

PROFIL

Stand: Januar 2018



SANDRO KOWOLLIK

Dr. rer. nat.

Chemie | Theoretische Chemie

Triona – Information und Technologie GmbH

Dekan-Laist-Str. 15a

55129 Mainz

Tel: +49 6131/5015380

Mail: projekte@triona.de

Web: www.triona.de

QUALIFIKATIONEN

Fachliche Schwerpunkte

- Softwareentwicklung mit JAVA SE / JEE
- Wissenschaftliches Programmieren mit Fortran 90/95

Technische Kompetenzen

Programmiersprache und -methoden, Technologien

- Fortran 90/95
- Bash Programmierung
- Java SE 8
- Java EE 7

Entwicklungsumgebungen

- Agile Methoden, insbesondere Pair Programming

Betriebssysteme

- Windows (XP, 7, 10)
- MAC OS Sierra
- Linux (openSUSE)

Sprachliche Kompetenzen

- Deutsch (Muttersprache)
- Englisch (fließend)

PROJEKTE

Entwicklung eines Programms zur Berechnung radioaktiver Eisenkomplexe

[Promotion] Das Programm ermöglicht es Eigenschaften bestimmter radioaktiver Isotope, im speziellen Eisenatome und -moleküle, zu berechnen.

Zeitraumen: September 2012 – August 2017

Technologien

- Fortran 90/95
- Bash Programmierung

Branche

- Forschung und Entwicklung

Werkzeuge

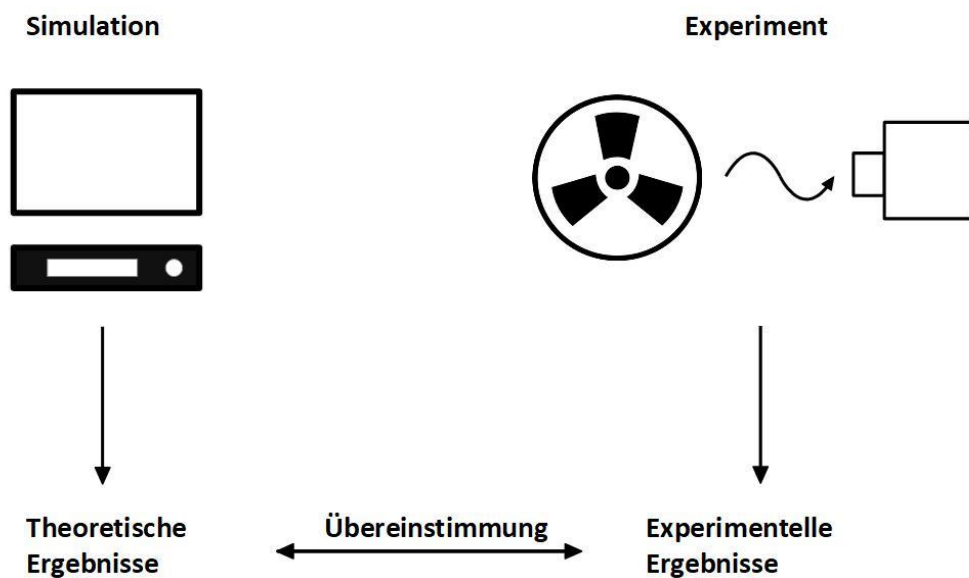
- Turbomole 4.x, Gaussian09 (Quantenchemische Programmpakete)
- Wolfram Mathematica
- LaTeX (TeXmaker)
- OpenOffice
- GIMP

Tätigkeiten

- Miterstellung des konzeptionellen Aufbaus des Programms
- Implementieren des Programms zur Berechnung der radioaktiven Atome, im speziellen Eisenatome
- Kalibrierung und Bewertung der Methode mit dem Ziel der höchstmöglichen Übereinstimmung theoretischer und experimenteller Daten

- Evaluierung und Verwaltung der berechneten Daten mit Hilfe eigens erstellter Programme (Fortran, Bash)
- Implementieren von Unittests zur Gewährleistung der korrekten Funktion
- Dokumentation der Implementierung
- Dokumentation der Ergebnisse durch LaTeX und Wolfram Mathematica
- Präsentation und Erstellen eines Manuals mit Hilfe von LaTeX, Open Office und GIMP

Projektskizze



Entwicklung eines Programms zur Berechnung rückstoßfreier Atome

[Diplomarbeit] Unter bestimmten Voraussetzungen können Atome Energie aufnehmen, ohne dabei einen Rückstoß zu erfahren. Man kann sich als vereinfachtes Beispiel den Rückstoß einer abgeschossenen Waffe vorstellen. Man wird einen deutlich spürbaren Rückstoß erfahren, wenn man die Waffe beim Abfeuern in der Hand hält. Im Gegensatz dazu wird ein Panzer, auf dem eine Waffe fest installiert ist, kaum einen Rückstoß erfahren.

Zeitraumen: November 2011 – August 2012

Technologien

- Fortran 90/95
- Bash Programmierung

Branche

- Forschung und Entwicklung

Werkzeuge

- Turbomole 4.x, Gaussian09 (Quantenchemische Programmpakete)
- Wolfram Mathematica
- LaTeX (TeXmaker)
- OpenOffice
- GIMP

Tätigkeiten

- Entwicklung des Programms zur Berechnung der Rückstoßfreiheit (Fortran 90/95)
- Evaluierung und Verwaltung der berechneten Daten mit Hilfe eigens erstellter Programme (Fortran 90/95, Bash)
- Qualitätssicherung durch Anwendung ausgewählter Testlisten
- Dokumentation der Implementierung
- Dokumentation der Ergebnisse durch LaTeX und Wolfram Mathematica

Verbesserte Darstellung von Atomen durch Implementieren einer Datentransformation zur Verbindung zweier chemischer Simulationsprogramme

[Forschungspraktikum] Durch die Transformation der Daten zweier Simulationsprogramme ließ sich der Output des einen Programms als Input des jeweils anderen nutzen. Auf diese Weise ließen sich die Vorteile der beiden Programme miteinander kombinieren und eine zeitlich verbesserte Darstellung von Atomen erreichen.

Zeitraumen: Mai – Oktober 2011

Technologien

- Fortran 90/95
- Bash Programmierung

Branche

- Forschung und Entwicklung

Werkzeuge

- Turbomole 4.x, Gaussian09 (Quantenchemische Programmpakete)
- LaTeX (TeXmaker)

Tätigkeiten

- Implementierung des Programms in das laufende System
- Durchführung von Qualitätssicherungsmaßnahmen (Testlisten)
- Dokumentation der Implementierung
- Dokumentation der Ergebnisse durch LaTeX und Wolfram Mathematica