

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 из-

вестны [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 Φ , 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):

$$\begin{aligned} \Phi = & \frac{1}{2}g_{ijkl}P_{i,j}P_{k,l} + \frac{1}{2}a_{ij}P_iP_j + \frac{1}{12}b_{ijkl}P_iP_jP_kP_l - \\ & - \phi P_{i,i} - \frac{\varepsilon_0}{2}\phi_i\phi_{,i} - q_{ijkl}P_iP_ju_{k,l} - f_{ijkl}u_{i,j,l}P_k + \\ & + \frac{1}{2}c_{ijkl}u_{i,j}u_{k,l} - \sigma_{ij}u_{i,j}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь P_i – вектор поляризации, u_i – вектор упругого смещения, ϕ – электростатический потенциал, σ_{ij} – 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. Во-вторых, флексоэлектрическое слагаемое мы пишем в форме $f_{ijkl}u_{i,j,l}P_k$, а не в форме $f_{ijkl}(u_{i,j,l}P_k - u_{i,j,l}P_{k,l})/2$. 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_{ij} не является положительно определенным, что приводит к возникновению спонтанной поляризации $P_i^{(0)}$. С учетом того, что возникает доменная структура, поле $P_i^{(0)}$ является пространственно неоднородным, причем мы будем его считать случайным полем, так же,

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 $\tilde{P}_i = P_i - P_i^{(0)}$, $\tilde{u}_i = u_i - u_i^{(0)}$, $\tilde{\phi} = \phi - \phi^{(0)}$. При этом линейные члены, кроме $\sigma_{ij}\tilde{u}_{i,j}$, исчезают в силу равновесности доменной структуры при $\sigma_{ij} = 0$ (по меньшей мере локальной равновесности), и, опуская несущественную для нас константу, получаем

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

В результате такого переразложения у нас возникло случайное поле анизотропии $b_{ijkl}P_k^{(0)}P_l^{(0)}$ и случайное же поле пьезотензора $d_{ijkl} = -2q_{ijkl}P_i^{(0)}$. 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

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

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

$$\begin{aligned} \Phi = & \frac{1}{2}g_{ijkl}P_{i,j}P_{k,l} + \frac{1}{2}(\beta_{ij} + \alpha_{ij})P_iP_j - \phi P_{i,i} - \\ & - \frac{\varepsilon_0}{2}\phi_i\phi_{,i} + d_{ikl}P_iu_{k,l} - f_{ijkl}u_{i,j,l}P_k + \\ & + \frac{1}{2}c_{ijkl}u_{i,j}u_{k,l} - \sigma_{ij}u_{i,j}. \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$(\beta_{ij} + \alpha_{ij})P_j - g_{ijkl}P_{k,l,j} + \phi_{,i} + d_{ikl}u_{k,l} - f_{kjil}u_{k,l,j} = 0, \quad (5)$$

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

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

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):

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

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

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

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

$$\varepsilon_0 \phi_{n,i,i} = G_{in,i}, \quad (11)$$

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

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

Эти функции могут быть найдены с помощью преобразования Фурье.

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

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

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

В первом порядке появляется вклад только в поляризацию

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

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

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

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

Вклад в поляризацию третьего порядка равен

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

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

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

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

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

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

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

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):

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

где

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

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 сохраняется.

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:

$$P_i(\mathbf{r}) = \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')u_{kl}^{(0)}(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' \int \Delta_{jkl}(\mathbf{r}'')d^3\mathbf{r}'' - \int G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')u_{kl,m}^{(0)}(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}' \int r_m'' \Delta_{jkl}(\mathbf{r}'')d^3\mathbf{r}'' \quad (26)$$

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

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

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

Практически удобнее пользоваться фурье-представлением последней формулы:

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

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 PbTiO_3 . Поскольку мы оцениваем лишь порядок, то пренебрежем кубической анизотропией и примем для фурье-образа коррелятора спонтанной поляризации крайне простую аппроксимацию:

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

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:

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

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:

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

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 $\mathbf{k}$, и свести интегрирование к интегрированию по единичной сфере, причем параметр Λ^{-3} при этом сокращается:

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

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

$$\oint_{k=1} k_i \dots k_n dS. \quad (34)$$

Такие интегралы удобно вычислять, дифференцируя по компонентам вектора $\mathbf{r}$ производящую функцию

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

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

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

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

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:

$$\begin{aligned} \delta f_{1111} &= 2.6 f_{1212}, \\ \delta f_{1122} &= 0.8 f_{1212}, \\ \delta f_{1212} &= -0.1 f_{1212}. \end{aligned} \quad (37)$$

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 коррелятор 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.

1. V. Mashkevich and K. Tolpygo, Soviet Physics – JETP **5**(3), 435 (1957).
2. K. Tolpygo, Soviet Physics – Solid State **4**, 1297 (1963).
3. 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).
6. A. Askar, P. Lee, and A. Cakmak, Phys. Rev. B **1**(8), 3525 (1970).
7. M. Majdoub, P. Sharma, and T. Çağın, Phys. Rev. B **78**(12), 121407 (2008).
8. X. Wang, Nano Energy **1**(1), 13 (2012).
9. X. Jiang, W. Huang, and S. Zhang, Nano Energy **2**(6), 1079 (2013).

10. Q. Deng, M. Kammoun, A. Erturk, and P. Sharma, *International Journal of Solids and Structures* **51**(18), 3218 (2014).
11. 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).
12. H. Tzou and X. Zhang, *Journal of Vibration and Acoustics* **138**(3), 031006 (2016).
13. A.G. Moura and A. Erturk, *J. Appl. Phys.* **121**(6), 064110 (2017).
14. X. Liang, S. Hu, and S. Shen, *Smart Mater. Struct.* **26**(3), 035050 (2017).
15. X. Liang, R. Zhang, S. Hu, and S. Shen, *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* **28**, 2064 (2017).
16. Z. Yan, *Physica E: Lowdimensional Systems and Nanostructures* **88**, 125 (2017).
17. P. Zubko, G. Catalan, A. Buckley, P. Welche, and J. Scott, *Phys. Rev. Lett.* **99**(16), 167601 (2007).
18. J. Hong, G. Catalan, J. Scott, and E. Artacho, *J. Phys. Condens. Matter* **22**(11), 112201 (2010).
19. V. Zaleskii and E. Rumyantseva, *Phys. Solid State* **56**, 1352 (2014).
20. E. D. Obozova, P. P. Syrnikov, and V. G. Zaleskii, *Phys. Solid State* **60**(5) (2018).
21. V. Zaleskii, E. Obozova, and A. Polushina, *Instruments and Experimental Techniques* **62**, 830 (2019).
22. E. Bursian and O. Zaikovskii, *Soviet Physics – Solid State* **10**(5), 1121 (1968).
23. E. Bursian, O. Zaikovskii, and K. Makarov, *Seriya Fizicheskaya* **33**(7), 1098 (1969).
24. E. Bursian and N. Trunov, *Soviet Physics – Solid State* **10**, 760 (1974).
25. E. Rumyantseva and V.G. Zaleskii, *Phys. Solid State* **58**, 689 (2016).
26. 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).
28. R. Ahluwalia, A.K. Tagantsev, P. Yudin, N. Setter, N. Ng, and D.J. Srolovitz, *Phys. Rev. B* **89**(17), 174105 (2014).
29. R. Ahluwalia, P. Yudin, and A. Yurkov, *Physica Status Solidi (b)* **255**(3), 1700312 (2018).
30. 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.
31. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and applications of ferroelectrics and related materials*, Oxford university press, Oxford (2001).
32. P. Mokry, 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, Piscataway (2013), p. 222.