

圧電応力定数の第一原理計算

2026年10月6日

概要

第一原理計算を用いると、結晶や表面などの電子状態や原子構造を求めることができます。得られた情報は材料開発の指標として活用されるほか、対応する実験値との比較によって計算の妥当性を検証することもできます。

機械的な応力によって分極が発生する圧電効果と、電場によってひずみが生じる逆圧電効果を示す材料を、圧電体と呼びます。圧電特性を表す指標のひとつに圧電応力定数があります。圧電応力定数は第一原理電子状態計算から算出することが可能です。

本書では、Winmostarを用いて各種物質の圧電応力定数を計算し、実測値と比較した例を示します。

計算条件

本書の計算にはQuantum ESPRESSO 7.5を使用しました。汎関数にはPBEを使用し、PAW法の擬ポテンシャルを用いました。波動関数および電子密度のカットオフエネルギーは、それぞれ75 Ryおよび675 Ryとしました。 k 点の間隔は $0.15 \text{ \AA}^{-1}$ としました。

まず、ひずみを与えていない状態で、格子と原子位置の構造最適化を行いました。次に、 z 方向にひずみを $-1.0, -0.5, 0, +0.5, +1.0 \%$ 与え、それぞれの状態で原子位置のみ最適化しました。そして、Berry位相法を用いて z 軸方向の分極を計算しました。本書で評価した圧電応力定数 e_{33} は、 z 方向のひずみ η_3 と z 方向の分極 P_3 から下式を用いて算出しました。

$$e_{33} = \frac{\partial P_3}{\partial \eta_3} \quad (\text{式1})$$

なお、本書では扱いませんが、圧電応力定数について電子的効果とイオン位置変化による効果の寄与に分割して評価することも可能です[1]。

計算結果

図1に、本書の計算で得られた、 BaTiO_3 の各ひずみにおける分極を示します。図1より、分極がひずみに対しおおむね線形に変化していることがわかります。本書では、一次関数をひずみと分極の計算値にフィッティングし、得られた傾きから圧電応力定数 e_{33} を算出しました。

図2に各物質における圧電応力定数 e_{33} の実験値[2-5]と本書で得られた計算値を示します。図2より、実験値と計算値の間にある程度相関があることがわかります。この結果は、圧電体の研究開発において第一原理計算が有用であることを示唆しています。

通常、圧電応力定数の算出作業は計算手順が多く煩雑になり、大きな作業コストを伴います。Winmostarを用いると、マウス操作のみで手軽に実行でき、大幅に作業を効率化できます。圧電応力定数の計算については、[チュートリアル](#)も用意されています。

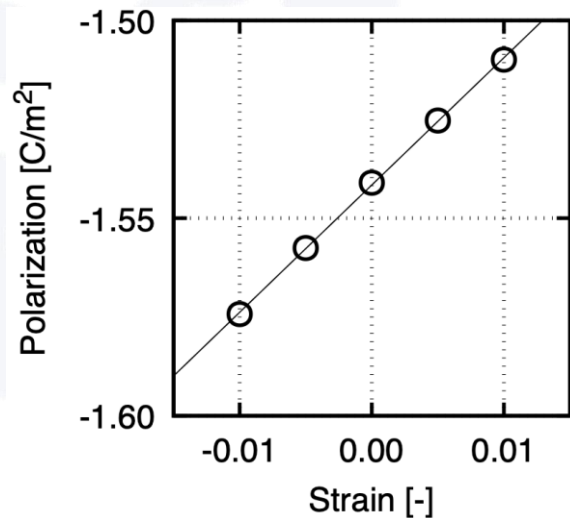


図1: BaTiO_3 の各ひずみにおける分極の計算値 (実線は一次関数によるフィッティング結果)

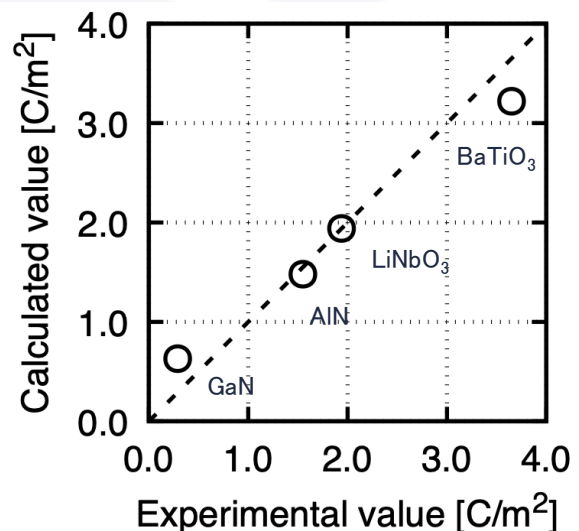


図2: 各物質における圧電応力定数 e_{33} の実験値[2-5]と本書で得られた計算値の比較

Winmostar V11以降では、各種処理の高速化、オプション設定の拡充、さらなる自動化を予定しています。

Winmostarバージョン: 11.18.0

対応ソルバ: QuantumESPRESSO 7.5

引用: [1] Chem. Mater., 36, 7552 (2024).

[2] IEEE Trans. Sonics Ultrason., SU-32, 634 (1985).

[3] J. Appl. Phys., 111, 013509 (2012).

[4] 第20回超音波シンポジウム, PB-8, (1999).

[5] スマートプロセス学会誌 5, 9 (2016).