**代码思路：**

1. **分子读入：**通过smile将分子结构读入，也可以直接读入mol等类型的文件，这是我们得到的分子结构是2D的，并不能代表分子结构的实际坐标。
2. **2D转3D:结构转换：**通过加H原子与rdkit自带包的3D结构转化与力学结构优化，进一步贴近实际分子结构。输出此时3D结构的原子中心位置的坐标。
3. **坐标轴点阵的生成：**通过对原子中心坐标的限制以及判断，规划出我们所需要划分的区域的范围，然后在此范围内生成指定行列的坐标轴点阵。
4. **与点阵高度相对应的矩阵：**初始化高度矩阵，通过对基平面的移动，使基平面置于分子结构之下。
5. **分子结构的高度输入：**假设为一簇光束从分子结构上方射下，将分子投影高基平面上，分子从接触分子时的高度作为此分子在此位置的高度，如此计算分子结构的高度，并储存在之前建立好的矩阵中。如下图

