

机器学习驱动新型发光材料的研究进展

宋坤洁, 解荣军

(厦门大学 材料学院, 厦门 361005)

摘要: 发光材料是一类重要的战略性先进电子材料, 在新型显示、固态照明、生物医学和传感探测等领域展现出广阔的应用前景。然而, 实际应用对材料性能提出多维度严格要求, 依赖经验与试错的传统研发模式周期长、成本高, 严重制约高性能新材料的开发进程。近年来, 机器学习(Machine learning, ML)的快速发展为该领域瓶颈问题提供了新的解决途径。ML 通过构建“组成-结构-性能”之间的复杂映射关系, 实现对候选材料的高通量虚拟筛选, 进而提升研发效率。此外, ML 的特征重要性分析, 揭示了影响发光性能的关键物理化学因素, 为理解材料构效关系提供了新的理论支持。本文系统阐述了 ML 驱动发光材料研究的流程框架, 重点包括数据准备、特征工程、模型选择、模型评估与模型应用等关键环节, 并深入探讨了各阶段在发光材料研究中的特殊考量与应对策略。在此基础上, 本文还综述了 ML 在荧光粉关键性能预测方面的最新研究进展, 包括发射波长、半峰全宽(FWHM)、热稳定性、荧光寿命、质心位移及工艺优化等关键指标。最后, 对当前研究存在的挑战, 如可靠数据匮乏、材料性质复杂及参数难量化等问题进行了梳理, 并展望了未来人工智能(Artificial intelligence, AI)技术在发光材料研究中深度融合的发展趋势, 以期为推动荧光粉材料领域“AI for Science”新范式的建立提供有益参考。

关键词: 机器学习; 荧光粉; 人工智能; 数据驱动技术; 发光材料; AI for Science; 综述

中图分类号: O482 文献标志码: A 文章编号: 1000-324X(2026)06-0689-15

Research Advances on Machine Learning-driven Development of Novel Luminescent Materials

SONG Kunjie, XIE Rongjun

(College of Materials, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: Phosphor materials are essential functional components in modern optoelectronics, playing a crucial role in next-generation displays, solid-state lighting, biomedical imaging, and sensing applications. However, the properties of materials are stringently required in multiple dimensions for practical applications. The conventional trial-and-error approach impedes the development of novel high-performance phosphors due to its long cycles and high costs. In recent years, the rapidly advancing machine learning (ML) methodology presents an innovative solution to addressing

收稿日期: 2025-09-23; 收到修改稿日期: 2025-11-27; 网络出版日期: 2025-12-11

基金项目: 国家重点研发计划(2022YFB3503800, 2022YFB3503801)

National Key R&D Program of China (2022YFB3503800, 2022YFB3503801)

作者简介: 宋坤洁(2000-), 男, 博士研究生. E-mail: songkj@stu.xmu.edu.cn

SONG Kunjie (2000-), male, PhD candidate. E-mail: songkj@stu.xmu.edu.cn

通信作者: 解荣军, 教授. E-mail: rxjie@xmu.edu.cn

XIE Rongjun, professor. E-mail: rxjie@xmu.edu.cn

these bottlenecks. It not only dramatically accelerates the high-throughput virtual screening of candidate materials by establishing complex mappings among “composition-structure-property”, substantially improving efficiency, but also provides novel theoretical insights into structure-property correlations through algorithm-derived importance weights. This review systematically outlines the methodological framework for ML-driven phosphor development, covering key stages including data preparation, feature engineering, model selection, model evaluation and application. It further discusses specific considerations and corresponding strategies for each stage of the process. Subsequently, it reviews recent research progress in applying ML to predict key phosphor properties, encompassing critical metrics such as emission wavelength, full width at half-maximum (FWHM), thermal stability, fluorescence lifetime, centroid shift, and process optimization. Finally, this review addresses existing challenges in current research, such as scarcity of reliable data, complexity of materials properties, and difficulties in parameter quantification. The article outlines future development trends for the deep integration of artificial intelligence (AI) technology in luminescent materials research, aiming to provide a valuable reference for promoting the establishment of an “AI for Science” paradigm in the field of phosphor materials.

Key words: machine learning; phosphor; artificial intelligence; data-driven technique; luminescent material; AI for science; review

发光材料是一类在无机基质晶格中掺杂稀土离子或过渡金属离子的先进功能材料(也称为荧光粉), 在外界能量激发下可产生特征电磁波发射。这类材料具有优异的光学性能, 广泛应用于背光显示、固态照明、生物成像、智慧农业和传感探测等领域^[1-3]。随着全球气候变暖以及能源危机问题的加剧, 传统照明技术的高能耗(典型白炽灯能量转换效率不足 5%)和高碳排放已无法满足可持续性社会发展需求。在此背景下, 基于荧光粉转换的白光发光二极管(Phosphor-converted white light-emitting diode, pc-wLED)^[4-6]技术展现出显著优势, 其具备能量转换效率高、使用寿命长、无汞污染和低热损耗等环保特性^[7-9]。研究指出, 使用 pc-wLED 取代 35% 的传统白炽灯将创造巨大的环境和经济效益, 预计每年节省 185 TWh 的能源, 相当于避免了 7900 万吨 CO₂ 的排放^[10]。

荧光粉材料作为照明及显示器件的关键功能组分, 长期以来受到学术界广泛研究与关注。虽然目前已开发出多种荧光粉材料, 但在实际应用场景中对其性能要求是多维度与综合性的。因此, 尽管绝大多数荧光粉在某一特定性能方面表现优异, 仍因无法全面满足实际应用条件而缺乏商业化价值。美国能源部于 2022 年发布的调查文件指出, 具备实际应用前景的荧光粉必须同时满足多项关键性能指标, 包括适宜的发射光谱位置、窄的发射峰宽、良好的光谱热稳定性、高量子效率、优异的化学稳定性以及合适的粉体粒径分布。只有综合性能达到上述标

准的荧光材料, 才具备面向商业化应用的基本条件, 其关键性能如图 1 所示^[1, 10-12]。

长期以来, 荧光粉的研发主要依赖于研究者的经验积累和试错。尽管这种方法成功发现了诸多新型荧光粉材料, 但能够同时满足图 1 所示多项性能指标的材料体系仍然稀缺。为加速新型荧光粉的开发, 研究者提出了多种改进策略, 例如单颗粒诊断法^[13]、组合化学空间搜索^[14-15]以及矿物结构原型启发^[7, 16]等。然而, 这些方法仍然面临经验依赖和试错成本高昂等固有局限。计算方法的提出推动了材料科学的第一次计算革命, 特别是密度泛函理论(Density functional theory, DFT)、蒙特卡洛模拟和分子动力学的应用, 使得研究人员能够更有效地探索相组成空间^[17]。例如, 本课题组采用 DFT 计算对 Sr-Al-Si-O-N 的化学空间进行高通量筛选, 通过评估具有合适禁带宽度和德拜温度的材料结构, 成功发现了具有全可见光谱发射特性的 Sr₂AlSi₂O₆N:Eu²⁺ 荧光粉^[6]。此外, 本课题组结合 DFT 计算和理论参数化模型, 建立了 Eu²⁺ 发射波长与掺杂基质参数间的定量构效关系模型, 从无机晶体结构数据库(Inorganic crystal structure database, ICSD)中成功筛选出 5 种具有潜在应用价值的近红外荧光材料基质^[18]。需要指出的是, 当前高通量 DFT 计算仍受到计算资源的显著限制, 高昂的计算成本严重制约了其在多组分体系 and 大规模材料筛选中的应用。

当代 AI 的出现预示着第二次计算革命, 极大地改变和加强了计算机在材料科学与工程中的应用。

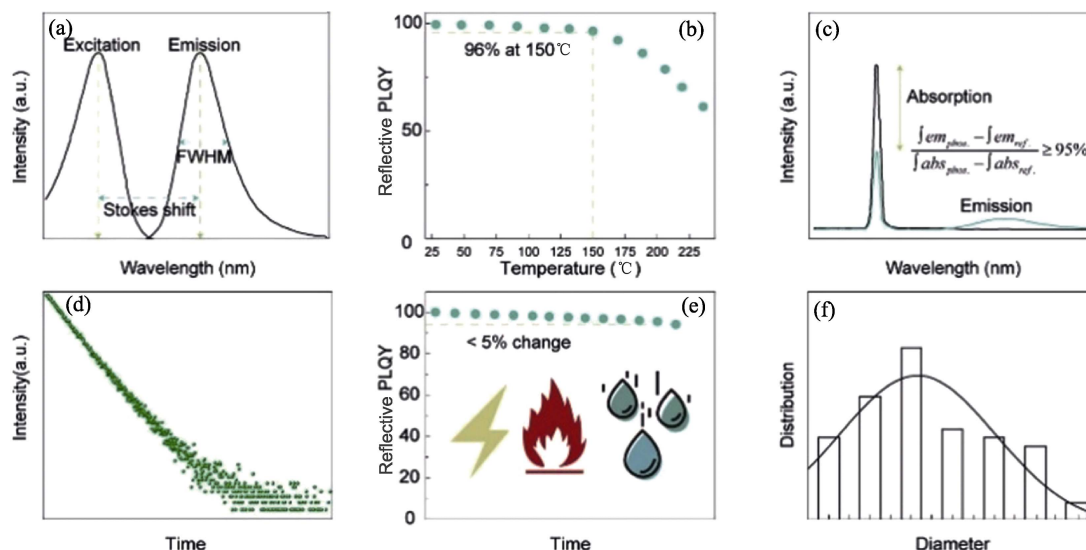


图 1 荧光粉的关键性能指标

Fig. 1 Key properties for phosphors

(a) Fluorescence spectrum (including excitation wavelength, emission wavelength, FWHM, Stokes shift); (b) Thermal stability of materials; (c) Quantum efficiency of phosphor; (d) Decay time; (e) Chemical stability; (f) Particle size distribution

大数据与 AI 的结合被称为“科学的第四研究范式”, 其在科学领域的应用正在以惊人的速度增长^[19-20]。

ML 作为 AI 近年来迅速发展的一子领域, 为发光材料的理性设计带来了新的思路^[21]。ML 能够高效预测发光材料的性能参数, 包括但不限于激发/发射能量^[22]、量子效率^[23]、荧光寿命^[24]以及德拜温度^[25]等关键特性。同时其低成本、高效率、高准确性的优势引起了广泛关注。近年来, ML 与实验研究的交叉融合产生了诸多创新性成果^[26-29]。本综述系统总结了 ML 的基本工作流程, 包括数据准备、特征工程、模型选择、模型评估和模型应用五部分。随后重点讨论了该方法在荧光粉材料关键性能预测, 尤其是对发射光谱和稳定性预测的应用进展。最后, 基于研究现状, 提出了该领域面临的一些挑战, 并

展望了未来可能的发展方向。

1 机器学习驱动发光材料研究流程

AI 是指通过 ML、深度学习(Deep learning, DL)等技术手段, 使计算机系统具备类人认知功能(包括推理、学习和决策等能力)的计算方法体系。如图 2 所示, ML 作为 AI 的核心组成部分, 在材料科学领域主要应用于构建数据驱动的预测性回归与分类模型^[30-32]。其核心在于通过对已有数据知识的学习, 建立材料结构与性能之间的映射模型, 进而精准预测潜在材料的性质。基于 ML 的材料研究一般包括数据准备、特征工程、模型选择、模型评估和模型应用五个步骤。

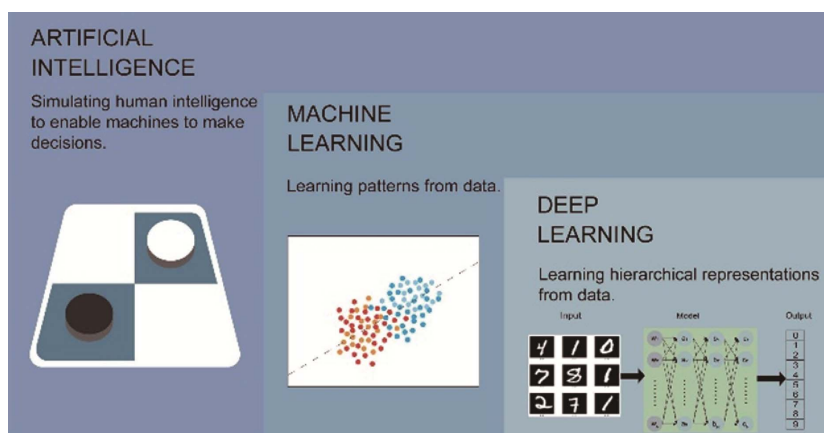


图 2 人工智能、机器学习与深度学习之间的关系示意图

Fig. 2 Conceptual framework of hierarchical relationship among artificial intelligence, machine learning, and deep learning

1.1 数据准备

数据采集作为 ML 在材料科学研究中的基础环节,其质量直接决定了后续模型的预测性能。数据集通常包括与材料相关的物理性质参数和光学性质参数。物理性质方面包括构成元素的原子特征(如原子序数、电负性和原子半径)^[33]以及材料的晶体结构、电子结构等本征属性。这些参数可通过第三方计算模块或材料数据库的应用程序编程接口(Application programming interface, API)获取,如表 1 所示^[34-43]。光学性质则包括发光材料的激发和发射峰位、最大 FWHM、荧光寿命、热猝灭稳定性等。这些参数主要通过已发表文献检索、实验收集、理论计算获得,并通常作为目标性质。需要特别强调的是,数据的准确性和完整性对 ML 模型的性能具有决定性影响,因此必须对获得的数据进行质量检测^[44]。首先,必须对数据完整性进行核查,保证数据类型的统一性并处理缺失值问题。在收集数据过程中,一些特殊结构部分性质往往难以提取,当缺失值较少时可采取均值填充,但当缺失值过多时,则应考虑删除该列数据。其次,需评估数据精度的一致性。由于数据来源的多样性,不同研究团队对同一性质的测试或计算方法可能存在显著差异,例如 DFT 计算中采用 PBE(Perdew-Burke-Ernzerhof)泛函与 HSE06(Heyd-Scuseria-Ernzerhof 2006)杂化泛函所获得的带隙值可能相差高达 50%,这就要求数据预处理阶段采用统一标准^[45]。最后,检查数据合理性与唯一性,通过统计分析和可视化方法识别并剔除异常值及重复数据点,确保数据集的清洁度。这一系列措施有助于构建高精度的预测模型。

1.2 特征工程

ML 模型训练的核心目标在于建立材料特征描述符与光学性能参数之间的准确映射关系,因此特征描述符的合理选择至关重要^[46-48]。有效的特征描述符应充分表征材料的关键特性,从而确保模型能够精确捕捉不同材料体系间的相似性与差异性^[49]。

特征工程作为数据预处理的关键环节,其主要任务是通过优化原始描述符来提升模型的预测性能。特征工程需要考虑以下策略^[50]。

1.2.1 特征选择

特征选择旨在从原始特征集合中选取对目标变量预测最有价值的特征。更多的描述符并不能保证模型具有更好的质量,相反,过多的特征数量会增加模型的复杂性和训练时间。此外,数据过多可能导致特征稀疏和维度灾难,从而降低模型性能。特征选择通常采用相关性分析和正则化方法相结合的策略。在相关性分析中,主要运用 Pearson 相关系数^[51]和 Spearman 等级相关系数等统计方法评估特征间的关联性。其中, Pearson 相关系数(r)用于量化特征间的线性相关性,其取值范围为 $[-1, 1]$: $r=1$ 表示完全正线性相关, $r=-1$ 表示完全负线性相关, $r=0$ 则表示无线性相关性。当 r 的绝对值超过 0.9 时,仅保留物理意义更明确或与目标变量相关性更强的特征。除相关性分析外, Lasso(Least absolute shrinkage and selection operator)回归算法基于 L1 正则化将冗余特征的系数收缩至零,从而实现特征空间的稀疏化,也常用于特征筛选^[52]。

1.2.2 特征转换

特征转换旨在通过数学变换将原始特征转化为更具物理意义和统计特性的新特征,从而优化数据的分布特征并增强模型的表达能力^[53]。需要特别指出的是,特征转换的效果具有显著的模型依赖性和数据特异性。常用的转换方法包括: (1)非线性变换(如对数转换和幂次变换),用于处理偏态分布数据; (2)分类变量编码(包括独热编码和均值编码),实现类别特征的数值化表示; (3)基于领域知识的组合特征构造(如电负性差、离子半径比等)。这些转换可显著提升模型对材料构效关系的捕捉能力。

1.2.3 特征缩放

特征缩放是 ML 数据预处理的关键步骤,其核心目的是通过数学变换将不同量纲和量级的特征统

表 1 常用的第三方库以及数据库^[34-43]

Table 1 Major external libraries and databases^[34-43]

Library	Website	Ref.	Database	Website	Ref.
Matminer	https://hackingmaterials.lbl.gov/matminer/	[34]	MP	https://materialsproject.org/	[39]
DScribe	https://singroup.github.io/dscribe/	[35]	AFLOW	https://www.afflowlib.org/	[40]
ChemTools	https://www.chemistrytools.org/	[36]	NOMAD	https://nomad-lab.eu/nomad-lab/	[41]
RDKit	https://www.rdkit.org/	[37]	ICSD	https://icsd.nist.gov/	[42]
Pymatgen	https://pymatgen.org/	[38]	COD	https://www.crystallography.net/cod/	[43]
.....					

一至相同数值范围, 以确保各特征在模型训练过程中获得均衡的权重分配。常用的特征缩放方法主要包括: (1) Min-Max 归一化, 将特征线性映射至[0, 1]区间; (2) Z-score 标准化, 基于均值和标准差将数据转换为标准正态分布。

1.2.4 特征选择的物理依据

值得注意的是, 依据统计相关性的特征选择固然重要, 但长期积累的实验经验知识同样可靠, 在构建特征时应当充分考虑这些经验知识。例如, 在研究稀土离子掺杂发光材料的发射波长时, 稀土离子所处的局域结构特征极为重要, 应重点关注多面体的体积、畸变程度、平均键长、配位阴离子电负性等特征。而在研究热稳定性时, 基质材料的禁带宽度以及德拜温度是比较重要的两个特征。基于实验经验知识所构建的特征, 可在一定程度上反映材料内部的微观物理化学过程。例如, 稀土离子的局域结构特征直接影响 4f-5d 电子跃迁过程中的质心位移与晶体场劈裂; 而材料的禁带宽度与德拜温度则分别影响能量转移路径、激子结合能及声子振动行为^[11]。然而, 当前构建的特征在描述某些关键物理量方面仍存在明显局限, 如电子自旋-轨道耦合、激发态之间的交叉弛豫, 以及电-声耦合等微观过程, 目前仍缺乏有效的结构或成分描述符来准确表征。整体来说, 基于实验经验知识的特征集不仅有利于提升模型效果, 在构效关系分析方面更能体现出特征与性能的物理关联性, 提高模型结果的可信度。

1.3 模型选择

ML 算法体系主要包含监督学习、无监督学习和强化学习三大范式。监督学习方法通过构建特征描述符与目标光学性质(如发射波长、热猝灭温度等)之间的定量映射关系, 对材料性能实现准确预测。其中, 线性回归(Linear regression, LR)、支持向量回归(Support vector regression, SVR)、随机森林(Random forest, RF)等算法在发光材料研究中应用广泛且表现突出^[24, 26, 54]。无监督学习方法则通过挖掘未标注数据中隐含的结构特征, 实现材料的分类与规律发现^[32], 常用算法有 K-means 聚类、主成分分析(Principal component analysis, PCA)和 *t*-分布随机邻域嵌入(*t*-distributed stochastic neighbor embedding, *t*-SNE)等。强化学习凭借其独特的奖励反馈机制, 在材料合成路径优化等领域展现出巨大应用潜力^[55-56]。

由于数据结构的差异, ML 模型的选择需综合考虑预测目标、数据特征和计算资源等多重因素。即便选定合适的算法框架, 模型性能仍在很大程度

上依赖于超参数优化效果。算法的超参数决定了底层的运算逻辑与收敛标准, 对模型表现起着决定性作用^[57]。因此, 超参数优化对获得模型最佳性能极为重要。为此, 研究者开发了多种优化策略, 包括系统性的网格搜索、高效的贝叶斯优化以及粒子群优化等。

1.4 模型评估

模型评估是确保 ML 算法具备良好泛化性能的关键环节, 其核心目标是有效控制预测误差(包括偏差、方差及噪声干扰)导致的欠拟合或过拟合现象。过拟合通常发生在模型复杂度过高或特征冗余的情况下, 表现为对训练数据过度适配而丧失泛化能力; 欠拟合则反映模型未能充分捕捉数据的内在规律。

为了系统评估模型性能, 标准流程通常采用三数据集划分策略: 训练集用于参数学习, 验证集指导超参数优化, 测试集用于评估模型的泛化能力。其中, *K* 折交叉验证(*K*=5 或 10)通过多次随机划分有效消除了数据切割偶然性对模型泛化能力的影响。值得注意的是, 模型性能不应局限于构建完美的数据集, 还应具备识别并抵抗异常数据干扰的能力。除了交叉验证所提供的泛化能力证明外, 还应强调模型的鲁棒性。即通过向数据集中添加噪声扰动、引入离群值、控制数据分布等, 用以提高模型对不同输入的适应性, 使模型在数据扰动下保持性能, 提高模型在数据集中存在不确定性和噪声数据时的稳定性。

1.5 模型应用

经过系统化的模型训练与评估流程, 优化后的 ML 模型可用于精准预测发光材料性质或发现自然界中潜在的荧光粉材料基质。然而, 需要特别指出的是, 尽管高性能模型能够有效解决材料预测及筛选问题, 但其固有的“黑箱”特性往往掩盖了材料结构与性能之间的内在物理化学机制。因此, 开展模型可解释性分析具有重要意义, 从而验证模型的物理合理性并揭示材料潜在的构效关系, 为材料设计提供理论指导^[58-59]。

在可解释性分析方法方面, 当前研究主要聚焦在两个维度。(1)特征层面分析。通过 RF 的特征重要性排序和决策树可视化等方法, 定量评估各描述符对预测结果的贡献, 进而识别影响材料性能的关键因素。(2)样本层面解析。采用局部可解释模型无关解释(Local interpretable model-agnostic explanations, LIME)^[60]和 SHapley 加性解释(SHapley additive explanation, SHAP)^[61]等方法, 深入探究模型对特定

样本的决策机制。SHAP 值分析适用于量化各特征对单个预测的边际贡献,其可视化结果能直观展示不同特征值区间对模型输出的影响趋势。例如,上海交通大学张鹏飞教授团队^[61]采用 SHAP 模型,系统分析了尖晶石结构高熵金属氧化物中元素组成与结晶分类模型以及元素组成与催化活性回归模型的特征重要性。SHAP 分析表明,Zn、Co 和 Mg 对尖晶石结构成相具有关键作用;同时,这些元素也显著提升了该类高熵金属氧化物对 CH₄ 的催化活性。相比之下,提升 C₃H₆ 与 CO 催化活性的关键元素则有所不同:前者主要为 Zn、Co、Mn,后者为 Cu、Ni、Mn。该研究为尖晶石结构高熵金属氧化物的定向筛选与组分设计提供了重要的理论依据。

2 机器学习在发光材料领域的应用

近年来,数据驱动的 ML 方法通过深度挖掘材料潜在的构效关系,在多个材料领域取得了突破性进展,如高性能合金设计^[31, 62]以及能源材料优化^[63-64]等。在发光材料领域,ML 同样展现出巨大的应用潜力,特别是在发光材料性质的预测方面。本章节基于发光材料的核心特性,介绍了 ML 在荧光粉材料研究中的应用进展,重点阐述其在解决材料设计科学问题中取得的成就。

2.1 发射波长

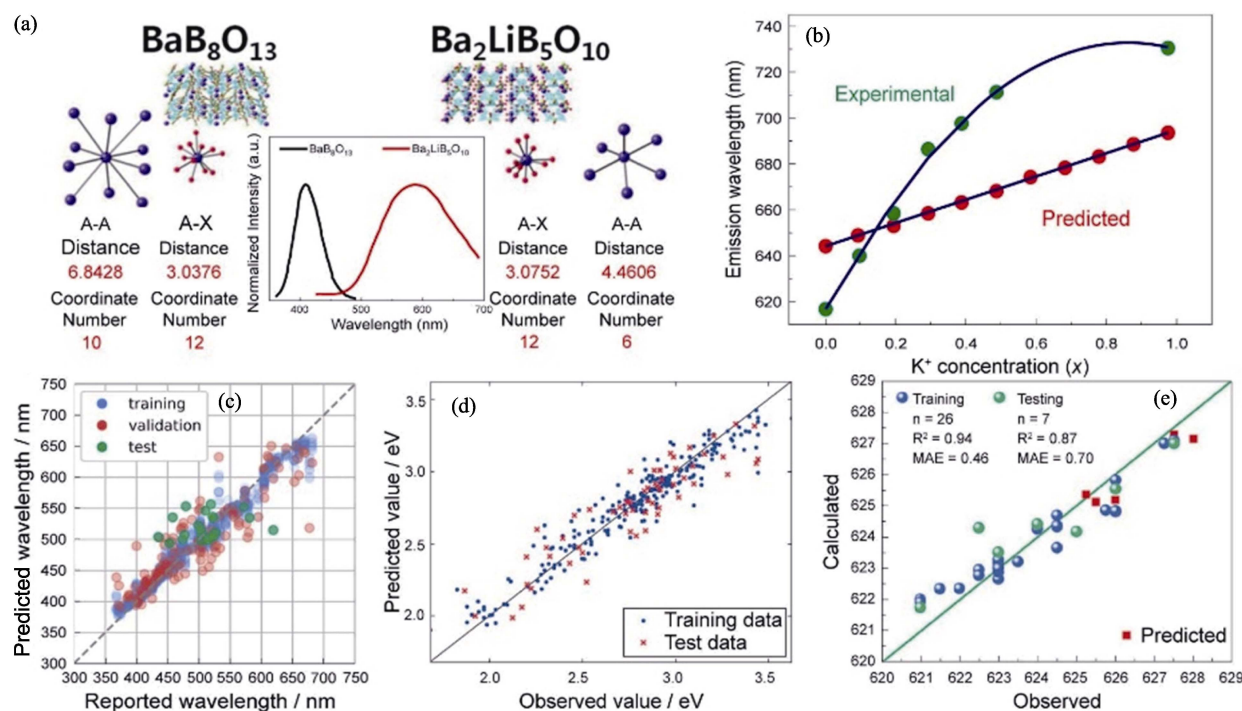
发射波长是发光材料最核心的光学参数,其精确调控直接影响材料在显示和照明等领域的应用价值^[65-66]。在典型的 Eu²⁺和 Ce³⁺掺杂体系中,其 4f-5d 跃迁发射行为受到基质晶体场的多重调控,包括配位对称性、键长、键角以及共价性等结构因子的协同作用^[67-68]。尽管离子取代策略可通过调控局域结构来调节发射波长,但多组分掺杂带来的合成复杂性及组分波动等问题,仍在一定程度上制约着该方法的可靠性与适用性。作为数据驱动赋能发光材料研究方面的开创性工作,韩国世宗大学 Sohn Kee-Sun 教授团队^[69]通过验证性因子分析了 Eu²⁺掺杂荧光粉材料的发射波长。如图 3(a)所示,尽管两种硼酸盐材料(BaB₈O₁₃:Eu²⁺, λ_{em} =408 nm; Ba₂LiB₅O₁₀:Eu²⁺, λ_{em} =587 nm)的配位结构相似但发射波长相差较大,这一差异源于 A-A 局部环境因素(A 为 Eu²⁺掺杂位点)。该研究为 Eu²⁺掺杂荧光粉材料的发射波长影响因素提供了新的见解。

除定性分析外,ML 还可通过建立组成-结构-性能的定量关联模型来精准预测发射波长。例如,华南理工大学夏志国教授团队创新性地运用 LR 模

型,基于小数据集预测 A₃BSi₂O₇ 型^[70-71]系列荧光粉材料的发射波长,并解析其变化趋势^[54]。该工作仅基于 8 条已知数据及 2 种金属阳离子半径特征构建的数据集,通过 LR 模型获得与实验值相似的变化趋势(图 3(b))。通过进一步解析拟合模型,明确了金属离子半径与该系列材料发射波长间的构效关系,为数据稀缺体系的 ML 研究提供了范例。日本国立材料研究所 Naoto Hirosaki 团队^[72]也通过构建 ML 模型成功实现了 Eu²⁺掺杂荧光粉材料发射波长的精准预测与新材料筛选。该工作基于高维特征空间构建的数据集,对比多种 ML 模型性能表现,利用最佳表现模型(图 3(c))对 AtomWork-Adv 材料数据库^[73]中的结构进行筛选,从 20 个预测发射波长位于 500~550 nm 区间的候选结构中,成功合成出三种新型 Eu²⁺掺杂荧光粉。值得注意的是,研究团队采用单颗粒诊断技术^[13],通过微区 X 射线衍射与光谱联用分析,从含杂相的合成产物中快速鉴别出目标相的发光特性,有效解决了大规模筛选后多种材料中目标相发光行为难以确认的难题。此外,日本索尼公司 Tomiya 等^[74]仅基于基质材料的化学计量信息,构建了 Eu²⁺掺杂荧光粉发射波长的预测模型,该模型的预测误差低于 DFT 计算得到的波长误差(图 3(d))。

尽管目前可采用含时密度泛函理论(Time-dependent DFT, TD-DFT)、约束性密度泛函理论(Constrained DFT, CDFT)以及 GW 准粒子近似等第一性原理计算方法获得荧光粉的发射能量,但这些方法通常需要消耗大量计算资源,且时间成本高昂。因此,为快速评估荧光粉的发射能量,韩国世宗大学 Sohn Kee-Sun 教授团队^[22]构建了一个综合 ML 平台,该平台集成 18 种算法,可用于预测 Eu²⁺掺杂荧光粉材料的禁带宽度、激发能及发射能,并达到了可接受的预测精度。

除常用的稀土发光离子外,过渡金属 Mn⁴⁺离子作为最为常见的一种非稀土激活剂,不仅具备 200~600 nm 的超宽吸收带,且由于 ²E_g→⁴A_{2g} 属于自旋禁阻的 d-d 跃迁,在 600~780 nm 处具有极窄的红色发射峰,广泛应用于红色荧光粉材料。为开发具有理想发射波长的 Mn⁴⁺掺杂荧光粉,河北工业大学苏敏团队^[75]构建了 Mn⁴⁺掺杂峰值发射波长预测模型,并选用 19 种化合物对模型预测结果进行验证,证明此 ML 模型的预测结果具有较高可靠性。同时,华南理工大学张勤远教授团队^[26]也借助 ML 算法建立了 Mn⁴⁺掺杂氟化物的发射波长预测模型(图 3(e)),该模型准确识别出影响 Mn⁴⁺掺杂氟化物发射波长的关键结构特征,并成功从候选结构中筛选出一种

图 3 ML 模型用于发射波长预测的应用^[26, 54, 69, 72, 74]Fig. 3 Application of ML models for emission wavelength prediction^[26, 54, 69, 72, 74]

(a) Emission spectra and A-X and A-A local structures for $\text{Ba}_2\text{LiB}_5\text{O}_{10}:\text{Eu}^{2+}$ and $\text{BaB}_8\text{O}_{13}:\text{Eu}^{2+}$ ^[69]; (b) Theoretically predicted and experimentally observed emission wavelengths of $\text{R}_{1-x}\text{K}_x\text{LSO}:0.01\text{Eu}^{2+}$ ($0 \leq x \leq 1$) phosphors^[54]; (c) Performance of the best model on the dataset^[72]; (d) Comparison diagram between model predicted values and experimentally observed values^[74]; (e) Comparative plots of the experimentally observed and model predicted values^[26]

长波零声子发射荧光粉($\lambda_{\text{ZPL}}=628$ nm)材料, 其色坐标接近 Rec. 2020 推荐的纯红光点。

综上所述, ML 方法在 Eu^{2+} 与 Mn^{4+} 掺杂荧光粉发射波长预测方面已取得诸多成功案例, 表明 ML 技术已成为发现与设计新型发光材料的有力工具。这些成果也为其他发光材料的理性设计与性能优化奠定了重要基础。

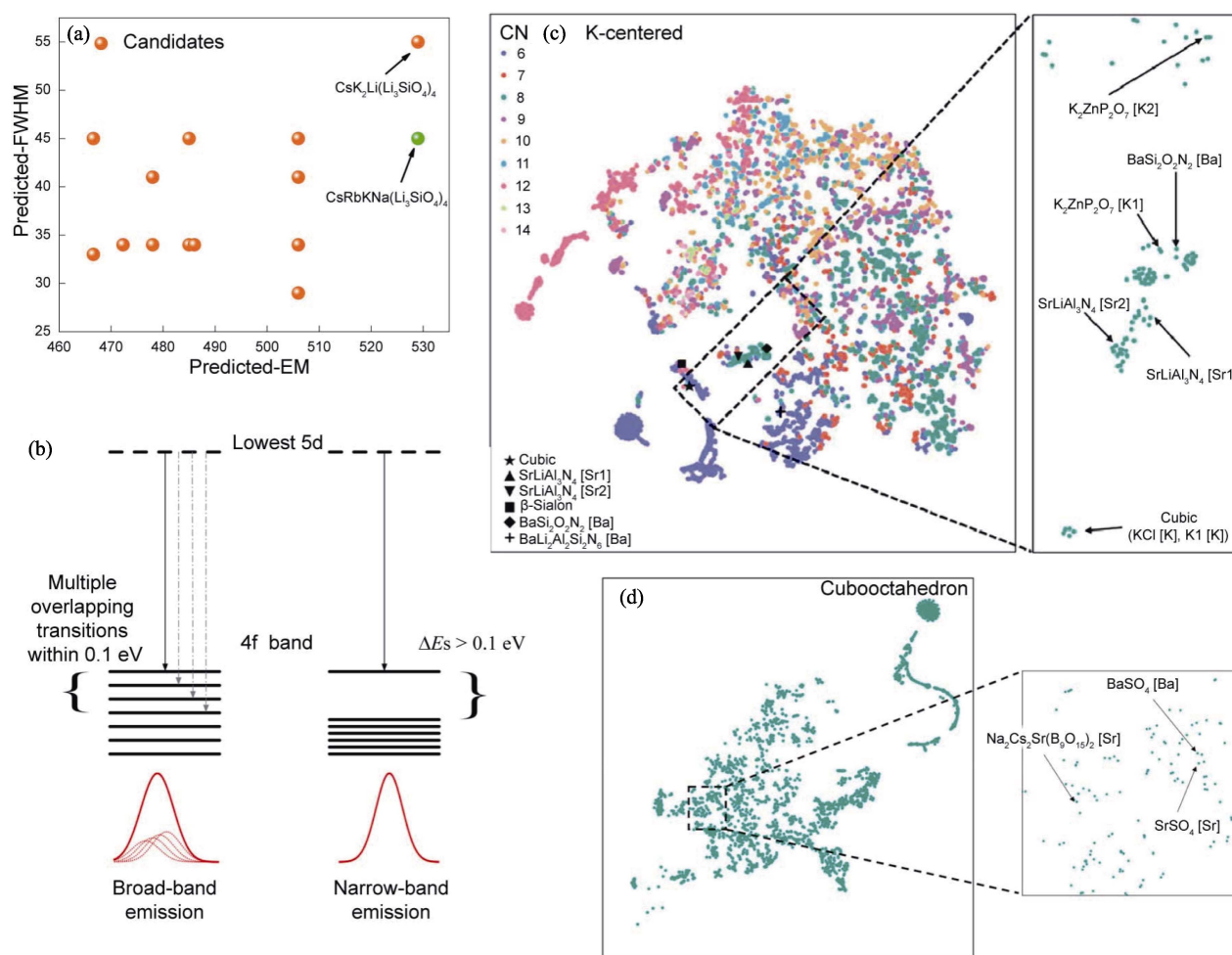
2.2 最大半峰全宽

发射光谱的最大 FWHM 是决定荧光粉应用性能的关键参数之一, 其优化需结合具体应用场景进行针对性设计。在通用照明领域, 宽光谱发射 (FWHM>80 nm) 有助于提高白光发光二极管 (White light-emitting diode, wLED) 的显色指数 (CRI>90), 例如商用 $\text{YAG}:\text{Ce}^{3+}$ 荧光粉的 FWHM 约为 120 nm^[76]。而在背光显示应用中, 窄带发射 (FWHM<50 nm) 对 wLED 的扩展色域至关重要, 使得器件色域覆盖达到美国国家电视系统委员会 (National Television System Committee, NTSC) 标准的 110% 以上。目前液晶显示 (Liquid crystal display, LCD) 背光系统中采用的 $\beta\text{-SiAlON}:\text{Eu}^{2+}$ 绿色荧光粉 (FWHM $\approx$ 55 nm) 光谱过宽, 导致色域覆盖受限 (约 92% NTSC 标准)^[77]。该技术瓶颈促使研究者致力于开发新型窄带荧光粉

材料。实现这一目标需精确调控稀土掺杂离子的晶体场环境与电子云膨胀效应, 这对传统试错法提出了严峻挑战, 而 ML 辅助的理性设计则提供了新的解决思路。

实验研究证明, UCr_4C_4 矿物结构硅酸盐基质荧光粉材料 ($\text{M}_x(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_x$, $\text{M}=\text{Li}$ 、 Na 、 K 、 Rb 、 Cs) 具有出色的热稳定性、较窄的 FWHM 以及较高的量子产率, 在窄带荧光粉领域展现出重要应用前景^[16, 78-79]。然而, 该体系碱金属组分的高挥发性使得传统试错法的开发面临巨大挑战。本课题组^[80]将 DFT 计算与 ML 模型相结合, 针对该系列潜在的荧光粉材料性质, 建立了 Eu^{2+} 掺杂 $\text{M}_x(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_x$ 体系的发射波长及 FWHM 预测模型, 成功预测出 $\text{CsRbKNa}(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_4:\text{Eu}^{2+}$ (529 nm/45 nm) 和 $\text{CsK}_2\text{Li}(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_4:\text{Eu}^{2+}$ (529 nm/55 nm) 两种性能优异的窄带绿色荧光粉 (图 4(a))。通过固相法合成验证, 其光致发光光谱与预测结果高度吻合。

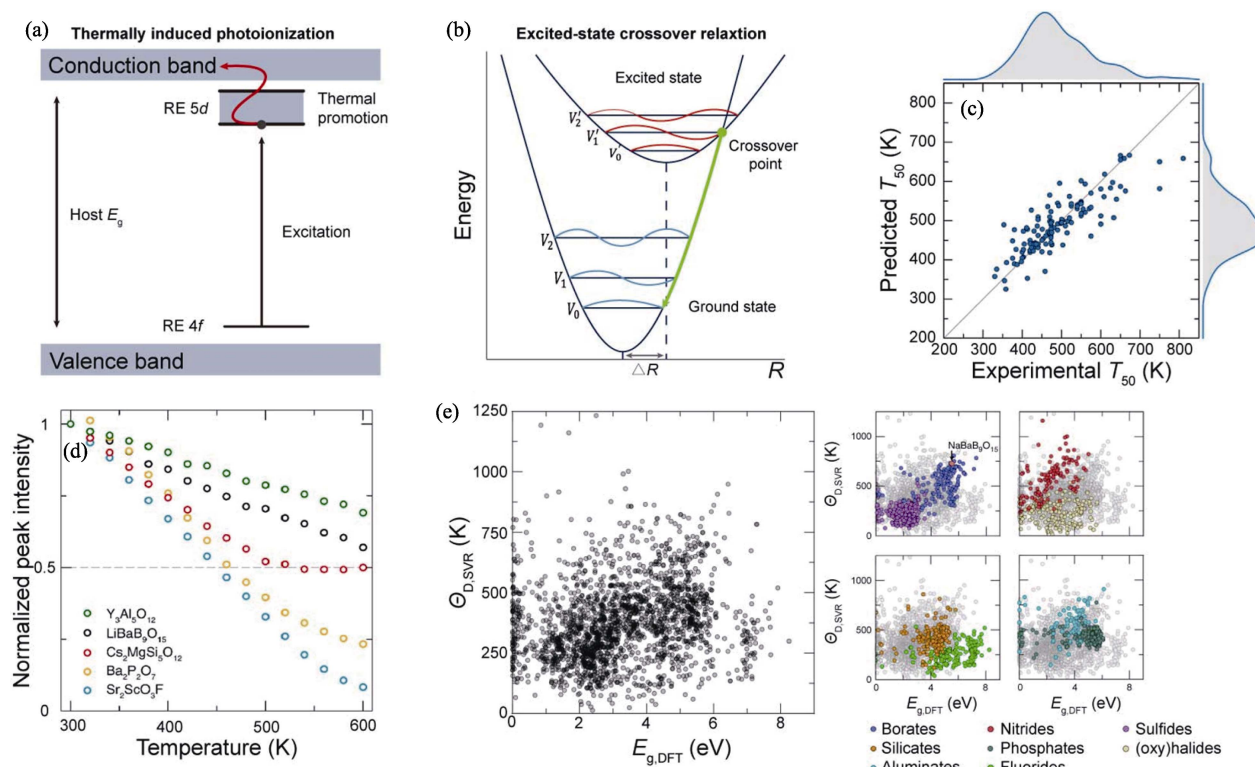
一般而言, 氮化物荧光粉材料在结构上具有边和/或顶点共享的 SiN_4 、 AlN_4 、 LiN_4 、 MgN_4 等组成的高度凝聚三维骨架, 这些相互连接的四面体形成的较大孔洞结构可以容纳各种阳离子。迄今为止, 研究人员已开发出多种商用的氮化物荧光粉材料,

图 4 ML 模型用于发射 FWHM 预测的应用^[80-81, 83-84]Fig. 4 Application of ML models for emission FWHM prediction^[80-81, 83-84]

(a) Predicted emission wavelengths and FWHM of candidates^[80]; (b) Relationship between emission bandwidth and Eu^{2+} 4f band levels. When there are multiple Eu^{2+} 4f levels within 0.1 eV from the highest band (left), overlapping emissions result in a broad bandwidth. Conversely, a large energy splitting between the two highest 4f bands (right) results in narrow-band emission^[81]; (c) 2D t -SNE plots of the local structures, and enlarged image showing phosphors with similar local structures within the black region^[83]; (d) 2D t -SNE plots of local structures^[84]

例如 $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4$ ^[7]、 CaAlSiN_3 ^[68]、 $\text{Sr}_2\text{Si}_5\text{N}_8$ ^[67]、 β -SiAlON:Eu²⁺^[77]等。氮化物荧光粉具有相对红移的激发和发射光谱、较小的斯托克斯位移、高的热稳定性以及丰富的发射颜色等优点,这使其成为固态照明应用中最具前景的发光材料。美国加州福尼亚大学圣地亚哥分校 Ong Shyue Ping 教授团队^[81]通过对比已知的窄带和宽带荧光粉材料的电子结构,发现 $\text{Eu}^{2+}4f^7$ 轨道两个最高能级之间较大的劈裂是产生窄带发射的关键特征(图 4(b))。基于此描述符,从 2259 个氮化物候选结构中确定了 5 个 Eu^{2+} 掺杂红色窄带发射的氮化物基质。此外,考虑到 Eu^{2+} 的 5d 能级本质上取决于所处的配位环境,韩国世宗大学 Sohn Kee-Sun 教授团队^[82]以发光中心离子与配位阴离子形成的长方体结构作为判断标准,结合 DFT 计算结果,发现了 37 个候选结构,并通过实验验证

获得了 2 种 Eu^{2+} 掺杂窄带红色发射氮化物荧光粉。同样,基于配位环境,日本国立材料研究所 Takeda Takashi 教授团队^[83]对中心阳离子和周围配体阴离子组成的局部结构进行定量计算,并通过 t -SNE 方法将不同结构之间的定量化差异投影到二维平面进行可视化(图 4(c))。结果显示, $\text{K}_2\text{ZnP}_2\text{O}_7$ 结构的 K_1 位点与已知的窄带荧光粉 $\text{BaSi}_2\text{O}_2\text{N}_2\cdot\text{Eu}^{2+}$ 的 Ba 格位局域环境相似,表明 $\text{K}_2\text{ZnP}_2\text{O}_7\cdot\text{Eu}^{2+}$ 结构具有与 $\text{BaSi}_2\text{O}_2\text{N}_2\cdot\text{Eu}^{2+}$ 相似的窄带发射性质。单颗粒诊断结果表明,该结构在 440 nm 处具有 30 nm 的窄带发射,符合预期结果。采用相似的研究方法,该团队^[84]发现 $\text{Na}_2\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{B}_9\text{O}_{15})_2$ 结构中的 Sr 位点与已知的窄带发射硫酸盐荧光粉材料 $\text{BaSO}_4\cdot\text{Eu}^{2+}$ 中的 Ba 格位局域环境相似(图 4(d)),且单颗粒诊断结果证实了其窄带发射特性($\lambda_{\text{em}}=417$ nm, FWHM=26 nm)。

图 5 ML 模型用于热稳定性预测的应用^[11, 25, 89]Fig. 5 Application of ML models for thermal stability prediction^[11, 25, 89]

(a) Schematic of thermally induced photoionization in phosphors that undergo $4f^{n-1}5d^1 \rightarrow 4f^n5d^0$ transitions^[11]; (b) Schematic of the crossover mechanism in which thermally induced non-radiative relaxation occurs at the intersection (crossover) point between the ground and excited state parabolas^[11]; (c) Predicted T_{50} by model versus experimental results^[89]; (d) Thermal quenching curves of normalized emission intensity for five candidate structures^[89]; (e) Distribution of 2071 candidate structures with axes representing the model-predicted Deybe temperature and the DFT-calculated bandgap^[25]

2.3 热稳定性与量子效率

在实际应用中, pc-wLED 器件的工作温度可升高至 425 K, 这主要是因为荧光粉材料在光转换过程中不可避免地会发生能量损失。为确保器件在长期工作条件下保持稳定的发光性能和显色特性, 荧光粉材料须具备优异的热稳定性。对于 4f-5d 跃迁的稀土掺杂荧光粉, 其热猝灭机制主要包括热诱导光电离(图 5(a))主要受温度影响, 随着温度升高, 稀土离子 5d 能级上的激发态电子热振动加剧, 克服 5d 能级-CBM(基质材料导带)之间的能垒发生跃迁, 导致稀土离子发光猝灭^[11, 85]。该过程的发生概率主要取决于稀土离子 5d 轨道与基质导带底之间的能级差, 本质上受晶体场强度、电子能带结构和电子云扩展效应等复杂因素调控, 因此通过传统试错法开发高热稳定性材料面临较大挑战^[86]。激发态交叉弛豫所致的发光猝灭(图 5(b))则与激发态和基态势能面之间的原子核位移(ΔR)密切相关^[11, 85]。两个势能面之间的交点使激发态电子与空穴发生非辐射复合, 从而导致发光强度下降。此类猝灭机制与材料的结构

刚性密切相关: 结构刚性越强, ΔR 越小, 非辐射复合概率越低, 热稳定性则相应越高。虽然表面包覆、晶格工程后处理工艺能在一定程度上改善荧光粉材料的热稳定性, 但材料的本征热猝灭特性依然发挥决定性作用^[87]。近年来, ML 方法通过建立多尺度特征与热稳定性参数的定量关联模型, 在荧光粉材料热稳定性优化方面取得令人瞩目的进展, 为高性能荧光粉的理性设计提供了新范式。

石榴石型荧光粉(通式 $[A]_3[B]_2(C)_3O_{12}$)因其立方晶系的稳定结构和可调控的发光性能而备受关注。理论上, 超过 20 种阳离子可以进入石榴石晶格的不同位点, 形成庞大的组成空间, 这使得通过传统实验方法筛选性能优异的荧光粉材料极具挑战。北京科技大学宿彦京教授团队^[88]通过训练 ML 模型, 实现了对高热稳定性 Ce^{3+} 掺杂石榴石结构青/绿色发光材料的理性设计。基于发射波长预测模型以及热稳定性预测模型的协同作用, 该研究团队开发了一种热稳定性优异的 $Lu_{1.5}Sr_{1.5}Al_{3.5}Si_{1.5}O_{12}:Ce^{3+}$ 荧光粉, 该材料在 640 K 时仍能保持 60% 以上的初始发光强度, 发射峰位于 505 nm。此外, 美国休斯顿大

学 Jakoah Brgoch 教授团队^[89]也通过 ML 建立了 Eu^{3+} 掺杂氧化物荧光粉的热稳定性预测模型, 模型预测结果与实验数据呈现良好的线性相关性(图 5(c))。基于该预测模型, 成功筛选出 5 种 $T_{50} > 425 \text{ K}$ (T_{50} 为材料发光强度降至初始强度的 50% 时所处的环境温度)的候选材料 ($\text{Sr}_2\text{ScO}_3\text{F}:\text{Eu}^{3+}$ 、 $\text{Cs}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7:\text{Eu}^{3+}$ 、 $\text{Ba}_2\text{P}_2\text{O}_7:\text{Eu}^{3+}$ 、 $\text{LiBaB}_9\text{O}_{15}:\text{Eu}^{3+}$ 和 $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Eu}^{3+}$) (图 5(d))。如上所述, 结构刚性较强的荧光粉理论上具有优异的热稳定性与较高的量子效率。量子效率反映了材料将吸收的光子转化为发光的能力, 效率越高, 发光过程中的能量损失越小。发光材料的组成、微观结构、缺陷及杂质等因素均会显著影响其量子效率。德拜温度常被用作结构刚性的替代指标, 但由于无机固体中化学键的复杂性和多样性, 准确识别结构刚性仍面临巨大挑战。尽管基于 DFT 的第一性原理计算可获取材料的德拜温度, 但其高昂的计算成本及对复杂结构的处理限制了候选材料的大规模快速筛选。针对这一问题, 美国休斯顿大学 Jakoah Brgoch 教授团队^[25]通过训练支持向量回归模型, 对候选结构德拜温度进行了可靠预测, 并结合 DFT 计算带隙数据, 从 2071 种候选结构中筛选出具有潜力的材料(图 5(e))。其中, $\text{BaNaB}_9\text{O}_{15}$ 被预测具有较高的德拜温度和较宽的禁带宽度, 表明其应具备出色的热稳定性与量子效率。实验验证表明, $\text{BaNaB}_9\text{O}_{15}:\text{Eu}^{2+}$ 确实实现了 95% 的量子产率并具有良好的热稳定性。宁波大学李扬教授团队^[90]也提出了一个可解释的 ML 框架, 以结构刚度和禁带宽度作为关键描述符, 预测了超过 30000 种 Eu^{3+} 掺杂荧光粉材料的热猝灭温度。该模型指导下合成的 $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4:\text{Eu}^{3+}$ 在 100% 的掺杂浓度下具有 87% 的光致发光量子产率以及 93% @ 450 K 的优异热猝灭性能。此外, 北京科技大学宿彦京教授团队^[91]提出了一种三目标优化策略, 利用 ML 在高维空间的数据分析优势, 从多元素组合空间中成功发掘出新型近红外荧光粉 $\text{LaGa}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{O}_6:\text{Cr}^{3+}$ 。该材料在实现 55.4% 内量子效率的同时, 在 393 K 时可保持初始发射强度的 65%。该研究为开发多目标性能的荧光粉材料提供了新思路。

2.4 其他光学性质

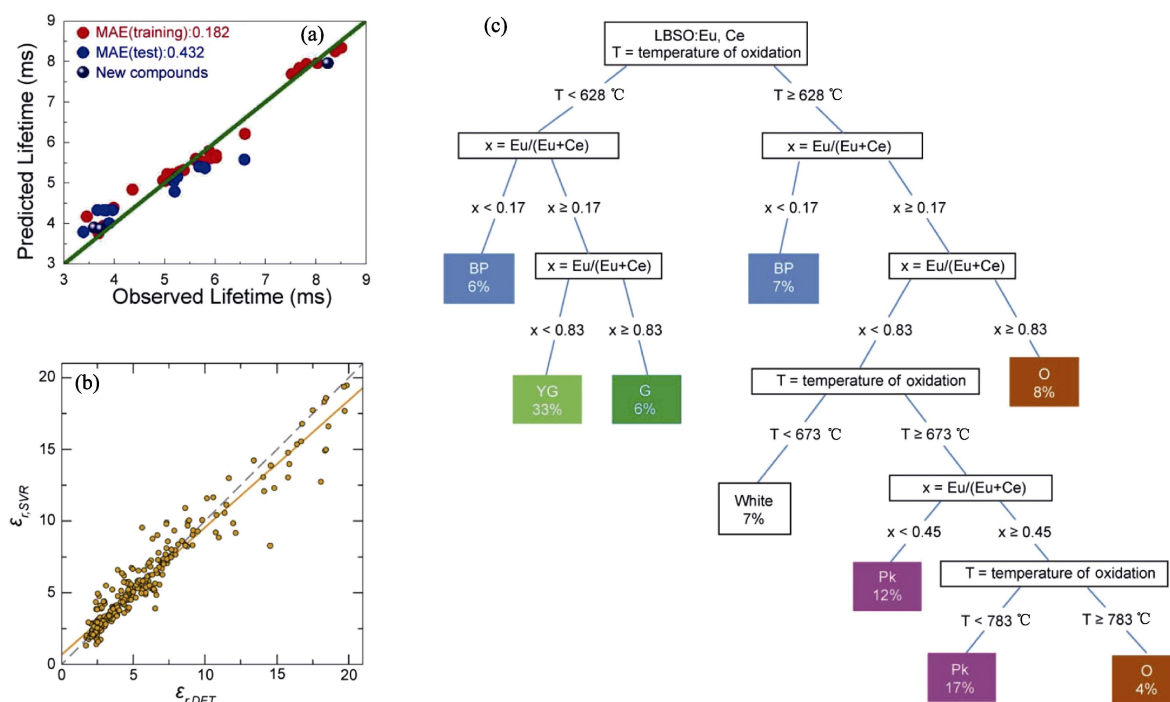
ML 赋能的发光材料研究在其他性质方面也展现出极大的应用潜力。例如, Mn^{4+} 掺杂氟化物荧光粉因其窄带发射特性和低成本优势, 广泛应用于照明及显示器件中, 但在高端显示领域存在荧光寿命过长的的问题。虽然已有一些短寿命氟化物体系的报道, 但其量子效率往往较低, 难以满足实际应用需

求^[92]。针对这一挑战, 华南理工大学张勤远教授团队^[24]创新性地采用 ML 方法建立结构-寿命定量关系模型(图 6(a)), 实现了对 Mn^{4+} 荧光寿命的精准预测。通过解析特征重要性, 揭示了 Mn^{4+} 荧光寿命的影响因素, 为设计新型短寿命高效 Mn^{4+} 荧光粉提供了设计准则。根据经验模型, 稀土掺杂荧光粉材料的 4f-5d 跃迁发光特性由两个物理过程共同决定: 配位场环境中稀土离子与阴离子配体之间的相互作用导致 5d 轨道能级相对于自由离子态发生系统性下移, 这一现象可通过质心位移(ϵ_c)定量表征; 同时, 晶体场效应进一步诱导 5d 轨道能级劈裂(ϵ_{cfs}), 形成特定的能级分布模式。这两个效应共同影响材料的发射波长^[93-96]。此外, 多年研究表明, 5d 轨道的质心位移与发射波长之间存在显著的正相关性, 如果能在实验前确定材料的质心位移, 则可粗略评估材料的发射颜色。对于 Ce^{3+} 掺杂体系, 质心位移可根据公式(1)进行计算^[93-97]:

$$\epsilon_c = 1.79 \times 10^{13} \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{\text{sp}}^i}{(R_i - f\Delta r)^6} \quad (1)$$

其中, α_{sp}^i 为第 i 个配位阴离子的光谱极化率, Δr 为 Ce^{3+} 与被取代阳离子的半径差, R_i 为 Ce^{3+} 与配位阴离子之间的距离, N 为配位数, f 为稀土元素取代所诱发近邻阴离子弛豫的修正参数。然而, 该公式的实际应用面临重大挑战: 准确获取关键参数 α_{sp}^i 依赖于精确测定介电常数(ϵ_r), 而 ϵ_r 作为多变量函数, 其大小对材料组成、温度、外加场频率等条件极为敏感。这种复杂性使得直接通过公式(1)计算材料质心位移极为困难, 严重制约了其在荧光材料设计中的应用。为了解决这个问题, 美国休斯顿大学 Jakoah Brgoch 教授团队^[97]通过 ML 模型实现了对材料 ϵ_r 的精准预测(图 6(b)), 并进一步预测了 Ce^{3+} 掺杂荧光粉材料的质心位移。该研究为理解 Ce^{3+} 4f-5d 跃迁的调控机制提供了新的理论视角, 同时证明了 ML 在揭示材料科学深层机理方面的应用价值。

ML 在发光材料领域中的应用已从性能预测扩展到实验条件优化领域。单基质全光谱荧光粉的设计通常依赖于多发光中心的协同掺杂策略, 然而不同发光中心之间复杂的能量转移过程和浓度猝灭效应导致传统试错法的研发效率低下^[5]。针对这一挑战, 法国南特大学 Romain Gautier 教授团队^[98]创新性地采用 ML 方法, 通过建立“工艺参数-发光性能”定量关联模型, 成功实现了单相白光荧光粉合成条件的智能预测与优化。研究以 $\text{Li}_2\text{BaSiO}_4$ 为基质体系, 通过建立决策树模型来分析 88 组实验数据, 揭

图 6 ML 模型用于其他性质预测的应用^[24, 97-98]Fig. 6 Application of ML models for other properties prediction^[24, 97-98]

(a) Experimental *versus* predicted fluorescence lifetime from ML model^[24]; (b) Comparison of ML-predicted *versus* DFT-calculated dielectric constants for the validation set^[97]; (c) Decision tree classification model for emission colors^[98]

示各实验条件与发光颜色之间的定性关系(图 6(c))。这种层次化的决策路径直观展示了工艺参数对发光颜色的调控机制。该研究不仅建立了荧光粉制备工艺的智能预测模型, 而且通过精确调控变价态稀土离子, 实现了高性能单相白光荧光粉的制备, 为复杂组分发光材料的理性设计提供了新思路。

3 挑战

尽管 ML 驱动发光材料在候选结构筛选和关键性质预测方面取得了一定进展, 但仍存在显著问题, 有待进一步解决。

3.1 缺乏发光材料专项数据库

稀土发光材料作为功能材料的重要分支, 虽历经数十年的研究发展, 却始终缺乏系统化的专项数据库支持。数据库的缺失严重制约了材料基因工程方法在该领域的应用, 特别是 ML 在“材料设计-性能预测-组分优化”等环节的应用。具体表现在: (1)现有数据分散于独立文献, 难以满足 ML 对标准化数据规模的要求; (2)同种材料在不同制备条件下的性质差异显著, 影响 ML 模型的预测准确性; (3)性能数据(量子产率、热猝灭温度等)测量标准不一, 严重影响模型训练质量。因此, 建立完善的稀土发光材

料专项数据库对推进 ML 赋能该领域的发展极为重要。

3.2 发光材料性质复杂

在发光材料研究中, 发射峰位作为发光材料最核心的参数, 准确预测对开发新型发光材料具有重要指导意义。然而, 荧光粉材料中稀土离子在宿主晶格中的多格位占据特性常导致复杂的多峰发射光谱, 这给 ML 建模带来了极大挑战。具体表现为: (1)现有 ML 方法单纯建立输入特征与输出目标的函数映射关系, 难以完整表征多发光中心这一复杂物理过程; (2)模型预测结果可能遗漏次要发射峰, 甚至错误地将次要发射峰识别为主要发射峰, 导致对材料发光行为的片面认识; (3)预测偏差可能误导实验设计方向, 造成研发资源浪费。更加重要的是, 这种局限性可能使具有多峰发射特性但综合性能优异的荧光粉材料在初筛阶段被错误排除。因此, 发展能够准确预测复杂发射光谱的 ML 框架对推进新型发光材料的设计至关重要。

3.3 材料制备工艺难以量化

在发光材料的性能优化研究中, 实验制备工艺参数与材料性能(特别是量子效率)之间存在显著的关联性。值得注意的是, 即使化学组成相同的材料, 在不同制备条件下(如烧结温度、反应气氛或退火工

艺等)也可能表现出数量级差异的发光效率。这种强烈的工艺依赖性表明,在构建 ML 预测模型时,必须将实验工艺参数作为关键特征描述符纳入考虑范围。然而,当前研究面临以下挑战:(1)工艺参数难以作为描述符进行考量,尽管已发表文献普遍记录了实验过程,但由于制备条件存在多参数耦合特性以及难以将定性描述转化为数值的难题,全面系统量化工艺参数仍面临极大挑战;(2)结构描述符存在局限性,目前大多数 ML 模型所采用的特征描述符主要来源于理想化的晶体结构数据库以及 DFT 优化结果,忽略了实际情况中制备工艺对材料微观结构的显著影响。这些局限性可能导致模型无法准确预测真实实验条件下材料的性能,进而影响 ML 指导材料研发的可靠性。

4 总结和展望

本文系统阐述了 ML 驱动发光材料研发的方法论框架和研究流程。基于发光材料的几个核心性能参数,综述了 ML 在该领域的最新研究进展与应用成果,并深入探讨了当前面临的关键技术挑战。随着 AI 算法的持续革新和计算机硬件的快速发展,ML 与材料研究的交叉融合已逐渐成为材料信息学的重要研究方向。展望未来,ML 驱动发光材料研究的发展趋势主要体现在以下几个方面。

4.1 基于大语言模型的智能数据挖掘

大语言模型(Large language models, LLMs)^[99]是自然语言处理(Natural language processing, NLP)领域的核心模型,具有结构复杂、参数规模大、语言理解能力强、推理能力出色等特点。LLMs 可以帮助研究者快速浏览和理解发光材料领域的大量文献,而不用依赖于人工手动检索阅读。未来,LLMs 有望建立和管理稀土发光材料专项数据库,促进现有发光材料信息的集成和系统化,从而推动 ML 驱动的发光材料研发。

4.2 多目标优化驱动的发发光材料理性设计

实际应用的发光材料需同时满足发射波长、量子效率、热稳定性等多项性能指标的严苛要求,这些指标往往存在相互制约关系。多目标协同优化是能够有效解决多个目标函数相互冲突的技术框架,通过协调优化多个目标,找到一组平衡解(Pareto 最优解)^[100]。该技术路线有望指导开发具有“六边形战士”特性的理想发光材料,推动发光材料领域迎来重大突破。

4.3 全自动化实验平台的构建与应用

近年来,快速发展的 AI 实验室代表了材料研发的新范式。凭借标准化实验流程、闭环迭代系统以及高通量并行实验能力,该平台可将新材料的研发周期缩短 80%以上^[101]。未来,随着自动化实验室的普及,有望实现发光材料的标准化、统一化制备,这不仅能减小实验误差,还能极大地提高研发效率,加速新型发光材料的发现。

4.4 新材料的发现与应用

ML 驱动材料研究的根本目标在于实现新材料的精准发现。对于模型预测所筛选出的候选材料,进行实验合成与性能表征是不可或缺的验证环节。尽管全自动化实验平台在材料研发中具有极高效率,但其高昂的搭建成本又限制了普及应用。因此,当前的材料合成工作仍主要依赖传统的人工试错法,而该方法普遍存在研发周期长和资源消耗大等固有局限性。如果能在实验前有效预测候选材料的可合成性与结构稳定性,将显著降低实验试错成本。第一性原理计算在此展现出重要的应用潜力,通过构建能量凸包图、计算声子谱及开展分子动力学模拟,可系统性地评估候选材料的稳定性,并识别竞争性物相,从而为实验合成提供理论预判^[102]。该步骤的实现将有效贯通从虚拟设计至实验验证的研究闭环,是推动“AI for Science”走向实际应用的关键环节。

参考文献:

- [1] XIE R J, HIROSAKI N. Silicon-based oxynitride and nitride phosphors for white LEDs—a review. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2007, **8**(7/8): 588.
- [2] XIE R J, HIROSAKI N, SAKUMA K, *et al.* Eu²⁺-doped Ca- α -SiAlON: a yellow phosphor for white light-emitting diodes. *Applied Physics Letters*, 2004, **84**(26): 5404.
- [3] WANG P, WANG Y, LI Z, *et al.* Enhanced stability and brightness through co-substitution: promoting plant growth with green-excited deep red phosphor Ca_{1-x}Sr₂Li_{1-x}Mg_{2x}Al_{3-x}N₄:yEu²⁺. *Advanced Materials*, 2025, **37**(4): 2414578.
- [4] LIU S, LI L, QIN X, *et al.* Achieving ultra-broadband sunlight-like emission in single-phase phosphors: the interplay of structure and luminescence. *Advanced Materials*, 2024, **36**(38): 2406164.
- [5] LIU S, YANG X, DU R, *et al.* Single-grain high-efficiency full-visible-spectrum white emitters. *Angewandte Chemie International Edition*, 2025, **64**(19): e202502100.
- [6] LI S, XIA Y, AMACHRAA M, *et al.* Data-driven discovery of full-visible-spectrum phosphor. *Chemistry of Materials*, 2019, **31**(16): 6286.
- [7] PUST P, WEILER V, HECHT C, *et al.* Narrow-band red-emitting Sr[LiAl₃N₄]:Eu²⁺ as a next-generation LED-phosphor material. *Nature Materials*, 2014, **13**(9): 891.
- [8] PUST P, SCHMIDT P J, SCHNICK W. A revolution in lighting. *Nature Materials*, 2015, **14**(5): 454.

- [9] GEORGE N C, DENAULT K A, SESHADRI R. Phosphors for solid-state white lighting. *Annual Review of Materials Research*, 2013, **43**(1): 481.
- [10] MORGAN P, MONICA H, NORMAN B, *et al.* 2022 Solid-state lighting R&D opportunities. US Department of Energy Office of Scientific and Technical Information. (2022-02-02)[2025-11-26]. <https://doi.org/10.2172/1862626>.
- [11] HARIYANI S, SÓJKA M, SETLUR A, *et al.* A guide to comprehensive phosphor discovery for solid-state lighting. *Nature Reviews Materials*, 2023, **8**(11): 759.
- [12] TAKEDA T, KOYAMA Y, IKENO H, *et al.* Exploring new useful phosphors by combining experiments with machine learning. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2024, **25**(1): 2421761.
- [13] WANG X J, WANG L, TAKEDA T, *et al.* Blue-emitting $\text{Sr}_3\text{Si}_{8-x}\text{Al}_x\text{O}_{7+x}\text{N}_{8-x}:\text{Eu}^{2+}$ discovered by a single-particle-diagnosis approach: crystal structure, luminescence, scale-up synthesis, and its abnormal thermal quenching behavior. *Chemistry of Materials*, 2015, **27**(22): 7689.
- [14] PARK W B, SINGH S P, KIM M, *et al.* Combinatorial screening of luminescent and structural properties in a Ce^{3+} -doped Ln-Al-Si-O-N ($\text{Ln} = \text{Y, La, Gd, Lu}$) system: the discovery of a novel $\text{Gd}_3\text{Al}_{3+x}\text{Si}_{3-x}\text{O}_{12+x}\text{N}_{2-x}:\text{Ce}^{3+}$ phosphor. *Inorganic Chemistry*, 2015, **54**(4): 1829.
- [15] PARK W B, SINGH S P, SOHN K S. Discovery of a phosphor for light emitting diode applications and its structural determination, $\text{Ba}(\text{Si,Al})_5(\text{O,N})_8:\text{Eu}^{2+}$. *Journal of the American Chemical Society*, 2014, **136**(6): 2363.
- [16] ZHAO M, LIAO H, MOLOKKEEV M S, *et al.* Emerging ultra-narrow-band cyan-emitting phosphor for white LEDs with enhanced color rendition. *Light: Science & Applications*, 2019, **8**: 38.
- [17] WANG Z, HA J, KIM Y H, *et al.* Mining unexplored chemistries for phosphors for high-color-quality white-light-emitting diodes. *Joule*, 2018, **2**(5): 914.
- [18] LI S, AMACHRAA M, CHEN C, *et al.* Efficient near-infrared phosphors discovered by parametrizing the Eu(II) 5d-to-4f energy gap. *Matter*, 2022, **5**(6): 1924.
- [19] BUTLER K T, DAVIES D W, CARTWRIGHT H, *et al.* Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 2018, **559**: 547.
- [20] XIE T, GROSSMAN J C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. *Physical Review Letters*, 2018, **120**(14): 145301.
- [21] AGRAWAL A, CHOUDHARY A. Perspective: materials informatics and big data: realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Materials*, 2016, **4**(5): 053208.
- [22] PARK C, LEE J W, KIM M, *et al.* A data-driven approach to predicting band gap, excitation, and emission energies for Eu^{2+} -activated phosphors. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2021, **8**(21): 4610.
- [23] MOLOKKEEV M S, SU B, ALEKSANDROVSKY A S, *et al.* Machine learning analysis and discovery of zero-dimensional ns^2 metal halides toward enhanced photoluminescence quantum yield. *Chemistry of Materials*, 2022, **34**(2): 537.
- [24] MING H, ZHOU Y, MOLOKKEEV M S, *et al.* Machine-learning-driven discovery of Mn^{4+} -doped red-emitting fluorides with short excited-state lifetime and high efficiency for mini light-emitting diode displays. *ACS Materials Letters*, 2024, **6**(5): 1790.
- [25] ZHUO Y, TEHRANI A, OLIYNYK A, *et al.* Identifying an efficient, thermally robust inorganic phosphor host via machine learning. *Nature Communications*, 2018, **9**: 4377.
- [26] WANG Y, TANG W, ZHANG C, *et al.* Structure-based machine learning enables discovery of Mn^{4+} -activated red-light fluorides for ultrawide-gamut mini-light-emitting diodes. *Advanced Functional Materials*, 2024, **34**(14): 2313490.
- [27] BI H, JIANG J, CHEN J, *et al.* Machine learning prediction of quantum yields and wavelengths of aggregation-induced emission molecules. *Materials*, 2024, **17**(7): 1664.
- [28] PILANIA G, GUBERNATIS J E, LOOKMAN T. Multi-fidelity machine learning models for accurate bandgap predictions of solids. *Computational Materials Science*, 2017, **129**: 156.
- [29] YUAN H, QI L, PARIS M, *et al.* Machine learning guided design of single-phase hybrid lead halide white phosphors. *Advanced Science*, 2021, **8**(19): 2101407.
- [30] LI H, ZHENG H, YUE T, *et al.* Machine learning-accelerated discovery of heat-resistant polysulfates for electrostatic energy storage. *Nature Energy*, 2025, **10**: 90.
- [31] YANG S, ZANG B, XIANG M, *et al.* Designing Fe-based amorphous alloys with both ultra-high magnetization and ultra-low coercivity through artificial intelligence. *Advanced Functional Materials*, 2025, **35**(30): 2425588.
- [32] JIA X, DENG Y, BAO X, *et al.* Unsupervised machine learning for discovery of promising half-Heusler thermoelectric materials. *npj Computational Materials*, 2022, **8**: 34.
- [33] ISAYEV O, OSES C, TOHER C, *et al.* Universal fragment descriptors for predicting properties of inorganic crystals. *Nature Communications*, 2017, **8**: 15679.
- [34] WARD L, DUNN A, FAGHANINIA A, *et al.* Matminer: an open source toolkit for materials data mining. *Computational Materials Science*, 2018, **152**: 60.
- [35] HIMANEN L, JÄGER M O J, MOROOKA E V, *et al.* DScribe: library of descriptors for machine learning in materials science. *Computer Physics Communications*, 2020, **247**: 106949.
- [36] HEIDAR-ZADEH F, RICHER M, FIAS S, *et al.* An explicit approach to conceptual density functional theory descriptors of arbitrary order. *Chemical Physics Letters*, 2016, **660**: 307.
- [37] BENTO A P, HERSEY A, FÉLIX E, *et al.* An open source chemical structure curation pipeline using RDKit. *Journal of Cheminformatics*, 2020, **12**: 51.
- [38] ONG S P, RICHARDS W D, JAIN A, *et al.* Python Materials Genomics (pymatgen): a robust, open-source Python library for materials analysis. *Computational Materials Science*, 2013, **68**: 314.
- [39] JAIN A, ONG S P, HAUTIER G, *et al.* Commentary: the materials project: a materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials*, 2013, **1**: 011002.
- [40] CURTAROLO S, SETYAWAN W, HART G L W, *et al.* AFLOW: an automatic framework for high-throughput materials discovery. *Computational Materials Science*, 2012, **58**: 218.
- [41] DRAXL C, SCHEFFLER M. The NOMAD laboratory: from data sharing to artificial intelligence. *Journal of Physics: Materials*, 2019, **2**(3): 036001.
- [42] HELLENBRANDT M. The inorganic crystal structure database (ICSD)—present and future. *Crystallography Reviews*, 2004, **10**(1): 17.
- [43] GRAŽULIS S, DAŠKEVIČ A, MERKYS A, *et al.* Crystallography open database (COD): an open-access collection of crystal structures and platform for world-wide collaboration. *Nucleic Acids Research*, 2012, **40**(D1): D420.
- [44] MORGAN D, JACOBS R. Opportunities and challenges for machine learning in materials science. *Annual Review of Materials Research*, 2020, **50**(1): 71.
- [45] LIU Y, YANG Z, ZOU X, *et al.* Data quantity governance for

- machine learning in materials science. *National Science Review*, 2023, **10**(7): nwad125.
- [46] HAGHIGHATLARI M, LI J, HEIDAR-ZADEH F, *et al.* Learning to make chemical predictions: the interplay of feature representation, data, and machine learning methods. *Chem*, 2020, **6**(7): 1527.
- [47] GHIRINGHELLI L M, VYBIRAL J, LEVCHENKO S V, *et al.* Big data of materials science: critical role of the descriptor. *Physical Review Letters*, 2015, **114**(10): 105503.
- [48] HE J, LI J, LIU C, *et al.* Machine learning identified materials descriptors for ferroelectricity. *Acta Materialia*, 2021, **209**: 116815.
- [49] YILMAZ B, YILDIRIM R. Critical review of machine learning applications in perovskite solar research. *Nano Energy*, 2021, **80**: 105546.
- [50] JO B, CHEN W, JUNG H S. Comprehensive review of advances in machine-learning-driven optimization and characterization of perovskite materials for photovoltaic devices. *Journal of Energy Chemistry*, 2025, **101**: 298.
- [51] PEARSON K. Mathematical contributions to the theory of evolution: on a form of spurious correlation which may arise when indices are used in the measurement of organs. *Proceedings of the Royal Society*, 1897, **60**: 489.
- [52] WANG A Y T, MURDOCK R J, KAUWE S K, *et al.* Machine learning for materials scientists: an introductory guide toward best practices. *Chemistry of Materials*, 2020, **32**(12): 4954.
- [53] LI C, HAO H, XU B, *et al.* Improved physics-based structural descriptors of perovskite materials enable higher accuracy of machine learning. *Computational Materials Science*, 2021, **198**: 110714.
- [54] LAI S, ZHAO M, QIAO J, *et al.* Data-driven photoluminescence tuning in Eu²⁺-doped phosphors. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, **11**(14): 5680.
- [55] KARPOVICH C, PAN E, OLIVETTI E A. Deep reinforcement learning for inverse inorganic materials design. *npj Computational Materials*, 2024, **10**: 287.
- [56] HE Z, THÜRER M, ZHOU W. The use of reinforcement learning for material flow control: an assessment by simulation. *International Journal of Production Economics*, 2024, **274**: 109312.
- [57] SHEN Z H, LIU H X, SHEN Y, *et al.* Machine learning in energy storage materials. *Interdisciplinary Materials*, 2022, **1**(2): 175.
- [58] JIANG X, FU H, BAI Y, *et al.* Interpretable machine learning applications: a promising prospect of AI for materials. *Advanced Functional Materials*, 2025, **35**(41): 2507734.
- [59] SHI Y, ZHANG Y, WEN J, *et al.* Interpretable machine learning for stability and electronic structure prediction of Janus III-VI van der Waals heterostructures. *Materials Genome Engineering Advances*, 2024, **2**(4): e76.
- [60] YAO Y, HAN D, SPOONER K B, *et al.* Adapting explainable machine learning to study mechanical properties of 2D hybrid halide perovskites. *Advanced Functional Materials*, 2025, **35**(1): 2411652.
- [61] DUAN X, LI Y, ZHAO J, *et al.* Machine learning accelerated discovery of entropy-stabilized oxide catalysts for catalytic oxidation. *Journal of the American Chemical Society*, 2025, **147**(1): 651.
- [62] HAN Z, XIA S, CHEN Z, *et al.* Facilitated the discovery of new γ/γ' Co-based superalloys by combining first-principles and machine learning. *npj Computational Materials*, 2024, **10**: 259.
- [63] WU J, TORRESI L, HU M, *et al.* Inverse design workflow discovers hole-transport materials tailored for perovskite solar cells. *Science*, 2024, **386**(6727): 1256.
- [64] CUI C X, SHEN Y, HE J R, *et al.* Quantitative insight into the electric field effect on CO₂ electrocatalysis via machine learning spectroscopy. *Journal of the American Chemical Society*, 2024, **146**(50): 34551.
- [65] WANG L, XIE R J, SUEHIRO T, *et al.* Down-conversion nitride materials for solid state lighting: recent advances and perspectives. *Chemical Reviews*, 2018, **118**(4): 1951.
- [66] XIE R J, HINTZEN H T. Optical properties of (oxy)nitride materials: a review. *Journal of the American Ceramic Society*, 2013, **96**(3): 665.
- [67] XIE R J, HIROSAKI N, SUEHIRO T, *et al.* A simple, efficient synthetic route to Sr₂Si₅N₈:Eu²⁺-based red phosphors for white light-emitting diodes. *Chemistry of Materials*, 2006, **18**(23): 5578.
- [68] LI Y, HIROSAKI N, XIE R J, *et al.* Yellow-orange-emitting CaAlSiN₃:Ce³⁺ phosphor: structure, photoluminescence, and application in white LEDs. *Chemistry of Materials*, 2008, **20**(21): 6704.
- [69] PARK W B, SINGH S P, KIM M, *et al.* Phosphor informatics based on confirmatory factor analysis. *ACS Combinatorial Science*, 2015, **17**(5): 317.
- [70] QIAO J, AMACHRAA M, MOLOKEEV M, *et al.* Engineering of K₃YSi₂O₇ to tune photoluminescence with selected activators and site occupancy. *Chemistry of Materials*, 2019, **31**(18): 7770.
- [71] QIAO J, ZHOU G, ZHOU Y, *et al.* Divalent europium-doped near-infrared-emitting phosphor for light-emitting diodes. *Nature Communications*, 2019, **10**: 5267.
- [72] KOYAMA Y, IKENO H, HARADA M, *et al.* Rapid discovery of new Eu²⁺-activated phosphors with a designed luminescence color using a data-driven approach. *Materials Advances*, 2023, **4**(1): 231.
- [73] XU Y, YAMAZAKI M, VILLARS P. Inorganic materials database for exploring the nature of material. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2011, **50**(11S): 11RH02.
- [74] NAKANO H, TANAKA K, MIYAO T, *et al.* Practical models for predicting the emission peak wavelengths of inorganic phosphors based on stoichiometric information. *Chemistry Letters*, 2017, **46**(10): 1482.
- [75] DING C, LI Z F, ZHANG W J, *et al.* Machine learning the peak emission wavelength of Mn⁴⁺-activated inorganic phosphors. *New Journal of Chemistry*, 2023, **47**(22): 10875.
- [76] TIAN R, ZHOU T, XIE R J. Spectrally tunable dual-phosphor ceramics for laser lighting. *Laser & Photonics Reviews*, 2025, **19**(13): 2402144.
- [77] HIROSAKI N, XIE R, KIMOTO K, *et al.* Characterization and properties of green-emitting β -SiAlON:Eu²⁺ powder phosphors for white light-emitting diodes. *Applied Physics Letters*, 2005, **86**(21): 211905.
- [78] ZHAO M, YANG Z, NING L, *et al.* Tailoring of white luminescence in a NaLi₃SiO₄:Eu²⁺ phosphor containing broad-band defect-induced charge-transfer emission. *Advanced Materials*, 2021, **33**(29): 2101428.
- [79] ZHAO M, LIAO H, NING L, *et al.* Next-generation narrow-band green-emitting RbLi(Li₃SiO₄)₂:Eu²⁺ phosphor for backlight display application. *Advanced Materials*, 2018, **30**(38): 1802489.
- [80] LIU S, SONG K, LI S, *et al.* Machine learning-driven discovery of efficient narrow-band green phosphor for wide-color-gamut backlight displays. *Chemical Engineering Journal*, 2025, **520**: 165719.
- [81] WANG Z, CHU I H, ZHOU F, *et al.* Electronic structure descriptor for the discovery of narrow-band red-emitting phosphors. *Chemistry of Materials*, 2016, **28**(11): 4024.
- [82] KIM M, SINGH S P, LEE J W, *et al.* Identification of a narrow band red light-emitting phosphor using computational screening of ICSD: its synthesis and optical characterization. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, **774**: 338.
- [83] TAKEMURA S, KOYAMA Y, NAKANISHI T, *et al.* Narrow-band phosphor K₂ZnP₂O₇:Eu²⁺ discovered using local structure similarity. *Scripta Materialia*, 2022, **215**(1): 114686.

- [84] TAKEMURA S, KOYAMA Y, NAKANISHI T, *et al.* Narrow-band emitting phosphor $\text{Na}_2\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{B}_9\text{O}_{15})_2:\text{Eu}^{2+}$ discovered from local structure similarity with sulfate phosphor. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2022, **13**(51): 11878.
- [85] AMACHRAA M, WANG Z, CHEN C, *et al.* Predicting thermal quenching in inorganic phosphors. *Chemistry of Materials*, 2020, **32**(14): 6256.
- [86] KIM Y H, ARUNKUMAR P, KIM B Y, *et al.* A zero-thermal-quenching phosphor. *Nature Materials*, 2017, **16**(5): 543.
- [87] ZHENG P, LI S, WANG L, *et al.* Unique color converter architecture enabling phosphor-in-glass (PiG) films suitable for high-power and high-luminance laser-driven white lighting. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2018, **10**(17): 14930.
- [88] JIANG L, JIANG X, ZHANG Y, *et al.* Multiobjective machine learning-assisted discovery of a novel cyan-green garnet: Ce phosphors with excellent thermal stability. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, **14**(13): 15426.
- [89] ZHUO Y, HARIYANI S, ARMIJO E, *et al.* Evaluating thermal quenching temperature in Eu^{3+} -substituted oxide phosphors via machine learning. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2020, **12**(5): 5244.
- [90] ZHANG S, LV Y, LI Z, *et al.* Explainable machine learning-enabled discovery for high-efficiency red-emitting phosphor under data constraints. *Chemical Engineering Journal*, 2025, **522**: 167046.
- [91] JIANG L, JIANG X, YANG M, *et al.* Developing and optimizing novel Cr^{3+} -activated inorganic NIR phosphors by combining triple-objective optimization and crystal field engineering. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2024, **11**(2): 487.
- [92] HUANG L, LOU S, CAO L, *et al.* Surfactant- and HF-free cation exchange synthesis of highly-efficient nanoscale $\text{K}_2\text{SiF}_6:\text{Mn}^{4+}$ and potential usage for high-resolution micro-LED display. *ACS Materials Letters*, 2022, **4**(9): 1716.
- [93] DORENBOS P. 5d-level energies of Ce^{3+} and the crystalline environment. I. Fluoride compounds. *Physical Review B*, 2000, **62**(23): 15640.
- [94] DORENBOS P. 5d-level energies of Ce^{3+} and the crystalline environment. II. Chloride, bromide, and iodide compounds. *Physical Review B*, 2000, **62**(23): 15650.
- [95] DORENBOS P. 5d-level energies of Ce^{3+} and the crystalline environment. III. Oxides containing ionic complexes. *Physical Review B*, 2001, **64**(12): 125117.
- [96] DORENBOS P. Relation between Eu^{2+} and Ce^{3+} f $\leftrightarrow$ d-transition energies in inorganic compounds. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2003, **15**(27): 4797.
- [97] ZHUO Y, HARIYANI S, YOU S, *et al.* Machine learning 5d-level centroid shift of Ce^{3+} inorganic phosphors. *Journal of Applied Physics*, 2020, **128**: 013104.
- [98] YUAN H, GÉNOIS R, GLAIS E, *et al.* Machine learning identification of experimental conditions for the synthesis of single-phase white phosphors. *Matter*, 2021, **4**(12): 3967.
- [99] YUAN W, CHEN G, WANG Z, *et al.* Empowering generalist material intelligence with large language models. *Advanced Materials*, 2025, **37**(32): 2502771.
- [100] XU P, MA Y, LU W, *et al.* Multi-objective optimization in machine learning assisted materials design and discovery. *Journal of Materials Informatics*, 2025, **5**(2): 26.
- [101] ZHU Q, ZHANG F, HUANG Y, *et al.* An all-round AI-Chemist with a scientific mind. *National Science Review*, 2022, **9**(10): nwac190.
- [102] MALYI O I, SOPIHA K V, PERSSON C, *et al.* Energy, phonon, and dynamic stability criteria of two-dimensional materials. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2019, **11**(28): 24876.