

Руководство пользователя

Назначение и область применения

Данный продукт предназначен для построения количественной формулы молекулы или молекул описанных в CML файле.

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.

Требования к составу и параметрам технических средств

В состав технических средств должен входить ПК с архитектурой x86 и ОС Windows 7 service pack 1 или выше.

Требования к исходным кодам и языкам программирования

Языки реализации: C++(ISO/IEC 14882:2003), компилятор Visual C++ 2010

Требования к программным средствам, используемым программой

Jmol(13.0.4), Boost(1.60.0)

Лицензия

MIT License.

Авторы

Куropicтев И.