



2025 年 11 月 20 日

NIMS（国立研究開発法人物質・材料研究機構）／国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）

組成傾斜薄膜に対応した AI ベース自律材料探索システムを開発

～最高性能を示す新しい磁気機能材料薄膜の高効率な開拓に成功～

NIMS は、1 つの試料から膨大な材料データを獲得できる「組成傾斜薄膜」に対し、データ解析や AI による最適組成予測を実行するプログラムを開発しました。これを用いた磁性組成傾斜薄膜の自律材料探索により、次世代磁気センサ等の応用で有望な巨大な異常ホール効果を示す新しい磁性材料を発見しました。

本研究成果は、11月19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

AI と自動実験を組み合わせた自律材料探索は、革新的な新材料を効率的に発見できる手法として注目されています。しかし、デバイス応用で重要な薄膜材料では、多数の組成を同時に探索できる「コンビナトリアル成膜手法」を自律材料探索に適用するための最適化プログラムがこれまで存在しませんでした。特に、組成が連続的に変化する「組成傾斜薄膜」から得られる大量のデータを自動解析し、次の実験条件を自律的に決定する仕組みの整備が課題でした。

■成果のポイント

研究チームは、組成傾斜薄膜に適した AI 最適化手法（ベイズ最適化：データから次に試す条件を賢く選ぶ方法）を開発し、NIMS 主導の自動自律実験用オープンソースソフトウェア「NIMO」に実装しました。これにより、実験と解析・予測を自動で繰り返すクローズドループを構築し、多数の試料を一度に評価しながら効率的に材料探索を進めることが可能になりました。実証として、Fe-Co-Ni-(Ta,W,Ir)（鉄-コバルト-ニッケル-（タンタル、タングステン、イリジウム））系の 5 元系薄膜を対象に異常ホール効果の最大化を目指した探索を行い、室温成膜の磁性薄膜として報告例の中で最大級に匹敵する異常ホール抵抗率（ $10.9 \mu\Omega\cdot\text{cm}$ ）を実現する新規アモルファス薄膜 $\text{Fe}_{44.9}\text{Co}_{27.9}\text{Ni}_{12.1}\text{Ta}_{3.3}\text{Ir}_{11.7}$ を見出しました（図 1）。

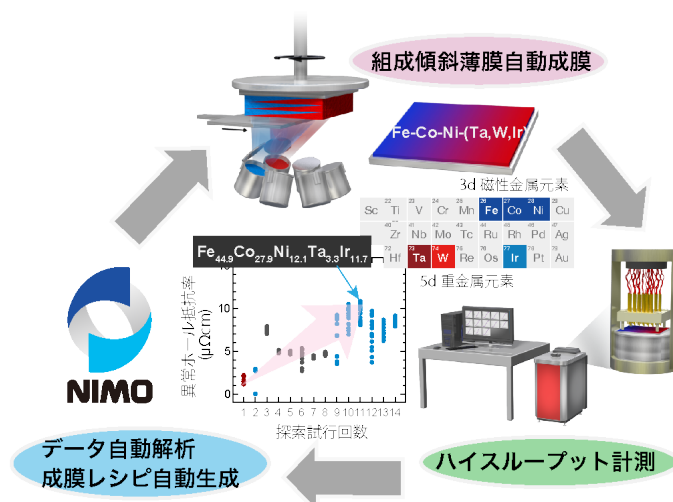


図 1： NIMO を用いて、組成傾斜薄膜の作製とハイスループット計測を結び、実験と解析を自動で繰り返す材料探索（クローズドループ）を実現しました。

■ 将来展望

今後は、さらなる多元組成傾斜や成膜条件を同時に最適化できるアルゴリズムの開発、ならびに試料搬送ロボットの導入による完全自動化を進めます。さらに、本プログラムは異常ホール効果以外の特性最適化にも応用可能であり、コンビナトリアル成膜と機械学習を組み合わせた自律材料探索の加速を通じて、さまざまな高機能薄膜材料の創出が期待されます。

■ その他

本研究は、NIMS 磁気機能デバイスグループの遠山 諒ポスドク研究員（研究当時）、桜庭 裕弥グループリーダー、データ駆動型アルゴリズムチームの田村 亮チームリーダー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」（JPMJCR2101）、さがけ「AI・ロボットによる研究開発プロセス革新のための基盤構築と実践活用」（JPMJPR24T8）および ERATO「内田磁性熱動体プロジェクト」（JPMJER2201）、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（DX-MAG）」（JPMXP1122715503）、「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点（DX-GEM）」（JPMXP1121467561）の支援を受けています。

なお、本研究成果は 2025 年 11 月 19 日に npj Computational Materials にオンライン掲載されました。

研究の背景

機械学習^[1]や AI と自動実験を組み合わせた自律材料探索^[2]が、世界中で注目を集めています。材料合成、ロボットによる試料搬送、計測、機械学習によるデータ解析と次の合成条件の自律的決定からなるクローズドループを回すことで、所望の性能を示す材料やその合成条件を、人手を介さず高効率に発見（最適化）できると期待されています。デバイス応用で重要な薄膜材料に関して、このクローズドループをさらに高効率化するには、多数の組成を一度に探索できるコンビナトリアル成膜手法^[3]の活用が有効です。同手法により、単一基板上で材料の組成が連続的に変化する組成傾斜薄膜を一度の成膜で作製できます。組成傾斜薄膜をクローズドループに組み込めば、1 回の実験サイクルで多様な組成データが得られ、最適化プロセスの大幅な短縮が可能です。

こうした最適化実験には、組成傾斜薄膜に特化した機械学習プログラムが必要です。具体的には、組成傾斜薄膜から得られる多数のデータを自動解析し、その結果から次に組成を傾斜させる元素の組み合わせを選び、次サイクルの成膜レシピを自動生成する機能が求められます。しかし、このような実験に適した最適化プログラムは、これまで開発されていませんでした。

2025 年 9 月に、NIMS ではコンビナトリアル成膜手法を用いて、異常ホール効果^[4]を示す材料を高効率に評価できるハイスループット実験システム^[5]を開発しました。異常ホール効果とは、磁性体に電流と磁場を印加した際、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。これを利用すると、周囲の磁場変化を電圧変化として検出できます。大きな異常ホール効果を示す材料は、高感度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^[6]への応用が期待され、新材料探索が活発です。このハイスループット実験システムに組成傾斜薄膜の最適化に対応する機械学習プログラムを組み込めば、新規異常ホール材料探索の一層の高効率化と、コンビナトリアル成膜×機械学習による超高効率な自律材料探索の実現に向け、大きく前進できます。

研究内容と成果

本研究では、組成傾斜薄膜に適したベイズ最適化プログラム^[7]を開発し、自律実験のためのオープンソースソフトウェア「NIMO」^[8]に標準実装しました。まず、組成情報から異常ホール効果を予測する機械学習モデルを構築し、その予測結果に基づいて次に組成を傾斜させるのに適した 2 元素を選定する最適化手法を確立しました。さらに、ハイスループット実験システムの計測結果を自動解析して異常ホール効果を算出するプログラムと、最適化結果から次サイクルの成膜レシピを自動生成するプログラムを開発し、①データ解析、②次材料候補の予測、③成膜レシピ生成という、従来は研究者が行ってきた 3 つの役割を

NIMO に統合しました（図 2）。これにより、試料搬送を除いて人手を介さずに実験を実行できるクローズドループを構築し、高効率な自律材料探索を実現しました。構築した自律材料探索クローズドループの実証として、新規 5 元薄膜に対して異常ホール効果を最大化するための組成最適化を行いました。材料探索空間は、室温強磁性元素の鉄（Fe）、コバルト（Co）、ニッケル（Ni）に、重元素のタンタル（Ta）、タングステン（W）、イリジウム（Ir）のうち 2 元素を組み合わせた 5 元素系の多元合金です。設定した組成比の離散化を考慮すると、探索候補は 18,594 種類に上ります。コンビナトリアルスパッタ成膜装置を用い、5 元素のうち 2 元素（Ta、W、Ir の内の 2 元素）の組成を変化させた組成傾斜薄膜を熱酸化シリコン（Si）基板上に室温で成膜しました。最適化プロセスの初期 3 サイクルは、学習データ取得として、NIMO がランダムに提案した条件で実験し、異常ホール抵抗率のデータを蓄積しました。4 サイクル目以降は組成傾斜薄膜向けベイズ最適化を適用し、自動生成された成膜レシピに基づいて成膜と評価を繰り返しました。合計 18 サイクル（234 組成成分）の実験の結果、最大の異常ホール抵抗率 $10.9 \mu\Omega\cdot\text{cm}$ （ Ω は電気抵抗の単位、読みはオーム）を示す $\text{Fe}_{44.9}\text{Co}_{27.9}\text{Ni}_{12.1}\text{Ta}_{3.3}\text{Ir}_{11.7}$ の組成を得ました（図 3）。この値は、室温成膜の磁性薄膜として報告された中で最大級に匹敵する水準です。さらに、X 線回折測定により、当該薄膜が結晶構造をもたない非晶質（アモルファス）^[9]であることを確認しました。非晶質の多元系材料における異常ホール効果の理論予測は困難であることから、本自律実験システムによって効率的に到達できた最適組成と位置づけられます。以上により、開発した

組成傾斜薄膜用ベイズ最適化を組み込んだクローズドループ実験により、産業応用上、有用な大きな異常ホール効果を示す新規室温成膜 5 元アモルファス薄膜材料を発見し、その組成を高効率に最適化することに成功しました。

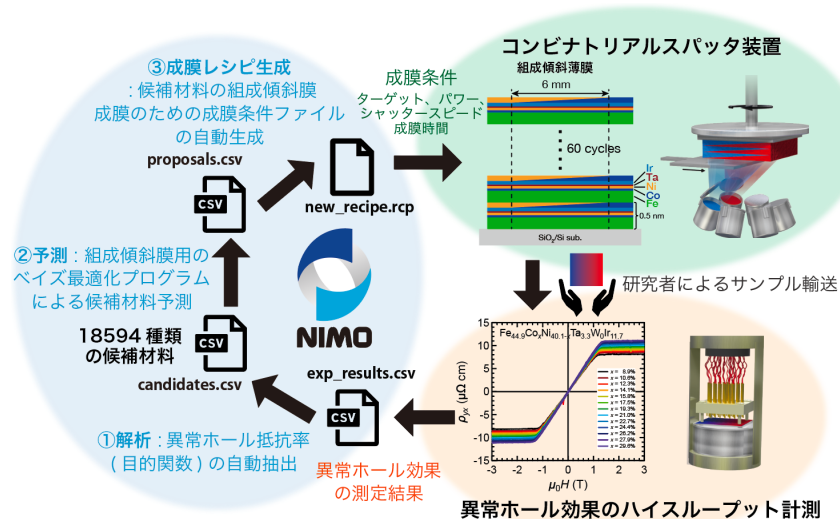


図 2 コンビナトリアル成膜とハイスループット異常ホール効果計測、NIMO 実装による自律材料探索システムの模式図。NIMO は①解析（異常ホール抵抗率の自動抽出）、②予測（組成傾斜用ベイズ最適化による候補選定）、③成膜レシピ生成（次サイクル条件の自動作成）の三機能を統合し、実験のクローズドループ化と自律化を実現した。

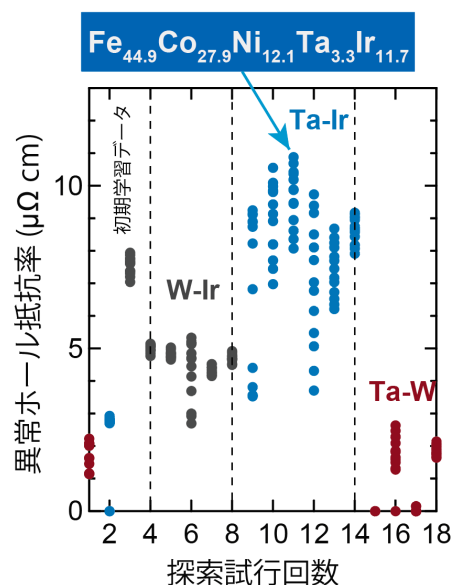


図 3 自律実験による異常ホール材料探索の結果。ベイズ最適化を用いた反復実験により、異常ホール抵抗率が向上し、最終的に $\text{Fe}_{44.9}\text{Co}_{27.9}\text{Ni}_{12.1}\text{Ta}_{3.3}\text{Ir}_{11.7}$ で最大値 $10.9 \mu\Omega\cdot\text{cm}$ を達成した。

今後の展開

本成果は、組成傾斜薄膜を用いたコンビナトリアル実験に適した最適化プログラムの開発と、それを組み込んだ自律材料探索のクローズドループ実験により、大きな異常ホール効果を示す新規薄膜の組成最適化を実証したものです。今後は、さらに多元素の組成を最適化できるプログラムの開発や、組成以外の成膜条件も含めた最適化、試料搬送ロボットの導入を進め、さらなる高効率化と完全自動化を目指します。また、今回のベイズ最適化プログラムは異常ホール効果に限らず、任意の材料特性の最適化に適用可能です。コンビナトリアル成膜と機械学習を組み合わせ

た自律材料探索の実装により、高特性を示す新規薄膜材料の創出が一層加速すると期待されます。

■掲載論文

題目	Autonomous closed-loop exploration of composition-spread films for the anomalous Hall effect
著者	Ryo Toyama, Ryo Tamura, Shoichi Matsuda, Yuma Iwasaki, and Yuya Sakuraba
雑誌	npj Computational Materials
DOI	https://doi.org/10.1038/s41524-025-01828-7
掲載日	2025 年 11 月 19 日

■用語解説

- [1] 機械学習：大量の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。
- [2] 自律材料探索：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。
- [3] コンビナトリアル成膜手法：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。
- [4] 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。
- [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] 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。
- [7] バイズ最適化：過去の試行データから目的関数の確率モデルを構築し、不確実性を考慮しながら次に評価すべき点を選ぶことで、少ない試行回数で最適解を効率的に探索する手法。
- [8] NIMO：NIMS が中心となって開発する自動自律実験のためのオープンソースソフトウェア NIMS-OS（NIMS Orchestration System）。GitHub（<https://github.com/NIMS-DA/nimo>）にて公開されている。
- [9] 非晶質（アモルファス）：原子や分子が規則正しく並ばず、長距離の周期構造を持たない固体。周期構造を持たないため、理論的な物性計算が極めて困難となる。

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/
	NIMS マテリアル基盤研究センター データ駆動型アルゴリズムチーム チームリーダー

	田村 亮（たむら りょう） E-mail: TAMURA.Ryo@nims.go.jp TEL: 029-860-4948 URL: https://samurai.nims.go.jp/profiles/tamura_ryo
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 TEL: 03-3512-3531, FAX: 03-3222-2066

NIMS とは？

NIMS（ニムス）は、物質・材料科学の研究に特化した国立研究開発法人です。

エネルギー、環境、医療、インフラ、モビリティ——私たちの暮らしを支えるあらゆる技術は「物質」と「材料」で成り立っています。

NIMS はそれらの基礎・基盤研究だけでなく、成果の普及とその活用の促進まで総合的に行っています。

社会の発展は常に物質・材料科学の進歩とともにあり、いま、地球規模の環境・資源問題の解決に向けたカギとして、その重要性はいっそう高まっています。

NIMS は「材料で、世界を変える」というビジョンのもと、持続可能で豊かな社会の実現を目指して、世界最先端の研究を続けています。

【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>