

1º passo: Instalação do jEdit

- Baixar o pacote do site do John Evans. Siga exatamente, e com calma, o roteiro descrito em:

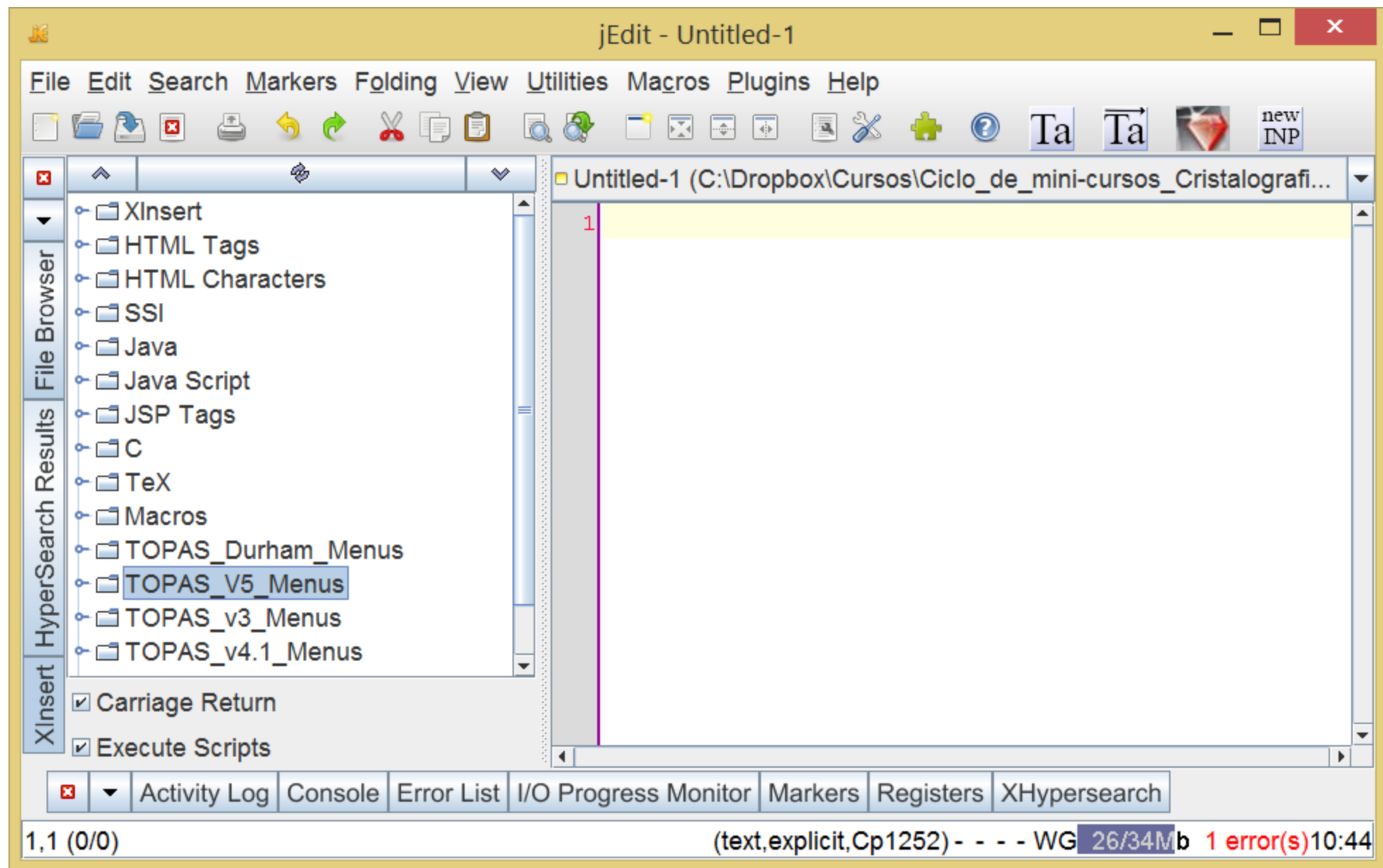
http://community.dur.ac.uk/john.evans/topas_academic/jedit_setup.htm

Note que será necessário ter o Java em seu computador.

Ao terminar a instalação o jEdit estará pronto para ser usado com o Topas Academic versão 5. Para o Topas-Bruker, depois da instalação, vá para

http://community.dur.ac.uk/john.evans/topas_academic/jedit_update.htm e instale o update para que o jEdit funcione com o Topas.

jEdit v4.3



- TOPAS_V5_Menus
 - Help
 - Examples
 - Top level
 - GOF details**
 - chi2_convergence_criteria
 - conserve_memory
 - continue_after_convergence
 - do_errors
 - iters 100000
 - no_LIMIT_warnings
 - process_times
 - randomize_on_errors
 - seed
 - verbose
 - approximate_A
 - Bootstrap error determination
 - Output

- Scan file level
 - File name(s)
 - GOF details
 - Emission profile(s)
 - Background
 - Chubychev
 - 1 / X
 - Instrument / Sample
 - Diffractometer radius
 - Tube_Tails
 - Linear Position Sensitive Detector
 - Axial divergence
 - Full_Axial_Model
 - Finger_et_al
 - Simple_Axial_Model
 - Capillary sample
 - Instrument, flat sample, point detector
 - Slit_Width
 - Equatorial divergence
 - Variable divergence
 - Corrections
 - Zero_Error
 - Specimen_Displacement (mm)
 - Specimen_Tilt
 - Cylindrical_2Th_Correction
 - Cylindrical_1_Correction
 - Lorentz-Polarisation
 - Surface_Roughness_Pitschke_et_al
 - Surface_Roughness_Suortti
 - Absorption (1/cm)
 - Absorption_With_Sample_Thickness_mm_Shape
 - Absorption_With_Sample_Thickness_mm_Shape_Intensity
 - Mixture details
 - Mixture Mass Absorption Coeff.
 - Mixture Density (g/cm^3)
 - Mixture Linear Absorption Coeff. (1/cm)
 - Miscellaneous
 - Output
 - File type options

- TOPAS_V5_Menus
 - Help
 - Examples
 - Top level
 - Scan file level
 - Phase level - Structure**
 - Insert CIFs in INP format
 - str...
 - phase_name
 - space_group
 - scale
 - r_bragg
 - CS_L
 - CS_G
 - Strain_L
 - Strain_G
 - view_structure
 - Peak type
 - Lattice parameters
 - Sites...
 - Preferred orientation
 - Crystal details
 - Quantitative
 - Output
 - Fourier Maps
 - Cloud
 - Phase Penalties
 - Rigid bodies
 - peak_buffer_step

- Strain_G
 - view_structure
 - Peak type
 - PV_Peak_Type
 - TCHZ_Peak_Type
 - PVII_Peak_Type
 - Lattice parameters
 - Sites...
 - Preferred orientation
 - PO-March Dollase - 1 Dir
 - PO-March Dollase - 2 Dirs
 - PO_Spherical_Harmonics

Clique duplo na linha de cada seta, na sequência mostrada. Edite os valores conforme o seu caso.

2 0 0 1

1- Clique para salvar e dizer ao Topas que esse arquivo é que será usado nos refinamentos.

Ao salvar use o nome [y2o3_jEdit_01.inp](#)

2. Clique para abrir o Topas

The screenshot shows the JEdit interface with a file browser on the left and a text editor on the right. The text editor contains the following content:

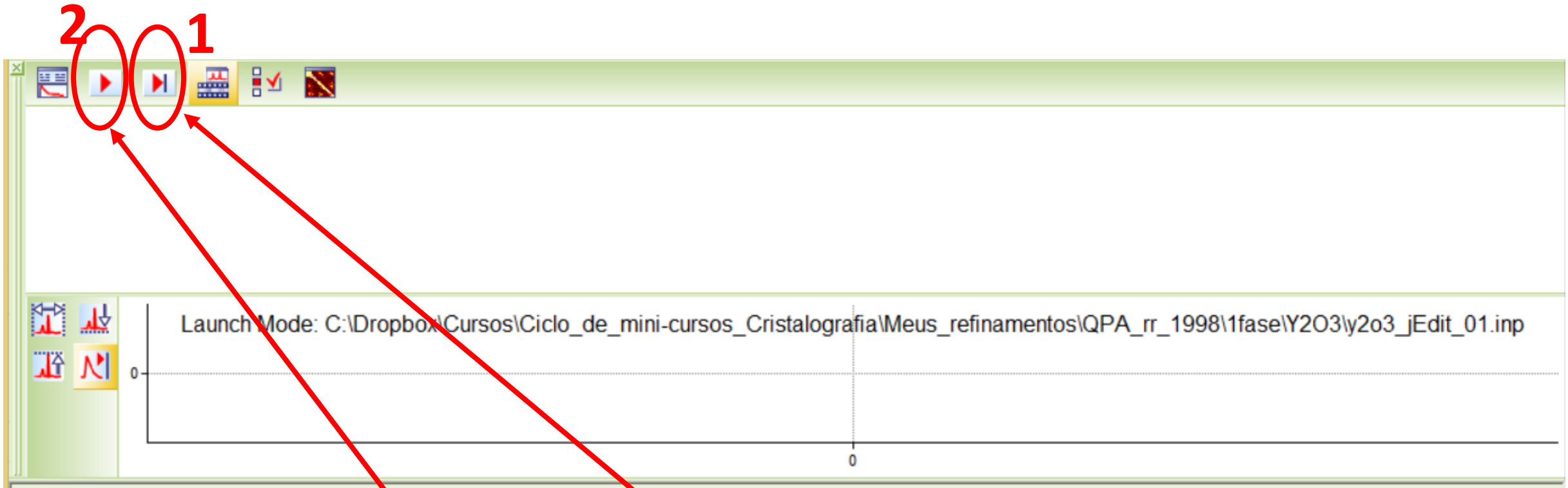
```

5  r_wp 0 r_exp 0 r_p 0 r_wp_dash 0 r_p_dash 0 r_exp_dash 0 weighted_Durbin_Watson 0 gof 0
6  lam
7  ymin_on_ymax 0.0001
8  la 0.0159 lo 1.534753 lh 3.6854
9  la 0.5791 lo 1.540596 lh 0.437
10 la 0.0762 lo 1.541058 lh 0.6
11 la 0.2417 lo 1.54441 lh 0.52
12 la 0.0871 lo 1.544721 lh 0.62
13
14 bkg @ 0 0 0 * add/remove coefficients as required
15 Radius(225)
16 Full_Axial_Model(12, 15, 12, 5, 5)
17 Slit_Width(.3)
18 Divergence(1)
19 Specimen_Displacement(@, 0)
20 LP_Factor(26.7)
21 str
22 phase_name Y203
23 scale @ 0.0001
24 r_bragg 0
25 CS_L(@, 300)
26 CS_G(@, 300)
27 a 10.6056
28 b 10.6056
29 c 10.6056
30 a1 90
31 be 90
32 ga 90
33 volume 1192.9
34 space_group "Ia-3"
35 site Y1 x 0.96742 y 0. z 0.25 occ Y+3 1.
36 site Y2 x 0.25 y 0.25 z 0.25 occ Y+3 1.
37 site O1 x 0.39072 y 0.15190 z 0.38016 occ O-2 1.

```

The file browser on the left shows a tree structure with folders like Examples, Top level, Scan file level, and Phase level - Structure. The Phase level - Structure folder is expanded, showing sub-folders like Insert CIFs in INP format, str..., phase_name, space_group, scale, r_bragg, CS_L, CS_G, Strain_L, Strain_G, view_structure, Peak type, Lattice parameters, Sites..., Preferred orientation, Crystal details, Quantitative, Output, Fourier Maps, Cloud, Phase Penalties, Rigid bodies, and peak_buffer_step.

Na interface, clique em [F2] para fechar a janela dos parâmetros e vai ficar como abaixo, onde poderá ver que o Topas irá usar o arquivo que acabamos de criar.



Clique em 1 para ir passo a passo

Ou

Clique em 2 para que o refinamento vá até a convergência

O jEdit possui outros recursos que serão vistos em aula.

Alguns exemplos.

- Para selecionar uma área, clique em *<CTRL + shift>*, clique e arraste o mouse para selecionar o que deseja.
- Para comentar uma região. Selecione e faça *<ctrl> + c* e (ou seja, com a tecla **<CTRL>** pressionada tecle **E** e depois **C**).
- Use “ ‘ ” antes de um texto que deseja que seja usado como comentário. Ex:
' esse é um comentário

O Topas irá entender que essas linhas ou regiões são comentários e não irá usá-las nos refinamentos. Ao salvar o novo INP todos os comentários estarão de volta.