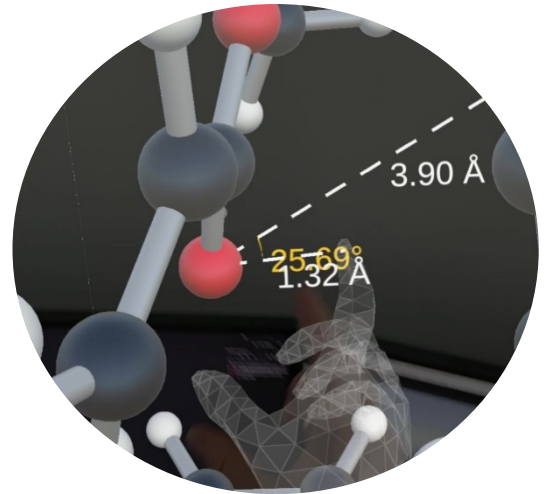


## Bachelor-/Masterarbeit

# Visualisierung von Eigenschaften in einer Augmented-Reality-Umgebung



**Betreuer**  
Tobias Rau

**Prüfer**  
Prof. Dr. Andreas Köhn

### Motivation

Eigenschaften von Molekülen sind oft unmittelbar mit deren Struktur und ihrer Ausrichtung relativ zu einer Vorzugsrichtung (z.B. ein Magnetfeld) verknüpft. Einfache Eigenschaften, wie z.B. Dipolmomente oder Polarisierbarkeiten lassen sich als geometrische Symbole (Pfeil, Ellipsoid) darstellen, durch die unmittelbare Verknüpfung mit der molekularen Struktur entsteht dabei oft ein intuitives Verständnis von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen. In dieser Arbeit sollen solche Darstellungen für eine interaktive Umgebung in Augmented Reality (AR) entwickelt werden. Dabei steht vor allem die intuitive Interaktion mit 3D-Objekten und eine Erweiterung auf dynamische Modelle (d.h. wie ändert sich eine Eigenschaft als Funktion der Struktur) im Vordergrund.

Die Arbeit baut dabei auf das in dieser Arbeitsgruppe entwickelte Paket chARpack auf (<https://charpack.github.io/>, Publikation dazu: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.4c00462>). Als Hardware nutzen wir HoloLens™ und Meta Quest™, zudem kann die Software auch auf normalen Laptop- oder Desktop-Computern laufen.

*Diese Abschlussarbeit ist Teil einer Kollaboration des Instituts für theoretische Chemie und des Instituts für Visualisierung in interaktive Systeme innerhalb des Cluster of Excellence SimTech.*

### Aufgaben

Je nach Vorkenntnissen und Vorlieben kann dieses Projekt unterschiedlich ausgestaltet werden. Im Kern muss über ein Python-Interface ein existierendes Machine-Learning-Modul (welches die Eigenschaften als Funktion der Kernkoordinaten liefert) mit chARpack verknüpft werden. Darüber hinaus können die graphische Darstellung und die Möglichkeiten zur Interaktion optimiert und in Benutzerstudien getestet werden.

### Voraussetzungen

- Studium in den Fächern Chemie, Materialwissenschaften oder Simulation Technology (Naturwissenschaftszweig)
- Etwas Erfahrung mit einer Skriptsprache (Python, C#, ...)

### Bewerbung

Bitte senden Sie eine Nachricht an [tobias.rau@theochem.uni-stuttgart.de](mailto:tobias.rau@theochem.uni-stuttgart.de)