

Klasy:

- Atom
- Residue
- Chain -> Helix, Sheet . . .
- Molecule
- Ramachandran_map

Funkcje:

- load_molecule_from_pdb(path : string) -> Molecule
 - load_chain_from_pdb(path : string, chain_identifier : string) -> Chain
-

Atom:

- Dane:
 - atom_name (string),
 - element_symbol (string),
 - coordinates (float, float, float),
- Funkcje:
 - ?

Residue:

- Dane:
 - residue_name (string),
 - residue_sequence_number (int),
 - atoms (lista obiektów typu Atom),
- Funkcje:
 - ?

Chain:

- Dane:
 - chain_identifier (string),
 - residues (lista obiektów typu Residue),
 - helices_indexes (lista tupli (int, int)),
 - sheets_indexes (lista tupli (int, int)),
 - . . .
- Funkcje:
 - get_helix(helix_identifier : string) -> Helix(Chain)
 - get_all_helices() -> lista obiektów typu Helix(Chain)
 - get_sheet(sheet_identifier : string) -> Sheet(Chain)
 - get_all_sheets() -> lista obiektów typu Sheet(Chain)
 - get_hetatoms() -> lista obiektów typu Atom
 - load_chain_from_pdb(path : string, chain_identifier : string) -> Chain

Molecule:

- Dane:
 - molecule_name (string),
 - chains (lista obiektów typu Chain),
- Funkcje:
 - load_molecule_from_pdb(pdb_file_path : string)
 - get_chain(chain_identifier : string) -> Chain
 - get_all_chains() -> lista obiektów typu Chain

Ramachandran_map:

- Dane:
 - chain identifier (string),
 - phi_angles (lista float)
 - psi_angle (lista float)
- Funkcje:
 - calculate_map(input_chain : Chain) ?funkcja jako konstruktor?
 - show()
 - save(path : string)