

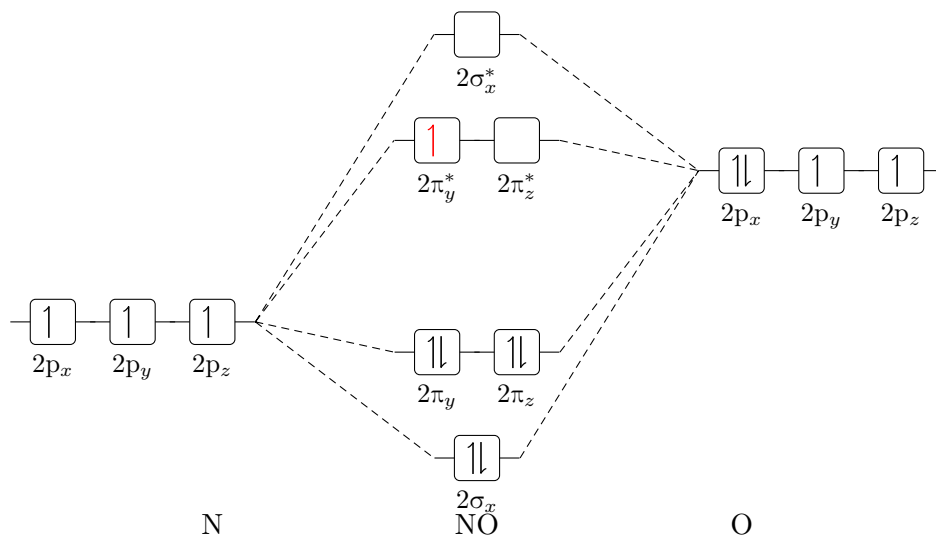
MOdiagram v0.2

2011/10/27

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	3
2	Motivation	3
3	Befehle	3
3.1	Der <code>\atom</code> Befehl	3
3.2	Der <code>\molecule</code> Befehl	6
3.3	Die Namensgebung	10
3.4	AOs und MOs irgendwo	11
3.5	Die Positionen	14
3.6	Default-Werte	15
4	Anpassen des Layouts	15
4.1	Umgebungs-Optionen	15
4.1.1	Option <code>style</code>	16
4.1.2	Option <code>distance</code>	18
4.1.3	Option <code>AO-width</code>	18
4.1.4	Optionen <code>el-sep</code> , <code>up-el-pos</code> und <code>down-el-pos</code>	19
4.1.5	Option <code>lines</code>	21
4.1.6	Option <code>names</code>	21
4.1.7	Optionen <code>names-style</code> und <code>names-style-add</code>	21
4.1.8	Option <code>labels</code>	23
4.1.9	Option <code>labels-fs</code>	24
4.1.10	Option <code>labels-style</code>	24
4.2	<code>\atom</code> und <code>\molecule</code> spezifische Anpassungen	25
4.2.1	Der <code>label</code> Key	25
4.2.2	Der <code>color</code> Key	26
4.2.3	Die <code>up-el-pos</code> und <code>down-el-pos</code> Keys	26
4.3	<code>\AO</code> spezifische Anpassungen	27
4.3.1	Der <code>label</code> Key	27
4.3.2	Der <code>color</code> Key	27
4.3.3	Die <code>up-el-pos</code> und <code>down-el-pos</code> Keys	28
4.4	Energie-Achse	28
5	Beispiele	29

1 Lizenz, Voraussetzungen

MOdiagram v0.2 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 und `textgreek`⁵. Außerdem werden die Ti $\kern-0.1em$ kZ-Libraries `calc` und `arrows` geladen.

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

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 Ti $\kern-0.1em$ kZ gelöst, da es bis dato noch kein Paket für diese Aufgabe gab. Zum einen soll MOdiagram diese Lücke nun füllen. Zum anderen fand ich es persönlich immer mühsam, aus vorherigem Code mit Copy & Paste ein zweites, drittes, ... zu erstellen. Das hat sich mit MOdiagram erledigt.

3 Befehle

Alle MO-Diagramme werden mit der Umgebung `MOdiagram` erzeugt. Bei den in den folgenden Abschnitten beschriebenen Befehlen werden verschiedene Argumente mit (o) oder mit (m) markiert. Das steht für *optional* bzw. für *mandatory* (also *obligatorisch*).

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<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/textgreek>



```

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

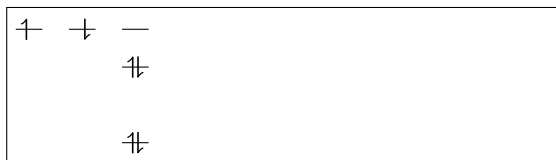
```

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}

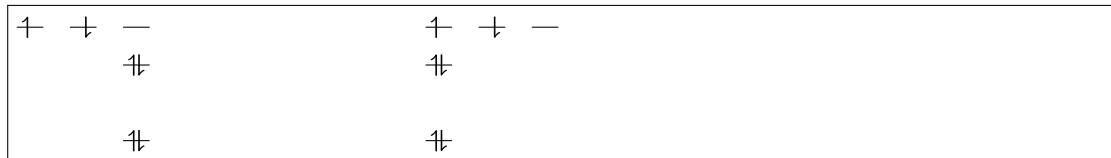
```

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 18).

```

1 \begin{M0diagram}
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{M0diagram}

```



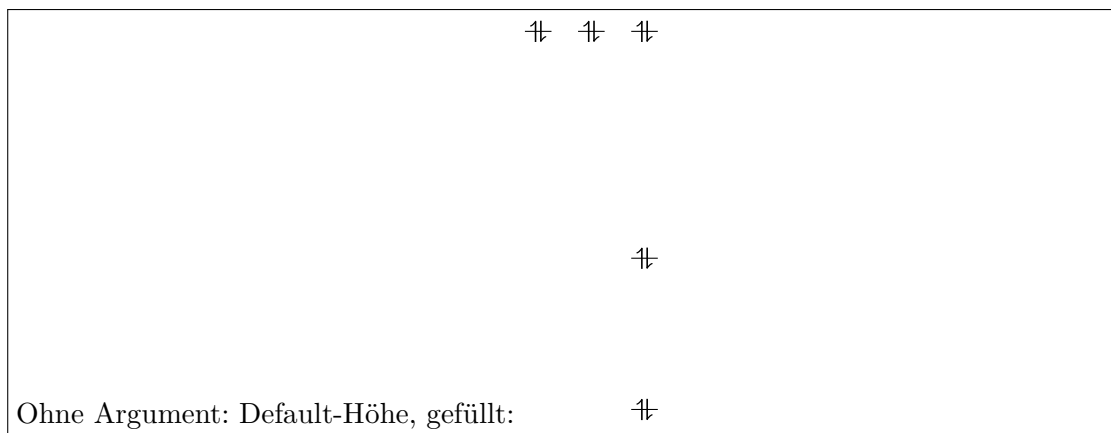
Der Sinn der Verschiebung wird klar, wenn wir den Befehl `\molecule` (Abschnitt 3.2) dazu nehmen.

NEU Jedes der Argumente für die AO kann leer bleiben oder weggelassen werden.

```

1 Ohne Argument: Default-H\"ohe, gef\"ullt:
2 \begin{M0diagram}
3   \atom{left}{1s, 2s, 2p}
4 \end{M0diagram}

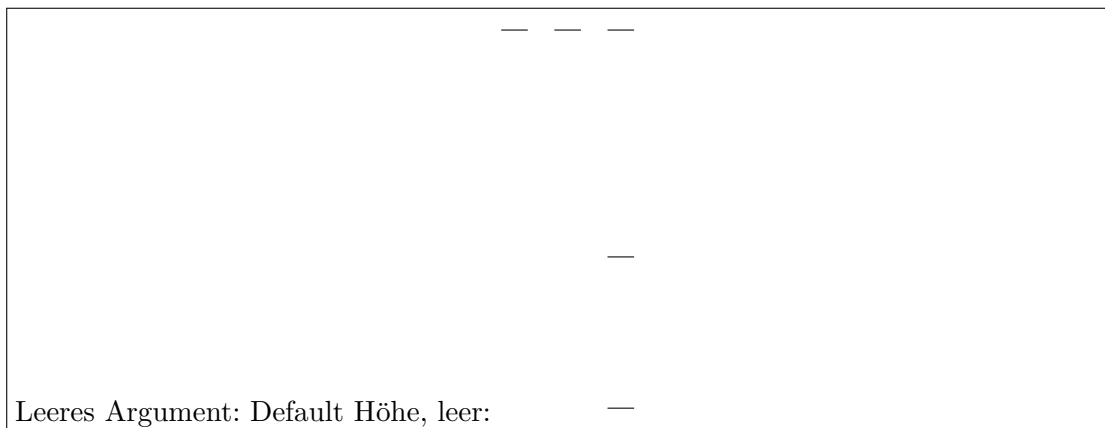
```



```

1 Leeres Argument: Default H\"ohe, leer:
2 \begin{MOfdiagram}
3   \atom{left}{1s=, 2s=, 2p=}
4 \end{MOfdiagram}

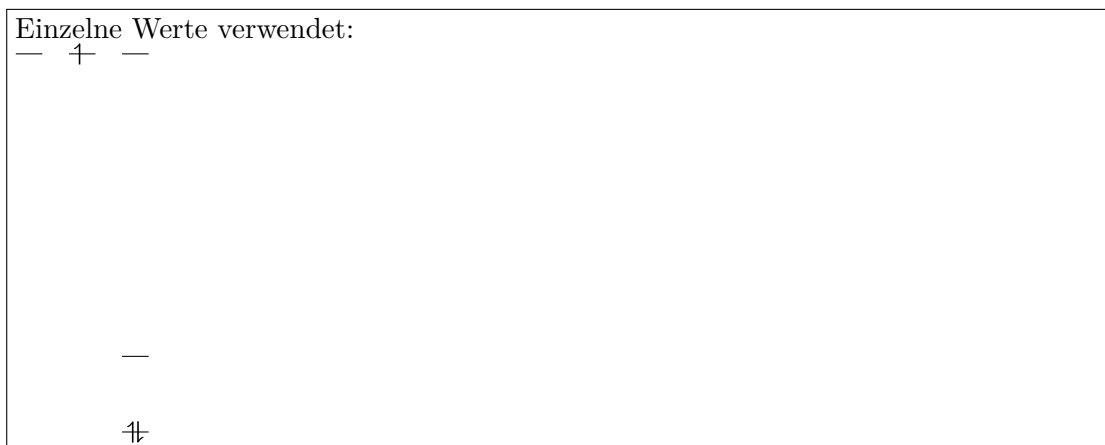
```



```

1 Einzelne Werte verwendet:\\
2 \begin{MOfdiagram}
3   \atom{left}{1s, 2s=1, 2p={;,up} }
4 \end{MOfdiagram}

```

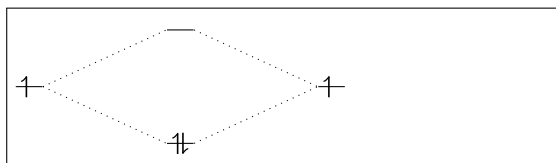


3.2 Der \molecule Befehl

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

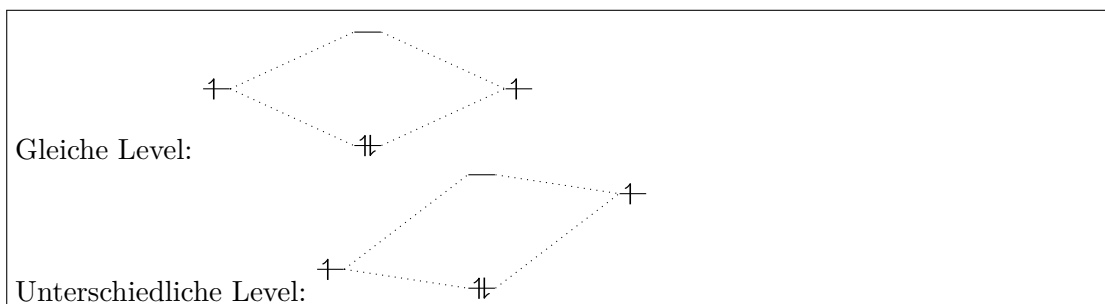
```

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}

```



NEU Wird für `<energy loss>` ein eigener Wert angegeben, können auch unsymmetrische Aufspaltungen erzeugt werden. Dann gilt der erste, `<energy gain>`, für das bindende und der zweite, `<energy loss>`, für das antibindende MO.

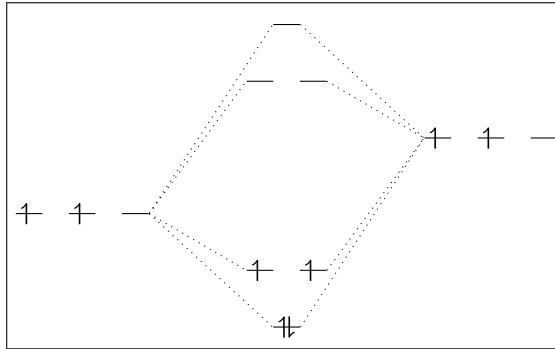
```

1 \begin{MOdiagram}
2   \atom{left} { 1s = { 0; up } }
3   \atom{right}{ 1s = { 0; up } }
4   \molecule { 1sMO = {.75/.25; pair } }
5 \end{MOdiagram}
6
7 \begin{MOdiagram}
8   \atom{left} { 1s = { 0; up } }
9   \atom{right}{ 1s = { 1; up } }
10  \molecule { 1sMO = {.25/.75; pair } }
11 \end{MOdiagram}

```

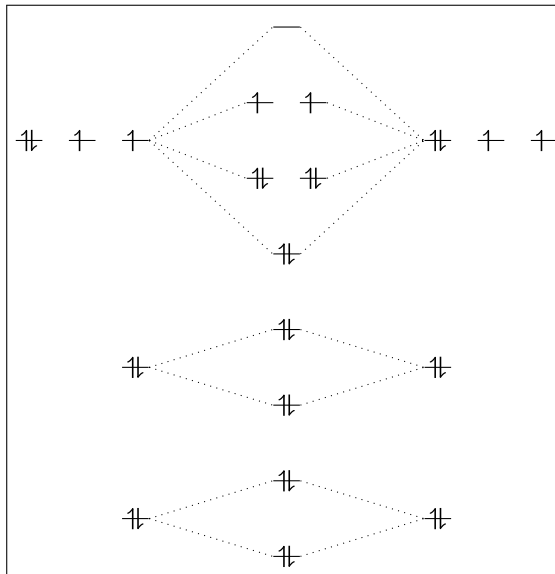


Beachten Sie, dass Sie bei **2pMO** *zwei* solche Werte (oder Paare) angeben müssen: die Aufspaltung der σ -Orbitale und die Aufspaltung der π -Orbitale.



```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left}{ { 2p = { 0; up,
3   up } } }
4 \atom{right}{ { 2p = { 1; up,
5   up } } }
6 \molecule { 2pMO = { 1.5,
7   .75; pair, up, up } }
8 \end{MOdiagram}
```

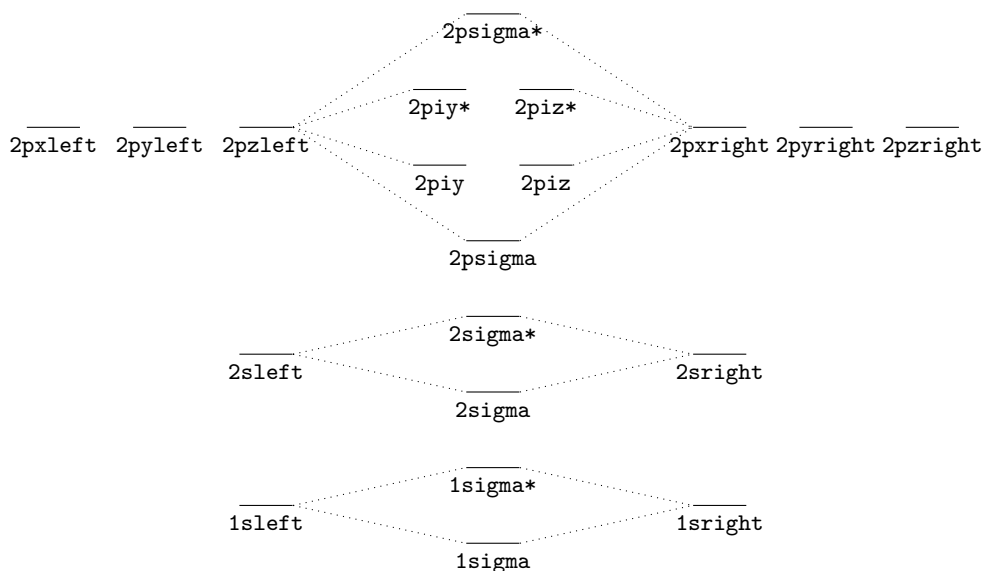
Das komplette MO-Diagramm für Triplett-Disauerstoff könnte nun etwa folgendermaßen aussehen:



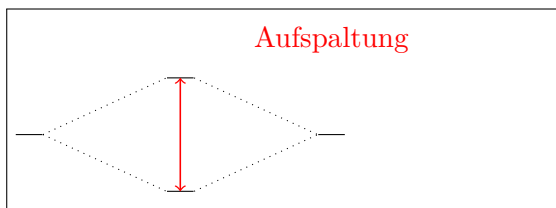
```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left}{
3   1s, 2s, 2p = {;pair,up,up}
4 }
5 \atom{right}{
6   1s, 2s, 2p = {;pair,up,up}
7 }
8 \molecule{
9   1sMO, 2sMO, 2pMO = {;pair,
10    pair,pair,up,up}
11 }
12 \end{MOdiagram}
```

3.3 Die Namensgebung

Da man üblicherweise die AO und MO auch beschriften (können) möchte und sie in der M0diagram-Umgebung *TikZ*-Nodes entsprechen, ist die interne Benennung wichtig. Diese folgt eng der tatsächlichen Funktion:



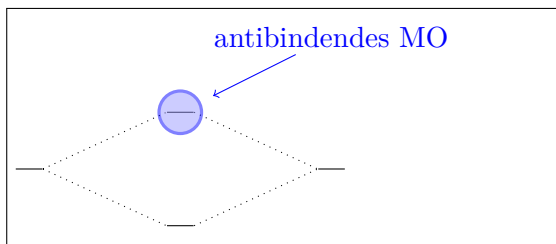
Mit diesen Bezeichnungen ist es möglich, sie mit den üblichen *TikZ*-Befehlen zu referenzieren:



```

1 \begin{M0diagram}
2 \atom{left} { 1s = 0 }
3 \atom{right}{ 1s = 0 }
4 \molecule { 1sMO = .75 }
5 \draw[<->,red,semithick] (1
   sigma.center) -- (1sigma
   *.center) ;
6 \draw[red] (1sigma*) ++ (2cm
   ,.5cm) node {Aufspaltung}
   ;
7 \end{M0diagram}

```



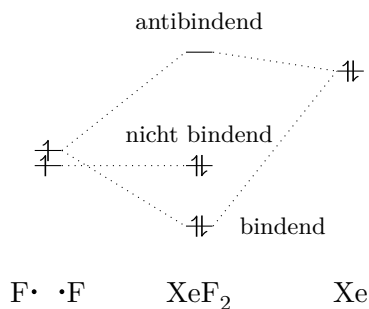
```

1 \begin{MOfdiagram}
2   \atom{left} { 1s = 0 }
3   \atom{right}{ 1s = 0 }
4   \molecule { 1sMO = .75 }
5   \draw[draw=blue,very thick,
6         fill=blue!40,opacity=.5]
7         (1sigma*) circle (8pt);
8   \draw[<-,shorten <=8pt,
9         shorten >=15pt,blue] (1
10        sigma*) --++(2,1) node {
11        antibindendes MO};
12 \end{MOfdiagram}

```

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:

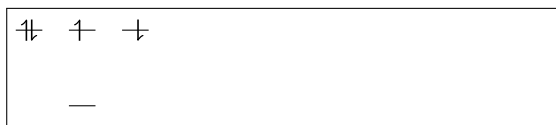


Um solche MO-Diagramme erstellen zu können, gibt es folgenden Befehl:

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

- `<name>` (o) Name der Node, wenn nicht angegeben, dann wird `A0#` verwendet, wobei # eine fortlaufende Nummer ist.
- `<xshift>` (o) Vertikale Position des Orbitals, eine $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -Länge mit Einheit
- `<type>` (m) s oder p
- `<key = val>` (o) Key-Value Paare, mit denen das Layout angepasst werden kann, siehe Abschnitt 4.3.
- `<A0-spec>` (m) Spezifizierung des Atom-Orbitals

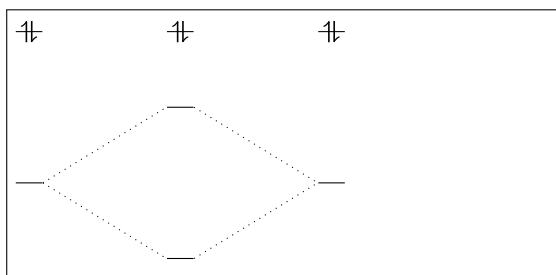
Je nach <type> werden damit ein s- oder drei p-Orbitale erzeugt.



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

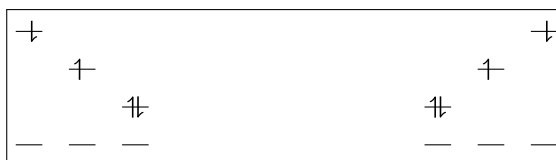
Möchte man ein AO genau an die Position eines Atoms setzen, so muss man deren <xshift> kennen. Die haben per Default folgende Werte (siehe auch Abschnitt 3.5):

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



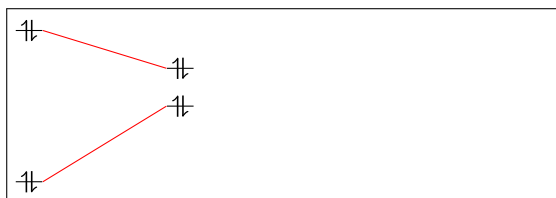
```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} {1s=0}
3 \atom{right}{1s=0}
4 \molecule {1sMO=1}
5 \AO(1cm){s}{2}
6 \AO(3cm){s}{2}
7 \AO(5cm){s}{2}
8 \end{MOdiagram}
```

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:



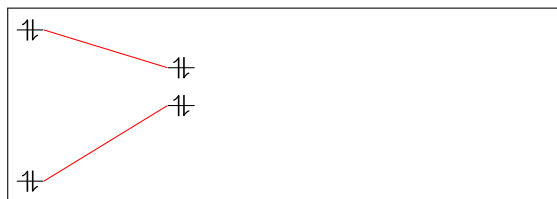
```
1 \begin{MOdiagram}
2 \atom{left} {2p=0}
3 \atom{right}{2p=0}
4 % ueber dem linken:
5 \AO(1cm) {s}{.5}
6 \AO(1cm-20pt){s}{1;up}
7 \AO(1cm-40pt){s}{1.5;down}
8 % ueber dem rechten:
9 \AO(5cm) {s}{.5}
10 \AO(5cm+20pt){s}{1;up}
11 \AO(5cm+40pt){s}{1.5;down}
12 \end{MOdiagram}
```

Auch die mit \AO gesetzten Orbitale können mit Linien verbunden werden. Das kann man natürlich mit dem \draw-Befehl machen. Dafür können Sie entweder die voreingestellten Node-Namen verwenden ...



```
1 \begin{MOdiagram}
2 \AO{s}{0} \AO(2cm){s}{1}
3 \AO{s}{2} \AO(2cm){s}{1.5}
4 \draw[red] (AO1.0) -- (AO
5 2.180) (AO3.0) -- (AO
6 4.180);
7 \end{MOdiagram}
```

... oder eigene Node-Namen setzen.



```
1 \begin{M0diagram}
2 \AO[a]{s}{0} \AO[b](2cm){s}
   {1}
3 \AO[c]{s}{2} \AO[d](2cm){s}
   {1.5}
4 \draw[red] (a.0) -- (b.180)
   (c.0) -- (d.180);
5 \end{M0diagram}
```

Die voreingestellten Namen lauten **A01**, **A02** usw. beim Typ **s** und **A01x**, **A01y**, **A01z**, **A02x** usw. beim Typ **p**. Beim Typ **p** bekommt auch der selbstgewählte Name ein **x**, **y** bzw. ein **z** angehängt.

```
1 \begin{M0diagram}
2 \AO{p}{0}
3 \draw[<-,shorten >=5pt] (A01y.-90) -- ++ (.5,-1) node {y};
4 \end{M0diagram}
5 und
6 \begin{M0diagram}
7 \AO[A]{p}{0}
8 \draw[<-,shorten >=5pt] (Ay.-90) -- ++ (.5,-1) node {y};
9 \end{M0diagram}
```

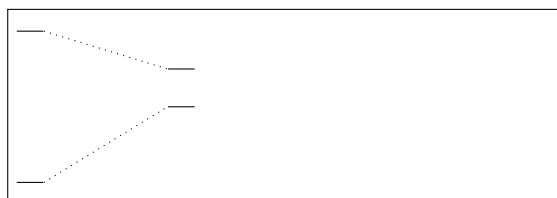


Soll die Verbindungslinie automatisch zu dem Stil der durch `\molecule` erzeugten Linien⁶ passen, dann sollte man den Befehl `\connect` verwenden.

`\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{M0diagram}
2 \AO{s}{0;} \AO(2cm){s}{1;}
3 \AO{s}{2;} \AO(2cm){s}{1.5;}
4 \connect{ A01 & A02, A03 &
   A04 }
5 \end{M0diagram}
```

⁶Dieser Stil kann angepasst werden, siehe Seite 21.

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:



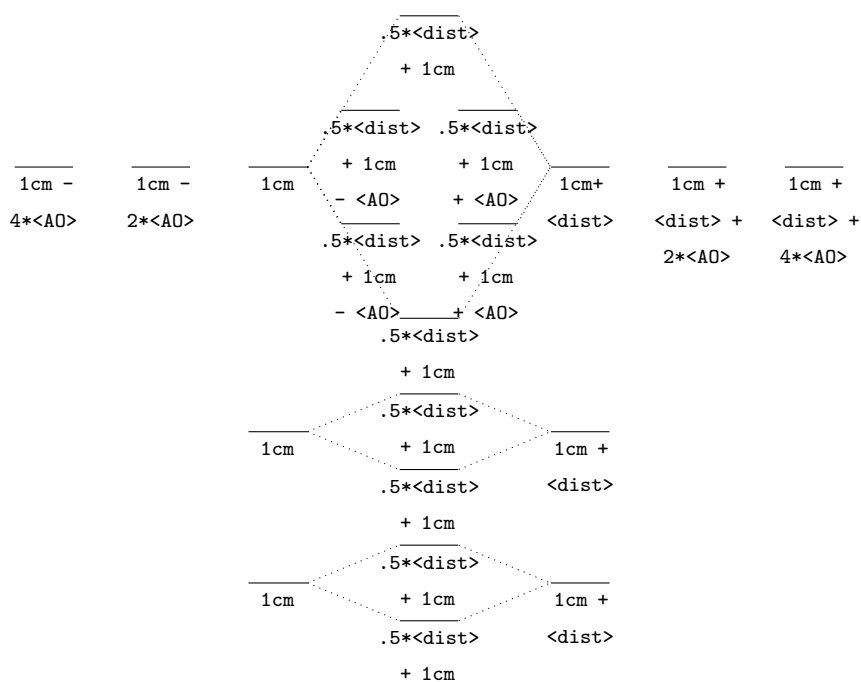
```

1 \begin{tikzpicture}
2 \draw (0,0) node (a) {a} ++
   (1,0) node (b) {b}
3   ++ (0,1) node (c) {c}
   ++ (-1,0) node (d)
       {d} ;
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.



3.6 Default-Werte

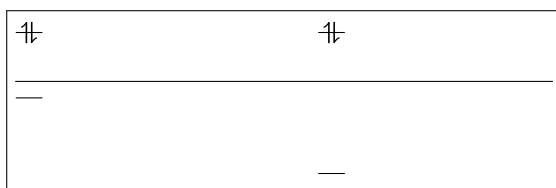
NEU Wenn Sie die Argumente (oder besser: Werte) für die Spezifikation der AO bzw. MO weg- oder leerlassen, werden spezielle Default-Werte verwendet. In der folgenden Tabelle finden Sie eine Übersicht.

AO / MO	ohne	leer
Syntax:	1s	1s=
1s	{0;pair}	{0;}
2s	{2;pair}	{2;}
2p	{5;pair,pair,pair}	{5;,}
1sMO	{.5;pair,pair}	{.5;,}
2sMO	{.5;pair,pair}	{.5;,}
2pMO	{1.5,.5;pair,pair,pair,pair,pair,pair}	{1.5,.5;,,,,}

Ganz ähnlich verhält es sich mit dem `\AO`-Befehl (Seite 11), mit dem Unterschied, dass er eine Angabe für `<energy>` benötigt.

<type>	<el-spec>
s	pair
p	pair,pair,pair

Vergleichen Sie folgende Beispiele:



```

1 \begin{MOdiagram}
2   \atom{left} { 1s={0;pair} }
3   \atom{right}{ 1s  }
4 \end{MOdiagram}
5
6 \hrulefill
7
8 \begin{MOdiagram}
9   \atom{left}{ 1s=1 }
10  \atom{right}{ 1s=  }
11 \end{MOdiagram}

```

4 Anpassen des Layouts

Die Optionen des Abschnitts 4.1 können auch global als Paketoptionen, d.h. mit `\usepackage[<key = val>]{modiagram}`, oder über den Setup-Befehl `\MOsetup{<key = val>}` eingesetzt werden.

4.1 Umgebungs-Optionen

Mit folgenden Optionen kann das Aussehen der MO-Diagramme verändert werden.

- `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.
- `el-sep=<num>` Abstand der Pfeile eines Elektronenpaars, Abschnitt 4.1.4.
- `up-el-pos=<num>` Position des Spin-Up Pfeils, Abschnitt 4.1.4.
- `down-el-pos=<num>` Position des Spin-Down Pfeils, Abschnitt 4.1.4.
- `lines=<tikz>` *TikZ*-Stil der Verbindungslinien anpassen, Abschnitt 4.1.5.
- `names=<bool>` Atome und Molekül beschriften, Abschnitt 4.1.6.
- `names-style=<tikz>` *TikZ*-Stil der Beschriftungen, Abschnitt 4.1.7.
- `names-style-add=<tikz>` *TikZ*-Stil der Beschriftungen, Abschnitt 4.1.7.
- `labels=<bool>` Orbitale mit Default Beschriftung versehen, Abschnitt 4.1.8.
- `labels-fs=<cs>` Schriftgröße der Label-Beschriftung verändern, Abschnitt 4.1.9.
- `labels-style=<tikz>` *TikZ*-Stil der Label-Beschriftung verändern, Abschnitt 4.1.10.

Sie alle werden nachfolgend besprochen. Wenn sie lokal als Option der Umgebung aufgerufen werden, haben sie nur für diese Auswirkungen.

```

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

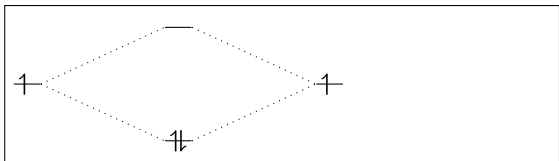
```

4.1.1 Option style

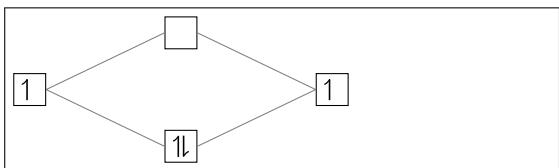
Es gibt fünf verschiedene Stile, aus denen ausgewählt werden kann:

- `style=plain` ∇ (Default)
- `style=square` $\boxed{1}$
- `style=circle` $\textcircled{1}$
- `style=round` $\boxed{1}$
- `style=fancy` $\boxed{1}$

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

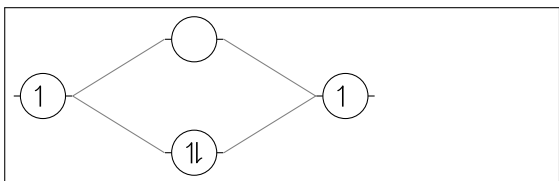


```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MoleculeDiagram}[style=plain
  ]% Default
3 \atom[H]{left} { 1s = {;up}
  }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {;up}
  }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MoleculeDiagram}
```

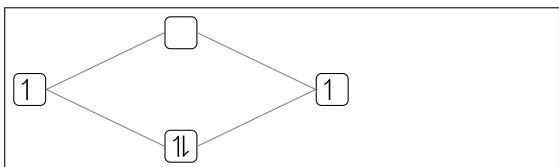


```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MoleculeDiagram}[style=
  square]
3 \atom[H]{left} { 1s = {;up}
  }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {;up}
  }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MoleculeDiagram}
```

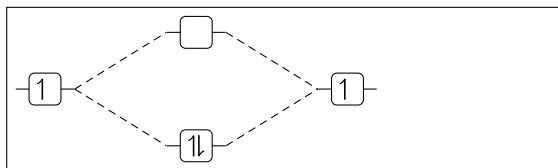
NEU



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



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



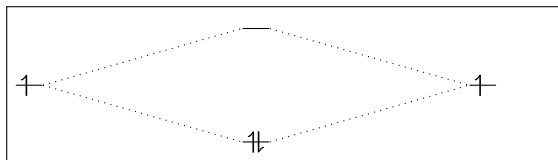
```

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

```

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 12 und Abschnitt 3.5.



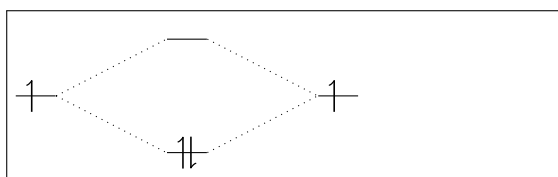
```

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

```

4.1.3 Option AO-width

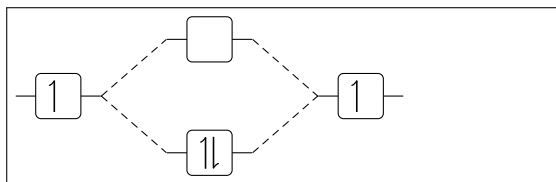
Die Länge `AO-width` entspricht der Länge des waagerechten Strichs eines Orbitals im `plain`-Stil und beträgt per Default 10 pt.



```

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

```



```

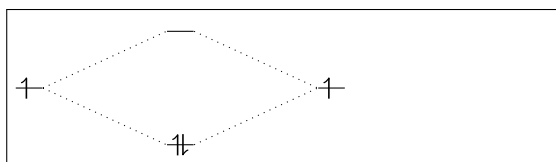
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[style=fancy
  ,AO-width=15pt]
3 \atom[H]{left} { 1s = {};up}
4 \atom[H]{right}{ 1s = {};up}
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}

```

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

4.1.4 Optionen `el-sep`, `up-el-pos` und `down-el-pos`

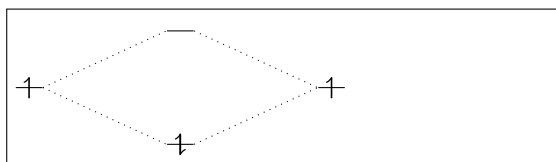
NEU Diese drei Optionen beeinflussen die horizontale Position der Pfeile, die die Elektronen in einem AO/MO repräsentieren. Die Option `el-sep=<num>` erwartet einen Wert zwischen 0 und 1. Dabei bedeutet 0 *keinen* Abstand voneinander und 1 *vollen* Abstand voneinander (bezogen auf die Länge `AO-width`, Abschnitt 4.1.3).



```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[el-sep=.2]%
  default
3 \atom[H]{left} { 1s = {};up}
4 \atom[H]{right}{ 1s = {};up}
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}

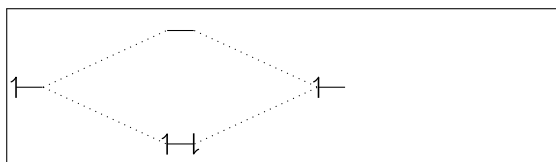
```



```

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

```

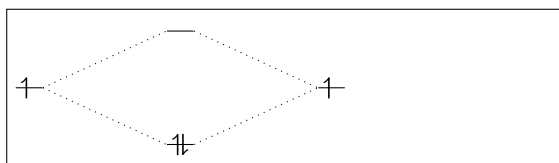


```

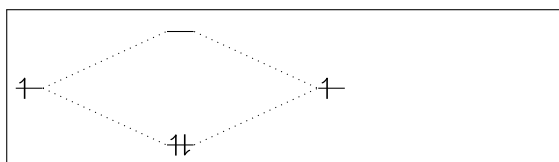
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[el-sep=1]
3 \atom[H]{left} { 1s = {};up}
4 \atom[H]{right}{ 1s = {};up}
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}

```

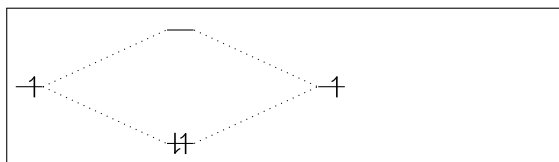
Die Optionen `up-el-pos=<num>` und `down-el-pos=<num>` können alternativ dazu eingesetzt werden, um das Spin-Up- und Spin-Down-Elektron zu platzieren. Wieder werden Werte zwischen 0 und 1 erwartet. Diesmal bedeutet 0 *ganz links* und 1 *ganz rechts*



```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MObdiagram}[up-el-pos
  =.4,down-el-pos=.6]%
  default
3 \atom[H]{left} { 1s = {};up}
  }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {};up}
  }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MObdiagram}
```



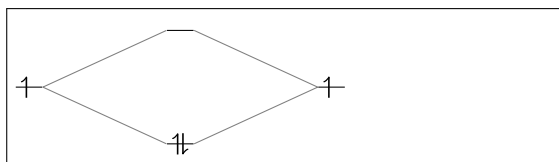
```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MObdiagram}[up-el-pos
  =.333,down-el-pos=.667]
3 \atom[H]{left} { 1s = {};up}
  }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {};up}
  }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MObdiagram}
```



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

4.1.5 Option lines

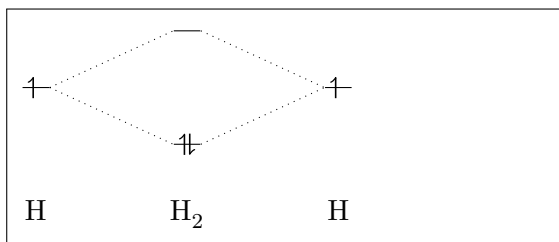
Der Option `lines` können `TikZ`-Keys angegeben werden, um den Stil der Verbindungslinien zu ändern.



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

4.1.6 Option names

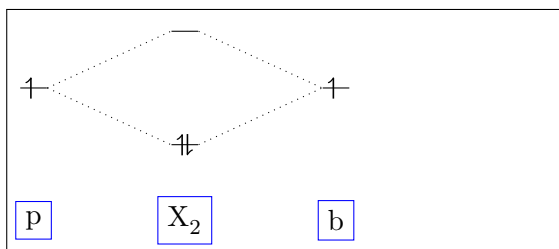
Verwendet man die Option `names`, werden den Atomen und dem Molekül Beschriftungen hinzugefügt, sofern man die optionalen Argumente von `\atom` und/oder `\molecule` verwendet hat.



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

4.1.7 Optionen names-style und names-style-add

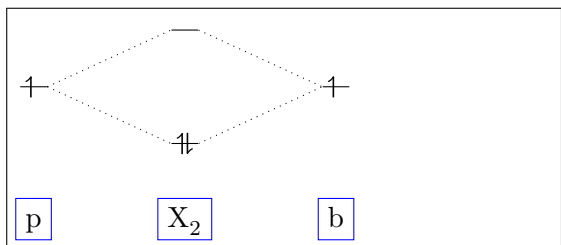
NEU Diese Optionen erlauben die Gestaltung der Beschriftung der Atome und des Moleküls. Per Default wird folgende Einstellung verwendet: `\names-style={anchor=base}`⁷.



```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MObdiagram}[names,names-style={draw=blue}]
3 \atom[p]{left} { 1s = {};up}
4 \atom[b]{right}{ 1s = {};up}
5 \molecule[\ce{X2}]{ 1sMO = {.75;pair} }
6 \end{MObdiagram}
```

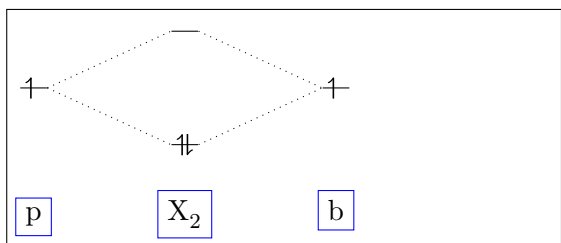
⁷Zur Bedeutung siehe „TikZ und PGF – Manual for Version 2.10“ S. 183 Abschnitt 16.4.4 (pgfmanual.pdf)

Damit werden die Voreinstellungen überschrieben. Wie Sie erkennen können, zerstört das die vertikale Ausrichtung der Nodes. Um das zu vermeiden, können Sie z. B. `text height` und `text depth` deklarieren ...



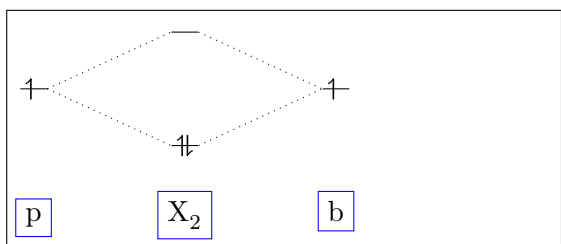
```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[names,names
  -style={text height=1.5ex,
    text depth=.25ex, draw=
    blue}]
3 \atom[p]{left} { 1s = {};up}
  }
4 \atom[b]{right}{ 1s = {};up}
  }
5 \molecule[\ce{X2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}
```

..., den `anchor` wieder hinzufügen ...



```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[names,names
  -style={anchor=base, draw=
    blue}]
3 \atom[p]{left} { 1s = {};up}
  }
4 \atom[b]{right}{ 1s = {};up}
  }
5 \molecule[\ce{X2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}
```

... oder die Option `names-style-add` verwenden. Diese überschreibt die Einstellung nicht, sondern fügt die neuen Deklarationen hinzu.

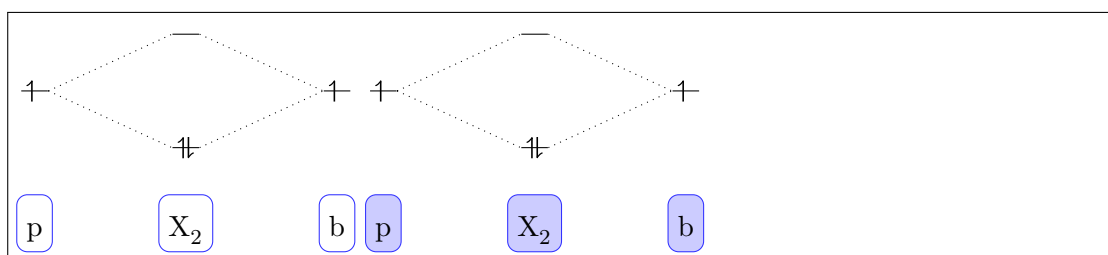


```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[names,names
  -style-add={draw=blue}]
3 \atom[p]{left} { 1s = {};up}
  }
4 \atom[b]{right}{ 1s = {};up}
  }
5 \molecule[\ce{X2}]{ 1sMO =
  {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}
```

```

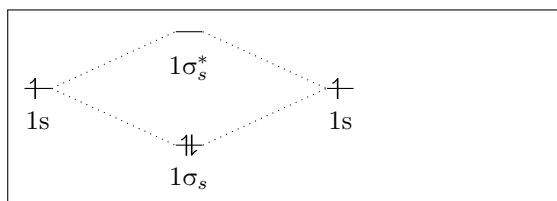
1 \MOsetup{names,names-style={text height=2.5ex,text depth=.5ex,
   draw=blue!80,rounded corners}}
2 \begin{MOfdiagram}
3   \atom[p]{left} { 1s = {};up} }
4   \atom[b]{right}{ 1s = {};up} }
5   \molecule[\ce{X2}]{ 1sMO = {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}
7 \begin{MOfdiagram}[names-style-add={fill=blue!20}]
8   \atom[p]{left} { 1s = {};up} }
9   \atom[b]{right}{ 1s = {};up} }
10  \molecule[\ce{X2}]{ 1sMO = {.75;pair} }
11 \end{MOfdiagram}

```



4.1.8 Option labels

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



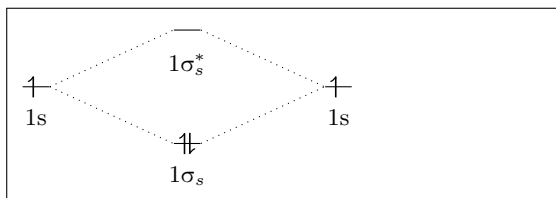
```

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

```

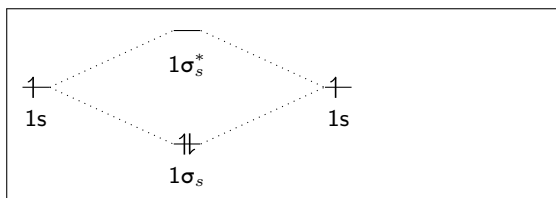
4.1.9 Option labels-fs

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{MOfdiagram}[labels,
   labels-fs=\footnotesize]
3 \atom[H]{left} { 1s = {;up}
   }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {;up}
   }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
   {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}
```

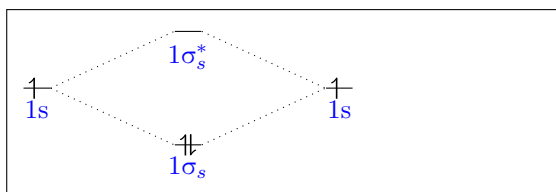
Damit ist es auch möglich, den Schriftstil zu verändern.



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

4.1.10 Option labels-style

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

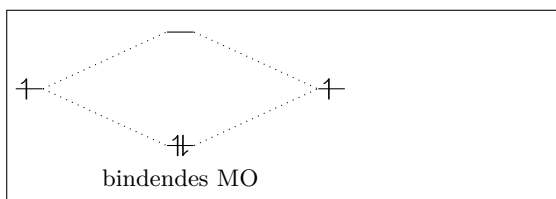


```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[labels,
   labels-style={blue,yshift
   =4pt}]
3 \atom[H]{left} { 1s = {;up}
   }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {;up}
   }
5 \molecule[\ce{H2}]{ 1sMO =
   {.75;pair} }
6 \end{MOfdiagram}
```

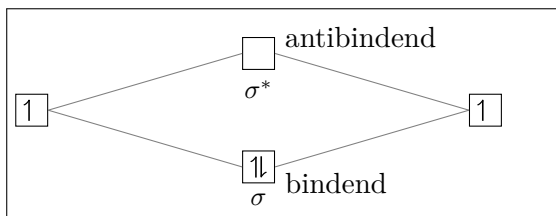
4.2 \atom und \molecule spezifische Anpassungen

4.2.1 Der label Key

Wenn man die vordefinierten Label nicht verwenden möchte, also eigene Label einsetzen 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.

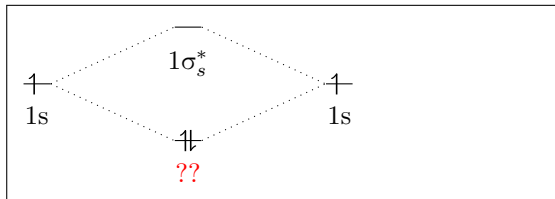


```
1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOdiagram}[labels-fs=\footnotesize]
3 \atom[H]{left} { 1s = {;up} }
4 \atom[H]{right}{ 1s = {;up} }
5 \molecule[\ce{H2}]{
6   1sMO = {.75;pair},
7   label = { 1sigma = {
8             bindendes MO} }
9 }
10 \end{MOdiagram}
```



```
1 \begin{MOdiagram}[style=square,distance=6cm]
2 \atom{left} { 1s = {;up} }
3 \atom{right}{ 1s = {;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}
```

Wird der Key zusammen mit der `labels`-Option (Seite 23) verwendet, dann werden damit einzelne Label überschrieben:



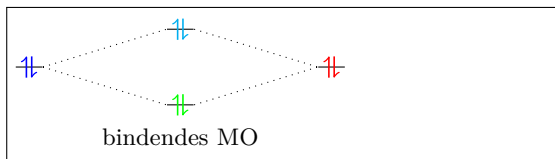
```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MOfdiagram}[labels]
3 \atom[H]{left} { 1s = {;up}
4   }
5 \atom[H]{right}{ 1s = {;up}
6   }
7 \molecule[\ce{H2}]{
8   1sMO = {.75;pair},
9   label = { 1sigma = \
10    textcolor{red}{??} }
11 }
12 \end{MOfdiagram}

```

4.2.2 Der color Key

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



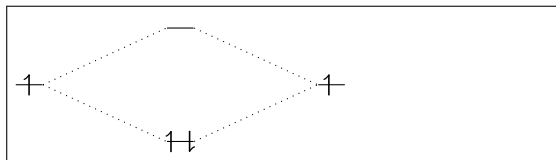
```

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

```

4.2.3 Die up-el-pos und down-el-pos Keys

NEU Mit den Keys up-el-pos bzw. down-el-pos ist es möglich, die Pfeile, die die Elektronen repräsentieren, in einem einzigen AO oder MO zu verschieben. Es können Werte zwischen 0 und 1 verwendet werden, siehe auch Abschnitt 4.1.4.



```

1 % use package 'mhchem'
2 \begin{MObdiagram}
3 \atom[H]{left}{
4   1s      = {;up},
5   up-el-pos = { 1sleft=.5 }
6 }
7 \atom[H]{right}{ 1s = {;up}
8 }
9 \molecule[\ce{H2}]{
10  1sMO      = {.75;pair} ,
11  up-el-pos = { 1sigma=.15
12                } ,
13  down-el-pos = { 1sigma=.85
14                  }
15 }
16 \end{MObdiagram}

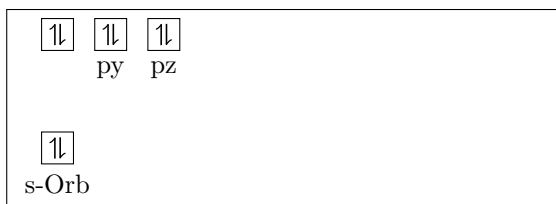
```

4.3 \AO spezifische Anpassungen

NEU Diese Keys erlauben, die mit \AO erzeugten AOs bzw. MOs anzupassen.

4.3.1 Der label Key

Der Key `label[x/y/z]` erlaubt, an ein frei gesetztes AO bzw. MO ein Label zu setzen. Wenn Sie den Typ `p` verwenden, können Sie in eckigen Klammern das zu verwendende Orbital auswählen.



```

1 \begin{MObdiagram}[style=
2   square]
3 \AO{s}[label=s-Orb]{0}
4 \AO{p}[label[y]=py,label[z]=
5   pz]{1.5}
6 \end{MObdiagram}

```

4.3.2 Der color Key

Analog zum `label`-Key gibt es den Key `color[x/y/z]`, der ermöglicht, die Elektronen zu färben. Wenn Sie den Typ `p` verwenden, können Sie in eckigen Klammern das zu verwendende Orbital auswählen.



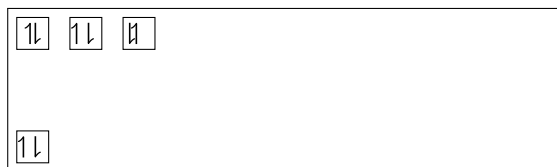
```

1 \begin{MObdiagram}[style=
2   square]
3 \AO{s}[color=red]{0}
4 \AO{p}[color[y]=green,color[
5   z]=cyan]{1.5}
6 \end{MObdiagram}

```

4.3.3 Die up-el-pos und down-el-pos Keys

Weiter gibt es noch die Keys `up-el-pos[x/y/z]` und `down-el-pos[x/y/z]`, mit denen die Elektronen verschoben werden können. Dabei können Sie Werte zwischen 0 und 1 einsetzen, siehe auch Abschnitt 4.1.4. Wenn Sie den Typ `p` verwenden, können Sie in eckigen Klammern das zu verwendende Orbital auswählen.



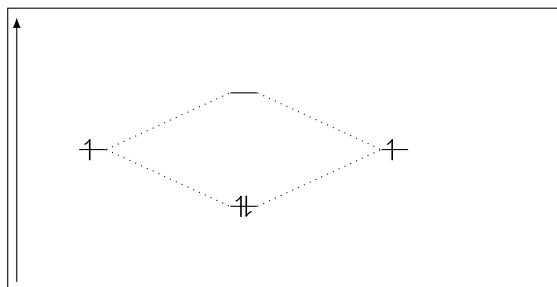
```
1 \begin{MObdiagram}[style=
   square]
2 \AO{s}[up-el-pos=.15]{0}
3 \AO{p}[up-el-pos[y]=.15,down
   -el-pos[z]=.15]{1.5}
4 \end{MObdiagram}
```

4.4 Energie-Achse

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

`\EnergyAxis[<key = val>]`

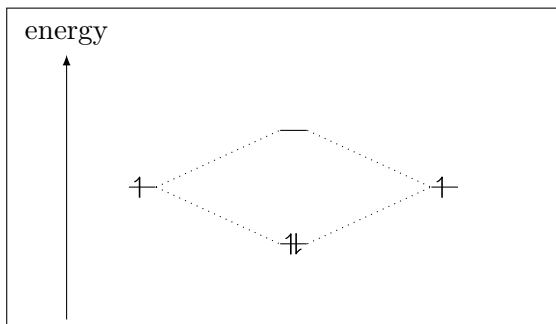
- `<key = val>` (o) Schlüssel-Wert-Paare, um die Achse zu modifizieren.



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

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

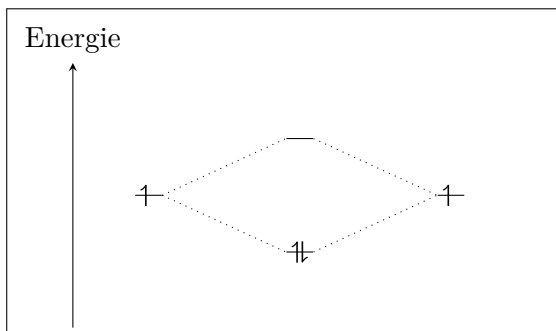
- `title=<title>` Achsenbeschriftung (Default: `energy`).
- `head=<tikz-arrow-head>` Pfeilspitze; hier können die Pfeilspitzen verwendet werden, die in der *TikZ*-Library `arrows` spezifiziert sind (pgf-Manual v2.10 Seiten 256ff.) (Default: `>`).



```

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

```



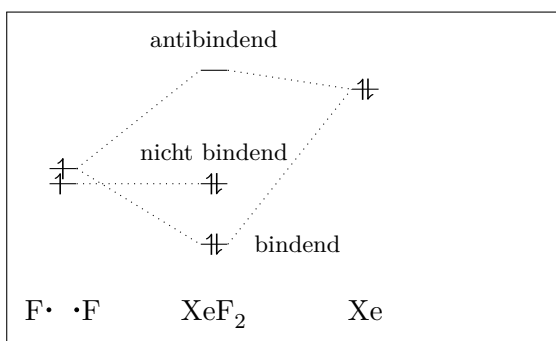
```

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

```

5 Beispiele

Das Beispiel vom Beginn des Abschnitts 3.4.



```

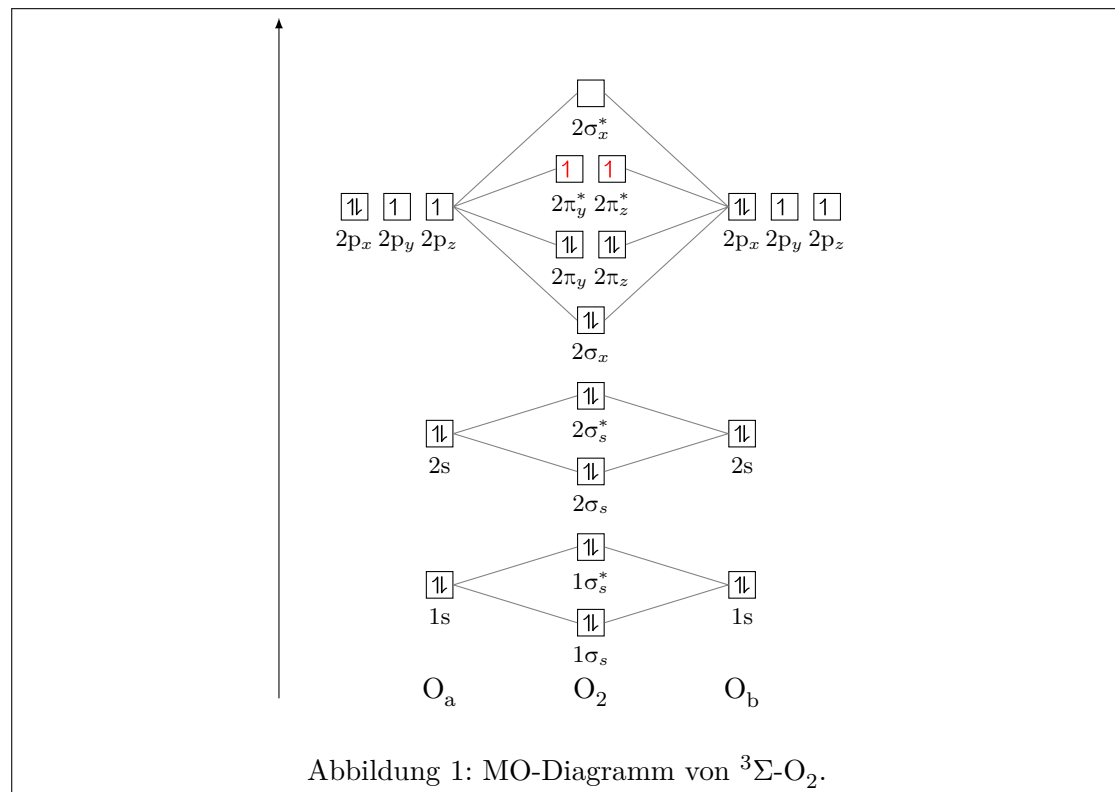
1 % use packages 'mhchem' and '
2 chemfig'
3 \begin{MOdiagram}[names]
4 \atom[\lewis{0.,F}\hspace*{5
5 mm}\lewis{4.,F}]{left}{1s
6 =.2;up,up-el-pos={1sleft
7 =.5}}
8 \atom[Xe]{right}{1s=1.25;
9 pair}
10 \molecule[\ce{XeF2}]{1sMO
11 = {1/.25;pair}}
12 \AO(1cm){s}{0;up}
13 \AO(3cm){s}{0;pair}
14 \connect{ A01 & A02 }
15 \node[right,xshift=4mm] at
16 (1sigma) {\footnotesize
17 bindend};
18 \node[above] at (A02.90) {\
19 footnotesize nicht
20 bindend};
21 \node[above] at (1sigma*.90)
22 {\footnotesize
23 antibindend};
24 \end{MOdiagram}

```

```

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

```



```

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

```

