

## Python在结构化学可视化教学中的应用探索

王延忻<sup>1</sup>, 王宏娟<sup>1</sup>, 石玉仁<sup>2</sup>, 杨云霞<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> 西北师范大学化学化工学院, 兰州 730070

<sup>2</sup> 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070

**摘要:** 介绍使用Python语言和科学计算库绘制结构化学中常见的氢原子s和p轨道波函数和电子云的图形的探索。在此过程中编写了多个脚本, 通过数据处理和不同的生成算法实现波函数、电子云的可视化教学, 旨在引导学生深入学习和理解波函数和电子云物理意义, 提升学生自主思考和主动学习的能力。

**关键词:** 结构化学; Python; 波函数; 电子云; 可视化

**中图分类号:** G64; O6

## Application of Python for Visualizing in Structural Chemistry Teaching

Yanxin Wang<sup>1</sup>, Hongjuan Wang<sup>1</sup>, Yuren Shi<sup>2</sup>, Yunxia Yang<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> College of Chemistry and Chemical Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China.

<sup>2</sup> College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China.

**Abstract:** This paper explores the use of the Python language and scientific computing libraries to visualize the wave functions and electron clouds of common hydrogen atomic s and p orbitals in structural chemistry. Multiple scripts have been developed in this process, employing data processing and various generation algorithms to achieve the visualization of wave functions and electron clouds. The aim is to guide students in a comprehensive study and understanding of the physical significance of wave functions and electron clouds. This approach enhances students' abilities for independent thinking and active learning.

**Key Words:** Structural chemistry; Python; Wave function; Electron cloud; Visualization

作为面向化学高年级学生的核心基础课程, 结构化学从微观层面探究物质的构成规律, 它以电子因素和空间因素为主线, 阐述原子、分子和晶体的结构、性能和应用, 其基本原理和方法在化学、材料、信息等科学领域有广泛的应用<sup>[1]</sup>。结构化学的知识体系建立在量子力学<sup>[2]</sup>、群论和晶体学<sup>[3]</sup>等相关数学物理理论的基础上, 学习结构化学课程能够帮助学生从经验层面逐渐深入到化学本质, 培养化学科学思维。该课程难度大, 要求教师和学生具备较强的数理基础、逻辑思维和空间想象力。其中, 原子结构涉及单电子原子薛定谔方程的求解, 包括大量的数学运算和推导过程, 而且由解析结果所得到的量子数、能量、波函数、概率密度和概率分布(电子云)等函数图像非常抽象, 因此学生学习过程中存在较多困难<sup>[4]</sup>。在这一重要章节内容学习过程中, 传统教学多采用数学运算板书推导和波函数图像PPT演示相结合的方式, 这种方式虽然能够展示抽象理论知识和具象图形, 使学生对

收稿: 2023-06-02; 录用: 2023-11-23; 网络发表: 2024-01-08

\*通讯作者, Email: Yangyx80@163.com

基金资助: 国家自然科学基金(12065022); 河南省优秀青年科学基金项目(212300410057); 河南省科技研究与发展计划联合基金项目(222301420060)

波函数和电子云图形有直观的认识，但是可能使学生将薛定谔方程求解结果和原子轨道图形割裂开来，难以深入理解原子轨道的本质。如果教师能够在授课过程中将薛定谔方程求解结果进行可视化教学，即时演示薛定谔方程的求解结果与原子轨道波函数和电子云图形之间的联系，引导学生思考和探索，这样就可能会促使学生主动地去发现和解决问题，从而对结构化学的学习产生好奇心和热爱之情。

因此，我们在结构化学教学过程中尝试使用基于Python<sup>[5]</sup>的学习工具，并利用数值计算库scipy、numpy和可视化库matplotlib，编写了一些可以绘制结构化学学习中重要波函数和电子云的脚本，主要包括常见的氢原子s和p原子轨道相关图形，这样我们在实践教学过程中只要简单调整参数就可以实现对波函数相关图形的可视化教学，从而帮助学生更好地理解薛定谔方程和原子轨道之间的联系，这样也可以有效地提高学生的学习兴趣。

## 1 Python语言的特点

Python是一门简单易学的编程语言，只需掌握基本语法，就能编写出解决复杂问题的脚本。Python拥有活跃的开源社区和丰富的文档支持，还有众多扩展库，可以通过简单的命令安装，让其在科学计算、机器学习、人工智能等领域占据优势。Python还可以和其他程序、语言混合使用，这也是它被称为胶水语言的原因<sup>[6]</sup>。当然，Python也有一些不足之处，比如它作为解释型语言的运行速度较慢，不适合一些对性能要求高的项目和任务；Python的全局解释器锁也影响了它的多线程并发性能；Python有时也会出现稳定性和可维护性的问题等。但这些缺点并不影响它优异的便捷性和扩展性，所以我们选择了Python作为这一教学工具的编程语言。

## 2 波函数可视化基本模块及原理

我们编写了一系列用于计算氢原子s、p原子轨道径向函数、球谐函数等波函数可视化所需的基本模块，同时也阐明了一些数据处理方法。

### 2.1 检查量子数合法性

在进行计算前，首先要检查输入的量子数的合法性，即：主量子数 $n$ 为不大于7的正整数；角量子数 $l$ 为小于 $n$ 的非负整数；磁量子数为绝对值不大于 $l$ 的整数。符合以上条件的量子数才能用来计算s、p原子轨道波函数以及其他数据。我们编写了一个简单的判断模块：check\_wavefunction\_parameters(见补充材料)，这一模块会放在后续的波函数计算代码之前，绘图时调用波函数计算模块，若判断量子数不合法，则终止程序。

### 2.2 波函数计算模块

在波函数的可视化过程中，波函数的计算是一个关键的环节，它直接影响了可视化的质量和效率。因此，我们编写了一个波函数计算模块，它由一个基本计算模块和三个辅助模块组成。编程的基本思路是使用波函数计算模块计算所需的点、面、空间中的波函数，然后通过不同的表现形式绘制图像。例如等值线图计算三个平面上的波函数值，然后将其拼合为一个三维图像。电子云图通过随机值和该点波函数值进行对比，从而判断该点处是否绘制一个表示电子的点。轨道轮廓图计算出定义空间内每点的波函数值后，提取其中波函数值相等的点建立一个曲面进行绘制。下面将详细介绍波函数计算模块的设计和实现。

#### 2.2.1 球极坐标下计算

为了计算给定量子数条件下极坐标系空间中某点的波函数，我们编写了一个名为calc\_psi\_rtp的函数，该函数包含7个参数，分别是主量子数 $n$ 、角量子数 $l$ 、磁量子数 $m$ ，极坐标系空间某点的坐标 $r$ 、 $\theta$ 、 $\phi$ ，以及第七个参数幂次power，它控制返回值的幂次，如果需要计算波函数的平方，则其值输入2即可。

在这一部分，我们参考了《结构化学基础》<sup>[1]</sup>和《高等无机结构化学》<sup>[7]</sup>的相关内容，距离采用

原子单位制，即以氢原子的波尔半径 $a_0$  ( $a_0 = 52.9$  pm)为单位。首先计算氢原子径向部分 $R_n$ 的归一化系数：

$$C = \sqrt{\frac{2Z^3 (n-l-1)!}{na_0 2n(n+1)!}}$$

然后计算了径向部分中的连带拉盖尔多项式：

$$L = L_{n-l-1}^{(2l+1)}$$

它表示一个阶数为 $n-l-1$ ， $\alpha$ 参数为 $2l+1$ 的拉盖尔多项式。在代码中，这部分的计算使用scipy库中的genlaguerre函数完成，接受两个参数，第一个参数为阶数，第二个参数为 $\alpha$ 参数。

接着我们计算波函数径向部分：

$$R = C \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l L \left(\frac{2Zr}{na_0}\right) e^{-\frac{Zr}{na_0}}$$

其中 $r$ 为径向距离， $L$ 为上面提到的拉盖尔多项式。

然后计算球谐函数：

$$Y_{lm} = Y_l^m(\theta, \phi)$$

其表示阶数为角量子数 $l$ 、阶为磁量子数 $m$ 、方位角为 $\phi$ 、极角为 $\theta$ 的球谐函数。在代码中，这部分的计算由scipy库中的sph\_harm函数完成，接受4个参数。

最后将径向部分和球谐函数相乘，即可得极坐标系空间中某点 $(r, \theta, \phi)$ 的波函数值。

### 2.2.2 笛卡尔坐标下计算

numpy库是一个用于科学计算的Python库，它提供了很多高效的数值运算和数据处理的功能。其中的meshgrid函数是一个用于生成网格采样矩阵的函数，它可以用来计算多变量的函数和绘制二维或三维的图形。由于在后续的数据生成过程中，需要用到空间网格，而生成空间网格时最方便的就是分别生成 $x$ 、 $y$ 、 $z$ 坐标的一维数组，再使用numpy库中的meshgrid函数将其组合为二维或三维网格，故我们对极坐标下的计算模块进行了调整。

上面已经讨论了极坐标下输入 $(r, \theta, \phi)$ 进行计算的方法，而波函数在笛卡尔坐标系中的计算比较复杂，故我们根据直角坐标与极坐标的转换关系：

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta &= \arccos \frac{z}{r} \\ \phi &= \arctan \frac{y}{x} \end{aligned}$$

将笛卡尔坐标转化为球极坐标，然后再根据上述过程进行计算，并重新命名模块为calc\_psi\_xyz，改变其第4至第6个传入参数为笛卡尔坐标下某点的坐标值，这样就可返回笛卡尔坐标下空间中某点 $(x, y, z)$ 处的波函数值。通过这种方式能更方便和自由地选择计算函数，以适配不同的数据类型和要求，例如我们想观察波函数在某一平面的分布情况时，就可以通过笛卡尔坐标系方便地生成空间网格并计算，以避免球极坐标下复杂参数方程的运算。

### 2.2.3 波函数线性组合的计算

在磁量子数不等于0的情况下，例如绘制氢原子 $2p_x$ 轨道的图像时，我们需要对函数 $\psi_{211}$ 和 $\psi_{21-1}$ 进行线性组合，利用组合的结果来绘图。为了后续更方便地调用计算函数，我们编写了新的函数用以计算波函数线性组合后的结果，这个函数为磁量子数不为零的情况下的可视化提供计算方面的便利，调用一次函数就可以完成数据的计算。

由于涉及到线性组合的计算部分仅限于球谐函数，故在球极坐标和笛卡尔坐标下的波函数计算模块中，我们添加了对球谐函数进行线性组合的部分，通过对球谐函数的线性组合，也就实现了波函数的线性组合。在这里要注意的是，在计算两个数学上相等的浮点数时，计算机可能会产生一个

计算误差，一般量级在 $1e^{-16}$ 左右，为了消除这一误差，我们可以通过布尔索引，将数组中绝对值小于某一值的数据设为0。

我们为球极坐标和笛卡尔坐标下的波函数计算都添加了这一功能，分别命名为`calc_psi_rtp_linear_combination`和`calc_psi_xyz_linear_combination`。它们接受的参数和`calc_psi_rtp`、`calc_psi_xyz`相同，不过返回值变成了两个，分别为球谐函数传入参数为 $m$ 和 $-m$ 计算出的波函数值相加、相减后的结果。在调用时，可以将一个变量例如`psi`赋值为这个函数的返回值，通过对其进行索引如`psi[0]`、`psi[1]`来调用这两个变量。索引是一个用来表示变量中的某个元素的位置的数字，比如`psi[0]`表示变量`psi`中的第一个元素，`psi[1]`表示变量`psi`中的第二个元素。

### 3 可视化教学实践

根据《结构化学基础》<sup>[1]</sup>第五版第二章第三节的内容以及上述的基础模块，编写了多个脚本，用于绘制氢原子 $s$ 和 $p$ 原子轨道波函数和其他所需图形。这些脚本通过数据处理和不同的生成算法实现，旨在引导学生自主思考和理解问题。在讲授该部分时，我们采用直观演示法一边讲授一边通过多媒体向学生进行演示，同时也可以让学生跟着老师自己动手操作一遍。

#### 3.1 $\psi-r$ 图和 $\psi^2-r$ 图

我们编写了一个函数`plot_psi_r`，用于绘制 $\psi-r$ 图和 $\psi^2-r$ 图。这个函数接受3个传入参数，分别是主量子数 $n$ 、角量子数 $l$ 、磁量子数 $m$ ，并接受两个可选参数极角 $\theta$ 和方位角 $\varphi$ 来绘制 $\psi-r$ 图和 $\psi^2-r$ 图(如果角度参数缺省，则其默认值为0)。这两种图只适用于 $s$ 轨道相关波函数的表述，必须保证 $l=0$ 。这些图形能够帮助学生直观地理解薛定谔方程的求解结果，加深对概念的理解。通过这段代码，学生可以将注意力从繁杂计算中抽离，更好地理解基础概念。

例如：运行`plot_psi_r(1,0,0,0,0)`后，程序会输出图1。

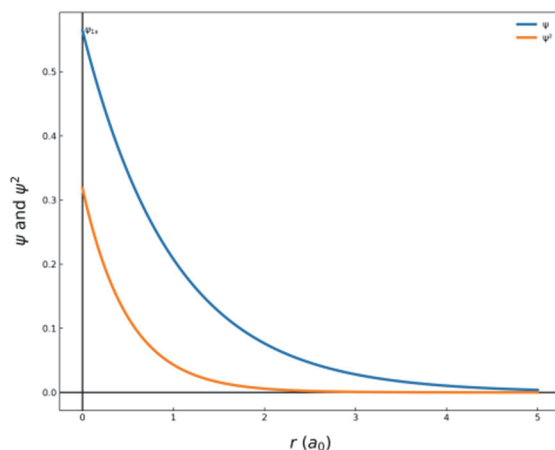


图1  $\psi_{1s}-r$ 和 $\psi_{1s}^2-r$ 图

在本段代码中，首先导入了必要的库，包括科学计算库`numpy`、可视化库`matplotlib`以及我们编写的基本模块；接着，验证传入参数的合法性；若参数合法，则生成一个 $r$ 数组，并调用波函数计算模块，以计算 $\psi$ 值；最后使用`matplotlib`库来绘制图像。

#### 3.2 径向分布图

径向分布函数 $R_{n,l}(r)$ <sup>[8]</sup>描述了电子运动波函数随着离开原子核距离的变化状态，径向波函数的平方 $R_{n,l}^2(r)$ 表示距离原子核一定距离的电子云概率密度， $r^2R_{n,l}^2(r)$ 则表示在距离原子核 $r$ 和 $r+dr$ 之间的球壳间电子出现的概率。为了绘制径向分布函数 $D=r^2R_{n,l}^2(r)$ ，我们编写了一个名为`plot_D_r`的函数。该函数需要传入两个参数：主量子数 $n$ 和角量子数 $l$ 。通过观察绘制出的图像，可以得出许多有用

的结论。

例如，当我们运行`plot_D_r(3,0,0)`时，程序会输出图2。从图中可以看出，这一状态下的波函数有三个峰值，分别位于 $r = 0.73a_0$  ( $r = 38.69 \text{ pm}$ )、 $r = 4.20a_0$  ( $r = 222.60 \text{ pm}$ )、 $r = 13.05a_0$  ( $r = 691.65 \text{ pm}$ )处。这意味着在这三个距离处电子出现的概率较高。再者，绘制出不同主量子数的 $s$ 态径向分布图后，可以直观看到，随着主量子数的增大，径向分布最大峰值出现的位置离核越远，也就是说当主量子数越大，原子半径就越大。

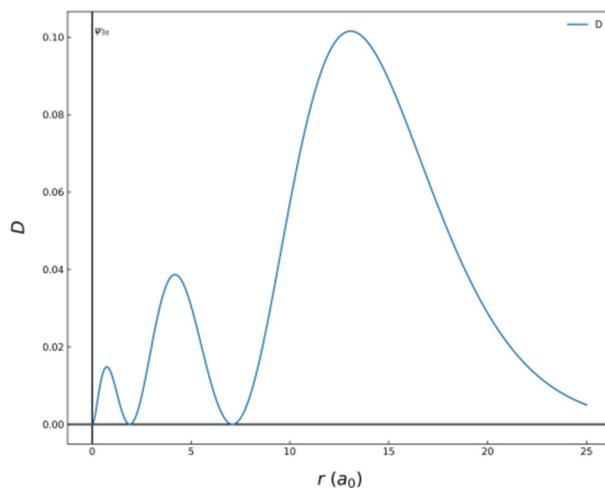


图2  $\psi_{3s}$ 的径向分布图

### 3.3 原子轨道等值线图

原子轨道等值线图是结构化学研究中的重要图形。通过不同的数据处理或者绘图方法可以表现为多种方式，如电子云图、原子轨道网格图、电子云界面图和原子轨道轮廓图等。

我们编写了一个名为`plot_contour`的函数，用于绘制等值线图。该函数接受三个量子数作为输入参数，并可选地接受第四个参数，这个参数控制计算出波函数的幂次，默认值为1。运行后会绘制 $x = 0$ ， $y = 0$ ， $z = 0$ 三个平面上的原子轨道等值面图，可以通过旋转、平移、缩放等方式来更改观察角度，方便使用者了解原子轨道的分布情况。函数调用了三次`calc_contour_plot_data`函数来计算对应平面上的点的波函数值，可以通过向某一调用的代码行前添加“#”来使得这行代码变成注释，从而让程序跳过这一行代码，通过这种方法就可以绘制一个单独的平面，以便单独对一个平面进行观察。图3为运行未进行修改的`plot_contour(2,1,0)`的结果。

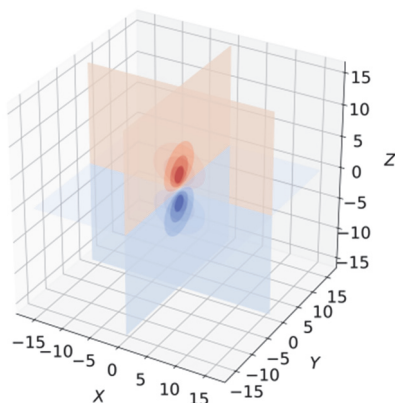


图3  $\psi_{210}$ 的原子轨道等值线图

当 $m$ 值不为0时,需要对波函数进行线性组合,用组合后的结果来进行图像的绘制。前面已经讲到了波函数线性组合的计算和实现,此处不再复述。当传入的 $m$ 值不为0时,会生成两张图像,两张图像可以分别旋转、平移、缩放,并分别代表线性组合过程中相加、相减后的结果。例如运行`plot_countour(2,1,1)`后,程序会输出图4。该步骤可以通过小组合作学习方式让学生讨论自行画出,教师适当地给予指导。以下类似的处理也作为课后作业让学生自行完成,教师在下次课上进行分析。

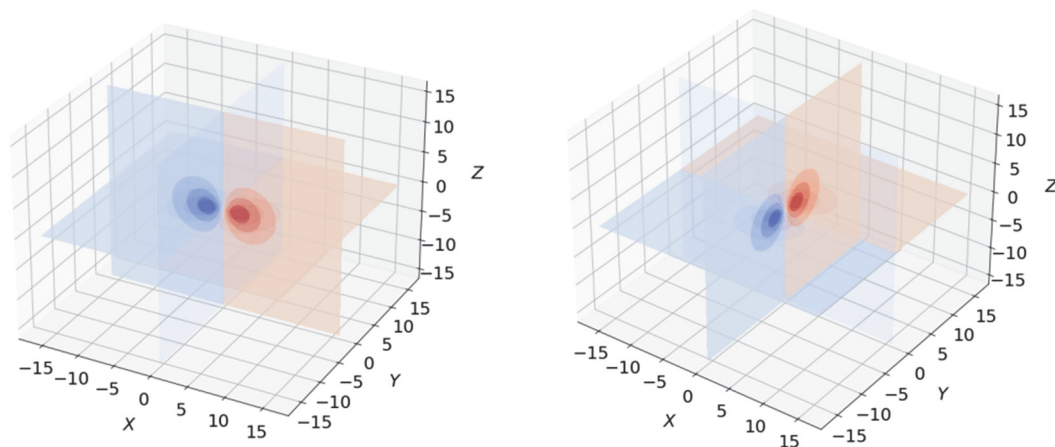


图4  $2p_x$ 和 $2p_y$ 的轨道等值面图

可以通过调整`calc_countour_plot_data`函数中的颜色映射来改变图像的色彩,选择合适的颜色映射会让图像有效性更强。例如:绘图数据中只有正值,就可以使用顺序映射,顺序映射根据值的大小来填充渐变的颜色;当绘图数据中有正有负时,就可以使用发散映射,发散映射会给正负值不同的色彩,让图像更加直观。

### 3.3.1 电子云概率密度分布图

将原子轨道等值线图的数据平方后就可以得到电子分布的概率密度图<sup>[9]</sup>。这可以通过为`plot_countour`函数传入第四个参数使得幂次为2来实现,这意味着所得数据都是非负数。根据绘图数据的特点,我们修改了颜色映射,使用“Greys”映射(这一映射是顺序映射的一种,最小值为白色,最大值为黑色,中间值是渐变的灰色)以期让图像有更好的表现能力。运行`plot_countour(2,1,1,2)`后程序输出了图5,展示了 $2p_x$ 和 $2p_y$ 轨道的电子云概率密度分布图。

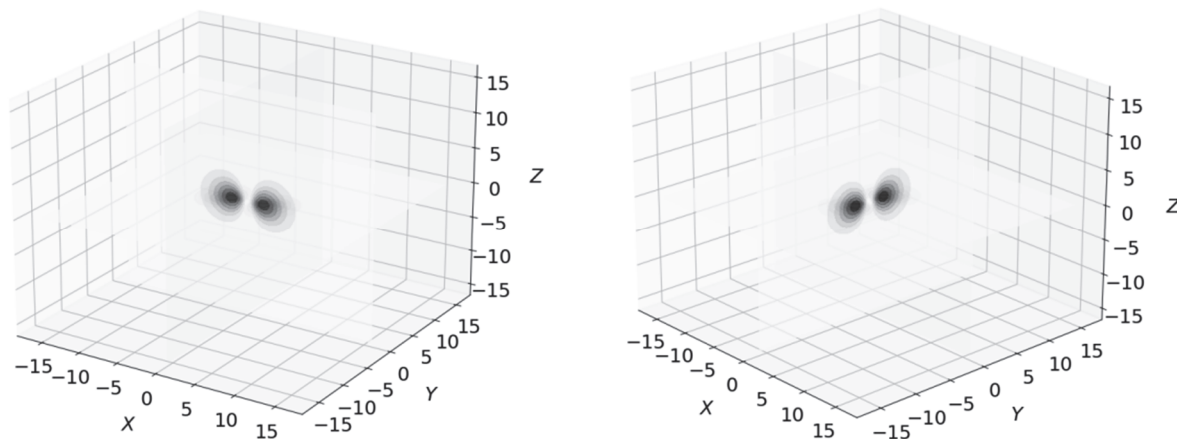


图5  $2p_x$ 和 $2p_y$ 轨道的电子概率密度图

### 3.3.2 电子云图

通过绘制电子云示意图可以让学生“直观”地观察电子云的分布。为了生成电子云图像，需要一组符合电子分布概率密度的离散数据，为此，我们使用了接受拒绝法<sup>[10]</sup>。简单来说，接受拒绝法的基本原理是使用一个容易抽样的参考分布来从一个复杂的目标分布中抽样。我们首先找到一个容易抽样的参考分布，然后按照一定的概率接受或拒绝从参考分布中抽取的样本，这个概率由目标分布和参考分布的概率密度函数之比决定，最终，被接受的样本就是来自目标分布的样本。

假设我们想从 $f(x) = 2x$  ( $x \in [0,1]$ )中进行抽样，我们可以使用一个均匀分布 $U(0,1)$ 作为参考分布 $g(x)$ 。由于 $f(x)$ 在 $x = 1$ 处取得最大值2，故我们取 $M = 2$ 。现在，我们来模拟一次抽样过程。

- (1) 从均匀分布 $U(0,1)$ 中抽取一个样本 $x$ 。假设我们抽取到的样本为0.6。
- (2) 计算接受概率 $p(x) = \frac{f(x)}{Mg(x)} = \frac{2x}{2 \times 1} = x$ 。将 $x = 0.6$ 代入，得到接受概率为0.6。
- (3) 从均匀分布 $U(0,1)$ 中抽取一个样本 $u$ 。假设我们抽取到的样本为0.4。
- (4) 判断是否接受样本。由于 $u \leq x$ ，所以我们接受样本 $x = 0.6$ 。

这样就完成了一次成功的抽样，我们只需重复这个过程，直到样本数量足够。当然，也可以一次性生成多个数据，通过这样的方法来筛选出符合条件的数据。

那么，具体到电子云散点图的实现部分，我们就可通过计算出空间中波函数最大值 $\psi_{\max}$ 后生成一些随机坐标 $(x_i, y_i, z_i)$ 和其对应的 $\psi$ 值 $\psi_i$ 。通过上文的方法易得：

$$p(x) = \frac{f(x)}{Mg(x)} = \frac{f(x)}{\psi_{\max} \times 1} = \frac{f(x)}{\psi_{\max}}$$

由于接受条件是 $u \leq p(x)$ ， $u$ 在均匀分布 $U(0,1)$ 中抽样。也就是说，我们生成一个 $[0, \psi_{\max}]$ 中的随机数，如果这个随机数小于某点 $(x_i, y_i, z_i)$ 的 $\psi_i$ ，则接受该坐标点 $(x_i, y_i, z_i)$ 作为绘图数据。

我们根据上述原理编写了`plot_electron_cloud`函数，它接受4个参数传入，前三个为3个量子数，第四个是生成待筛选样本的数量，推荐值为200000，待筛选数据越多，图中点就会越密集。和原子轨道等值线图绘制类似，在 $m$ 不为0时会输出两张图，分别是线性组合相加减后的结果。

如图6，是运行`plot_electron_cloud(3,2,0,500000)`的输出结果，展示了对应量子数的电子云图像。

### 3.3.3 原子轨道网格线图

改变原子轨道等值线图上的绘图方法即可得到该图像，其物理意义和等值线图的类似，不过是使用曲面的凹凸来表示波函数的大小，颜色同样也代表波函数的数值，从上俯视可以观察到类似于等值线图的图像。我们编写函数绘制了一个三维曲面，在这一曲面上， $\psi$ 值为正的地方在图中体现为凸出平面的部分，并填充为红色， $\psi$ 值为负的地方在图中体现为凹下去的部分，并填充为蓝色。可以使用`plot_surface`来调用它，它除了接受三个量子数的传入，还额外接受一个字符串，绘制平面所垂直的轴。例如运行`plot_surface(2,1,0,'y')`会输出图7。

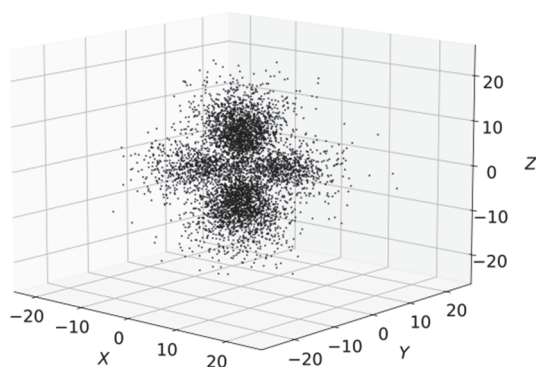
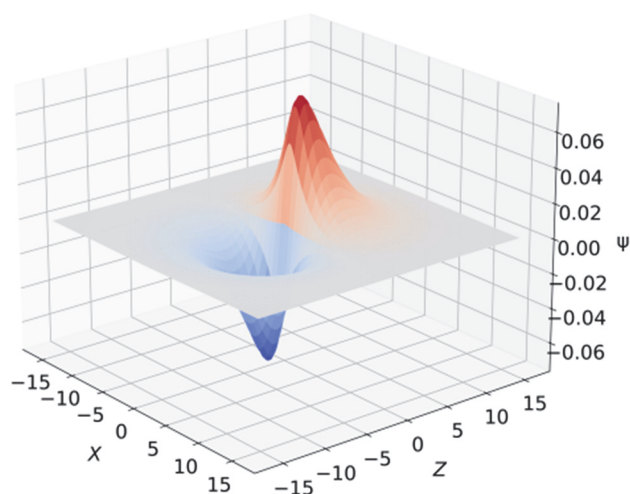


图6  $\psi_{320}$ 的电子云图

图7  $\psi_{2p}$ 的原子轨道网格线图

电子版为彩图

这一绘图方法还可以用来绘制二维势箱的波函数图像。实现方法也比较简单，适合让学生自行学习绘制图形。

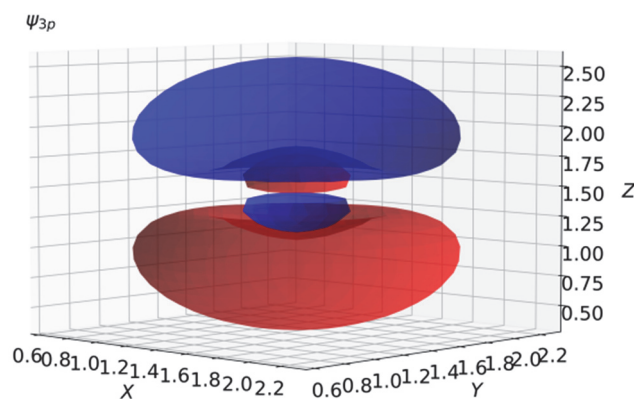
绘制上述图像需要使用matplotlib库中的plot\_surface函数，在调用matplotlib库中的plot\_surface函数时，传入的前两个变量是通过两个一维数组网格化形成的二维数组。这个过程简单来说，就是每个网格有4个顶点，这个二维数组分别描述了每个小网格顶点的x坐标和z坐标，从而绘制一系列的网格来展示图像。

### 3.3.4 原子轨道轮廓图

原子轨道轮廓图<sup>[11]</sup>是一种用于表示电子在原子核周围分布的三维等值面图像。它通过提取空间中所有波函数值等于某一给定值的点来实现。三维等值面图可以方便地观察原子轨道的形状和正负分布。

为了绘制原子轨道轮廓图，我们定义了一个名为plot\_outline的函数。此函数接受量子数 $n$ 、 $l$ 和 $m$ 作为输入参数，并使用marching\_cubes函数从波函数的体积数据中提取等值面，然后，它使用plot\_trisurf函数绘制等值面。例如运行plot\_outline(3,1,0)后，程序输出图8。

通过调整传入plot\_outline函数的量子数，我们可以方便地绘制出各种状态波函数的图像。这样，我们就可以方便地绘制出原子轨道的三维图像，并对电子在原子核周围的分布有一个直观的认识。

图8  $\psi_{3p}$ 的原子轨道轮廓图

接下来简要介绍`plot_outline`函数的实现方法。首先, 定义一个边界和步长, 然后使用`np.mgrid`函数在这个边界内生成一个三维网格; 接着, 调用`calc_psi_xyz_linear_combination`函数计算每个网格点上的波函数值, 也就是空间内每一点的波函数值, 当然这里计算出的值不是连续的; 然后使用`marching_cubes`函数根据波函数值分别计算正负等值面的顶点和面; 最后, 使用`plot_trisurf`函数绘制正负等值面并显示图像。在这个函数的使用过程中, 不同的等值面可能导致绘图效果的差异, 可以通过修改代码中的变量`iso_val`来调整选择的等值面上的数值, 从而得到更好的绘图效果。如果等值面的数值选择不合适, 会导致绘制出的图像和实际情况有所偏差。

这个算法同样能实现三维势箱波函数的可视化, 计算出空间内波函数后, 通过调整合适的等值面后使用同样算法绘制即可。

当然, 为了使學生能够更好地理解, 调动学习积极性, 我们采用直观演示法、任务驱动法等多种教学方法和评价方式, 多媒体与课堂相结合, 教师充当“引导者”“帮助者”的角色, 着眼于学生的发展, 循序渐进, 使学生更好地理解薛定谔方程和原子轨道之间的联系, 提高学生的学习兴趣。在教学过程中, 组织学生分小组合作学习, 讨论类似图形的画法、有争议的问题等, 教师做出适当的指点和引导。在小组相互讨论期间, 学生互相学习, 讨论结束后在课堂上以小组ppt讲解方式向全班同学展示, 做到组内互学、组间交流。最后环节由教师进行评点并强调重点, 主要着眼于学生在学习过程中的误区和特点, 给予解释和引导, 使學生在学习各种公式、函数的过程中更积极主动且能有更进一步的领悟。如此, 在结构化学教学过程中, 将讲解、演示和分组学习结合起来, 课后让学生进行模型制作, 不仅大大调动了学生的学习积极性。充分锻炼学生的动手动脑能力及解决问题的能力, 使得教学效果得以提升。

#### 4 可视化教学反思

使用Python程序尝试结构化学的可视化教学有许多优点, 如可以帮助學生更加即时、直观地建立薛定谔方程和熟悉的原子轨道、电子云之间的联系, 有助于學生深入理解理论化学内容等, 同时, 从學生在课堂上的反应以及课后作业、模型制作等丰富多彩的评价方式结果来看教学效果较好, 學生从感到无聊的被迫学习慢慢转变为主动学习, 积极提出问题并尝试自己解决问题, 激发了學生的学习兴趣。

当然, 作为一种教学手段, 可视化教学只是为了更好完成教学目标的一种辅助方法, 需要注意的是:

第一, 可视化教学不可能完全取代课堂讲解, 它只能作为一种补充和激发兴趣的方式。不同的知识点和學生的水平需要不同的教学方法, 有些知识点可能更适合用语言或数学公式推导来表达, 有些知识点则可利用可视化教学方法。因此, 在使用可视化教学时, 应该根据不同的情况灵活地选择合适的教学方法, 让學生能够全面、深入地掌握知识。

第二, 可视化教学不能代替理论知识的学习, 作为一种辅助工具, 它可以帮助學生更直观地感受和理解知识。如果没有扎实的理论基础, 學生可能会对可视化教学产生过度依赖而忽略了背后的逻辑和原理。因此, 在使用可视化教学方法时, 应该结合相关的理论知识和文献资料, 让學生能够掌握可视化教学内容的原理和意义, 而不仅停留在表象上。

第三, 避免可视化可能造成的理解上的偏差和误解。相较于课堂讲解, 可视化更易为學生接受, 但有可能因为被图像吸引而不求甚解, 例如, 如果只看图形而没有了解到数据的来源和处理方法, 學生可能会忽略一些重要的细节或变量, 而这些细节和变量往往是决定图形是否准确和有效的关键。因此, 在编写可视化脚本时, 教师应该注意提供清晰的注释、源码和数据处理方法, 让學生能够看到数据是如何计算出来的, 又是如何通过一系列的处理转化成绘图时图中的点、线、面的。

最后, 结构化学课不是编程课, 教学过程中应根据學生的进度和能力合理安排。对于不熟悉原理和方法的學生, 应注重理论学习, 将可视化作为辅助工具, 更好地理解 and 掌握结构化学知识; 对

基础较好的学生，鼓励他们自行探索，学习使用Python、C语言或MATLAB等语言绘制函数，进一步激发自主思考和主动探索的兴趣，培养科学素养。

## 5 结语

本文介绍了使用Python语言和科学计算库绘制结构化学中一些氢原子轨道函数和图像的方法，展示了使用Python语言和科学计算库绘制的多种函数图像，这些图像能够帮助学生更好地理解结构化学知识。我们也提供了详细的代码实现和注释，方便读者学习和参考。希望通过本文能够帮助结构化学初学者更好地理解原子中的奥妙世界，消除学习结构化学时的畏难情绪，为结构化学教学提供有益的参考，促进结构化学教学的发展。

**补充材料：**可通过链接<https://www.dxxh.pku.edu.cn>免费下载。

## 参 考 文 献

- [1] 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第5版. 北京: 北京大学出版社, 2017: 34-41.
- [2] 邓丽城, 陈德媛, 郭艳艳. 物理与工程, **2023**, *33* (2), 88.
- [3] 刘元兴. 自然辩证法研究, **2022**, *38* (12), 85.
- [4] 张浩, 阚子规, 林子涵, 钱雨晨, 司承运, 钱海. 大学化学, **2023**, *38* (1), 287.
- [5] 侯成. 大学化学, **2021**, *36* (2), 241.
- [6] 董付国. Python程序设计基础. 第2版. 北京: 清华大学出版社, 2019: 3-9.
- [7] 麦松威, 周公度, 李伟基. 高等无机结构化学. 北京: 北京大学出版社, 2001: 16-24.
- [8] 霍英杰, 闫霆, 周宇翔, 潘卫国. 功能材料, **2023**, *54* (4), 4132.
- [9] 李晋华, 郑重, 韩岗. 电脑编程技巧与维护, **2022**, *443* (5), 42.
- [10] 张宇, 唐启祥. 文山学院学报, **2017**, *30* (6), 108.
- [11] 孙宏伟, 陈兰. 大学化学, **2019**, *34* (7), 100.