Supporting Information for *Univ. Chem.* doi: 10.3866/PKU.DXHX201802035

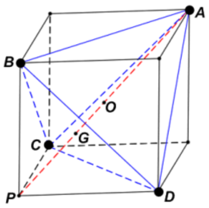
浅谈质心分数坐标在确定等径圆球密堆积空隙中的应用

张文静*，汤华彪，朱艳艳，魏东辉，刘春梅，唐明生*
郑州大学化学与分子工程学院，郑州 450001

Applications of Centroid Fractional Coordinates in Locating Interstices in Close Packings of Equal Spheres

ZHANG Wenjing *, TANG Huabiao, ZHU Yanyan, WEI Donghui, LIU Chunmei, TANG Mingsheng *
College of Chemical and Molecular Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, P. R. China.

*通讯作者，Email: zhangwj@zzu.edu.cn; mstang@zzu.edu.cn



附图 1　*A*1 型最密堆积中的四面体空隙

本部分内容主要介绍立体几何法推求正四面体空隙中心的另一种常用方法。如附图 1 所示，将从密堆积结构中抽象出的正四面体置于一个正立方体中，四面体(ABCD)的顶点占据立方体相隔的四个顶点。容易看出，空隙的中心 O 位于立方体的体对角线 AP 上，依据正立方体的性质可知

$$AO = \frac{3}{4}AG$$

$$AG = \frac{2}{3}AP = \frac{2\sqrt{3}}{3}DP = \frac{2\sqrt{3}}{3}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}CD = \frac{\sqrt{6}}{3}CD$$

因此有 $AO = \frac{\sqrt{6}}{4}CD$ 。

结合图 2(a)可知， $CD = 2R$ ，代入上式即可得到顶点到空隙的距离为

$$AO = \frac{\sqrt{6}}{2}R$$

中心到底面的距离和中心到堆积球球面的最短距离 d 的计算请参见等式(3)和等式(4)。