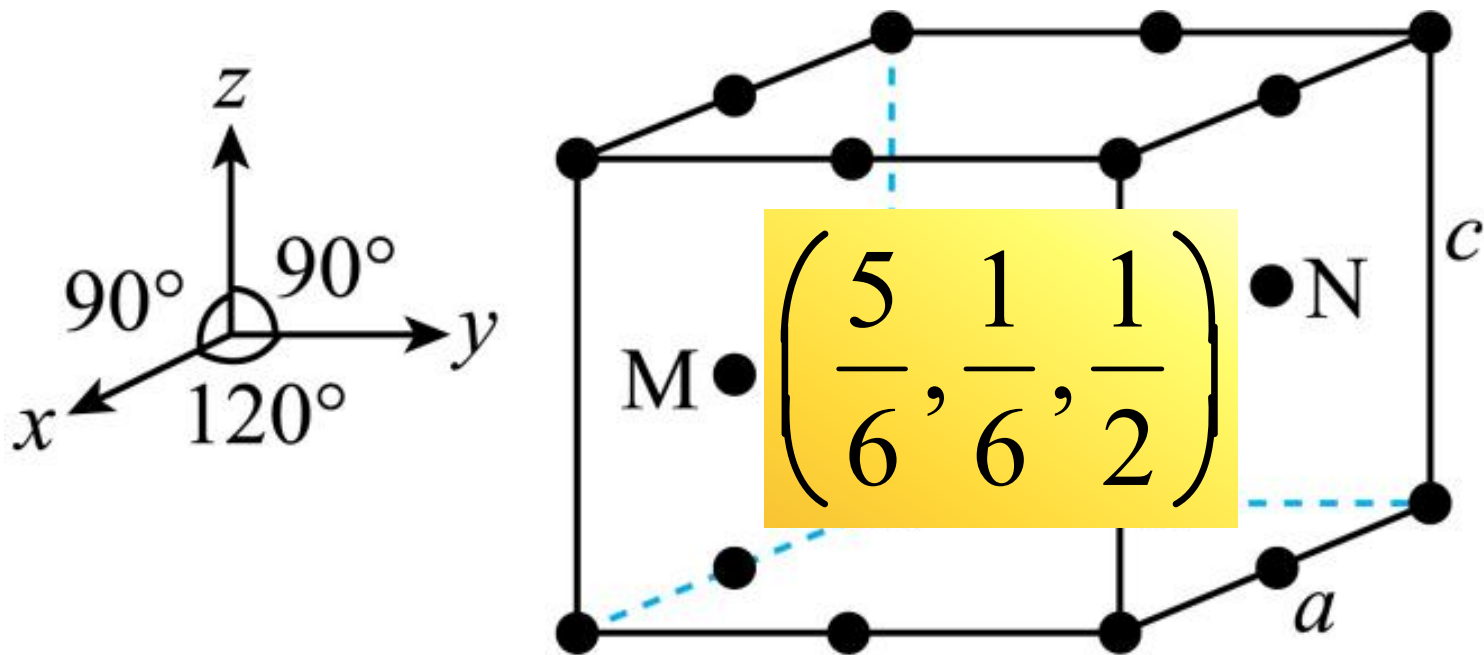




核心考点028

晶胞中原子的「分数坐标」



原子的 分数坐标

I. 知识

一、定义

二、取值范围

三、原子坐标种类

II. 例题

考点一、直角坐标系晶胞

考点二、六方晶胞

考点三、坐标与距离换算

考点四、原子坐标种类

建立原子坐标

以一个顶点为坐标原点，以 a 、 b 、 c 为坐标轴的单位建立坐标系，得到用 (x, y, z) 表示的碳、氧原子的原子坐标。 x, y, z 均为分数，表示该原子在晶胞中的相对位置。

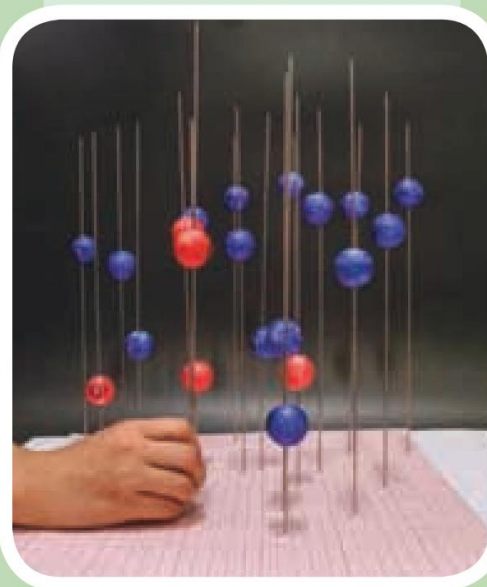


图3-4-4 搭建碳、氧原子

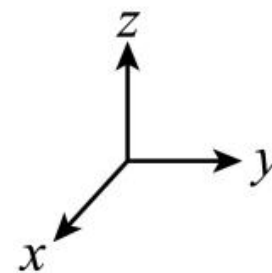
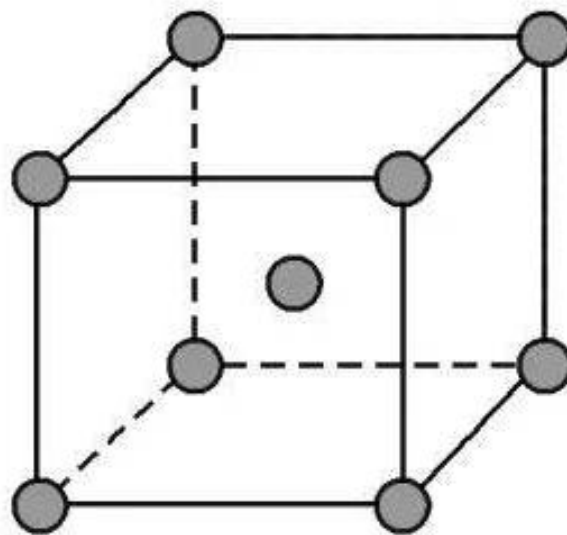
动手实践：

请依据青蒿素晶体中碳、氧原子坐标（等比例放大到宏观大小的尺度，由教师提供），利用泡沫板、泡沫球和毛衣针（或橡皮泥、竹签等其他的替代材料），搭建出青蒿素分子中的碳、氧原子在三维空间中的位置。

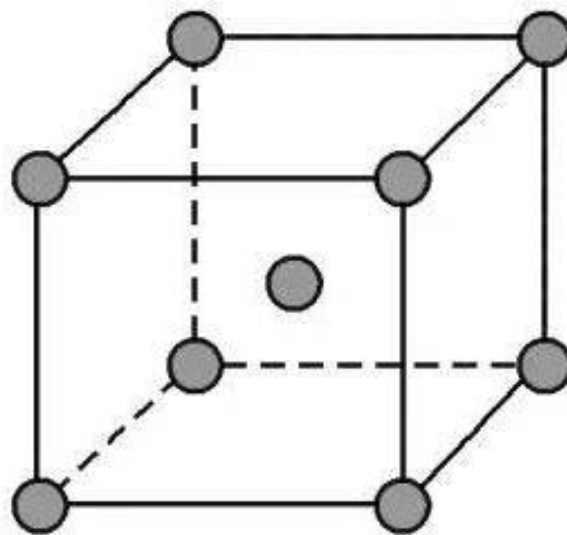
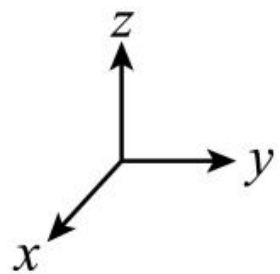
一、定义

建立原子坐标

以一个顶点为坐标原点，以 a 、 b 、 c 为坐标轴的单位建立坐标系，得到用 (x, y, z) 表示的碳、氧原子的原子坐标。 x 、 y 、 z 均为分数，表示该原子在晶胞中的相对位置。



二、取值范围



(3) 分数坐标

晶胞中某原子 P 的位置可用向量 $\overrightarrow{OP} = xa + yb + zc$ 代表, x 、 y 、 z 不会大于 1, 称为分数坐标。
原子位置常用分数坐标表示。

例如:

所有顶点原子: 0, 0, 0



化学教师用书 选择性必修 2 物质结构与性质

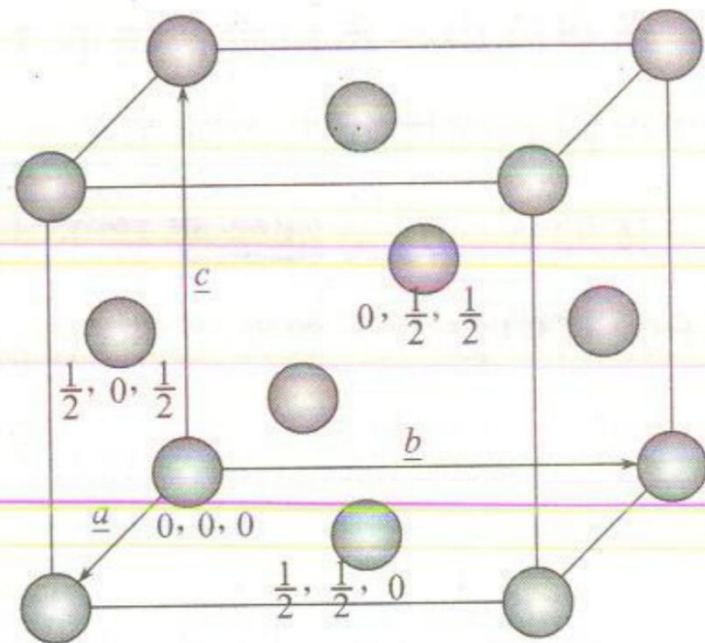
(前)后面心原子: $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

左(右)面心原子: $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$

(上)下面心原子: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$

参考资料

[1] 中华人民共和国教育部制定. 普通高中化学课程标准



(2) 晶胞中原子的坐标与计数

原子在晶胞中的位置，科学的表述是原子坐标。坐标必定是对应于一个参考系的术语。晶胞的参考系的原点，习惯上取在晶胞的左-后-下顶角上，并把相交于这个原点的晶胞的三根棱按右手坐标定为 a 、 b 、 c ，通常以向前方（指向观察者）为 $+a$ ，向右为 $+b$ ，向上为 $+c$ （但并非必定如此，这只是大多数情况下的习惯画法， a 、 b 、 c 的指向可以改变，但原点和右手坐标系一般不改变，否则利用计算机程序画晶胞时会出现混乱）。在这样一个坐标系中，原子的坐标就是指向量和 $xa+yb+zc$ 中的 (x, y, z) 三数组的三个数字。例如，原点的坐标是 $0, 0, 0$ ；体心的坐标是 $1/2, 1/2, 1/2$ ；等等。如图3-9画了15个原子，然而，若考察原子坐标，却只有4种原子坐标，可见图中的晶胞只有4个原子！

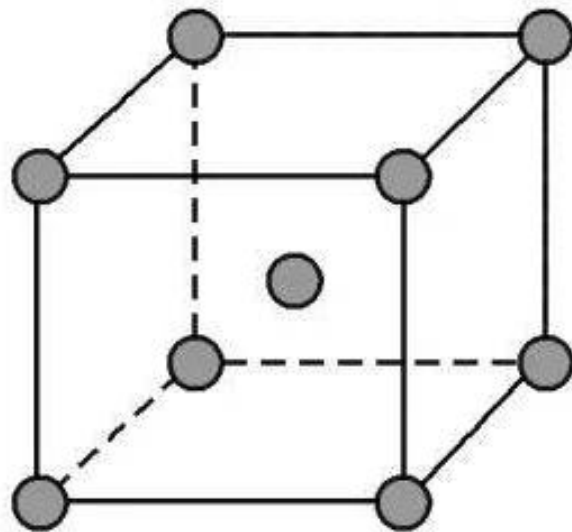
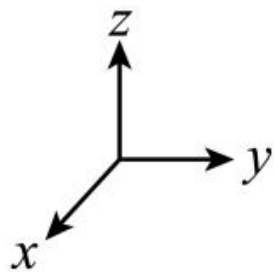
	原子坐标	平均每个晶胞中的原子个数
	0, 0, 0	$8 \times \frac{1}{8} = 1$
	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	1
	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$2 \times \frac{1}{2} = 1$
	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$4 \times \frac{1}{4} = 1$

图3-9 晶胞中的原子坐标与计数举例

请注意：① x 、 y 、 z 三个数的取值范围是 $1 > x(y, z) > -1$ ，不会等于1或大于1，也不会等于-1或小于-1，可以简单地记忆为“1即是0”；②由此可见，晶胞的8个顶角的坐标是一样的，换句话说，它们是同一个原子。请回过头来看图3-8。若取实线的小立方体为晶胞，8个顶角的原子不一样了，可见错了；③再细致点，我们可以肯定：若一个原子坐标在晶面上，肯定在晶胞图上可以看见一对（位于平行的两个面上），反过来说，三对面如果都有原子，必定有三个原子坐标，而不是一个原子坐标。同样的道理，如果某原子在晶胞的棱上，在晶胞图上将看到4个原子，位于平行的4个棱上。反过来说，如果晶胞的12根棱上全有原子，肯定不会有相同的坐标，而是有3个坐标。

有了原子坐标的概念，数晶胞里的原子数目，变得很简单——有多少种不同的原子坐标，就有多少个原子，至于不同坐标的原子是否同种原子，跟晶胞中有多少个原子毫无关系。

三、原子坐标种类



三、原子坐标种类

