

计算与数据驱动环保型发光材料的研究进展

胡 扬, 谢 敏, 张筱怡, 李 想, 郭新伟, 姜 南, 周文瀚, 张胜利, 曾海波

(南京理工大学 材料科学与工程学院, 南京 210094)

摘 要: 传统发光材料(如镉系量子点、铅卤化物钙钛矿)因含 Cd、Pb 等重金属元素, 在其全生命周期存在显著的环境与健康风险。因此, 开发无镉量子点、无铅卤化物钙钛矿、稀土掺杂荧光粉等环保型发光材料成为核心科研方向。然而, 当前环保型发光材料的研发仍高度依赖“试错式”实验模式, 不仅效率低, 也难以突破发光效率、环境稳定性与界面相容性的核心瓶颈。本文系统梳理了环保型发光材料的研究现状与现存挑战, 并阐明了密度泛函理论等计算技术可精准预测量子点核壳结构光电特性、解析缺陷致非辐射复合机制等, 从而定向预测并优化材料的发光效率与稳定性。数据驱动技术可通过构建标准化材料数据库与机器学习模型, 进一步加速材料筛选与设计, 已成功指导开发出高稳定性荧光粉、高效率窄带发射材料等。展望未来, 计算与数据驱动技术协同可破解环保型发光材料的研发困境。通过进一步推动两类技术的协同和融合, 有望加速环保型发光材料在显示、照明等领域的实际应用, 助力光电产业绿色转型。

关 键 词: 环保型发光材料; 密度泛函理论; 数据驱动技术; 机器学习; 钙钛矿材料; 综述

中图分类号: TB39; TN204 文献标志码: A 文章编号: 1000-324X(2026)06-0704-19

Research Progress on Computational and Data-driven Environmental-friendly Luminescent Materials

HU Yang, XIE Min, ZHANG Xiaoyi, LI Xiang, GUO Xinwei, JIANG Nan,
ZHOU Wenhan, ZHANG Shengli, ZENG Haibo

(School of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

Abstract: The development of traditional luminescent materials (such as cadmium-based quantum dots and lead halide perovskites) is intrinsically limited by their reliance on toxic heavy metals (e.g., Cd and Pb), which raises severe environmental and health risks throughout their lifecycles. Therefore, the transition toward eco-friendly alternatives, including cadmium-free quantum dots, lead-free halide perovskites, and rare-earth-doped phosphors, has become a pivotal research imperative. Currently, the design and optimization of such materials rely on inefficient trial-and-error experimental paradigms, which often fail to overcome critical bottlenecks in luminous efficiency, environmental stability, and interfacial compatibility. This review systematically outlines the current

收稿日期: 2025-10-27; 收到修改稿日期: 2026-01-07; 网络出版日期: 2026-01-22

基金项目: 国家重点研发计划(2024YFA1210002); 国家自然科学基金(52473236, 62304109)

National Key Research and Development Program of China (2024YFA1210002); National Natural Science Foundation of China (52473236, 62304109)

作者简介: 胡 扬(1996-), 女, 博士. E-mail: hudfyang@njust.edu.cn

HU Yang (1996-), female, PhD. E-mail: hudfyang@njust.edu.cn

通信作者: 张胜利, 教授. E-mail: zhangslvip@njust.edu.cn; 曾海波, 教授. E-mail: zeng.haibo@njust.edu.cn

ZHANG Shengli, professor. E-mail: zhangslvip@njust.edu.cn; ZENG Haibo, professor. E-mail: zeng.haibo@njust.edu.cn

landscape and technical challenges of environmental-friendly luminescent materials. It highlights how computational techniques, particularly density functional theory, allow the accurate prediction of optoelectronic properties in core-shell structures and the elucidation of defect-induced non-radiative recombination mechanisms, thus facilitating rational material design and property optimization. In addition to theoretical calculations, data-driven technologies further accelerate material screening by leveraging standardized databases and machine learning models, having already yielded high-stability phosphors and high-efficiency narrowband emitters. Finally, an outlook on the synergy between computational and data-driven approaches to overcome existing research and development barriers is provided. Future efforts must focus on deepening the integration of these technologies to advance the practical deployment of environmental-friendly luminescent materials in display and lighting applications, thereby driving the sustainable transformation of the optoelectronics industry.

Key words: environmental-friendly luminescent material; density functional theory; data-driven technology; machine learning; perovskite material; review

发光材料是显示、照明、生物成像及光电探测等光电器件的核心组成部分,其性能直接决定器件的亮度、色域、效率与寿命^[1-3]。发光性能主要取决于光致发光量子产率(Photoluminescence quantum yield, PLQY)、电致发光外量子效率(External quantum efficiency, EQE)、光谱可调性以及环境稳定性等关键指标^[4-8]。在传统无机发光材料的发展进程中,以铕掺杂钒酸铋为代表的稀土掺杂荧光粉逐步取代了汞蒸气放电激发的传统荧光粉,显著降低了汞污染风险。该类荧光粉因其发光效率高、化学稳定性好,被广泛应用于通用照明和传统显示等领域^[9]。然而,稀土掺杂荧光粉的发展受限于稀土资源稀缺性和高成本,且部分体系发射谱宽较宽、色纯度有限。为提升光电性能并降低成本,镉系量子点(如 CdSe、CdS)^[10-12]与铅卤化物钙钛矿材料(包括全无机钙钛矿如 CsPbBr₃ 和有机-无机杂化钙钛矿如 CH₃NH₃PbI₃)^[13-15]相继成为研究热点。这类材料具备接近 100% 的量子效率、极窄的发射半高宽和连续可调的光谱范围,迅速成为高端显示、低成本照明和生物成像等领域的前沿材料。然而,其环保问题十分突出,比如 Pb、Cd 等重金属污染易在生态系统中富集,对人体神经与内分泌系统构成长时程毒性^[16-19]。另外,上述体系的制备过程污染高,且产物难以回收降解,比如合成镉系量子点所用的二甲基镉等前驱体易挥发且毒性强,会威胁操作人员安全^[20-24]。

为解决传统发光材料的环保问题,研究人员围绕“低毒/无毒、绿色合成、可回收降解”三大方向持续开发环保型发光材料体系^[25-34]。然而,传统“试错式”实验模式难以系统揭示材料结构与发光性能、环

保持性之间的构效关系,导致研发效率受限。在此背景下,计算与数据驱动技术为材料开发提供了新的路径。高通量第一性原理计算可在早期筛选并排除含有毒元素或带隙不匹配的材料,机器学习则可快速定量评估发光材料性能。例如, Mai 等^[35]提出以主动学习策略为核心的目标驱动框架,用于筛选适用于发光二极管(Light-emitting diode, LED)的卤化物钙钛矿发光材料; Kumar 等^[36]构建机器学习模型并在更大化学空间预测候选氧化物的带隙、热力学稳定性和光学特性,然后通过第一性原理计算验证其发光可行性; Xiong 等^[37]则利用机器学习揭示双钙钛矿材料结构与发光性能之间的内在关联。

本文首先梳理了环保型发光材料(包括无铅钙钛矿、无镉量子点及稀土掺杂荧光粉等)的发展脉络与研究现状;进而剖析当前该领域在发光效率、稳定性以及界面相容性等方面的核心挑战,重点阐述了材料计算在环保型发光材料的物性预测、发光机理解析及性能优化中的作用机制与典型应用;并聚焦数据驱动技术,系统阐述相关数据库的构建、不同机器学习模型在发光材料开发中的应用及数据驱动下的新材料设计与性能优化策略;最后,总结并展望了环保型发光材料的未来发展路径,为环保型发光材料的高效研发提供坚实理论支撑与可行技术路径。

1 典型环保型发光材料与发展瓶颈

1.1 环保型发光材料的定义与典型材料

环保型发光材料是指在材料组成、制备过程及使用生命周期中满足低毒性(无重金属或重金属含

量符合环保标准^[38]、低能耗(可低温或溶液法制备)、低污染(减少有害溶剂排放、易降解或回收)要求,同时具备稳定发光性能(如合适的发光波长、较高的发光效率与色纯度)的一类功能材料^[39-41]。其核心特征是在获得优异光电性能的同时,最大限度降低对生态环境与人体健康的潜在危害。目前已发展的典型环保型发光材料体系主要包括以下三类(图 1)。

(1)无镉环保型发光量子点。涵盖 III-V 族半导体量子点(如 InP、InAs、InSb)^[25-26]、I-III-VI 族半导体量子点(如 CuInS₂、CuInSe₂、AgInS₂ 及其合金化体系)^[27-29]、Zn 基量子点^[42]及碳量子点等^[43]。其中,III-V 族量子点通过核壳结构优化,PLQY 可达 90%~95%,性能与传统 CdSe 体系相当^[25-26]。I-III-VI 族量子点通过调控阴阳离子比例、壳层包覆及表面缺陷钝化,可实现从可见光到近红外的连续可调发光^[27-29]。Zn 基量子点可通过 Te 掺杂比例(0~15%)及壳层厚度优化调控发光波长,主要覆盖蓝光波段(445~457 nm)。例如,ZnTeSe/ZnSe/ZnS 量子点经氯化物钝化后,PLQY 可达 100%^[44];通过等电子控制策略构建的同类量子点外量子效率高达 24.7%,发射谱线窄至 17 nm^[42];基于 ZnSe/ZnS 量子点白光 LED 的最大 EQE 为 15%^[45]。这类量子点具有高发光量子产率与窄发射谱线,在广色域显示、增强现实/虚拟现实和生物成像等领域展现出显著的应用潜力^[46-48]。

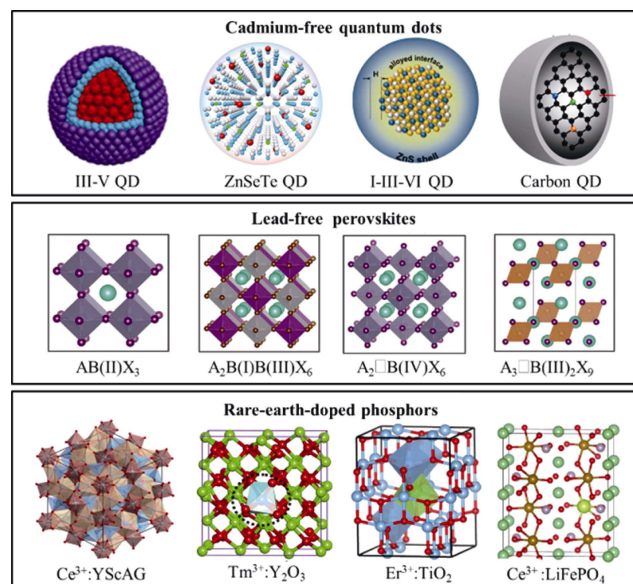


图 1 环保型发光材料概述

Fig. 1 Overview of environmental-friendly luminescent materials

QD: quantum dot

(2)无铅卤化物钙钛矿及衍生材料。通过 Sn、Ge、Bi、Sb、Cu、Ag 等低毒或无毒元素部分或完全取代 Pb 构建而成,主要包括锡基钙钛矿(如 FA(Sn,Ge)I₃ (FA=[NH₂(CH)₂NH₂]⁺)^[30]、Cs₂SnI₆、TEA₂SnI₄ (TEA=2-thiopheneethylamine)^[49-50]、双钙钛矿(如 Cs₂AgBiBr₆、Cs₂AgInCl₆^[31])、零维或缺陷钙钛矿(如 Cs₃Bi₂Br₉^[32]、Cs₃Sb₂I₉^[51]、Cs₃Bi₂I₉^[52])以及铜卤化物(如 CuCl、CuBr、Cs₃Cu₂I₅^[33]、CsCu₂I₃^[53-54])等。这类材料在保留钙钛矿高色纯度与溶液可加工性的基础上,可以缓解铅毒性问题^[55-56]。例如,TEA₂SnI₄ 与双缩脲作用后制备的钙钛矿发光二极管(Perovskite light-emitting diodes, PeLEDs)最大亮度达 418 cd/m²,最高 EQE 达 1.37%^[50];将聚乙烯基吡啶引入 CsCu₂I₃ 发光层优化后的黄光 LED,其 EQE 提升至原始器件的 8.5 倍^[57]。然而,这类材料的发光效率与环境稳定性仍需进一步提升。

(3)稀土掺杂荧光粉。作为一类发展成熟且体系庞大的无机发光材料,其基质材料包括氧/硫/氮/氟化物、磷/硅/铝酸盐等,发光中心离子包括 Ce³⁺、Eu³⁺、Eu²⁺、Tm³⁺和 Pr³⁺等^[34]。这类材料不含 Pb、Cd 等重金属,稀土离子本身毒性低,且成品具有优异的化学稳定性、热稳定性和高发光效率,已成为固态照明与显示背光领域的核心材料,并广泛应用于长余辉材料、闪烁体等特种领域。其主要挑战在于对稀土资源的依赖,导致成本较高,以及部分体系发射谱线较宽,难以满足下一代超高清显示对窄带发射的更高要求^[58-59]。

尽管环保型发光材料涵盖量子点(1~10 nm)、二维材料(单/少层原子厚度)、微米级荧光粉(1~10 μm)等跨尺度体系,但从计算材料学的视角审视,其研究核心均指向材料的电子能带结构、缺陷态性质、激子行为及离子/配位场环境等微观物理化学过程。密度泛函理论等第一性原理方法作为跨尺度的基础工具,可统一从原子和电子层面揭示这些关键特性:对于量子点,计算聚焦于量子限域效应引起的尺寸依赖性带隙变化及表面态;对于钙钛矿,计算侧重于铅位替代元素的轨道贡献、缺陷形成能及结构稳定性;对于稀土掺杂荧光粉,计算则集中于稀土离子的能级劈裂、基质晶体场效应及能量传递路径。因此,尽管研究对象尺度多元,但计算驱动设计环保型发光材料可始终通过模拟预测电子结构、筛选组分、解析发光与猝灭机制,最终指导性能优化。数据驱动技术则进一步通过描述符构建机器学习模型,实现对跨尺度材料性能的关联与预测。

1.2 环保型发光材料的发展瓶颈

1.2.1 环保性与发光效率的矛盾

环保型发光材料最突出的瓶颈在于环保性与发光效率难以兼顾, 具体表现为“成分/工艺环保化”与“发光效率最大化”的矛盾。在发光机制方向上, 采用低毒金属离子(如 Sn^{2+} 和 Ge^{2+})替代传统发光材料中的有毒离子(如 Pb^{2+})后, 容易因组分调整引入缺陷能级, 导致载流子非辐射复合概率增加, 发光效率显著下降。以铅卤化物钙钛矿(APbX_3)为例, Pb^{2+} 外层孤电子对存在的 6s 轨道可以与卤素阴离子 X^- 外层的 np 轨道形成 σ^* 反键, 占据 APbX_3 的价带顶, 推高价带顶的位置使材料的缺陷能级嵌入价带内部, 成为良性缺陷态, 从而抑制非辐射复合。而替代元素(如 Sn^{2+} 和 Ge^{2+})的外层 ns 轨道能量更高, 容易形成浅能级缺陷, 导致非辐射复合概率增加, 发光效率显著下降^[60]。

在环保合成工艺方面, 水相合成、低温合成等环保工艺虽减少污染, 但往往难以获得高结晶质量的材料, 导致晶格缺陷(如空位、位错)增多, 成为激子非辐射复合中心, 同样降低发光效率。以 III-V 族量子点为例, InP 量子点的本征带隙为 1.35 eV, 为实现波长大于 750 nm 的近红外光发射, 需将其尺寸增大至 10 nm 以上, 这对现有合成技术构成挑战, 且尺寸增大过程中易伴随 PLQY 显著下降^[26]。未经过表面优化(如核壳结构修饰、缺陷钝化)的 InP 量子点, 因表面存在大量悬空键与磷酸盐缺陷, PLQY 通常很低, 即便通过简单 ZnS 壳层包覆, 若不能有效解决晶格失配(InP 与 ZnS 晶格失配 7.7%)^[26]所引发的界面缺陷, PLQY 也难以提升至近红外应用所需的高水平。InAs 量子点虽具有低毒性、良好的生物相容性^[61]和优异的近红外发射特性, 但要将其吸收范围扩展至 1550 nm 以上同样需要将颗粒尺寸精确调控在至少 10 nm, 这对合成过程中的前驱体比例、反应温度、反应时间等参数提出了极高要求, 需通过精细调控实现^[62]。

1.2.2 环保性与稳定性的平衡

环保型发光材料实现长期应用的关键瓶颈在于平衡环保性与稳定性, 具体表现为“提升材料环境稳定性”与“维持高发光效率”的相互制约。为提升材料在湿度、温度及氧气等因素影响的环境中的稳定性, 需通过表面包覆(如量子点的 SiO_2 包覆)或结构改性(如钙钛矿的 A 位阳离子取代)等手段, 但这些修饰常会引入界面缺陷或改变电子结构, 导致发光效率下降。例如, 为提升 III-V 族量子点的稳定性而采取的表面修饰手段, 往往会对发光效率产生负面

影响。InP 量子点虽可通过 ZnS 壳层包覆钝化缺陷提升 PLQY, 但 ZnS 与 InP 之间 7.7% 的晶格失配会在界面引入缺陷态, 反而限制了 PLQY 的进一步提升^[26]。InAs 量子点采用长链油酸(OA)配体可有效增强胶体稳定性, 但 OA 的绝缘特性会阻碍载流子迁移, 降低量子点 LED 器件的电荷注入效率^[63]。此外, 无机包覆层(如 SiO_2 、 Al_2O_3)虽能有效隔离水氧, 但若包覆层厚度超 5 nm 或致密度过高时, 会阻碍载流子传输与光子输出, 造成效率损耗。需特别指出, 传统的 SiO_2 包覆方法因前驱体中含有的水分易导致钙钛矿材料降解和发光猝灭, 并不适用于钙钛矿基材料^[64]。

针对上述稳定性提升与发光效率损耗的矛盾, 近年来科研人员通过优化修饰方法与封装策略开展了大量探索。Yang 等^[65]通过控制四甲氧基硅烷(Tetramethoxysilane, TMOS)与水的摩尔比获得部分水解(PH-TMOS), 先以 PH-TMOS 改性 Cs_4PbBr_6 纳米晶(Nanocrystals, NCs)并去除疏水油酸, 随后注水诱导其向 CsPbBr_3 NCs 相变, 同时新加入的 TMOS 水解生成交联 Si-O-Si 网络, 由于前期在钙钛矿 NCs 表面形成了大量结合位点, 最终成功构建出 $\text{CsPbBr}_3@/\text{SiO}_2$ 结构。该策略在显著提升 CsPbBr_3 对极性溶剂和空气的光学稳定性的同时, 有效避免了传统 SiO_2 包覆中水分导致钙钛矿降解及包覆层过厚/过致密引起的效率损耗。有机包覆层(如聚甲基丙烯酸甲酯(Polymethyl methacrylate, PMMA)、金属有机框架(Metal organic frameworks, MOFs))虽具有良好的柔韧性与载流子兼容性, 但研究表明^[64, 66-68], 这些聚合物材料普遍存在 PLQY 偏低或保护效果欠佳的问题, 这主要归因于纳米颗粒与聚合物基质间严重的相分离或界面相互作用弱。值得注意的是, 不同钙钛矿-聚合物复合薄膜的稳定性差异显著。除 PMMA 复合膜在短时间内发生降解外, 多数体系展现了一定耐水性和耐热性, 然而一旦温度超过聚合物相变温度, 其发光性能迅速衰减, 表明这些钙钛矿-聚合物复合材料的稳定性主要依赖于聚合物基底的保护与封装作用。Wang 等^[67]提出采用“双基质封装策略”对 CsPbBr_3 钙钛矿 NCs 性能进行优化: 以柠檬酸钠(Sodium citrate, SC)为第一基质, PMMA 为第二包覆层, 制备 SC- $\text{CsPbBr}_3@/\text{PMMA}$ 复合材料。实验结果表明, 该复合材料在水中浸泡 60 d 后仍能保留 83%~86% 的初始 PLQY, 远优于未包覆的 CsPbBr_3 NCs(15 h, PLQY 仅存 34.3%)。此外, 研究发现仅 PMMA 与 SC- CsPbBr_3 兼容性良好, 而其他聚合物(如乙烯-醋酸乙烯酯共聚物、聚间苯二甲酰间苯二胺、聚马来酸酐、聚苯乙烯)则因界面作用不

足或相分离导致 PLQY 下降。

1.2.3 界面相容性难题

环保型发光材料与电极、电荷传输层的界面相容性差,是导致器件电荷注入损耗的核心问题,主要体现在能级不匹配与界面缺陷两方面。从能级匹配角度来看,多数环保型材料的能带结构与传统电极/传输层存在显著势垒。例如,锡铅钙钛矿太阳能电池高达约 0.5 eV 的能量损失可部分归因于钙钛矿太阳能电池界面处不利的能带排列。常用的空穴传输层材料聚 3,4-乙撑二氧噻吩:聚苯乙烯磺酸(PEDOT:PSS)的能级与锡铅钙钛矿的价带匹配不佳,导致在 PEDOT:PSS/锡铅钙钛矿界面处产生电位能损失,进而降低器件的开路电压(V_{oc})^[69]。从界面缺陷角度来看,环保型材料与电极的接触界面易因晶格失配或化学相互作用引入缺陷态。III-V 族量子点与传输层的界面易因晶格失配、表面氧化等形成氧空位、In-O 键、Zn-P 键等缺陷,而这些缺陷会捕获注入的电子或空穴,减少参与发光的激子数量,从而降低器件效率。例如,InP/ZnSe/ZnS 量子点中,InP 与 ZnS 的晶格失配(7.7%)通常会引入界面缺陷^[26],加上磷酸盐缺陷对激子的捕获作用,加剧了非辐射复合,从而对发光效率产生负面影响。为解决这一问题,Zhang 等^[70]在壳层生长初期采用氢氟酸溶液蚀刻 InP 表面氧化层,有效减少界面缺陷并抑制非辐射俄歇复合与福斯特共振能量转移。然而,氢氟

酸具有高度危险性,且易将水分引入合成体系,限制了其实际应用。Wang 等^[71]通过在核壳界面处添加合金化的无氧 In-ZnSe 过渡层,开发出一种更安全的方法。该合金化过渡层显著降低了核壳界面处陷阱态的非辐射复合,将量子点的效率提升至 98%。

2 材料计算在环保型发光材料中的应用

2.1 物性预测

材料计算在环保型发光材料物性预测方面展现出精准的指导价值,通过探索结构与性能的物理关联与内涵,对材料关键物性参数进行精准预测,可大幅降低实验的试错成本。在量子点材料中,通过理论计算预测调整核带隙和壳层带隙的相对位置,从而定制核壳结构量子点的光电特性(图 2(a)),其中 I 型核壳带对齐量子点是制造电致发光器件的理想选择^[3],其壳层带隙更大,能将电子和空穴同时限制在核内以增强振子强度和 PLQY;而 II 型量子点因电子和空穴波函数分离、重叠减少,更适用于光学增益、稳定发射和光电流产生等应用^[72]。近期,Kick 等^[73]提出基于密度泛函理论(Density functional theory, DFT)的波函数隧道概率估计方法(图 2(b)),可在原子层面定量、定性分析核壳纳米晶体的能带偏移与载流子限制效应。Nandan 等^[74]则通过构建一维核壳量子点模型,结合哈特里-福克平

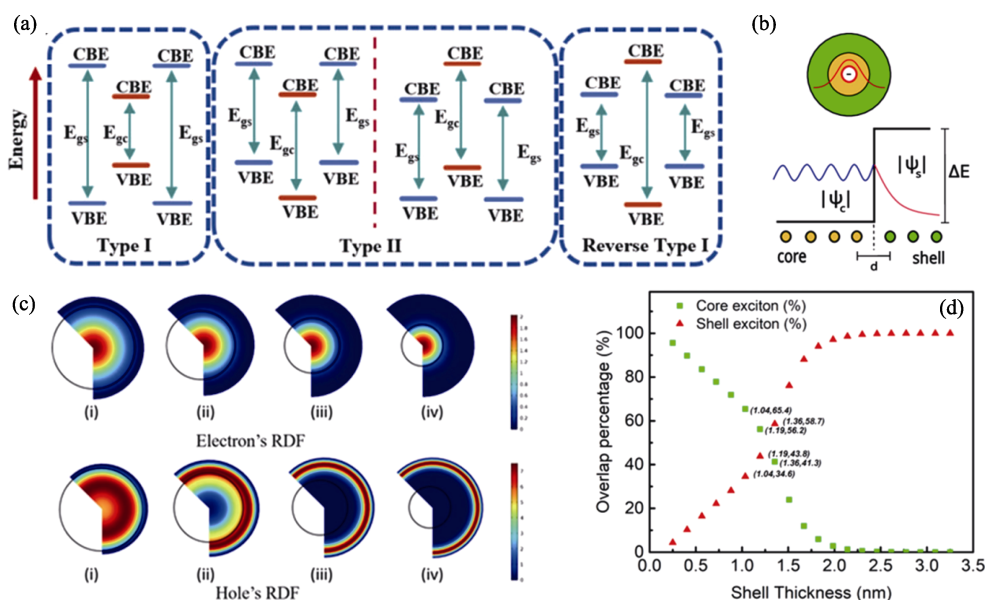


图 2 核壳量子点的能带对齐类型及壳层厚度依赖的激子分布特性^[3, 73-74]

Fig. 2 Band alignment types and shell-thickness-dependent exciton distribution characteristics in core/shell quantum dots^[3, 73-74]

(a) Type I, type II and reverse type I band alignment (CBE: conduction band edge, VBE: valence band edge, E_{gc} : energy band gap of core, E_{gs} : energy band gap of shell)^[3]; (b) Schematic diagram of the wave function tunneling probability estimation method^[73];

(c) Electron-hole radial distribution function (RDF) of 1.75 nm CdSe core with different shell thicknesses; (d) Single exciton probability distribution vs. shell thickness (with core/shell exciton coverage)^[74]

均场近似、有限差分法及精确场近似计算库仑相互作用, 预测随着壳厚从 0.25 nm 增加到 3.25 nm (图 2(c, d)), 激子类型会从电子-空穴共定位核区的 I 型, 逐渐转变为电子核局限、空穴壳局限的 II 型, 中间经历空穴核-壳共定位且具双吸收的“伪 II 型”过渡态。Cao 等^[75]还基于 DFT 与晶格动力学模拟计算, 系统评估了 InAs 核与不同 III-V 族(GaAs、InP)、II-VI 族(CdSe、ZnSe、ZnS)壳层的能带偏移量与晶格失配度, 筛选出能带匹配度高且晶格失配低的壳层材料, 为 II 型异质结构设计提供量化依据。

在量子点表面与合金物性预测方面, Chen 等^[76]通过对 III-V 族量子点不同表面进行建模计算 (图 3(a)), 预判其表面易发生氧化, 且氧化产生的缺陷态更深, 使量子点对表面陷阱更敏感。Kim 等^[77]通过 DFT+GW 近似(格林函数 G 与屏蔽库仑相互作用 W 的近似)计算不同 As/P 比例的 $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$ 合金量子点的带隙能量与光致发光(Photoluminescence, PL)光谱, 揭示了“合金成分-带隙-发射波长”的定量关系, 实现了近红外光谱精准可调性预测(图 3(b))。此外, 通过 DFT 计算 $\text{Ga}_{2-x}\text{Sc}_x\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$ 的晶格优化结构^[34](图 3(c, d)), 可预判晶格参数随 x 增大而增加, 并在 $x>0.8$ 时趋于稳定(源于 Sc^{3+} 无法完全占据 Ga2 位点, 键价和(Bond valence sum, BVS)偏离 3.0)

(图 3(e)), 与实验结果一致。同时还能预测 Cr^{3+} 晶体场参数变化, 随着 Sc 含量增加, Cr^{3+} 所处的晶体场强度减弱(D_q/B 值从 2.15($x=0$)降至 2.01($x=0.8$); D_q 为晶体场分裂能, B 为 Racah 参数), 使其 ${}^4\text{T}_2 \rightarrow {}^4\text{A}_2$ 跃迁能量降低, 发射波长从 720 nm($x=0$)红移至 850 nm ($x=0.8$), 与实验发射光谱偏移趋势相符。DFT 结合时间分辨理论计算得到的 Cr^{3+} 激发态寿命($x=0.4$ 时为 1.2 ms)也与条纹相机测得结果(1.1 ms)高度一致, 验证了计算对近红外发光动力学的准确预测能力^[78]。综上, 材料计算在环保型发光材料的物性预测中发挥着定量指导作用。通过第一性原理计算, 可以精准预测材料的带隙、激子结合能以及异质结构的能带对齐类型。预先获取这些具体参数为实验设计具有特定发光波长、高效激子复合的环保型发光材料提供了关键理论依据, 显著减少了在材料组分与结构优化中的试错成本。

2.2 发光机理

材料计算能够从原子与电子层面揭示环保型发光材料的发光起源、激子行为及非辐射损耗路径, 为理解并调控发光性能提供核心机理支撑。在稀土掺杂荧光粉的发光机理解析方面, 通过 DFT 计算 $\beta\text{-SiAlON}:\text{Eu}^{2+}$ 中 Si/Al 原子替换后(化学通式为 $\beta\text{-Si}_{6-z}\text{Al}_z\text{O}_z\text{N}_{8-z}$ ($0 < z \leq 4.2$))的电子态密度与晶体场

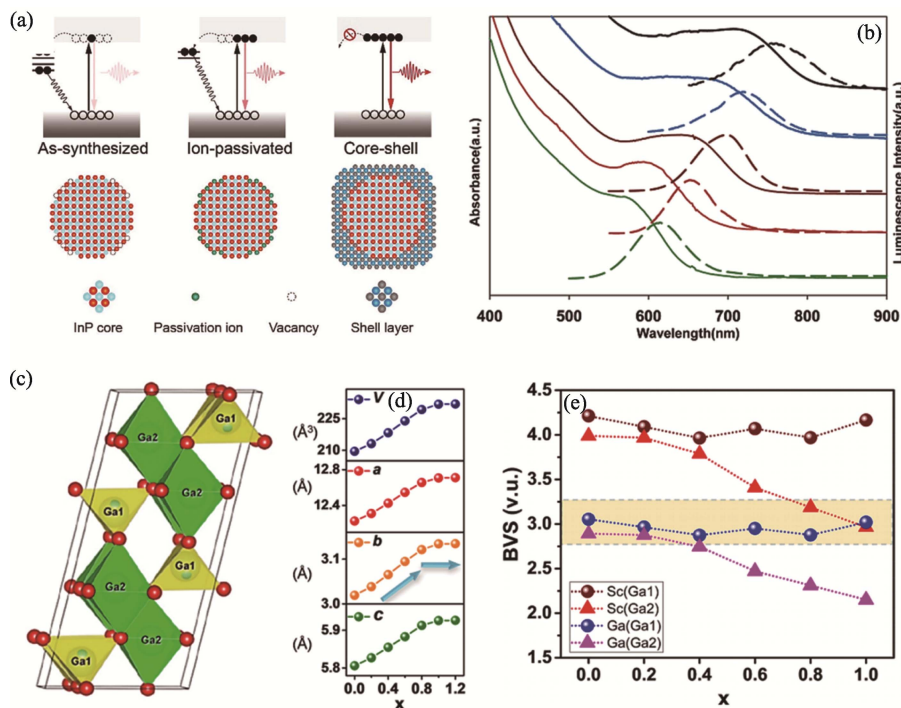


图3 InP 量子点的表面化学效应、光学性质及 Ga_2O_3 晶体结构特性^[34, 76-78]

Fig. 3 Surface chemistry effects and optical properties of InP QDs and crystal structure characteristics of Ga_2O_3 ^[34, 76-78]
(a) Influence of different surface chemistries on carrier trapping in InP QDs^[76]; (b) Absorbance and emission spectra of QDs with different compositions^[77]; (c) Crystal structure of Ga_2O_3 ^[34]; (d) Refined lattice parameters^[78]; (e) BVS^[78]

强度,可解释其发光波长随 Al/O 含量(z 值)变化的机理:低 z 值样品($z=0.03$)晶格结构刚性强,电子-晶格相互作用弱, Eu^{2+} 的 $4f-5d$ 跃迁能量较高,发射波长为 529 nm;高 z 值样品($z=0.18$)晶格刚性降低,电子-晶格耦合作用增强,跃迁能量降低,发射波长红移至 540 nm。同时 DFT 计算还验证了 Eu^{2+} 不占据 $\beta\text{-SiAlON}$ 晶格中的 Al/Si 位点(离子半径不匹配),而是位于六方通道中形成 9 配位结构,这与扫描透射电子显微镜观察到的 Eu 原子位置一致^[79]。通过第一性原理计算上转换 r_4C_4 型氮化物($\text{SrLiAl}_3\text{N}_4$ ^[80]、 $\text{SrMg}_2\text{Al}_2\text{N}_4$ ^[81]、 $\text{SrMg}_3\text{SiN}_4$ ^[82])的电子结构与 Eu^{2+} 配位环境,可解释其窄带发射性能的差异(图 4(a-c)):在 $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ (SLA)中, Eu^{2+} 位于 2 个 Sr 位点,周围形成有序的 $[\text{LiN}_4]-[\text{AlN}_4]$ 四面体框架(图 4(d)),晶体场强度均匀,电子-晶格相互作用弱(Huang-Rhys 因子 $S \approx 1$),因此发射半高宽仅为 50 nm (1180 cm^{-1}),且发光效率较高($77 \text{ lm/W}_{\text{opt}}$);而 $\text{SrMg}_2\text{Al}_2\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ 因 Mg/Al 占位(图 4(e))导致其局部晶体场不均匀($\sigma^2=0.008$),发射半高宽增至 68 nm (1838 cm^{-1}),与实验光谱(图 4(f))一致;对 $\text{SrMg}_3\text{SiN}_4:\text{Eu}^{2+}$ 的带隙计算(3.9 eV)可解释其热稳定性较差的原因——窄带隙导致高温下电子易从 $\text{Eu}^{2+}5d$ 能级跃迁至导带,引发非辐射复合,与图 4(f)中样品的高温 PL 强度衰减趋势相符^[34, 82]。

在量子点缺陷发光机理解析中, Kumar 等^[83]通过双组分 DFT 与屏蔽单电子组态相互作用方法,研究准球形氟钝化 InP 量子点的表面缺陷,从原子层面揭示缺陷对发光的调控机制:三重配位 P 原子

(P-3c)作为空穴陷阱主导陷阱光致发光,而三重配位 In 原子(In-3c)作为电子陷阱,当其能级位于单粒子能隙内时,可同时增强陷阱发光并猝灭带边发光;此外,如图 5(a)所示,表面缺陷与配体环境引发的对称性破缺使带边激子精细结构呈现 3-1-3-1 分裂(而非理想高对称模型预测的 5-3 分裂),计算结果与实验 PL 测量高度吻合。

在二维钙钛矿发光机理解析中, Gu 等^[84]通过 DFT 计算结合调控实验发现,小尺寸间隔阳离子会引发面外八面体倾斜,大尺寸则导致键拉伸与阳离子偏心位移(图 5(b-e))。两类动态结构畸变均会通过增强激子-声子耦合提高非辐射复合损失猝灭光致发光强度,阐明了“间隔阳离子选择→结构畸变程度→非辐射复合效率→发光强度”的传导机制。此外,通过 DFT 计算 FAPbI_3 中 V_{Pb} 等缺陷对的形成能与能级位置,可揭示缺陷对从“浅能级不稳定态”转为“深能级稳定态”的机制^[85];DFT 计算 $\text{Cs}_3\text{Cu}_2\text{I}_5$ 的波函数等值面图则显示,其导带底与价带顶的电子云局域性强($\text{Cu}4s/\text{I}5p$ 轨道重叠区域有限),载流子有效质量大,这从电子结构角度解释了 $\text{Cs}_3\text{Cu}_2\text{I}_5$ 基 PeLEDs 的 EQE 较低(仅 3.45%)的原因^[86]。因此,材料计算从原子尺度阐明了决定环保型发光材料 PLQY 与发射谱线宽的核心机理。通过解析缺陷能级位置、激子-声子耦合强度及晶体场环境变化,计算研究明确了导致非辐射复合损失和光谱展宽的物理根源。这种对微观发光与猝灭机制的深刻理解,是后续有针对性地通过缺陷钝化、结构调控等手段提升发光性能参数的基础。

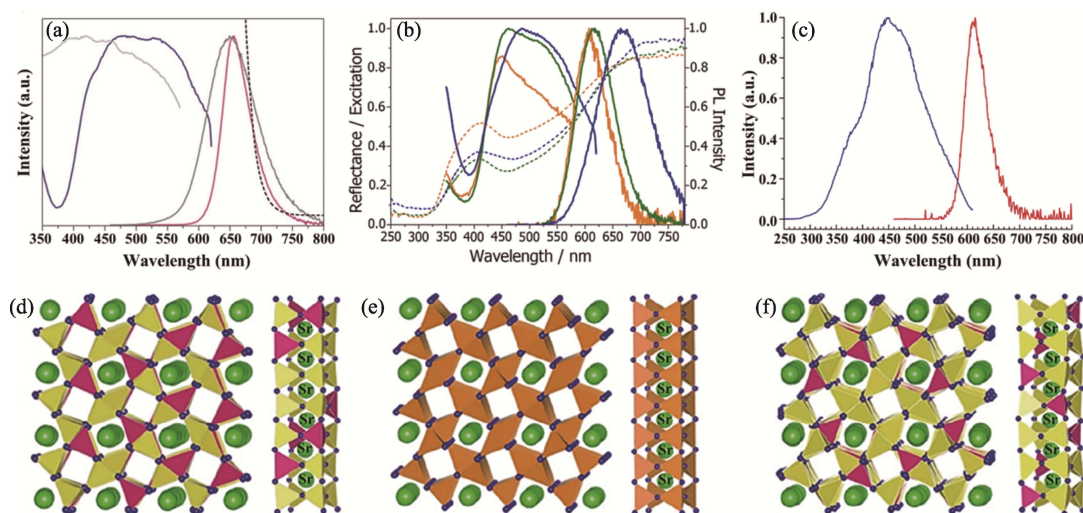


图 4 几种氮化物荧光粉的晶体结构及发光性能^[34, 80-82]

Fig. 4 Crystal structures and luminescence properties of several nitride phosphors^[34, 80-82]

(a) Excitation/emission spectra of SLA and $\text{CaAlSiN}_3:\text{Eu}^{2+}$ ^[80]; (b) Excitation, reflectance and emission spectra of $\text{M}[\text{Mg}_2\text{Al}_2\text{N}_4]:\text{Eu}^{2+}$ (M=Ca, Sr, Ba)^[81]; (c) Excitation/emission spectra of $\text{Sr}[\text{Mg}_3\text{SiN}_4]:\text{Eu}^{2+}$ ^[82]; (d-f) Crystal structures of (d) $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4$, (e) $\text{SrMg}_2\text{Al}_2\text{N}_4$, and (f) $\text{SrMg}_3\text{SiN}_4$ ^[34]

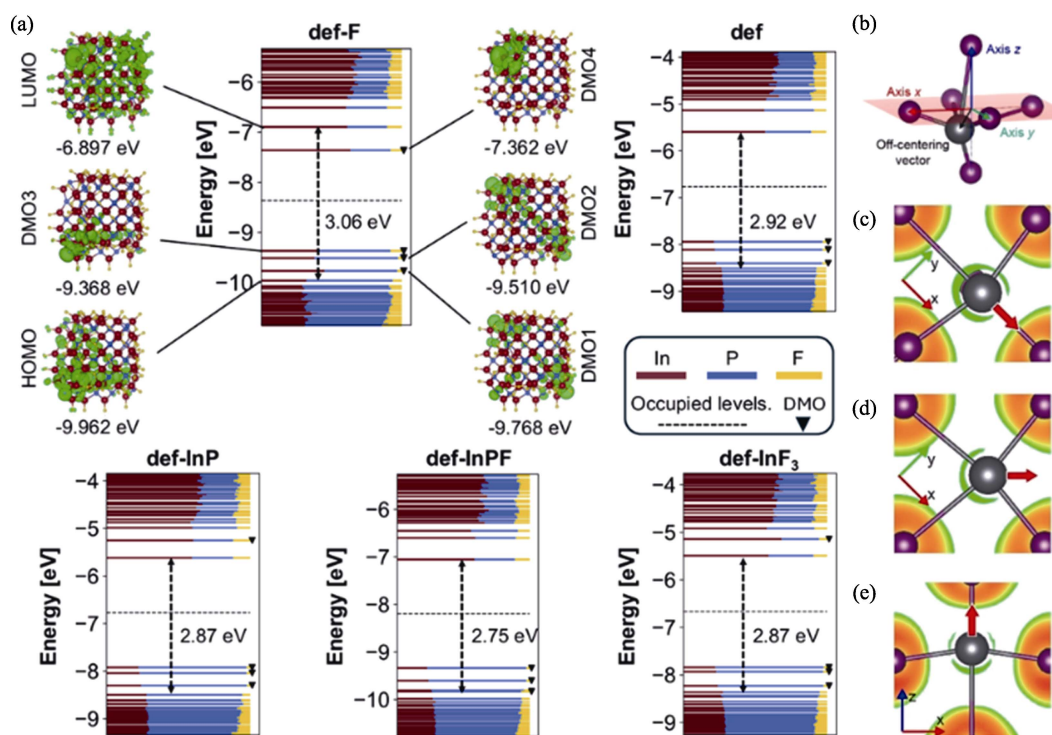


图 5 InP 量子点的电子结构计算及二维钙钛矿的结构畸变与电子定位分析^[83-84]

Fig. 5 Electronic structure calculations of InP QDs and structural distortion with electron localization analysis of 2D perovskites^[83-84]
(a) Molecular orbital energy and electron density of InP QDs in the screened configuration interaction singles (SCIS) calculations^[83]; (b) Schematic of octahedral coordinate system and off-centering vector^[84]; (c-e) Electron localization function contour plots under different stretchings^[84]

2.3 性能优化

基于材料计算揭示的机理, 可针对性设计优化策略, 有效提升环保型发光材料的发光效率、光谱可调性及稳定性。以 $\text{Ca}_{0.003-x}\text{Sr}_x\text{AlSiN}_3:\text{Eu}^{2+}$ 体系为例, DFT 计算为其光谱调控、效率提升与热稳定性优化提供了全方位指导。一方面, 通过计算判断 Sr^{2+} (离子半径 1.26 Å, 配位数(CN)=8)取代 Ca^{2+} (离子半径 1.12 Å, CN=8) 后的物性变化, 预测晶格常数随 x 增加而增大, Eu^{2+} 周围晶体场强度减弱使其 5d 能级分裂能降低, 发射波长从 650 nm ($x=0$) 蓝移至 619 nm ($x=0.9$), 与实验光谱完全一致。计算同时揭示, Sr^{2+} 掺杂可增强 Al/N 与 Si/N 的轨道杂化, 形成更有序的 (Al, Si)₄ 四面体团簇, 减少 Eu^{2+} 与晶格缺陷的相互作用, 使 $x=0.9$ 样品外量子效率较 $x=0$ 样品提升 5%^[87]。另一方面, DFT 计算该体系的能带结构与缺陷形成能表明, Sr^{2+} 掺杂可提升 Eu^{2+} 的热激活能 (从 0.165 eV ($x=0$) 升至 0.23 eV ($x=0.9$))。这是由于 Sr^{2+} 取代后晶格刚性增强, 提高了电子从 Eu^{2+} 5d 能级跃迁至导带的能量势垒, 从而减少了非辐射复合。计算还建立了发射蓝移能量与晶格参数的关系, Sr^{2+} 掺杂量每增加 0.3, 晶格常数增大 0.02 Å, 蓝移能量增加约 50 cm⁻¹, 与实测蓝移趋势吻合, 充分验证了计算在指导材料多性能优化中的核心价值^[87]。

在 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_{2+x}\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_5:\text{Eu}$ 环保型发光材料体系中, 计算同样发挥关键指导作用。材料计算预判双阳离子取代 ($[\text{Sr}^{2+} + \text{Si}^{4+}]$ 离子半径总和小于 $[\text{La}^{3+} + \text{Al}^{3+}]$) 引起的晶格收缩趋势, 即随 x 增大晶格常数减小、X 射线衍射峰向高角度偏移, 这与实验趋势一致。基于此, 实验通过调整 x (如 $x=0.800$ 、0.975) 和原料用量获得单相样品, 避免了杂相干扰。图 6(a~d) 展示了 $x=0.975$ 时 $\text{Sr}_{2.945}\text{Al}_{0.025}\text{Si}_{0.975}\text{O}_5:0.03\text{Eu}^{2+}$ 的 Sr_3SiO_5 型晶体结构 (沿 [010]、[100]、[001] 晶向视图及配位多面体), 为晶格稳定性分析提供了直观支撑^[88]。同时, 计算量化 Eu^{2+} 5d 能级与晶体场的关联, 揭示 x 增大导致 Eu^{2+} 配位数环境改变、晶体场减弱, 其 Eu^{2+} 的 $4f^7(^8\text{S}_{7/2}) \rightarrow 4f^65d$ 跃迁、 Eu^{3+} 的 f-f 跃迁及二者能量转移关系 (图 6(e)), 解释了能级分裂与光谱演变的内在机理。发射光谱从 $x=0$ 时 Eu^{3+} 的 703 nm 窄带红光, 逐步变为 $x=0.800$ 时 Sr_2SiO_4 型宽带绿光、 $x=0.975$ 时 Sr_3SiO_5 型 590 nm 左右宽带橙光, 与实验高度吻合。此外, 计算发现 Si^{4+} 掺杂增强了 Si-O 键共价性, 提升了晶格热稳定性, $x=0.975$ 样品 Eu^{2+} 热激活能 (0.21 eV) 高于 $x=0.800$ 样品 (0.15 eV), 对应 150 °C 下前者峰值强度保留率 (91.3%) 显著高于后者 (74%), 为热稳定性优化提供了机理支撑^[88]。本节案例表明, 通过模拟掺杂、取代等对电子结构

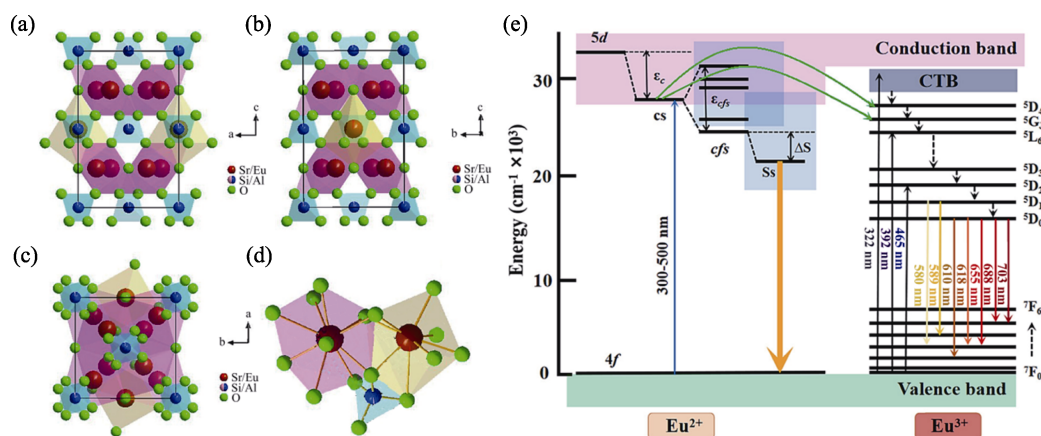


图 6 $\text{Sr}_{2.945}\text{Al}_{0.025}\text{Si}_{0.975}\text{O}_5:0.03\text{Eu}^{2+}$ 的晶体结构特征及 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_{2+x}\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_5:\text{Eu}$ 荧光粉的能量转移机制^[88]

Fig. 6 Crystal structural characteristics of $\text{Sr}_{2.945}\text{Al}_{0.025}\text{Si}_{0.975}\text{O}_5:0.03\text{Eu}^{2+}$ and energy transfer mechanism of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_{2+x}\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_5:\text{Eu}$ phosphors^[88]

(a-c) Crystal structure of $\text{Sr}_{2.945}\text{Al}_{0.025}\text{Si}_{0.975}\text{O}_5:0.03\text{Eu}^{2+}$ (different views); (d) Corresponding coordination polyhedra; (e) Schematic of Eu ion transition and energy transfer in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_{2+x}\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_5:\text{Eu}$

和晶格动力学的影响, 可以定量预测发射波长随组分变化的移动趋势, 评估不同掺杂离子对热猝灭行为的抑制能力, 从而实现对发光颜色和热稳定性等关键参数的协同优化。

2.4 发光材料的激发态计算

准确描述发光材料的激发态性质对于理解其发光颜色、效率及微观机理至关重要。激发态计算的核心是模拟电子在不同能级间的跃迁过程, 这些过程直接对应光的吸收、荧光、磷光等宏观现象。DFT 框架下的方法已成为该领域的重要工具, 但仍面临精度与效率难以兼顾的挑战。传统 DFT 方法在描述激发态时存在显著局限。高精度方法如 GW 近似结合 Bethe-Salpeter 方程, 虽能较准确地处理电子关联和激子效应, 但计算量巨大, 通常仅限于原子数较少的体系, 难以应用于真实的复杂材料或大尺寸模型^[89-92]。而适用于大体系的近似方法往往以牺牲精度为代价, 导致激发能、发光峰位等关键参数预测偏差较大^[93-94]。

含时密度泛函理论(Time-dependent density functional theory, TDDFT)是目前主流的激发态计算方法。它基于基态的 Kohn-Sham 轨道, 通过线性响应理论处理外场下的密度变化, 在精度和计算量之间取得了较好的平衡^[95-96]。Hefei-NAMD、CP2K 及 PWmat 等软件均提供了 TDDFT 计算模块^[97-99]。例如, Han 等^[100]采用 TDDFT 系统研究了 CdSe、CdS、ZnSe、ZnS 等 II-VI 族蓝光量子点的激子特性, 精确计算了其光学带隙与激子寿命, 揭示了表面配体的钝化机制。Zhang 等^[101]利用 TDDFT 探究了全无机钙钛矿纳米结构的光学响应, 阐明了卤素组分对

光生载流子行为的影响。然而, TDDFT 的计算精度严重依赖于所选的交换关联泛函。传统泛函(如 Local density approximation 和 Generalized gradient approximation)因存在自相互作用误差且缺乏长程交换作用, 普遍低估带隙和激发能; 而引入精确交换的杂化泛函(如 Becke-3-parameter-Lee-Yang-Parr, 即 B3LYP)虽能提升精度, 但其计算量随体系增大而急剧增加, 限制了其在大型体系中的应用。

为兼顾计算效率与精度, 研究者发展了一系列近似方法。简化 Tamm-Dancoff 近似(Simplified Tamm-Dancoff approximation, sTDA)通过半经验处理库仑积分, 能够高效处理包含数千个原子的超大体系^[102]。例如, Akkerman 等^[103]采用 sTDA 结合 TDDFT, 研究了全无机钙钛矿纳米晶的激子特征, 揭示了卤素偏析导致发光效率降低的缺陷机制。 Δ 自洽场(Delta self-consistent field, Δ SCF)方法通过将电子直接置于目标空轨道进行自洽场迭代来获得特定激发态的能量, 但其难以自动给出跃迁的振子强度, 且对初始猜想的依赖性较强^[104]。此外, 组态相互作用单激发(Configuration interaction singles, CIS)方法在 TDDFT 普及前被广泛使用, 但其计算的激发能通常系统性地偏高 0.7~1.0 eV, 须谨慎选用^[105]。对于量子点体系至关重要的激子精细结构劈裂, 则可以在单激发组态基础上构建对角化激子哈密顿量, 采用屏蔽库仑相互作用进行描述^[106]。当前, TDDFT 仍是发光材料激发态计算的核心方法。然而, 其计算精度与效率间的固有矛盾尚未解决。发展能在宽泛体系尺度下平衡精度与成本的普适性计算方法, 仍是发光材料领域的重要发展方向。

3 数据驱动在环保型发光材料中的应用

3.1 相关材料数据库

材料数据库是数据驱动研究的基础支撑, 其数据的完整性、准确性与可用性直接决定了后续模型训练和材料筛选的可靠性。当前, 数据收集主要依托实验测量、现有数据库调用与第一性原理计算三种途径, 各类数据在来源、规模与可靠性方面均面临挑战, 制约了数据驱动模型的准确性与泛化能力。

实验数据集的构建高度依赖于合成与表征过程的标准化, 以确保数据的一致性与可比性。例如, Regonia 等^[107]通过统一的碱引发 Zn^{2+} 水解缩合反应合成 ZnO 量子点, 并借助紫外-可见分光光度法与透射电子显微镜系统表征, 建立了包含带隙与尺寸的高质量实验数据集。Jiang 等^[108]则通过高温固相法合成了 120 个 Ce 掺杂石榴石荧光粉样本, 经严格筛选后保留 70 个作为训练集, 并通过主动学习策略迭代补充 25 个实验样本, 逐步扩充数据集规模。Wang 等^[109]在碳点白光 LED 研究中, 通过统一的水热工艺制备绿/橙色碳点及相关器件, 系统采集结构参数、光致发光性能与相关色温数据, 构建了涵盖合成条件与器件性能的关联数据集。这些研究表明, 实验数据的工艺一致性、表征规范性及异常值剔除是保障数据质量的关键。理论数据集的构建则依赖于高通量计算与现有数据库的深度融合, 通过统一计算参数与标准化数据格式提升可比性。Setyawan 等^[110]开发了基于高通量从头算(Automating agentic workflow generation, AFLOW)的计算框架, 从无机晶体结构数据库(Inorganic crystal structure database, ICSD)的 193456 种化合物中筛选并计算了 7439 种无机闪烁体材料的电子能带结构。该工作采用标准化计算参数, 并按布拉菲晶格分组并行计算, 在确保数据一致性的同时显著提升计算效率, 构建了大规模理论性质数据库。Marchenko 等^[111]构建了包含 515 种二维杂化钙钛矿的开放数据库, 通过晶体学数据提取结构信息并采用统一参数进行 DFT 计算, 补全带隙等关键性能数据, 形成了结构-性能对应的标准化数据集。针对数据规模不足的挑战, Sivonxay 等^[112]通过动力学蒙特卡洛模拟构建了超过 6000 个样本的纳米颗粒异质结构数据集, 为小样本场景下的机器学习训练提供了重要数据基础。小样本数据下的机器学习策略尤为重要。在环保型发光材料研究中, 某些体系(如无铅钙钛矿、新型量子

点)的实验或计算数据规模往往有限, 直接制约了模型的训练效果。为此, 研究者常采用主动学习、数据增强、迁移学习与集成建模等方法以应对数据稀缺问题。例如, Jiang 等^[108]通过主动学习迭代扩充实验样本, 有效提升了小数据集下的建模可行性; Sivonxay 等^[112]则通过模拟数据增强结合图神经网络(Graph neural network, GNN), 为数据稀缺体系提供了可行的数据扩充路径。这些策略为数据驱动在环保型发光材料中的实际应用提供了重要技术支撑。当前, 尽管 NOMAD(Novel materials discovery)、OQMD(Open quantum materials database)等数据库已遵循 FAIR 原则(即可查找 Findable、可访问 Accessible、可互操作 Interoperable、可重用 Reusable)推进数据标准化与开放共享^[113-114], 但环保型发光材料领域仍面临数据系统性不足、测试条件不统一、计算与实验数据难以直接关联等挑战, 制约了数据驱动模型的全面推广。未来需进一步推动实验与计算数据的融合平台建设, 发展适用于小样本、多模态数据的机器学习框架, 以提升数据驱动材料设计的可靠性与效率。

3.2 机器学习模型

数据库积累的标准化、高可信度材料数据为机器学习模型的训练、验证与优化提供了核心支撑, 而模型则通过挖掘数据中隐藏的关联, 实现对发光材料关键特性的精准预判与合成路径的智能探索。

监督学习的核心应用集中于性能预测, 即通过构建输入特征(如合成参数、结构参数)与输出性能(如带隙、发射波长、量子效率)的映射关系, 实现对材料发光关键指标的精准预判。Regonia 等^[107]通过碱引发的 Zn^{2+} 水解缩合反应合成 ZnO 量子点, 将生长温度与量子点直径、带隙关联后, 以合成时间和温度为特征训练岭回归(Ridge regression, RR)、核岭回归(Kernel ridge regression, KRR)和人工神经网络(Artificial neural network, ANN)三种监督模型(图 7(a)), 最终带二次特征的 KRR 和 RR 模型在光学带隙预测方面表现最优, 精度可媲美有效质量近似模型, 且对大尺寸量子点预测更具优势。Mohd 等^[115]则提出“第一性原理+监督学习”的两步模型, 先以第一性原理获取的电子参数训练线性回归模型, 再利用多层感知器神经网络基于结构参数预测电子参数并代入线性回归模型, 实现对石榴石型氧化物中 Ce^{3+} 离子 4f-5d 跃迁能的精准预测(图 7(b, c)), 留一交叉验证相关系数达 0.9915。Zhuo 等^[116]先以约 2800 组 DFT 计算数据训练支持向量回归模型预测相对介电常数, 再用极端梯度提升算法结合平均

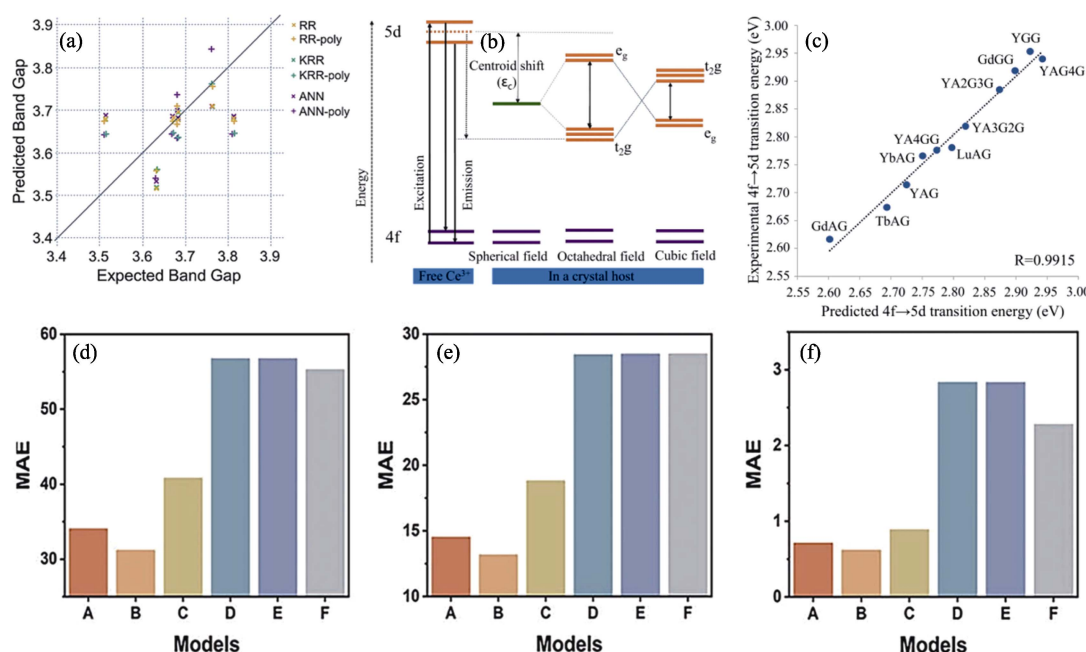


图 7 机器学习在带隙预测、 Ce^{3+} 掺杂晶体光学性能及碳点发光性能预测中的应用^[107, 115, 117]

Fig. 7 Machine learning applications in band gap prediction, optical properties of Ce^{3+} -doped crystals, and luminescence performance prediction of carbon dots^[107, 115, 117]

(a) Band gap prediction comparison of different machine learning models^[107]; (b) 4f-5d energy level diagram of Ce^{3+} in crystals^[115]; (c) Correlation between predicted and experimental Ce^{3+} 4f-5d transition energy^[115]; (d-f) Mean absolute error (MAE) optimization of emission wavelength, quantum yield (QY) and Stokes shift by different models^[117]

电负性、极化率等特征,实现对 Ce^{3+} 掺杂无机荧光粉 5d 能级重心位移的可靠预测。此外,Chen 等^[117]通过水热法合成 270 种碳点构建数据集,经优化后的随机森林(Random forest, RF)监督模型可精准预测碳点的量子效率、最大发射波长及斯托克斯位移(图 7(d-f)),并明确了溶剂对发射波长、前驱体比例对量子效率的关键影响,为多色碳点的可控合成提供了支撑。

无监督学习主要用于发光材料的分类、聚类与潜在特征挖掘,无需预设标签即可从海量数据中识别材料结构或性能的内在关联,为材料筛选与机理分析提供依据。Park 等^[118]收集了 91 种含单一 Eu^{2+} 激活位点的荧光粉,提取到 29 个反映基质元素与结构特征的描述符,并搭建了包含 18 种机器学习算法的集成平台以预测其带隙、激发带边波长及峰值发射波长(图 8(a))。其中,无监督学习相关算法通过对描述符的聚类分析,辅助实现对荧光粉带隙、激发带边波长及峰值发射波长的分类预测,最终有 4 种算法对峰值发射波长的预测达到决定系数 $R^2 > 0.6$ 、均方误差(Mean squared error, MSE) < 0.02 的可接受水平,验证了无监督学习在材料分类与特征挖掘中的有效性。

强化学习侧重于在复杂的多参数合成空间中,

通过与环境交互迭代,动态优化工艺参数,以实现预设目标性能(如特定发光强度、半高宽)的逼近。Bezing 等^[119]将高通量分段流微流体反应器与基于克里金回归的自适应采样算法(Multiparametric automated regression kriging interpolation and adaptive sampling, MARIA, 强化学习相关策略)结合,通过反应器反馈的发光特性数据(如特定发射特性、半高宽、发光强度)调整试剂浓度,快速识别出复杂钙钛矿纳米晶 $((\text{Cs}/\text{FA})\text{Pb}(\text{I}/\text{Br})_3$ 、 $(\text{Rb}/\text{Cs}/\text{FA})\text{Pb}(\text{I}/\text{Br})_3$)的最优合成试剂浓度(图 8(b)),并同步实现对其他光谱特性的预测(图 8(c, d))。在碳点合成领域,强化学习相关策略也被用于优化水热法、微波辅助合成的工艺参数。例如,Wang 等^[120]在碳点白光 LED 制备中,结合机器学习模型与蓝色碳点,通过强化学习优化组合比例,最终实现了 PL 相关色温(Correlated color temperature, CCT)可调及不同 CCT 碳点白光 LED 的精准制备。

除上述方法外,其他机器学习方法也为环保型发光材料的研究提供了有力工具。GNN 通过将晶体结构表示为原子节点与化学键边的图结构,能够有效捕捉材料的拓扑特征与局部化学环境,适用于结构-性能的关联建模。例如,Kruglov 等^[121]利用原子线图神经网络(Atomic line graph neural network,

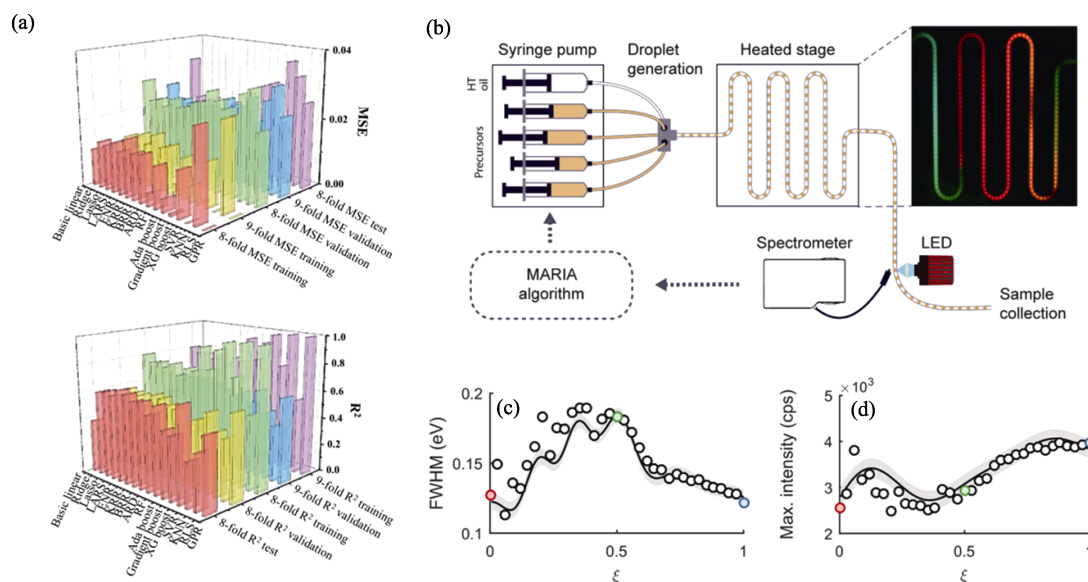


图8 机器学习在 Eu^{2+} 激活荧光粉发射波长预测及钙钛矿纳米晶自适应合成优化中的应用^[118-119]

Fig. 8 Machine learning for emission wavelength prediction of Eu^{2+} -activated phosphors and adaptive synthesis optimization of perovskite nanocrystals^[118-119]

(a) Training, validation and test results of peak emission wavelength (PEW) prediction^[118]; (b) Synthesis setup and adaptive sampling of $(\text{Cs}/\text{FA})\text{Pb}(\text{I}/\text{Br})_3$ NCs^[119]; (c, d) Full width at half maximum (FWHM) and maximum intensity prediction under 680 nm emission^[119]

ALIGNNN)预测晶体材料的双折射率,从材料数据库中高效筛选出深紫外高双折射候选材料,体现了GNN在结构敏感性预测中的优势,其局限性在于对高质量晶体图数据的依赖,并且复杂体系的计算成本高。生成对抗网络(Generative adversarial network, GAN)通过生成器与判别器的对抗训练学习材料数据的分布,可实现新型发光材料结构的逆向设计。例如, Tan 等^[122]采用基于自编码器的 GAN 从头设计荧光分子,成功生成具有高荧光效率的候选分子。然而, GAN 生成结构的可合成性与稳定性仍需实验验证,且训练过程对数据质量和规模较为敏感。自监督学习(Self-supervised learning)利用大量未标注数据(如晶体结构、光谱曲线)进行预训练,再通过少量标注数据微调,显著缓解了标注数据稀缺的问题。例如, Xie 等^[123]通过化学感知的分子片段掩码预训练策略,提升了模型对荧光性质的预测能力。该方法特别适用于新型材料体系研究的初期阶段,但其效果高度依赖于自监督任务设计与材料物理特性的契合度。迁移学习(Transfer learning)通过将已有材料体系(源域)训练得到的模型知识迁移至新体系(目标域),能够大幅降低对新数据量的需求。例如, Moore 等^[124]通过迁移学习将光学光谱预训练模型应用于有机荧光团的能级预测,在小样本场景下仍保持较高精度。该方法适用于源域与目标域具有共同物理规律的场景,但领域差异过大可能导致“负迁移”,需谨慎设计迁移策略。引入上述方法进

一步丰富了数据驱动手段,但当前环保型发光材料的机器学习工作仍然集中在监督学习等传统工具方法上。未来研究需要更主动地接轨人工智能领域的前沿进展,发展并构建更适配材料复杂关系建模的新方法。

3.3 新型环保型发光材料设计

基于数据驱动的新型环保型发光材料设计,通过“模型预测-实验验证”的闭环流程,大幅缩短了研发周期,成功开发出多种性能优异、适配不同应用场景的新材料。Jiang 等^[108]针对高温白光 LED 需求,构建发射波长与热稳定性机器学习模型,从大量石榴石结构化合物中经少量迭代筛选,发现了 $\text{Lu}_{1.5}\text{Sr}_{1.5}\text{Al}_{3.5}\text{Si}_{1.5}\text{O}_{12}:\text{Ce}$ 氟绿石榴石 Ce 荧光粉,其发射峰约 505 nm,在 640 K 下仍保留 60% 发射强度,热稳定性优异。Li 等^[125]结合高通量 DFT 计算与实验,发现了首个 Eu^{2+} 激活全可见光谱荧光粉 $\text{Sr}_2\text{AlSi}_2\text{O}_6\text{N}:\text{Eu}^{2+}$,基于其制备的白光 LED 显色指数(CRI)优异,并通过化学取代优化量子效率(图 9(a))。Xu 等^[126]采用高通量计算从 7 万种化合物中筛选出 BeGeN_2 等 5 种深紫外发光材料候选物,并揭示该类材料稀少的根本原因(图 9(b))。针对零维金属卤化物的发光效率问题, Molokeev 等^[127]通过主成分分析与 RF 机器学习方法,分析了 32 种零维 ns^2 金属卤化物的 PLQY 与晶体结构的关系,发现金属离子间距是影响 PLQY 的首要因素,进而合成了两种新 Sb^{3+} 基卤化物(其中 $(\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N})_2\text{SbCl}_5$ 的晶体

结构和光谱如图 9(c~e)所示), 并证实浓度猝灭是决定该类材料 PLQY 的主要因素。Zhuo 等^[128]以 2610 种化合物的 DFT 弹性模量数据训练支持向量机回归模型并预测德拜温度, 再结合 DFT 计算的带隙值构建筛选图谱, 从 2071 种候选物中筛选出高效热稳定的 $\text{NaBaB}_9\text{O}_{15}$ 基质, 实现了对 Eu^{2+} 掺杂窄带发射荧光粉的定向开发。Takemura 等^[129]则从局部结构相似性出发, 通过瓦瑟斯坦距离量化局部结构差异, 结合 t -分布随机邻域嵌入(t -distributed stochastic neighbor embedding, t -SNE)可视化, 将 ICSD 数据库中碱金属/碱土金属中心的局部结构映射为 2D 散点图(图 10(a)), 筛选出与已知窄带荧光粉 $\text{BaSi}_2\text{O}_2\text{N}_2\text{:Eu}^{2+}$ 的 Ba 位局部结构相似的 $\text{K}_2\text{ZnP}_2\text{O}_7$ 作为基质, 合成了在 440 nm 处窄带发射(半高宽 30 nm)的 $\text{K}_2\text{ZnP}_2\text{O}_7\text{:Eu}^{2+}$ 荧光粉。随后又以窄带发射荧光粉 $\text{BaSO}_4\text{:Eu}^{2+}$ 的 Ba 位局部结构为参考, 通过相同方法从 ICSD 数据库中筛选出 $\text{Na}_2\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{B}_9\text{O}_{15})_2$ 作为基质, 合成出在 417 nm 处呈窄带发射(半高宽 26 nm)的 $\text{Na}_2\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{B}_9\text{O}_{15})_2\text{:Eu}^{2+}$ 荧光粉^[130]。在微型 LED 用荧光粉设计中, Wang 等^[131]采用 RF 机器学习算法, 基于 33 种 Mn^{4+} 激活三价中心离子氟化物构建波长预测模型, 识别出次级配位离子半径比、电负性权重等关键结构特征, 发现 $\text{Cs}_2\text{NaAlF}_6\text{:Mn}^{4+}$ (CNAF) 候选材料(图 10(b)), 将其制备为透明红膜并应用于微型 LED 器件, 实现了 121.5% NTSC(National Television System Committee)或 90.6% Recommen-

dation ITU-R BT.2020 超宽色域。

机器学习还可结合特定应用场景的性能需求, 实现对不同发光波段、功能导向材料的精准设计。Koyama 等^[132]基于 129 种 Eu^{2+} 激活荧光粉数据集, 采用梯度提升回归树的 bootstrap 集成算法构建发射峰波长预测模型, 从材料数据库筛选 20 个预测发射峰位于 500~550 nm 范围内的候选物, 经合成表征发现了 $\text{Li}_2\text{Ca}_4\text{Si}_4\text{O}_{13}\text{:Eu}^{2+}$ 、 $\text{Na}_2\text{Ca}_2\text{Si}_2\text{O}_7\text{:Eu}^{2+}$ 、 $\text{SrLaGaO}_4\text{:Eu}^{2+}$ 三种新型绿或蓝绿发射荧光粉。Ding 等^[133]基于 116 种 Mn^{4+} 激活荧光粉实验数据构建 6 种机器学习模型, 经递归特征消除筛选特征后, K 近邻回归模型预测性能最优, 以此预测 278 种候选物波长并选取 19 种进行实验验证, 结合层次聚类分析总结荧光粉波长与基质结构的规律, 最终合成 6 种荧光粉(如 $\text{Ba}_2\text{LaNbO}_6\text{:Mn}^{4+}$), 实测波长与预测结果吻合。Ming 等^[134]基于 40 个 Mn^{4+} 激活氟化物数据集构建 RF 机器学习模型, 该模型可精准预测激发态寿命(Excited state lifetime, ESL)(图 10(c, d)), 揭示 B 位对称性为影响 ESL 的关键结构特征及“结构-寿命”关联(图 10(e)), 据此发现 $(\text{TMA})_2\text{SnF}_6\text{:Mn}^{4+}$ 与 $(\text{TMA})_2\text{HfF}_6\text{:Mn}^{4+}$ (TMA=Tetramethylammonium) 两种新型氟化物($\text{ESL} \leq 3.7$ ms、内量子效率 > 92%、外量子效率 > 55%), 并基于前者组装出 124% NTSC 色域的微型 LED 显示原型。Jiang 等^[135]结合三目标优化与晶场工程, 构建了近红外荧光粉性能预测模型, 开发出 $\text{LaGa}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{O}_6\text{:Cr}^{3+}$ 荧光粉, 其在 442 nm 激

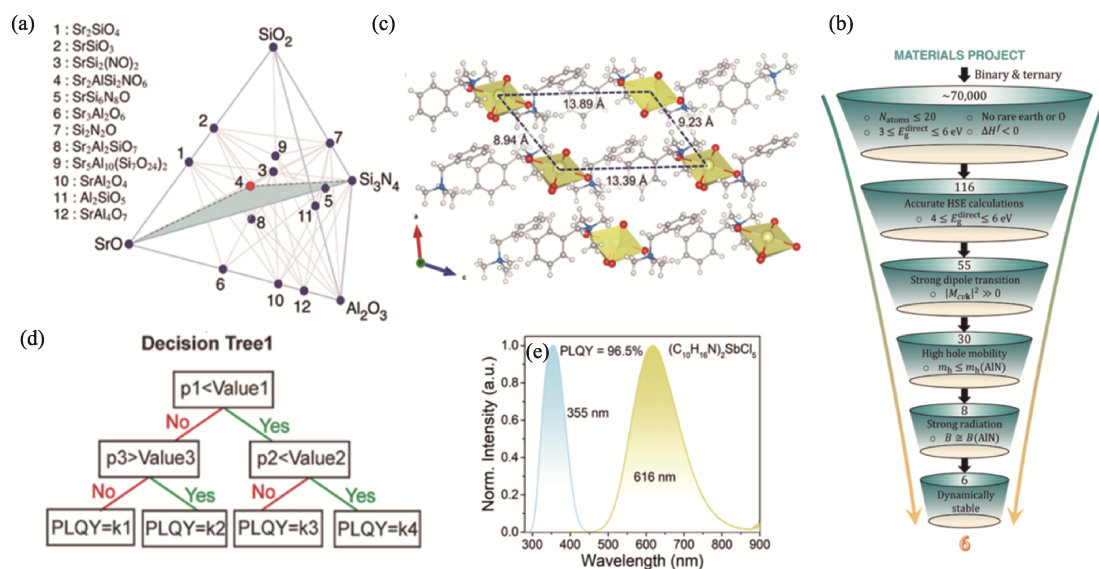


图 9 新型发光材料的相图分析、晶体结构表征及计算筛选策略^[125-127]

Fig. 9 Phase diagram analysis, crystal structure characterization, and computational screening strategies for novel luminescent materials^[125-127]

(a) 3D phase diagram of $\text{SrO-SiO}_2\text{-Si}_3\text{N}_4\text{-Al}_2\text{O}_3$ (with new phase $\text{Sr}_2\text{AlSi}_2\text{O}_6\text{N}$)^[125]; (b) Computational screening workflow of deep-ultraviolet light emitters^[126]; (c) Crystal structure of $(\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N})_2\text{SbCl}_5$ ^[127]; (d) Schematic of random forest algorithm^[127]; (e) Photoluminescence excitation (PLE) and PL spectrum of $(\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N})_2\text{SbCl}_5$ ^[127]

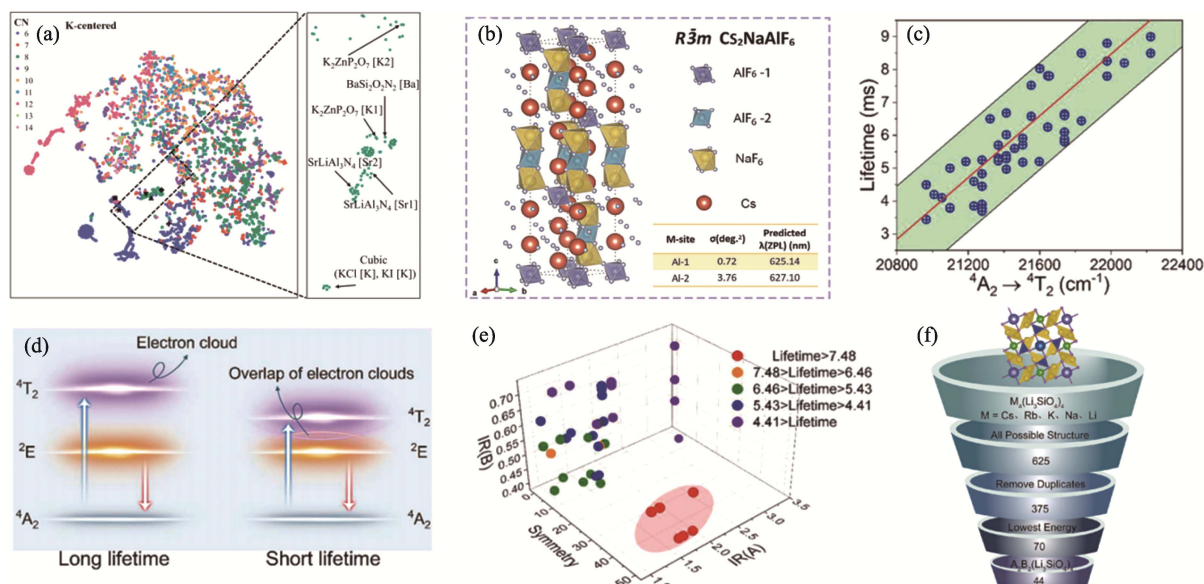


图 10 数据驱动在 Eu^{2+} 及 Mn^{4+} 掺杂荧光粉结构筛选与性能分析中的应用^[129, 131, 134, 137]

Fig. 10 Data-driven structural screening and property analysis of Eu^{2+} -doped and Mn^{4+} -doped phosphors^[129, 131, 134, 137]

(a) 2D t -SNE plots of K-centered local structures^[129]; (b) Lattice structure of the candidate CNAF^[131]; (c) ESL vs. ${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_2$ transition energy of Mn^{4+} -doped fluorides^[134]; (d) Energy level diagram of Mn^{4+} -activated systems (long/short ESL)^[134]; (e) 3D feature space distribution of high-lifetime samples^[134]; (f) Schematic of ML-based screening for narrow-band green emission candidates^[137]

发下呈 850 nm 宽带发射, 393 K 下仍保留 65% 室温发射强度, 可用于近红外 LED 夜视。Bi 等^[136]建立 563 种有机发光分子数据库, 筛选分子指纹后发现 RF 最适合预测量子产率, 梯度提升回归最适合预测波长, 并经 DFT 验证 4 种新聚合诱导发射 (Aggregation-induced emission, AIE) 分子。Liu 等^[137]建立决策树回归模型预测 Eu^{2+} 掺杂硅酸盐荧光粉性能, 发现 $\text{CsRbKNa}(\text{Li}_3\text{SiO}_4)_4:\text{Eu}^{2+}$ 窄带绿色荧光粉, 其与 $\text{K}_2\text{SiF}_6:\text{Mn}^{4+}$ 封装的白光 LED 发光效率达 116.9 lm/W, 色域覆盖 116.0% NTSC 标准(图 10(f))。综上, 聚焦于数据驱动技术对材料发光性能参数的深度优化, 展示如何利用模型解析关键影响因素, 并精准调控合成或制备参数, 以实现量子产率、色坐标、余辉寿命等具体指标的最大化提升。

3.4 发光性能优化

发光性能优化是环保型发光材料实现产业化应用的核心环节, 数据驱动技术通过精准的参数调控与模型指导, 有效提升了材料的发光效率、热稳定性、色纯度等关键性能, 同时大幅降低了实验成本。Luo 等^[138]收集 151 个碳点合成数据, 包含温度、反应时间等特征, 建立融合 XGBoost 特征提取、One-hot 编码、主成分分析降维和逻辑回归的机器学习模型(图 11(a)), 该模型能准确预测红色碳点合成条件(图 11(b, c))。通过筛选有效条件提升了合成效率, 且合成的红色碳点具备良好稳定性与细胞成像

能力。Han 等^[139]针对环保型碳点的发光性能优化, 以水热合成法为基础, 借机器学习构建调控体系。采集 200 余组涵盖反应温度、前驱体质量等参数及荧光量子产率等指标的实验数据, 采用“ 3σ 准则”剔除异常数据后, 构建 XGBoost 回归模型。经网格搜索优化超参数, 5 折交叉验证显示模型对荧光量子产率预测均方根误差(Root mean square error, RMSE)低至 0.021。模型明确前驱体质量与碱性催化剂体积为关键参数, 前者影响碳点粒径与荧光中心数量, 后者决定氮掺杂程度, 据此优化制备的绿色荧光碳点的荧光量子产率达 39.3%, 且该模型减少 60% 的无效实验, 为环保型发光材料发光性能高效优化提供支撑。

针对室温磷光碳点的余辉性能优化, Muyasiroh 等^[140]利用 XGBoost 机器学习模型指导微波辅助合成乙二醇和磷酸基室温磷光碳点, 可将其磷光平均寿命优化至 1.6 s, 该材料在紫外激发下呈蓝光, 关闭激发光源后呈 7 s 可见绿光余辉, 成功应用于多级防伪与动态时间依赖的信息加密。针对荧光粉的光色核心参数优化, Yuan 等^[141]通过迭代合成、表征与机器学习, 构建 $\text{CCT}=f(x, y)$ 和 $\text{CRI}=g(x, y)$ 的多项式回归模型(图 11(d)), 指导设计 Mn 掺杂 (TDMP) $\text{Pb}(\text{Br}_x\text{Cl}_{1-x})_4:y\text{Mn}$ (TDMP=Trans-2,5-dimethylpiperazine) 单相杂化卤化铅白色荧光粉。该荧光粉可实现超高 CRI(>92) 与 CCT (3200~7000 K) 可调, 且实验量较传统网格搜索

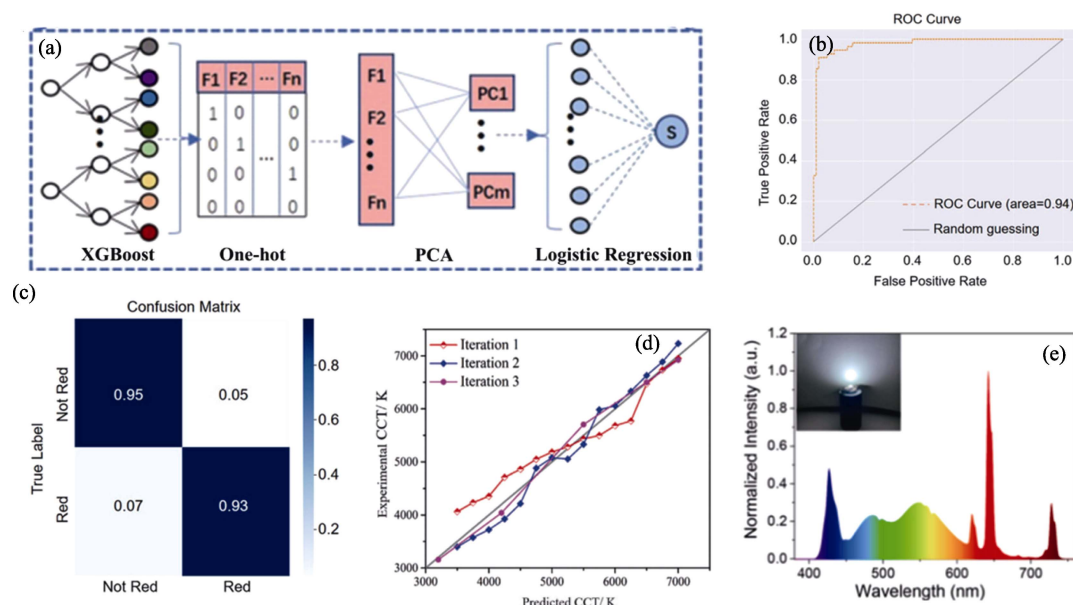


图 11 机器学习模型在发光材料性能预测及 LED 器件优化中的应用评估^[138, 141-142]

Fig. 11 Evaluation of machine learning models in property prediction of luminescent materials and LED device optimization^[138, 141-142]

(a) Data processing pipeline of ML model^[138]; (b) Receiver operating characteristic (ROC) curve and area under the curve (AUC) of logistic regression classifier^[138]; (c) Confusion matrix of the model on cross-validation^[138]; (d) Comparison of predicted and experimental CCT^[141]; (e) Structure and luminescence photo of white phosphor-converted light-emitting diode (pc-LED)^[142]

方法降低 98.6%。针对荧光粉的热稳定性难题, Zhang 等^[142]构建了可解释的机器学习框架, 基于小数据集建立 XGBoost 模型精准预测 Eu^{3+} 激活红光荧光粉的热猝灭温度 T_{50} , 识别出带隙与德拜温度为关键影响因素。据此, 从 3 万多种氧化物中筛选并实验合成了 6 种候选物, 其中 $\text{YAl}_3(\text{BO}_3)_4 \cdot \text{Eu}^{3+}$ 在 100% Eu^{3+} 掺杂下展现出优异性能。基于该荧光粉制作的白光 LED CRI 达 92.9、发光效率达 38.91 lm/W (图 11(e)), 为高效红光荧光粉发现提供新方法。

4 结论与展望

计算与数据驱动技术为突破环保型发光材料研发的“试错式”困境提供了有效途径。材料计算能从原子-电子层面揭示发光起源与非辐射损耗机制, 精准预测材料物性并指导性能优化; 数据驱动则通过构建数据库与机器学习模型加速材料筛选, 二者协同已成为开发高发光效率、高稳定性发光材料体系的重要方法。但推动相关技术产业化仍需应对以下核心挑战。(1) 计算精度与实验存在差距, 如交换关联泛函的近似性无法完全描述复杂多体效应; 对复杂界面缺陷及动态氧化过程的精准模拟仍存在困难, 导致理论预测与器件实际性能之间存在偏差。(2) 数据质量与数量不足, 如无铅钙钛矿数据量远少

于铅基钙钛矿, 环保型量子点数据缺乏系统性和标准化, 且不同研究间的性能测试条件缺乏统一性, 造成数据难以对比与整合, 限制数据驱动模型训练效果与泛化能力。

未来需通过多方向突破推动环保型发光材料发展。(1) 融合多尺度计算方法, 将 DFT(原子尺度)与分子动力学(介观尺度)、有限元模拟(器件尺度)结合, 从原子相互作用到器件工作状态系统揭示材料结构-性能关系。(2) 构建人工智能与实验的闭环研发体系, 建立计算与实验数据的统一数据库, 并利用强化学习优化合成路径, 有望将新材料研发周期缩短近一半。(3) 发展规模化绿色制备工艺, 当前低温合成虽能降低能耗, 但产物均一性不足, 3D 打印等精准成型技术可减少原料浪费, 却面临设备成本高昂的制约, 未来需开发适用于工业化生产的连续式合成和成型设备。(4) 探索新型环保材料体系, 如具有单光子发射特性的 III-V 族量子点, 可拓展其在量子通信、高灵敏度近红外探测等领域的应用, 为环保型发光材料开辟新方向。(5) 进一步拓展环保型发光材料的应用场景, 在农业照明领域中开发匹配植物光合作用的荧光粉材料; 在生物医药领域推进无毒量子点的生物相容性改性, 实现长时间、无细胞毒性的体内荧光成像, 为疾病早期诊断提供新工具。

参考文献:

- [1] SHAN Q, DONG Y, XIANG H, *et al.* Perovskite quantum dots for the next-generation displays: progress and prospect. *Advanced Functional Materials*, 2024, **34**(36): 2401284.
- [2] CHEN F, ZHENG J, XING C, *et al.* Applications of liquid crystal planer optical elements based on photoalignment technology in display and photonic devices. *Displays*, 2024, **82**: 102632.
- [3] FAN J, HAN C, YANG G, *et al.* Recent progress of quantum dots light-emitting diodes: materials, device structures, and display applications. *Advanced Materials*, 2024, **36**(37): 2312948.
- [4] AHMED T, SETH S, SAMANTA A. Boosting the photoluminescence of CsPbX₃ (X=Cl, Br, I) perovskite nanocrystals covering a wide wavelength range by postsynthetic treatment with tetrafluoroborate salts. *Chemistry of Materials*, 2018, **30**(11): 3633.
- [5] YIN J, ZHANG J, PAN W, *et al.* Fully aqua-mediated ripening of perovskite quantum dots with 98% PLQY and self-assembly into bioimaging nanoparticles. *Advanced Functional Materials*, 2026, **36**(7): e14590.
- [6] VARNAKAVI N, VELPUGONDA J L, LEE N, *et al.* In situ synthesis of Br-rich CsPbBr₃ nanoplatelets: enhanced stability and high PLQY for wide color gamut displays. *Advanced Functional Materials*, 2025, **35**(3): 2413320.
- [7] AFTABUZZAMAN M, BHOYAR T, JEONG S, *et al.* Near-unity PLQY in lead-free halide perovskites and perovskite-inspired halides for light-emitting diode applications. *ACS Energy Letters*, 2025, **10**(9): 4439.
- [8] WANG P J, MORALES-MÁRQUEZ R, CERVÁS G, *et al.* The role of temperature in the photoluminescence quantum yield (PLQY) of Ag₂S-based nanocrystals. *Materials Horizons*, 2024, **11**(23): 6158.
- [9] YUAN G, LI M, YU M, *et al.* In situ synthesis, enhanced luminescence and application in dye sensitized solar cells of Y₂O₃/Y₂O₃S:Eu³⁺ nanocomposites by reduction of Y₂O₃:Eu³⁺. *Scientific Reports*, 2016, **6**: 37133.
- [10] HOU L, HU S, ZHANG B, *et al.* Spacing controlled quantum resonance in colloidal CdSe quantum dot superlattices. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2025, **16**(32): 8290.
- [11] NGUYEN H A, HAMMEL B F, SHARP D, *et al.* Colossal core/shell CdSe/CdS quantum dot emitters. *ACS Nano*, 2024, **18**(31): 20726.
- [12] DOU W, GONG Y, HUANG X, *et al.* CdSe quantum dots enable high thermoelectric performance in solution-processed polycrystalline SnSe. *Small*, 2024, **20**(28): 2311153.
- [13] YANG Z, YAO J, XU L, *et al.* Designer bright and fast CsPbBr₃ perovskite nanocrystal scintillators for high-speed X-ray imaging. *Nature Communications*, 2024, **15**: 8870.
- [14] MEHRA S, PANDEY R, MADAN J, *et al.* Experimental and theoretical investigations of MAPbX₃-based perovskites (X=Cl, Br, I) for photovoltaic applications. *ChemistryOpen*, 2024, **13**(2): e202300055.
- [15] TORRENCE C E, LIBBY C S, NIE W, *et al.* Environmental and health risks of perovskite solar modules: case for better test standards and risk mitigation solutions. *iScience*, 2022, **26**(1): 105807.
- [16] HE H, DENG S, LIU Y. Environmentally friendly synthesis of quantum dots and their applications in diverse fields from the perspective of environmental compliance: a review. *Discover Nano*, 2025, **20**(1): 132.
- [17] MEI L, XIE R, ZHU S, *et al.* Neurotoxicity study of lead-based perovskite nanoparticles. *Nano Today*, 2023, **50**: 101830.
- [18] FAUSIA K H, NHARANGATT B, VINAYAKAN R N, *et al.* Probing the structural degradation of CsPbBr₃ perovskite nanocrystals in the presence of H₂O and H₂S: how weak interactions and HSAB matter. *ACS Omega*, 2024, **9**(7): 8417.
- [19] KALNAITYTĖ-VENGELIENĖ A, MONTVYDIENĖ D, JANUŠKAITĖ E, *et al.* The effects of CdSe/ZnS quantum dots on autofluorescence properties and growth of algae *Desmodesmus communis*: dependence on cultivation medium. *Environmental Science: Nano*, 2024, **11**(4): 1701.
- [20] HU L, ZHONG H, HE Z. Toxicity evaluation of cadmium-containing quantum dots: a review of optimizing physicochemical properties to diminish toxicity. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2021, **200**: 111609.
- [21] YUE Z, GUO H, CHENG Y. Toxicity of perovskite solar cells. *Energies*, 2023, **16**(10): 4007.
- [22] SABAH N, SHAHROOSVAND H. Shedding light on the environmental impact of the decomposition of perovskite solar cell. *Scientific Reports*, 2023, **13**: 18004.
- [23] GIROUX M S, ZAHRA Z, SALAWU O A, *et al.* Assessing the environmental effects related to quantum dot structure, function, synthesis and exposure. *Environmental Science: Nano*, 2022, **9**(3): 867.
- [24] DOWNIE D H, ELING C J, CHARLTON B K, *et al.* Recycling self-assembled colloidal quantum dot supraparticle lasers. *Optical Materials Express*, 2024, **14**(12): 2982.
- [25] JANG E, JANG H. Review: quantum dot light-emitting diodes. *Chemical Reviews*, 2023, **123**(8): 4663.
- [26] PAN Y Y, PAN J L, WANG Y K, *et al.* III-V quantum dots: a multidimensional exploration from eco-friendly materials to near infrared optoelectronic applications. *Materials Today*, 2025, **85**: 171.
- [27] CHEN T, CHEN Y, LI Y, *et al.* A review on multiple I-III-VI quantum dots: preparation and enhanced luminescence properties. *Materials*, 2023, **16**(14): 5039.
- [28] JIN L, SELOPAL G S, TONG X, *et al.* Heavy-metal-free colloidal quantum dots: progress and opportunities in solar technologies. *Advanced Materials*, 2024, **36**(33): 2402912.
- [29] JAIN S, BHARTI S, BHULLAR G K, *et al.* I-III-VI core/shell QDs: synthesis, characterizations and applications. *Journal of Luminescence*, 2020, **219**: 116912.
- [30] TEKIN A, KALPAR M, TEKIN E. Exploring the potential of Sn-Ge based hybrid organic-inorganic perovskites: a density functional theory based computational screening study. *The Journal of Chemical Physics*, 2024, **161**(7): 074703.
- [31] JI Y, LIN P, REN X, *et al.* Geometric and electronic structures of Cs₂BB'X₆ double perovskites: the importance of exact exchange. *Physical Review Research*, 2024, **6**(3): 033172.
- [32] LI X, DU X, ZHANG P, *et al.* Lead-free halide perovskite Cs₃Bi₂Br₉ single crystals for high-performance X-ray detection. *Science China Materials*, 2021, **64**(6): 1427.
- [33] MENG X, JIANG J, YANG X, *et al.* Organic-inorganic hybrid cuprous-based metal halides with unique two-dimensional crystal structure for white light-emitting diodes. *Angewandte Chemie International Edition*, 2024, **63**(43): e202411047.
- [34] FANG M H, BAO Z, HUANG W T, *et al.* Evolutionary generation of phosphor materials and their progress in future applications for light-emitting diodes. *Chemical Reviews*, 2022, **122**(13): 11474.
- [35] MAI H, WEN X, LI X, *et al.* Data driven high quantum yield halide perovskite phosphors design and fabrication. *Materials Today*, 2024, **74**: 12.
- [36] KUMAR U, KIM H W, SINGH S, *et al.* Designing Pr-based advanced photoluminescent materials using machine learning and

- density functional theory. *Journal of Materials Science*, 2024, **59**: 1433.
- [37] XIONG Z, WANG Z, JIANG J, *et al.* Exploration of double perovskite luminescent materials accelerated by explainable machine learning. *Physical Review Applied*, 2025, **24**: 014050.
- [38] HAN P, ZHOU W, ZHENG D, *et al.* Lead-free all-inorganic indium chloride perovskite variant nanocrystals for efficient luminescence. *Advanced Optical Materials*, 2022, **10**(1): 2101344.
- [39] LI H, ZHANG W, BIAN Y, *et al.* ZnF₂-assisted synthesis of highly luminescent InP/ZnSe/ZnS quantum dots for efficient and stable electroluminescence. *Nano Letters*, 2022, **22**(10): 4067.
- [40] GAO M, YANG H, SHEN H, *et al.* Bulk-like ZnSe quantum dots enabling efficient ultranarrow blue light-emitting diodes. *Nano Letters*, 2021, **21**(17): 7252.
- [41] WU Z, LIU P, ZHANG W, *et al.* Development of InP quantum dot-based light-emitting diodes. *ACS Energy Letters*, 2020, **5**(4): 1095.
- [42] WU Q, CAO F, YU W, *et al.* Homogeneous ZnSeTeS quantum dots for efficient and stable pure-blue LEDs. *Nature*, 2025, **639**(8055): 633.
- [43] JIANG C, TOZAWA M, AKIYOSHI K, *et al.* Development of Cu-In-Ga-S quantum dots with a narrow emission peak for red electroluminescence. *The Journal of Chemical Physics*, 2023, **158**(16): 164708.
- [44] KIM T, KIM K H, KIM S, *et al.* Efficient and stable blue quantum dot light-emitting diode. *Nature*, 2020, **586**(7829): 385.
- [45] WANG S, WANG C, WANG Y, *et al.* Local lattice softening in semiconductor quantum dots for efficient white light-emitting diodes. *Nature Photonics*, 2025, **19**(9): 952.
- [46] HUANG Y, HSIANG E L, DENG M Y, *et al.* Mini-LED, micro-LED and OLED displays: present status and future perspectives. *Light: Science & Applications*, 2020, **9**(1): 105.
- [47] LIN J Y, JIANG H X. Development of microLED. *Applied Physics Letters*, 2020, **116**(10): 100502.
- [48] HSIANG E L, YANG Z, YANG Q, *et al.* Prospects and challenges of mini-LED, OLED, and micro-LED displays. *Journal of the Society for Information Display*, 2021, **29**(6): 446.
- [49] TANG X, WENG S, HAO W, *et al.* Aqueous synthesis of ultrastable dual-color-emitting lead-free double-perovskite Cs₂SnI₆ with a wide emission span enabled by the size effect. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2023, **11**(24): 9121.
- [50] JIA H, SHI H, YU R, *et al.* Biuret induced tin-anchoring and crystallization-regulating for efficient lead-free tin halide perovskite light-emitting diodes. *Small*, 2022, **18**(17): 2200036.
- [51] LIN H, TALEBI S, MACSWAIN W, *et al.* Tailoring substitutional sites for efficient lanthanide doping in lead-free perovskite nanocrystals with enhanced near-infrared photoluminescence. *ACS Nano*, 2025, **19**(15): 14941.
- [52] LENG M, YANG Y, ZENG K, *et al.* All-inorganic bismuth-based perovskite quantum dots with bright blue photoluminescence and excellent stability. *Advanced Functional Materials*, 2018, **28**(1): 1704446.
- [53] ZENG X, YIN Q, PAN L, *et al.* Hole delayed-release effect of inorganic interfacial dipole layer on charge balance for boosting CsCu₂I₃ light-emitting diodes. *ACS Nano*, 2025, **19**(12): 11878.
- [54] YUAN X R, ZHANG X S, ZHAO X Y, *et al.* Achieving high quantum efficiency in Cs₃Cu₂I₅ nanocrystals by the A-site ion substitution for flexible blue electroluminescence devices and enhanced photovoltaic cells. *ACS Applied Nano Materials*, 2024, **7**(19): 23214.
- [55] LIU S, LIU H, ZHOU G, *et al.* Water-induced crystal phase transformation of stable lead-free Cu-based perovskite nanocrystals prepared by one-pot method. *Chemical Engineering Journal*, 2022, **427**: 131430.
- [56] GAO F, ZHU X, FENG Q, *et al.* Deep-blue emissive Cs₃Cu₂I₅ perovskites nanocrystals with 96.6% quantum yield via InI₃-assisted synthesis for light-emitting device and fluorescent ink applications. *Nano Energy*, 2022, **98**: 107270.
- [57] MA Z, JI X, WANG M, *et al.* Carbazole-containing polymer-assisted trap passivation and hole-injection promotion for efficient and stable CsCu₂I₃-based yellow LEDs. *Advanced Science*, 2022, **9**(27): 2202408.
- [58] DING H, LIU Z, HU P, *et al.* High efficiency green-emitting LuAG:Ce ceramic phosphors for laser diode lighting. *Advanced Optical Materials*, 2021, **9**(8): 2002141.
- [59] LI Y, LUO Z, LIU Y, *et al.* Ce:YScAG phosphor-converted transparent ceramics with high thermal saturation and weak concentration quenching for LED and LD white lighting. *Ceramics International*, 2023, **49**(2): 2051.
- [60] INFANTE I, MANNA L. Are there good alternatives to lead halide perovskite nanocrystals? *Nano Letters*, 2021, **21**(1): 6.
- [61] DE FRANCO M, ZHU D X, ASAITHAMBI A, *et al.* Near-infrared light-emitting diodes based on RoHS-compliant InAs/ZnSe colloidal quantum dots. *ACS Energy Letters*, 2022, **7**(11): 3788.
- [62] JALALI H B, DE TRIZIO L, MANNA L, *et al.* Indium arsenide quantum dots: an alternative to lead-based infrared emitting nanomaterials. *Chemical Society Reviews*, 2022, **51**(24): 9861.
- [63] PAN Q Y, ZHAO Q, WEI P X, *et al.* Surface ligands for perovskite quantum dots. *ChemSusChem*, 2025, **18**(4): e202401875.
- [64] LIU J H, YANG Z X, YE B Q, *et al.* A review of stability-enhanced luminescent materials: fabrication and optoelectronic applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 2019, **7**(17): 4934.
- [65] LI M, ZHANG X, YANG P. Controlling the growth of a SiO₂ coating on hydrophobic CsPbBr₃ nanocrystals towards aqueous transfer and high luminescence. *Nanoscale*, 2021, **13**(8): 3860.
- [66] WANG Q Q, ZHANG X Y, QIAN L, *et al.* Improving perovskite green quantum dot light-emitting diode performance by hole interface buffer layers. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, **15**(23): 28833.
- [67] WANG Z T, CHEN C, LIAN K, *et al.* Double-matrix encapsulation of cyan perovskite nanomaterials for high-efficiency full-spectrum white light-emitting diodes. *ACS Applied Nano Materials*, 2024, **7**(23): 27154.
- [68] XUAN T T, HUANG J J, LIU H, *et al.* Super-hydrophobic cesium lead halide perovskite quantum dot-polymer composites with high stability and luminescent efficiency for wide color gamut white light-emitting diodes. *Chemistry of Materials*, 2019, **31**(3): 1042.
- [69] GUO T H, WANG H, HAN W H, *et al.* Designed p-type graphene quantum dots to heal interface charge transfer in Sn-Pb perovskite solar cells. *Nano Energy*, 2022, **98**: 107298.
- [70] ZHANG W D, DUAN X J, TAN Y Z, *et al.* Giant pyramidal near-infrared InP/ZnS quantum dots with size over 15 nm for cell imaging. *Laser & Photonics Reviews*, 2024, **18**(10): 2400367.
- [71] WANG J F, BA G H, MENG J, *et al.* Transition layer assisted synthesis of defect free amine-phosphine based InP QDs. *Nano Letters*, 2024, **24**(29): 8894.
- [72] IVANOV S A, PIRYATINSKI A, NANDA J, *et al.* Type-II core/shell CdS/ZnSe nanocrystals: synthesis, electronic structures, and spectroscopic properties. *Journal of the American Chemical Society*, 2007, **129**(38): 11708.
- [73] KICK M, ALEXANDER E, VAN VOORHIS T. Band alignment

- in core-shell nanocrystals by estimating wave function tunneling probabilities. *Nano Letters*, 2025, **25**(42): 15272.
- [74] NANDAN Y, MEHATA M S. Wavefunction engineering of type-I/type-II excitons of CdSe/CdS core-shell quantum dots. *Scientific Reports*, 2019, **9**: 2.
- [75] CAO Y W, BANIN U. Growth and properties of semiconductor core/shell nanocrystals with InAs cores. *Journal of the American Chemical Society*, 2000, **122**(40): 9692.
- [76] CHEN B, LI D Y, WANG F. InP quantum dots: synthesis and lighting applications. *Small*, 2020, **16**(32): 2002454.
- [77] KIM S W, ZIMMER J P, OHNISHI S, *et al.* Engineering InAs_xP_{1-x}/InP/ZnSe III-V alloyed core/shell quantum dots for the near-infrared. *Journal of the American Chemical Society*, 2005, **127**(30): 10526.
- [78] FANG M H, CHEN K C, MAJEWSKA N, *et al.* Hidden structural evolution and bond valence control in near-infrared phosphors for light-emitting diodes. *ACS Energy Letters*, 2021, **6**(1): 109.
- [79] KIMOTO K, XIE R J, MATSUI Y, *et al.* Direct observation of single dopant atom in light-emitting phosphor of β -SiAlON:Eu²⁺. *Applied Physics Letters*, 2009, **94**(4): 041908.
- [80] 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**: 891.
- [81] PUST P, HINTZE F, HECHT C, *et al.* Group (III) nitrides M[Mg₂Al₂N₄] (M=Ca, Sr, Ba, Eu) and Ba[Mg₂Ga₂N₄]—structural relation and nontypical luminescence properties of Eu²⁺ doped samples. *Chemistry of Materials*, 2014, **26**(21): 6113.
- [82] SCHMIECHEN S, SCHNEIDER H, WAGATHA P, *et al.* Toward new phosphors for application in illumination-grade white pc-LEDs: the nitridomagnesosilicates Ca[Mg₃SiN₄]:Ce³⁺, Sr[Mg₃SiN₄]:Eu²⁺, and Eu[Mg₃SiN₄]. *Chemistry of Materials*, 2014, **26**(8): 2712.
- [83] KUMAR S, COCCHI C, STEENBOCK T. Surface defects and symmetry breaking impact on the photoluminescence of InP quantum dots. *Nano Letters*, 2025, **25**(26): 10588.
- [84] GU J Z, TAO Y, FU T H, *et al.* Correlating photophysical properties with stereochemical expression of 6s² lone pairs in two-dimensional lead halide perovskites. *Angewandte Chemie International Edition*, 2023, **62**(30): e202304515.
- [85] XU N, QI X, SHEN Z, *et al.* Point defects in metal halide perovskites. *Nature Reviews Physics*, 2025, **7**: 554.
- [86] ZOU Y, YUAN Z, BAI S, *et al.* Recent progress toward perovskite light-emitting diodes with enhanced spectral and operational stability. *Materials Today Nano*, 2019, **5**: 100028.
- [87] TSAI Y T, CHIANG C Y, ZHOU W, *et al.* Structural ordering and charge variation induced by cation substitution in (Sr,Ca)AlSiN₃:Eu phosphor. *Journal of the American Chemical Society*, 2015, **137**(28): 8936.
- [88] MAO A, GUO Y, ZHOU W, *et al.* Crystal field engineering inducing transformation from narrow band of Eu³⁺ to broadband of Eu²⁺. *Inorganic Chemistry*, 2024, **63**(35): 16134.
- [89] XU L L, LIU G Y, XIANG H Y, *et al.* Charge-carrier dynamics and regulation strategies in perovskite light-emitting diodes: from materials to devices. *Applied Physics Reviews*, 2022, **9**(2): 021308.
- [90] BOGO N, STEIN C J. Benchmarking DFT-based excited-state methods for intermolecular charge-transfer excitations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2024, **26**(32): 21575.
- [91] BERTONI A I, SÁNCHEZ C G. Data-driven approach for benchmarking DFTB-approximate excited state methods. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, **25**(5): 3789.
- [92] DE WERGIFOSSE M. Computing excited states of very large systems with range-separated hybrid functionals and the exact integral simplified time-dependent density functional theory (XsTD-DFT). *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2024, **15**(51): 12628.
- [93] LEE S, PARK W, CHOI C H. Expanding horizons in quantum chemical studies: the versatile power of MRSF-TDDFT. *Accounts of Chemical Research*, 2025, **58**(2): 208.
- [94] SINYAVSKIY A, MALIŠ M, LUBER S. Bridging the gap between variational and perturbational DFT-based methods for calculating excited states. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2025, **21**(15): 7430.
- [95] CASTRO A, MARQUES M A L, RUBIO A. Propagators for the time-dependent Kohn-Sham equations. *The Journal of Chemical Physics*, 2004, **121**(8): 3425.
- [96] GROSS E K U, KOHN W. Time-dependent density-functional theory. *Advances in Quantum Chemistry*, 1990, **21**: 255.
- [97] ZHU Y F, PENG J W, XU C, *et al.* Unsupervised machine learning in the analysis of nonadiabatic molecular dynamics simulation. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2024, **15**(38): 9601.
- [98] KÜHNE T D, IANNUZZI M, DEL BEN M, *et al.* CP2K: an electronic structure and molecular dynamics software package—quickstep: efficient and accurate electronic structure calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 2020, **152**(19): 194103.
- [99] JIA W L, CAO Z Y, WANG L, *et al.* The analysis of a plane wave pseudopotential density functional theory code on a GPU machine. *Computer Physics Communications*, 2013, **184**(1): 9.
- [100] HAN P P, MIN J J, ZENG Z P, *et al.* Excitonic characteristics of blue-emitting quantum dot materials in group II-VI using hybrid time-dependent density functional theory. *Physical Review B*, 2021, **104**(4): 045404.
- [101] ZHANG B F, ZHANG H, LIN J H, *et al.* A time-dependent density functional study on optical response in all-inorganic lead-halide perovskite nanostructures. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2020, **120**(13): e26232.
- [102] GRIMME S, BANNWARTH C. Ultra-fast computation of electronic spectra for large systems by tight-binding based simplified Tamm-Dancoff approximation (sTDA-xTB). *The Journal of Chemical Physics*, 2016, **145**(5): 054103.
- [103] AKKERMAN Q A, BLADT E, PETRALANDA U, *et al.* Fully inorganic Ruddlesden-Popper double Cl-I and triple Cl-Br-I lead halide perovskite nanocrystals. *Chemistry of Materials*, 2019, **31**(6): 2182.
- [104] FILATOV M, HUIX-ROTLANT M. Assessment of density functional theory based Δ SCF (self-consistent field) and linear response methods for longest wavelength excited states of extended π -conjugated molecular systems. *The Journal of Chemical Physics*, 2014, **141**(2): 024112.
- [105] HEAD-GORDON M, RICO R J, OUMI M, *et al.* A doubles correction to electronic excited states from configuration interaction in the space of single substitutions. *Chemical Physics Letters*, 1994, **219**(1/2): 21.
- [106] JI Z M, SONG Z G. Exciton radiative lifetime in CdSe quantum dots. *Journal of Semiconductors*, 2023, **44**(3): 032702.
- [107] REGONIA P R, PELICANO C M, TANI R, *et al.* Predicting the band gap of ZnO quantum dots via supervised machine learning models. *Optik*, 2020, **207**: 164469.
- [108] 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.
- [109] WANG X, WANG B, WANG H S, *et al.* Carbon-dot-based

- white-light-emitting diodes with adjustable correlated color temperature guided by machine learning. *Angewandte Chemie International Edition*, 2021, **60(22)**: 12585.
- [110] SETYAWAN W, GAUME R M, LAM S, *et al.* High-throughput combinatorial database of electronic band structures for inorganic scintillator materials. *ACS Combinatorial Science*, 2011, **13(4)**: 382.
- [111] MARCHENKO E I, FATEEV S A, PETROV A A, *et al.* Database of two-dimensional hybrid perovskite materials: open-access collection of crystal structures, band gaps, and atomic partial charges predicted by machine learning. *Chemistry of Materials*, 2020, **32(17)**: 7383.
- [112] SIVONXAY E, ATTIA L, SPOTTE-SMITH E W C, *et al.* Gradient-based optimization of complex nanoparticle heterostructures enabled by deep learning on heterogeneous graphs. *Nature Computational Science*, 2026, **6**: 83.
- [113] DRAXL C, SCHEFFLER M. NOMAD: the FAIR concept for big data-driven materials science. *MRS Bulletin*, 2018, **43(9)**: 676.
- [114] KIRKLIN S, SAAL J E, MEREDIG B, *et al.* The open quantum materials database (OQMD): assessing the accuracy of DFT formation energies. *npj Computational Materials*, 2015, **1**: 15010.
- [115] MOHD R N I B, NOVITA M, OGASAWARA K. Two-step model for predicting 4f→5d transition energies of Ce³⁺ in garnet-type oxides based on first-principles calculations and machine learning. *Optical Materials*, 2025, **159**: 116653.
- [116] ZHUO Y, HARIYANI S, YOU S, *et al.* Machine learning 5d-level centroid shift of Ce³⁺ inorganic phosphors. *Journal of Applied Physics*, 2020, **128(1)**: 013104.
- [117] CHEN J, LUO J B, HU M Y, *et al.* Controlled synthesis of multicolor carbon dots assisted by machine learning. *Advanced Functional Materials*, 2023, **33(2)**: 2210095.
- [118] PARK C, LEE J W, KIM M, *et al.* A data-driven approach to predicting band gap, excitation, and emission energies for Eu²⁺-activated phosphors. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2021, **8(21)**: 4610.
- [119] BEZINGE L, MACEICZYK R M, LIGNOS I, *et al.* Pick a color MARIA: adaptive sampling enables the rapid identification of complex perovskite nanocrystal compositions with defined emission characteristics. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2018, **10(22)**: 18869.
- [120] WANG X, WANG B, WANG H, *et al.* Carbon-dot-based white-light-emitting diodes with adjustable correlated color temperature guided by machine learning. *Angewandte Chemie International Edition*, 2021, **60(22)**: 12585.
- [121] KRUGLOV I A, BEREZNIKOVA L A, XIE C, *et al.* Graph neural network guided design of novel deep-ultraviolet optical materials with high birefringence. *Science China Materials*, 2024, **67(12)**: 3941.
- [122] TAN Z, LI Y, WU X, *et al.* De novo creation of fluorescent molecules via adversarial generative modeling. *RSC Advances*, 2023, **13(2)**: 1031.
- [123] XIE A L, ZHANG Z Q, GUAN J H, *et al.* Self-supervised learning with chemistry-aware fragmentation for effective molecular property prediction. *Briefings in Bioinformatics*, 2023, **24(5)**: bbad296.
- [124] MOORE G J, BARDAGOT O, BANERJI N. Deep transfer learning: a fast and accurate tool to predict the energy levels of donor molecules for organic photovoltaics. *Advanced Theory and Simulations*, 2022, **5(5)**: 2100511.
- [125] LI S, XIA Y, AMACHRAA M, *et al.* Data-driven discovery of full-visible-spectrum phosphor. *Chemistry of Materials*, 2019, **31(16)**: 6286.
- [126] XU X, LIANG H P, HUANG Q S, *et al.* Computational screening of promising deep-ultraviolet light emitters. *Journal of the American Chemical Society*, 2024, **146(18)**: 12864.
- [127] MOLOKEEV M S, SU B, ALEKSANDROVSKY A S, *et al.* Machine learning analysis and discovery of zero-dimensional ns² metal halides toward enhanced photoluminescence quantum yield. *Chemistry of Materials*, 2022, **34(2)**: 537.
- [128] ZHUO Y, TEHRANI A M, OLIYNYK A O, *et al.* Identifying an efficient, thermally robust inorganic phosphor host via machine learning. *Nature Communications*, 2018, **9**: 4377.
- [129] TAKEMURA S, KOYAMA Y, NAKANISHI T, *et al.* Narrow-band phosphor K₂ZnP₂O₇:Eu²⁺ discovered using local structure similarity. *Scripta Materialia*, 2022, **215**: 114686.
- [130] TAKEMURA S, KOYAMA Y, NAKANISHI T, *et al.* Narrow-band emitting phosphor Na₂Cs₂Sr(B₉O₁₅):Eu²⁺ discovered from local structure similarity with sulfate phosphor. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2022, **13(51)**: 11878.
- [131] WANG Y, TANG W, ZHANG C, *et al.* Structure-based machine learning enables discovery of Mn⁴⁺-activated red-light fluorides for ultrawide-gamut mini-light-emitting diodes. *Advanced Functional Materials*, 2024, **34(14)**: 2313490.
- [132] 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.
- [133] DING C, LI Z, ZHANG W, *et al.* Machine learning the peak emission wavelength of Mn⁴⁺-activated inorganic phosphors. *New Journal of Chemistry*, 2023, **47(22)**: 10875.
- [134] MING H, ZHOU Y, MOLOKEEV M S, *et al.* Machine-learning-driven discovery of Mn⁴⁺-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.
- [135] JIANG L, JIANG X, YANG M, *et al.* Developing and optimizing novel Cr³⁺-activated inorganic NIR phosphors by combining triple-objective optimization and crystal field engineering. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2024, **11(2)**: 487.
- [136] 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.
- [137] LIU S, SONG K, LI S, *et al.* Machine learning-driven discovery of efficient narrow-band green phosphor for wide-color-gamut back-light displays. *Chemical Engineering Journal*, 2025, **520**: 165719.
- [138] LUO J B, CHEN J, LIU H, *et al.* High-efficiency synthesis of red carbon dots using machine learning. *Chemical Communications*, 2022, **58(64)**: 9014.
- [139] HAN Y, TANG B, WANG L, *et al.* Machine-learning-driven synthesis of carbon dots with enhanced quantum yields. *ACS Nano*, 2020, **14(11)**: 14761.
- [140] MUYASSIROH D A M, PERMATASARI F A, HIRANO T, *et al.* Machine learning-guided synthesis of room-temperature phosphorescent carbon dots for enhanced phosphorescence lifetime and information encryption. *ACS Applied Nano Materials*, 2024, **7(5)**: 5465.
- [141] YUAN H L, QI L Y, PARIS M, *et al.* Machine learning guided design of single-phase hybrid lead halide white phosphors. *Advanced Science*, 2021, **8(19)**: 2101407.
- [142] 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.