

ワークショップ 「現代に適應するデータベース」

主催：（公財）豊田理化学研究所 共催：（一社）合金状態図研究会
2025 年 3 月 3 日（月）9:00 ～ 3 月 4 日（火）15:00（終了予定時刻）
（公財）豊田理化学研究所 井口洋夫記念ホール
ハイブリッド開催（現地&オンライン）

－ プ ロ グ ラ ム － Day1 3 月 3 日（月）

9:00～9:10 開会の辞
9:10～9:15 開催概要アナウンス

9:15～12:15 一般講演
現代の視点から見た計算状態図とデータベース 源 聡（物質・材料研究機構）
理論状態図研究から得られる熱力学物性の金属組織学への応用 大 谷 博 司（豊田理化学研究所）
固溶体を対象とした準安定状態図のデータベース 榎 木 勝 徳（島 根 大 学）

12:15～13:45 昼 食 + ポスターセッション

13:45～15:45 一般講演
熱力学解析とデータベース 阿 部 太 一（物質・材料研究機構）
過冷却液相の Gibbs エネルギーについて 徳 永 辰 也（九州工業大学）

15:45～16:00 休 憩

16:00～16:45 ポスターセッション・ショートプレゼン（1 人あたり 3 分程度）
16:45～17:35 ポスターセッション（コアタイム）

18:00 頃～ 意見交換会

Day2 3 月 4 日（火）

9:00～12:00 一般講演
フェーズフィールド法・データベース・データ科学の融合 小 山 敏 幸（名古屋大学/物質・材料研究機構）
新しいデータベース開発法について 飯久保 智（九 州 大 学）
Gibbs エネルギーの活用例と新規データベースへの期待 大 沼 郁 雄（物質・材料研究機構）

12:00～13:30 昼 食 + ポスターセッション

13:30～14:45 総合討論 & 情報交換

14:45～15:00 閉会の辞

【ポスター発表リスト】

※数字はポスターボード番号およびショートプレゼンの発表順に対応.

- | | |
|--|-----------------------------|
| 1. 電子照射誘起アモルファス化とデータベース | 永瀬 丈嗣 (兵庫県立大学) |
| 2. コラプスモデルによる Si ねじり粒界エネルギー計算 | 西谷 滋人 (関西学院大学) |
| 3. フォノン状態密度に基づく熱力学モデルの構築およびマイクロメカニクス援用による
低温固体アンモニアの常温における安定化機構の検討 | 森下 政夫 (物質・材料研究機構) |
| 4. 第一原理計算に基づく理論状態図と実験状態図における不確実性評価 | 鈴木 昂生 (JX 金属) |
| 5. Nd-Fe-B-Cu 系 CALPHAD データベースと連携した液相焼結フェーズフィールドシミュレーション | 石井 秋光 (物質・材料研究機構) |
| 6. 仮想現実技術を用いた 3 次元合金状態図および組織シミュレーション結果の可視化 | 松岡 佑亮 (物質・材料研究機構) |
| 7. Thermodynamic modeling of sigma phase based on Density functional theory and Machine Learning | Wenhao Zhang (NIMS) |
| 8. 拡散データベース (Kakusan) のデータ構成と収録内容 | 伊藤 卓郎 (物質・材料研究機構) |
| 9. PSPP 連関の再考察とデータベース構築に向けた展望 | 門平 卓也 (物質・材料研究機構) |
| 10. 計算データベース構築および外挿可能 AI を用いた材料開発 | 佐藤 正寛 (東京大学) |
| 11. フェーズフィールド法における CALPHAD データベースの直接活用 | 森野 琢水 (横浜国立大学) |
| 12. 高圧下における Ti と ZnO の相変態 | 唐 永鵬 (九州大学) |
| 13. Screening new Entropy Stabilized Oxides by
DFT calculations and active learning | Sebastien Junie (NIMS/CNRS) |
| 14. Promising Multi-component Cubic Alloys for Hydrogen Storage: Insights
from First-principles Calculations and Machine Learning | Zeineb Nefzi (NIMS/CNRS) |

※以下のポスター発表についてはショートプレゼンを行わない.

- | | |
|----------------------------------|-------------------|
| 15. 現代の視点から見た計算状態図とデータベース | 源 聡 (物質・材料研究機構) |
| 16. 固溶体を対象とした準安定状態図のデータベース | 榎木 勝徳 (島根大学) |
| 17. CALPHAD 法による熱力学解析の手続き | 阿部 太一 (物質・材料研究機構) |
| 18. 過冷却液相の Gibbs エネルギーについて | 徳永 辰也 (九州工業大学) |
| 19. Gibbs エネルギーの活用例と新規データベースへの期待 | 大沼 郁雄 (物質・材料研究機構) |