

# طراحی و تحلیل دقیق نانو حسگرهای ارتعاشی بر پایه نانولوله‌های کربنی برای تشخیص گازها

مرتضی رحمتی دهکردی  
دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده  
مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی  
واحد خمینی شهر، اصفهان، ایران  
rahmati\_m1168@yahoo.com

رضا حسینی آراء\*  
دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه  
پیام نور، صندوق پستی ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵  
تهران، ایران  
hosseiniara@pnu.ac.ir

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۲/۰۵

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۳/۲۸

## چکیده

هدف از این پژوهش، طراحی و تحلیل مکانیکی یک نانوحسگر ارتعاشی دقیق با استفاده از نانولوله‌های کربنی برای شناسایی گازهای اطراف آن می‌باشد. در بیشتر پژوهش‌های انجام شده برای سادگی از مدل‌های تیر در تحلیل نانولوله‌های کربنی استفاده شده است در حالی که چنین مدل‌هایی با توجه به هندسه پوسته‌ای و نازک نانولوله‌ها، نمی‌تواند دقت بالایی داشته باشند و اساس دقت حسگر زیر سوال می‌رود. در این پژوهش برای افزایش دقت نانوحسگر، از مدل پوسته‌ای استوانه‌ای ناموضعی دائل استفاده گردید که به صورت تو خالی و دو سرگیردار از جنس نانولوله کربنی می‌باشد. همچنین برای افزایش دقت محاسباتی، اثرهای ناموضعی، اینرسی دورانی و تنش‌های سطحی در مقیاس نانو نیز لحاظ شد در صورتی که در پژوهش‌های پیشین از آن‌ها چشم‌پوشی شده است. در ادامه با روش جداسازی متغیرها و به صورت کاملاً تحلیلی، پاسخ بسته و دقیق معادلات حاکم بر ارتعاشات نانوحسگر بر اساس معادلات پوسته‌های استوانه‌ای دائل و شرایط مرزی دوسرگیردار، به دست آمد تا دقت و نوآوری بالاتری نسبت به کارهای گذشته که به صورت کاملاً عددی بوده، داشته باشد. سپس با محاسبه تغییر فرکانس ارتعاشی نانوحسگر در تماس با گازهای اطراف آن و تعیین بازه‌ی فرکانس ارتعاشی نانوحسگر، تشخیص گازهای مجاور انجام گرفت. در پایان و برای راستی آزمایی پاسخ‌های به دست آمده، نتایج برای نمونه گاز کریپتون<sup>۱</sup> در مقایسه با سایر مراجع، نشان از دقت بالای مدل ارائه شده دارد.

واژگان کلیدی: نانو حسگر ارتعاشی، شناسایی گازها، نانولوله‌های کربنی، اثر ناموضعی، تنش‌های سطحی

## ۱. مقدمه

عصر حاضر را شاید بتوان عصر کربن نام نهاد زیرا این ماده کاربرد وسیعی در صنایع مختلف پیدا کرده است. در این بین، نانولوله‌های کربنی<sup>۲</sup> و فلورن‌ها<sup>۳</sup> توجه بسیاری از دانشمندان را در زمینه‌ی شناسایی، ساخت و به کارگیری آن‌ها در صنایع مختلف به خود جلب کرده‌اند. به همین دلیل اخیراً استفاده از نانولوله‌های کربنی در تولید نانوحسگرها نیز بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۱]. در واقع نانولوله‌های کربنی به علت داشتن خواص مکانیکی و الکتریکی منحصر به فرد، کاربردهای متنوعی در حسگرهای با دقت بسیار بالا برای تشخیص مواد در غلظت‌های بسیار پایین پیدا کرده‌اند. به وسیله‌ی این حساسیت بسیار بالا، ناچیزترین تغییرات مکانیکی نیز قابل تشخیص هستند، به طوری که حد تشخیص آن صدها بار بیشتر از روش‌های متداول است. تحقیقات منتشرشده، استفاده از نانولوله‌های کربنی در حسگرهای فشار، گاز، نور، جرم، تنش، کرنش، شیمیایی و زیستی را به خوبی نشان می‌دهد [۲-۴].

با توجه به مسایل مربوط به سلامتی، ایمنی و محیط زیست، ساخت حسگرهای تشخیص گاز یکی از موضوعات قابل توجه در دهه‌های اخیر به جهت کاربردهای فراوان آنها در صنایع مختلف غذایی، شیمیایی، بهداشتی، نظامی و حتی فضایی بوده است. نشت گازهای مهلک مانند گازهای آمونیاک و دی‌اکسید نیتروژن یکی از خطرات روزمره‌ی زندگی صنعتی است و معمولاً هشدار دهنده‌های موجود در صنعت اغلب بسیار دیر موفق به شناسایی اینگونه گازهای نشتی می‌شوند. اما با تحلیل ارتعاشی یک نانوحسگر که اتم‌های یک گاز آن را احاطه کرده‌اند، تغییر قابل تشخیصی در فرکانس ارتعاشی نانولوله ایجاد می‌شود که بر این اساس می‌توان گاز مورد نظر را شناسایی نمود [۵،۶].

ایده‌ی استفاده از نانولوله‌های کربنی به‌عنوان نوسان‌گر با حساسیت بالا توسط پانچرال<sup>۴</sup> و همکارانش [۷] پیشنهاد

گردید. متو<sup>۵</sup> و همکاران [۸] نیز یک روش مبتنی بر داده‌های تحلیلی و شبیه‌سازی اجزاء محدود برای طراحی یک حسگر بر پایه‌ی نانولوله‌های کربنی به دست آوردند. در همین راستا، واو<sup>۶</sup> و همکاران [۹] نیز توانستند براساس نانو ارتعاش‌گر یک سرگردار، تغییرات در فرکانس تشدید نانولوله‌ها را تشخیص دهند و به این ترتیب جرم داخلی اتم‌ها و همچنین جرم نانولوله‌ها را محاسبه نمایند. لی<sup>۷</sup> و همکاران [۱۰] نیز یک روش مکانیک ساختار مولکولی به منظور تعیین خواص دینامیکی حسگرهای جرم و فشار بر پایه‌ی CNT به کار بردند. در تحقیقات دیگری، کاربرد نانولوله‌های کربنی به‌عنوان نانوحسگر برای شناسایی ذرات بیولوژیکی به وسیله‌ی تغییر فرکانس مورد بررسی قرار گرفت [۱۱-۱۳]. جورجانتزینو<sup>۸</sup> و آنی‌فانتیس<sup>۹</sup> [۱۴] برای پیش‌بینی رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی یک و چند جداره به منظور بررسی ویژگی‌های سنجشی، هنگامی که یک نانو ذره به آن‌ها متصل است، از روش اجزاء محدود مبتنی بر جرم و فر استفاده کردند. همچنین لی و همکاران [۱۵] توانستند معادله‌ی فرکانس ارتعاشات یک CNT به‌عنوان نانوحسگری همراه با جرم متصل بر روی آن را با استفاده از نظریه‌ی الاستیسیته‌ی ناموضعی ارائه نمایند. در این مدل، نانوحسگر به صورت تیر یک سرگردار برای محاسبه جرم اتمی مواد، مورد بررسی قرار گرفت.

چاست<sup>۱۰</sup> و همکاران [۱۶] در پژوهش دیگری، به بررسی کاربرد نانوحسگرهای مکانیکی در علوم سطح، مانند انتقال فاز و انتشار پرداختند. آزمایش آن‌ها به توانایی محاسبه کوچک‌ترین جرم‌ها توسط حسگرهای مکانیکی تکیه داشت و نانوحسگر مورد استفاده‌شان دارای دقت  $(\gamma g)^{1/7}$  بود، که مربوط به جرم یک پروتون است. همچنین این حسگر یک نانولوله کربنی با طولی حدود ۱۵۰ نانومتر بود که با فرکانسی نزدیک به ۲ گیگاهرتز ارتعاش می‌کرد. آن‌ها با بهره‌گیری از سطح بی‌سابقه‌ای از حساسیت توانستند به دقت، وقایعی که در جذب مولکول نفتالین<sup>۱۲</sup> رخ می‌دهد را مشاهده

کنند، همچنین به اندازه‌گیری انرژی اتصال یک اتم زنون<sup>۱۳</sup>، بر روی سطح نانولوله‌های کربنی پرداختند.

ژانگ<sup>۱۴</sup> و همکاران [۱۷] نیز به بررسی تأثیر کشش و تنش سطحی بر تغییرات فرکانس نانوحسگرها پرداختند و در ادامه توانستند یک روش تجربی جدید برای تعیین کشش و تنش سطحی به دست آورند. همچنین ژانگ [۱۸] در پژوهش دیگری به بررسی هر دو پارامتر جرم و سختی برای نانوحسگرهای مکانیکی پرداخت زیرا وی دریافته بود که اگر تأثیر سختی مطرح نشود، پاسخ ارتعاشی به اشتباه تفسیر می‌شود. همچنین در پژوهش‌های دیگری، حسینی‌آرا و همکاران [۱۹-۲۱] با به کارگیری تئوری تیر اویلر برنولی و در نظر گرفتن اثرات جانبی گوناگون، موفق به تحلیل نانوزیست حسگرهای مکانیکی برای تشخیص عوامل بیماری‌زا شدند.

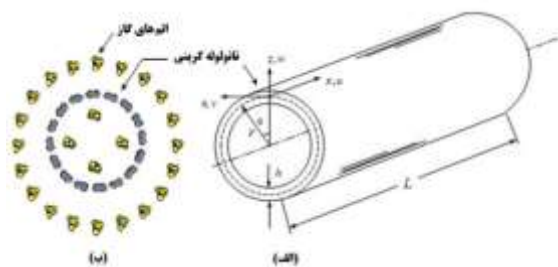
نکته قابل توجه این است که در بیشتر پژوهش‌های انجام شده از مدل تیر برای تحلیل نانولوله‌های کربنی استفاده شده است در حالی که این مدل با توجه به هندسه پوسته‌ای و نازک نانولوله‌ها، نمی‌تواند دقت بالایی داشته باشد. بر این اساس، پژوهش حاضر بر اساس مدل پوسته‌ای استوانه‌ای [۲۲-۲۶] به صورت توخالی و دو سرگیردار به محاسبه تغییر فرکانس ارتعاشی نانوحسگری از جنس نانولوله کربنی در اثر وجود اتم‌های گاز کریپتون بر روی آن می‌پردازد. علاوه بر این برای افزایش دقت محاسباتی، اثرهای ناموضعی، اینرسی دورانی و تنش‌های سطحی در مقیاس نانو نیز لحاظ شد در صورتی که در پژوهش‌های پیشین از آن‌ها چشم‌پوشی شده است. برای این منظور، معادلات حاکم بر اساس تئوری ناموضعی پوسته‌های استوانه‌ای دائل به دست می‌آید و برای افزایش دقت پاسخ‌ها، اثرهای ناموضعی، تنش‌های سطحی و اینرسی دورانی نیز در تحلیل نانوحسگر در نظر گرفته می‌شود. در ادامه با روش جداسازی متغیرها و به صورت

کاملاً تحلیلی، پاسخ بسته و دقیق معادلات حاکم بر ارتعاشات نانوحسگر بر اساس معادلات پوسته‌های استوانه‌ای دائل و شرایط مرزی دوسرگیردار، محاسبه می‌گردد تا در مقایسه با پژوهش‌های قبلی که به صورت کاملاً عددی بوده، دقت و مزیت بالاتری داشته باشد. در نهایت، با محاسبه دقیق میزان تغییر فرکانس ارتعاشی نانوحسگر، ماهیت گاز مورد نظر شناسایی می‌گردد.

## ۲. تحلیل ارتعاشات نانوحسگر

### ۲-۱. شماتیک مسأله

نانوحسگر مورد نظر به صورت یک نانوپوسته استوانه‌ای دوسرگیردار با طول  $L$  در نظر گرفته می‌شود که با محیط اطراف در تماس است. شکل ۱ دستگاه مختصات مربوط به این پوسته استوانه‌ای را نشان می‌دهد. در این شکل  $r$  و  $h$  به ترتیب شعاع میانگین و ضخامت نانولوله کربنی می‌باشد.



شکل ۱. الف) دستگاه مختصات مربوط به پوسته استوانه‌ای بر روی سطح مقطع نانولوله کربنی ب) آرایش اتمی گاز بر روی نانولوله کربنی

همانطور که در شکل ۱ دیده می‌شود، در این پژوهش فرض شده است که اتم‌های گاز به صورت یکنواخت بر روی نانوحسگر توزیع شده‌اند که با توجه به ماهیت پخش گاز در محیط، یک فرض منطقی و نزدیک به واقعیت است.

### ۲-۲. معادله حاکم بر ارتعاشات یک نانوپوسته‌ای

#### استوانه‌ای

معادله‌ی اصلی حاکم بر ارتعاشات یک نانوپوسته‌ی استوانه‌ای با در نظر گرفتن اثرهای ناموضعی ارینگن<sup>۱۵</sup>، تنش‌های سطحی و اینرسی دورانی در مدل پوسته‌های استوانه‌ای دائل، به صورت زیر می‌باشد [۲۷]:

$$(D + D^s)\nabla^8 w = 2\tau^s(1 - \mu\nabla^2)\nabla^6 w + (\rho h + \rho^s)(1 - \mu\nabla^2)\frac{\partial}{\partial t^2}\nabla^4 w + \frac{\nu h^2 \rho^s}{6(1 - \nu)}(1 - \mu\nabla^2)\frac{\partial}{\partial t^2}\nabla^6 w - \frac{Eh}{r^2}\left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4}\right) \quad (1)$$

که در رابطه ۱ منظور از  $D$  سختی خمشی،  $D^s$  سختی خمشی سطحی،  $\tau^s$  تنش پسماند سطحی،  $\mu$  پارامتر ناموضعی،  $\rho$  چگالی نانولوله،  $\rho^s$  چگالی سطحی،  $h$  ضخامت نانولوله،  $\nu$  نسبت پواسون،  $E$  مدول یانگ و  $r$  شعاع نانولوله کربنی می‌باشد.

باتوجه به شرایط مرزی دو سرگیردار، باید در دو سر نانوحسگر پارامترهای خیز و شیب برابر صفر باشد. پس می‌توان یک پاسخ دقیق فرکانسی پوسته‌های استوانه‌ای دوسرگیردار را بر اساس روش جداسازی متغیرها به صورت زیر بیان نمود [۲۸]:

$$W(x, t) = \left[ 1 - \cos\left(\frac{2m\pi x}{L}\right) \right] \cos(n\theta) \cos(\omega t) \quad (2)$$

در این رابطه منظور از  $\omega$ ،  $m$  و  $n$  به ترتیب، فرکانس ارتعاشات، عدد موج طولی و محیطی می‌باشد. همچنین  $L$  طول نانولوله کربنی می‌باشد. در ادامه با جای‌گذاری رابطه ۲ در معادله‌ی حاکم ۱، پاسخ بسته و دقیق فرکانس نانوحسگر به صورت زیر ساده‌سازی می‌شود:

$$\omega = \sqrt{\frac{(A - B - C)}{-(D + E)}} \quad (3)$$

که بسط پارامترهای  $A, B, C, D$  و  $E$  موجود در رابطه ۳، در پیوست تعریف شده است.

### ۳. نتایج عددی

#### ۳-۱. مشخصات تحلیل

در این بخش به بررسی نتایج عددی مربوط به تحلیل ارتعاشی نانوحسگر تحت تأثیر پارامترهای مختلفی مانند اثرهای ناموضعی، تنش‌های سطحی، اینرسی دورانی و نسبت‌های ابعادی نانوحسگر پرداخته می‌شود. در این تحلیل، نانوحسگر از جنس نانولوله‌های کربنی با مشخصات مکانیکی مدول یانگ  $E = 1(\text{TPa})$ ، چگالی حجمی  $\rho = 2300(\text{kg/m}^3)$ ، نسبت پواسون  $\nu = 0.27$ ، تنش سطحی  $\tau^s = 0.9108(\text{N/m})$  و ضخامت پوسته  $h = 0.34(\text{nm})$  در نظر گرفته می‌شود [۱۰، ۲۷]. همچنین پارامترهای چگالی و سختی خمشی نانو پوسته به صورت زیر محاسبه شده است [۲۷]:

$$\begin{aligned} \rho^s &= 2\rho_g h \\ D^s &= 0.0017\rho_g \\ D &= \frac{Eh^3}{12(1 - \nu^2)} \end{aligned} \quad (4)$$

که در رابطه ۴ منظور از  $\rho_g$  چگالی حجمی گاز توزیع شده بر روی سطح نانولوله کربنی می‌باشد. همچنین مشخصات جرم اتمی و فاصله اتمی تعادلی گاز کریپتون نیز با توجه به مرجع [۲۹] در جدول ۱ بیان شده است:

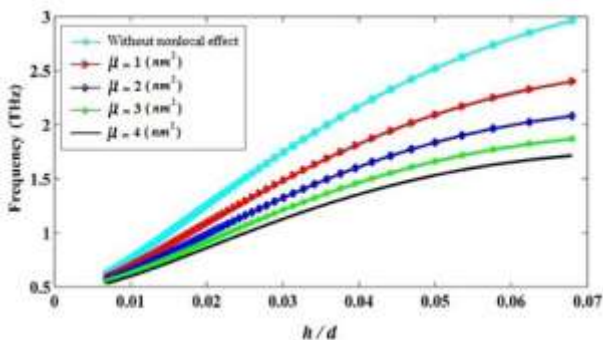
جدول ۱. مشخصات اتمی گاز کریپتون [۲۰]

نوع گاز	جرم اتمی (amu)	فاصله اتمی (nm)
کریپتون (Kr)	۸۳/۷۹۸	۰/۳۸۳

#### ۳-۲. تحلیل فرکانس ارتعاشی براساس تغییر

##### پارامترهای مختلف

#### ۳-۲-۱. بررسی تغییرات طول به قطر



شکل ۳. بررسی اثرهای ناموضعی بر روی فرکانس بر حسب تغییرات ضخامت به قطر

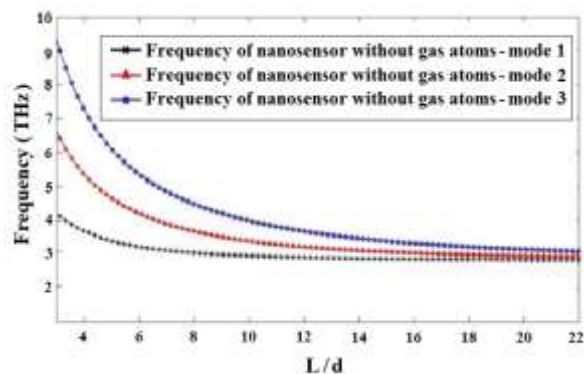
با توجه به این نمودار می‌توان نتیجه گرفت زمانی که پارامتر ناموضعی برابر با صفر باشد یعنی همان حالت کلاسیک تحلیل که در آن اثرهای ابعاد کوچک در مقیاس نانو لحاظ نشده است، این پاسخ یک حد بالا برای فرکانس نانوحسگر خواهد بود. همچنین با افزایش مقدار پارامتر ناموضعی  $\mu$ ، مقدار فرکانس ارتعاشی نیز کاهش می‌یابد. نتیجه دیگر این که با افزایش نسبت ضخامت به قطر نانولوله کربنی، فرکانس ارتعاشی نانوحسگر نیز افزایش می‌یابد. زیرا با ثابت در نظر گرفتن ضخامت نانولوله کربنی و کاهش قطر آن، جرم حسگر نیز کاهش می‌یابد و این عامل باعث افزایش فرکانس آن خواهد شد.

### ۳-۲-۳. بررسی اثر اینرسی دورانی

در شکل ۴ نیز با احتساب اثرهای تنش‌های سطحی، تغییرات فرکانس نانوحسگر در بازه تغییرات قطر از ۵ تا ۵۰ نانومتر برای ۱۰ اتم گاز کریپتون در مودهای اول تا سوم رسم شده است.

با توجه به شکل ۴ می‌توان نتیجه گرفت که با در نظر گرفتن اثر اینرسی دورانی، مقدار فرکانس ارتعاشی کاهش معناداری پیدا می‌کند. پس برای دقت بیشتر محاسبات و بر خلاف پژوهش‌های پیشین نباید از اثر آن چشم‌پوشی نمود. همچنین با افزایش مود ارتعاشی نیز فرکانس ارتعاشی افزایش پیدا کرده است.

برای این منظور اثر تنش‌های سطحی بر روی نانوحسگر لحاظ شده است ( $\tau^s = 0.9108 \text{ (N/m)}$ ). همچنین ضخامت پوسته نانولوله کربنی ثابت و برابر  $h = 0.34 \text{ (nm)}$  فرض شده است. تغییرات فرکانس نانوحسگر، در بازه تغییرات طول نانولوله کربنی از ۲ تا ۲۵ نانومتر، در مود اول تا سوم برای نانوحسگر در شکل ۲ رسم گردیده است.



شکل ۲. نمودار فرکانس بر حسب تغییرات طول به قطر در مودهای اول تا سوم برای نانوحسگر

از شکل ۲ ملاحظه می‌شود که با افزایش نسبت طول به قطر نانوحسگر، فرکانس ارتعاشی کاهش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌گردد که فرکانس نانوحسگر با افزایش نسبت ابعادی در هر سه مود به یک مقدار مشخص میل می‌کند.

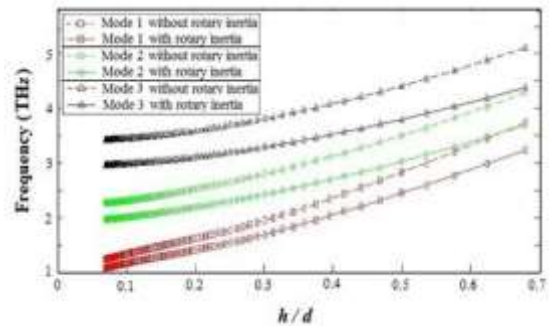
### ۳-۲-۳. بررسی اثرهای سطحی و ناموضعی

در شکل ۳ با احتساب اثرهای سطحی بر روی نانوحسگر ( $\tau^s = 0.9108 \text{ (N/m)}$ ) و همچنین ضخامت ثابت دیواره نانوحسگر برابر  $h = 0.34 \text{ (nm)}$ ، تغییرات فرکانس نانوحسگر در بازه تغییرات قطر نانولوله کربنی از ۵ تا ۵۰ نانومتر برای ۱۰ اتم گاز کریپتون (Kr) در مود اول با مقادیر مختلف پارامتر ناموضعی  $\mu$  رسم گردیده است.

شکل ۵. مقایسه‌ی نتایج این پژوهش با تحلیل MD برای گاز کریپتون در مرجع [۲۹]

با توجه به تفسیر فیزیکی شکل ۵ ملاحظه می‌شود که در حضور تنها ۳ اتم از گاز مورد بررسی کریپتون (Kr) بر روی نانوحسگر، خطای حدود ۱۸ درصد در حساسیت نانوحسگر با نتایج تحلیل دینامیک مولکولی (MD) وجود دارد که شاید بتوان گفت در عمل چنین دقتی در هیچ یک از دستگاه‌های طراحی شده تا به امروز نیز وجود ندارد؛ زیرا تشخیص حضور گاز معمولاً در تعداد بالاتری از اتم‌های گاز معنی پیدا می‌کند. پس به صورت کاربردی تر و با افزایش میزان چگالی یا غلظت گاز در محیط اطراف نانوحسگر، حساسیت نانوحسگر افزایش یافته و خطای مدل ارائه شده برای حضور ۱۰ اتم از گاز مورد نظر به حدود ۴ درصد رسیده است که نشانگر دقت بسیار بالا برای یک مدل محاسباتی مکانیکی می‌باشد. از دیدگاه عملی می‌توان گفت نتایج به دست آمده از مدل محاسباتی مکانیکی نانوحسگر مورد نظر در این پژوهش، تطابق خوبی با نتایج تحلیل به روش دینامیک مولکولی دارد و با افزایش چگالی گاز، میزان خطا در تشخیص گاز بسیار کمتر نیز می‌شود. به عبارت دیگر، افزایش تعداد اتم‌های گاز مورد بررسی در محیط، باعث افزایش حساسیت نانوحسگر در تشخیص آن می‌شود که در عمل و در مقایسه با حسگرهای معمولی دارای سرعت و حساسیت بسیار بیشتری خواهد بود.

در ادامه، مقایسه مقادیر فرکانس به دست آمده در پژوهش حاضر با نتایج به دست آمده در پژوهش‌های پیشین در شکل ۶ ارائه شده است. همچنین تحلیل‌های انجام شده توسط روش دینامیک مولکولی [۳۰، ۲۹] برای طول‌های مختلف و حضور ۱۰ اتم از گاز کریپتون به صورت زیر آورده شده است



شکل ۴. بررسی اثر اینرسی دورانی بر روی فرکانس ارتعاشی بر حسب ضخامت به تغییرات قطر برای مودهای مختلف

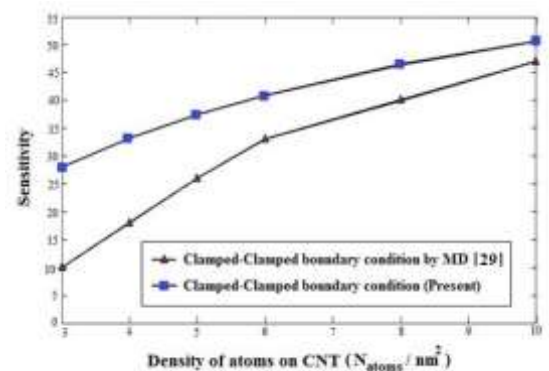
#### ۴. راستی آزمایی نتایج عددی

برای این منظور ابتدا مقایسه‌ی حساسیت براساس چگالی گاز کریپتون با نتایج پژوهش‌های پیشین انجام شده است. برای محاسبه درصد حساسیت نانوحسگر از رابطه ۵ استفاده می‌گردد:

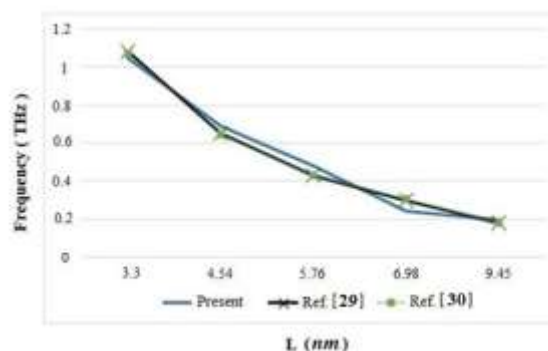
$$((\omega_0 - \omega_{atoms})/\omega_0) \times 100 \quad (5)$$

که در این رابطه  $\omega_0$  فرکانس ارتعاشی نانوحسگر بدون حضور اتم‌های گاز و  $\omega_{atoms}$  فرکانس ارتعاشی نانوحسگر با حضور اتم‌های گاز است.

در شکل ۵ نیز با در نظر گرفتن اثرهای سطحی، تغییرات حساسیت نانوحسگر در بازه تغییرات چگالی گاز کریپتون برای یک نانولوله‌ی کربنی با آرایش (۸، ۸) تحلیل و با نتایج عددی حاصل از روش تحلیل دینامیک مولکولی (MD) در مرجع [۲۹] مقایسه شده است.



نانوحسگر نیز کاهش یافته است. در این میان نیز با مقایسه شکل ۳ و ۴ مشخص شد که در یک نسبت ضخامت به قطر ثابت برای نانولوله کربنی، اثرهای اینرسی دورانی در مقایسه با دو اثر ناموضعی و تنش‌های سطحی، تأثیر بیشتری بر کاهش فرکانس ارتعاشی نانوحسگر در ابعاد بسیار کوچک دارد. همچنین طبق انتظار مشاهده گردید که با افزایش نسبت طول به قطر نانوحسگر، فرکانس کاهش می‌یابد در حالی که با افزایش ضخامت نانوحسگر، فرکانس در همه مودها افزایش می‌یابد. در پایان و برای سلامت‌سنجی پاسخ‌ها، مقایسه‌ای با نتایج موجود در پژوهش‌های پیشین انجام پذیرفت. این نتایج عمدتاً بر اساس شبیه‌سازی اتمی و توسط نرم‌افزار دینامیک مولکولی (MD) و با دقت اتمی بود و نزدیک بودن پاسخ‌ها، نشانگر دقت بالا در مدل مکانیکی ارائه شده در این پژوهش بود. همچنین، از دیدگاه کاربردی و در مقایسه با حسگرهای معمولی می‌توان مشاهده نمود که نانوحسگر مورد مطالعه توانایی تشخیص فرکانس‌های در محدوده تراهرتز را دارد. این مساله در مقایسه با حسگرهای معمولی که در محدوده کیلوهرتز تا مگاهرتز کار می‌کنند، به شدت اهمیت دارد و باعث افزایش چشمگیر در سرعت و حساسیت تشخیص می‌گردد. به علاوه با استفاده از مدل مکانیکی ارائه شده و پاسخ بسته فرکانس در رابطه ۳، می‌توان مشخصات اتمی هر گاز دیگری را وارد نمود و به راحتی تغییرات فرکانس ناشی از حضور اتم‌های آن گاز را تعیین نمود. این مزایا می‌تواند باعث کاهش چشمگیر هزینه‌های محاسباتی و زمان مورد نیاز برای تحلیل گردد.



شکل ۶. مقایسه مقادیر فرکانس به دست آمده با نتایج پژوهش‌های پیشین

مشاهده می‌شود که نتایج به دست آمده برای فرکانس ارتعاشی نانوحسگر، انطباق بسیار خوبی با نتایج عددی موجود در مراجع [۳۰، ۲۹] دارد که می‌تواند به خوبی صحت مدل مکانیکی ارائه شده را تایید نماید.

## ۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تغییرات فرکانس ارتعاشی یک نانوحسگر بر پایه نانولوله‌های کربنی در حضور مولکول‌های گاز و تحت تاثیر پارامترهای گوناگونی همچون اثرهای ناموضعی در ابعاد نانو، تنش‌های سطحی و اینرسی دورانی به صورت یک پاسخ تحلیلی و بسته به دست آمده است. از نتایج مهم این تحلیل می‌توان مشاهده نمود که گرچه اثرهای ناموضعی، تنش‌های سطحی و اینرسی دورانی در ابعاد بزرگ (ماکرو) بسیار کوچک است اما این اثرها در مقیاس نانو قابل ملاحظه هستند، در حالی که در بیشتر پژوهش‌ها به منظور سادگی محاسبات از آن‌ها صرف‌نظر شده و در نتیجه دقت محاسبات

## ۶. منابع

- [1] Anzar, Nigar, Rahil Hasan, Manshi Tyagi, Neelam Yadav, and Jagriti Narang. "Carbon nanotube-A review on Synthesis, Properties and plethora of applications in the field of biomedical science." *Sensors International* 1 (2020): 100003.

- [2] Chowdhury, Rajib, Sondipon Adhikari, and John Mitchell. "Vibrating carbon nanotube-based biosensors." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 42, no. 2 (2009): 104-109.
- [۳] مجید باقری، محمد ایمان پرست و مهدی راغبی، "معرفی و بررسی عملکرد تشدیدگرهای میکرومکانیکی." *مجله علمی صوت و ارتعاش* ۹، ۵ (۱۳۹۵): ۸۵-۱۰۰.
- [۴] محسن مطهری نژاد و سید محمد جعفری، "بررسی کارایی حسگرهای نشر فرا آوایی در مطالعه تخریب طبیعی یاتاقان تماس زاویه‌ای." *مجله علمی صوت و ارتعاش* ۲۴، ۱۲ (۱۴۰۳): ۵۷-۷۱.
- [5] Chakraborty, Urmila, Ajeet Kaushik, Ganga Ram Chaudhary, and Yogendra Kumar Mishra. "Emerging nano-enabled gas sensor for environmental monitoring—Perspectives and open challenges." *Current Opinion in Environmental Science & Health* 37 (2024): 100532.
- [6] Guo, Shu-Yu, Xian-Gang Hu, Peng-Xiang Hou, Zhu Liu, Yi-Ming Zhao, Ying-Gang Li, Feng Zhang, Chang Liu, and Hui-Ming Cheng. "A self-powered flexible gas-sensing system based on single-wall carbon nanotube films." *Cell reports physical science* 3, no. 12 (2022).
- [7] Poncharal, Philippe, Wang Zhong Lin, Daniel Ugarte, and Walt De Heer. "Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes." *science* 283, no. 5407 (1999): 1513-1516.
- [8] Mateiu, Ramona, Anders Kühle, Rodolphe Marie, and Anja Boisen. "Building a multi-walled carbon nanotube-based mass sensor with the atomic force microscope." *Ultramicroscopy* 105, no. 1-4 (2005): 233-237.
- [9] Chien, Wen Tung, Cheng Sheng Chen, and Hsin Hua Chen. "Resonant frequency analysis of fixed-free single-walled carbon nanotube-based mass sensor." *Sensors and Actuators A: Physical* 126, no. 1 (2006): 117-121.
- [10] Li, Chun-Yu, and Tsu-Wei Chou. "Strain and pressure sensing using single-walled carbon nanotubes." *Nanotechnology* 15, no. 11 (2004): 1493.
- [۱۱] رضا حسینی آراء و محسن هادی، "طراحی و تحلیل یک نانوزیست حسگر ارتعاشی برپایه نانولوله کربنی برای تشخیص ویروسها." *نشریه علمی صوت و ارتعاش* ۱۷، ۹ (۱۳۹۹): ۶۹-۸۰.
- [12] Chiu, Hsin-Ying, Peter Hung, Henk W. Ch. Postma, and Marc Bockrath. "Atomic-scale mass sensing using carbon nanotube resonators." *Nano letters* 8, no. 12 (2008): 4342-4346.
- [13] Wasik, Daniel, Ashok Mulchandani, and Marylynn V. Yates. "A heparin-functionalized carbon nanotube-based affinity biosensor for dengue virus." *Biosensors and Bioelectronics* 91 (2017): 811-816.
- [14] Georgantzinos, Stelios K., and Nick Anifantis. "Carbon nanotube-based resonant nanomechanical sensors: a computational investigation of their behavior." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 42, no. 5 (2010): 1795-1801.
- [15] Lee, Haw-Long, Jung-Chang Hsu, and Win-Jin Chang. "Frequency shift of carbon-nanotube-based mass sensor using nonlocal elasticity theory." *Nanoscale research letters* 5 (2010): 1774-1778.
- [16] Chaste, Julien, Alexander Eichler, Joel Moser, Gustavo Ceballos, Riccardo Rurali, and Adrian Bachtold. "A nanomechanical mass sensor with yoctogram resolution." *Nature nanotechnology* 7, no. 5 (2012): 301-304.

- [17] Zhang, Yin, Lijiang Zhou, and Hengshuang Zhao. "Determining the effects of surface elasticity and surface stress by measuring the shifts of resonant frequencies." *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 469, no. 2159 (2013): 20130449.
- [18] Zhang, Yin. "Detecting the stiffness and mass of biochemical adsorbates by a resonator sensor." *Sensors and Actuators B: Chemical* 202 (2014): 286-293.
- [19] Hosseini-Ara, Reza, Ali Mokhtarian, Amir Hossein Karamrezaei, and Davood Toghraie. "Computational analysis of high precision nano-sensors for diagnosis of viruses: Effects of partial antibody layer." *Mathematics and Computers in Simulation* 192 (2022): 384-398.
- [20] Hosseini-Ara, Reza, Amir Hossein Karamrezaei, and Ali Mokhtarian. "Exact analysis of antibody-coated silicon biological nano-sensors (SBNSs) to identify viruses and bacteria." *Microsystem Technologies* 26, no. 2 (2020): 509-516.
- [۲۱] رضا حسینی آراء، امیرحسین کرم‌رضایی و علی مختاریان، "تحلیل و بررسی اثر پوشش کامل لایه جاذب میوسین بر ارتعاشات نانو زیست‌حسگرهای سیلیکونی به منظور شناسایی عوامل بیماری‌زا." *مجله مهندسی پزشکی زیستی* ۱، ۱۲(۱۳۹۷)، ۴۱-۴۹.
- [22] Arefi, Mohammad, Sina Kiani Moghaddam, Elias Mohammad-Rezaei Bidgoli, Masoud Kiani, and Omer Civalek. "Analysis of graphene nanoplatelet reinforced cylindrical shell subjected to thermo-mechanical loads." *Composite Structures* 255 (2021): 112924.
- [23] Arefi, Mohammad, Reza Koochi Faegh, and Abbas Loghman. "The effect of axially variable thermal and mechanical loads on the 2D thermoelastic response of FG cylindrical shell." *Journal of Thermal Stresses* 39, no. 12 (2016): 1539-1559.
- [24] Arefi, Mohammad, Reza Koochi Faegh, and Abbas Loghman. "The effect of axially variable thermal and mechanical loads on the 2D thermoelastic response of FG cylindrical shell." *Journal of Thermal Stresses* 39, no. 12 (2016): 1539-1559.
- [25] Heidari, Yaser, Mohammad Arefi, and Mohsen Irani-Rahaghi. "Free vibration analysis of cylindrical micro/nano-shell reinforced with CNTRC patches." *International Journal of Applied Mechanics* 13, no. 04 (2021): 2150040.
- [26] Dehsaraji, Maryam Lori, Mohammad Arefi, and Abbas Loghman. "Three-dimensional free vibration analysis of functionally graded nano cylindrical shell considering thickness stretching effect." *Steel and Composite Structures, An International Journal* 34, no. 5 (2020): 657-670.
- [27] Arash, Behrouz, and Quan Wang. "Detection of gas atoms with carbon nanotubes." *Scientific reports* 3, no. 1 (2013): 1782.
- [28] Meirovitch, Leonard. *Fundamentals of vibrations*. McGraw-Hill International Edition. Mechanical Engineering Series, 2001.
- [29] Arash, Behrouz, Quan Wang, and Vijay K. Varadan. "Carbon Nanotube-Based Sensors for Detection of Gas Atoms." *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine* 2, no. 2 (2011): 021010.
- [30] Zhang, Yingyan, Chien Ming Wang, and Vincent B. C. Tan. "Assessment of Timoshenko beam models for vibrational behavior of single-walled carbon nanotubes using molecular dynamics." *Advances in Applied Mathematics and Mechanics* 1, no. 1 (2009): 89-106.

$$\begin{aligned}
 A &= (D + D^s) \left[ -\left(\frac{2m\pi}{L}\right)^8 - \left(\frac{n}{r}\right)^8 - 6\left(\frac{n}{r}\right)^4 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 - 4\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^6 - 4\left(\frac{n}{r}\right)^6 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \\
 B &= 2\tau^s \left\{ \begin{aligned} &\left[ \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^6 + \left(\frac{n}{r}\right)^6 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^4 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \\ &- \mu \left[ -\left(\frac{2m\pi}{L}\right)^8 - \left(\frac{n}{r}\right)^8 - 6\left(\frac{n}{r}\right)^4 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 - 4\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^6 - 4\left(\frac{n}{r}\right)^6 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \end{aligned} \right\} \\
 C &= \frac{Eh}{r^2} \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 \\
 D &= (\rho h + \rho^s) \left\{ \begin{aligned} &\left[ -\left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 - \left(\frac{n}{r}\right)^4 - 2\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \\ &- \mu \left[ \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^6 + \left(\frac{n}{r}\right)^6 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^4 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \end{aligned} \right\} \\
 E &= \left(\frac{Eh^2\nu^s}{6(1-\nu)}\right) \left\{ \begin{aligned} &\left[ \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^6 + \left(\frac{n}{r}\right)^6 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 + 3\left(\frac{n}{r}\right)^4 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \\ &- \mu \left[ -\left(\frac{2m\pi}{L}\right)^8 - \left(\frac{n}{r}\right)^8 - 6\left(\frac{n}{r}\right)^4 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^4 - 4\left(\frac{n}{r}\right)^2 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^6 - 4\left(\frac{n}{r}\right)^6 \left(\frac{2m\pi}{L}\right)^2 \right] \end{aligned} \right\}
 \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Krypton gas

<sup>2</sup>Carbon nanotube (CNT)

<sup>3</sup>Fullerene

<sup>4</sup>P. Poncharal

<sup>5</sup>R. Mateiu

<sup>6</sup>D.H. Wu

<sup>7</sup>C. Y. Li

<sup>8</sup>S.K. Georgantzinis

<sup>9</sup>N.K. Anifantis

<sup>10</sup>J. Chaste

<sup>11</sup>Youcto grams=10<sup>-24</sup> grams

<sup>12</sup>C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>

<sup>13</sup>Xenon

<sup>14</sup>Y. Zhang

<sup>15</sup>Eringen's nonlocal effects