



Installation de Olex2 / NoSpherA2

1. Télécharger et installer la dernière version disponible d'**Olex2** selon la configuration de l'ordinateur:

<https://www.olexsys.org/olex2/docs/getting-started/installing-olex2/>

Remarques

- Pour les utilisateurs Mac, **Olex2** doit être lancé à l'invite de commande du terminal. Le plus simple est de créer un alias dans un fichier de type '.profile'.
Par ex. insérer dans le fichier .zprofile la ligne :
`alias olex2='open /Applications/Cristallographie/olex2.app'`.
Il suffit ensuite d'ouvrir une fenêtre terminal et de taper `olex2`.
- Sous Windows, exécuter le programme **olex2-installer.exe** et suivre les instructions d'installation (installer le programme par exemple dans le répertoire `d:\progs\olex2`).

2. Télécharger les exécutables Shelx (au moins **shelxt**, **shelxs** et **shelxl**) :

- Inscription (gratuite): <https://shelx.uni-goettingen.de/register.php>
- Téléchargement : <https://shelx.uni-goettingen.de/download.php>
- Pour PC Windows : installer les programmes directement dans le répertoire d'**Olex2** (ex: `d:\progs\olex2`)
- Pour Mac configurer le PATH pour pointer vers le répertoire d'installation de ces exécutables. Par exemple insérer dans le fichier .zshrc la ligne :
`export PATH=/Applications/Cristallographie/shelx:$PATH`

3. Télécharger **ORCA** après inscription (gratuite)

https://www.orcasoftware.de/tutorials_orca/first_steps/install.html

4. Assigner les variables système et les PATH pour lier **ORCA** à **Olex2**

https://www.orcasoftware.de/tutorials_orca/first_steps/trouble_install.html#path-variable

5. Pour les utilisateurs de multiprocesseurs télécharger **MPI**

- Pour Mac : <https://www.open-mpi.org/software/ompi/v4.1/>
Décompresser et extraire le fichier `xxx.tar.gz` et suivre la procédure d'installation dans le fichier **INSTALL** créé
- Pour PC Windows : <https://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=100593>
Modifier le PATH dans les variables d'environnement en rajoutant le chemin de **MPI** dans la variable système PATH. (Ex. `c:\Program Files\Microsoft\MPI\bin`).

Remarques importantes :

1. dans la mesure du possible testez les programmes au fur et à mesure des installations
Sur une structure exemple, lancer **olex2**, cliquer sur l'onglet *WORK* puis sur la flèche à côté de l'onglet *REFINE*. Choisir le programme *olex2.refine*, cocher la case *NoSpherA2* puis *update table*. Si tout est OK, **ORCA** devrait apparaître dans l'onglet '*Please select source of .tsc*'
2. dans la mesure du possible ne garder que la version la plus récente de chaque programme installé et vérifier que les chemins (PATH) d'accès correspondent.
3. pour un bon déroulement des sessions pratiques, il est vivement recommandé de tester le bon fonctionnement des différents programmes installés
4. n'hésitez pas à contacter les organisateurs de l'ANF pour les problèmes liés à l'installation des logiciels ci-dessus :
 - Installation pour MacOS : michel.giorgi@univ-amu.fr
 - Installation sous Windows : thierry.roisnel@univ-rennes.fr