

# Pflichtenheft.

## 1. Zielbestimmung.

### • **Muss-Kriterien:**

- Das Programm soll den Übersicht über separate Reaktionen oder Reaktionsketten geben.
- Den Entwicklern soll es einfach sein, neue Reaktionen oder Ketten im Programm darzustellen.
- Der Benutzer soll fähig sein, seine Kenntnisse zu prüfen.

☒ ~~Das Programm soll die Moleküle auf Beachtung des Oktet-Regels überprüfen.~~

### • **Wunsch-Kriterien:**

- Die Erfüllung verschiedener Regeln der Verbindungsbildung soll überprüft werden.
- Das Programm soll fähig sein, die Moleküle selbst zu malen.

## 2. Produkt-Einsatz:

- *Wofür?* Für die Lehre.
- *Für wen?* Für Studenten und Professoren.
- *Betriebsbedingungen:* Ab -40 °C bis +35 °C

## 3. Produkt-Umgebung:

- Python 3.7
- PyQt5

## 4. Produkt-Funktionen.

1. **Reaktionswege nachsehen.** Der Benutzer kann die vorgestellten Reaktionen nachsehen und Infos darüber kriegen (sehen Sie die Produkt-Daten).
2. **Kenntnisse Testen.** Das Programm macht zufällig Lücken in Reaktionswegen, der Benutzer soll sie mit Drag-n-Drop füllen. Das Programm bewertet dann das Ergebnis und zeigt die Fehler.

3. **Reaktionswege erstellen.** Der Benutzer kann neue Reaktionswege für Punkte 1 und 2 erstellen.

5. **Produkt-Daten.**

- Die größte Einheit ist der **Reaktionsweg** mit einem Name.
- Er besteht aus 1..n streng angeordneten **Reaktionen/Enzymen**.
- Eine Reaktion hat immer **Edukte** und **Produkte**. In einem Reaktionsweg sind ein oder mehrere Produkte einer Reaktion Edukte der nächsten Reaktion.
- *Ein Enzym kann einen nicht festen Target haben: Bestimmte Struktur in Molekülen und nicht die Moleküle gesamt.*
- Edukte und Produkte sind **Moleküle**. Moleküle bestehen aus einem (mehreren) Objekt(en) der Klasse Bond und einem **Bild**.

6. **Produkt-Leistungen.**

7. **Benutzeroberfläche.**

8. **Qualitätszielbestimmung.**

9. **Globale Testszenarien/Testfälle.**

10. **Entwicklungsumgebung.**

11. **Ergänzungen.**

12. **Glossar, Begriffslexikon.**