

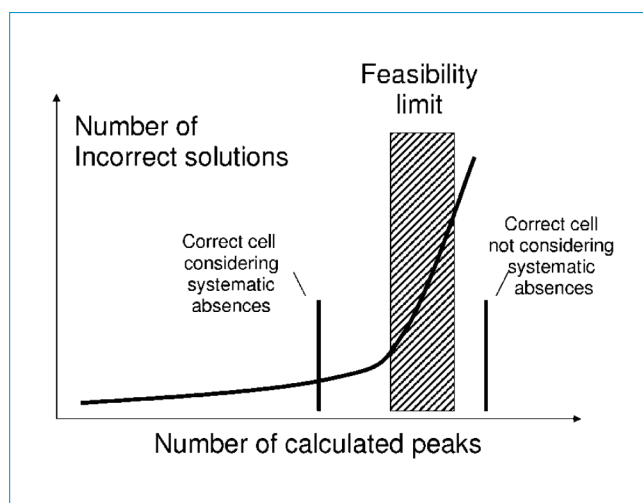
# X-CELL

## データシート

これまでのIndexingプログラムに不満の結晶解析研究者へ・・・革新的Indexingアルゴリズム。X-Cellは現実にかかる様々なIndexingの問題を考慮に入れることによって、従来Indexingできなかったユニットセルを検索することができるようになりました。不純物、配向性、ピークの重なりが強いデータに対してもIndexingが可能になり、今までIndexingできずに諦めていたデータへもX-CellでIndexingの適用が可能となります。

### X-CELLの機能：

- 可能性のあるユニットセルデータの全出力
- 消滅則を考慮に入れたサーチ
- 不純物によって発生するピークを考慮に入れたIndexing
- ゼロポイントシフトの同時計算
- 1D (Dominant Lattice)、2D (Plane)、と3D (Cell) に対してのIndexing



### 参考文献

M.A.Neumann, J. appl. Cryst. 36, 356 (2003).

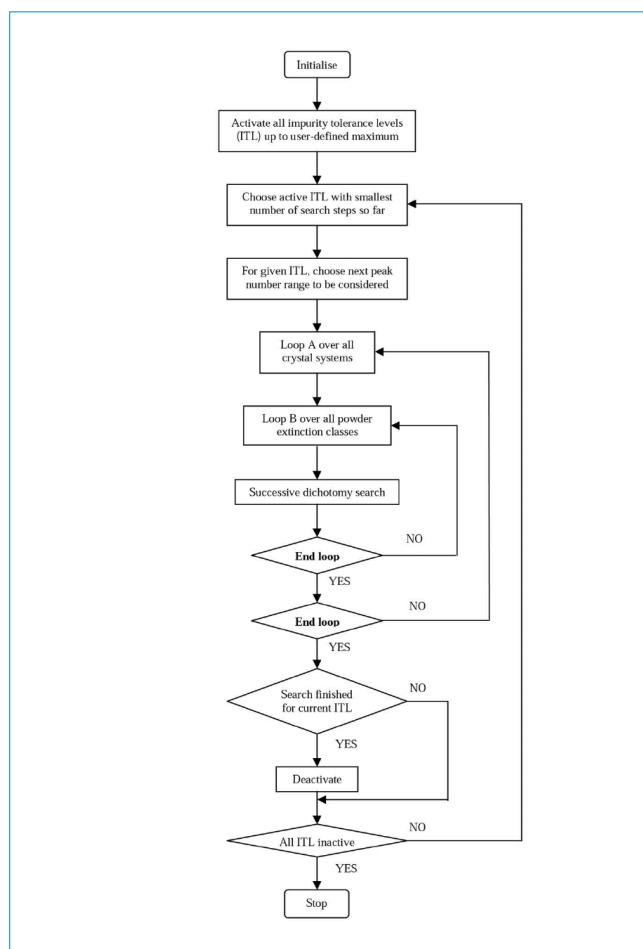
現在ある各Indexingアルゴリズム (ITO, TREOR, DICVOL) でセルが見つかった場合はYES、見つからなかった場合はNOで表示されています。

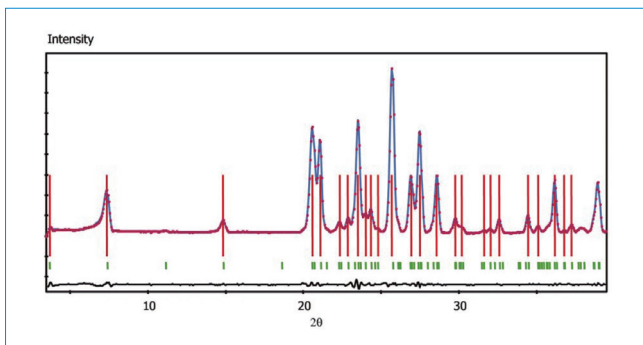
X-Cellから出力された結果の順位。1は、リストの中で最も高い評価を得た結果です。

	max rel.	FOM	rel. FOM	rank	obs/calc	s.g.	imp.	ITO	TREOR	DICVOL
<b>Good quality data</b>										
beta-L-glutamic-acid	9.30	9.30	1	24/32	P212121	0	YES	YES	YES	
fn31	29.68	29.68	1	25/29	P63m	0	NO	YES	NO	
fluorescein	8.21	7.85	2	23/38	Pna21	0	YES	NO	YES	
formylurea	18.92	18.92	1	26/31	Pna21	0	NO	YES	YES	
o-thymic acid	3.38	3.38	1	21/39	P21/c	0	NO	YES	YES	
Sodium-chloro-acetate	8.32	8.32	1	20/32	P21/c	0	YES	YES	YES	
piv-pro-gly-NHMe	6.92	6.92	1	25/36	P1	0	YES	YES	YES	
p-toluenesulphonyl-drazide	4.85	4.85	1	26/33	P21/c	0	NO	YES	YES	
3-chloro-trans-cinnamic acid	5.51	5.51	1	26/38	P21/c	0	YES	YES	YES	
1-methylfluorene	3.55	3.55	1	25/41	P21/c	0	NO	NO	NO	
<b>Good quality with impurities</b>										
p-methoxybenzoic acid	2.98	2.98	1	23/37	P21/c	1	YES	YES	NO	
tetrahydroisothiazophene	1.33	1.33	1	19/40	C2	1	NO	YES	YES	
alpha-L-glutamic-acid(*)	1.21	1.21	1	19/39	P212121	4	YES	NO	NO	
sk100	5.81	5.81	1	28/30	P-421m	1	NO	NO	NO	
<b>Preferred orientation</b>										
NPHJ	1.60	1.60	1	15/35	P21	0	NO	NO	NO	
GSK form I	2.75	2.75	1	23/47	P21/c	2	NO	NO	NO	
GSK form II	2.19	1.09	3473	23/65	P-1	1	NO	NO	NO	
GSK form III	2.78	2.50	9	28/67	P21/c	0	NO	NO	NO	
<b>Good peaks - strong overlap</b>										
aigh (alpha phase)**	1.10	0.36	519	18/41	P-1	3	NO	NO	NO	
indigo (alpha phase)	0.88	0.60	4	21/71	P21	0	NO	NO	NO	
octane	1.11	0.55	21	21/56	P-1	2	NO	NO	NO	
pentadecane	0.73	0.73	2	28/139	Pbcm	0	NO	NO	NO	
nonane	0.77	0.77	1	25/61	P-1	0	NO	NO	NO	
erythronycin	1.34	1.34	1	23/52	P212121	0	YES	NO	YES	

(\*) 3 days CPUtime  
(\*\*) 2 days CPUtime

上記の計算は、同じ設定で4つのIndexingアルゴリズムを比較した結果です。全てデフォルトに近い設定で計算してあります。GSK form IIとaigh (alpha phase)は、1Dと2DでのIndexingを合わせることによってIndexingが可能。





NonaneのPawley精密化の結果、長い縦線は計算されたピーク位置、短い縦線はIndexingで考慮されたピークをそれぞれ表す。

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](http://www.3ds.com)（英語）、[www.3ds.com/ja](http://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。