

従来比 30 倍の高速実験で新しい磁気センサ材料を発見！

～AI によるデータ解析・予測による超効率的開発に成功～

NIMS は、多数の材料組成を短時間で評価できる新しい実験手法を開発し、磁性材料の異常ホール効果の特性を従来の 30 倍の速さで測定することに成功しました。得られた膨大なデータを機械学習で解析し、その予測に基づいて新しい材料を実証した結果、磁気をより敏感に検出できる新しい磁気センサ材料の開発に成功しました。本研究結果は、9 月 3 日に npj Computational Materials 誌に掲載されました。

研究成果の概要

■ 従来の課題

異常ホール効果は、磁性体に電流を流すと、電流と磁化（N 極－S 極の向き）の両方に直交する方向に電圧が発生する現象です。この特性を利用すると、磁化の変化を電気信号として敏感に検出できるため、次世代ハードディスクドライブ用リードヘッドや高性能磁気センサなどへの応用が期待されています。特に、大きな異常ホール効果を示す新規材料として期待される 3 種類以上の元素を含む多元素磁性合金では、元素の種類と組成比の組み合わせが膨大で（いわゆる「組み合わせ爆発」）、さらに 1 試料の評価に時間がかかるため、この広大な探索空間はほとんど未開拓のままでした。そのため、薄膜試料の異常ホール効果を高効率に評価できる実験手法と、広大な探索空間から優れた材料を効率的に見出す方法の確立が求められていました。

■ 成果のポイント

今回、当研究チームは、1 枚の薄膜試料の中で連続的に組成が変化する「組成傾斜薄膜」を用いて、効率よく評価できる新しい実験手法の開発に成功しました。これにより、1 組成あたり約 0.2 時間で評価でき、従来手法に比べて約 30 倍の高速化を実現しました。さらに、本手法を用いて、鉄（Fe）に重元素を 1 種類加えた二元系薄膜の異常ホール効果を系統的に調査しました。その結果をもとに、より大きな効果を示す可能性のある三元系材料（Fe と 2 種類の重元素）を予測する機械学習モデルを構築しました。そして、その予測に基づき探索した Fe-Ir-Pt（鉄－イリジウム－白金）系の新材料において、Fe-X 二元系材料の最大値（ $5.25 \mu\Omega \text{ cm}$ ）を上回る、 $6.5 \mu\Omega \text{ cm}$ の異常ホール抵抗率を観測することに成功しました。

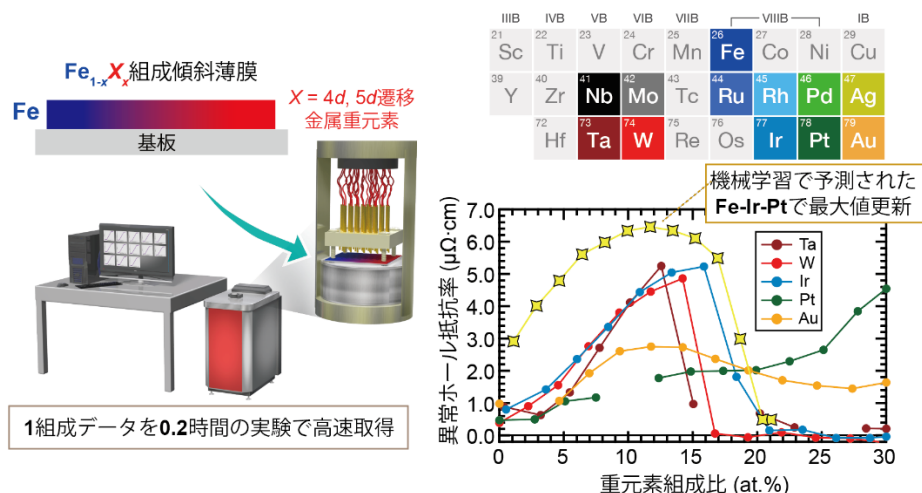


図 1：Fe_{1-x}X_x 組成傾斜薄膜のマルチチャンネル同時測定による異常ホール効果の高速計測。1 組成あたり 0.2 時間で測定でき、従来手法に比べて約 30 倍の高速化を実現。機械学習により予測された Fe-Ir-Pt 系で従来の最大値を更新。

■ 将来展望

本成果は、多数の組成を一度に試せる実験方法（コンビナトリアル実験）と機械学習を組み合わせることで、大きな異常ホール効果を示す新しい薄膜材料を効率的に探索・発見できる手法を実証したものです。今後は、探索対象となる材料空間をさらに拡大することで、より大きな異常ホール効果を示す新材料の発見が期待されます。さらに、大量に得られた測定結果を活用したデータ駆動型材料開発や、より高速な自動・自律型の材料探索システムの実現にもつながると見込まれます。

■ その他

本研究は、NIMS 磁気機能デバイスグループの遠山諒ボスドク研究員（研究当時）、桜庭裕弥グループリーダー、データ駆動型材料設計グループの岩崎悠真主幹研究員らによる研究チームによって実施されました。JST 戦略的創造研究推進事業 CREST「未踏探索空間における革新的物質の開発」（JPMJCR21O1）、および文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト「データ創出・活用型磁性材料研究拠点」（JPMXP1122715503）の支援を受けています。

本研究成果は、2025 年 9 月 3 日に npj Computational Materials にオンライン掲載されました。

研究の背景

異常ホール効果^[1]は、磁性体に電流を流すと、電流と磁化（N 極－S 極の向き）の両方に直交する方向に電圧が生じる現象です。この効果を利用すると、磁化の変化を電気信号として検出できるため、磁気センサや次世代ハードディスクドライブのリードヘッド^[2]などへの応用研究が進められています。これらのデバイスをより高感度・高性能化するためには、大きな異常ホール効果を示す新しい薄膜材料の開発が不可欠であり、世界中で探索が加速しています。

これまでに、3 種類以上の元素を含む多元素磁性合金で大きな異常ホール効果を示す材料が報告されています。しかし、元素の種類や組成比の組み合わせは膨大（いわゆる「組み合わせ爆発」）であるため、体系的な探索はほとんど進んでいません。異常ホール効果はスピン軌道相互作用^[3]に起因するため、高いスピン起動相互作用を持つ重元素を磁性薄膜に添加すれば効果の増大が期待されますが、例えば代表的な磁性元素である鉄（Fe）に複数の重元素を加えた組成においても、これまで系統的な研究は行われていませんでした。

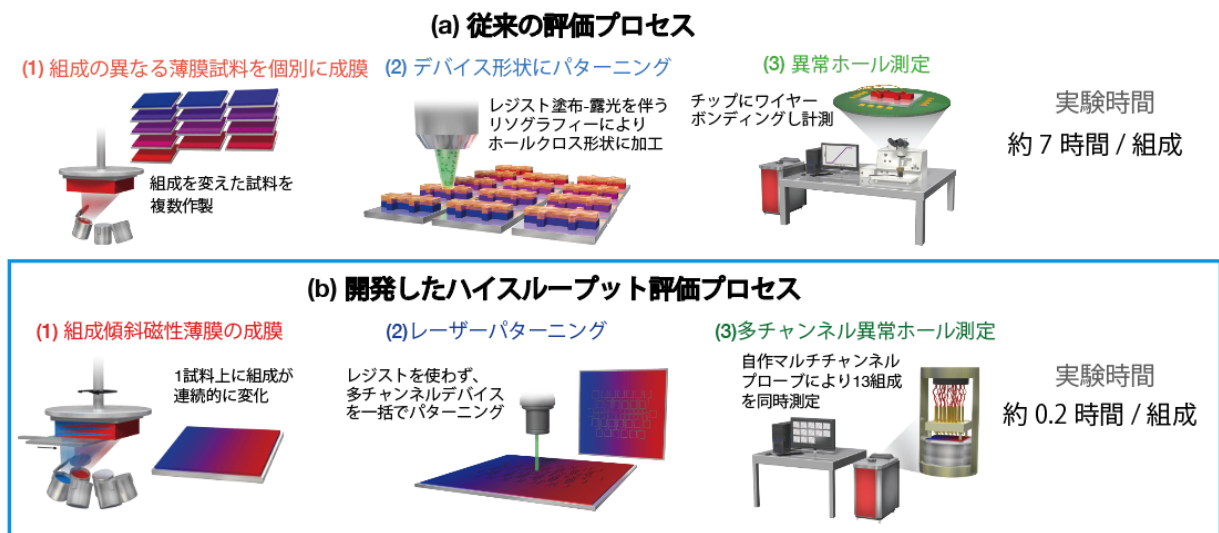


図 2 磁性薄膜試料の異常ホール効果に関する (a) 従来の評価プロセスと (b) 本研究で開発したハイスループット評価プロセスの比較。1 組成あたりの実験時間を約 7 時間から約 0.2 時間へと短縮し、約 30 倍の高速化を実現した。

1 枚の薄膜における異常ホール効果进行评估するには、図 2 (a) に示すように、(1) 単一組成の薄膜を成膜し、(2) 光を使った微細加工技術（リソグラフィー）でデバイス形状に加工し、(3) 電極と配線を細い金属線で接続するワイヤーボンディングを行って測定するというプロセスが必要です。これらはいずれも時間のかかる作業であり、1 組成の薄膜を評価するだけでも、私

たちの実験環境では最低でも合計約 7 時間を要し、丸一日近くかかります。このような非効率的なプロセスでは、数百から数千に及ぶ組成が存在する広大な材料探索空間から、大きな異常ホール効果を示す新しい薄膜材料を見つけ出すのは極めて困難です。したがって、異常ホール効果を高効率に評価できる新しい実験手法の開発と、多元素材料の広大な探索空間から有望な材料を効率的に見出す方法の確立が強く求められていました。

研究内容と成果

本研究では、多数の組成を一度に試せるコンビナトリアル実験手法^[4]を活用し、薄膜の異常ホール効果を高速に評価できる新しいハイスループット手法^[5]を開発しました。その結果、従来法の 30 分の 1 の時間で評価することに成功しました。

本手法は、(1) スパッタ成膜による組成傾斜薄膜^[6]の作製、(2) レーザー加工による 13 デバイスの一括パターニング、(3) マルチチャンネルプローブを用いた 13 組成の同時測定、の 3 つのプロセスから構成されます(図 2(b))。まず (1) では、単一基板上に組成が連続的に変化する「組成傾斜薄膜」を成膜し、複数の組成を一度に得ることで成膜時間を大幅に短縮しました。次に (2) では、レーザーで薄膜に直接パターンを描くように加工し、測定用のデバイスパターンを作製しました。この方法ではフォトリソ（感光剤による加工）や真空プロセスを必要とせず、従来のリソグラフィーに比べ加工時間を大幅に削減できます。最後に (3) では、独自開発のマルチチャンネルプローブを用いて、異なる組成を持つ 13 種類の薄膜を一度にまとめて測定しました。この測定方法では、従来のように端子ごとに配線する必要がなく、試料ホルダーにおいてピンアレイで押さえるだけで測定可能です。これにより、13 個の試料あたり約 3 時間、すなわち 1 組成あたり約 0.2 時間で評価でき、従来手法に比べて約 30 倍の高速化を実現しました。

図 3 に示す通り、本研究で開発したハイスループット評価手法の実証として、代表的な磁性元素 Fe に重元素 (X) を 1 種類加えた二元系 Fe-X 薄膜の異常ホール効果を系統的に調べました。

4d、5d 系の 11 種類の重元素を添加した $\text{Fe}_{1-x}\text{X}_x$ 組成傾斜薄膜 ($x \leq 30\%$) を作製し、143 組成 (= 13 組成 × 11 元素) のデータをわずか 33 時間 (約 1 日半) の実験で取得しました。これは従来手法では約 41 日を要するデータ量に相当します。測定の結果、全ての重元素添加で異常ホール効果の増大傾向が見られ、特に 5d 元素の Ta、W、Ir、Pt で顕著に増大しました。中でも Ta を 12.6% 添加した場合に最大値となる異常ホール抵抗率 $5.25 \mu\Omega \text{ cm}$ が観測されました。

さらに、この二元系データに基づき、より大きな異常ホール抵抗率を示す可能性のある三元系 Fe-Y-Z (Fe と 2 種類の 5d 重元素 Y、Z) を予測する機械学習モデル^[7]を構築しました。その結果、Fe-Ir-Pt での増大が予測されました (図 4)。

この予測に基づき、三元系 Fe-Ir-Pt 組成傾斜膜 $\text{Fe}_y\text{Ir}_z\text{Pt}_{1-y-z}$ を作製し、同様の手法で評価したところ、 $\text{Fe}_{80}\text{Ir}_2\text{Pt}_{20-z}$ において、二元系最大値 ($5.25 \mu\Omega \text{ cm}$) を上回る、 $6.5 \mu\Omega \text{ cm}$ の異常ホール抵抗率を実証しました。さらに、この $\text{Fe}_{80}\text{Ir}_2\text{Pt}_{20-z}$ での増大の起源を解明するためスケール則解析^[8]を行った結果、外因性機構であるスキュー散乱^[9]が主因で

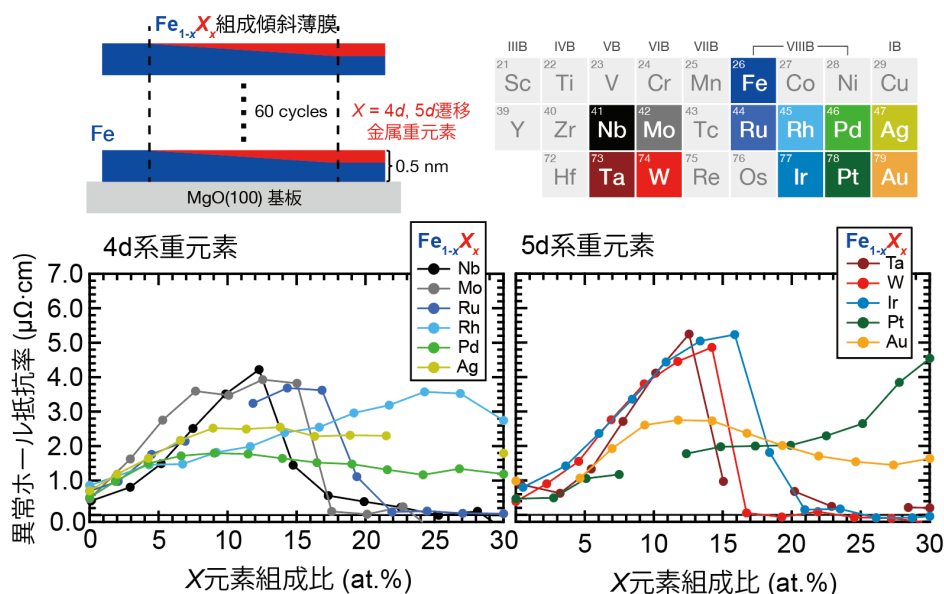


図 3 Fe に 4d 系 (左) および 5d 系 (右) の重元素を加えた組成傾斜膜のハイスループット測定結果。重元素の種類や含有量によって、異常ホール効果が大きく変化することが分かった。

あることが明らかになりました。

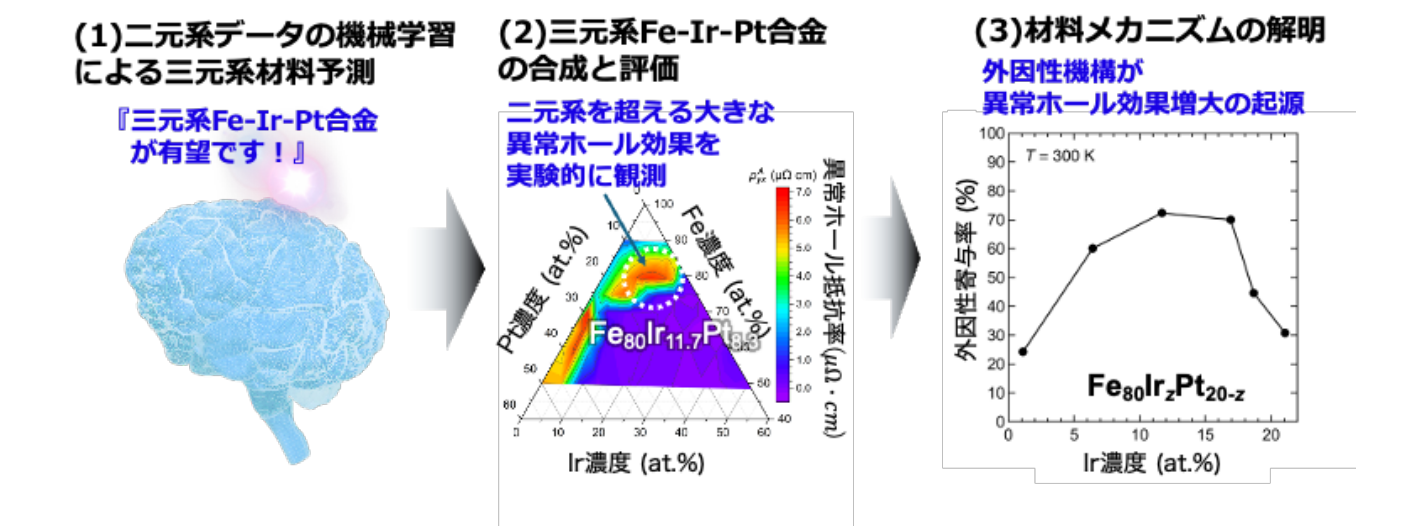


図4 本研究では、二元系 Fe-X 薄膜のデータをもとに、（1）機械学習で大きな異常ホール抵抗率を示す三元系材料を予測し、（2）実験でその予測を確認し、（3）異常ホール効果が増大する仕組みを解明した。

今後の展開

本成果は、多数の組成を一度に試せる実験方法（コンビナトリアル実験）と機械学習を組み合わせることで、大きな異常ホール効果を示す新しい薄膜材料を効率的に探索・発見できることを実証しました。今後は探索対象をさらに広げることで、より優れた多元素磁性合金薄膜の発見が期待されます。また、大量の測定データは、将来の自動・自律型材料開発システム^[10]の実現に直結します。そのためには、ロボットによる試料移動や実験プロセスの自動化、機械学習と連動した条件最適化アルゴリズムの導入が不可欠です。

さらに、この組成傾斜膜を用いた手法は異常ホール効果材料にとどまらず、高スピン分極率材料^[11]、高磁気異方性材料^[12]、低ダンピング材料^[13]の探索にも応用可能です。磁性薄膜に限らず、熱電材料や超伝導材料など幅広い機能性材料の効率的な開拓にも有効であり、ハイスループット実験とデータ科学の融合によって新材料探索のさらなる加速が期待されます。

■掲載論文

題目	High-throughput materials exploration system for the anomalous Hall effect using combinatorial experiments and machine learning
著者	Ryo Toyama, Yuma Iwasaki, Prabhanjan D. Kulkarni, Hirofumi Suto, Tomoya Nakatani, and Yuya Sakuraba
雑誌	npj Computational Materials
DOI	https://doi.org/10.1038/s41524-025-01757-5
掲載日	2025 年 9 月 3 日

■用語解説

- [1] 異常ホール効果：磁性体に電流を流すと、磁化と電流に直交する方向に電圧が生じる現象。磁気センサやメモリ素子への応用が注目される。スピン軌道相互作用を起源とする（用語解説[3]参照）。
- [2] リードヘッド：ハードディスクでは磁性体の磁化の上向き（“1”）・下向き（“0”）として情報を記録する。この磁化の向きを読み取る（read）ための磁気センサのことをリードヘッドと呼ぶ。

- [3] スピン軌道相互作用：電子の自転（スピン）と軌道運動（原子核の周りを回る動き）が影響し合う量子力学的な現象。この相互作用により、物質の電氣的・磁氣的性質が変化し、新しい機能を持つ材料の設計に役立つ。スピントロニクスなどの先端技術でも重要。
- [4] コンビナトリアル実験手法：一度の実験で組成の異なる多数の薄膜試料を成膜する、もしくは 1 試料のなかで組成が連続的に変化する組成傾斜薄膜を成膜する技術。探索効率を飛躍的に向上させる。
- [5] ハイスループット実験：多数のサンプルを短時間で自動的に合成・評価できる実験手法。従来の手法に比べて大幅な時間短縮とデータ量拡大を実現する。
- [6] 組成傾斜薄膜：単一の基板上で組成が連続的に変化する薄膜。1 枚の試料から複数の組成情報を取得でき、効率的な物性評価が可能。
- [7] 機械学習モデル：大量の実験データを基にパターンを学習し、新たな材料の特性を予測するアルゴリズム。材料探索に広く応用されつつある。
- [8] スケール則解析：物理量の相関関係をスケーリング則に基づいて解析する手法。異常ホール効果の寄与要因（内因性・外因性）を切り分けるのに有効。
- [9] スキュー散乱：電子が不純物や欠陥で散乱される際に、左右非対称に散乱される現象。外因性の異常ホール効果の主要因の一つ。
- [10] 自動・自律型材料開発システム：ロボット実験装置、AI、機械学習を組み合わせ、材料合成・評価・解析を自動で繰り返すシステム。次世代のマテリアルズ・インフォマティクスの方向性。
- [11] 高スピン分極率材料：電子伝導が特定スピン方向に偏る材料。スピントロニクス素子に利用すると高効率なスピン注入が可能。
- [12] 高磁気異方性材料：磁化の向きが特定方向に強く固定される性質を持つ材料。高密度磁気記録や MRAM（磁気抵抗メモリ、電源が切れてもデータが消えない記録媒体）に重要。
- [13] 低ダンピング材料：スピン運動が減衰しにくい材料。スピン波デバイスや高速磁気メモリで性能向上が期待される。

本件に関するお問い合わせ先

研究内容について	NIMS 磁性・スピントロニクス材料研究センター 磁気機能デバイスグループ グループリーダー 桜庭 裕弥（さくらば ゆうや） E-mail: SAKURABA.Yuya@nims.go.jp TEL: 029-859-2708 URL: https://www.nims.go.jp/mmu/mmg/
報道・広報について	NIMS 国際・広報部門 広報室 〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1 E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017
	科学技術振興機構 広報課 〒102-8666 東京都千代田区四番町 5 番地 3 E-mail: jstkoho@jst.go.jp TEL: 03-5214-8404, FAX: 03-5214-8432
支援事業について	科学技術振興機構 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 安藤 裕輔（あんどう ゆうすけ） 〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町 E-mail: crest@jst.go.jp

NIMS とは？

NIMS（ニムス）は、国内で唯一、物質・材料科学の研究に特化した国立研究開発法人です。

世界を構成する様々な「物質」。その中で私たちの生活を支えているのが「材料」です。その材料も、大きくは有機・高分子材料、無機材料に分類でき、無機材料はさらに金属材料とセラミックス材料とに分けられます。石器時代から産業革命を経て現代まで、人類の発展はこの材料の進歩とともにありましたが、近年では、地球規模の環境や資源問題の解決手段のひとつとしても注目が高まっています。NIMS はその物質・材料に関する研究に特化した国立研究開発法人として、「材料で、世界を変える」をテーマに、未来を拓く物質・材料の研究に日々取り組んでいます。

【NIMS を掴む参考ページ】

NIMS はこんな研究所！ <https://www.nims.go.jp/nims/introduction.html>

NIMS ビジョン <https://www.nims.go.jp/nims/profile.html#vision>