

对称性原理:原因的对称性必然存在结果的对称性之中,也即结果的对称性必然 多于原因的对称性。

显然,结构与性能就是这种关系,结构的对称性必然存在于性能的对称性之中,性能的对称性要多于结构的对称性。

首先,在研究结构与性能关系时,对称性原理是二者对称性关系的诠释。这将帮助我们更好地理解结构与性能之间的关系。

其次,在科研过程当中,往往是以需求(性能)为导向,也就是说,我们需要设计或者调控一种性能,使其符合要求,那么在这时,选择材料的一个准则,就可以是对称性原理,根据性能的约束就可以知道结构的约束。例如,压电效应只能发生于无对称中心的晶体中,或者说只有唯一的极轴。因为根据电解质的电极化原理,晶体的极化性能可以表示为



显然,其对称性只有一个无穷对称轴,即唯一极轴。故而结构的对称性小于等于一根极轴,可以是唯一一根 n 次旋转轴或者唯一一根无穷旋转轴。也即无对称中心,唯一极轴。另外,如果存在对称中心,则必然存在与图中极化子方向相反,大小相同的另一极化子,使得极化相消,成为反铁电性,这也能够说明对称中心不允许存在于铁电性结构中。

此外,我们从实验室中得到一种材料,它的结构被解析后,我们可以借助对称性原理得到该材料是否具备某种性能,或者不具备某种性能。例如,具有对称中心的结构就不具备压电性或者铁电性。因此我们可以通过解析结构结合对称性原理预测材料的性能。