

理論計算によるホイスラー合金の包括的データベースを創出

格子振動安定性や磁性を含む多面的な物性情報を公開

NIMS は、スーパーコンピュータ「富岳」などを用いた理論計算で、さまざまな機能性を発現することで注目されているホイスラー合金約 28,000 種を解析し、磁性・電子構造・格子振動安定性（フォノン安定性）を含む 10 万件超の物性情報を収録した包括的データベースを構築しました。従来見落とされていたフォノン安定性を含む多面的な指標で総合評価を行い、室温以上で安定な磁性合金およそ 600 種を新たに特定し、そのうち 47 種は高密度記録やスピントロニクス素子として注目される「補償フェリ磁性体」候補であることを明らかにしました。本研究で得られた計算データはウェブ上で一般公開しており、機械学習による新材料探索の加速につながると期待されます。本成果は Acta Materialia 誌に 2025 年 9 月 15 日に掲載されました。

研究成果の概要

■ 従来の課題

ホイスラー合金は、3 種類以上の元素で構成される規則構造や不規則構造を持ち、その組み合わせによって半導体や磁性体など多彩な特性を示すため、スピントロニクスや熱電変換デバイスといった幅広い分野への応用が期待されています。近年では、計算機シミュレーションや機械学習を使って優れた特性を持つ組成を探す研究が活発に進められています。ところが、これまでの理論研究は探索の範囲が限られていたうえに、結晶の安定性の評価が不十分でした。その結果、計算で有望とされた組成が、実際の合成では必ずしも安定せず実用化に至らない例も報告されています。こうした背景から、結晶安定性をより正確に予測できる、大規模かつ多面的なデータベースの構築が求められていました。

■ 成果のポイント

今回、NIMS の研究チームは、スーパーコンピュータ「富岳」などを活用し、3 元系規則ホイスラー合金約 28,000 組成（図 1 左参照）を対象に網羅的な第一原理計算を行いました。特に、原子一つ一つの動きを扱う必要があり、計算コストの高さから従来は十分に扱えなかったフォノン（格子振動）安定性を加えて評価することで、結晶の安定性をこれまで以上に正確に予測できるようになりました。さらに、複数の代表的なスピン配列（スピンの向き）を考慮して磁気的性質や電子状態を計算し、キュリー温度（物質が磁性を失う温度）も含めて解析した結果、室温以上で安定と予測される磁性合金を約 600 種類特定しました。その中には全体の磁化が打ち消し合う「補償フェリ磁性体」候補 47 種類も含まれており、一部は大きな異常ホール効果や異常ネルンスト効果といったユニークな物性を示す可能性があることも明らかになりました。本研究で得られた 10 万件超の計算データは専用のウェブページで公開しており、誰でもアクセス・ダウンロードが可能です。

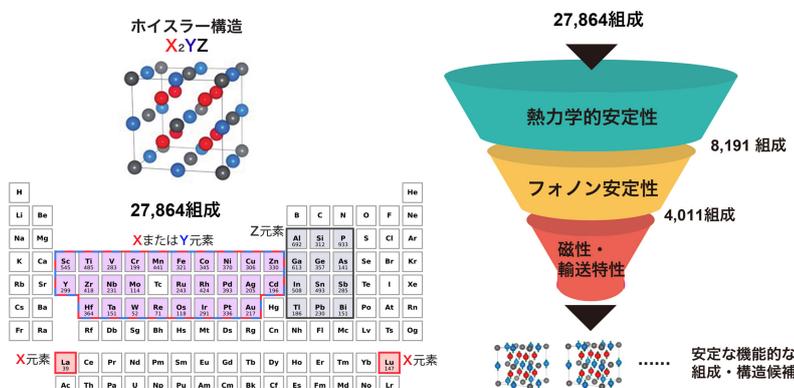


図 1 理論計算によってフォノン安定性・電子状態・磁性・輸送特性を含む大規模データベースを創出。

■ 将来展望

今後は、本研究で構築した大規模データベースを活用し、安定性や物性を高精度に予測できる機械学習モデルの開発を進めていきます。これにより、従来手法では探索が困難であった4元系ホイスラー合金や不規則合金といった広大な材料空間に対しても効率的な予測が可能となります。そして、高性能かつ安定なスピントロニクス材料や熱電変換材料の発見が大きく加速すると期待されます。

■ その他

- 本研究は、NIMS 磁性・スピントロニクス材料研究センター 磁性理論グループの只野央将グループリーダー、XIAO Enda (シャオ・エンダ) ポスドク研究員からなる研究チームによって、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事業「データ創出・活用型磁性材料研究拠点」(JPMXP1122715503) および文部科学省 スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新」(JPMXP1020230327) の一環として行われました。
- 本研究成果は、2025年9月15日にActa Materialia誌にて掲載されました。

研究の背景

ホイスラー合金は X_2YZ や XYZ などの組成で表される物質群であり、構成元素 X, Y, Z を変えることで電子材料、磁性材料、そして熱電材料など多種多様な機能性を示すことから、長年にわたり活発に研究が行われてきました。これまでは既知の機能性ホイスラー合金を基盤とし、その元素を部分的に置換することで性能向上を狙う実験的研究が主流でした。一方、近年では第一原理計算^[1]によって広大な探索空間を網羅的に探索し、所望の磁性や輸送特性を示す合金を効率的に見出す試みが進められています。さらに、計算データや実験データを活用し、機械学習モデルと組み合わせたデータ駆動型の材料探索にも大きな期待が寄せられています。しかし、従来の理論研究にはいくつかの課題がありました。多くの計算はエネルギーに基づく熱力学的安定性のみを評価しており、計算コストの高いフォノン^[2]の安定性を考慮していませんでした。そのため、計算上は高性能と予測されたにもかかわらず、実際の合成では必ずしも安定せず実用化に至らない事例が報告されています。加えて、既存の公開データベースに登録されているホイスラー合金の組成は限られており、さらにキュリー温度^[3]や輸送係数といった機能材料探索に不可欠な情報が欠落しています。このことが、データ駆動アプローチによる安定かつ高性能なホイスラー合金の効率的探索を妨げる大きな要因となっていました。

研究内容と成果

NIMSは、3元系の規則ホイスラー合金27,865組成を対象に網羅的な第一原理計算を実施し、過去最大規模となる包括的なホイスラー合金データベースを構築しました。主な成果は以下の通りです。

- スーパーコンピュータ「富岳」を用いてフォノンの網羅計算を行い、従来見落とされていたフォノン安定性を含めて結晶安定性を精密に評価しました。その結果、安定性の高い約4,000組成を特定しました。さらに、構成元素 X, Y, Z ごとに①熱力学的に不安定、②熱力学的には安定だがフォノン不安定、③熱力学的・フォノンとも安定の3種類に分類し、安定性マップを体系的に構築しました(それぞれ図2の円グラフ内側の灰色、

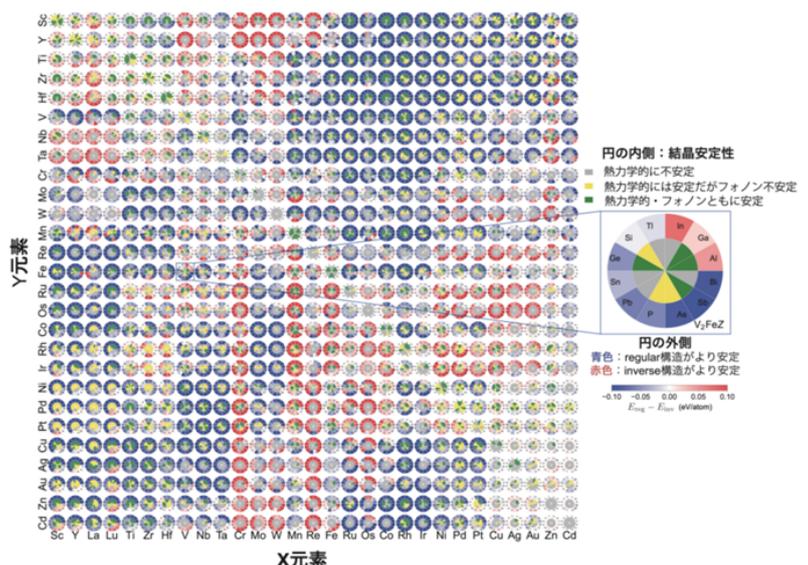


図2 X_2YZ 構造の安定性マップ。構成元素 X (横軸)、 Y (縦軸)、 Z (円周方向:12元素)ごとに安定性を可視化している。

黄色、緑色に対応します)。

- 今回の網羅計算により、 X_2YZ の組成を取る規則ホイスラー合金 (regular 構造もしくは inverse 構造) は Z 原子の第一イオン化エネルギーと原子半径が小さいほど安定性が高くなる傾向があることを示しました (図 3)。一方、 XYZ の組成を取るハーフホイスラーでは X 原子の原子半径よりも Y 原子の原子半径が大きい事が重要であり、安定なハーフホイスラーの 94%はこの条件を満たすことを明らかにしました。
- キュリー温度・ネール温度^[3]を網羅的に計算し、磁気転移温度が室温以上でかつ結晶安定性が高い約 600 組成を見出しました。その中には、全磁気モーメントがゼロに近い補償フェリ磁性体^[4]候補 47 種が含まれています。これらの候補に対してさらなる解析を行い、大きな異常ホール効果・異常ネルンスト効果^[5]を示す物質をそれぞれ 12 種・8 種見出しました。これらの材料はスピントロニクスや熱電変換デバイス応用への可能性を秘めています。
- 本研究で得られた成果は、データベースとして一般公開しました。登録件数は、エネルギー・磁性情報が約 106,000 件、フォノンデータが約 8,000 件、キュリー温度・ネール温度が約 1,200 件、異常ホール伝導率・異常ネルンスト伝導率が 670 件に及びます。URL: <https://www.nims.go.jp/group/spintheory/database/>

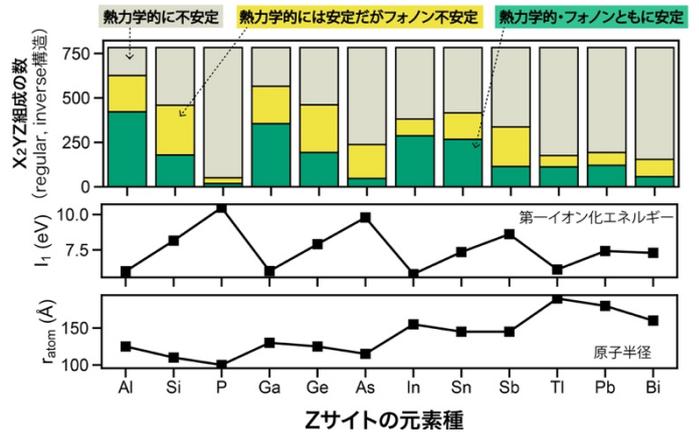


図 3 X_2YZ 組成の安定性分布と Z 元素のイオン化エネルギーおよび原子半径の比較。

今後の展開

今回構築した大規模データベースは、世界中の研究者が自由に利用できる基盤として、新しい材料探索を大きく加速させると期待されます。特に、安定性や磁気特性を高精度に予測できる機械学習モデルの開発に活用することで、従来の実験や計算では膨大な時間と労力を要していた材料探索を効率化できます。今後の展開としては、これまで十分に調べられていない 4 元系ホイスラー化合物や不規則合金といった広大な未踏の材料空間に研究が広がることが見込まれます。こうした未踏領域からも、高性能かつ安定なスピントロニクス材料や熱電変換材料を効率的に見いだせる可能性があります。さらに、今回公開したデータベースについても、登録する物性値の種類や件数を今後さらに拡充していく計画です。これにより、より多面的な観点から材料を評価できるようになり、機械学習を用いた材料探索の精度や実用性が一層高まると期待されます。これらの取り組みによって、長期的には低消費電力の電子デバイスや未利用熱エネルギーを活用するエネルギー変換システムなど、私たちの社会や生活に役立つ技術の実現につながると考えられます。ただし、新材料の合成や産業応用には依然として課題が残されており、今後は実験研究との連携や産業界との協力を通じて、データ駆動型材料探索の成果を社会実装へと結びつけていくことが重要です。

■ 掲載論文

題目	High-throughput computational screening of Heusler compounds with phonon considerations for enhanced material discovery
著者	Enda Xiao, Terumasa Tadano
雑誌	Acta Materialia
DOI	10.1016/j.actamat.2025.121312
掲載日時	2025 年 9 月 15 日

■ 用語解説

- [1] **第一原理計算**：原子や電子の挙動を経験的なパラメータに依存せず、量子力学の基本原理に基づいて計算する手法。本研究では密度汎関数理論（DFT）を用いており、結晶構造、エネルギー、磁性、輸送特性などを十分な精度で予測できる。
- [2] **フォノン**：結晶中の原子振動を量子化して表した準粒子。フォノン分散やフォノン状態密度を調べることで、熱伝導率や電気伝導への寄与を議論できるほか、結晶の動的安定性を評価できる。虚数振動数が現れる場合は「フォノン不安定」と呼ばれ、結晶構造が保てずに安定な構造へ自発的に変形してしまう。例えば、チタン酸バリウム(BaTiO_3)は高温では立方晶構造をとるが、室温ではフォノン不安定性のため自発的に正方晶構造へと変化する。
- [3] **キュリー温度・ネール温度**：磁気秩序の消失温度。強磁性体やフェリ磁性体が常磁性体に転移する温度をキュリー温度と呼ぶ。一方、反強磁性体が常磁性体に転移する温度はネール温度と呼ばれる。
- [4] **補償フェリ磁性体**：異なるサブ格子に存在する磁気モーメントが反平行に揃い、全体としてほぼ打ち消し合うフェリ磁性体。強磁性体と反強磁性体の性質を併せ持ち、高密度記録やスピントロニクス素子において注目されている。
- [5] **異常ホール効果(AHE)・異常ネルンスト効果(ANE)**：磁性体における輸送現象であり、電子バンドのトポロジーやベリー曲率と深く関係している。外部磁場を加えなくても、電場と垂直方向に電流が生じたり（AHE）、温度勾配と垂直方向に電圧が発生したり(ANE)する。大きな AHE や ANE を示す材料は、スピントロニクスデバイスや熱電変換応用などの観点から注目されている。

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 グループリーダー 只野 央将 E-mail: Tadano.Terumasa@nims.go.jp TEL: 029-859-2332 URL: https://www.nims.go.jp/group/spintheory/ja-jp/
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

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>