

DOI: [https://doi.org/10.26642/ten-2023-1\(91\)-57-66](https://doi.org/10.26642/ten-2023-1(91)-57-66)  
УДК 661.868.1:004.94:62-987

О.П. Людвіченко, аспірант  
О.О. Лещук, д.т.н.  
С.О. Гордєєв, к.т.н.

Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України

## Моделювання теплового стану комірки апарата високого тиску при вирощуванні кристалів нітриду галію

З використанням методу скінченних елементів досліджено тепловий стан спеціально сконструйованої комірки апарата високого тиску типу «тороїд-40» для проведення експериментів з вирощування кристалів нітриду галію методом температурного градієнта. Досліджено вплив зміни концентрації складу нагрівачів на тепловий стан комірки високого тиску. Визначено, що однакова концентрація графіту у верхньому і нижньому торцевих нагрівачах призводить до відхилення від бажаної горизонтальної орієнтації ізоліній температури у ростовому об'ємі. За умови, коли концентрація графіту у нижньому нагрівачі більша за концентрацію у верхньому, і ця різниця перевищує 4 % за масою, топологія температурних полів набуває горизонтальної орієнтації, але це призводить до неприйнятної збільшення осевого градієнта температури. Сприятливі умови для синтезу кристалів GaN (за параметрами градієнта і топології ізоліній температури) створюються за умови, коли концентрація графіту у нижньому нагрівачі змінюється в інтервалі 9–11 %, а у верхньому – менша на 2–3 % за масою. В результаті дослідження впливу кристалізованої фази GaN на розподіл температури у зразку Fe–GaN отримано зменшення температури в контрольних точках ростового об'єму (до 5 °C). Побудовано залежність максимального перепаду температури у ростовому об'ємі від розміру зони кристалізації.

**Ключові слова:** нітрид галію; висока температура; високий тиск; апарат високого тиску (АВТ); комірка високого тиску (КВТ); метод скінченних елементів (МСЕ).

**Актуальність теми.** Сполуки типу  $A^{III}B^V$ , хоча і є аналогами кремнію і германію, але їх властивості перевершують притаманні традиційним напівпровідникам. Зокрема, з використанням нітриду галію, що є прямозонним напівпровідником з шириною забороненої зони 3,4 еВ, можливо створювати більш потужні, меншого розміру, економічні, енергоєфективні, екологічні, резистивні до іонізуючого опромінення прилади, здатні працювати при температурах до 300 °C. На сьогодні GaN-елементну базу використовують в електроніці і оптоелектроніці (надвисокочастотні твердотільні прилади великої потужності, твердотільне освітлення). Більшість GaN-приладів комерційного призначення в даний час виробляють епітаксіальними методами на підкладках із кремнію, карбід кремнію та сапфіру. До переваг використання сторонніх підкладок належать їх висока якість і низька собівартість. Недоліком гетероепітаксіального методу є невідповідність властивостей підкладки та епітаксіальних шарів: неспівпадіння параметрів кристалічних ґраток, коефіцієнтів теплового розширення, можлива наявність хімічної несумісності між підкладкою і нарощуваним шаром, що призводить до появи дефектів і швидкої деградації експлуатаційних характеристик приладу. Поліпшити споживчі властивості приладів на основі GaN можна використанням власних підкладок, що забезпечить якість і температурні режими роботи приладу, які важко одержати іншими методами. Створення технології виробництва GaN-підкладок високої якості і низької собівартості є актуальним питанням.

**Аналіз останніх досліджень та публікацій.** Перспективною технологією отримання кристалів GaN для використання як підкладок для гомоепітаксіального нарощування є метод температурного градієнта, що реалізують в умовах високих тисків і температур. За аналогією із кристалізацією алмазу з розчину вуглецю в розплаві металу в Інституті надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України здійснили дослідження перекристалізації GaN із багатокомпонентної розчин-розплавної системи Fe–Ga–N-в КВТ. В [1] вивчено умови кристалізації GaN із його розчину у розплаві заліза в АВТ та описано поведінку системи Fe–GaN за тиску 6–8 ГПа і температури 1500–2000 °C. Зроблено висновок про можливість і доцільність використання АВТ типу «тороїд» для вивчення розчинності нітриду галію у залізі. Існування принципової можливості отримання кристалів GaN в умовах високих тисків і температур доведено в [2]. При проектуванні КВТ необхідне попереднє отримання даних з розподілу температури у ростовому об'ємі камери. Робоча температура в АВТ досягається прямим пропусканням електричного струму і утримується завдяки балансу потужності джерел джоулевого тепла і тепловідводу в системі охолодження апарата [3]. Задача електронагрівання АВТ вирішується МСЕ, оскільки її аналітичне розв'язання неможливе, а проведення експериментів по визначенню теплових параметрів системи неприйнятно трудомістке і довготривале. Універсальність МСЕ дозволяє аналізувати вплив концентрації

складу і розмірів електрорезистивних елементів і елементів теплоізоляції на тепловий стан АВТ, що суттєво допомагає уникати помилок під час проєктування і модернізації КВТ. Роботи [4–12] присвячені розрахунку полів електричного потенціалу і температури в АВТ різних типів з використанням МСЕ.

В [13–14] були визначені умови нагрівання КВТ апарата «тороїд-30», що приводять до плавлення зразка заліза у контакті із нітридом галію і розчинення GaN у Fe за тиску 6–8 ГПа і температури 1500–2000 °С.

**Метою статті** є дослідження теплового стану КВТ при проведенні експериментів по синтезу кристалів нітриду галію з використанням методу температурного градієнта. Отримані дані з розподілу температури і топології її ізоліній дозволяють оптимізувати параметри електрорезистивного нагрівання КВТ за допомогою внесення змін у розміри і композиційний склад струмопровідних і електрорезистивних елементів АВТ.

**Викладення основного матеріалу. Постановка завдання.** Для отримання даних з розподілу температури в АВТ, з огляду на принцип роботи апарата, необхідне розв'язання зв'язаної задачі електро- і теплопровідності. Система нелінійних рівнянь для характеристики теплового стану АВТ у випадку його стаціонарного електрорезистивного нагрівання і відсутності електричних зарядів виглядає так:

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

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

де  $\chi$  – коефіцієнт електропровідності;  $T$  – температура;  $\varphi$  – потенціал електричного поля;  $\lambda$  – коефіцієнт теплопровідності;  $\chi(T)|\operatorname{grad}\varphi|^2$  – питома потужність джерел Джоулевого тепла. Для розв'язання рівнянь (1–2) задають такі граничні умови:

$$\varphi = \varphi_{S_\varphi}, \quad (3)$$

$$T = T_{S_T}, \quad (4)$$

$$\mathbf{n} \cdot \lambda(T)\operatorname{grad}T = -\alpha_{S_\alpha}(T - \theta), \quad (5)$$

де  $S_\varphi$ ,  $S_T$ ,  $S_\alpha$  – відповідно граничні поверхні, на яких задаються значення електروпотенціалу, температури та умови конвекційного теплообміну;  $\mathbf{n}$  – вектор одиничної нормалі до  $S_\alpha$ ;  $\alpha_{S_\alpha}$  – коефіцієнт тепловіддачі;  $\theta$  – температура зовнішнього середовища.

Беручи до уваги діапазон температур, за яких проводять синтез матеріалів в АВТ, при моделюванні теплового стану комірки варто враховувати температурну залежність матеріалів, що використовуються. В [13] проаналізовано поширення на електро- і теплофізичні властивості матеріалів, використаних для дослідження розчинності нітриду галію в залізі. Також при моделюванні скористалися даними по терморозширеному графіту, отриманими із [15–16].

Електро- і теплофізичні властивості композиційних матеріалів елементів КВТ (хлорид цезію + графіт, діоксид цирконію + графіт, хлорид цезію + діоксид цирконію, залізо + нітрид галію) визначали за теорією стохастичних неоднорідних матеріалів, аналогічно до [3, 13, 14]. Згідно з цією моделлю коефіцієнт теплопровідності  $N$ -компонентної суміші визначають таким:

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

де  $x_i^V$  – об'ємна концентрація  $i$ -ї фази;  $\lambda_i$  – 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

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

Для розв'язання системи зв'язаних нелінійних рівнянь (1–5) скористалися МСЕ. З метою отримання достовірних розрахункових значень як програмним забезпеченням скористалися власною розробкою [6] авторів і пакетом ANSYS.

Комірка АВТ типу «тороїд-30», на якому проводили дослідження розчинності GaN у Fe [13], непридатна для ефективного застосування метода температурного градієнта, тому використовували АВТ типу «тороїд-40». З огляду на осьову симетрію АВТ зв'язану задачу електрорезистивного нагрівання розв'язували в осесиметричній постановці. Розрахункові схеми АВТ і КВТ у вигляді половин осьового перерізу представлено на рисунках 1–2 відповідно. Граничні умови задавали такими (рис. 1): потенціал електричного поля  $\varphi_{AB} = 3,18$  В,  $\varphi_{IJ} = 0$  В, температура  $T_{AB} = T_{IJ} = 40$  °С (виміряно експериментально). На поверхнях  $BC$ ,  $DE$ ,  $FG$ ,  $HI$  задавали умови конвективного теплообміну апарата з повітрям, на поверхнях  $CD$ ,  $GH$  – з водою [13] (коефіцієнт тепловіддачі  $\alpha_{BC} = \alpha_{DE} = \alpha_{FG} = \alpha_{HI} = 50$  Вт/(м<sup>2</sup>·°С),  $\alpha_{CD} = \alpha_{GH} = 7600$  Вт / (м<sup>2</sup>·°С), температура оточуючого середовища  $\theta = 20$  °С).

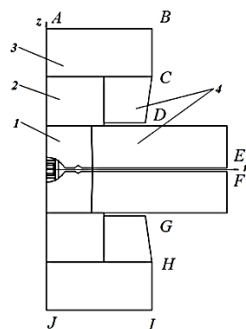


Рис. 1. Розрахункова схема АВТ типу «тороїд-40»: 1 – матриця (ВК6); 2 – опорна плита (ВК15); 3 – підкладна плита (35ХГСА); 4 – скріплюючі кільця (35ХГСА)

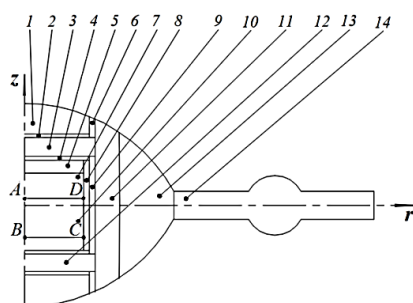


Рис. 2. КВТ для проведення експериментів з вирощування кристалів нітриду галію методом температурного градієнта: 1 – теплоізоляційний диск (хлорид цезію + графіт); 2, 4 – струмопровідні диски (терморозширений графіт); 3, 12 – торцеві нагрівачі (діоксид цирконію + графіт); 5, 8 – елементи ізоляції (хлорид цезію + діоксид цирконію); 6 – струмопідвід (графіт); 7 – джерело нітриду галію; 9 – трубчастий нагрівач (графіт); 10 – ростовий об'єм (залізо + нітрид галію); 11 – зовнішній теплоізоляційний елемент (хлорид цезію + графіт); 13 – контейнер (літографський камінь); 14 – заусенець (пресований кальцит); А–D – характерні точки

Складові елементи спорядження КВТ (рис. 2) мають таке призначення. Теплоізоляційний диск 1 – зменшення теплового навантаження на матрицю АВТ. Струмопровідні диски 2, 4 – поліпшення електричного контакту між струмопровідними елементами, а також сприяння горизонтальній орієнтації ізоліній температури. Торцеві нагрівачі 3, 12 – допоміжні композиційні резистивні елементи, що за рахунок зміни концентрації графіту змінюють свої електрорезистивні властивості, і відповідно впливають на топологію ізоліній і градієнт температури у ростовому об'ємі. Ізоляційний контейнер 5, 8 – захист ростового об'єму від хімічно активного графіту. Трубчастий нагрівач 9 – досягнення робочих значень температури у ростовому об'ємі. Контейнер 13 – зменшення теплового потоку з центральної зони комірки. Заусенець 14 – ущільнення зони високого тиску.

На рисунку 3 представлено сітку елементів для АВТ і КВТ. В [14] досліджено збіжність і обґрунтовано вибір ступеня скінченно-елементної дискретизації стосовно цього типу апарата.

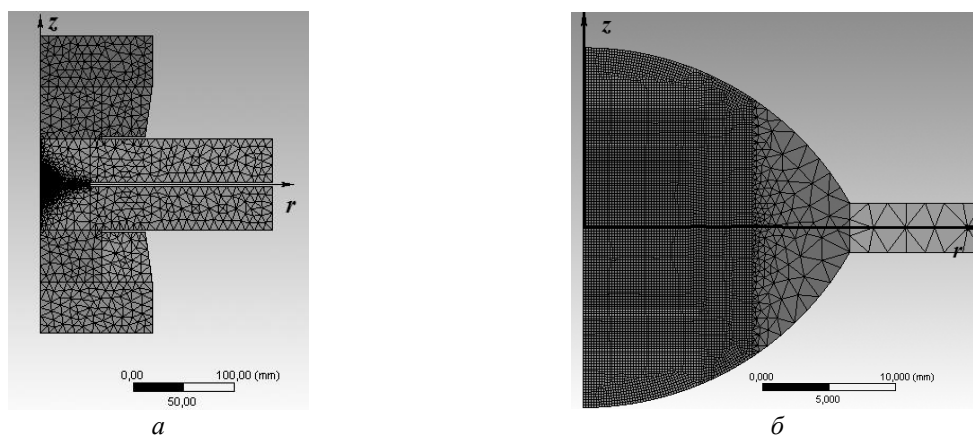


Рис. 3. Скінченно-елементна сітка для АВТ (а) і КВТ (б)

**Результати обчислень.**

**Тепловий стан КВТ при зміні концентрації графіту в торцевих нагрівачах.**

Для забезпечення бажаного теплового стану у ростовому об'ємі (температура в контрольній точці *B* (рис. 2) – 1500 °С, осьовий градієнт температури – до 10 °С/мм, наближена до горизонтальної орієнтація ізоліній температури), за якого виконуються умови кристалізації у розчин-розплавній системі Fe–Ga–N нітриду галію, змінювали значення концентрації графіту у верхньому і нижньому торцевих нагрівачах. Зробили три серії розрахунків: при постійній концентрації графіту 7 % по масі у верхньому нагрівачі у нижньому змінювали концентрацію від 7 до 14 % (з кроком 1 %); при постійній концентрації графіту 8 % у верхньому нагрівачі у нижньому змінювали концентрацію від 8 до 14 %; при постійній концентрації графіту 9 % у верхньому нагрівачі у нижньому змінювали концентрацію від 9 до 14 %. Подібний підхід дозволив з'ясувати, яким чином впливає наявність різниці у концентраціях графіту у верхньому і нижньому нагрівачах на поле температури у ростовому об'ємі.

На рисунку 4 представлено розподіл температури у ростовому об'ємі для чотирьох різних значень концентрації графіту у нижньому нагрівачі і фіксованому значенні графіту у верхньому (8 % по масі).

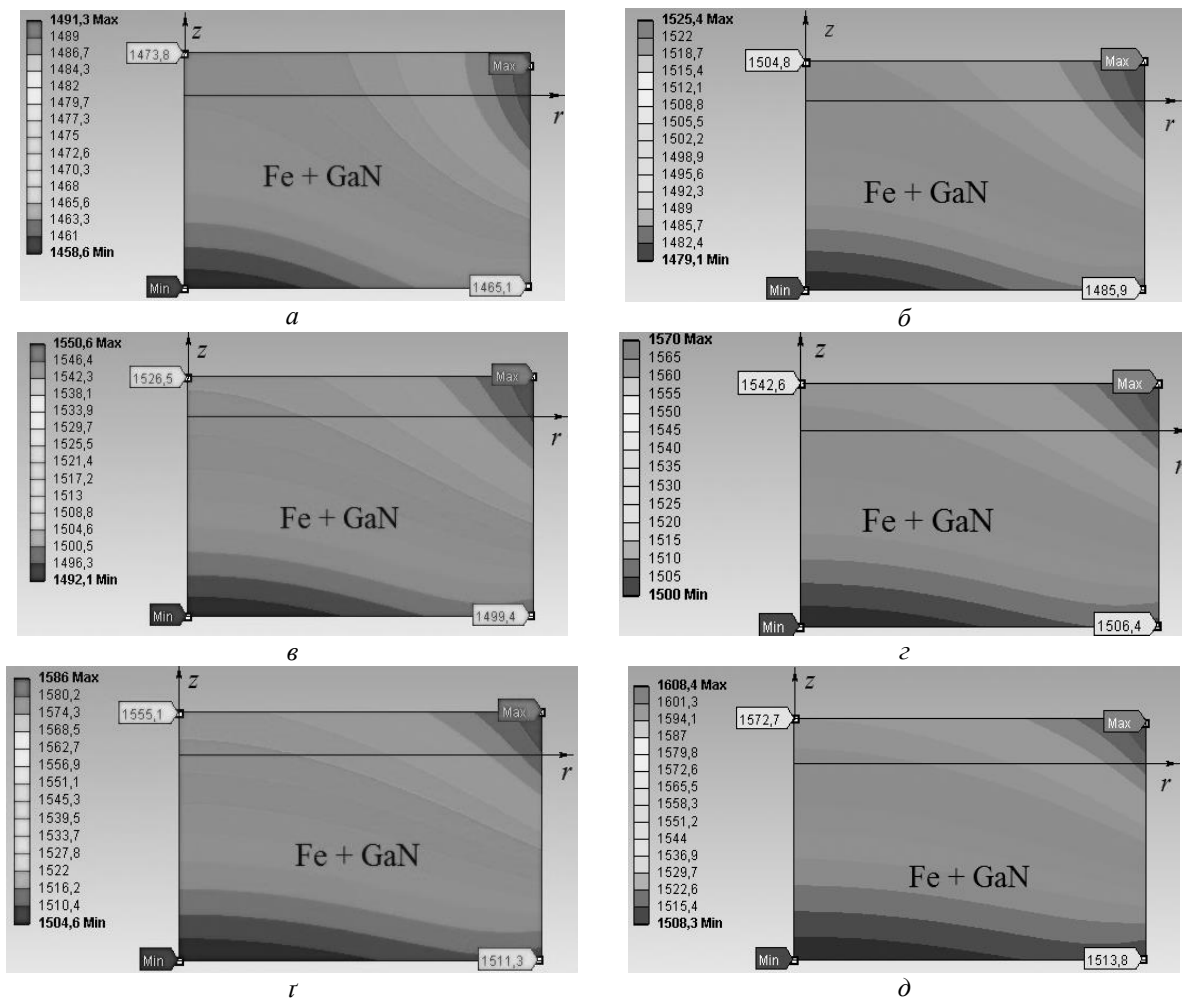


Рис. 4. Температурні поля (°С) у ростовому об'ємі за постійної концентрації графіту (8 % по масі) у верхньому нагрівачі за концентрації графіту у нижньому нагрівачі 8 (а), 9 (б), 10 (в), 11 (г), 12 (д) і 14 % (е)

За результатами розрахунків побудовано графіки зміни температури в контрольних точках *A* і *B* (рис. 5) та *B* і *C* (рис. 6) ростового об'єму. На рисунках 7–9 – перепади температури в осьовому, радіальному (між точками *B* і *C*) напрямках та максимальний перепад відповідно.

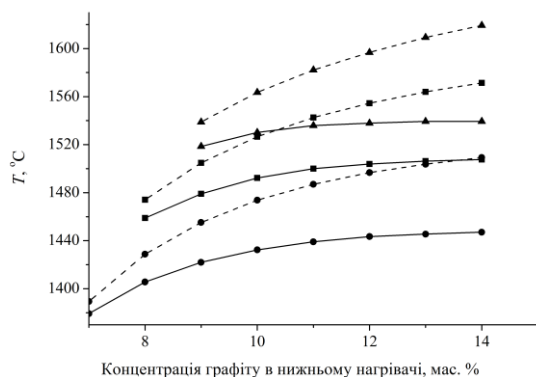


Рис. 5. Зміна температури в контрольних точках A (---) і B (—) ростового об'єму за концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 (●), 8 (■) і 9 % (▲)

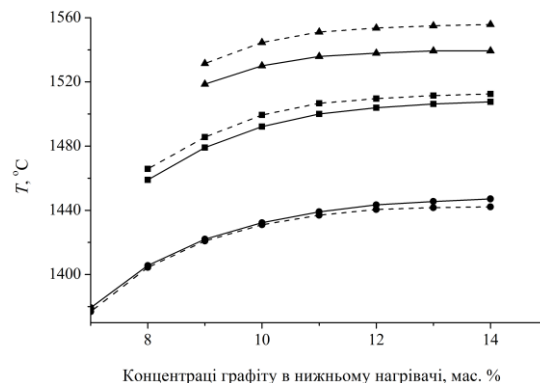


Рис. 6. Зміна температури в контрольних точках B (—) і C (---) ростового об'єму за концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 (●), 8 (■) і 9 % (▲)

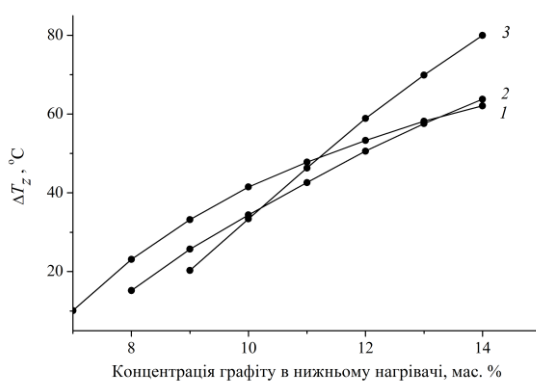


Рис. 7. Осьовий перепад температури (1 – концентрація у верхньому нагрівачі 7 %, 2–8 %, 3–9 %)

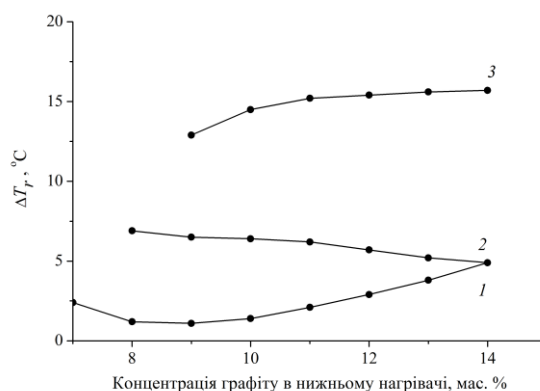


Рис. 8. Радіальний перепад температури (1 – концентрація у верхньому нагрівачі 7 %, 2–8 %, 3–9 %)

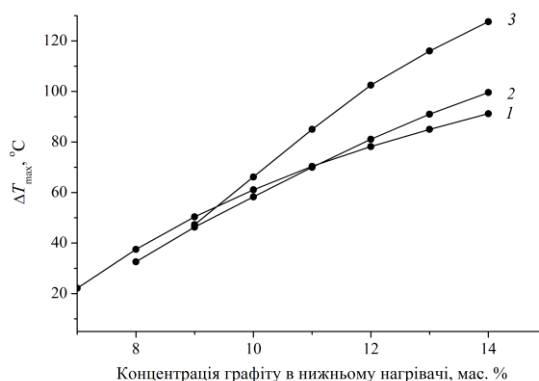


Рис. 9. Максимальний перепад температури в досліджуваному зразку (1 – концентрація у верхньому нагрівачі 7 %, 2–8 %, 3–9 %)

Користуючись графіками на рисунках 7–9, можна обрати значення концентрації графіту в нагрівачах, які забезпечать необхідні осьовий і радіальний перепади температури. Із досвіду отримання синтетичних алмазів відомо, що для отримання якісних кристалів осьовий градієнт температури має бути до 10 °C/мм, а радіальний – мінімально можливим. Також ізолнії температури в ростовому об'ємі мають бути горизонтально орієнтованими. Із аналізу графіків на рисунках 7, 9 випливає, що при концентрації графіту у верхньому нагрівачі 9 % за масою (крива 3) відбувається різке зростання осьового та максимального перепадів температури залежно від концентрації графіту у нижньому нагрівачі. Радіальний перепад температури не суттєво реагує на зміну концентрації графіту у нижньому нагрівачі, разом з тим має місце його суттєва залежність від концентрації графіту у верхньому нагрівачі. Мінімальні значення

радіального перепаду температури (рис. 8, крива 1) відповідають концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 % за масою. Аналізуючи температурні поля на рисунку 4, а і графіки на рисунках 7, 9, можна зробити висновок, що за однакової концентрації графіту в нагрівачах не виконується умова горизонтальної орієнтації ізоліній температури; збільшення різниці між концентраціями графіту в нагрівачах на 4 % за масою і більше призводить до суттєвого росту осьового перепаду температури; при різниці між концентраціями у 2–3 % за масою – розрахункові умови оптимальні.

При концентраціях графіту у верхньому нагрівачі 7 % за масою і у нижньому 9 % (рис. 10, а) значення осьового і радіального градієнтів температури відповідно становлять 6,32 і 0,16 °C/мм; при концентраціях 7 і 10 % (рис. 10, б) – 7,88 і 0,18 °C/мм; при концентраціях 8 і 10 % (рис. 4, б) – 6,6 і 0,81 °C/мм; при концентраціях 8 і 11 % (рис. 4, з) – 8,19 і 0,78 °C/мм (розміри реакційного об'єму: радіус – 7,9 мм, висота – 5,2 мм).

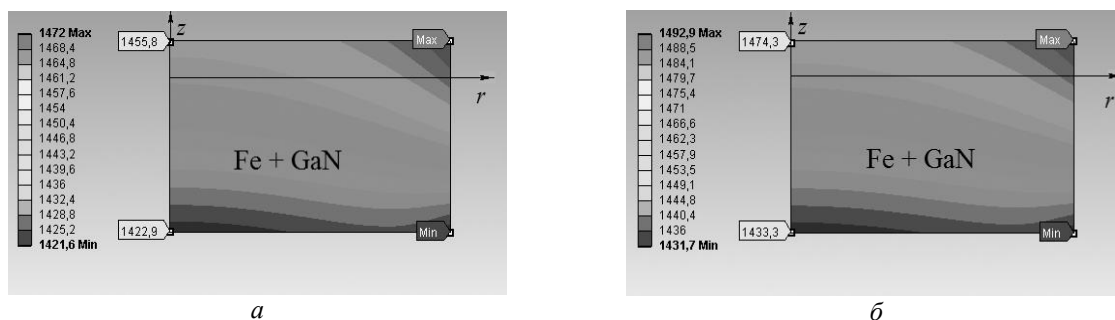


Рис. 10. Температурні поля (°C) у ростовому об'ємі за напруги  $\varphi=3,18$  В і концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 % та нижньому нагрівачі 9 (а) і 10 (б) % по масі

Розрахунки показали, що при зменшенні концентрації графіту у верхньому нагрівачі з 8 до 7 % по масі відбувається суттєве падіння температури в контрольних точках (рис. 10). Тому для коректного порівняння значень градієнтів температури розрахунки проводили за напруги  $\varphi = 3,29$  В при концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 % і нижньому 9 %, а також за напруги  $\varphi = 3,27$  В при концентрації графіту у нагрівачах 7 % і 10 % відповідно (рис. 11). За цих напруг температура в контрольній точці В ростового об'єму становить 1500 °C при відповідних значеннях концентрації графіту у нагрівачах.

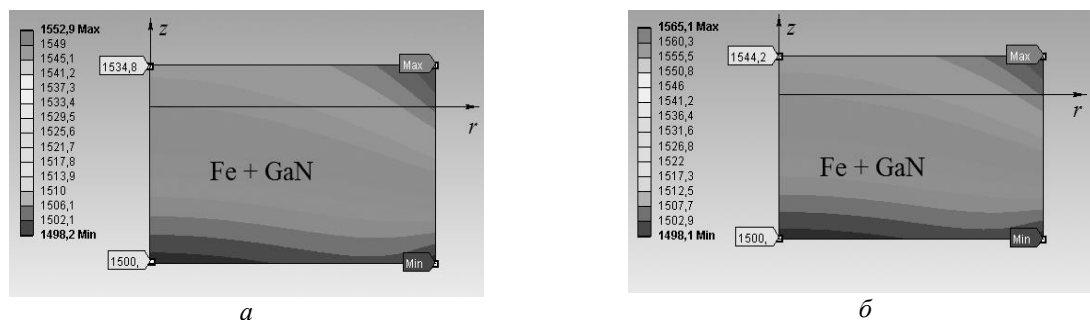


Рис. 11. Температурні поля (°C) у ростовому об'ємі: а – за напруги  $\varphi = 3,29$  В і концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 % і нижньому 9 % по масі; б – за напруги  $\varphi = 3,27$  В і концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 % і нижньому 10 % по масі

Таким чином, розраховані осьовий і радіальний градієнти температури становлять: 6,69 і 0,23 °C/мм при концентрації графіту у верхньому нагрівачі 7 % і у нижньому 9 % за масою; 8,5 і 0,24 °C/мм при відповідних значеннях концентрації 7 і 10 %. З огляду на значення градієнтів температури і аналізу температурних полів на рисунку 11 оптимальним є значення концентрації графіту 7 і 9 % за масою у верхньому і нижньому нагрівачах відповідно.

#### Дослідження зміни теплового стану ростового об'єму при кристалізації GaN

Розрахунки проведено за умови, що концентрація графіту у нижньому нагрівачі 12 (рис. 2) – 11 %, у верхньому – 3–8 % (за масою). На рисунку 12 стрілками вказано напрямок руху границі кристалізованого GaN в осьовому і радіальному напрямках. Дуга EF моделює границю утворення GaN, має радіус 16 мм ( $BE = 0,25$  мм) і збігається з ізотермою. Покрокове збільшення радіуса дуги на 0,25 мм моделює зростання зони кристалізації GaN до дуги GH з радіусом 17,75 мм ( $BG = 2$  мм). Схему дискретизації ростового об'єму на скінченні елементи з урахуванням нової фази наведено на рисунку 13.

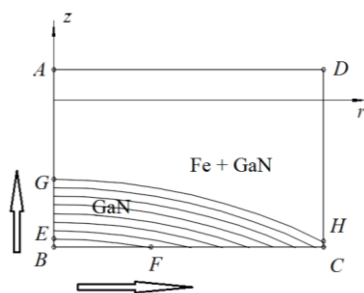


Рис. 12. Міжфазні границі при кристалізації GaN

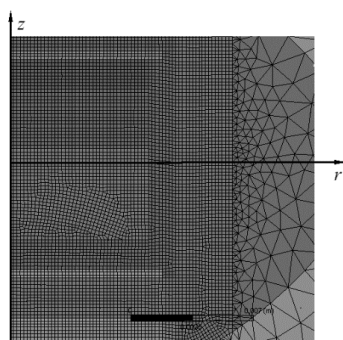
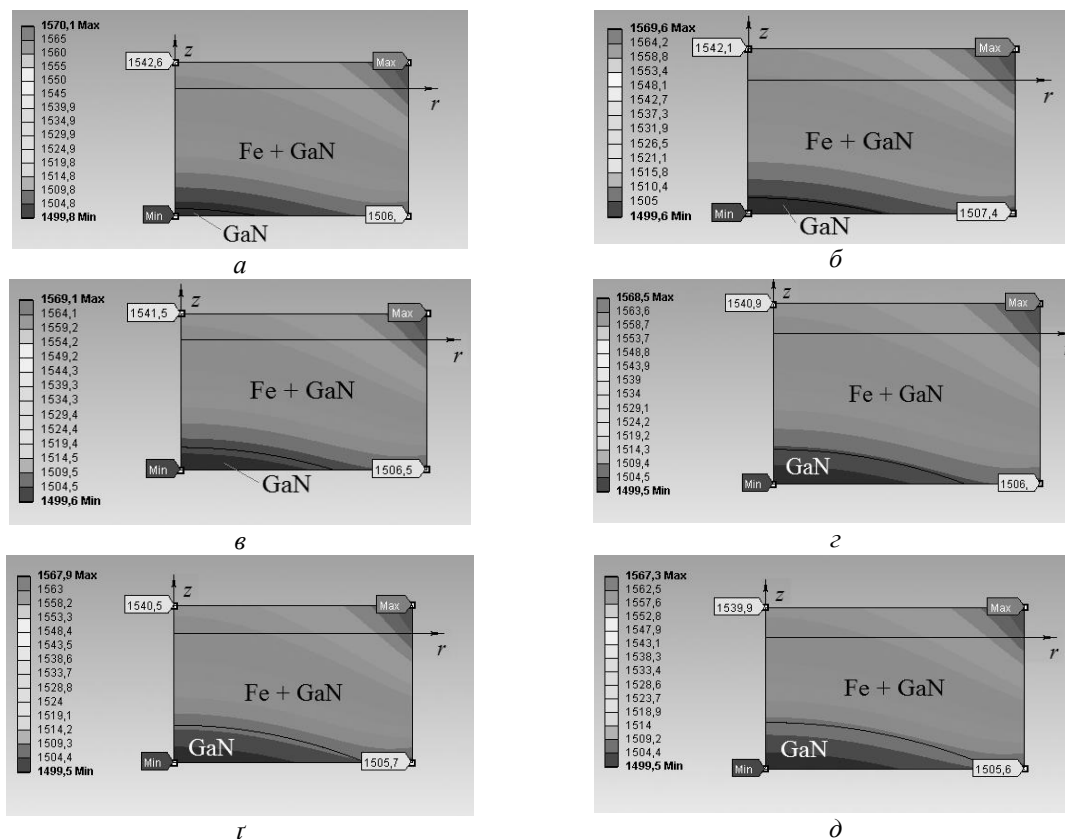


Рис. 13. Схема дискретизації комірки АВТ з кристалізованим GaN

Для восьми поступово зростаючих положень зони кристалізації GaN розраховано стаціонарні температурні поля у ростовому об'ємі КВТ (рис. 14). За результатами розрахунків побудовано графіки зміни температури в характеристичних точках (рис. 15) і максимального перепаду температури у ростовому об'ємі (рис. 16). Утворення і зростання зони кристалізації GaN веде до незначного лінійного зменшення температури в характеристичних точках. Падіння температури в контрольних точках A–D становлять:  $\Delta T_A = 4,9 \text{ }^\circ\text{C}$ ;  $\Delta T_B = \Delta T_C = 0,6 \text{ }^\circ\text{C}$ ;  $\Delta T_D = 4,7 \text{ }^\circ\text{C}$ . У ростовому об'ємі без урахування впливу кристалізованої фази GaN  $\Delta T_{\text{max}} = 70,4 \text{ }^\circ\text{C}$ , а при змодельованому максимальному об'ємі кристалізованої фази GaN  $\Delta T_{\text{max}} = 66,5 \text{ }^\circ\text{C}$  (зменшення максимуму температурного перепаду має нелінійний характер).





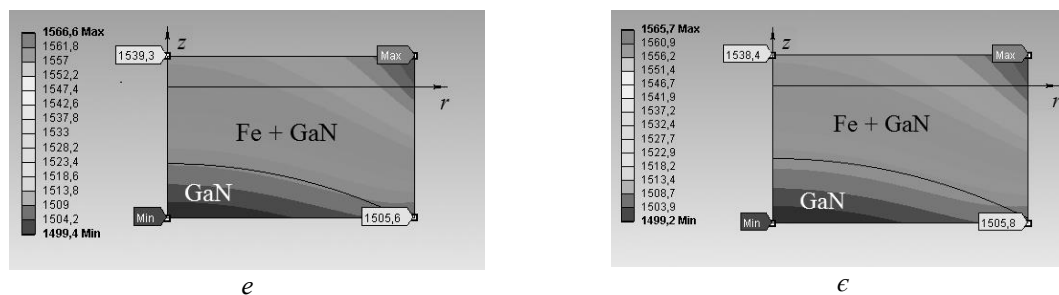


Рис. 14. Температурні поля у ростовому об'ємі КВТ при зростанні зони кристалізації GaN (а–є)

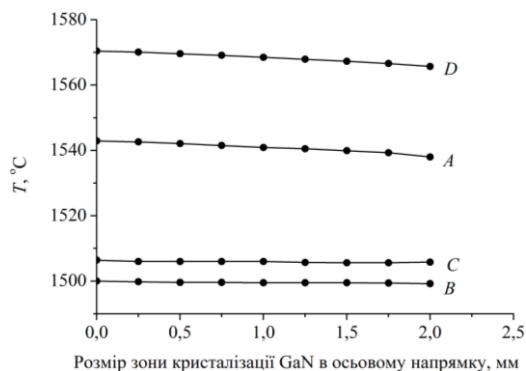


Рис. 15. Зміна температури в характеристичних точках ростового об'єму при зростанні зони кристалізації GaN

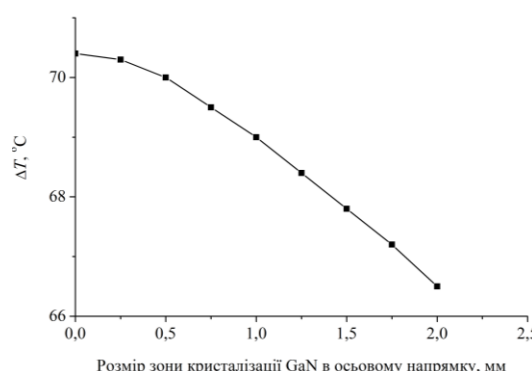


Рис. 16. Зміна максимального перепаду температури у ростовому об'ємі при зростанні зони кристалізації GaN

**Висновки та перспективи подальших досліджень.**

1. Розроблено методику моделювання електрорезистивного нагрівання АВТ, яка використана для аналізу теплового стану комірки АВТ типу «тороїд-40» під час проведення експериментів з вирощування кристалів нітриду галію методом температурного градієнта з урахуванням температурних залежностей провідних властивостей елементів АВТ і ефективних значень властивостей композиційних матеріалів. Програмне забезпечення дозволяє проводити сумісний розрахунок полів електропотенціалу, густини джерел джоулевого тепла і температури для геометрично складної конструкції АВТ.

2. Досліджено вплив концентрації графіту у нижньому і верхньому нагрівачах (графіт ГСМ + ZrO<sub>2</sub>) на тепловий стан досліджуваного зразка Fe–GaN. Знайдено, що за умови, коли нижній і верхній нагрівачі мають однакову концентрацію, температурний перепад у зразку Fe–GaN – мінімальний, осьовий градієнт температури – 2–3 °C/мм і ізолінії температури не мають необхідної горизонтальної орієнтації. За умови, коли концентрація графіту у нижньому нагрівачі більша за масою на 4 % від концентрації у верхньому нагрівачі, збільшується максимальний перепад температури у зразку, осьовий градієнт температури становить більше 10 °C/мм і ізолінії температури мають горизонтальну орієнтацію. За умови, коли концентрація графіту у нижньому нагрівачі 7 %, у верхньому 9 % за масою, осьовий і радіальний градієнти температури становлять відповідно 6,69 і 0,23 °C/мм, а ізолінії температури мають горизонтальну орієнтацію. Таким чином, визначено оптимальний склад резистивних елементів комірки для проведення експериментальних досліджень з вирощування кристалів нітриду галію.

3. Досліджено вплив зростаючої зони кристалізації GaN на розподіл температури у ростовому об'ємі. Отримано зменшення температури в характеристичних точках ростового об'єму (максимально до 5 °C).

4. Конфігурація комірки і визначені для неї умови нагрівання є прийнятними для експериментальних досліджень з вирощування кристалів нітриду галію методом температурного градієнта.

**Фінансування.** Роботу виконано за підтримки Національного фонду досліджень України в рамках проєкту «Монокристали нітриду галію GaN: отримання під високим тиском, структура, властивості» (реєстраційний номер 2020.02/0078).

**Список використаної літератури:**

1. Investigation of GaN behavior in contact with Fe, Fe<sub>2-4</sub>N and Co/Cr at high pressures and high temperatures / I.A. Petrusha, B.S. Sadovyi, P.S. Sadovyi and other // Інструментальне матеріалознавство. – 2021. – Вип. 24. – С. 312–325.



2. Thermodynamic calculations of the Fe–Ga–N melting diagram in the context of gallium nitride crystallization under high temperatures and pressures / V.Z. Turkevych, Yu.Yu. Rumiantseva, Yu.I. Sadova and other // *J. Superhard Mater.* – 2022. – Vol. 44, № 2. – P. 73–78.
3. Моделювання теплового стану апарата високого тиску при дослідженні розчинності нітриду галію в залізі / О.П. Людвіченко, О.М. Анісін, О.О. Леуцук, І.А. Петруша // *Інструментальне матеріалознавство.* – 2021. – Вип. 24. – С. 325–334.
4. Mathematical modeling of diamond synthesis process / N.V. Novikov, V.I. Levitas, A.A. Leshchuk, A.V. Idesman // *High Pres. Res.* – 1991. – Vol. 7. – P. 195–197.
5. Leshchuk A.A. Computer simulation of physical and mechanical processes running in the reaction cells of high-pressure installations in the course of synthesis of diamonds / A.A. Leshchuk, N.V. Novikov, V.I. Levitas // *Strength Mater.* – 2001. – Vol. 33, № 3. – P. 277–292.
6. Lyeshchuk O. Computational modeling of superhard materials synthesis / O.Lyeshchuk // *Comp. Mater. Sci.* – 2010. – Vol. 49, № 1S. – P. 85–94.
7. Lyeshchuk O.O. Thermomechanical approach to the modeling of HP–HT material processing / O.O. Lyeshchuk, S.B. Polotniak, M.V. Novikov // *J. Phys. Conf. Ser.* – 2012. – Vol. 377.
8. Modeling the temperature field in a high-pressure apparatus during the sintering of large-sized products based on boron carbide / V.A. Dutka, A.L. Maystrenko, O.I. Borymskiy and other // *J. Superhard Mater.* – 2020. – Vol. 42, № 4. – P. 240–250.
9. Finite element design of a temperature field for high-pressure diamond synthesis / R.Li, G.Zheng, Y.Liu and other // *Diam. Relat. Mater.* – 2016. – Vol. 69. – P. 133–137.
10. Significant improvement of multi-seed method of diamond synthesis by adjusting the lateral cooling water temperature / Y.Li, C.Wang, N.Chen and other // *Cryst. Eng. Comm.* – 2017. – Vol. 19. – P. 6681–6685.
11. Li R. Finite element design for the HPHT synthesis of diamond / R.Li, M.Ding, T.Shi // *J. Cryst. Growth.* – 2018. – Vol. 491. – P. 111–115.
12. Застосування шестипуансонного апарата високого тиску для вирощування монокристалів алмазу інструментального призначення / Т.С. Панасюк, О.О. Леуцук, В.В. Лисаковський та ін. // *Технічна інженерія.* – 2019. – № 2. – С. 36–43.
13. Liudvichenko O.P. 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 / O.P. Liudvichenko, O.O. Lyeshchuk, I.A. Petrusha // *J. Superhard Mater.* – 2023. – Vol. 45, № 2. – P. 83–92.
14. Скінченноеlementний аналіз електрорезистивного нагрівання апарата високого тиску для дослідження розчинності GaN у Fe / О.П. Людвіченко, О.М. Анісін, О.О. Леуцук, В.І. Щидловський // *Mech. Adv. Technol.* – 2021. – Vol. 5, № 3. – С. 302–306.
15. Савицький О.В. Електропровідність графітових деталей резистивного нагрівання, виготовлених шляхом пресування / О.В. Савицький, В.В. Лисаковський // *Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения : зб. наук. робіт.* – Київ : ІНМ ім. В.Н. Бакуля НАН України, 2018. – Вип. 21. – С. 295–300.
16. Solfiti E. A review on thermophysical properties of flexible graphite / E.Solfiti, F.Berto // *Procedia Struct. Integrity.* – 2020. – Vol. 26. – P. 187–198.

#### References:

1. Petrusha, I.A., Sadovyi, B.S., Sadovyi, P.S. et al. (2021), «Investigation of GaN behavior in contact with Fe, Fe<sub>2</sub>-4N and Co/Cr at high pressures and high temperatures», *Instrumentalne materialoznavstvo*, Issue 24, pp. 312–325.
2. 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.*, Vol. 44, No. 2, pp. 73–78.
3. Liudvichenko, O.P., Anisin, O.M., Leshchuk, O.O. and Petrusha, I.A. (2021), «Modeliuvannia teplovoho stanu aparata vysokoho tysku pry doslidzhenni rozchynnosti nitrydu galiuu v zalizi», *Instrumentalne materialoznavstvo*, Issue 24, pp. 325–334.
4. Novikov, N.V., Levitas, V.I., Leshchuk, A.A. and Idesman, A.V. (1991), «Mathematical modeling of diamond synthesis process», *High Pres. Res.*, Vol. 7, pp. 195–197.
5. Leshchuk, A.A., Novikov, N.V. and 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.*, Vol. 33, No. 3, pp. 277–292.
6. Lyeshchuk, O. (2010), «Computational modeling of superhard materials synthesis», *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 49, No. 1S, pp. 85–94.
7. Lyeshchuk, O.O., Polotniak, S.B. and Novikov, M.V. (2012), «Thermomechanical approach to the modeling of HP–HT material processing», *J. Phys. Conf. Ser.*, Vol. 377.
8. Dutka, V.A., Maystrenko, A.L., Borymskiy, 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.*, Vol. 42, No. 4, pp. 240–250.
9. Li, R., Zheng, G., Liu, Y. et al. (2016), «Finite element design of a temperature field for high-pressure diamond synthesis», *Diam. Relat. Mater.*, Vol. 69, pp. 133–137.
10. 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.*, Vol. 19, pp. 6681–6685.

11. Li, R., Ding, M. and Shi, T. (2018), «Finite element design for the HPHT synthesis of diamond», *J. Cryst. Growth*, Vol. 491, pp. 111–115.
12. Panasiuk, T.S., Lieshchuk, O.O., Lysakovskiy, V.V. et al. (2019), «Zastosuvannya shestypuansonnogo aparata vysokoho tysku dlia vyroshchuvannya monokystaliv almazu instrumentalnogo pryznachennia», *Tekhnichna inzheneriia*, No. 2, pp. 36–43.
13. Liudvichenko, O.P., Lyeshchuk, O.O. and Petrusa, 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», *J. Superhard Mater.*, Vol. 45, No. 2, pp. 83–92.
14. Liudvichenko, O.P., Anisin, O.M., Lieshchuk, O.O. and Shchydlovskiy, V.I. (2021), «Skinchennoelementnyi analiz elektrozestystivnogo nahrivannia aparata vysokoho tysku dlia doslidzhennia rozchynnosti GaN u Fe», *Mech. Adv. Technol.*, Vol. 5, No. 3, pp. 302–306.
15. Savitskiy, O.V. and Lysakovskiy, V.V. (2018), «Elektroprovodnist hrafitovykh detalei rezystyvnoho nahrivannia, vyhotovlenykh shliakhom presuvannia», *Porodorazrushaiushchyi y metalloobrabatyvaiushchyi y instrument – tekhnika y tekhnolohiya eho yzghotovleniya y pryumeneniya*, zb. nauk. robit, YNM im. V.N. Bakulia NAN Ukrainy, Kyiv, Issue 21, pp. 295–300.
16. Solfiti, E. and Berto, F. (2020), «A review on thermophysical properties of flexible graphite», *Procedia Struct. Integrity*, Vol. 26, pp. 187–198.

**Людвіченко** Олексій Петрович – аспірант Інституту надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України.

<https://orcid.org/0009-0008-7982-0066>.

Наукові інтереси:

– комп'ютерне моделювання температурних полів.

E-mail: ludvial@ukr.net.

**Лещук** Олександр Олександрович – доктор технічних наук, старший науковий співробітник, завідувач відділу Інституту надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України.

<https://orcid.org/0009-0006-2008-1399>.

Наукові інтереси:

– комп'ютерне матеріалознавство;

– розробка фізико-механічних моделей та комп'ютерне моделювання технологічних процесів отримання функціональних матеріалів та виробів в екстремальних умовах високих тисків та температур.

E-mail: leshchuk@ism.kiev.ua.

**Гордєєв** Сергій Олександрович – кандидат технічних наук, молодший науковий співробітник Інституту надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України.

<https://orcid.org/0009-0009-8318-1209>.

Наукові інтереси:

– розробка методів спрямованого вирощування монокристалів алмазу при високих тисках і температурах.

E-mail: sgordeev9090@gmail.com.

**Liudvichenko O.P., Lyeshchuk O.O., Gordieiev S.O.**

#### **Modeling the thermal state of the high-pressure apparatus cell during the growth of gallium nitride crystals**

Using the finite element method, the thermal state of a specially designed «Toroid-40» high pressure apparatus cell was investigated for conducting experiments on the growth of gallium nitride crystals by the temperature gradient method. The effect of changing the concentration of the composition of the heaters on the thermal state of the high pressure cell was studied. It was determined that the same concentration of graphite in the upper and lower heaters leads to a deviation from the desired horizontal orientation of the temperature isolines in the growth volume. Under the condition that the concentration of graphite in the lower heater is greater than the concentration in the upper one, and this difference exceeds 4 % by mass, the topology of the temperature fields acquires a horizontal orientation, but this leads to an unacceptable increase in the axial temperature gradient. Favourable conditions for the synthesis of GaN crystals (according to the parameters of the gradient and the topology of the temperature isolines) are created under the condition that the concentration of graphite in the lower heater varies in the range of 9–11 %, and in the upper one it is lower by 2–3 % by mass. As a result of the study of the influence of the crystallized GaN phase on the temperature distribution in the Fe–GaN sample, a decrease in the temperature at the control points of the growth volume was obtained (up to 5 °C). The dependence of the maximum temperature difference in the growth volume on the size of the crystallization zone is constructed.

**Keywords:** gallium nitride; high temperature; high pressure; high pressure apparatus; high pressure cell; finite element method.

Стаття надійшла до редакції 14.04.2023.