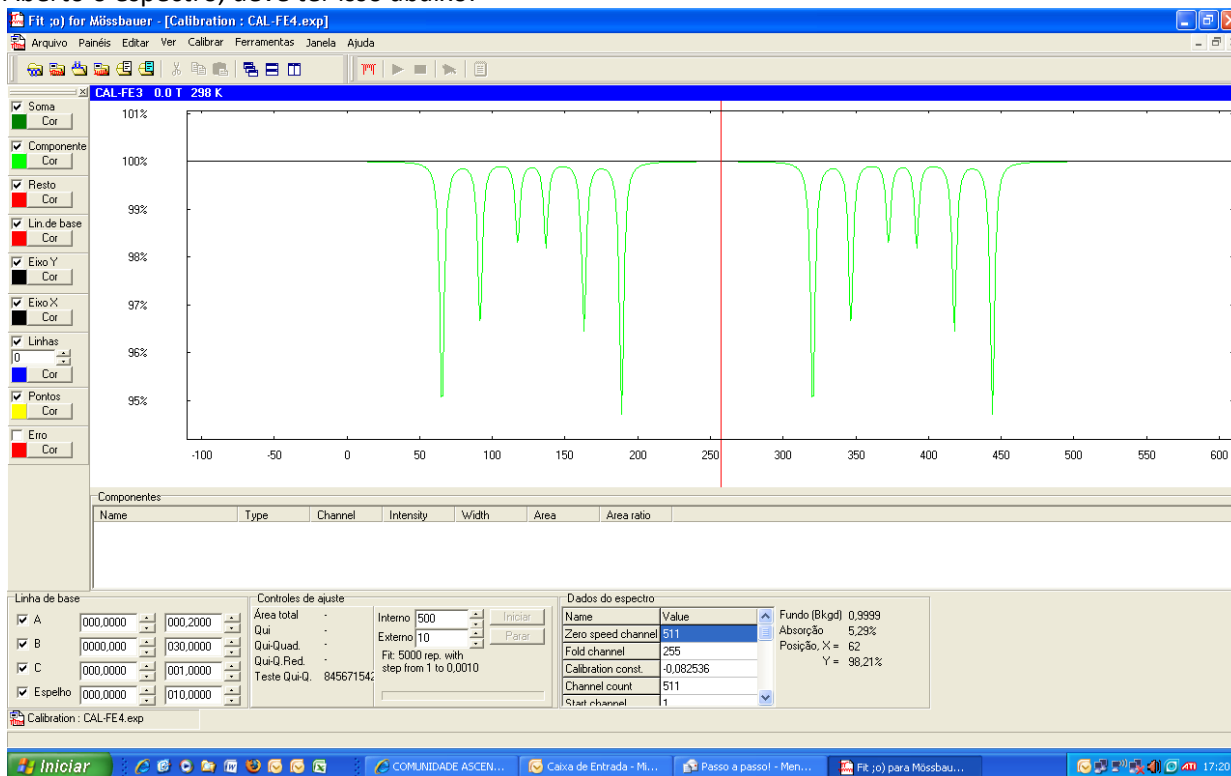
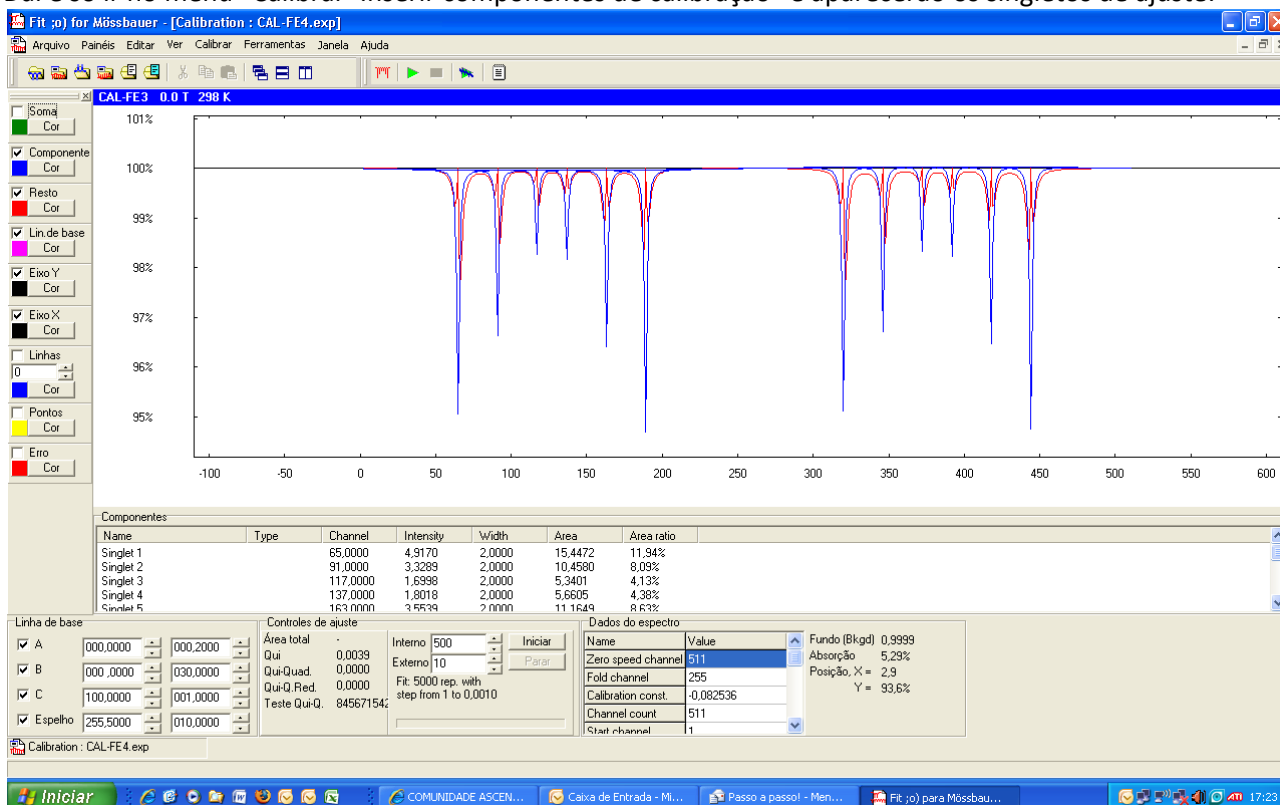


Passo a passo no Fit;o)
 Vou tentar fazer um passo-a-passo:
 Aberto o espectro, deve ter isso abaixo:

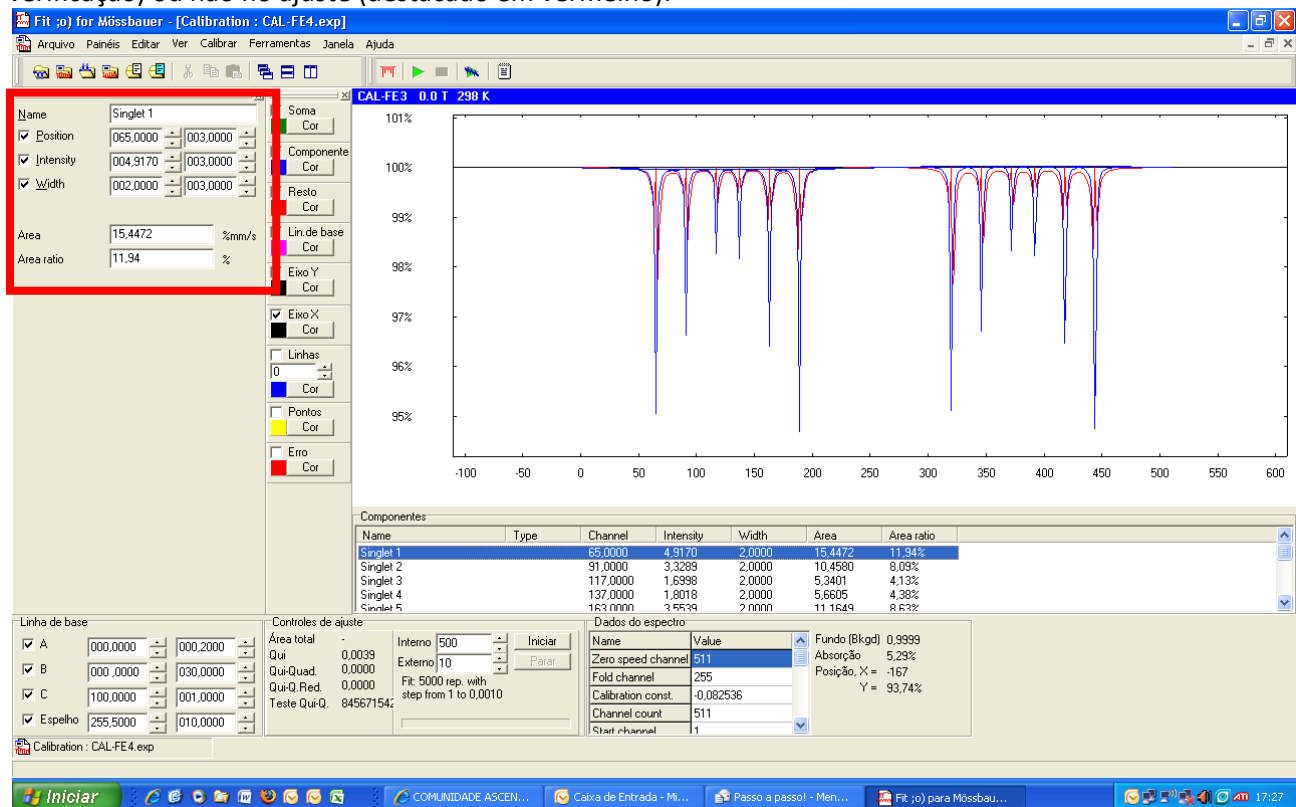


Daí é só ir no menu “Calibrar>Inserir componentes de calibração” e aparecerão os singletos de ajuste:



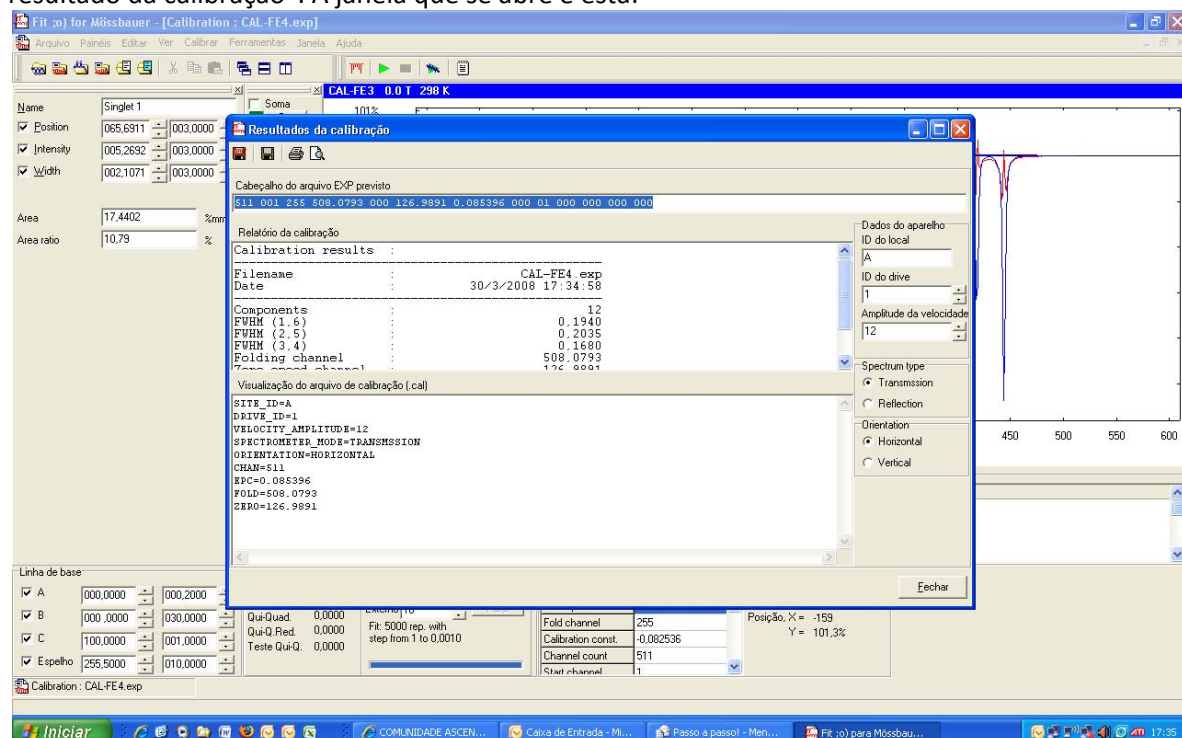
Na captura acima eu deixei visível apenas os componente, o resto e alinha de base. Também alterei a cor (é só clicar em Cor) para a visualização ficar mais fácil. Daí fazemos o seguinte: na lista dos componentes abaixo

do gráfico, selecione um deles e aparecerá o conjunto de controles para liberar (marcado na caixa de verificação) ou não no ajuste (destacado em vermelho):

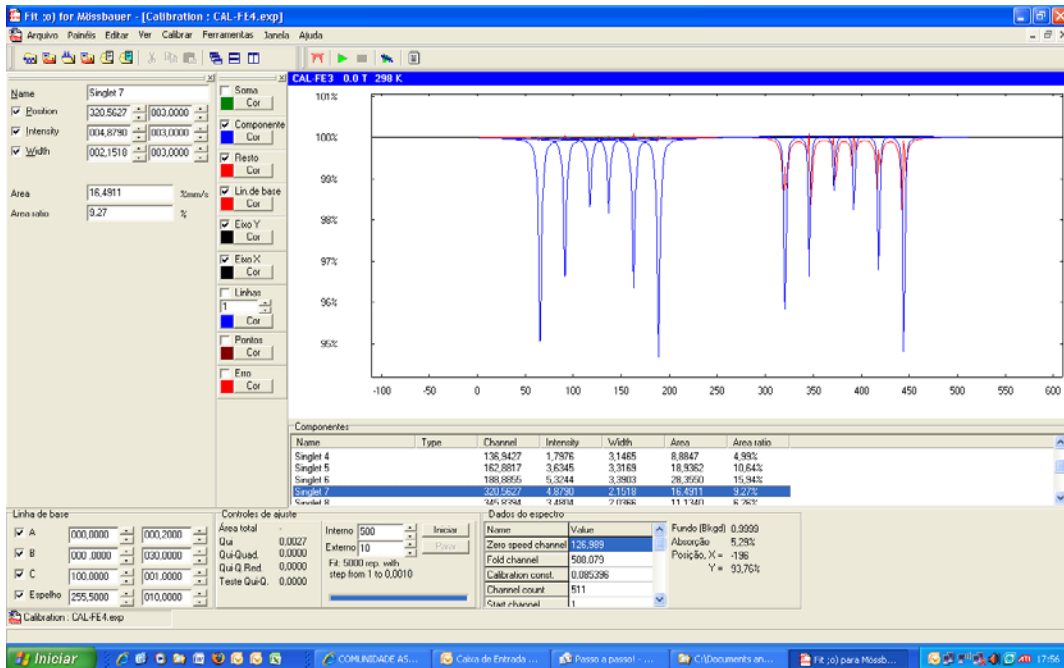


Depois de fixada (ou liberada) a variação, é só apertar o botão “Iniciar” na caixa “Controles de ajuste” que fica abaixo da lista de componentes e o ajuste será feito aos poucos. Observe que existe o Teste Qui-Quadrado que nos diz se o resultado está de acordo.

Uma vez que o qui-quadrado não varia mais, abra o resultado da calibração em “Ferramentas>Mostrar resultado da calibração”. A janela que se abre é esta:



Se quiser melhorar o ajuste de calibração, copie o “Cabeçalho do arquivo EXP previsto” e substitua o do arquivo de calibração e refaça o processo. Eu costumo fazer aqui o ajuste manual de cada singleto. Seleciono um a um e vou alterando posição, intensidade e largura “na mão” até que a curva de resto fique acima da linha de base. O processo é fácil: basta selecionar, por exemplo, o singleto 1. Daí você seleciona um número, por exemplo, se quiser ajustar a largura do singleto, selecione um número da largura, recomendo o primeiro ou segundo algarismo decimal, e mude o seu valor apertando no teclado as setas para cima ou para baixo. O resultado fica assim:

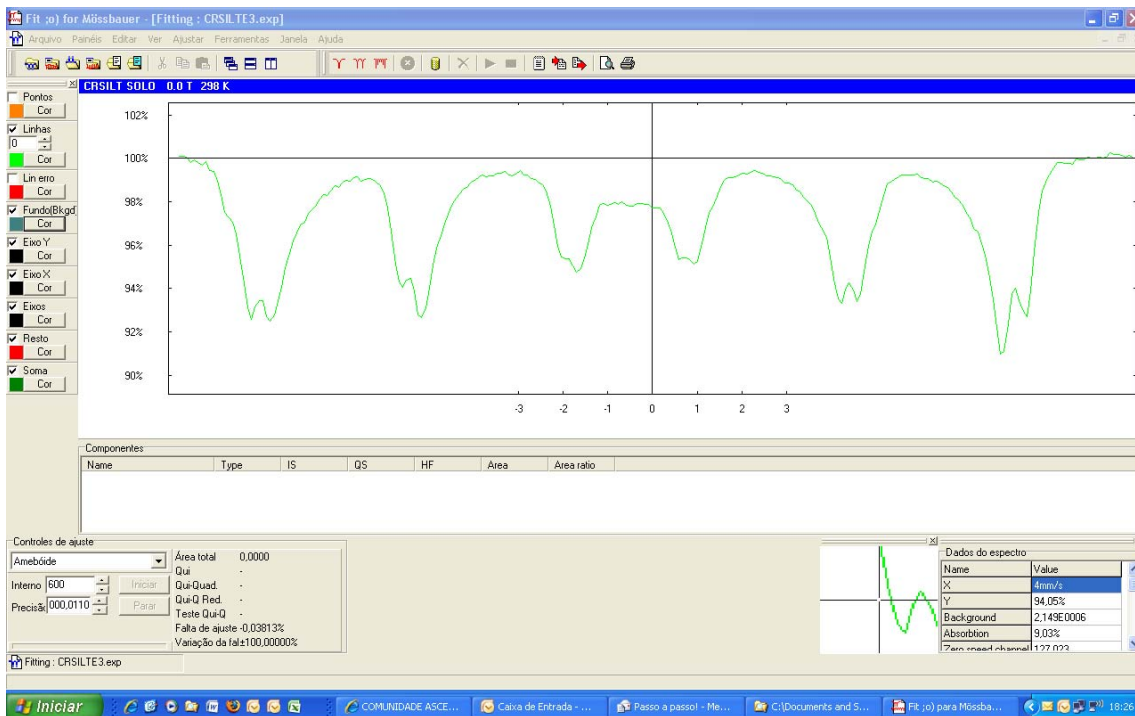


Uma vez que a calibração está completa, podemos usar os dados do cabeçalho para colocar no EXP do arquivo de espectro mössbauer de qualquer amostra:

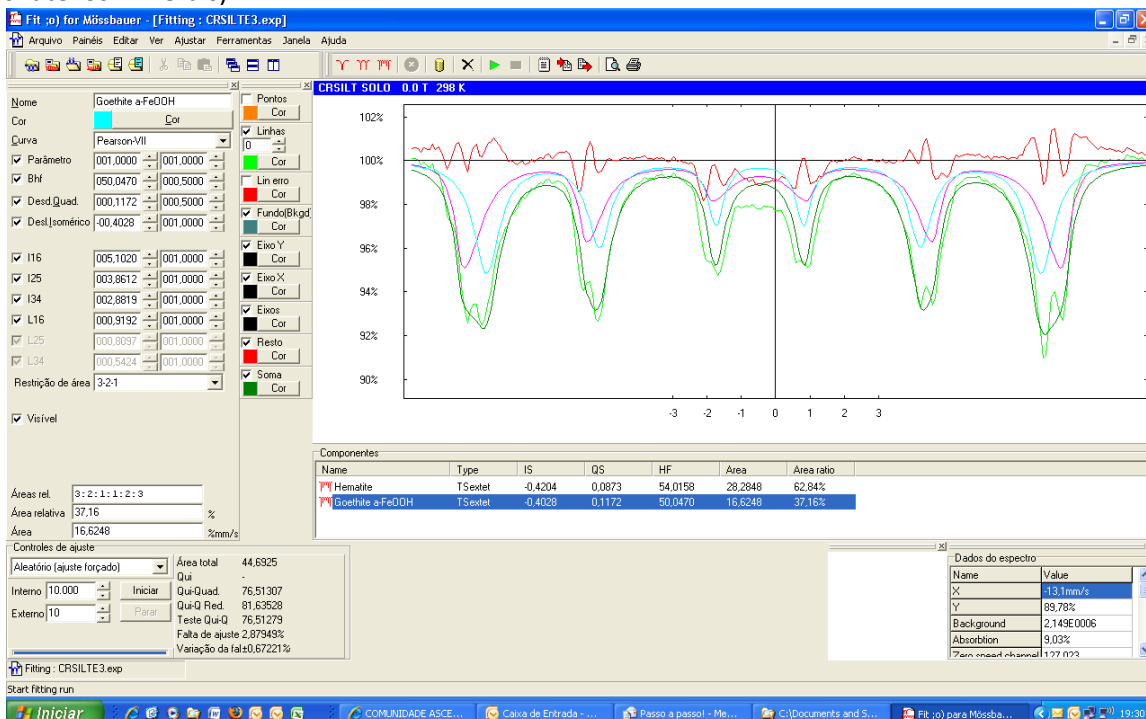
```

CRSILTE3.exp - Bloco de notas
Arquivo Editar Formatar Exibir Ajuda
| CRSILT SOLO 0.0 T 298 K
511 001 255 507.9988 000 127.0235 0.084410 000 01 000 000 000 000
1.076785
1.075642
1.077288
1.075951
1.073096
1.075135
1.072962
1.073983
1.075853
1.072303
1.072976
1.070923
1.072231
1.072110
1.070675
1.069628
1.068045
1.064138
1.057526
1.043547
1.022143
1.020037
1.011101
995595
971675
961439
964138
975004
987526
1.002793
1.013168
1.021583
1.027925
1.030165
1.033687
1.036889
    
```

Abrindo no Fit, temos:



Vá em "Ajustar>Inserir mineral" para escolher os minerais que você desconfia que existem no espectro. Pode-se também inserir sextetos e dupletos sem relacionar a um mineral específico. NO caso desse exemplo, supus a existência de dois sextetos. Daí clique em "Iniciar" nos controles de ajuste para um ajuste automático. Uma forma mais racional é desmarcar a variação dos parâmetros e ir soltando-os aos poucos, assim como se faz no Normos. Meu exemplo ficou assim (falta ajustar melhor, usei um espectro qualquer e chutei os minerais):



Espero ter ajudado!

Um abraço!
 Renato.