



1.登録年月日

2019/5/7

2.会議体名

フロンティア連携委員会 先端化学・
材料技術部会 CC分科会

3.件名

外部委託調査最終報告書
「化学分野における情報科学活用のための
データベースおよび先行事例に関する調査」
株式会社 旭リサーチセンター

4.発信者

JACI 福井祥文

5.発信先

J-Shares 外部委託調査フォルダー

6.公開範囲、期間

正会員・関係者及び上司・同僚・部下まで
(関係者外秘)
登録後5年以内

「化学分野における情報科学活用のためのデータベース
および先行事例に関する調査」

最終報告書

平成31年3月22日

(株) 旭リサーチセンター

目次

1. 概要	3
2. 背景と目的	4
3. 調査概要	5
3-1. 有識者ヒアリング	5
3-2. 文献検索	5
3-3. 代表的事例	5
3-4. 公共データベース	5
3-5. ベンチャー企業	5
4. 有識者ヒアリング	6
4-1. 概要	6
4-2. 個別のヒアリング	9
4-2-1. ダッソー・システムズ株式会社高岡シニアソリューションサイエンティス、石崎ソリューションサイエンティスト	9
4-2-2. 産業技術総合研究所齋藤研究員	10
4-2-3. 旭化成株式会社池端エキスパート	11
4-2-4. 東京大学大学院船津教授	12
4-2-5. 北海道大学清水教授	13
4-2-6. 奈良先端科学技術大学院大学金谷教授	15
4-2-7. 物質・材料研究機構知京副機構長	16
4-2-8. 東京大学大学院津田教授	17
4-2-9. 大阪大学三宅淳特任教授	18
4-2-10. 慶應大学榊原教授	19
5. 文献検索	21
5-1. 概要	21
5-2. 文献検索結果一覧	24
6. 代表的事例	25
6-1. 概要	25
6-2. 個別の代表的事例の紹介	25
6-2-1. 有機化学	25
6-2-2. 無機化学	28
6-2-3. 触媒化学	29
6-2-2. 高分子化学	30
7. 公共データベース	32
7-1. 概要	32
7-2. 個別のデータベース紹介	34
8. ベンチャー企業	35

8-1. 概要.....	35
8-2. 個別のベンチャー企業紹介.....	35
9. 化学分野における情報科学の活用の現状と今後.....	37
10. 終わりに.....	38
11. 付表.....	39
11-1. 付表：文献検索結果一覧.....	39
11-2. 付表：個別のデータベース紹介.....	67

1. 概要

化学分野における情報科学技術の応用に関して、以下の観点からまとめた。

- 1) 有識者の意見
- 2) 文献検索
- 3) 代表的事例
- 4) 公共データベース
- 5) ベンチャー企業

有識者 10 人にヒアリングを行い、それぞれの立場からこの分野の展望を伺い、併せて、代表的事例、公共データベース、ベンチャー企業などに関する情報を頂いた。今回の調査の主目的ではないが、有識者の展望は、機械学習、ケモインフォマティクス、ユーザーのそれぞれの立場で、興味深いものがあり、この部分だけでも有用な資料になっている。

文献検索の結果は、この分野がこの数年の間に、急激に盛り上がっていることを象徴する結果になった。全体で 200 件ほどの文献には、有機化学関連の研究が多いという偏りはあるが、有機化学、無機化学、触媒化学、高分子化学などの幅広い分野への応用が含まれている。

代表的な事例の選択は、インパクトの高い雑誌に掲載され、データが公開されていることを基本とした。しかし、そうした事例は、この調査研究の企画提案で予想したより、かなり少なかった。それでも、こうした事例は、そのまま教材となるだけでなく、どのように応用されているか、どのような人工知能的手法が用いられているかといった点からも参考になると思われる。

公共データベースは、それ自体を使って規則を導き出すという使い方ばかりでなく、手許にあるデータを増やす手段、分子設計方針が得られた後の化合物検索など、様々な使い方があるので、有識者の方々から名前が挙がったものばかりでなく、有料、無料を問わず、アクセス可能なものを広く紹介することとした。

この分野のベンチャー企業の数多くないというのが、有識者の方々の共通認識であったため、ベンチャー企業に関しては、簡単な記載に留めた。

2. 背景と目的

我が国が掲げる「超スマート社会」を実現するための基盤技術の柱として情報科学分野（IoT システム構築、ビッグデータ解析、AI など）が、あらゆる分野で急速に発展を遂げている。その一方で、化学分野においてそれを担う人材がますます不足する状況も指摘されている。

このような状況に鑑み、公益社団法人新化学技術推進協会（JACI）ではコンピュータケミストリ（CC）分科会が中心となって、今後、化学分野において情報科学技術の担い手となる若手研究者、技術者向けに、先端技術や基盤技術を学ぶための「化学産業のための情報科学講座」を開講し、情報科学の初心者を対象として、データ駆動型サイエンスとしてのデータマイニング、AI をどのように進めるかについての講義を行ってきた。

2019 年春までには、多変量データの作り方、基本統計解析法、オーソドックスな多変量解析法、さらには、最新の機械学習などのトピックスについての一巡目の講義が終了する予定である。

これを受けて CC 分科会では「情報科学 WG」を立ち上げることを検討しており、それに向けた情報収集を行うこととした。

本調査では、化学分野で情報科学を活用していく上で、既存のデータベースとしてどのようなものが世の中に存在しているか、それを WG で利用することができるか、また、既に反応、材料分野で最近のデータサイエンスの応用事例として、どのようなものが報告されているかについて調査を行い、利用しやすい形で整理することを意図した。

3. 調査概要

3-1. 有識者ヒアリング

有識者 10 人を訪問し、個別にヒアリングを行った。それぞれの立場からこの分野の展望を伺い、併せて、代表的事例、公共データベース、ベンチャー企業などに関する情報を頂いた。ヒアリング結果は有識者毎の個表とした。今回の調査の主目的ではないが、有識者の展望は、機械学習、ケモインフォマティクス、ユーザーのそれぞれの立場で、興味深いものがあり、この部分だけでも有用な資料になっている。

3-2. 文献検索

文献データベースを使って、「人工知能」、「化学」をキーワードとして検索を行った。文献検索の結果は、この分野がこの数年の間に、急激に盛り上がっていることを象徴する結果になった。全体で 200 件ほどの文献には、有機化学関連の研究が多いという偏りはあるが、有機化学、無機化学、触媒化学、高分子化学などの幅広い分野への応用が含まれている。また、かなりの割合で総説も含まれていたが、それも参考になると考えて、付表中に残した。

3-3. 代表的事例

代表的な事例の選択は、最近のこの分野の総説や論文に引用されている論文を辿ることで探していった。その中で、インパクトの高い雑誌に掲載され、データが公開されていて、講義資料として利用できる論文であることを基本とした。その数は 15 件と、今回の調査の企画段階で予想したより、はるかに少ないものであった。しかし、こうした事例は、そのまま講義資料となるだけでなく、情報科学的な手法がどのように応用されているか、どのような解析手法が用いられているかといった点からも参考になると思われる。

3-4. 公共データベース

公共データベースは、それ自体を使って規則を導き出すという使いばかりでなく、手許にあるデータを増やす手段、分子設計方針が得られた後の化合物検索など、様々な使い方があるので、有識者の方々から名前が挙がったものばかりでなく、無料のもの、有料のものを併せて、アクセス可能なものを広く紹介することとした。少し以前は、大きなデータベースを使って、規則を導き出すというビッグデータ活用型の用途が多かったが、最近では、個別の解析の結果得られた方向性に合致する化合物の検索に使うといった用途が中心になっているように思われる。

3-5. ベンチャー企業

この分野のベンチャー企業の数多くないというのが、有識者の方々の共通認識であったため、ベンチャー企業に関しては、ヒアリングで挙がったものを中心に、簡単な記載に留めた。

4. 有識者ヒアリング

4-1. 概要

下の表にある 11 名（機関としては、10 ヶ所）の方にヒアリングを行った結果を、「全体的展望」、「代表的事例」、「代表的研究者」、「公共データベース」、「ベンチャー企業」、「その他」の各項目に分類して 4-2. の個表に記載した。

対応者	所属	実施日
高岡雄司氏、石崎貴志氏	ダッソーシステムズ	1月18日
齊藤裕氏	産業技術総合研究所	1月23日
池端久貴氏	旭化成	1月24日
船津公人教授	東京大学	1月28日
清水研一教授	北海道大学	1月30日
金谷重彦教授	奈良先端大学	2月4日
知京豊裕副拠点長	物質・材料研究機構	2月7日
津田宏治教授	東京大学	2月8日
三宅淳教授	大阪大学	2月13日
榊原康文教授	慶応大学	2月27日

若手の研究者から、ベテランの研究者まで、背景も機械学習、ケモインフォマティクス、ユーザーと、様々な角度から情報を集めることができたと思っている。

その中で、人工知能のユーザー的な立場の方々は、将来に対して期待を抱かれており、機械学習から参入された方々は、化学が取り組み易い対象と考えられており、ケモインフォマティクスから参入された方々は、化学への応用は難しいが徐々に取り組みが広がっていると思われるというように、研究背景により現状の展望も変わってくるのが面白かった。

また、この調査期間中に開催された、シンポジウム「理論生物物理学の現状と未来」（2月14日）、JACI 特別フォーラム「最近の化学におけるインフォマティクスの動向」（2月19日）、日本化学会第 99 春季年会 ATP プログラム「インフォマティクスが変える化学合成」（3月17日）、高分子学会関東支部会ワークショップ「AI は高分子研究をどのように変えるか：シーズから迫る AI の本質」（3月20日）を聴講した。いずれも、今回の調査目的に関連するものであり、有識者ヒアリングを補うものでもあった。

郷信広京都大学名誉教授の傘寿を記念したシンポジウム「理論生物物理学の現状と未来」（下表に演題を挙げる。）では、郷研究室の卒業生でアカデミアで活躍している研究者を中心とした講演が 8 件あったが、蛋白質の理論計算の研究室にも関わらず、亀田主任研究員、水口プロジェクトリーダー、木下教授の 3 人が人工知能応用に言及していた。亀田主任研究員はヒアリングにお邪魔した齋藤研究員と同じ研究室であり、将来的にはシミュレーションとの融合を考えているといった内容。水口プロジェクトリーダー、木下教授は、共に、データベースの構築に際して、データを均一化することが大切であることを強調していた。

講演者	所属	タイトル
北尾彰朗教授	東京工業大学生命理工学院	コンピューターで観るタンパク質複合体の結合と解離
杉田有治主任研究員	理化学研究所開拓研究本部	細胞環境を考慮した蛋白質ダイナミクスと機能の解析
亀田倫史主任研究員	産業技術総合研究所人工知能研究センター	シミュレーションと人工知能の融合を目指して
水口賢司プロジェクトリーダー	医薬基盤・健康・栄養研究所	計算生物学と創薬のためのデータベース統合
木下賢吾教授	東北大学情報科学研究科	東北における大規模コホート構築とゲノム・オミックス解析戦略
Steven Hayward 教授	University of East Anglia, UK	Utilising the concept of the important subspace in protein dynamics for the development of an interactive docking tool
伊倉貞吉准教授	東京医科歯科大学難治療疾患研究所	タンパク質機能における階層的様相
郷信広名誉教授	京都大学	スネークキューブパズルとタンパク質フォールディング

JACI 特別フォーラム「最近の化学におけるインフォマティクスの動向」（下表に演題を挙げる。）では、内プリンシパルエキスパート、矢田主任研究員が、少ないデータを、いかに活用するかに力点を置いた発表をしていた。また、沼館室長は、先の水口プロジェクトリーダー、木下教授と同様に、データのキュレーションの重要性に触れていた。

講演者	所属	タイトル
内幸彦プリンシパルエキスパート	旭化成株式会社研究開発本部技術政策室 MI 推進部	企業における MI 利用の現状と今後の展望
矢田陽主任研究員	産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター	キャタリストインフォマティクスの現状と将来への期待
沼館建室長	経済産業省製造産業局 素材産業課	化学産業のデジタルトランスフォーメーションへ向けて

日本化学会第 99 春季年会の ATP プログラム「インフォマティクスが変える化学合成」では、下のプログラムで発表があり、既に、ヒアリングを行った方々の関係者、また、中間報告会、最終報告会で希望のあった方々の講演も聴講でき、大変、参考になった。

講演者	所属	タイトル
佐藤一彦センター長	産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター	オーガナイザー趣旨説明
田中功教授	京都大学大学院工学研究院	データ駆動による新材料の発見
清水研一教授	北海道大学触媒研究所	キャタリストインフォマティクスの最近の動向
矢田陽主任研究員	産業技術総合研究所触媒化学融合研究センター	キャタリストインフォマティクスによるエポキシ化触媒反応の収率の予測
吉田亮教授	総合数理研究所	マテリアルズインフォマティクスの最前線
袖山慶太郎グループリーダー	物質・材料研究機構	マテリアルズ・インフォマティクスによるリチウムイオン電池の電解液材料探索
畑中美穂准教授	奈良先端科学技術大学院大学研究推進機構	データ駆動型材料設計—少ないデータからどう予測モデルを作るか？
上野京子部長	化学情報協会	SciFinder-n における反応ルールに基づく逆合成ルート探索と予測
菊池淳チームリーダー	理化学研究所	機械学習・量子化学計算による NMR スペクトル解析の革新
溝口照康教授	東京大学生産技術研究所	データ科学で理解するスペクトロスコピー
中井浩巳教授	早稲田大学理工学部	データ科学と理論・計算化学の融合

高分子学会関東支部会ワークショップ「AIは高分子研究をどのように変えるか：シーズから迫るAIの本質」では、下の5件の講演の他、27件のポスター発表があった。講演で、NECの岩崎悠真 JST さきがけ研究員から磁性材料開発への人工知能の応用の話があったばかりでなく、ポスター発表でも、DICの今田知之サイエンティストの「データ駆動型科学による高機能フェノール樹脂の開発」、昭和電工の南拓也リサーチャーらの「バイズ最適化を活用した耐熱性ポリマーの効率的設計」、コニカミノルタの池田祐子博士らの「マテリアルズ・インフォマティクスを用いた高分子複合材料の弾性率の予測モデル構築」と、民間企業でも、化学分野への情報科学的手法の利用が始まっている状況が明らかになったワークショップであった。この内、昭和電工の事例は、既に、論文文化されている（MRS Advances, DOI:10.1557/adv.2019.57）ので、代表的事例でも取り上げる。

講演者	所属	タイトル
金子弘昌専任講師	明治大学理工学部応用化学科	高機能材料の研究・開発・製造をデータ活用により支援する
森田裕史グループリーダー	産業技術総合研究所機能材料コンピューテーシ	ソフトウェアとしての OCTA とインフォマティクス研究の融合

	ヨナルデザイン研究センター	
岩崎悠真 JST さきがけ研究員	日本電気システムプラットフォーム研究所	AI と科学者の協創による磁性材料開発
金谷重彦教授	奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科情報科学領域	データサイエンス全般から化学の話題まで
内藤昌信主任研究員	物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門	オープンサイエンスとデータ駆動型高分子設計

今回の調査期間が短かったにも関わらず、その間に、複数の関連講演会が企画されることから、この分野に対する関心の高さが判る。また、時間の関係で、下の有識者ヒアリングで名前が挙がったにもかかわらず、個別に訪問することができなかった、医薬基盤・健康・栄養研究所の水口賢司プロジェクトリーダー、総合数理研究所の吉田亮教授、奈良先端科学技術大学の畑中美穂准教授、明治大学の金子弘昌専任講師、NEC の岩崎悠真 JST さきがけ研究員にお話を伺えるよい機会ともなった。

4-2. 個別のヒアリング

以下に、個別のヒアリング案件を紹介する。

4-2-1. ダッソー・システムズ株式会社高岡シニアソリューションサイエンティス、石崎ソリューションサイエンティスト

日時： 2019年1月18日（金）10:00～11:30
対応者： 高岡雄司シニアソリューションサイエンティスト ダッソー・システムズ株式会社 石崎貴志ソリューションサイエンティスト ダッソー・システムズ株式会社
背景： ダッソー・システムズは 3DEXPERIENCE プラットフォームを基盤とした、3次元設計、エンジニアリング、モデリング&シミュレーション、データやプロセスの管理を実現するソリューション提供企業であるが、その中で、BIOVIA 事業部では、分子モデリングの Materials Studio、データサイエンスツールの Pipeline Pilot、電子実験ノートやデータ管システム等を販売している。Pipeline Pilot は、R や Python などのスクリプトを含め、人工知能解析手法のプログラミングに詳しくない研究者にも利用可能な環境を提供する。
展望： 創薬に類似する化合物の物質設計への応用は比較的容易だが、ポリマーなどの混合物になると難度が上がる。人工知能の応用には、機械学習という側面と、自動提案と

<p>いう側面がある。創薬では構造提案の仕組みも開発されてきているが、材料開発への応用はこれから。化学分野では自社データの数に限られるので、公共のデータベースを出発点にすることも多い。</p>
<p>代表的事例：</p> <p>ダイキンは代替フロンの研究開発に MI 手法を活用している。</p> <p>サムスンとハーバード大学の OLED の研究開発への機械学習活用事例は有名。 (Nature Materials,15(10), 1120-1127 (2016))</p>
<p>代表的研究者：</p> <p>情報統合型物質・材料開発イニシアティブに情報が集まっていると思われる。</p>
<p>公共データベース：</p> <p>物質・材料研究機構の MatNavi (PolyInfo、AtomWork、CPDDB など)</p> <p>米国国立標準技術研究所の ThermoDataEngine</p> <p>米国の Materials Project のデータベース</p> <p>米国の Materials Genome Initiative のデータベース</p> <p>化学構造なら、PubChem</p> <p>特許情報なら、SureChEMBL</p> <p>元素組成から可能性のある化学構造なら、GDB-11、GDB-13、GDB-17</p>
<p>ベンチャー企業：</p> <p>創薬への人工知能応用のベンチャーは多いが、化学分野のベンチャーは少ない。</p> <p>創薬の場合はマイルストーン契約が多いが、素材はそれが最終製品とならない場合もあり、異なるビジネスモデルが必要。</p> <p>創薬なら、例えば、英国の Exscientia が大日本住友製薬と共同研究を行っている。</p>
<p>その他：</p> <p>JACI で、この分野のダッソー・システムズの商品紹介をすることは可能。</p>

4-2-2. 産業技術総合研究所齋藤研究員

<p>日時： 2019年1月22日(火) 10:00~11:10</p>
<p>対応者：</p> <p>齋藤裕研究員・産業技術総合研究所人工知能研究センターオーミクス情報研究チーム</p>
<p>背景：</p> <p>学生時代から一貫して機械学習の研究に携わり、産総研入所後はバイオインフォマティクスを幅広く研究されてきた。最近、新学術領域研究「化学コミュニケーションのフロンティア」に参画され、機械学習の化学分野への応用を研究されている。</p>
<p>展望：</p> <p>機械学習の研究者からみると、化合物の問題は単純で、参入障壁が低い。最近、榊原先生との SMILES 表記のコンボリユーション・ニューラルネットワークに関する研</p>

<p>究が論文になった (BMC Bioinformatics 2018, 19(Suppl 19), 526)。フィルター機能の学習で、重要な構造モチーフを読み取ることが可能。</p>
<p>代表的事例： 新しい研究が毎週のように下のプレプリントアーカイブに登録されている状況。 arXiv.org (物理系) bioRxiv.org (生物系)</p>
<p>代表的研究者： 物質系では、東京大学新領域創成科学の津田宏治先生。 深層学習では、産総研の椿真史特別研究員。</p>
<p>公共データベース： 化学構造の PubChem 化合物と蛋白質との相互作用の DrugBank Tox21 の化合物毒性データはベンチマークに用いられる。 DeepChem は化学向けの python ライブラリー。</p>
<p>ベンチャー企業： 日本では、Preferred Networks が深層学習に詳しい。 同社の Chainer Chemistry は化学向け深層学習ライブラリー</p>
<p>その他： 出身研究室である慶應義塾大学工学部榊原康文先生を紹介して頂いた。</p>

4-2-3. 旭化成株式会社池端エキスパート

<p>日時： 2019年1月23日(水) 10:00~11:00</p>
<p>対応者： 池端久貴エキスパート・旭化成株式会社 研究・開発本部 技術政策室 MI 推進部</p>
<p>背景： MaDIS シンポジウム 2019 の「機械学習を用いた PolyInfo の製品開発への活用に向けて」と題する講演で、PolyInfo の活用事例に関して発表する。機械学習に関しては、ユーザーの立場で、ポリマーへの応用を研究している。</p>
<p>展望： ポリマーへの機械学習の応用は、化学構造だけでは決まらないので難しい。また、研究事例も少ない。ポリマーのデータベースで使えるものは PolyInfo ぐらい。データベースの利用方法に関しては、化学業界で共有化するのがよいと考えている。</p>
<p>代表的事例： サムスンとハーバード大学の OLED の研究開発への機械学習活用事例は有名。 (Nature Materials, 15(10), 1120-1127 (2016)) 理研の第一原理計算データベースは使えるかもしれない。 (Journal of Chemical Information and Modeling, 57, 1300-1308 (2017))</p>

<p>ポリマーでは、大阪大学の有機太陽電池に関する研究事例。 (Journal of Physical Chemistry Letters, 9, 2639-2646 (2018))</p>
<p>代表的研究者： 日本の MI のコミュニティーは小さく、物質・材料研究機構に集中している。 他には、東京大学新領域創成科学の、岡田真人先生、津田宏治先生。</p>
<p>公共データベース： 物質・材料研究機構の PolyInfo を使っている。 Clean Energy Project のデータベース。 理研の第一原理計算データベースの PubChemQC。 他に、PubChem など。</p>
<p>ベンチャー企業： SyntheticGestalt（日本企業）は、元々、ゲノム情報活用などのバイオ系だが、機器分析データへの人工知能活用にも展開している。</p>

4-2-4. 東京大学大学院船津教授

日時： 2019年1月28日（月）13:00～14:00
<p>対応者： 船津公人教授・東京大学大学院工学系研究科</p>
<p>背景： 長年、ケモインフォマティクス研究に携われ、多くの国プロにも関与されている。奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センターの研究ディレクターも兼任されている。</p>
<p>展望： 企業との共同研究を行って来たが、昔は、コンピューター・リーダブルにするという意識が低かった。最近、意識は高まって来ている。しかし、データ数が少ないのが現状。部門を超えて若者が集まるのがよいのではないか。データ収集に時間は掛かるかもしれないが、ケモインフォマティクスが進み始めれば当たり前のことになる。化学分野は課題も多く、手間も掛かるので、社内で人材を育てる動きが強くなっている。</p>
代表的事例：
<p>代表的研究者： 薬物など、低分子化合物では、 ボン大学の Prof. Jürgen Bajorath スイス連邦工科大学の Prof. Gisbert Schneider</p>
<p>公共データベース： 物質系では、 物質・材料研究機構のデータベース 米国国立標準技術研究所のデータベース</p>

<p>米国の Materials Project のデータベース 他にそれほどあるわけではない。 ハンドブックなど、名前と物性はあるがプロセスが無い。 やはり、材料系は厳しい。 有機化合物では、 米国国立衛生研究所のデータベース 米国国立がん研究所のデータベース PubChem Available Chemicals Directory 毒性では、 製品評価技術基盤機構の HESS 米国国立衛生研究所の Tox21 など 欧州では ToxBank など</p>
<p>ベンチャー企業： DeNA がインフォマティシャンを集めている。 Preferred Networks Affinity Science の Dragon は分子記述子の計算によく使用されている。</p>
<p>その他： 奈良先端大学の金谷先生とも親しい。</p>

4-2-5. 北海道大学清水教授

日時： 2019年1月30日（水）14:00～15:30
<p>対応者： 清水研一教授・北海道大学触媒科学研究所</p>
<p>背景： 触媒学会での御講演「マテリアルインフォマティックスの触媒への展開」のバージョンアップ版資料を使ってこの分野の現状を解説して頂いた。 Python のスクリプトは、共同研究者である北海道大学情報科学研究科瀧川一学准教授が作成されている。清水先生は触媒の問題を整理して提供するユーザーの立場。</p>
<p>展望： 触媒性能は、プロセス依存性があり、構造のみでは決まらない。物理的材料のインフォマティクスより難易度が高い。条件がバラバラな論文データを教師データにすべきではない。同じ装置で実験データを収集すべきである。 近い将来、AI が膨大な論文をテキストマイニングして機械学習することで、網羅的な無機合成レシピ提案システムが構築されるだろう。自動合成機械が候補材料を合成し、触媒評価も自動化され、蓄積した構造・性能データを AI が学習するようになる。</p>
<p>代表的事例： 総説として、</p>

Nature, 559, 547, 2018 (MI 全般)
Science, 361, 360, 2018 (MI 全般)
ACS Catal., 8, 7403, 2018 (触媒)
AIChE J., 64, 2311, 2018 (触媒)
論文として、
Adv. Catal., 45, 71, 2000
Proc. Natl. Acad. Sci., 108, 937, 2011
RSC Adv., 6, 52587, 2016
J. Catal., 224, 206, 2004
ChemCatChem, 3, 1935, 2011
npj Compt. Mater., 4, 12, 2018
ACS Nano, 11, 12742, 2018
Adv. Theory Simul., 1, 1800037, 2018
Chem. Mater, 28, 5621, 2016
Chem., 1, 617, 2016
Proc. Natl. Acad. Sci., 114, 3040, 2017
Chem. Lett., 1269, 1988
Catal. Today, 23, 347, 1995
Catal. Sci. Technol., 2, 2456, 2012
Chem. Lett., 47, 284, 2018
Acc. Chem. Res., 49, 1292, 2016
ACS Cent. Sci., 2, 725, 2016
ACS Cent. Sci., 3, 434, 2017
Catal. Sci. Technol., 6, 617, 2016
Chem. Mater., 29, 2844, 2017
Angew. Chem. Int. Ed., 56, 10815, 2017
Nature, 533, 73, 2016
Scientific Data, 4, 170127, 2017
Science, 347, 1221, 2015

代表的研究者：

物質・材料研究機構の高橋啓介氏。

公共データベース：

米国の Materials Project のデータベース

物質・材料研究機構のデータベース

北海道大学触媒研にも文献情報、XAFS のデータベースはあるが、収録数が少なく、インフォマティクスに乗せるのは困難。世界的にも、触媒のデータベースは無い。

ベンチャー企業：

情報を持ち合わせていない。

その他：

現在、総説を執筆中、関連文献 240 報収集済み。(5 月に投稿予定)

4-2-6. 奈良先端科学技術大学院大学金谷教授

日時： 2019 年 2 月 4 日 (月) 17:50~19:50
対応者： 金谷重彦教授・奈良先端科学技術大学院大学
背景： 生薬データベース KNApSAcK の制作者。ケモインフォマティクス、バイオインフォマティクスの研究に、長年、取り組まれている。
展望： 化学分野でも、予測してから実験する時代である。化学系の企業にあるデータは、数は少なくても、初歩的な統計解析で役立つものもある。また、電子顕微鏡の画像データなど、意外にデータ数が多いものもある。データサイエンスの立場からは、まずは、ランダムフォレストなどの分類能力の高い手法から始めて、分類可能なデータであれば、徐々に、結果の解釈が可能な回帰分析などに向かうという取り組みが適切に思える。予測したい物性ととも画像データがある場合は、深層学習を行い、画像データをもとに回帰もしくは分類が的確に行えるか、直ぐに検討すべきである。また、化学構造情報がある場合は、グラフ・コンボリューション・ニューラルネットを行い、その後、解釈と予測性能の向上を目指し、よりシンプルな解析をすすめることをお勧めする。
代表的事例： Phys. Rev. Materials, 1, 043603, 2017 J. Comput. Phys., 285, 316, 2015 Nat. Commun., 9, 3800, 2018
代表的研究者： 明治大学理工学部の子金子弘昌専任講師 東北大学金属材料研究所の久保百司教授 北海道大学触媒研究所の清水研一教授 関西学院大学の岡田孝名誉教授 奈良先端科学技術大学院大学の畑中美穂特任准教授、宮尾知幸准教授 長浜バイオ大学の白井剛教授 UC San Diego の Assoc. Prof. Shyue Ping Ong University of Erlangen-Nürnberg の Prof. Johann Gasteiger
公共データベース： 物質・材料研究機構のデータベース (但し、歯抜けが多い。) PubChem には SMILES の記載がある。 天然物では KNApSAcK にも引き合いが多い。 米国の Materials Project のデータベース

<p>Gasteiger の教科書 Chemoinformatics に記載のデータベース GitHub Pymatgen</p>
<p>ベンチャー企業： Gasteiger の教科書 Chemoinformatics に記載のベンチャー企業</p>
<p>その他： JACI の「化学産業のための情報科学講座」の講師を務められている。その講義用のデータとして、論文の supplemental data を使うことには賛成。</p>

4-2-7. 物質・材料研究機構知京副機構長

<p>日時： 2019年2月7日（木）10:00～11:40</p>
<p>対応者： 知京豊裕副拠点長・物質・材料研究機構</p>
<p>背景： 知京氏は、半導体材料開発の御出身。物質・材料研究機構では、昨年までデータプラットフォームセンターに属し、文献から図やキャプションを取り出す API 開発を手掛け、次年度以降に他の API と同時に公開を準備中。物質・材料研究機構では、全ての研究者が機械学習やデータベースなどのツールに触れてほしいと考えている。しかし、仕組みだけでは上手く機能しないので、機械学習を大学との連携や専門家の採用などを通じてデータ科学を使った材料開発の事例を示し、実験研究者とペアを組んで研究を進める取り組みも行っている。</p>
<p>展望： 初めは、コンビナトリアルで材料探索を始めたが、どの領域のどの材料と組成を探索するのが課題となった。そこで、いきなり実験ではなく、バーチャルスクリーニングから初めて、その推奨に基づいて合成を行い、結果をフィードバックするという研究の流れが現在の主流になっている。バーチャルスクリーニングでは、第一原理計算、データベース、テキストマイニングを使ってデータを集める。そのデータを機械学習することで材料の候補を絞ることができる。また、機械学習の際に利用する記述子は、気付きを与えるツールでもある。しかし、バーチャルスクリーニングにはプロセスデータが無い。そのため、物質・材料研究機構では、プロセスデータを収集する方針。米国では、Materials Genome Initiative が複数の機関とデータシェアを進めており、NREL などが実験データを公開している。欧州では、NOMAD Laboratory があり、アメリカとの連携を強めている。中国では中国版 Materials Genome Initiative が同様の動き。将来的には、バーチャルスクリーニングからリアルスクリーニングのハイスループット化がトレンドになると予想している。また、リアルスクリーニングでは安川電機の SmartPal などロボティックスの導入がなされると期待している。新材料発見のあとのデバイス化では産業技術総合研究所の原史朗氏提案のミニマルファブなどにその可能性を感じる。</p>
<p>代表的事例： 「展望」および「代表的研究者」参照</p>

<p>代表的研究者：</p> <p>メリーランド大学の Ichiro Takeuchi</p> <p>NIST の Martin Green</p> <p>トロント大学の Prof. Alán Aspuru-Guzik</p> <p>NIMS の MatNavi の PolyInfo の管理は石井貴史氏が行っている。</p> <p>産業技術総合研究所の青柳岳司氏の GOURMET シミュレーションプラットフォーム</p> <p>物質・材料研究機構の袖山慶太郎氏のリチウムイオン電池研究</p> <p>物質・材料研究機構の小山幸典氏の記述子開発</p> <p>統計数理研究所の吉田亮氏の転移学習（小山氏の共同研究者）</p> <p>NEC の岩崎悠真氏</p>
<p>公共データベース：</p> <p>物質・材料研究機構の MatNavi（PolyInfo、AtomWork、CPDDB など）</p> <p>PolyInfo は、物質・材料研究機構のミッションとして維持管理されている。テクニカルスタッフを雇用して、最大 300 件／年のデータ収集を継続している。</p> <p>AtomWorkAdv は有償公開で、主に物質・材料研究機構内部で使われている。</p> <p>米国の Materials Genome Initiative のデータベース</p> <p>XenonPy に記述子発生のツール</p>
<p>ベンチャー企業：</p> <p>Citrine Informatics は、当初の企業データを集めるビジネスモデルで失敗。今は、公的機関から公開されたデータを蓄積し、それに API を加えたビジネスを展開。</p> <p>SAS も機械学習を使ったサービスを始めた。</p> <p>BIOVIA（ダッソーシステムズ）</p> <p>Intermolecular は、主に半導体</p> <p>Ilika は、主に電池</p>
<p>その他：</p> <p>物質・材料研究機構は、企業との共同研究にも熱心である。トヨタ自動車、パナソニック、ソフトバンク、ロレアル化粧品など COE を作り包括的に共同研究を行っている。取り扱う材料は電池だけでなく多岐にわたる。</p>

4-2-8. 東京大学大学院津田教授

日時： 2019年2月8日（金）13:00～14:00
対応者： 津田宏治教授・東京大学大学院新領域創成科学研究科
<p>背景：</p> <p>津田先生は、機械学習の御出身。東京大学でも、理化学研究所でも、主に、ポストドクと研究を進めている。自動設計が研究テーマで、対象は有機分子、無機薄膜（最近、熱輻射材料が論文化された。DOI: 10.1021/acscentsci.8b00802）など、共同研究者によって変化する。</p>
展望：

<p>物性値は Gaussian、VASP などのシミュレーションで求め、それを人工知能で解析し、得られた結果に基づいて、さらに計算を行うというサイクルを繰り返して、物質設計を行う。ハイスループット実験の研究者と組めればよいが、現在は、実験の代わりにシミュレーションを用いている。実験データを得るスピードが遅いと、人工知能研究を行うのが難しくなる。企業の要望で、実験のパラメータの最適化なども行っているが、地味で論文にはならない。現時点でデータが無くても、作ればよいので、共同研究を始めることは可能だが、データだけあって、後で実験をやってくれないのは困る。ブームは去るものだと判っているが、盛り上がっている機会を捉えて、社会、科学に機械学習でインパクトを与えたい。材料設計では人工知能による提案で新規材料の特許を取得するところまで進められると信じている。機械学習の材料設計への応用では、シミュレーションの高速化が一番多く、自動設計、計測インフォマティクスがそれに続く。</p>
<p>代表的事例：（「背景」、「展望」および「代表的研究者」参照）</p>
<p>代表的研究者：</p> <p>グラスゴー大学の Prof. Leroy Cronin (Nature, 559, 377, 2018)</p> <p>トロント大学の Prof. Alán Aspuru-Guzik</p> <p>統計数理研究所の吉田亮先生</p> <p>京都大学の奥野恭史先生（薬物設計）</p> <p>医薬基盤研究所の水口賢司先生（薬物設計）</p> <p>名古屋工業大学の竹内一郎先生</p> <p>メリーランド大学の竹内一郎先生</p> <p>NEC の岩崎悠真氏他、JST さきがけの「マテリアルズインフォ」の若手研究者</p>
<p>公共データベース：</p> <p>米国の Materials Project のデータベース</p> <p>PubChem</p>
<p>ベンチャー企業：</p> <p>MI-6 は 5、6 人の小さな会社だが、競争相手はいない。企業からデータをもらって解析している。まだ、もの作りまで行っていない。津田先生はアドバイザーの立場。</p>
<p>その他：</p> <p>東京大学の他に、理化学研究所、物質・材料研究機構を兼任されている。</p>

4-2-9. 大阪大学三宅淳特任教授

<p>日時： 2019年2月13日（水）14:30～16:30</p>
<p>対応者：</p> <p>三宅淳特任教授・大阪大学国際医工情報センター</p>
<p>背景：</p> <p>大阪大学理学部化学科の御出身で、産業技術総合研究所でバイオ水素エネルギーの研究に携わられた後、再生医療のプロジェクトにオーガナイザーとして関与された。</p>

<p>その間、東京大学も兼務され、そこで、細胞のがん化を数学的に扱う研究をされたが、その過程で、ニューラルネットの利用を試みられた。大阪大学に移られてからは、人工知能を用いた手法を軸に、ミトコンドリア遺伝子解析などの研究を展開され、現在は、医学部学生を対象に人工知能に関わる教育活動を行っておられる。</p>
<p>展望：</p> <p>元々、化学の御出身なので、人工知能の化学への応用にも興味を持たれている。化学は素反応の集合体ではなく、線形ではない問題である。人工知能の対象は複雑系であり、医学の次に化学が好対象になるかもしれない。化学プラント、油田探索、ガス輸送などには、既に、人工知能が用いられている。しかし、化合物の問題に適用しようとすると、意外によいデータベースが無い。ハンドブックなどを探したが、十分な数の記述子が見付からなかった。実験的なものでも、バーチャルなものでも構わないが、記述子の数が増やせれば、化合物を人工知能で扱うことが可能になると考えている。マスコミ的な人工知能のブームは終わっても、人工知能応用の広がり止められない。</p>
<p>代表的事例：</p> <p>化学分野では知らない。</p>
<p>代表的研究者：</p> <p>化学分野では知らない。(ケモインフォマティクスの研究者はいるが。)</p>
<p>公共データベース：</p> <p>遺伝子の研究には、NCBI の GenBank を使っている。</p> <p>東北メガバンクは色々なデータベースの寄せ集めである。本来、最初から設計されたものが使いやすい。</p>
<p>ベンチャー企業：</p> <p>Preferred Networks</p>
<p>その他：</p> <p>化学企業との共同研究を希望されている。</p> <p>Heart View の論文「ディープラーニングの医学への応用」の別刷を頂いた。</p>

4-2-10. 慶應大学榊原教授

<p>日時： 2019年2月27日(水) 17:00~18:00</p>
<p>対応者： 榊原康文教授・慶應義塾大学理工学部</p>
<p>背景：</p> <p>富士通在籍時に第五世代コンピュータープロジェクトに関わった。その頃からバイオインフォマティクスの研究に携わり、化学分野への展開は、慶應義塾大学に生命情報学科ができて共同研究が始まってからになる。現在、京都大学の掛谷教授が代表を務める新学術領域研究「化学コミュニケーションのフロンティア」の計画班員で、天然物有機化学研究者が多いこの新学術領域では、数少ない人工知能の研究者。人工知能に関わる共同研究やデータベース作成を担当している。また、内閣府 PRISM プロジ</p>

<p>ェクトの「量子コンピュータを用いた創薬ターゲット探索ソフトウェア等開発」にも関与し、量子コンピュータにも期待している。</p>
<p>展望：</p> <p>化学分野での人工知能の応用は、化学の研究者と人工知能の研究者の密な連携が必要である。化学分野での従来の実験主体の方法から踏み出して、新しい情報科学手法を取り入れる必要がある。バイオインフォマティクスの分野でも、人材育成プログラムが行われてきたが、一週間ぐらいの集中講義では中々上手く行かない。学生の頃から両方の分野を勉強することにより、化学の専門家でもアルゴリズムが理解できる人材作りが大切である。社会人であれば、専門家同士の密な接触で進めるのがよいと思う。</p> <p>人工知能の特徴は非構造化データが取り扱えること。化学の研究者の問題をしっかりと理解して、それをどのように人工知能の問題に落とし込んで行くかがポイントになる。化学構造を表現する SMILES を適用した深層学習手法を開発してきたが、一つの化学構造に対して複数の表記がある点が問題である。文法構造を入れることで、結果が改善できると思っている。</p> <p>人工知能を用いるには数千～数万のデータが必要だが、計算量が大きいことが、海外との競争で問題になる。多くのパラメータを探索する必要がある、計算機パワーの差から結果がすぐ出て来ないようでは競争に負けてしまう。将来的には、化学も強化学習の枠組みに落とせるのではないだろうか。</p>
<p>代表的事例：</p> <p>Neural Information Processing Systems (NIPS) での研究報告 Nature の姉妹誌の論文</p>
<p>代表的研究者：</p> <p>九州工業大学の山西芳裕教授（京都大学化学研究所の金久研出身） 京都大学の奥野恭史教授</p>
<p>公共データベース：</p> <p>PubChem Cancer Cell Line Encyclopedia (CCLE) NCI のデータベース The Cancer Genome Atlas (TCGA) のデータベース Catalogue Of Somatic Mutations In Cancer (COSMIC)</p>
<p>ベンチャー企業：</p> <p>ゲノム系のベンチャーは多いが、化学系のベンチャーは知らない。</p>
<p>その他：</p> <p>産業技術総合研究所の齋藤研究員は榊原教授の研究室の出身。</p>

5. 文献検索

5-1. 概要

最初に、JDreamIII を使って、次のキーワードで検索を行った。

「人工知能に関するキーワード」

人工知能、アーティフィシアルインテリジェンス、計算知能

AI、artificial intelligence、artificial intelligent、computational intelligence

機械学習

machine learning

強化学習

power learning、reinforcement learning

深層学習、ディープラーニング

deep learning

ランダムフォレスト

random forest

インフォマティクス

informatics

ベイズ

Bayesian

「化学に関するキーワード」

化学、ケミストリー、化学一般、化学分野

chemistry、chem

マテリアルズインフォマティクス、マテリアル～インフォマティクス

materials informatics、material～informatics

「人工知能に関するキーワード」のいずれか、かつ、「化学に関するキーワード」のいずれかの条件で検索した結果、多くのノイズが含まれていた。この原因は、化学分野以外の文献がヒットしていることに主たる原因があると考えられた。

そこで、既に、代表的な事例として収集を開始していた論文、総説が引用している雑誌に検索対象を限定することにした。そのリストを下に示す。

「雑誌名リスト」

Accounts of Chemical Research

ACS Applied Material & Interfaces

ACS Catalysis

ACS Central Science

ACS Nano

ACS Omega

ACS Photonics
Advanced Theory and Simulations
Advances in Catalysis
AIChE Journal
Angewandte Chemie, International Edition
Catalysis Science & Technology
Catalysis Today
ChemCatChem
Chemical Communication
Chemical Review
Chemical Science
ChemInform
Chemistry
Chemistry, A European Journal
Chemistry Letters
Chemistry of Materials
Chimia
Computational Materials Sciences
Coordination Chemistry Reviews
CrystEngComm
Energy & Environmental Science
Frontiers in Materials
Industrial & Engineering Chemistry Research
JOM
Journal of Alloys and Compounds
Journal of American Chemical Society
Journal of Catalysis
Journal of Chemical Information and Computer Sciences
Journal of Chemical Information and Modeling
Journal of Chemical Physics
Journal of Chemical Theory and Computation
Journal of Cheminformatics
Journal of Computational Chemistry
Journal of Computer-Aided Molecular Design
Journal of Materiomics
Journal of Organic Chemistry
Journal of Physical Chemistry C
Journal of Physical Chemistry Letters
Macromolecules
Materials Discovery

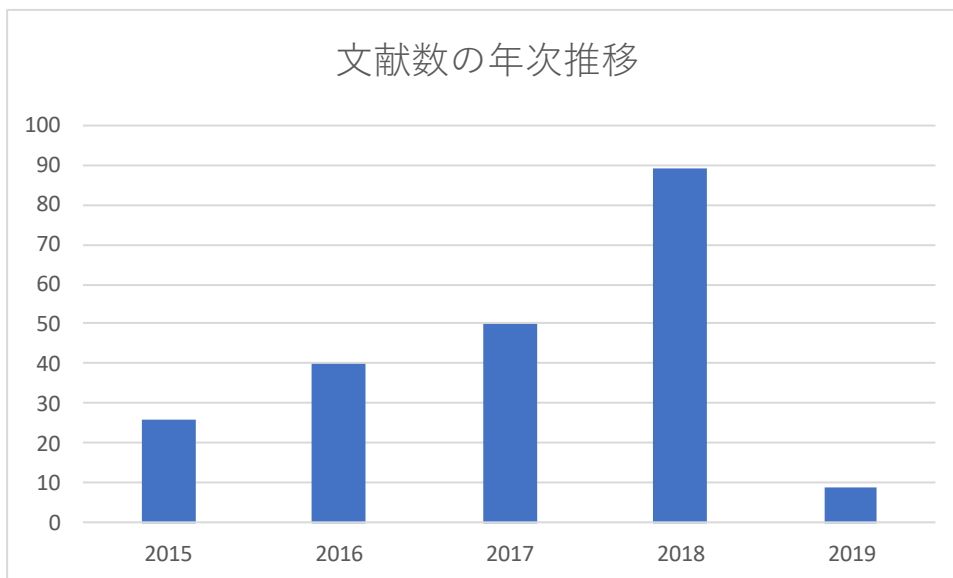
Materials Horizons
Molecular Informatics
MRS Bulletin
Nature
Nature Chemistry
Nature Communication
Nature Materials
Nature Physics
New Journal of Physics
Nondestructive Testing and Evaluation
npj Computational Materials
Organic Letters
Organometallics
Physical Chemistry Chemical Physics
Physical Review B
Physical Review Letters
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America
Reviews in Computational Chemistry
RSC Advances
Science
Science Advances
Science and Technology of Advanced Materials
Science Report
Scientific Data
Small
Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science

これらの雑誌は、必ずしもデータベースに収録されているとは限らないが、使用データベースにより収録雑誌が異なるため、候補となる雑誌名を全て挙げている。

雑誌名を絞った結果、JDreamIII では、357 件、Web of Science では 303 件のヒットがあった。検索結果を検討すると、ノイズは減ったものの、まだ、今回の調査対象から外れる薬物設計などに関わる論文が含まれていたため、これらをタイトルと要旨から判断して手作業で削った。

その結果得られた 214 件の論文を、タイトル、著者、雑誌名のみ、付表 11-1 に列挙した。この中には、相当数の総説が含まれているが、それも参考になると考え、リストに残した。また、次の年代順の推移の数字は総説も含めたものになっている。

得られた結果を年代毎にまとめると下図のようになり、この数年、急速に論文数が増えていることが明らかになった。しかし、その絶対数は必ずしも多くはなく、その中から講義資料として使えると想定したデータを備えた論文を探し出すことにも、この時点で、自ずと限界があることが明らかになった。



5-2. 文献検索結果一覧

検索結果の文献リストは、11-1. に付表としてまとめた。

6. 代表的事例

6-1. 概要

代表的な事例は、最近の総説 (Nature, 559, 547-555, 2018、Science, 361, 360-365, 2018)、論文の引用文献から、インパクトの高い雑誌に掲載され、データが公開されていることを判断基準に選択した。また、できるだけ多くの分野から、できるだけ異なったパターンの事例を集めた。そのまま教材となるだけでなく、どのように応用されているか、どのような人工知能的手法が用いられているかといった点も参考になると思われる。

しかし、論文に使われたデータが公開されているという基準は、教材として使用するために必要な条件ではあるものの、代表的な事例を紹介するという目的とは、矛盾する場合もあった。例えば、サムスンとハーバード大学との OLED 候補化合物に関する共同研究は、企業が関わる事例 (Nature Materials, 15, 1120-1127, 2016) としても有名ではあるが、ここでは取り上げないこととした。但し、高分子の例は少なかったので、データは公開されていないが、4. で紹介した、昭和電工の事例を取り上げることにした。

6-2. 個別の代表的事例の紹介

以下に、個別の代表的事例を紹介する。

6-2-1. 有機化学

Nature 559, 377-381, 2018 (有料)
Controlling an Organic Synthesis Robot With Machine Learning to Search for New Reactivity
Granda, J. M., Donina, L., Dragone, V., Long, D.-L. & Cronin, L.
「有機」 「ハイスループット反応装置によるデータ取得」 「データ解析に SVM や線形判別分析を活用」 手作業で行うより化学反応と分析を速く行う有機合成ロボットを作製、少数の実験を行うことで、可能な化合物の組合せの反応性を予測した。判断には機械学習を用い、化学構造は二値化し、反応はリアルタイムで NMR と IR を用いて解析した。10%のデータセットを用いて、969 の化合物の組合せの反応性を 80%以上の正確さで予測できた。線形カーネルの SVM で、反応前後のスペクトルから反応の有無を二値化している。一部のデータを取得後、線形判別分析を用いて、反応の有無を予測し、反応する可能性の高い空間を探索している。
補助資料：(無料) 41586_2018_307_MOESM5_ESM.csv に、2 または 3 化合物の組合せ 969 件の反応性、判別値

Science 359, 429-434, 2018 (有料)
A Platform for Automated Nanomole-scale Reaction Screening and Micromole-scale

Synthesis in Flow
Perera, D., Tucker, J. W., Brahmhatt, S., Helal, C.J., Chong, A., Farrell, W., Richardson, P. & Sach, N.W.
<p>「有機」</p> <p>「ハイスループット反応装置によるデータ取得」</p> <p>迅速でナノモルスケールの自動反応装置の開発。Suzuki-Miyaura カップリングを例に、5,760 条件を検討。24 時間で 1,500 を越える条件検討が可能。</p> <p>この文献自体は解析を行っていないが、文献 1 の中で、機械学習のデータとして使われている。</p>
<p>補助資料：(有料)</p> <p>S1.xlsx に、5,760 の反応条件と収率を格納。</p>

Science, 361, 569, 2018 (有料)
Mapping the Dark Space of Chemical Reactions with Extended Nanomole Synthesis and MALDI-TOF MS
Lin, S., Dikler, S., Blincoe, W.D., Ferguson, R.D., Sheridan, R.P., Peng, Z., Conway D.V., Zawatzky, K., Wang, H., Cernak, T., Davies, I.W., DiRocco, D.A., Sheng, H., Welch, C.J. & Dreher, S.D.
<p>「有機」</p> <p>「ハイスループット反応装置の反応を MALDI-TOF MS で解析」</p> <p>化学構造や反応条件に依存し易い C-N カップリング反応を汎用性の高いハイスループット反応装置で検討した。反応の確認もハイスループットに MALDI-TOF MS を用いて解析している。</p> <p>この文献中では人工知能などを用いた解析は行っていないが、将来的に、ロボティクスに人工知能機能を付加することを想定した研究である。</p>
<p>補助資料：(有料)</p> <p>aar6236_Lin_Data_S1_to_S5.xlsx に反応に用いた化学構造、各種触媒での反応成績などのデータがまとめられている。</p>

Journal of American Chemical Society, 140, 5004–5008, 2018 (有料)
Deoxyfluorination with Sulfonyl Fluorides: Navigating Reaction Space with Machine Learning
Nielsen, M.K., Ahneman, D.T., Riera, O. & Doyle, A.G.
<p>「有機」</p> <p>「ハイスループット反応装置でデータを取得」</p> <p>「ランダムフォレストを用いて反応条件を予測」</p> <p>様々な構造を持つアルコール (-OH) からフッ化物 (-F) への変換反応を機械学習で解析した。全 640 反応を 448 の訓練データと 192 の評価データに分けて反応条件を予測して良好な結果を得たばかりでなく、訓練データに含まれないアルコールの反応条件</p>

も良好に予測することができた。
補助資料：(有料) si_001.pdf に、ランダムフォレストの R ソースコードが含まれている。 si_002.zip の中に、 Excel 形式で、化合物の記述子、反応収率が格納されている。

Science 360, 186-190, 2018 (有料)
Predicting Reaction Performance in C-N Cross-coupling Using Machine Learning
Ahnenman, D.T., Estrada, J.G., Lin, S., Dreher, S.D., & Doyle, A.G.
「有機」 「ハイスループット反応装置でデータを取得」 「分子記述子を用いてランダムフォレストで解析」 阻害性添加剤の存在下、アリルハライドと 4-メチルアニリンとのパラジウム触媒 Buchwald-Hartwig クロスカップリングを、ハイスループット実験で検討し、収率に関する多くのデータを得た。そのデータを、原子、分子、振動の記述子を用いて、ランダムフォレストモデルで解析することにより、線形回帰分析より良好に反応の結果を予想できることを示した。
補助資料：(有料) aar5169-Ahenman-SM_revision_1.pdf に全ての補助資料を記載。 (その中に、プログラムとデータのダウンロードサイトと R caret の問題点の議論。) rxnpredict-master.zip の中にプログラムとデータを格納。

CrystEngComm, 19, 3737-3745, 2017 (有料)
A Publicly Available Crystallisation Data Set and its Application in Machine Learning
Pillong, M., Marx, C., Piechon, P., Wicker, J.G.P., Cooper, R.I. & Trixie Wagner, T.
「有機」 「多くの有機化合物の結晶化条件を検討」 「その結果をランダムフォレストを用いて解釈」 市販の 319 化合物の 18 種類の溶媒に対する溶解度と結晶性のデータを収集し、得られた結果をランダムフォレストを用いて解釈した。
補助資料：(有料) c7ce00738h6.csv に、319 化合物×18 溶媒×(溶解性+結晶性)のデータ。

CrystEngComm, 18, 4133-4141, 2016 (有料)
Computational Identification of Organic Porous Molecular Crystals
Evans, J.D., Huang, D.M., Haranczyk, M, Thornton, A.W., Sumbly, C.J. & Doonan, C.J.
「有機」 「シミュレーションにより、空隙の大きな有機分子結晶構造を形成する分子を探索」

<p>「SVM を用いて大きな表面積を与える因子を解析」</p> <p>幾何学的な解析とシミュレーションによって 150,000 の有機化合物から、481 の空隙の大きな有機分子結晶を与えると予想される化合物を選択。その化学構造の特徴を SVM を用いて解析した結果、ファンデルワールス表面積など、分子サイズに関連する性質が、高い空孔度の予測に有効であることが明らかになった。</p>
<p>補助資料：(無料)</p> <p>GitHub 中の oPMC_porosity.xlsx に、481 化合物×11 計算値のファイルを登録。</p>

6-2-2. 無機化学

<p>Nature Communications, 2019, https://doi.org/10.1038/s41467-019-08483-9 (無料)</p>
<p>Capturing Chemical Intuition in Synthesis of Metalorganic Frameworks</p>
<p>Moosavi, S.M., Chidambaram, A., Talirz, L., Haranczyk, M., Stylianou, K.C. & Smit, B.</p>
<p>「無機」</p> <p>「GA で次の 30 の結晶化条件を選択して 3 サイクル実験」</p> <p>「結晶化に大切な因子をランダムフォレストを用いて解釈」</p> <p>MOF (HKUST-1) の結晶化を、溶媒、温度、時間などの実験条件を変化させて検討した。まず、最初の 30 条件で得られた結果を GA で最適化して、次の 30 条件を選択した。このサイクルを 3 回繰り返して、比表面積で最適に近い結果を得た。改めて、全ての 90 条件をランダムフォレストを用いて解析して、重要なパラメータを抽出した。</p>
<p>補助資料：(無料)</p> <p>41467_2019_8483_MOESM5_ESM.csv に、(9 のパラメータ+結晶性+比表面積) × 30 条件×3 サイクルの全てのデータを格納。</p>

<p>Nature, 533, 73-76, 2016 (有料)</p>
<p>Machine-learning-assisted Materials Discovery using Failed Experiments</p>
<p>Raccuglia, P., Elbert, K.C., Adler, P.D.F., Falk, C., Wenny, M.B., Mollo, A., Zeller, M., Friedler, S.A., Schrier, J. & Norquist, A.J.</p>
<p>「無機」</p> <p>「実験室のノートから、失敗した実験を含め多くのデータを収集」</p> <p>「SVM を使って、化学構造記述子から合成が成功する条件を抽出」</p> <p>実験ノートから MOF の水熱合成の条件のデータを収集し、化学構造に基づく多くの記述子を発生させ、SVM で実験結果にフィッティングした。その結果、実験条件として重要なパラメータが明らかになった。</p>
<p>補助資料：(無料)</p> <p>nature17439-s2.csv、nature17439-s3.csv に、3,955 反応条件×273 (パラメータ+結果) と予測結果を格納。</p>

Journal of Physical Chemistry Letters, 9, 1064–1071, 2018 (有料)
Accelerating Chemical Discovery with Machine Learning: Simulated Evolution of Spin Crossover Complexes with an Artificial Neural Network
Janet, J.P., Chan, L. & Kulik, H.J.
「無機」 「多くの候補化合物を GA で最適化」 「評価関数には計算時間を短縮するためにニューラルネットワークを使用」 5,600 を越える Spin Crossover Complexes 候補化合物の評価をニューラルネットワークを用いて計算時間を短縮し、えられた結果を GA で最適化した。
補助資料：(無料) ie7b00808_si_001.pdf に 41 配位子に対応する表が 6 つある。(立体構造に関するデータは ie7b00808_si_002.zip に格納されている。)

Advanced Theory and Simulations, 2019, 1800180 (有料)
Materials-Informatics-Assisted High-Yield Synthesis of 2D Nanomaterials through Exfoliation
Nakada, G., Igarashi, Y., Imai, H. & Oaki, Y.
「無機」 「層状化合物の剥離条件を検討」 「少数の実験による条件探索をスパースモデリングで効率化」 無機層状化合物の剥離条件を溶媒 14 種、層間に入るゲスト化合物 8 種を用いて検討し、剥離編の大きさと収率を評価した。その結果を用いて、条件探索がスパースモデリングで効率化できることを示した。
補助資料：(無し) 補助資料は無く、論文中的表 1 に 14 溶媒×8 ゲスト化合物×2 評価の全てのデータが記載されている。

6-2-3. 触媒化学

Journal of Physical Chemistry Letters, 6, 3528-3533, 2015 (無料)
Machine-learning-augmented Chemisorption Model for CO ₂ Electroreduction Catalyst Screening
Ma, X., Li, Z., Achenie, L.E.K. & Xin, H.
「触媒」 「d-band 計算から得られる値と原子のパラメータを収集」 「ニューラルネットワークを用いて CO の吸着エネルギーにフィッティング」 合金電極上での CO ₂ の還元反応に関して、d-band 計算単独よりもフィッティングのよいモデルをニューラルネットワークを用いて作成した。実験的に得られる CO の吸着エネルギーを計算で得られるパラメーターと原子パラメーターでモデル化した。

補助資料：(無料)

jz5b01660_si_001.pdf の中に、298 合金× (CO 吸着エネルギー+13 パラメータ) の表がある。

Science, 363, 247, 2019 (有料)

Prediction of Higher-selectivity Catalysts by Computer-driven Workflow and Machine Learning

Zahrt, A.F., Henle, J.J., Rose, B.T., Wang, Y., Darrow, W.T. & Denmark, S.E.

「触媒」

「立体構造と電子構造を加味した化学構造記述子を発生」

「SVM を使って、光学選択性を予測するモデルを作成」

「ニューラルネットワークで作成したモデルで訓練セット以外の結果を予測」

光学活性なリン酸触媒を用いるチオールの N-アシルイミンへの付加反応を、柔軟な立体構造を表現可能な記述子も含めて、SVM で解析した。データの一部を用いて、残りのデータを説明できるモデルが得られたばかりでなく、全てのデータを用いてニューラルネットワークで作成したモデルは、新たな光学活性触媒の立体選択性を予測すること示された。

補助資料：(有料)

aau5631_DataS1.xlsx に光学選択性の実験値と予測値、aau5631_DataS2.xlsx に分子記述子と予測値、aau5631_DataS3.xlsx に新たな化合物の実験値と予想値。

6-2-2. 高分子化学

Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (10), 2639–2646, 2018 (有料)

Computer-Aided Screening of Conjugated Polymers for Organic Solar Cell: Classification by Random Forest

Nagasawa, S., Al-Naamani, E. & Saeki, A.

「高分子」

「PCE を含む約 1,000 のデータを文献から収集」

「ニューラルネットワークとランダムフォレストを用いて解析」

ポリマーとフラーレンを組合せた有機太陽電池に関する約 1,000 の文献データを収集し、ニューラルネットワークとランダムフォレストを用いた解析を行った結果、ランダムフォレストを用いる分類の方が良好な結果を与えた。

補助資料：(無料)

jz8b00635_si_002.txt の中に、1,203 化合物の PCE_max(%), PCE_ave(%), Voc (V), Jsc (mA cm²), FF, Mw (kg mol⁻¹), Mn (kg mol⁻¹), PDI (=Mw/Mn), Monomer (g mol⁻¹), HOMO (eV), LUMO (eV), bandgap(eV), SMILES をテキストデータで格納している。

MRS Advances, 2019, DOI:10.1557/adv.2019.57 (有料)
Prediction of Repeat Unit of Optimal Polymer by Bayesian Optimization
Minami, T., Kawada, M., Fujita, T., Murofushi, K., Uchida, H., Omori, K. & Okuno, Y.
<p>「高分子」</p> <p>「PolyInfo にガラス転移温度の記載のある 417 の高分子を例題として使用」</p> <p>「ベイズ最適化で機能性高分子の設計を加速」</p> <p>バーチャルな実験によるガラス転移温度の最大化により、機能性高分子の開発にベイズ最適化の応用の可能性を示した。ランダムな選択より、40 倍、目的高分子の探索が速くなる。効率 は データセットの大きさによらず、小さな訓練データでも構わない。繰り返しユニットは SMILES で表現、10 ユニットで ECFPs の数密度の記述子を発生。高分子のガラス転移温度の予測にはガウス過程回帰を用いた。高分子のガラス転移温度の情報は PolyInfo から得た 417 点。訓練データは 10 の構造とガラス転移温度。残りの 407 構造のガラス転移温度を予測。一番高いガラス転移温度が予測されたサンプルを訓練データに加え、同じ作業を繰り返す。初期値依存性を低減するために、500 の初期訓練データに対して同様の計算を行った。</p>
<p>補助資料：(無し)</p> <p>データは無いが、民間企業が PolyInfo を活用した事例として紹介する。</p>

7. 公共データベース

7-1. 概要

有識者ヒアリングの結果、この分野で用いられている代表的なデータベースとして、

PubChem

NIMS の MatNavi (特に、PolyInfo)

NIST のデータベース (ThermoDataEngine など)

Materials Project のデータベース

などが多くの方から挙げられた。他に

DrugBank

Materials Genome Initiative のデータベース

SureChEMBL

GDB-11、GDB-13、GDB-17

Clean Energy Project のデータベース

PubChemQC

NCBI の GenBank

Tox21

HESS

ToxBank

米国国立衛生研究所のデータベース

米国国立がん研究所のデータベース

Available Chemicals Directory

KNAPSAck

CCCBDB

Begdb

Truhlar 先生系の DataSet

Mnsol

JANAF Table

IUPAC Task Group on Atmospheric Chemical Kinetic Data Evaluation

MolecularDescriptors

xldatabases

COD

American Mineralogist Crystal Structure Database

など、それぞれの研究者の目的に応じて使用する様々なデータベースがある。

また、

DeepChem
GitHub
Pymatgen
XenonPy
package 'datasets'
The Data and Story Library
UC Irvine Machine Learning Repository
HARVARD Dataverse
OPSIN

などの様にプログラムのライブラリーを紹介される方もあった。

しかし、公共データベースは、それ自体を使って規則を導き出すという使い方（恐らく、個々の企業では、こうした用途は少ないと思われる。）ばかりでなく、手許にあるデータを増やす手段、分子設計方針が得られた後の化合物検索など、様々な使い方が考えられるので、有識者の方々から名前が挙がったデータベースばかりでなく、アクセス可能なものを広く紹介することとした。

化学分野の無料の公共データベースをまとめたサイトとして、

<http://depth-first.com/articles/2011/10/12/sixty-four-free-chemistry-databases/>

<http://cds.rsc.org/externalresources.asp>

が充実しているので、まず、これをアルファベット順にまとめた。

但し、これらのサイトに記載のあるデータベースには、既にアクセスできないもの、アクセスできても更新が行われていないもの、データ数が少ないもの、市販の化合物のデータベースの様に類似データベースの多いもの、Protein Data Bank の情報の一部を抽出して加工、または、データを付加したものなど、恐らく、化学企業で、実際に使われることは無いと思われるものも多く含まれている。一部、SMILES の発生、Protein Data Bank のビューアなど、データ処理プログラムも含まれている。

化学分野の情報科学の応用に関する代表的な文献を辿ると、こうした無料のデータベースばかりでなく、むしろ、データ量が多く、有用な情報を提供している Cambridge Crystallographic Data Centre や Inorganic Crystal Structure Database などの結晶構造データベースや、Reaxys などの反応データベースなど、有料データベースを基礎データとして用いているものも多い。こうした有料のデータベースを紹介しないのは片手落ちであると思われたので、

Hill, J. et al, "Materials Science with Large-scale Data and Informatics: Unlocking New Opportunities," MRS Bulletin, 41 (5), 399-409, 2016

の総説から有料データベースも取り上げることにした。この総説によれば、多くのデータ

ベースは旧態然としていて、情報科学的な利用が考えられておらず、API (application programming interface) を備えていないものがほとんどである。

7-2. 個別のデータベース紹介

代表的公共データベースを、11-2. 付表にまとめた。

8. ベンチャー企業

8-1. 概要

この分野のベンチャー企業の数多くないというのが、有識者の方々の共通認識であったため、ベンチャー企業に関しては、名前の挙げた下の8社に関する簡単な記載に留めた。併せて、有識者から得られたコメントを転記した。

Citrine Informatics (知京副拠点長)

Uncountable

MI-6 (津田教授)

Preferred Networks (齋藤研究員)

Affinity Science (船津教授)

SyntheticGestalt (池端エキスパート)

Intermolecular (知京副拠点長)

Ilika (知京副拠点長)

8-2. 個別のベンチャー企業紹介

以下に、ヒアリングで挙げたベンチャー企業を中心に簡単にまとめた。

サイト： https://citrine.io/
企業名：Citrine Informatics
概要：より速い材料開発のための人工知能データプラットフォームを提供。「当初の企業データを集めるビジネスモデルで失敗。今は、公的機関から公開されたデータを蓄積し、それにAPIを加えたビジネスを展開。(知京副拠点長談)

サイト： https://www.uncountable.com/
企業名：Uncountable
概要：人工知能を用いたフォーミュレーション開発。

サイト： https://mi-6.co.jp/
企業名：MI-6
概要：MI-6株式会社はマテリアルズ・インフォマティクスを推進し、豊かな未来へ続く新たなソリューションをご提供します。「5、6人の小さな会社だが、競争相手はいない。企業からデータをもらって解析している。まだ、もの作りまで行っていない。(津田教授談)」

サイト： https://www.preferred-networks.jp/ja/
企業名：Preferred Networks
概要：ロボティクスや工作機械への応用。物体認識・制御・異常検知・最適化技術の研究開発。「同社のChainer Chemistryは化学向け深層学習ライブラリー。(齋藤研究員

談)」

サイト：<http://affinity-science.com/>

企業名：Affinity Science

概要：海外または国内で開発された優れた科学技術ソフトウェアの輸入販売をはじめ、受託研究・計算、計算機環境を含むトータルシステムの提案、コンサルティング業務など、計算科学に関連したサービスを提供しています。「Dragon は分子記述子の計算によく使用されている。(船津教授談)」

サイト：不明

企業名：SyntheticGestalt

概要：「元々、ゲノム情報活用などのバイオ系だが、機器分析データへの人工知能活用にも展開している。(池端エキスパート談)」

サイト：<https://intermolecular.com/>

企業名：Intermolecular

概要：先端的材料イノベーションの信頼できるパートナー。「主に、半導体。(知京副拠点長談)」

サイト：<https://www.ilika.com/>

企業名：Ilika

概要：固体電池技術と材料イノベーションのパイオニア。「主に、電池。(知京副拠点長談)」

9. 化学分野における情報科学の活用の現状と今後

化学分野における情報科学の活用は、大きな転換点にあるのかもしれない。知京副拠点長のコメントにあるように、背景となる歴史的な流れとして、

- 1) コンビナトリアル化学による実験のハイスループット化
- 2) 大規模データベースを用いたバーチャルスクリーニング
- 3) ロボット実験にハイスループットデータ生成

がある。

マテリアルズサイエンスの実験側の試みとして、最も初期のコンビナトリアル化学は期待されたほど研究の加速には役立たなかった。その原因は、少なくとも当時は、ハイスループット化自体が難しく、中々、データが出て来なかったことにある。

そこで、**Material Project** を初めとして、計算機化学を中心に、大量のバーチャルデータを作り出して、それをバーチャルにスクリーニングすることで、物質探索を行うという流れが出て来た。この際に、そのデータを作成するためのソースデータとして、あるいは一部の目的データを補うために、公共のデータベースが多用された。

情報科学的な手法は、得られた大量データの解析、データ作成のための量子力学計算の内挿による簡略化、分子の立体構造を発生するための経験的力場の作成、バーチャルな化学構造の発生などの目的で使われた。

しかし、バーチャルなデータは、実際に化合物を合成することが困難だったり、予想された結晶構造が不安定であったり、プロセス条件に依存するバルクの物性との対応がつかなくなったりするといった問題があった。

そこで、最近では、少ない数のデータを活かすという、化学分野の研究の本質に立ち返った研究に情報科学的な手法が用いられている。ベイズ最適化やスパースモデリングの手法を用い、少数の実験結果のデータから次の実験を提案したり、ランダムフォレストなどの手法で、得られた結果全体を改めて化学的な直感に合う形で解析したり、類似の解析結果の転位学習を利用して、データの少ない実験のモデルを構築したりといった方法が提案されている。

また、もう一つの流れとして、実験のロボット化、ハイスループット化の進展が挙げられる。これは、技術の進歩によるコンビナトリアル化学の復活と捉えることができる。ハイスループットといっても、ビッグデータといえるほどのデータが出て来る訳ではないが、その解釈には情報科学的な手法が欠かせなくなっている。また、こうした実験にはプロセス条件や、失敗した結果も含まれるので、化学的な知識の獲得や、研究開発の加速化に役立つものと期待される。

今回の調査研究の企画提案の段階で、最近、多くのトップジャーナルに掲載される化学分野における情報科学の応用に関する論文に、サプリメントデータとして実験結果をテーブルにしたものを複数見出していたので、それが JACI が構想している講座の教材として使えるのではないかと直感した。

しかし、現在は、まだ、バーチャルな系の論文も多い中で、この数年、ようやく、そう

した実データを伴った論文が出始めたという状況にある。そのため、当初、予想したほどには、目的とする代表的事例が見出せないことになった。現在が、バーチャルなデータからリアルなデータの利用へ、少数データの活用の変換点にあるとすれば、もう数年、こうした事例を継続的に収集することに意味がありそうに思える。

また、立体的な情報も含め、化学構造をどのように取り扱うかは、古くからある問題であるが、現在でも解決されたわけではない。この部分に関しても、引き続き、研究が続けられていくことになるであろう。

10. 終わりに

今回の調査の眼目は、代表的な事例を紹介しつつ、化学分野における情報科学的手法の応用に関する教材を提供することにあった。しかし、教材として使えるデータを提供する論文は必ずしも多くはなかった。それでも、その中身は、様々な分野に及び、情報科学的な手法の利用方法も異なり、具体的な情報科学的手法も複数含まれるので、最初の教材として価値あるものであると思われる。また、こうした代表的な事例ばかりでなく、有識者ヒアリング、文献検索、公共データベース、ベンチャー企業などの情報も含めて、役立つ資料集となれば、幸である。

以上

1 1. 付表

11-1. 付表:文献検索結果一覧

以下に、検索結果を書誌事項のみ記載する。

本文中に引用した総説に★を、代表的事例に取り上げたものを◎で示した。

タイトル : Many Molecular Properties from One Kernel in Chemical Space
著者 : Ramakrishnan, R. & von Lilienfeld, O.A.
文献 : Chimia, 69 (4), 182-186, 2015

タイトル : Predicting Melting Points of Organic Molecules: Applications to Aqueous Solubility Prediction Using the General Solubility Equation
著者 : McDonagh, J.L., van Mourik, T. & Mitchell, J.B.O.
文献 : Molecular Informatics, 34 (11-12), 715-724, 2015

タイトル : Big Data Meets Quantum Chemistry Approximations: The Delta-Machine Learning Approach
著者 : Ramakrishnan, R., Dral, P.O., Rupp, M. & von Lilienfeld, O.A.
文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 11 (5), 2087-2096, 2015

タイトル : Machine Learning of Single Molecule Free Energy Surfaces and the Impact of Chemistry and Environment upon Structure and Dynamics
著者 : Mansbach, R.A. & Ferguson, A.L.
文献 : Journal of Chemical Physics, 142 (10), 2015

タイトル : Searching Molecular Structure Databases with Tandem Mass Spectra using CSI:FingerID
著者 : Duhrkop, K., Shen, H.B., Meusel, M., Rousu, J. & Bocker, S.
文献 : Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America, 112 (41), 12580-12585, 2015

タイトル : Machine Learning of Parameters for Accurate Semiempirical Quantum Chemical Calculations
著者 : Dral, P.O., von Lilienfeld, O.A. & Thiel, W.
文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 11 (5), 2120-2125, 2015

タイトル : Predictive QSPR Modelling for the Second Virial Coefficient of the Pure Organic Compounds
--

著者 : Mokshyna, E., Polishchuk, P.G., Nedostup, V.I. & Kuzmin, V.E.

文献 : Molecular Informatics, 34 (1), 53-59, 2015

タイトル : Prediction of Conformationally Dependent Atomic Multipole Moments in Carbohydrates

著者 : Cardamone, S. & Popelier, P.L.A.

文献 : Journal of Computational Chemistry, 36 (32), 2361-2373, 2015

タイトル : Realistic Sampling of Amino Acid Geometries for a Multipolar Polarizable Force Field

著者 : Hughes, T.J., Cardamone, S. & Popelier, P.L.A.

文献 : Journal of Computational Chemistry, 36 (24), 1844-1857, 2015

タイトル : Accelerated Materials Property Predictions and Design using Motif-based Fingerprints

著者 : Huan, T.D., Mannodi-Kanakkithodi, A. & Ramprasad, R.

文献 : Physical Review B, 92 (1), 2015

タイトル : The Development of an Artificial Organic Networks Toolkit for LabVIEW

著者 : Ponce, H., Ponce, P. & Molina, A.

文献 : Journal of Computational Chemistry, 36 (7), 478-492, 2015

タイトル : Expert System for Predicting Reaction Conditions: The Michael Reaction Case

著者 : Marcou, G., de Sousa, J.A., Latino, D.A.R.S., de Luca, A., Horvath, D., Rietsch, V. & Varnek, A.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 55 (2), 239-250, 2015

タイトル : Cheminformatics Research at the Unilever Centre for Molecular Science Informatics Cambridge

著者 : Fuchs, J.E., Bender, A. & Glen, R.C.

文献 : Molecular Informatics, 34 (9), 626-633, Sp. Iss., 2015

タイトル : Informatics Derived Materials Databases for Multifunctional Properties

著者 : Broderick, S. & Rajan, K.

文献 : Science and Technology of Advanced Materials, 16 (1), 2015

タイトル : Materials Cartography: Representing and Mining Materials Space Using Structural and Electronic Fingerprints

著者 : Isayev, O., Fourches, D., Muratov, E.N., Oses, C., Rasch, K., Tropsha, A. & Curtarolo, S.

文献 : Chemistry of Materials, 27 (3), 735-743, 2015

タイトル : Informatics-Aided Density Functional Theory Study on the Li Ion Transport of Tavorite-Type $\text{LiMTO(4)F} (\text{M}^{3+} \text{-T}^{5+}, \text{Ni}^{2+} \text{-T}^{6+})$

著者 : Jalem, R., Kimura, M., Nakayama, M. & Kasuga, T.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 55 (6), 1158-1168, 2015

タイトル : Comprehensive Mechanical Property Classification of Vapor-grown Carbon Nanofiber/vinyl Ester Nanocomposites using Support Vector Machines

著者 : Abuomar, O., Nouranian, S., King, R., Ricks, T.M. & Lacy, T.E.

文献 : Computational Materials Science, 99, 316-325, 2015

タイトル : Chemical Process Simulation for Dynamic Risk Analysis: A Steam Methane Reformer Case Study

著者 : Moskowitz, I.H., Seider, W.D., Soroush, M., Oktem, U.G. & Arbogast, J.E.

文献 : Industrial & Engineering Chemistry, 54 (16), 4347-4359, 2015

タイトル : Prediction of Low-Thermal-Conductivity Compounds with First-Principles Anharmonic Lattice-Dynamics Calculations and Bayesian Optimization

著者 : Seko, A., Togo, A., Hayashi, H., Tsuda, K., Chaput, L. & Tanaka, I.

文献 : Physical Review Letters, 115 (20), 2015

タイトル : New Knowledge and Tools for Crystal Design: Local Coordination versus Overall Network Topology and much more

著者 : Alexandrov, E.V., Shevchenko, A.P., Asiri, A.A. & Blatov, V.A.

文献 : CrystEngComm, 17 (15), 2913-2924, 2015

◎ タイトル : Machine-Learning-Augmented Chemisorption Model for CO_2 Electroreduction Catalyst Screening

著者 : Ma, X.F., Li, Z., Achenie, L.E.K. & Xin, H.L.

文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 6 (18), 3528-3533, 2015

タイトル : Machines First, Humans Second: on the Importance of Algorithmic Interpretation of Open Chemistry Data

著者 : Clark, A.M., Williams, A.J. & Ekins, S.

文献 : Journal of Cheminformatics, 7, 2015

タイトル : Materials Prediction via Classification Learning
著者 : Balachandran, P.V., Theiler, J., Rondinelli, J.M. & Lookman, T.
文献 : Scientific Reports, 5, 2015

タイトル : Mapping Chemical Selection Pathways for Designing Multicomponent Alloys: an informatics framework for materials design
著者 : Srinivasan, S., Broderick, S.R., Zhang, R.F., Mishra, A., Sinnott, S.B., Saxena, S.K., LeBeau, J.M. & Rajan, K.
文献 : Scientific Reports 5, 2015

タイトル : ChemDoodle Web Components: HTML5 toolkit for chemical graphics, interfaces, and informatics
著者 : Burger, M.C.
文献 : Journal of Cheminformatics, 7, 2015

タイトル : Classification of Octet AB-type Binary Compounds using Dynamical Charges: A Materials Informatics Perspective
著者 : Pilania, G., Gubernatis, J.E. & Lookman, T.
文献 : Scientific Reports, 5, 2015

タイトル : Material Synthesis and Design from First Principle Calculations and Machine Learning
著者 : Takahashi, K. & Tanaka, Y.
文献 : Computational Materials Science, 112, 364-367 Part A, 2016

タイトル : Critical Assessment of Regression-based Machine Learning Methods for Polymer Dielectrics
著者 : Mannodi-Kanakkithodi, A., Pilania, G. & Ramprasad, R.
文献 : Computational Materials Science, 125, 123-135, 2016

タイトル : Design of Efficient Molecular Organic Light-emitting Diodes by a High-throughput Virtual Screening and Experimental Approach
著者 : Gomez-Bombarelli, R., Aguilera-Iparraguirre, J., Hirzel, T.D., Duvenaud, D., Maclaurin, D., Blood-Forsythe, M.A., Chae, H.S., Einzinger, M., Ha, D.G., Wu, T., Markopoulos, G., Jeon, S., Kang, H., Miyazaki, H., Numata, M., Kim, S., Huang, W.L., Hong, S.I., Baldo, M., Adams, R.P. & Aspuru-Guzik, A.
文献 : Nature Materials, 15 (10), 1120, 2016

© タイトル : Machine-learning-assisted Materials Discovery using Failed

Experiments
著者 : Raccuglia, P., Elbert, K.C., Adler, P.D.F., Falk, C., Wenny, M.B., Mollo, A., Zeller, M., Friedler, S.A., Schrier, J. & Norquist, A.J.
文献 : Nature, 533 (7601), 73, 2016

タイトル : Incorporation of Local Structure into Kriging Models for the Prediction of Atomistic Properties in the Water Decamer
著者 : Davie, S.J., Di Pasquale, N. & Popelier, P.L.A.
文献 : Journal of Computational Chemistry, 37 (27), 2409-2422, 2016

タイトル : Machine-learning Prediction of the d-Band Center for Metals and Bimetals
著者 : Takigawa, I., Shimizu, K.I., Tsuda, K. & Takakusagi, S
文献 : RSC Advances, 6 (58), 52587-52595, 2016

タイトル : From Organized High-Throughput Data to Phenomenological Theory using Machine Learning: The Example of Dielectric Breakdown
著者 : Kim, C., Pilania, G. & Ramprasad, R.
文献 : Chemistry of Materials, 28 (5), 1304-1311, 2016

タイトル : Perspective: Machine Learning Potentials for Atomistic Simulations
著者 : Behler, J.
文献 : Journal of Chemical Physics, 145 (17), 2016

タイトル : A Bayesian Approach to Calibrating High-throughput Virtual Screening Results and Application to Organic Photovoltaic Materials
著者 : Pyzer-Knapp, E.O., Simm, G.N. & Guzik, A.A.
文献 : Materials Horizons, 3 (3), 226-233, 2016

タイトル : Machine Learning Estimation of Atom Condensed Fukui Functions
著者 : Zhang, Q.Y., Zheng, F.F., Zhao, T.F., Qu, X.H. & Aires-de-Sousa, J.
文献 : Molecular Informatics, 35 (2), 62-69, 2016

タイトル : Using the Gini Coefficient to Measure the Chemical Diversity of Small-molecule Libraries
著者 : Weidlich, I.E. & Filippov, I.V.
文献 : Journal of Computational Chemistry, 37 (22), 2091-2097, 2016

タイトル : FEREBUS: Highly Parallelized Engine for Kriging Training
著者 : Di Pasquale, N., Bane, M., Davie, S.J. & Popelier, P.L.A.

文献 : Journal of Computational Chemistry, 37 (29), 2606-2616, 2016

タイトル : Multi-objective Optimization Techniques to Design the Pareto Front of Organic Dielectric Polymers

著者 : Mannodi-Kanakkithodi, A., Pilania, G., Ramprasad, R., Lookman, T. & Gubernatis, J.E.

文献 : Computational Materials Science, 25, 92-99, 2016

タイトル : In Silico Calculation of Infinite Dilution Activity Coefficients of Molecular Solutes in Ionic Liquids: Critical Review of Current Methods and New Models Based on Three Machine Learning Algorithms

著者 : Paduszynski, K.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 56 (8), 1420-1437, 2016

タイトル : Tree Based Machine Learning Framework for Predicting Ground State Energies of Molecules

著者 : Himmetoglu, B.

文献 : Journal of Chemical Physics, 145 (13), 2016

タイトル : Are the Sublimation Thermodynamics of Organic Molecules Predictable?

著者 : McDonagh, J.L., Palmer, D.S., van Mourik, T. & Mitchell, J.B.O.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 56 (11), 2162-2179, 2016

タイトル : Materials Informatics: Statistical Modeling in Material Science

著者 : Yosipof, A., Shimanovich, K. & Senderowitz, H.

文献 : Molecular Informatics, 35 (11-12), 568-579, 2016

タイトル : BIGCHEM: Challenges and Opportunities for Big Data Analysis in Chemistry

著者 : Tetko, I.V., Engkvist, O. Koch, U. Reymond, J.L. & Chen, H.M.

文献 : Molecular Informatics, 35 (11-12), 615-621, 2016

タイトル : Structure-Curie Temperature Relationships in BaTiO₃-based Ferroelectric Perovskites: Anomalous Behavior of (Ba,Cd)TiO₃ from DFT, Statistical Inference, and Experiments

著者 : Balachandran, P.V., Xue, D.Z. & Lookman, T.

文献 : Physical Review B, 93 (14), 2016

タイトル : Accelerated Search for BaTiO₃-based Piezoelectrics with Vertical

Morphotropic Phase Boundary using Bayesian Learning
著者 : Xue, D.Z., Balachandran, P.V., Yuan, R.H., Hu, T., Qian, X., Dougherty, E.R. & Lookman, T.
文献 : Proceedings of the National Academy of Science of the United State of America, 113 (47), 13301-13306, 2016
タイトル : Role of Materials Data Science and Informatics in Accelerated Materials Innovation
著者 : Kalidindi, S.R., Brough, D.B., Li, S.Y., Cecen, A. Blekh, A.L., Congo, F.Y.P. & Campbell, C.
文献 : MRS Bulletin, 41 (8), 596-602, 2016
★タイトル : Materials Science with Large-scale Data and Informatics: Unlocking New Opportunities
著者 : Hill, J., Mulholland, G., Persson, K., Seshadri, R., Wolverton, C. & Meredig, B.
文献 : MRS Bulletin, 41 (5), 399-409, 2016
タイトル : Beyond Bulk Single Crystals: A Data Format for All Materials Structure-property-processing Relationships
著者 : Michel, K. & Meredig, B.
文献 : MRS Bulletin, 41 (8), 617-622, 2016
タイトル : Harnessing the Big Data Paradigm for ICME: Shifting from Materials Selection to Materials Enabled Design
著者 : Broderick, S.R., Santhanam, G.R. & Rajan, K.
文献 : JOM, 68 (8), 2109-2115, 2016
タイトル : Visualization Based Data Mining for Comparison Between Two Solar Cell Libraries
著者 : Yosipof, A., Kaspi, O., Majhi, K. & Senderowitz, H.
文献 : Molecular Informatics, 35 (11-12), 622-628, 2016
タイトル : Microstructural Informatics for Accelerating the Discovery of Processing-microstructure-property Relationships
著者 : Wodo, O., Broderick, S. & Rajan, K.
文献 : MRS Bulletin, 41 (8), 603-609, 2016
タイトル : Kekule.js: An Open Source JavaScript Chemoinformatics Toolkit
著者 : Jiang, C., Jin, X., Dong, Y. & Chen, M.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 56 (6), 1132-1138, Sp. Iss., 2016

タイトル : Chemistry Informer Libraries: a Chemoinformatics Enabled Approach to Evaluate and Advance Synthetic Methods

著者 : Kutchukian, P.S., Dropinski, J.F., Dykstra, K.D., Li, B., DiRocco, D.A., Streckfuss, E.C., Campeau, L.C., Cernak, T., Vachal, P., Davies, I.W., Krska, S.W. & Dreher, S.D.

文献 : Chemical Science, 7 (4), 2604-2613 2016

タイトル : Lessons Learned from the Design of Chemical Space Networks and Opportunities for New Applications

著者 : Vogt, M., Stumpfe, D., Maggiora, G.M. & Bajorath, J.

文献 : Journal of Computer-aided Molecular Design, 30 (3), 191-208, 2016

タイトル : mBEEF-vdW: Robust Fitting of Error Estimation Density Functionals

著者 : Lundgaard, K.T., Wellendorff, J., Voss, J., Jacobsen, K.W., & Bligaard, T.

文献 : Physical Review B, 93 (23), 2016

タイトル : Development of Solar Fuels Photoanodes through Combinatorial Integration of Ni-La-Co-Ce Oxide Catalysts on BiVO₄

著者 : Guevarra, D., Shinde, A., Suram, S.K., Sharp, I.D., Toma, F.M., Haber, J.A., & Gregoire, J.M.

文献 : Energy & Environmental Science, 9 (2), 565-580, 2016

タイトル : Industrial & Engineering Chemistry Research, 55 (38), 10191-10207, 2016

著者 : Lotgering-Lin, O., Schoniger, A., Nowak, W. & Gross, J

文献 : Industrial & Engineering Chemistry Research, 55 (38), 10191-10207, 2016

タイトル : Quantification of Uncertainty in First-principles Predicted Mechanical Properties of Solids: Application to Solid Ion Conductors

著者 : Ahmad, Z. & Viswanathan, V.

文献 : Physical Review B, 94 (6), 2016

タイトル : Efficient Bayesian Phase Estimation

著者 : Wiebe, N. & Granade, C.

文献 : Physical Review Letters, 117 (1), 2016

タイトル : Confidence Limits, Error Bars and Method Comparison in Molecular Modeling. Part 2: Comparing Methods

著者 : Nicholls, A.
文献 : Journal of Computer-aided Molecular Design, 30 (2), 103-126, 2016

タイトル : Theory-guided Machine Learning in Materials Science
著者 : Wagner, N. & Rondinelli, J.M.
文献 : Frontiers in Materials, 3, 2016

タイトル : Finding New Perovskite Halides via Machine Learning
著者 : Pilania, G., Balachandran, P.V., Kim, C. & Lookman, T.
文献 : Frontiers in Materials, 3, 2016

タイトル : Automated Discovery and Construction of Surface Phase Diagrams Using Machine Learning
著者 : Ulissi, Z.W., Singh, A.R., Tsai, C. & Norskov, J.K.
文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 7 (19), 3931-3935, 2016

タイトル : A machine learning correction for DFT non-covalent interactions based on the S22, S66 and X40 benchmark databases
著者 : Gao, T., Li, H.Z., Li, W.Z., Li, L., Fang, C., Li, H., Hu, L.H., Lu, Y.H. & Su, Z.M.
文献 : Journal of Cheminformatics, 8, 2016

タイトル : A Statistical Learning Framework for Materials Science: Application to Elastic Moduli of k-nary Inorganic Polycrystalline Compounds
著者 : de Jong, M., Chen, W., Notestine, R., Persson, K., Ceder, G., Jain, A., Asta, M. & Gamst, A.
文献 : Scientific Reports, 6, 2016

タイトル : Machine Learning Molecular Dynamics for the Simulation of Infrared Spectra
著者 : Gastegger, M, Behler, J. & Marquetand, P.
文献 : Chemical Science, 8 (10), 6924-6935, 2017

タイトル : Machine Learning Methods to Predict Density Functional Theory B3LYP Energies of HOMO and LUMO Orbitals
著者 : Pereira, F., Xiao, K.X., Latino, D.A.R.S., Wu, C.C., Zhang, Q.Y. & Aires-de-Sousa, J.
文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 57 (1), 11-21, 2017

タイトル : Formation Enthalpies for Transition Metal Alloys using Machine Learning
--

著者 : Ubaru, S., Miedlar, A., Saad, Y. & Chelikowsky, J.R.

文献 : Physical Review B, 95 (21), 2017

タイトル : Neural-Symbolic Machine Learning for Retrosynthesis and Reaction Prediction

著者 : Segler, M.H.S. & Waller, M.P.

文献 : Chemistry A European Journal, 23 (25), 5966-5971, 2017

タイトル : Structure-based Sampling and Self-correcting Machine Learning for Accurate Calculations of Potential Energy Surfaces and Vibrational Levels

著者 : Dral, P.O., Owens, A., Yurchenko, S.N. & Thiel, W.

文献 : Journal of Chemical Physics, 146 (24), 2017

タイトル : Coupling Matched Molecular Pairs with Machine Learning for Virtual Compound Optimization

著者 : Turk, S., Merget, B., Rippmann, F. & Fulle, S.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 57 (12), 3079-3085, 2017

タイトル : Predicting the Viscosity of Ionic Liquids by the ELM Intelligence Algorithm

著者 : Kang, X.J., Zhao, Z.J., Qian, J.G. & Afzal, R.M.

文献 : Industrial & Engineering Chemistry Research, 56 (39), 11344-11351, 2017

タイトル : Machine Learning Reveals Orbital Interaction in Materials

著者 : Pham, T.L., Kino, H., Terakura, K., Miyake, T., Tsuda, K., Takigawa, I. & Dam, H.C.

文献 : Science and Technology of Advanced Materials, 18 (1), 756-765, 2017

タイトル : Deep Learning for Computational Chemistry

著者 : Goh, G.B., Hodas, N.O. & Vishnu, A.

文献 : Journal of Computational Chemistry, 38 (16), 1291-1307, 2017

タイトル : Unveiling Descriptors for Predicting the Bulk Modulus of Amorphous Carbon

著者 : Takahashi, K. & Tanaka, Y.

文献 : Physical Review B, 95 (5), 2017

タイトル : New Methods for Prediction of Elastic Constants Based on Density Functional Theory Combined with Machine Learning

著者 : Wang, J., Yang, X.Y., Zeng, Z., Zhang, X.L., Zhao, X.S. & Wang, Z.G.

文献 : Computational Materials Science, 138, 135-148, 2017

タイトル : Multi-fidelity Machine Learning Models for Accurate Bandgap Predictions of Solids

著者 : Pilania, G., Gubernatis, J.E. & Lookman, T.

文献 : Computational Materials Science, 129, 156-163, 2017

タイトル : Practical Models for Predicting the Emission Peak Wavelengths of Inorganic Phosphors Based on Stoichiometric Information

著者 : Nakano, H., Tanaka, K., Miyao, T., Funatsu, K., Shirasawa, R. & Tomiya, S.

文献 : Chemistry Letters, 46 (10), 1482-1485, 2017

タイトル : PubChemQC Project: A Large-Scale First-Principles Electronic Structure Database for Data-Driven Chemistry

著者 : Nakata, M. & Shimazaki, T.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 57 (6), 1300-1308, 2017

タイトル : A machine Learning Approach to Graph-theoretical Cluster Expansions of the Energy of Adsorbate Layers

著者 : Vignola, E., Steinmann, S.N., Vandegheuchte, B.D., Curulla, D., Stamatakis, M. & Sautet, P.

文献 : Journal of Chemical Physics, 147 (5), 2017

タイトル : A Neural-network Potential through Charge Equilibration for WS₂: From Clusters to Sheets

著者 : Hafizi, R., Ghasemi, S.A., Hashemifar, S.J. & Akbarzadeh, H.

文献 : Journal of Chemical Physics, 147 (23), 2017

タイトル : Uncovering Structure-property Relationships of Materials by Subgroup Discovery

著者 : Goldsmith, B.R., Boley, M., Vreeken, J., Scheffler, M. & Ghiringhelli, L.M.

文献 : New Journal of Physics, 19 (1), 2017

タイトル : Toolkit for the Construction of Reproducing Kernel-Based Representations of Data: Application to Multidimensional Potential Energy Surfaces

著者 : Unke, O.T. & Meuwly, M.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 57 (8), 1923-1931, 2017

タイトル : First Principles Neural Network Potentials for Reactive Simulations of

Large Molecular and Condensed Systems
著者 : Behler, J.
文献 : Angewandte Chemie International Edition, 56 (42), 12828-12840, 2017

タイトル : Probabilistic Inverse Design for Self-assembling Materials
著者 : Jadrich, R.B., Lindquist, B.A. & Truskett, T.M.
文献 : Journal of Chemical Physics, 146 (18), 2017

タイトル : Chemical Topic Modeling: Exploring Molecular Data Sets Using a Common Text-Mining Approach
著者 : Schneider, N., Fechner, N., Landrum, G.A. & Stiefl, N.
文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 57 (8), 1816-1831, 2017

タイトル : Predicting Electronic Structure Properties of Transition Metal Complexes with Neural Networks
著者 : Janet, J.P. & Kulik, H.J.
文献 : Chemical Science, 8 (7), 5137-5152, 2017

タイトル : MDTS: Automatic Complex Materials Design using Monte Carlo Tree Search
著者 : Dieb, T.M., Ju, S., Yoshizoe, K., Hou, Z., Shiomi, J. & Tsuda, K.
文献 : Science and Technology of Advanced Materials, 18 (1), 498-503, 2017

タイトル : Probing the Dynamics of Layered Double Hydroxides by Solid-State (27) AI NMR Spectroscopy
著者 : Di Bitetto, A., Andre, E., Carteret, C., Durand, P. & Kervern, G.
文献 : Journal of Physical Chemistry C, 121 (13), 7276-7281, 2017

タイトル : ANI-1: an Extensible Neural Network Potential with DFT Accuracy at Force Field Computational Cost
著者 : Smith, J.S., Isayev, O. & Roitberg, A.E.
文献 : Chemical Science, 8 (4), 3192-3203, 2017

タイトル : Capture of Iodine Species in MIL-53(AI), MIL-120(AI), and HKUST-1(Cu) Periodic DFT and Ab-Initio Molecular Dynamics Studies
著者 : Chibani, S., Chiter, F., Cantrel, L. & Paul, J.F.
文献 : Journal of Physical Chemistry C, 121 (45), 25283-25291, 2017

タイトル : Crystal Structure Representation for Neural Networks using Topological

Approach
著者 : Fedorov, A.V., & Shamanaev, I.V.
文献 : Molecular Informatics, 36 (8), 2017

タイトル : A Computational Scheme To Evaluate Hamaker Constants of Molecules with Practical Size and Anisotropy
著者 : Hongo, K. & Maezono, R.
文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 13 (11), 5217-5230, 2017

タイトル : Design of Novel Age-hardenable Aluminium Alloy using Evolutionary Computation
著者 : Dey, S., Dey, P. & Datta, S.
文献 : Journal of Alloys and Compounds, 704, 373-381, 2017

タイトル : Novel Principles and Nanostructuring Methods for Enhanced Thermoelectrics
著者 : Mori, T.
文献 : Small, 13 (45), - Sp. Iss., 2017

タイトル : High-Throughput Image Analysis of Fibrillar Materials: A Case Study on Polymer Nanofiber Packing, Alignment, and Defects in Organic Field Effect Transistors
著者 : Persson, N.E., Rafshoon, J. Naghshpour, K. Fast, T. Chu, P.H., McBride, M., Risteen, B., Groyer, M. & Reichmanis, E.
文献 : ACS Applied Materials & Interfaces, 9 (41), 36090-36102, 2017

タイトル : Prediction of Supercritical Carbon Dioxide Solubility in Polymers based on Hybrid Artificial Intelligence Method Integrated with the Diffusion Theory
著者 : Li, M.S., Liu, L., Huang, X.Y., Liu, H.S., Chen, B.S., Guan, L.X. & Wu, Y.
文献 : RSC Advances, 7 (78), 49817-49827, 2017

タイトル : Solubility Prediction of Gases in Polymers based on an Artificial Neural Network: a Review
著者 : Li, M.S., Wu, W., Chen, B.S., Wu, Y. & Huang, X.Y.
文献 : RSC Advances, 7 (56), 35274-35282, 2017

タイトル : Modelling Chemical Reasoning to Predict and Invent Reactions
著者 : Segler, M.H.S. & Waller, M.P.
文献 : Chemistry -A European Journal, 23 (25), 6118-6128, 2017

タイトル : A Bayesian Learning Approach to Modeling Pseudoreaction Networks for Complex Reacting Systems: Application to the Mild Visbreaking of Bitumen

著者 : Tefera, D.T., Jaramillo, L.M.Y., Ranjan, R., Li, C.Q., de Kierk, A. & Prasad, V.

文献 : Industrial & Engineering Chemistry Research, 56 (8), 1961-1970, 2017

タイトル : Predicting the Outcomes of Organic Reactions via Machine Learning: Are Current Descriptors Sufficient?

著者 : Skoraczynski, G., Dittwald, P., Miasojedow, B., Szymkuc, S., Gajewska, E.P., Grzybowski, B.A. & Gambin, A.

文献 : Scientific Reports, 7, 2017

タイトル : Machine Learning, Quantum Chemistry and Chemical Space

著者 : Ramakrishnan, R. & von Lilienfeld, O.A.

文献 : Reviews in Computational Chemistry, 30, 225-256, 2017

タイトル : Chemically Intuited, Large-scale Screening of MOFs by Machine Learning Techniques

著者 : Borboudakis, G., Stergiannakos, T., Frysalis, M., Klontzas, E., Tsamardinos, I. & Froudakis, GE

文献 : npj Computational Materials, 3, 2017

タイトル : Discovering Charge Density Functionals and Structure-property Relationships with PROPhet: A General Framework for Coupling Machine Learning and First-principles Methods

著者 : Kolb, B., Lentz, L.C. & Kolpak, A.M.

文献 : Scientific Reports, 7, 2017

タイトル : Quantum-chemical Insights from Deep Tensor Neural Networks

著者 : Schutt, K.T., Arbabzadah, F., Chmiela, S., Muller, K.R. & Tkatchenko, A.

文献 : Nature Communications, 8, 2017

タイトル : A Universal 3D Voxel Descriptor for Solid-State Material Informatics with Deep Convolutional Neural Networks

著者 : Kajita, S., Ohba, N., Jinnouchi, R. & Asahi, R.

文献 : Scientific Reports, 7, 2017

タイトル : Machine Learning in Materials Informatics: Recent Applications and Prospects

著者 : Ramprasad, R., Batra, R., Pilania, G., Mannodi-Kanakkithodi, A. & Kim, C.
文献 : npj Computational Materials, 3, 2017
タイトル : To Address Surface Reaction Network Complexity using Scaling Relations Machine Learning and DFT Calculations
著者 : Ulissi, Z.W., Medford, A.J., Bligaard, T. & Norskov, J.K.
文献 : Nature Communications, 8, 2017
タイトル : Comparison of Dissimilarity Measures for Cluster Analysis of X-ray Diffraction Data from Combinatorial Libraries
著者 : Iwasaki, Y., Kusne, A.G. & Takeuchi, I.
文献 : npj Computational Materials, 3, 2017
タイトル : ANI-1, a Data Set of 20 million Calculated Off-equilibrium Conformations for Organic Molecules
著者 : Smith, J.S., Isayev, O. & Roitberg, A.E.
文献 : Scientific Data, 4, 2017
タイトル : RANdom SAmple Consensus (RANSAC) algorithm for material- informatics: application to photovoltaic solar cells
著者 : Kaspi, O., Yosipof, A. & Senderowitz, H.
文献 : Journal of Cheminformatics, 9, 2017
タイトル : Retrosynthetic Reaction Prediction Using Neural Sequence-to-Sequence Models
著者 : Liu, B.W., Ramsundar, B., Kawthekar, P., Shi, J.D., Gomes, J., Nguyen, Q.L., Ho, S., Sloane, J., Wender, P. & Pande, V.
文献 : ACS Central Science, 3 (10), 1103-1113, 2017
タイトル : Support Vector Machine Classification and Regression Prioritize Different Structural Features for Binary Compound Activity and Potency Value Prediction
著者 : Rodriguez-Perez, R., Vogt, M. & Bajorath, J.
文献 : ACS Omega, 2 (10), 6371-6379, 2017
タイトル : Deep Learning for Flow Sculpting: Insights into Efficient Learning using Scientific Simulation Data
著者 : Stoecklein, D., Lore, K.G., Davies, M., Sarkar, S. & Ganapathysubramanian, B.
文献 : Scientific Reports, 7, 2017

タイトル : A Bayesian Target Predictor Method based on Molecular Pairing Energies estimation
著者 : Oliver, A., Canals, V. & Rossello, J.L.
文献 : Scientific Reports, 7, 2017
タイトル : Quantum Machine Learning in Chemical Compound Space
著者 : von Lilienfeld, O.A.
文献 : Angewandte Chemie International Edition, 57 (16), 4164-4169 Sp. Iss., 2018
★タイトル : Machine Learning for Molecular and Materials Science
著者 : Butler, K.T., Davies, D.W., Cartwright, H., Isayev, O. & Walsh, A.
文献 : Nature, 559 (7715), 547-555, 2018
タイトル : Machine Learning in Computer-Aided Synthesis Planning
著者 : Coley, C.W., Green, W.H. & Jensen, K.F.
文献 : Accounts of Chemical Research, 51 (5), 1281-1289, 2018
◎タイトル : Deoxyfluorination with Sulfonyl Fluorides: Navigating Reaction Space with Machine Learning
著者 : Nielsen, M.K., Ahneman, D.T., Riera, O. & Doyle, A.G.
文献 : Journal of the American Chemical Society, 140 (15), 5004-5008, 2018
タイトル : Exploratory Machine-learned Theoretical Chemical Shifts Can Closely Predict Metabolic Mixture Signals
著者 : Ito, K., Obuchi, Y., Chikayama, E., Date, Y. & Kikuchi, J.
文献 : Chemical Science, 9 (43), 8213-8220, 2018
タイトル : Development of a Machine Learning Potential for Graphene
著者 : Rowe, P., Csanyi, G., Alfe, D. & Michaelides, A.
文献 : Physical Review B, 97 (5), 2018
★タイトル : Inverse Molecular Design using Machine Learning: Generative Models for Matter Engineering
著者 : Sanchez-Lengeling, B. & Aspuru-Guzik, A.
文献 : Science, 361 (6400), 360-365, Sp. Iss., 2018
タイトル : Can Exact Conditions Improve Machine-learned Density Functionals?
著者 : Hollingsworth, J., Li, L., Baker, T.E. & Burke, K.

文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (24), 2018

◎タイトル : Controlling an Organic Synthesis Robot with Machine Learning to Search for New Reactivity

著者 : Granda, J.M., Donina, L., Dragone, V., Long, D.L. & Cronin, L.

文献 : Nature, 559 (7714), 377, 2018

タイトル : Feasibility of Activation Energy Prediction of Gas-Phase Reactions by Machine Learning

著者 : Choi, S., Kim, Y., Kim, J.W., Kim, Z. & Kim, W.Y.

文献 : Chemistry -A European Journal, 24 (47), 12354-12358, Sp. Iss., 2018

タイトル : An Materials Informatics Approach to Ni-based Single Crystal Superalloys Lattice Misfit Prediction

著者 : Jiang, X., Yin, H.Q., Zhang, C., Zhang, R.J., Zhang, K.Q., Deng, Z.H., Liu, G.Q. & Qu, X.H.

文献 : Computational Materials Science, 143, 295-300, 2018

タイトル : Strategies and Software for Machine Learning Accelerated Discovery in Transition Metal Chemistry

著者 : Nandy, A., Duan, C.R., Janet, J.P., Gugler, S. & Kulik, H.J.

文献 : Industrial & Engineering Chemistry Research, 57 (42), 13973-13986, 2018

タイトル : Prediction of Interstitial Diffusion Activation Energies of Nitrogen, Oxygen, Boron and Carbon in bcc, fcc, and hcp Metals using Machine Learning

著者 : Zeng, Y.Z., Li, Q.X. & Bai, K.W.

文献 : Computational Materials Science, 144, 232-247, 2018

タイトル : PV Analyzer: A Decision Support System for Photovoltaic Solar Cells Libraries

著者 : Kaspi, O., Yosipof, A. & Senderowitz, H.

文献 : Molecular Informatics, 37 (9-10), Sp. Iss., 2018

タイトル : Data-Driven Learning of Total and Local Energies in Elemental Boron

著者 : Deringer, V.L., Pickard, C.J. & Csanyi, G.

文献 : Physical Review Letters, 120 (15), 2018

タイトル : Feature Optimization for Atomistic Machine Learning Yields a Data-driven Construction of the Periodic Table of the Elements

著者 : Willatt, M.J., Musil, F. & Ceriotti, M.
文献 : Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (47), 29661-29668, 2018
タイトル : Atomic Energies from a Convolutional Neural Network
著者 : Chen, X., Jorgensen, M.S., Li, J. & Hammer, B.
文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 14 (7), 3933-3942, 2018
タイトル : Deep Learning Approaches for Mining Structure-Property Linkages in High Contrast Composites from Simulation Datasets
著者 : Yang, Z.J., Yabansu, Y.C., Al-Bahrani, R., Liao, W.K., Choudhary, A.N., Kalidindi, S.R. & Agrawal, A.
文献 : Computational Materials Science, 151, 278-287, 2018
タイトル : wACSF-Weighted Atom-centered Symmetry Functions as Descriptors in Machine Learning Potentials
著者 : Gastegger, M., Schwiedrzik, L., Bittermann, M., Berzsenyi, F. & Marquetand, P.
文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (24), 2018
タイトル : Discovery of Intermetallic Compounds from Traditional to Machine-Learning Approaches
著者 : Oliynyk, A.O. & Mar, A.
文献 : Accounts of Chemical Research, 51 (1), 59-68, 2018
タイトル : Reactivity of Amorphous Carbon Surfaces: Rationalizing the Role of Structural Motifs in Functionalization Using Machine Learning
著者 : Caro, M.A., Aarva, A., Deringer, V.L., Csanyi, G. & Laurila, T.
文献 : Chemistry of Materials, 30 (21), 7446-7455, 2018
タイトル : Machine Learning for Predicting Product Distributions in Catalytic Regioselective Reactions
著者 : Banerjee, S., Sreenithya, A. & Sunoj, R.B.
文献 : Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (27), 18311-18318, 2018
タイトル : Automated Calculation of Thermal Rate Coefficients using Ring Polymer Molecular Dynamics and Machine-learning Interatomic Potentials with Active Learning
著者 : Novikov, I.S., Suleimanov, Y.V. & Shapeev, A.V.
文献 : Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (46), 29503-29512, 2018

タイトル : Computational Surface Chemistry of Tetrahedral Amorphous Carbon by Combining Machine Learning and Density Functional Theory

著者 : Deringer, V.L., Caro, M.A., Jana, R., Aarva, A., Elliott, S.R., Laurila, T., Csanyi, G. & Pastewka, L.

文献 : Chemistry of Materials, 30 (21), 7438-7445, 2018

タイトル : Role of Pore Chemistry and Topology in the CO₂ Capture Capabilities of MOFs: From Molecular Simulation to Machine Learning

著者 : Anderson, R., Rodgers, J., Argueta, E., Biong, A. & Gomez-Gualdron, D.A.

文献 : Chemistry of Materials, 30 (18), 6325-6337, 2018

タイトル : Comparison of Different Machine Learning Models for the Prediction of Forces in Copper and Silicon Dioxide

著者 : Li, W.W. & Ando, Y.

文献 : Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (47), 30006-30020, 2018

タイトル : Many-Body Descriptors for Predicting Molecular Properties with Machine Learning: Analysis of Pairwise and Three-Body Interactions in Molecules

著者 : Pronobis, W., Tkatchenko, A. & Muller, K.R.

文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 14 (6), 2991-3003, 2018

タイトル : Transferability in Machine Learning for Electronic Structure via the Molecular Orbital Basis

著者 : Welborn, M., Cheng, L.X. & Miller, T.F.

文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 14 (9), 4772-4779, 2018

タイトル : Machine Learning for Predicting Occurrence of Interphase Precipitation in HSLA Steels

著者 : Rahnama, A., Clark, S. & Sridhar, S.

文献 : Computational Material Science, 154, 169-177, 2018

タイトル : Perturbation-Theory and Machine Learning (PTML) Model for High-Throughput Screening of Parham Reactions: Experimental and Theoretical Studies

著者 : Simon-Vidal, L., Garcia-Calvo, O., Oteo, U., Arrasate, S., Lete, E., Sotomayor, N. & Gonzalez-Diaz, H.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 58 (7), 1384-1396, 2018

タイトル : Heat Capacity Prediction of Ionic Liquids Based on Quantum Chemistry

Descriptors
著者 : Kang, X.J., Liu, X.Y., Li, J.Q., Zhao, Y.S. & Zhang, H.Z.
文献 : Industrial & Engineering Chemistry Research, 57 (49), 16989-16994, 2018

タイトル : Matminer: an Open Source Toolkit for Materials Data Mining
著者 : Ward, L., Dunn, A., Faghaninia, A., Zimmermann, N.E.R., Bajaj, S., Wang, Q., Montoya, J., Chen, J.M., Bystrom, K., Dylla, M., Chard, K., Asta, M., Persson, K.A., Snyder, G.J., Foster, I. & Jain, A.
文献 : Computational Materials Science, 152, 60-69, 2018

タイトル : Size-independent Neural Networks Based First-principles Method for Accurate Prediction of Heat of Formation of Fuels
著者 : Yang, G.Y., Wu, J., Chen, S.G., Zhou, W.J., Sun, J. & Chen, G.H.
文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (24), 2018

タイトル : Relation Extraction with Weakly Supervised Learning based on Process-structure-property-performance Reciprocity
著者 : Onishi, T., Kadohira, T. & Watanabe, I.
文献 : Science and Technology of Advanced Materials, 19 (1), 649-659, 2018

タイトル : Less is More: Sampling Chemical Space with Active Learning
著者 : Smith, J.S., Nebgen, B., Lubbers, N., Isayev, O. & Roitberg, A.E.
文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (24), 2018

タイトル : Constant Size Descriptors for Accurate Machine Learning Models of Molecular Properties
著者 : Collins, C.R., Gordon, G.J., von Lilienfeld, O.A. & Yaron, D.J.
文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (24), 2018

タイトル : NOMAD: the FAIR Concept for Big Data-Driven Materials Science
著者 : Draxl, C. & Scheffler, M.
文献 : MRS Bulletin, 43 (9), 676-682, 2018

タイトル : Physics-informed Machine Learning for Inorganic Scintillator Discovery
著者 : Pilania, G., McClellan, K.J., Stanek, C.R. & Uberuaga, B.P.
文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (24), 2018

タイトル : Atomic Structure of Boron Resolved using Machine Learning and Global Sampling
--

著者 : Huang, S.D., Shang, C., Kang, P.L. & Liu, Z.P.
文献 : Chemical Science, 9 (46), 8644-8655, 2018
タイトル : From Process to Properties: Correlating Synthesis Conditions and Structural Disorder of Platinum Nanocatalysts
著者 : Sun, B.C., Barron, H., Opletal, G. & Barnard, A.S.
文献 : Journal of Physical Chemistry C, 122 (49), 28085-28093, 2018
タイトル : Prediction of Adsorption Energies for Chemical Species on Metal Catalyst Surfaces Using Machine Learning
著者 : Chowdhury, A.J., Yang, W.Q., Walker, E., Mamun, O., Heyden, A. & Terejanu, G.A.
文献 : Journal of Physical Chemistry C, 122 (49), 28142-28150, 2018
タイトル : TopP-S: Persistent Homology-based Multi-task Deep Neural Networks for Simultaneous Predictions of Partition Coefficient and Aqueous Solubility
著者 : Wu, K.D., Zhao, Z.X., Wang, R.X. & Wei, G.W.
文献 : Journal of Computational Chemistry, 39 (20), 1444-1454, 2018
タイトル : Electron-Phonon Systems on a Universal Quantum Computer
著者 : Macridin, A., Spentzouris, P., Amundson, J. & Harnik, R.
文献 : Physical Review Letters, 121 (11), 2018
タイトル : Correlated Materials Characterization via Multimodal Chemical and Functional Imaging
著者 : Belianinov, A., Ievlev, A.V., Lorenz, M., Borodinov, N., Doughty, B., Kalinin, S.V., Fernandez, F.M. & Ovchinnikova, O.S.
文献 : ACS Nano, 12 (12), 11798-11818, 2018
タイトル : A General Representation Scheme for Crystalline Solids based on Voronoi-tessellation Real Feature Values and Atomic Property Data
著者 : Jalem, R., Nakayama, M., Noda, Y., Le, T., Takeuchi, I., Tateyama, Y. & Yamazaki, H.
文献 : Science and Technology of Advanced Materials, 19 (1), 231-242, 2018
タイトル : Crystal Structure Prediction via Deep Learning
著者 : Ryan, K., Lengyel, J. & Shatruk, M.
文献 : Journal of the American Chemical Society, 140 (32), 10158-10168, 2018

タイトル : Electronic Structure based Descriptor for Characterizing Local Atomic Environments
著者 : Jenke, J., Subramanyam, A.P.A., Densow, M., Hammerschmidt, T., Pettifor, D.G. & Drautz, R.
文献 : Physical Review B, 98 (14), 2018
タイトル : Principal Component Analysis Acceleration of Rovibrational Coarse-grain Models for Internal Energy Excitation and Dissociation
著者 : Bellemans, A., Parente, A. & Magin, T.
文献 : Journal of Chemical Physics, 148 (16), 2018
タイトル : Reliable and Performant Identification of Low-Energy Conformers in the Gas Phase and Water
著者 : Cavasin, A.T., Hillisch, A., Uellendahl, F., Schneckener, S. & Goller, A.H.
文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 58 (5), 1005-1020, 2018
タイトル : Fully Automated Molecular Design with Atomic Resolution for Desired Thermophysical Properties
著者 : Hsu, H.H., Huang, C.H. & Lin, S.T.
文献 : Industrial & Engineering Chemistry Research, 57 (29), 9683-9692, 2018
タイトル : Strategies for Accelerating the Adoption of Materials Informatics
著者 : Ward, L., Aykol, M., Blaiszik, B., Foster, I., Meredig, B., Saal, J. & Suram, S.
文献 : MRS Bulletin, 43 (9), 683-689, 2018
タイトル : Application of Generative Autoencoder in De Novo Molecular Design
著者 : Blaschke, T., Olivecrona, M., Engkvist, O., Bajorath, J. & Chen, H.M.
文献 : Molecular Informatics, 37 (1-2), Sp. Iss., 2018
タイトル : Planning Chemical Syntheses with Deep Neural Networks and Symbolic AI
著者 : Segler, M.H.S., Preuss, M. & Waller, M.P.
文献 : Nature, 555 (7698), 604, 2018
タイトル : Redesigning the Materials and Catalysts Database Construction Process Using Ontologies
著者 : Takahashi, L., Miyazato, I. & Takahashi, K.
文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 58 (9), 1742-1754, 2018

タイトル : A Density Functional Tight Binding Layer for Deep Learning of Chemical Hamiltonians
著者 : Li, H.C., Collins, C., Tanha, M., Gordon, G.J. & Yaron, D.J.
文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 14 (11), 5764-5776, 2018
タイトル : Visualization of Solar Cell Library Space by Dimensionality Reduction Methods
著者 : Kaspi, O., Yosipof, A. & Senderowitz, H.
文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 58 (12), 2428-2439, Sp. Iss., 2018
タイトル : Discovery of High-Performance Thermoelectric Chalcogenides through Reliable High-Throughput Material Screening
著者 : Xi, L.L., Pan, S.S., Li, X., Xu, Y.L., Ni, J.Y., Sun, X., Yang, J., Luo, J., Xi, J.Y., Zhu, W.H., Li, X.R., Jiang, D., Dronskowski, R., Shi, X., Snyder, G.J. & Zhang, W.Q.
文献 : Journal of the American Chemical Society, 140 (34), 10785-10793, 2018
タイトル : MatCloud: A high-throughput Computational Infrastructure for Entegrated Management of Materials Simulation, Data and Resources
著者 : Yang, X.Y., Wang, Z.G., Zhao, X.S., Song, J.L., Zhang, M.M. & Liu, H.D.
文献 : Computational Materials Science, 146, 319-333, 2018
タイトル : Generation of Pairwise Potentials Using Multidimensional Data Mining
著者 : Zheng, Z., Pei, J., Bansal, N., Liu, H., Song, L.F. & Merz, K.M.
文献 : Journal of Chemical Theory and Computation, 14 (10), 5045-5067, 2018
タイトル : A strategy to Apply Machine Learning to Small Datasets in Materials Science
著者 : Zhang, Y. & Ling, C.
文献 : npj Computational Materials, 4, 2018
タイトル : Quantum Machine Learning for Electronic Structure Calculations
著者 : Xia, R.X. & Kais, S.
文献 : Nature Communications, 9, 2018
タイトル : Discovering a Transferable Charge Assignment Model Using Machine Learning
著者 : Sifain, A.E., Lubbers, N., Nebgen, B.T., Smith, J.S., Lokhov, A.Y., Isayev, O., Roitberg, A.E., Barros, K. & Tretiak, S.

文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (16), 4495-4501, 2018

タイトル : Metallic Metal-Organic Frameworks Predicted by the Combination of Machine Learning Methods and Ab Initio Calculations

著者 : He, Y.P., Cubuk, E.D., Allendorf, M.D. & Reed, E.J.

文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (16), 4562-4569, 2018

タイトル : Machine Learning for the Prediction of Molecular Dipole Moments Obtained by Density Functional Theory

著者 : Pereira, F. & Aires-de-Sousa, J.

文献 : Journal of Cheminformatics, 10, 2018

タイトル : Ab Initio Calculations of the Redox Potentials of Additives for Lithium-Ion Batteries and Their Prediction through Machine Learning

著者 : Okamoto, Y. & Kubo, Y.

文献 : ACS Omega, 3 (7), 7868-7874, 2018

タイトル : Artificial Intelligence: The Future for Organic Chemistry?

著者 : Peiretti, F. & Brunel, J.M.

文献 : ACS Omega, 3 (10), 13263-13266, 2018

タイトル : Extracting Knowledge from Data through Catalysis Informatics

著者 : Medford, A.J., Kunz, M.R., Ewing, S.M., Borders, T. & Fushimi, R.

文献 : ACS Catalysis, 8 (8), 7403-7429, 2018

タイトル : Towards Exact Molecular Dynamics Simulations with Machine-learned Force Fields

著者 : Chmiela, S., Sauceda, H.E., Muller, K.R. & Tkatchenko, A.

文献 : Nature Communications, 9, 2018

タイトル : Reaction: The Near Future of Artificial Intelligence in Materials Discovery

著者 : Gomez-Bombarelli, R.

文献 : Chem, 4 (6), 1189-1190, 2018

◎タイトル : Accelerating Chemical Discovery with Machine Learning: Simulated Evolution of Spin Crossover Complexes with an Artificial Neural Network

著者 : Janet, J.P., Chan, L. & Kulik, H.J.

文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (5), 1064-1071, 2018

タイトル : Deep Learning for Nonadiabatic Excited-State Dynamics
著者 : Chen, W.K., Liu, X.Y., Fang, W.H., Dral, P.O. & Cui, G.L.
文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (23), 6702-6708, 2018

タイトル : ElemNet: Deep Learning the Chemistry of Materials From Only Elemental Composition
著者 : Jha, D., Ward, L., Paul, A., Liao, W.K., Choudhary, A., Wolverton, C. & Agrawal, A.
文献 : Scientific Reports, 8, 2018

タイトル : Hunting for Organic Molecules with Artificial Intelligence: Molecules Optimized for Desired Excitation Energies
著者 : Sumita, M., Yang, X.F., Ishihara, S., Tamura, R. & Tsuda, K.
文献 : ACS Central Science, 4 (9), 1126-1133, 2018

◎タイトル : Computer-Aided Screening of Conjugated Polymers for Organic Solar Cell: Classification by Random Forest
著者 : Nagasawa, S., Al-Naamani, E. & Saeki, A.
文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (10), 2639-2646, 2018

タイトル : Deep-learning-based Inverse Design Model for Intelligent Discovery of Organic Molecules
著者 : Kim, K., Kang, S., Yoo, J., Kwon, Y., Nam, Y., Lee, D., Kim, I., Choi, Y.S., Jung, Y., Kim, S., Son, W.J., Son, J., Lee, H.S., Shin, J. & Hwang, S.
文献 : npj Computational Materials, 4, 2018

タイトル : A confidence Predictor for logD using Conformal Regression and a Support-Vector Machine
著者 : Lapins, M., Arvidsson, S., Lampa, S., Berg, A., Schaal, W., Alvarsson, J. & Spjuth, O.
文献 : Journal of Cheminformatics, 10, 2018

タイトル : Prediction of Compound Profiling Matrices, Part II: Relative Performance of Multitask Deep Learning and Random Forest Classification on the Basis of Varying Amounts of Training Data
著者 : Rodriguez-Perez, R. & Bajorath, J.
文献 : ACS Omega, 3 (9), 12033-12040, 2018

タイトル : Distributed Representation of Chemical Fragments

著者 : Chakravarti, S.K.
文献 : ACS Omega, 3 (3), 2825-2836, 2018
タイトル : Fast and Accurate Molecular Property Prediction: Learning Atomic Interactions and Potentials with Neural Networks
著者 : Tsubaki, M. & Mizoguchi, T.
文献 : Journal of Physical Chemistry Letters, 9 (19), 5733-5741, 2018
タイトル : Data Descriptor: Auto-generated materials database of Curie and Neel temperatures via semi-supervised relationship extraction
著者 : Court, C.J. & Cole, J.M.
文献 : Scientific Data, 5, 2018
タイトル : Functional Odor Classification Through a Medicinal Chemistry Approach
著者 : Poivet, E., Tahirova, N., Peterlin, Z., Xu, L., Zou, D.J., Acree, T. & Firestein, S.
文献 : Science Advances, 4 (2), 2018
タイトル : Automated Generation and Ensemble-learned Matching of X-ray Absorption Spectra
著者 : Zheng, C., Mathew, K., Chen, C., Chen, Y.M., Tang, H.M., Dozier, A., Kas, J.J., Vila, F.D., Rehr, J.J., Piper, L.F.J., Persson, K.A. & Ong, S.P.
文献 : npj Computational Materials, 4, 2018
タイトル : Learning a Local-Variable Model of Aromatic and Conjugated Systems
著者 : Matlock, M.K., Dang, N.L. & Swamidass, S.J.
文献 : ACS Central Science, 4 (1), 52-62, 2018
タイトル : Materials Informatics for Self-assembly of Functionalized Organic Precursors on Metal Surfaces
著者 : Packwood, D.M. & Hitosugi, T.
文献 : Nature Communications, 9, 2018
タイトル : Mapping Mesoscopic Phase Evolution during E-beam Induced Transformations via Deep Learning of Atomically Resolved Images
著者 : Vasudevan, R.K., Laanait, N., Ferragut, E.M., Wang, K., Geohegan, D.B., Xiao, K., Ziatdinov, M., Jesse, S., Dyck, O. & Kalinin, S.V.
文献 : npj Computational Materials, 4, 2018
タイトル : A Molecular Neuromorphic Network Device Consisting of Single-walled

Carbon Nanotubes Complexed with Polyoxometalate
著者 : Tanaka, H., Akai-Kasaya, M., TermehYousefi, A., Hong, L., Fu, L.X., Tamukoh, H., Tanaka, D., Asai, T. & Ogawa, T.
文献 : Nature Communications, 9, 2018

タイトル : SVM-SulfoSite: a Support Vector Machine based Predictor for Sulfenylation Sites
著者 : Al-barakati, H.J., McConnell, E.W., Hicks, L.M., Poole, L.B., Newman, R.H. & Kc, D.B.
文献 : Scientific Reports, 8, 2018

タイトル : Phoenix: A Bayesian Optimizer for Chemistry
著者 : Hase, F., Roch, L.M., Kreisbeck, C. & Aspuru-Guzik, A.
文献 : ACS Central Science, 4 (9), 1134-1145, 2018

タイトル : The Matter Simulation (R)evolution
著者 : Aspuru-Guzik, A., Lindh, R. & Reiher, M.
文献 : ACS Central Science, 4 (2), 144-152, 2018

タイトル : Exploring Materials Band Structure Space with Unsupervised Machine Learning
著者 : Nunez, M.
文献 : Computational Materials Science, 158, 117-123, 2019

タイトル : Machine Learning of Optical Properties of Materials - Predicting Spectra from Images and Images from Spectra
著者 : Stein, H.S., Guevarra, D., Newhouse, P.F., Soedarmadji, E. & Gregoire, J.M.
文献 : Chemical Science, 10 (1), 47-55, 2019

タイトル : Machine Learning Model for Non-equilibrium Structures and Energies of Simple Molecules
著者 : Iype, E., & Urolagin, S.
文献 : Journal of Chemical Physics, 150 (2), 2019

タイトル : Structure and Dynamics of the Liquid-Water/Zinc-Oxide Interface from Machine Learning Potential Simulations
著者 : Quaranta, V., Behler, J. & Hellstrom, M.
文献 : Journal of Physical Chemistry C, 123 (2), 1293-1304, 2019

タイトル : A graph-convolutional Neural Network Model for the Prediction of Chemical Reactivity

著者 : Coley, C.W., Jin, W.G., Rogers, L., Jamison, T.F., Jaakkola, T.S., Green, W.H., Barzilay, R. & Jensen, K.F.

文献 : Chemical Science, 10 (2), 370-377, 2019

タイトル : Conditional Molecular Design with Deep Generative Models

著者 : Kang, S. & Cho, K.

文献 : Journal of Chemical Information and Modeling, 59 (1), 43-52, 2019

タイトル : Application of Materials Informatics to Vapor-grown Carbon Nanofiber/vinyl Ester Nanocomposites through Self-organizing Maps and Clustering Techniques

著者 : Abuomar, O., Nouranian, S., King, R. & Lacy, T.E.

文献 : Computational Materials Science, 158, 98-109, 2019

タイトル : Quantitative Design Rules for Protein-resistant Surface Coatings using Machine Learning

著者 : Le, T.C., Penna, M., Winkler, D.A. & Yarovsky, I.

文献 : Scientific Reports, 9, 2019

◎タイトル : Capturing Chemical Intuition in Synthesis of Metal-organic Frameworks

著者 : Moosavi, S.M., Chidambaram, A., Talirz, L., Haranczyk, M., Stylianou, K.C. & Smit, B.

文献 : Nature Communications, 10, 2019

11-2. 付表: 個別のデータベース紹介

以下に、代表的公共データベースを紹介する。

サイト： http://pc1664.pharmazie.uni-marburg.de/affinity/index.php
データベース名：AffinDB
概要：蛋白質-リガンド複合体の結合力のデータベース。

サイト： http://aflowlib.org/
データベース名：AFLOWLIB
概要：計算による 2,532,342 の物質構造のデータベース。

サイト： https://www.aist.go.jp/aist_e/list/database/riodb/
データベース名：AIST Research Information Databases
概要：産業技術総合研究所が提供する SDBS、熱力学データ、化学事故、日本の地質調査に関するデータベース群。

サイト： http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php
データベース名：American Mineralogist Crystal Structure Database
概要：鉱物の結晶構造のデータベース。

サイト： https://www.asminternational.org/materials-resources/online-databases/-/journal_content/56/10192/15468704/DATABASE
データベース名：ASM Alloy Center Database 【有償】
概要：合金に関するデータベース。

サイト： https://www.asminternational.org/phase-diagrams
データベース名：ASM Phase Diagrams 【有償】
概要：合金の相図に関するデータベース。

サイト： http://www.bindingdb.org/bind/index.jsp
データベース名：BindingDB
概要：蛋白質と薬物などの結合親和力のデータベース。7,223 の蛋白質と 697,594 の低分子化合物の間の 1,558,402 の結合データ。

サイト： http://www.bmrwisc.edu/
データベース名：Biological Magnetic Resonance Data Bank
概要：蛋白質、ペプチド、核酸などの生体分子の NMR スペクトルに関するデータベース。

サイト： http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/pkatable/
データベース名：Bordwell pKa Table
概要：DMSO 中の酸性度に関するデータベース。

サイト： https://www.brenda-enzymes.org/index.php
データベース名：BRENDA
概要：酵素に関する情報システム。

サイト： https://www.thermocalc.com/products-services/databases/thermodynamic
データベース名：CALPHAD databases (Thermo-Calc) 【有償】
概要：Thermo-Calc で使用する高品質な熱力学データに関するデータベース。

サイト： https://www.ccdc.cam.ac.uk/
データベース名：Cambridge Crystallographic Data Centre 【有償】
概要：低分子有機化合物の結晶構造に関するデータベース。

サイト： https://cmr.fysik.dtu.dk/catapp/catapp.html
データベース名：CatApp
概要：材料科学計算を用いる触媒表面や複合触媒に関するデータベース。

サイト： https://www.ebi.ac.uk/chebi/
データベース名：ChEBI
概要：結合、機能、代謝のデータベース。

サイト： http://chemacx.cambridgesoft.com/chemacx/Forms/Home/ContentArea/Home.aspx
データベース名：ChemACX
概要：パーキンエルマーが提供する市販化合物データベース。

サイト： https://www.ebi.ac.uk/chembl/
データベース名：ChEMBL
概要：EMBL が提供する化合物の生理活性のデータベース。化学構造入力パッド付。

サイト： http://cdb.ics.uci.edu/
データベース名：ChemDB
概要：ケモインフォマティクスに関する様々なツールを提供。

サイト： https://chemdb.niaid.nih.gov/
--

データベース名 : ChemDB HIV
概要 : HIV や HIV 酵素、他の病原体に対する化合物の構造と活性を集めたデータベース。

サイト : https://cactus.nci.nih.gov/chemical/apps/cap
データベース名 : Chemical Activity Predictor - GUSAR
概要 : 化学構造から活性の予測ツール

サイト : http://www.ebi.ac.uk/pdbe-srv/pdbechem/
データベース名 : Chemical Components in the PDB
概要 : Protein Data Bank 中の化合物のデータベース

サイト : https://cactus.nci.nih.gov/chemical/structure
データベース名 : Chemical Identifier Resolver
概要 : 化合物の様々な識別子を化学構造を通じて他の識別子に変換。

サイト : https://jpldataeval.jpl.nasa.gov/
データベース名 : Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies
概要 : NASA の提供する航空宇宙に関する化合物データ。

サイト : https://cactus.nci.nih.gov/cgi-bin/lookup/search
データベース名 : Chemical Structure Lookup Service
概要 : 100 を越えるデータベースから 7,400 万件 (ユニークな構造としては、4,600 万件) の構造を検索。

サイト : https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/
データベース名 : ChemIDplus
概要 : TOXNET データベースの一つ。

サイト : http://chemmine.ucr.edu/
データベース名 : ChemMine
概要 : 低分子化合物を構造類似性や物理化学的な性質に基づいて解析、クラスタリングするためのツール。

サイト : http://cssp.chemspider.com/
データベース名 : ChemSpider
概要 : 100 を越えるデータソースの 6,700 万件を超える化学構造を検索。

サイト： http://www.chemsynthesis.com/
データベース名：Chemical Synthesis
概要：化合物の合成法と融点、沸点や密度などの物理的な性質を検索。4 万を超える化合物と 4 万 5 千を超える合成法を有するデータベース。

サイト： https://chem.libretexts.org/
データベース名：ChemWiki (Chemistry LibreTexts Library)
概要：教育用のテキストベースのデータベース。

サイト： https://cindasdata.com/products/hpad
データベース名：CINDAS High-Performance Alloys Database 【有償】
概要：高機能合金のデータベース。149 の合金に関する 14,000 件のデータセットと 48,800 のグラフを有している。

サイト： https://citrination.com/users/sign_in
データベース名：Citrination
概要：物質と化学情報に関するデータベースと解析プラットフォーム。

サイト： http://www.cococo-database.it/
データベース名：CoCoCo
概要：計算機を用いる薬物設計のツールを提供。

サイト： http://www.codata.info/
データベース名：CODATA
概要：化合物の熱力学データ

サイト： http://commonchemistry.org/
データベース名：Common Chemistry
概要：多くの人に関心のある約 7,900 件の化合物の CAS 登録番号。

サイト： http://www.alanwood.net/pesticides/
データベース名：Compendium of Common Pesticide Names
概要：1,200 件を超える殺虫剤の International Organization for Standardization (ISO) による公式名称のリスト。1,800 件を超える有効成分を含む。

サイト： https://cmr.fysik.dtu.dk/
データベース名：Computational Materials Repository
概要：計算を用いる材料科学のデータベース。様々な計算結果を集めている。

サイト : http://hbcponline.com/faces/contents/ContentsSearch.xhtml;jsessionid=2DD7AF2B33B029E8FB90C236590CD97B
データベース名 : CRC Handbook 【有償】
概要 : 化学と物理のハンドブック。現在は第 99 版。

サイト : http://www.crystallography.net/cod/
データベース名 : Crystallography Open Database
概要 : 生体分子以外の有機化合物、無機化合物、金属有機化合物、鉱物の結晶構造の無償データベース。

サイト : https://www.ebi.ac.uk/Tools/structure/dalilite/
データベース名 : DaliLite
概要 : 2 つの蛋白質立体構造を重ね合わせるプログラム。EMBL が提供するツール。

サイト : http://blaster.docking.org/
データベース名 : DOCK Blaster
概要 : 蛋白質立体構造に基づいてリガンドを探索するツール。

サイト : http://www.hydrogenmaterialssearch.govtools.us/
データベース名 : DOE Hydrogen Storage Materials Database
概要 : DOE の水素貯蔵物質に関するデータベース。

サイト : https://www.drugbank.ca/
データベース名 : DrugBank
概要 : 薬物とそのターゲットに関するバイオインフォマティクスとケモインフォマティクスを統合したデータベース。

サイト : https://www.emolecules.com/
データベース名 : eMolecules
概要 : 150 万件を越える化合物原料の検索と注文のサイト。

サイト : https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/047084289X
データベース名 : Electronic Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis
概要 : 有機合成に用いる試薬と触媒に関するデータベース。5,100 件を超える試薬と触媒の情報を有し、毎年、200 件程が更新または登録される。

サイト : https://cactus.nci.nih.gov/ncidb2.2/
データベース名 : Enhanced NCI Database Browser 2.2

概要：NCI データベース群のブラウザー。250,250 件の構造が検索可能。

サイト：<https://www.ebi.ac.uk/enzymeportal/>

データベース名：Enzyme Portal

概要：酵素の活性や、低分子との関わり、生化学パスウエーなどに関するデータベース。

サイト：<https://www.epa.gov/iris>

データベース名：EPA Integrated Risk Information System

概要：EPA が提供する環境中の化合物の健康への危険性の検出と解析に関するデータベース。

サイト：<https://www.ebi.ac.uk/ena>

データベース名：European Nucleotide Archive

概要：核酸配列に関する情報のデータベース。

サイト：<http://www.aim.env.uea.ac.uk/aim/aim.php>

データベース名：Extended AIM Aerosol Thermodynamics Model

概要：無機化合物や有機化合物と水を含むエアロゾル、水溶液や液体混合物における溶媒と溶質の気体／液体／個体の分配に関する計算モデル。

サイト：<http://extoxnet.orst.edu/>

データベース名：EXtension TOXicology NETwork

概要：殺虫剤に関するデータベース。

サイト：<https://fdasis.nlm.nih.gov/srs/srs.jsp>

データベース名：FDA Unique Ingredient Identifier

概要：薬物、生物製剤、食物、機器に関する登録番号。

サイト：<https://figshare.com/categories/Chemistry/38>

データベース名：Figshare/chemistry

概要：科学に関するデータシェアリングサイト。その中の化学関連項目。

サイト：https://figshare.com/articles/Chemical_reactions_from_US_patents_1976-Sep2016_/5104873/1

データベース名：Figshare/chemistry/Chemical reactions from US patents

概要：科学に関するデータシェアリングサイト。その中の化学関連項目。その中の米国特許中の化学反応。CML または反応 SMILES による記載。

サイト： https://figshare.com/articles/Jean_Claude_Bradley_Open_Melting_Point_Datset/1031637/2
データベース名：Figshare/chemistry/ Jean-Claude Bradley Open Melting Point Dataset
概要：科学に関するデータシェアリングサイト。その中の化学関連項目。その中の化合物の融点データ。28,645 件のデータが Chemspider ID でひも付けられている。
サイト： http://firedb.bioinfo.cnio.es/Php/FireDB.php
データベース名：FireDB
概要：PDB の構造とリガンドに関するデータベース。機能に重要な残基に関するデータも含んでいる。
サイト： http://gdb.unibe.ch/downloads/
データベース名：GDB Databases (GDB-11, GDB-13, GDB-17)
概要：安定に存在すると考えられる C、N、O などの原子が 11、13、17 含まれる化合物を網羅的に示したデータベース。
サイト： http://www.functionalglycomics.org/glycomics/molecule/jsp/carbohydrate/carbMoleculeHome.jsp
データベース名：Glycan Structures Database
概要：数千の合成と天然由来の糖質に関するデータベース。
サイト： http://gmd.mpimp-golm.mpg.de/
データベース名：Golm Metabolome Database (GMD)
概要：GC-MS で解析した生理活性代謝物のデータベース。
サイト： https://grantadesign.com/industry/products/ces-selector/
データベース名：Granta CES Selector 【有償】
概要：物質の選択とグラフによる物質の性質を解析するサイト。
サイト： http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/data/frames.html
データベース名：GRI-Mech Reaction rate coefficients
概要：反応速度のデータベース。
サイト： http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/data/thermo_table.html
データベース名：GRI-Mech thermodynamic data
概要：298K の熱力学データのデータベース。
サイト： http://xray.bmc.uu.se/hicup/

データベース名 : Hetero-compound Information Centre - Uppsala - Release
概要 : PDB 中の蛋白質以外の物質に関するデータベース。2008 年以降、アップデートされていない。

サイト : https://www.heterocycles.jp/newlibrary/libraries/prepress
データベース名 : Heterocycles Web Edition
概要 : 化学雑誌 HETEROCYCLES の Web 版。

サイト : http://www.hmdb.ca/
データベース名 : Human Metabolome Database (HMDB)
概要 : 人体中に見出される低分子代謝物に関する、化学的データ、臨床データ、生化学データを提供するデータベース。水溶性または脂溶性の 114,100 件の代謝物を含む。加えて、5,702 件の蛋白質配列にも情報がリンクされている。

サイト : http://www2.fiz-karlsruhe.de/icsd_home.html
データベース名 : Inorganic Crystal Structure Database 【有償】
概要 : 無機化合物の結晶構造のデータベース。203,830 件の結晶構造が登録されている。

サイト : http://www.newglass.jp/interglad_n/gaiyo/info_e.html
データベース名 : International Glass Database System 【有償】
概要 : 約 340,000 種類のガラスの物性と構造に関するデータベース。

サイト : http://www.ebi.ac.uk/interpro/
データベース名 : InterPro
概要 : 蛋白質をファミリーに分類し、ドメイン構造と重要サイトを予測し、機能解析を行うサイト。

サイト : http://iupac.pole-ether.fr/
データベース名 : IUPAC - Evaluated Kinetic Data
概要 : 反応速度と光化学的なデータを提供。

サイト : https://srdata.nist.gov/solubility/
データベース名 : IUPAC-NIST Solubility Database
概要 : 2 溶媒、3 溶媒、4 溶媒システムの相溶性、液体-液体平衡に関するデータベース。

サイト : http://jenalib.leibniz-fli.de/IMAGE.html
データベース名 : Jena Library of Biological Macromolecules
概要 : PDB と NDB に登録された全ての立体構造を提供。

サイト： http://jenalib.leibniz-fli.de/ImgLibPDB/pages/hetDir/IMAGE_HET.shtml
データベース名：JenaLib Hetero Components Database
概要：PDB と NDB に登録された全ての立体構造に含まれる蛋白質や核酸以外の分子に関する情報を提供。

サイト： https://www.genome.jp/ligand/
データベース名：KEGG LIGAND Database
概要：生命に関わる化学物質と反応に関する知識を提供するデータベース。COMPOUND、GLYCAN、REACTION、RCLASS、ENZYME からなる。

サイト： http://www.eidogen.com/kinasekb.php
データベース名：Kinase Knowledgebase
概要：キナーゼの構造活性相関と合成に関わるデータベース。

サイト： https://app.knovel.com/web/index.v
データベース名：Knovel【有償】
概要：化合物や物質の検索、様々な工学的計算手法を提供。

サイト： http://ligand-depot.rutgers.edu/
データベース名：Ligand Expo
概要：PDB に含まれる低分子化合物に関する情報を提供。

サイト： http://lipidbank.jp/
データベース名：LipidBank
概要：脂質のデータベース。2007 年以降、更新されていない。

サイト： http://www.lipidmaps.org/
データベース名：LIPID MAPS
概要：脂質分子に関するデータベースとツール。

サイト： https://www.lookchem.com/
データベース名：LookChem
概要：CAS 番号を持つ 6,000,000 件の化合物の検索。

サイト： http://mmed.nmrfam.wisc.edu/
データベース名：Madison Metabolomics Consortium Database
概要：NMR と MS のデータを用いてメタボロミクスに関わる検索。

サイト： http://www.massbank.jp/
データベース名：MassBank
概要：日本質量分析学会が提供するデータベース。スペクトル検索は出来なくなった。

サイト： https://www.matdat.com/
データベース名：MatDat
概要：鉄、アルミニウム、チタンなどの合金に関するデータベース。

サイト： https://materialsproject.org/
データベース名：Materials Project
概要：計算によって得られた予測構造のデータベース。新規材料開発のための解析ツールも提供している。

サイト： https://mits.nims.go.jp/index_en.html
データベース名：MatNav
概要：ポリマーデータベース (PoLyInfo)、無機材料データベース (AtomWork)、計算による相図データベース (CPDDB)、計算による電子構造データベース (CompES-X)、放射性物質の除去に有望な吸着剤のデータベース (READS)、中性子変換データベース (NeuTran)、界面熱伝導データベース (ITC)、拡散データベース (Kakusan)、超電導材料データベース (SuperCon) など。

サイト： http://www.matweb.com/index.aspx
データベース名：MatWeb
概要：ABS、ナイロン、ポリカーボネート、ポリエステル、ポリエチレン、ポリプロピレンなどの熱可塑性、熱硬化性ポリマー、アルミニウム、コバルト、銅、鉛、マグネシウム、ニッケル、鉄、チタン、亜鉛の合金、セラミックス、半導体、繊維などの工学材料に関するデータベース。

サイト： https://metacyc.org/
データベース名：MetaCyc
概要：実験的に解析された代謝経路に関するデータベース。2,960種の生物の2,666種類の代謝経路を含む。

サイト： https://metlin.scripps.edu/landing_page.php?pgcontent=mainPage
データベース名：METLIN
概要：メタボロミクス解析用の代謝物のデータベース。42,000の構造、MS/MSのデータを含む。

サイト： https://www.mindat.org/
--

データベース名 : Mindat
概要 : 鉱物とその産出場所に関するデータベース。
サイト : https://www.molport.com/shop/index
データベース名 : MolPort
概要 : 900 万件の化合物の検索と注文のサイト。
サイト : http://mylims.epfl.ch/
データベース名 : mylims.org
概要 : NMR スペクトルの処理と登録のサイト。
サイト : http://nanohub.org/
データベース名 : NanoHUB
概要 : ナノスケールの現象のシミュレーションプログラムを提供。
サイト : https://www.re3data.org/repository/r3d100011129
データベース名 : Nanomaterials Registry
概要 : ナノマテリアルの物理化学的性質、生物や環境との相互作用などに関するデータベース。
サイト : https://www.fda.gov/Drugs/InformationOnDrugs/ucm142438.htm
データベース名 : National Drug Code Registry
概要 : 薬物の National Drug Code (NDC)に関するデータベース。
サイト : https://www.ncbi.nlm.nih.gov/biosystems
データベース名 : NCBI BioSystems Database
概要 : Entrez の生物システム、遺伝子、蛋白質、低分子、文献を統合したデータベース。
サイト : https://www.ncbi.nlm.nih.gov/gene
データベース名 : NCBI Gene
概要 : 多くの生物種の遺伝子に関する情報を統合したデータベース。
サイト : https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein
データベース名 : NCBI Protein
概要 : GenBank、RefSeq、TPA、SwissProt、PIR、PRF、PDB などの蛋白質配列情報を統合したデータベース。
サイト : https://kinetics.nist.gov/solution/

データベース名 : NDRL/NIST Solution Kinetics Database
概要 : 液相反応の速度論的データに関するデータベース。

サイト : https://www.niehs.nih.gov/research/resources/databases/index.cfm
データベース名 : NIEHS のデータベース群
概要 : Alu Pair Database、BOSS、CEBS、気候変動の健康への影響、環境ゲノム、EHEA、EPR、などのデータベース群。

サイト : https://www.nist.gov/srd/srd-catalog
データベース名 : NIST SRD Catalog
概要 : NIST のデータベースカタログ

サイト : https://www.nist.gov/pml/productservices/physical-reference-data
データベース名 : (NIST) Physical Reference Data
概要 : NIST の物理的データベースカタログ

サイト : https://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp
データベース名 : NIST Chemical Kinetics Database
概要 : 気相反応の速度論的データに関するデータベース。

サイト : https://webbook.nist.gov/
データベース名 : NIST Chemistry WebBook
概要 : NIST の Standard Reference Data Program のデータへのアクセス。

サイト : https://physics.nist.gov/cuu/index.html
データベース名 : NIST reference on constants, units and uncertainty
概要 : 基礎的物理解定数、SI 単位、測定の不確かさに関するデータベース。

サイト : http://www.drорlist.com/nmr/MPNMR.html
データベース名 : NMR Structure of Membrane Proteins
概要 : 立体構造が決定された膜蛋白質に関する一覧表。

サイト : http://nmrwiki.org/wiki/index.php?title=Main_Page
データベース名 : NMR Wiki
概要 : NMR 研究者の知識の共有のためのサイト。

サイト : http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de/
データベース名 : NMRShiftDB

概要：有機化合物の NMR スペクトルのデータベース。スペクトルの予測、スペクトルや構造からの検索が可能。

サイト：<http://restraintsgrid.bmrb.wisc.edu/NRG/MRGridServlet>

データベース名：NMR Restraints Grid

概要：2,500 件の蛋白質や核酸の構造決定に用いられた NMR データ。

サイト：<http://nomad-repository.eu/>

データベース名：NOMAD

概要：量子化学計算に基づく構造のデータベース。

サイト：<http://ndbserver.rutgers.edu/>

データベース名：Nucleic Acid Database

概要：実験的に決定された核酸と複合体の立体構造のデータベース。

サイト：<https://bip.weizmann.ac.il/oca-docs/oca-home.html>

データベース名：OCA

概要：ブラウザベースの蛋白質立体構造と機能のデータベース。

サイト：<https://ochem.eu/home/show.do>

データベース名：OCHEM

概要：13,076 件の情報源から収集した 2,826,074 件の化合物に関する 623 の物性のデータベース。

サイト：<https://cactus.nci.nih.gov/translate/>

データベース名：Online SMILES Translator and Structure File Generator

概要：オンラインで SMILES の翻訳、構造ファイル作成

サイト：<https://openkim.org/>

データベース名：Open Knowledge Database of Interatomic Models (OpenKIM)

概要：分子シミュレーションのためのオンラインツール。

サイト：<http://oqmd.org/>

データベース名：Open Quantum Materials Database

概要：量子化学計算を用いた熱力学と構造のデータベース。

サイト：<http://www.orgsyn.org/#>

データベース名：Organic Syntheses

概要：信頼できる有機化合物合成法。
サイト： https://www.osha.gov/chemicaldata/
データベース名：OSHA Occupational Chemical Database
概要：政府機関の情報を含めた化合物のデータベース。
サイト： https://cactus.nci.nih.gov/osra/
データベース名：OSRA: Optical Structure Recognition Application
概要：化学構造の構造を SMILES や SD ファイルに変換するツール。
サイト： https://drug-interactions.medicine.iu.edu/Main-Table.aspx
データベース名：P450 Drug Interaction Table
概要：チトクローム P450 と薬物の相互作用の一覧表。
サイト： http://paulingfile.com/
データベース名：Pauling File 【有償】
概要：無機化合物の相図、結晶構造、物理的性質のデータベース。
サイト： https://www.epa.gov/tsca-screening-tools
データベース名：PBT Profiler (旧称)
概要：化合物が Toxic Substances Control Act (TSCA) に抵触する可能性を予測するモデルとツール。
サイト： http://www.ebi.ac.uk/msd-srv/prot_int/pistart.html
データベース名：PDBePISA
概要：蛋白質などの相互作用面をインタラクティブに解析するツール。
サイト： https://swift.cmbi.umcn.nl/gv/pdbreport/
データベース名：PDBREPORT database
概要：PDB 登録時に問題となった診断結果のデータベース。
サイト： http://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/cgi-bin/pdbsum/GetPage.pl?pdbcode=index.html
データベース名：PDBsum
概要：PDB の絵画的データベース。
サイト： http://phenol-explorer.eu/
データベース名：Phenol-Explorer

概要：食物に含まれるポリフェノールのデータベース。400 件の食物に含まれる 500 種類のポリフェノールの含量に関して 35,000 件を超えて収録。

サイト：<http://www.pherobase.com/>

データベース名：Pherobase

概要：フェロモンと情報化学物質のデータベース。

サイト：<http://www.icdd.com/index.php/pdfsearch/>

データベース名：Powder Diffraction File (PDF) 【有償】

概要：結晶材料同定のための粉末回折データに関するデータベース。

サイト：<https://cactus.nci.nih.gov/prosit/>

データベース名：PROSIT: Pseudo-Rotational Online Service and Interactive Tool

概要：核酸、ヌクレオチドの擬回転、パッカリング構造の計算ツール。

サイト：<https://www.ebi.ac.uk/pdbe/>

データベース名：Protein Data Bank in Europe

概要：生体高分子の立体構造のデータベース。

サイト：<http://www.ebi.ac.uk/pdbe/emdb/>

データベース名：Protein Data Bank in Europe EM resources

概要：PDB の電子顕微鏡構造のデータベース。

サイト：<http://www.ebi.ac.uk/pdbe/nmr-resources>

データベース名：Protein Data Bank in Europe NMR resources

概要：PDB の NMR に関するリソース。

サイト：<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/#>

データベース名：PubChem

概要：バイオアッセイデータを含む化合物のデータベース。

サイト：<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pcassay?cmd=search>

データベース名：PubChem BioAssay

概要：The PubChem BioAssay Database contains bioactivity screens of chemical substances described in PubChem Substance. It provides searchable descriptions of each bioassay, including descriptions of the conditions and readouts specific to that screening procedure.

サイト： https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pccompound?cmd=search
データベース名：PubChem Compound
概要：PubChem 内の構造類似性とクロスリファレンス。

サイト： https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pcsubstance?cmd=search
データベース名：PubChem Substance
概要：PubChem 内の化合物と BioAssay のリンク。

サイト： http://pubchemqc.riken.jp/
データベース名：PubChemQC
概要：理化学研究所の量子化学計算した化合物のデータベース。現在、350 万件を超えるデータを収録している。

サイト： https://www.rcsb.org/
データベース名：RCSB PDB
概要：PDB のデータを教育用に加工したデータベース。

サイト： https://www.elsevier.com/solutions/reaxys
データベース名：Reaxys 【有償】
概要：有機化学反応のデータベース。

サイト： http://refdb.wishartlab.com/
データベース名：Re-referenced Protein Chemical shift Database (RefDB)
概要：BioMagRes Bank から得られた参照 NMR シフトのデータベース。

サイト： https://www.rhea-db.org/
データベース名：Rhea
概要：酵素反応とゲノムスケールの代謝ネットワークのデータベース。

サイト： http://rruff.info/
データベース名：RRuff
概要：鉱物のラマンスペクトルと X 線解析と化学データに関するデータベース。

サイト： https://www.engr.ucr.edu/~carter/SAPRC/
データベース名：SAPRC Atmospheric Chemical Mechanisms and VOC Reactivity Scales
概要：Atmospheric Chemical Mechanisms and VOC Reactivity Scales

サイト： https://scifinder.cas.org/scifinder/login
データベース名：Scifinder/ChemAbstracts【有償】
概要：化学に関する文献情報データベース。

サイト： http://sideeffects.embl.de/
データベース名：Side Effect Resource (SIDER)
概要：市販医薬品の副作用に関するデータベース。

サイト： http://www.akosgmbh.de/sciglass/sciglass.htm
データベース名：SciGlass【有償】
概要：ガラスの物性に関するデータベース。1万6千件を超えるハライド、3万5千件を超えるカルコゲナイドを含む36万件を超えるガラス組成を収録。

サイト： https://www.sigmaaldrich.com/catalog/AdvancedSearchPage.do
データベース名：Sigma-Aldrich
概要：Sigma-Aldrichの化合物検索システム

サイト： http://www.drorlist.com/nmr/SPNMR.html
データベース名：solid-stateNMR Protein Structure
概要：固体NMRによって立体構造が決定された蛋白質の一覧表。

サイト： https://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi
データベース名：SDBS (Spectral Database for Organic Compounds)
概要：有機化合物のスペクトルデータベース。このサイトは国立研究開発法人産業技術総合研究所が無償で提供しています。

サイト： http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/case/propose.php
データベース名：Spectral Similarity Search
概要： ^{13}C -NMRのシフト値と多重度から類似構造を検索。

サイト： https://materials.springer.com/
データベース名：SpringerMaterials【有償】
概要：材料科学のための物性データベース。

サイト： http://stitch.embl.de/
データベース名：STITCH
概要：蛋白質と化合物の相互作用に関するデータベース。

サイト： http://symmetry.otterbein.edu/
データベース名：Symmetry@Otterbein
概要：分子の対称性の教育に関するリソース。

サイト： https://www.synarchive.com/
データベース名：SynArchive：A total synthesis database
概要：有機合成に関する無償のデータベース。

サイト： http://www.tedesignlab.org/
データベース名：TEDesignLab
概要：計算科学に基づく熱電効果を示す物質のデータベース。

サイト： http://mcm.leeds.ac.uk/MCM/
データベース名：The Master Chemical Mechanism
概要：気相の化学プロセスのデータベース。メタンと 142 件の VOC のデータを収録している。

サイト： https://www.totalmateria.com/page.aspx?ID=Home&LN=JP
データベース名：Total Materia 【有償】
概要：様々な材料を含む、包括的なデータベース。

サイト： https://toxnet.nlm.nih.gov/
データベース名：TOXNET Databases
概要：化合物の毒性、環境や人体への影響などに関するデータベース。

サイト： http://www.mrl.ucsb.edu:8080/datamine/thermoelectric.jsp
データベース名：UCSB-MRL thermoelectric database
概要：100 件の文献から情報を抽出した熱電効果に関するデータベース。

サイト： http://eds.bmc.uu.se/eds/valligurl.php
データベース名：VallkgURL
概要：蛋白質とリガンドの相互作用に関するデータベース。

サイト： http://webreactions.net/
データベース名：WebReactions
概要：ケモインフォマティクスのツールに関するプラットフォーム。

サイト： http://zinc15.docking.org/
--

データベース名：ZINC15

概要：薬物のバーチャルスクリーニング用のデータベース。市販化合物だけでなく、簡単に合成可能な化合物を加え 2.3 億件の化合物を収録している。