# Stellenausschreibung – Studentische Hilfskraft

22.04.2013

Wir suchen einen Studenten, der Spaß daran hat ein Tool zu entwickeln, das Molekül-Strukturdaten, die in Textform vorliegen, graphisch bearbeiten kann. Es gibt zwar bereits viele Programme, die solche Strukturdaten anzeigen können, z.B. jmol (siehe Bild unten), aber die uns bekannten können diese Daten nicht oder nur ungenügend bearbeiten. Die Molekülstrukturen sollen graphisch bearbeitbar sein, also nach Auswählen einer beliebigen Teilstruktur soll diese rotiert, verschoben, gespiegelt o.ä. werden. Das Ziel der Arbeit ist, solche geometrische Operationen in ein Programm einzubauen.

Typische Fragestellung: Das Beispiel unten zeigt zwei $C_{58}$-Fullerene auf einer Goldoberfläche. Ein Anwendungsfall wäre nun, das erste Fulleren festzuhalten und das andere um das erste herumzudrehen. Dabei müssen natürlich die Bindungsabstände zwischen den Fullerenen und der Goldoberfläche beibehalten werden. Oder man möchte die beiden Fullerene gezielt um ihre Symmetrieachse drehen; ohne den Abstand zur Goldoberfläche zu verändern.

Aufgabenbeschreibung:

1. Vorarbeit: Scan existierender Tools (http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_molecular_graphics_systems), als Entscheidungsgrundlage, welche gewünschte Funktionalität bereits vorhanden ist.
2. Danach: Gemeinsame Entscheidung: Welches Tool und was wird implementiert.

Vorraussetzungen:

- Programmierkenntnisse, Fähigkeit sich zügig in eine neue Sprache einzuarbeiten
- Die Aktivität ist in der Arbeitsgruppe gut integriert. Selbstständiges Arbeiten im eigenen Verantwortungsbereich wird aber erwartet.
- Teamfähigkeit und Interdisziplinarität: Das Projekt verbindet Gruppen aus theoretischer Physik und Chemie.

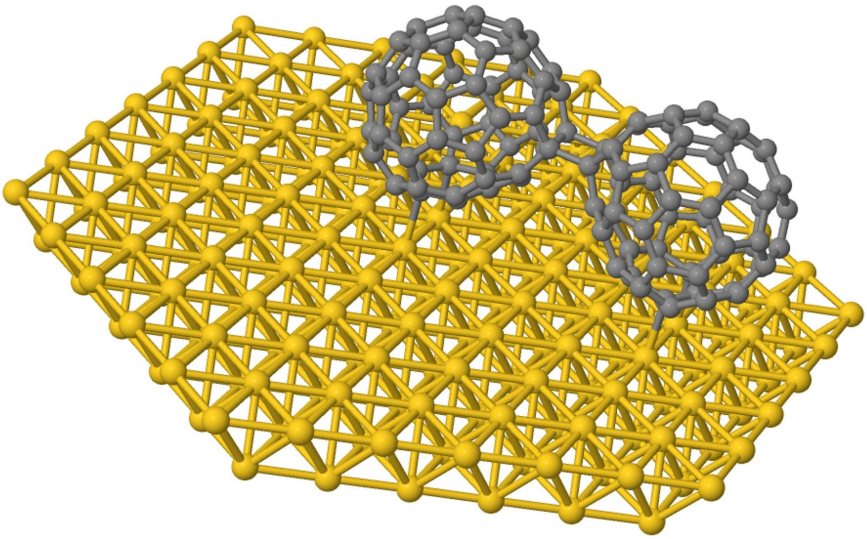
Position:

- Studentische Hilfskraft mit ca. 20-40 Stunden/Monat (nach Absprache)
- gewünschte Dauer: bis zur Programmfertigstellung

Arbeitsstätte:

- Homeoffice, nach Absprache evtl. auch Institut für Nanotechnologie (Campus Nord – KIT) (Ausgezeichnete Anbindung an Campus Süd via KIT-Shuttle)

```
C    -0.7313231   -5.3056717    9.0129452
C     0.7299033   -5.3056717    9.0129571
C    -1.4313286   -6.3113048    8.3181190
C    -0.7066865   -7.3640507    7.6157714
C     0.7052505   -7.3640330    7.6157775
C     1.4298969   -6.3113036    8.3181211
C    -2.6076813   -5.9754766    7.5252011
C    -1.1783285   -3.9214285    8.9265603
...
Au   -7.2093051    9.9895062    0.0000000
Au   -7.2093051    8.3245885   -2.3545492
Au   -8.6511662    7.4921297    0.0000000
Au   -4.3255831    9.9895062    0.0000000
Au   -1.4418610    9.9895062    0.0000000
Au   -5.7674441    7.4921297    0.0000000
Au   -4.3255831    8.3245885   -2.3545492
Au   -8.6511662    5.8272120   -2.3545492
Au  -10.0930272    4.9947531    0.0000000
Au   -5.7674441    5.8272120   -2.3545492
...
```



Links: Teil einer Strukturdatei, Rechts: grafische Darstellung der Struktur von jmol

Kontakt und Betreuung:

- Dipl.-Phys. Michael Walz (michael.walz@kit.edu), Prof. (apl.) F.Evers (ferdinand.evers@kit.edu)
- Gruppenseite: https://www.tkm.kit.edu/forschung/ag-evers/