epitaxy (HVPE) [3], Epitaxial Lateral Overgrowth (ELO) [4], амонотермічний метод [5], метод росту кристалів GaN з розчину під контрольованим тиском азоту – (модифікація амонотермічного методу) [6].

Актуальність досліджень, спрямованих на легування сполук GaN індієм з метою варіювання фізичних властивостей твердих розчинів $In_{1-x}Ga_xN$, обумовлена широкими перспективами їх застосування в оптоелектроніці та сонячній енергетиці. Зокрема, у роботі [7] проведено комплексний теоретичний аналіз впливу хімічного складу на структурні, електронні, пружні, п'єзоелектричні та діелектричні властивості твердих розчинів гексагональної модифікації $In_{1-x}Ga_xN$ методом перших принципів (initio methods). Розглянуто композиції з вмістом Ga_x в 0, 25, 50, 75 і 100 %, що дозволило кількісно оцінити вплив складу на параметри ґратки, модулі пружності, електронну зонну структуру та функціональні властивості матеріалу.

У дослідженні [8] запропоновано архітектуру високоефективних сонячних елементів на основі InGaN, в яких активна область сформована шляхом поєднання двох різних напружених надґраткових структур InGaN/InGaN. Таке інженерне рішення забезпечило досягнення високої напруги холостого ходу, значної щільності струму короткого замикання та підвищеного коефіцієнта заповнення, що свідчить про ефективне використання композиційних і структурних параметрів для оптимізації фотоелектричних характеристик.

Окрему увагу приділено двовимірним формам $In_xGa_{1-x}N$. Так, у роботі [9] на основі перших принципів досліджено електронні та оптичні властивості 2D- $In_xGa_{1-x}N$ з урахуванням ефектів одноосового механічного навантаження. Показано, що ширина забороненої зони матеріалу може змінюватись в діапазоні 2,28–0,23 eV залежно від складу та ступеня прикладеної деформації. Отримані результати вказують на високий потенціал таких матеріалів для застосування в електронних та оптоелектронних пристроях з налаштованими характеристиками.

На сучасному етапі розвитку технологій вирощування нітридних матеріалів дослідники стикаються з низкою ключових викликів, серед яких:

- контроль дефектної структури та зменшення густини дислокацій у кристалах;
- мінімізація флуктуацій складу у твердих розчинах;
- забезпечення стабільної р-типу провідності у широкозонних напівпровідниках;
- масштабування та здешевлення виробничих процесів, зокрема у рамках технології GaN-on-Si.

Основними чинниками, що обмежують поширення GaN- та InGaN-технологій, є:

- висока температура сублімації та низька розчинність азоту в металах, що унеможливорює застосування традиційних методів кристалізації з розплаву при нормальному тиску;
- висока густина дислокацій у шарах GaN, вирощених на гетерогенних підкладках (Al_2O_3 , SiC, Si), яка негативно впливає на довговічність та ефективність приладів;
- складність контролю складу та досягнення однорідності InGaN при підвищеному вмісті індію, необхідному для отримання довгохвильового (зеленого та червоного) випромінювання.

Таким чином, обмеження сучасних методів синтезу та легування GaN і InGaN зумовлюють необхідність розробки альтернативних підходів до отримання високоякісних кристалів цих сполук.

Одним із можливих рішень цієї задачі є кристалізація GaN та InGaN в умовах високого тиску і високої температури (НРНТ) з розчин-розплаву методом температурного градієнта в АВТ по аналогії з синтезом алмаза [10].

Дослідження в цьому напрямку були розпочаті в 2016 році в Інституті надтвердих матеріалів імені В.М. Бакуля Національної академії наук України.

В роботі [11] дослідили розчинність GaN під тиском до 8 ГПа і температурою, що наближається до 2000 °С, з використанням різних розчинників, таких як Fe, Fe₃N і сплави Co/Cr. Було виявлено, що розчинність сильно залежить від тиску, температури та часу витримки. Наприклад, температура плавлення Fe збільшується з 1782 °С при 6,7 ГПа до 1827 °С при 8,3 ГПа.

Подальші експерименти [12] продемонстрували, що синтез GaN можливий за НРНТ умов (3–5 ГПа, 1200–1600 °С) з використанням насиченого азотом розчинника Fe–Ga–N. В подальших дослідженнях [13] було підтверджено можливість вирощування кристалів GaN в умовах НРНТ, представлено попередню фазову діаграму системи Fe–Ga–N та запропоновано термодинамічні параметри, що визначають процес кристалізації в умовах температурного градієнта.

Зважаючи на важливість впливу розподілу температури на процеси, що відбуваються під час синтезу в АВТ, виникає необхідність у проведенні оцінки теплового стану комірки. При проектуванні комірок АВТ, здатних забезпечити необхідні теплові умови, застосовують комп'ютерну симуляцію [14–20]. Завдяки чисельному моделюванню вдається оптимізувати поля напружки, щільності струму, джерел джоулевого тепла, температури і її градієнта в елементах комірки.

Метою даного дослідження є попереднє визначення теплового стану комірки АВТ-40 тороїдального типу, призначеної для проведення експериментів з вирощування полікристалів InGaN.

Постановка задачі

Для досягнення необхідних теплових умов у реакційному об'ємі змінювали конфігурацію і провідні властивості елементів електрорезистивного ланцюга АВТ. Методика рішення задачі була аналогічною до наведеної в роботі [20]. Тепловий аналіз здійснювали шляхом чисельного моделювання із застосуванням методу скінченних елементів (МСЕ). Для розрахунків використовували академічну версію програмного комплексу ANSYS.

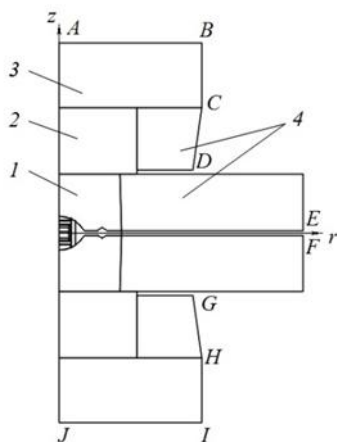


Рис. 1. Розрахункова схема АВТ типу «тороїд-40»: 1 – матриця (ВК6); 2 – опорна плита (ВК15); 3 – підкладна плита (35ХГСА); 4 – скріплючі кільця (35ХГСА)

Властивості матеріалів наведено в [20–30]. Визначення ефективних властивостей композиційних матеріалів (наприклад, сумішей ZrO₂ + графіт, CzCl + графіт, CzCl + ZrO₂) проводили згідно з моделлю, представленою в [20].

На рис. 1 і 2 представлено схеми конструкції АВТ і експериментальної комірки, кожна з яких показано у вигляді половини осьового перерізу. Числове моделювання проводили з урахуванням таких граничних умов: падіння напружки між поверхнями АВ і ІІ підбирали, виходячи з температури у контрольній точці комірки, а температура на поверхнях АВ та ІІ фіксувалася на експериментально виміряному рівні 40 °С.

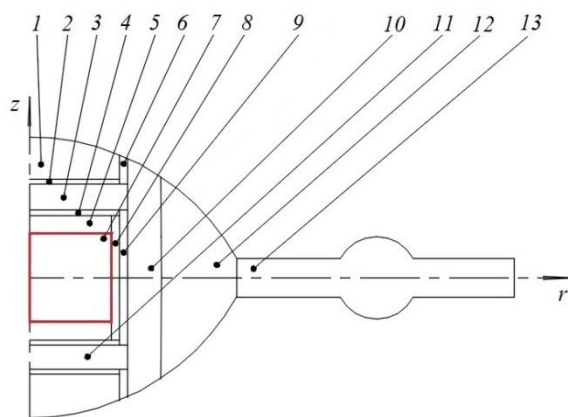


Рис. 2. Комірка АВТ типу «тороїд-40» для проведення експериментів з кристалізації InGaN : 1 – теплоізоляційний диск (CzCl + графіт); 2, 4 – струмопровідні диски (терморозширений графіт); 3, 11 – торцеві нагрівачі (ZrO_2 + графіт); 5, 8 – елементи ізоляції (CzCl + ZrO_2); 6 – струмопідвід (графіт); 7 – реакційний об'єм; 9 – трубчастий нагрівач (графіт); 10 – теплоізоляційна втулка (CzCl + графіт); 12 – контейнер (літографський камінь); 13 – заусенець (пресований кальцит)

Конвективний теплообмін з повітрям застосовували до поверхонь BC , DE , FG та HI , тоді як поверхні CD та GH конвективно охолоджувалися водою. Значення коефіцієнтів тепловіддачі та умови теплоізоляції в зазорі між блок-матрицями були прийняті на основі роботи [31].

Функціональні елементи спорядження комірки високого тиску (див. рис. 2) виконують такі завдання:

- Теплоізоляційний диск 1 – зменшує теплове навантаження на твердосплавну матрицю (АВТ).
- Струмопровідні диски 2, 4 – забезпечують електричний контакт між струмопровідними елементами конструкції.
- Торцеві нагрівачі 3, 11 – основні електрорезистивні елементи, що забезпечують необхідні градієнти температури та топологію ізотерм у реакційному об'ємі.
- Ізоляційні елементи 5, 8 – запобігають взаємодії джерела нітриду галію з хімічно активним графітом.
- Трубчастий нагрівач 9 – електрорезистивний елемент, призначений для досягнення робочих температур у реакційному об'ємі.
- Теплоізоляційна втулка 10, контейнер 12 – теплоізолюють центральну зону комірки.
- Заусенець 13 – виконує функцію ущільнення зони високого тиску.

На рис. 3 представлено схеми спорядження реакційного об'єму у вигляді половин осевого перерізу. Джерело нітриду галію – спресований порошок GaN . Як легуючу добавку використали фольгу із In товщиною 0,25 мм, яку розташували між джерелом нітриду галію і розчинником. Варіанти розчинників: Fe (армко залізо), Fe_3N (що містить 10 ат. % N), CoCr (50 ат. % Cr). Інший варіант спорядження (див. рис. 3, б) включає підкладку з подрібненого (< 50 мкм) і спресованого сапфіру. Підкладку застосували для ініціації гетерогенного зародкоутворення InGaN . Контрольна точка K (див. рис. 3) розташована на осі z в нижній частині реакційного об'єму. В табл. 1 наведено термоелектричні властивості матеріалів, використаних при спорядженні реакційного об'єму.

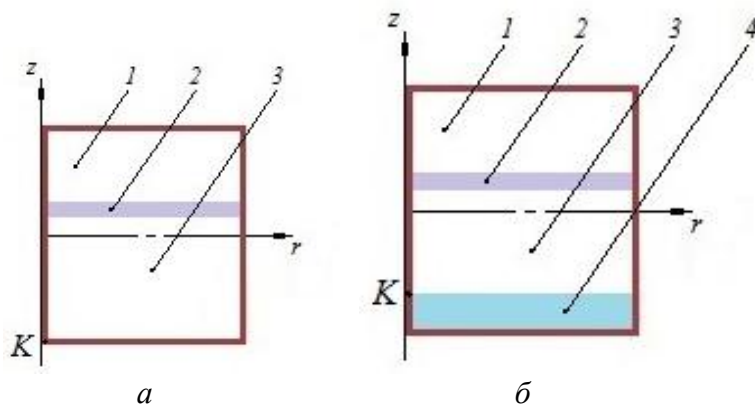


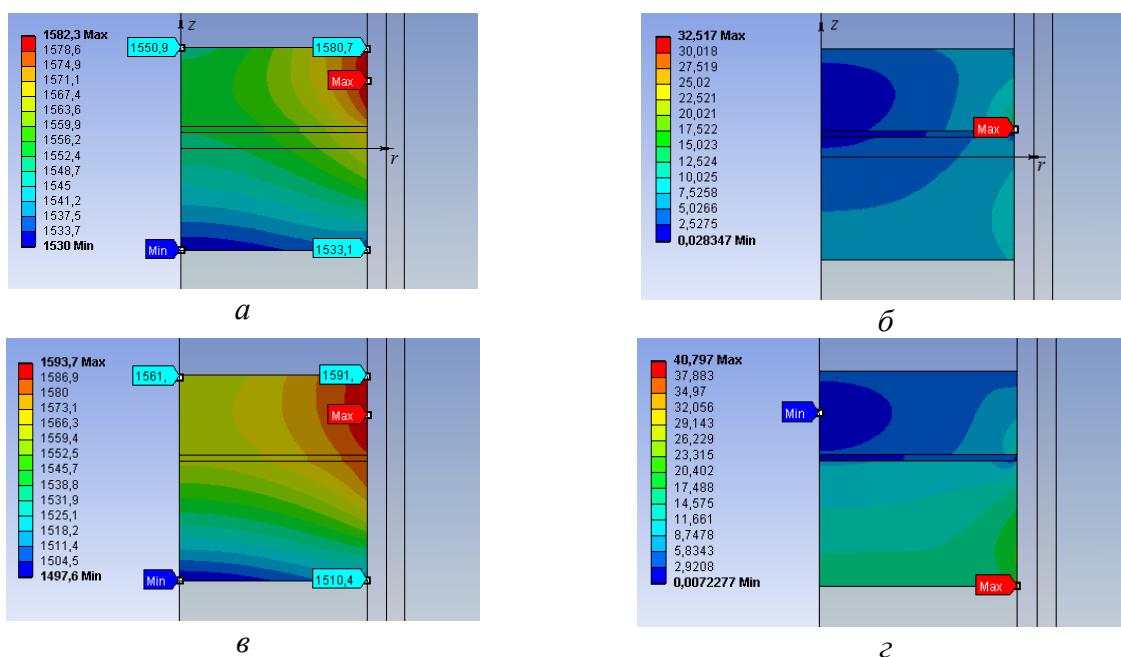
Рис. 3. Схеми спорядження реакційного об'єму: а – 1 – нітрид талію, 2 – індій, 3 – розчинник; б – те саме з додаванням 4 – підкладка з сапфіру; К – контрольна точка

Таблиця 1. Термоелектричні властивості елементів спорядження реакційного об'єму

Прекурсори, розчинники, підкладка	Електроопір, $10^{-6} \text{ Ом} \times \text{м}$	Теплопровідність, $\text{Вт} \times \text{м}^{-1} \times \text{°C}^{-1}$
GaN	4×10^{12}	30
Fe	1,35	35
Fe ₃ N	1,9	26
CoCr	1,21	35
In	0,08	280
Al ₂ O ₃	7,8	8

Результати моделювання

Результати розрахунків для схеми спорядження реакційного об'єму (див. рис. 3, а) і розчинників Fe, Fe₃N, CoCr у вигляді температурних полів і полів градієнта температури в реакційному об'ємі наведено на рис. 4. Температура 1530 °С в контрольній точці К досягається за умови, що напруга між підкладними плитами становить 3,2 В (розчинник – армко-залізо).



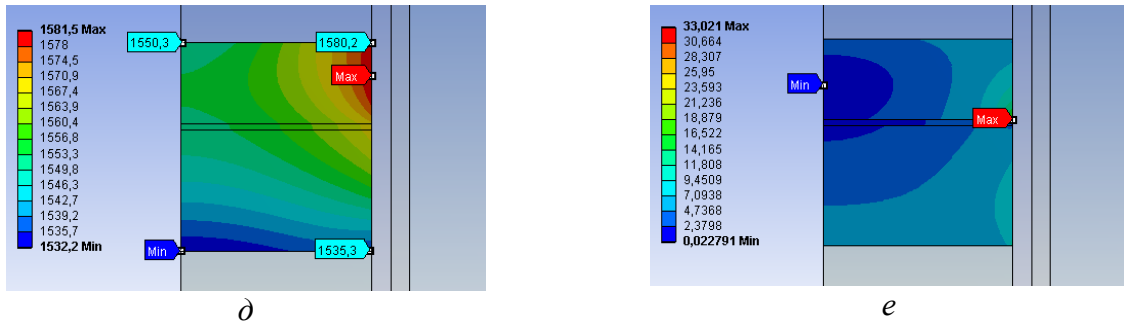


Рис. 4. Температурні поля (°C) – зліва і поля градієнта температури (°C/мм) – зправа в реакційному об'ємі для розчинників Fe (а, б), Fe₃N (в, з), CoCr (д, е)

Результати розрахунків для реакційного об'єму з підкладкою із сапфіру (див. рис. 3, б) і тих же розчинників представлено на рис. 5. Для цього випадку температура 1530 °C в контрольній точці була отримана за напруги 3,19 В (з армо-залізом як розчинником).

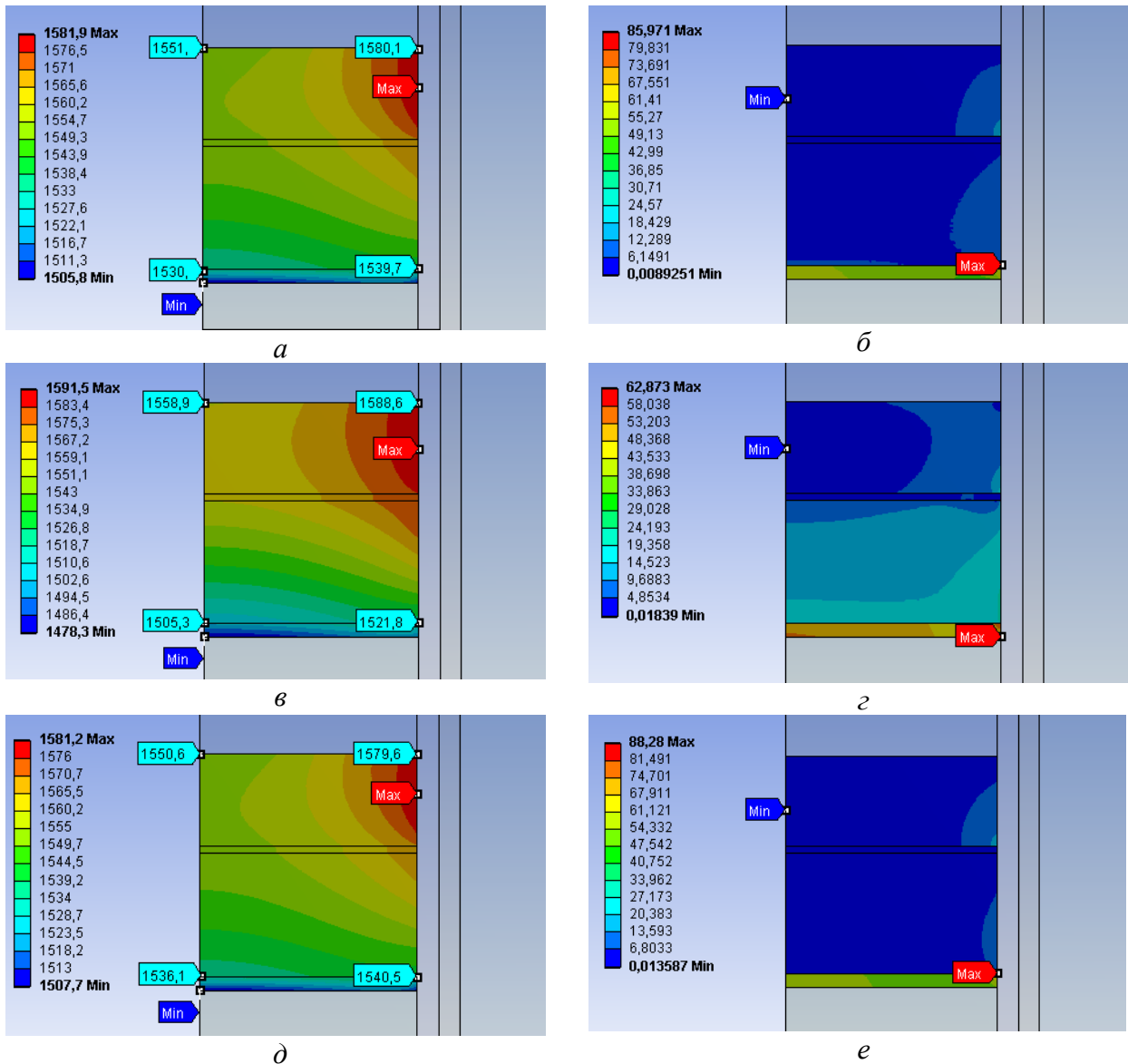


Рис. 5. Аналогічно рис. 4 для схеми спорядження реакційного об'єму з підкладкою із сапфіру

Згідно з розрахунками при використанні розчинників Fe, Fe₃N, CoCr і двох схем спорядження реакційного об'єму топологія температурних полів суттєво не відрізняється. Температурні поля зберігають горизонтальну орієнтацію.

В табл. 2 наведено значення максимального (ΔT_{\max}), осьового перепаду температури (ΔT_z) і інтервали значень градієнтів температури ($\text{grad}T$) для реакційного об'єму. Мінімальні значення $\Delta T_z = 15$ °C, $\Delta T_{\max} = 45$ °C при використанні розчинника CoCr і за умови застосування підкладки із сапфіру. Використання розчинника Fe₃N призводить до зменшення температури в контрольній точці до 1497,6 °C і 1505,3 °C за спорядження без підкладки і з нею відповідно. При використанні розчинників Fe, CoCr з підкладкою із сапфіру поле градієнта температури однорідне, сягає мінімальних значень і змінюється в інтервалах 0,009–6,1 і 0,1–6,8 °C/мм відповідно. За використання розчинника Fe₃N значення $\text{grad}T$ більше рекомендованих для синтезу алмазу (10 °C/мм) для обох схем спорядження.

Таблиця 2. Розрахункові теплові параметри реакційного об'єму

Розчинники	Підкладка	ΔT_{\max} , °C	ΔT_z , °C	$\text{grad}T$, °C/мм
Fe	–	52	21	0,03–7,5
Fe ₃ N	–	96	63	8,7–20,4
CoCr	–	49	18	0,02–7,1
Fe	+	50	21	0,009–6,1
Fe ₃ N	+	86	54	4,8–14,5
CoCr	+	45	15	0,1–6,8

Висновки

1. Проведено попереднє комп'ютерне моделювання теплового стану комірки АВТ, призначеної для досліджень кристалізації InGaN. Встановлено, що теплопровідність розчинників (Fe, Fe₃N, CoCr) та підкладки (Al₂O₃) суттєво впливають на значення температури та градієнта температури в реакційному об'ємі.

2. Розрахунки показали, що використання підкладки з Al₂O₃ забезпечує зменшення параметрів ΔT_{\max} , ΔT_z та $\text{grad}T$ для всіх досліджуваних випадків.

3. Найменша неоднорідність теплового стану реакційного об'єму досягається при застосуванні розчинника CoCr у поєднанні з підкладкою з Al₂O₃ ($\Delta T_{\max} = 45$ °C, $\Delta T_z = 15$ °C, $\text{grad}T = 0,1$ –6,8 °C/мм).

4. При використанні розчинника Fe₃N $\text{grad}T$ перевищує 10 °C/мм, що потребує модернізації електрорезистивної системи АВТ для оптимізації теплових умов у реакційному об'ємі.

О. Liudvichenko, О. Lyeshchuk, S. Gordieiev, О. Anisin

Bakul Institute for Superhard Materials of the National Academy of Sciences of Ukraine

THE EFFECT OF THE THERMAL CONDUCTIVITY OF PRECURSORS AND ITS SOLVENTS ON THE THERMAL STATE OF THE HIGH-PRESSURE APPARATUS CELL DURING CRYSTALLIZATION OF SEMICONDUCTOR COMPOUNDS OF THE A^{III}B^V SYSTEM

Computer modeling was used to study the thermal state of the high-pressure apparatus (HPA) cell designed for growing InGaN crystals. Three types of solvents were considered: Fe, Fe₃N, and CoCr. The effect of using an Al₂O₃ substrate on the temperature distribution and temperature gradient in the cell was analyzed. It was found that the use of an Al₂O₃ substrate reduces the values of ΔT_{\max} , ΔT_z , and $\text{grad}T$ for all cases considered. The minimum temperature field heterogeneity is achieved when using a CoCr solvent in combination with an Al₂O₃ substrate ($\Delta T_{\max} = 45$ °C, $\Delta T_z = 15$ °C; $\text{grad}T = 0.1$ –6.8 °C/mm). When using Fe₃N

as a solvent, it is necessary to upgrade the HPA electrical resistance system, since according to calculations, $\text{grad}T$ exceeds $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{mm}$.

Key words: solvent, InGaN crystallization, high-pressure apparatus (HPA), cell, thermal state, computer modeling

Література

1. Amano H., Kito M., Hiramatsu K., Akasaki I. Growth of low dislocation density GaN using low-temperature deposited buffer layer. *Jpn. J. Appl. Phys.* 1989. Vol. 28, Part 2, N 12. P. L2112–L2114.
2. Nakamura S., Mukai T., Senoh M., Iwasa N. Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN films. *Ibid.* 1992. Vol. 31, Part 2, N 2A. P. L139–L142.
3. Monemar B., Larsson H., Hemmingsson C., Ivanov I.G., Gogova D. Growth of thick GaN layers with hydride vapour phase epitaxy. *J. Cryst. Growth.* 2005. Vol. 281, N 1. P. 17–31.
4. Mukai T., Takekawa K., Nakamura S. InGaN-based blue light-emitting diodes grown on epitaxially laterally overgrown GaN substrates. *Jpn. J. Appl. Phys.* 1998. Vol. 37, N 7B. P. L839–L841
5. Boćkowski M., Grzegory I. Recent progress in crystal growth of bulk GaN. *Acta Phys. Pol. A.* 2022. Vol. 141, N 3. P. 167.
6. Inoue T., Seki Y., Oda O., Kurai S., Yamada Y., Taguchi T. Growth of bulk GaN single crystals by the pressure-controlled solution growth method. *J. Cryst. Growth.* 2001. Vol. 229, N 1–4. P. 35–40.
7. Shen X.P., Lin J.B., Hu R.Y., Liu Y.C., Xu L.Q., Niu H. B., Huang S.Y., Ma Y.J., Wang V. Compositional effects on structural, electronic, elastic, piezoelectric and dielectric properties of GaInN alloys: a first-principles study. *RSC Adv.* 2024. Vol. 14, N 10. P. 6752–6761.
8. Kuwahara Y., Fujii T., Sugiyama T., Iida D., Isobe Y., Fujiyama Y., Iwaya M., Takeuchi T., Kamiyam, S., Akasaki I., Amano H. GaInN-based solar cells using strained-layer GaInN/GaN superlattice active layer on a freestanding GaN substrate. *Appl. Phys. Express.* 2011. Vol. 4, N 2. P. 021001.
9. Li K., Wu H.H., Lu Y.Z., Zhang C., Yang W. Strain-Engineered electronic and optical properties of 2D In_xGa_{1-x}N: A first-principles study. *Comput. Mater. Sci.* 2025. Vol. 258. P. 114047.
10. Ivakhnenko S.A. Some aspects of diamond crystallization under high pressures. *High Pres. Res.* 1991. Vol. 7. P. 183–187.
11. Petrusha I.A., Sadovyi B.S., Sadovyi P.S., Osipov A.S., Rumiantseva Yu.Yu., Balabanov P.A., Klimczyk P., Sadova Yu.I., Savitskyi O.V., Hordieiev S.O., Sakal T.O. Investigation of GaN behavior in contact with Fe, Fe₂₋₄N and Co/Cr at high pressures and high temperatures. *Tooling Materials Science.* 2021. Vol. 24. P. 312–325.
12. Rumiantseva Yu.Yu., Savitskyi O.V., Sadova Yu.I. GaN crystallization by the temperature gradient method. *Abstracts of the Eleventh Conference of Young Scientists and Specialists «Superhard, Composite Materials and Coatings: Production, Properties, Application» May 28–29, 2020 Kyiv 22–3.* Kyiv: ISM NASU.
13. Turkevych V.Z., Rumiantseva Yu.Yu., Sadova Yu.I., Kushch O.V., Hladkyi I.O., Turkevych D.V. Thermodynamic calculations of the Fe–Ga–N melting diagram in the context of gallium nitride crystallization under high temperatures and pressures. *J. Superhard Mater.* 2022. Vol. 44. P. 73–78.
14. Lyeshchuk O. Computational modeling of superhard materials synthesis. *Comp. Mater. Sci.* 2010. Vol. 49, N 1S. P. S85–S94.
15. Lyeshchuk O.O., Polotniak S.B., Novikov M.V. Thermomechanical approach to the modeling of HP–HT material processing. *J. Phys. Conf. Ser.* 2012. Vol. 377. 012095.

16. Li R., Zheng G., Liu Y., Wang M., Chen P., Chen M., Zhang Q. Finite element design of a temperature field for high-pressure diamond synthesis. *Diam. Relat. Mater.* 2016. Vol. 69. P. 133–137.
17. Li Y., Wang C., Chen N., Chen L., Guo L., Jia X., Ma H. Significant improvement of multi-seed method of diamond synthesis by adjusting the lateral cooling water temperature. *Cryst. Eng. Comm.* 2017. Vol. 19. P. 6681–6685.
18. Li R., Ding M., Shi T. Finite element design for the HPHT synthesis of diamond. *J. Cryst. Growth.* 2018. Vol. 491. P. 111–115.
19. Dutka V.A., Maystrenko A.L., Borymskyi O.I., Kulich V.G., Kosenchuk T.O. Modeling the temperature field in a high-pressure apparatus during the sintering of large-sized products based on boron carbide. *J. Superhard Mater.* 2020. Vol. 42. P. 240–250.
20. Liudvichenko O.P., Lyeshchuk O.O., Petruscha I.A. Effect of the concentration of components and the size of heaters on the thermal state of a high-pressure cell to study the solubility of gallium nitride in iron. *Ibid.* 2023. Vol. 45, N 2. P. 83–92.
21. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники: справ. М.: Атомиздат, 1968. 380 с.
22. Chen W., Decker D.L. Pressure dependence of the thermal conductivity of pyrophyllite to 40 kbar. *J. Appl. Phys.* 1992. Vol. 71, N 6. P. 2624–2627.
23. *Thermophysical Properties of Materials for Nuclear Engineering: A Tutorial and Collection of Data.* 2008 (Vienna: International Atomic Energy Agency).
24. Савицький О.В., Лисаковський В.В. Електропровідність графітових деталей резистивного нагрівання, виготовлених шляхом пресування. *Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения.* Сб. науч. тр. Вып. 21. К.: ИСМ им. В.Н. Бакуля НАН Украины, 2018. С. 295–300.
25. Carte A.E. Thermal constants of pyrophyllite and their change on heating. 1955. *Br. J. Appl. Phys.* Vol. 6. P. 326–328.
26. Parchovianský M., Galusek D., Švančárek P., Sedláček J., Šajgalík P. Thermal behavior, electrical conductivity and microstructure of hot pressed Al₂O₃/SiC nanocomposites. *Ceram. Int.* 2014. Vol. 40, N 9. P. 14421–14429.
27. Molodets A.M., Golyshev A.A. Thermal conductivity of indium at high pressures and temperatures under shock compression. *Phys. Solid State.* 2009. Vol. 51, N 2. P. 226–229.
28. Glagoleva Y.V., Polev V.F., Gorbatov V.I., Ivliev A.D., Kurichenko A.A., Taluts S.G., Korshunov I.G. Thermal and kinetic properties of cobalt-chromium alloys at high temperatures. *Phys. Met. Metallogr.* 2009. Vol. 107, N 3. P. 254–261.
29. Secco R.A., Schloessin H.H. The electrical resistivity of solid and liquid Fe at pressures up to 7 GPa. *J. Geophys. Res. Solid Earth.* 1989. Vol. 94, N B5. P. 5887–5894.
30. Wang Y., Yang F., Shen C., Yang J., Hu X., Fei Y. Electrical Resistivity and Phase Evolution of Fe–N Binary System at High Pressure and High Temperature. *Minerals.* 2024. Vol. 14, N 5. P. 467.
31. Будяк А.А. Расчет теплового поля в реакционной ячейке АВД методом поэтапного моделирования. *Сверхтвердые материалы.* 1994. № 3. С. 11–16.

Надійшла 15.09.25

References

1. Amano, H., Kito, M., Hiramatsu, K. & Akasaki, I. (1989). Growth of low dislocation density GaN using low-temperature deposited buffer layer. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 28(2, 12), L2112–L2114.

2. Nakamura, S., Mukai, T., Senoh, M. & Iwasa, N. (1992). Thermal annealing effects on p-type Mg-doped GaN films. *Ibid*, 31(2, 2A), L139–L142.
3. Monemar, B., Larsson, H., Hemmingsson, C., et al. (2005) Growth of thick GaN layers with hydride vapour phase epitaxy. *J. Cryst. Growth*, 281(1), 17–31.
4. Mukai, T., Takekawa, K. & Nakamura, S. (1998). InGaN-based blue light-emitting diodes, grown on epitaxially laterally overgrown GaN substrates. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 37(7B), L839.
5. Boćkowski, M. & Grzegory, I. (2022). Recent progress in crystal growth of bulk GaN. *Acta Phys. Pol. A*, 141(3), 167.
6. Inoue, T., Seki, Y., Oda, O., et al. (2001). Growth of bulk GaN single crystals by the pressure-controlled solution growth method. *J. Cryst. Growth*, 229(1-4), 35–40.
7. Shen, X.P., Lin, J.B., Hu, R.Y., et al. (2024). Compositional effects on structural, electronic, elastic, piezoelectric and dielectric properties of GaInN alloys: a first-principles study. *RSC Adv.*, 14(10), 6752–6761.
8. Kuwahara, Y., Fujii, T., Sugiyama, T., et al. (2011). GaInN-based solar cells using strained-layer GaInN/GaN superlattice active layer on a freestanding GaN substrate. *Appl. Phys. Express*, 4(2), 021001.
9. Li, K., Wu, H.H., Lu, Y.Z., et al. (2025). Strain-Engineered electronic and optical properties of 2D In_xGa_{1-x}N: A first-principles study. *Comput. Mater. Sci.*, 258, 114047.
10. Ivakhnenko, S.A (1991). Some aspects of diamond crystallization under high pressures *High Pres. Res.*, 7, 183–187.
11. Petrusha, I.A., Sadovyi, B.S., Sadovyi, P.S., et al. (2021). Investigation of GaN behavior in contact with Fe, Fe₂₋₄N and Co/Cr at high pressures and high temperatures. *Tooling Materials Science*, 24, 312–325.
12. Rumiantseva, Yu.Yu., Savitskyi, O.V. & Sadova, Yu.I. (2020). GaN crystallization by the temperature gradient method. *Abstracts of the Eleventh Conference of Young Scientists and Specialists «Superhard, Composite Materials and Coatings: Production, Properties, Application»* May 28–29, 2020 Kyiv 22–3. ISM NASU.
13. Turkevych, V.Z., Rumiantseva, Yu.Yu., Sadova, Yu.I., et al. (2022). Thermodynamic calculations of the Fe–Ga–N melting diagram in the context of gallium nitride crystallization under high temperatures and pressures. *J. Superhard Mater.*, 44, 73–78.
14. Lyeshchuk, O. (2010). Computational modeling of superhard materials synthesis. *Comput. Mater. Sci.*, 49(1S), S85–S94.
15. 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.
16. Li R., Zheng, G., Liu, Y., et al. (2016). Finite element design of a temperature field for high-pressure diamond synthesis. *Diam. Relat. Mater.*, 69, 133–137.
17. Li, Y., Wang, C., Chen, N., et al. (2017). Significant improvement of multi-seed method of diamond synthesis by adjusting the lateral cooling water temperature. *Cryst. Eng. Comm.*, 19, 6681–6685.
18. Li, R., Ding, M. & Shi, T. (2018). Finite element design for the HPHT synthesis of diamond. *J. Cryst. Growth*, 491, 111–115.
19. Dutka, V.A., Maystrenko, A.L., Borymskyi, O.I., et al. (2020). Modeling the temperature field in a high-pressure apparatus during the sintering of large-sized products based on boron carbide. *J. Superhard Mater.*, 42, 240–250.
20. Liudvichenko, O.P., Lyeshchuk, O.O. & Petrusha, I.A. (2023). Effect of the concentration of components and the size of heaters on the thermal state of a high-pressure cell to study the solubility of gallium nitride in iron. *Ibid*, 45(2), 83–92.

21. Chirkin, V.S. (1968). *Teplofizicheskie svoistva materialov yadernoi tekhniki: sprav. [Thermophysical Properties of Nuclear Engineering Materials: ref. book]*. Atomizdat [in Russian].
22. Chen, W., & Decker, D.L. (1992). Pressure dependence of the thermal conductivity of pyrophyllite to 40 kbar. *J. Appl. Phys.*, 71(6), 2624–2627.
23. (2008). *Thermophysical Properties of Materials for Nuclear Engineering: A Tutorial and Collection of Data*. International Atomic Energy Agency.
24. Savytskyi, O.V., & Lysakovskiy, V.V. (2018). Elektroprovodnist hrafitovykh detalei rezystyvnoho nahrivannia, vyhotovlenykh shlyakhom presuvannia [Electrical conductivity of resistive heating graphite parts made by pressing]. *Porodorazrushaiushchii i metalloobrabatyvaiushchii instrument – tekhnika i tekhnologiya eho izhotovleniia i primeneniia – Rock Destruction and Metal-Working Tools – Techniques and Technology of the Tool Production and Applications* (21st Issue, p. 295–300). ISM im. V.N. Bakulia, NAN Ukrainy [in Ukrainian].
25. Carte, A.E. (1955). Thermal constants of pyrophyllite and their change on heating. *Br. J. Appl. Phys.*, 6, 326–328.
26. Parchovianský, M., Galusek, D., Švančárek, P., et al. (2014). Thermal behavior, electrical conductivity and microstructure of hot pressed Al₂O₃/SiC nanocomposites. . 40(9), 14421–14429.
27. Molodets, A.M., & Golyshev, A.A. (2009) Thermal conductivity of indium at high pressures and temperatures under shock compression. *Phys. Solid State*, 51(2), 226–229.
28. Glagoleva, Y.V., Polev, V.F., Gorbatov, V.I., et al. (2009). Thermal and kinetic properties of cobalt-chromium alloys at high temperatures. *Phys. Met. Metallogr.*, 107(3), 254–261.
29. Secco, R.A., & Schloessin, H.H. (1989). The electrical resistivity of solid and liquid Fe at pressures up to 7 GPa. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 94(B5), 5887–5894.
30. Wang, Y., Yang, F., Shen, C., et al. (2024). Electrical Resistivity and Phase Evolution of Fe–N Binary System at High Pressure and High Temperature. *Minerals*, 14(5), 467.
31. Budiak, A.A. (1994). Raschet teplovoho polia v reaktsionnoi yacheike AVD metodom poetapnoho modelirovaniia [Calculation of the thermal field in the HPA reaction cell using step-by-step modeling]. *Sverkhtverdye materialy – Superhard Materials*, (3), 10–15 [in Russian].