

ICSDを利用したMI研究の論文報告例

2019.11 化学情報協会 調べ

1. Neural network based classification of crystal symmetries from x-ray diffraction patterns
Pascal Marc Vecsei, Kenny Choo, Johan Chang, Titus Neupert, *Phys. Rev. B*, 99, 245120 (2019)
DOI: [10.1103/PhysRevB.99.245120](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.245120)
Artificial neural networks に基づいた機械学習アルゴリズムによる、結晶系と空間群による粉末 X 線回折パターン (XRD) の分類.
2. Fast and interpretable classification of small X-ray diffraction datasets using data augmentation and deep neural networks
Felipe Oviedo, Zekun Ren, Shijing Sun, Charles Settens, Zhe Liu, Noor Titan Putri Hartono, Savitha Ramasamy, Brian L. DeCost, Siyu I. P. Tian, Giuseppe Romano, Aaron Gilad Kusne & Tonio Buonassisi, *Computational Materials*, **2019**, 5, 60 DOI: [10.1038/s41524-019-0196-x](https://doi.org/10.1038/s41524-019-0196-x)
薄膜の XRD パターンから結晶学的次元と空間群を予測する機械学習.
3. Computational Discovery of Inorganic Electrides from an Automated Screening
Qiang Zhu, Timofey Frolov, Kamal Choudhary, *Matter*, 1 (5), **2019**, 1293-1303
DOI: [10.1016/j.matt.2019.06.017](https://doi.org/10.1016/j.matt.2019.06.017)
エレクトライド材料開発のための、結晶内の空隙とエネルギー空間内の interstitial electron での分布を定量化するための自動計算スクリーニングスキーム.
4. Data mining new energy materials from structure databases
Lei Zhang, Zhiqiao Chen, Jing Su, Jingfa Li, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 107, (2019), 554-567 DOI: [10.1016/j.rser.2019.03.036](https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.03.036)
ICSD や CSD に収録された構造を基にした、色素増感太陽電池やペロブスカイト太陽電池等の新エネルギー材料のデータマイニング研究の最近の進歩のレビュー.
5. Possibilities of Neural Network Powder Diffraction Analysis Crystal Structure of Chemical Compounds
Zaloga, Alexander N.; Stanovov, Vladimir V.; Bezrukova, Oksana E.; Dubinin, Petr S.; Yakimov, Igor S., *Journal of Siberian Federal University. Chemistry.*, **2019**, 12 (2)
DOI: [10.17516/1998-2836-0118](https://doi.org/10.17516/1998-2836-0118)
Convolutional artificial neural networks (ANN)を用いて、粉末回折パターンから結晶構造の結晶系や空間群を予測.
6. High-Throughput Computational Assessment of Previously Synthesized Semiconductors for Photovoltaic and Photoelectrochemical Devices
Korina Kuhar, Mohnish Pandey, Kristian S. Thygesen, and Karsten W. Jacobsen, *ACS Energy Letters*, **2018** 3 (2), 436-446 DOI: [10.1021/acseenergylett.7b01312](https://doi.org/10.1021/acseenergylett.7b01312)
計算スクリーニングを使用して、光起電または光電気化学デバイスの光吸収体の可能性材料を特定.

7. Materials screening for the discovery of new half-Heuslers: machine learning versus ab initio methods
Fleur Legrain, Jesús Carrete, Ambroise van Roekeghem, Georg K.H. Madsen, and Natalio Mingo, *J. Phys. Chem. B*, **2018**, 122, 2, 625–632 DOI: [10.1021/acs.jpcc.7b05296](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b05296)
ランダムフォレストによる分類を使用して、実験的に報告された化合物のみをトレーニングセットとして使用して、ハーフヘイスラー化合物の安定性を予測.
8. Machine learning material properties from the periodic table using convolutional neural networks
Xiaolong Zheng, P. Zheng, R. Zhang, *Chem. Sci.*, **2018**, 9, 8426-8432 DOI: [10.1039/c8sc02648c](https://doi.org/10.1039/c8sc02648c)
フルヘイスラー化合物の安定性をICSDのX₂YZの化合物からCNNを使って予測.
9. Physical descriptor for the Gibbs energy of inorganic crystalline solids and prediction of temperature-dependent materials chemistry
Christopher J. Bartel, Samantha L. Millican, Ann M. Deml, John R. Rumpitz, William Tumas, Alan W. Weimer, Stephan Lany, Vlada Stevanović, Charles B. Musgrave & Aaron M. Holder, *Nature Communications*, 9, 4168 (2018) DOI: [10.1038/s41467-018-06682-4](https://doi.org/10.1038/s41467-018-06682-4)
無機結晶のGibbs生成エネルギーと温度依存型材料化学の予測のための記述子.材料の合成の可能性と安定性に対する温度と組成の影響.
10. Machine learning modeling of superconducting critical temperature
Valentin Stanev, Corey Oses, A. Gilad Kusne, Efrain Rodriguez, Johnpierre Paglione, Stefano Curtarolo & Ichiro Takeuchi, *Computational Materials*, 4, Article number: 29 (2018)
DOI: [10.1038/s41524-018-0085-8](https://doi.org/10.1038/s41524-018-0085-8)
新しい超伝導体の候補を、非銅酸化物および非鉄ベースの酸化物から特定.
11. Systematic search for two-dimensional ferromagnetic materials
Yu Zhu, Xianghua Kong, Trevor David Rhone, and Hong Guo, *Phys. Rev. Materials*, 2, 081001(R) (2018)
DOI: [10.1103/PhysRevMaterials.2.081001](https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.081001)
2次元(2D)強磁性材料(2DFM)の体系的なマテリアルズインフォマティクス検索
12. Germanene and stanene on two-dimensional substrates: Dirac cone and Z₂ invariant
Zeyuan Ni, Emi Minamitani, Yasunobu Ando, and Satoshi Watanabe, *Phys. Rev. B* 96, 075427 (2017)
DOI: [10.1103/PhysRevB.96.075427](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.075427)
ab initio 密度汎関数理論と無機結晶構造データベースのデータマイニングの組み合わせにより、CdI₂タイプの単分子層材料がゲルマネンまたはスタネンの適切な基板であることが判明したとの報告.
13. Comparison of approximations in density functional theory calculations: energetics and structure of binary oxides
Yoyo Hinuma, Hiroyuki Hayashi, Yu Kumagai, Isao Tanaka, and Fumiyasu Oba, *Phys. Rev. B*, **2017**, 96, 094102 DOI: [10.1103/PhysRevB.96.094102](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.094102)
ICSDのプロトタイプを利用.
14. Screening for Cu-S based thermoelectric materials using crystal structure features

Rui-zhi Zhang, Kan Chen, Baoli Du, and Michael J. Reece, *J. Mater. Chem. A*, **2017**, 5, 5013-5019

DOI: [10.1039/C6TA10607B](https://doi.org/10.1039/C6TA10607B)

Cu-S ベースの化合物について、結晶構造の特徴に基づくハイスループットスクリーニングを使用して、ICSD から 13 の化合物を潜在的な熱電材料として特定。

15. How Chemical Composition Alone Can Predict Vibrational Free Energies and Entropies of Solids

Fleur Legrain, Jesús Carrete, Ambroise van Roekeghem, Stefano Curtarolo, and Natalio Mingo, *Chem.*

Mater. **2017**, 29, 15, 6220–6227 DOI: [10.1021/acs.chemmater.7b00789](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b00789)

機械学習技術を使用して、ICSD 内の結晶性化合物の振動自由エネルギー(Fvib)とエントロピー(Svib)を効率的に予測。

16. The optimal one dimensional periodic table: A modified Pettifor chemical scale from data mining

Henning Glawe, Antonio Sanna, E K U Gross and Miguel A L Marques, *New Journal of Physics*, 18 (9),

article id. 093011 (2016) DOI: [10.1088/1367-2630/18/9/093011](https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/9/093011)

ICSD の実験データと統計分析から、化学元素 A が特定の構造内の別の B に置き換えられる可能性を判断。

17. The thermodynamic scale of inorganic crystalline metastability.

Wenhao Sun, Stephen T. Dacek, Shyue Ping Ong, Geoffroy Hautier, Anubhav Jain, William D. Richards, Anthony C. Gamst, Kristin A. Persson, and Gerbrand Ceder, *Science Advances*, **2016**, 2 (11), e1600225

DOI: [10.1126/sciadv.1600225](https://doi.org/10.1126/sciadv.1600225)

ICSDに報告されている結晶の準安定相の熱力学的スケールを定量化するためのデータマイニング研究。

18. On the Way to New Possible Na-Ion Conductors: The Voronoi-Dirichlet Approach, Data Mining and Symmetry Considerations in Ternary Na Oxides.

Falk Meutzner, Dr. Wolfram Münchgesang, Natalya A. Kabanova, Dr. Matthias Zschornak, Dr. Tilmann Leisegang, Prof. Vladislav A. Blatov, Prof. Dirk C. Meyer, *Chemistry a European Journal*, **2015**, 21 (46),

16601-16608 DOI: [10.1002/chem.201501975](https://doi.org/10.1002/chem.201501975)

Naイオン電池の固体イオン伝導体の候補物質を探すためのデータマイニング。

19. Data-mined similarity function between material compositions

Lusann Yang and Gerbrand Ceder, *Phys. Rev. B*, **88**, 224107 (2013), DOI: [10.1103/PhysRevB.88.224107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.224107)

材料組成の類似性を評価するための新しい方法。イオン置換類似性を利用してデータマイニング。

20. Possible high-temperature superconductors predicted from electronic structure and data-filtering algorithms

M. Klintonberg, O. Eriksson, *Computational Materials Science*, 67 (2013) 282–286

DOI: [10.1016/j.commatsci.2012.08.038](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.08.038)

電子構造から超伝導体の新しい可能性を予測するデータマイニング/データフィルタリング法。

21. High-throughput computational screening of new Li-ion battery anode materials

Scott Kirklin, Bryce Meredig, Chris Wolverton, *Advanced Energy Materials*, **2013**, 3 (2), 252-262

DOI: [10.1002/aenm.201200593](https://doi.org/10.1002/aenm.201200593)

新しいLiイオン電池負極材高をDFTとGCLPからハイスループット計算アプローチによりスクリーニング。

22. Novel Approach for Clustering Zeolite Crystal Structures.
M. Lach-hab, S. Yang, I. I. Vaisman, E. Blaisten-Barojas, *Molecular Informatics*, **2010**, 29 (4), 297-301
DOI: [10.1002/minf.200900072](https://doi.org/10.1002/minf.200900072)
ゼオライトの結晶構造タイプをクラス分けするための機械学習.
23. Machine learning study of the heulandite family of zeolites
Shujiang Yang, Mohammed Lach-hab, Estela Blaisten-Barojas, Xiang Li, Vicky L. Karen, *Microporous and Mesoporous Materials*, 130, Issues 1–3, **2010**, 309-313 DOI: [10.1016/j.micromeso.2009.11.027](https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2009.11.027)
ゼオライト結晶の結晶学的データの機械学習クラスタリング分析に基づいて、HEUフレームワークタイプに属するゼオライトが2つではなく3つの鉱物グループに分けられることを示した報告.
24. Data mining and accelerated electronic structure theory as a tool in the search for new functional materials
C. Ortiz, O. Eriksson, M. Klintonberg, *Computational Materials Science*, 44 (4), **2009**, 1042-1049
DOI: [10.1016/j.commatsci.2008.07.016](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.07.016)
データマイニングにより、電離放射線の検出器材料として使用できる可能性のある 136 の新規材料を予測.
25. Machine learning approach for structure-based zeolite classification *Microporous and Mesoporous Materials*
D. Andrew Carra, Mohammed Lach-haba, Shujiang Yanga, Iosif I. Vaismana,b, Estela Blaisten-Barojas,
Microporous and Mesoporous Materials, 117, 1–2, **2009**, 339-349 DOI: [10.1016/j.micromeso.2008.07.027](https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2008.07.027)
22 種類の鉱物と 13 種類のフレームワークに分類するゼオライト構造予測子(ZSP)の報告.