

Руководство

Назначение и область применения

Данный продукт предназначен для построения и визуализации двухмерных моделей молекул по общим структурным данным в формате CML. Может быть использован в учебных целях (в качестве наглядного пособия) в рамках курсов по химии и биологии.

Общее описание и интерфейс

Программный продукт представляет собой консольное приложение. Подробное описание ключей и команд можно найти в руководстве пользователя.

Программный продукт использует интерфейс командной строки. Входные данные в программу можно передавать через командную строку или в виде тестового файла. Входные данные состоят из набора параметров, которые определяют поведение программы: имя CML-файла, удовлетворяющего стандартам и схемам стандарта[1], вывод количественной формулы[2](ключ -f), степеней окисления атомов (ключ -p), запуск Jmol для отображения построенной 2D-модели (ключ -v), имя файла для которого текущие разрешения ОС позволяют производить запись для сохранения построенной модели.