

## 機能コア解析のためのソフトウェア開発と応用

世古敦人\* 豊浦和明\* 柴田基洋<sup>1)</sup>\* 溝口照康<sup>2)</sup>\*

## 1. はじめに

近年の材料研究では、シミュレーションと解析の両面で計算科学手法とソフトウェアの重要度が増している。現象の理解には第一原理計算や分子動力学計算などの計算結果が、結果の解析には統計処理や画像処理が常用されるようになってきている。また、完全結晶を対象とした網羅的な構造や物性のデータベース、二次元化合物や触媒といった特定の材料系に関するデータベースなどが実験・計算を問わず多数公開されるのに伴って、大量のデータを情報科学的手法で解析して材料開発に利用する「マテリアルズインフォマティクス」の研究も盛んに耳にするようになった。

本特集号で注目している「機能コア」は、材料中の格子欠陥近傍に形成される機能発現にかかわる量子場である。機能コアにおける局所的な構造-機能相関に関する定量的で包括的な解析には、原子構造レベルでの正確なモデリングや発現する機能を扱うための計算科学とそれを実装したソフトウェアが不可欠である。

本稿では著者らが開発してきた機械学習ポテンシャル、固体イオニクス材料の理論解析ソフトウェア、界面モデリングソフトウェアなど、機能コア解析のためのソフトウェアについて述べる。

## 2. 機械学習ポテンシャルの開発と応用

機械学習ポテンシャルでは、隣接原子分布を表現する「構造特徴量」を定義し、ニューラルネットワークモデル、ガウス過程モデル、多項式モデルなどの機械学習モデルにより結

晶構造のポテンシャルエネルギーと構造特徴量の関係を記述する。また、多様な結晶構造に対する網羅的な第一原理計算を実行し、機械学習によりモデルパラメータを推定する。このような機械学習ポテンシャルは、多数の構造特徴量と柔軟な予測モデルを用いるため、経験的ポテンシャルと同じような計算コストにより第一原理計算に近い精度での予測が可能となる。これまで実行不可能であった探索範囲の広い結晶構造探索や高精度な大規模分子動力学計算などが可能となるため、機械学習ポテンシャルの手法開発や応用が、世界中で活発に行われている。

本稿で紹介する機械学習ポテンシャルは、動径関数と球面調和関数に基づいた多項式回転不変量を群論的手法により系統的に生成し、回転不変量を構造特徴量として用いたものであり、多項式モデルに分類される<sup>(1),(2)</sup>。また、対象とするそれぞれの系について、カットオフ半径、構造特徴量の数、多項式回転不変量の次数などを変化させた様々なポテンシャルを構築し、最適なポテンシャルを選択した。それぞれのポテンシャルモデルの推定には、ICSDのプロトタイプ構造から生成された一万から四万程度の構造に対する第一原理計算結果(エネルギーや原子に働く力)を用い、線形リッジ回帰によりパラメータ推定を行った。図1(a)に、Ti-Al系における様々なポテンシャルモデルの予測誤差と計算コストの関係を示す。図1(a)より、予測精度と計算コストはトレードオフの関係にあり、最適なポテンシャルを探すことは多目的最適化となることがわかる。このような場合、最適なポテンシャルはパレート最適なポテンシャルの集合であり、パレート最適なポテンシャルよりも予測精度と計算コストの両方が向上するポテンシャルは存在しない。また、Ti-Al系においては、予測誤差が非常に小さい5(meV/atom)以下となるポテ

\* 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻; 准教授(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)

\*\* 東京大学生産技術研究所; 1)助教 2)教授

Applications and Software Developments for Analyzing Crystal Defect Cores; Atsuto Seko\*, Kazuaki Toyoura\*, Kiyou Shibata\*\* and Teruyasu Mizoguchi\*\* (\*Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, Kyoto. \*\*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Tokyo)

Keywords: Crystal defect, DFT, Machine learning, migration, software

2022年6月1日受理[doi:10.2320/materia.61.634]

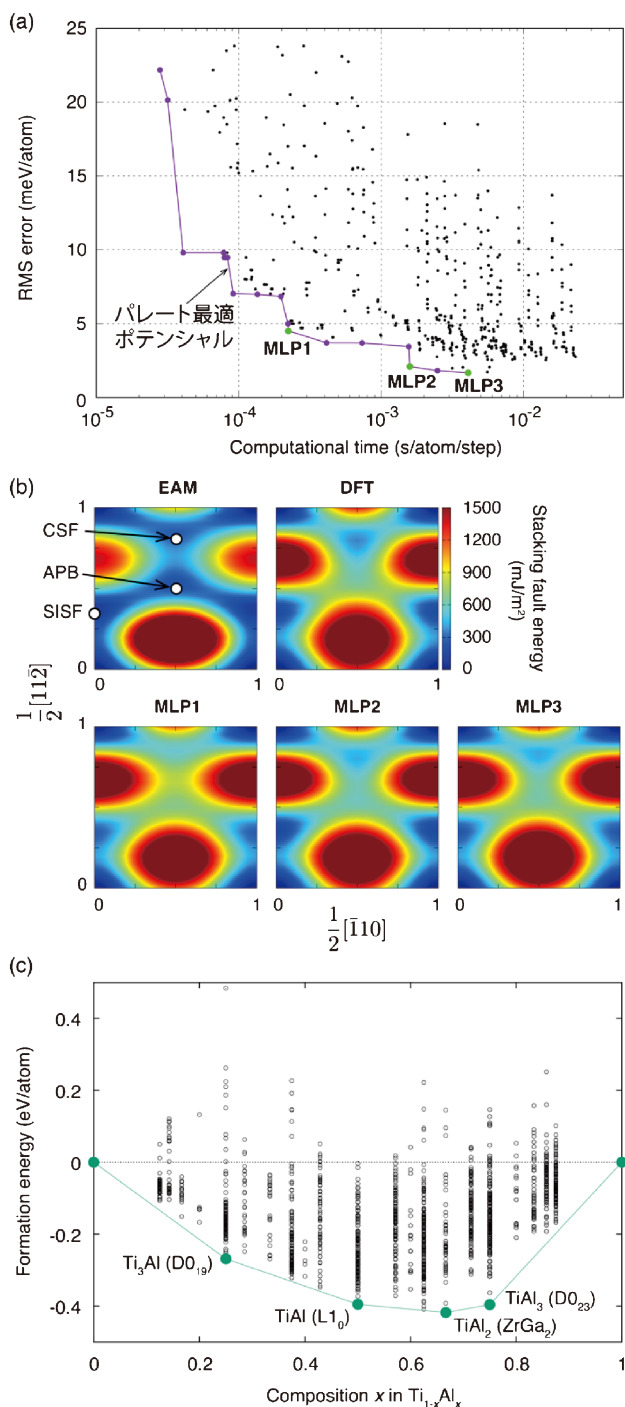


図1 (a) Ti-Al系における機械学習ポテンシャルの予測誤差と計算コストの関係およびパレート最適な機械学習ポテンシャル. 横軸は、エネルギーと原子に働く力の計算に必要な1原子1ステップあたりの時間. (b) パレート最適な機械学習ポテンシャルによる $\gamma$ -TiAlの一般化積層欠陥エネルギー. (c) 機械学習ポテンシャルを用いた大域的最適化手法(DIRECT法)により予測されたTi-Al系における形成エネルギーと安定構造. 安定構造は、 $TiAl_3$ を除き、実験による構造と同じである. $TiAl_3$ の実験構造はD0<sub>22</sub>構造であるが、凸包上のD0<sub>23</sub>構造の形成エネルギーとかなり近い値を示す(+6 meV/atom). (オンラインカラー)

ンシャルが複数存在し、これらのポテンシャルのエネルギーや力の計算に必要な時間は、 $10^{-4}$ ~ $10^{-2}$ (s/atom/step)程度である. 従来から広く利用されているEAMポテンシャルと比べると、計算コストは10倍から1000倍程度となる一方で、安定構造、規則相の形成エネルギー、弾性定数、フォノン物性や熱膨張率、一般化積層欠陥エネルギー[図1(b)], Bain pathエネルギー曲面など、高精度な予測が可能となる<sup>(2)</sup>.

原稿執筆時点において、48種の単体やMg系、Al系、Li系、Si系、Cu系など約100種の合金における機械学習ポテンシャルが構築済みである. これらのパレート最適な機械学習ポテンシャルは、WEBにて公開中(Polynomial Machine Learning Potential Repository at Kyoto University)<sup>(3)</sup>であり、今後も継続的にポテンシャルを追加する予定である. また、これらの機械学習ポテンシャルは、世界中で広く用いられている分子動力学計算ソフトウェアLAMMPSにて利用可能な形式であり、LAMMPSにて用いるためのパッケージも併せて公開している<sup>(3)</sup>. さらに、それぞれのパレート最適なポテンシャルにより予測された多様な結晶構造に対する凝集エネルギー、エネルギー体積曲線、フォノン状態密度、弾性定数、格子定数、規則構造の形成エネルギーなどが併せて閲覧できるようになっており、パレート最適なポテンシャルの中から、要求される計算精度と計算コストに応じて、適切なポテンシャルを選択することが可能である.

最も直接的な機械学習ポテンシャルの応用は、多数の原子から構成される系を対象とした物性計算、構造探索、分子動力学計算などの統計力学計算である. EAMなどの経験的ポテンシャルと比べると、計算可能な原子数やステップ数は少し減少するものの、一般的な第一原理計算では不可能である大規模な計算が、第一原理計算と同じような精度で実行可能である. 例えば、図2(a)はFCC金属において、2112原子までの粒界構造モデルを考え、粒界構造および粒界エネルギーの予測を行ったものである<sup>(4)</sup>. それぞれの粒界構造モデルについて、さまざまな剛体変位を与えることにより、粒界モデルの大域的最適化を行った. 機械学習ポテンシャルは粒界構造データを一切用いず構築したものであるが、粒界エネルギーの予測値は第一原理計算の値を再現しており、学習データに含まれない欠陥構造に対しても予測能力が高いことを示している. その他にも、Si粒界における粒界構造探索および格子熱伝導計算を行った(図2(b))<sup>(5)</sup>. その他にも、機械学習ポテンシャルを利用した多くの大規模計算が期待される.

また、膨大な数のエネルギー・力計算が必要となる応用に対しても、機械学習ポテンシャルは非常に有効である. その一例として、大域的構造探索を紹介する. 上述の機械学習ポテンシャルは、経験的ポテンシャルでは精度が足りない多くの構造についても、高精度なエネルギー予測が可能である. 図1(c)は、決定論的大域的最適化手法の一つであるDIRECT法を用い、12原子までにより表現可能な化学組成を対象に、Ti-Al系の安定構造および準安定構造列挙を行ったものである<sup>(6)</sup>. DIRECT法では、解の存在する可能性の

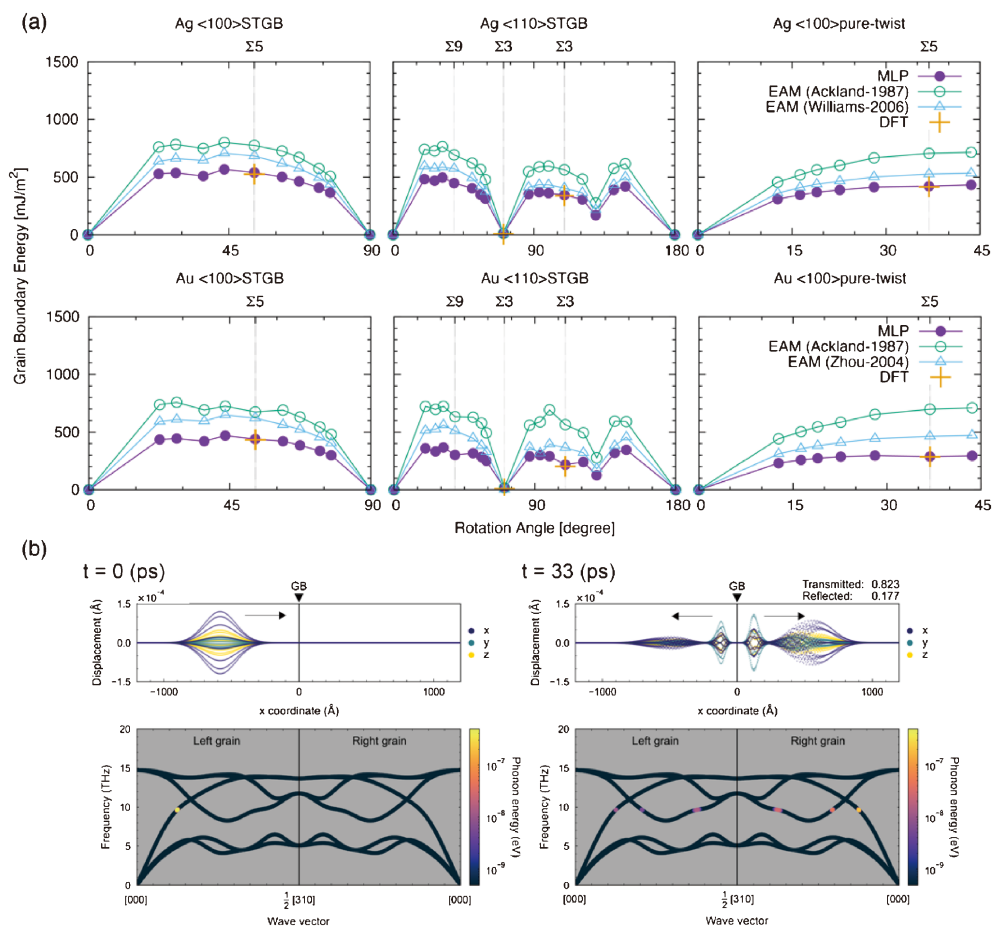


図2 (a) Ag および Au における対称傾角粒界, わじれ粒界の过剩エネルギー. (b)  $\Sigma 5(310)\text{Si}$  粒界における phonon wave packet シミュレーション. (オンラインカラー)

高い探索領域を分割し, 分割した部分探索領域の中央に該当する構造のエネルギーを計算する. 解の存在する可能性の高い探索領域の判定, 探索領域の分割およびエネルギー計算を繰り返すことで, 大域的に構造を探索する. また, その過程で得られるエネルギー計算を行った構造集合には, 低いエネルギーを持つ準安定な構造が含まれている. 合計 $10^9$ 回程度の機械学習ポテンシャルによるエネルギー評価の結果, HCP 置換の  $\text{Ni}_3\text{Sn}$  型 ( $\text{D}_{019}$ ) 構造や FCC 置換の  $\text{AuCu}$  型 ( $\text{L}_{10}$ ) 構造などが, 凸包上の安定構造として現れている. また,  $\text{AlB}_2$  型 ( $\text{C}_{32}$ ),  $\text{Cu}_3\text{Au}$  型 ( $\text{L}_{12}$ ),  $\text{AuCd}$  型 ( $\text{B}_{19}$ ),  $\text{Cu}_2\text{Mg}$ -Laves 型 ( $\text{C}_{15}$ ),  $\text{AuTe}_2$  型 ( $\text{C}_{34}$ ),  $\text{Ca}_7\text{Ge}$  型構造など, 様々な準安定構造が求まった.

### 3. 固体イオニクス材料の理論解析ソフトウェアの開発

シミュレーション結果から物性を定量的に評価する際にも, ソフトウェアは有効である. 第一原理計算などの理論計算を固体イオニクス材料評価に用いる方法のひとつに, “ポテンシャルエネルギー曲面マッピング (Potential Energy Surface mapping, PES mapping)” がある. これは, ホスト結晶中で伝導キャリアが感じるポテンシャルエネルギー (Potential Energy, PE) を位置の関数として評価するもので

あり, 結晶内に導入した細かなグリッド点上で網羅的に PE 計算することで PES を獲得できる. 例として, 立方晶ペロブスカイト型  $\text{BaZrO}_3$  中におけるプロトンの PES ( $\text{H}^+$ -PES) を図 3 (a) に示す. 図の灰色曲面は PE 最小点に対して 0.3 eV の等値面であり, それより PE の低い領域については PE 値をグレースケールで表示している. 図より, プロトンは主に酸素イオン周囲に存在し, その周囲の回転と隣接する酸素イオン間のホッピングにより移動することがわかる. 回転およびホッピングに対する PE 障壁  $\Delta E^{\text{mig}}$  は, それぞれ, 0.17 eV および 0.25 eV であり, プロトンの長距離伝導に対する律速過程はホッピング過程である. このような PES 評価のコストは, ホスト結晶の対称性低下とともに増大するが, “PES の極小点間を繋ぐ谷線を探索する Nudged Elastic Band (NEB) 法<sup>(7)(8)</sup>” や “ガウス過程 (Gaussian Process, GP) に基づくベイズ最適化 (Bayesian Optimization, BO) により伝導の支配領域を選択的に評価する手法<sup>(9)-(11)</sup>” などが提案されており, 効率的に評価することが可能となっている. PES の全容が明らかとなれば系内で起こり得る全てのイオンジャンプと PE 障壁  $\Delta E^{\text{mig}}$  を抽出でき, 遷移状態理論に基づいてジャンプ頻度  $\Gamma$  を  $\Gamma_0 \exp(-\Delta E^{\text{mig}}/k_B T)$  により見積もることができる. ここで,  $k_B$  はボルツマン定数,  $T$  は絶対温度である.  $\Gamma_0$  はジャンプの試行回数と解釈される前

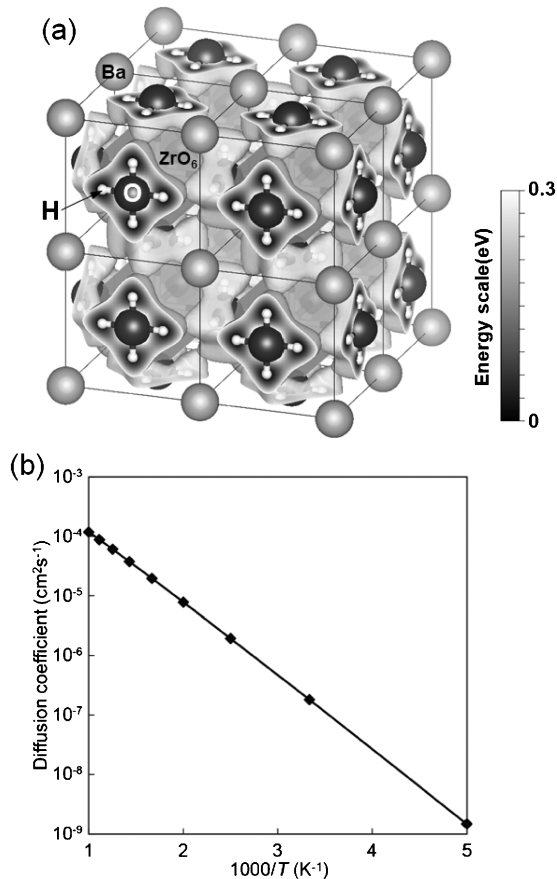


図3 (a) BaZrO<sub>3</sub>で計算されたH<sup>+</sup>のPES. グレーの表面はPESの等値面(等断面レベル: 最も安定なサイトに対して0.3 eV)であり, 計算されたPotential Energyをグレースケールで示している. (b) (a)の結果をMASTEQに入力して得られたBaZrO<sub>3</sub>におけるプロトン拡散係数の定量値.

指数因子であり, 格子振動の周波数程度( $\sim 10^{13}/s$ )の値で近似されることが多い. このジャンプ頻度を用いて動的モンテカルロ(Kinetic Monte Carlo, KMC)法<sup>(12)</sup>に基づく拡散シミュレーションを行い, イオンの平均二乗変位から拡散係数を見積もる方法が一般的であるが, ここでは, より簡便に拡散係数を見積もることのできるマスター方程式の数値解法を紹介したい<sup>(13)(14)</sup>.

マスター方程式とはマルコフ過程に基づく時間発展方程式であり, 時刻 $t$ において位置 $\mathbf{r}$ のサイト $i$ に拡散粒子が存在する確率 $p_i(\mathbf{r}, t)$ の時間変化は次式で表される.

$$\frac{\partial p_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \sum_j [\Gamma_{ji} p_j(\mathbf{r} + \mathbf{s}_{ij}, t) - \Gamma_{ij} p_i(\mathbf{r}, t)]$$

ここで,  $\Gamma_{ij}$ ,  $\mathbf{s}_{ij}$ は, サイト $i$ からサイト $j$ へのジャンプ頻度およびジャンプベクトルである. 右辺第1項および第2項は, それぞれ, “隣接サイトからサイト $i$ への粒子の流入”と“サイト $i$ から隣接サイトへの粒子の流出”に対応している. 結晶内の拡散については, 並進対称性を利用することで, 基本単位格子(primitive cell)内のサイト(サイト数: $n$ )のみを考えればよい. 注意すべきは周期境界を跨ぐジャンプの存在であり, 隣接サイトとして, 着目する基本単位格子外

のサイトも考慮する必要がある. このマスター方程式は, 位置 $\mathbf{r}$ に対するフーリエ変換( $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{Q}$ )を用いることで容易に解くことができる. 詳細は割愛するが,  $A_{ij} = \sum_{\alpha} \Gamma_{ij}^{\alpha} \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{s}_{ij}^{\alpha}) - \delta_{ij} \sum_{\alpha, j} \Gamma_{ij}^{\alpha}$ を要素とする $n \times n$ 次元の正方行列 $\mathbf{A}$ (jump matrix)を定義すると, 拡散係数は行列 $\mathbf{A}$ の固有値から見積もることができる. ここで,  $\alpha$ は基本単位格子セルの番号を表し, 周期境界を跨ぐジャンプを考慮するために $\Gamma_{ij}$ および $\mathbf{s}_{ij}$ の添え字として付加されている. 拡散係数テンソル $\mathbf{D}$ の要素 $D_{mn}$ ( $m, n = x, y, z$ )は, 行列 $\mathbf{A}$ の最大固有値 $\lambda_{\max}$ と $\lambda_{\min} = -\sum_{m, n = x, y, z} D_{mn} Q_m Q_n$ の関係があることから, 十分小さな $\mathbf{Q}$ ベクトルを適切に設定することで見積もることができる.

筆者らは, マスター方程式の数値解法に基づいて拡散係数テンソル $\mathbf{D}$ を見積もることのできるソフトウェアプログラム(MASTEQ)を開発し, Githubにてソースコードを公開している<sup>(15)</sup>. 例として, BaZrO<sub>3</sub>中のプロトンの拡散係数を本プログラムで見積もった例を図3(b)に示す. この酸化物は立方晶であり, プロトン拡散は等方的である. また, 基本単位格子内のサイト数は12であることから, 例えば,  $\mathbf{Q} = (Q_x, 0, 0)$ に対する $12 \times 12$ 正方行列 $\mathbf{A}$ の最大固有値 $\lambda_1$ を求めれば,  $D_{xx} = |\lambda_1| / Q_x^2$ から拡散係数を見積もることができる. 見積もられた拡散係数の見かけの活性化エネルギーは0.24 eVであり, 想定通り, 律速過程のホッピング経路のPE障壁(0.25 eV)と同程度となっている. 現時点では, MASTEQは“独立粒子近似下”あるいは“サイトブロッキング効果を考慮した平均場近似下”における拡散係数テンソル $\mathbf{D}$ の見積もりのみが可能である. 将来的には, “連続するジャンプ間の相関効果”や“キャリア間の相互作用”を取り扱うことができるよう, 本プログラムを拡張する予定である.

#### 4. 結晶学に基づく効率的な界面モデリングソフトウェアの開発

結晶の界面では, 結晶内部では現れない局所構造や周期性が生じ, 熱伝導や電気伝導の変調や熱膨張率の増大といったバルクでは現れない物性が現れたり, 破壊や腐食といった材料の機械的耐性を支配したりする. また, 原子分解能観察による界面構造と特性の各論的な分析と理解の進展に伴い, 最安定および準安定な粒界相やファセット構造の網羅的な探索, それらのダイナミクス解析や物性予測など, 構造や現象の理解における計算科学の適用範囲と重要性が増大している. 以上の背景から, 著者らは新規材料特性の設計には界面を舞台とした機能コアの探索と解析, およびそれに適した新しい計算科学が不可欠だと考え, これまで界面構造や物性に関する情報科学的なアプローチ<sup>(16)-(19)</sup>を提案したほか, 現在もシリコン界面構造の相挙動についての検討<sup>(20)</sup>などを重ねている.

界面構造のモデリングでは, 1. 計算科学的な扱いやすさ, 2. 物理的妥当性, 3. 効率的な探索の3つの考慮すべき要素がある. 1は計算科学的な要請であって, 対応格子(coincident-site-lattice: CSL)に基づいて周期的境界条件を満たす

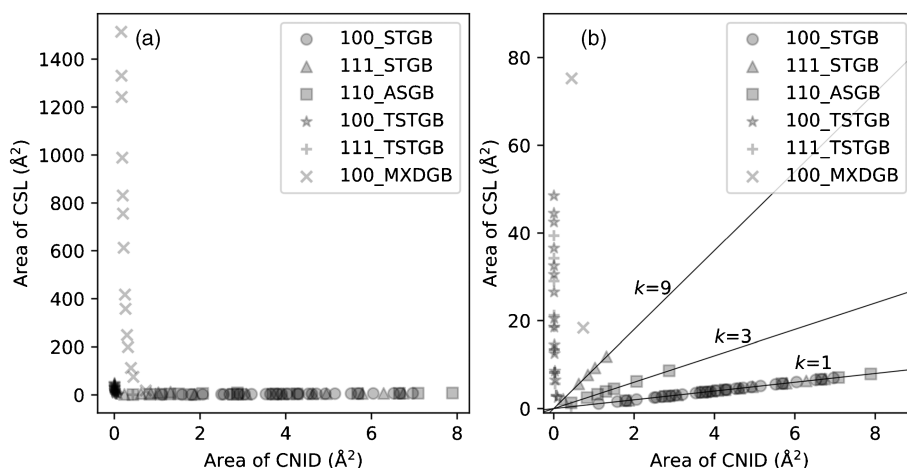


図4 CNID と CSL の単位胞の面積の比較の全体図(a)と拡大図(b). 凡例の数は回転軸ミラー指数, 文字は界面の種類(STGB: 対称傾角粒界, ASGB: 非対称傾角粒界, TSTGB: ねじれ粒界, MXDGB: 混合粒界)を表す. (b)では原点を通る比例関係の補助線を傾き $k$ とともに示している.

計算セルの作成などが挙げられる. しかし, ヘテロ界面や格子定数の比に解析的な対応関係がない結晶, ランダム粒界などでは, 厳密な CSL が存在しないため, 適当な格子歪を導入して近似的な CSL 粒界を計算する必要がある. 2は物理的な要請であって, 界面の存在によるひずみ場やそれによる界面間の相互作用が目的とする構造や物性に影響しない程度に抑えられたモデルを用いる. 計算コストが低い分子動力学計算の場合, 結晶と比較した場合のひずみが粒界近傍から十分に緩和する程度のバルク領域を含めればよい. ただし, 一般の近似 CSL 粒界ではバルク領域の周期性が不整合なので, 薄膜に対して基板は歪ませないなど物理的に妥当な格子歪分布を考慮する必要がある. 3は主に最安定状態や準安定状態の構造や物性を探索する場合に重要となる. 界面を特徴づけるパラメータには, 結晶間の相対的な方位関係を示す3自由度と粒界面の方位を示す2自由度を合わせた巨視的な5自由度と, 相対的な剛体変位量(rigid body translation: RBT)として微視的な3自由度がある. 網羅的に粒界構造を探索する場合, 各巨視的5自由度に対して安定な粒界構造を探索する必要がある. これは残りのRBTを微視的な3自由度空間内でサンプリングし, 各々の構造を構造緩和させ安定性を調べる. 一般には CSL の単位胞内でRBTをサンプリングして探索すれば十分だが, 結晶学的には冗長である. 結晶学的には非同変位胞(cell of non-identical displacement: CNID)という, 一方の結晶に対してもう一方の結晶を平行移動した際に非同変位配置が得られる変位ベクトルを含む最小の領域, をRBTの探索空間とすれば必要十分でより効率的な構造探索が行える.

上記の界面に関する概念や手続きは結晶学の基礎研究の進展で確立されてきた<sup>(21)-(23)</sup>ものの, 幾何学的な情報のみから簡便に近似的な CSL 粒界も含めて界面モデルを作成できるソフトウェアは提供されてこなかった. そのため, 一般の研究者がこれらの要素を考慮して界面モデルを作成するには多大な労力が必要で, 界面機能コア解析の障壁となっていた.

そこで, 我々はこれらの要素を考慮して CSL 粒界モデルを簡便に生成できるソフトウェア, Interface master を開発し GitHub で公開している<sup>(24)</sup>. Interface master では各種アルゴリズムを統合的に実装し, 歪を許容した近似的な CSL 粒界モデルの生成, 適当な大きさのバルク領域を含む粒界モデルの作成, CNID 内でRBTをサンプリングした構造の計算ソフトウェア形式(LAMMPS や VASP など)での出力などが行える.

例えば, 上記の3に関連したCNIDによるサンプリングの効率化を紹介する<sup>(25)</sup>. サンプリング密度を一定にした場合, 探索空間に比例してサンプリング点が増えるため, CNIDの単位胞の面積がCSLの単位胞の面積に対して小さいほど効率的なサンプリングが可能だといえる.

図4に面心立方格子の結晶について各回転軸([100], [110], [111]軸)の各種粒界(STGB: 対称傾角粒界, ASGB: 非対称傾角粒界, TSTGB: ねじれ粒界, MXDGB: 混合粒界)に対して計算したCSLとCNIDの単位胞の面積(Area of CSL および Area of CNID)を散布図で示した. 図4(b)の拡大図では原点を通る傾き $k$ の直線を補助線として示した. [100]軸STGBではCSLとCNIDの単位胞の面積がほぼ同じだが, 他のほぼすべての粒界でCNIDの単位胞の面積のほうが小さく, 探索コストを大幅に減らせる場合が多く存在することが分かる. 特に, 回転軸が粒界面に含まれないTSTGB, MXDGBに対して特に顕著な効率化が確認できる.

Interface master では, 同相界面(粒界)以外にも異相界面や表面の計算モデル作成も可能であり, 界面や表面を舞台とする様々な機能コア解析に活用している.

## 5. まとめ

以上, 機能コア解析に有効な計算科学とそれを実装したソフトウェアの開発と応用について述べてきた. 材料研究にお

いて日に日に増している計算科学の重要性はオープンサイエンスの潮流と相まって関連するソフトウェアの開発とデータベースの公開を刺激している。本稿で取り上げたもの以外にも、世界中で個別の計算ソフトウェア、ソフトウェアを橋渡しして計算・解析・データベース化を一貫して行うためのワークフローソフトや、各プロセスにおけるエラーを自動で処理するソフトウェアの開発が進んでいる。特筆すべきは、これらの多くがオープンソースプロジェクトで誰でも入手・使用でき、日々アップデートされ新たな機能が実装されている点である。加えて、様々なデータレポジトリやデータジャーナルを通して多種多様な材料データが容易に入手できる環境が整いつつある。本稿がそのようなソフトウェアやデータを駆使した材料研究を始める端緒となれば幸いである<sup>(26)</sup>。

以上の研究は科学研究費補助金・新学術領域研究(研究領域提案型)「情報科学による機能コア計算設計19H05787」で実施された。ここに謝意を表する。

## 文 献

- (1) A. Seko, A. Togo and I. Tanaka: Phys. Rev. B, **99**(2019), 214108.
- (2) A. Seko: Phys. Rev. B, **102**(2020), 174104.
- (3) A. Seko: arXiv: 2007. 14206(2020), <https://sekocho.github.io>
- (4) T. Nishiyama, A. Seko and I. Tanaka: Phys. Rev. Mater., **4**(2020), 123607.
- (5) S. Fujii and A. Seko: Comput. Mater. Sci., **204**(2022), 111137.
- (6) A. Seko, K. Toyoura and J. Honda: in preparation.
- (7) G. Henkelman, B. P. Uberuaga and H. Jónsson: J. Chem. Phys., **113**(2000), 9901.
- (8) G. Henkelman and H. Jónsson: J. Chem. Phys., **113**(2000), 9978.
- (9) K. Toyoura, D. Hirano, A. Seko, M. Shiga, A. Kuwabara, M. Karasuyama, K. Shitara and I. Takeuchi: Phys. Rev. B, **93**(2016), 054112.
- (10) K. Kanamori, K. Toyoura, J. Honda, K. Hattori, A. Seko, M. Karasuyama, K. Shitara, M. Shiga, A. Kuwabara and I. Takeuchi: Phys. Rev. B, **97**(2018), 125124.
- (11) K. Toyoura, T. Fujii, K. Kanamori and I. Takeuchi: Phys. Rev. B, **101**(2020), 184117.
- (12) K. A. Fichthorn and W. H. Weinberg: J. Chem. Phys., **95**(1991), 1090.
- (13) R. Allnatt and A. B. Lidiard: Atomic Transport in Solids, Cambridge University Press Inc., Cambridge, UK, (1993).
- (14) R. Hempelmann: Quasielastic Neutron Scattering and Solid State Diffusion, Oxford University Press Inc., New York, (2000).
- (15) K. Toyoura: <https://github.com/KazuakiToyouura/MASTEQ>, MASTEQ: Numerical estimator of atomic diffusivity in crystals using a master equation approach, (2022).
- (16) S. Kiyohara, H. Oda, T. Miyata and T. Mizoguchi: Science Adv., **2**(2016), e1600746.
- (17) S. Kiyohara, H. Oda, K. Tsuda and T. Mizoguchi: Jpn. J. Appl. Phys., **55**(2016), 045502-1-4.
- (18) H. Oda, S. Kiyohara, K. Tsuda and T. Mizoguchi: J. Phys. Soc. Jpn., **86**(2017), 123601-1-4.
- (19) R. Otani, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi: Appl. Phys. Express, **13**(2020), 065504-1-6.
- (20) Y. Xie, K. Shibata and T. Mizoguchi: Research Square, PREPRINT (Version 1) (2021), available at [<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1043243/v1>].
- (21) R. Bonnet and F. Durand: Scr. Metall., **9**(1975), 935-939.
- (22) R. Bonnet: Scr. Metall., **10**(1976), 801-803.
- (23) R. Bonnet and E. Cousineau: Acta Crystallogr. Sect. A, **33**(1977), 850-856.
- (24) Y. Xie: GitHub: available at [https://github.com/nmdl-mizo/interface\\_master](https://github.com/nmdl-mizo/interface_master).
- (25) Y. Xie, K. Shibata and T. Mizoguchi: Comput. Phys. Commun., **273**(2022), 108260.
- (26) K. Matsunaga, M. Yoshiya, N. Shibata, H. Ohta and T. Mizoguchi: J. Ceram. Soc. Jpn, in press, available at [[doi.org/10.2109/jcersj2.22080](https://doi.org/10.2109/jcersj2.22080)].

★★

世古教人  
2007年 京都大学大学院工学研究科博士課程修了  
京都大学次世代開拓研究ユニット助教, 京都大学大学院工学研究科助教を経て,  
2015年10月より現職。  
専門分野: 計算材料科学  
©第一原理計算, 統計熱力学, 機械学習手法を用いた第一原理熱力学計算手法の開発, マテリアルズ・インフォマティクス手法の開発に従事。

★★

