

QCLDB: Quantum Chemistry Library Database

Francesca Bonini,* Laura Raimondi**

* CILEA, Segrate

** Università degli Studi di Milano, Dip. di Chimica Organica e Industriale

Abstract

Disponibilità del database QCLDB su Exemplar al CILEA.

Dal 1992 sulle macchine del CILEA è a disposizione il database QCLDB (Bollettino del CILEA, n. 36, Dicembre 1992), sviluppato dalla JAICI (*Japan Association for International Chemical Information*); attualmente è stata installata l'ultima versione (aggiornata al Dicembre 1997) sull'Exemplar 1200 (iclspp0.cilea.it).

Come dice il nome QCLDB (*Quantum Chemistry Literature Database*) è un database contenente informazioni su tutte le strutture molecolari calcolate con metodi ab initio, raccolte a partire dal 1978 e aggiornato annualmente.

Le citazioni contenute in questo database prendono in esame sia la teoria dei metodi ab initio sia la sua applicazione al calcolo di strutture elettroniche di sistemi atomici e molecolari. Vengono forniti anche dati che permettono una valutazione dell'attendibilità dei risultati presenti (quali il metodo utilizzato, la qualità del basis set, ...).

La ricerca bibliografica è particolarmente semplice e si svolge con modalità interattive; sempre interattivamente e durante la ricerca stessa è possibile ottenere informazioni sui vari comandi utilizzabili dall'utente.

E' disponibile in rete un manuale per la consultazione di QCLDB all'indirizzo:

<http://derioc1.organik.uni-erlangen.de/manuals/QCLDB/using-QCLDB.html>

L'utilità del database QCLDB è ovvia per chiunque sia interessato ad analizzare con accuratezza strutture elettroniche di atomi e/o

molecole con diverse metodologie ab initio. Gli utenti più probabili sono dunque i chimici ed i fisici, ma anche biologi e farmacologi.

Il database viene acquistato dal Dipartimento di Chimica Organica e Industriale dell'Università degli Studi di Milano, ed è a disposizione di tutti gli utenti del CILEA che ne facciano esplicitamente richiesta alla Dott.ssa Laura Raimondi, afferente a tale Dipartimento e raggiungibile tramite posta elettronica all'indirizzo:

laura@iumchz.chimorg.unimi.it.