



Per Zufall durchs Web

Möchten Sie einen zufälligen Bummel mit Molekülen machen? Die „Molecular Monte Carlo Home Page“, die vom Cooper Union Department of Chemistry unterstützt wird, soll all denen als internationale Informationsquelle dienen, die mithilfe stochastischer Methoden, d.h. auf Basis von Zufallszahlen und Wahrscheinlichkeitsstatistiken, Molekülsysteme untersuchen oder untersuchen möchten. Ganz allgemein lässt sich sagen, dass Monte-Carlo(MC)-Methoden komplexe chemische und physikalische Probleme der Untersuchung zugänglich machen, die sonst nur näherungsweise gelöst werden könnten oder fast nicht zu behandeln wären. MC-Rechnungen können im Wesentlichen

exakte Ergebnisse zu nahezu jedem Thema liefern, das im Zusammenhang mit Molekülberechnungen von Interesse ist; seien es thermisch gemittelte Strukturmerkmale atomarer oder molekularer Flüssigkeiten, Gibbs-Energien, Phasenumwandlungstemperaturen, Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten oder Ladungsverteilungen. Die MC-Methoden werden auf viele Arten eingesetzt; entsprechend findet man auf der Homepage neben dem „klassischen“ MC-Verfahren, bei dem aus einer Wahrscheinlichkeitsverteilung (z.B. einer Boltzmann-Verteilung) Proben gezogen werden, um thermodynamische Eigenschaften zu bestimmen, vier andere Arten von MC-Verfahren erwähnt, die besonders oft bei Molekülberechnungen auftreten. Ein Beispiel ist das Wegintegral-MC-Verfahren, mit dem Eigenschaften eines Quantensystems bei endlichen Temperaturen berechnet werden. In den „MC tutorials“, einer der von der Startseite aus zugänglichen Linksammlungen, findet man eine grobe Beschreibung dieser Methoden sowie Einführungen in beispielsweise „Random Walks“, Markov-Ketten, simuliertes Tempern und Zufallszahlengeneratoren. Darüber hinaus existieren Links zu Tagungen mit MC-Bezug, zu Literaturdatenbanken (wie dem Los-Alamos-E-Print-Archiv) und zu den Homepages von Zeitschriften, darunter dem *Journal of Chemical Physics*, in dem der Metropolis-Algo-

rithmus ursprünglich veröffentlicht worden war. Der direkte Zugang zu den Zeitschriften ist ein sehr nützliches Angebot, die Auswahl an Tagungen scheint mir dagegen recht willkürlich und mit (bisher) nur drei Einträgen auch sehr begrenzt zu sein. In Anbetracht der Vielfalt an Problemen, die mit MC-Methoden angegangen werden, möchte ich anregen, die Aufzählung um allgemeinere Tagungen zu Themen der Theoretischen Chemie (Biologie) und der statistischen Physik zu erweitern. Die Homepage bietet auch Links zu Online-Veröffentlichungen und zu Büchern. Doch ähnlich wie bei den Tagungen existieren nur wenige Eintragungen. Darüber hinaus sind die meisten Themen zu speziell, um allgemein zu interessieren. Insgesamt scheint mir diese Linksammlung daher nicht besonders nützlich zu sein.

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:
angewandte@wiley-vch.de

Die Stärke der Homepage liegt meiner Meinung nach in der Sammlung an Programmen und Rechenwerkzeugen wie der CCP5-Bibliothek über MC-Verfahren (Computer Simulation of Condensed Phases) und Moleküldynamikmethoden. Eine ausführliche Beschreibung der Quellcodes fehlt, aber die Links ermöglichen beispielsweise den direkten Zugang zu allen Quellcodes des Buches *Computer Simulation of Liquids* von Allen und Tildesley. Auch die Anordnung der Elemente auf der Seite und ihr Layout sind klar genug, um eine bestimmte Information einfach zu finden.

Alles in allem dürfte die „Molecular Monte Carlo Home Page“ vor allem für Neulinge auf dem Gebiet der MC-Methoden eine nützliche Quelle für einführende Artikel und auch eine gewisse praktische Hilfe sein.

Sabine Klapp
Technische Universität Berlin



Für weitere Informationen besuchen Sie:

<http://www.cooper.edu/engineering/chemechem/monte.html>
und
topper@cooper.edu