

2021 年度山东省科学技术奖（自然科学奖）提名公示

项目名称：基于晶格振动的钙钛矿结构微波陶瓷的固有属性与构效关系研究

提名者及提名意见：

提名者： 山东师范大学

提名等级： 自然科学二等奖

提名意见：我单位认真审阅了该项目的推荐书及附件材料，确认全部材料真实有效，相关栏目符合山东省科学技术奖励委员会办公室的填写要求。按照要求，我单位和项目完成单位都已经对该项目的拟推荐情况进行了公示，公示期间无异议。该项目针对微波陶瓷研究中存在的“炒菜”现象和普遍采用的“试错”方法，对钙钛矿结构微波陶瓷的晶格振动进行了深入研究，以第一性原理结合群论为工具，取得了一系列高水平研究成果：1. 结合第一性原理方法剖析声子特性，对声子模式进行了精确指认和描述，突破了无机非金属氧化物材料在复杂氧环境下晶格振动模式难以标准化的难题。2. 解析了介电性能的成因和影响因素，从原子/分子层面阐明其介电响应机制；从本质上解释和预测陶瓷的本征性能，研究了不同格位原子对各声子模式的贡献，指出了各晶格振动峰的精细原子振动形式及其贡献，阐明其成分、结构和性能之间的内在联系，深入认识其固有属性，为其他无机非金属氧化物材料的声子特性分析奠定了坚实的基础。3. 从微观的角度研究宏观问题，掌握了多种结构微波陶瓷在复杂氧环境下的固有属性，分析了拉曼声子模式与微波介电性能的关系；利用四参数模型拟合了微波陶瓷的介电性质，揭示了红外声子模式与陶瓷介电性能之间的关系。4. 以声子模式为媒介建立了多种结构微波陶瓷的组分-结构-性能关系；并进一步分析了不同的烧结温度烧结时间等工艺参数对多种结构微波陶瓷结构-性能关系（构效关系）的影响；最终构筑了微波介质陶瓷结构/性能调控的理论框架，有利于从材料科学的高度指导微波陶瓷的设计。该项目涉及物理-化学-电子-晶体结构-计算科学等多学科交叉，目前国内外相关研究并不多。该项目解决了无机非金属氧化物材料在复杂氧环境下晶格振动模式难以标准化的难题，推动了微波陶瓷晶格振动光谱学研究，从材料本征属性出发研究宏观物性，为架构结构性能调控的精准物理模型提供了部

分数据支撑。研究成果获得国内外同行专家的广泛关注和高度评价。该项目符合山东省自然科学奖的提名条件，提名该项目为山东省自然科学二等奖。

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双钙钛矿结构、复合钙钛矿结构体系的构效关系，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），从晶体中原子的振动出发去讨论晶体的宏观物性（晶格动力学）。在钙钛矿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 68 篇，列出主要代表性论文 5 篇。

代表性论文专著目录：

- 1) 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.
- 2) Chun-Hai Wang, **Xi-Ping Jing***, Lu Wang, Jing Lu, Assignment of Raman-active vibrational modes of MgTiO_3 , *Journal of Applied Physics*, 2008, 104(3): 034112.
- 3) Chun-Hai Wang, **Xi-Ping Jing***, Lu Wang, Jing Lu, XRD and Raman Studies on the Ordering/Disordering of $\text{Ba}(\text{Mg}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$, *Journal of the American Ceramic Society*, 2009, 92(7): 1547-155.

- 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, **Feng Shi***, Correlation Among Dielectric Properties, Vibrational Modes and Crystal Structures in $\text{Ba}[\text{Sn}_x\text{Zn}_{(1-x)/3}\text{Nb}_{2(1-x)/3}]\text{O}_3$ Solid Solutions, *Journal of Physical Chemistry C*, 2012, 116 (12): 6852-6858.

主要完成人情况:

1. 石锋, 男, 教授, 项目完成人, 主要完成声子特性研究和钙钛矿结构陶瓷结构-性能关系构建; 项目完成时单位是山东师范大学, 现工作单位是齐鲁工业大学(山东省科学院)。
2. 王春海, 男, 副教授, 项目完成人, 主要完成第一性原理计算和模拟拟合以及钙钛矿结构微波陶瓷的声子模式指认; 项目完成时单位是北京大学, 现工作单位是西北工业大学。
3. 戚泽明, 男, 项目研究员/副研究员, 项目完成人, 针对微波陶瓷的红外和远红外光谱进行测试、表征和分析; 项目完成单位和工作单位都是中国科学技术大学。
4. 荆西平, 男, 副教授, 项目完成人, 针对钙钛矿结构声子模式确认和精确描述以及以及第一性原理计算等科研成果的主要贡献者; 项目完成单位和工作单位都是北京大学。

完成单位情况:

1. 山东师范大学: 主要贡献在声子特性研究和钙钛矿结构陶瓷结构-性能关系构建方面。
2. 北京大学: 主要贡献在钙钛矿结构微波陶瓷的声子模式确认以及第一性原理计算等方面。
3. 中国科学技术大学: 主要贡献在于利用同步辐射红外谱学实验站, 进行微波陶瓷的红外谱学表征, 并进行红外谱学数据的拟合与分析。