О флексоэлектричестве в многодоменном сегнетоэлектрике

А. С. Юрков⁺¹⁾, *П. В. Юдин*^{*}

⁺ Омский научный центр Сибирского отделения РАН (Институт радиофизики и физической электроники), 644024 Омск, Россия

*Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 3 августа 2024 г. После переработки 18 августа 2024 г. Принята к публикации 20 августа 2024 г.

Рассмотрено флексоэлектричество в макроскопически неполяризованном многодоменном сегнетоэлектрике. Показано, что флексоэлектрические модули модифицируются за счет пьезоэффекта в отдельных доменах. Построена теория возмущений, согласно которой эффект возникает в третьем порядке. Оценка эффекта для титаната свинца в изотропном приближении показала, что поправки к флексоэлектрическим модулям f_{1111} и f_{1122} сравнимы по величине с их исходными значениями и зависят лишь от исходной величины f_{1212} . Поправка же к f_{1212} мала, что позволяет использовать теорию возмущений.

DOI: 10.31857/S0370274X24090178, EDN: HPKRAV

Флексоэлектричество – электромеханический эффект высшего порядка, обусловленный связью электрической поляризации с градиентом деформации и/или градиента поляризации с деформацией [1-6]. В последнее время он привлекает значительное внимание ряда исследователей. Это связано с тем, что эффект является масштабно зависимым и растет с уменьшением характерного размера, становясь сравнимым с пьезоэлектричеством в нанометровом масштабе. Поэтому изучение флексоэлектричества имеет существенное значение для развития технологии микро- и наномеханических устройств (MEMS и NEMS соответственно) [7–16]. Наиболее сильно флексоэлектричество проявляется в материалах с большой диэлектрической проницаемостью [17-21], поэтому зачастую оно исследуется в сегнетоэлектриках.

В то же время сегнетоэлектрики могут находиться в парафазе и сегнетофазе. Конечно, в сегнетофазе возникает пьезоэффект, и в монодоменном образце на фоне пьезоэлектричества флексоэффект проявляется менее ярко. Однако обычно в сегнетофазе образец разбивается на домены, причем в среднем по образцу, если не принять специальных мер, инверсионная симметрия по прежнему сохраняется. Так что в среднем по образцу пьезоэффект исчезает. В этом случае флексоэффект в сегнетофазе сегнетоэлектрика так же существенен, как и в парафазе. Заметим, что экспериментальные работы по флексоэлектричеству в сегнетофазе сегнетоэлектриков известны [22–25]. Что же касается теоретических работ, то здесь можно указать работы по влиянию флексоэлектричества на доменные стенки [26–28]. Теоретических же работ, посвященных флексоэлектричеству в образце в целом (в сегнетофазе), авторам данной статьи не известно.

Если рассматривать прямой флексоэффект (поляризация под действием градиента деформации), которым мы здесь только и ограничимся, сразу можно заметить, что градиент деформации, свернутый с флексотензором, входит в термодинамический потенциал точно так же, как и электрическое поле. Поэтому может показаться, что теория прямого флексоэффекта в многодоменном сегнетоэлектрике ничем не отличается от теории поляризации такого сегнетоэлектрика под действием электрического поля. Но внимательное рассмотрение этого вопроса показывает, что это не вполне так. Дело в том, что, хотя в среднем по образцу пьезоэффект отсутствует, локально он все же есть, что приводит к перенормировке флексоэлектрического тензора. Рассмотрение такой перенормировки и составляет содержание данной статьи.

Нужно отметить, что задачи, связанные с доменной структурой, являются, в теоретическом отношении, довольно сложными в силу нелинейности соответствующих уравнений. По-видимому, количественные результаты тут возможны только на основе прямого численного моделирования, подобного, например, тому, что делалось в [29]. Такое прямое моделирование требует крайне больших вычислительных ресурсов. При этом даже в случае линеаризации на

 $^{^{1)}}$ e-mail: fitec@mail.ru

фоне доменной структуры, что в основном нас и интересует, точное аналитическое решение оказывается проблематичным в силу случайного характера доменной структуры. Тем не менее качественный результат, заключающийся в демонстрации указанного выше эффекта, может быть получен и на основании теории возмущений. Именно это и делается ниже.

2. Основные уравнения. Основой нашего рассмотрения является объемная плотность потенциала Ландау Ф, интеграл от которой дает потенциал Ландау. Минимум этого потенциала определяет равновесную конфигурацию. Используя тензорные обозначения Эйнштейна и знак при флексоэлектрическом слагаемом в соответствии с [30], запишем этот потенциал в следующем виде (используем систему СИ):

$$\Phi = \frac{1}{2} g_{ijkl} P_{i,j} P_{k,l} + \frac{1}{2} a_{ij} P_i P_j + \frac{1}{12} b_{ijkl} P_i P_j P_k P_l - \phi P_{i,i} - \frac{\varepsilon_0}{2} \phi_{,i} \phi_{,i} - q_{ijkl} P_i P_j u_{k,l} - f_{ijkl} u_{i,j,l} P_k + \frac{1}{2} c_{ijkl} u_{i,j} u_{k,l} - \sigma_{ij} u_{i,j}.$$
(1)

Здесь P_i – вектор поляризации, u_i – вектор упругого смещения, ϕ – электростатический потенциал, σ_{ii} – симметричный тензор, являющийся формальным источником упругих деформаций, ε_0 – диэлектрическая постоянная, g_{ijkl} , a_{ij} , b_{ijkl} , q_{ijkl} , f_{ijkl} , c_{ijkl} – тензоры материальных постоянных, описывающие дисперсионные, диэлектрические (в двух порядках), электрострикционные, флексоэлектрические и упругие свойства соответственно.

Относительно формулы (1) нужно сделать два замечания. Во-первых, в ней мы пишем несимметризованный градиент смещения $u_{i,j}$, в то время как фактически имеет место зависимость только от симметризованного тензора (тензора деформаций). Так можно делать потому, что материальные тензоры симметричны по соответствующим индексам и несимметричная часть $u_{i,j}$ все равно выпадает. Вовторых, флексоэлектрическое слагаемое мы пишем в форме $f_{ijkl}u_{i,j,l}P_k$, а не в форме $f_{ijkl}(u_{i,j,l}P_k$ $u_{i,j}P_{k,l})/2$. Так можно делать потому, что с точностью до поверхностных членов, возникающих при интегрировании по частям, эти две формы эквивалентны, поверхностными же эффектами мы здесь не интересуемся.

В сегнетофазе материальный тензор a_{ii} не является положительно определенным, что приводит к возникновению спонтанной поляризации $P_i^{(0)}$. С учетом того, что возникает доменная структура, поле ${\cal P}_i^{(0)}$ является пространственно неоднородным, причем мы будем его считать случайным полем, так же,

Письма в ЖЭТФ том 120 вып. 5-6 2024

как поле соответствующих деформаций $u_i^{(0)}$ и поле электростатического потенциала $\phi^{(0)}$.

Нас интересует линеаризованная теория. Поэтому переразложим (1) над $P_i^{(0)}$ с точностью до членов второго порядка по $\tilde{P}_i = P_i - P_i^{(0)}, \ \tilde{u}_i = u_i - u_i^{(0)},$ $ilde{\phi} = \phi - \phi^{(0)}$. При этом линейные члены, кроме $\sigma_{ij} ilde{u}_{i,j},$ исчезают в силу равновесности доменной структуры при $\sigma_{ii} = 0$ (по меньшей мере локальной равновесности), и, опуская несущественную для нас константу, получаем

$$\Phi = \frac{1}{2} g_{ijkl} \tilde{P}_{i,j} \tilde{P}_{k,l} + \frac{1}{2} \left[a_{ij} + b_{ijkl} P_k^{(0)} P_l^{(0)} - 2q_{ijkl} u_{k,l}^{(0)} \right] \tilde{P}_i \tilde{P}_j - \tilde{\phi} \tilde{P}_{i,i} - \frac{\varepsilon_0}{2} \tilde{\phi}_{,i} \tilde{\phi}_{,i} - 2q_{ijkl} P_i^{(0)} \tilde{P}_j \tilde{u}_{k,l} - f_{ijkl} \tilde{u}_{i,j,l} \tilde{P}_k + \frac{1}{2} c_{ijkl} \tilde{u}_{i,j} \tilde{u}_{k,l} - \sigma_{ij} \tilde{u}_{i,j}.$$
 (2)

В результате такого переразложения у нас возникло случайное поле анизотропии $b_{ijkl}P_k^{(0)}P_l^{(0)}$ и случайное же поле пьезотензора $d_{jkl} = -2q_{ijkl}P_i^{(0)}$. Отметим, что тензор $a_{ij} + b_{ijkl}P_k^{(0)}P_l^{(0)}$ теперь уже является положительно определенным, причем в нем удобно выделить средний (по случайной доменной структуре) тензор, записав

$$a_{ij} + b_{ijkl} P_k^{(0)} P_l^{(0)} - 2q_{ijkl} u_{k,l}^{(0)} = \langle \beta_{ij} \rangle + \alpha_{ij}.$$
(3)

Здесь $\langle \beta_{ij} \rangle$ – постоянный тензор, имеющий симметрию исходной парафазы, так что в кубическом случае он сводится к скаляру, $\langle \alpha_{ij} \rangle = 0$.

Далее для упрощения записи мы будем опускать тильды и знак усреднения у $\langle \beta_{ij} \rangle$. В итоге получим

$$\Phi = \frac{1}{2} g_{ijkl} P_{i,j} P_{k,l} + \frac{1}{2} (\beta_{ij} + \alpha_{ij}) P_i P_j - \phi P_{i,i} - \frac{\varepsilon_0}{2} \phi_{,i} \phi_{,i} + d_{ikl} P_i u_{k,l} - f_{ijkl} u_{i,j,l} P_k + \frac{1}{2} c_{ijkl} u_{i,j} u_{k,l} - \sigma_{ij} u_{i,j}.$$
(4)

Варьируя интеграл от такого потенциала по P_i , u_i и ϕ , получаем следующую систему линейных уравнений:

$$(\beta_{ij} + \alpha_{ij})P_j - g_{ijkl}P_{k,l,j} + \phi_{,i} + d_{ikl}u_{k,l} - f_{kjil}u_{k,l,j} = 0,$$

$$(5)$$

$$(c_{klij}u_{i,j} + d_{ikl}P_i + f_{klij}P_{i,j} - \sigma_{kl})_l = 0,$$

$$(6)$$

$$c_{klij}u_{i,j} + d_{ikl}P_i + f_{klij}P_{i,j} - \sigma_{kl})_{,l} = 0, \qquad (6)$$

$$\left(\varepsilon_0\phi_{,i} - P_i\right)_{,i} = 0\,. \tag{7}$$

Хотя полученные уравнения являются линейными, дело усложняется тем, что это стохастические уравнения, так как величины α_{ij} и d_{ikl} являются случайно неоднородными. Поэтому придется воспользоваться теорией возмущений по соответствующим слагаемым в (5)–(7). Также параметром разложения будет флексоэлектрическое слагаемое.

3. Теория возмущений. Получить теорию возмущений проще всего, осуществляя итерации интегральных уравнений, эквивалентных (5)–(7):

$$P_{i}(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\alpha_{jn}(\mathbf{r}')P_{n}(\mathbf{r}') + d_{jkl}(\mathbf{r}')u_{kl}(\mathbf{r}') - f_{knjl}u_{kn,l}(\mathbf{r}')]d^{3}\mathbf{r}', \qquad (8)$$

$$u_{ij}(\mathbf{r}) = \int D_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\sigma_{kl}(\mathbf{r}') - d_{nkl}(\mathbf{r}')P_n(\mathbf{r}') - f_{klnm}P_{n,m}(\mathbf{r}')]d^3\mathbf{r}'.$$
 (9)

Здесь $u_{ij} = (u_{i,j} + u_{j,i})/2$, а функции Грина (пропагаторы) G_{ij} и D_{ijkl} удовлетворяют уравнениям

$$g_{ijkl}G_{kn,j,l}(\mathbf{r}) - \beta_{ij}G_{jn}(\mathbf{r}) - \phi_{n,i}(\mathbf{r}) = \delta_{in}\delta(\mathbf{r}), \quad (10)$$

$$\varepsilon_0 \phi_{n,i,i} = G_{in,i},\tag{11}$$

$$D_{klnm} = \frac{1}{2} \left(\mathcal{D}_{kn,m,l} + \mathcal{D}_{ln,m,k} \right), \qquad (12)$$

$$c_{ijkl}\mathcal{D}_{kn,l,j}(\mathbf{r}) = \delta_{in}\delta(\mathbf{r}).$$
(13)

Эти функции могут быть найдены с помощью преобразования Фурье.

Из уравнений (8) и (9) очевидно следующее. Невозмущенное решение содержит только упругую деформацию:

$$u_{ij}^{(0)}(\mathbf{r}) = \int D_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\sigma_{kl}(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}',\qquad(14)$$

$$P_i^{(0)} = 0. (15)$$

В первом порядке появляется вклад только в поляризацию

$$P_{i}^{(1)}(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [d_{jkl}(\mathbf{r}')u_{kl}^{(0)}(\mathbf{r}') - f_{knjl}u_{kn,l}^{(0)}(\mathbf{r}')] d^{3}\mathbf{r}', \qquad (16)$$

$$u_{ij}^{(1)} = 0. (17)$$

Во втором порядке есть вклад и в поляризацию

$$P_i^{(2)}(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \alpha_{jn}(\mathbf{r}') P_n^{(1)}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}', \quad (18)$$

и в деформацию

$$u_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}) = -\int D_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')[d_{nkl}(\mathbf{r}')P_n^{(1)}(\mathbf{r}') + f_{klnm}P_{n,m}^{(1)}(\mathbf{r}')]d^3\mathbf{r}'.$$
(19)

Вклад в поляризацию третьего порядка равен

$$P_{i}^{(3)}(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\alpha_{jn}(\mathbf{r}')P_{n}^{(2)}(\mathbf{r}') + d_{jkl}(\mathbf{r}')u_{kl}^{(2)}(\mathbf{r}') - f_{knjl}u_{kn,l}^{(2)}(\mathbf{r}')]d^{3}\mathbf{r}'.$$
 (20)

Вклад третьего порядка в деформацию и все более высокие вклады нас интересовать не будут.

Далее надо сделать подстановки и усреднить полученную поляризацию по случайной доменной структуре. При этом надо учесть, что в силу того, что мы предполагаем сохранение инверсионной симметрии в среднем (вероятности доменов с противоположной поляризацией равны), то обратятся в ноль $\langle d_{ikl} \rangle$ и $\langle d_{ikl} \alpha_{nm} \rangle$. Также обратится в ноль $\langle \alpha_{ij} \rangle$, так как его среднюю часть мы выделили в β_{ij} и учли до построения теории возмущений. Тогда получаем

$$P_i^{(1)}(\mathbf{r}) = -\int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') f_{knjl} u_{kn,l}^{(0)}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'.$$
 (21)

Это обычный невозмущенный флексоэлектрический вклад. Во втором порядке усреднение обнуляет вклад в поляризацию:

$$\langle P_i^{(2)} \rangle = 0. \tag{22}$$

Что же касается третьего порядка, то в нем возникает десять слагаемых, пять из которых обращаются в ноль при усреднении. Из оставшихся пяти слагаемых, четыре лишь модифицируют пропагаторы. Они нас здесь не интересуют. Интересующий нас эффект описывается единственным слагаемым третьего порядка

$$P_i^{(3)}(\mathbf{r}) = -\int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') D_{klmn}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') f_{mnpq} \times \times G_{pr,q}(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''') \langle d_{jkl}(\mathbf{r}') d_{rst}(\mathbf{r}''') \rangle u_{st}^{(0)}(\mathbf{r}''') \times \times d^3 \mathbf{r}''' d^3 \mathbf{r}'' d^3 \mathbf{r}'.$$
(23)

4. Дополнительный вклад в флексоэлектрические модули. Последнюю формулу предыдущего раздела можно переписать в виде отклика за счет нелокального пьезоэлектричества (здесь мы уже опускаем обозначение порядка теории возмущений):

$$P_{i}(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Delta_{jkl}(\mathbf{r}'') u_{kl}^{(0)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') d^{3}\mathbf{r}'' d^{3}\mathbf{r}',$$
(24)

где

$$\Delta_{jkl}(\mathbf{r}) = \int \langle d_{rkl}(0)d_{jst}(\mathbf{r})\rangle D_{stmn}(\mathbf{r}') \times \\ \times f_{mnpq}G_{pr,q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'.$$
(25)

Письма в ЖЭТФ том 120 вып. 5-6 2024

Здесь учтено, что $\langle d_{jkl}(\mathbf{r}')d_{rst}(\mathbf{r}'')\rangle$ зависит только от разности своих пространственных аргументов, так как в среднем трансляционная инвариантность со-храняется.

Нелокальный пьезоэффект, описываемый формулой (24), для достаточно медленно меняющихся упругих полей может быть стандартным образом представлен как флексоэффект. Для этого надо лишь разложить $u_{kl}^{(0)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')$ вблизи \mathbf{r}' с точностью до линейных членов. Тогда получится следующее:

$$P_{i}(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{kl}^{(0)}(\mathbf{r}') d^{3}\mathbf{r}' \int \Delta_{jkl}(\mathbf{r}'') d^{3}\mathbf{r}'' - \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_{kl,m}^{(0)}(\mathbf{r}') d^{3}\mathbf{r}' \int r_{m}'' \Delta_{jkl}(\mathbf{r}'') d^{3}\mathbf{r}''.$$
(26)

Первое слагаемое обращается в ноль по симметрийным причинам. Что же касается второго слагаемого, то сравнив его с (21), мы убеждаемся, что получилась поправка к флексоэлектрическому тензору, определяемая следующими формулами:

$$\delta f_{klij} = \int r_j \Delta_{ikl}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = L_{klijmnpq} f_{mnpq}, \qquad (27)$$

$$L_{klijmnpq} = \int \langle d_{rkl}(0) d_{ist}(\mathbf{r}) \rangle D_{stmn}(\mathbf{r}') \times \\ \times G_{pr,q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') r_j d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{r}.$$
(28)

Практически удобнее пользоваться фурьепредставлением последней формулы:

$$L_{klijmnpq} = -4q_{urkl}q_{vist} \int \left\langle P_u^{(0)} P_v^{(0)} \right\rangle (-\mathbf{k}) \times \frac{\partial}{\partial k_j} \left[D_{stmn}(\mathbf{k}) k_q G_{pr}(\mathbf{k}) \right] \frac{d^3 \mathbf{k}}{8\pi^3}.$$
 (29)

Здесь мы дополнительно выразили коррелятор поля пьезомодулей через коррелятор поля спонтанной поляризации.

5. Численная оценка. Сделаем оценку порядка величины δf_{klij} для типичного сегнетоэлектрика кубической (в парафазе) структуры PbTiO₃. Поскольку мы оцениваем лишь порядок, то пренебрежем кубической анизотропией и примем для фурьеобраза коррелятора спонтанной поляризации крайне простую аппроксимацию:

$$\langle P_i P_j \rangle(\mathbf{k}) = \begin{cases} 6\pi^2 \delta_{ij} \Lambda^{-3} \left(P^{(0)} \right)^2 & k < \Lambda, \\ 0 & k > \Lambda. \end{cases}$$
(30)

Здесь Λ — параметр обрезания, имеющий порядок обратного размера доменов.

При такой аппроксимации можно, во-первых, записать основную формулу (29) в виде интеграла по объему шара. Во-вторых, используя тот факт, что в этом случае под интегралом стоит лишь частная производная, интеграл по объему шара можно свести к интегралу по его поверхности:

$$L_{klijmnpq} = -q_{urkl}q_{uist}24\pi^2 \left(P^{(0)}\right)^2 \Lambda^{-3} \times \\ \times \oint_{k=\Lambda} \frac{k_j}{k} D_{stmn}(\mathbf{k}) k_q G_{pr}(\mathbf{k}) \frac{dS}{8\pi^3}.$$
(31)

Здесь использовано представление единичного вектора внешней нормали в виде $n_j = k_j/k$.

Практически всегда корреляционная длина флуктуаций много меньше, чем характерный размер доменов. А это означает, что при $k < \Lambda$, с учетом того, что в сегнетоэлектрике относительная диэлектрическая проницаемость ε много больше единицы, пропагатор $G_{ij}(\mathbf{k})$ дается следующей формулой:

$$G_{ij} = \varepsilon \varepsilon_0 \left(k_i k_j / k^2 - \delta_{ij} \right).$$
(32)

Существенно, что такой пропагатор масштабно инвариантен (не меняется при изменении масштаба вектора k_i). Упругий пропагатор масштабно инвариантен изначально. Поэтому в интеграле (31) можно сделать масштабное преобразование **k**, и свести интегрирование к интегрированию по *единичной* сфере, причем параметр Λ^{-3} при этом сокращается:

$$L_{klijmnpq} = -q_{urkl}q_{uist}24\pi^2 \left(P^{(0)}\right)^2 \times \\ \times \oint_{k=1} k_j D_{stmn}(\mathbf{k})k_q G_{pr}(\mathbf{k}) \frac{dS}{8\pi^3}.$$
(33)

Учитывая явный вид пропагаторов, ясно, что в результате таких преобразований интегрирование свелось к интегралам вида

$$\oint_{k=1} k_i \dots k_n dS. \tag{34}$$

Такие интегралы удобно вычислять, дифференцируя по компонентам вектора **r** производящую функцию

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{k=1} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} dS_{\mathbf{k}} = \frac{\sin r}{r}$$
(35)

и беря после дифференцирования предел $\mathbf{r} \to 0$. При этом, чтобы избежать необходимости раскрывать неопределенности, синус в F удобно представить в виде разложения в ряд Тейлора.

Письма в ЖЭТФ том 120 вып. 5-6 2024

В результате, после несколько громоздких, но принципиально простых выкладок, в предположении изотропности тензора f_{ijkl} , получается простая формула для поправок к этому тензору:

$$\delta f_{klij} = -\left(P^{(0)}\right)^2 \frac{2\varepsilon\varepsilon_0 f_{1212}}{5c_{1212}} \times \left(2q_{ujkl}q_{uiss} - 3q_{uskl}q_{uisj} - 3q_{utkl}q_{uijt}\right).$$
(36)

Подставляя численные параметры (все в СИ): $\varepsilon = 400$ [31], $c_{1111} = 17.46 \cdot 10^{10}$, $c_{1212} = 11.1 \cdot 10^{10}$, $q_{1111} = 11.41 \cdot 10^9$, $q_{1122} = 0.46 \cdot 10^9$, $q_{1212} = 1.87 \cdot 10^9$, $P_0 = 0.63$ [32], получаем следующее:

$$\delta f_{1111} = 2.6 f_{1212},$$

$$\delta f_{1122} = 0.8 f_{1212},$$

$$\delta f_{1212} = -0.1 f_{1212}.$$

(37)

В поправках изотропности тензора уже нет, что связано с тем, что тензор электрострикции взят с реальной кубической симметрией.

Обращают на себя внимание два факта. Первый – все выразилось только через компоненту f_{1212} . Это довольно естественное следствие чисто поперечной структуры пропагатора G и изотропности затравочного тензора f_{ijkl} . Второй примечательный факт заключается в том, что поправка к f_{1212} мала и это благоприятно с точки зрения применимости теории возмущений. В это же время поправки к f_{1111} и f_{1122} малыми не являются, что благоприятно с точки зрения возможности наблюдения рассматриваемого эффекта и его важности.

6. Заключение. Мы построили континуальную теорию, описывающую влияние случайной доменной структуры в сегнетоэлектрике на его макроскопические электромеханические свойства. Исходная система уравнений содержит электрострикцию, флексоэлектрический эффект и корреляционные члены. Пьезоэффект в данной модели описывается сверткой тензора электрострикции с вектором поляризации. При усреднении по доменной структуре пьезоэффект зануляется, а диэлектрическая проницаемость описывается изотропным тензором, для оценки которого можно воспользоваться данными для поликристалла [31]. Рассматривая все случайно-неоднородные величины как возмущение классических уравнений для сегнетоэлектрика, мы получили соответствующую теорию возмущений. В рамках такой теории возмущений появляется перенормировка флексоэлектрического тензора, добавка к которому связана с локальным пьезоэффектом. Она выражается через функции Грина (пропагаторы) поляризационного и упругого поля, исходные флексоэлектриче-

ские модули, квадратичную форму компонент тензора электрострикции и пространственный корреллятор вектора поляризации. Фурье-образ последнего мы аппроксимировали крайне простой характеристической функцией однородного шара, что позволило осуществить численную оценку эффекта для типичного сегнетоэлектрика титаната свинца. Получающиеся поправки к флексоэлектрическим модулям f_{1111} и f_{1122} по порядку величины сравнимы с исходными модулями и не зависят ни от размера доменов, ни от корреляционной длины, ни от размеров образца. В связи с тем, что в случае достаточно крупных доменов фурье-образ поляризационного пропагатора можно взять в форме поперечного проектора, в ответ вошла лишь компонента f_{1212} флексотензора, поправка к которой оказалась мала. Тем самым использование теории возмущений для данного случая, по меньшей мере, не противоречиво, несмотря на общую большую величину эффекта в других компонентах. Сформулированная нами в общем виде теория может применяться для решения широкого класса задач, связанных с электромеханическим откликом в случайно поляризованном образце.

Финансирование работы. Работа А.С. Юркова финансировалась в соответствии с государственным заданием Омского научного центра Сибирского отделения Российской академии наук (номер госрегистрации проекта 122011200349-3). Работа П.В. Юдина финансировалась в рамках государственного задания Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук (номер госрегистрации проекта 122022800489-6).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

- V. Mashkevich and K. Tolpygo, Soviet Physics JETP 5(3), 435 (1957).
- 2. K. Tolpygo, Soviet Physics Solid State 4, 1297 (1963).
- S. M. Kogan, Soviet Physics Solid State 5(10), 2069 (1964).
- 4. P. Harris, J. Appl. Phys. **36**(3), 739 (1965).
- 5. R. D. Mindlin, International Journal of Solids and Structures 4(6), 637 (1968).
- A. Askar, P. Lee, and A. Cakmak, Phys. Rev. B 1(8), 3525 (1970).
- M. Majdoub, P. Sharma, and T. Çağin, Phys. Rev. B 78(12), 121407 (2008).
- 8. X. Wang, Nano Energy 1(1), 13 (2012).
- X. Jiang, W. Huang, and S. Zhang, Nano Energy 2(6), 1079 (2013).

- Q. Deng, M. Kammoun, A. Erturk, and P. Sharma, International Journal of Solids and Structures 51(18), 3218 (2014).
- J. K. Han, S. Y. C. Do Hyun Jeon, S. W. Kang, S. A. Yang, S. D. Bu, S. Myung, J. Lim, M. Choi, M. Lee, and M. K. Lee, Sci. Rep. 6, 29562 (2016).
- H. Tzou and X. Zhang, Journal of Vibration and Acoustics 138(3), 031006 (2016).
- A.G. Moura and A. Erturk, J. Appl. Phys. **121**(6), 064110 (2017).
- X. Liang, S. Hu, and S. Shen, Smart Mater. Struct. 26(3), 035050 (2017).
- X. Liang, R. Zhang, S. Hu, and S. Shen, J. Intell. Mater. Syst. Struct. 28, 2064 (2017).
- Z. Yan, Physica E: Lowdimensional Systems and Nanostructures 88, 125 (2017).
- P. Zubko, G. Catalan, A. Buckley, P. Welche, and J. Scott, Phys. Rev. Lett. 99(16), 167601 (2007).
- J. Hong, G. Catalan, J. Scott, and E. Artacho, J. Phys. Condens. Matter **22**(11), 112201 (2010).
- V. Zalesskii and E. Rumyantseva, Phys. Solid State 56, 1352 (2014).
- E. D. Obozova, P. P. Syrnikov, and V. G. Zalesskii, Phys. Solid State 60(5) (2018).
- V. Zalesskii, E. Obozova, and A. Polushina, Instruments and Experimental Techniques 62, 830 (2019).
- E. Bursian and O. Zaikovskii, Soviet Physics Solid State 10(5), 1121 (1968).
- E. Bursian, O. Zaikovskii, and K. Makarov, Seriya Fizicheskaya 33(7), 1098 (1969).

- E. Bursian and N. Trunov, Soviet Physics Solid State 10, 760 (1974).
- E. Rumyantseva and V.G. Zalesskii, Phys. Solid State 58, 689 (2016).
- P.V. Yudin, A.K. Tagantsev, E.A. Eliseev, A.N. Morozovska, and N. Setter, Phys. Rev. B 86(13), 134102 (2012).
- 27. E.A. Eliseev, P.V. Yudin, S.V. Kalinin, N. Setter, A.K. Tagantsev, and A.N. Morozovska, Phys. Rev. B 87(5), 054111 (2013).
- R. Ahluwalia, A.K. Tagantsev, P. Yudin, N. Setter, N. Ng, and D. J. Srolovitz, Phys. Rev. B 89(17), 174105 (2014).
- R. Ahluwalia, P. Yudin, and A. Yurkov, Physica Status Solidi (b) 255(3), 1700312 (2018).
- P. Yudin and A. Tagantsev, Basic theoretical description of flexoelectricity in solids, in Flexoelectricity in solids: from theory to applications, World Scientific, Singapore (2017), p. 1.
- M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and applications of ferroelectrics and related materials*, Oxford university press, Oxford (2001).
- 32. P. Mokrý, T. Sluka, and A.K. Tagantsev, Nonlinear extrinsic permittivity and piezoelectricity in lead titanate due to 90° domain walls pinning, in 2013 Joint IEEE International Symposium on Applications of Ferroelectric and Workshop on Piezoresponse Force Microscopy (ISAF/PFM), IEEE, Piscatway (2013), p. 222.