Модель

В предметной области выделяются простые сущности – атомы и составные сущности – молекулы.

Каждый атом характеризуется :

* Элементом, который он представляет
* Символом, обозначающий элемент
* Размером атома ( относительной атомной массой)
* Количеством связей, которые он может устанавливать

Каждая молекула характеризуется:

* Входящими в ее состав атомами
* Связями между этими атомами

В программе атомы будут храниться в файле формата xml. Файл содержит описание каждого атома, храня все выделенные характеристики. Пример:

<element name=”hydrogen”>

<symbol> H<\symbol>

<size> 1<\size>

<valency> <\valency>

<\element>

Каждая молекула, схему которой надо будет составить в программе, описана в отдельном xml файле. Пример:

<molecule name=”methan”>

<elements>

<atom id=”a1” type=”C”\>

<atom id=”a2” type=”H”\>

<atom id=”a3” type=”H”\>

<atom id=”a4” type=”H”\>

<atom id=”a5” type=”H”\>

<\elements>

<links>

<l id=”l1” from=”a1” to=”a2”\>

<l id=”l2” from=”a1” to=”a3”\>

<l id=”l3” from=”a1” to=”a4”\>

<l id=”l4” from=”a1” to=”a5”\>

<\links>

<\molecule>

Молекула с точки зрения структуры представляет собой граф. В программе молекула будет храниться как список смежности этого графа. Для этого будут использоваться стандартные Java коллекции TreeMap.

В одном TreeMap будут храниться id атома и соответствующий этому id класс атома. Во втором TreeMap будут храниться id атома и список атомов, с которыми он связан. Таким образом в памяти программы будет храниться информация об атомах и связях между ними.

Для демонстрации 3D. Модели молекулы будет использоваться инструмент Jmol. Он работает со структурой данных в виде cml файла.