

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 (QCLDBII)

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、基底関数や計算をおこなった物性の種類及び文献に関するコメント（キーワード）などからなっています。

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。パスワードは、初期登録の際に、登録メールアドレス先に送付されます。

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、特に振動スペクトルの解析には有用です。

ソフトウェア

- 入力支援ツール Nano-Ignition