

بررسی اثر پارامترهای هندسی و ساختاری نانولوله‌های کربنی بر جذب صوت در محیط گازی آرگون با رویکرد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

فهیمة مختاری^۱، محمد کامالوند^{۲*}، محمد مهدی جلیلی^۳

^۱ دانشجوی دکتری، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد، یزد، ایران

^۲ دانشیار، گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه یزد، یزد، ایران

^۳ استاد، گروه دینامیک و کنترل، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۴/۰۷؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۴/۰۸/۱۸؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۹/۱۱

چکیده

آلودگی صوتی یکی از چالش‌های مهم محیط زیست است که می‌تواند سلامت انسان و پایداری اکوسیستم را تهدید کند. استفاده از نانوساختارهای کربنی به دلیل استحکام مکانیکی بالا و ویژگی‌های منحصر به فرد هندسی، رویکردی نوین برای جذب صوت در مقیاس نانو متر به شمار می‌آید. در این پژوهش، انتشار و جذب امواج صوتی در محیط گازی آرگون با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شد. مدل ابتدا در غیاب جاذب اعتبارسنجی گردید و سپس اثر قطر، تعداد، آرایش و فرکانس بر پارامترهای آکوستیکی شامل ضریب میرایی، عدد موج و ضریب جذب تحلیل شد. نتایج نشان داد افزایش قطر نانولوله‌ها سطح تماس مؤثر را گسترش داده و افزایش تعداد آن‌ها با کاهش مسیر آزاد مؤثر مولکول‌ها، کارایی جذب را بهبود می‌دهد. آرایش مثلثی با محدودسازی فضا و افزایش برخوردهای گاز-دیواره، بالاترین ضریب جذب را ایجاد کرد. همچنین بررسی وابستگی فرکانس نشان داد میان فرکانس، ضریب میرایی و ضریب جذب همبستگی مستقیم برقرار است که تطابق آن با مطالعات پیشین، اعتبار شبیه‌سازی حاضر را تأیید می‌کند. محدودیت اصلی مطالعه، تمرکز بر محیط گازی آرگون و استفاده از نانولوله‌های تک‌جداره با ابعاد محدود است. با این وجود، یافته‌ها بر اهمیت بهینه‌سازی هندسه و پارامترهای ساختاری نانوجاذب‌ها برای طراحی سامانه‌های کارآمد کنترل نویز در فرکانس‌های بالا تأکید دارند.

کلمات کلیدی: جذب صوت؛ نانوجاذب؛ میرایی آکوستیکی؛ محیط گازی آرگون.

Investigation of the Effects of Geometric and Structural Parameters of Carbon Nanotubes on Sound Absorption in an Argon Gas Environment Using a Molecular Dynamics Simulation Approach

Fahimeh Mokhtari¹, Mohammad Kamalvand^{2,*}, Mohammad Mehdi Jalili³

¹ Ph.D. Student, Department of Physical Chemistry, Faculty of chemistry, Yazd University, Yazd, Iran

² Assoc.Prof, Department of Physical Chemistry, Faculty of chemistry, Yazd University, Yazd, Iran

³ Professor, Department of Dynamics and Control, Faculty of Mechanical Engineering, Yazd University, Yazd, Iran

Abstract

Noise pollution poses a significant threat to human health and ecosystem stability. Carbon-based nanostructures, with their exceptional mechanical strength and unique geometries, offer a promising strategy for nanoscale sound absorption. In this study, molecular dynamics simulations were employed to examine acoustic wave propagation and absorption in argon gas. The model was first validated without an absorber, followed by an analysis of how nanotube diameter, quantity, arrangement, and frequency influence key acoustic parameters, including attenuation, wave number, and absorption coefficient. Findings indicate that larger nanotube diameters enhance effective contact area, while increasing the number of nanotubes shortens molecular free paths, thereby improving absorption. A triangular arrangement maximized absorption by confining space and intensifying gas-wall interactions. Frequency-dependent analysis showed a clear correlation between frequency, attenuation, and absorption, aligning with previous studies and confirming the simulation's validity. The study is limited to argon gas and single-walled nanotubes of restricted dimensions. Nonetheless, the results underscore the critical role of optimizing nano-absorber geometry and structural parameters for designing effective high-frequency noise-control systems.

Keywords: Sound Absorption; Nano-Absorber; Acoustic Damping; Argon Gas Environment.

۱- مقدمه

* نویسنده مسئول؛ تلفن: ۰۳۵۳۸۲۱۲۶۴۱؛ فکس: ۰۳۵۳۸۲۱۰۶۴۴

آدرس پست الکترونیک: kamalvand@yazd.ac.ir

آکوستیک در نانولوله‌ها انجام شده است که نشان می‌دهد روش دینامیک مولکولی قادر است رفتار جذب صوت و محاسبه ضرایب تضعیف را مطابق با نظریه موج ایستا به‌طور دقیق شبیه‌سازی کند [۱۷ و ۱۹]. به‌منظور تحلیل دقیق‌تر خواص آکوستیکی و مکانیکی این ساختارها، مطالعات مختلفی در زمینه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانولوله‌های کربنی انجام شده است. برای نمونه، اثر انرژی سطح بر فرکانس‌های طبیعی نانومیله‌های تابعی مدرج ترک‌دار بررسی شده و نتایج نشان داده است که تغییرات سطحی می‌تواند تأثیر قابل‌توجهی بر رفتار آکوستیکی این نانوساختارها داشته باشد [۲۰]. همچنین، یک مدل اصلاح‌شده مکانیک مولکولی ساختاری برای تحلیل خواص مکانیکی و غیرخطی نانولوله‌های کربنی ارائه گردیده که دقت قابل‌ملاحظه‌ای در این تحلیل‌ها فراهم می‌آورد [۲۱]. در مطالعه‌ای دیگر، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اثر طول نانولوله کربنی بر عملکرد جذب انرژی نانوسیال بررسی شده و نتایج نشان داده است که افزایش طول و قطر نانولوله بر میزان جذب و انتقال انرژی تأثیرگذار است [۲۲]. افزون بر این، رفتار ارتعاشی و تغییرات ساختاری نانولوله کربنی تحت جذب فیزیکی یک مولکول زیستی مورد بررسی قرار گرفته و نقش قابل‌توجه برهم‌کنش سطحی در تغییر خواص مکانیکی و دینامیکی این ساختارها گزارش شده است [۲۳]. این مطالعات در مجموع چشم‌اندازی روشن برای توسعه تحقیقات در زمینه جذب‌های آکوستیکی و صوتی نانومقیاس فراهم می‌سازند. اگرچه تاکنون قابلیت نانولوله‌های کربنی به‌عنوان جذب‌های صوتی به اثبات رسیده، اما تأثیر قطر و تراکم نانولوله‌ها، همچنان نیازمند بررسی دقیق‌تری است.

هدف اصلی این پژوهش، بررسی تأثیر پارامترهای هندسی و آرایش ساختاری نانولوله‌های کربنی و اثر فرکانس بر میزان جذب صوت در محیط گازی آرگون با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. همچنین، این تحقیق به دنبال ارائه درکی روشن از نقش نفوذ گاز و توزیع فضایی نانولوله‌های کربنی در بهبود راندمان جذب آکوستیکی در مقیاس نانومتر می‌باشد.

برای درک دقیق برهم‌کنش چندین نانولوله کربنی با امواج صوتی، ابتدا لازم است رفتار انتشار و جذب موج در اطراف یک نانولوله منفرد بررسی شود. این مرحله پایه‌ای، امکان شناسایی مکانیزم‌های اصلی جذب و سهم هر لوله به‌صورت مجزا را فراهم

آلودگی محیط زیست در سطح جهانی به چهار دسته‌ی اصلی شامل آلودگی هوا، آب، صوت و پسماند جامد تقسیم می‌شود [۱]. در این میان، آلودگی صوتی به‌عنوان سومین نوع رایج شناخته شده که نه‌تنها موجب برهم خوردن تعادل زیستی در محیط‌های طبیعی می‌گردد، بلکه تهدیدی جدی برای سلامت جسمی و روانی انسان نیز محسوب می‌شود. عوارضی همچون اختلالات شنوایی، بی‌خوابی، افزایش تنش عصبی و کاهش تمرکز از جمله پیامدهای این نوع آلودگی هستند [۲].

یکی از روش‌های مؤثر و اقتصادی برای کاهش آلودگی صوتی، استفاده از جاذب‌های صوتی و نصب آن‌ها در مسیر انتشار موج صوتی است [۳]. جاذب‌های صوتی به‌طور کلی به دو دسته‌ی اصلی متخلخل و تشدیدگر تقسیم می‌شوند [۴]. در میان آن‌ها، ساختارهای متخلخل با سلول‌های باز، به دلیل چگالی کم، مقاومت مکانیکی مطلوب، قابلیت انعطاف‌پذیری بالا و جذب مناسب در بازه‌های وسیع فرکانسی، بیش از سایر گزینه‌ها مورد توجه قرار گرفته‌اند [۵ و ۶].

نمونه‌هایی از این ساختارهای متخلخل سلول باز شامل اسفنج‌ها، سرامیک‌های خاص، گرافین و به‌ویژه نانولوله‌های کربنی هستند [۷-۹]. نانولوله‌های کربنی به دلیل ویژگی‌هایی همچون استحکام مکانیکی بالا، سازگاری زیست‌محیطی، پایداری شیمیایی، رسانایی حرارتی مناسب و توانایی جذب انرژی، به‌عنوان گزینه‌ای مناسب در ساخت نانوکامپوزیت‌های تقویت‌شده و جاذب‌های صوتی شناخته شده‌اند [۱۰-۱۳].

انتشار موج در ساختارهای نانومتری، به شدت تحت تأثیر خواصی همچون طول مشخصه و عدد نادسن ($kn = \lambda/L$) قرار دارد. عدد نادسن که نسبت میانگین مسیر آزاد مولکولی به طول مشخصه محیط است، رفتار سیال را به چهار ناحیه جریان پیوسته، لغزشی، گذار و آزاد طبقه‌بندی می‌کند [۱۴]. مطالعه دقیق رفتار جذب صوت در مقیاس نانومتر، نیازمند روش‌های عددی پیشرفته نظیر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است که با دقت بالا و هزینه‌ی نسبتاً پایین، امکان تحلیل برهم‌کنش‌های مولکولی را فراهم می‌سازد [۱۵-۱۷].

مطالعات پیشین نشان داده‌اند که مدل‌سازی انتشار امواج صوتی در گازهای تک‌اتمی، می‌تواند با برازش غیرخطی نتایج حاصل از مؤلفه‌های سرعت، مقادیر مربوط به سرعت صوت و ضریب تضعیف را استخراج نمایند [۱۸]. در همین راستا، تحقیقات متعددی در زمینه انتشار صوت و اثرات ترمو-

در این رابطه، $k = 2\pi/\lambda$ عدد موج، λ طول موج صوتی، m ضریب میرایی و z فاصله را نشان می‌دهد همچنین v_0 معرف حداکثر سرعت دیواره نوسانی $v_0 = a\omega$ است. پس از برخورد موج با دیواره بازتابنده در انتهای جعبه شبیه‌سازی، موج بازتابی به‌صورت زیر توصیف می‌شود:

$$v_r(z,t) = -v_0 \exp[i(\omega t - k(2l_z - z))] - m(2l_z - z) \quad (۴)$$

برهم‌کنش بین موج ورودی و بازتابی، منجر به تشکیل موج ایستا در محیط می‌شود. شکل کلی سرعت در این شرایط به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$v(z,t) = A(z) \sin \omega t + B(z) \cos \omega t \quad (۵)$$

دامنه سرعت در هر نقطه از برهم‌نهی هارمونیک دو تابع $A(z)$ و $B(z)$ به‌دست می‌آید که می‌توان آن‌ها را با برازش غیرخطی روی داده‌های حاصل از شبیه‌سازی استخراج کرد. فرمول‌های دقیق برای این دو مؤلفه به‌صورت زیر هستند:

$$A(z) = v_0 [e^{-mz} \cos(kz) - e^{-m(2l_z - z)} \cos(k(2l_z - z))] \quad (۶)$$

$$B(z) = -v_0 [e^{-mz} \sin(kz) - e^{-m(2l_z - z)} \sin(k(2l_z - z))] \quad (۷)$$

این معادلات امکان بررسی دقیق دامنه و الگوی موج ایستا را فراهم می‌کنند و پایه تحلیل نتایج در ادامه این تحقیق هستند [۱۷ و ۲۶].

برای استخراج دقیق پارامترهای موج صوتی، لازم بود معادلات (۶) و (۷) به‌صورت همزمان حل شوند. بدین منظور، مقادیر $A(z)$ و $B(z)$ از خروجی شبیه‌سازی محاسبه و سپس با استفاده از فرآیند برازش غیرخطی، ضرایب m و k تعیین گردید. این فرآیند با کدنویسی در محیط نرم افزار متلب اجرا شد تا امکان کنترل بیشتر و دستیابی به دقت بالاتر در بهینه‌سازی فراهم شود.

در روش‌های متداول (مانند استفاده از قابلیت Solver در اکسل)، برازش همزمان دو معادله به‌صورت مستقیم انجام

می‌سازد و مبنایی برای تحلیل آرایش‌های چندلوله‌ای ایجاد می‌کند. به همین دلیل، در گام نخست این پژوهش، انتشار موج صوتی در حضور یک نانولوله منفرد به‌طور جداگانه شبیه‌سازی و تحلیل گردید تا نتایج به‌دست‌آمده، به‌عنوان مبنای مقایسه نسبی برای پیکربندی‌های چندلوله‌ای مورد استفاده قرار گیرد. در همین راستا، ابتدا، مبانی نظری مرتبط به موج صوتی مرور شده و سپس روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای محاسبه جذب و تضعیف تشریح شده است.

۲- روش تحقیق

۲-۱- نظریه موج ایستاده

هنگام انتشار امواج صوتی در محیط گازی، موج صوتی طولی به‌صورت متوالی از ناحیه‌های فشرده و رقیق‌شده عبور کرده و نوساناتی با دامنه و فرکانس مشخص ایجاد می‌کند. با حرکت موج در محیط، انتقال تکانه و انرژی به ذرات ماده صورت می‌گیرد. این انتقال منجر به ارتعاش اجزای سازنده ماده (شامل اتم‌ها، یون‌ها و مولکول‌ها) می‌شود که بسته به فرکانس موج و ویژگی‌های ماده، می‌تواند منجر به بازتاب، تشدید یا میرایی گردد. بررسی این پاسخ‌ها به‌ویژه در مقیاس نانومتر، با استفاده از تلفیق روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و نظریه موج ایستا امکان‌پذیر است [۲۴ و ۲۵].

بر اساس نظریه موج ایستا، انتشار امواج صوتی را می‌توان با مدلی متشکل از یک جعبه پر شده از گاز و دیواره نوسانی در راستای z شبیه‌سازی کرد. در این مدل، دیواره‌ی نوسانگر با حرکت هارمونیک در راستای محور z باعث تولید موج صوتی می‌شود. تغییر مکان و سرعت این دیواره به‌صورت تابعی از زمان به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$Z_\omega(t) = a(1 - \cos \omega t) \quad (۱)$$

$$V_\omega(t) = a\omega \sin \omega t \quad (۲)$$

در روابط بالا، a و ω به ترتیب دامنه و فرکانس زاویه‌ای می‌باشند. همزمان با نوسان دیواره، موج صوتی در جهت z منتشر می‌شود و سبب ایجاد تغییر در مؤلفه سرعت در (z, t) به شکل زیر خواهد شد:

$$v_t(z, t) = v_0 \exp[i(\omega t - kz) - mz] \quad (۳)$$

برای بررسی رفتار جذب صوت در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز، یک جعبه شبیه‌سازی مکعب مستطیلی حاوی گاز آرگون و نانولوله کربنی به‌عنوان جاذب صوت طراحی گردید. محیط گازی مورد استفاده، آرگون خالص با جرم مولکولی ۳۹/۹۴۸ گرم بر مول، چگالی ۱/۸ کیلوگرم بر مترمکعب، فشار ۱ اتمسفر و دمای ۲۷۳ کلون می‌باشد. انتخاب آرگون به دلیل ماهیت تک‌اتمی، عدم واکنش‌پذیری شیمیایی، ساختار ساده و در دسترس بودن داده‌های دقیق پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز انجام شد که امکان تحلیل دقیق پدیده‌های آکوستیکی را بدون پیچیدگی‌های ناشی از ارتعاشات داخلی مولکولی فراهم می‌کند. علاوه بر این، آرگون در بسیاری از مطالعات پیشین به‌عنوان گاز مرجع برای بررسی انتقال صوت در مقیاس نانومتر استفاده شده و داده‌های آن به‌خوبی اعتبارسنجی شده‌اند.

نانولوله‌های کربنی مورد استفاده در این مطالعه از نوع تک‌دیواره (SWCNT) با جرم اتمی کربن ۱۲/۰۱ گرم بر مول می‌باشند. قطر و طول نانولوله‌ها بر اساس شرایط مطالعه و اهداف تحقیق انتخاب شده و در بخش نتایج به تفصیل بررسی گردیده‌اند. انتخاب نانولوله کربنی تک‌دیواره در این مطالعه به دلیل سادگی ساختاری، عدم وجود برهم‌کنش‌های پیچیده بین دیواره‌ها، چگالی کم، کارایی بیشتر و امکان شبیه‌سازی دقیق‌تر انجام شد. این ویژگی‌ها شرایطی فراهم می‌کند که بتوان با دقت، اثرات هندسی و ساختاری بر جذب صوت را به‌صورت خالص تحلیل کرد. با وجود این، مکانیزم‌های کلی جذب صوت که در نانولوله کربنی تک‌دیواره مشاهده می‌شوند می‌توانند به نانولوله‌های چنددیواره (MWCNT) نیز تعمیم یابند. با این حال، وجود دیواره‌های اضافی، برهم‌کنش‌های بین‌لایه‌ای و تفاوت در خواص مکانیکی و ارتعاشی می‌تواند بر مقادیر کمی ضرایب جذب اثرگذار باشد. بررسی دقیق این اثرات مستلزم شبیه‌سازی‌های مجزا و تحلیل تفصیلی است که می‌تواند در تحقیقات آینده دنبال شود.

در این شبیه‌سازی، در راستاهای جانبی (x و y)، شرایط مرزی تناوبی^۵ اعمال گردید تا محیطی شبه‌نامحدود ایجاد شود و از اثرات مرزهای جانبی جلوگیری شود. در راستای انتشار موج (z)، شرط مرزی ثابت^۶ اعمال شد، به‌گونه‌ای که یک دیواره

می‌شود، اما نتیجه به شرایط اولیه وابسته بوده و ممکن است به یک مینیمم موضعی محدود شود، که در این حالت تضمینی برای دستیابی به مینیمم مطلق وجود ندارد. به‌منظور غلبه بر این محدودیت، الگوریتم طراحی‌شده تمامی ترکیب‌های ممکن متغیرهای بهینه‌سازی را بررسی و مقادیری را انتخاب می‌کند که مجموع مربعات خطا در هر دو معادله به حداقل برسد. به این ترتیب، بهینه‌سازی به گونه‌ای انجام شد که مجموع مربعات خطا دو معادله همزمان کمینه شود. این روش علاوه بر جلوگیری از گیر افتادن در مینیمم‌های موضعی، امکان دستیابی به برآورد دقیق‌تر و پایدارتر پارامترها را فراهم می‌کند.

۲-۲- مدل‌سازی پیکربندی سیستم

در این پژوهش، به‌منظور بررسی دقیق رفتار سامانه در مقیاس نانو، از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک استفاده شد. این روش امکان مشاهده‌ی مستقیم حرکت اتم‌ها و انتقال انرژی در فواصل زمانی بسیار کوتاه را فراهم کرده و ابزاری کارآمد برای تحلیل فرآیندهای فیزیکی در مقیاس نانومتری به‌شمار می‌رود.

فرآیند شبیه‌سازی به‌صورت سه‌بعدی و با استفاده از نرم‌افزار لمپس^۱ انجام شد. این نرم‌افزار یکی از پرکاربردترین بسته‌های محاسباتی در زمینه مدل‌سازی اتمی و مولکولی است که با حل معادلات حرکت نیوتنی، موقعیت و سرعت ذرات را در هر گام زمانی به‌روزرسانی می‌کند و از قابلیت پردازش موازی در سیستم‌های چند هسته‌ای بهره می‌برد.

برای آماده‌سازی مدل اولیه، از نرم‌افزار وی ام دی^۲ [۲۷] جهت ساخت ساختارهای هندسی اولیه و از بسته‌ی پک مول^۳ [۲۸] برای ایجاد توزیع اولیه‌ی اتم‌ها در ناحیه شبیه‌سازی استفاده شد. فایل خروجی نهایی در قالب ورودی مناسب برای اجرای شبیه‌سازی در نرم‌افزار لمپس استخراج گردید [۲۹]. به‌منظور مشاهده و تحلیل داده‌های حاصل از شبیه‌سازی، از نرم‌افزار اُویتو^۴ استفاده شد که امکان بررسی چیدمان اتم‌ها، تحلیل تغییرات ساختاری و تجسم نتایج را فراهم می‌کند.

^۱ LAMMPS

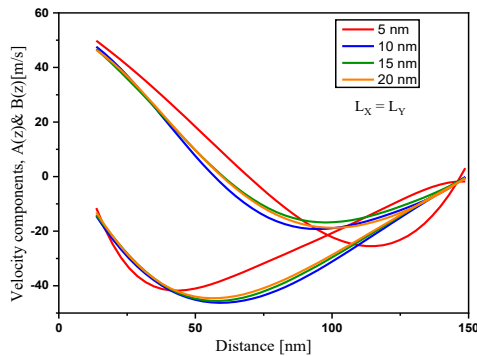
^۲ VMD

^۳ Packmol

^۴ Ovito

^۵ Periodic

^۶ Fixed



شکل ۲- مؤلفه‌های سرعت صوت به عنوان تابعی از فاصله برای تعیین ابعاد جانبی شبیه‌سازی در جهات x و y.

۳-۲- الگوریتم محاسباتی

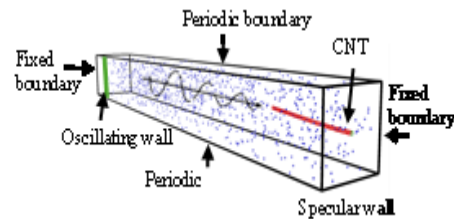
تمامی شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس (نسخه ۲۰۲۴) انجام شدند. موج صوتی با اعمال نوسان هارمونیک به دیواره بدون ساختار سمت چپ با فرکانس‌های ۱/۵ گیگاهرتز تولید گردید. دیواره نوسانگر به صورت یک دیواره بدون ساختار از نوع لنارد-جونز (۳-۹) مدل شد تا ضمن کاهش تعداد اتم‌ها و کاهش هزینه محاسباتی، کارایی محاسبات حفظ گردد. دیواره بازتابنده از نوع لنارد-جونز (۶-۱۲) نیز کاملاً سخت در نظر گرفته شد تا تمام موج برگشتی را بازتاب دهد.

برای کنترل شرایط ترمودینامیکی، از ترکیب الگوریتم‌های لانگوین جهت تنظیم دما در ۲۷۳ کلوین استفاده شد. پس از دستیابی به تعادل ترمودینامیکی در مدت ۱۰ نانوثانیه با گام زمانی ۰/۵ فمتوثانیه، دیواره نوسانگر با فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز و دامنه سرعت ۴۹/۶۹ متر بر ثانیه شروع به نوسان کرد و موج صوتی را به محیط گاز منتقل نمود. در مجموع ۱۰۰ سیکل از موج با گام زمانی ۱ فمتوثانیه شبیه‌سازی گردید.

برای تحلیل داده‌ها، پس از ۶۰ سیکل، تقسیم‌بندی فضایی (binning) در جهت z انجام شده و اطلاعات دینامیکی در ۴۰ ناحیه استخراج گردید تا میزان جذب صوتی در حضور و عدم حضور نانولوله‌ها مورد ارزیابی قرار گیرد.

قابل ذکر است، شبیه‌سازی‌ها بر روی کلاستری با ۳۲ هسته پردازشی و ۱۶ گیگابایت حافظه انجام شد. اجرای ۱۰۰ سیکل شبیه‌سازی با حضور نانوجاذب صوتی و ۸۷۳۰ ذره حدود ۱۰۰ ساعت به طول انجامید، در حالی که زمان اجرای سایر شبیه‌سازی‌ها با پارامترهای متفاوت، متغیر خواهد بود.

نوسانی برای تولید موج صوتی و یک دیواره بازتابنده برای ایجاد موج ایستاده در سیستم استفاده گردید. این آرایش موجب می‌شود فرآیند انتشار و میرایی موج تنها تحت تأثیر حضور نانولوله‌ها و ویژگی‌های محیط گازی بررسی شود. شکل ۱، شماتیک سیستم مدل سازی شده را نمایش می‌دهد.



شکل ۱- شماتیک مدل سازی انتشار موج صوتی در سیستم حاوی گاز آرگون و نانولوله کربنی

به منظور تثبیت نانولوله‌ها در جعبه شبیه‌سازی، سه لایه انتهایی از اتم‌های کربن در سمت راست نانولوله‌ها (نزدیک دیواره بازتابنده) ثابت شده و سایر اتم‌ها به صورت آزادانه امکان حرکت طبیعی داشتند.

برای ایجاد موج صوتی، دیواره‌ی نوسانگر در سمت چپ جعبه ($z=0$) قرار داده شد و با سرعت نوسانی سینوسی، موج طولی از طریق برخورد با اتم‌های گاز تولید گردید. در سمت مقابل، دیواره‌ی بازتابنده به صورت صلب و بدون ساختار در نظر گرفته شد تا موج صوتی را به طور کامل منعکس کرده و موج ایستا تشکیل دهد.

برای تعیین ابعاد جعبه در دو راستای x و y، چندین شبیه‌سازی مستقل با اندازه‌های مختلف (۵ تا ۲۰ نانومتر) انجام شده و اجزای سرعت موج صوتی ($A(z)$ و $B(z)$) مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج در شکل ۲، نشان می‌دهد که برای ابعاد بزرگ‌تر از ۱۰ نانومتر، تغییرات قابل توجهی در اجزای سرعت مشاهده نمی‌شود. بنابراین، برای کاهش هزینه‌های محاسباتی، ابعاد جعبه در جهت x و y برابر ۱۵ نانومتر و در جهت z برابر ۱۵۰ نانومتر (کمتر از نصف طول موج صوتی در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز) انتخاب شد.

۲-۴- پتانسیل‌های برهمکنش

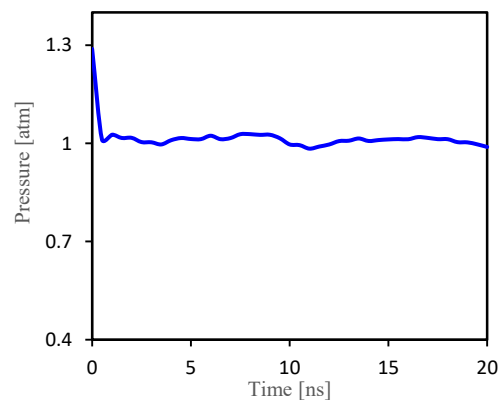
در این شبیه‌سازی، برهمکنش بین اتم‌های کربن در ساختار نانولوله با استفاده از پتانسیل ترسوف مدل سازی شد زیرا این پتانسیل توانایی بالایی در توصیف ویژگی‌های ارتعاشی و پایداری ساختاری نانولوله‌های کربنی دارد. همچنین برای مدل‌سازی برهمکنش بین اتم‌های گاز آرگون و برهم‌کنش‌های میان آرگون و کربن، از پتانسیل وان‌دروالس لنارد-جونز (۶-۱۲) استفاده گردید.

در این مدل، پارامترهای مربوط به جفت آرگون-آرگون برابر با $\sigma = 0.340$ نانومتر و $\epsilon = 0.238$ کیلوکالری بر مول و برای جفت آرگون-کربن برابر با $\sigma = 0.338$ نانومتر و $\epsilon = 0.115$ کیلوکالری بر مول در نظر گرفته شدند [۱۷، ۳۰ و ۳۱]. این مقادیر امکان شبیه‌سازی دقیق برهم‌کنش‌های فیزیکی در ناحیه تماس گاز-جامد را فراهم می‌کنند. همچنین، برهم‌کنش بین اتم‌های گازی با دیواره نوسانی بر اساس پتانسیل لنارد جونز (۳-۹) و با دیواره بازتابنده بر اساس پتانسیل لنارد جونز (۶-۱۲) مدل‌سازی شد. پارامترهای استفاده شده در این مدل برابر با پارامترهای مربوط به جفت آرگون-آرگون هستند.

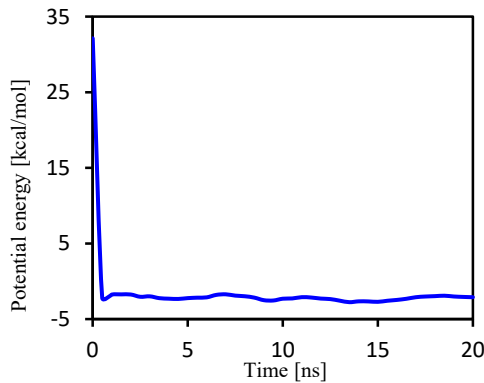
۳- بررسی تعادل سیستم

۳-۱- بررسی تعادل سیستم پیش از انتشار موج صوتی

به‌منظور اطمینان از دستیابی سیستم شبیه‌سازی شده به حالت تعادل، روند تغییرات فشار و انرژی پتانسیل گاز بررسی شد. شکل ۳ نمایش‌دهنده سیر زمانی این دو خاصیت در محیط شبیه‌سازی است.



(الف)



(ب)

شکل ۳- روند تغییرات، (الف) فشار و (ب) انرژی پتانسیل گاز در مسیر تعادل.

همان‌گونه که در شکل مشاهده می‌شود، هر دو پارامتر به‌مرور زمان به مقدار ثابتی نزدیک شده‌اند. پایداری این خاصیت‌ها در حدود زمان ۱۰ نانوثانیه حاصل شده است. این امر نشان می‌دهد که سیستم وارد حالت تعادل ترمودینامیکی شده و شرایط مناسبی برای آغاز فرآیند انتشار موج صوتی فراهم شده است. دستیابی به چنین تعادلی، گامی ضروری در راستای صحت‌سنجی نتایج شبیه‌سازی و تحلیل قابل اعتماد رفتار سیستم به‌شمار می‌آید.

۳-۲- بررسی تعادل سیستم بعد از انتشار موج صوتی

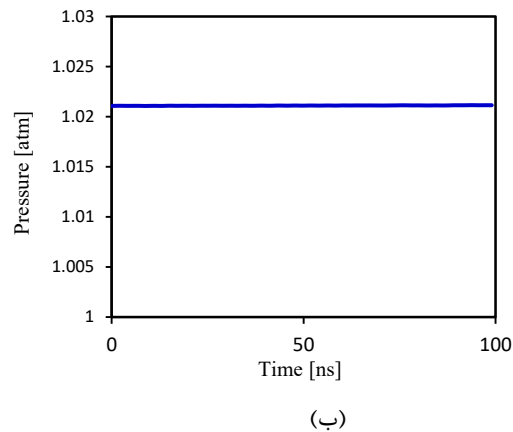
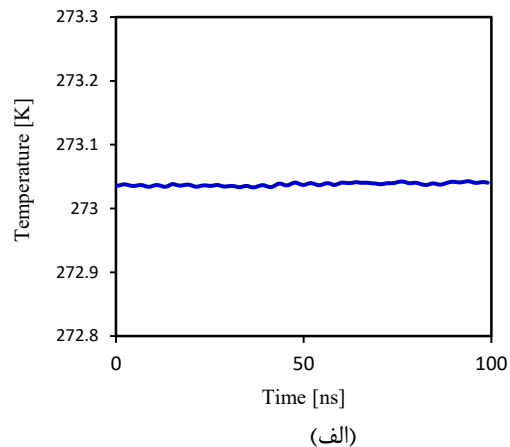
به‌منظور ارزیابی دقیق مولفه‌های سرعت صوت، نمونه‌برداری زمانی آغاز شد که تغییرات سرعت متوسط ذرات در راستای Z به مقدار ناچیزی رسیده و نشانگر رسیدن موج به حالت ایستا بود. با توجه به وابستگی سرعت صوت به پارامترهای دما و فشار، در طول انتشار موج، نوسانات این دو کمیت مورد پایش قرار گرفت. شکل ۴ تغییرات میانگین دمای گاز و فشار آن را در شرایط اعمال موج صوتی با فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز نمایش می‌دهد.

در منابع معتبر مقایسه شده و اثر فرکانس بر میرایی موج در غیاب نانولوله‌های کربنی بررسی می‌شود. سپس، با اطمینان از صحت مدل، تاثیر عوامل مختلف ساختاری و هندسی نانولوله‌های کربنی شامل قطر و تعداد نانولوله‌ها، همچنین اثر فرکانس بر جذب صوت تحلیل و تفسیر خواهد شد.

۴-۱- اعتبارسنجی مدل شبیه‌سازی

به منظور اعتبارسنجی مدل شبیه‌سازی، انتشار موج صوتی در محیط آرگون خالص در دو فرکانس ۱/۵ و ۳/۰ گیگاهرتز بررسی شد. نتایج شبیه‌سازی برای فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز، سرعت صوت و عدد موج را به ترتیب $c = 407/1$ m/s و به m^{-1} $k = 2/31 \times 10^7$ نشان داد که با مقادیر تجربی (ترتیب m/s $c = 307/7$ و به m^{-1} $k = 3/06 \times 10^7$) و همچنین نتایج مطالعه پیشین [۱۸] (ترتیب m/s $c = 435/0$ و به m^{-1} $k = 2/16 \times 10^7$) همخوانی مناسبی دارد. در مقایسه با مطالعه گذشته که منبع موج صوتی به صورت آرگون جامد مدل شده و کل سیستم شامل بیش از ۵۰ هزار ذره بود، در مدل حاضر از حدود ۱۰۰۰ ذره گاز آرگون با همان چگالی استفاده شد؛ این تغییر در ساختار منبع صوتی موجب حذف اثرات مزاحم ناشی از ذرات جامد و کاهش اختلال در مسیر موج صوتی گردیده است که دقت و تطابق شبیه‌سازی با داده‌های تجربی را افزایش داده است.

برای فرکانس ۳/۰ گیگاهرتز نیز شبیه‌سازی انجام شد و نتایج مربوط به هر دو فرکانس در شکل ۵ و جدول ۱ ارائه شده است. مقایسه داده‌ها نشان می‌دهد که ضریب میرایی از m^{-1} $0/820 \times 10^7$ در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز به m^{-1} $1/69 \times 10^7$ در فرکانس ۳/۰ گیگاهرتز افزایش یافته و سرعت صوت از $c = 407/1$ m/s به $c = 446/8$ m/s تغییر کرده است. این روند افزایشی با گزارش‌های موجود در مطالعات قبلی [۱۸] مطابقت دارد. بنابراین، کاهش دامنه و افزایش ضریب میرایی با افزایش فرکانس، وابستگی میرایی به فرکانس را تأیید کرده و صحت عملکرد مدل شبیه‌سازی را نشان می‌دهد.



شکل ۴- تغییرات میانگین، الف) و ب) فشار گاز در طول انتشار موج صوتی.

بر اساس نمودارها، میزان افزایش میانگین دما و فشار گاز به دلیل پراکندگی موج، از یک درصد تجاوز نمی‌کند. از آنجا که سرعت صوت با ریشه دوم دما و فشار رابطه دارد، این تغییرات اندک، سبب عدم قطعیت کمتر در سرعت صوت خواهند شد. بر این اساس، می‌توان نتیجه گرفت که سیستم در حین انتشار موج صوتی از پایداری قابل قبولی برخوردار بوده است؛ موضوعی که برای صحت تحلیل نتایج و اعتماد به پاسخ‌های استخراج‌شده، ضروری است.

۴- بحث و نتایج

در این بخش، ابتدا نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی صحت و دقت مدل ارائه‌شده اعتبارسنجی می‌گردد. بدین منظور، مقادیر به‌دست‌آمده با داده‌های موجود

۲-۴- اثر قطر نانوجاذب صوتی

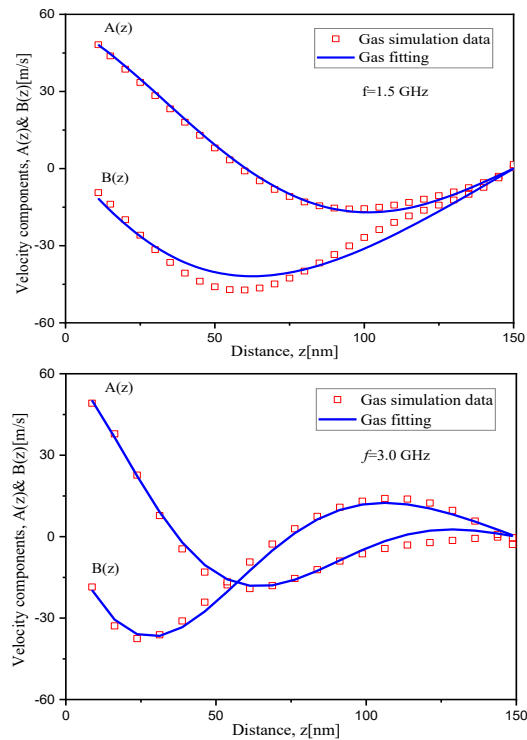
به منظور مطالعه‌ی نقش قطر نانولوله‌های کربنی بر پارامترهای مرتبط با موج صوتی، سه ساختار با قطرهای ۰/۶۸، ۱/۲۲ و ۲/۲۰ نانومتر مورد بررسی قرار گرفتند. طول تمامی نانولوله‌ها برابر با ۲۵ نانومتر در نظر گرفته شد و انتهای آن‌ها در مجاورت دیواره‌ی بازتابی به صورت ثابت مهار گردید.

در همه‌ی شبیه‌سازی‌ها، مؤلفه‌های صوتی $A(z)$ و $B(z)$ بر اساس روابط ۶ و ۷ به عنوان تابعی از فاصله استخراج شده و در شکل ۶ ارائه شده‌اند. با بررسی ظاهری منحنی‌ها نمی‌توان رابطه‌ی واضحی را مشاهده کرد بنابراین، برای تحلیل دقیق‌تر، پارامترهای عدد موج و ضریب تضعیف از طریق برازش غیرخطی بر مؤلفه‌های سرعت محاسبه شدند. در جدول ۲ مقادیر به دست آمده فهرست شده‌اند که روند کلی افزایش تضعیف با افزایش قطر را نشان می‌دهد. با این حال، برای بررسی جامع‌تر، محاسبه‌ی ضریب جذب (α) نیز ضروری است [۱۹].

$$\alpha = 1 - \left| \exp[-(ik + m - m_g)2L_{CNT}] \right|^2 \quad (۸)$$

مقایسه‌ی پارامترهای m و α ، نشان‌دهنده‌ی همبستگی مستقیم میان قطر و شدت میرایی صوت است. افزایش قطر باعث افزایش سطح مقطع و فراهم شدن امکان نفوذ تعداد بیشتری از مولکول‌های آرگون به فضای داخلی نانولوله می‌شود؛ عاملی که به جذب مؤثرتر امواج صوتی منتهی می‌گردد.

در ساختارهای با قطر کمتر، ورود گاز به فضای داخلی عملاً ممکن نیست و تنها برهم‌کنش با سطح بیرونی انجام می‌گیرد که عمدتاً از نوع واندروالسی است و تأثیر محدودی در جذب صوت دارد. اما با بزرگ‌تر شدن قطر، علاوه بر سطح خارجی، برهم‌کنش مؤثری بین گاز و دیواره‌های داخلی نیز شکل می‌گیرد که کاهش سرعت ذرات گاز درون نانولوله و افزایش میرایی را در پی دارد.



شکل ۵- تغییر دامنه موج صوتی در محیط گازی آرگون بدون حضور نانولوله کربنی در دو فرکانس ۱/۵ و ۳ گیگاهرتز.

جدول ۱- مقادیر عددی ضریب میرایی و سرعت صوت در گاز آرگون بدون حضور نانولوله کربنی در دو فرکانس ۱/۵ و ۳ گیگاهرتز.

	f (GHz)	m ($10^{-7} m^{-1}$)	k ($10^{-7} m^{-1}$)	c (m/s)
Gas	۱/۵	۰/۸۲۰	۲/۳۱	۴۰۷/۱
Gas	۳/۰	۰/۹۰۲	۴/۴۱	۴۲۶/۸

این نتایج، تطابق مناسب با داده‌های تجربی و مطالعات پیشین داشته و پایه‌ای قابل اعتماد برای تحلیل‌های بعدی، از جمله بررسی اثر پارامترهای هندسی و ساختاری نانولوله‌های کربنی بر جذب انرژی صوتی، فراهم می‌آورد.

جدول ۲- مقادیر k ، m و α موج صوتی در محیط گازی آرگون با قطرهای مختلف نانولوله‌های کربنی و فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز.

	D (nm)	m (10^{-7} m^{-1})	k (10^{-7} m^{-1})	α
Gas	۰/۰۰	۰/۸۲۰	۲/۳۱	۰/۰۰۰
CNT (۵,۵)	۰/۶۸	۰/۹۲۲	۲/۳۴	۰/۰۹۷
CNT (۹,۹)	۱/۲۲	۰/۹۲۶	۲/۳۹	۰/۱۰۰
CNT(۱۹,۱۹)	۲/۲	۰/۹۸۹	۲/۴۰	۰/۱۵۶

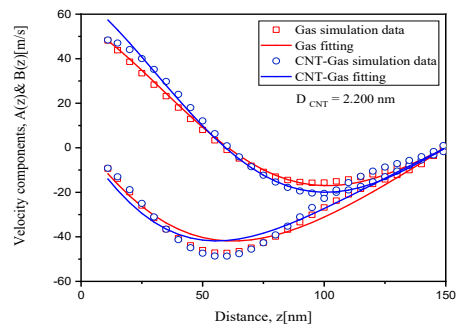
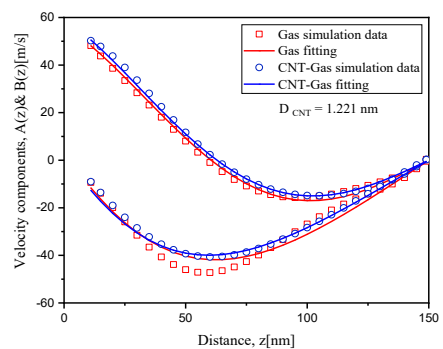
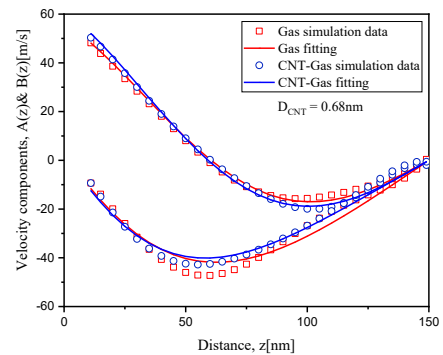
جدول ۳- شاخص‌های دقت شبیه‌سازی (R^2 و RMSE) در بررسی اثر قطر نانولوله‌های کربنی در محیط گازی آرگون بر جذب صوت.

	RMSE	R^2
Gas	۲/۵۴	۰/۹۷۶
CNT (۵,۵)	۲/۲۵	۰/۹۸۲
CNT (۹,۹)	۱/۲۱	۰/۹۹۵
CNT (۱۹,۱۹)	۳/۵	۰/۹۶۶

مقدار پایین RMSE بیانگر انحراف کم داده‌های شبیه‌سازی از مقادیر مرجع است و مقدار R^2 نزدیک به ۱، نشان‌دهنده برازش مناسب مدل شبیه‌سازی با داده‌های شبیه‌سازی می‌باشد. بنابراین، قطر نانولوله به‌عنوان عاملی کلیدی در بهبود جذب انرژی صوتی در این سیستم‌ها شناخته می‌شود.

۳-۴- اثر تعداد نانوجاذب

جهت بررسی تأثیر تعداد نانولوله‌ها بر جذب صوت در محیط‌های نانومتری، نانولوله کربنی کوچک‌تر با قابلیت جذب انرژی صوتی انتخاب شد تا هزینه‌های محاسباتی

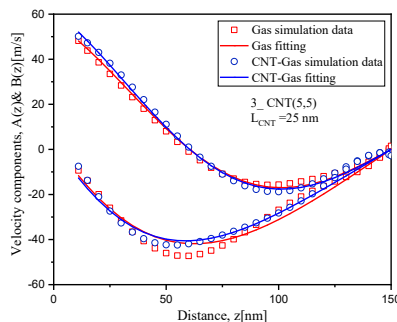
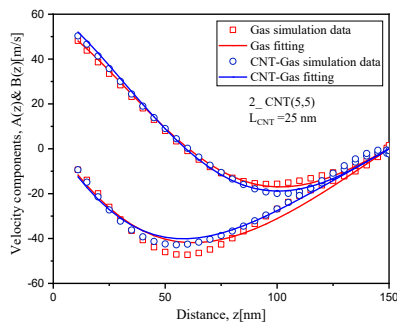
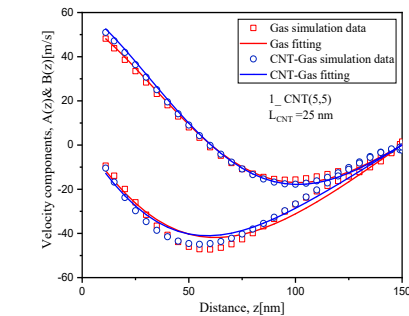


شکل ۶- توزیع مولفه‌های صوتی $A(z)$ و $B(z)$ به عنوان تابعی از موقعیت مکانی در حضور نانولوله‌های کربنی با قطرهای مختلف در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز.

با توجه به اینکه پارامترهای صوتی (میرایی و عدد موج) از برازش غیرخطی استخراج شدند، به‌منظور ارزیابی دقت شبیه‌سازی‌ها، شاخص‌های جذر میانگین مربعات خطا (RMSE) و ضریب تعیین (R^2) محاسبه شدند. جزئیات این شاخص‌ها در جدول ۳ ارائه شده است.

مستقل ارتعاش می‌کند و برهم‌کنش‌های گاز در اطراف هر نانولوله به‌طور مجزا باقی می‌ماند.

در شبیه‌سازی سوم، افزودن نانولوله سوم موجب ایجاد آرایش مثلثی شکل میان نانولوله‌ها شد که فضایی محصور میان آن‌ها ایجاد می‌کند. این فضای محصور به مولکول‌های گاز اجازه می‌دهد تا تجمع کرده و در مسیر انتشار موج صوتی محدود شوند.

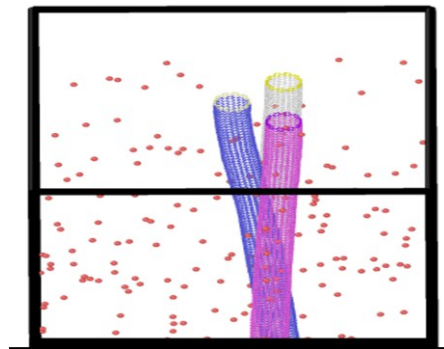


شکل ۸- توزیع مولفه‌های صوتی $A(z)$ و $B(z)$ به عنوان تابعی از موقعیت مکانی با تعداد مختلف نانولوله کربنی در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز.

از دیدگاه نظریه جنبشی گازها، برتری آرایش مثلثی نانولوله‌ها را می‌توان با مفهوم عدد نادسن تبیین کرد. در این

کاهش یابد و هدف تحقیق به‌طور مؤثرتر مورد بررسی قرار گیرد. در شبیه‌سازی‌های انجام‌شده، سه آرایش مختلف برای CNT(۵, ۵) مورد استفاده قرار گرفت.

در شبیه‌سازی اول، یک نانولوله با قطر ۰/۶۸ نانومتر و طول ۲۵ نانومتر در مرکز دیوار بازتابی قرار گرفت. در شبیه‌سازی دوم، یک نانولوله مشابه در فاصله ۳/۳۶ نانومتر از نانولوله اول در راستای محور x قرار داده شد. در نهایت، در شبیه‌سازی سوم، یک نانولوله دیگر در مجاورت دو نانولوله قبلی قرار گرفت و فاصله ۲/۶۳ نانومتری از هر کدام حفظ گردید. آرایش نانولوله‌های کربنی در این شبیه‌سازی در شکل ۷ نشان داده شده است.



شکل ۷- شماتیک از آرایش مثلثی سه نانولوله کربنی با قطر ۰/۶۸ نانومتر و طول ۲۵ نانومتر با فاصله ۲/۶۳ نانومتر بین هر دو نانولوله.

نتایج شبیه‌سازی‌ها، شامل مولفه‌های سرعت و داده‌های برازش غیرخطی، در شکل ۸ و جدول ۴ ارائه شده‌اند. نتایج حاکی از آن است که با افزایش تعداد نانولوله‌های کربنی در سیستم، دامنه موج صوتی کاهش یافته که این امر به معنی افزایش قابل توجهی در میزان جذب صوت است. این نتیجه در جدول ۴ به‌طور عددی نیز تأیید شده است.

مطابق با جدول ۴، افزایش تعداد نانولوله‌ها منجر به افزایش ضریب جذب صوتی می‌گردد. این افزایش به دلیل شکل‌گیری نواحی محصور میان نانولوله‌ها است. هنگامی که تنها یک نانولوله در محیط وجود دارد، مولکول‌های گاز علاوه بر برهم‌کنش با سطح خارجی نانولوله، توانایی نفوذ به داخل نانولوله را نیز دارند. با افزودن نانولوله دوم، ساختاری خطی ایجاد می‌شود که هر نانولوله به‌طور

ضریب میرایی و ضریب جذب صوت در محیط گازی آرگون و فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز

	RMSE	R ²
Gas	۲/۵	۰/۹۷۶
۱_CNT (۵, ۵)	۲/۲	۰/۹۸۳
۲_CNT (۵, ۵)	۱/۸	۹۸۹/۰
۳_CNT (۵, ۵)	۱/۷	۹۹۰/۰

در نهایت، نتایج این تحقیق نشان می‌دهند که با افزایش تعداد نانولوله‌ها و طراحی مناسب آرایش فضایی آن‌ها، می‌توان مواد جاذب صوتی با بازدهی بالا در مقیاس نانومتر تولید کرد. آرایش‌های مثلثی و شبکه‌ای از نانولوله‌های کربنی می‌توانند به‌عنوان مواد جاذب صوتی مؤثر در طراحی فیلترهای صوتی و مواد جاذب امواج آکوستیکی به‌کار گرفته شوند.

۴-۴- بررسی اثر ترکیبی قطر، طول و تعداد نانولوله‌های کربنی با تعداد اتم ثابت بر جذب صوت

در این بخش، با ثابت نگه‌داشتن تعداد اتم‌های نانولوله‌های کربنی (۴۰۸۰ اتم)، اثر ترکیبی طول و تعداد نانولوله کربنی بر جذب انرژی آکوستیکی بررسی شده است. همان‌گونه که در شکل ۹ و جدول ۳ مشاهده می‌شود، نانولوله‌ها با ویژگی‌های هندسی متفاوت انتخاب شدند به‌گونه‌ای که مجموع تعداد اتم‌ها در ساختار آن‌ها یکسان باقی بماند. این نانولوله‌ها شامل نمونه‌های CNT (۵, ۵) با طول ۵۰ نانومتر و دو CNT (۵, ۵) با طول ۲۵ نانومتر هستند.

تحلیل ضرایب میرایی (m)، عدد موج (k) و ضریب جذب صوتی (α) در جدول ۶ نشان می‌دهد که در شرایط برابر از نظر تعداد اتم‌ها، تغییرات هندسی ساختار می‌تواند تأثیر قابل‌توجهی بر میزان جذب صوت داشته باشد.

بیشترین ضریب جذب صوتی مربوط به نمونه‌ی دوم است که شامل دو CNT (۵, ۵) با طول ۲۵ نانومتر می‌باشد و ضریب میرایی آن نیز بیشترین مقدار را دارد. این پدیده را می‌توان به افزایش مؤثر

مطالعه، طول مشخصه به‌عنوان فاصله بین نانولوله‌های کربنی در نظر گرفته شد. با تشکیل آرایش مثلثی، فاصله مؤثر بین نانولوله‌ها کاهش می‌یابد که این امر موجب افزایش عدد نادسن و حرکت سیستم به سمت رژیم گذار می‌شود. در این رژیم، سهم برخوردهای گاز-دیواره به‌طور محسوسی افزایش می‌یابد و مولکول‌های گاز زمان بیشتری را در نواحی محصور میان نانولوله‌ها سپری می‌کنند. افزایش احتمال برخورد مولکول‌ها با دیواره‌های نانولوله کربنی و افزایش زمان اقامت آن‌ها در نواحی محدود، باعث اتلاف بیشتر انرژی جنبشی و انتقال انرژی به دیواره‌ها می‌شود. بنابراین، ضریب جذب صوت در آرایش مثلثی افزایش می‌یابد.

جدول ۴- تأثیر آرایش شبکه‌ای نانولوله‌های کربنی بر ضریب میرایی و ضریب جذب صوت در محیط گازی آرگون و فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز.

	D (nm)	m (۱۰ ^{-۷} m ^۳)	k (۱۰ ^{-۷} m ^۳)	α
Gas	۰/۰۰	۸۲۰/۰	۳۱/۲	۰/۰۰۰
۱_CNT (۵, ۵)	۰/۶۸	۹۲۲/۰	۳۴/۲	۰/۹۷/۰
۲_CNT (۵, ۵)	۰/۶۸	۹۲۷/۰	۳۸/۲	۱۰۲/۰
۳_CNT (۵, ۵)	۰/۶۸	۹۴۱/۰	۳۵/۲	۰/۱۱۴

جدول ۵ نشان می‌دهد که شاخص‌های آماری خطا برای همه شبیه‌سازی‌ها مقادیر کمی دارند و این موضوع گویای دقت بالای مدل در پیش‌بینی ضریب میرایی و ضریب جذب صوت در محیط آرگون است. مقادیر R² در تمامی حالت‌ها بالاتر از ۰/۹۷ بوده و بیشینه آن برابر با ۰/۹۹ در آرایش سه‌تایی به‌دست آمده است که نمایانگر برازش بسیار خوب مدل با داده‌های مورد انتظار است. در مجموع، شاخص‌های آماری گزارش‌شده پایه‌ای مطمئن برای اعتماد به توانایی مدل در بازتولید و پیش‌بینی رفتار آکوستیکی سیستم فراهم می‌آورند.

جدول ۵- شاخص‌های آماری خطا (RMSE و R²) برای شبیه‌سازی تأثیر آرایش شبکه‌ای نانولوله‌های کربنی بر

γ_{CNT}	۲۵	۰/۹۲۷	۳۸۲	۱۰۲/۰
(۵, ۵)				

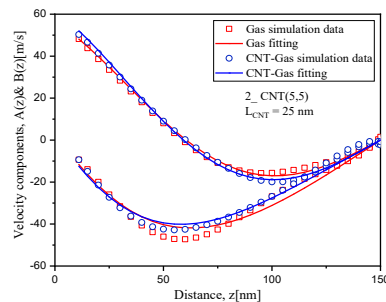
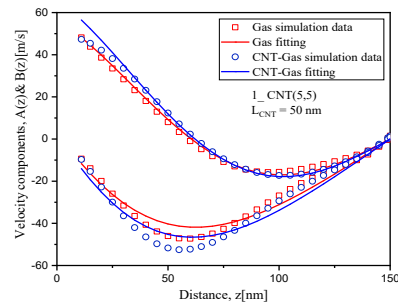
در جمع‌بندی می‌توان گفت که در طراحی نانوجاذب‌های صوتی در مقیاس نانومتر، صرفاً افزایش طول یا قطر نمی‌تواند بهینه‌ترین نتیجه را به همراه داشته باشد. ترکیب چند نانولوله‌ی کوتاه‌تر با حفظ تعداد اتم ثابت، می‌تواند راهکاری مؤثر برای ارتقاء عملکرد جذب صوت باشد.

۴-۵- بررسی اثر فرکانس بر جذب صوت

در این بخش، تأثیر فرکانس بر رفتار جذب صوتی نانولوله‌های کربنی بررسی شده است. بدین منظور، نانولوله کربنی با قطر ۲/۲ نانومتر و طول ۲۵ نانومتر در دو فرکانس ۱/۵ و ۳/۰ گیگاهرتز مورد شبیه‌سازی قرار گرفتند. در فرکانس بالاتر (۳/۰ گیگاهرتز)، به دلیل کوتاه‌تر بودن طول موج صوتی، امکان جای‌گذاری بیش از یک طول موج درون جعبه شبیه‌سازی وجود داشت، بدون آنکه هزینه محاسباتی قابل توجهی تحمیل شود. نتایج حاصل از تحلیل مؤلفه‌های سرعت و برازش غیرخطی آن‌ها در شکل ۱۰ نشان داده شده و مقادیر پارامترهای برازش‌شده در جدول ۷ گزارش گردیده است.

بررسی نتایج عددی در جدول ۷ نشان می‌دهد که افزایش فرکانس به طور مستقیم منجر به افزایش ضرایب میرایی و جذب می‌شود. به طور نمونه، ضریب جذب در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز حدود $m^{-1} = 0/989 \times 10^7$ محاسبه شد، در حالی که در فرکانس ۳ گیگاهرتز مقدار آن به $m^{-1} = 1/72 \times 10^7$ رسید. همچنین، ضریب جذب در فرکانس بالاتر حدود ۳/۲ برابر مقدار ضریب جذب در فرکانس پایین‌تر است. این تغییرات بیانگر آن است که در فرکانس‌های بالاتر، کارایی نانولوله‌ها در کاهش انرژی موج صوتی بهبود می‌یابد.

در برهم‌کنش سطحی، افزایش تعداد نانو جاذب و توزیع بهتر انرژی مکانیکی در ساختار ترکیبی نسبت داد. در مقایسه با نانولوله‌ی تکی (طول ۵۰ نانومتر)، ساختار دوتایی عملکرد بهتری نشان داده است، که گویای آن است که افزایش تعداد نانولوله‌های مجزا با ابعاد کوچکتر، می‌تواند نسبت به افزایش طول یک‌نواخت ساختار، عملکرد آکوستیکی بهتری فراهم کند.



شکل ۹- توزیع مولفه‌های صوتی $A(z)$ و $B(z)$ در حضور نانولوله‌های کربنی با تعداد اتم‌های یکسان، تعداد و طول متفاوت در فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز.

جدول ۶- مقادیر k ، m و α موج صوتی در حضور نانولوله کربنی با تعداد اتم‌های یکسان ($n = 4080$) و هندسه متفاوت در محیط گازی آرگون و فرکانس ۱/۵ گیگاهرتز.

	LCNT (nm)	$m (10^7 m^{-1})$	$k (10^7 m^{-1})$	α
Gas	۰	۸۲۰/۰	۳۱/۲	۰۰۰/۰
γ_{CNT} (۵, ۵)	۵۰	۸۵۹/۰	۲۹/۲	۰۳۸/۰

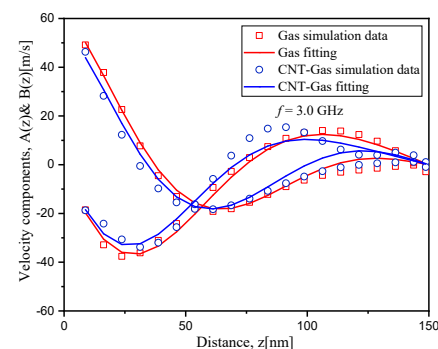
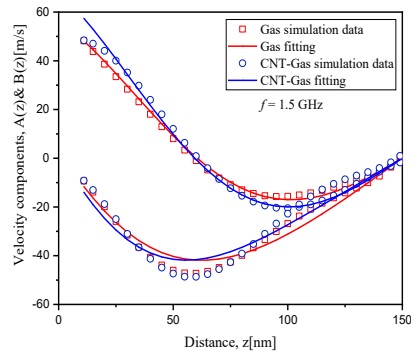
فرکانس می‌تواند در طراحی و بهینه‌سازی سامانه‌های جذب صوت مبتنی بر CNT نقش کلیدی ایفا کند.

۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، رفتار جذب صوت توسط نانولوله‌های کربنی در محیط گازی آرگون با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش قطر و تعداد نانولوله‌ها می‌تواند به‌طور مؤثر دامنه موج صوتی را کاهش دهد، که این امر به افزایش جذب انرژی صوتی در این سیستم منجر می‌شود. نفوذ اتم‌های آرگون به درون ساختار نانولوله‌ها و برهم‌کنش‌های سطحی میان مولکول‌ها نقش تعیین‌کننده‌ای در فرآیند جذب ایفا کردند. افزون بر این، ساختارهایی با تعداد اتم یکسان اما با ترکیب و آرایش متفاوت مورد بررسی قرار گرفتند و مشخص شد که آرایش بهینه نانولوله‌ها می‌تواند عملکرد جذب را به شکل قابل‌توجهی افزایش دهد.

علاوه بر این، تحلیل اثر فرکانس نشان داد که کارایی نانولوله‌های کربنی در جذب صوت در فرکانس‌های بالاتر بهبود می‌یابد. این موضوع بر وجود ارتباط قوی میان فرکانس، ضریب تضعیف و ضریب جذب دلالت دارد و نشان می‌دهد که انتخاب مناسب پارامترهای فرکانسی در کنار طراحی هندسی بهینه می‌تواند راهگشای توسعه سامانه‌های نوین جذب و کنترل نویز در مقیاس نانومتر باشد.

یکی از ویژگی‌های منحصر به فرد طراحی مدل شبیه‌سازی در این تحقیق، استفاده از دیواره‌های بدون ساختار به‌عنوان نوسانگر و بازتابنده بود که هیچ‌گونه جذب از سوی دیواره‌ها ایجاد نکرد و تمامی فرآیند جذب به عملکرد نانوجاذب‌ها اختصاص یافت. این انتخاب باعث شد که محاسبات با دقت بالا و هزینه کمتری انجام گیرد. همچنین، ابعاد جعبه شبیه‌سازی به‌گونه‌ای طراحی شد که اثرات مرزی به حداقل برسد، و این امر به افزایش دقت نتایج و کاهش زمان محاسبات کمک کرد. نتایج این پژوهش نه تنها بینشی عمیق‌تر نسبت به مکانیزم جذب صوت در مقیاس نانومتر ارائه می‌دهد، بلکه می‌تواند مبنایی برای توسعه مواد جاذب صوتی پیشرفته باشد. به‌کارگیری آرایش بهینه نانولوله‌های کربنی در محیط‌های گازی، می‌تواند امکان طراحی فیلترهای صوتی و جاذب‌های آکوستیکی با کارایی بالا را فراهم کند. این رویکرد قابلیت



شکل ۱۰- توزیع مولفه‌های صوتی $A(z)$ و $B(z)$ به عنوان تابعی از موقعیت مکانی در حضور نانولوله با قطر ۲/۲ نانومتر و طول ۲۵ نانومتر در محیط گازی آرگون و فرکانس‌های ۱/۵ و ۳/۰ گیگاهرتز.

جدول ۷- مقادیر m ، k و α موج صوتی در حضور نانولوله‌های کربنی با قطر ۲/۲ نانومتر و طول ۲۵ نانومتر در محیط گازی آرگون و فرکانس‌های ۱/۵ و ۳/۰ گیگاهرتز.

f (GHz)	m ($10^9 m^{-1}$)	k ($10^9 m^{-1}$)	α	
CNT(۱۹, ۱۹)	۱/۵	۰/۹۸۹	۲/۴۰	۰/۱۵۶
CNT(۱۹, ۱۹)	۳/۰	۱/۷۲	۴/۵۵	۰/۵۶

این نتایج وجود یک همبستگی قوی میان فرکانس، ضریب تضعیف و ضریب جذب را تأیید می‌کنند و نشان می‌دهند که نانولوله‌های کربنی می‌توانند به عنوان جاذب‌های کارآمد در گستره‌ای از فرکانس‌ها عمل کنند. همچنین انتخاب مناسب

- Effects of fiber size, density, and binder concentration. *Appl Acoust* 202:109174.
- [8] Rezaee S, Araghi H, Noshad H, Zabihi Z (2023) Physical characteristics of nickel thin-films and nickel thin-film foams as Li-air batteries anode and cathode current collectors. *J Mol Liq* 383:122171.
- [9] Jamiyati M (2023) A review on carbon nanotubes and their fabrication methods. *J Appl Chem Eng* 14(55):59–65.
- [10] Yang L, Chen Y, Xu Z, et al. (2023) Effect of surface modification of carbon fiber based on magnetron sputtering technology on tensile properties. *Carbon* 204:377–386.
- [11] Tsang Z-V, Wang J-R, Lin K-Y, Yu S-S (2024) 3D printable carbon nanotubes-based composites with reconfigurable shapes and properties. *Carbon* 228:119431.
- [12] Alizadeh M, Hasanazadeh M, Mohtashami S (2019) Improvement of sound absorption behavior of flexible polyurethane foam reinforced with polymeric nanofibers, carbon nanotubes and nanoparticles. *Adv Mater Coat J* 29(2):45–56.
- [13] Ahmadi M, Talebitooti M, Talebitooti R (2022) Analytical investigation on sound transmission loss of functionally graded nanocomposite cylindrical shells reinforced by carbon nanotubes. *Mech Based Des Struct Mach* 50:3386–3403.
- [14] Rostamzadeh H, Salimi MR, Tacibi-Rahni M (2018) Permeability correlation with porosity and Knudsen number for rarefied gas flow in Sierpinski carpets. *J Nat Gas Sci Eng* 56:549–567.
- [15] Azizi A, Momen R, Rezaee S, Hosseini M, Heydarian F, Pan A (2023) Comprehensive scrutiny of surface mechanical parameters of graphyne-based materials for metal-ions and metal-air batteries applications: A perspective and a hybrid atomistic-continuum model. *J Energy Storage* 74:109478.
- [16] Ghafouri Pourkermani A, Azizi B, Nejat Pishkenari H (2020) Vibrational analysis of Ag, Cu and Ni nanobeams using a hybrid continuum-atomistic model. *Int J Mech Sci* 165:105208.
- [17] Ayub M, Zander AC, Howard CQ, Huang DM, Cazzolato BS (2015) Molecular dynamics simulations of sound wave propagation in a gas and thermo-acoustic effects on a carbon nanotube. *J Comput Acoust* 23:1540012.
- [18] Ayub M, Zander AC, Huang DM, Cazzolato BS, Howard CQ (2018) Molecular dynamics simulations of classical sound absorption in a monatomic gas. *J Sound Vib* 421:319–333.
- [19] Ayub M, Zander AC, Huang DM, Howard CQ, Cazzolato BS (2018) Molecular dynamics simulations of acoustic absorption by a carbon nanotube. *Phys Fluids* 30.
- [20] Nazemnejad R, Shokrallahi H (2022) Effect of surface energy on natural frequencies of graded cracked functional nanorods. *J Solid Fluid Mech* 12(4):103–116.
- استفاده در صنایعی نظیر انتقال و فشرده‌سازی گاز، سامانه‌های احتراق، تجهیزات نیروگاهی، هوافضا و خودروسازی را دارد. همچنین، بهره‌گیری از این فناوری می‌تواند به کاهش آلودگی صوتی، افزایش عمر تجهیزات، بهبود شرایط ایمنی محیط کار و کاهش نیاز به واردات مواد پیشرفته جاذب صوت کمک کند. علاوه بر این، در حوزه علم پزشکی نیز نتایج این پژوهش می‌تواند کاربردهایی نظیر ارتقای کیفیت دستگاه‌های تصویربرداری فراصوت (سونوگرافی)، بهبود کارایی دستگاه‌های درمانی مبتنی بر امواج صوتی نظیر HIFU برای درمان تومورها و توسعه سامانه‌های دارورسانی هدفمند با استفاده از تحریکات آکوستیکی در مقیاس نانومتر داشته باشد.
- در ادامه، تحقیقات بیشتر باید به بررسی تاثیر نانولوله‌های کربنی در محیط‌های گازی دیگر پرداخته و توسعه سیستم‌های جاذب صوت در شرایط صنعتی را مورد بررسی قرار دهد. با توجه به اعتبارسنجی مدل در این تحقیق و نتایج به دست آمده، انتظار می‌رود این رویکرد در کاربردهای عملی مختلف به‌ویژه در فناوری‌های نوین کنترل آلودگی صوتی به کار گرفته شود.

مراجع

- [1] Nan J, Yu L, Du M, Meng J, Dong Z, Miao M, et al. (2023) Highly efficient underwater acoustic absorber designed by filled-microperforated plate-like structure: Aging and life prediction. *Polym Test* 128:111484.
- [2] Okur N, Yaranakul MC (2022) Development of hybrid layered structures based on natural fabric reinforced composites and warp knitted spacer fabric for acoustic applications. *J Ind Text* 51:2216S–2245S.
- [3] Kishore SE, Sujithra R, Dhatreyi B (2021) A review on latest acoustic noise mitigation materials. *Mater Today Proc* 47:4700–4707.
- [4] Mazrouei-Sebdani Z, Begum H, Schoenwald S, Horoshenkov KV, Malfait WJ (2021) A review on silica aerogel-based materials for acoustic applications. *J Non Cryst Solids* 562:120770.
- [5] Rastegar N, Ershad-Langroudi A, Parsimehr H, Moradi G (2022) Sound-absorbing porous materials: a review on polyurethane-based foams. *Iran Polym J* 31:83–105.
- [6] Liang M, Wu H, Liu J, Shen Y, Wu G (2022) Improved sound absorption performance of synthetic fiber materials for industrial noise reduction: a review. *J Porous Mater* 29:869–892.
- [7] Gomez TS, Zuluaga S, Jimenez M, de la Prida D, Pedrero A, Navacerrada MÁ, et al. (2023) Sound absorption behavior of repurposed waste fibers:

- [26] Hadjiconstantinou NG, Garcia AL (2001) Molecular simulations of sound wave propagation in simple gases. *Phys Fluids* 13:1040–1046.
- [27] Humphrey W, Dalke A, Schulten K (1996) VMD: Visual molecular dynamics. *J Mol Graph* 14:33–38.
- [28] Martinez L, Andrade R, Birgin EG, Martínez JM (2009) PACKMOL: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations. *J Comput Chem* 30:2157–2164.
- [29] Plimpton S (1995) Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J Comput Phys* 117:1–19.
- [30] Kohestanian M, Sohbatazadeh Z, Rezaee S (2020) Mechanical properties of continuous fiber composites of cubic silicon carbide (3C-SiC) / different types of carbon nanotubes (SWCNTs, RSWCNTs, and MWCNTs): A molecular dynamics simulation. *Mater Today Commun* 23:100922.
- [31] Tersoff J (1994) Chemical order in amorphous silicon carbide. *Phys Rev B* 49:16349–16352.
- [21] Qaderi S H (2014) Modified structural molecular mechanics model for mechanical properties of carbon nanotubes. *J Solid Fluid Mech* 4(4):75–85.
- [22] Hasanzadeh M, et al. (2022) Molecular dynamics simulation of carbon nanotube length effect on nanofluid energy absorption system. *Modares Mech Eng J* 22(4):1157–1168.
- [23] Soleimani A, et al. (2021) Structural and vibrational properties of carbon nanotubes under physical adsorption of flavin mononucleotide biomolecule. *Modares Mech Eng J* 21(3):751–762.
- [24] Barcan M, Chirica I, Beznea E-F (2019) Numerical vibro-acoustic analysis of a ship compartment structure. *ITM Web Conf* 29:02015.
- [25] Ertekin N (2024) Nano-electro-mechanical conduct of boron nitride nanotube as piezoelectric nanogenerators and nanoswitches. *Smart Mater Struct* 33:25037.