

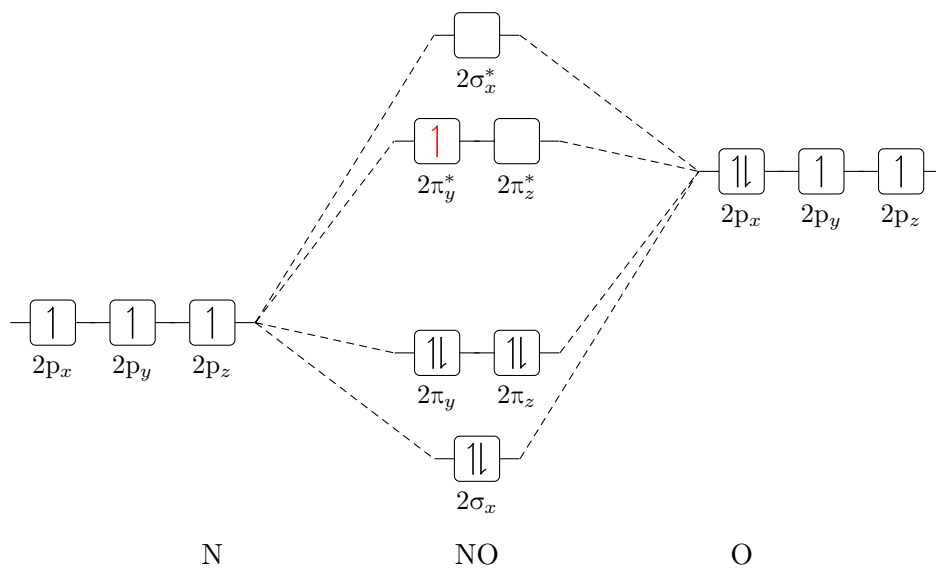
MOdiagram v0.1

2011/09/25

Clemens NIEDERBERGER

<http://www.mychemistry.eu/>
contact@mychemistry.eu

MOdiagram stellt eine Umgebung und Befehle zur Verfügung, um Molekülorbital-Diagramme zu erstellen.



Inhaltsverzeichnis

1	Lizenz, Voraussetzungen	2
2	Motivation	3
3	Basisbefehle	3
3.1	Der <code>\atom</code> Befehl	3
3.2	Der <code>\molecule</code> Befehl	4
3.3	Die Namensgebung	7
3.4	AOs und MOs irgendwo	8
3.5	Die Positionen	10
4	Anpassen des Layouts	11
4.1	Umgebungs-Optionen	11
4.1.1	Option <code>style</code>	12
4.1.2	Option <code>distance</code>	13
4.1.3	Option <code>A0-width</code>	13
4.1.4	Option <code>lines</code>	14
4.1.5	Option <code>names</code>	14
4.1.6	Option <code>labels</code>	14
4.1.7	Option <code>labels-fs</code>	15
4.1.8	Option <code>labels-style</code>	15
4.2	<code>\atom</code> und <code>\molecule</code> spezifische Anpassungen	16
4.2.1	Der <code>label</code> Key	16
4.2.2	Der <code>color</code> Key	16
4.3	Energie-Achse	17
4.4	Beispiele	18

1 Lizenz, Voraussetzungen

MOdiagram v0.1 steht unter der L^AT_EX Project Public License Version 1.3 oder später. (<http://www.latex-project.org/lppl.txt>)

MOdiagram benötigt die Pakete `expl3`¹, `xparse`², `l3keys2e`³, `tikz`⁴, `amsmath`⁵ und `textgreek`⁶. Außerdem werden die Ti k Z-Libraries `calc` und `arrows` geladen.

Kenntnisse des `pgf`- bzw. des `tikz`-Paketes sind von Vorteil.

¹<http://www.ctan.org/pkg/expl3>
²<http://www.ctan.org/pkg/xparse>
³<http://www.ctan.org/pkg/l3keys2e>
⁴<http://www.ctan.org/pkg/pgf>
⁵<http://www.ctan.org/pkg/amsmath>
⁶<http://www.ctan.org/pkg/textgreek>

2 Motivation

Dieses Paket ist entstanden wegen einer Frage auf <http://tex.stackexchange.com/>, genauer gesagt wegen der Frage [Molecular orbital diagrams in LaTeX](#). Dort heißt es

I'm wondering if anyone has seen a package for drawing (qualitative) molecular orbital splitting diagrams in L^AT_EX? Or if there exist any packages that can be easily re-purposed to this task?

Otherwise, I think I'll have a go at it in TikZ.

Dort wird das Problem mit TikZ gelöst, da es bis dato noch kein Paket für diese Aufgabe gab. MOdiagram soll diese Lücke nun füllen.

3 Basisbefehle

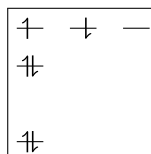
Alle MO-Diagramme werden mit der Umgebung `MOdiagram` erzeugt. Innerhalb dieser Umgebung sind zunächst zwei Befehle wichtig.

3.1 Der `\atom` Befehl

```
\atom[<name>]{<pos>}{<AO-spec>}
```

- `<name>` (o) Beschriftung des Atoms
- `<pos>` (m) links oder rechts im MO-Diagramm
- `<AO-spec>` (m) Spezifizierung der Atom-Orbitale (AO)

Sehen wir uns den Befehl einmal an:



```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{right}{
3   1s = { 0; pair} ,
4   2s = { 1; pair} ,
5   2p = {1.5; up, down, }
6 }
7 \end{MOdiagram}
```

Wie Sie sehen können, ist die Angabe von `<AO-spec>` wesentlich für die Ausgabe der Orbital-Niveaus und den enthaltenen Elektronen. Folgende Schlüssel-Wert-Paare können durch Kommata getrennt eingegeben werden:

- `1s={<rel. energy>; <el-spec>}`
- `2s={<rel. energy>; <el-spec>}`

- `2p={<rel. energy>; <x el-spec>, <y el-spec>, <z el-spec>}`

Die `<el-spec>` können die Werte `pair`, `up` und `down` annehmen oder leer gelassen werden. `<rel. energy>` ist in etwa mit der y -Koordinate gleichzusetzen und verschiebt das AO in vertikaler Richtung um `<rel. energy>` cm auf- (positiv) oder abwärts (negativ).

Das Argument `<pos>` wird wichtig, wenn die p-Orbitale verwendet werden. Vergleichen Sie folgendes Beispiel mit dem vorhergehenden:



```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left}{
3   1s = { 0; pair} ,
4   2s = { 1; pair} ,
5   2p = {1.5; up, down, }
6 }
7 \end{MOdiagram}

```

Verwendet man beide Varianten auf einmal, so sieht man außerdem, dass das rechte Atom gegenüber dem linken nach rechts verschoben ist. Der Betrag, um den das rechte verschoben ist, beträgt per Default 4 cm und kann individuell angepasst werden (siehe Seite 13).



```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left}{
3   1s = { 0; pair} ,
4   2s = { 1; pair} ,
5   2p = {1.5; up, down, }
6 }
7 \atom{right}{
8   1s = { 0; pair} ,
9   2s = { 1; pair} ,
10  2p = {1.5; up, down, }
11 }
12 \end{MOdiagram}

```

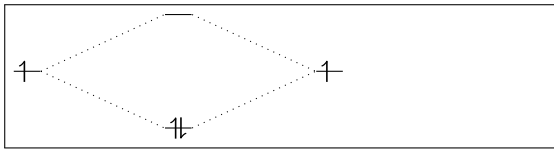
Der Sinn der Verschiebung wird klar, wenn wir den nächsten Befehl dazu nehmen.

3.2 Der `\molecule` Befehl

`\molecule[<name>]{<MO-spec>}`

- `<name>` (o) Beschriftung des Moleküls
- `<MO-spec>` (m) Spezifizierung der Molekül-Orbitale (MO)

Zunächst einmal ein Beispiel:



```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} { 1s = { 0; up} }
3 \atom{right}{ 1s = { 0; up} }
4 \molecule { 1sMO = {.75; pair, } }
5 \end{MOdiagram}

```

Durch den Befehl `\molecule` werden die Atom-Orbitale (AO) verbunden und die entsprechenden bindenden und antibindenden Orbitale des Moleküls (MO) gezeichnet. `\molecule` kann nur verwendet werden, *nachdem* man bereits *beide* Atome gesetzt hat, da die zu verbindenden Orbitale bekannt sein müssen.

Das Argument `<MO-spec>` erwartet dabei durch Kommata getrennt folgende Key-Value-Paare:

- `1sMO={<energy gain>; <s el-spec>, <s* el-spec>}` (verbindet die durch `1s` spezifizierten AO.)
- `2sMO={<energy gain>; <s el-spec>, <s* el-spec>}` (verbindet die durch `2s` spezifizierten AO.)
- `2pMO={<s energy gain>, <p energy gain>; <s el-spec>, <py el-spec>, <pz el-spec>, <py* el-spec>, <pz* el-spec>, <s* el-spec>}` (verbindet die durch `2p` spezifizierten AO.)

Es ist dabei zu beachten, dass die entsprechenden AO gesetzt sein müssen, um sie verbinden zu können. Folgendes wird nicht funktionieren:

```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} { 1s = { 0; } }
3 \atom{right}{ 1s = { 0; } }
4 \molecule { 2sMO = {.75; , } }
5 \end{MOdiagram}

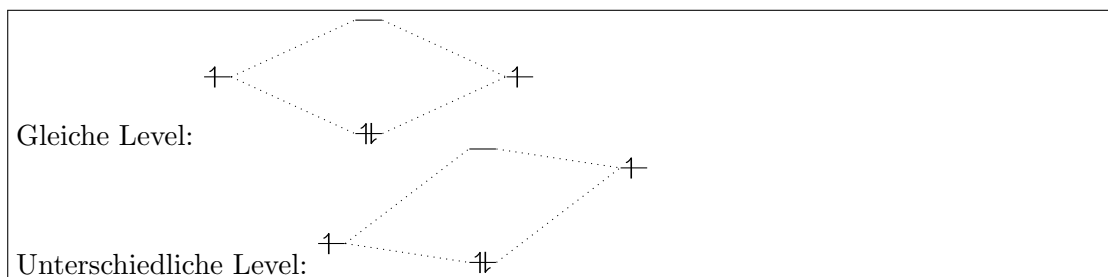
```

Der Wert, der für `<energy gain>` angegeben wird, gibt an, wieviele cm das bindende MO unter dem niedrigeren AO bzw. wieviel das antibindende MO über dem höheren AO gesetzt wird.

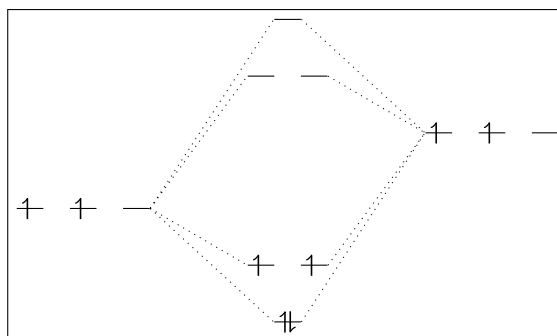
```

1 Gleiche Level:
2 \begin{MOdiagram}
3 \atom{left} { 1s = { 0; up } }
4 \atom{right}{ 1s = { 0; up } }
5 \molecule { 1sMO = { .75; pair, } }
6 \end{MOdiagram}
7
8 Unterschiedliche Level:
9 \begin{MOdiagram}
10 \atom{left} { 1s = { 0; up } }
11 \atom{right}{ 1s = { 1; up } }
12 \molecule { 1sMO = { .25; pair, } }
13 \end{MOdiagram}

```



Beachten Sie, dass Sie bei **2pMO** *zwei* solche Werte angeben müssen: die Aufspaltung der σ -Orbitale und die Aufspaltung der π -Orbitale.

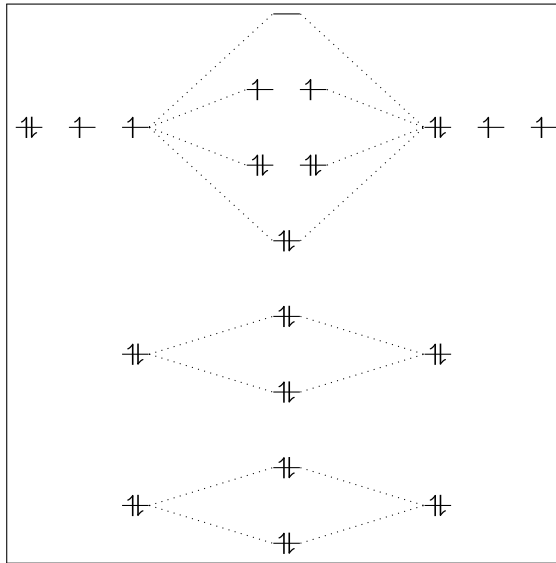


```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} { 2p = { 0; up, up , } }
3 \atom{right}{ 2p = { 1; up, up , } }
4 \molecule { 2pMO = { 1.5, .75; pair
5 \end{MOdiagram}

```

Das komplette MO-Diagramm für Triplett-Disauerstoff könnte nun etwa folgendermaßen aussehen:



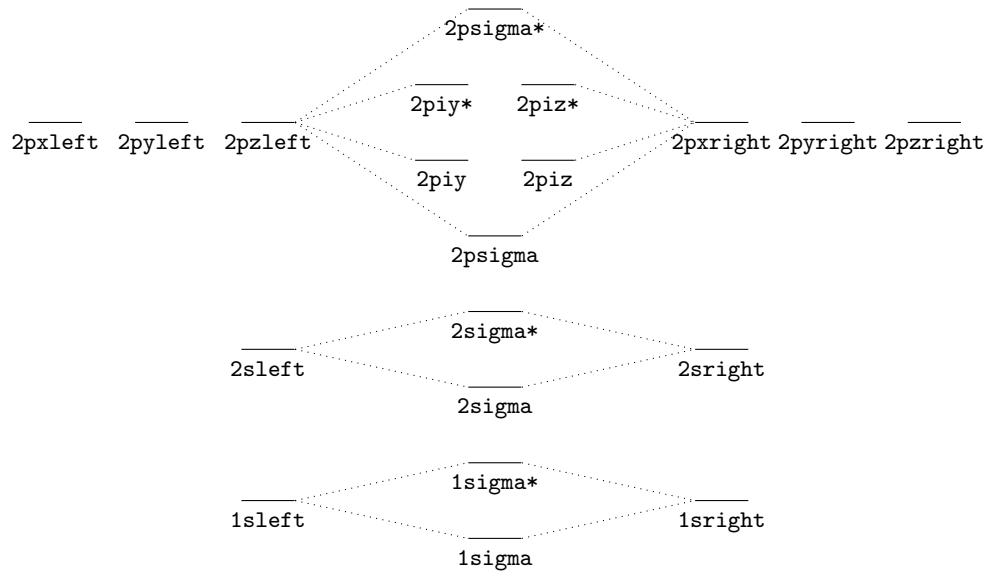
```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left}{
3   1s = {0;pair},
4   2s = {2;pair},
5   2p = {5;pair,up,up}
6 }
7 \atom{right}{
8   1s = {0;pair},
9   2s = {2;pair},
10  2p = {5;pair,up,up}
11 }
12 \molecule{
13   1sMO = {.5;pair,pair},
14   2sMO = {.5;pair,pair},
15   2pMO = {1.5,.5;pair,pair,pair,up,up,}
16 }
17 \end{MOdiagram}

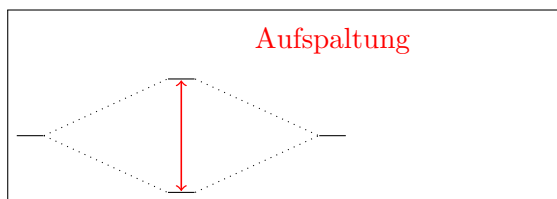
```

3.3 Die Namensgebung

Da man üblicherweise die AO und MO auch beschriften (können) möchte und sie in der `MOdiagram`-Umgebung `TikZ`-Nodes entsprechen, ist die interne Benennung wichtig. Diese folgt eng der tatsächlichen Funktion:



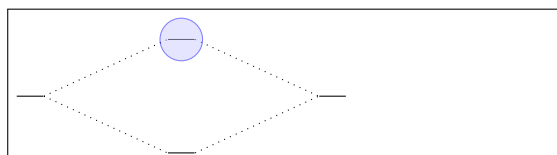
Mit diesen Bezeichnungen ist es möglich, sie mit den üblich `TikZ`-Befehlen zu referenzieren:



```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom[left] { 1s = {0; } }
3 \atom[right]{ 1s = {0; } }
4 \molecule { 1sMO = {.75; , } }
5 \draw[<->,red,semithick] (1sigma)
  -- (1sigma*);
6 \draw[red] (1sigma*) ++ (2cm,.5cm)
  node {Aufspaltung};
7 \end{MOdiagram}

```



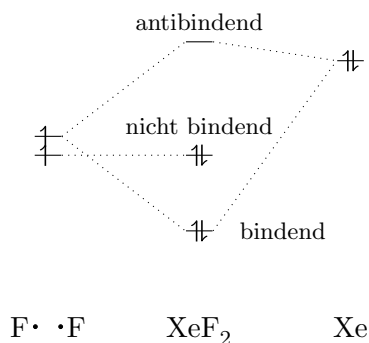
```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom[left] { 1s = {0; } }
3 \atom[right]{ 1s = {0; } }
4 \molecule { 1sMO = {.75; , } }
5 \draw[draw=blue,fill=blue!20,
  opacity=.5] (1sigma*) circle (8
  pt);
6 \end{MOdiagram}

```

3.4 AOs und MOs irgendwo

Nicht immer reichen die Standardorbitale aus, um ein sinnvolles MO-Diagramm zu zeichnen. Beispielsweise würde man im MO-Diagramm von XeF_2 wohl folgenden Ausschnitt für die 3Z/2E-Bindung benötigen, der die Wechselwirkung eines Xe-p-Orbitals mit der antibindenden Kombination zweier F-p-Orbitale zeigt:



Um solche MO-Diagramme erstellen zu können, gibt es folgenden Befehl:

```
\AO[<name>] (<xshift>){<type>}{<energy>;<el-spec>}
```

- <name> (o) Name der Node
- <xshift> (o) Vertikale Position des Orbitals, eine TeX-Länge mit Einheit
- <type> (m) s oder p
- <AO-spec> (m) Spezifizierung des Atom-Orbitals

Je nach `<type>` werden damit ein s- oder drei p-Orbitale erzeugt.

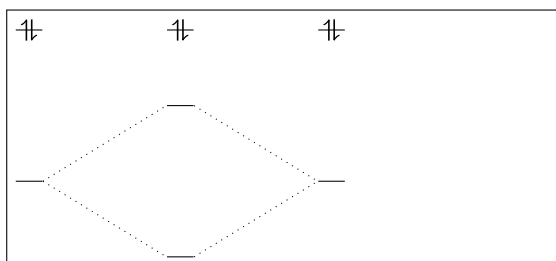


```
1 \begin{MOdiagram}
2 \AO{s}{0;}
3 \AO(-20pt){p}{1;pair,up,down}
4 \end{MOdiagram}
```

Beachten Sie, dass als `<el-spec>` beim Typ `s` nur eine Spezifikation erwartet wird, beim Typ `p` aber drei durch Komma getrennte.

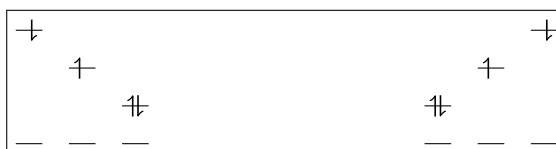
Möchte man ein AO genau an die Position eines Atoms setzen, so muss man deren `<xshift>` kennen. Die haben per Default folgende Werte (siehe auch Abschnitt 3.5):

- atom left: 1 cm
- molecule: 3 cm
- atom right: 5 cm



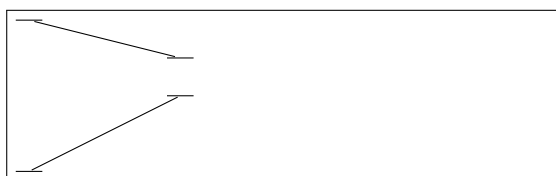
```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} {1s={0;}}
3 \atom{right}{1s={0;}}
4 \molecule {1sMO={1;,}}
5 \AO(1cm){s}{2;pair}
6 \AO(3cm){s}{2;pair}
7 \AO(5cm){s}{2;pair}
8 \end{MOdiagram}
```

In p-Orbitalen findet pro Orbital per Default eine Verschiebung um 20 pt statt, was einer zweifachen Verschiebung um die noch zu besprechende Länge `AO-width` (siehe Abschnitt 4.1.3) entspricht:



```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} {2p={0;,}}
3 \atom{right}{2p={0;,}}
4 % ueber dem linken:
5 \AO(1cm) {s}{.5;pair}
6 \AO(1cm-20pt){s}{1;up}
7 \AO(1cm-40pt){s}{1,5;down}
8 % ueber dem rechten:
9 \AO(5cm) {s}{.5;pair}
10 \AO(5cm+20pt){s}{1;up}
11 \AO(5cm+40pt){s}{1.5;down}
12 \end{MOdiagram}
```

Auch die mit `\AO` gesetzten Orbitale können mit Linien verbunden werden. Das kann man natürlich mit dem `\draw`-Befehl machen:



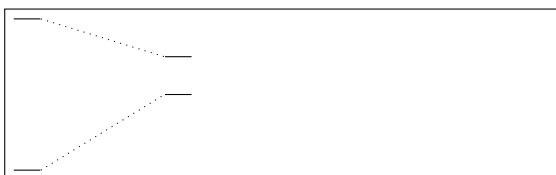
```
1 \begin{MOdiagram}
2 \AO[a]{s}{0;} \AO[b](2cm){s}{1;}
3 \AO[c]{s}{2;} \AO[d](2cm){s}{1.5;}
4 \draw (a) -- (b) (c) -- (d);
5 \end{MOdiagram}
```

Soll die Verbindungslinie aber zu dem Stil der durch `\molecule` erzeugten Linien⁷ passen, dann sollte man den Befehl `\connect` verwenden.

`\connect{<AO-connect>}`

- `<AO-connect>` (m) durch Kommata getrennte Liste von durch `&` verbundenen Node-Paaren, die verbunden werden sollen.

Dieser Befehl erwartet eine durch Kommata getrennte Liste von durch `&` verbundenen Paaren von Node-Namen derer Nodes, die verbunden werden sollen:

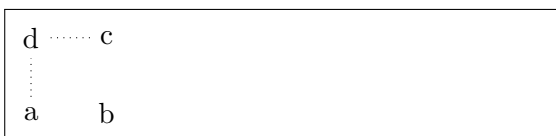


```

1 \begin{MOfdiagram}
2 \AO[a]{s}{0;} \AO[b](2cm){s}{1;}
3 \AO[c]{s}{2;} \AO[d](2cm){s}{1.5;}
4 \connect{ a & b, c & d }
5 \end{MOfdiagram}

```

Einige Punkte müssen dabei noch erwähnt werden: `\connect` fügt der ersten Node den Anker `east` und der zweiten den Anker `west` hinzu. Damit funktioniert eine vernünftige Verbindung nur von links nach rechts. Allerdings können nach dem üblichen `TikZ`-Schema auch eigene Anker gesetzt werden:



```

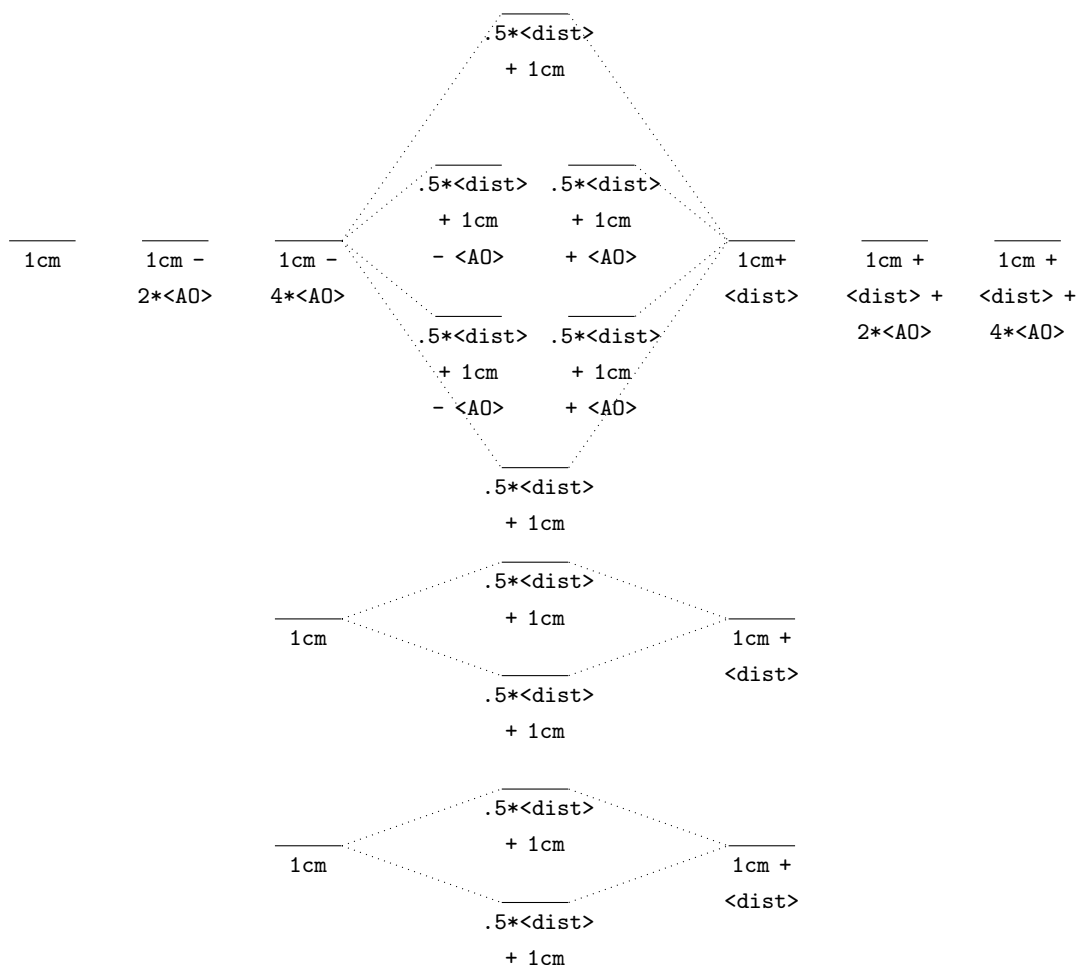
1 \begin{tikzpicture}
2 \draw (0,0) node (a) {a} ++ (1,0)
   node (b) {b}
   ++ (0,1) node (c) {c} ++
   (-1,0) node (d) {d} ;
3
4 \connect{ a.90 & d.-90, c.180 & d.0
   }
5 \end{tikzpicture}

```

3.5 Die Positionen

In folgender Darstellung sehen Sie die Werte, die die x -Positionen der Orbitale annehmen in Abhängigkeit von `<distance>` (`<dist>`) und `<AO-width>` (`<AO>`). Diese Längen und wie man sie ändert werden in den Abschnitten 4.1.2 und 4.1.3 besprochen.

⁷Dieser Stil kann angepasst werden, siehe Seite 14.



4 Anpassen des Layouts

4.1 Umgebungs-Optionen

Es gibt folgende Optionen, mit denen das Aussehen der MO-Diagramme verändert werden kann.

- `style=<type>` Verändern des Stils der Orbitale und Verbindungslinien, Abschnitt [4.1.1](#).
- `distance=<dim>` Der Abstand zwischen linkem und rechtem Atom, Abschnitt [4.1.2](#).
- `AO-width=<dim>` Die Größe der Orbitale ändern, Abschnitt [4.1.3](#).
- `lines=<tikz>` TikZ-Stil der Verbindungslinien anpassen, Abschnitt [4.1.4](#).
- `names=<bool>` Atome und Molekül beschriften, Abschnitt [4.1.5](#).

- `labels=<bool>` Orbitale mit Default Beschriftung versehen, Abschnitt 4.1.6.
- `labels-fs=<cs>` Schriftgröße der Label-Beschriftung verändern, Abschnitt 4.1.7.
- `labels-style=<tikz>` TikZ-Stil der Label-Beschriftung verändern, Abschnitt 4.1.8.

Sie alle werden nachfolgend besprochen. Aufgerufen werden sie entweder als Option der Umgebung

```
1 \begin{MOdiagram}[<key = value>]
2   ...
3 \end{MOdiagram}
```

oder über den Setup-Befehl

```
\MOsetup{<key = value>}
```

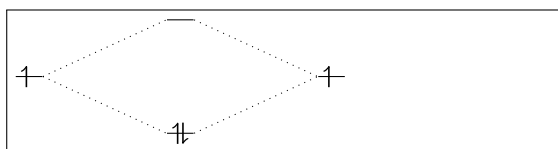
- `<key = val>` (m) komma-separierte Schlüssel-Wert-Liste

4.1.1 Option style

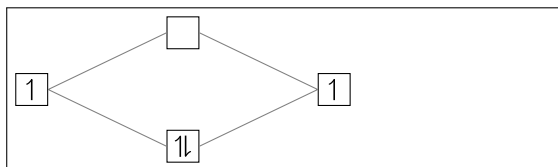
Es gibt vier verschiedene Stile, aus denen ausgewählt werden kann:

- `style=plain` \neq (Default)
- `style=square` \square
- `style=round` \circ
- `style=fancy` $\text{---}\square\text{---}$

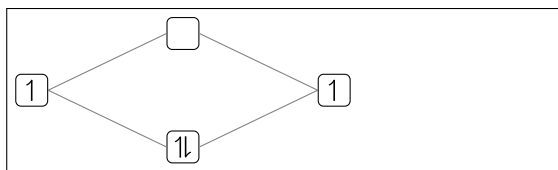
Sehen wir uns das MO-Diagramm für H_2 in den verschiedenen Stilen an:



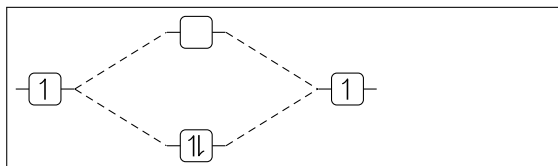
```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[style=plain]%
   Default
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
   pair,} }
6 \end{MOdiagram}
```



```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[style=square]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
   pair,} }
6 \end{MOdiagram}
```



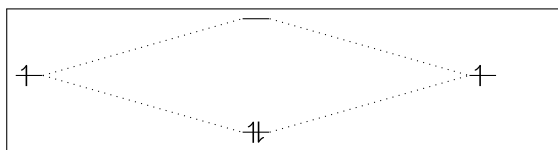
```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[style=round]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
6   pair,} }
7 \end{MOdiagram}
```



```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[style=fancy]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
6   pair,} }
7 \end{MOdiagram}
```

4.1.2 Option distance

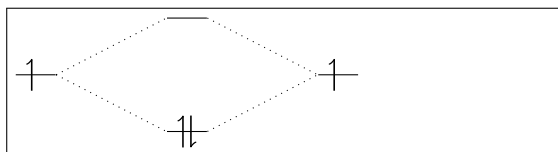
Je nach Label und Beschriftungen können die 4 cm, durch die das linke und das rechte Atom getrennt sind, zu wenig sein. Mit der Option `distance=<dim>` lässt sie sich verändern. Damit wird die Position des rechten Atoms auf `1cm + <dim>` gesetzt und die Position des Moleküls auf `0.5*(1cm + <dim>)`, siehe auch Seite 9 und Abschnitt 3.5.



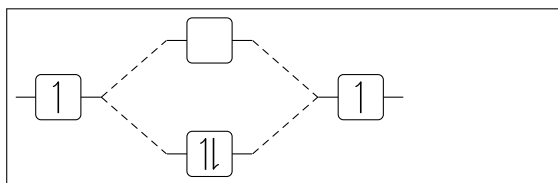
```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[distance=6cm]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
6   pair,} }
7 \end{MOdiagram}
```

4.1.3 Option AO-width

Die Länge `AO-width` entspricht der Länge des waagerechten Strichs eines Orbitals im `plain`-Stil und beträgt per Default 10 pt.



```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[AO-width=15pt]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
6   pair,} }
7 \end{MOdiagram}
```



```

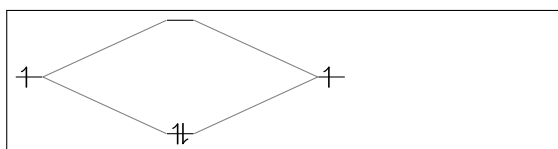
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[style=fancy,AO-
width=15pt]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

Durch das Verändern von `AO-width` ändern sich auch die Positionen der p- und π -Orbitale, siehe Abschnitt 3.5.

4.1.4 Option lines

Der Option `lines` können `TikZ`-Keys angegeben werden, um den Stil der Verbindungslinien zu ändern.



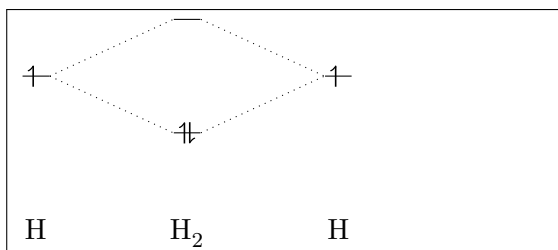
```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[lines={gray,thin
}]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

4.1.5 Option names

Verwendet man die Option `names`, werden den Atomen und dem Molekül Beschriftungen hinzugefügt, sofern man die optionalen Argumente von `\atom` und/oder `\molecule` verwendet hat.



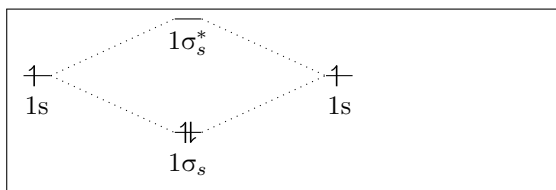
```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[names]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

4.1.6 Option labels

Mit der Option `labels` werden vordefinierte Labels an die Orbitale geschrieben. Diese Labels können auch geändert werden, siehe Abschnitt 4.2.1.



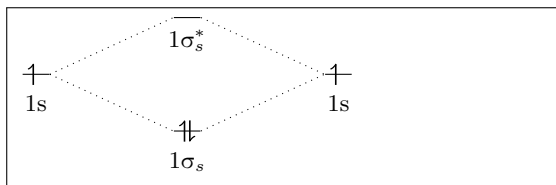
```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[labels]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
   pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

4.1.7 Option labels-fs

Per Default werden die Labels mit der Schriftgröße `\small` gesetzt. Wenn man das ändern möchte, kann man die Option `labels-fs` verwenden.

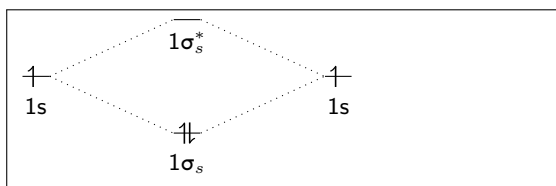


```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[labels,labels-fs
   =\footnotesize]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
   pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

Damit ist es auch möglich, den Schriftstil zu verändern.



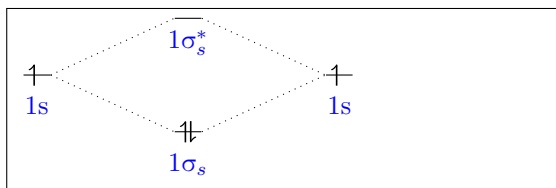
```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[labels,labels-fs
   =\sffamily\footnotesize]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
   pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

4.1.8 Option labels-style

Mit der Option `labels-style` kann man den `TikZ`-Stil der Nodes ändern, in die die Labels geschrieben werden.



```

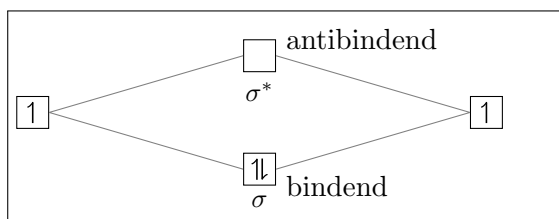
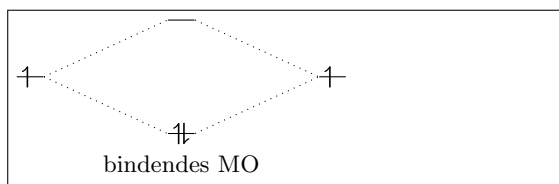
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[labels,labels-
   style={blue}]
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO = {.75;
   pair,} }
6 \end{MOdiagram}

```

4.2 `\atom` und `\molecule` spezifische Anpassungen

4.2.1 Der `label` Key

Wenn man die vordefinierten Label nicht verwenden möchte, also eigene Label ändern möchte oder auch nur einzelne Label verwenden möchte, kann man den Key `label` einsetzen. Dieser Key wird im `\atom`- und im `\molecule`-Befehl bei `<AO-spec>` bzw. `<MO-spec>` eingesetzt. Der Key erwartet eine durch Kommata getrennte Schlüssel-Wert-Liste. Als Schlüssel werden die in Abschnitt 3.3 vorgestellten Namen verwendet, mit denen das zu beschriftende Orbital spezifiziert wird.

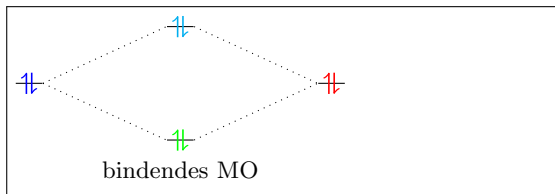


```
1 % use package 'mhchem'  
2 \begin{MOdiagram}[labels-fs=  
   footnotesize]  
3 \atom[H]{left} { 1s = {0;up} }  
4 \atom[H]{right}{ 1s = {0;up} }  
5 \molecule[\ce{H2}]{  
6   1sMO = {.75;pair,},  
7   label = { 1sigma = {bindendes MO}  
8 }  
9 \end{MOdiagram}
```

```
1 \begin{MOdiagram}[style=square,  
   distance=6cm]  
2 \atom{left} { 1s = {0;up} }  
3 \atom{right}{ 1s = {0;up} }  
4 \molecule{  
5   1sMO = {.75;pair,} ,  
6   label = {  
7     1sigma =  $\sigma$ ,  
8     1sigma* =  $\sigma^*$   
9   }  
10 }  
11 \node[right] at (1sigma.-45) {  
   bindend};  
12 \node[right] at (1sigma*.45) {  
   antibindend};  
13 \end{MOdiagram}
```

4.2.2 Der `color` Key

Analog zum `label`-Key kann der `color`-Key verwendet werden, um die Elektronen eines Orbitals farbig darzustellen.



```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[labels-fs=\
   footnotesize]
3 \atom[H]{left}{
4   1s = {0;pair},
5   color = { 1sleft = blue }
6 }
7 \atom[H]{right}{
8   1s = {0;pair},
9   color = { 1sright = red }
10 }
11 \molecule[\ce{H2}]{
12   1sMO = {.75;pair,pair},
13   label = { 1sigma = {bindendes MO}
14             },
15   color = { 1sigma = green, 1sigma*
16             = cyan }
17 }
18 \end{MOdiagram}

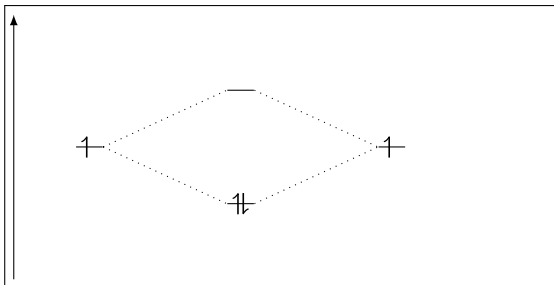
```

4.3 Energie-Achse

Zuletzt möchte man unter Umständen gerne eine Energie-Achse an das Diagramm zeichnen. Dafür gibt es den Befehl `\EnergyAxis`

`\EnergyAxis[<key = val>]`

- `<key = val>` (o) Schlüssel-Wert-Paare, um die Achse zu modifizieren.



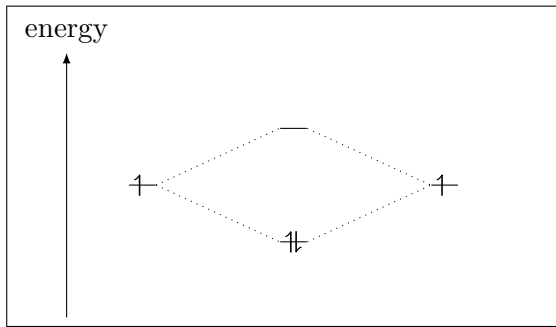
```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} { 1s = {0;up} }
3 \atom{right}{ 1s = {0;up} }
4 \molecule{ 1sMO = {.75;pair,} }
5 \EnergyAxis
6 \end{MOdiagram}

```

Es gibt derzeit zwei Keys, mit denen die Achse modifiziert werden kann.

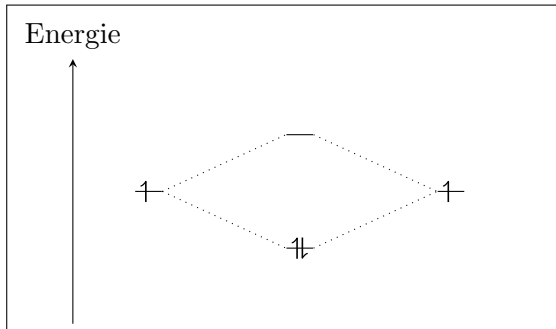
- `title=<title>` Achsenbeschriftung (Default: `energy`).
- `head=<tikz-arrow-head>` Pfeilspitze; hier können die Pfeilspitzen verwendet werden, die in der `TikZ`-Library `arrows` spezifiziert sind (pgf-Manual v2.10 Seiten 256ff.) (Default: `>`).



```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} { 1s = {0;up} }
3 \atom{right}{ 1s = {0;up} }
4 \molecule{ 1sMO = {.75;pair,} }
5 \EnergyAxis[title]
6 \end{MOdiagram}

```



```

1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} { 1s = {0;up} }
3 \atom{right}{ 1s = {0;up} }
4 \molecule{ 1sMO = {.75;pair,} }
5 \EnergyAxis[title=Energie,head=
  stealth]
6 \end{MOdiagram}

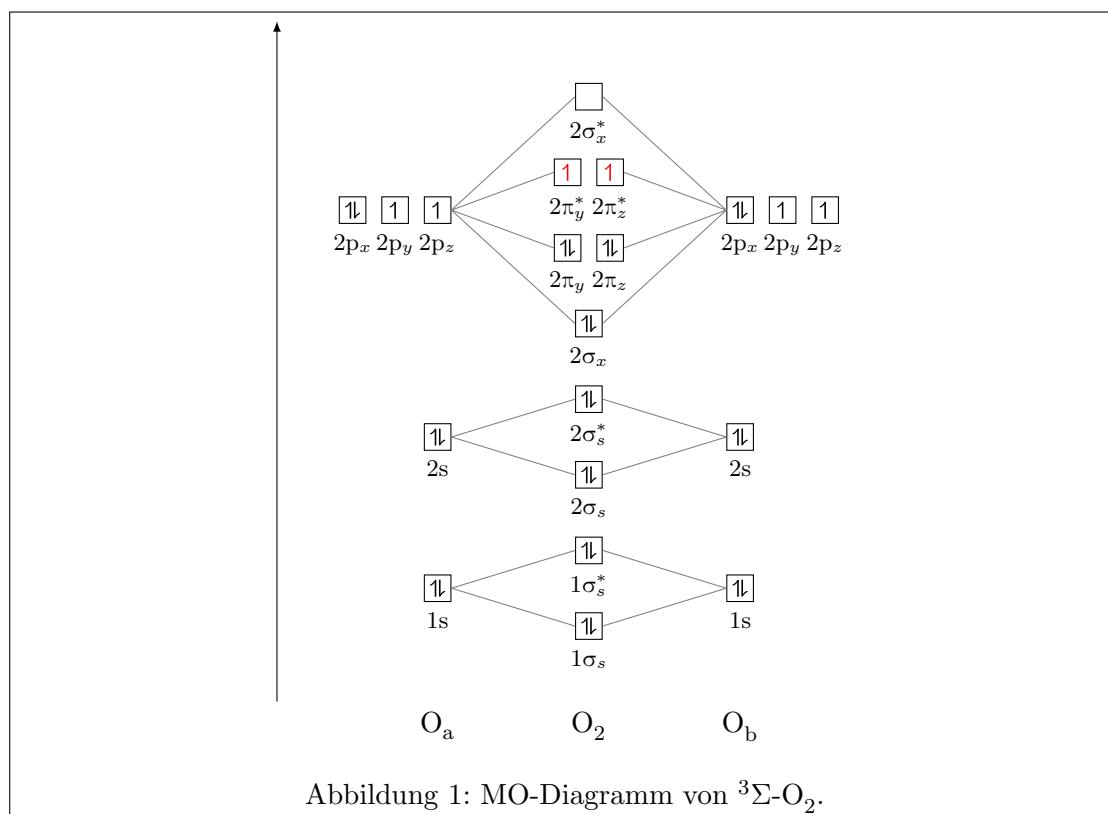
```

4.4 Beispiele

```

1 % use packages 'mhchem' (and 'textgreek' loaded by 'MOdiagram')
2 \begin{figure}
3   \centering
4   \begin{MOdiagram}[style=square,labels,names,A0-width=8pt,labels-fs=\
      footnotesize]
5     \atom[\ce{O_a}]{left}{
6       1s = {0;pair},
7       2s = {2;pair},
8       2p = {5;pair,up,up}
9     }
10    \atom[\ce{O_b}]{right}{
11      1s = {0;pair},
12      2s = {2;pair},
13      2p = {5;pair,up,up}
14    }
15    \molecule[\ce{O2}]{
16      1sMO = {.5;pair,pair},
17      2sMO = {.5;pair,pair},
18      2pMO = {1.5,.5;pair,pair,pair,up,up,},
19      color = { 2piy*=red, 2piz*=red }
20    }
21    \EnergyAxis
22  \end{MOdiagram}
23  \caption{MO-Diagramm von  $^3\Sigma-\text{O}_2$ .}
24 \end{figure}

```



```

1 % use package 'chemfig'
2 \begin{figure}
3   \centering
4   \begin{MOdiagram}[style=fancy,distance=7cm,A0-width=15pt,labels]
5     \atom[N]{left}{
6       2p = {0;up,up,up}
7     }
8     \atom[O]{right}{
9       2p = {2;pair,up,up}
10    }
11    \molecule[NO]{
12      2pMO = {1.8,.4;pair,pair,pair,up,,},
13      color = { 2piy*=red }
14    }
15    \EnergyAxis[title]
16  \end{MOdiagram}
17  \caption{Ausschnitt aus dem MO-Diagramm von \protect\Lewis{4.,NO}.}
18 \end{figure}

```

