

Esquema de Trabajo en el Análisis Estructural

inversión de carga (*p.e.*, SHELXT)
métodos directos (*p.e.*, SIR-92)
Patterson (*p.e.*, SHELXS)

SXGRAPH

nombre.INS

nombre.HKL

nombre.RES

refino
SHELXL

nombre.CIF
nombre.FCF

nombre.LST
o
SHELXL.LST

tablas, etc.

“validación”
(comprobación
automático)
p.e., CheckCIF