

ICSDを利用したMI研究の論文報告例

2022.9 化学情報協会 調べ

Abstract中に、「ICSD」または「Inorganic Crystal Structure Database」の記載があるMaterials informatics関連の論文を、化学情報協会ですべて調査しました。



1. Machine-learning correction to density-functional crystal structure optimization
Robert Hussein, Jonathan Schmidt, Tomás Barros, Miguel A. L. Marques, and Silvana Botti
MRS Bulletin, **47**, 765–771 (2022). DOI: <https://doi.org/10.1557/s43577-022-00310-9>
格子パラメーターの予測に対し、一般的な交換相関汎関数Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 近似とその変形PBEsolのパフォーマンスを調査し、機械学習を使用してその精度を高める方法。
2. Crystal structure guided machine learning for the discovery and design of intrinsically hard materials
Russlan Jaafreh, Tamer Abuhmed, Jung-Gu Kim, Kotiba Hamad
Journal of Materiomics, **8**, 3, 678-684 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2021.11.004>.
さまざまな化合物の固有の硬度を予測するための機械学習モデル。
3. A deep crystal structure identification system for X-ray diffraction patterns
Chakraborty, A., Sharma, R., *Vis Comput* **38**, 1275–1282 (2022).
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00371-021-02165-8>
畳み込みニューラル ネットワークの拡張機能を使用して、回折パターンから結晶構造を予測。XRDパターンから結晶サイズと空間群を予測する方法を提案。
4. Powder X-Ray Diffraction Pattern Is All You Need for Machine-Learning-Based Symmetry Identification and Property Prediction
Byung Do Lee, Jin-Woong Lee, Woon Bae Park, Joonseo Park, Min-Young Cho, Satendra Pal

Singh, Myoung-ho Pyo, Kee-Sun Sohn, *Adv. Intell. Syst.* 2022, 4, 2200042

DOI: <https://doi.org/10.1002/aisy.202200042>

粉末XRDパターンからの機械学習主導の材料特性予測。

5. Lattice Thermal Conductivity: An Accelerated Discovery Guided by Machine Learning
Russlan Jaafreh, Yoo Seong Kang, and Kotiba Hamad, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2021, 13, 48, 57204–57213, DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.1c17378>
周期表、プロトタイプ構造、および RF ベースのモデルを使用して、膨大な数の化合物の LTC-温度挙動を予測した報告。
6. Adaptive Learning Framework in Prediction and Validation of Gibbs Free Energy for Inorganic Crystalline Solids
Jonghoon Yoon, Eunseong Choi, and Kyoungmin Min, *J. Phys. Chem. A*, 2021, 125, 46, 10103–10110
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05292>
機械学習モデルでギブズ自由エネルギー情報がわからない約4万のICSDの材料を予測。
7. Automated prediction of lattice parameters from X-ray powder diffraction patterns
Sathya R. Chitturi, Daniel Ratner, Richard C. Walroth, Vivek Thampy, Evan J. Reed, Mike Dunne, Christopher J. Tassone and Kevin H. Stone, *Journal of Applied Crystallography*, 54, 6, 1799–1810 (2021)
DOI: <https://doi.org/10.1107/S1600576721010840>
粉末 X 線回折 (PXRD) 解析における単位セル格子パラメーターの正確な決定のため、ICSDとCSDのデータでトレーニングした報告。
8. A data-driven XRD analysis protocol for phase identification and phase-fraction prediction of multiphase inorganic compounds
Jin-Woong Lee, Woon Bae Park, Minseuk Kim, Satendra Pal Singh, Myoung-ho Pyo, and Kee-Sun Sohn
Inorg. Chem. Front., 2021, 8, 2492–2504, DOI: <https://doi.org/10.1039/D0QI01513J>
XRD分析から多相無機化合物における構成相の割合を正確に予測するためのdeep learningに合成データを使用し、ICSDに218個登録されている固体電解質材料として知られているLi-La-Zr-O 四元組成系のデータを用いて検証した報告。
9. Data-driven design of a new class of rare-earth free permanent magnets
Alena Vishina, Daniel Hedlund, Vitalii Shtender, Erna K. Delczeg-Czirjak, Simon R. Larsen, Olga Yu. Vekilova, Shuo Huang, Levente Vitos, Peter Svedlindh, Martin Sahlberg, Olle Eriksson, Heike C. Herper, *Acta Materialia*, 212, 2021, 116913, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116913>
ICSDのデータによるハイスループット/データマイニング検索に基づき、希土類を含まない新しいクラスの永久磁石を探した報告。
10. High-throughput discovery of novel cubic crystal materials using deep generative neural networks
Yong Zhao, Mohammed Al-Fahdi, Ming Hu, Edirisuriya M. D. Siriwardane, Yuqi Song, Alireza Nasiri, Jianjun Hu, *Adv. Sci.*, 2021, 8, 2100566, DOI: <https://doi.org/10.1002/advs.202100566>
新しい立方体材料の大規模な生成設計のための敵対的生成ネットワーク(GAN)ベースのディープニューラルネット

トワーク モデルであるCubicGANを提案。

11. Generative adversarial networks (GAN) based efficient sampling of chemical composition space for inverse design of inorganic materials
Dan, Y., Zhao, Y., Li, X. *et al. npj Comput Mater*, **6**, 84 (2020).
DOI: <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00352-0>
ICSDのデータでトレーニングした、新しい仮想無機材料を効率的に生成するための敵対的生成ネットワーク(GAN)に基づく生成的機械学習モデル(MatGAN)を提案。
12. Data-driven prediction of diamond-like infrared nonlinear optical crystals with targeting performances
Wang, R., Liang, F. & Lin, Z, *Sci Rep* 10, 3486 (2020). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-020-60410-x>
ハイスループットスクリーニングと機械学習モデルを組み合わせた新しい光電子機能材料の探索。バンドギャップ、電気陰性度、グループ ボリューム、および結合の柔軟性を含む 4 つの特徴的な記述子を使用して、二次非線形性をモデル化および予測したという報告。
13. Identification of Crystalline Materials with Ultra-Low Thermal Conductivity Based on Machine Learning Study
Xinming Wang, Shuming Zeng, Zhuchi Wang, and Jun Ni, *J. Phys. Chem. C*, 2020, 124, 16, 8488–8495 (16), 8488-8495 DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b11610>
ICSD全体の材料に学習したモデルを採用し、熱伝導率を予測するための機械学習モデルを開発。Cs、Au、Hg、Tl、Pb などの重元素が熱伝導率の低減に役立つことを発見。
14. Surveying polar materials in the Inorganic Crystal Structure Database to identify emerging structure types
Joseph W. Bennett, *Journal of Solid State Chemistry*, 281, 2020, 121045,
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2019.121045>.
ICSD内の極性物質のファミリーを検索しマイニングすることで、強誘電体を含む可能性のあるファミリーとしてさらなる調査を保証する、ICSD 内のさまざまな新しい極構造タイプを特定。
15. Crystal symmetry classification from powder X-ray diffraction patterns using a convolutional neural network
Alexander N. Zaloga, Vladimir V. Stanovov, Oksana E. Bezrukova, Petr S. Dubinin, Igor S. Yakimov,
Materials Today Communications, 25, 2020, 101662, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101662>
畳み込み人工ニューラルネットワークを適用して、ICSD の結晶構造から計算されたフルプロファイルX 線回折パターンによって、結晶系と対称空間群を特定。
16. The Earth Mover's distance as a metric for the space of inorganic compositions
Cameron J. Hargreaves, Matthew S. Dyer, Michael W. Gaultois, Vitaliy A. Kurlin, and Matthew J. Rosseinsky
Chem. Mater. 2020, 32, 24, 10610-10620, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c03381>
構造の類似性を定量化するための機械学習。
17. Material informatics for layered high- T_c -super-conductors
Zhong-Li Liu, Peng Kang, Yu Zhu, Lei Liu, and Hong Guo
APL Materials, **8**, 061104 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0004641>
機械学習によるマテリアルズ インフォマティクスを使用して、超伝導体の臨界超伝導温度 T_c を効率的に予測。

18. Machine-Learning Assisted Screening of Energetic Materials
Peng Kang, Zhongli Liu, Hakima Abou-Rachid, and Hong Guo
J. Phys. Chem. A, 2020, 124, 26, 5341–5351, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.0c02647>
機械学習、マテリアルズ・インフォマティクス、および熱化学データを組み合わせて、エネルギー材料の潜在的な候補をスクリーニング。爆発熱 ΔH_f を予測。
19. High-throughput and data-mining approach to predict new rare-earth free permanent magnets
Alena Vishina, Olga Yu. Vekilova, Torbjörn Björkman, Anders Bergman, Heike C. Herper, and Olle Eriksson
Phys. Rev. B, **101**, 094407 (2020). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.094407>
ICSDのデータの一部を利用し、3d-5d遷移金属化合物に焦点を当てた新しい希土類フリー永久磁石のハイスループット検索のアプリケーションを提示。データマイニング/データフィルタリングアプローチを使用して、希土類を含まない永久磁石の候補を見つけることが可能であることを示唆。
20. Artificial Neural Network based Modelling and Simulation to Identify new candidates for hosting Skyrmions
B.U.V Prashanth, Mohammed Riyaz Ahmed, *Procedia Computer Science*, 171, 2020, 1571-1580.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.procs.2020.04.168>.
ICSD データベースに含まれるキラル構造の統計分析から、スキルミオンとして知られるエキゾチックなトポロジカル励起をホストするための新しい候補を特定するため人工ニューラル ネットワークを使ったという報告
21. 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
npj Computational Materials, **5**, 60 (2019) DOI: <https://doi.org/10.1038/s41524-019-0196-x>
限られた数の薄膜XRDパターンから結晶学的次元と空間群を予測するための機械学習対応アプローチ。
22. 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。
23. 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。
24. 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。

25. 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。

26. 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。

27. Matrix- and tensor-based recommender systems for the discovery of currently unknown inorganic compounds

Atsuto Seko, Hiroyuki Hayashi, Hisashi Kashima, Isao Tanaka, *Phys. Rev. Mater.*, 2018, 2, 013805.

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.013805>

ICSDから得られた既知の化合物から、マトリックス、テンソル法を用いて、三元系、四元系の未知無機化合物を予測する方法を提案・検証した報告。

28. 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。

29. 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.jpccb.7b05296](https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.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。

30. 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。

31. 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, Vlado 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.

32. 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.

33. 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

34. Identification of solid oxygen-containing Na-electrolytes: an assessment based on crystallographic and economic parameters

F. Meutzner, W. Münchgesang, T. Leisegang, R. Schmid, M. Zschornak, M. Ureña de Vivanco, A.P. Shevchenko, V.A. Blatov, D.C. Meyer, *Cryst. Res. Technol.*, 2017, 52, No.1, 1600223.

DOI: <https://doi.org/10.1002/crat.201600223>

ICSD中のNaとOを含むエントリーの結晶学パラメータからVDP approachによる計算で、既知の電気伝導体だけでなく、新しい結晶質の固体ナトリウム電解質候補を見つけた論文。

35. Classification of crystal structure using a convolutional neural network

W. B. Park, J. Chung, J. Jung, K. Sohn, S. P. Singh, M. Pyo, N. Shin and K.-S. Sohn, *IUCrJ*, 2017, 4, 486-494. DOI: <https://doi.org/10.1107/S205225251700714X>

ICSDの粉末X線回折パターンデータから無機化合物中の空間群や晶系を同定することに成功した機械学習の報告。

36. 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.

37. 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.

38. 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.
39. 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.
40. 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.
41. 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.
42. On-the-fly machine-learning for high-throughput experiments: search for rare-earth-free permanent magnets
A.G. Kusne, T. Gao, A. Mehta, L. Ke, M. C. Nguyen, K.-M. Ho, V. Antropov, C.-Z. Wang, M. J. Kramer, C. Long, I. Takeuchi, *Sci. Rep.*, 2014, 4, 6367. DOI: <https://doi.org/10.1038/srep06367>
Fe-Co-X (X=Mo, W, Ta, Zr, Hf, Vなどの遷移金属) の三元系の磁気異方性を有する磁性体の探索に機械学習を用いた報告。
43. 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.
44. 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.
45. 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.

46. Framework-Type Determination for Zeolite Structures in the Inorganic Crystal Structure Database
Shujiang Yang , Mohammed Lach-hab, Iosif I. Vaisman, Estela Blaisten-Barojas , Xiang Li, Vicky L. Karen, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 2010, 39, 033102. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3432459>
ICSDに収録されている1433のゼオライトのフレームワークタイプを、ICSDと論文中の結晶学データを基にして、機械学習と従来の構造解析手法によって、63種類のFramework Type Codeに分類した報告。
47. 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.
48. 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.
49. 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.
50. 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.