

# MS-X-CELL

これまでの Index 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 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

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/>

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。

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。

	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	0	YES	YES	YES
fin31	29.68	29.68	1	25/29	P63/m	0	0	NO	YES	NO
fluorescein	8.21	7.85	2	23/38	Pna21	0	0	YES	NO	YES
formylurea	18.92	18.92	1	26/31	Pna21	0	0	NO	YES	YES
o-thymotic acid	3.38	3.38	1	21/39	P21/c	0	0	NO	YES	YES
Sodium-chloro-acetate	8.32	8.32	1	20/32	P21/c	0	0	YES	YES	YES
piv-pro-gly-NHMe	6.92	6.92	1	25/36	P1	0	0	YES	YES	YES
p-toluenesulphonhydrazide	4.85	4.85	1	26/33	P21/c	0	0	NO	YES	YES
3-chloro-trans-cinnamic acid	5.51	5.51	1	26/38	P21/c	0	0	YES	YES	YES
1-methylfluorene	3.55	3.55	1	25/41	P21/c	0	0	NO	NO	NO
<b>Good quality with impurities</b>										
p-methoxybenzoic acid	2.98	2.98	1	23/37	P21/c	1	1	YES	YES	NO
tetrahexylsexithiophene	1.33	1.33	1	19/40	C2	1	1	NO	YES	YES
alpha-l-glutamic-acid(*)	1.21	1.21	1	19/39	P212121	4	4	YES	NO	NO
ak100	5.81	5.81	1	28/30	P-421m	1	1	NO	NO	NO
<b>Preferred orientation</b>										
NPHU	1.60	1.60	1	15/35	P21	0	0	NO	NO	NO
GSK form I	2.75	2.75	1	23/47	P21/c	2	2	NO	NO	NO
GSK form II	2.19	1.09	3473	23/65	P-1	1	1	NO	NO	NO
GSK form III	2.78	2.50	9	28/67	P21/c	0	0	NO	NO	NO
<b>Broad peaks - strong overlap</b>										
aigh (alpha phase) (**)	1.10	0.36	519	18/41	P-1	3	3	NO	NO	NO
indigo (alpha phase)	0.88	0.60	4	21/71	P21	0	0	NO	NO	NO
octane	1.11	0.55	21	21/56	P-1	2	2	NO	NO	NO
pentadecane	0.73	0.73	2	25/139	Pbcm	0	0	NO	NO	NO
nonane	0.77	0.77	1	25/61	P-1	0	0	NO	NO	NO
erythromycin	1.34	1.34	1	23/52	P212121	0	0	YES	NO	YES

(\*) 3 days CPU time  
(\*) 2 days CPU time

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 for 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。