

用 MATLAB 绘制原子轨道及杂化轨道角度部分图

吕申壮

经 Hollow Man 校对

(乐山师范学院 化学学院 四川 乐山 614000)

摘要:原子轨道和杂化轨道是量子化学、结构化学研究和教学的重要内容,其图形能加深理解。文章介绍了用 MATLAB 绘制原子轨道及杂化轨道角度部分图,通过设定 surf(X,Y,Z,C)的第四个参数,以达到原子轨道的角度部分的正负值用不同的颜色表示。研究表明 MATLAB 是解决结构化学数值计算和数据可视化问题的一种非常有效的工具。

关键词: MATLAB 原子轨道 杂化轨道 结构化学

中图分类号:O6-39 O641 文献标志码:A 文章编号:1009-8666(2015)12-0026-03

DOI:10.16069/j.cnki.51-1610/g4.2015.12.008

0 引言

原子轨道和电子云图形在化学中应用十分广泛,是结构化学和量子化学的重要内容之一^[1-3]。该图形属于四维图形,难于想象,常常用径向部分和角度部分分别画出。

MATLAB 是一种简单易用的程序语言,具有强大的科学计算数据处理能力和出色的图形处理功能。通过对图形的线型、立面、色彩、光线以及视角等属性的处理,将计算数据的特性表现得淋漓尽致。文献[4]就采用 MATLAB 绘制原子轨道和电子云图形进行了详细的报道,可美中不足的是原子轨道角度部分的正负值(相位问题)未能在图中表示出,图中的不同颜色只反映了 z 方向值的多少。本文介绍一种能用颜色区分原子轨道相位问题及其 sp 杂化轨道相位问题的方法。

1 方法

sp sp² sp³ 等性杂化用矩阵表示分别为^[1]:

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s \\ p_z \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{1/3} & \sqrt{2/3} & 0 \\ \sqrt{1/3} & -\sqrt{1/6} & \sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/3} & \sqrt{1/6} & -\sqrt{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s \\ p_x \\ p_y \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{bmatrix} \quad (3)$$

由 MATLAB 用户自定义函数分别写出原子轨道及其杂化轨道的函数,将 θ, ϕ 的值离散化求出相应波函数的值,用 sph2cart 将球坐标表示转化为直角坐标表示,根据波函数值的正负定义出表示颜色的矩阵 C,再用 surf(X,Y,Z,C)画出相应的图。

1.1 函数文件

将下列每个函数分别保存为不同文件,文件名要与函数名相同,扩展名为 m。

```
function y=Ys(theta,phi) y=sqrt(1/4/pi)*phi.  
^0;
```

```
function y=Ypx(theta,phi) y=sqrt(3/4/pi)*
```

Hollow Man 注:此论文中
所有标点都为全角,如果想
要直接复制请手动替换为半
角符号。

收稿日期:2015-10-20

作者简介:吕申壮(1964—),男,四川乐山人。乐山师范学院化学学院教授,博士后,研究方向:量子化学。

```

(sin(theta).*cos(phi));
function y=Ypy (theta ,phi) y=sqrt(3/4/pi)*
(sin(theta).*sin(phi));
function y=Ypz(theta ,phi) y=sqrt(3/4/pi)*cos
(theta);
function y=Ydz2(theta ,phi) zt=cos(theta) y=
sqrt(5/16/pi)*(3*ct.*ct-1);
function y=Ydx2y2 (theta ,phi) st=sin(theta);
y=sqrt(15/16/pi)*st.*st.*cos(2*phi);
function y=Ydxy(theta ,phi) st=sin(theta) y=
sqrt(15/16/pi)*st.*st.*sin(2*phi);
function y=Ydz(theta ,phi) zt=cos(theta) st=
sin(theta) y=sqrt(15/4/pi)*st.*ct.*cos(phi);
function y=Ydyz(theta ,phi) zt=cos(theta) y=
sqrt(15/16/pi)*st.*ct.*sin(phi);
function y=Yfz3(theta ,phi) zt=cos(theta) y=
1/4*sqrt(7/pi)*(5*(ct.^3)-3*ct);
function y=Yfx2 (theta ,phi) zt=cos(theta);
st=sin(theta) a=1/8*sqrt(42/pi);
y=a*st.*(5*ct.*ct.*cos(phi)-cos(phi));
function y=Yfyz (theta ,phi) zt=cos(theta);
st=sin(theta);
a=1/8*sqrt(42/pi) y=a*st.*(5*ct.*ct.*sin(phi)
-sin(phi));
function y=Yfzxy(theta ,phi) st=sin(theta) zt=
cos(theta);
y=1/4*sqrt(105/pi)*st.*st.*ct.*sin(2*phi);
function y=Yfzx2_y2 (theta ,phi) st=sin
(theta) zt=cos(theta);
y=1/4*sqrt(105/pi)*st.*st.*ct.*cos(2*phi);
function y=Yfxx2_y2 (theta ,phi) st=sin
(theta) y=1/8*sqrt(70/pi)*st.*st.*st.*cos(3*phi);
function y=Ysp_1(theta ,phi) y=sqrt(1/2)*(Ys
(theta ,phi)+Ypz(theta ,phi));
function y=Ysp_2(theta ,phi) y=sqrt(1/2)*(Ys
(theta ,phi)-Ypz(theta ,phi));
function y=Ysp2_1(theta ,phi) y=sqrt(1/3)*Ys
(theta ,phi)+sqrt(2/3)*Ypx(theta ,phi);
function y=Ysp2_2(theta ,phi);
y=sqrt (1/3)*Ys (theta ,phi) -sqrt(1/6)*Ypx
(theta ,phi)+sqrt(1/2)*Ypy(theta ,phi);
function y=Ysp2_3(theta ,phi);
y=sqrt (1/3)*Ys (theta ,phi) -sqrt(1/6)*Ypx
(theta ,phi)-sqrt(1/2)*Ypy(theta ,phi);

```

```

function y=Ysp3_1(theta ,phi);
y=1/2*( Ys (theta ,phi)+Ypx (theta ,phi)+Ypy
(theta ,phi)+Ypz(theta ,phi));
function y=Ysp3_2(theta ,phi);
y=1/2*( Ys (theta ,phi)-Ypx (theta ,phi)+Ypy
(theta ,phi)-Ypz(theta ,phi));
function y=Ysp3_3(theta ,phi);
y=1/2*( Ys (theta ,phi) -Ypx (theta ,phi) -Ypy
(theta ,phi)+Ypz(theta ,phi));
function y=Ysp3_4(theta ,phi);
y=1/2*( Ys (theta ,phi) +Ypx (theta ,phi) -Ypy
(theta ,phi)-Ypz(theta ,phi));

```

1.2 命令文件

将下面的命令文件保存为扩展名为 m 的文件(相当于 DOS 的批处理文件) 画不同的图只需要改变调用函数 其中“%”后为注释。

```

p=-pi/2 :pi/60 :pi/2 ; t=0 :2*pi/100 :2*pi ; [P ,
T]=meshgrid(p ,t) ; theta=pi/2-P ,phi=T ;
R=Ysp_1 (theta ,phi) ; %改变此句调用其他
函数

```

```

R1=abs(R) [n ,m]=size(R) ,C=ones(n ,m) ;
i=find(R<0) ;%寻找 R<0 的指标
C(i)=0 ;
[X ,Y ,Z]=sph2cart (T ,P ,R1) ; surf(X ,Y ,Z ,
C) ;

```

```

xlabel('x') ylabel('y') zlabel('z') axis equal ;
rotate3d on ;%按着鼠标拖动图形可以旋转
也可以将最后一句改为如下语句制成动画 ;
m=moviein(20) ;%建立一个 20 列大矩阵
for i=1 :20
view(-37.5+24*(i-1) ,30) ;%改变视点
m(:,i)=getframe ;%将图形保存到 m 矩阵
end
movie(m ,2) ;%播放画面 2 次
也可以下面语句保存为 M 文件 画平面极坐
标图 :

```

```

t =0 :pi/50 :2*pi ,phi =0 :pi ,theta =t ,r =(Ysp_1
(theta ,phi)) ,polar(t ,abs(r) ,'-r') ;
i=find(r>0) ,r(i)=nan ,hold on ,polar(t ,abs(r) ,
'-b') ;

```

1.3 图形输出示例

下图为一些示例，分别为 sp 杂化的立体图、sp 杂化的极坐标图、 p_x 、 $d_{x^2-y^2}$ 、 f_{zxy} 和 f_z 的立体图。

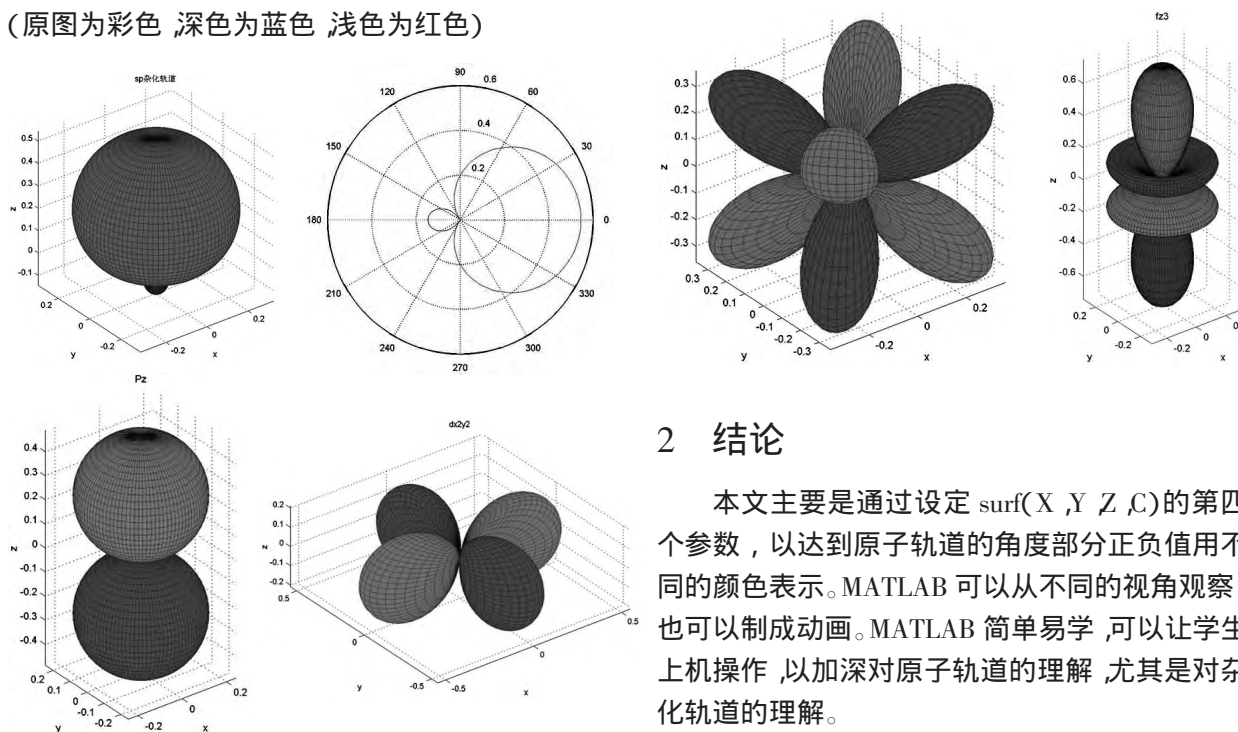
Hollow Man 勘误：此处缺少了 st=sin(theta)；

Hollow Man 勘误：此处应为 st

Hollow Man 注：已知当函数为 Ys.m 时，使用极坐标画图存在 BUG：错误使用 polar (line 73) THETA 和 RHO 的大小必须相同。

Hollow Man 勘误：此处缺少了；

(原图为彩色,深色为蓝色,浅色为红色)



2 结论

本文主要是通过设定 $\text{surf}(X, Y, Z, C)$ 的第四个参数, 以达到原子轨道的角度部分正负值用不同的颜色表示。MATLAB 可以从不同的视角观察, 也可以制成动画。MATLAB 简单易学, 可以让学生上机操作, 以加深对原子轨道的理解, 尤其是对杂化轨道的理解。

参考文献:

- [1]徐光宪, 黎乐民. 量子化学基本原理和从头计算法:上册[M]. 北京:科学出版社, 1984:217-242.
- [2]徐光宪, 王祥云. 物质结构[M]. 第2版.北京:高等教育出版社, 1987:37-45.
- [3]周公度, 段连运. 结构化学基础[M]. 第2版.北京:北京大学出版计, 1995:491-493.
- [4]刘平, 张大顺. 使用 MATLAB 绘制原子轨道和电子云图形[M]. 计算机与应用化学, 2003, 20(4):533-536.

Drawing Angular Part of Atomic Orbital and Hybrid Orbital By Using MATLAB

LV Shenzhuang

Checked by Hollow Man

(School of Chemistry, Leshan Normal University, Leshan Sichuan 614000, China)

Abstract The Atomic orbital and hybrid orbital is an important part in the research and education of quantum chemistry and structure chemistry. The graphical presentation can make students deeply understand them. It is illustrated to draw angular parts of the atomic orbital and the hybrid orbital with MATLAB and the different signs of the function are shown in the different color by setting the fourth parameter of function surf (X, Y, Z and C). The result shows that MATLAB is a powerful tool to solve the problems of numerical calculation and data visualization in structural chemistry.

Key Words MATLAB ;Atomic Orbital ;Hybrid Orbital ;Structural Chemistry

[责任编辑:李书华]