

RUN_SHELXL

(T.R/CDIFX-SCR Rennes/2009-2015)

run_shelxl est un petit programme développé spécifiquement pour lancer l'application **SHELXL** à partir de l'interface graphique **WinGX**. La définition de cette application **SHELXL** peut s'effectuer dans **WinGX** à partir de l'option **File / System / User menu items** et le menu **Refine** par exemple, en définissant les paramètres suivants :

```
Menu tag           = SHELXL
FullPath of executable = c:\progs\run_shelxl
command line argument = arg
```

avec **arg** pouvant prendre les valeurs regroupées dans le tableau suivant :

huge	shelxlfh.exe	: version huge compilée avec Lahey Fortran
32	shelxl_if32.exe	: version 32bits compilée avec Intel Fortran
32m	shelxl_if32m.exe	: version 32bits multiprocesseur compilée avec Intel Fortran
64m	shelxl_if64m.exe	: version 64bits multiprocesseur compilée avec Intel Fortran
gs	shelxh.exe	: version fournie par G. Sheldrick
lf	shelxlf.exe	: version compilée avec Lahey Fortran

ou bien spécifiant directement le nom du programme **SHELXL** à exécuter.

Il faut ensuite sortir du programme **WinGX** et relancer cette application pour voir apparaître l'item **SHELXL** dans le menu **Refine**. A l'exécution du programme **run_shelx**, les différentes étapes suivantes sont effectuées :

1. recherche du *jobname* en cours
2. recherche si le **fichier.hkl** correspondant est présent dans le répertoire. Si ce n'est pas le cas, **run_shelx** propose de choisir le **fichier.HKL** associé au *jobname* parmi la liste de tous les **fichiers.hkl** présents dans le répertoire de travail.
3. lancement du programme **shelxl** défini par l'utilisateur
4. recopie du fichier **jobname.lst** (résultats du calcul) en **shelxl.lst** pour être ensuite directement lisible avec l'option **Refine / Open SHELXL.lst**

run_shelxl est téléchargeable à l'adresse suivante :

http://www.cdifx.univ-rennes1.fr/progs/run_shelxl.exe