

基于MATLAB的类氢轨道可视化及相关教学问题解析

杨一莹, 朱荣秀, 马玉臣, 张冬菊*

山东大学化学与化工学院, 济南 250100

摘要: 类氢轨道是结构化学的重要教学内容, 现有教材多以简化示意图呈现其图像。本文通过编写MATLAB代码, 系统绘制了类氢轨道波函数及其角度部分的空间图像, 并对其进行了详细分析。通过对比可视化图像, 澄清了一些教学中常见的误区, 并指出了Orbital Viewer等常用软件中的错误。本文结果为可视化教学提供了重要素材, 为加深学生对类氢轨道性质的理解提供了一定的指导。

关键词: MATLAB; 可视化教学; 类氢轨道; 等值面

中图分类号: G64; O6

MATLAB-based Visualization of Hydrogen-Like Orbitals and Analysis of Relevant Teaching Problems

Yiying Yang, Rongxiu Zhu, Yuchen Ma, Dongju Zhang *

School of Chemistry and Chemical Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China.

Abstract: Hydrogen-like orbitals represent a crucial topic in the education of structural chemistry; however, existing textbooks usually present simplified schematic diagrams of their images. This paper employs MATLAB codes to systematically generate visualizations of the wave functions of hydrogen-like orbitals, including detailed isosurfaces of their angular components, followed by an in-depth analysis. By comparing these visualized images, we clarify several common misconceptions encountered in teaching and highlight errors found in widely used software, such as Orbital Viewer. The findings of this study provide valuable resources for visual teaching and offer significant insights to enhance students' understanding of the characteristics of hydrogen-like orbitals.

Key Words: MATLAB; Visualization teaching; Hydrogen-like orbitals; Isosurfaces

类氢原子是量子力学的经典模型, 其薛定谔方程及其解是结构化学教学中的重要内容^[1-7]。类氢轨道及其电子云图像是该部分教学的核心组成部分, 但由于轨道波函数形式复杂、涉及 r, θ, ϕ 三个变量, 并且包含复数和实数两种不同形式的解, 使得对其图像的表达较为复杂。大多数结构化学教材使用示意图进行描述, 有些仅展示实函数轨道^[1-4], 也有教材讨论复函数轨道^[5-7], 二者在形状上有的相同、有的相似、有的则完全不同。在教学过程中, 我们发现许多学生对这些不同形式的轨道及电子云缺乏清晰的认识, 存在较多的认知误区。因此, 利用现代可视化技术系统呈现波函数及电子云的高精度图像, 并通过对比分析各类图像的差异和联系, 是澄清模糊认识、提升教学效果、改进教学质量的关键措施。

收稿: 2024-11-01; 录用: 2024-12-18; 网络发表: 2025-03-13

*通讯作者, Email: zhangdj@sdu.edu.cn

基金资助: 国家自然科学基金(22273051); 山东省高等教育本科教学改革研究项目(Z2022169); 山东大学教育教学改革研究项目(2023Y061, 2023Y102, 2024Z07); 济南市科技局“新高校20条”项目(202228082)

MATLAB^[8]作为一种功能强大的科学与工程计算语言, 凭借其卓越的数值与符号运算能力以及强大的作图与拟合功能, 广泛应用于科研、技术和工程领域。本文主要应用MATLAB的数据可视化和图像处理功能, 通过编写其MATLAB代码, 优化图像显示参数, 系统绘制了类氢轨道波函数及其角度部分的高精度图像。通过强调波函数实数解和复数解的不同特征, 澄清了一些容易混淆的概念, 所得结果为可视化教学提供了重要素材, 所呈现的各类图像有助于学生加深对原子结构基本理论和基本概念的理解, 激发其学习兴趣。

类氢波函数 ψ 和电子云 $|\psi|^2$ 是 r, θ, ϕ 三个变量的函数, 在三维空间难以直接呈现“函数-变量”的关系。因此, 为描述类氢波函数及其电子云的性质, 通常需要通过降维、参数化和形象化描述等手段来解决维数问题, 从不同角度来审视这些函数的特性并获得不同的图形表现。降维方法基于 $\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$, 分别考察波函数及电子云随矢径 r 的变化(二维问题)和随角度 θ 和 ϕ 的变化情况(三维问题), 以揭示其径向分布和角度分布。参数化方法是指将 ψ 和 $|\psi|^2$ 参数化, 在三维或二维空间绘制 ψ 和 $|\psi|^2$ 的等值面、等值线及空间网格图等。形象化描述则是依据波函数的物理意义, 用黑点疏密表示电子在空间各点出现的几率分布。这些图形从不同角度、不同侧面反映了波函数的性质, 对于讨论化学键、分子构型等化学问题具有重要应用价值。

对于波函数的径向部分 $R(r)$, 由于其解为实函数且仅涉及一个变量, 因此“函数-变量”关系可以通过简单的描点作图呈现, 其图像清晰, 易于理解, 不易产生混淆, 在此不予赘述。本文主要讨论波函数 $\psi(r, \theta, \phi)$ 及其角度部分 $Y(\theta, \phi)$ 的等值面图像。

1 MATLAB函数

MATLAB提供了一系列功能强大的三维图形绘制函数, 本文应用该程序绘制原子轨道和电子云的三维等值面。需要调用的主要函数包括meshgrid、sqrt、atan2、abs、max、isosurface、patch、axis equal、view(3)、camlight、lightangle、material、lighting gouraud、quiver3等函数, 这些函数的调用语法及功能如下:

- (1) meshgrid: 在三维空间创建均匀网格点, 以便后续计算;
`[X, Y, Z_cartesian] = meshgrid(x, y, z); % 使用Z_cartesian避免与波函数中的Z冲突;`
- (2) sqrt: 计算径向距离, 用于确定电子与原子核的距离;
 atan2: 根据笛卡尔坐标计算极坐标的角度;
`R = sqrt(X.^2 + Y.^2 + Z_cartesian.^2); % 径向距离;`
`Theta = atan2(sqrt(X.^2 + Y.^2), Z_cartesian); % (theta)角;`
`Phi = atan2(Y, X); % (phi)角;`
- (3) figure; % 创建轨道图像;
 hold on; % 允许在现有图像上继续绘制新的内容, 而不会清除之前绘制的图形;
- (4) abs: 取目标数组的绝对值;
 Max: 取目标数组的最大值;
`iso_value = max(abs(Psi(:))) * 0.1; % 设置等值面的阈值以进行可视化;`
- (5) isosurface: 提取等密度面, 生成正值和负值的等值面数据;
`p1 = isosurface(X, Y, Z_cartesian, Psi, iso_value); % 创建正等值面;`
`p2 = isosurface(X, Y, Z_cartesian, Psi, -iso_value); % 创建负等值面;`
- (6) patch: 绘制等值面, 并设置颜色和边缘属性;
`patch(p1, 'FaceColor', [0.4, 0.4, 0.8], 'EdgeColor', 'none'); % 为正等值面设置蓝紫色;`
`patch(p2, 'FaceColor', [0.8, 0.8, 0.4], 'EdgeColor', 'none'); % 为负等值面设置淡黄色;`
- (7) axis equal; % 调整坐标轴等长以优化可视化效果;

- (8) view(3); % 调整为3D视角;
 (9) camlight; % 添加设置光源;
 lightangle(45, 45); % 调整光源方向;
 material([0.6 0.4 0]); % 调整对象的环境/漫反射/镜面反射强度;
 lighting gouraud; % 创建平滑的光影效果;
 (10) quiver3; % 添加三维坐标箭头效果。

在本文的补充材料中, 我们提供了几个用于绘制原子轨道3D图像的MATLAB源代码。这些代码可以直接在MATLAB程序中运行, 生成相应的3D图像。通过这些示例代码, 可引导学生举一反三, 替换代码中的波函数公式, 即可获得本文涉及的所有原子轨道和电子云的图像。

2 原子轨道 $Y(\theta, \phi)$ 的角度分布

$Y(\theta, \phi)$ 函数称为原子轨道角度部分, 有复数解和实数解两种形式。 $Y(\theta, \phi)$ 函数的复数解用量子数 l 和磁量子数 m 两个整数标注, 表示为 Y_{lm} , 如 Y_{20} , Y_{32} 等。这些函数是数学上著名的球谐函数。除 $m=0$ 的球谐函数为实函数外, 其他球谐函数均为复数形式, 如表1所示。这些复波函数在实空间中的图像, 是指其模 $|Y_{lm}(\theta, \phi)|$ 值随 θ 、 ϕ 的变化情况, 即同一球面不同方向上 $Y(\theta, \phi)$ 值的相对大小。由于 $|m|$ 相等的两个状态其模是相等的, 例如:

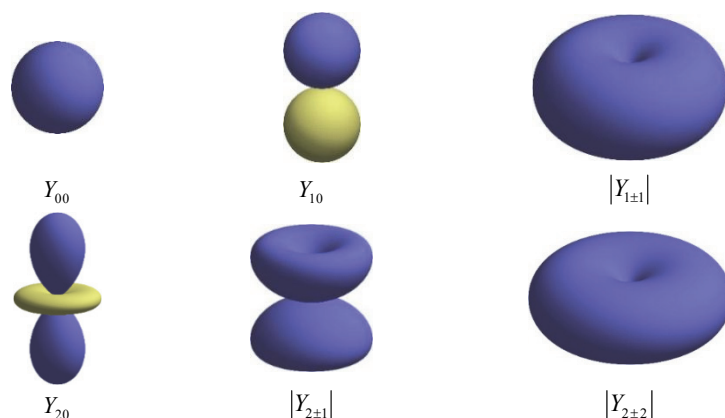
$$|Y_{1,1}| = \sqrt{Y_{11}^* Y_{11}} = \sqrt{Y_{1\bar{1}} Y_{11}} = \sqrt{Y_{1\bar{1}} Y_{11}^*} = |Y_{1\bar{1}}| = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} |\sin \theta|$$

因此 $|m|$ 相等的球谐函数图像是相同的。表1中所示的几个球谐函数的3D等值面示于图1。

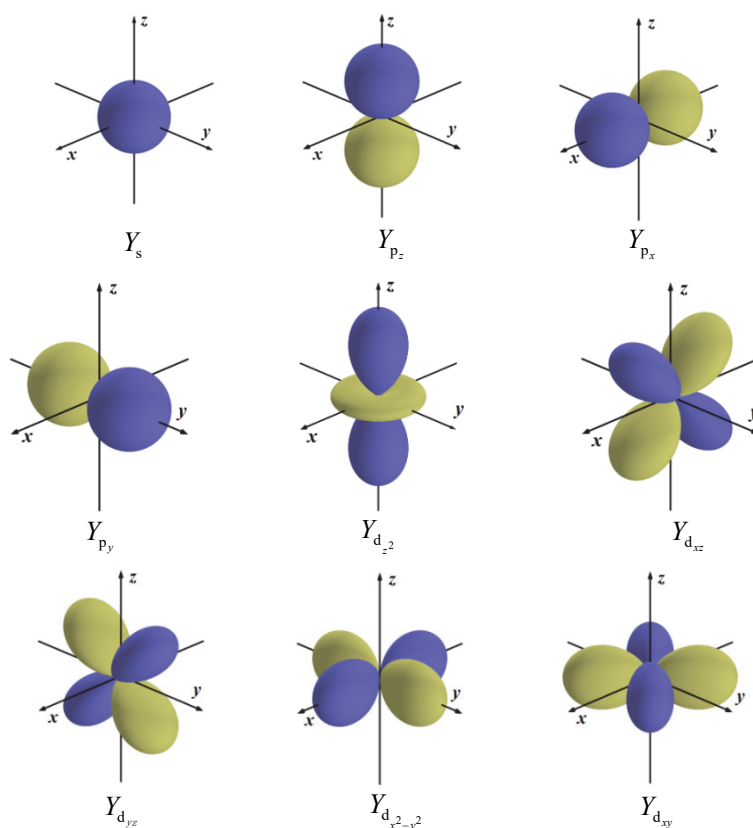
表1 $l=0-2$ 的 $Y(\theta, \phi)$ 函数

l	m	复数解 $Y_{lm}(\theta, \phi)$	实数解 $Y_{l(r)}$ (θ, ϕ)
0	0	$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$Y_s = Y_{00}$
1	0	$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$Y_{p_z} = Y_{10}$
	1	$Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta$	$\begin{cases} Y_{p_x} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \phi \\ Y_{p_y} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \phi \end{cases}$
	-1	$Y_{1\bar{1}} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta$	
2	0	$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$Y_{d_{z^2}} = Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	1	$Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta$	$\begin{cases} Y_{d_{xz}} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin 2\theta \cos \phi \\ Y_{d_{yz}} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin 2\theta \sin \phi \end{cases}$
	-1	$Y_{2\bar{1}} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta \cos \theta$	
	2	$Y_{22} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{i2\phi} \sin^2 \theta$	$\begin{cases} Y_{d_{x^2-y^2}} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\phi \\ Y_{d_{xy}} = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \sin^2 \theta \sin 2\phi \end{cases}$
	-2	$Y_{2\bar{2}} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-i2\phi} \sin^2 \theta$	

注意图1中 Y_{00} 、 Y_{10} 、 Y_{20} 的表达方式与其余函数不同, 未用其模表示。 Y_{00} 为一常数, 其三维等值面为一圆球, 均为正值; 而 Y_{10} 和 Y_{20} 均为实函数, 其值有正有负, 在3D等值面上用两种颜色表示, 它们的等值面分别有1个和2个节面。


 图1 原子轨道角度部分复数解 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ (球谐函数)的3D等值面

$Y(\theta, \phi)$ 方程的实数解, 除 $m=0$ 的情况外, 均由 $|m|$ 相等的两个状态线性组合得到, 记为 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$, 下标 l 为角量子数符号, 按 $l=0, 1, 2, 3\cdots$ 等分别记为s, p, d, f等; 下标 $f(r)$ 为一关于坐标 x, y, z 的函数, 取决于 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 的函数形式, $f(r)$ 与 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 的关系是 $Y_{l_f(r)} = f(r) / r^l$ 。表1给出了 $l \leq 2$ 的 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 函数。这些实函数不应再称为球谐函数, 它们已不再是角动量 z 分量算符的本征函数。通常所说的原子轨道的角度分布主要针对波函数的实数解, 它们的角度分布图像对于理解化学键的形成及其化学键类型具有重要意义。表1所列 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 函数的3D等值面示于图2。


 图2 原子轨道角度部分实数解 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 的3D等值面

显然，图2中 Y_s 、 Y_{p_z} 、 $Y_{d_{z^2}}$ 分别对应图1中的 Y_{00} 、 Y_{10} 、 Y_{20} ，这些函数本身是常数或实函数，虽用两种不同符号表达，函数没有变化，图像自然是一回事。图2中其他 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 的图像则与 Y_{lm} 的图像明显不同，实函数的等值面值有正负之区分，而复函数的等值面是其模的图像，均为正值。

由于 $Y(\theta, \phi)$ 函数只与量子数 l 和 m 有关，而与主量子数 n 无关，所以 l 和 m 相同的状态，其角度分布图像都是一样的。例如， $2p_z$ 、 $3p_z$ 、 $4p_z$ 等轨道的角度分布，统称为 p_z 轨道的角度分布。

图1和图2分别是 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ 和 $Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)$ 的3D等值面，类似地，连接 $|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$ 或 $|Y_{l_f(r)}(\theta, \phi)|^2$ 值相等的点所构成的曲面称为电子云的角度分布。电子云角度分布与轨道的角度图像类似，但相对而言更“瘦”一些，且所有值均为正值。例如， Y_{p_z} 和 $|Y_{p_z}|^2$ 均沿 z 轴方向取最大值，根据波函数的物理意义，归一化的波函数最大值不能超过1，将其最大值设为1，其他方向的 Y_{p_z} 值均小于1，因此 $|Y_{p_z}|^2 \leq |Y_{p_z}|$ ，即电子云的角度分布更瘦一些。图3列出了几个将 $Y(\theta, \phi)$ 与 $|Y(\theta, \phi)|^2$ 进行比较的例子，例如 $|Y_{p_z}|^2$ 与 Y_{p_z} 均是沿 z 轴有最大值，但前者是两个相切的“鸡蛋”，而后者是两个相切的球。

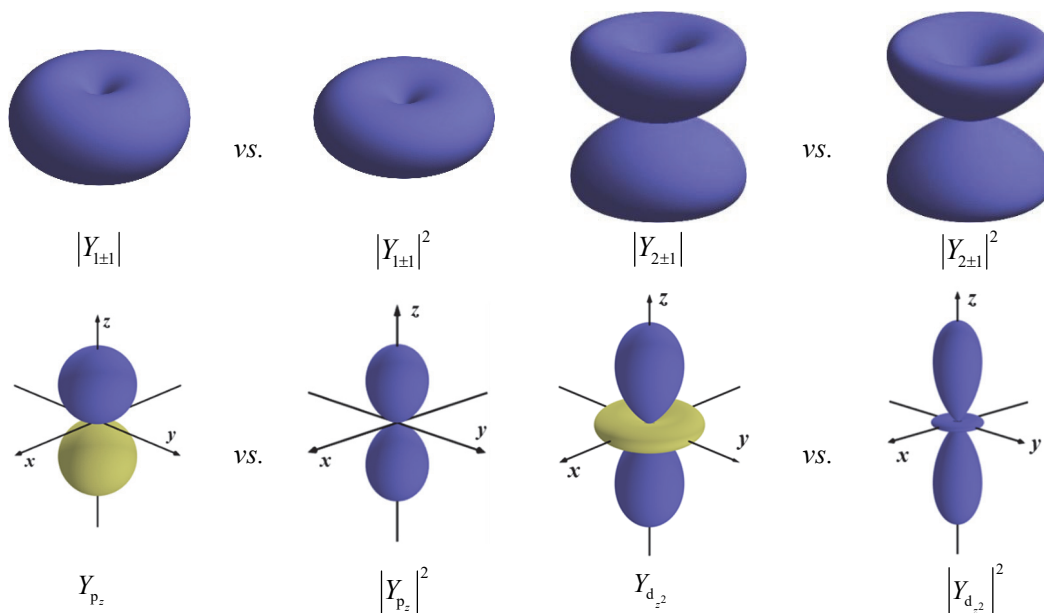


图3 波函数角度分布与电子云角度分布的比较

3 原子轨道 $\psi(r, \theta, \phi)$ 的空间分布

如前所述，原子轨道的空间分布可以通过等值面、等值线和空间网格图等多种方式呈现，其中最常用的是通过等值面展示波函数的形状。原子轨道的等值面是连接 $\psi(r, \theta, \phi)$ 值相同的点形成的一系列闭合曲面，通常被称为原子轨道轮廓图。

类似于 $Y(\theta, \phi)$ ， $\psi(r, \theta, \phi)$ 也有复数解和实数解两种形式，分别表示为 $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ 和 $\psi_{nl_f(r)}(r, \theta, \phi)$ 。表2给出了 n 为1-3对应的原子轨道波函数，包括复数解和实数解。两种形式的解其3D等值面的图像是不同的，多数教材通常给出波函数和电子云实数解的图像，少有教材给出复数解的图像。

在教学中我们发现，学生对这些氢轨道的理解容易混淆，常将两类图像混为一谈。特别是一些广泛使用的教学软件中也存在类似的错误，给教学带来了错误导向。例如Orbital Viewer软件^[9]（一款绘制原子轨道轮廓图的共享软件，有广泛应用^[10-12]），在绘制原子轨道轮廓图时，要求输入的是波函数复数解对应的量子数 n, l, m ，却显示出了实数解 ($\psi_{nl_f(r)}(r, \theta, \phi)$) 的图像，如图4所示。图中显示，输

入的是 ψ_{211} 的三个量子数，但展示的显然是 $2p_x$ 或 $2p_y$ 的轨道轮廓，与输入条件不匹配，误导学生错误地认为 $\psi_{211} = \psi_{2p_x}$ 或 $\psi_{211} = \psi_{2p_y}$ 。这里的错误在于混淆了波函数的复数解与实数解，复数解的3D等值面是指其模的图像，全为正值。

 表2 单电子原子波函数($n=1-3$)的复数解和实数解

$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$	$\psi_{n_l(r)}(r, \theta, \phi)$
$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$	$\psi_{1s} = \psi_{100}$
$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\psi_{2s} = \psi_{200}$
$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \cos \theta$	$\psi_{2p_z} = \psi_{210}$
$\psi_{211} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} e^{i\phi} \sin \theta$ $\psi_{21\bar{1}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} e^{-i\phi} \sin \theta$	$\begin{cases} \psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \sin \theta \cos \phi \\ \psi_{2p_y} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{5/2} r e^{-Zr/2a_0} \sin \theta \sin \phi \end{cases}$
$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}}(Z/a_0)^{3/2} \left(27 - 18\frac{Zr}{a_0} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Zr/3a_0}$	$\psi_{3s} = \psi_{300}$
$\psi_{310} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} \cos \theta$	$\psi_{3p_z} = \psi_{310}$
$\psi_{311} = \frac{2}{27\sqrt{6}}(Z/a_0)^{5/2} \left(r - \frac{Zr^2}{6a_0}\right) e^{-Zr/3a_0} e^{i\phi} \sin \theta$ $\psi_{31\bar{1}} = \frac{2}{27\sqrt{6}}(Z/a_0)^{5/2} \left(r - \frac{Zr^2}{6a_0}\right) e^{-Zr/3a_0} e^{-i\phi} \sin \theta$	$\begin{cases} \psi_{3p_x} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \cos \phi \\ \psi_{3p_y} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{5/2} \left(6 - \frac{Zr}{a_0}\right) r e^{-Zr/3a_0} \sin \theta \sin \phi \end{cases}$
$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} (3\cos^2 \theta - 1)$	$\psi_{3d_{z^2}} = \psi_{320}$
$\psi_{321} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} e^{i\phi} \sin \theta \cos \theta$ $\psi_{32\bar{1}} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} e^{-i\phi} \sin \theta \cos \theta$	$\begin{cases} \psi_{3d_{xz}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} \sin 2\theta \cos \phi \\ \psi_{3d_{yz}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} \sin 2\theta \sin \phi \end{cases}$
$\psi_{322} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} e^{i\phi} \sin^2 \theta$ $\psi_{32\bar{2}} = \frac{1}{162\sqrt{\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} e^{-i\phi} \sin^2 \theta$	$\begin{cases} \psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta \cos 2\phi \\ \psi_{3d_{xy}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}(Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} \sin^2 \theta \sin 2\phi \end{cases}$

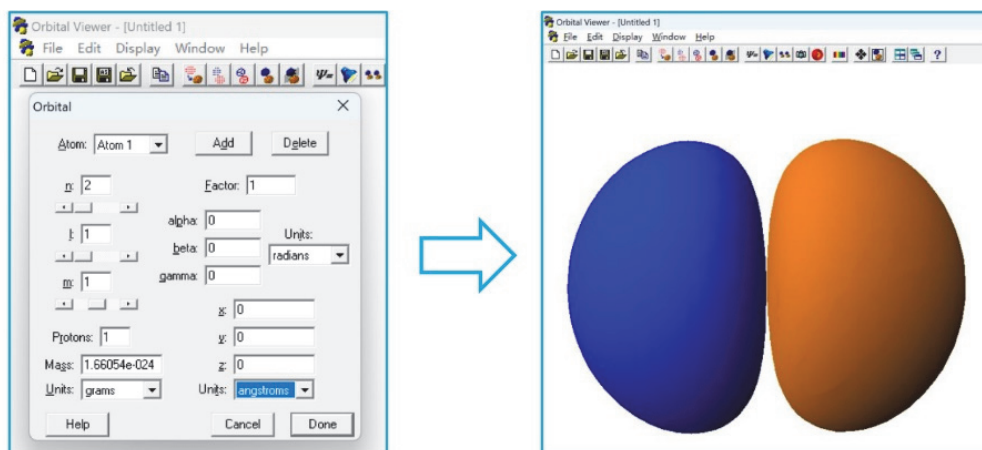


图4 Orbital Viewer软件的输入(左图)和输出(右图)

为引导学生正确认识类氢轨道和电子云的性质，我们以表2中 $m \neq 0$ 类氢轨道为例，绘制了其复数解和实数解的等密度面，结果展示于图5。

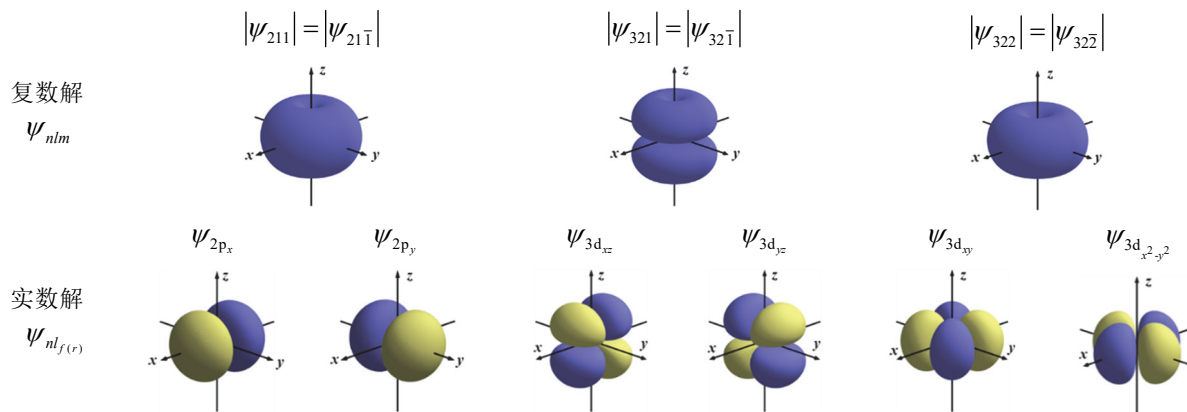


图5 类氢波函数复数解和实数解等密度面的比较(各类轨道标度不同)

可以看出，这些 $m \neq 0$ 的类氢轨道，其复数解与实数解的3D等密度面明显不同，不能混为一谈。类似于前面的球谐函数 Y_{lm} ，这里的类氢波函数的复数解 ψ_{nlm} ，其 $|m|$ 相等的两个状态的模是相等的，具有相同的3D等密度面，等密度值均为正值。例如：

$$|\psi_{321}| = \sqrt{\psi_{321}^* \psi_{321}} = \sqrt{\psi_{32\bar{1}} \psi_{321}} = \sqrt{\psi_{32\bar{1}}^* \psi_{32\bar{1}}} = |\psi_{32\bar{1}}| = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} (Z/a_0)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} |\sin \theta| |\cos \theta|$$

对于类氢波函数的实数解，其3D等密度面上的等密度值有正有负， $|m|$ 相等的两个轨道虽然形状相同，但有不同的空间取向。

另外还要注意原子轨道轮廓图与原子轨道角度分布图的区别。原子轨道轮廓图是 ψ 相同的点构成的曲面，不仅与 $Y(\theta, \phi)$ 相关，而且与 $R(r)$ 相关。一方面，加入径向部分后，轨道形状发生了变化。如包含径向函数 $R_{20}(r)$ 的 ψ_{2p_z} 轨道，其形状类似于“一对馒头”，而不包含该径向函数的 Y_{p_z} ，其形状为一对相切的球。另一方面，主量子数 n 不同的轨道，既使其 $Y(\theta, \phi)$ 相同，其轨道轮廓并不相同，如 ψ_{2p_z} 与 ψ_{3p_z} 轨道，前者只有一个角度节面，而后者有1个球形径向节面和1个平面角度节面，如图6所示。仅1s轨道，由于其 $Y(\theta, \phi)$ 函数为一常数 ($\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$)，因此 ψ 与 $Y(\theta, \phi)$ 的等密度面有相同的图像，均为一球面。全部其他轨道，其原子轨道 (ψ) 轮廓图与其角度分布图均不相同。有些原子轨道的轮廓图与其相应的角度分布图有些类似，但概念不同，应予以区分。例如，比较 $\psi_{3d_{xy}}$ 的原子轨道轮廓图与其相应的角度分布图 $Y_{d_{xy}}$ (见图2和图5)，应注意理解它们之间的区别与联系。在化学专业基础课程教材中，如《物质结构基本原理》^[3]、《基础有机化学》^[13]等教材采用原子轨道的角度部分甚至用示意图定性描述原子轨道的形状。这些教材在讨论共轭体系时，采用原子轨道的角度部分(两个相切的圆)或示意图(哑铃)描述碳原子的2p轨道，这些图像只是原子轨道的近似或示意表达，不是原子轨道的真实形状。

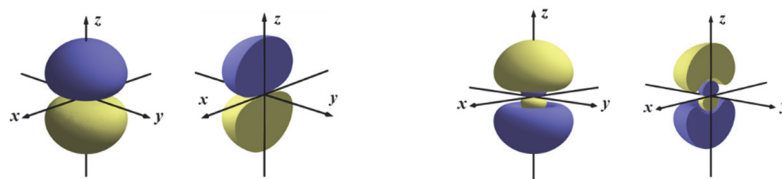


图6 类氢原子的 ψ_{2p_z} 与 ψ_{3p_z} 轨道及其切面图

4 结语

本文通过MATLAB程序实现了类氢轨道的可视化,给出了高精度的三维波函数图像,为结构化学课程中原子结构部分的教学提供了有益素材。结合类氢轨道教学中易混淆的问题,论文重点强调了波函数及其角度部分实数解与复数解的不同图像,指出了常用教学软件Orbital Viewer中的不足之处。本文结果有助于学生加深对类氢轨道性质的理解,本文研究方法为结构化学的可视化教学提供了重要启示。

补充材料: 可通过链接<https://www.dxhx.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.
- [2] 孙宏伟, 彭谦. 结构化学. 第2版. 北京: 高等教育出版社, 2024.
- [3] 郭用猷, 张冬菊, 刘艳华. 物质结构基本原理. 北京: 高等教育出版社, 2015.
- [4] 景欢旺. 结构化学. 第2版. 北京: 科学出版社, 2023.
- [5] 李炳瑞. 结构化学. 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2020.
- [6] 林梦海, 吕鑫. 结构化学. 第4版. 北京: 科学出版社, 2019.
- [7] 潘到皚, 李奇. 结构化学. 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2023.
- [8] Mathworks. MATLAB version: 9.13.0 (R2022b), The MathWorks Inc.: Natick, MA, USA, 2022. [2024-10-02]. <https://www.mathworks.com>
- [9] Manthey, D. Orbital Viewer. [2024-10-01]. <http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>
- [10] 肖信, 袁中直. 大学化学, **2003**, *18* (4), 41.
- [11] 孙宏伟, 陈兰. 大学化学, **2019**, *34* (7), 100.
- [12] 余凡, 韩静华, 胡冰倩, 李堂明, 梁昊, 李艾华, 王亮, 李宝. 大学化学, **2022**, *37* (3), 2105063.
- [13] 邢其毅, 裴伟伟, 徐瑞秋, 裴坚. 基础有机化学. 第4版. 北京: 北京大学出版社, 2017.