

申报 2020 年度高等学校科学研究优秀成果奖（科学技术）项目公示材料

一、项目名称：

微波介质陶瓷的晶格动力学研究及其结构/性能调控

二、提名单位：

山东师范大学

三、项目简介：

微波介质陶瓷是应用于微波频段（300MHz~300GHz）电路中作为介质材料并完成一种或多种功能的陶瓷，广泛应用于通信、雷达、导航、电子对抗、全球卫星定位系统（GPS）等领域，是现代通信技术的关键基础材料。微波介质陶瓷的介电性能主要包括三个关键参数：相对介电常数 ϵ_r 、品质因数 $Q \times f$ 以及谐振频率温度系数 τ_f 。微波介电性能强烈依赖于晶体结构，而晶体结构又可以通过组分裁剪进行调控。如何明确微波介质陶瓷的组分-结构-性能调控的关系一直是该领域的研究焦点和基础性课题。

该项目通过深入系统研究多种体系的结构-性能关系，详细分析组分对化合物的晶体结构、有序/无序相变、有序畴、电子结构、氧八面体倾斜以及晶格振动特性等的影响规律。进一步研究介电性能的本源及影响因素，从原子/分子层面阐释材料介电响应的物理机理，从本质上解释和预测陶瓷的介电性能（基本属性），从晶体中原子的热振动出发讨论晶体的宏观物性（晶格动力学）。在多种结构化合物中寻找综合性能优良的微波介质陶瓷，阐明其成分、结构和性能之间的内在联系，获得组分裁剪和工艺参数变化对微波陶瓷材料进行协调改性的重要指南。

本项目总计发表 SCI 论文 100 余篇，列出主要代表性论文 5 篇。

三、主要完成人情况表：

排名	姓名	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目技术创造性贡献
1	石锋	教授	齐鲁工业大学	山东师范大学	主要完成声子特性研究和多种结构微波陶瓷结构-性能关系构建
2	王春海	副教授	西北工业大学	北京大学	完成对钙钛矿结构微波陶瓷声子模式的第一性原理计算、描述与光谱指认
3	荆西平	副教授	北京大学	北京大学	对部分结构微波陶瓷声子模式确认和精确描述完成第一性原理计算

四、主要完成单位

山东师范大学, 长期从事包括钙钛矿和复合钙钛矿微波介质陶瓷的晶格动力学研究, 利用声子模式建立了结构-性能关系;

北京大学, 针对多种结构微波陶瓷的声子模式的指认和描述做了大量工作。

五、代表性论文目录:

1. Chun-Hai Wang, **Xi-Ping Jing***, Wei Feng, and Jing Lu, Assignment of raman-active vibrational modes of MgTiO₃, *Journal of Applied Physics*, 2008, 104(3): 034112.
2. Chun-Hai Wang, **Xi-Ping Jing***, Lu Wang, Jing Lu, XRD and Raman Studies on the Ordering/Disordering of Ba(Mg_{1/3}Ta_{2/3})O₃, *Journal of the American Ceramic Society*, 2009, 92(7): 1547-155.
3. Chuanling Diao, **Feng Shi***, Correlation Among Dielectric Properties, Vibrational Modes and Crystal Structures in Ba[Sn_xZn_{(1-x)/3}Nb_{2(1-x)/3}]O₃ Solid Solutions, *Journal of Physical Chemistry C*, 2012, 116 (12): 6852–6858.

4. **Feng Shi***, Helei Dong, Correlation of Crystal Structure, Dielectric Properties and Lattice Vibration Spectra of $(\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x)(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ Solid Solutions, *Dalton Transactions*, 2011,40(25): 6659-6667.
5. Chuanling Diao, Chunhai Wang, Nengneng Luo, Zeming Qi, Tao Shao, Yuyin Wang, Jing Lu, Quanchao Wang, Xiaojun Kuang, Liang Fang, **Feng Shi***, and **Xi-Ping Jing***, First- Principle Calculation and Assignment for Vibrational Spectra of $\text{Ba}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ Microwave Dielectric Ceramic, *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(11), 114103.