

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2020.05.022

基于 MATLAB 对球谐函数及其 原子轨道的可视化研究

郑兴荣, 杨 伟, 张馨丹, 杜晨敏, 李小龙, 唐 欢

(陇东学院电气工程学院物理系, 庆阳 745000)

摘 要: 球谐函数是拉普拉斯方程的球坐标系形式解的角度部分, 在经典场论、量子力学等领域广泛应用. 基于量子力学中的角动量算符和连带勒让德方程, 设定广义函数的条件下, 利用分离变量法推导出球谐函数的一般方程式, 进而解出 n, l 分别为 0, 1, 2, 3, 4, 5 时的球谐函数. 另外, 根据球坐标的自变量定义域, 设定自变量 θ, φ 的条件下, 得到了不同状态的球谐函数及其原子轨道. 最后, 利用 MATLAB 软件对不同的 n, l 所对应的球谐函数和原子轨道进行仿真模拟, 得到了简明扼要、直观清晰的可视化结果. 这种可视化的研究思路为研究球谐函数及其原子轨道的其他特性提供了一条便利的途径.

关键词: 球谐函数; 原子轨道; 连带勒让德方程; 可视化研究; 角动量算符; 分离变量法; 数值仿真

中图分类号: O571.2; O562.1

文献标识码: A

文章编号: 0490-6756(2020)05-0968-07

Visualization research of the spherical harmonic function and atomic orbital based on MATLAB software

ZHENG Xing-Rong, YANG Wei, ZHANG Xin-Dan, DU Chen-Min, LI Xiao-Long, TANG Huan

(Department of Physics, College of Electrical Engineering, Longdong University, Qingyang 745000, China)

Abstract: The spherical harmonic function is the angular part of the form solution of the spherical coordinate system of the Laplace equation. It is widely used in classical field theory, quantum mechanics and other fields. Based on the angular momentum operator and associated Legendre equation in quantum mechanics, the general equation of spheric harmonic function is deduced using the separation variable method under the generalized function condition, and then the spherical harmonic function is obtained when n and l are 0, 1, 2, 3, 4 and 5, respectively. According to the independent variable domain of spherical coordinate, under the independent variables θ, φ condition, spheric harmonic function and its atomic orbitals at different states are studied. Finally, using MATLAB software, we simulate spheric harmonic function and its atomic orbitals at different n, l , then obtain concise, readable and clear visualization results. The visualization study provides a feasible way to investigate other characteristics for spheric harmonic function and its atomic orbitals.

Keywords: Spherical harmonic function; Atomic orbitals; Associated Legendre equation; Visualization research; Angular momentum operators; Separation variable method; Simulation

收稿日期: 2020-01-18

基金项目: 甘肃省教育厅高等学校创新能力项目(2019A-112); 国家自然科学基金(11565018)

作者简介: 郑兴荣(1986—), 男, 甘肃天水人, 副教授, 主要研究凝聚态理论物理. E-mail: zhengxingrong2006@163.com

1 引言

量子力学是描述微观世界,研究微观粒子运动规律以及相关特性的一门理论和学科^[1-4],与相对论一起被认为是现代物理学的两大支柱,且这两门学科是许多理论和学科的基础,尤其是近几十年出现的新学科,如物理学中的群论、核结构、电子结构理论、强子物理和粒子物理学、计算物理学、固体物理学、原子物理学、量子化学、分子生物学、拓扑学等^[5-12]. 在许多现代技术装备中,量子力学及其相关特性的效应起了重要的作用. 从激光、电子显微镜、原子钟到核磁共振的医学图像显示装置,都关键地依靠了量子力学的原理和效应. 根据量子理论,粒子的行为常常像波,用于描述粒子行为的“波函数”预测一个粒子可能的特性. 近年来,随着计算机技术的高速发展,计算机三维重构技术日趋成熟,结合计算物理方法和 MATLAB 软件的强大功能使得抽象量子理论的可视化分析更加形象、逼真^[13-16]. 基于 MATLAB 软件的可视化研究不仅运用在理论和实验教学方面^[17-19],而且在科学研究上的发展更为迅速^[20-24]. 因此,微观、抽象粒子的可视化被众多研究者进行了大量的研究,尤其是近十几年已趋于白热化^[20, 25-26]. 本文根据量子力学中角动量算符和连带勒让德方程^[27-30],在设定广义函数的条件下利用微积分下的分离变量法推出球谐函数的一般方程式^[31],把不同的角量子数和磁量子数代入通项中,进而得出不同的角量子数和磁量子数下的球谐函数^[32-34]. 而不同的角量子数对应不同的 s, p, d, f... 状态,因此利用 MATLAB 软件强大的作图功能,对不同的 n, l 所对应的球谐函数以及不同的 n, l 所对应的原子轨道进行仿真模拟,其可视化的结果对研究球谐函数及其原子轨道提供了一条便利的途径.

本文利用 MATLAB 仿真模拟功能得到可视化的结果,这种可视化结果可以直观地、详细地、具体地观测到球谐函数及其原子轨道的运动特性,将一个抽象的、难懂的问题具体化和简易化. 本课题的前期工作已经将 n 维线性谐振子、氢原子进行了可视化研究,结合本课题的研究结果,已经证明了对抽象的量子理论进行可视化研究是一种新的研究思路,它既可以当做实验来验证理论,也可以作为理论指导实验. 因此,本文的这种创新具有很大的科学研究潜力、市场价值和应用价值.

2 球谐函数的理论模型与推导

2.1 角动量算符

根据量子理论,角动量算符 $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ 在直角笛卡尔坐标的三个分量形式为

$$\begin{cases} \hat{L}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} (y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_y = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} (x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \end{cases} \quad (1)$$

因此,有

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (2)$$

为了讨论角动量算符的本征值方程,接下来本文把这些算符用球坐标来表示. 令

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (3)$$

其中 $\varphi \in [0, 2\pi]$, $\theta \in [0, \pi]$. 利用几何知识,对 $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ 两边的 x, y, z 求偏导数,得

$$\begin{cases} \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial r}{\partial y} = \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi \\ \frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r} = \cos \theta \end{cases} \quad (4)$$

同理,对 $\cos \theta = z/r$ 两边的 x, y, z 求偏导数,有

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{1}{r} \cos \theta \sin \theta \cos \varphi = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{1}{r} \sin \theta \sin \varphi \cos \theta = \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \theta \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{1}{r} \sin \theta \end{cases} \quad (5)$$

对 $\tan \varphi = y/x$ 两边的 x, y, z 求偏导数,有

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{1}{\sec^2 \varphi} \frac{y}{x^2} = -\cos^2 \varphi \frac{\sin \varphi}{\cos \varphi} \frac{1}{r \sin \theta \cos \varphi} = \\ \quad -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \cos^2 \varphi \frac{1}{r \sin \theta \cos \varphi} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \end{cases} \quad (6)$$

利用“链式法则”求偏微分,则有

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \\ \frac{1}{r} \cos\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin\varphi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \\ \frac{1}{r} \cos\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos\varphi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases} \quad (7)$$

将公式(7)代入公式(1)(2)中,得到用球坐标表示的 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z, \hat{L}^2$ 表示的式子:

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{cases} \quad (8)$$

所以

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (9)$$

2.2 球谐函数

由上式可知,这些角动量算符与径向坐标 r 无关,只与角度 θ 和 φ 有关,所以角动量算符平方的本征值方程为

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \lambda \hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (10)$$

即

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \cdot \\ & Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \lambda \hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (11)$$

在保证函数 $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ 为有限的条件下,利用分离变量法 $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ 可求得该二阶偏微分方程. 即

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (12)$$

则角动量平方算符的本征值为

$$L^2 = l(l+1) \hbar^2, \quad (13)$$

其中 $l=0,1,2,3,\dots$ 称为角量子数.

利用缔合勒让德方程,归一化性质等,得到角动量平方算符的本征函数为

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = N_{l,m} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (14)$$

这就是球谐函数. 其中 $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ 为缔合勒让德多项式. l 为角量子数,表征角动量的大小. $m(m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$ 为磁量子数,对应于一个 l 的值, m 可以取个 $(2l+1)$ 值. $N_{l,m}$ 为归一化因子,其表达式如下:

$$N_{l,m} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} \quad (15)$$

球谐函数是角动量和 z 分量的共同本征函数,全部的球谐函数构成一个正交归一的完备集合,即

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = 1 \quad (16)$$

3 仿真结果与讨论

3.1 利用 MATLAB 对球谐函数进行仿真

根据前面球谐函数的理论推导,针对不同的轨道量子数 l 和磁量子数 m ,利用 MATLAB 进行编程,得到了 21 组不同的球谐函数图像,如图 1 所示. 通过对球谐函数可视化的研究,将抽象化转变为具体化,加深了对球谐函数的理解.

由图 1 可以看出,当 $l=m=0$ 时,球谐函数的可视化图形是一个均匀的球体;当 $l=m \neq 0$ 时,图形是由 $2l$ 或者 $2m$ 个椭球水平叠加而成;当 $m=1$ 时,对于不同的 l 值,图形是由 $2n$ ($n=1,2,3,\dots$) 个椭球上下叠加而成;当 $n=3$ 且 $l>n$ 时,图形由 $6(n-2)$ 个椭球上下叠加而成. 例如,当 $l=m=0$ 时,是一个均匀的球体;当 $l=1, m=1$ 时,是两个均匀球在水平方向上叠加在一起构成的;当 $l=2, m=0$ 时,是两个球和一个圆饼状在竖直方向上叠加在一起构成的;而当 $l=2, m=1$ 时,是四个椭球在竖直方向上叠加在一起构成的;当 $l=2, m=2$ 时,是四个椭球在水平方向上叠加在一起构成的;当 $l=3, m=0$ 时,是由两个球和两个圆饼状叠加在一起构成;当 $l=3, m=1$ 时,由四个椭球和两个圆饼状叠加在一起构成;当 $l=3, m=2$ 时,由八个椭球上下叠加在一起构成;当 $l=3, m=3$ 时,由六个椭球叠加在一起构成;当 $l=4, m=4$ 时,由八个椭球叠加在一起构成;当 $l=4, m=3$ 时,由上下各为六个椭球叠加在一起构成的;当 $l=5, m=1$ 时,由上部两个椭球中间六个椭球下部两个椭球叠加在一起构成的.

这种可视化的结果为研究球谐函数的其他特性提供了一种更为简明扼要、直观清晰的途径.

3.2 球谐函数的原子轨道的仿真模拟

原子轨道在微观粒子、结构化学中的应用非常广泛,是微观结构和量子化学研究中的重要内容. 球谐函数原子轨道图形种类繁多、形态复杂,不易理解. 基于此,本文利用前面的理论推导,结合 MATLAB 的作图功能,对球谐函数的原子轨道进行了三维和彩色平面等值线图仿真模拟,如图 2 所

示. 球谐函数原子轨道中不同的角量子数对应不同的 状态, l 为 $0, 1, 2, 3 \cdots$, 分别对应的状态为 $s, p, d, f \cdots$.

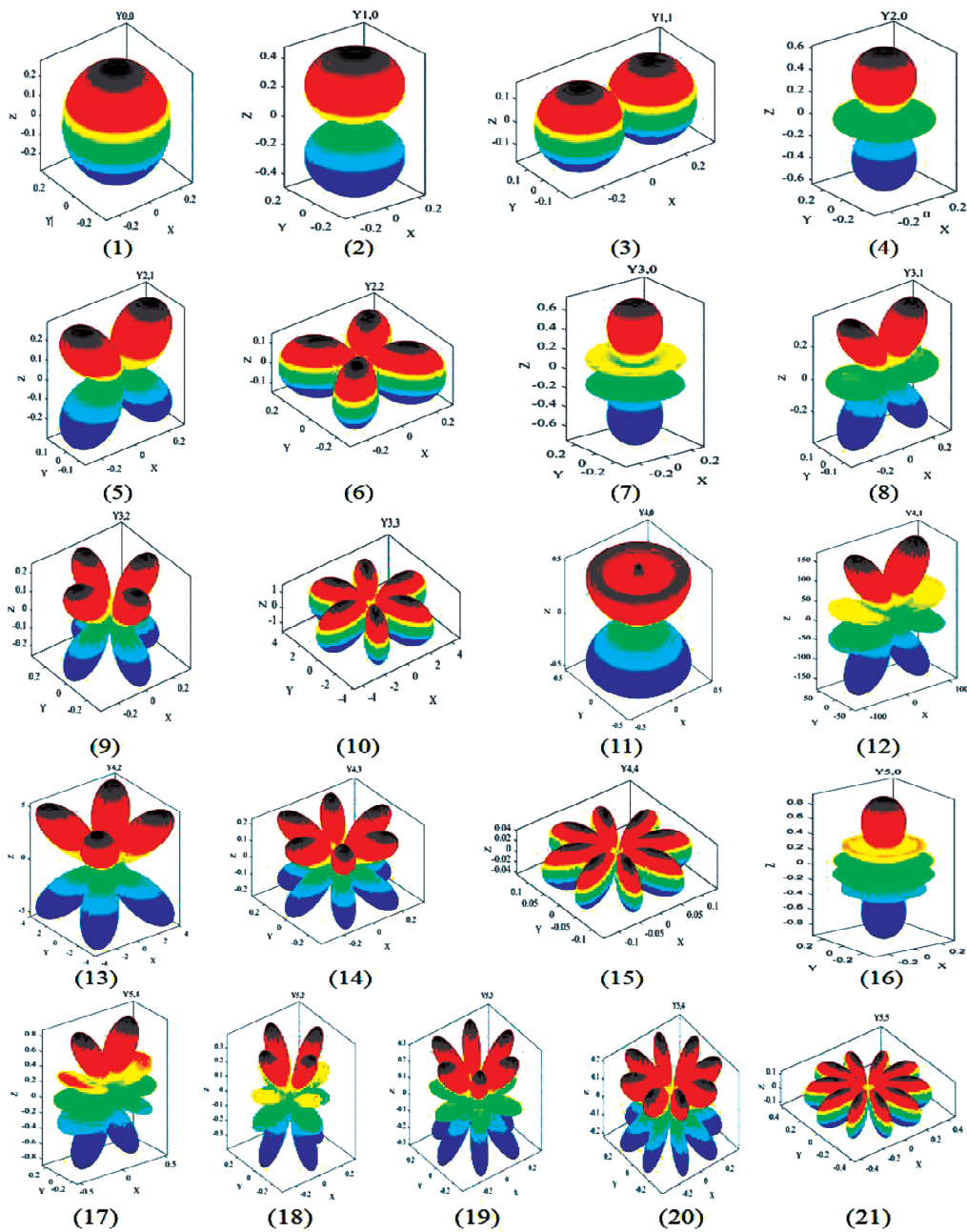


图 1 球谐函数的仿真模拟图
Fig. 1 Simulation diagrams of the spherical harmonic functions

由图 2 可以看出, 仿真模拟出的可视化图形可以直观地观测到原子轨道的运动情况, 不同的颜色代表原子轨道的运动出现在空间的不同位置, 在原子运动过程中存在极值, 通过仿真图的颜色深浅可以直观地得出极值所在区域.

这种对三维立体和彩色平面等值线进行的可视化图形, 可以加深对原子轨道运动情况的理解, 为微观结构的研究提供了更为简单、可操作性强的方法.

利用 MATLAB 的仿真功能, 对原子轨道所对应的径向波函数绘制二维平面曲线图, 见图 3.

由图 3 可以看出, 当 r 发生变化时, 径向分布几率密度也随之发生改变. 当主量子数 n 越大时, 原子轨道的最可几径向距离越大, 则原子轨道的扩散程度越大; 对单原子而言, 当主量子数 n 相同时, 角量子数 l 对原子轨道的径向分布影响不大, 仅随角量子数 l 的增大, 最可几径向距离稍有减小.

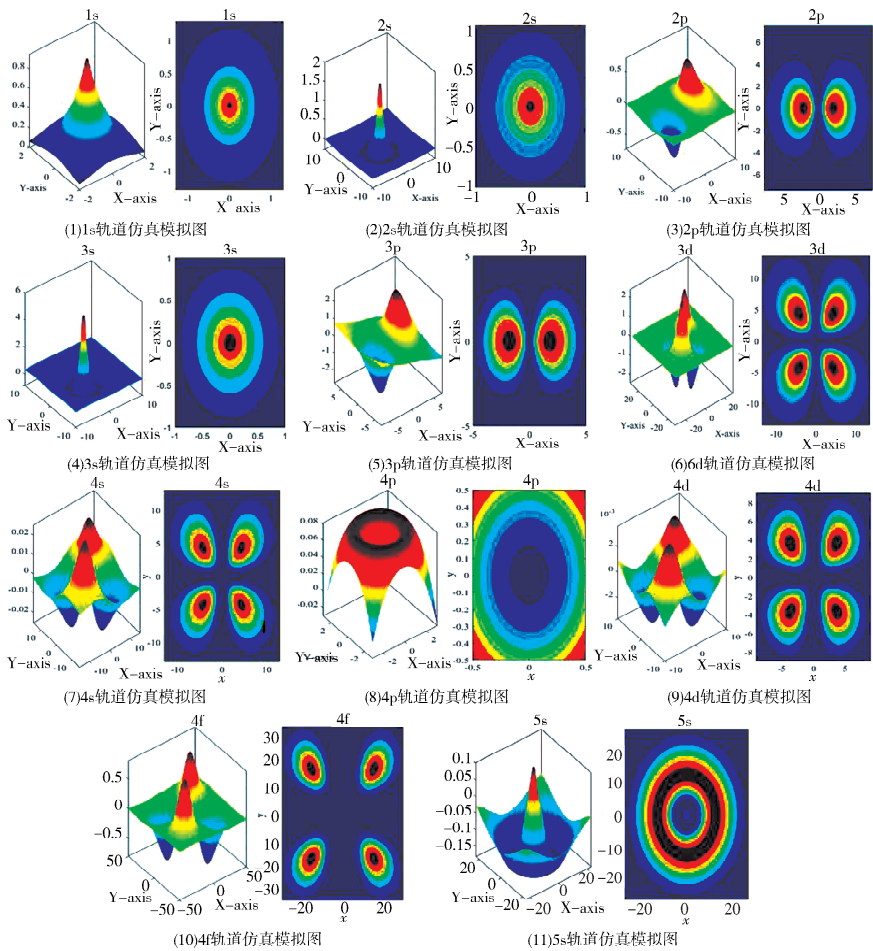


图 2 球谐函数原子轨道的仿真模拟图

Fig. 2 Simulation diagrams of the atomic orbitals of spherical harmonic function

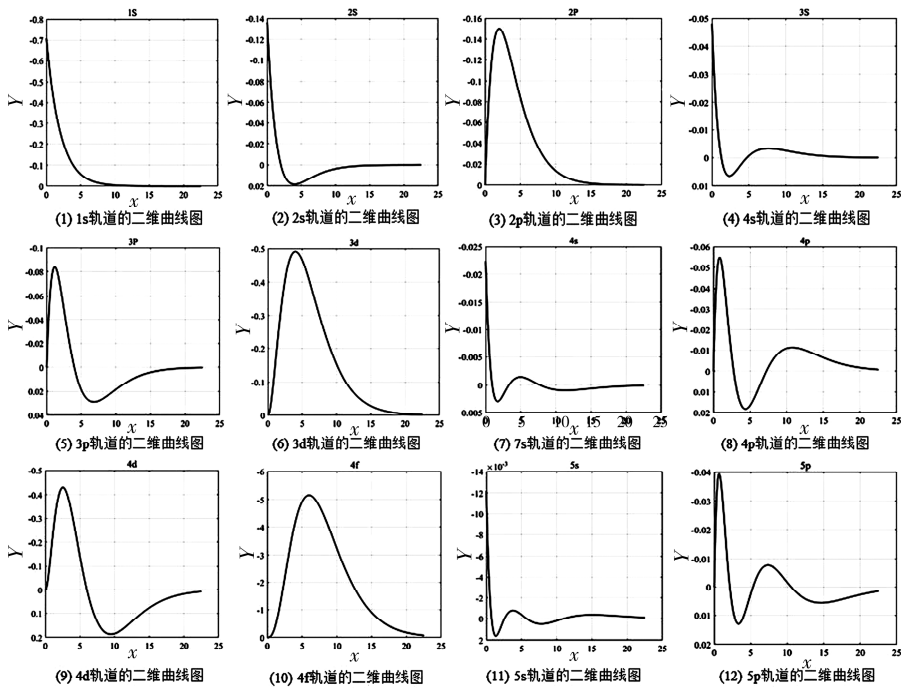


图 3 原子轨道所对应的径向波函数的二维仿真图

Fig. 3 Two-dimensional simulation diagrams of the radial wave functions of atomic orbital

4 结 论

球谐函数作为现代物理学中的一类特殊函数,是拉普拉斯方程的球坐标系形式解的角度部分,在经典场论、量子力学等领域广泛应用,解决了物理学中的许多问题.本文基于量子力学中的角动量算符和连带勒让德方程,设定广义函数的条件下,利用分离变量法推导出球谐函数的一般方程式,进而解出 n, l 分别为 $0, 1, 2, 3, 4, 5$ 时的球谐函数.另外,根据球坐标的自变量定义域,设定自变量 θ, φ 的条件下,得到了不同状态的球谐函数及其原子轨道,并对其进行了可视化研究.最后,利用 MATLAB 软件对不同的 n, l 所对应的球谐函数和原子轨道进行仿真模拟,得到了简明扼要、直观清晰的可视化结果.这种可视化的研究思路为研究球谐函数及其原子轨道的其他特性提供了一条便利的途径.通过以上研究表明, MATLAB 是解决微观结构数值计算和可视化问题的一种更为形象、直观的工具,有广泛的适用性.利用 MATLAB 软件对球谐函数及其原子轨道进行了可视化分析,可以形象地认识微观粒子的运动形态和量子理论抽象的波函数概念.

参考文献:

- [1] 喀兴林. 高等量子力学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001.
- [2] 周世勋. 量子力学教程[M]. 北京: 高等教育出版社, 2008.
- [3] 周义昌, 李华钟. 量子力学的一些几何效应[J]. 物理学进展, 1995, 15: 114.
- [4] 郑腾鹏. 物理学科领域知识学习中的物理问题表征体系研究[D]. 广州: 广州大学, 2012.
- [5] Ferraioli A G, Noce C. The measurement problem in quantum mechanics [J]. Geophys Sci Philos, 2019, 7: 41.
- [6] Sharon H S. Quantum effects in complex systems: summarizing remarks [J]. Faraday Discuss, 2020, 221: 582.
- [7] James F, Park I Y. Quantum gravitational effects on the boundary [J]. Theor Math Phys, 2018, 195: 607.
- [8] 刘明. 量子力学中球谐函数递推公式新探[J]. 培训与研究(湖北教育学院学报), 2003, 20: 12.
- [9] 林克椿, 沈钧贤, 黄有国, 等. 2020 年中国生物物理学发展研究[C]//周光召. 2020 年中国科学技术发展研究(下). 北京: 科学技术出版社, 2020: 902.
- [10] 金松寿. 量子化学基础及其应用[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1980.
- [11] 葛雨. MoP 在高压下的电子, 声子和电声耦合性质的第一性原理计算[J]. 原子与分子物理学报, 2020, 37: 231.
- [12] 李生好, 雷国平. 基于张量网络算法的自旋梯子系统的弦序参量的研究[J]. 原子与分子物理学报, 2019, 36: 93.
- [13] Welker A J, Hogan J P, Eckert A. Extraction and visualization of orientation data from virtual geologic surfaces with MATLAB [J]. MethodsX, 2019, 6: 2636.
- [14] Zekollari H. TopoZeko: A MATLAB function for 3-D and 4-D topographical visualization in geosciences [J]. SoftwareX, 2017, 6: 285.
- [15] 贾泽露, 刘耀林. 可视化空间数据挖掘研究综述[J]. 地理空间信息, 2009, 7: 10.
- [16] 刘平, 张大顺. 使用 MATLAB 绘制原子轨道和电子云图形[J]. 计算机与应用化学, 2003, 20: 533.
- [17] 张程宾, 韩群, 陈永平. 基于 MATLAB 的传热学课程虚拟仿真实验平台设计[J]. 实验技术与管理, 2020, 37: 132.
- [18] 李立, 张皓晶, 张雄. 基于 MATLAB 编程的弗兰克-赫兹实验数据处理方法探讨[J]. 物理通报, 2020, 39: 75.
- [19] 苏关东, 顾勋, 赵兰苓, 等. 基于 Matlab PDETOOL 的渗流力学可视化教学与上机实验[J]. 实验室研究与探索, 2017, 36: 137.
- [20] Zhao K, Henderson E, Bullard K, *et al.* PoSE: visualization of patterns of sequence evolution using PAML and MATLA [J]. BMC Bioinformatics, 2018, 19: 364.
- [21] 申明金, 苏宇. MATLAB 在原子结构学习中的应用[J]. 西安文理学院学报: 自然科学版, 2010, 13: 64.
- [22] 马德明, 仇海强, 施卫. 氢原子电子云分布的可视化分析[J]. 西安理工大学学报, 2007, 23: 149.
- [23] 刘平, 张大顺. 使用 MATLAB 绘制原子轨道和电子云图形[J]. 计算机与应用化学, 2003, 20: 533.
- [24] 赵旭光, 刘晓军. 用 Matlab 获得氢原子的电子云图像[J]. 齐齐哈尔大学学报: 自然科学版, 2006, 22: 98.
- [25] 张捍卫, 李明艳, 雷伟伟. 缔合勒让德函数的解析表达式研究[J]. 大地测量与地球动力学, 2015, 35: 645.
- [26] 赵忠奎, 陆建华. 勒让德函数在求解变系数微分方程中的应用[J]. 牡丹江师范学院学报: 自然科学

版, 2013(3): 1.

[27] Gao W X, Chen H W. An order-aware scheme for robust direction of arrival estimation in the spherical harmonic domain [J]. J Acoust Soc Am, 2019, 146: 4883.

[28] 熊朝晖, 姚宜斌, 袁德宝, 等. 全球单层电离层球谐函数模型计算及精度评估[J]. 测绘地理信息, 2018(4): 20.

[29] Devaraju B, Sneeuw N. The polar form of the spherical harmonic spectrum: implications for filtering GRACE data [J]. J Geodesy, 2017, 91: 1475.

[30] 刘纘武, 陆仲连. 球谐函数级数式的改化形式[J]. 测绘学院学报, 1997(3): 163.

[31] 赵中姿. 一类三阶非线性常微分方程边值问题正解的存在性[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2019, 56: 189.

[32] Claessens S J. Spherical harmonic analysis of a harmonic function given on a spheroid [J]. Geophys J Int, 2016, 206: 142.

[33] Sahoo I, Guinness J, Reich B J. A test for isotropy on a sphere using spherical harmonic functions [J]. Stat Sinica, 2019, 29: 1253.

[34] 熊朝晖, 姚宜斌, 袁德宝, 等. 全球单层电离层球谐函数模型计算及精度评估[J]. 测绘地理信息, 2018(4): 20.

引用本文格式:

中 文: 郑兴荣, 杨伟, 张馨丹, 等. 基于 MATLAB 对球谐函数及其原子轨道的可视化研究[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2020, 57: 968.

英 文: Zheng X R, Yang W, Zhang X D, *et al.* Visualization research of the spherical harmonic function and atomic orbital based on MATLAB software [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, 2020, 57: 968.