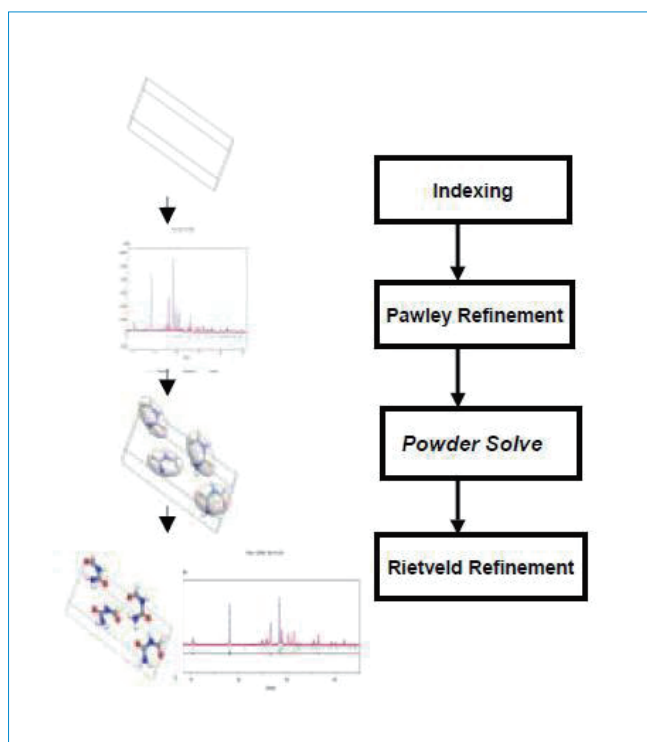


REFLEX PLUS

データシート

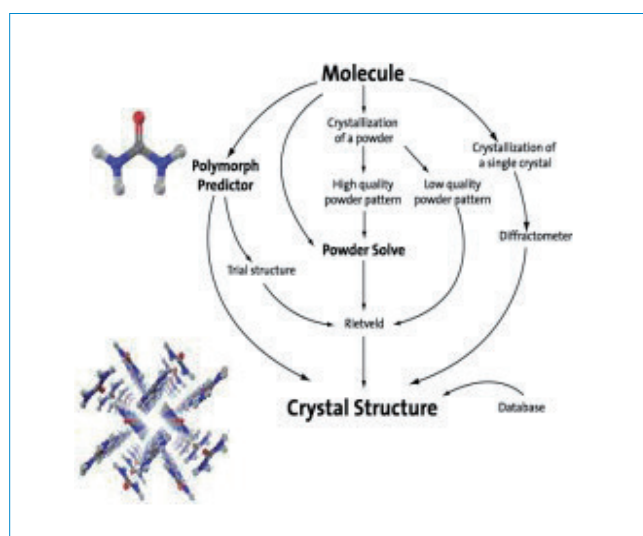
Reflex Plusは標準のReflexにPowder Solveテクノロジーをくわえた進歩版です。Reflex Plusは、粉末回折データから結晶構造を予測するための機能を完備したパッケージソフトです。

結晶構造の解明の最も理想的な方法は単結晶X線回折です。しかし必要な大きさの単結晶育成は難しいことが多く、時には不可能ですが、粉末試料は粉末回折による分析のために得



られることがあります。

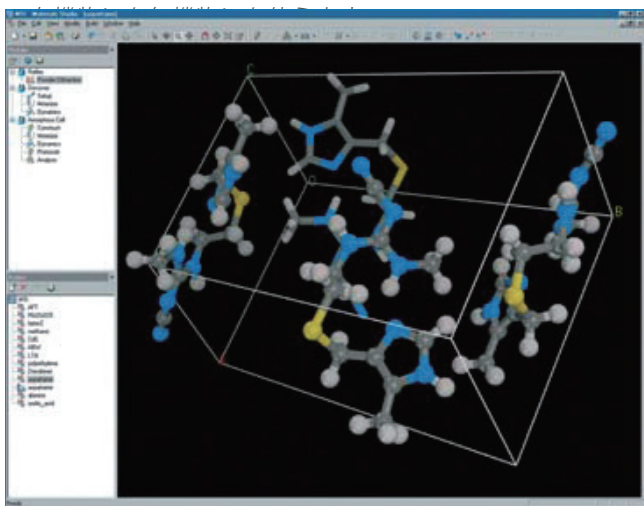
- Reflex Powder Indexingツールは、実験から得た粉末解析パターンから格子パラメータと結晶系を測定できるようにします。
- Reflex Powder Refinementモジュールで利用できる修正Pawley法は、格子パラメータ、ピーク形状とバックグラウンドパラメータの修正をし、indexingの結果を確かめ、可能性のある空間群のリストを減らす手助けをする便利なツールです。
- Powder Solveアルゴリズムは、単位セル内の分子フラグメントの配置とコンフォメーションを検索します。シミュレートされた構造の粉末解析パターンと実験データが一番近いものをランク付けします。
- 計算結果の最終的なリファインメントに、Rietveld法を使



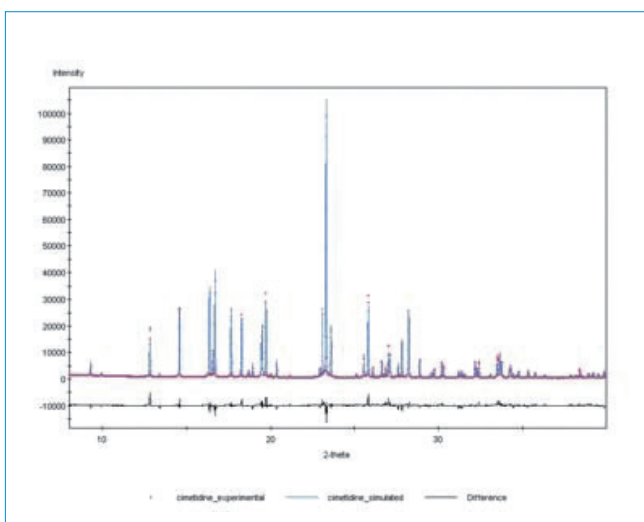
います。

機能

- Reflex PlusはIndexing、Pawleyリファインメント、Powder Solveは(構造解明)、Rietveldリファインメントをカバーする、構造決定のための完全パッケージです。
- Bruker、Stoe、Jade、PANalytical、JCAMP、GalacticSPC、GSASraw、ILLといった様々なファイルフォーマットを読み取ることができます。
- いろいろなマルチ周波数とユーザー設定の分極を持つX線源に対応できます。
- X線、中性子と電子回折に使えます。
- 標準と消滅則を考慮に入れた非標準の両方のどんな空間群にも対応できます。
- 自由度を任意に指定出来ます。
- Pawleyリファインメントからの最終パラメータは自動的に粉末解析に移されます。
- Close Contactペナルティー機能は化学的に原子間距離を考慮した解を計算します。
- それぞれの構造解析において自動ツールは適切な数のステップを見積もります。
- すべてのパラメータシミュレーションは自動設定です。
- モンテカルロ・シミュレーテッドアニーリングとモンテカルロ・パラレルテンパリングの二つのグローバルサーチアルゴリズムから選べます。
- 構造解明サーチ中、自動的にRietveld法を行います。
- 結果を分析するための幅広いツール
- Rietveld Refinementツールでさらに精密化されます。
- labデータからsynchrotronデータまで使えます。
- 溶媒和、塩と柔軟分子などの複雑な化合物にも有効さを証明されています。



粉末解明技術を用いた実験的な粉末回折パターンから決定されたシメチジンの構造



Refles Plusによって決定されたシメチジンの結晶構造についてシミュレーションパターンと実験的な粉末回折パターンの比較

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、**12**の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com（英語）、www.3ds.com/ja（日本語）をご参照ください。



3DEXPERIENCE®

©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTED, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および INETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、書面による許可の承認が必要です。