ICSDを利用したマテリアルズ・インフォマティクス研究の論文報告例

2026/10

Abstract中に「ICSD」または「Inorganic Crystal Structure Database」の記載があるMaterials informatics関連の論文(2023年～2025年)を中心に、化学情報協会で独自に調査しました。
一部Copilotを利用して作成しています。

No	Title	Author	Reference	DOIリンク	ICSD利用方法	MI手法	対象材料	要約
1	Machine-learning prediction of metal sulfide photocatalysts for sacrificial hydrogen evolution under visible light irradiation	Yuichi Yamaguchi, Fuga Kakami, Ryuto Baba, Wataru Takahara, Yosuke Harashima, Tomoaki Takayama, Mikiya Fujii, Akihiko Kudo	*J. Mater. Chem. A* 2026; 14 (17): 9956–9965	https://doi.org/10.1039/d5ta06041a	スクリーニング	ML	金属硫化物光触媒	機械学習とICSDスクリーニングによる可視光水素生成用金属硫化物光触媒探索。
2	Learning Crystallographic Disorder: Bridging Prediction and Experiment in Materials Discovery	K. S. Jakob, A. Walsh, K. Reuter, and J. T. Margraf	*Adv. Mater.* 38, no. 5 (2026): e14226.	https://doi.org/10.1002/adma.202514226	学習データ	ML分類	結晶のdisorder	ICSDから結晶学的disorderを学習し実験実現性を評価。
3	Oxidation states in solids from data-driven paradigms	Yue Yin, Hai Xiao	*Chem. Sci.* (2025) **16** (42): 19917–19928.	https://doi.org/10.1039/D5SC05694B	ICSDベンチマークデータ	データ駆動+GCN	酸化状態予測	100万件超の結晶データから酸化状態を推定しICSDで妥当性検証。
4	Data-driven prediction of chemically relevant compositions in multi-component systems using tensor embeddings	Hayashi, H., Tanaka, I	*Sci Rep* **15**, 1448 (2025).	https://doi.org/10.1038/s41598-024-85062-z	ICSD組成データ	テンソル分解+RF	多元酸化物	ICSD組成データから多元酸化物の存在可能性を予測。
5	Hierarchical screening of ICSD to search for new high-conductive solid-state materials among mixed polyanionic oxohalides for sodium-ion batteries	Morkhova, Y.A., Osipov, V.T., Antonyuk, A.V. *et al.*	*J Solid State Electrochem* **29**, 3043–3050 (2025)	https://doi.org/10.1007/s10008-025-06205-4	ICSDスクリーニング	階層探索	固体電解質	Naイオン伝導体候補探索。
6	First-Principles High-Throughput Screening and Experimental Verification of III-VIB Transition Metal Chalcogenides Nonlinear Optical Crystals	Miao Song; Hongbo Huang; Baoli Gao; Yumiao Niu; Ying Wang; Daqing Yang; Bingbing Zhang	*Chem. Mater.* (2025) 37 (3): 1321–1330.	https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.4c03537	ICSDスクリーニング	第一原理HTS	NLO結晶	R非線形光学結晶候補探索。
7	Discovering virtual Na-based argyrodites as solid-state electrolytes using DFT, AIMD, and machine learning techniques	Byung Do Lee, Deepak Subhash Gavali, Heejeong Kim, Seonghwan Kim, Min Young Cho, Kyunglim Pyo, Young-Kook Lee, Woon Bae Park, Kee-Sun Sohn	*J. Mater. Chem. A* 2025; 13 (15): 10462–10474	https://doi.org/10.1039/D4TA06927G	安定性評価のための競合相(competing phases)データベース	DFT/AIMD/ML	Na固体電解質	仮想Na系アルギロダイト固体電解質の計算探索。
8	Classification of (dis)ordered structures as superionic lithium conductors with an experimental structure–conductivity database	Daniel B. McHaffie, Zachery W. B. Iton, Jadon M. Bienz, Forrest A. L. Laskowski, Kimberly A. See	*Digital Discovery* 2025; 4 (6): 1518–1533	https://doi.org/10.1039/D5DD00052A	教師データ + 候補探索DB	DL(GNN/AtomSets)	固体電解質	構造情報を用いた超イオン伝導体(Li固体電解質)の機械学習探索。
9	Predicting Anion Redox in Secondary Battery Cathode Materials with a Data-Driven Model	Nicholas S. Grundish; Brandi Ransom; Austin D. Sendek; Lenson A. Pellouchoud; Yutao Li; Evan J. Reed	*J. Phys. Chem. C* (2024) 128 (40): 16844–16853.	https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c02079	候補探索データベース	ML	電池正極	アニオンレドックス発現確率を予測。
10	XRDMatch: a semi-supervised learning framework to efficiently discover room temperature lithium superionic conductors	Zheng Wan; Zhenying Chen; Hao Chen; Yizhi Jiang; Jinhuan Zhang; Yidong Wang; Jindong Wang; Hao Sun; Zhongjie Zhu; Jinhui Zhu; Linyi Yang; Wei Ye; Shikun Zhang; Xing Xie; Yue Zhang; Xiaodong Zhuang; Xiao He; Jinrong Yang	*Energy Environ. Sci.* (2024) 17 (24): 9487–9498.	https://doi.org/10.1039/D4EE02970D	ICSD結晶構造(ラベルなしデータ)	半教師あり学習	超イオン伝導体	XRDMatchで室温Li超イオン伝導体探索。
11	Crystal structure graph neural networks for high-performance superconducting critical temperature prediction	Zhang, J., Zhong, C., Lu, X. *et al.*	*Sci. China Mater.* **67**, 3253–3261 (2024)	https://doi.org/10.1007/s40843-024-3026-8	ICSD構造	GNN	超伝導体	ICSDから高Tc超伝導体候補探索。
12	Deep learning for symmetry classification using sparse 3D electron density data for inorganic compounds	Kim, S., Lee, B.D., Cho, M.Y. *et al.*	*npj Comput Mater* **10**, 211 (2024).	https://doi.org/10.1038/s41524-024-01402-7	実験構造	PointNet/SparseCNN	無機結晶	電子密度データから空間群分類。
13	Candidate ferroelectrics via ab initio high-throughput screening of polar materials	Ricci, F., Reyes-Lillo, S.E., Mack, S.A. *et al.*	*npj Comput Mater* **10**, 15 (2024)	https://doi.org/10.1038/s41524-023-01193-3	ICSD参照	ab initio HTS	強誘電体	強誘電体候補探索。ICSDは候補の評価に利用。
14	Cataloging High-Quality Two-Dimensional van der Waals Materials with Flat Bands	J. Duan, D.-S. Ma, R.-W. Zhang, W. Jiang, Z. Zhang, C. Cui, Z.-M. Yu, Y. Yao	*Adv. Funct. Mater.* 2024, 34, 2313067.	https://doi.org/10.1002/adfm.202313067	ICSD構造データベース	HTS	2D vdW材料	ICSDから平坦バンド量子材料候補229件を抽出。
15	A novel class of multivalent ionic conductors with the La3CuSiS7 structure type: results of stepwise ICSD screening	Artem A. Kabanov, Yelizaveta A. Morkhova, Vladislav T. Osipov, Manuel Rothenberger, Tilmann Leisegang, Vladislav A. Blatov	*Phys. Chem. Chem. Phys.* (2024) 26 (3): 2622–2628.	https://doi.org/10.1039/D3CP04510B	スクリーニング	HTS+DFT	イオン伝導体	新規多価イオン伝導体候補を探索。
16	Machine-learning assisted high-throughput discovery of solid-state electrolytes for Li-ion batteries	Xingyu Guo, Zhenbin Wang, Ji-Hui Yang, Xin-Gao Gong	*Mater. Chem. A* 2024; 12 (17): 10124–10136	https://doi.org/10.1039/D4TA00721B	HTS	ML	固体電解質	機械学習による固体電解質候補探索。
17	Enhancing Superconductor Critical Temperature Prediction: A Novel Machine Learning Approach Integrating Dopant Recognition	Chengquan Zhong, Yuelin Wang, Yanwu Long, Jiakai Liu, Kailong Hu, Jingzi Zhang, Junjie Chen, Xi Lin	*ACS Appl. Mater. Interfaces* 6 November 2024; 16 (44): 60472–60481	https://doi.org/10.1021/acsami.4c11997	ICSDスクリーニング	MoE ML	超伝導体	ドーピング認識型MLによる高Tc超伝導体探索。
18	Machine learning-aided unraveling of the importance of structural features for the electrocatalytic oxygen evolution reaction on multimetal oxides based on their A-site metal configurations	Yuuki Sugawara, Xiao Chen, Ryusei Higuchi, Takeo Yamaguchi	*Energy Adv. 2023; 2 (9): 1351–1356*	https://doi.org/10.1039/d3ya00238a	学習データ(結晶構造特徴量の取得)	ML	多元金属酸化物(ABOx型酸化物OER触媒)	構造情報と機械学習を用いて多元金属酸化物OER触媒の活性支配因子を解明。
19	Materials synthesizability and stability prediction using a semi-supervised teacher-student dual neural network	Daniel Gleaves, Nihang Fu, Edirisuriya M. Dilanga Siriwardane, Yong Zhao, Jianjun Hu	*Digital Discovery* 2023; 2 (2): 377–391	https://doi.org/10.1039/D2DD00098A	学習+未ラベル	半教師ありDL	材料探索	合成可能性／安定性予測AI。
20	Ideal Vacuum-Based Efficient and High-Throughput Computational Screening of Type II Heterojunctions	Ling Hua, Zhenyu Li	*ACS Appl. Mater. Interfaces* (2023) 15 (49): 57760–5776	https://doi.org/10.1021/acsami.3c11082	ICSD材料データベース	HTS	ヘテロ接合	ICSDスクリーニングでType IIヘテロ接合候補を探索。

21	Predicting Synthesizability using Machine Learning on Databases of Existing Inorganic Materials	Ruiming Zhu, Siyu Isaac Parker Tian, Zekun Ren, Jiali Li, Tonio Buonassisi, Kedar Hippalgaonkar	*ACS Omega* (2023) 8 (9): 8210–8218.	https://doi.org/10.1021/acsomega.2c04856	学習データ	ML / DL	無機材料	機械学習で材料の合成可能性を予測。
22	Composition Based Oxidation State Prediction of Materials Using Deep Learning Language Models	N. Fu, J. Hu, Y. Feng, G. Morrison, H.-C. zur Loye, J. Hu	*Adv. Sci.* 2023, 10, 2301011.	https://doi.org/10.1002/advs.202301011	ICSD学習データ	BERT	酸化状態予測	組成のみから酸化状態を予測。
23	Prediction of large magnetic moment materials with graph neural networks and random forests	Sékou-OumarKaba, Benjamin Groleau-Paré, Marc-Antoine Gauthier, A.-M. S. Tremblay, Simon Verret, Chloé Gauvin-Ndiaye	*Phys. Rev. Materials* **7**, 044407 (2023)	https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.7.044407	ICSDスキャン	GNN/RF	磁性材料	高磁気モーメント材料候補探索。
24	A database of experimentally measured lithium solid electrolyte conductivities evaluated with machine learning	Hargreaves, C.J., Gaultois, M.W., Daniels, L.M. *et al.*	*npj Comput Mater* **9**, 9 (2023)	https://doi.org/10.1038/s41524-022-00951-z	ICSD比較母集団	CrabNet	固体電解質	Li固体電解質データベース構築と伝導度分類。
25	Recommender system for discovery of inorganic compounds.	Hayashi, H., Seko, A. & Tanaka, I.	*npj Comput Mater* **8**, 217 (2022)	https://doi.org/10.1038/s41524-022-00899-0	ICSD登録組成（教師データ）	推薦システム	無機化合物	推薦システムによる新規無機化合物探索。