



CML

ConsoleCML

Руководство пользователя

Аннотация

Инструкции
к установке

Краткий
список команд

Примеры и пояснения

ИЮЛЬ 2016

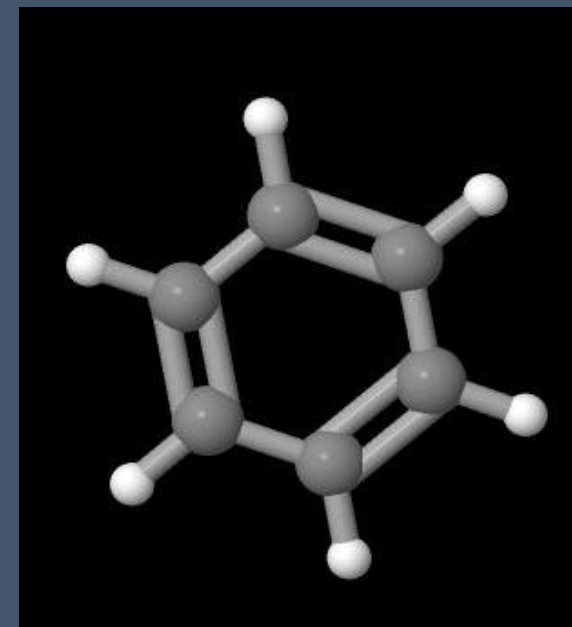
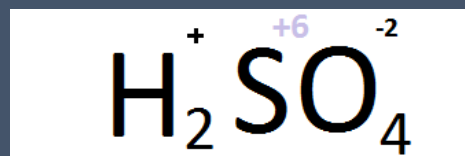
ConsoleCML

Данный продукт предназначен для построения и визуализации молекул по общим структурным данным в формате **.cml**.

Может быть использован в учебных целях.

ConsoleCML использует интерфейс командной строки.

Программа должна обеспечивать следующие функции:



- Вычисление степеней окисления всех атомов в молекуле
- Отображение молекулы с помощью **Jmol**
аналогичное получаемому через интерфейс пользователя
- Вывод дополнительной информации (количественная формула, справка)

Инструкции к установке

1. Папку с исполняемым файлом **.exe** поместите в удобную для запуска директорию.
2. Убедитесь, что на компьютере установлен **Jmol***.
3. Файлы для обработки желательно поместить в каталог с исполняемым файлом.
(В противном случае необходимо задавать их **полный путь**)

*Установить Jmol можно по этой ссылке:

<http://jmol.sourceforge.net/download/>

Папку из архива рекомендуется переименовать в `jml` и оставить на диске C.

Тогда путь до исполняемого **.jar** файла станет: `C:\jml\jmol.jar`

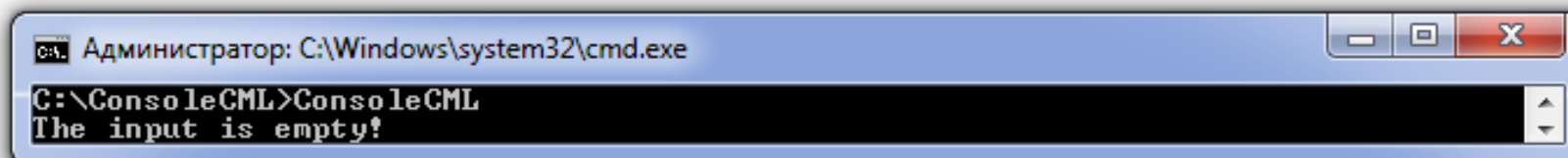
Пробный запуск

В командной строке наберите и запустите (**Enter**):

```
>ConsoleCML
```

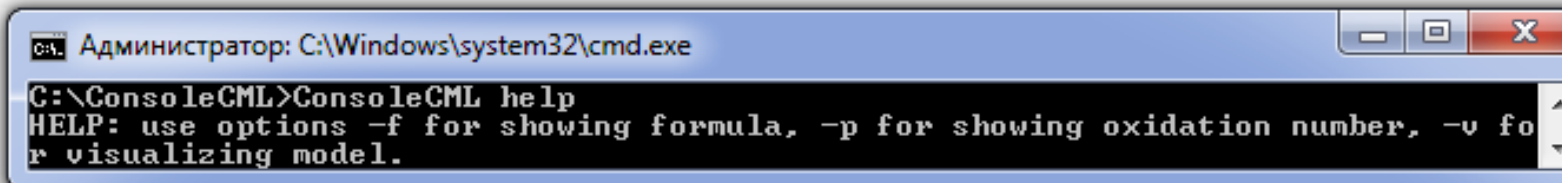
```
>ConsoleCML help
```

Результаты:



Администратор: C:\Windows\system32\cmd.exe

```
C:\>ConsoleCML>ConsoleCML  
The input is empty!
```



Администратор: C:\Windows\system32\cmd.exe

```
C:\>ConsoleCML>ConsoleCML help  
HELP: use options -f for showing formula, -p for showing oxidation number, -v fo  
r visualizing model.
```

Параметры

Для выполнения задач в **ConsoleCML** необходимо передать параметры.

В общем случае (| - "или"):

```
>ConsoleCML [[filename] []|[-f]|[-p]|[-v] [path]|[null] ]  
| [help] | []
```

filename - имя ***.cml** файла

-f - флаг "показать количественную формулу"

-p - флаг "вычислить степени окисления"

-v - флаг "отобразить молекулу из файла"

Флаги независимы между собой.

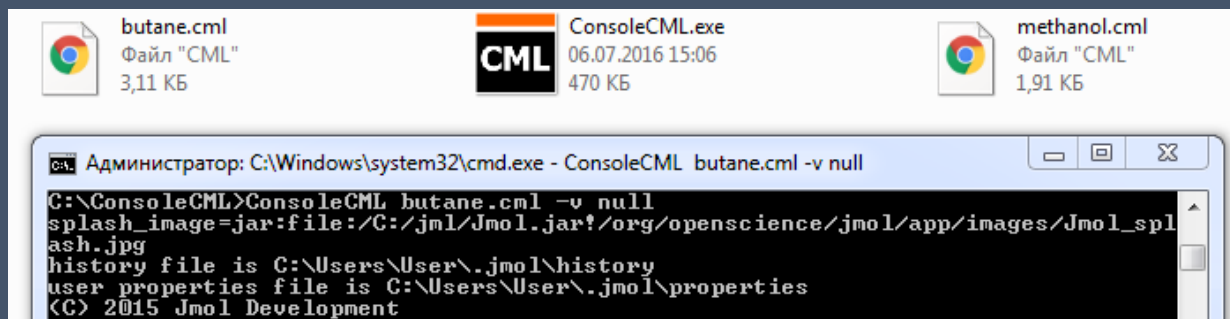
В качестве параметра path необходимо указать путь до jmol.jar.

Иначе можно указать null - приложение будет искать этот файл по пути:

C:\jml\jmol.jar

Примеры

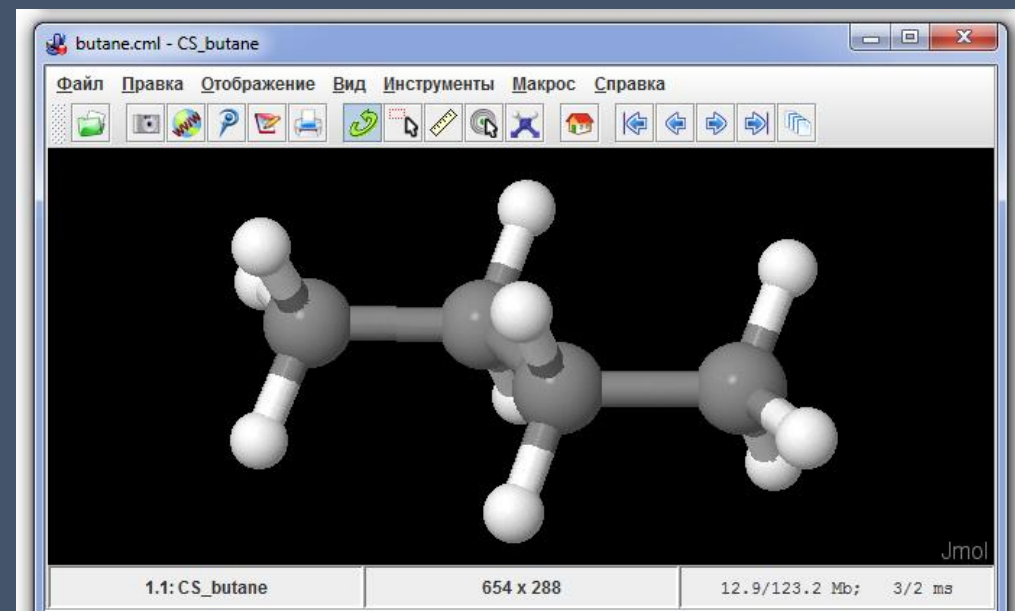
```
>ConsoleCML butane.cml -v null
```



В качестве демонстрационных примеров в репозитории можно найти несколько **.cml** файлов. Например, `butane.cml`

В данном примере **ConsoleCML** отображает модель бутана с помощью **Jmol** без дополнительных опций.

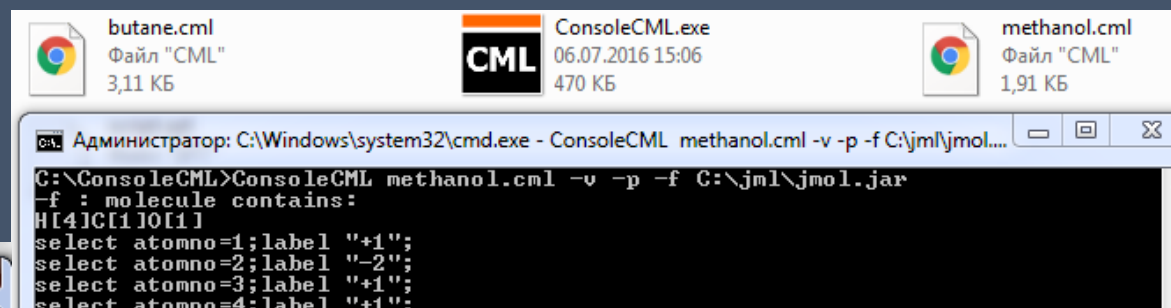
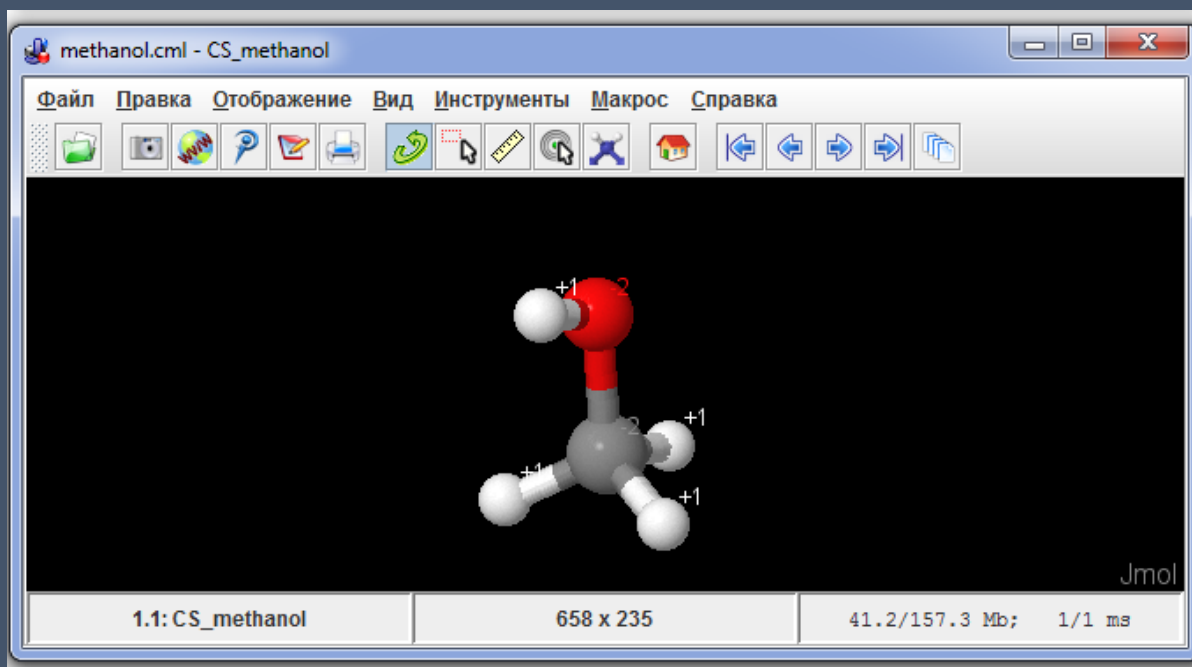
Путь до `jmol.jar` подразумевается стандартным: `C:\jml\jmol.jar`.



Примеры

```
>ConsoleCML methanol.cml -v -p -f C:\jml\jmol.jar
```

В данном случае путь указывается
явно: C:\jml\jmol.jar



```
butane.cml
Файл "CML"
3,11 КБ

ConsoleCML.exe
06.07.2016 15:06
470 КБ

methanol.cml
Файл "CML"
1,91 КБ

Администратор: C:\Windows\system32\cmd.exe - ConsoleCML methanol.cml -v -p -f C:\jml\jmol.jar

C:\ConsoleCML>ConsoleCML methanol.cml -v -p -f C:\jml\jmol.jar
-f : molecule contains:
H[4]C[1]O[1]
select atomno=1;label "+1";
select atomno=2;label "-2";
select atomno=3;label "+1";
select atomno=4;label "+1";
```

Указаны все флаги -v -p -f
В консоли выводится
количественная формула.
Молекула отображается в
Jmol вместе со степенями
окисления.

Условия эксплуатации

1. 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.

2. Требования к программным средствам, используемым программой

Jmol (13.0.4), Boost (1.60.0)