

- изготовления и применения: Сб. науч. тр. – К.: Ин-т сверхтв. материалов им. В.Н.Бакуля НАН Украины, 2013. – Вып. 16. – С. 251–257.
2. Кинетика роста монокристаллов алмаза в шестипуансонном аппарате высокого давления / В.В. Лысаковский, Н.В. Новиков, В.В. Нагорный и др. // там же, 2014. – Вып. 17. – С. 209–212.
  3. Бруйка В.А. Инженерный анализ в Ansys Workbench: Уч. пособ. Ч. 1 – Самар. гос. техн. ун-т, 2008. – 271с.
  4. Крейт Ф., Блэк У. Основы теплопередачи. – М.: Мир, 1983. – 512 с.
  5. Варгафник Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Наука, 1972. – 720 с.
  6. Свойства конструкционных материалов на основе углерода : Справ. / Под ред. В.П.Соседова. – М.: Металлургия, 1975. – 336 с.
  7. Теплопроводность твёрдых тел: Справ. / Под ред. В.С. Охотина. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 320 с.

Поступила 23.06.15

УДК 004.65:62-987:025.4.06

**К. З. Гордашник**, канд. техн. наук; **В. Н. Колодницкий**, канд. физ.-мат. наук; **Е. М. Чистяков**,  
**В. Н. Кулаковский**, кандидаты технических наук; **Т. А. Сороченко**, **М. В. Дубенко**

*Институт сверхтвёрдых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины, г. Киев*

#### **АППАРАТЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ СТАТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА КАК МНОГОУРОВНЕВАЯ ПОДСИСТЕМА ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ «СТМ», РАЗРАБОТАННАЯ НА ОСНОВЕ ОНТОЛОГО-ТЕЗАУРУСНОГО АНАЛИЗА**

*На основе онтолого-тезаурусного анализа разработана многоуровневая подсистема предметной области «Сверхтвёрдые материалы», в которой представлены типы и элементы конструкций аппаратов высокого давления, используемые при статическом синтезе (НРНТ) сверхтвёрдых материалов.*

**Ключевые слова:** онтология, тезаурус, интеллектуальный анализ, база знаний, сверхтвёрдые материалы, аппараты высокого давления, статический синтез.

В настоящее время наиболее перспективной научно-технической информацией практически во всех предметных областях являются онтологии и онтолого-тезаурусные системы [1; 2].

Онтологии – модели данных с двумя специфическими особенностями. Во-первых, онтологии строятся на основе совместного понимания специалистами предметной области. Такое понимание представляется соглашением экспертов относительно понятий и отношений в предметной области. Во-вторых, онтологии используют способ представления, который может обрабатываться компьютерными программами (т. е. записываются с использованием формальных языков), что позволяет компьютерам работать с онтологиями. К таким действиям относятся передача онтологий между компьютерами, хранение онтологий, проверка согласованности онтологий, формирование логических выводов на основе и с помощью онтологий.

Модель онтологии – это система логических соотношений, каждое из которых имеет смысловое содержание, с которым согласно большинство экспертов (специалистов предметной области), а вся система – суть представления знаний предметной области.

Основные концепции исследования онтологии предметной области следующие:

– при построении концептуальной модели используют предметные знания в виде набора понятий и связывающих их отношений; каждое понятие имеет имя и атрибуты (неотъемлемые свойства объекта или явления, в отличие от случайных преходящих его состояний), каждый атрибут – значение;

– модель строится с использованием следующих средств: словаря терминов, используемых при описании характеристик объектов и процессов, точных и однозначных определений всех терминов этого словаря и классификации логических взаимосвязей этих терминов.

Важно отметить, что разработанная онтология предметной области позволяет [3]:

- повторно использовать знания в предметной области;
- делать допущения в предметной области явными;
- отделять знания в предметной области от оперативных данных;
- анализировать знания в предметной области;
- рассматривать совместно принимаемую онтологию как начальный шаг в направлении стандартизации.

База знаний предметной области «Сверхтвердые материалы» (БЗ ПрО «СТМ»), разработанная в Институте сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины (ИСМ), основана на модели ПрО «СТМ», которая является объединением тезауруса [4] и онтологии [2]. Тематический электронный информационно-поисковый тезаурус и онтология спроектированы на основе фиксации парадигматических соотношений (омонимии, т. е. лексическая форма используется для названия одного определенного понятия) лексических единиц (терминов). Для поиска, выбора и анализа информации разработана компьютерная программа объединения электронного тезауруса и онтологии с материаловедческими базами данных ИСМ.

Модель автоматизированной онтолого-тезаурусной системы ПрО «СТМ» – основная многоуровневая программная система, с помощью которой можно оперативно осуществлять интеграцию, выборку и управление знаниями в области современных сверхтвердых материалов и изделий из них.

Неотъемлемой частью построения такой системы управления знаниями является развитие методов исследования и построения систем накопления, анализа и управления информационными массивами на основе онтолого-тезаурусного подхода к исследуемой области знаний, установление закономерностей и тенденций развития науки в информационных потоках ПрО «СТМ» [1; 2].

В качестве базиса проектирования концептуальной модели онтологий используют ПрО «СТМ» с отработанным и выверенным понятийным аппаратом. Эта система имеет корректно построенную иерархию предметно-ориентированных определений и является основой концептуального и информационного моделирования.

Построив онтологию онтолого-тезаурусной системы ПрО «СТМ» и заполнив ее конкретными экземплярами подсистем, получили взаимосвязь чисто справочной информации (марки, характеристики материала), технической (способы получения материалов, оборудование, оснастка, исходные материалы) и научной (физико-механические и физико-химические свойства, патенты и научно-технические публикации).

Процесс построения ПрО «СТМ» состоит из последовательных этапов. а естественном языке создается список определений терминов и их синонимов каждой подсистемы, а затем на основе таксономических отношений (иерархии понятий относительно вложения) строятся структура и классификация понятий.

Каждая подсистема содержит как многоуровневые материаловедческие понятия, так и проблемно-ориентированные знания, соответствующие научным направлениям в области СТМ. Совокупность подсистем онтологий знаний и понятий в области СТМ является информационной основой для построения данной базы знаний. При этом тезаурус каждой подсистемы рассматривается как частный случай онтологии. По графически представленной в виде онтологий структурированной информации формируется тезаурусный вариант каждой подсистемы.

Для разработки общей логической структуры подсистем онтологий ПрО «СТМ» использовали модульный принцип. Модули организованы в иерархию, т. е. модуль может быть модулем верхнего уровня или подчиненным модулем, ассоциированным с отдельным объектом. В целях создания единой онтологии ПрО «СТМ» была иерархически упорядочена и структурирована

вся понятийная область. Структура построенной онтологии соответствует структуре и классификации элементов материаловедческой базы знаний.

При таком подходе структура автоматизированной онтолого-тезаурусной системы ПрО «СТМ» состоит из совокупности подсистем. Подсистемы включают разновидности сверхтвердых материалов, способы их изготовления, используемое оборудование, оснастку, марки материалов, их характеристики, физико-механические и физико-химические свойства, назначение. При этом каждая подсистема состоит из онтологии и тезауруса.

Ранее авторы представили онтолого-тезаурусные подсистемы автоматизированной онтолого-тезаурусной системы управления знаниями в ПрО «СТМ» «Порошки наноалмазные» [2].

В настоящей работе приведен фрагмент онтолого-тезаурусной системы «СТМ», состоящий из четырех подсистем. Этот фрагмент касается аппаратов высокого давления (АВД), которые используют при статическом синтезе СТМ (порошков алмаза, в том числе монокристаллов; порошков кубического нитрида бора (КНБ) и композиционных материалов на основе алмаза и КНБ) [5–11], и основных элементов конструкции АВД. Подсистемы показаны на рис. 1–4.

Тезаурусное представление подсистемы онтологии «Типы АВД при статическом синтезе сверхтвердых материалов» (см. рис. 1):

–А–

#### АВД БЕСПРЕССОВЫЕ

- В АВД для исследования и промышленного производства СТМ
- Н АВД многопуансонный типа «БАРС» (разрезная сфера)

#### АВД В РАБОЧЕМ ПРОСТРАНСТВЕ ПРЕССОВОЙ УСТАНОВКИ

- В АВД для исследования и промышленного производства СТМ
- Н АВД одноосного сжатия
- Н АВД многоосного сжатия

#### АВД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ И ПРОМЫШЛЕННОГО ПРОИЗВОДСТВА СТМ

- В Аппараты высокого давления (АВД)
- Н АВД в рабочем пространстве прессовой установки
- Н АВД беспрессовые

#### АВД ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТМ

- В Аппараты высокого давления (АВД)
- Н АВД с наковальнями из поликристаллического материала на основе кубического нитрида бора
- Н АВД с алмазными наковальнями

#### АВД МНОГООСНОГО СЖАТИЯ

- В АВД в рабочем пространстве прессовой установки
- Н АВД многопуансонные

#### АВД МНОГОПУАНСОННЫЕ

- В АВД многоосного сжатия

#### АВД МНОГОПУАНСОННЫЙ ТИПА «БАРС» (РАЗРЕЗНАЯ СФЕРА)

- В АВД беспрессовые

#### АВД ОДНООСНОГО СЖАТИЯ

- В АВД в рабочем пространстве прессовой установки
- Н АВД типа «наковальня с углублением»
- Н АВД типа «наковальня с углублением и тороидом» (АВД типа «тороид»)
- Н АВД типа «бэлт»

АВД С НАКОВАЛЬНЯМИ АЛМАЗНЫМИ

- В АВД для исследования СТМ
- Н Наковальни из монокристаллов алмаза
- Н Наковальни из поликристаллического материала на основе алмаза

АВД С НАКОВАЛЬНЯМИ ИЗ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ  
КУБИЧЕСКОГО НИТРИДА БОРА

- В АВД для исследования СТМ

АВД ТИПА «БЭЛТ»

- В АВД одноосного сжатия
- Н АВД цилиндрического типа
- Н АВД типа «цилиндр–поршень»

АВД ТИПА «НАКОВАЛЬНЯ С УГЛУБЛЕНИЕМ»

- В АВД одноосного сжатия

АВД ТИПА «НАКОВАЛЬНЯ С УГЛУБЛЕНИЕМ И ТОРОИДОМ (АВД ТИПА «ТОРОИД»)

- В АВД одноосного сжатия

АВД ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ТИПА

- В АВД типа «бэлт»

АВД ТИПА «ЦИЛИНДР–ПОРШЕНЬ»

- В АВД типа «бэлт»

АППАРАТЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ (АВД)

- В Способ статического синтеза СТМ (НРНТ)
- Н АВД для исследования и промышленного производства СТМ
- Н АВД для исследования СТМ

–Н–

НАКОВАЛЬНИ ИЗ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА

- В АВД с алмазными наковальнями

НАКОВАЛЬНИ ИЗ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ АЛМАЗА

- В АВД с алмазными наковальнями

–С–

СПОСОБ СТАТИЧЕСКОГО СИНТЕЗА СТМ (НРНТ)

- Н Аппараты высокого давления (АВД)

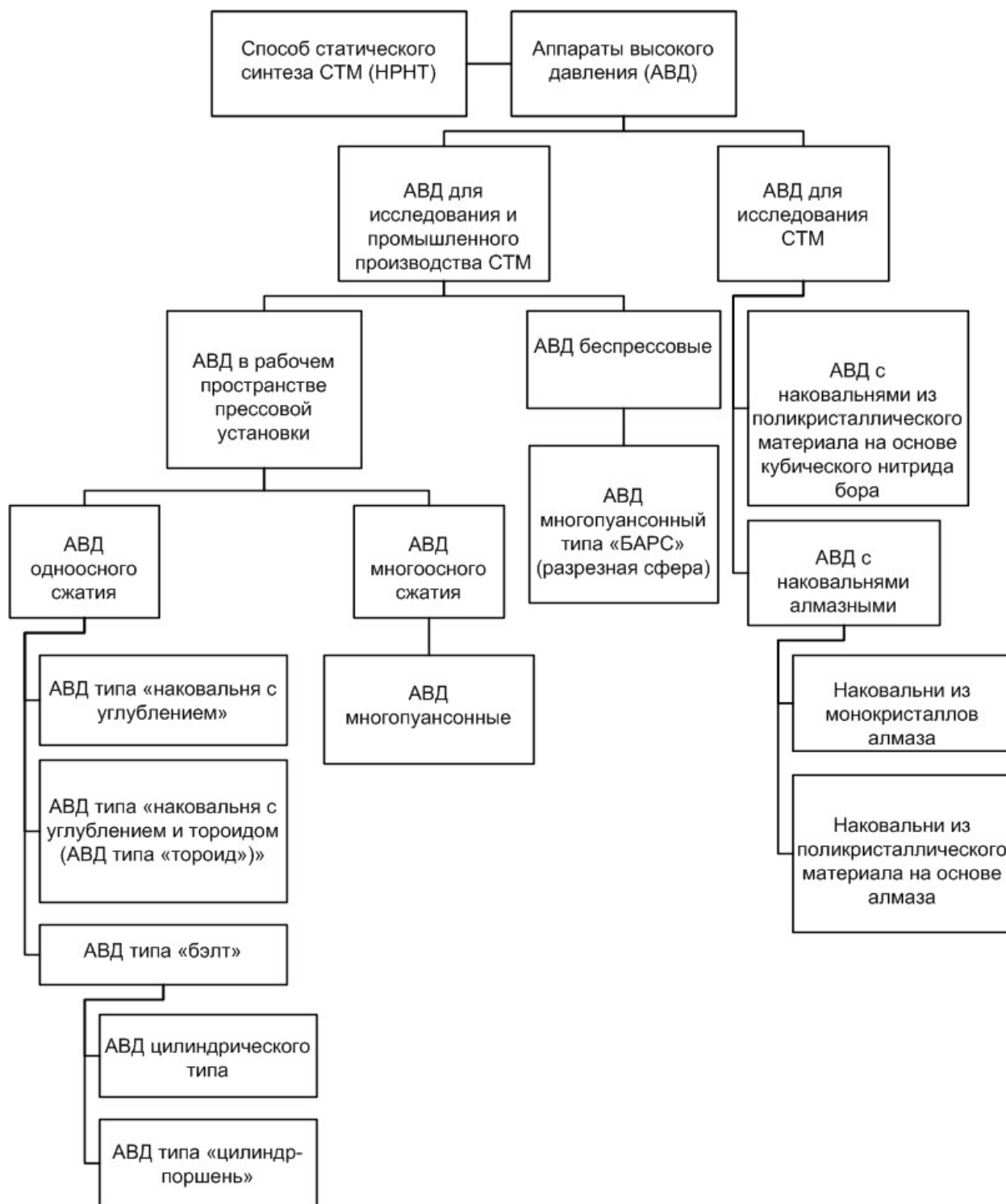


Рис. 1. Структура подсистемы онтологии «Типы АВД при статическом синтезе сверхтвердых материалов»

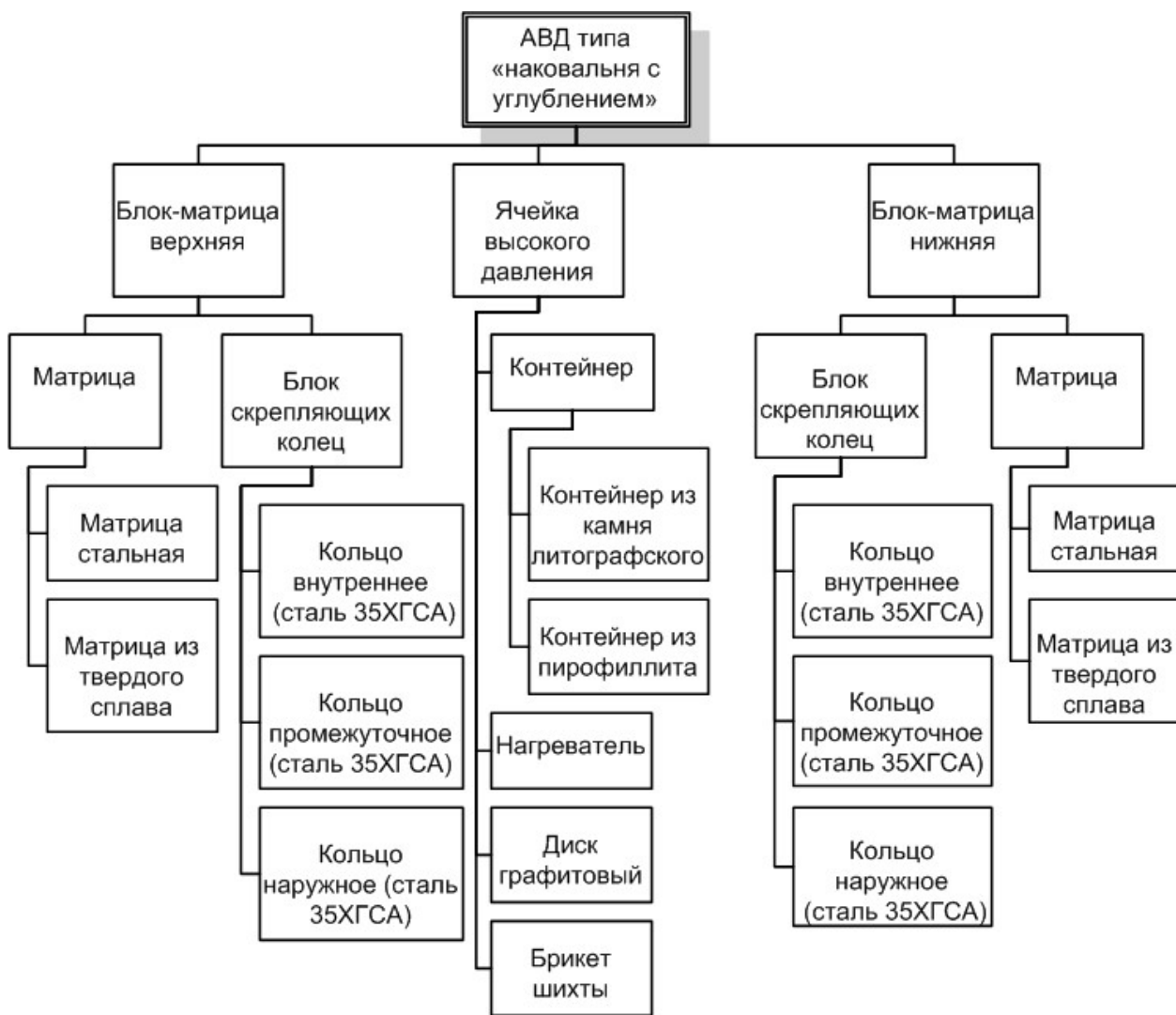


Рис. 2. Структура подсистемы онтологии «Структура основных элементов конструкции АВД типа «наковальня с углублением»

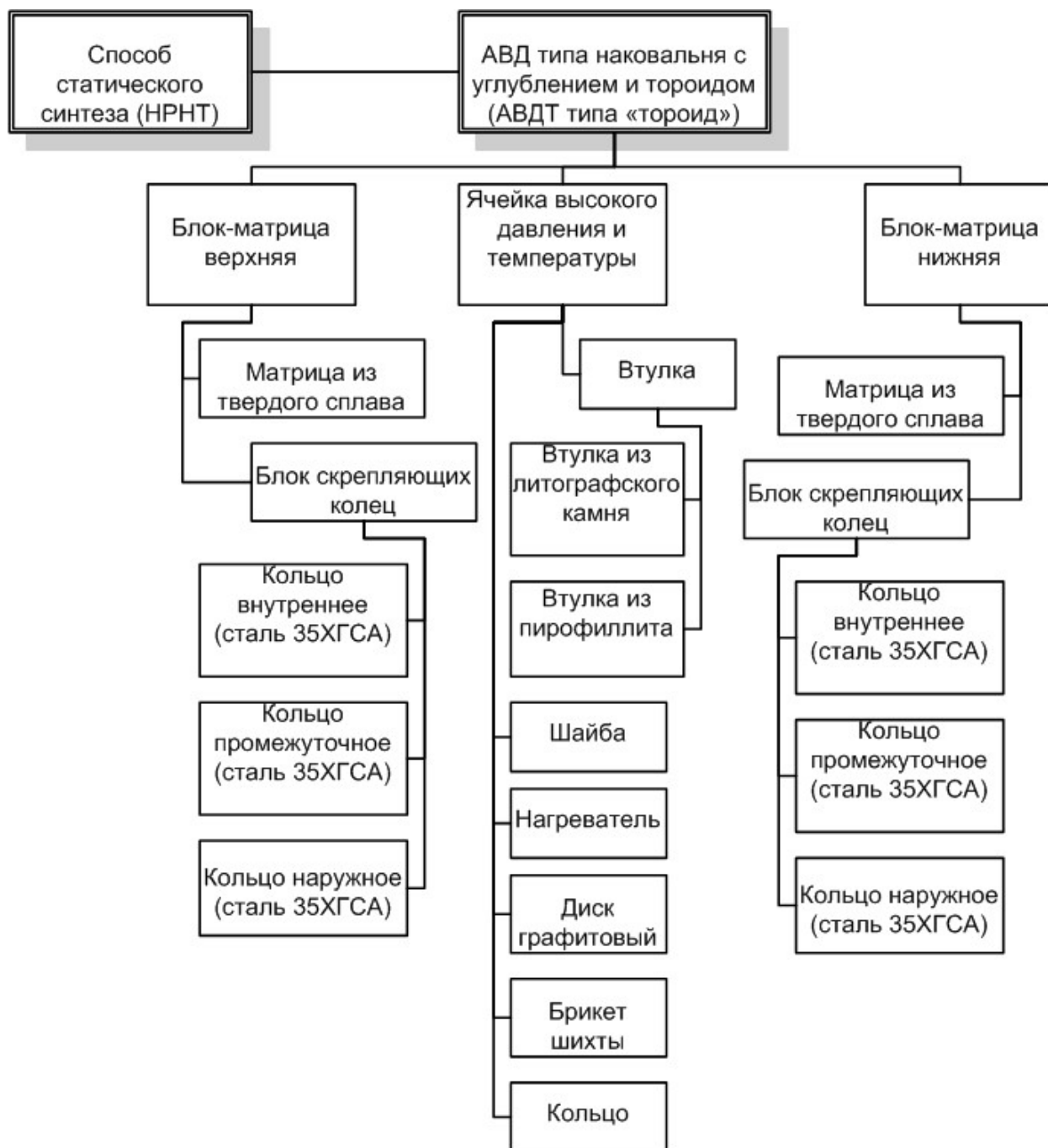


Рис. 3. Структура подсистемы онтологии «Структура основных элементов конструкции АВД типа «тороид»»

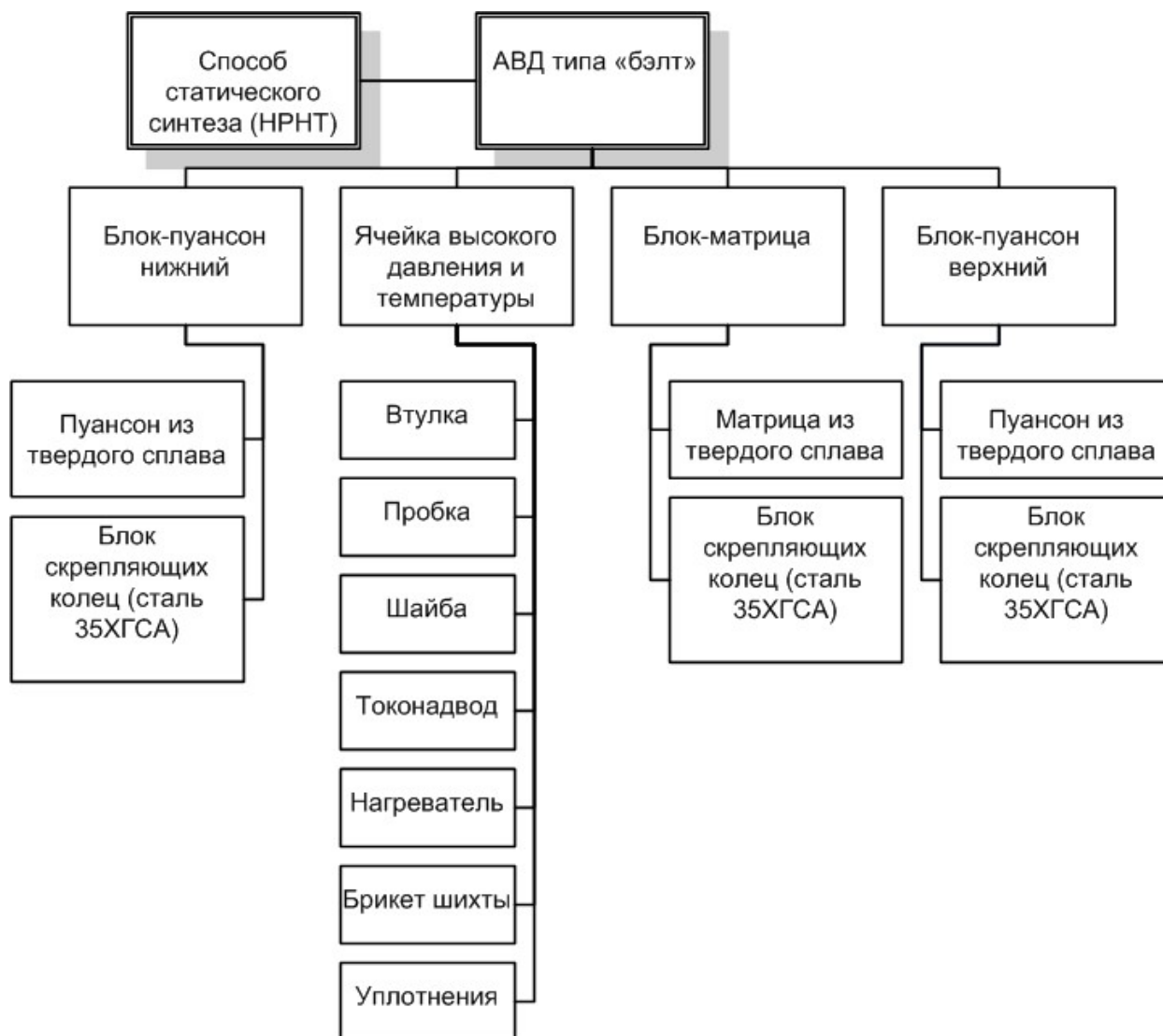


Рис. 4. Структура подсистемы онтологии «Структура основных элементов конструкции АВД типа «бэлт»»

### Выводы

1. Построение онтологии предметной области «Сверхтвердые материалы» и заполнение ее конкретными экземплярами подсистем позволяют устанавливать взаимосвязь чисто справочной информации (марки, характеристики материала), технической (способы получения материалов, оборудование, оснастка, исходные материалы и др.), и научной (физико-механические и физико-химические свойства, патенты, научно-технические публикации и др.).

2. Как и онтология любой конкретной предметной области, разработанный фрагмент ПрО «СТМ» по АВД, которые используют при статическом синтезе сверхтвердых материалов, дает определенные возможности. Они позволяют повторно использовать знания в предметной области; формулировать допущения в предметной области в качестве явных; отделять знания в предметной области от оперативных данных, анализировать знания в предметной области; рассматривать онтологию как начальный шаг в направлении стандартизации.

3. Разработан фрагмент многоуровневой автоматизированной онтолого-тезаурусной системы ПрО «СТМ» по АВД, которые используют при статическом синтезе сверхтвердых материалов.



Каждая из четырех рассмотренных подсистем состоит из онтологии и тезауруса. В совокупности они образуют двухуровневую структуру, в которой подсистема первого уровня – типы АД при статическом синтезе сверхтвердых материалов; подсистемы второго уровня – структуры основных элементов конструкции АД типов «наковальня с углублением», «тороид» и «бэлт».

*На основі онтолого-тезаурусного аналізу розроблено багаторівневу підсистему предметної області «Надтверді матеріали», що включає типи та елементи конструкцій апаратів високого тиску, які використовують при статичному синтезі (НПТ) надтвердих матеріалів.*

**Ключові слова:** онтологія, тезаурус, інтелектуальний аналіз, база знань, надтверді матеріали, апарати високого тиску, статичний синтез.

*On the basis of the ontology and thesaurus analysis a multilevel subsystem of the «Superhard materials» subject area has been developed, which presents the types and elements of structures of high-pressure apparatuses used in the static synthesis (HPHT) of superhard materials.*

**Key words:** ontology, thesaurus, mining, knowledge base, superhard materials, high-pressure apparatus, static synthesis.

### Литература

1. Онтологический подход к построению базы знаний «Сверхтвердые материалы» / В. Н. Кулаковский, А. А. Лебедева, К. З. Гордашник и др. // Штучний інтелект. – 2008. – № 4. – С. 91–102.
2. Представление и аналитическая обработка данных в предметной области «СТМ» на основе онтолого-тезаурусного анализа / А. А. Лебедева, К. З. Гордашник, В. Н. Колодницкий и др. // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения : сб. науч. тр. – К. : ИСМ им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2014. – Вып. 17. – С. 370–379.
3. Noy N. F. Ontology development 101: A guide to creating your first ontology / N. F. Noy, D. L. McGuinness. – Stanford Knowledge Systems Laboratory Technical Report KSL-01-05 and Stanford Medical Informatics Technical Report SMI-2001-0880, March 2001. – [http://protege.stanford.edu/publications/ontology\\_development/ontology101.html](http://protege.stanford.edu/publications/ontology_development/ontology101.html)
4. Электронный информационно-поисковый тезаурус предметной области «Сверхтвердые материалы» как формальная система знаний / В. Н. Колодницкий, В. Н. Кулаковский, А. А. Лебедева и др. // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения : сб. науч. тр. – К. : ИСМ им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2010. – Вып. 13. – С. 362–366.
5. Боримский И. А. Влияние схемы расположения компонентов реакционной шихты на характеристики синтезируемых кристаллов кубического нитрида бора / И. А. Боримский // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения : сб. науч. тр. – К. : ИСМ им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2010. – Вып. 13. – С. 367–369.
6. Чепуров А. И. Беспредельные аппараты «разрезная сфера» (БАРС): история создания и перспективы применения / А. И. Чепуров // Синтез, спекание и свойства сверхтвердых материалов : сб. науч. тр. / отв. ред. Н. В. Новиков, А. А. Шульженко; НАН Украины. Ин-т сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля. – К., 2011. – С. 72–76. – (Сер. «Материаловедение»).
7. Вентцель В. А. Создание и измерение высокого давления в системе «поршень–цилиндр» и изучение работы низкотемпературной камеры / В. А. Вентцель. – М. : МФТИ, 2008. – 13 с.
8. Катруша А. Н. Моделирование распределения температуры в ячейках аппаратов высокого давления при термобарической обработке монокристаллов алмаза / А. Н. Катруша // Синтез, спекание и свойства сверхтвердых материалов : сб. науч. тр. / Отв. ред. Н. В. Новиков, А. А. Шульженко; НАН Украины. Ин-т сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля. – К., 2011. – С. 56–61. – (Сер. «Материаловедение»).

9. Звіт про науково-дослідну роботу за темою 1605Н (договір 16/05–Н). Спінання під високим тиском композитів на основі нанодисперсних порошків алмазу та тугоплавких сполук. – К. : ІНМ ім. В. М. Бакуля НАН України, 2005. – 51 с.
10. Звіт про науково-технічну роботу Ф 10/55–2005. Розробка полікристалічних матеріалів на основі кубічного нітриду бору з спеціальними електрофізичними властивостями для застосування в якості пасивних та активних елементів приладів сучасної електроніки. – К. : ІНМ ім. В. М. Бакуля НАН України, 2006. – 89 с.
11. Пат. 2176690 RU С1 С30В29/04 ВО1J3/06. Реакционная ячейка многопуансонного аппарата высокого давления для выращивания асимметрично зональных монокристаллов алмаза / А. И. Чепуров, И. И. Федоров, В. М. Сонин и др. – Заявл. 13.03.2000; Опубл. 10.12.2001.

Поступила 22.05.15

УДК 621.921.34:548.736.15

**Т. В. Коваленко; С. А. Ивахненко**, член-корр. НАН Украины; **А. М. Куцай**, канд. техн. наук

*Институт сверхтвёрдых материалов им. В.Н. Бакуля НАН Украины, г. Киев*

### **БОРСОДЕРЖАЩИЕ ПРИМЕСНЫЕ ЦЕНТРЫ В АЛМАЗАХ, ВЫРАЩЕННЫХ В СИСТЕМЕ МАГНИЙ–УГЛЕРОД**

*В ростовой системе на основе Mg–C при давлении  $p \leq 8,2$  ГПа и температуре  $T \approx 1800–2000$  °C методами спонтанной кристаллизации и наращивания на затравку выращены структурно совершенные монокристаллы алмаза смешанного типа IIa + IIb. Методом ИК-спектроскопии в выращенных кристаллах установлено наличие примесных центров, обусловленных нескомпенсированным бором, и рассмотрены причины их возникновения.*

**Ключевые слова:** монокристаллы алмаза, система магний–углерод, ИК-Фурье спектроскопия.

#### **Введение**

Область применения монокристаллов алмаза определяется их свойствами (прочностью, электро- и теплопроводностью, полупроводниковыми характеристиками), которые зависят от дефектно-примесного состава кристаллов и могут быть заданы при их выращивании. Состав используемых при выращивании монокристаллов алмаза сплавов-растворителей существенно влияет на формирование дефектно-примесного состава кристаллов. Так, в результате добавления в реакционную шихту Al, Ti, Zr, изменяющих коэффициент захвата примеси азота на фронте кристаллизации, его концентрация в алмазе значительно снижается [1]. Дополнительным легированием ростовой системы бором возможно получать полупроводниковые монокристаллы типа IIb, согласно физической классификации [2].

В настоящее время возможны следующие варианты дефектно-примесного состава синтетических алмазов, выращиваемых методом температурного градиента и методом спонтанной кристаллизации:

- с повышенным содержанием примеси азота ( $>10^{17}$  см<sup>-3</sup>, тип IIb).
- со сниженным содержанием азота ( $\sim 10^{16}$  см<sup>-3</sup>, тип IIa).
- с повышенным содержанием примеси бора ( $>10^{16}$  см<sup>-3</sup>, тип IIb, с полупроводниковыми свойствами).

Согласно современным представлениям можно регулировать содержание азота в выращиваемых алмазах следующими методами:

- с использованием сплавов-растворителей, обеспечивающих захват азота до  $10^{16}$  см<sup>-3</sup>;