

1. 導入

Energy-Dia は、原子軌道図、分子軌道図、バンド構造図などのエネルギー図を作成するための Typst ライブライアリです。CeTZ ライブライアリを利用して、化学や物理の図を簡単に描画します。

1.1. 機能

- 原子軌道図 (AO): 原子のエネルギー準位と電子配置を視覚化します。
- 分子軌道図 (MO): 分子軌道の形成と電子配置を表示します。
- バンド構造図: バンド構造をプロットします。

1.2. インストール

このライブライアリを使用するには、以下のファイルを Typst プロジェクトに追加してください：

- lib.typ
- modules.typ

これらのファイルをプロジェクトのルートディレクトリに置き、ドキュメントでインポートしてください。

```
#import "lib.typ": *
```

2. API ドキュメント

以下のセクションでは、Energy-Dia ライブラリが提供する関数を文書化します。

- ao()
- band()
- mo()

2.0.1. ao

Display an energy level diagram for atomic orbitals

Arguments:

- width (length): Width of the diagram
- height (length): Height of the diagram
- levels (array of dictionaries): Energy level and electron count data. Each dictionary has the following keys:
 - energy (number): Energy value
 - electrons (number): Number of electrons (default: 0)
 - degeneracy (number): Degeneracy (default: 1)
 - caption (string): Caption (default: none)
 - up (boolean): Upward spin (default: none)

Example:

```
#ao(
  (energy: -1, electrons: 2),
  (energy: 0, electrons: 1)
)
```

2.0.1.1. パラメーター

```
ao(
  width,
  height,
  ..levels
)
```

2.0.2. band

Display an energy level diagram for band structure

Arguments:

- width (length): Width of the diagram
- height (length): Height of the diagram
- include_energy_labels (boolean): Whether to display energy labels
- levels (array of numbers): List of energy level values

Example:

```
#band(
  -1, 0, 0.5, 1,
  include_energy_labels: true
)
```

2.0.2.1. パラメーター

```
band(
    width,
    height,
    include_energy_labels,
    ..levels
)
```

2.0.3. mo

Display an energy level diagram for molecular orbitals

Arguments:

- width (length): Width of the diagram
- height (length): Height of the diagram
- atom1 (array of dictionaries): Energy level data for the left atom. Each dictionary has the following keys:
 - energy (number): Energy value
 - electrons (number): Number of electrons (default: 0)
 - degeneracy (number): Degeneracy (default: 1)
 - caption (string): Caption (default: none)
 - up (boolean): Upward spin (default: none)
- molecule (array of dictionaries): Energy level data for the molecule. Each dictionary has the following keys:
 - energy (number): Energy value
 - electrons (number): Number of electrons (default: 0)
 - degeneracy (number): Degeneracy (default: 1)
 - caption (string): Caption (default: none)
 - up (boolean): Upward spin (default: none)
- atom2 (array of dictionaries): Energy level data for the right atom. Each dictionary has the following keys:
 - energy (number): Energy value
 - electrons (number): Number of electrons (default: 0)
 - degeneracy (number): Degeneracy (default: 1)
 - caption (string): Caption (default: none)
 - up (boolean): Upward spin (default: none)
- connections (array): Connection data between orbitals

Example:

```
#mo(
    atom1: ((energy: -1, electrons: 2), (energy: 0, electrons: 1)),
    molecule: ((energy: -0.5, electrons: 2)),
    atom2: ((energy: -1, electrons: 2), (energy: 0, electrons: 1))
)
```

2.0.3.1. パラメーター

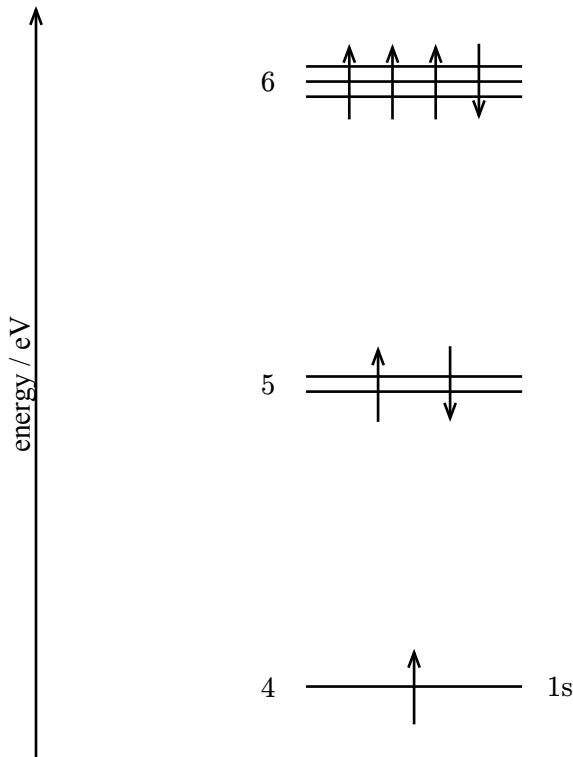
```
mo(
    width,
    height,
    atom1,
    molecule,
    atom2,
    ..connections
)
```

3. 例

このセクションでは、Energy-Dia ライブラリの使用例を提供します。

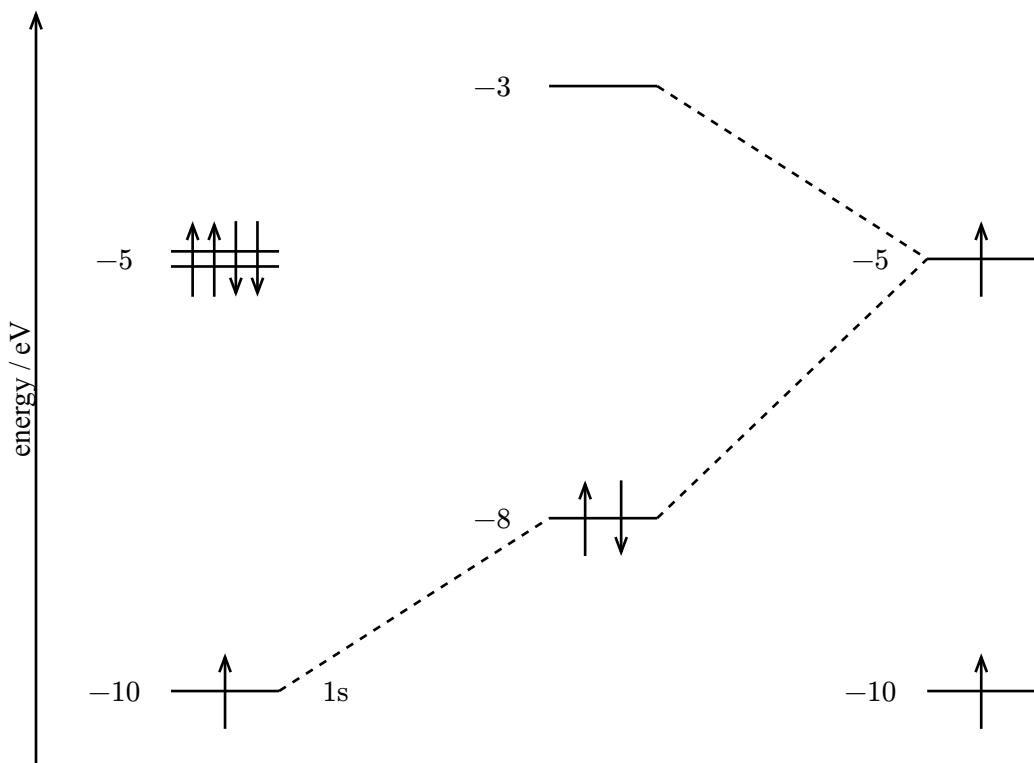
3.1. 原子軌道図

```
#ao(
    width: 10,
    height: 10,
    (energy: 4, electrons: 1, caption: "1s"),
    (energy: 5, electrons: 2, degeneracy: 2),
    (energy: 6, electrons: 4, degeneracy: 3, up: 3)
)
```



3.2. 分子軌道図

```
#mo(
    width: 15,
    height: 10,
    atom1: ((energy: -10, electrons: 1, label: 1, caption: "1s"), (energy: -5, electrons: 4,
degeneracy: 2, up: 2)),
    molecule: ((energy: -8, electrons: 2, label: 2), (energy: -3, electrons: 0, label: 3)),
    atom2: ((energy: -10, electrons: 1), (energy: -5, electrons: 1, label: 4)),
    (1, 2), (3, 4), (2, 4)
)
```



3.3. バンド構造図

```
#band(
  include_energy_labels: true,
  5, 6, 7, 15
)
```

