

Supplementary Materials for: Finding crystalline compounds using chemical similarity

Hai-Chen Wang,[†] Silvana Botti,[‡] and Miguel A. L. Marques^{*,†}

[†]*Institut für Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 06120 Halle (Saale),
Germany*

[‡]*Institut für Festkörpertheorie und -Optik, Friedrich-Schiller-Universität Jena and
European Theoretical Spectroscopy Facility, Max-Wien-Platz 1, 07743 Jena, Germany*

E-mail: miguel.marques@physik.uni-halle.de

Supplementary Notes

List 1. All substitution pairs and corresponding similarities, with a 5 % threshold.

H $\rightarrow$

Li $\rightarrow$ Na (6.2)

Be $\rightarrow$

B $\rightarrow$

C $\rightarrow$

N $\rightarrow$

O $\rightarrow$

F $\rightarrow$

Na $\rightarrow$ K (5.3)

Mg $\rightarrow$ Mn (9.1), Zn (8.7), Cd (7.9), Fe (7.2), Ni (6.8), Co (6.7)

Al $\rightarrow$ Ga (13.0), In (7.3), Fe (5.4)

Si $\rightarrow$ Ge (15.8)

P $\rightarrow$ As (7.2)

S $\rightarrow$ Se (9.6)

Cl $\rightarrow$ Br (9.8)

K $\rightarrow$ Rb (10.3), Cs (5.5)

Ca $\rightarrow$ Sr (15.2), Ba (7.2), Eu (6.9), Yb (5.7)

Sc $\rightarrow$ Y (18.2), Lu (15.9), Tm (14.9), Er (14.6), Zr (14.4), Tb (14.3), Yb (13.8), Dy (13.4),
Ho (13.3), Gd (12.6), Ti (11.1), Sm (11.1), Nd (10.4), La (9.5), Pr (9.1), Ce (9.0), Hf
(9.0), In (8.1), Mn (8.0), U (7.8), Pu (6.0), V (5.3), Eu (5.3), Th (5.3), Al (5.1), Cr
(5.1), Nb (5.1)

Ti $\rightarrow$ Zr (11.5), V (9.8), Hf (7.8), Mn (7.2), Nb (5.9), Fe (5.6), Sc (5.6), Cr (5.6)

V $\rightarrow$ Cr (9.4), Ti (8.2), Fe (6.2), Nb (5.5), Mn (5.1)

Cr $\rightarrow$ Fe (14.2), V (12.9), Mn (10.0), Co (7.1), Ti (6.3), Rh (5.4), Ni (5.1)

Mn $\rightarrow$ Fe (14.7), Co (10.7), Ni (8.2), Zn (6.6), Mg (6.1), Cr (5.5)

Fe $\rightarrow$ Co (15.5), Mn (12.4), Ni (11.6), Cr (6.6), Al (5.2)

Co $\rightarrow$ Ni (24.2), Fe (18.8), Mn (10.9), Rh (8.6), Ru (6.6), Zn (6.3), Cu (5.9)

Ni $\rightarrow$ Co (20.9), Fe (12.1), Pd (10.0), Cu (8.9), Mn (7.3), Pt (7.3), Rh (6.9), Zn (5.1)

Cu $\rightarrow$ Ni (6.9)

Zn $\rightarrow$ Mn (8.4), Co (7.9), Mg (7.5), Ni (7.4), Cd (7.4), Fe (5.5)

Ga $\rightarrow$ Al (22.5), In (12.5), Sn (6.1), Fe (5.5)

Ge $\rightarrow$ Si (27.5), Sn (7.8)

As $\rightarrow$ P (18.2), Sb (11.8)

Se $\rightarrow$ S (21.5), Te (10.2)

Br $\rightarrow$ Cl (25.0), I (13.3)

Rb $\rightarrow$ K (22.1), Cs (21.9)

Sr $\rightarrow$ Ba (18.1), Ca (17.4), Eu (9.1)

Y $\rightarrow$ Ho (29.3), Er (29.2), Dy (29.0), Gd (28.2), Tb (28.1), Sm (23.3), Tm (22.2), Nd (21.8),
Lu (20.5), Yb (20.4), La (18.4), Pr (18.1), Ce (17.2), Sc (11.7), Eu (11.3), U (8.2), Th
(7.7), Pu (6.3), Ca (5.5), Zr (5.3)

Zr $\rightarrow$ Hf (24.7), Ti (16.0), Sc (10.0), U (7.7), Nb (6.4), Tb (6.0), Y (5.8), Ta (5.4), Ce (5.2),
Tm (5.2)

Nb $\rightarrow$ Ta (19.6), V (7.9), Ti (7.1), Zr (5.6), Hf (5.5)

Mo $\rightarrow$ W (9.3)

Tc $\rightarrow$ Re (19.1), Ru (8.8), Ti (7.4), Os (7.4), Mn (5.9), Fe (5.9), Pt (5.9)

Ru $\rightarrow$ Rh (16.3), Co (16.0), Fe (13.2), Os (13.1), Ni (11.8), Ir (11.5), Mn (8.8), Pt (7.5), Pd
(6.9)

Rh $\rightarrow$ Ir (21.3), Co (19.9), Pd (18.8), Pt (18.7), Ni (18.5), Ru (15.5), Fe (12.8), Cu (8.3), Cr
(7.0), Mn (6.7), Os (6.1), Al (5.5), Au (5.4)

Pd $\rightarrow$ Pt (19.6), Ni (19.3), Rh (13.5), Cu (10.4), Au (8.4), Co (7.8), Ir (5.7), Fe (5.0)

Ag $\rightarrow$ Cu (11.9), Au (9.7)

Cd $\rightarrow$ Zn (10.5), Mg (9.5), Mn (8.1), Hg (7.9)

In $\rightarrow$ Al (11.1), Ga (11.1), Tl (8.3), Sn (8.2)

Sn $\rightarrow$ Ge (9.9), Pb (9.4), In (7.0), Si (6.7)

Sb $\rightarrow$ As (11.1), Bi (9.2), P (6.1)

Te $\rightarrow$ Se (14.3), S (9.7)

I $\rightarrow$ Br (10.7), Cl (7.2)

Cs $\rightarrow$ Rb (16.1), K (8.6)

Ba $\rightarrow$ Sr (12.0), Ca (5.4)

La $\rightarrow$ Ce (27.8), Nd (27.0), Pr (24.5), Sm (18.9), Gd (16.9), Tb (13.3), Y (13.0), Dy (12.4),
Ho (11.2), Er (11.1), Yb (9.3), Eu (9.2), Tm (8.3), Lu (7.4), U (6.6), Th (5.4), Sr (5.3),
Ca (5.1)

Ce $\rightarrow$ La (36.2), Pr (32.6), Nd (31.0), Sm (22.9), Gd (21.9), Tb (18.2), Dy (17.3), Y (15.9),
Er (15.7), Ho (15.0), Yb (12.3), Tm (10.7), Eu (9.7), Lu (9.6), U (9.6), Th (9.0), Pu
(7.5), Ca (6.1), Np (5.7), Sc (5.3), Sr (5.1)

Pr $\rightarrow$ Nd (54.6), Ce (42.3), La (41.5), Sm (38.5), Gd (31.2), Tb (27.8), Dy (25.8), Ho (23.2),
Er (22.7), Y (21.8), Tm (17.8), Yb (17.6), Eu (16.4), Lu (14.6), U (10.9), Th (10.0),
Ca (8.5), Pu (8.5), Np (7.7), Sc (7.1), Sr (6.7)

Nd $\rightarrow$ Pr (45.5), La (38.1), Sm (36.0), Ce (33.5), Gd (31.8), Tb (26.2), Ho (23.3), Dy (23.2),
Y (21.8), Er (21.6), Yb (16.3), Eu (16.0), Tm (15.3), Lu (13.9), U (9.7), Th (8.9), Pu
(7.2), Ca (6.7), Sc (6.7), Np (5.9), Sr (5.7)

Pm $\rightarrow$ Y (71.4), Sm (71.4), Dy (71.4), Ho (71.4), Lu (71.4), Sc (57.1), La (57.1), Ce (57.1),
Pr (57.1), Nd (57.1), Gd (57.1), Tb (57.1), Er (57.1), Tm (57.1), Eu (42.9), Tl (28.6),
Ca (14.3), Mn (14.3), Sr (14.3), Rh (14.3), Pd (14.3), Ag (14.3), In (14.3), Ba (14.3),
Yb (14.3), Hg (14.3), Pb (14.3), Ac (14.3), Pu (14.3), Cf (14.3)

Sm $\rightarrow$ Nd (49.4), Gd (47.7), Pr (44.0), La (36.7), Ce (34.0), Tb (34.0), Dy (33.9), Y (32.0),
Ho (30.8), Er (29.9), Yb (24.0), Eu (23.8), Tm (23.6), Lu (18.6), U (11.1), Sc (9.8),
Th (9.8), Pu (8.2), Sr (7.5), Ca (7.0), Np (6.6)

Eu $\rightarrow$ Sm (23.8), Gd (23.2), Nd (22.1), Sr (21.0), Yb (20.0), Pr (18.8), Ca (18.2), La (17.9),
Dy (16.9), Tb (16.6), Ho (15.7), Er (15.7), Y (15.6), Ce (14.4), Ba (13.5), Tm (12.2),
Lu (10.3), U (6.2), Th (5.6)

Gd $\rightarrow$ Sm (41.2), Dy (40.2), Tb (38.6), Nd (37.8), Er (37.6), Ho (34.9), Y (33.5), Pr (30.8),
La (28.3), Ce (28.2), Tm (24.7), Yb (22.8), Lu (21.4), Eu (20.1), U (10.2), Sc (9.6), Th
(9.3), Pu (7.7), Ca (6.7), Sr (5.7), Np (5.6)

Tb $\rightarrow$ Dy (49.6), Ho (47.5), Gd (46.7), Er (44.9), Y (40.4), Nd (37.6), Sm (35.6), Pr (33.3),
Tm (32.3), Ce (28.3), La (27.0), Yb (27.0), Lu (26.3), Eu (17.4), Sc (13.2), U (12.9),
Th (10.4), Pu (8.9), Zr (8.0), Np (7.1), Ca (6.8), Sr (5.8)

Dy $\rightarrow$ Ho (55.9), Er (55.7), Tb (53.0), Gd (52.0), Y (44.6), Sm (37.9), Tm (37.9), Nd (35.6),
Pr (33.0), Yb (31.0), Lu (29.7), Ce (28.7), La (26.9), Eu (18.9), Sc (13.3), U (12.8),
Th (11.1), Pu (9.5), Ca (8.2), Np (7.7), Zr (6.2), Sr (5.7)

Ho $\rightarrow$ Er (57.2), Dy (55.3), Tb (50.1), Y (44.6), Gd (44.6), Tm (39.9), Nd (35.3), Yb (34.5),
Sm (34.0), Lu (31.1), Pr (29.3), Ce (24.6), La (24.0), Eu (17.3), Sc (13.0), U (12.6),
Th (9.9), Pu (8.9), Ca (7.8), Np (7.1), Zr (7.0), Sr (5.0)

Er $\rightarrow$ Ho (51.2), Dy (49.3), Gd (42.9), Tb (42.3), Y (39.7), Tm (37.8), Yb (30.4), Sm (29.6),
Nd (29.3), Lu (29.3), Pr (25.7), Ce (23.0), La (21.2), Eu (15.5), Sc (12.8), U (10.9),
Th (8.7), Pu (8.3), Ca (6.8), Np (6.4), Zr (6.1)

Tm $\rightarrow$ Er (63.5), Ho (59.9), Dy (56.2), Tb (51.1), Y (50.6), Gd (47.4), Yb (47.2), Lu (45.3),
Sm (39.2), Nd (34.8), Pr (33.8), La (26.5), Ce (26.3), Sc (21.9), Eu (20.2), U (16.8), Th
(13.6), Pu (11.4), Zr (10.9), Np (9.0), Ca (8.3), Sr (6.6), Ti (5.4), Mn (5.4), In (5.1),
Hf (5.1)

Yb $\rightarrow$ Ho (31.0), Er (30.6), Tm (28.3), Y (27.8), Dy (27.6), Gd (26.2), Tb (25.7), Lu (25.7),
Sm (23.9), Nd (22.3), Pr (20.0), Eu (19.8), Ce (18.2), La (17.9), Ca (15.0), Sc (12.1),
U (10.5), Sr (9.6), Th (8.3), Pu (7.7), Np (5.5), Zr (5.4), Ba (5.2)

Lu $\rightarrow$ Er (48.1), Y (45.7), Ho (45.7), Tm (44.3), Dy (43.1), Yb (41.9), Tb (40.7), Gd (40.2),
Nd (31.0), Sm (30.2), Pr (27.1), La (23.3), Ce (23.1), Sc (22.9), Eu (16.7), U (13.6),
Pu (10.7), Th (10.2), Zr (10.0), Np (8.3), Ca (7.1), In (6.4), Mn (6.2), Hf (5.7)

Hf $\rightarrow$ Zr (52.6), Ti (23.0), Nb (13.4), Sc (13.2), Ta (9.3), U (8.8), V (7.1), Mn (6.8), Th (6.8), Y (6.4), Ce (6.1), Lu (5.9), Pu (5.9), Tb (5.6), Dy (5.6), Ho (5.4), Gd (5.1), Er (5.1), Tm (5.1)

Ta $\rightarrow$ Nb (28.4), V (8.6), Ti (6.8), Zr (6.8), Hf (5.5)

W $\rightarrow$ Mo (17.1)

Re $\rightarrow$ W (5.7)

Os $\rightarrow$ Ru (30.5), Ir (17.2), Rh (15.1), Fe (13.6), Co (13.3), Pt (12.7), Ni (10.9), Mn (9.7), Pd (8.2), Cr (6.3), Re (6.0)

Ir $\rightarrow$ Rh (29.4), Pt (22.5), Ru (15.1), Co (14.9), Ni (12.9), Pd (11.0), Os (9.6), Fe (8.5), Al (6.6), Mn (5.4)

Pt $\rightarrow$ Pd (24.7), Ni (17.6), Rh (16.9), Ir (14.7), Co (8.6), Au (8.2), Fe (6.4), Ru (6.4), Cu (5.9)

Au $\rightarrow$ Cu (15.0), Ag (12.9), Pd (11.5), Pt (8.9), Ni (6.9), Rh (5.3)

Hg $\rightarrow$ Cd (12.3), Zn (5.8)

Tl $\rightarrow$ In (14.1), K (8.8), Rb (7.3), Sn (5.8), Pb (5.8), Ga (5.2), Cs (5.0)

Pb $\rightarrow$ Sn (14.3), In (6.3)

Bi $\rightarrow$ Sb (13.9), As (6.7)

Ac $\rightarrow$ La (85.7), Nd (71.4), Ce (57.1), Pr (57.1), Am (57.1), Sm (42.9), Eu (42.9), Gd (42.9), Np (42.9), Pu (42.9), Cm (42.9), Sc (28.6), Ho (28.6), Yb (28.6), Bi (28.6), U (28.6), Cf (28.6), Mg (14.3), S (14.3), Ti (14.3), V (14.3), Cr (14.3), Se (14.3), Y (14.3), Zr (14.3), Nb (14.3), Pm (14.3), Tb (14.3), Dy (14.3), Er (14.3), Tm (14.3), Lu (14.3), Ta (14.3), Bk (14.3)

Th $\rightarrow$ U (34.4), Ce (22.2), Nd (20.2), Pr (19.0), Gd (17.8), Y (17.6), La (17.3), Tb (16.6),
Dy (16.6), Sm (16.3), Ho (14.9), Er (14.6), Yb (13.9), Tm (13.7), Pu (13.2), Np (12.4),
Lu (10.5), Zr (10.2), Eu (9.3), Ca (8.0), Sc (7.8), Sr (6.8), Hf (6.8)

Pa $\rightarrow$ U (60.0), Th (36.7), Np (33.3), Zr (26.7), Ce (26.7), Pu (23.3), Pr (20.0), Hf (20.0),
Sc (16.7), Ti (16.7), V (16.7), Tb (16.7), Ta (16.7), Am (16.7), Cm (16.7), Mg (13.3),
Sr (13.3), Nb (13.3), Sn (13.3), Nd (13.3), Sm (13.3), Gd (13.3), Dy (13.3), Yb (13.3),
Ca (10.0), Cr (10.0), Zn (10.0), Y (10.0), Ba (10.0), La (10.0), Eu (10.0), Ho (10.0),
Er (10.0), Tm (10.0), Lu (10.0), Bk (10.0), Si (6.7), Fe (6.7), Ni (6.7), Mo (6.7), Cd
(6.7), Pb (6.7), Cf (6.7)

U $\rightarrow$ Th (13.7), Ce (9.4), Nd (8.8), La (8.4), Pr (8.2), Tb (8.1), Np (8.1), Gd (7.8), Dy (7.6),
Ho (7.6), Y (7.5), Sm (7.4), Er (7.3), Yb (7.0), Tm (6.7), Pu (6.7), Zr (6.5), Lu (5.5)

Np $\rightarrow$ U (49.4), Pr (35.3), Pu (35.3), Ce (34.1), La (33.5), Nd (32.4), Th (30.0), Dy (27.6),
Tb (27.1), Sm (26.5), Gd (25.9), Ho (25.9), Er (25.9), Y (25.3), Yb (22.4), Tm (21.8),
Lu (20.6), Sc (15.9), Eu (15.9), Zr (14.7), Am (14.7), Ca (10.6), Cm (10.6), Sr (9.4),
Hf (8.2), Ti (6.5), Ba (6.5), Nb (5.9), Pa (5.9), Mg (5.3)

Pu $\rightarrow$ Ce (40.2), U (36.5), Nd (35.4), Pr (34.9), La (33.3), Gd (32.3), Np (31.7), Y (31.2),
Tb (30.7), Dy (30.7), Er (30.2), Sm (29.6), Ho (29.1), Th (28.6), Yb (28.0), Tm (24.9),
Lu (23.8), Sc (19.0), Zr (17.5), Eu (16.9), Am (15.9), Hf (12.7), Ca (11.1), Cm (11.1),
Sr (9.5), Ti (7.9), Ba (7.4), V (6.9), Nb (6.9), Mg (6.3), Ta (5.8), In (5.3), Bk (5.3)

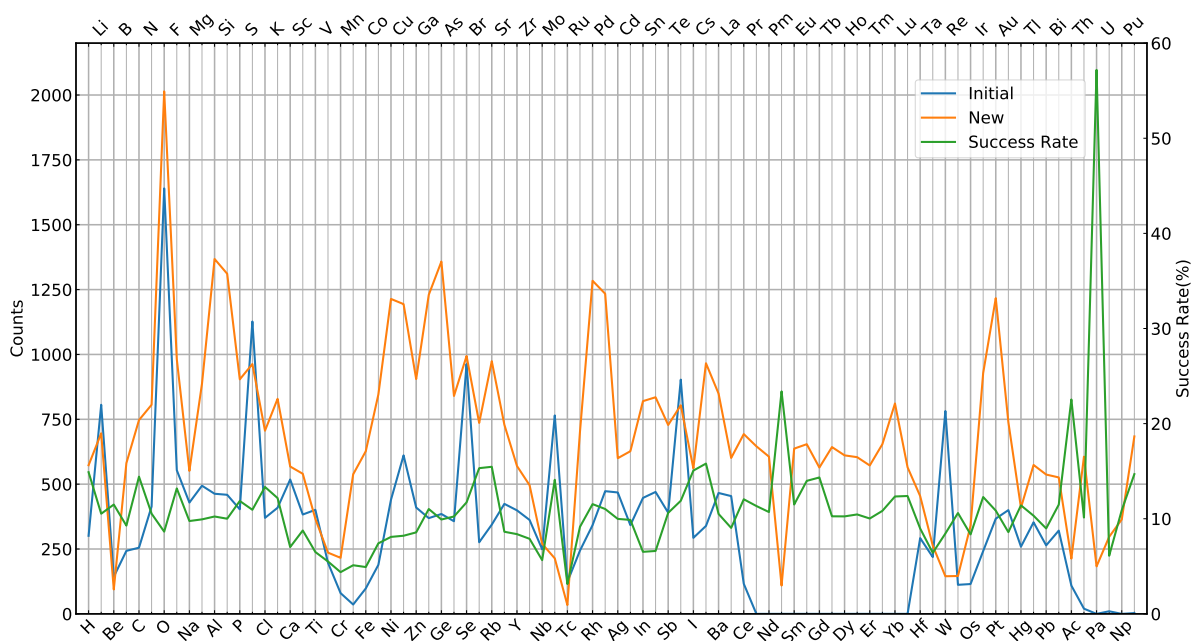
Am $\rightarrow$ Pu (63.8), La (61.7), Ce (61.7), Nd (61.7), Pr (55.3), Np (53.2), Gd (48.9), Tb (48.9),
Dy (46.8), Ho (46.8), Sm (44.7), Yb (44.7), U (44.7), Y (42.6), Cm (42.6), Er (40.4),
Eu (38.3), Tm (38.3), Lu (34.0), Sc (27.7), Zr (25.5), Th (25.5), Sr (21.3), Bk (21.3),
Ca (17.0), Ba (14.9), Hf (14.9), Ti (12.8), In (12.8), Mg (10.6), Pb (10.6), Pa (10.6),
Cf (10.6), V (8.5), Cr (8.5), Mn (8.5), Nb (8.5), Sn (8.5), Bi (8.5), Ac (8.5), Cd (6.4),
Ta (6.4)

Cm $\rightarrow$ Nd (45.1), La (43.1), Ce (43.1), U (43.1), Pu (41.2), Pr (39.2), Am (39.2), Gd (37.3),
 Np (35.3), Tb (33.3), Ho (33.3), Y (31.4), Dy (31.4), Eu (29.4), Er (29.4), Yb (29.4),
 Sc (27.5), Tm (27.5), Sm (25.5), Lu (25.5), Th (25.5), Bk (19.6), Sr (17.6), Zr (17.6),
 Ca (15.7), In (13.7), Ba (13.7), Cf (13.7), Mg (11.8), Ti (9.8), Nb (9.8), Sn (9.8), Pb
 (9.8), Bi (9.8), Pa (9.8), V (7.8), Cr (7.8), Mn (7.8), Cd (7.8), Hf (7.8), Ta (5.9), Hg
 (5.9), Ac (5.9)

Bk $\rightarrow$ Ce (62.5), Pu (62.5), Am (62.5), Cm (62.5), Tb (50.0), Yb (50.0), U (50.0), Np (50.0),
 Sc (43.8), Y (43.8), La (43.8), Pr (43.8), Nd (43.8), Ho (43.8), Er (43.8), Zr (37.5),
 Gd (37.5), Dy (37.5), Tm (37.5), Th (37.5), Lu (31.2), Ti (25.0), V (25.0), Cr (25.0),
 Nb (25.0), Eu (25.0), Sr (18.8), In (18.8), Sm (18.8), Hf (18.8), Ta (18.8), Pa (18.8),
 Cf (18.8), Mg (12.5), Al (12.5), Ca (12.5), Ba (12.5), Pt (12.5), Bi (12.5), Li (6.2), Be
 (6.2), Si (6.2), S (6.2), Mn (6.2), Fe (6.2), Co (6.2), Ni (6.2), Cu (6.2), Zn (6.2), Ga
 (6.2), Se (6.2), Mo (6.2), Pd (6.2), Cd (6.2), Sn (6.2), W (6.2), Pb (6.2), Ac (6.2)

Cf $\rightarrow$ Ce (52.9), Pr (52.9), La (47.1), Pu (47.1), Nd (41.2), Gd (41.2), Tb (41.2), Cm (41.2),
 Er (35.3), Y (29.4), Dy (29.4), Ho (29.4), Yb (29.4), Lu (29.4), U (29.4), Np (29.4),
 Am (29.4), Sc (23.5), Sm (23.5), Eu (23.5), Tm (23.5), Th (23.5), Zr (17.6), Bk (17.6),
 Ca (11.8), Sr (11.8), In (11.8), Sn (11.8), Ba (11.8), Pb (11.8), Bi (11.8), Ac (11.8), Pa
 (11.8), Li (5.9), Mg (5.9), Si (5.9), Mn (5.9), Rh (5.9), Cd (5.9), Te (5.9), Pm (5.9),
 Hf (5.9), Ir (5.9), Hg (5.9), Tl (5.9)

Supplementary Figures



Supplementary Figure 1: Distribution of the number of new and initial compounds that contain a selected chemical element, as well as the success rate for substitutions involving a selected chemical element.