

# 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

このライブラリを使用するには、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))  
  )
```

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。