

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 ライブラリです。CeTZ ライブラリを利用して、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

このライブルリを使用するには、以下の通りインポートしてください：

```
#import "@preview/energy-dia:0.1.0": *
```

2 API ドキュメント

以下のセクションでは、Energy-Dia ライブル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))  
)
```

Warning: Each atom and molecular orbital is required to be an array. Therefore, even if there is only one orbital, do not forget to put a comma at the end.

2.0.3.1 パラメーター

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

3 例

demo/demo.typ を参照してください。