
上海硅酸盐所在机器学习辅助微波介质陶瓷研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13631.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

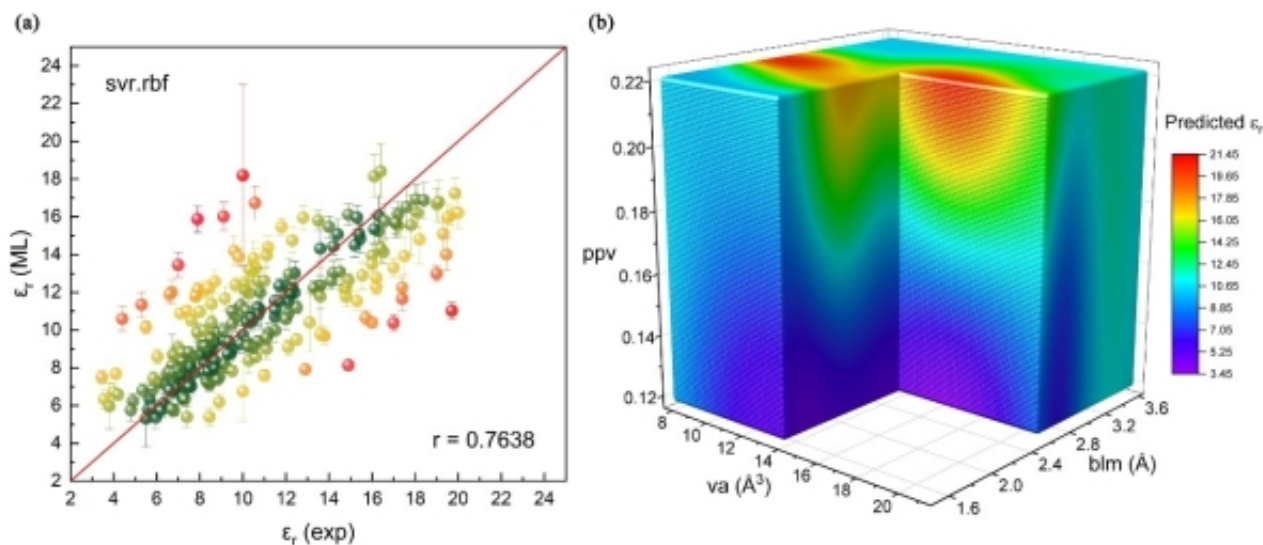
微波介质陶瓷作为微波集成电路基板、介质谐振器、介质天线等通信电子元器件的关键材料，近年来随着5G/6G技术的蓬勃发展，受到越来越广泛的关注。材料信息学借助机器学习等方法对数据进行建模分析，挖掘物理量之间的隐含关联，构建定量“构效关系”，从而加速新材料研发，目前已在一些材料研究领域得到运用并证实了其可靠性。然而，学界针对微波介质陶瓷材料的性能预测与理性设计的机器学习模型研究的报道较少。

近期，中国科学院上海硅酸盐研究所无源集成器件与材料研究团队采用机器学习方法，研究微波介质陶瓷的材料特征与介电性能之间的关系，提出了一种普适性强、准确性高的介电常数预测模型，并以此为依据预测了新的低介电常数微波介质材料。最优预测模型经过数据清洗、两步降维、模型超参数优化、特征量组合寻优和多算法对比等步骤获得。研究表明，除了降低单位体积离子极化率（ppv）之外，降低平均键长（blm）和提高每个原子所占的晶胞体积（va）都可有效降低材料介电常数。利用机器学习模型，从3,300余种未报道介电常数的无机材料中筛选出潜在的低介电常数材料，并从中选取了若干种进行制备和测试，验证了预测结果的可靠性。相关研究成果以Machine learning approaches for permittivity prediction and rational design of microwave dielectric ceramics为题，发表在Journal of Materiomics上。

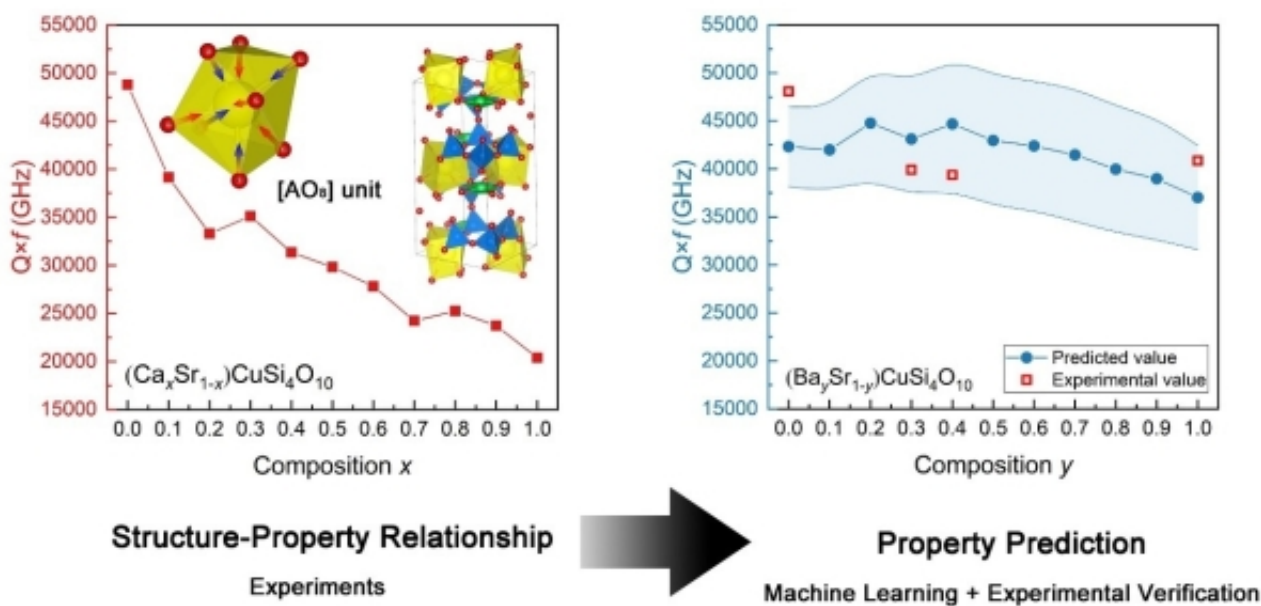
此外，研究人员还通过实验研究和机器学习相结合的方法，发现了材料局域结构与品质因数（ $Q \times f$ ）之间的定量关系。实验发现，硅铁钡矿型系列低介陶瓷 $ACuSi_4O_{10}$ （ $A = Ca, Sr, Ba$ ）中A位取代会引起[AO8]十二面体单元发生显著的收缩和畸变，且伴随 $Q \times f$ 值单调下降。基于实验数据，采用键长、键价和等多个基本属性描述[AO8]局域结构的变化，通过支持向量机方法构建 $Q \times f$ 值定量预测模型。模型发现，A-O2键长与A-O键长方差是 $Q \times f$ 值预测的决定性特征量。研究人员利用该定量构效关系对相同结构材料进行 $Q \times f$ 值预测，并得到实验验证。采用准光腔法，测试了材料在20 GHz-110 GHz毫米波频段下的介电常数和介电损耗。相关研究成果以Structure and microwave dielectric properties of gillespite-type $ACuSi_4O_{10}$ ($A = Ca, Sr, Ba$) ceramics and quantitative prediction of $Q \times f$ value via machine learning为题，发表在ACS Applied Materials Interfaces上。

相关研究工作得到国家重点研发计划项目、国家自然科学基金项目、中科院青年创新促进会和上海市青年科技启明星计划等的资助。

论文链接：[1](#)、[2](#)



(a) 介电常数机器学习预测模型的表现，(b) 预测介电常数在特征量空间中的分布



基于ACSO体系的微波介质陶瓷 $Q \times f$ 的模型预测与实验验证

研究团队单位：上海硅酸盐研究所

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发