Письма в ЖЭТФ, том 94, вып. 6, с. 490 – 493

Упругие граничные условия при наличии флексоэлектрического эффекта

А. С. Юрков[1)]

644076 Омск, Россия

Поступила в редакцию 3 августа 2011 г.

Получены граничные условия к уравнениям теории упругости, модифицированной наличием флексоэлектрического эффекта. Показано, что в общем случае они не совпадают с граничными условиями стандартной теории упругости. В частности, на поверхности возникают напряжения, пропорциональные произведению поляризации на кривизну поверхности. За счет граничных условий однородная поляризация деформирует кристалл, хотя в объемные уравнения равновесия она не входит.

Флексоэлектрический эффект (далее для краткости флексоэффект) заключается в линейном отклике электрической поляризации на градиент механической деформации. Наиболее естественный способ получения градиента деформации заключается в изгибе образца. Отсюда и происходит название эффекта. Возможен также и обратный эффект.

Несмотря на то что этот эффект известен очень давно (см. обзор [1] и ссылки в нем), в последние годы возникло много работ по его детальному изучению, как экспериментальному [2–4], так и теоретическому [5, 6]. Это связано в первую очередь с тем, что были предложены наноструктурированные метаматериалы [7–9], обладающие пьезоэлектрическими свойствами благодаря флексоэффекту.

В связи с этим становится актуальной задача теоретического описания, в том числе в рамках теории сплошной среды, свойств упругих объектов (в принципе не обязательно наноразмерных) с учетом флексоэффекта. Такое описание включает в себя две задачи: нахождение распределения электрической поляризации по образцу при заданных деформациях и нахождение упругих деформаций при заданном распределении поляризации. Конечно же, обе эти задачи в общем случае должны решаться совместно, но такое совместное решение невозможно без достаточно полного решения каждой из них. В настоящей работе мы будем иметь дело только со второй задачей: нахождением деформаций при заданной поляризации.

Во всех работах, посвященных такой задаче и известных автору данной статьи, используются обычные упругие граничные условия, $\sigma_{ij}n_j = 0$, на свободной поверхности тела. В то же время, так как в данном случае мы имеем не обычную, а модифицированную флексоэффектом теорию упругости, использование обычных граничных условий вызывает сомнение. И действительно, как показало проведенное исследование, при наличии флексоэффекта в общем случае упругие граничные условия требуют модификации.

Если поляризация не равна нулю на границе кристалла, то, как будет ясно из дальнейшего, часть свободной энергии, зависящая от упругих смещений u_i, должна включать как минимум следующие слагаемые:

$$F_1 = \int \frac{1}{2} c_{ijkl} u_{i,j} u_{k,l} dV, \tag{1}$$

$$F_2 = \int \frac{1}{2} f_{ijkl} (P_{i,j} u_{k,l} - P_i u_{k,l,j}) dV, \tag{2}$$

$$F_3 = \int \frac{1}{2} v_{ijklnm} u_{i,j,n} u_{k,l,m} dV, \tag{3}$$

где $(\ldots)_{,i} = \partial(\ldots)/\partial x_i$, подразумевается суммирование по повторяющимся индексам и мы пишем несимметризованные тензоры дисторсии вместо симметризованных тензоров деформации. Последнее вполне можно делать, так как они все равно сворачиваются с симметричными по соответствующим индексам материальными тензорами.

С принципиальной точки зрения равновесные упругие смещения определяются минимумом $F = F_1 + F_2 + F_3$, который может быть найден варьированием по u_i и приравниванием нулю получающейся вариации δF, состоящей из трех слагаемых:

$$\delta F_1 = \oint c_{ijkl} u_{i,j} \delta u_k n_l dS - \int c_{ijkl} u_{i,j,l} \delta u_k dV\,, \tag{4}$$

$$\delta F_2 = \oint f_{ijkl} P_{i,j} \delta u_k n_l dS - \frac{1}{2} \oint f_{ijkl} P_i \delta u_{k,l} n_j dS - \int f_{ijkl} P_{i,j,l} \delta u_k dV, \tag{5}$$

[1)] e-mail: fitec@omskcity.com

$$\delta F_3 = \oint v_{ijklnm} u_{i,j,n} \delta u_{k,l} n_m dS - \\ - \oint v_{ijklnm} u_{i,j,n,m} \delta u_k n_l dS + \\ + \int v_{ijklnm} u_{i,j,n,m,l} \delta u_k dV, \quad (6)$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали к поверхности (наружу от объема).

При вариациях, исчезающих на границах, мы получаем дифференциальные уравнения в объеме $\sigma_{kl,l} = 0$, где

$$\sigma_{kl} = c_{klij} u_{i,j} + f_{klij} P_{i,j} - v_{ijklnm} u_{i,j,n,m}. \quad (7)$$

Что же касается граничных условий, то они должны выводиться из условия зануления той части δF, которая представлена выше поверхностными интегралами. Таким образом, эти граничные условия содержатся в уравнении

$$\oint \sigma_{km} \delta u_k n_m dS + \oint \theta_{klm} \delta u_{k,l} n_m dS = 0, \quad (8)$$

где

$$\theta_{klm} = v_{ijklnm} u_{i,j,n} - \frac{1}{2} f_{imkl} P_i. \quad (9)$$

Если поляризация на поверхности образца равна нулю (в принципе достаточно зануления лишь $f_{imkl} P_i n_m$), то можно, не вступая в противоречие с существованием минимума F, положить $v_{ijlknm} = 0$. Тогда в (8) остается только первый интеграл, который, как легко убедиться, дает обычные граничные условия стандартной теории упругости, $\sigma_{km} n_m = 0$. Однако ситуация становится иной, если поляризация на поверхности не равна нулю. Существенно, что при этом мы не можем, вообще говоря, считать независимыми δu_k и $\delta u_{k,l}$. Поэтому второй интеграл в (8) должен быть преобразован. Это будет сделано далее. Однако предварительно нужно кратко обсудить необходимый для такого преобразования математический аппарат.

Замкнутая поверхность упругого тела не может быть всюду плоской. Поэтому на такой поверхности возникает двумерная неевклидова геометрия. Если бы мы интересовались исключительно двумерными касательными тензорами на такой поверхности, то было бы вполне достаточно общеизвестной римановой геометрии. Однако в формулу (8) входят значения не двумерных, а трехмерных тензорных объектов на поверхности. Поэтому стандартный аппарат римановой геометрии применительно к нашей задаче требует некоторой модификации, которая оказывается довольно естественной, если воспользоваться реперным формализмом. Ниже мы кратко опишем требуемые модификации, причем интересуясь только частным вопросом преобразования второго интеграла в (8), мы не будем вдаваться в подробности.

Пусть на поверхности имеется произвольная неортогональная координатная сетка. Обозначим соответствующие координаты через $x^{(a)}$, где верхний индекс в скобках пробегает два значения: 1 и 2. Чтобы отличать объемные декартовы координаты от криволинейных поверхностных, индексы последних мы заключаем в скобки. Введем трехмерные реперные векторы $e_{i(a)}$, касательные к координатной сетке. Подчеркнем, что, в отличие от ситуации римановой геометрии, размерность реперных векторов у нас не совпадает с размерностью реперного пространства. Модули этих векторов (по евклидовой метрике трехмерного пространства) нормированы тем условием, что при перемещениях вдоль поверхности $dr_i = e_{i(a)} dx^{(a)}$. Отсюда следует, что $dr^2 = e_{i(a)} e_{i(b)} dx^{(a)} dx^{(b)}$, так что $e_{i(a)} e_{i(b)}$ – метрический тензор в поверхностной системе координат. Реперные векторы в общем случае не ортогональны. Поэтому вводим еще и взаимный базис $e_i^{(a)}$. Трехмерные индексы считаем относящимися к глобальной декартовой системе координат и не подразделяем их на верхние и нижние.

Ясно, что $e_i^{(a)} = g^{(a)(b)} e_{i(b)}$, причем эта пара тоже касательна к поверхности (но уже не к координатной сетке). Матрица $g^{(a)(b)}$ определяется естественным условием: $e_i^{(a)} e_{i(b)} = \delta_{(b)}^{(a)}$. Введем также матрицу $g_{(a)(b)}$, обратную $g^{(a)(b)}$. С помощью этих двух матриц можно обычным образом поднимать и опускать реперные индексы. Из $e_i^{(a)} = g^{(a)(b)} e_{i(b)}$ следует $e_{i(c)} e_i^{(a)} = e_{i(c)} g^{(a)(b)} e_{i(b)}$ и далее $\delta_{(c)}^{(a)} = g^{(a)(b)} e_{i(b)} e_{i(c)}$. Поэтому $g_{(a)(b)} = e_{i(a)} e_{i(b)}$, так что $g_{(a)(b)}$ – метрический тензор на поверхности. Поднимая индексы, также получаем $g^{(a)(b)} = e_i^{(a)} e_i^{(b)}$.

Любой касательный к поверхности вектор τ_i может быть разложен по паре реперных векторов, например с верхними индексами, причем коэффициенты – это скалярные произведения с взаимным базисом. Таким образом, $\tau_i = e_i^{(a)} e_{j(a)} \tau_j$. Любой же нормальный к поверхности вектор, свернутый по трехмерным индексам с любым реперным вектором, дает нуль. Поэтому $e_i^{(a)} e_{j(a)}$ – это проектор на касательную плоскость. Он может быть стандартным образом представлен как разность единичного оператора и проектора на нормаль: $e_i^{(a)} e_{j(a)} = \delta_{ij} - n_i n_j$. Обратим внимание на то, что в обычной римановой геометрии в записанной формуле не было бы последнего слагаемого.

Вектор элементарной площадки выражается через реперные векторы следующим образом: $n_i dS = \varepsilon_{ijk} dr_j^{(1)} dr_k^{(2)}$. Делая очевидные подстановки, получаем $n_i dS = \varepsilon_{ijk} e_{j(1)} e_{k(2)} d^2x$, где через d^2x мы обозначили $dx^{(1)} dx^{(2)}$. Сама же площадка получается взятием скалярного квадрата этого вектора и извлечением корня. В итоге получается $dS = \sqrt{g} d^2x$, $n_i = g^{-1/2} \varepsilon_{ijk} e_{j(1)} e_{k(2)}$, где $g = \det g_{(a)(b)}$.

Нам также понадобится дифференцирование трехмерных объектов по криволинейным координатам на поверхности. Очевидно, что дифференциал некоторого трехмерного тензорного объекта $A_{\ldots}$ при изменении поверхностных координат на $dx^{(a)}$ равен $dA_{\ldots} = A_{\ldots,i} dr_i$. Тогда, используя приведенное выше выражение для dr_i, мы можем записать $dA_{\ldots} = A_{\ldots,i} e_{i(a)} dx^{(a)}$. Отсюда ясно, что частные производные по поверхностным координатам определяются следующим образом: $A_{\ldots,(a)} = A_{\ldots,i} e_{i(a)}$. Заметим, что для тензоров, свернутых с реперными векторами и/или нормалью, выражение было бы сложнее: появились бы производные от реперных векторов и/или от нормали. В такой ситуации довольно естественно вводить ковариантные производные. Однако для наших весьма узких целей мы обойдемся более элементарными средствами, вычисляя такие свертки явно.

Теперь можно переходить к выводу граничных условий. Для этого надо преобразовать второй интеграл в (8). Вставляя дополнительно символ Кронекера δ_{jl} и заменяя его в соответствии со сказанным выше на $e_{j(a)} e_l^{(a)} + n_l n_j$, перепишем его как

$$\oint \theta_{klm} \delta u_{k,l} n_m dS = \oint \theta_{klm} \delta u_{k,j} n_j n_l n_m \sqrt{g} d^2x + \\ + \oint \theta_{klm} \delta u_{k,j} e_{j(a)} e_l^{(a)} n_m \sqrt{g} d^2x. \qquad (10)$$

Первое слагаемое в правой части преобразовано быть не может. В нем стоит производная по нормали к поверхности, которая не имеет никакого отношения к интегрированию по поверхности. Второе же слагаемое содержит выражение $u_{k,j} e_{j(a)}$, которое является, как мы видели выше, производной по $x^{(a)}$. Именно этот факт позволяет провести интегрирование по частям. Выполняя такое интегрирование и снова делая простые манипуляции с формулой $\delta_{jl} = e_{j(a)} e_l^{(a)} + n_l n_j$, получаем

$$\oint \theta_{klm} \delta u_{k,l} n_m dS = \oint \theta_{klm} \delta u_{k,j} n_j n_l n_m dS + \\ + \oint \theta_{klm,j} n_j n_l n_m \delta u_k dS - \oint \theta_{klm,l} n_m \delta u_k dS - \\ - \oint \theta_{klm} \gamma_{lm} \delta u_k dS, \qquad (11)$$

где

$$\gamma_{lm} = (e_l^{(a)} n_m \sqrt{g})_{,(a)} g^{-1/2}. \qquad (12)$$

Теперь возвращаемся к уравнению (8). Если использовать (11), то (8) преобразуется в условие равенства нулю суммы пяти интегралов: один интеграл содержит производную от δu_k по нормали к поверхности (этот член соответствует первому интегралу в правой части (11)), четыре интеграла содержат саму вариацию δu_k. Производную по нормали $\delta u_{k,j} n_j$ нужно считать независимой величиной. Действительно, задав δu_k на поверхности, мы можем как угодно продолжать эту функцию по нормали к поверхности. Но если эта производная независима, то мы тут же получаем первое граничное условие:

$$\theta_{klm} n_l n_m|_S = 0. \qquad (13)$$

Зануление же суммы оставшихся интегралов дает второе граничное условие:

$$\sigma_{km} n_m + \theta_{klm,j} n_j n_l n_m - \theta_{klm,l} n_m - \theta_{klm} \gamma_{lm}|_S = 0. \qquad (14)$$

Эти формулы являются граничными условиями к уравнениям упругого равновесия в объеме с учетом флексоэлектрического эффекта в общей форме.

Необходимо заметить, что так как по всей поверхности $\theta_{klm} n_l n_m = 0$, будет равна нулю также и производная вдоль поверхности от этого выражения. В результате можно получить тождества, позволяющие в конкретных случаях придать условию (14) иную форму. Это может оказаться удобным в конкретных вычислениях. Вместе с тем форма (14) имеет то общетеоретическое преимущество, что в ней явно видна ковариантность по отношению к поворотам глобальной трехмерной системы координат. Кроме того, при такой форме все, что относится к геометрии поверхности и только к ней, объединяется в единственном трехмерном тензоре γ_{lm}. Заметим, что γ_{lm} – инвариант относительно смены координатной сетки на поверхности, а больше характеристики этой сетки никуда не входят. Поэтому после того, как вычислен тензор γ_{lm}, далее о координатной сетке на поверхности можно забыть.

В принципиальном отношении формулы, записанные выше, решают интересующую нас проблему. Но для обсуждения физической стороны вопроса желательно эти формулы максимально упростить. Пусть $z = \zeta(x, y)$ – уравнение поверхности. Координатную же сетку на поверхности образуем путем проецирования вдоль оси OZ декартовой координатной сетки на плоскости OXY. При этом $x^{(1)}$ – это фактически

декартова координата x, а $x^{(2)}$ – декартова координата y. Заметим, что при дифференцировании трехмерных объектов эти координаты следует все же различать. Например, $(\ldots)_{,x}$ – это производная вдоль направления оси OX, а $(\ldots)_{,(1)}$ – производная вдоль касательного к поверхности направления, имеющего в общем случае z-составляющую и совпадающего с направлением OX только после проецирования.

В описанной системе координат реперные векторы имеют простой вид: $\mathbf{e}_{(1)} = \{1, 0, \zeta_{,x}\}$, $\mathbf{e}_{(2)} = \{0, 1, \zeta_{,y}\}$, а дальнейшие выкладки сводятся к элементарной, хотя и довольно объемной алгебре. При этом для γ_{lm} получаются громоздкие выражения. Вместе с тем они радикально упрощаются, если систему глобальных координат выбрать так, что в рассматриваемой точке поверхности ось OZ декартовой системы координат перпендикулярна этой поверхности. Для обсуждения физических аспектов достаточно этого случая, да и при конкретных вычислениях всегда можно делать преобразование γ_{lm} из одной декартовой системы в другую по обычным правилам преобразования трехмерного тензора.

Если $\mathbf{n}||OZ$, то прямые вычисления дают $\gamma_{\alpha\beta} = -\zeta_{,\alpha,\beta}$, $\gamma_{z\alpha} = \gamma_{\alpha z} = 0$, $\gamma_{zz} = \zeta_{,\alpha,\alpha}$. Здесь и далее греческими буквами мы обозначаем трехмерные индексы, пробегающие только значения x и y. Величину γ_{zz} можно опустить, так как она все равно умножается на θ_{kzz}, нулевую в силу (13). В итоге граничные условия приобретают такой вид:

$$\sigma_{kz} - \theta_{k\alpha z,\alpha} + \theta_{k\beta\alpha}\zeta_{,\alpha,\beta} = 0, \tag{15}$$

$$\theta_{kzz} = 0. \tag{16}$$

Мы видим, что наши граничные условия не совпадают с граничными условиями стандартной теории упругости. Кроме того, условий стало больше, что вполне естественно, так как повысился порядок дифференциальных уравнений, $\sigma_{km}n_m \neq 0$.

Даже если не обращать внимания на члены с высшими производными от упругих смещений, то в любом случае θ_{klm} содержит в себе в качестве слагаемого $-(1/2)f_{imkl}P_i$, а последнее слагаемое в (15) приводит к тому, что поверхностное значение $\sigma_{km}n_m$ содержит в себе эту величину, пропорциональную поляризации, свернутую с кривизной поверхности $\zeta_{,\alpha,\beta}$. Отсюда можно сделать вывод о том, что даже при строго однородной поляризации за счет флексоэффекта тело будет деформироваться, несмотря на то что однородная поляризация не входит в объемные дифференциальные уравнения равновесия.

Другой важный вывод заключается в том, что если тело имеет острые ребра, то на них кривизна обращается в бесконечность и указанная величина при этом также обращается в бесконечность. Поэтому реальные расчеты требуют сглаживания таких ребер либо здесь нужно проводить специальный анализ.

Отметим также, что предельный переход $v_{ijklnm} \to 0$ сингулярен, что хорошо видно из полученных формул. Действительно, если расписать (16) как $v_{ijkznz}u_{i,j,n} - (f_{izkz}P_i)/2 = 0$, то понятно, что при конечном втором слагаемом и $v_{ijkznz} \to 0$ получается $u_{i,j,n} \to \infty$.

Из изложенного выше достаточно ясно, что решение конкретных задач по определению деформации за счет флексоэффекта при условии ненулевой поляризации на поверхности требует решения довольно сложных дифференциальных уравнений при непростых граничных условиях. Любая такая задача вполне может составлять предмет отдельного исследования. Тем не менее корректное решение подобных задач представляется невозможным без учета теоретических результатов, изложенных выше.

Автор благодарит А.К. Таганцева за многочисленные дискуссии, в результате которых сформировалась задача, решенная в данной работе.

1. А.К. Таганцев, УФН **152**, 423 (1987).
2. W. Ma and L. E. Cross, Appl. Phys. Lett. **82**, 3293 (2003).
3. J. Y. Fu, W. Zhu, N. Li, and L. E. Cross, J. of Appl. Phys. **100**, 024112 (2006).
4. P. Zubko, G. Catalan, A. Buckley et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 167601 (2007).
5. R. Maranganti, N. D. Sharma, and P. Sharma, Phys. Rev. B **74**, 014110 (2006).
6. E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, M. D. Glinchuk, and R. Blinc, Phys. Rev. B **79**, 165433 (2009).
7. J. Fousek, L. E. Cross, and D. B. Litvin, Mat. Lett. **39**, 287 (1999).
8. L. E. Cross, J. of Mat. Science **41**, 53 (2006).
9. B. Chu, W. Zhu, and L. E. Cross, J. of Applied Phys. **106**, 104109 (2009).