



## 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 Wegeintegral-MC-Verfahren, mit dem Eigenarten 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 Linkssammlung daher nicht besonders nützlich zu sein.

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:  
[angewandte@wiley-vch.de](mailto: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](mailto:topper@cooper.edu)

Welcome to the Molecular Monte Carlo Home Page!  
Last Update: March 6, 1998.

**Electronic Computational Chemistry Conference**  
April 2-6, 2000

**2000's participants are invited to the Molecular Monte Carlo Home Page of the Month of March/April 2001.**

This page, sponsored by the Cooper Union Department of Chemistry, is meant to serve as an educational resource for those who use "random walk" (stochastic method) to simulate and analyze molecular systems. This will link to important materials on Monte Carlo methods as well as software repositories and other information.

**Molecular Monte Carlo: What Is It?**

Although Monte Carlo methods are used in a dizzyingly diverse number of ways, in the context of molecular computation there are three types most commonly encountered:

- "classical" Monte Carlo, or CMC (samples are drawn from a probability distribution, often the classical Boltzmann distribution, to obtain thermodynamic properties, minimum energy structures and/or rate coefficients, or perhaps just to sample conformations as part of a global molecular search algorithm);
- "quantum" Monte Carlo, or QMC (random walks are used to compute quantum-mechanical energies and wavefunctions, often to solve electronic structure problems, using Schrödinger's equation as a fixed starting point);
- "path integral" quantum Monte Carlo, or PIMC (quantum statistical mechanical integrals are computed in classical thermodynamic properties, or via rate coefficients, using Feynman's path integral as a fixed starting point).

"relaxation" Monte Carlo, or VMC (random and quenched number generators are used to generate molecular structures and sample molecular phase space surfaces);

"simulation" Monte Carlo, or SMC (stochastic algorithms are used to generate initial conditions for quantumchemical trajectory simulations, or to actually simulate processes using random arguments to establish rate scales or by introducing stochastic effects into