

UNIVERSITATEA “OVIDIUS” din CONSTANȚA
Școala Doctorală de Matematică
Domeniul Matematică

Teza de doctorat
Rezumat

**Aspecte matematice ale modelelor macroscopice pentru
nanotuburi de carbon**

Conducători de doctorat:

Prof. univ. dr. EDUARD MARIUS CRĂCIUN

Prof. univ. dr. ing. SORIN VLASE

Student doctorand:

ADRIAN-ERACLE NICOLESCU

Constanța, 2022

Cuprins

1 Introducere

- 1.1 Scurt istoric
- 1.2 Structura tezei de doctorat. Scop și obiective
- 1.3 Rezultate originale ale cercetării
- 1.4 Mulțumiri

2. Modele matematice pentru proprietățile mecanice ale nanotuburilor de carbon

2.1 Introducere

- 2.1.1 Teoria clasică a elasticității
- 2.1.2 Modele nelocale simplificate pentru studiul deformațiilor și oscilațiilor nanotuburilor de carbon

2.2 Un model matematic pentru un senzor bazat pe modificările frecvenței oscilațiilor transversale ale nanotubului de carbon

- 2.2.1 Nanotubul de carbon modelat ca un corp elastic liniar
- 2.2.2 Determinarea masei oscilatorului echivalent cu nanotubul de carbon

2.3 Model matematic pentru oscilațiilor longitudinale ale nanotubului de carbon

- 2.3.1 Oscilațiile longitudinale în nanotuburile de carbon. Modelul nanotubului nelocal
- 2.3.2 Dependența frecvenței de oscilație a nanotubului de masă de gaz atașată
- 2.3.3 Aplicații pentru un senzor bazat pe modificările frecvenței oscilațiilor longitudinale ale nanotuburilor

2.4 Soluția slabă a oscilațiilor longitudinale ale nanotubului nelocal aflat într-un mediu elastic

- 2.4.1 Existența, unicitatea și regularitatea soluției slabe a problemei 2.4.1

2.5 Concluzii

3 Un model matematic pentru proprietățile electrice ale nanotuburilor de carbon

- 3.1 Introducere
- 3.2 Un principiu de maxim
- 3.3 Demonstrația Teoremei 3.1.6
- 3.4 Concluzii

4. Un model matematic pentru proprietățile electrice și termice ale nanotuburilor de carbon

- 4.1 Introducere
- 4.2 Demonstrația Teoremei 4.1.4
- 4.3 Concluzii

5. Concluzii finale, contribuții originale. Rezultate diseminate. Direcții viitoare de cercetare

- 5.1 Concluzii finale. Contribuții originale
- 5.2 Rezultate diseminate
 - 5.2.1 Articole publicate pe durata studiilor doctorale, incluse în teza de doctorat
 - 5.2.2 Prezentarea rezultatelor cercetării
 - 5.2.3 Articole publicate sau în curs de publicare în timpul studiilor doctorale, care nu a fost inclus în teza de doctorat
 - 5.2.4 Premiera rezultatelor cercetării științifice
- 5.3 Direcții viitoare de cercetare

Referințe bibliografice

Cuvinte-cheie Nanotub de carbon; senzor; metodă neinvazivă; oscilații transversale, oscilații longitudinale; ecuație anizotropică; principii de maxim; soluție slabă; problema supradeterminată; simetrie.

Rezumat

Descoperirea nanotuburilor de carbon în 1991 de Iijima [12] a generat direcții noi de dezvoltare de nanodispozitive de înaltă rezoluție. Nanotuburile de carbon prezintă proprietăți fizice și chimice unice, care au fost studiate intens în ultimele decenii pentru aplicații biologice. Detectarea ultra-sensibilă a speciilor biologice cu nanotuburi de carbon poate fi realizată după funcționalizarea acestora. Nanosenzorii bazați pe nanotuburi de carbon deschid o nouă abordare în analiza microscopică a probelor biologice. Nanodimensiunile nanotuburilor de carbon oferă posibilitatea integrării lor în senzori cu aplicații vaste în tehnicile non-invazive și minimum-invazive de detecție de compuși biologici și de măsurare de parametri medicali.

Aceasta teză de doctorat este structurată în cinci capitole, și anume: un capitol introductiv, trei capitole care conțin rezultate originale, rezultate ale cercetării personale efectuate pe durata studiilor doctorale asupra comportamentului mecanic, electric și termic al nanotuburilor de carbon și un ultim capitol care sintetizează concluziile finale, diseminarea rezultatelor obținute prin articolele publicate, prin participările la conferințe internaționale de specialitate, contribuțiile originale ale autorului, precum și direcții viitoare de cercetare. Scopul și obiectivele acestei teze de doctorat sunt cercetarea comportamentului mecanic, electric și termic al nanotuburilor de carbon.

Cercetarea se concretizează în realizarea unei baze teoretice și a unor modele matematice care să descrie comportamentul nanotuburilor, prin intermediul soluțiilor unor probleme cu date inițiale și la limită. Aplicațiile valorifica modelele teoretice elaborate.

Principalele rezultate originale din aceasta lucrare sunt două aplicații practice - doi senzori neinvazivi - bazate pe două modele macroscopice ale comportamentului elastic al nanotuburilor de carbon, și anume modelul Timoshenko și Gere [23] al barei elastice clasice pentru studiul oscilațiilor transversale și modelul Aydogdu [1] al barei elastice nelocale pentru studiul oscilațiilor longitudinale ale nanotuburilor de carbon, determinarea soluției slabe pentru oscilațiile longitudinale ale nanotubului de carbon aflat într-un mediu exterior elastic pe baza modelului barei nelocale Aydogdu [1] și două modele macroscopice pentru comportamentul electric și termic al nanotubului de carbon, și anume un model macroscopic pentru proprietățile electrice ale nanotubului de carbon cu doi pereți divizați virtual în domenii inelare, exprimând potențialul electric în domeniul ocupat de nanotub ca soluție a problemei supradeterminate 3.1.1., respectiv un alt model macroscopic pentru descrierea comportamentului termic, respectiv, electric al nanotubului, în condițiile în care capetele nanotubului sunt menținute la potențiale electrice constante diferite, respectiv, cu capetele menținute la temperaturi constante diferite ca soluție a problemei supradeterminate 4.1.1.

Rezultatele originale obținute pe durata studiilor doctorale prezentate în capitolele 2, 3 și 4 se bazează pe patru articole publicate în timpul studiilor doctorale: trei dintre acestea indexate ISI, și anume [2], [16], [17] și un articol publicat într-o revista indexată BDI, [15].

Subcapitolul 2.2 propune, pe baza modelului Timoshenko și Gere [23] al barei elastice clasice pentru studiul oscilațiilor transversale, un model matematic pentru un senzor bazat pe modificările frecvenței oscilațiilor transversale ale nanotubului de carbon modelat ca un corp elastic liniar. Ideea de funcționare a unui astfel de senzor este modificarea pulsației oscilațiilor proprii ale nanotubului în urma conectării la capătul liber al acestuia a unei molecule care îl funcționalizează, respectiv a atașării uneia sau mai multor molecule pe capătul funcționalizat.

Modelul de analiza propus în această lucrare încorporează detecția acetonei din respirația pacientului cu ajutorul unui senzor cu nanotuburi de carbon. În acest senzor, fiecare dintre nanotuburile de carbon este fixat la un capăt de un substrat, iar celălalt capăt este liber. Nanotuburile de carbon sunt plasate în vecinătatea suprafeței unei membrane selective. O a doua variantă de senzor presupune funcționalizarea capătului liber al nanotubului cu o moleculă cu afinitate mare la acetonă.

Se măsoară frecvențele de oscilație ale nanotuburilor și se compară spectrul frecvențelor nanotuburilor înainte și după atașarea moleculelor de acetonă. Măsurând variația relativă a frecvenței în urma cuplării moleculelor de acetonă, se poate face detecția până la nivelul unei singure molecule de

acetona și, implicit, se poate măsura indirect concentrația moleculelor de acetona și presiunea parțială a acetonei în proba investigată.

Pentru a studia oscilațiile transversale ale nanotubului de carbon, vom folosi modelul barei elastice clasice fixată la un capăt pe substrat, iar celălalt capăt liber. Activând piezoelectric (ca în Yasuda și colab. [29]), nanotubul de carbon va oscila liber pe direcția y . În aproximația micilor oscilații, oscilația nanotubului poate fi exprimată prin ecuația [23]:

$$EI \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} - \rho A \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = 0, \quad (2.100)$$

unde E este modulul de elasticitate Young al nanotubului de carbon, I este momentul de inerție al nanotubului, ρ este densitatea medie a nanotubului de carbon, A este aria secțiunii transversale a nanotubului de carbon la distanța x de O , iar u_y este deplasarea nanotubului în punctul de coordonată x .

Ecuația (2.100) arată că orice punct al barei oscilează armonic în cazul neamortizat, lucru care ne permite o analogie între oscilația capătului liber al nanotubului și oscilația unui pendul elastic. Nanotubul supus oscilațiilor libere neamortizate poate fi modelat ca un sistem discret - pendul elastic - care oscilează cu aceeași frecvență ca și capătul liber ($x = L$) al nanotubului. Ecuația de mișcare pentru modelul pendulului elastic este:

$$-k_{ech}\mathbf{x} = m_{ech} \frac{\partial^2 \mathbf{x}}{\partial t^2} = -4\pi^2 \nu^2 m_{ech} \mathbf{x}, \quad (2.101)$$

unde k_{ech} este constanta elastică a pendulului echivalent și m_{ech} este masa echivalentă a acestuia.

Frecvența proprie a oscilatorului echivalent cu nanotubul de carbon, în cazul micilor oscilații se poate exprima prin relația

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_{ech}}{m_{ech}}}. \quad (2.102)$$

Criteriile de analogie decurg din condiția ca pendulul elastic să aibă aceeași frecvență de oscilație ca și capătul liber ($x = L$) al nanotubului, deci:

- constanta elastică a pendulului trebuie să fie factorul de proporționalitate dintre forța maximă exercitată asupra capătului liber al barei și amplitudinea de oscilație a acestuia;
- masa pendulului trebuie să corespundă egalității dintre energia cinetică maximă a barei și energia cinetică maximă a pendulului echivalent.

O masă suplimentară atașată la capătul nanotubului de carbon va determina modificarea frecvenței micilor oscilații ale acestuia.

Pentru exprimarea dependenței frecvenței de oscilație a nanotubului de masa moleculei sau a grupului de molecule de gaz atașate de capătul liber al nanotubului am rezolvat două probleme:

Problema 2.2.1 *Fie un nanotub cu un capăt încastrat, supus la încovoire sub acțiunea unei forțe distribuite pe lungimea nanotubului și dirijată după axa Oy . Să se determine constanta de elastică a nanotubului (factorul de proporționalitate dintre forța maximă exercitată asupra capătului liber al nanotubului și amplitudinea de oscilație a acestuia).*

Pentru rezolvarea acestei probleme, am folosit ecuații de tip rezistența materialelor și am urmărit descrierea dată de Timoshenko și Gere [23], Timoshenko și Young [24]. Am obținut constanta elastică a resortului echivalent cu nanotubul un capăt încastrat în forma:

$$k_{ech} = \frac{3EI}{L^3}. \quad (2.136)$$

Problema 2.2.3 *Fie un nanotub cu un capăt încastrat care oscilează după (2.100). Să se determine masa m_{ech} a unui oscilator prins de resortul echivalent descris (2.136) care oscilează cu aceeași frecvență*

ca și nanotubul. Deformarea statică a nanotubului descrisă în Problema 2.2.1. este asimilată cu problema dinamică

$$m_{ech} \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -k_{ech} \mathbf{x}. \quad (2.137)$$

Pentru rezolvarea acestei probleme vom folosi o metoda energetica ca în Zacarias, Wang și Reimbold în [27]. Metoda utilizată pentru a determina masa echivalentă, m_{ech} , este de a face o analogie energetică între nanotub și oscilatorul echivalent. Principiul echivalenței este că nanotubul și oscilatorul echivalent au același efect dinamic, adică aceeași energie cinetică maximă. Considerăm că sistemul format din nanotubul modelat ca nanobară de masa echivalentă m_0 și o moleculă sau un grup de molecule de gaz atașate, de masă m , este pus în mișcare de oscilație. Am obținut masa echivalentă a oscilatorului:

$$m_{ech} = m_0 + m, \quad m_0 = \frac{33L}{140} \rho A \quad (2.147)$$

Pe baza ecuațiilor (2.102), (2.136) și (2.147) am exprimat dependența frecvenței de oscilație de masa moleculei sau a grupului de molecule atașate de capătul liber al nanotubului prin formula

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_{ech}}{m_{ech}}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{3EI}{(m_0 + m) L^3}}. \quad (2.148)$$

Dacă nu este atașată nicio moleculă de gaz, atunci $m = 0$ și conform ecuației (2.148), frecvența de oscilație a nanotubului este:

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{3EI}{m_0 L^3}}. \quad (2.149)$$

Notând cu $\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0}$ variația relativă a frecvenței nanotubului în urma atașării moleculei sau grupului de molecule de gaz, obținem masa atașată de capătul liber al nanotubului:

$$m = m_0 \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{\Delta\nu}{\nu_0}\right)^2} - 1 \right]. \quad (2.152)$$

În cazul analizei unei probe gazoase cu mai multe componente, pentru a asigura selectivitatea senzorului cu nanotuburi de carbon, se face funcționalizarea acestora. În funcție de gazul căutat în proba atmosferei analizate, pe fiecare nanotub se atașează chimic o moleculă cu afinitate mare la componenta gazoasă vizată. Folosind rezultatul obținut anterior, am obținut formula dependentei masei de gaz atașate de capătul liber al nanotubului de frecvența de oscilație a nanotubului funcționalizat. Notând cu m_f masa moleculei care funcționalizează nanotubul, obținem

$$m_{eq} = m_0 + m_f + m. \quad (2.154)$$

și obținem masa atașată de capătul liber funcționalizat al nanotubului:

$$m = (m_0 + m_f) \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{\Delta\nu}{\nu_0}\right)^2} - 1 \right]. \quad (2.159)$$

Între glicemie (BG) și concentrația de acetonă din aerul expirat (C_a) există formula empirică [28]

$$BG = \alpha C_a + \beta, \quad (2.160)$$

unde α și β sunt constante determinate experimental.

Rezultatul acestui subcapitol este Aplicația 2.2.2.6 care permite evaluarea glicemiei unui pacient. Rezultatele acestui subcapitol au fost publicate în lucrarea A.E. Nicolescu, L. Rusali, M. Vasile [15].

Subcapitolul 2.3 propune, pe baza modelului Aydogdu [1] al barei elastice nelocale, un model matematic pentru oscilațiile longitudinale ale nanotubului. În paragraful introductiv sunt rezolvate problemele 2.3.1 și 2.3.2, iar soluțiile obținute sunt folosite în paragraful 2.3. Pe baza soluției Problemei 2.3.3 este formulată Aplicația practica 2.3.3 pe baza căreia se poate utiliza nanotubul de carbon pentru identificarea unei macromolecule. Principiul utilizat este modificarea frecvenței oscilațiilor longitudinale ale nanotubului în urma atașării unei macromolecule de capătul liber al acestuia. Am rezolvat următoarea problemă:

Problema 2.3.3 Să se găsească frecvențele proprii ale deplasării $u(x, t)$, $u : [0; L] \times [0; \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, care să satisfacă ecuația

$$EA \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + (e_0 a)^2 m \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^2 \partial t^2} = m \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2}. \quad (2.192)$$

cu condițiile pe frontieră în absența macromoleculei

$$u(0, t) = 0, \quad N(L, t) = 0. \quad (2.193)$$

Am determinat frecvența oscilațiilor axiale ale nanotubului în urma atașării macromoleculei:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{EA}{L \left[M + M_{CNT} \left(\frac{e_0 a}{L} \right)^2 \right]}}. \quad (2.207)$$

respectiv în absența macromoleculei ($M = 0$):

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{EA}{LM_{CNT} \left(\frac{e_0 a}{L} \right)^2}}. \quad (2.208)$$

Dependența dintre masa macromoleculei biologice sau a unei structuri virale atașate de nanotub și variația frecvențelor de oscilație înainte și după atașarea de nanotubul care oscilează longitudinal este exprimată prin

$$M = M_{CNT} \left(\frac{e_0 a}{L} \right)^2 \left[\left(\frac{\nu_0}{\nu} \right)^2 - 1 \right]. \quad (2.209)$$

Contribuția originală a autorului în paragraful 2.4, pe baza modelului barei nelocale Aydogdu [1], este determinarea soluției slabe pentru oscilațiile longitudinale ale nanotubului de carbon aflat într-un mediu exterior elastic. Am folosit fundamentele teoretice ale soluțiilor slabe pentru ecuația undelor din cărțile H. Brezis [5], V. Barbu [3], Singh și colab. [22], O. A. Ladyzhenskaia [13], G. Shilov [21] la care se adaugă lucrarea lui C. Mortici [14].

Am considerat că mediul exterior elastic acționează asupra nanotubului cu o forță axială pe unitatea de lungime $f = -ku$, k este o constantă reală strict pozitivă. În această ipoteză, formulăm următoarea problemă:

Problema 2.4.1 Fie $\Omega = (0, L) \subset \mathbb{R}$ (domeniul spațial ocupat de nanotubul de carbon) cu frontiera Γ . Definim $Q = \Omega \times (0, \infty)$ și $\Sigma = \Gamma \times (0, \infty)$. Am studiat existența și unicitatea soluției slabe u a problemei la limită:

- (i) $\left[EA - k(e_0 a)^2 \right] \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + (e_0 a)^2 m \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} - ku = 0$ în Q ;
- (ii) $u = 0$ pe Σ ;
- (iii) $u(x, 0) = g(x)$ în Ω ;
- (iv) $\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = h(x)$ în Ω .

Notând cu

$$p_0 = EA - k(e_0 a)^2, \quad p_1 = m(e_0 a)^2, \quad (2.210)$$

ecuația (i) poate fi scrisă sub forma

$$m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left[p_0 \frac{\partial u}{\partial x} + p_1 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} \right] + ku = 0 \quad t > 0, \quad x \in (0, L). \quad (2.211)$$

Condițiile la limită asociate ecuației (2.211) sunt:

$$u|_{x=0} = u|_{x=L} = 0, \quad (2.212)$$

la care se adaugă condițiile inițiale

$$u|_{t=0} = g(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{t=0} = h(x), \quad x \in (0, L). \quad (2.213)$$

Am determinat soluția problemei (2.211)-(2.213) sub forma unei serii Fourier folosind metoda separării variabilelor și am demonstrat existența, unicitatea și regularitatea soluției slabe a problemei (2.211)-(2.213).

Pentru a defini soluția slabă a problemei (2.211)-(2.213), luând în considerare condițiile la limită, vom considera spațiul Sobolev $H_0^1(0, L)$ (H. Brézis [5], V. Barbu [3]) cu produsul scalar și norma asociată acestuia:

$$\begin{aligned} \langle u, v \rangle_1 &:= p_1 \int_0^L u' v' dx + m \int_0^L u v dx, \\ \|u\|_1^2 &:= p_1 \int_0^L (u')^2 dx + m \int_0^L u^2 dx \quad \forall u, v \in H_0^1(0, L). \end{aligned} \quad (2.214)$$

Pentru obținerea definiției unei soluții slabe, vom înmulți scalar (2.211) cu o funcție $v \in H^1(0, T; H_0^1(0, L))$ și apoi vom integra în raport cu t , pentru $t \in (0, T)$. În urma integrărilor prin părți și a condițiilor la limită (2.212)-(2.213) obținem următoarea definiție

Definiția 2.4.2 Fie $g, h \in H_0^1(0, L)$ funcții date. Funcția $u : (0, L) \times (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ se numește soluție slabă a problemei la limită (2.211)-(2.213) dacă:

1. $u \in C^1([0, T]; H_0^1(0, L))$ și

$$\begin{aligned} & \tilde{k} \int_0^t \int_0^L u(x, \tau) v(x, \tau) dx d\tau + \tilde{p}_1 \int_0^L \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x \partial t} \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} dx \\ & - \tilde{p}_1 \int_0^t \int_0^L \frac{\partial^2 u(x, \tau)}{\partial x \partial t} \frac{\partial^2 v(x, \tau)}{\partial x \partial t} dx d\tau + \\ & + \int_0^t \int_0^L \left[\tilde{p}_0 \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial x} \frac{\partial v(x, \tau)}{\partial x} - \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial t} \frac{\partial v(x, \tau)}{\partial t} \right] dx d\tau \\ & + \int_0^L \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} v(x, t) dx \\ & = \int_0^L h(x) v(x, 0) dx + \tilde{p}_1 \int_0^L h'(x) \frac{\partial v}{\partial x}(x, 0) dx \\ & \quad \forall v \in H^1(0, T; H_0^1(0, L)), \quad \forall T > 0, \quad \forall t \in (0, T); \end{aligned} \quad (2.216)$$

2. $u(x, 0) = g(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = h(x), \quad 0 < x < L.$

Am notat cu $\tilde{p}_0 = \frac{p_0}{m}$; $\tilde{p}_1 = \frac{p_1}{m}$; $\tilde{k} = \frac{k}{m}$.

Pentru a obține existența și unicitatea soluției slabe, de tip propagări de unde, definită mai sus, aplicăm metoda separării variabilelor. Ecuația undelor longitudinale se determină prin căutarea de soluții de forma

$$u(x, t) = \varphi(x) e^{i\omega t}, \quad t > 0, \quad x \in (0, L).$$

Înlocuind u de această formă în ecuația (2.211), și ținând cont de condițiile la limită (2.212), adică problema Sturm-Liouville (G. Șilov [21][Capitolul V, Secțiunea 5])

$$\begin{cases} (p_0 - p_1\omega^2) \varphi'' + (-k + m\omega^2) \varphi = 0, & x \in (0, L) \\ \varphi(0) = \varphi(L) = 0. \end{cases} \quad (2.217)$$

Am găsit valorile proprii ale problemei (2.217), λ_n :

$$\omega_n = \sqrt{\frac{n^2\pi^2 p_0 + kL^2}{n^2\pi^2 p_1 + mL^2}}. \quad (2.222)$$

și funcțiile proprii ale problemei (2.217)

$$\varphi_n(x) = a_n \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad x \in [0, L], \quad n \in \mathbb{N}^*,$$

unde a_n va fi determinat așa încât acestea să formeze un sistem ortonormat care va fi și complet (conform G. Șilov [21][Capitolul V, Secțiunea 5] și C. Mortici [14]) în spațiul $H_0^1(0, L)$ în raport cu norma și produsul scalar definite în (2.214). Am găsit

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi x}{L} (c_n \cos \omega_n t + d_n \sin \omega_n t), \quad (2.234)$$

unde constantele a_n, ω_n, c_n, d_n sunt cele date de expresiile:

$$a_n = \sqrt{\frac{2L}{n^2\pi^2 p_1 + mL^2}}, \quad n \in \mathbb{N}^*. \quad (2.226)$$

$$c_n = \langle g, \varphi_n \rangle = p_1 \int_0^L g' \varphi_n' dx + m \int_0^L g \varphi_n dx \quad \forall n \in \mathbb{N}^*. \quad (2.232)$$

$$d_n \omega_n = \langle h, \varphi_n \rangle_1, \text{ de unde } d_n = \frac{1}{\omega_n} \left(p_1 \int_0^L h' \varphi_n' dx + m \int_0^L h \varphi_n dx \right) \forall n \in \mathbb{N}^*, \quad (2.233)$$

Pentru a demonstra existența și unicitatea soluției slabe a problemei 2.4.1 am folosit rezultatele obținute anterior și argumente standard (Ladyzhenskaya [[13], Chapter IV, Sections 2-4] și Barbu [[3], pp. 168-189]). în concluzie, avem:

Teorema 2.4.3 Dacă $g, h \in H_0^1(0, L)$ și sunt verificate ipotezele asupra constantelor de material, atunci problema (2.211) – (2.213) admite o unică soluție slabă $u \in C^1([0, T]; H_0^1(0, L))$ dată de egalitatea (2.234).

Rezultatele acestui subcapitolului 2.4 au fost publicate în lucrarea A.E. Nicolescu, A. Bobe [16].

În capitolul 3 am studiat o problemă generală supradeterminată a cărei soluție generală am particularizat-o pentru descrierea distribuției potențialului electric în interiorul unui nanotub cu doi pereți. Deoarece sunt impuse atât condițiile la limită Dirichlet, cât și cele Neumann, Problema 3.1.1 este supradeterminată și atunci, în general, există o soluție doar dacă domeniul Ω studiat satisface o proprietate suplimentară de simetrie.

Modelele electrice și electronice pentru nanotubul de carbon cu un singur perete sau cu doi pereți cu comportament de semiconductor propuse de Collins și colab. [8], Devoret și colab. [9], Neto și colab. [18], Postma și colab. [19] includ în componenta acestora un condensator echivalent.

Modelul macroscopic electric propus în acest capitol pentru determinarea distribuției potențialului electric în interiorul unui nanotub cu doi pereți divizează nanotubul cilindric în domenii inelare. Pe baza semnificației fizice a condițiilor pe frontiere impuse în problema generală (cei doi pereți ai nanotubului menținți la potențiale electrice constante diferite), modelul propune descompunerea nanotubului în domenii inelare, toate aceste domenii, conectate la aceeași diferență de potențial electric sunt echivalente cu condensatoare elementare conectate în paralel.

Norma euclidiană, care reflectă izotropia spațiului și operatorul Laplace, care este la rândul său determinat de izotropia dielectricului și dictează utilizarea normei euclidiene în exprimarea câmpului electric în cazul izotrop, este înlocuită în acest capitol cu o normă arbitrară și, respectiv, de un operator anizotrop N -laplacian, care reflectă anizotropia mediului. Înlocuind norma euclidiană obișnuită a gradientului cu o normă arbitrară F , atunci simetria rezultată a soluției este cea a așa-numitei forme Wulff (o bilă în norma duală F^*). În cazul particularizării rezultatelor Problemei 3.1.1, pentru nanotubul de carbon divizat virtual în domenii inelare, funcția u reprezintă potențialul electrostatic V . La fel ca și soluția generală a Problemei 3.1.1, potențialul este o funcție mărginită și Holder continuă în domeniul Ω . Modelul matematic propus pentru distribuția potențialului electric V în nanotubul de carbon poate fi privit ca un caz particular al problemei generale 3.1.1 pentru N -laplacianul anizotrop într-un domeniu inelar din $\mathbb{R}^N$.

$$\begin{aligned} F &\in C_{loc}^{3,\alpha}(\mathbb{R}^N \setminus \{\mathbf{0}\}), \text{ cu } \alpha \in (0, 1), \\ \text{Hess}(F^N) &\text{ este pozitivă definită pe } \mathbb{R}^N \setminus \{\mathbf{0}\}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Mai sus, $C_{loc}^{3,\alpha}(\mathbb{R}^N \setminus \{\mathbf{0}\})$ reprezintă spațiul funcțiilor de clasă C^3 pentru care derivatele parțiale de ordin trei sunt funcții local Hölder continue pe $\mathbb{R}^N \setminus \{\mathbf{0}\}$ de exponent α (conform Fiorenza [11, Capitolul 1] și L. Evans [10, Chapter 5]).

Am notat argumentul normei arbitrare F cu $F(\xi) = F(\xi_1, \dots, \xi_N)$, iar $F_{\xi_i} = \frac{\partial F}{\partial \xi_i}$, $i \in 1, 2, \dots, N$ și cu

$$\text{Hess}(F^N) := (F_{\xi_i \xi_j}^N)_{1 \leq i, j \leq N}, \text{ unde } F_{\xi_i \xi_j} = \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_i \partial \xi_j}$$

Fie următoarea problemă la limită supradeterminată:

Problema 3.1.1

$$\begin{cases} Qu := \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (F^{N-1}(\nabla u) F_{\xi_i}(\nabla u)) = 0 \text{ în } \Omega := \Omega_0 \setminus \overline{\Omega}_1 \subset \mathbb{R}^N, \\ u = 0, F(\nabla u) = c_0 \text{ pe } \partial\Omega_0, \\ u = 1, F(\nabla u) = c_1 \text{ pe } \partial\Omega_1. \end{cases} \quad (3.2)$$

Aici Ω_0 și Ω_1 sunt domenii mărginite din $\mathbb{R}^N$ având frontierele de clasă C^2 , astfel încât $\Omega_0 \supset \overline{\Omega}_1$, iar $c_1 > c_0 > 0$ sunt constante reale oarecare. Mai mult, presupunem că Ω_0 și Ω_1 sunt domenii stelate în raport cu originea, care se află situată în Ω_1 . Prin $\nu = (\nu^1, \dots, \nu^N)$ notăm versorul normalei exterioare la $\partial\Omega$. În demonstrațiile din acest capitol am folosit următoarele definiții:

Definiția 3.1.2 Spunem că $u \in W^{1,N}(\Omega)$ este soluția slabă a problemei 3.1.1 dacă

$$\int_{\Omega} F^{N-1}(\nabla u) F_{\xi_i}(\nabla u) v_i \, dx = 0 \quad \forall v \in C_0^\infty(\Omega) \quad (3.3)$$

și u satisface condițiile pe frontieră (3.2)_{2,3}.

Definiția 3.1.4 Numim *norma duală* a lui F

$$F^*(\mathbf{x}) = \sup_{\xi \neq \mathbf{0}} \frac{\langle \mathbf{x}, \xi \rangle}{F(\xi)} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N.$$

F^* se mai numește și polara lui F .

Pentru $r > 0$, definim

$$W_F(r) := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : F^*(\mathbf{x}) < r\}, \quad W_{F^*}(r) := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : F(\mathbf{x}) < r\}.$$

Definiția 3.1.5 În general, pentru $r > 0$, spunem că $W_F(r)$ este forma *Wulff* a lui F , de rază r și centru $\mathbf{0}$. O mulțime $D \subset \mathbb{R}^N$ este o formă *Wulff* a lui F dacă există $r > 0$ astfel încât $D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : F^*(\mathbf{x}) < r\}$.

Rezultatul principal original al acestui capitol este teorema 3.1.6.

Teorema 3.1.6 Dacă problema 3.2 are o soluție slabă u , atunci Ω_1 și Ω_0 sunt forme Wulff concentrice, ale căror raze sunt date de:

$$r_i = \left(c_i (\ln c_1 - \ln c_0) \right)^{-1}, \quad i = 0, 1. \quad (3.9)$$

Mai mult, dacă $F^* \in C^1(\mathbb{R}^N \setminus \{\mathbf{0}\})$, atunci soluția $u(\mathbf{x})$ este dată de formula:

$$u(\mathbf{x}) = \left((\ln r_0 - \ln r_1)^{-1} (\ln r_0 - \ln F^*(\mathbf{x})) \right) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (3.10)$$

Demonstrația Teoremei 3.1.6 este prezentată printr-o succesiune de leme:

Lema.3.2.1 Presupunem că u este soluția slabă a ecuației (3.2)₁. Atunci funcția P , definită prin (3.16) – (3.17), este fie identic constant pe $\bar{\Omega}$, sau nu are puncte de maxim în Ω și verifică $P_\nu > 0$ pe $\partial\Omega = \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1$.

Aici, ν este versorul normalei exterioare la $\partial\Omega$, în timp ce P_ν este derivata normală a lui P .

Lema.3.2.2 Presupunem că u este soluția slabă a ecuației (3.2)₁. Fie a_{ij} coeficienții definiți prin

$$a_{ij}(\nabla u) := \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \left(\frac{1}{N} F^N(\nabla u) \right) = F^{N-1} F_{ij} + (N-1) F^{N-2} F_i F_j,$$

unde $i, j \in \{1, \dots, N\}$. Atunci avem inegalitatea:

$$a_{ij} a_{kl} u_{ik} u_{jl} \geq \frac{(a_{ij} u_{ij})^2}{N} + \frac{N}{N-1} \left[\frac{a_{ij} u_{ij}}{N} - (N-1) F^{N-2} F_i F_j u_{ij} \right]^2 \quad \text{pe } \Omega \setminus \mathcal{C}, \quad (3.18)$$

unde mulțimea

$$\mathcal{C} = \{x \in \Omega; \nabla u(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}.$$

Pentru început vom defini curbura medie anizotropă, H_F (G. Wang și C. Xia [26, p. 313]). În acest scop vom considera un domeniu mărginit $D \subset \mathbb{R}^N$ cu frontiera, ∂D -o subvarietate $N-1$ dimensională, orientată și compactă, fără frontieră în $\mathbb{R}^N$. Notăm cu $\{e_\alpha\}_{\alpha=1}^{N-1}$ o bază în spațiul tangent la ∂D , iar cu $(g_{\alpha\beta})_{\alpha\beta}$, $(h_{\alpha\beta})_{\alpha\beta}$ matricile primei forme fundamentale, respectiv celei de-a doua forme fundamentale.

Definiția 3.3.1 A doua F-formă fundamentală, $(h_{\alpha\beta}^F)_{\alpha\beta}$ și curbura medie anizotropă H_F a frontierei ∂D se definesc astfel:

$$h_{\alpha\beta}^F = \langle F_{\xi\xi} \circ \bar{\nabla}_{e_\alpha}, e_\beta \rangle, \quad H_F = \sum_{\alpha,\beta=1}^{N-1} g^{\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^F, \quad (3.34)$$

unde $(g^{\alpha\beta})_{\alpha\beta}$ e matricea inversă a matricei $(g_{\alpha\beta})_{\alpha\beta}$, iar $\bar{\nabla}$ este derivata covariantă în $\mathbb{R}^N$.

De asemenea, spunem că ∂D este slab convexă dacă matricea $(h_{\alpha\beta})_{\alpha\beta}$ este semipozitiv definită (G. Wang și C. Xia [26, p. 313]).

Lema 3.3.2 Dacă problema 3.2 admite soluția slabă $u(\mathbf{x})$, atunci F - curbura medie, H_F , a $\partial\Omega$ satisface:

$$H_{1F} > \alpha \frac{(N-1)c_1}{N} \quad \text{pe } \partial\Omega_1 \quad \text{și} \quad H_{0F} < \alpha \frac{(N-1)c_0}{N} \quad \text{pe } \partial\Omega_0, \quad (3.35)$$

sau

$$H_{1F} = \alpha \frac{(N-1)c_1}{N} \quad \text{pe } \partial\Omega_1 \quad \text{și} \quad H_{0F} = \alpha \frac{(N-1)c_0}{N} \quad \text{pe } \partial\Omega_0, \quad (3.36)$$

unde $H_{iF} := H_{F|\partial\Omega_i}$, $i = 0, 1$.

Lema 3.3.3 O condiție necesară de existență a unei soluții $u(\mathbf{x})$ a problemei 3.2 este

$$c_0^N |\Omega_0| = c_1^N |\Omega_1|, \quad (3.41)$$

unde c_0, c_1 sunt constantele din condițiile la limită (3.2)_{2,3}.

În final am obținut

$$u(\mathbf{x}) = k_0 \int_{F^*(\mathbf{x})}^{r_0} s^{-1} ds = k_0 (\ln r_0 - \ln F^*(\mathbf{x})) \quad \text{pe } \Omega. \quad (3.57)$$

$$\nabla u(\mathbf{x}) = -\frac{\nabla F^*(\mathbf{x})}{(\ln r_0 - \ln r_1) F^*(\mathbf{x})}. \quad (3.58)$$

În cele din urmă, pentru a obține (3.9) folosim condițiile pe frontieră (3.2)_{2,3}, (3.58) și egalitatea $F(\nabla F^*(\mathbf{x})) = 1$. Astfel, Teorema 3.1.6, este demonstrată. Rezultatele originale din capitolul 3 au fost publicate în lucrarea A. E. Nicolescu și S. Vlase [17].

Cunoașterea distribuției potențialului electric și a distribuției temperaturii pe domeniul spațial ocupat de un nanotub permite utilizarea acestuia într-un domeniu vast de dispozitive de măsură bazate pe efectul termoelectric direct *Seebeck* (Chakraborty și colab. [6]), pe efectul *Peltier* (Shafraniuk [20]), pe efectul *Hall* (Baumgartner și colab. [4]), sau pe efectul *Nernst* (Checkelsky și Ong [7]).

În capitolul 4 am formulat o problemă generală la limită supradeterminată, Problema 4.1.1, pe un domeniu cilindric $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $N \geq 2$, pentru o funcție $u : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ pentru care sunt puse condiții pe frontierele libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$.

Pe baza problemei generale 4.1.1, se formulează în continuare două probleme particulare la limită supradeterminate, problema 4.1.5. și problema 4.1.6, ale căror soluții permit o posibilă descriere a comportamentului electric, respectiv, termic al nanotuburilor de carbon pentru care sunt puse condiții pe frontierele libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$. Prin interpretările potențialului electric V și, respectiv, a temperaturii T ca fiind soluțiile problemelor particulare 4.1.5 respectiv 4.1.6, în teză au fost propuse modele matematice ale distribuției suprafețelor izoterme în nanotubul de carbon cu capetele menținute la potențiale electrice constante, respectiv pentru suprafețele echipotențiale în nanotubul cu capetele termostatate.

Modelul microscopic propus în acest capitol pentru descrierea comportamentului termic, respectiv, electric al nanotubului, este un domeniu cilindric $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, cu capetele menținute la potențiale electrice diferite, respectiv, cu frontierele menținute la temperaturi diferite pe care se formulează problemele 4.1.5 și 4.1.6.

Problemele 4.1.5 și 4.1.6 sunt cazuri particulare ale Problemei 4.1.1, problemă la limită supradeterminată mai generală, pe un domeniu cilindric $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $N \geq 2$, pentru o funcție $u : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ pentru care sunt puse condiții pe frontierele libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$. Pentru modelul microscopic propus, funcția u reprezintă potențialul electric V în cazul comportamentului electric, respectiv, temperatura T în cazul comportamentului termic. Modelul microscopic al nanotubului de carbon propus în acest capitol conduce la concluzia că suprafețele izoterme ale nanotubului termostatat la capete, respectiv suprafețele echipotențiale ale nanotubului cu capetele menținute de potențiale electrice constante sunt hiperplane paralele cu frontierele libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$ în cazul N -dimensional. Acest model este un caz particular al unei probleme supradeterminate pentru o clasă generală de ecuații anizotrope pe un domeniu cilindric $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Scopul este să arătăm că dacă problema 4.1.1 admite o soluție în sens slab, atunci domeniul Ω și soluția u corespunzătoare satisfac anumite proprietăți de simetrie. În acest capitol am tratat următoarea problemă la limită:

Problema 4.1.1

$$\begin{cases} Qu := \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} (G'(F(\nabla u)) F_{\xi_i}(\nabla u)) = 0 & \text{în } \Omega, \\ u = 0, F(\nabla u) = a_0 = \text{const.} > 0 & \text{pe } \partial\Omega_0, \\ u = 1, F(\nabla u) = a_1 = \text{const.} > 0 & \text{pe } \partial\Omega_1, \\ G'(F(\nabla u)) \nabla F(\nabla u) \cdot \nu = 0 & \text{pe } \partial\Omega_c. \end{cases} \quad (4.7)$$

Rezultatul principal al acestui capitol afirmă următoarele:

Teorema 4.1.4 Să presupunem că frontiera laterală a cilindrului $\partial\Omega_c$ este slab convexă și, în plus, funcția F verifică și condiția

$$\sum_{i=1}^{N-1} x_i \frac{\partial F}{\partial x_i}(x) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^N. \quad (4.10)$$

Dacă problema 4.1.1 are o soluție $u \in C^1(\overline{\Omega})$, atunci $a_0 = a_1 = a > 0$ și frontierele $\partial\Omega_i$ sunt cuprinse în două hiperplane orizontale, $h_i = c_i = \text{const.}$, $i = 0, 1$. Mai mult, soluția u a problemei 4.1.1 depinde doar de x_N .

Demonstrarea Teoremei 4.1.4 este dată printr-o succesiune de leme:

Lema 4.2.1 Funcția $P(u; \cdot)$ definită

$$P(u; x) = G'(F(\nabla u(x))) F(\nabla u(x)) - G(F(\nabla u(x))) \stackrel{\text{not.}}{=} H(F(\nabla u(x))) \forall x \in \overline{\Omega},$$

își atinge maximul pe $\overline{\Omega}$ doar pe $\partial\Omega$, altfel $P(u; \cdot) \equiv \text{const.}$ în $\overline{\Omega}$.

Lema 4.2.2 Presupunem că u este o soluție slabă a ecuației (4.7)₁. Fie a_{ij} coeficienții definiți prin

$$a_{ij}(\nabla u) := \frac{\partial^2}{\partial \xi_i \partial \xi_j} (G \circ F)(\nabla u) = G' F_{ij} + G'' F_i F_j,$$

$$a_{ijk}(\nabla u) := \frac{\partial^3}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k} (G \circ F)(\nabla u).$$

Atunci avem următoare inegalitate:

$$a_{ij} a_{kl} u_{ik} u_{jl} \geq \frac{(a_{ij} u_{ij})^2}{N} + \frac{N}{N-1} \left[\frac{a_{ij} u_{ij}}{N} - G'' F_i F_j u_{ij} \right]^2 \text{ pe } \Omega \setminus \mathcal{C}. \quad (4.30)$$

Lema 4.2.3 O condiție necesară pentru existența unei soluții slabe u a problemei (4.7) este $a_0 = a_1 = a > 0$.

Lema 4.2.4 Funcția auxiliară P verifică următoarea identitate

$$\int_{\Omega} \left(P(u; x) - G'(F(\nabla u(x))) \sum_{i=1}^{N-1} F_i(\nabla u(x)) u_i(x) \right) dx = H(a) |\Omega|, \quad (4.30)$$

unde $|\Omega|$ este volumul lui Ω .

Observația 4.2.5

Modificăm problema la limită (4.7) luând $h_0 = 0$, adică

$$\partial\Omega_0 = \{(x', 0) \in \mathbb{R}^N; x' \in \Omega'\},$$

iar $F(\nabla u)$ nu mai este dat pe $\partial\Omega_0$.

Dacă această versiune modificată a problemei 4.1.1 are o soluție slabă $u \in C^1(\overline{\Omega})$ și au loc ipotezele Teoremei 4.1.4, atunci porțiunea de frontieră liberă $\partial\Omega_1$ este conținut într-un hiperplan orizontal $h_1 = \text{const.} > 0$ și u depinde numai de x_N .

Într-adevăr, concluzia Lemei 4.2.1 rămâne adevărată dacă (4.7)₂ este înlocuită prin

$$u = 0 \text{ pe } \partial\Omega_0 = \{(x', 0) \in \mathbb{R}^N; x' \in \Omega'\}. \quad (4.46)$$

Modelul microscopic propus presupune descrierea comportamentul termic, respectiv, electric al nanotubului, că domeniu ocupat de nanotub este cilindric, iar capetele nanotubului sunt menținute la potențiale electrice constante diferite, respectiv, cu capetele menținute la temperaturi constante diferite.

Acest model conduce la concluzia că suprafețele izoterme ale nanotubului termostatat la capete, respectiv, suprafețele echipotențiale ale nanotubului cu capetele menținute de potențiale electrice constante sunt hiperplane paralele cu frontierele libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$. Valorile temperaturii, respectiv ale potențialului electric într-un punct al nanotubului depind doar de variabila x_N în lungul axei cilindrului. Acest capitol propune două direcții, și anume:

- O problemă abstractă la limita supradeterminată (Problema 4.1.1), care generalizează modelul propus, și anume problema ecuației anizotrope pe un domeniu cilindric $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, $N \geq 2$, pentru o funcție $u : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ pentru care sunt puse condiții pe frontierele libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$.
- Două aplicații (Problema 4.1.5 și Problema 4.1.6) ale Problemei 4.1.1 prin particularizarea funcției u în cazul tridimensional, u reprezentând potențialul electric în Problema 4.1.5, respectiv, temperatura în Problema 4.1.6.

Rezultatul principal al acestui capitol este Teorema 4.1.4. Pentru a demonstra Teorema 4.1.4. printr-o succesiune de leme, am stabilit un principiu de maxim pentru o P -funcție, o identitate de tip Rellich și unele argumente geometrice privind curburile anizotrope ale frontierelor libere $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$.

Dacă în capitolul 3 soluția problemei generale este aplicată pentru a determina potențialul electric în domeniul spațial ocupat de un nanotub cu doi pereți, pereții nanotubului fiind menținuți la potențiale electrice constante diferite cu scopul evaluării capacității electrice echivalente a acestuia, în capitolul 4, soluția problemei 4.1.1 este aplicată în determinarea distribuției potențialului electric și, respectiv, în determinarea distribuției temperaturii pentru un nanotub cu un singur perete în condițiile în care capetele acestuia sunt menținute la potențiale electrice constante diferite, respectiv, capetele acestuia sunt menținute la temperaturi constante diferite.

Problemele legate de nanotuburi în capitolele 3 și 4 sunt decuplate.

În capitolele 3 și 4 nu se studiază deformabilitatea sau propagările în prezența câmpului electric sau termic.

Pe baza rezultatelor obținute în acest capitol (în condițiile problemei 4.1.5, suprafețele echipotențiale ale nanotuburilor de carbon sunt plane paralele cu $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$, iar în condițiile problemei 4.1.6, suprafețele izoterme ale nanotuburilor de carbon sunt plane paralele cu $\partial\Omega_0$ și $\partial\Omega_1$), se pot propune două aplicații practice, și anume implementarea nanotubului de carbon fie ca element al unui senzor termoelectric, fie utilizarea nanotubului ca nanogenerator de tensiune electrică bazat pe efectul Seebeck.

Rezultatele originale din acest capitol au fost publicate în lucrarea L. Barbu și A.E. Nicolescu [2].

Câteva direcții de studiu pe care le voi avea în vedere în conexiune cu problemele studiate în aceasta teza de doctorat sunt următoarele:

- (i) Studiul senzorilor electromagnetici cu nanotuburi de carbon. Nanostructura nanotuburilor de carbon permite utilizarea acestora ca detectori de radiație electromagnetică și de radiație gama pe baza modificărilor proprietăților electrice (capacitate electrică, rezistență electrică și inductanță magnetică) în urma interacțiunilor cu aceste radiații.
- (ii) Cu toate că cea mai mare parte a nanotuburilor de carbon pot fi asimilate din punct de vedere elastic cu sisteme uni-dimensionale chirale, în această lucrare au fost considerate două familii de nanotuburi, cele zig-zag și cele armchair. Modelele nelocale prezentate în lucrare au fost aplicate acestor două familii, iar extinderea lor la nanotuburile chirale reprezintă una din căile de generalizare ulterioară a rezultatelor din această lucrare.
- (iii) Studiul comportamentului piezoelectric al nanotuburilor deformate axial și utilizarea rezultatelor obținute în proiectare de nanosenzori electromecanici.
- (iv) O alta direcție de cercetare este studiul vibrațiilor nanotuburilor compozite funcționalizate lateral. Funcționalizarea laterală a nanotuburilor de carbon permite atât mărirea suprafeței active de atașare a moleculelor care fac obiectul detecției, cât și creșterea semnificativă a probabilității de atașare de nanotub a acestor molecule.

REFERINȚE BIBLIOGRAFICE

- [1] Aydogdu, M., *Axial vibration of the nanorods with the nonlocal continuum rod model*, Physica E., 41, 861-864, (2009)
- [2] Barbu L, Nicolescu A.E., *An overdetermined problem for a class of anisotropic equations in a cylindrical domain*, Math. Method. Appl. Sci., 1-9, (2020)
- [3] Barbu, V., *Partial Differential Equations and Boundary Value Problems*, Springer, (1998)
- [4] Baumgartner, G. et al., *Hall effect and magnetoresistance of carbon nanotube films*, Phys. Rev. B, 55, 6704-6707, 1997
- [5] Brezis, H., *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*, Springer, 200-234, (2014)
- [6] Chakraborty, P., Ma, T., Zahiri, A.H., Cao, L., Wang, Y., *Carbon-based materials for thermoelectrics*, Adv. Condens. Matter Phys., 3898479, 2018
- [7] Checkelsky, J. G., Ong, N. P., *Thermopower and Nernst effect in graphene in a magnetic field*, Phys. Rev. B 80, 081413, 2009
- [8] Collins, P.G., Zettl. A., *Unique Characteristics of Cold Cathode Carbon nanotube-matrix Field Emitters*, Phys. Rev. B., 55 (15), 9391-9399, (1997)
- [9] Devoret, M. H., Schelkopf, R.J., *Amplifying Quantum Signals with the Single-Electron Transistor*, Nature, 406, 1039-1046, (2000)
- [10] Evans, L. C., *Partial differential equations*, Providence, R.I.: American Mathematical Society, (2010)
- [11] Fiorenza, R., *Hölder and locally Hölder Continuous Functions, and Open Sets of Class C^k and $C^{k,\lambda}$* , Birkhäuser, (2016)
- [12] Iijima, S., *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature, 354, 56-58, (1991)
- [13] Ladyzhenskaya, O.A., *The Boundary Value Problems of Mathematical Physics*, Springer-Verlag New York, (1985)
- [14] Mortici, C., *Orthogonal basis in Sobolev space*, Stud. U. Babes-Bol. Math., 49(2), 89-93, (2004)
- [15] Nicolescu, A.E., Rusali L., Vasile M., *A Non-Invasive Glucose Analysis Model with a Carbon Nanotube Sensor*, ARS Medica Tomitana, 25(4), 189-192, (2019)
- [16] Nicolescu, A.E., Bobe A., *Weak Solution of Longitudinal Waves in Carbon Nanotubes*, Continuum Mech. Therm., 33, 2065-2073, (2021)
- [17] Nicolescu, A.E., Vlase, S., *On a Free Boundary Value Problem for the Anisotropic N -Laplace Operator on an N -Dimensional Ring Domain*, Analele Stiint. ale Univ. Ovidius Constanta Ser. Mat., 28, 195-208, (2020)
- [18] Neto, A. H. C., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., Geim, A. K., *The Electronic Properties of Graphene*, Rev. Mod. Phys, 109, 62, (2009)

- [19] Postma, H.W.Ch., Teepen, T., Yao, Z., Grifoni, M., Dekker, C., *Carbon Nanotube Single-Electron Transistors at Room Temperature*, Science, 293, (5527), 76, (2001)
- [20] Shafraniuk, S., *Peltier cooling in carbon nanotube circuits*, JNMNT, Vol. 6, Iss. 6, 2015
- [21] Shilov, G., *Elementary functional analysis*, Dover Publ., New-York, 1974
- [22] Singh, B.N., Lal, A., Kumar, R., *Nonlinear bending response of laminated composite plates on nonlinear elastic foundation with uncertain system properties*, Eng. Struct., 30, 1101-1112, (2008)
- [23] Timoshenko, S., Gere, J. M., *Theory of elastic stability*, McGraw-Hill New York, (1961)
- [24] Timoshenko, S., Young, D.H., *Vibration Problems in Engineering*, 3rd Edition, Van Nostrand, New York, (1961)
- [25] Wang, G., Xia, C., *A Characterization of the Wulff Shape by an Overdetermined Anisotropic PDE*, Arch. Rational Mech. Anal., 199, 99-115, (2011)
- [26] Wang, G., Xia, C., *An Optimal Anisotropic Poincaré Inequality for Convex Domains*, Pacific J. Math., 258(2), 305-326, (2012)
- [27] Zacarias, E.F., Wang Chong, W., Reibold, M.M.P., *Natural Vibration Frequency of Classic MEMS Structures*, Mechanics of Solids in Brazil, Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, ISBN 978-85-85769-43-7, (2009)
- [28] Yan, K., Zhang, D., *Blood Glucose Prediction by Breath Analysis System with Feature Selection and Model Fusion*, 36th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, (2014)
- [29] Yasuda, M., Takei, K., Arie, T., *Oscillation control of carbon nanotube mechanical resonator by electrostatic interaction induced retardation*, Sci. Rep., 6, 22600, (2016)