



论 文

一种用于预测钙钛矿带隙的卷积神经网络模型

王鸿博^{1,2}, 张卫兵^{1,2*}

1. 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114

2. 长沙理工大学物理与电子科学学院, 长沙 410114

* E-mail: zhangwb@csust.edu.cn

收稿日期: 2026-02-09; 接受日期: 2026-06-08; 网络版发表日期: 2026-08-28

国家自然科学基金(批准号: 11874092)、霍英东教育基金会第十六届高等院校青年教师基金(编号: 161005)和湖南省杰出青年科学基金(编号: 2021JJ10039)资助项目

摘要 准确预测带隙是半导体领域的关键问题. 本文提出了一种融合通道注意力机制的卷积神经网络模型, 实现钙钛矿材料带隙的准确快速预测. 该模型基于 ABX_3 型单钙钛矿和 $A_2BB'X_6$ 型双钙钛矿数据, 采用双池化并行结构协同提取特征的局部极值与全局分布信息, 并引入通道注意力机制自适应加权与带隙相关的特征通道, 增强对关键特征的识别. 在测试集上实现了 $R^2 = 0.917$, $RMSE = 0.493$ eV的良好预测性能, 显著优于XGBoost等传统机器学习模型, 并将模型应用于独立的外部测试集取得 $R^2 = 0.936$, 仍能保持良好的泛化能力. 通过可解释性分析与消融实验进一步揭示了形成能、B位电负性、p轨道价电子数和未填充d轨道电子数等影响带隙的关键特征, 同时验证了双池化结构与注意力机制对提升模型性能的作用. 本研究构建了一个高效可靠的钙钛矿带隙预测模型, 为目标带隙材料的设计与高通量筛选提供了理论指导与数据支持, 有助于加速新材料研发进程.

关键词 钙钛矿, 带隙, 卷积神经网络, 通道注意力机制

1 引言

近年来钙钛矿材料因其优异的高吸收率及较低的制造成本受到广泛关注^[1~3], 在太阳能电池^[4,5]、发光二极管^[6,7]等领域展现出广阔的应用潜力. 材料的带隙决定了其对光波的吸收范围, 是优化光电器件效率的核心参数之一^[8]. 因此, 实现带隙的精准、快速预测对于定向设计与开发高性能钙钛矿材料至关重要.

传统的“试错法”材料研发模式不仅耗时费力, 还高度依赖于研究者的经验直觉^[9]. 虽然第一性原理计算^[10]能够从量子力学层面提供准确的理论预测, 但是

计算成本高, 严重限制了其在海量组分和构型空间中的高通量筛选能力. 机器学习(machine learning, ML)技术的兴起为材料科学研究带来了革命性变化^[11~14]. 通过建立材料成分、结构与性能之间的映射关系, ML能够极大地加速新材料的发现进程.

目前, 传统机器学习方法如RF^[15], XGBoost^[16], SVR^[17]以及MLPR^[18], 被广泛应用于预测钙钛矿的带隙. Gao等人^[19]采用极限梯度提升回归(XGBoost)模型, 并结合DFT计算实现了无机双钙钛矿带隙的快速预测. Cai等人^[20]通过构建以随机森林回归为核心的集成学习框架, 加速了对具有优异光伏性能的全无机

引用格式: 王鸿博, 张卫兵. 一种用于预测钙钛矿带隙的卷积神经网络模型. 中国科学: 技术科学, 2026, 56: 2141–2152

Wang H B, Zhang W B. A convolutional neural network model for predicting perovskite bandgaps (in Chinese). Sci Sin Tech, 2026, 56: 2141–2152, doi: 10.1360/SST-2026-0056

钙钛矿的寻找. Yang等人^[21]结合梯度提升回归树(gradient boosting regression tree, GBRT)算法^[22]和基于遗传算法的符号回归算法, 实现了有机-无机杂化钙钛矿(hybrid organic-inorganic perovskite, HOIP)带隙的可解释性预测. 尽管这些方法取得一定成效, 但在捕捉材料的局部空间关系和复杂物理化学机制方面还存在不足. 其中传统方法通常将材料描述符视为独立的数值向量, 难以处理特征间复杂的非线性和非可加性耦合^[23]. 此外, 基于树的集成学习模型依赖于在叶子节点上对响应值进行平均来拟合数据, 这种归纳偏置使其在检测全局结构方面存在局限, 难以有效感知特征间的局部交互模式^[24], 制约了预测精度的进一步提升.

近年来, 深度学习模型如卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)^[25]凭借强大的局部特征提取能力逐渐被引入材料性质预测领域. 例如, Xie等人^[26]提出的晶体图卷积神经网络(crystal graph convolutional neural networks, CGCNN), 将晶体结构表示为图, 使用卷积操作提取局部原子环境特征, 首次将图卷积应用于晶体材料的带隙预测. 而Louis等人^[27]在CGCNN基础上引入全局注意力层, 增强对关键原子的识别能力, 在带隙预测中实现了更高的精度与更好的可解释性.

本文提出了一种引入通道注意力机制(squeeze-and-excitation network)^[28]的卷积神经网络模型(CNN-

SE). 在该模型中, 卷积层能够从描述符矩阵中提取有效的特征信息, 并通过注意力机制自适应地增强与带隙强相关的特征通道. 基于单钙钛矿和双钙钛矿数据集, 通过系统的特征工程筛选出描述符集合训练CNN-SE模型, 并与DT, RF, SVR, Ridge, XGBoost及MLPR等主流机器学习模型进行了对比分析, 最后通过可解释性研究与消融实验分析不同特征和不同模块对提升模型性能的影响.

2 数据及方法

2.1 数据集与特征工程

本文采用与文献^[29]相同的数据来源与筛选标准构建数据集. 数据源自公开访问的Materials Project数据库^[30], 使用pymatgen^[31]和matminer^[32]工具包获取并预处理, 包括3720种ABX₃型钙钛矿结构和2660种A₂BB'X₆型双钙钛矿结构. 这些数据包含化学式、带隙、形成能、体积、空间群等信息. 如图1所示, 数据集主要由氧化物、氮化物、硫化物、氟化物、氯化物、溴化物、碘化物等构成, 其带隙分布如表1所示. 带隙覆盖0~8 eV, 其中多数氧化物钙钛矿带隙较宽(>3 eV), 而卤化物钙钛矿(如碘化物、溴化物)带隙较窄(多集中于1.5~2.5 eV), 双钙钛矿的带隙分布也呈现类似趋势, 部分硫化物与氯化物体系表现出中等带隙

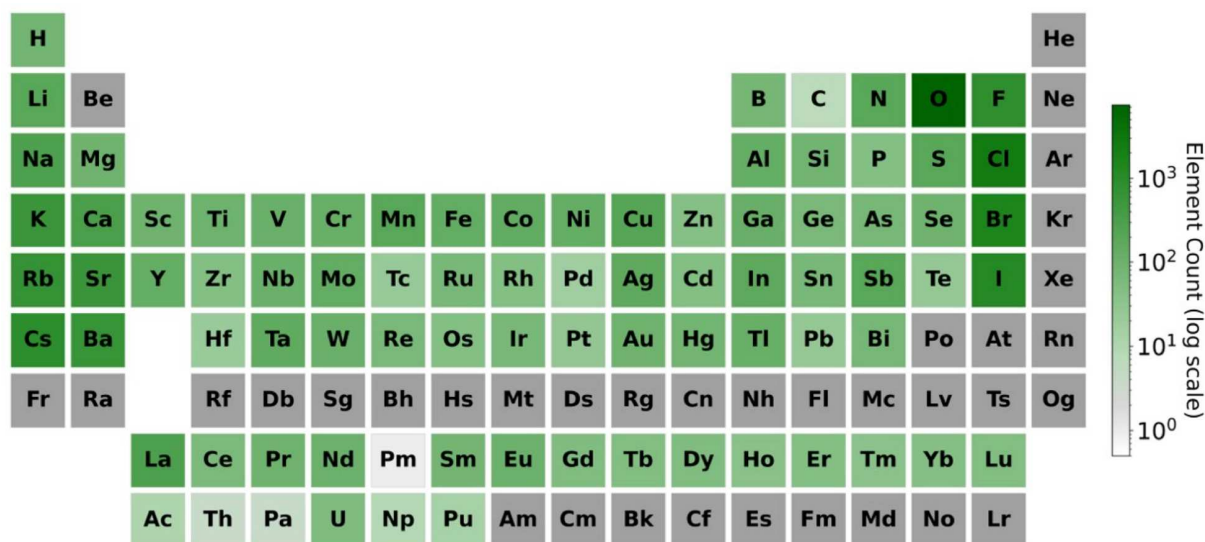


图1 (网络版彩图)数据集中元素数量的对数分布

Figure 1 (Color online) Logarithmic distribution of the number of elements in a dataset.

表 1 数据集中钙钛矿材料的带隙分布**Table 1** Bandgap distribution of perovskite materials

材料类型	带隙范围 (eV)	总体特征
卤化物	1.5~2.5	窄带隙
硫化物/氯化物	2.0~3.0	窄带隙
氧化物	>3.0	宽带隙
双钙钛矿	1.5~2.5	窄带隙

(2~3 eV).

本工作通过Matminer工具包进行特征挖掘, 基于“Magpie”和“Meredig”等模块^[33,34]生成初始描述符, 共得到286个特征, 包括化学计量特征、元素属性特征、电子结构特征和离子化合物属性等. 为消除不同特征量纲与数值范围差异对模型训练的影响, 对全部特征进行了标准化处理. 过多的材料特征可能增加模型复杂度并引发过拟合, 因此采用特征选择方法以去除冗余信息.

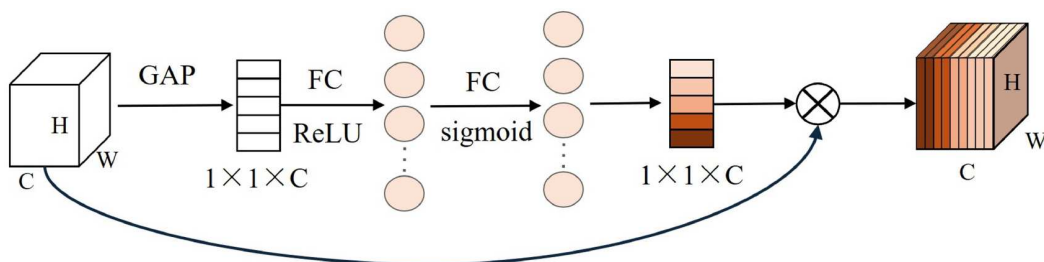
首先, 根据Pearson相关系数删除相关系数大于0.9的特征, 减少特征间多重共线性, 初步筛选后保留259个特征. 随后, 基于随机森林算法对剩余特征进行重要性排序, 剔除重要性较低的特征. 这一系列特征处理流程在降低特征维度的同时, 有助于提升模型的泛化能力与计算效率. 经过两阶段筛选, 最终构建了144个材料描述符集合, 包含电子结构(54个)、元素属性(52个)、化学成分(28个)和结构参数(10个)四类. 其中, 结构参数保留了容忍因子(tolerance factor)和八面体因子(octahedral factor), 分别用于描述钙钛矿的晶格畸变程度以及B-X-B键角、八面体倾斜特性, 能够有效反映材料的成键环境与空间约束. 在双钙钛矿结构中, B位由两种不同元素共同占据, 其相关特征取两者的平均值.

2.2 模型构建

卷积神经网络通过堆叠多个卷积层来提取高级特征表示, 但不同的通道可能对不同的特征有不同的贡献, 有些通道可能包含更多的关键信息, 而其他通道则可能包含噪声或冗余信息. 因此, 通道注意力机制的目标是通过对每层特征图全局信息的学习来为每个通道赋予不同的权重, 达到加强有用的特征通道, 抑制无用特征通道的效果. 图2展示了通道注意力机制的实现过程.

假设输入特征图尺寸为 $C \times H \times W$. 首先, 通过全局平均池化(global average pooling, GAP)将每个通道的空间信息压缩为 C 维向量, 随后将该向量输入第一个全连接(fully connected, FC)层, 映射到低维空间并通过ReLU激活函数保留非线性特征, 再通过第二个全连接层, 结合sigmoid函数的归一化作用, 生成与输入通道数一致的注意力权重向量, 从而量化每个通道的重要性. 最后, 将原始输入特征与该注意力权重进行逐通道相乘, 实现特征重加权, 以强化重要通道的贡献, 抑制次要通道的影响.

图3显示了提出的CNN-SE网络模型. 模型结构由“Conv2D”“SENet”“Pooling2D”“Dropout”和“Dense”层组成. 本文设计了两个 3×3 卷积层和两层注意力通道, 其中CNN的卷积核擅长捕捉局部特征模式, 能学习到不同组合特征之间的关系, 而通道注意力机制能够自动学习并赋予不同特征通道以不同的权重. 针对数值型描述符输入的特性, 设计了并行池化策略: 同时采用最大池化与平均池化, 对卷积输出进行双路处理与特征融合. 这样既能提取最显著特征响应, 又能保留全局统计信息. 最终, 特征图经展平后接入两个全连接隐藏层以进一步提取特征. 所有卷积层与全连接层均采用ReLU激活函数. 模型训练使用Adam优化器,

**图 2** (网络版彩图)通道注意力机制结构图**Figure 2** (Color online) Structure of channel attention mechanism.

以均方误差(mean square error, MSE)作为损失函数, 最终输出钙钛矿带隙的预测值。

网络各层参数配置如表2所示。初始的144个描述符以 12×12 二维矩阵形式输入, 首先经过第一层 3×3 卷积核, 通过填充尺寸为2的零填充策略, 在保持特征图空间维度不变的同时, 将通道数从1扩展至160。该层输出经过ReLU激活函数和通道注意力机制(SE模块)的自适应特征加权。随后, 通过最大池化与平均池化的并行处理, 将特征图从 12×12 降维至 6×6 , 并将两种池化结果在通道维度拼接, 得到320通道的特征向量。接着, 通过第二层 3×3 卷积核(同样保持零填充策略), 进一步提取 6×6 特征图的空间信息, 再经过SE模块进行通道加权。最后, 再次通过池化层将特征图进一步降维至 3×3 尺寸, 并将双池化结果合并为640通道的特征, 经过展平操作后, 形成长度为5760的特征向量, 随后通

过两层全连接层逐步降维至1维输出。这相当于将原始144个特征映射为5760个特征向量。这种深度特征表示提供了更丰富、更具体的材料表征, 使得CNN-SE模型能够充分预测钙钛矿的带隙。

2.3 评估指标

在本研究中, 深度学习模型的实现基于Py-Torch^[35]框架, 同时使用Scikit-learn (sklearn)^[36]库进行数据预处理和机器学习模型的对比实验。模型各参数均经调优设定, 其中, epoch设置为200, batch size为32, 学习率为0.0001。

本文选取平均绝对误差(mean absolute error, MAE)、均方根误差(root-mean-square error, RMSE)和决定系数(R^2)作为评价标准。MAE衡量预测误差的平均幅度, MAE值越小, 表示模型的预测精度越高。

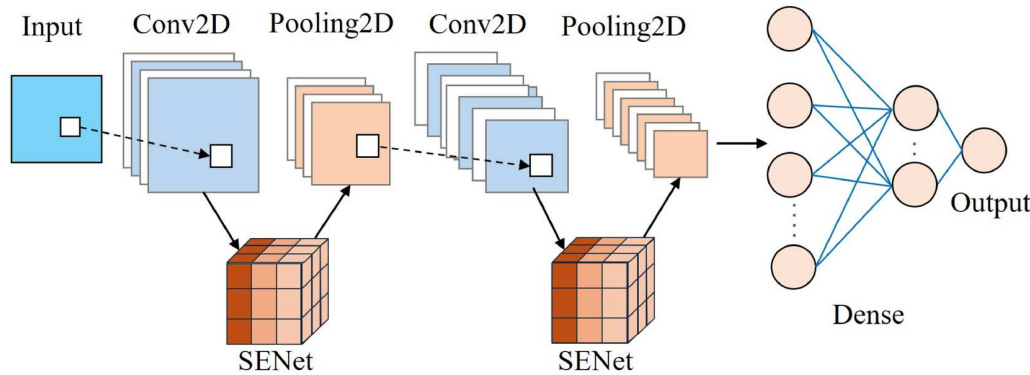


图 3 (网络版彩图) CNN-SE网络模型结构
Figure 3 (Color online) Architecture of CNN-SE model.

表 2 CNN-SE模型各层网络参数
Table 2 CNN-SE model network layer parameters

Layers	Input channels	Output channels	Size of output features	Kernel size
Conv2D	1	160	12×12	3×3
SENet	160	160	12×12	3×3
Pooling2D	160	320	6×6	3×3
Conv2D	320	320	6×6	3×3
SENet	320	320	6×6	3×3
Pooling2D	320	640	3×3	3×3
Dense	640	320	3×3	3×3
Dense	320	1	3×3	3×3

RMSE衡量模型预测值与真实值之间的偏差, 其值越小, 表明模型的预测精度越高. 而 R^2 衡量模型对数据波动的解释能力, 其值越接近1, 表示模型的拟合效果越佳.

3 结果与讨论

3.1 模型评估

在之前的研究中, Chen等人^[29]开发了一个利用机器学习算法预测无机钙钛矿带隙的模型, 他们应用了六种机器学习模型(DT, RF, SVR, Ridge, XGBoost以及MLPR), 其中XGBoost模型以 $R^2 = 0.873$ 和RMSE = 0.587 eV取得最佳性能. 为了验证CNN-SE模型预测能力, 本文按照同样的训练集和测试集划分方式, 90%的数据用于训练, 10%用于测试, 并采用10折交叉验证确保分析稳健性. 然后在相同的数据集上进行对比, 测试集的结果如表3所示.

在机器学习模型中, XGBoost表现最佳($R^2 = 0.873$, RMSE = 0.587 eV), 这一结果与Chen等人的结果相近. 相比之下, 本文提出的CNN-SE模型实现了显

著性能提升, 取得了最高的决定系数($R^2 = 0.917$), 均方根误差和平均绝对误差相比XGBoost模型分别降低了0.094和0.045 eV.

图4显示了该模型在训练集和测试集上的拟合结果. 在图4(a)的训练集结果中 R^2 高达0.976, 且误差指标表现优异(RMSE = 0.254 eV, MAE = 0.153 eV), 说明模型在训练数据上具有极高的拟合精度. 图4(b)的测试集结果中, R^2 为0.917, 数据点仍保持明显的线性分布趋势, 进一步验证该模型的预测能力.

图5展示了与带隙相关性最高的前10个特征的皮尔逊相关系数热力图. 其中, 各特征间无多重共线性, 过渡金属占比(transition metal fraction, $r = -0.46$)与带隙呈中等强度负相关, P价态占比(P valence fraction, $r = 0.35$)与带隙呈弱正相关; 其余特征与带隙的线性相关性均较弱, 表明带隙受多因素协同调控, 非线性特征显著.

为了进一步验证本文所提出模型的泛化性, 本文在一个独立的外部数据集上对其进行了评估. 该数据集包含5329个ABO₃型钙钛矿化合物, 其带隙值源于文

表 3 不同模型性能评估结果

Table 3 Evaluation results of different models

Model	DT	RF	SVR	Ridge	MLPR	XGBoost	CNN-SE
MAE	0.524	0.419	0.493	0.789	0.437	0.361	0.316
RMSE	0.810	0.626	0.776	1.017	0.629	0.587	0.493
R^2	0.752	0.852	0.783	0.657	0.851	0.873	0.917

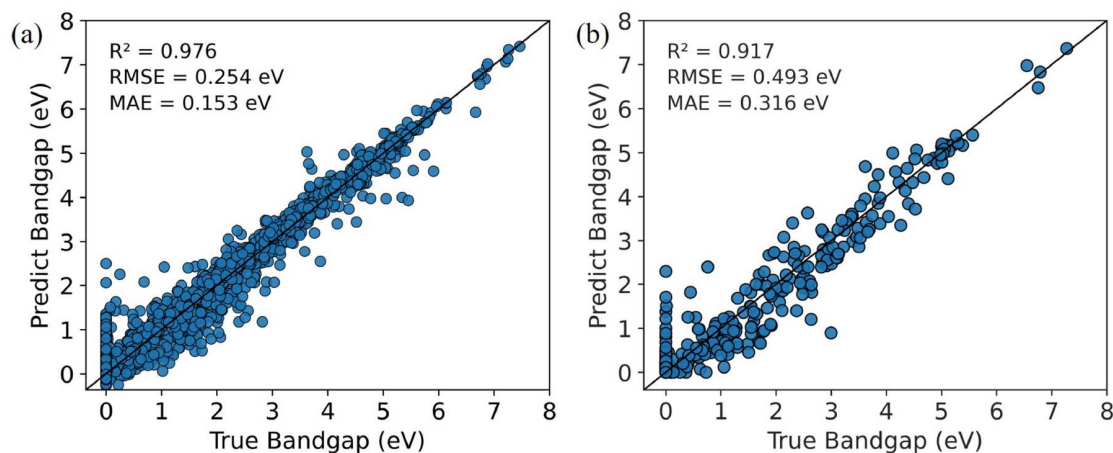


图 4 (网络版彩图) CNN-SE模型预测值与真实值的对比图. (a), (b) 训练集和测试集的结果

Figure 4 (Color online) Comparison between predicted and true values by CNN-SE model. (a), (b) Results for the training set and the test set.

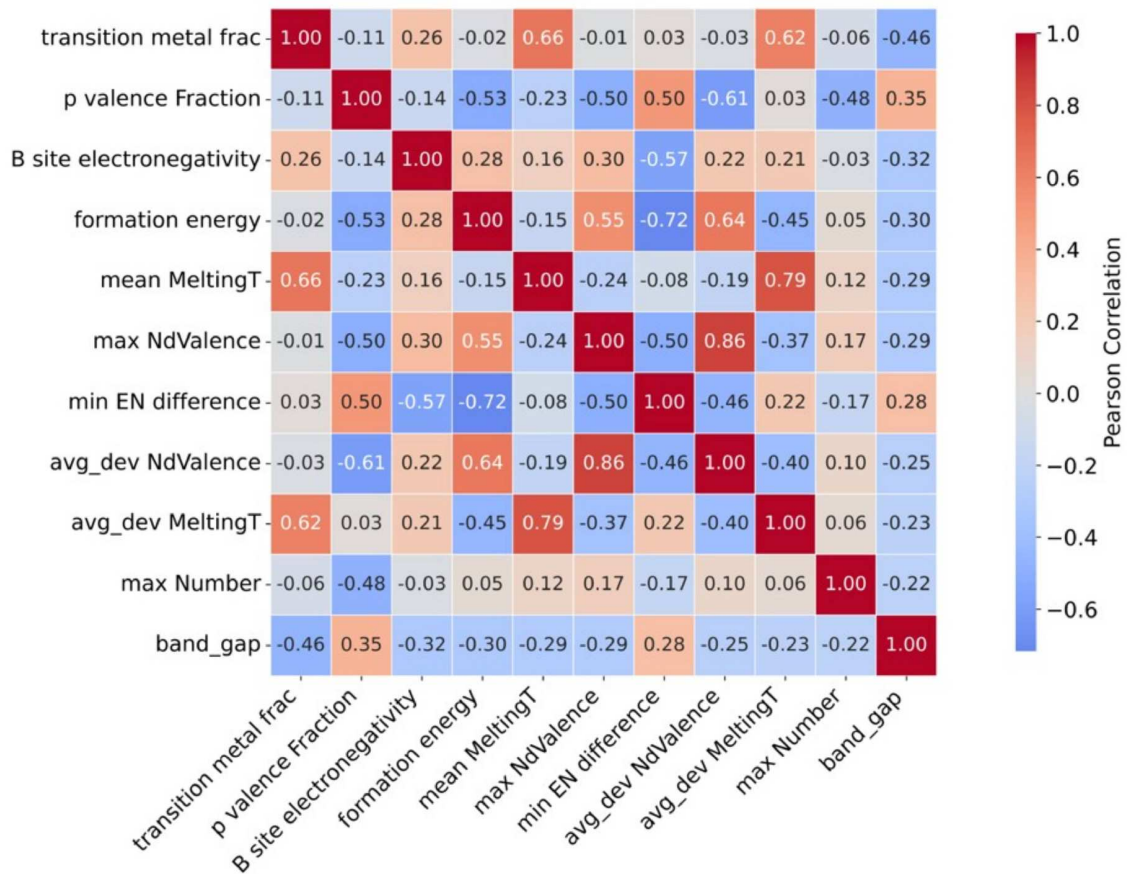


图 5 (网络版彩图)与带隙相关性最高的前10个特征的皮尔逊相关系数热力图
Figure 5 (Color online) Pearson correlation coefficient heatmap of the top 10 features most correlated with bandgap.

献[37]报道的DFT计算, 范围覆盖0~6 eV, 包括离子半径、形成能、稳定性、磁矩、每原子体积、带隙、晶格常数、氧空位形成能等特征. 为了保证未知数据集预测的准确性, 从该数据集中去除了原始训练集中已存在的化合物, 然后采用相同的特征工程, 最终保留4906个模型完全未见过的样本, 构成一个独立测试集. 在此测试集上, CNN-SE模型取得 $R^2 = 0.936$, $RMSE = 0.204$ eV的性能表现. 尽管数据来源不同, 但模型还保持了较高的预测精度. 这一结果有力地证明了CNN-SE模型能够有效地学习钙钛矿材料带隙的通用物理规律, 而非仅拟合特定数据集, 这为其在实际材料筛选中提供了有力支持.

3.2 SHAP分析

SHAP是一种基于博弈论中的Shapley值的模型解

释方法, 可以探索特征背后的潜在物理规律和化学意义[38]. 图6展示了特征贡献的总体分布, 这些特征的具体名称与物理含义如表4所示. 在图6中, 正SHAP值表示目标属性的较高值, 而负SHAP值表示目标属性的值较低, 可以看到形成能对模型输出的贡献最为显著. 形成能直接关联材料的热力学稳定性, 高形成能倾向于对应窄带隙, 而低形成能则与宽带隙相关. p轨道价电子数是另一关键因素, 它表征了材料中p区元素的价电子构成, 这些电子直接参与形成价带, 进而影响带隙. 未填充d轨道电子数和B点位电负性也具有高重要性, B位元素的高电负性有利于获得窄带隙钙钛矿, Chen等人也在研究中也得出了类似结论[29]. 通过与模型解释方法相结合, 我们可以从数据中推断出相关的物理性质, 从而可以设计出理想带隙的钙钛矿材料.

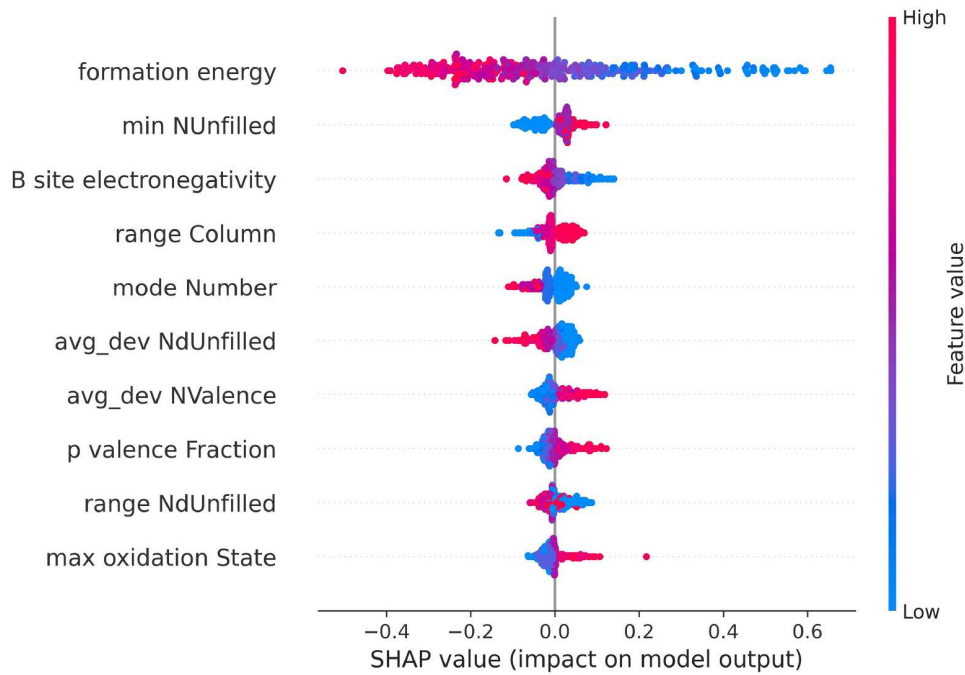


图 6 (网络版彩图)基于SHAP计算得到的重要性汇总图, 该图显示了某个特征的值如何影响带隙的预测结果. 其中每个点为样本, X 轴为SHAP值(特征贡献), Y 轴为特征名称; 红色代表高特征值, 蓝色代表低特征值

Figure 6 (Color online) The SHAP summary plot illustrates how each feature value influences the bandgap prediction. The X -axis represents the SHAP value (feature contribution), and the Y -axis lists the feature names. Red indicates a high feature value, while blue indicates a low feature value.

3.3 消融实验

为验证提出模型的有效性, 针对不同模块及池化策略进行了系统的消融实验, 并以 R^2 与RMSE作为评估指标. 实验以仅使用单一池化方式的CNN模型作为基准(CNN-Avg与CNN-Max), 逐步引入双池化并行结构(CNN-DualPool), 并进一步融合通道注意力机制,

最终构建出完整模型. 消融实验设置如下所示:

- (1) 基准模型——仅含2个 3×3 卷积层+单一平均池化+全连接层(无双池化、无注意力);
- (2) CNN+双池化(在基准模型基础上加入最大池化与平均池化并行结构);
- (3) CNN+双池化+通道注意力(完整CNN-SE模型).

结果如图7所示. 在基准模型基础上, 引入最大池化与平均池化并行使用结构后, 模型 R^2 指标提升了约1%, 该提升表明双池化结构能更全面地提取特征的不同层面信息: 最大池化有助于保留如形成能、电负性等关键特征的局部极值响应, 从而突出材料特性中的关键极值信息; 而平均池化则捕捉整体特征分布的全局趋势, 避免因局部波动导致的特征不稳定. 二者结合有效弥补了单一池化可能引起的特征信息丢失, 增强了模型对描述符中隐含信息的提取能力.

进一步融合通道注意力机制后, 模型性能取得了最显著提升(R^2 进一步提升约2.7%). 该机制的核心作用是通过可学习的权重, 对不同特征通道的重要性进

表 4 基于SHAP得到的重要性特征及其含义

Table 4 Key features and meanings from SHAP analysis

特征名称	含义
formation energy	形成能
min NUnfilled	最小未填充电子数
B site electronegativity	B位电负性
range Column	原子列数极差
mode Number	原子序数均值
dev NdUnfilled	d轨道未填充电子数偏差
dev NValence	价电子数偏差
p valence Fraction	p轨道价电子分数
range NdUnfilled	d轨道未填充电子数极差
max oxidation State	最高氧化态

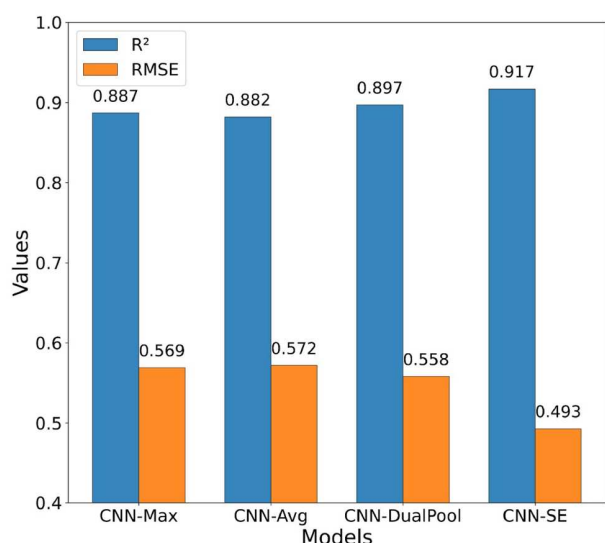


图7 (网络版彩图) CNN-SE模型与基准模型预测结果对比
Figure 7 (Color online) Comparison of predicted results between the CNN-SE model and baseline models.

行自适应评估与加权。这种优化直接体现在模型决策过程的变化上,如图8所示,引入注意力机制后,模型

对关键特征的利用效率显著提高。具体而言,注意力机制从不同层面强化了关键特征:在电子结构层面,p轨道价电子数的贡献度提升最为显著(60.9%),未填充d轨道电子数也大幅增强(37%);在化学键层面,B位电负性的贡献提升了54.2%;在稳定性层面,形成能的贡献提升了13.6%;而重要性较低的特征如氧化态则提升微弱(1.7%)。值得注意的是,特征“最小未填充电子数”的SHAP值下降了8.9%,而“未填充d轨道电子数偏差”和“极差”分别提升37.0%和24.7%。这是因为带隙主要由B位与B'位的轨道能量差异共同决定,“偏差”和“极差”比单一的“最小值”更能全面反映电子结构。这证明注意力机制并非均匀提升所有特征的作用,而是通过自适应权重分配,选择性地强化与带隙强关联的特征通道在最终决策中的影响力。这种特征选择和加权机制与双池化层的多层次特征提取能力共同构建了一个高效的特征处理流程,最终使CNN-SE模型在 R^2 与RMSE上均取得最优性能,验证了整体架构设计的合理性。

为进一步探究模型性能是否受钙钛矿类型的影

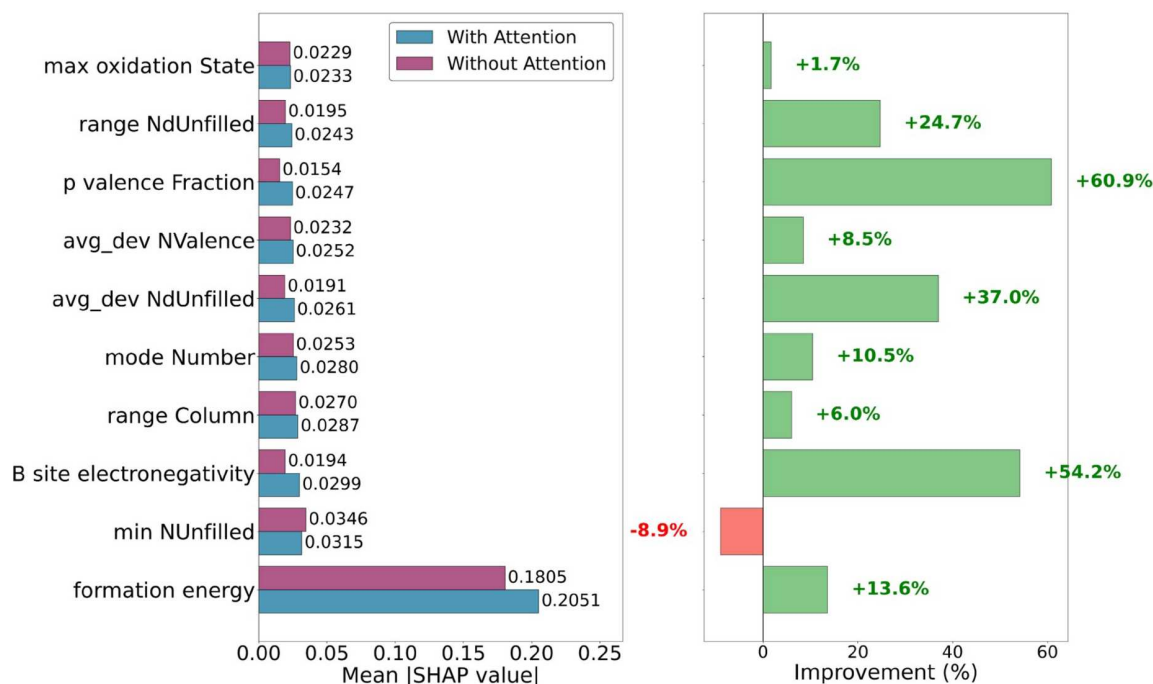


图8 (网络版彩图)注意力机制对不同特征重要性的影响评估。图中对比了模型在有无注意力机制下的各输入特征的SHAP值,柱状图上方百分比数值代表引入注意力机制后,各特征SHAP值(即对模型输出的贡献度)的相对提升百分比

Figure 8 (Color online) Impact of attention mechanism on the importance of different features. The chart compares the SHAP values of each input feature for the model with and without the attention mechanism. The percentage values above the bars represent the relative increase in the SHAP value (the contribution to the model output) of each feature after introducing the attention mechanism.

表 5 不同模型在单、双钙钛矿子集上的性能对比**Table 5** Performance comparison of different models on single and double perovskite subsets

材料类型	模型	R^2	RMSE	MAE
单钙钛矿 ($n = 1378$)	基准模型	0.928	0.450	0.294
	双池化模型	0.943	0.398	0.261
	CNN-SE	0.959	0.342	0.208
双钙钛矿 ($n = 1698$)	基准模型	0.933	0.438	0.284
	双池化模型	0.949	0.363	0.247
	CNN-SE	0.963	0.307	0.191

响, 本文将测试集按材料类型分为单钙钛矿(ABX_3)和双钙钛矿($A_2BB'X_6$)两个子集, 分别评估了基准模型、双池化模型和完整CNN-SE模型在两类材料上的预测性能, 结果如表5所示。

从表5可以看出, 在单钙钛矿子集上, 双池化结构使 R^2 从0.928提升至0.943, 注意力机制进一步将 R^2 提升至0.959; 在双钙钛矿子集上, 双池化结构使 R^2 从0.933提升至0.949, 注意力机制进一步将 R^2 提升至0.963。两类材料上的提升趋势基本一致, 表明双池化结构与注意力机制的有效性不依赖于钙钛矿的具体类型, 具有良好的泛化能力。

3.4 讨论

我们发现模型在带隙接近0区域的预测误差显著高于宽带隙区域。这主要是因为当带隙趋近0时, 材料电子结构处于金属-半导体相变的临界状态, 原子结构的微小扰动(如键长、键角变化)易导致能级交叉, 使带隙发生不连续跳变^[39]。这种突变特性使得回归模型难以通过平滑函数进行准确拟合。此外, DFT计算本身在0附近存在数值噪声, 0与0.01 eV在物理上难以精确区分, 导致数据标签存在一定模糊性^[40]。针对这一问题, 未来工作拟采用“分类-回归”两阶段策略: 首先利用分类模型判断材料为金属还是半导体, 再对半导体材料进行带隙数值的回归预测。该策略已在部分材料性质预测研究中被证明有效。

本研究使用的带隙数据主要源自Materials Project数据库, 这些数据基于高通量密度泛函理论(density functional theory, DFT)计算获得。需要指出的是, 由于标准DFT方法有局限性, 计算得到的带隙值通常系统性低于实验值或更精确的GW计算结果。因此, 本文模型所输出的带隙预测值, 在数值精度上受限于训练数

据, 不能直接等同于实验测量值。尽管如此, 本研究在当前数据框架下还具有重要的科学价值。首先大量基于Materials Project数据库的机器学习研究^[41,42]表明虽然DFT数据存在系统性低估, 但是其反映的材料相对变化趋势是可靠的, 适用于高通量筛选。其次, DFT带来的误差主要表现为系统性偏差, 而非随机噪声。这意味着模型所学习到的特征关系是正确的, 只是输出存在整体偏移。因此, 本研究通过SHAP分析揭示的物理规律以及模型对材料带隙相对高低的排序能力, 对实际材料设计仍具有明确的指导意义。在后续的工作中, 可利用少量高精度实验数据或GW计算数据对模型输出进行校准, 以进一步提高其定量预测的准确性。

4 结论

本文以 ABX_3 型和 $A_2BB'X_3$ 型钙钛矿为研究对象, 提出了一种融合通道注意力机制的卷积神经网络模型用于实现对钙钛矿带隙的预测。结果表明, 所提出的模型在测试集上取得了 $R^2 = 0.917$, $RMSE = 0.493$ eV的优异性能, 显著优于传统机器学习模型。同时基于SHAP的可解释性分析揭示了形成能、p轨道价电子数、B位电负性和未填充d轨道电子数等是影响钙钛矿带隙预测的关键特征。另外通过消融实验证实双池化结构相较于单一池化方式, 能更全面地捕捉特征信息, 使模型 R^2 提升约1%; 通道注意力机制通过抑制冗余通道、强化关键通道贡献, 进一步将模型 R^2 提升2.7%, 二者共同作用显著提升了模型的表达与预测能力。本研究为钙钛矿材料提供了一个快速可靠的带隙预测工具, 有助于加速新材料的研发过程, 并为目标带隙钙钛矿的定向设计与高通量筛选提供了坚实的理论指导与数据支持。

参考文献

- 1 Xu P, Ji X, Li M, et al. Small data machine learning in materials science. *npj Comput Mater*, 2023, 9: 42
- 2 Hu W, Zhang L, Pan Z. Designing two-dimensional halide perovskites based on high-throughput calculations and machine learning. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2022, 14: 21596–21604
- 3 Zheng W, Wang X, Zhang X, et al. Emerging halide perovskite ferroelectrics. *Adv Mater*, 2023, 35: 2205410
- 4 Kim J Y, Lee J W, Jung H S, et al. High-efficiency perovskite solar cells. *Chem Rev*, 2020, 120: 7867–7918
- 5 Suresh Kumar N, Chandra Babu Naidu K. A review on perovskite solar cells (PSCs), materials and applications. *J Materiomics*, 2021, 7: 940–956
- 6 Liu X K, Xu W, Bai S, et al. Metal halide perovskites for light-emitting diodes. *Nat Mater*, 2021, 20: 10–21
- 7 Heimbrook A, Higgins K, Kalinin S V, et al. Exploring the physics of cesium lead halide perovskite quantum dots via Bayesian inference of the photoluminescence spectra in automated experiment. *Nanophotonics*, 2021, 10: 1977–1989
- 8 Ma Y, Shan L, Ying Y, et al. Day-Night imaging without Infrared Cutoff removal based on metal-gradient perovskite single crystal photodetector. *Nat Commun*, 2024, 15: 7516
- 9 Curtarolo S, Hart G L W, Nardelli M B, et al. The high-throughput highway to computational materials design. *Nat Mater*, 2013, 12: 191–201
- 10 Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys Rev*, 1965, 140: A1133–A1138
- 11 Wang Z, Yang M, Xie X, et al. Applications of machine learning in perovskite materials. *Adv Compos Hybrid Mater*, 2022, 5: 2700–2720
- 12 Bhattacharjee B, Mukherjee S. Modern machine learning and particle physics: An in-depth review. *Eur Phys J Spec Top*, 2024, 233: 2421–2424
- 13 Yao W, Jia W, Shen R, et al. Machine learning prediction of bandgap and formation energy in two-dimensional metal oxides. *Physica B-Condensed Matter*, 2025, 717: 417821
- 14 Chen J, Song Y Y, Li S Z, et al. Machine-learning-based prediction of cubic perovskite formation energy and magnetism. *Sci Sin Tech*, 2024, 54: 247–256
- 15 Breiman L. Random forests. *Machine Learn*, 2001, 45: 5–32
- 16 Ribeiro M T, Singh S, Guestrin C. Why should I trust you? Explaining the predictions of any classifier. In: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 2016. 1135–1144
- 17 Wu Y R, Li H P, Gan X S. SVM regression modeling based on properties of engineering materials with PLS feature extraction. *Adv Mater Res*, 2014, 848: 122–125
- 18 Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 1986, 323: 533–536
- 19 Gao Z, Zhang H, Mao G, et al. Screening for lead-free inorganic double perovskites with suitable band gaps and high stability using combined machine learning and DFT calculation. *Appl Surf Sci*, 2021, 568: 150916
- 20 Cai X, Li Y, Liu J, et al. Discovery of all-inorganic lead-free perovskites with high photovoltaic performance via ensemble machine learning. *Mater Horiz*, 2023, 10: 5288–5297
- 21 Yang C, Chong X, Hu M, et al. Accelerating the discovery of hybrid perovskites with targeted band gaps via interpretable machine learning. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2023, 15: 40419–40427
- 22 Friedman J H. Greedy function approximation: A gradient boosting machine. *Ann Statist*, 2001, 29: 1189–1232
- 23 Tang Y, Xiao B, Ihara M, et al. Effects of nonlinearity and inter-feature coupling in machine learning studies of Nb alloys with center-environment features. *J Mater Inf*, 2025, 5: 38
- 24 Tan Y S, Agarwal A, Yu B. A cautionary tale on fitting decision trees to data from additive models: Generalization lower bounds. In: Proceedings of the International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, PMLR. 2022. 9663–9685
- 25 Lecun Y, Bottou L, Bengio Y, et al. Gradient-based learning applied to document recognition. *Proc IEEE*, 2002, 86: 2278–2324
- 26 Xie T, Grossman J C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 145301
- 27 Louis S Y, Zhao Y, Nasiri A, et al. Graph convolutional neural networks with global attention for improved materials property prediction. *Phys Chem Chem Phys*, 2020, 22: 18141–18148
- 28 Hu J, Shen L, Sun G. Squeeze-and-excitation networks. In: Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2018. 7132–7141
- 29 Chen Z, Wang J, Li C, et al. Highly versatile and accurate machine learning methods for predicting perovskite properties. *J Mater Chem C*, 2024,

12: 15444–15453

- 30 Jain A, Ong S P, Hautier G, et al. Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. [APL Mater](#), 2013, 1: 011002
- 31 Ong S P, Richards W D, Jain A, et al. Python Materials Genomics (pymatgen): A robust, open-source python library for materials analysis. [Comput Mater Sci](#), 2013, 68: 314–319
- 32 Ward L, Dunn A, Faghaninia A, et al. Matminer: An open source toolkit for materials data mining. [Comput Mater Sci](#), 2018, 152: 60–69
- 33 Ward L, Agrawal A, Choudhary A, et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials. [npj Comput Mater](#), 2016, 2: 1–7
- 34 Meredig B, Agrawal A, Kirklin S, et al. Combinatorial screening for new materials in unconstrained composition space with machine learning. [Phys Rev B](#), 2014, 89: 094104
- 35 Paszke A, Gross S, Massa F, et al. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In: Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems. 2019. 8026–8037
- 36 Pedregosa F, Varoquaux G, Gramfort A, et al. Scikit-learn: Machine learning in Python. *J Mach Learn Res*, 2011, 12: 2825–2830
- 37 Emery A A, Wolverton C. High-throughput DFT calculations of formation energy, stability and oxygen vacancy formation energy of ABO₃ perovskites. [Sci Data](#), 2017, 4: 1
- 38 Lundberg S M, Lee S I. A unified approach to interpreting model predictions. In: Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems. 2017. 4768–4777
- 39 Guo L X, Wan L L, Si L G, et al. Topological amplification and frequency conversion in a photonic lattice with a two-photon driving. [Phys Rev A](#), 2023, 108: 013512
- 40 Perdew J P, Levy M. Physical content of the exact Kohn-Sham orbital energies: Band gaps and derivative discontinuities. [Phys Rev Lett](#), 1983, 51: 1884–1887
- 41 Jung S G, Jung G, Cole J M. Automatic prediction of band gaps of inorganic materials using a gradient boosted and statistical feature selection workflow. [J Chem Inf Model](#), 2024, 64: 1187–1200
- 42 Chaube S, Khullar P, Goverapet Srinivasan S, et al. A statistical learning framework for accelerated bandgap prediction of inorganic compounds. [J Elec Materi](#), 2020, 49: 752–762

A convolutional neural network model for predicting perovskite bandgaps

WANG HongBo^{1,2} & ZHANG WeiBing^{1,2}

¹ Key Laboratory of Genetic Engineering of Flexible Electronic Materials of Hunan Province, Changsha 410114, China

² School of Physics and Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China

Accurate prediction of bandgaps is a critical issue in the semiconductor field. This paper proposes a convolutional neural network model incorporating a channel attention mechanism to achieve accurate and rapid bandgap prediction of perovskite materials. Based on data of ABX₃-type single perovskites and A₂BB'X₆-type double perovskites, the model employs a dual-pooling parallel structure to collaboratively extract both local extrema and global distribution information of features, and introduces a channel attention mechanism to adaptively weight bandgap-related feature channels, thereby enhancing the recognition of key features. On the test set, the model achieved strong predictive performance with $R^2 = 0.917$ and RMSE = 0.493 eV, significantly outperforming traditional machine learning models such as XGBoost. When applied to an independent external test set, the model maintained a robust generalization capability with $R^2 = 0.936$. Through interpretability analysis and ablation experiments, key features influencing the bandgap, such as formation energy, B-site electronegativity, p-orbital valence electron count, and unfilled d-orbital electron count, were further revealed. The effectiveness of the dual-pooling structure and the attention mechanism in improving model performance was also validated. This study establishes an efficient and reliable bandgap prediction model for perovskites, providing theoretical guidance and data support for the design and high-throughput screening of target-bandgap materials, which contributes to accelerating the development of new materials.

perovskite, band gap, convolutional neural network, channel attention mechanism

doi: [10.1360/SST-2026-0056](https://doi.org/10.1360/SST-2026-0056)