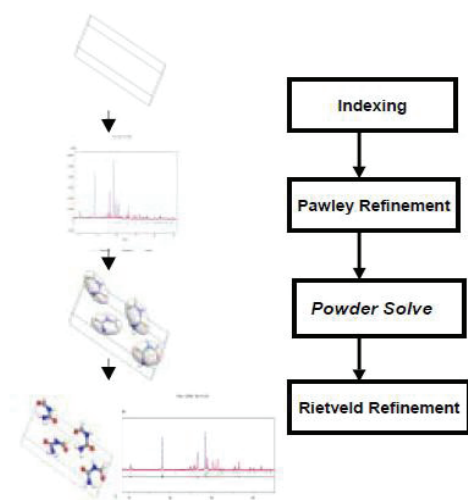


REFLEX PLUS

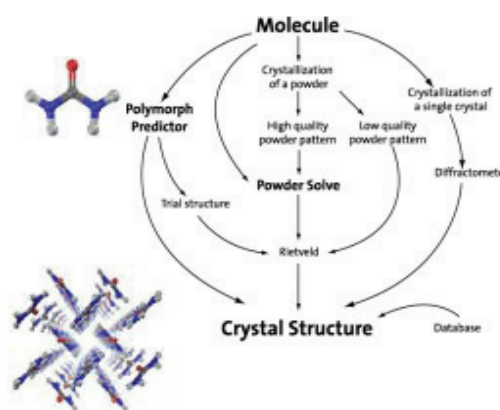
Reflex Plus は標準の Reflex に Powder Solve テクノロジーをくわえた進歩版です。Reflex Plus は、粉末回折データから結晶構造を予測するための機能を完備したパッケージソフトです。

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セル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、セルパラメータ、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。



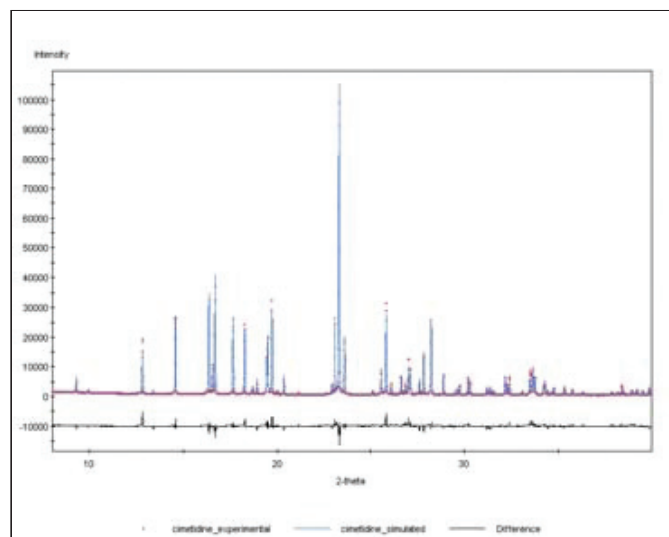
結晶構造解析の代表的ルート

機能

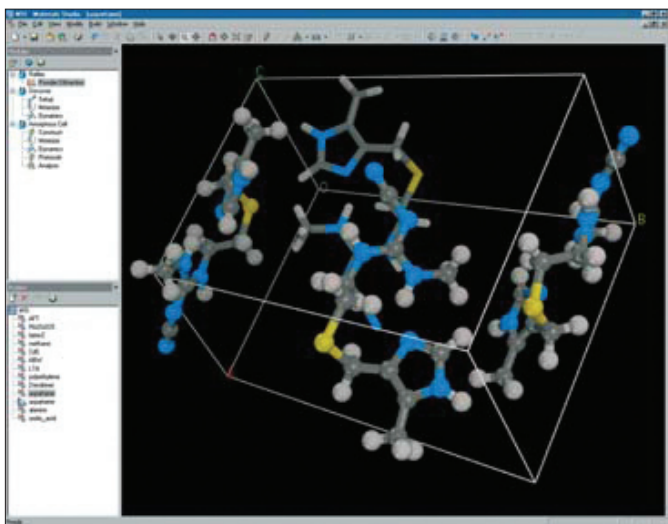
- Reflex Plus は Indexing、Pawley リファインメント、Powder Solve は(構造解明)、Rietveld リファインメントをカバーする、構造決定のための完全パッケージです。
- Bruker、Stoe、Jade、PANalytical、JCAMP、GalacticSPC、GSASraw、ILL といった様々なファイルフォーマットを読み取ることができます。

- 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。
- Freedom degree を任意に決定出来ます。
- Pawley リファインメントからの最終パラメーター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ー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・ララ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 Refinedment 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。
- 有機物にも無機物にも使えます。



Reflex Plus によって決定されたクリスタル構造をシミュレーションパターンとシメチジンの実験的粉末回折パターンの比較



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

Materials Studioに関する詳細については、下記URLを参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>