

УДК 621.891:620.22

DOI 10.62595/1819-5245-2026-1-24-38

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДИСПЕРГИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР УГЛЕРОДА ПРИ МЕХАНОАКТИВАЦИИ ПОРОШКОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ СИСТЕМ С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕЙ

**В. Н. ПАСОВЕЦ, В. А. КОВТУН, А. В. ИЛЬЮШОНОК**

*Государственное учреждение образования  
«Университет гражданской защиты Министерства  
по чрезвычайным ситуациям Республики Беларусь»,  
г. Минск*

*Представлена математическая модель процесса диспергирования наноструктур углерода при механоактивации порошковых композиционных систем. Разработанная модель основана на энергетическом анализе ван-дер-ваальсовых взаимодействий между наноструктурами углерода с учетом их морфологии, расположения и числа графеновых слоев. Введена эффективная константа взаимодействия, пропорциональная квадрату числа слоев, что позволяет адекватно описывать усиление межчастичных связей и оценивать энергию агломерации, дезагломерации и закрепления наноструктур углерода на металлических частицах. Определены зависимости времени и энергии механоактивации от конструктивных параметров смесителя-активатора при постоянных режимах работы. Показано, что для системы «медь – углеродные нанотрубки» эффективное разрушение агломератов и распределение наноструктур углерода достигается при частоте вращения  $85\text{--}90\text{ мин}^{-1}$  и времени обработки  $55\text{--}65\text{ мин}$ . Для системы «медь – луковичные наноструктуры углерода» – при частоте вращения  $85\text{--}90\text{ мин}^{-1}$  и времени обработки  $35\text{--}40\text{ мин}$ . Установлено, что результаты моделирования позволяют оптимизировать технологические параметры процесса получения композиционных материалов на основе металлической матрицы, наполненной наноструктурами углерода.*

**Ключевые слова:** механоактивация, композиционные материалы, металлические порошки, наноструктуры углерода, углеродные нанотрубки, луковичные наноструктуры углерода, ван-дер-ваальсово взаимодействие, агломерация, математическое моделирование, энергетический анализ, металлическая матрица.

**Для цитирования.** Пасовец, В. Н. Математическое моделирование процессов диспергирования наноструктур углерода при механоактивации порошковых композиционных систем с металлической матрицей / В. Н. Пасовец, В. А. Ковтун, А. В. Ильюшонок // Вестник Гомельского государственного технического университета имени П. О. Сухого. – 2026. – № 1 (104). – С. 24–38. – DOI 10.62595/1819-5245-2026-1-24-38

## MATHEMATICAL MODELING OF THE CARBON NANOSTRUCTURES DISPERSION PROCESSES DURING MECHANICAL ACTIVATION OF POWDER COMPOSITE SYSTEMS WITH A METAL MATRIX

**V. N. PASOVETS, V. A. KOVTUN, A. V. ILYUSHONOK**

*The University of Civil Protection of the Ministry  
for Emergency Situations of the Republic of Belarus, Minsk*

*A mathematical model of the carbon nanostructures dispersion during the mechanical activation of powder composite systems is presented. The developed model is based on an energy analysis of van der Waals interactions between carbon nanostructures, taking into account their morphology, arrangement, and number of graphene layers. An effective interaction constant proportional to the square of the number of layers is introduced, allowing for an adequate description of the strengthening of interparticle bonds and*

*an assessment of the energy of agglomeration, deagglomeration, and attachment of carbon nanostructures to metal particles. The dependences of the time and energy of mechanical activation on the design parameters of the mixer-activator under constant operating conditions are determined. It is shown that for the “copper-carbon nanotube” system, effective destruction of agglomerates and distribution of carbon nanostructures is achieved at a rotation speed 85–90 min<sup>-1</sup> and a processing time of 55–65 min. For the “copper – onion-shaped carbon nanostructures” system, the results were obtained at a rotation speed of 85–90 min<sup>-1</sup> and a processing time of 35–40 min. It was found that the modeling results enable optimization of the process parameters for producing composite materials based on a metal matrix filled with carbon nanostructures.*

**Keywords:** mechanical activation, composite materials, metal powders, carbon nanostructures, carbon nanotubes, onion-shaped carbon nanostructures, van der Waals interaction, agglomeration, mathematical modeling, energy analysis, metal matrix.

**For citation.** Pasovets V. N., Kovtun V. A., Plyushonok A. V. Mathematical modeling of the carbon nanostructures dispersion processes during mechanical activation of powder composite systems with a metal matrix. *Vestnik Gomel'skogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta imeni P. O. Sukhogo*, 2026, no. 1 (104), pp. 24–38 (in Russian). DOI 10.62595/1819-5245-2026-1-24-38

## Введение

Современное материаловедение в значительной степени ориентировано на проектирование и получение композиционных материалов с заданными физико-механическими характеристиками. Особое место в данном научном направлении занимают композиты с металлической матрицей, получаемые методами порошковой металлургии, которые позволяют сочетать пластичность и теплопроводность металлической фазы с высокими прочностью и жесткостью армирующих компонентов. Наиболее перспективным вектором развития указанного научного направления является создание нанокompозитов, у которых хотя бы один из компонентов имеет размер не более 100 нм хотя бы в одном из измерений. Применение наполнителя с характерными размерами, соответствующими наномасштабному уровню, обеспечивает появление размерных и поверхностных эффектов, существенно влияющих на свойства композиционного материала в целом [1, 2].

Среди широкого спектра наполнителей металлических матриц пристальное внимание исследователей сосредоточено на наноструктурах углерода: фуллеренах, углеродных нанотрубках (УНТ), наноалмазах и луковичных наноструктурах углерода (ЛНУ). Обладая аномально высокими механическими характеристиками, данные наноразмерные компоненты позиционируются как наиболее перспективные наполнители, обеспечивающие улучшение свойств металлических матриц [3].

Однако практическая реализация потенциала наноструктур углерода сопряжена с серьезным технологическим барьером – обеспечением их равномерного распределения в объеме металлической матрицы, состоящей из микроразмерных частиц. Интенсивное ван-дер-ваальсово взаимодействие наноструктур углерода приводит к их агломерации, что обуславливает формирование структурных дефектов и деградацию свойств получаемых композитов [6, 7]. Данная проблема носит междисциплинарный характер и актуальна для матриц различной природы, однако в металлических матрицах она усугубляется существенным различием в плотности исходных компонентов, обуславливающим проявление эффекта сегрегации при смешивании металлических микроразмерных и углеродных наноразмерных компонентов. Также получение порошковых композиционных материалов с металлической матрицей и наноструктурами углерода осложняется химической инертностью наноструктур углерода, которая затрудняет их смачиваемость металлическими расплавами и твердофазное взаимодействие с матрицей. Следовательно, управление процессами структурообразования на стадии смешивания исходных компонентов является неотъемлемым условием получения порошковых композитов с заданными свойствами.

Одним из наиболее эффективных способов устранения агломерации наноструктур углерода в металлической матрице является механическая активация, осуществляемая в активаторах различной конструкции. С физической точки зрения разрушение агломератов наноструктур углерода можно рассматривать как передачу механической энергии системе для преодоления энергии связи внутри агломерата. При этом эффективность процесса регламентируется следующим ключевым условием: количество подводимой механической энергии должно быть достаточным для разрушения связей между отдельными наноструктурами углерода в агломерате, но не должно превышать уровня, при котором нарушается целостность наноструктур углерода и происходит утрата их уникальных свойств. Таким образом, формирование оптимальной структуры композита «металл – наноструктуры углерода» требует строгого соблюдения так называемого «энергетического окна», обеспечивающего эффективное диспергирование и сохранение целостности углеродного наноразмерного наполнителя [4].

Экспериментальные исследования свидетельствуют о существенной зависимости эффективности процесса механоактивации от множества технологических параметров: времени воздействия, энергии обработки, типа и размера рабочих органов, соотношения компонентов, наличия поверхностно-активных веществ, газовой или жидкой среды, а также от морфологии наноструктур углерода. В условиях многофакторности и нелинейности протекающих процессов эмпирический подбор режимов механоактивации требует значительных временных и материальных затрат и характеризуется ограниченной воспроизводимостью, обусловленной высокой чувствительностью процесса к изменениям технологических и структурных параметров.

В этой связи возникает необходимость разработки математической модели процесса механоактивации исходных компонентов порошковых систем «металл – наноструктуры углерода», позволяющей количественно описывать эволюцию структурных и энергетических характеристик системы в процессе обработки. Такая модель должна учитывать физико-механические свойства исходных компонентов, характер и интенсивность механических воздействий на частицы, кинетику их деформирования и агломерации, а также процессы межфазного взаимодействия и поверхностной модификации, определяющие формирование конечной структуры, что позволит управлять свойствами порошковых композиций и формируемых композитных материалов, сокращать объем экспериментальных исследований и повышать воспроизводимость технологических процессов. В существующих на сегодняшний день моделях, как правило, не учитывается вклад внутренней многослойности наноструктур углерода в суммарную энергию агломерации, что ограничивает точность прогнозирования режимов обработки.

Таким образом, цель работы заключается в построении математической модели процесса механоактивации исходных компонентов порошковых композиционных материалов на основе металлической матрицы и наноструктур углерода, позволяющей определять оптимальное время механоактивации порошковой смеси различной массы, достаточное для разрушения агломератов наноструктур углерода и их внедрения в поверхность частиц металлической матрицы.

### **Основная часть**

Энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия  $E_{//}$  между двумя параллельно расположенными УНТ (рис. 1, *a*), рассчитанная в рамках приближенной континуальной модели цилиндрических тел, определяется из следующего уравнения [5]:

$$E_{//} = \frac{A_H}{24} l d_{\text{УНТ}}^{\frac{1}{2}} H^{-\frac{3}{2}} \text{ при } H \geq H_c, \quad (1)$$

где  $A_H$  – постоянная Гамакера;  $A_H = 60 \times 10^{-20}$  Дж [6, 7];  $l$  – длина УНТ, м;  $d_{\text{УНТ}}$  – диаметр УНТ, м;  $H$  – расстояние между взаимодействующими наноструктурами углерода, м;  $H_c$  – расстояние между графеновыми слоями многослойной УНТ,  $H_c = 3,4 \cdot 10^{-10}$  м.

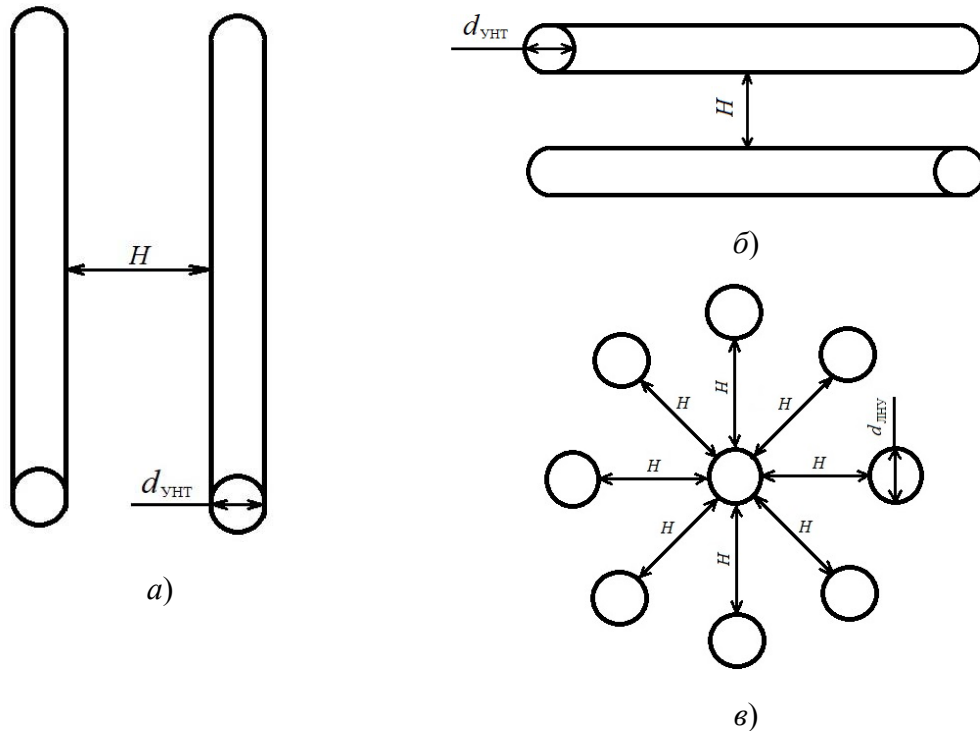


Рис. 1. Схема пространственного расположения наноструктур углерода при взаимодействии: а – параллельное расположение УНТ; б – скрещивающееся расположение УНТ; в – взаимодействие ЛНУ в агломерате

Энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия двух перпендикулярно скрещенных УНТ с диаметром  $d_{\text{УНТ}}$ , расположенных на расстоянии  $H$  (рис. 1, б) [5]:

$$E_{+} = \frac{A_H}{12} \frac{d_{\text{УНТ}}}{H} \text{ при } H < d_{\text{УНТ}}. \quad (2)$$

Энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия двух одинаковых ЛНУ с диаметрами  $d_{\text{ЛНУ}}$  (рис. 1, в) может быть оценена выражением [8]:

$$E_0 = \frac{A_H}{24} \frac{d_{\text{ЛНУ}}}{H} \text{ при } H < d_{\text{ЛНУ}}. \quad (3)$$

Для количественной оценки энергии взаимодействия между многослойными УНТ в металлической матрице была разработана аналитическая модель, базирующаяся на классическом подходе Гамакера для тел цилиндрической формы. Научная новизна предлагаемого подхода заключается в адаптации модели для многослойных структур путем введения эффективной константы взаимодействия.

В рамках данной модели интегральный потенциал системы учитывает аддитивный характер сил Ван-дер-Ваальса для всех слоев УНТ. Для упрощения расчетов вводится эффективная константа Гамакера:

$$A_H^{ef} = A_H N^2, \quad (4)$$

где  $N$  – количество слоев графена в многослойной УНТ или ЛНУ.

Использование квадратичной зависимости  $N^2$  физически обосновано парным взаимодействием каждой из оболочек первой УНТ с каждой оболочкой второй УНТ, что позволяет наиболее полно учесть вклад внутренней структуры многослойной УНТ в суммарное силовое поле.

Таким образом, при параллельной ориентации энергия взаимодействия УНТ в агломерате пропорциональна длине их взаимного перекрытия  $l$  и описывается выражением

$$E_{//} = \frac{A_H N^2}{24} l d_{УНТ}^{\frac{1}{2}} H^{-\frac{3}{2}} \text{ при } H \geq H_c. \quad (5)$$

Данная зависимость указывает на то, что в процессе механоактивации разделение параллельно ориентированных агломератов требует наибольших энергетических затрат, так как сила притяжения убывает относительно медленно с ростом зазора  $H$ .

Для скрещивающегося расположения многослойных УНТ энергия взаимодействия локализована и не зависит от их длины:

$$E_{+} = \frac{A_H N^2}{12} \frac{d_{УНТ}}{H} \text{ при } H < d_{УНТ}. \quad (6)$$

При построении математической модели ЛНУ аппроксимируются сферой диаметра  $d_{ЛНУ}$ . Для адекватного описания силового поля частиц и упрощенной оценки также вводится множитель  $N^2$ , учитывающий, что каждая ЛНУ состоит из  $N$  слоев, а каждый слой одной ЛНУ взаимодействует со всеми  $N$  слоями другой ЛНУ. Данный множитель коррелирует с общим числом атомов в системе и описывает усиление суммарного потенциала притяжения пропорционально количеству структурных слоев. Такое допущение позволяет учесть аддитивный характер сил Ван-дер-Ваальса:

$$E_0 = \frac{A_H N^2}{24} \frac{d_{ЛНУ}}{H} \text{ при } H < d_{ЛНУ}. \quad (7)$$

Характер убывания энергии с увеличением расстояния между взаимодействующими наноразмерными элементами свидетельствует о том, что точечное взаимодействие в агломератах разрушается значительно легче, чем протяженное.

Следовательно, замена классических зависимостей энергии взаимодействия УНТ на модифицированные с использованием коэффициента  $N^2$  позволяет учесть высокую поляризуемость многослойных нанообъектов.

Таким образом, представленные формулы позволяют рассчитывать критические значения энергии, необходимые для дезинтеграции кластеров многослойных УНТ различной морфологии, что является фундаментом для определения оптимального времени механоактивации порошковой системы.

Энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия углеродного наноразмерного наполнителя в образце:

– при параллельном расположении

$$E_{\parallel} = 0,5n_{\text{УНТ}}E_{\parallel}, \quad (8)$$

где  $n_{\text{УНТ}}$  – количество УНТ в образце, шт.;

– при скрещивающемся расположении

$$E_{\perp} = 0,5n_{\text{УНТ}}E_{\perp}. \quad (9)$$

Общая энергия взаимодействия

$$E_{\text{total}} = E_{\parallel} + E_{\perp}; \quad (10)$$

$$E_{\text{total}} = n_{\text{УНТ}} \frac{A_H N^2}{48H} \left( l d_{\text{УНТ}}^2 H^{\frac{1}{2}} + 2d_{\text{УНТ}} \right). \quad (11)$$

Энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия ЛНУ в агломерате:

$$E_{\text{oo}} = 0,5n_{\text{ЛНУ}}N_C E_{\text{oo}}, \quad (12)$$

где  $N_C$  – координационное число, характеризующее количество ближайших «соседей», окружающих данную ЛНУ в агломерате. Для неупорядоченной плотной упаковки нанодисперсных частиц в агломератах, формируемых за счет ван-дер-ваальсовых взаимодействий, характерно значение  $N_C \approx 8$ .

$$E_{\text{oo}} = 0,5n_{\text{ЛНУ}}N_C N^2 \frac{A_H d_{\text{ЛНУ}}}{24 H}. \quad (13)$$

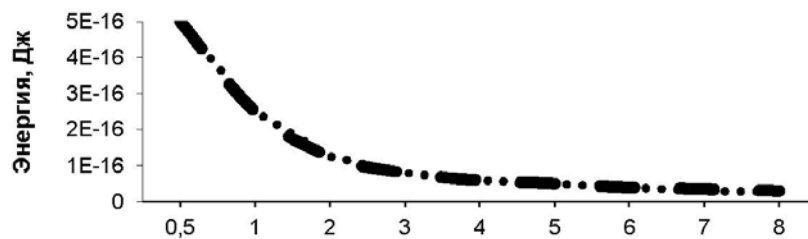
В работе [5] для двух параллельно расположенных однослойных УНТ с диаметром 1,36 нм представлено расчетное удельное значение энергии взаимодействия, равное 0,095 эВ/Å ( $1,52 \times 10^{-20}$  Дж/Å), что сопоставимо со значением энергии взаимодействия, рассчитанным в данной работе для однослойной УНТ с диаметром 1,36 нм и равным 0,184 эВ/Å ( $2,94 \times 10^{-20}$  Дж/Å). В работах [9, 10] отмечается, что УНТ агломерируются друг с другом под воздействием энергии ван-дер-ваальсовой связи, составляющей 500 эВ на микрометр контакта между трубками ( $8 \times 10^{-17}$  Дж/мкм).

В работе [5] также указывается, что для двух скрещивающихся многослойных УНТ с диаметром 10 нм, расположенных на расстоянии 0,34 нм, расчетное значение энергии взаимодействия составляет 10 эВ на контакт ( $1,6 \times 10^{-18}$  Дж). Сравнительный анализ показал, что представленное значение сопоставимо с результатом, рассчитанным в данной работе для двух скрещивающихся многослойных УНТ с диаметром 10 нм, расположенных на расстоянии 0,34 нм, для которых энергия взаимодействия составляет 9,4 эВ ( $1,5 \times 10^{-18}$  Дж).

Таким образом, показано влияние пространственного расположения углеродного наноструктурного наполнителя на величину энергии взаимодействия. На основании анализа результатов исследований можно сделать следующие выводы. Из представленных результатов расчетов видно, что значения энергии ван-дер-ваальсового взаимодействия при параллельном расположении УНТ значительно превышают значения энергии при скрещивающемся расположении, что объясняется значительной протяженностью взаимодействия. Увеличение расстояния между взаимодействующими УНТ значительно снижает энергию взаимодействия [4] (рис. 2).



а)



б)

Рис. 2. Энергия вандерваальсового взаимодействия двух параллельно расположенных УНТ (а), двух скрещивающихся УНТ и двух ЛНУ (б) в зависимости от расстояния между ними  $H$ :  
 — скрещивающееся расположение УНТ; •••• — ЛНУ.  
 $a - d_{\text{УНТ}} = 50$  нм;  $l = 500$  нм;  $N = 10$ ; б)  $d_{\text{ЛНУ}} = 50$  нм;  $N = 10$

На рис. 3 представлены зависимости влияния количества слоев  $N$  многослойных наноструктур углерода на энергию вандерваальсового взаимодействия в агломерате. Характер зависимости обуславлен аддитивным вкладом межслоевых взаимодействий, при котором каждый слой одной наноструктуры взаимодействует с каждым слоем другой. Рост энергии агломерации при увеличении  $N$  свидетельствует о повышенной устойчивости агломератов многослойных наноструктур к механическому воздействию, что необходимо учитывать при выборе режимов механоактивации порошковых систем.

Однако дезагломерированные УНТ и ЛНУ склонны к образованию новых агломератов. Следовательно, их необходимо закрепить на поверхности микроразмерных частиц медной матрицы.

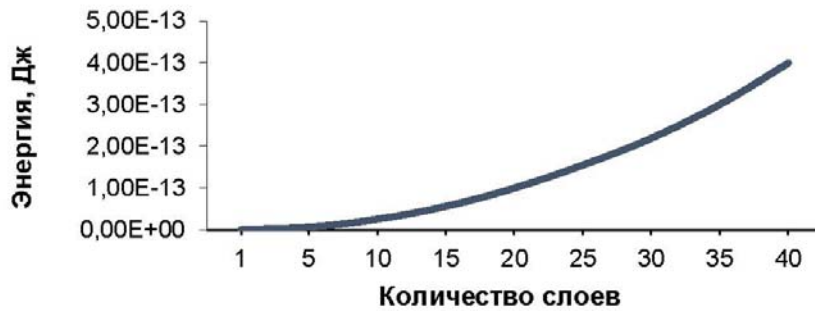
Ниже представлен расчет энергии, необходимой для закрепления УНТ на поверхности частиц матрицы. Данная энергия будет представлять собой работу, которую необходимо совершить для внедрения УНТ в медную матрицу при условии ее локального деформирования.

Энергия, необходимая для внедрения УНТ в поверхность металлической частицы:

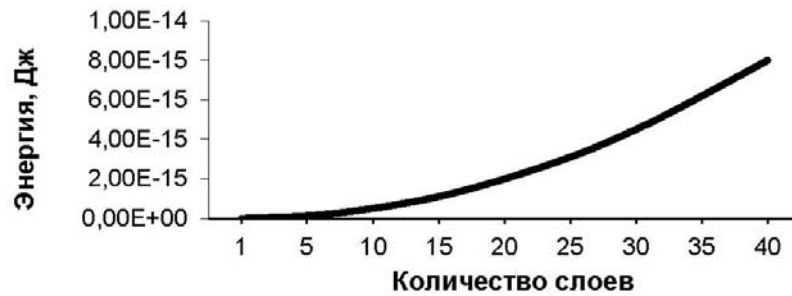
$$E_{\text{УНТ-М}} = n_{\text{УНТ}} \sigma_{\text{ТМ}} V_{\text{УНТ-М}}, \quad (14)$$

где  $\sigma_{\text{ТМ}}$  – предел текучести металла матрицы, например, для меди  $\sigma_{\text{ТМ}} = 100$  МПа;  $V_{\text{УНТ-М}}$  – объем внедренной части УНТ, м<sup>3</sup>.

Данная формула имеет ряд допущений: сопротивление внедрению предполагается постоянным и равным пределу текучести на протяжении всего процесса внедрения; упрощена геометрическая сложность контактного взаимодействия УНТ с поверхностью меди; предполагается, что вся работа внешних сил расходуется только на пластическую деформацию при напряжениях, соответствующих пределу текучести материала (не принимаются во внимание механизмы диссипации энергии, такие как трение, генерация тепла, образование дислокаций). Использование данной формулы позволяет определить величину энергии с точностью, достаточной для инженерных расчетов.



а)



б)

Рис. 3. Энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия двух параллельно расположенных УНТ (а) и двух ЛНУ (б) в зависимости от количества графеновых слоев  $N$ :

$a - d_{\text{УНТ}} = 50 \text{ нм}; l = 500 \text{ нм}; H = 0,5 \text{ нм};$

$b - d_{\text{ЛНУ}} = 50 \text{ нм}; H = 0,5 \text{ нм}$

Для количественного анализа взаимодействия на границе раздела «металл – УНТ» при механическом воздействии необходимо определить объем внедренной части УНТ в металл матрицы. В общем случае объем сегмента  $V_{\text{УНТ-М}}$ , образующегося при латеральном (боковом) внедрении цилиндрического индентора на произвольную глубину  $\delta$ , описывается следующим аналитическим выражением:

$$V_{\text{УНТ-М}} = \frac{d_{\text{УНТ}}^2 l}{4} \left[ \arccos \left( 1 - \frac{2\delta}{d_{\text{УНТ}}} \right) - \left( 1 - \frac{2\delta}{d_{\text{УНТ}}} \right) \sqrt{\frac{4\delta}{d_{\text{УНТ}}} - \left( \frac{2\delta}{d_{\text{УНТ}}} \right)^2} \right] \text{ при } 0 \leq \delta \leq d_{\text{УНТ}}, \quad (15)$$

где  $\delta$  – глубина внедрения УНТ, м.

При  $\delta = 0,5d_{\text{УНТ}}$  формула упрощается до объема полуцилиндра:

$$V_{\text{УНТ-М}} = \frac{\pi d_{\text{УНТ}}^2 l}{8}. \quad (16)$$

Энергия, необходимая для внедрения ЛНУ в поверхность порошковой металлической частицы:

$$E_{\text{ЛНУ-М}} = n_{\text{ЛНУ}} \sigma_{\text{ТМ}} V_{\text{ЛНУ-М}}, \quad (17)$$

где  $V_{\text{ЛНУ-М}}$  – объем внедренной части ЛНУ,  $\text{м}^3$ .

$$V_{\text{ЛНУ-М}} = \frac{\pi h^2}{3} \left( \frac{3d_{\text{ЛНУ}}}{2} - h \right) \text{ при } 0 \leq h \leq d_{\text{ЛНУ}}, \quad (18)$$

где  $h$  – глубина внедрения ЛНУ,  $\text{м}$ .

При  $h = 0,5d_{\text{ЛНУ}}$  формула упрощается до объема полусферы:

$$V_{\text{ЛНУ-М}} = \frac{\pi d_{\text{ЛНУ}}^3}{12}. \quad (19)$$

Также в процессе механоактивации энергия затрачивается на деформирование частиц металлической матрицы. Количество энергии на деформирование частиц матрицы можно рассчитать следующим образом:

$$E_{\text{М}} = n_{\text{М}} \sigma_{\text{ТМ}} V_{\text{М}} \varepsilon_p, \quad (20)$$

где  $n_{\text{М}}$  – количество порошковых частиц металла в образце, шт.;  $V_{\text{М}}$  – средний объем частицы металлической матрицы,  $\text{м}^3$ ;  $\varepsilon_p$  – относительная деформация порошковых частиц металла.

$$V_{\text{М}} = \frac{\pi d_{\text{М}}^3}{6}; \quad (21)$$

$$\varepsilon_p = \frac{h_{\text{М}}}{d_{\text{М}}}, \quad (22)$$

где  $h_{\text{М}}$  – величина деформации частиц металла,  $\text{мкм}$ ;  $d_{\text{М}}$  – диаметр порошковых частиц металла,  $\text{мкм}$ .

Следует отметить, что формула (20) представляет собой оценочное выражение, полученное при ряде упрощающих предположений: частица металла аппроксимируется телом простой геометрии, напряжения и деформации считаются однородно распределенными, локальные эффекты взаимодействия с матрицей не учитываются.

В реальных условиях задача внедрения твердого тела в жесткопластическую полуплоскость является классической задачей механики деформируемого твердого тела и требует более сложного подхода, включающего построение поля напряжений и деформаций в зоне контакта, учет упругопластических свойств материалов, принятие во внимание возможных неоднородностей и сложной геометрии частиц, возможное применение численных методов (метод конечных элементов).

Тем не менее использование формулы (20) оправдано в рамках данного анализа и позволяет получить значение величины энергии, необходимой для оценки эффективности процессов механоактивации. Для более точного количественного анализа в дальнейшем целесообразно применять модели пластической деформации с использованием известных решений задачи о внедрении твердого тела в полуплоскость.

Количество энергии, подводимой к активируемой системе в единицу времени [11]:

$$P = 0,5 K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b, \quad (23)$$

где  $K_a$  – коэффициент, зависящий от упругости соударения;  $K_b$  – константа, зависящая от геометрии рабочих органов смесителя-активатора;  $K_v$  – константа, зависящая от конструктивных особенностей рабочей камеры смесителя-активатора;  $m_b$  – масса одного активного рабочего органа, кг;  $n$  – частота вращения рабочей камеры,  $\text{мин}^{-1}$ ;  $R$  – радиус окружности рабочей камеры смесителя-активатора, м;  $N_b$  – количество активных рабочих органов.

Масса рабочего органа:

$$m_b = \frac{\pi d_b^3 \rho_b}{6}, \quad (24)$$

где  $d_b$  – диаметр рабочего органа, м;  $\rho_b$  – плотность материала рабочего органа смесителя-активатора,  $\text{кг/м}^3$ .

Таким образом, проведенный энергетический расчет процесса предварительной механоактивации порошковых систем «металл – наноструктуры углерода» показал, что количество подводимой энергии зависит от частоты вращения и размеров рабочей камеры смесителя-активатора, диаметра и материала активных органов. Сопоставляя необходимое количество энергии с подводимым количеством энергии при использовании смесителя-активатора, можно рассчитать время механоактивации.

В случае использования УНТ в качестве наполнителя:

$$t(n) = \frac{n_{\text{УНТ}} A_H N^2 \left( l d_{\text{УНТ}}^2 H^{\frac{1}{2}} + 2 d_{\text{УНТ}} \right)}{24 H K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b} +$$

$$+ \frac{n_{\text{УНТ}} \sigma_{\text{ТМ}} d_{\text{УНТ}}^2 l \left[ \arccos \left( 1 - \frac{2\delta}{d_{\text{УНТ}}} \right) - \left( 1 - \frac{2\delta}{d_{\text{УНТ}}} \right) \sqrt{\frac{4\delta}{d_{\text{УНТ}}} - \left( \frac{2\delta}{d_{\text{УНТ}}} \right)^2} \right]}{2 K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b} +$$

$$+ \frac{\pi n_M \sigma_{\text{ТМ}} d_M^2 h_M}{3 K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b}. \quad (25)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned}
 H &\geq H_c; \\
 H &< d_{\text{УНТ}}; \\
 \delta &\leq d_{\text{УНТ}}; \\
 \delta_M &< d_M; \\
 n &\leq n_{\text{кр}},
 \end{aligned} \tag{26}$$

где  $n_{\text{кр}}$  – критическая частота вращения рабочей камеры,  $\text{мин}^{-1}$ .

В случае внедрения УНТ боковой поверхностью на величину, равную радиусу УНТ, выражение (25) упрощается:

$$\begin{aligned}
 t(n) = n_{\text{УНТ}} \frac{A_H N^2 \left( l d_{\text{УНТ}}^{\frac{1}{2}} H^{\frac{1}{2}} + 2d_{\text{УНТ}} \right) + 6\pi \sigma_{\text{ТМ}} d_{\text{УНТ}}^2 l H}{24 H K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b} + \\
 + \frac{\pi n_M \sigma_{\text{ТМ}} d_{\text{УНТ}}^2 h_M}{3 K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b}.
 \end{aligned} \tag{27}$$

В случае использования ЛНУ в качестве наполнителя:

$$\begin{aligned}
 t(n) = n_{\text{ЛНУ}} \frac{N_c A_H N^2 \frac{d_{\text{ЛНУ}}}{H} + 8\pi \sigma_{\text{ТМ}} h^2 (3d_{\text{ЛНУ}} - 2h)}{24 K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b} + \\
 + \frac{\pi n_M \sigma_{\text{ТМ}} d_M^2 h_M}{3 K_a K_b^2 K_v m_b \left( \frac{\pi n}{30} \right)^3 R^2 N_b}.
 \end{aligned} \tag{28}$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned}
 H &\geq H_c; \\
 H &< d_{\text{ЛНУ}}; \\
 h &\leq d_{\text{ЛНУ}}; \\
 h_M &< d_M; \\
 n &\leq n_{\text{кр}}.
 \end{aligned} \tag{29}$$

При внедрении половины ЛНУ в металл матрицы выражение (28) упрощается:

$$t(n) = n_{\text{ЛНУ}} \frac{N_C A_H N^2 d_{\text{ЛНУ}} + 4\pi \sigma_{\text{ТМ}} d_{\text{ЛНУ}}^3 H}{24H K_a K_b^2 K_v m_b \left(\frac{\pi n}{30}\right)^3 R^2 N_b} + \frac{\pi n_M \sigma_{\text{ТМ}} d_M^2 h_M}{3K_a K_b^2 K_v m_b \left(\frac{\pi n}{30}\right)^3 R^2 N_b}. \quad (30)$$

В рамках разработанных моделей приняты следующие допущения: силы ван-дер-ваальсового взаимодействия аддитивны; деформация металлической матрицы носит локальный характер; разрушение агломератов происходит без разрушения наноструктур; распределение энергии по объему системы считается равномерным.

Таким образом, разработана математическая модель процесса механоактивации порошковой смеси на основе металлической матрицы и наноструктур углерода, основанная на рассмотрении протекающих на технологической стадии активирования физических процессов, учитывающая форму, размеры и свойства исходных дисперсных компонентов различного структурного уровня, частоту вращения и особенности конструкции рабочей камеры смесителя-активатора. Модель позволяет на основе критериев эффективного разделения агломератов наноструктур углерода и их распределения в процессе смешивания нано- и микроразмерных исходных компонентов композиционных материалов установить оптимальное время механоактивации порошковой системы различной массы, достаточное для разрушения агломератов наноструктур углерода и их распределения в порошковой металлической матрице.

Для количественной оценки условий разрушения агломератов наноструктур углерода в процессе механоактивации введен безразмерный энергетический критерий эффективности механоактивации, определяемый как отношение подводимой к системе механической энергии к энергии межчастичного взаимодействия в агломератах:

$$\Pi_{\text{УНТ}} = \frac{Pt}{E_o + E_{\text{УНТ-М}} + E_M}, \quad \Pi_{\text{ЛНУ}} = \frac{Pt}{E_{\text{оо}} + E_{\text{ЛНУ-М}} + E_M}, \quad (31)$$

Физический смысл данного критерия заключается в сопоставлении энергетического вклада внешнего механического воздействия с энергией, необходимой для преодоления ван-дер-ваальсового взаимодействия между наноструктурами углерода. При значениях  $\Pi_{\text{УНТ}} < 1$  ( $\Pi_{\text{ЛНУ}} < 1$ ) подводимой энергии недостаточно для эффективного разрушения агломератов, и наноструктуры сохраняют исходное агломерированное состояние. При  $\Pi_{\text{УНТ}} \approx 1$  ( $\Pi_{\text{ЛНУ}} \approx 1$ ) достигаются оптимальные условия механоактивации, при которых обеспечивается дезагломерация углеродных наноструктур и их равномерное распределение в объеме металлической матрицы. Значения  $\Pi_{\text{УНТ}} > 1$  ( $\Pi_{\text{ЛНУ}} > 1$ ) соответствуют режимам избыточного механического воздействия, при которых возрастает вероятность разрушения наноструктур и интенсификации дефектообразования в частицах матрицы.

Введение энергетического критерия  $\Pi_{\text{УНТ}}$  ( $\Pi_{\text{ЛНУ}}$ ) позволяет обобщить результаты расчетов и использовать его в качестве универсального параметра для прогнози-

рования рациональных режимов механоактивации порошковых систем «металл – наноструктуры углерода» независимо от типа наномодификатора и конструктивных особенностей смесителя-активатора.

Анализ разработанной математической модели позволил сделать следующие выводы. Для композиционной системы на основе медной матрицы, наполненной 0,07 мас. % УНТ ( $d_{\text{УНТ}} = 50$  нм,  $l = 500$  нм), количества механической энергии, подводимой в течение времени от 55 до 65 мин при частоте вращения рабочей камеры смесителя-активатора от 85 до 90 мин<sup>-1</sup>, достаточно для разрушения агломератов и распределения УНТ в металлической матрице. В случае использования ЛНУ ( $d_{\text{УНТ}} = 50$  нм) в качестве наноразмерного наполнителя медной матрицы необходимое время механоактивации составляет от 35 до 40 мин при частоте вращения рабочей камеры смесителя-активатора от 85 до 90 мин<sup>-1</sup>. При этом количество подводимой энергии позволяет сохранить структуру дендритных частиц медной матрицы.

Таким образом, при обработке композиционных материалов на основе порошковых систем «медь – наноструктурный наполнитель» в смесителе-активаторе возникают одновременно протекающие процессы разрушения и уменьшения размеров агломератов наноструктур углерода, распределения и закрепления наночастиц наполнителя в поверхностном слое и в междендритном пространстве порошковых частиц металлической матрицы, что в итоге обеспечивает рост числа контактов «металл–металл».

### **Заключение**

В работе представлена математическая модель процесса механоактивации порошковых систем на основе металлической матрицы и наноструктур углерода, основанная на энергетическом анализе совокупности физических процессов, протекающих на стадии смешивания исходных металлических микроразмерных и углеродных наноразмерных компонентов. Модель учитывает особенности ван-дер-ваальсового взаимодействия наноструктур углерода различной морфологии, их пространственную ориентацию в агломератах, а также физико-механические свойства исходных компонентов и технологические параметры работы смесителя-активатора.

Предложен модифицированный подход к оценке энергии взаимодействия многослойных углеродных нанотрубок и луковичных наноструктур углерода, основанный на введении эффективной константы взаимодействия, пропорциональной квадрату числа графеновых слоев. Данное допущение позволяет адекватно учитывать межчастичное притяжение в агломератах без существенного усложнения расчетного аппарата.

Показано, что величина энергии агломерации существенно зависит от пространственного расположения наноструктур: при параллельной ориентации УНТ энергия взаимодействия значительно превышает аналогичные значения для скрещивающегося расположения, что определяет различную устойчивость агломератов к механическому воздействию. Установлено, что разрушение агломератов, образованных параллельно расположенными УНТ, требует наибольших энергетических затрат, тогда как локальные контакты, образованные скрещивающимися УНТ и ЛНУ, разрушаются значительно легче.

В рамках модели проведен энергетический анализ процессов дезагломерации углеродных наноструктур, их закрепления на поверхности частиц металлической матрицы и деформирования частиц металлической матрицы, что позволило связать требуемое количество энергии с конструктивными параметрами смесителя-активатора и определить оптимальное время механоактивации порошковой системы.

С использованием разработанной модели установлено, что для композиционной системы на основе медного порошка с содержанием 0,07 мас. % УНТ подвод механической энергии в течение 55–65 мин при частоте вращения рабочей камеры 85–90 мин<sup>-1</sup> является достаточным для разрушения агломератов и распределения наноструктур при сохранении целостности частиц матрицы. Для композиционной смеси порошка меди и 0,07 мас. % ЛНУ подведение механической энергии в течение 35–40 мин при частоте вращения рабочей камеры 85–90 мин<sup>-1</sup> обеспечивает разрушение агломератов и закрепление ЛНУ на поверхности металлических частиц. Результаты проведенных исследований согласуются с экспериментальными данными, полученными ранее [12].

Полученные результаты создают теоретическую основу для прогнозирования и рационального выбора режимов механоактивации порошковых композиций «металл – наноструктуры углерода», позволяют сократить объем экспериментальных исследований и повысить воспроизводимость технологических процессов получения композиционных материалов с металлической матрицей, наполненной наноразмерными компонентами.

### Литература

1. Simoes, S. Design and development of metal matrix composites / S. Simoes // *Metals*. – 2025. – Vol. 15, iss. 8. – P. 848–852. – DOI 10.3390/met15080848
2. Пасовец, В. Н. Получение, свойства и безопасность композитов на основе порошковых металлов и наноструктур углерода / В. Н. Пасовец, В. А. Ковтун, Ю. М. Плескачевский. – Гомель : БелГУТ, 2011. – 200 с.
3. Comprehensive review of Carbon-based nanostructures: Properties, synthesis, characterization, and cross-disciplinary applications / M. Saleh, A. Gul, A. Nasir [et al.] // *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. – 2025. – Vol. 146. – P. 176–212. – DOI 10.1016/j.jiec.2024.11.052
4. Research of the interaction energy of carbon nanotubes in the agglomeration process / V. Kovtun, V. Pasovets, Y. Mirchev, M. Mihovski // *International Journal “NDT Days”*. – 2020. – Vol. 3, iss. 2. – P. 72–79.
5. Huang, Y. Y. Dispersion of carbon nanotubes: mixing, sonication, stabilization, and composite properties / Y. Y. Huang, E. M. Terentjev // *Polymers*. – 2012. – Vol. 4, iss. 1. – P. 275–295.
6. Hamaker, H. C. The London van der Waals attraction between spherical particles / H. C. Hamaker // *Physica*. – 1937. – Vol. 4, iss. 10. – P. 1058–1072.
7. Bhushan, B. Applied scanning probe methods viii: scanning probe microscopy techniques / B. Bhushan, H. Fuchs, M. Tomitori. – Berlin : Springer-Verlag, 2008. – 519 p.
8. Ohshima, H. Chapter 8 – van der Waals interaction between two particles / H. Ohshima // *Interface Science and Technology*. – 2024. – Vol. 37. – P. 197–215.
9. Girifalco, L. A. Carbon nanotubes, buckyballs, ropes, and a universal graphitic potential / L. A. Girifalco, M. Hodak, R. S. Lee // *Physical Review B*. – 2000. – Vol. 62, iss. 19. – P. 13104–13110.
10. Pavlenko, E. Probing interaction and dispersion of carbon nanotubes in metal and polymer matrices / E. Pavlenko. – Toulouse : Paul Sabatier University, 2014. – 148 p.
11. Пасовец, В. Н. Технологические особенности введения наноразмерных компонентов в порошковые композиты на основе меди / В. Н. Пасовец, В. А. Ковтун // *Вестник Гомельского государственного технического университета имени П. О. Сухого*. – 2020. – № 1 (80). – С. 47–55.
12. Пасовец, В. Н. Влияние механоактивации исходных порошковых компонентов на структурообразование и свойства композиционных материалов на основе систем медь – наноструктуры углерода / В. Н. Пасовец, В. А. Ковтун // *Материалы, технологии, инструменты*. – 2008. – Т. 13, № 3. – С. 87–93.

## References

1. Simoes S. Design and development of metal matrix composites. *Metals*, 2025, vol. 15, iss. 8, pp. 848 – 852. <https://doi.org/10.3390/met15080848>
2. Pasovets V. N., Kovtun V. A., Pleskachevskiy Yu. M. *Production, properties and safety of composites based on powder metals and carbon nanostructures*. Gomel, BelGUT, 2011. 200 p. (in Russian).
3. Saleh M., Gul A., Nasir A., T. O. Moses, Nural Y., Yabalak E. Comprehensive review of Carbon-based nanostructures: Properties, synthesis, characterization, and cross-disciplinary applications. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2025, vol. 148, pp. 176–212. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2024.11.052>
4. Kovtun V., Pasovets V., Mirchev Y., Mihovski M. Research of the interaction energy of carbon nanotubes in the agglomeration process. *International journal “NDT Days”*, 2020, vol. 3, iss. 2, pp. 72–79.
5. Huang Y. Y., Terentjev E. M. Dispersion of carbon nanotubes: mixing, sonication, stabilization, and composite properties. *Polymers*, 2012, vol. 4, iss. 1, pp. 275–295.
6. Hamaker H. C. The London – van der Waals attraction between spherical particles. *Physica*, 1937, vol. 4, iss. 3, pp. 1058–1072.
7. Bhushan B., Fuchs H., Tomitori M. *Applied scanning probe methods viii: scanning probe microscopy techniques*. Berlin, Springer-Verlag Publ., 2008. 519 p.
8. Ohshima H. Chapter 8 – van der Waals interaction between two particles. *Interface Science and Technology*, 2024, vol. 37, pp. 197–215.
9. Girifalco L. A., Hodak M., Lee R. S. Carbon nanotubes, buckyballs, ropes, and a universal graphitic potential. *Physical Review B*, 2000, vol. 62, iss. 19, pp. 13104–13110.
10. Pavlenko E. *Probing interaction and dispersion of carbon nanotubes in metal and polymer matrices*. Toulouse, Paul Sabatier University, 2014. 148 p.
11. Pasovets V. N., Kovtun V. A. Technological Features of Incorporating Nanoscale Components into Copper-Based Powder Composites. *Vestnik Gomel'skogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta imeni P. O. Sukhogo*, 2020, no. 1 (80), pp. 47–55 (in Russian).
12. Pasovets V. N., Kovtun V. A. The influence of mechanical activation of the initial powder components on the structure formation and properties of composite materials based on copper-carbon nanostructure systems. *Materialy, tekhnologii, instrumenty*, 2008, vol. 13, no. 3, pp. 87–93 (in Russian).

Поступила 03.02.2026 г.