Het fractionele coördinatensysteem

De positie van atomen binnen het eenheidskristal wordt beschreven aan de hand zijn x, y en z waarden. Deze waarden stellen steeds hun relatieve positie voor ten opzichte van de respectievelijk a b en c waarden van roosterparameters, vandaar de naam fractioneel. Het gebruik van het fractionele systeem heeft als groot voordeel dat het erg eenvoudig te interpreteren is, zo hoeft er geen rekening gehouden te worden met de hoeken tussen de assen van het eenheidskristal. Een element met waarden (0.5,0.5,0.5) ligt dus bijvoorbeeld in het midden van het kristal, terwijl een met waarden (1,1,1) het hoekpunt van het rooster inneemt dat zich diagonaal tegenover de oorsprong van het rooster bevindt.

Het fractionele coördinatensysteem brengt natuurlijk ook enkele nadelen met zich mee. Om een kristal, en zijn elementen, weer te geven als een driedimensionaal figuur is er nood aan coördinaten volgens een orthogonaal systeem, hiervoor kunnen de fractionele coördinaten dus niet gebruikt worden. Er zouden enkel waarden tussen nul en een kunnen verkregen worden wat telkens zou leiden tot een kubusvormig kristal. Dit kan worden vermeden door deze te vermenigvuldigen met de lengte van hun respectievelijke as van het kristalrooster. Dit laatste biedt slechts deels een oplossing voor de omzetting van het fractioneel naar het orthogonaal coördinatensysteem en is enkel van toepassing voor kubische, tetragonale en orthorhombische kristalroosters aangezien deze uitsluitend bestaan uit rechte hoeken. Om een algemene formule op te stellen die gebruikt kan worden bij deze conversie moet er ook rekening gehouden worden met de hoeken tussen de assen van het kristalrooster. Hiervoor wordt er gebruik gemaakt van onderstaande wiskundige formules.

Met behulp van deze berekeningen wordt een matrix verkregen. Door deze matrix te vermenigvuldigen met de vector die de fractionele coördinaten van het element beschrijft kunnen de orthogonale coördinaten van het element worden bekomen. Deze conversiematrix kan gebruikt worden voor elk element dat behoort tot dit kristalrooster en elk ander kristal met dezelfde roosterparameters.