

データベース・ソフトウェア

データベース

量子化学文献データベース (QCLDB II)

2016年で開発は終了しました。

- <http://qcldb2.ims.ac.jp/>

QCLDB は、1978年以降の化学、物理、計算科学などの主要な学術雑誌に掲載されたab

initio分子軌道計算の文献データベースです。データの内容は、文献の著者名や雑誌名、巻、号、年、分子の組成、計算方法、利用者の制限は特にありませんが、ログインする際のアカウントには、各個人のメールアドレスを使用しています。パスワード

Segmented Gaussian Basis Set (Sapporo基底関数)

- <http://sapporo.center.ims.ac.jp/sapporo/>

各種電子状態計算パッケージで直接使える形のガウス型基底関数を提供します。

力の定数に関するデータベース (FCDB)

2001年度で新規開発を停止しました。

- <http://fcdb.ims.ac.jp/indexj.html> (日本語版)
- <http://fcdb.ims.ac.jp/index.html> (英語版)

分子の重要な物理定数の一つである、力の定数に関する文献のデータベースです。分子分光学、分子力学の研究、特に振動ス

ソフトウェア

- 入力支援ツール Nano-Ignition

