INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Índice z, ferramenta para a garantia da qualidade de resultados analíticos em
análise por ativação neutrônica**

GEAN BATISTA DE LIMA

**Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área
de Tecnologia Nuclear - Aplicações**

Orientador:
Prof. Dr. Edson Gonçalves Moreira

São Paulo
2021

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Índice z, ferramenta para a garantia da qualidade de resultados
analíticos em análise por ativação neutrônica**

Versão corrigida
Versão original disponível no IPEN

GEAN BATISTA DE LIMA

Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do Grau
de Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Aplicações

Orientador:
Prof. Dr. Edson Gonçalves Moreira

São Paulo

2021

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte

Como citar:

LIMA, Gean B. ***Índice z, ferramenta para a garantia da qualidade de resultados analíticos em análise por ativação neutrônica***. 2021. 131 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN – CNEN/SP. São Paulo. Disponível em: (data de consulta no formato: dd/mm/aaaa)

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de geração automática da Biblioteca IPEN/USP,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Lima, Gean Batista de
Índice z, ferramenta para a garantia da qualidade de
resultados analíticos em análise por ativação neutrônica /
Gean Batista de Lima; orientador Edson Gonçalves Moreira. -
-São Paulo, 2021.
131 p.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em
Tecnologia Nuclear (Aplicações) -- Instituto de Pesquisas
Energéticas e Nucleares, São Paulo, 2021.

1. Índice z. 2. análise por ativação neutrônica. 3. NAA 4.
material de referência certificado. 5. MRC. I. Gonçalves
Moreira, Edson, orient. II. Título.

DEDICATÓRIA

Dedico esse trabalho à minha família e amigos, a começar pelas minhas irmãs, Luciene, Ivaneide e Geciane. Ao meu irmão Geovane. Ao meu pai Lucindo. À minha mãe Marlene, minha grande incentivadora desde criança.

À minha esposa Ana Paula e às minhas filhas Helena e Beatriz, que me ensinaram quão relativo é o tempo; um dia longe parece um ano e um dia perto parece um minuto.

Aos meus amigos, Thiago Kaiser e Fernando Alves, por compartilharem desde o início o sonho de se tornar Mestre, que agora se conclui.

AGRADECIMENTOS

Muitas pessoas, de forma direta ou indireta, contribuíram para a realização deste trabalho e a todas elas quero expressar meu reconhecimento e gratidão. Agradeço em especial,

Ao Dr. Edson, por toda orientação, dedicação, companheirismo, amizade e cuidado comigo na caminhada para finalização deste trabalho. Muito obrigado por orientar esse garoto de Rondônia, sem experiência.

Ao amigo, colaborador e incentivador, M. Sc. Thiago Kaiser, pelas ideias e contribuição para o desenvolvimento do sistema utilizado para a realização de cálculos.

Ao amigo M. Sc. Fernando Alves pelo incentivo, colaboração e parceria por toda a vida, incluído o período do mestrado.

À minha esposa Ana Paula, pelo apoio nos momentos de dificuldade, pela cobrança no cumprimento das metas e pela compreensão nos momentos de ausência.

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Rondônia, por todo apoio para execução desse trabalho.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN – CNEN/SP) e à Universidade de São Paulo (USP) pela oportunidade concedida para a execução desse trabalho.

Não sabendo que era impossível, foi lá e fez.
(Jean Cocteau)

RESUMO

LIMA, Gean Batista de. ***Índice z, ferramenta para a garantia da qualidade de resultados analíticos em análise por ativação neutrônica***. 2020. 131 p.

Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN – CNEN/SP. São Paulo.

Com a difusão da norma ABNT NBR ISO/IEC 17025, a necessidade de implantação de sistemas de gestão da qualidade em laboratórios químicos tornou-se indispensável. Diante disso, a utilização de materiais de referência certificados (MRC) e materiais de referência (MR) se tornou fundamental na validação de métodos, controle de resultados analíticos e demonstração da cadeia de rastreabilidade metrológica. No entanto, uma questão importante é como um laboratório analítico deve utilizar os resultados de medição que produz a partir dos MRC. MRC são fundamentais para se avaliar a veracidade de métodos analíticos, porém a veracidade não é uma grandeza e, portanto, não pode ser expressa numericamente. O erro relativo porcentual, o índice z e o erro normalizado são algumas formas de quantificar a veracidade. Neste estudo, foi definido como material de partida as dissertações de mestrado e teses de doutorado desenvolvidas no Laboratório de Análise por Ativação (LAN) do IPEN – CNEN/SP, no período de 2006 a 2019. Nesse período, os pesquisadores do LAN orientaram 53 dissertações e 23 teses, num total de 76 documentos. Verificou-se quais trabalhos possuem dados disponíveis para a realização dos cálculos, visando o comparativo de resultados. Da quantidade total de trabalhos analisados, 22 apresentaram dados possíveis de serem utilizados para o propósito deste trabalho. Com a finalidade de comparar métodos e testar cálculos distintos, foi elaborada uma planilha utilizando o Microsoft Office Excel 2016 utilizando os critérios definidos neste trabalho. De forma conjunta com a planilha, foi desenvolvida uma plataforma online para a realização de tais cálculos, que pode ser acessada pelo endereço: <<http://slan.pythonanywhere.com/>>

Palavras-chave: Índice z; análise por ativação neutrônica; NAA; material de referência certificado; MRC.

ABSTRACT

LIMA, Gean Batista de. ***z-score, a tool for quality assurance of analytical results in neutron activation analysis***. 2020. 131 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN – CNEN/SP. São Paulo.

With the dissemination of the ABNT NBR ISO / IEC 17025 standard, the need to implement quality management systems in chemical laboratories became essential. Therefore, the use of certified reference materials (MRC) and reference materials (MR) became necessary in method validation, control of analytical results and demonstration of the metrological traceability chain. However, an important issue is how an analytical laboratory should use the measurement results it produces from the MRC. MRCs are fundamental to assess the veracity of analytical methods, but veracity is not a quantity and, therefore, cannot be expressed numerically. The percent relative error, the z score and the normalized error are some ways to quantify the veracity. In this study, the starting material was defined as the master dissertations and doctoral theses developed at the Activation Analysis Laboratory (LAN) at IPEN – CNEN/SP, in the period from 2006 to 2019. During this period, LAN researchers supervised 53 dissertations and 23 theses, for a total of 76 documents. It was verified which documents have available data to perform the calculations, aiming to compare results. Of the total number of studies analyzed, 22 presented data that could be used for the purpose of this work. In order to compare methods and test different calculations, a spreadsheet was created using Microsoft Office Excel 2016 using the criteria defined in this work. In conjunction with the spreadsheet, an online platform was developed to perform such calculations, which can be accessed at: <<http://slan.pythonanywhere.com//>>

Key words: z score; neutron activation analysis; NAA; certified reference material; CRM.

SUMÁRIO

	Página
1 INTRODUÇÃO	14
1.1 Materiais de Referência e Materiais de Referência Certificados	16
1.2 Análise por ativação neutrônica instrumental (INAA)	18
1.3 Objetivos	20
1.4 Hipóteses	20
2 CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO DE RESULTADOS OBTIDOS COM MATERIAIS DE REFERÊNCIA CERTIFICADOS	21
2.1. Erro relativo	21
2.2. Índice z (z-score)	21
2.3. Índice Zeta (Zeta Score)	24
2.4. Erro normalizado	25
2.5. Desvio padrão relativo porcentual	26
2.6. Índice Z' (Z'-score)	26
3 FATORES RELACIONADOS À AVALIAÇÃO DE RESULTADOS OBTIDOS COM MRs E MRCs	27
3.1 Normas aplicáveis ao uso de MRs e MRCs	27
3.3 Tipos de incerteza	30
3.4 Normalidade de dados	31
4 MATERIAIS E MÉTODOS	35
5 RESULTADO E DISCUSSÃO	37
5.1 Planilha desenvolvida para a realização de cálculos	38
5.2 Plataforma desenvolvida para a realização de cálculos	42
5.3 Validação da metodologia da planilha e da plataforma de cálculos	52

5.4 Protocolo sugerido para os trabalhos produzidos no LAN.....	76
6 CONCLUSÕES	77
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	78

LISTA DE TABELAS

Página

Tabela 1 - Limites de detecção estimados para INAA usando raios gama de decaimento para fluxo de nêutrons de $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$	19
Tabela 2 - Normas relacionadas a MR e MRCs.....	27
Tabela 3 - Documentos orientativos relacionados a MR e MRCs do INMETRO.....	28
Tabela 4 - Quantidade de trabalhos para cada teste estatístico	37
Tabela 5 – Código fonte para o cálculo da diferença absoluta.....	42
Tabela 6 – Código fonte para o cálculo do desvio padrão relativo	43
Tabela 7 – Código fonte para o cálculo do erro relativo	43
Tabela 8 – Código fonte para o cálculo do erro normalizado	43
Tabela 9 – Código fonte para o cálculo do índice z.....	44
Tabela 10 – Código fonte para o cálculo do índice zeta.....	44
Tabela 11 – Código fonte para o cálculo do índice z pela equação de Horwitz, modificada por Thompson.....	45
Tabela 12 – Código fonte para o cálculo do desvio padrão, pela equação de Horwitz, modificada por Thompson.....	46
Tabela 13 – Conjunto de dados 1, retirados de trabalho que utiliza MRC ($\mu\text{g g}^{-1}$)....	53
Tabela 14 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 1	54
Tabela 15 - Valores recalculados do Trabalho 1, através da planilha, utilizando os dados originais	55
Tabela 16 - Valores recalculados do conjunto de dados 1, recalculado pela da plataforma, utilizando os dados originais	56
Tabela 17 – Conjunto de dados 2 retirados de trabalho original que utiliza MRC (mg kg^{-1})	60
Tabela 18 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 2	61
Tabela 19 - Valores recalculados do conjunto de dados 2, através da plataforma ...	62
Tabela 20 – Conjunto de dados 3 retirados de trabalho que utiliza MRC (mg kg^{-1}) ..	65
Tabela 21 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 3	66
Tabela 22 - Valores recalculados do conjunto de dados 3, através da plataforma ...	67

Tabela 23 – Conjunto de dados 4 retirados de trabalho que utiliza MRC (mg kg^{-1}) ..	70
Tabela 24 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 4	71
Tabela 25 - Valores recalculados do conjunto de dados 4, através da plataforma, utilizando os dados originais	72

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1 - Reação nuclear de captura de nêutrons térmicos (n, γ).....	19
Figura 2 - Gráfico de uma distribuição normal.....	32
Figura 3 - Gráfico representando distribuição com característica normal	34
Figura 4 - Gráfico percentual de cada teste	38
Figura 5 - Registro das medições e incertezas	39
Figura 6 - Cadastro de informações do certificado.....	39
Figura 7 - Cadastro das variáveis envolvidas em todos os cálculos	40
Figura 8 - Planilha aba para cálculo do índice z.....	40
Figura 9 - Consolidação e comparação de cálculos.....	41
Figura 10 - Cálculo do desvio padrão utilizando a equação de Horwitz	42
Figura 11 - Página inicial da plataforma desenvolvida para cálculos de índice z.....	46
Figura 12 - Menus a partir da página inicial.....	47
Figura 13 - Menu para os certificados cadastrados.....	47
Figura 14 – Menu de acesso aos dados dos certificados cadastrados	48
Figura 15 - Menu de acesso à importação de dados para certificados	48
Figura 16 - Planilha modelo para importação de dados para os certificados	49
Figura 17 - Acesso de visualização dos elementos cadastrados na plataforma	49
Figura 18 - Menu de acesso aos projetos cadastrados na plataforma	50
Figura 19 - Menu de acesso aos dados dos projetos.....	50
Figura 20 - Menu de acesso aos dados dos projetos.....	51
Figura 21 - Menu de importação das medições de um projeto	51
Figura 22 - Planilha modelo para importação de medições para os projetos	52
Figura 23 – Acesso de administrador da plataforma desenvolvida	52
Figura 24 - DPR% do conjunto de dados 1 e recalculados pela da plataforma	57
Figura 25 - ER% do conjunto de dados 1 e recalculados pela da plataforma	57
Figura 26 - Gráfico para diferença padronizada calculados no Trabalho 1	59
Figura 27 - Gráfico de dispersão gerado pela planilha de cálculo.....	59
Figura 28 - DPR% do conjunto de dados 2 e recalculados pela da plataforma	63

Figura 29 - ER% do conjunto de dados 2 e recalculados pela da plataforma	63
Figura 30 – Índices recalculados e índice z do conjunto de dados 2	64
Figura 31 - DPR% do conjunto de dados 3 e recalculados pela da plataforma	68
Figura 32 - ER% do conjunto de dados 3 e recalculados pela da plataforma	69
Figura 33 – Índices recalculados e índice z do conjunto de dados 3	69
Figura 34 - DPR% do conjunto de dados 4 e recalculados pela da plataforma	73
Figura 35 - DPR% do conjunto de dados 4 e recalculados pela da plataforma	73
Figura 36 – Índices recalculados e índice z do conjunto de dados 4	74

1 INTRODUÇÃO

A Estatística, assim como a Ciência, se desenvolveu em paralelo à humanidade. Quando o conhecimento obtido não era suficiente para solucionar os problemas que surgiam, até mesmo para a sobrevivência, novas ideias eram buscadas com o objetivo de suprir essa necessidade. Assim foi como a habilidade de contar, ou seja, a enumeração de objetos relacionando com símbolos; a necessidade de somar quantidades, subtrair, multiplicar, e por fim, de construir uma linguagem matemática e dar suporte à resolução de problemas de maior complexidade. Com a evolução da humanidade, da ciência e da matemática, muitos dados e informações foram produzidos ao longo dos anos, dessa forma, analisar e tratar tais dados passou a ser uma necessidade humana (SCHWAAB, 2007).

Para o tratamento de dados, utilizam-se as definições e abordagens estatísticas com a finalidade de contribuir na tomada de decisão. Dados podem ser definidos como informações provenientes de observações, contagens ou medições. A utilização de dados estatísticos tem registros nas antigas civilizações da Babilônia e do Egito e, mais tarde, no Império Romano. Nesse contexto, os dados eram relacionados às atividades do Estado, tais como nascimentos e óbitos. O termo estatística é derivado da palavra latina *status*, que significa “estado”. Percebe-se que o Estado foi o primeiro organismo a se preocupar em utilizar, de alguma forma, os dados que possuía referente à sua população e, assim, utilizá-los no processo decisório. Na prática recente, a Estatística vai muito além de contar nascimentos e óbitos, é tida como a ciência que trata da coleta, organização, análise e interpretação dos dados para a tomada de decisões (LARSON; FARBER; PATARRA, 2015; MEMÓRIA, 2004).

Em estatística, existem dois tipos de conjuntos de dados: população e amostra. Uma população é a coleção de todos os resultados possíveis de determinado conjunto; uma amostra é um subconjunto ou parte de uma população. O estudo de estatística tem dois ramos principais, que dependem dos tipos de dados analisados, a estatística descritiva, que envolve a organização, resumo e a representação dos dados, e a estatística inferencial, que utiliza amostras para chegar a conclusões sobre a população (CORREIA, 2003; DEVORE, 2014; LARSON; FARBER; PATARRA, 2015).

Para desenvolver um estudo, é necessário entender o tipo de dado envolvido e, assim, determinar o procedimento estatístico a ser utilizado. A primeira verificação é identificar se o estudo a ser desenvolvido trabalhará com dados quantitativos, que consistem em medidas numéricas e contagens; ou qualitativos, que são atributos, rótulos ou entradas não numéricas. Outro conceito importante em estatística é a coleta de dados. Existem várias maneiras de se coletarem dados, geralmente o foco do estudo determina a melhor maneira de realizar a coleta (LARSON; FARBER; PATARRA, 2015).

Os estudos e experimentos realizados no Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica (LAN) do Centro do Reator de Pesquisas (CERPq) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN - CNEN/SP) utilizam diversos protocolos para a coleta de dados e de amostras. Como bom parâmetro para estimar a adequação dos resultados medidos, vários pesquisadores do LAN utilizam alguns materiais denominados materiais de referência (MR) ou de materiais de referência certificados (MRC).

MRC é definido como material de referência (MR) acompanhado de uma documentação emitida por um organismo com autoridade para tal, o qual fornece um ou mais valores de propriedades especificadas com as incertezas e as rastreabilidades associadas, utilizando procedimentos válidos. MR é definido como material suficientemente homogêneo e estável em relação a propriedades específicas, preparado para se adequar a uma utilização pretendida numa medição ou em um exame de propriedades qualitativas (ABNT, 2020).

Os MRCs também tiveram sua evolução de acordo as necessidades humanas, alcançando, posteriormente, uma gama de aplicações não vislumbradas inicialmente. Humphry John Moule Bowen, britânico, botânico e químico, em 1964 desenvolveu o que seria o primeiro material de referência (MR) de matriz biológica. Ele distribuiu 91 kg de couve, em amostras homogêneas de 100 g para vários analistas de determinação de composição de elementos. O MR ficou conhecido como Couve de Bowen e possuía dados de mais de 60 elementos químicos, com 20 (vinte) desses elementos determinados com grau de precisão suficiente para serem denotados como valores recomendados. Da mesma amostra, 17 (dezessete) outros elementos foram determinados com grau de confiabilidade inferior, classificados como valores vinculados (WISE et al., 2019).

O *National Institute of Standards and Technology* (NIST) emitiu o primeiro MRC de matriz biológica em 1971, o *Orchard Leaves* 1571, momento em que o NIST era denominado *National Bureau of Standards* (NBS) e o respectivo MRC possuía valores certificados para o conteúdo de 19 elementos. Até início da década de 1980, o NIST emitiu 6 (seis) MRCs de matriz biológica, como folhas de espinafre, fígado bovino, farinha de trigo, farinha de arroz, tecido de ostra e leite em pó desnatado, focado em alimentos. Tais certificados, assim como outros de instituições diferentes, contribuíram para a instituição em 1980 da Lei da Fórmula Infantil nos Estados Unidos (EUA), com alterações posteriores, tornando em 1986 a fórmula infantil o alimento mais regulado dos EUA, contendo mínimo e máximo permitido de proteína, gordura, vitaminas e nutrientes orgânicos (WISE et al., 2019).

Com a relevância crescente dos MRCs e MRs para a finalidade que foram criados, tais materiais começaram a ser utilizados visando a comparação da capacidade analítica de laboratórios, assim como para comparação de resultados individuais em processos de medição. Com o surgimento de normas de gestão da qualidade, se tornaram imprescindíveis para adequação às exigências legais, facilitando a rastreabilidade metrológica, a validação de métodos e o controle de qualidade.

1.1 Materiais de Referência e Materiais de Referência Certificados

Com a evolução da Ciência, o surgimento de normas e a grande disseminação e aplicação de conceitos metrológicos em Química a partir dos anos 1990, tornou-se crescente a necessidade de implantação de sistemas de gestão da qualidade em laboratórios químicos, como por exemplo, a utilização de normas como a ABNT NBR ISO/IEC 17025. A partir de tal norma, fica evidente a importância da utilização de materiais de referência certificados (MRCs) para a validação de métodos, controle de resultados analíticos e para a demonstração da cadeia de rastreabilidade de medição (ABNT, 2017b).

MR e MRC são cada vez mais utilizados com o propósito de aumentar a confiabilidade em resultados analíticos. No entanto, uma questão importante que se coloca é como um laboratório analítico deve utilizar os resultados de medição que produz a partir dos MRC. Mais importante do que a escolha de qual abordagem de avaliação de resultados que será utilizada, é a definição clara do protocolo utilizado

para que os usuários possam compreender a qualidade dos resultados e tomar decisões corretas a partir destes (ABNT, 2019; ABNT, 2020).

Ao selecionar um MRC é importante considerar a avaliação da exatidão, da precisão do método e o nível de incerteza requerido para a finalidade do usuário. Dessa forma, a seleção deve sempre procurar o grau de incerteza compatível com o pretendido, não aplicando materiais com incerteza superior ao permitido para a finalidade, assim como a disponibilidade, o custo e a adequação química e física e o tipo de matriz para o objetivo desejado (ABNT, 2019).

Os MRCs destinam-se a atender muitas finalidades, no entanto, um mesmo material pode ser aplicado de forma correta para uma finalidade em um laboratório, assim como pode ser utilizado inadequadamente para outra finalidade em um outro laboratório. Sendo assim, recomenda-se que o usuário considere a adequação do MRC para a sua finalidade caso a caso (ABNT, 2019).

Nos certificados de MRC, é necessário que seja indicado o tratamento estatístico utilizado para a determinação dos valores atribuídos a partir dos resultados obtidos e das incertezas associadas, sendo obrigatório que o produtor do material declare quando forem utilizados métodos diferentes para a caracterização dos materiais de referência (INMETRO, 2018b).

Na literatura, são definidas diversas abordagens referentes aos princípios estatísticos para a utilização dos valores obtidos (INMETRO, 2018b; ABNT, 2019; ABNT, 2020). MRCs podem ser utilizados para a avaliação da precisão de métodos analíticos, ainda que não sejam fundamentais para isso. Podem ser substituídos por outros materiais que sejam suficientemente homogêneos para tal fim (BACCAN et al., 2001). Nesse caso, medições replicadas são obtidas em uma dada condição de precisão que varia de condições de repetibilidade a condições de reprodutibilidade e a dispersão dos resultados é estimada, em geral, utilizando-se o desvio padrão dos resultados (MAJCEN, 2003).

Por outro lado, MRCs são fundamentais para se avaliar a veracidade de métodos analíticos. A veracidade é definida como grau de concordância entre a média de um número infinito de valores medidos repetidos e um valor de referência e está inversamente relacionada ao erro sistemático, porém não está relacionada ao erro aleatório (INMETRO, 2012). Juntamente com a precisão, a veracidade compõe a

característica qualitativa de exatidão do método analítico¹. A veracidade não é uma grandeza e, portanto, não pode ser expressa numericamente. Assim, existem algumas formas para se quantificar a veracidade, podendo ser por meio do erro relativo porcentual, do índice z^2 e do erro normalizado, podendo também ser verificado pela determinação da tendência do método analítico, que é definida como a estimativa de um erro sistemático (INMETRO, 2012).

1.2 Análise por ativação neutrônica instrumental (INAA)

A análise por ativação com nêutrons (NAA) é uma técnica analítica que tem como base a medição da radiação gama induzida em uma amostra pela irradiação com nêutrons. Os núcleos atômicos sofrem reações nucleares, quando submetidos a um fluxo de nêutrons produzidos em um reator nuclear de pesquisa (BODE, 1996).

A aplicação da técnica puramente instrumental é denominada de Análise por Ativação com Nêutrons Instrumental (INAA), que foi aplicada em inúmeros experimentos realizados no Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica (LAN) do Centro do Reator de Pesquisas (CERPq) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN - CNEN/SP), alcançando resultados satisfatórios (VASCONCELLOS, 2004). Com a interação de um nêutron com um núcleo atômico, se obtém um núcleo composto em um estado de excitação. Este núcleo pode perder sua energia por diversos processos de desintegração, que geralmente envolvem partículas ou os chamados raios gama prontos. O núcleo instável começa a decair buscando a estabilidade pela emissão de radiação pelos processos de decaimento α , decaimento β^- , decaimento β^+ e captura eletrônica. Na maioria dos casos, também são emitidos raios X e radiação gama. Em geral, este último caso é o de interesse para a análise por ativação com nêutrons, que consiste na medição desses raios gama para identificação dos elementos presentes na amostra, assim como para a determinação de sua concentração, como demonstrado na Figura 1 (GREENBERG et al., 2011).

¹ Notar que essas definições atuais vão de encontro com as definições anteriores e amplamente difundidas na comunidade química da dicotomia entre precisão e exatidão do processo de medição.

² O termo índice z adotado neste trabalho decorre da denominação dada pelo INMETRO, nas normas nacionais, à terminologia *score-z*, utilizada nas normas internacionais e, de maneira informal, pelos usuários da ferramenta.

Figura 1 - Reação nuclear de captura de nêutrons térmicos (n, γ)

Fonte: autor da dissertação, adaptado de *University of Missouri Research Reactor*.

A sensibilidade para INAA é dependente de 3 parâmetros de irradiação (fluxo de nêutrons, tempos de medição e decaimento) e de 2 condições de medição: tempo de medição e eficiência do detector. Além destes, os parâmetros nucleares dos elementos também interferem na sensibilidade da técnica, como o número de átomos do núcleo alvo, a abundância isotópica do nuclídeo alvo e a secção de choque da reação (GREENBERG et al., 2011). A Tabela 1 lista as sensibilidades aproximadas para determinação de elementos, assumindo espectros livres de interferência.

Tabela 1 - Limites de detecção estimados para INAA usando raios gama de decaimento para fluxo de nêutrons de $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

Sensibilidade (picogramas)	Elementos
1	Dy, Eu
1–10	In, Lu, Mn
10–100	Au, Ho, Ir, Re, Sm, W
100– 1×10^3	Ag, Ar, As, Br, Cl, Co, Cs, Cu, Er, Ga, Hf, I, La, Sb, Sc, Se, Ta, Tb, Th, Tm, U, V, Yb
1×10^3 – 1×10^4	Al, Ba, Cd, Ce, Cr, Hg, Kr, Gd, Ge, Mo, Na, Nd, Ni, Os, Pd, Rb, Rh, Ru, Sr, Te, Zn, Zr
1×10^4 – 1×10^5	Bi, Ca, K, Mg, P, Pt, Si, Sn, Ti, Tl, Xe, Y
1×10^5 – 1×10^6	F, Fe, Nb, Ne
1×10^7	Pb, S

Fonte: IEA-TECDOC-564

Devido às diferentes sensibilidades, assim como os outros fatores que podem influenciar na sensibilidade para a determinação de elementos em INAA, a técnica é mais favorável para a determinação de alguns elementos em relação a outros. Por essa razão, são condições que devem ser levadas em consideração no momento do planejamento para a realização de um processo de medição.

1.3 Objetivos

O presente estudo foi desenvolvido com os seguintes objetivos:

1. Analisar a metodologia, com o uso de MRCs, utilizada para a verificação da exatidão dos resultados obtidos em INAA, no LAN, do Centro do Reator de Pesquisas (CERPq) do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN - CNEN/SP).
2. Definir protocolo unificado para a determinação do índice z em INAA, por meio de ferramenta disponível de forma online para a realização dos cálculos.

1.4 Hipóteses

Diante dos objetivos mencionados, as seguintes hipóteses serão levadas em consideração na condução deste trabalho:

1. O LAN possui uma metodologia padrão para avaliação da exatidão nos processos de medição com o uso de MRCs em INAA.
2. O LAN não possui uma ferramenta unificada para a realização dos cálculos para verificação da exatidão nos processos de medição.

2 CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO DE RESULTADOS OBTIDOS COM MATERIAIS DE REFERÊNCIA CERTIFICADOS

Diversos critérios são adotados no LAN para a análise de resultados obtidos por meio da INAA, utilizando materiais de referência. Tais critérios objetivam quantificar a veracidade dos valores envolvidos no processo de medição, uma vez que tal informação não pode ser mensurada de forma direta, entretanto por meio da utilização conjunta de análises estatísticas, é possível determinar se os valores obtidos em uma dada medição, por exemplo, estão dentro dos parâmetros aceitos para a sua utilização, visando transformar tais dados em informação e disponibilizar à sociedade.

O erro relativo é um parâmetro para avaliação da exatidão em um processo de medição. A exatidão indica a concordância entre os resultados obtidos pelo mesmo método, para uma mesma amostra, porém sob condições diferentes.

2.1. Erro relativo

Na área de determinação de elementos traço em amostras de matrizes complexas, em geral erros relativos da ordem de 10% ou maiores podem ser considerados satisfatórios (KONIECZKA e NAMIEŚNIK, 2009; INMETRO, 2018a). No entanto, quando a faixa de concentração desses elementos é muito baixa, poderão ser obtidos erros relativos muito elevados. Na Equação 1 é apresentada a forma como o E_r percentual é calculado:

$$E_r(\%) = \frac{(\bar{x} - X_v)}{X_v} \times 100 \quad (1)$$

Para fins práticos, toma-se $\bar{x}$ como o resultado da medição (em geral o valor médio de algumas determinações) e X_v como o valor certificado do MRC utilizado na avaliação da exatidão do método analítico, sendo que, quanto menor o erro relativo, maior a exatidão (KONIECZKA e NAMIEŚNIK, 2009; INMETRO, 2018a).

2.2. Índice z (z-score)

A utilização do índice z é uma opção interessante na avaliação da qualidade de métodos analíticos em razão de ser menos sujeito à influência do valor da concentração. Do ponto de vista puramente estatístico, o índice z nada mais é do

que a padronização da distância que esse valor se encontra da média, em termos de desvio padrão (TRIOLA, 2014).

A utilização do índice z em sistemas de qualidade surgiu inicialmente no contexto da análise de programas de proficiência, pois facilita a comparação de dados, uma vez que padroniza as informações de forma que possam ser avaliadas, independentemente de fatores que possam influenciar nos resultados da medição, pois o índice não precisa ser expresso na unidade original do resultado, é normalizado e descrito como sendo a distância entre valor esperado (valor de referência) e o resultado da medição, em unidades de desvio padrão.

O cálculo do índice z está baseado na distribuição Gaussiana, ou normal, como também é chamada. Possui média 0 (zero) e desvio padrão 1 (um) (BOLFARINE e SANDOVAL, 2001; JAMES, 1996; MORETTIN, 2010). Nesse tipo de distribuição de dados, a probabilidade de os resultados estarem no intervalo de $Z = \pm 2$ é de aproximadamente 95% (noventa e cinco por cento), baseado nessa informação, o desempenho do laboratório é considerado satisfatório ou não, para realizar o ensaio (ABNT, 2017).

Dentre os métodos estatísticos utilizados por programas interlaboratoriais para avaliar o desempenho, um dos mais utilizados é o índice z, recomendado pelo Protocolo Internacional Harmonizado para Ensaio de Proficiência da União Internacional para Química Pura e Aplicada (IUPAC), obtido conforme a Equação (1) (THOMPSON et al., 2006):

$$z = \frac{(x - X_v)}{\sigma} \quad (1)$$

onde:

z é o valor do índice z para a medição;

x é o resultado da medição;

X_v é o valor de referência;

σ é o desvio padrão do valor de referência.

Quando o índice z é calculado utilizando um MRC, o termo " σ " assume o valor da incerteza associada ao valor de consenso ou valor certificado no caso, X_v . A norma NBR ISO/IEC 17043 da ABNT, classifica os resultados nas medições como satisfatórios ou não, conforme descrito abaixo (ABNT, 2017a; ABNT, 2017b):

- $|z| \leq 2$: resultado satisfatório;
- $2 < |z| < 3$: resultado questionável;
- $|z| \geq 3$: resultado insatisfatório.

Ainda assim, também é possível calcular o índice z utilizando-se diferentes critérios para a definição do σ , pois não há padrão que o defina. Há a necessidade de, apenas, deixar claro quais critérios foram adotados para o valor utilizado (ISO, 2015). Na prática, isso faz com que muitos usuários tenham dúvidas sobre qual critério é o mais adequado para a utilização em seu contexto de trabalho. Dependendo do critério utilizado, o valor assumido para o índice z pode mudar e, portanto, a classificação de desempenho da análise pode ser alterada (THOMPSON et al., 2006).

A equação de Horwitz, modificada por Thompson, pode ser utilizada para obtenção do desvio padrão da reprodutibilidade baseado na concentração (c) do analito. Tal equação é expressa como razão adimensional da massa, ou seja, desprovido de qualquer unidade física que o defina, como segue abaixo, na Equação 3 (INMETRO, 2018a; ISO, 2015; MOREIRA et al., 2013):

$$\begin{aligned}
 & \text{- Para } c > 0,138 & \Rightarrow & \sigma = 0,01c^{0,5} \\
 & \text{- Para } 1,2 \times 10^{-7} \leq c \leq 0,138 & \Rightarrow & \sigma = 0,02c^{0,8495} \\
 & \text{- Para } c < 1,2 \times 10^{-7} & \Rightarrow & \sigma = 0,02c
 \end{aligned} \tag{3}$$

A fração mássica de um elemento em uma amostra é o quociente entre a massa do respectivo elemento e a soma das massas de todos os elementos que constituem a amostra. Uma vantagem em utilizar a grandeza adimensional é a possibilidade de preparar uma mistura com uma fração mássica estabelecida, levando em consideração as medições de massa das diferentes substâncias envolvidas. Denotando a fração mássica por “ w ” e bromo por (Br), como exemplo de elemento para o qual se deseja calcular a fração mássica em uma amostra, para o cálculo aplica-se a Equação 4:

$$w(\text{Br}) = \frac{M_{\text{Br}}}{M_T} \tag{4}$$

onde:

$w(\text{Br})$ é a fração mássica de bromo na amostra;

M_{Br} é a massa de bromo constante na amostra;

M_T é a massa de todos os elementos que compõem amostra.

Quando tanto M_{Br} quanto M_T são expressos na mesma unidade de massa, a fração mássica passa a ser expressa de forma adimensional, como uma razão, podendo facilmente ser empregada nas equações do modelo.

O principal ponto da modificação proposta por Thompson (Thompson, 2000) se deu em razão de a equação de Horwitz (Horwitz, 1980) não ser aplicável em concentrações de vários níveis, e era apresentada pela Equação 5 abaixo:

$$\sigma = 0,02c^{0,8495} \quad (5)$$

Thompson (Thompson, 2000) constatou que, para outros níveis de concentração (ou fração mássica) do mensurando, o valor do desvio padrão não obedecia a equação de Horwitz. Por essa razão, a modificação proposta aborda 3 (três) níveis de concentrações, expressos em fração mássica.

Uma situação que pode trazer complicações no momento de utilizar a equação de Horwitz, modificada por Thompson, é quando o valor certificado está representado em percentual e a medição é dada em partes por milhão (ppm), ou seja, em unidades distintas. Neste caso, é preciso utilizar um fator de conversão e transformar o valor da medição obtido, em percentual, ou o contrário, para que ambos estejam na mesma unidade e seja possível realizar o cálculo³.

2.3. Índice Zeta (Zeta Score)

O índice zeta (ζ) é recomendável somente quando o laboratório possui boa estrutura de gestão da qualidade para validação das incertezas de seus processos de medição (ISO, 2015). A obtenção do índice zeta se dá conforme a Equação 6:

$$\xi = \frac{(x - X_v)}{\sqrt{u(x)^2 + u(X)^2}} \quad (6)$$

onde:

$u(x)$ representa a incerteza padrão do laboratório (x);

$u(X)$ representa a incerteza padrão do valor certificado (X_v)

A interpretação do índice zeta é similar à interpretação dos índices z , e pode ser utilizada em conjunto para uma melhor avaliação do desempenho para os resultados obtidos. Se os valores absolutos encontrados forem acima de 3 para o

³ Ainda assim, não se recomenda a utilização nem de “%” nem “ppm” como unidades de fração mássica. devendo-se optar por unidades do Sistema Internacional, tais como $g\ kg^{-1}$ ou $\mu g\ kg^{-1}$, por exemplo.

índice z em múltiplas tentativas, é interessante avaliar o procedimento passo a passo e obter a incerteza do processo. Isso poderá indicar a etapa que pode comprometer o resultado. Com a incerteza, é possível calcular o índice zeta e, caso persistam os valores absolutos superiores a 3, é necessário verificar a avaliação da incerteza $u(x)$.

Por outro lado, se um laboratório obtiver repetidamente índice $z \geq |3|$, porém índices zeta $< |2|$, demonstra que a avaliação pode estar correta, mas os resultados não atendem ao desempenho esperado. Outra possibilidade pode estar na origem da obtenção dos dados, na medição, tornando a diferença $(x - x_v)$ muito grande. É importante ressaltar que o índice zeta é diferente do erro normalizado (En), pois utiliza incertezas padrão $u(x)$, em vez de incertezas expandidas $U(x)$ (ISO, 2015; THOMPSON et al., 2006).

2.4. Erro normalizado

Em suas orientações para a validação de métodos analíticos, o Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO) sugere o uso do erro normalizado (En) para a avaliação e/ou validação de resultados. Esse critério é utilizado com frequência para a comparação e avaliação de desempenho, tanto de laboratórios, quanto para resultados individuais (INMETRO, 2018a). O valor do erro normalizado indica se os resultados das medições são compatíveis, e pode ser calculado de acordo com a Equação 7:

$$En = \frac{x - x_v}{\sqrt{U^2 + U_v^2}} \quad (7)$$

Onde:

En é o valor para erro normalizado;

x é o resultado da medição;

x_v é o valor de referência;

U é a incerteza expandida do resultado;

U_v é a incerteza expandida do valor de referência.

Quando $|En| \leq 1$, o resultado obtido na medição é considerado adequado e satisfatório. Do contrário o resultado é considerado insatisfatório (INMETRO, 2018a).

2.5. Desvio padrão relativo porcentual

Em adição ao uso dos critérios anteriormente mencionados para avaliar a veracidade de resultados de análises, pode-se utilizar o desvio padrão relativo porcentual, DPR(%), para avaliar a precisão de tais resultados. A precisão representa a concordância entre os valores obtidos para as concentrações de um elemento em uma amostra, para “n” determinações. O DPR(%) é obtido de acordo com a Equação 8:

$$\text{DPR}(\%) = \frac{s}{\bar{x}} \times 100 \quad (8)$$

onde:

s representa o desvio padrão;

$\bar{x}$ a média;

Nesse caso, quanto maior o DPR (%) e a dispersão dos valores, menor será a precisão da informação (INMETRO, 2018a).

2.6. Índice Z' (Z'-score)

Este índice deve ser interpretado da mesma maneira que o índice z, usando, assim, os mesmos valores críticos de 2,0 e 3,0. O índice z' pode ser obtido pela Equação 9 abaixo:

$$z' = \frac{(x - X_v)}{\sqrt{\delta^2 + uv^2}} \quad (9)$$

onde:

uv representa a incerteza padrão do valor de referência (X_v);

δ representa o desvio padrão do resultado da medição do laboratório (x)

A norma ISO 13528 faz menção a essa equação como o índice z' modificado.

É importante destacar que a equação 9 poderia ser aplicada em situações em que o valor designado da incerteza fosse alto. No entanto, o protocolo harmonizado internacional não recomenda o seu uso. Isto porque, mesmo tendendo a fornecer valores similares aos do índice z, a equação 9 mascara o fato de o valor designado da incerteza ser alto (THOMPSON et al., 2006).

3 FATORES RELACIONADOS À AVALIAÇÃO DE RESULTADOS OBTIDOS COM MRs E MRCs

3.1 Normas aplicáveis ao uso de MRs e MRCs

Dada a importância dos MRs e MRCs, uma série de normas reguladoras sobre o tema foram publicadas no Brasil pela Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT). A ABNT NBR ISO 17034:2017 publicada em substituição à ABNT ISO GUIA 34:2012, juntamente com a ABNT NBR ISO/IEC 17025:2017, tornaram-se as normas centrais brasileira sobre produção e uso de MRs e MRCs. Para o produtor de MRCs, é obrigatória a acreditação, nos termos das normas citadas, para a obtenção do seu reconhecimento junto ao Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO). Na Tabela 2 estão listadas as normas, assim como o tema de abordagem de cada uma, ordenadas pelo tipo e por ordem crescente de numeração.

Tabela 2 - Normas relacionadas a MR e MRCs

MATERIAIS DE REFERÊNCIA	
Item	Objeto de regulação
ABNT NBR ISO/IEC 17025:2017	Requisitos Gerais para Competência de Laboratórios de Ensaio e Calibração
ABNT NBR ISO 17034:2017	Requisitos gerais para a competência de produtores de material de referência
ABNT ISO GUIA 30:2016	Termos e Definições Relacionados a Materiais de Referência
ABNT ISO GUIA 31:2017	Conteúdo de certificados, rótulos e documentação associada
ABNT ISO GUIA 32:2000	Calibração em Química Analítica e Uso de Materiais Certificados (Cancelada em 13/04/2015)
ABNT ISO GUIA 33:2019	Materiais de referência - Boas práticas no uso de materiais de referência
ABNT ISO GUIA 35:2020	Materiais de referência — Guia para caracterização e avaliação da homogeneidade e estabilidade

Fonte: autor da dissertação

As normas nacionais citadas acima, possuem texto e interpretação fiel às normas internacionais, relacionadas ao mesmo tema. Por essa razão, os documentos orientativos e normativos sobre diversos temas, inclusive MRs e MRCs, são constantemente atualizados, com o objetivo de facilitar sua aplicação e uso.

Em caráter de orientação, a Coordenação Geral de Acreditação (CGRE) do INMETRO emite os chamados Documentos Orientativos da Qualidade (DOQ) em complementação aos Guias, que possuem a mesma natureza, assim como complementam também os normativos, como a ABNT NBR ISO/IEC 17025:2017, a ABNT NBR ISO 17034:2017. Outro normativo é a Norma Inmetro Técnica (NIT), emitida pela Divisão de Acreditação de Laboratórios (Dicla). As informações referentes à versão dos documentos devem ser verificadas junto ao site do INMETRO. Na Tabela 3 são citados alguns documentos de caráter orientativos e suas respectivas versões.

Tabela 3 - Documentos orientativos relacionados a MR e MRCs do INMETRO

DOQ	Objeto de regulação
DOQ-CGCRE-001 Revisão 18 – FEV/2020	Orientação para a acreditação de laboratórios, produtores de materiais de referência e provedores de ensaios de proficiência
DOQ-CGCRE-008 Revisão 07 – JUL/2018	Orientação sobre validação de métodos analíticos
DOQ-CGCRE-016 Revisão 07 – JUN/2019	Orientações para a seleção e uso de materiais de referência com foco em ensaios químicos
DOQ-CGCRE-016 Revisão 04 – ABR/2019	Exemplos de estimativa de incerteza de medição ensaios químicos
DOQ-CGCRE-020 Revisão 09 – JAN/2019	Definições de termos utilizados nos documentos relacionados à acreditação de laboratórios, produtores de materiais de referência e provedores de ensaios de proficiência
DOQ-CGCRE-022 Revisão 03 – JUL/2019	Orientações para aplicação dos requisitos técnicos da ABNT NBR ISO/IEC 17025 na acreditação de laboratórios de calibração para o grupo de serviço de físico-química
DOQ-CGCRE-033 Revisão 01 – MAR/2018	Orientações sobre análise crítica da documentação associada aos materiais de referência adquiridos
DOQ-CGCRE-034 Revisão: 00 - SET/2012	Versão brasileira do documento diretrizes da OCDE de boas práticas para centros de recursos biológicos
DOQ-CGCRE-083 Revisão 01 - JUL/2016	Orientações gerais sobre a acreditação de laboratórios que realizam calibração de equipamentos com o uso de materiais de referência certificados (MRC)
DOQ-CGCRE-086 Revisão 02 – ABR/2018	Orientações gerais sobre os requisitos da ABNT NBR ISO 17034

Fonte: autor da dissertação

Pelas datas de suas publicações, constata-se que a maioria dos documentos de orientação foi revisada recentemente, de modo a atender às atualizações ocorridas também nas normas internacionais correspondentes.

É oportuno ressaltar que não há hierarquia entre os DOQs. Além disso, diferentemente das normas, a adoção desses documentos não é obrigatória, visto que o seu propósito é apenas comentar, esclarecer ou até mesmo, apresentar exemplos da aplicação das normas às quais eles estão relacionados.

Todos os trabalhos desenvolvidos no LAN com o uso de MRs e MRCs seguem as normas e orientações relativas ao tema. Há, inclusive, o desenvolvimento de pesquisas de Mestrado e de Doutorado com o objetivo de implementar o Sistema de Gestão da Qualidade (SANTOS, 2020) e (PETRONI, 2015), por exemplo, e a produção de MRs (CASTRO, 2017) e (MOREIRA, 2010), por exemplo, no referido laboratório. Esses trabalhos obedeceram aos critérios definidos na ABNT NBR ISO/IEC 17025 e nas demais normas relacionadas a esses assuntos.

3.2 Limite de detecção (LD) e limite de quantificação (LQ)

O limite de detecção (LD) é importante para qualquer método analítico. Em INAA não é diferente, pois este conceito está ligado à menor concentração (fração mássica) do analito, que pode ser detectada pelo método (INMETRO, 2018a). Como consta na Tabela 1, existem diferentes sensibilidades para cada elemento, alguns com mais dificuldades envolvidas no processo de determinação de concentrações, inclusive para INAA. Alguns elementos são potenciais poluentes, ou quando em concentrações acima do recomendado, podem indicar a necessidade de atenção e frequentemente são objeto de estudo pelos pesquisadores, como o Arsênio (As) e o Cromo (Cr), por exemplo.

A definição do termo “limite de detecção” não é uma unanimidade. Entretanto, é bastante utilizado, inclusive citado por documentos de orientação. O LD pode variar em razão do tipo de amostra e existem diversas formas de realizar o seu cálculo. As normas de orientação trazem informações estatísticas somente a critério de orientação sobre o assunto, uma vez que o LD deve ser obtido experimentalmente. Em INAA, o cálculo do LD pode ser realizado por meio da Equação 10, de acordo com (CURRIE, 1999).

$$LD = 3,29\sigma_o \quad (10)$$

sendo σ_o determinado de acordo com a Equação 11:

$$\sigma_o = \frac{\sqrt{RF}}{t_v} \quad (11)$$

RF = número total de contagens de radiação de fundo para determinado pico analítico;

t_v = tempo total de medição da amostra.

Por sua vez, o limite de quantificação (LQ), também chamado de “limite de determinação”, é a menor concentração ou fração mássica que pode ser determinada, porém com níveis de exatidão e precisão mínimos que devem atendidos (INMETRO, 2018a). Para o cálculo do LQ, (CURRIE, 1999) apresenta a Equação 12, para sua determinação, como segue:

$$LD = 10 \sigma_o \quad (12)$$

onde σ_o é o mesmo expresso na Equação 11.

3.3 Tipos de incerteza

A incerteza envolvida no processo de medição é algo fundamental para a validade de um resultado. A mesma pode ser definida com um valor não negativo que caracteriza a dispersão dos valores atribuídos a uma medição, com base nas informações utilizadas. Assim, a incerteza abrange uma faixa de valores. Por outro lado, a incerteza não deve ser confundida com o erro, que, por sua vez, é a diferença entre o valor medido e o valor esperado ou valor de referência, ou seja, é um valor único (INMETRO, 2012).

De modo a expressar a importância da incerteza no processo de medição, pode-se afirmar que um resultado analítico é sempre uma estimativa do valor real, podendo ser representado por médias, inclusive. Contudo, se não houver uma

incerteza associada a ele, o resultado nem poderá ser considerado um valor representativo nem um resultado de medição.

Tratando-se de incerteza, alguns termos e tipos de incerteza devem ser mencionados, destacando os 3 seguintes:

Incerteza padrão (u) – incerteza de um processo de medição expressa como desvio padrão.

Incerteza combinada (u_c) – é uma combinação de todas as fontes de incertezas de um método analítico, possuindo um nível de confiança de aproximadamente 68% (sessenta e oito por cento). Utiliza o método da raiz quadrada da soma dos quadrados da incerteza padrão de todos os componentes.

Incerteza expandida (U) – é expressa com um produto da incerteza padrão combinada por um fator de abrangência (k), que depende do nível de confiança e reporta 95% (noventa e cinco por cento) ou 99% (noventa e nove por cento) de nível de confiança. Para que seja de 95%. A confiança do valor medido deve estar situada no intervalo $\pm k u_c$, com $k = 2$.

A incerteza pode envolver uma série de componentes e, por essa razão, é dividida em dois tipos: tipo A e tipo B. A incerteza do tipo A é baseada em métodos estatísticos, leva em consideração as próprias avaliações do analista, após a replicação de uma série de observações. A incerteza do tipo B vem de métodos de avaliação da incerteza por outros meios que não a análise estatística de série de observações. Este tipo de incerteza, é determinada a partir de informações acessórias e externas ao processo de medição, que podem ser obtidas de resultados de medições similares anteriores, de experiência ou conhecimento do comportamento do instrumento, de dados do fabricante, de dados fornecidos por certificados de calibração ou de certificados de materiais de referência (INMETRO, 2012).

3.4 Normalidade de dados

Ao analisar uma distribuição de dados oriunda de um processo de medição, é de extrema importância conhecer o tipo de distribuição que esses dados possuem, pois essa distribuição é decisiva para escolha do tipo de teste estatístico que se deve aplicar aos dados e, por conseguinte, para os resultados, recomendações e tomada

de decisão. O mais importante inicialmente é determinar se os dados obedecem ou não a uma distribuição normal, ou seja, se são paramétricos ou não-paramétricos.

A distribuição normal ou gaussiana, como também é conhecida, é uma distribuição contínua muito importante, pois tem aplicação direta do teorema central do limite, que é um resultado fundamental em aplicações práticas e teóricas, pois garante que em distribuições que não se enquadrem como normais, a média dos dados converge para uma distribuição normal, conforme o número de dados aumenta. Outro fator importante é que diversos estudos práticos possuem naturalmente como resultado uma distribuição normal, como a altura de uma determinada população, peso, faixa de renda, concentração de determinados analitos no organismo, dentre outras (BOLFARINE e SANDOVAL, 2001). Tais informações são chamadas variáveis aleatórias contínuas, pois seus valores variam em um intervalo de números reais, embora se possa medir com o valor inteiro mais próximo.

Se uma distribuição de dados é considerada normal, terá o seu gráfico simétrico, em forma de sino (TRIOLA, 2014), como na Figura 2.

Figura 2 - Gráfico de uma distribuição normal

Fonte: adaptado de TRIOLA, 2014.

Neste caso, se uma variável aleatória X é contínua e atende ao requisito gráfico anterior, poderá ainda ser descrita pela Equação 13.

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \text{ para } -\infty < x < \infty \quad (13)$$

Onde:

μ = média da população;

σ = desvio padrão;

Estes dois parâmetros especificam uma distribuição normal. Uma outra forma de dizer que a variável X tem distribuição normal é $X \sim N(\mu, \sigma^2)$, ou seja, para cada par de parâmetros μ e σ , há uma curva diferente de $f(x)$. Existe assim, o que se chama de uma família de distribuições normais (BOLFARINE e SANDOVAL, 2001).

Para cada variável aleatória contínua X existe uma função associada densidade de probabilidade f . Sendo assim, a probabilidade de X estar entre $-\infty$ e ∞ é encontrada pela integração da função f de $-\infty$ até ∞ . Como o cálculo de probabilidades é medido em uma escala de 0 a 1 (STEWART, 2016), segue que a função de densidade de probabilidade normal é dada de acordo com a Equação 14.

$$P(-\infty \leq X \leq \infty) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1 \quad (14)$$

Como a função densidade de probabilidade é conhecida, de acordo com a Equação 13 em que a probabilidade da variável aleatória ocorrer no intervalo de $-\infty$ e ∞ é dada pela Equação 15:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} = 1 \quad (15)$$

A literatura define uma distribuição normal padrão chamada Z , que possui $\mu=0$ e $\sigma=1$. Para esta curva normal, existe uma tabela contendo as probabilidades desta distribuição normal específica (TRIOLA, 2014). Ao aplicar os valores $\mu=0$ e $\sigma=1$ na Equação 15 e realizar uma mudança de variável, obtém-se a Equação 16.

$$Z = \frac{(X - \mu)}{\sigma} \quad (16)$$

A Equação 16 é chamada de equação normal padrão ou reduzida. Por essa razão, os testes estatísticos utilizados para uma distribuição normal somente possuem resultados adequados se a distribuição de dados atender aos requisitos para este tipo de distribuição.

Para a verificar se uma série de dados obedece a uma distribuição normal, é possível realizar uma análise gráfica dos dados, conforme Figura 3.

Figura 3 - Gráfico representando distribuição com característica normal

Fonte: adaptado de TRIOLA, 2014.

A análise gráfica, entretanto, possui algumas limitações de precisão ao se levar em consideração os conceitos de normalidade de acordo com formalidade matemática. Outros métodos envolvem testes estatísticos conhecidos, como teste de Kolmogorov-Smirnov, recomendado para amostras de 30 a 100 dados, e o teste Shapiro-Wilk, recomendado para amostras de 100 a 1000.

Ao realizar o teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov ou Shapiro-Wilk em um *software*, basicamente é testado se os dados do espaço amostral diferem de uma distribuição normal. Se o resultado for $p > 0,05$ significa dizer que não diferem, portanto, é uma distribuição normal. Se o resultado for $p < 0,05$, significa que os dados diferem de uma distribuição normal.

Nesse estudo, utilizou-se o teste de Kolmogorov-Smirnov para avaliar a normalidade dos conjuntos de dados amostrais, em razão de a amostra de dados ser inferior a 100.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Foi definido como material de partida para a obtenção dos dados do presente estudo, as dissertações de mestrado e teses de doutorado desenvolvidas no LAN, na área de concentração de Tecnologia Nuclear – Aplicações da Universidade de São Paulo, em um período de 14 anos (2006 a 2019). Nesse período, os pesquisadores do LAN orientaram 53 dissertações e 23 teses, num total de 76 documentos, com aplicações das mais variadas de técnicas de INAA. Tais documentos abordaram os aspectos de qualidade e validação de métodos com diferentes graus de profundidade.

O passo inicial para a verificação dos critérios adotados para a avaliação de resultados no LAN dependeu do acesso às informações. Os trabalhos orientados por pesquisadores do Centro constam no repositório de teses e dissertações da USP a partir de 2006, desta forma este foi o ano definido como ponto de partida, tendo como prazo final, 2019. Da quantidade total de trabalhos analisados, 4 (quatro) não utilizam materiais de referência em seu desenvolvimento, reduzindo o espaço amostral para 72 (setenta e dois) documentos, dos quais 22 (vinte e dois) apresentam dados de interesse para o presente estudo.

Após ter acesso aos trabalhos e, conseqüentemente aos dados, verificou-se que grande parte dos trabalhos não possuía dados suficientes para dar suporte à uma avaliação estatística dos critérios utilizados, visto que apresentava informações incompletas, como valores médios ou gráficos com os valores finais e sem anexos com informações adicionais. Essa constatação evidencia que nem sempre é possível ter acesso aos dados originais das pesquisas, mesmo que essas não envolvam direitos autorais ou registro de patentes.

Por outro lado, um percentual dos trabalhos analisados apresentava informações detalhadas e precisas sobre a metodologia adotada na condução das pesquisas, os cálculos realizados, além de disponibilizar dados detalhados e originais obtidos nos estudos.

Para comparar métodos, testar cálculos e recalcular valores de índice z e de outros critérios definidos nos trabalhos analisados, foi elaborada planilha utilizando o software Microsoft Office Excel 2016. Essa planilha foi utilizada para as seguintes ações: recalcular os valores disponibilizados nos trabalhos; comparar os valores recalculados com os resultados originais publicados nos trabalhos; e validar o método.

Para os cálculos, foram utilizadas as fórmulas e os critérios citados no capítulo 2, critérios de avaliação de resultados. Os cálculos utilizam as fórmulas, bem como os critérios definidos neste trabalho.

Com a planilha estruturada e compreendendo as relações das equações, foi desenvolvido também uma plataforma *on-line*, utilizando a linguagem de programação Python, para a realização de cálculos para a diferença absoluta, índice z, índice zeta, erro relativo, erro normalizado, desvio padrão, desvio padrão relativo percentual, média aritmética e variância. A planilha foi utilizada inicialmente para recalcular os valores disponibilizados nos trabalhos, realizar a comparação com os resultados originais e validar o método.

A plataforma criada contém as fórmulas e requisitos mencionados nas normas ISO 13528 (ISO, 2015), a ISO 17043 (ISO, 2010), o DOQ-CGCRE-008 (INMETRO, 2018a), e a ABNT NBR ISO 17034 (ABNT, 2017c), consideradas no presente estudo, assim como na planilha digital (Microsoft Excel). Com isso, foram evitadas limitações para a compreensão, pelo usuário, do funcionamento dessa planilha, que utiliza uma forma padrão.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para obtenção de um panorama geral, foram verificados todos os trabalhos produzidos no período de 2006 a 2019, produzidos sob a orientação de pesquisadores lotados no LAN. Os testes estatísticos realizados foram tabelados, constando a quantidade de teses e dissertações que os respectivos testes estão presentes, de um total de 76.

Verificou-se que há trabalhos que utilizam mais de uma análise estatística, por essa razão, a soma dos valores mencionados na Tabela 4, 303 tipos de análises, é superior a quantidade total de trabalhos, 72, porém ao subtrair as intersecções o valor é exatamente 72.

A Tabela 4 apresenta a quantidade de trabalhos em que cada critério estatístico foi adotado, ressalta-se que o termo “diferença padronizada” representa o critério definido de (BODE, 1996) assim como o índice zeta, de acordo com a (ISO, 2015).

Tabela 4 - Quantidade de trabalhos para cada teste estatístico

Critério	Quantidade de trabalhos	Critério	Quantidade de trabalhos
Média Aritmética	71	Análise Multivariada	17
Desvio Padrão Relativo e Desvio Padrão	52	Análise de Variância	12
Erro Relativo Percentual	52	Tukey-Kramer	9
Diferença Padronizada	32	Correlação de Pearson	7
Teste t Student	24	Erro Normalizado	6
Índice Z	18	U-score	3

Fonte: autor da dissertação

Dentre as teses e dissertações, foi realizado um levantamento relacionado a quantidade de trabalhos que realizaram de 1 (um) a 9 (nove) testes, intervalo escolhido por ser, respectivamente, o valor mínimo e máximo de testes encontrados. A distribuição da quantidade de trabalhos pela quantidade de testes é próxima de uma distribuição normal, como consta na Figura 4. Para testar a normalidade de tais dados foram utilizados dois testes, o teste de Kolmogorov-Smirnov, e o teste Shapiro-Wilk.

Verificou-se, utilizando o software IBM SPSS Statistics versão 22, que os resultados obtidos não foram satisfatórios para o requisito de uma distribuição normal.

Figura 4 - Gráfico percentual de cada teste

Fonte: autor da dissertação

Tal levantamento foi realizado para visualizar o percentual de trabalhos relacionando com a quantidade de testes utilizados. Dessa forma, 22% dos trabalhos verificados utilizam de 1 a 3 testes; 68% utilizam de 4 a 6 testes e 9% de 7 a 9 testes estatísticos.

5.1 Planilha desenvolvida para a realização de cálculos

Para a realização dos cálculos para o índice z e demais testes estatísticos utilizados para quantificação da veracidade nas medições, foi desenvolvida uma planilha eletrônica em Microsoft Office Excel 2016, porém é necessário entender o funcionamento e organização dos dados na planilha. As informações necessárias à realização dos cálculos estão divididas em abas, ou seja, várias planilhas no Excel. Tais abas contêm informações como os valores das medições e os dados do MR ou MRC utilizado.

Como exemplificação, a Figura 5, contém informações ilustrativas de medições realizadas e suas respectivas incertezas, constantes na aba chamada “Medições” na planilha. Com tais informações, a planilha calcula de forma imediata a média e o desvio padrão e a média das incertezas informadas.

Figura 5 - Registro das medições e incertezas

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	Elemento	Medição	Incerteza	Medição	Incerteza	Medição	Incerteza	Medição	Incerteza	Medição	Incerteza	Média	Desvio Padrão	Média Incerteza
2	As	0,028	0,01	0,044	0,01	0,033	0,01	0,037	0			0,04	0,01	0,0058
3	Br*	2,1	0,01	2,5	0,01	1,7	0,01	2,2	0,01			2,13	0,29	0,0100
4	Ca (%)	1,61	0,02	1,57	0,04	1,52	0,02	1,49	0,06			1,55	0,05	0,0350
5	Cl	485	21	498	26	479	21	519	35			495,25	15,34	25,7500
6	Co (ng g ⁻¹)*	109	3	108	3	106	3	103	2	109	4	107,00	2,28	3,0000
7	Cr (ng g ⁻¹)*	984	21	743	19	748	22	825	18	928	24	845,60	96,35	20,8000
8	Fe	83,1	1,5	83,4	2	80	1,3	80,4	2			81,73	1,54	1,7000
9	K (%)	1,67	0,01	1,54	0,01	1,61	0,02	1,66	0,01			1,62	0,05	0,0125
10	La*	20,5	0,1	19	0,1	19,9	0,1	19,2	0,1	22,4	0,1	20,20	1,22	0,1000
11	Mg (%)	0,24	0,03	0,22	0,03	0,28	0,03					0,25	0,02	0,0300
12	Mn	47,7	1	51,5	1,3	50,8	1					50,00	1,65	1,1000
13	Rb	10,1	0,2	10,1	0,1	9,6	0,2	9,3	0,1			9,78	0,34	0,1500
14	Sb (ng g ⁻¹)*	18,9	2,1	17,7	2,8	17,3	2,5	14,9	3,3			17,20	1,45	2,6750
15	Sc (ng g ⁻¹)*	30,8	0,2	28,9	0,5	31,5	0,3	32	0,2	30,6	0,3	30,76	1,06	0,3000
16	Se	0,054	0,01	0,051	0,02	0,06	0,01					0,06	0,00	0,0137
17	Zn	13,9	0,3	12,9	0,2	11,4	0,1					12,73	1,03	0,2000
18														
19														
20														
21														
22														

Fonte: autor da dissertação

A Figura 6 apresenta a aba para cadastro das informações do certificado, que geralmente leva o nome do respectivo MRC para facilitar possíveis correções ou mesmo consultas às informações no documento. Nesta aba se insere os valores certificados, suas incertezas, na mesma sequência dos elementos registrados nas medições, assim como outras informações que estiverem disponíveis no documento. Todos os valores reportados foram confirmados nos respectivos certificados dos MRC.

Figura 6 - Cadastro de informações do certificado

	A	B	C	D	E	F
1	NIST-1515 Apple Leaves					
2	Elemento	Valor certificado	Incerteza			
3	As	0,038	0,01			
4	Br*	1,8	-			
5	Ca (%)	1,526	0,02			
6	Cl	579	23,00			
7	Co*	0,09	-			
8	Cr*	0,3	-			
9	Fe	83	5,00			
10	K (%)	1,61	0,02			
11	La*	20	-			
12	Mg (%)	0,271	0,01			
13	Mn	54	3,00			
14	Rb	10,2	1,50			
15	Sb*	0,014	-			
16	Sc*	0,03	-			
17	Se	0,05	0,01			
18	Zn	12,5	0,30			

Fonte: autor da dissertação

A aba “dados” da respectiva planilha relaciona todos os valores envolvidos nos cálculos dos testes estatísticos, ou seja, os valores obtidos pelo laboratório e os valores certificados. As fórmulas nas abas seguintes relacionam dentre todos, quais se aplicam a cada caso, como mostra a Figura 7, um fragmento de tais informações:

Figura 7 - Cadastro das variáveis envolvidas em todos os cálculos

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
	Elemento	Incerteza expandida do resultado (Ulab)	Incerteza padrão do resultado (ux)	Desvio Padrão do resultado (Slab)	Desvio Padrão robusto do resultado (Slab*)	Desvio Padrão HORWITZ	Média Aritmética dos resultados (X lab)	Média Aritmética robusta dos resultados (X lab*)	Incerteza combinada do resultado (xc)	Valor de Referência (Xv)	D
2	As		0,006	0,01		2,58E-05	0,0355	0,0280		0,0380	
3	Br		0,065	0,29		8,35E-04	2,1250	2,1000		1,8000	
4	Ca (%)		0,037	0,05		2,55E-07	1,5475	1,6100		1,5260	
5	Cl		23,667	15,34		2,23E-02	495,2500	485,0000		579,0000	
6	Co (ng g-1)		2,656	2,28		9,32E-06	107,0000	109,0000		0,0900	
7	Cr (ng g-1)		35,271	96,35		5,40E-05	845,6000	984,0000		0,3000	
8	Fe		1,667	1,54		9,04E-03	81,7250	83,1000		83,0000	
9	K (%)		0,020	0,05		6,63E-04	1,6200	1,6700		1,6100	
10	La		0,324	1,22		4,49E-03	20,2000	20,5000		20,0000	
11	Mg (%)		0,029	0,02		1,34E-04	0,2467	0,2400		0,2710	
12	Mn		1,238	1,65		7,07E-03	50,0000	47,7000		54,0000	
13	Rb		0,188	0,34		3,05E-03	9,7750	10,1000		10,2000	
14	Sb (ng g-1)		2,431	1,45		1,97E-06	17,2000	18,9000		0,0140	
15	Sc (ng g-1)		0,451	1,06		3,23E-06	30,7600	30,8000		0,0300	
16	Se		0,011	0,00		1,21E-09	0,0550	0,0540		0,0500	
17	Zn		0,497	1,03		2,83E-03	12,3333	12,0000		12,5000	

Fonte: autor da dissertação

A planilha é eficiente para a realização dos cálculos, sendo possível ver em cada célula os valores que estão sendo relacionados além de gerar alguns gráficos na parte dos cálculos, como segue um exemplo na Figura 8.

Figura 8 - Planilha aba para cálculo do índice z

Fonte: autor da dissertação

Na aba “tabela” consta o resumo com os cálculos realizados, baseados nos dados das medições e do certificado, facilitando a comparação. Para exemplo, consta

na Figura 9 valores recalculados utilizando a planilha, na parte chamada “tabela” que traz os valores de forma condensada para facilitar a visualização.

Figura 9 - Consolidação e comparação de cálculos

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	NIST-1515 Apple Leaves													
2	Elemento	n	Valores recalculados do conjunto de dados 9									Certificado		
X			±	DP	Diferença Absoluta	DPR (%)	Er (%)	En	Z	Z Horwitz	Zeta	Valor Certificado	Incerteza expandida	
3	As	4	0,03550	±	0,01	0,00	16,20	-6,58	-0,28	-0,36	-3,20	-0,43	0,038	0,01
4	Br*	4	2,12500	±	0,29	0,33	0,47	18,06	-	-	0,97	32,50	1,8	-
5	Ca (%)	4	1,54750	±	0,05	0,02	2,26	1,41	0,56	1,43	0,08	0,61	1,526	0,02
6	Cl	4	495,25000	±	15,34	-83,75	5,20	-14,46	-2,43	-3,64	-2,45	-3,25	579	23,00
7	Co (ng g-1)	5	107,00000	±	2,28	106,91	2,80	-	-	-	11,47	35,64	0,09	-
8	Cr (ng g-1)*	5	845,60000	±	96,35	845,30	2,46	-	-	-	15,67	40,64	0,3	-
9	Fe	4	81,72500	±	1,54	-1,28	2,08	-1,54	-0,24	-0,26	-0,17	-0,75	83	5,00
10	K (%)	4	1,62000	±	0,05	0,01	0,77	0,62	0,42	0,50	0,04	0,80	1,61	0,02
11	La*	5	20,20000	±	1,22	0,20	0,50	1,00	-	-	0,09	2,00	20	-
12	Mg (%)	3	0,24667	±	0,02	-0,02	12,16	-8,98	-0,78	-3,04	-0,45	-0,81	0,271	0,01
13	Mn	3	50,00000	±	1,65	-4,00	2,20	-7,41	-1,25	-1,33	-0,82	-3,64	54	3,00
14	Rb	4	9,77500	±	0,34	-0,43	1,53	-4,17	-0,28	-0,28	-0,35	-2,83	10,2	1,50
15	Sb (ng g-1)	4	17,20000	±	1,45	17,19	15,55	-	-	-	8,71	6,42	0,014	-
16	Sc (ng g-1)*	5	30,76000	±	1,06	30,73	0,98	-	-	-	9,51	102,43	0,03	-
17	Se	3	0,05500	±	0,00	0,00	24,85	10,00	0,31	0,56	4,13	0,37	0,05	0,01
18	Zn	3	12,73333	±	1,03	0,23	1,57	1,87	0,65	0,78	0,15	1,17	12,50	0,30
n = número de determinações; X = valor médio; DP = desvio padrão; DPR(%) = desvio padrão relativo; Er (%) = erro relativo percentual; En = erro normalizado; z = índice z; Z Horwitz = índice z utilizando equação de Horwitz, modificada por Thompson; Zeta = índice zeta														
20														
21														
22														
23														
		TABELA		Medições		DADOS		NIST-1515 Apple Leaves				Diferença Absoluta		DPR

Fonte: autor da dissertação

A aba “tabela” foi configurada para que seja possível copiar e colar tais informações em documento do Microsoft Word com formatação adequada para publicação de resultados.

O desvio padrão proposto na equação de Horwitz, modificada por Thompson, é determinado baseado somente na concentração do analito para a obtenção índice z. Na Figura 10, a célula destacada em amarelo possui a Equação 17 para o cálculo do desvio padrão de forma direta, como segue:

$$=SE(B2>0,138;0,01*B2^0,5;SE(B2>=0,00000012;0,022*B2^0,8495;B2*0,022)) \quad (17)$$

A fórmula cumpre rigorosamente os intervalos previstos para a concentração na Equação 3, a equação de Horwitz modificada.

Figura 10 - Cálculo do desvio padrão utilizando a equação de Horwitz

	A	B	C	D	E	F
1	Elemento	Resultado da medição	Desvio Padrão Eq HWT	Obs. Se atentar para as unidades ppm ou percentual		
2	As	0,0000000355	0,000000000781			
3	Br*	2,13E-06	3,34E-07			
4	Ca (%)	1,55E-06	2,55E-07			
5	Cl	4,95E-04	3,43E-05			
6	Co (ng g-1)*	1,07E-07	2,35E-09	ppb		
7	Cr (ng g-1)*	8,46E-07	1,53E-07	ppb		
8	Fe	8,17E-05	7,41E-06			
9	K (%)	1,62E-06	2,65E-07			
10	La*	2,02E-05	2,26E-06			
11	Mg (%)	2,47E-07	5,36E-08			

Fonte: autor da dissertação

No exemplo da Figura 10, o valor da concentração do elemento Arsênio (As) é 0,0355 ppm, para tornar tal grandeza adimensional, divide-se o valor por 1.000.000 (um milhão), obtendo 0,0000000355 na célula B2, utilizada no cálculo. A partir de tais informações, as condições inseridas nas fórmulas da planilha do Excel, verifica em qual faixa da (3) o valor está e realiza o cálculo indicado para o caso.

5.2 Plataforma desenvolvida para a realização de cálculos

De forma conjunta à planilha, a partir da realização dos testes dos cálculos em comparação aos trabalhos realizados, foi desenvolvida plataforma *online* para a realização de tais cálculos, que pode ser acessada pelo endereço <<http://slan.pythonanywhere.com/>>. O site é desenvolvido em Python, linguagem de programação clara, com simplicidade no código e com ótimas aplicações em matemática e estatística. Na Tabela 5 é apresentado um exemplo do código utilizado para a realização do cálculo para a obtenção do resultado para a diferença absoluta em um processo de medição na plataforma.

Tabela 5 – Código fonte para o cálculo da diferença absoluta

```
@register.simple_tag(name='diferenca_absoluta')
def diferenca_absoluta(media, referencia):
    resultado = float((media - referencia))
    a = '{:,.4f}'.format(resultado)
    b = a.replace('.', ',')
    c = b.replace(',', 'v')
    return c.replace('v', '.')
```

Fonte: autor da dissertação

Apesar de a diferença absoluta não ter sido utilizada na maioria dos trabalhos analisados no presente estudo, decidiu-se pela sua inclusão na plataforma digital. Isto se deu com o objetivo de contemplar, nessa ferramenta digital, a maioria dos testes indicados nas normas, bem como aqueles testes mais comumente

utilizados pelos pesquisadores. Com isso, amplia-se a possibilidade de uso de ferramenta, tornando-a um suporte para pesquisadores das diversas áreas da Ciência. Dentre os cálculos existentes na plataforma digital, está o DPR(%), que é bastante utilizado em pesquisas. Na Tabela 6 é demonstrado como o código do DPR(%) está descrito na plataforma.

Tabela 6 – Código fonte para o cálculo do desvio padrão relativo

```
@register.simple_tag(name='dpr')
def dpr(media_incerteza, media_concentracao):
    resultado = float(((media_incerteza / media_concentracao) * 100))
    a = '{:,.4f}'.format(resultado)
    b = a.replace(',', 'v')
    c = b.replace('.', ';')
    return c.replace('v', '.')
```

Fonte: autor da dissertação

É importante destacar que os códigos fonte, como o descrito na Tabela 5, são basicamente a “tradução” das fórmulas criadas na planilha eletrônica para a linguagem utilizada no sistema Python, possibilitando a apresentação, na plataforma digital, dos resultados obtidos a partir dessas fórmulas.

Nas Tabelas, 7, 8, 9 e 10, estão descritos códigos utilizados na plataforma para a realização dos cálculos para o erro relativo, erro normalizado, índice z e índice zeta.

Tabela 7 – Código fonte para o cálculo do erro relativo

```
@register.simple_tag(name='er')
def er(media_concentracao, referencia):
    resultado = float((((media_concentracao - referencia) / referencia) * 100))
    a = '{:,.4f}'.format(resultado)
    b = a.replace(',', 'v')
    c = b.replace('.', ';')
    return c.replace('v', '.')
```

Fonte: autor da dissertação

Tabela 8 – Código fonte para o cálculo do erro normalizado

```
@register.simple_tag(name='en')
def en(media_concentracao, referencia_concentracao, media_incerteza,
referencia_incerteza_expandida):
    if referencia_incerteza_expandida:
        resultado = float(
            (float(media_concentracao) - float(referencia_concentracao)) / math.sqrt(
                (float(media_incerteza) ** 2) + (float(referencia_incerteza_expandida) ** 2))
        )
        a = '{:,.4f}'.format(resultado)
        b = a.replace(',', 'v')
        c = b.replace('.', ';')
        return c.replace('v', '.')
    else:
        return '-'
```

Fonte: autor da dissertação

Tabela 9 – Código fonte para o cálculo do índice z

```
@register.simple_tag(name='z_score')
def z_score(media_concentracao, referencia_concentracao, referencia_incerteza):
    if referencia_incerteza:
        resultado = float(((media_concentracao - referencia_concentracao) / referencia_incerteza))
        a = '{:,.4f}'.format(resultado)
        b = a.replace(',', 'v')
        c = b.replace('.', ',')
        return c.replace('v', '.')
    else:
        return '-'
```

Fonte: autor da dissertação

Tabela 10 – Código fonte para o cálculo do índice zeta

```
@register.simple_tag(name='zeta_score')
def zeta_score(media_concentracao, referencia_concentracao, media_incerteza,
referencia_incerteza_padrao):
    if referencia_incerteza_padrao:
        resultado = float(
            (float(media_concentracao) - float(referencia_concentracao)) / math.sqrt(
                (float(media_incerteza) ** 2) + (float(referencia_incerteza_padrao) ** 2))
        )
        a = '{:,.4f}'.format(resultado)
        b = a.replace(',', 'v')
        c = b.replace('.', ',')
        return c.replace('v', '.')
    else:
        return '-'
```

Fonte: autor da dissertação

Dentre todas as fórmulas implementadas na plataforma, a equação de Horwitz, modificada por Thompson, foi a que apresentou maior complexidade, tanto para a compreensão da sua aplicação quanto para o desenvolvimento do seu código fonte. Na utilização dessa fórmula, calcula-se o desvio padrão baseado nos parâmetros determinados pela equação original. Para tal, é necessário que as grandezas sejam adimensionais, ou seja, desprovidas de grandezas físicas que as descrevem. Diante disso, o código desenvolvido e implementado na plataforma utiliza a grandeza de entrada do valor para realizar a conversão para valores adimensionais de forma automática, levando em consideração sempre a unidade de medida indicada no certificado de cada elemento. O código fonte desse cálculo é apresentado na Tabela 11.

Tabela 11 – Código fonte para o cálculo do índice z pela equação de Horwitz, modificada por Thompson

```
@register.simple_tag(name='z_horwitz')
def z_horwitz(media_concentracao, referencia_concentracao, fracao_massa_certificado,
fracao_massa_medicao):
    if referencia_concentracao:
        if fracao_massa_medicao == 1 and fracao_massa_certificado == 0: # MEDIÇÃO (PPM) E
CERTIFICADO (%)
            media_concentracao = (media_concentracao / 10000) / 100
            referencia_concentracao = (referencia_concentracao / 10000) / 100

        elif fracao_massa_medicao == 2 and fracao_massa_certificado == 0: # MEDIÇÃO (PPB) E
CERTIFICADO (%)
            media_concentracao = (media_concentracao / 10000000) / 100
            referencia_concentracao = (referencia_concentracao / 10000000) / 100

        elif fracao_massa_medicao == 2 and fracao_massa_certificado == 2: # MEDIÇÃO (PPB) E
CERTIFICADO (PPM)
            media_concentracao = (media_concentracao / 1000) / 10000000000
            referencia_concentracao = (referencia_concentracao / 1000) / 10000000000

        elif fracao_massa_medicao == 2 and fracao_massa_certificado == 2: # MEDIÇÃO (PPM) E
CERTIFICADO (PPB)
            media_concentracao = (media_concentracao * 1000) / 10000000000000
            referencia_concentracao = (referencia_concentracao * 1000) / 10000000000000

        elif fracao_massa_medicao == 0 and fracao_massa_certificado == 0: # MEDIÇÃO (%)
CERTIFICADO (%)
            media_concentracao = media_concentracao / 100
            referencia_concentracao = referencia_concentracao / 100

        elif fracao_massa_medicao == 1 and fracao_massa_certificado == 1: # MEDIÇÃO (PPM)
CERTIFICADO (PPM)
            media_concentracao = media_concentracao / 1000000
            referencia_concentracao = referencia_concentracao / 1000000

        elif fracao_massa_medicao == 2 and fracao_massa_certificado == 2: # MEDIÇÃO (PPB) E
CERTIFICADO (PPB)
            media_concentracao = media_concentracao / 10000000000
            referencia_concentracao = referencia_concentracao / 10000000000
```

Fonte: autor da dissertação

O código fonte desenvolvido para o cálculo do desvio padrão pela equação de Horwitz, modificada por Thompson, é apresentado na Tabela 12. Para realizar esse cálculo, os valores obtidos após a conversão realizada pelo código apresentado na Tabela 11, são comparados com os intervalos determinados pela equação original, obtendo-se o valor do desvio padrão para o respectivo elemento da medição.

Tabela 12 – Código fonte para o cálculo do desvio padrão, pela equação de Horwitz, modificada por Thompson

```
# CÁLCULO DO DESVIO PADRÃO DE HORWITZ
if media_concentracao > 0.138:
    dp_horwitz = 0.01 * math.sqrt(float(media_concentracao))
elif media_concentracao >= 0.00000012:
    dp_horwitz = 0.022 * (float(media_concentracao) ** 0.8495)
else:
    dp_horwitz = float(media_concentracao) * 0.022

resultado = float(
    (float(media_concentracao) - float(referencia_concentracao)) / float(
        dp_horwitz
    )
)

a = '{:,.4f}'.format(resultado)
b = a.replace(',', 'v')
c = b.replace('.', ',')
return c.replace('v', '.')
else:
    return '-'
```

Fonte: autor da dissertação

Algumas imagens foram retiradas de telas da plataforma para ilustração de seu funcionamento. A Figura 11 apresenta o acesso inicial.

Figura 11 - Página inicial da plataforma desenvolvida para cálculos de índice z

Fonte: autor da dissertação

Ao acessar a plataforma pela interface de usuário, no canto superior esquerdo estão os menus “Cadastro” e “Projetos”, de acordo com a Figura 12.

Figura 12 - Menus a partir da página inicial

Fonte: autor da dissertação

Ao percorrer os menus laterais, o primeiro acesso dentro dos cadastros é o menu “Certificados”. Nesse menu é possível visualizar os MRs e MRCs cadastrados, pesquisando pelo nome ou pelo código de identificação de cada um, de acordo com a Figura 13.

Figura 13 - Menu para os certificados cadastrados

Fonte: autor da dissertação

A Figura 14 mostra o menu “Dados dos Certificados” que contém as informações disponibilizadas no documento para cada elemento, como a concentração, fração de massa, e o tipo de incerteza, informações que influenciam diretamente na forma de realizar os cálculos. Caso o certificado de interesse não possua dados cadastrados, é possível fazer a importação das informações através do botão em verde “Importar Dados”.

Figura 14 – Menu de acesso aos dados dos certificados cadastrados

Home / Dados dos Certificados

DADOS DOS CERTIFICADOS

Pesquisar
Digite para pesquisar

IMPORTAR DADOS

ADICIONAR DADOS

Certificado	Elemento	Concentração	Incerteza Padrão	Incerteza Expandida	Fração de Massa	Unidade da Fração
NIST SRM 1577C	Ag - Prata	5,90000	0,00000	1,60000	0,0000000000	PPM
NIST SRM 2976	Ag - Prata	0,01100	0,00000	0,00000	0,0000000000	PPM
NIST SRM 1566b	Ag - Prata	0,66600	0,00000	0,00900	0,0000000000	PPM
NIST 1573a	Ag - Prata	0,01700	0,00000	0,00000	0,0000000000	PPM
NIST SRM 2976	Al - Alumínio	134,00000	0,00000	34,00000	0,0000000000	PPM
NIST SRM 1566b	Al - Alumínio	197,20000	0,00000	6,00000	0,0000000000	PPM

Fonte: autor da dissertação

Para realizar a importação de dados de um certificado, existe uma planilha modelo, que pode ser baixada ao clicar no campo indicado. Após preencher os dados da planilha, basta selecionar o arquivo para upload e indicar o certificado ao qual se referem os dados, de acordo com Figura 15.

Figura 15 - Menu de acesso à importação de dados para certificados

Home / Dados dos Certificados / Importar Dados

IMPORTAR DADOS DO CERTIFICADO

Info: Clique aqui para fazer o download de nossa Planilha Modelo

Certificado 1*
Selecione o certificado

SELECIONAR ARQUIVO 1

Escolha o arquivo

Certificado 2
Selecione o certificado

SELECIONAR ARQUIVO 2

Escolha o arquivo

Certificado 3
Selecione o certificado

SELECIONAR ARQUIVO 3

Escolha o arquivo

IMPORTAR

Fonte: autor da dissertação

A planilha modelo para a importação dos dados exige que seja preenchido o campo elemento, somente como o símbolo, sem representação de unidades como % (percentual) ou qualquer outro, que serão indicados em local próprio. A Figura 16 mostra como é o preenchimento. Na coluna B deve ser informado o status da certificação do elemento, se a concentração do elemento é Certificada, Referência ou

Informativa; na coluna C a contração do elemento; das colunas D a G o tipo de incerteza associada e na coluna I a unidade da fração mássica, mg kg⁻¹ e micrograma kg⁻¹ etc.

Figura 16 - Planilha modelo para importação de dados para os certificados

	A	B	C	D	E	F	G	I
1	ELEMENTO	TIPO DE CONCENTRAÇÃO	CONCENTRAÇÃO	INCERTEZA EXPANDIDA	INCERTEZA PADRÃO	INCERTEZA COMBINADA	INTERVALO DE CONFIANÇA	TIPO DE FRAÇÃO DE MASSA
2	As	Certificado	0,038	0,007	0,007			PPM
3	Br	Informado	1,8					PPM
4	Ca	Certificado	1,526	0,015	0,015			PPM
5	Cl	Certificado	579	23	23			PPM
6	Co	Informado	0,09					PPM
7	Cr	Informado	0,3					PPM
8	Fe	Certificado	83	5	5			PPM
9	K	Certificado	1,61	0,02	0,02			PPM
10	La	Informado	20					PPM
11	Mg	Certificado	0,271	0,008	0,008			PPM
12	Mn	Certificado	54	3	3			PPM
13	Rb	Certificado	10,2	1,5	1,5			PPM
14	Sb	Informado	0,014					PPM
15	Sc	Informado	0,03					PPM
16	Se	Certificado	0,05	0,009	0,009			PPM
17	Zn	Certificado	12,5	0,3	0,3			PPM

Fonte: autor da dissertação

O menu “Elementos” de acordo com a Figura 17 mostra os elementos químicos cadastrados na plataforma. Em caso de importação de dados que contenha um elemento que não está na base do sistema, é necessário realizar a inclusão.

Figura 17 - Acesso de visualização dos elementos cadastrados na plataforma

Mestrado Gean	
Home / Elementos	
ELEMENTOS	
<div>Pesquisar</div> <div>Digite para pesquisar</div>	
Descrição	Símbolo
Prata	Ag
Alumínio	Al
Arsênio	As
Ouro	Au

Fonte: autor da dissertação

A Figura 18 mostra a visualização dos projetos cadastrados. Dentro de tais projetos podem ser cadastradas uma ou mais medições, envolvendo um ou mais certificados. Cada projeto possui 3 opções, no lado direito, sendo elas: visualizar, editar e excluir. Na opção visualizar irá mostrar os cálculos disponíveis para este projeto. A função editar permite alterar informações do projeto, enquanto excluir apaga o projeto e todos os dados cadastrados.

Figura 18 - Menu de acesso aos projetos cadastrados na plataforma

Descrição	Autor	Data de Início	Medições	Situação	Ações
Conjunto de dados 1	Gean Batista de Lima	16/10/2020	573	Em Andamento	
Conjunto de dados 10	Gean Batista de Lima	16/10/2020	50	Em Andamento	
Conjunto de dados 11	Gean Batista de Lima	16/10/2020	0	Em Andamento	
Conjunto de dados 12	Gean Batista de Lima	16/10/2020	0	Em Andamento	
Conjunto de dados 13	Gean Batista de Lima	16/10/2020	0	Em Andamento	

Fonte: autor da dissertação

No menu de visualização dos dados do projeto, consta todos os cálculos disponíveis de acordo com os dados importados. A plataforma apresenta, de acordo com a Figura 19 o Número de Determinações (N); Valor Médio (X); Y = Média de Incerteza (Y); Desvio Padrão (DP); Diferença Absoluta (DA); Desvio Padrão Relativo (DPR%); Erro Relativo Percentual (Er%); Erro Normalizado (En); Índice Z (Z); Índice Z utilizando equação de Horwitz modificada por Thompson (Z Horwitz); Índice Zeta (Zeta); Mediana; Variância e os dados do certificado.

Figura 19 - Menu de acesso aos dados dos projetos

Elemento	N	X	Y	DP	DA	DPR (%)	Er (%)	En	Z	Z Horwitz	Zeta	Mediana	Variância
As	4	0,0355	0,0058	22,5586	-0,0025	16,1972	-6,5789	-0,2760	-0,3571	-3,2010	-0,2760	4,6700	508,8891
Br	4	2,1250	0,0100	21,0377	0,3250	0,4706	18,0556	-	-	0,9736	-	3,0500	442,5848
Ca	4	1,5475	0,0350	19,2657	0,0215	2,2617	1,4089	0,5646	1,4333	0,0843	0,5646	2,1000	371,1680
Cl	4	495,2500	25,7500	165,4073	-83,7500	5,1994	-14,4646	-2,4257	-3,6413	-2,4452	-2,4257	2,8400	27359,5625
Co	5	107,0000	3,0000	121,2362	106,9100	2,8037	118,788,8889	-	-	11,4719	-	5,2000	14698,2193

Fonte: autor da dissertação

Ao lado de cada cálculo existe uma opção de ocultar uma coluna, de acordo com o interesse. A Figura 20 apresenta a mesma tela da Figura 19, porém ocultando algumas colunas para exemplificação.

Figura 20 - Menu de acesso aos dados dos projetos

ESTATÍSTICAS DAS MEDIÇÕES									
Elemento	N	X	DP	DPR (%)	Er (%)	En	Z	Z Horwitz	Zeta
As	4	0,0355	22,5586	16,1972	-6,5789	-0,2760	-0,3571	-3,2010	-0,2760
Br	4	2,1250	21,0377	0,4706	18,0556	-	-	0,9736	-
Ca	4	1,5475	19,2657	2,2617	1,4089	0,5646	1,4333	0,0843	0,5646
Cl	4	495,2500	165,4073	5,1994	-14,4646	-2,4257	-3,6413	-2,4452	-2,4257
Co	5	107,0000	121,2362	2,8037	118.788,8889	-	-	11,4719	-
Cr	5	845,6000	166,9792	2,4598	281.766,6667	-	-	15,6661	-

Fonte: autor da dissertação

A partir de um projeto cadastrado, é possível importar os dados de uma ou mais medições para este projeto. Para tal, existe também uma planilha modelo, disponibilizada no sistema para uso. Para a importação basta selecionar o certificado e importar a planilha contendo os dados das medições, como segue na Figura 21.

Figura 21 - Menu de importação das medições de um projeto

Mestrado Gean

DADOS DO PROJETO

Autor: Gean Batista de Lima

Início: 16 de Outubro de 2020

Descrição: Conjunto de dados 6

Situação: Em Andamento

IMPORTAR DADOS DO PROJETO

Info: Clique aqui para fazer o download de nossa Planilha Modelo

Data 1*

19/10/2020

Certificado 1*

Selecione o certificado 1

SELECIONAR ARQUIVO 1

Escolha o arquivo 1

Data 2

19/10/2020

Certificado 2

Selecione o certificado 2

SELECIONAR ARQUIVO 2

Escolha o arquivo 2

Data 3

19/10/2020

Certificado 3

Selecione o certificado 3

SELECIONAR ARQUIVO 3

Escolha o arquivo 3

Fonte: autor da dissertação

A planilha modelo para a importação das medições exige que seja preenchido o campo elemento, também somente como o símbolo. A Figura 22 mostra como deve ocorrer o preenchimento. Na coluna A. deve ser inserido o símbolo do elemento. Na coluna B deve ser informado a concentração do elemento; das colunas

C a F o tipo de incerteza associada e na coluna G o tipo de fração de massa, mg kg⁻¹ e micrograma kg⁻¹.

Figura 22 - Planilha modelo para importação de medições para os projetos

	A	B	C	D	E	F	G
1	ELEMENTO	MEDICÃO	INCERTEZA PADRÃO	INCERTEZA EXPANDIDA	INCERTEZA EXPANDIDA COMBINADA	INTERVALO DE CONFIANÇA	TIPO DE FRAÇÃO DE MASSA
2	As	0,028	0,008				PPM
3	Br	2,100	0,010				PPM
4	Ca	1,610	0,020				PPM
5	Cl	485,000	21,000				PPM
6	Co	109,000	3,000				PPM
7	Cr	984,000	21,000				PPM
8	Fe	83,100	1,500				PPM
9	K	1,670	0,010				PPM
10	La	20,500	0,100				PPM
11	Mg	0,240	0,030				PPM
12	Mn	47,700	1,000				PPM
13	Rh	10,100	0,200				PPM

Fonte: autor da dissertação

A plataforma também possui um acesso de administrador, onde é possível cadastrar os usuários, também certificados e seus dados, elementos, medições e projetos que essas informações estarão relacionadas. É possível realizar a importação e exportação de informações. Abaixo a demonstração na Figura 23 do menu de administrador do sistema:

Figura 23 – Acesso de administrador da plataforma desenvolvida

Mestrado Gean
BEM-VINDO(A), GEAN BATISTA

Administração

AUTENTICAÇÃO E AUTORIZAÇÃO

Grupos

Adicionar

Modificar

Usuários

Adicionar

Modificar

PORTAL

Certificados

Adicionar

Modificar

Dados dos Certificados

Adicionar

Modificar

Elementos

Adicionar

Modificar

Medições

Adicionar

Modificar

Projetos

Adicionar

Modificar

Ações recentes

Minhas Ações

Zn - Zinco - NIST SRM 1577C

Dado do Certificado

V - Vanádio - NIST SRM 1577C

Dado do Certificado

S - Enxofre - NIST SRM 1577C

Dado do Certificado

Sr - Estrôncio - NIST SRM 1577C

Dado do Certificado

Na - Sódio - NIST SRM 1577C

Dado do Certificado

Fonte: autor da dissertação

5.3 Validação da metodologia da planilha e da plataforma de cálculos

Adotando a planilha demonstrada na Figura 8, alguns cálculos foram realizados mediante a obtenção de dados originais de trabalhos dentro da amostra disponível. Abaixo consta na Tabela 13 dados originais retirados do conjunto de dados 1, do espaço amostral, nos quais as frações mássicas estão, em $\mu\text{g g}^{-1}$, exceto se estiver indicado. Os dados utilizados para a realização dos cálculos, encontram-se no

Anexo I deste trabalho. No texto original foi adotado o termo “concentrações dos elementos, que foi aqui substituído por “frações mássicas”.

Tabela 13 – Conjunto de dados 1, retirados de trabalho que utiliza MRC ($\mu\text{g g}^{-1}$)

Elemento	Dados individuais - NIST 1515 – Apple Leaves
As	$0,028 \pm 0,008^*$; $0,044 \pm 0,005$; $0,033 \pm 0,006$; $0,037 \pm 0,004$
Br	$2,1 \pm 0,01$; $2,5 \pm 0,01$; $1,7 \pm 0,01$; $2,2 \pm 0,01$
Ca (%)	$1,61 \pm 0,02$; $1,57 \pm 0,04$; $1,52 \pm 0,02$; $1,49 \pm 0,06$
Cl	485 ± 21 ; 498 ± 26 ; 479 ± 21 ; 519 ± 35
Co (ng g^{-1})	109 ± 3 ; 108 ± 3 ; 106 ± 3 ; 103 ± 2 ; 109 ± 4
Cr (ng g^{-1})	984 ± 21 ; 743 ± 19 ; 748 ± 22 ; 825 ± 18 ; 928 ± 24
Fe	$83,1 \pm 1,5$; $83,4 \pm 2$; $80,0 \pm 1,3$; $80,4 \pm 2$
K (%)	$1,67 \pm 0,01$; $1,54 \pm 0,01$; $1,61 \pm 0,02$; $1,66 \pm 0,01$
La	$20,5 \pm 0,1$; $19,0 \pm 0,1$; $19,9 \pm 0,1$; $19,2 \pm 0,1$; $22,4 \pm 0,1$
Mg (%)	$0,24 \pm 0,03$; $0,22 \pm 0,03$; $0,28 \pm 0,03$
Mn	$47,7 \pm 1,0$; $51,5 \pm 1,3$; $50,8 \pm 1,0$
Rb	$10,1 \pm 0,2$; $10,1 \pm 0,1$; $9,6 \pm 0,2$; $9,3 \pm 0,1$
Sb (ng g^{-1})	$18,9 \pm 2,1$; $17,7 \pm 2,8$; $17,3 \pm 2,5$; $14,9 \pm 3,3$
Sc (ng g^{-1})	$30,8 \pm 0,2$; $28,9 \pm 0,5$; $31,5 \pm 0,3$; $32,0 \pm 0,2$; $30,6 \pm 0,3$
Se	$0,054 \pm 0,013$; $0,051 \pm 0,015$; $0,060 \pm 0,013$
Zn	$13,9 \pm 0,3$; $12,9 \pm 0,2$; $11,4 \pm 0,1$

* Incerteza calculada considerando erros nas medições das taxas de contagens da amostra e do padrão

Fonte: adaptado do Trabalho 1 do espaço amostral

Os dados apresentados na Tabela 13 são o resultado da medição juntamente com as suas incertezas do trabalho original. A partir do conjunto de dados 1, chegou-se aos seguintes resultados de média, desvio padrão, desvio padrão relativo e erro relativo, no trabalho original, como consta na Tabela 14.

Tabela 14 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 1

Elemento	Este trabalho				Valor do certificado (NIST, 1993)
	n	X $\pm$ DP	DPR (%)	Er (%)	
As	4	0,036 $\pm$ 0,006	16,6	5,2	0,038 $\pm$ 0,007
Br	4	2,13 $\pm$ 0,01	0,5	-	(1,8) *
Ca (%)	4	1,548 $\pm$ 0,039	2,5	2,4	1,526 $\pm$ 0,015
Cl	4	495 $\pm$ 25	5,1	14,5	579 $\pm$ 23
Co	5	0,107 $\pm$ 0,003	2,8	-	(0,09)
Cr	5	0,85 $\pm$ 0,02	2,4	-	(0,3)
Fe	4	81,7 $\pm$ 1,7	2,1	1,2	83 $\pm$ 5
K (%)	4	1,62 $\pm$ 0,01	0,6	0,6	1,61 $\pm$ 0,02
La	5	20,2 $\pm$ 0,1	0,5	-	(20)
Mg (%)	3	0,246 $\pm$ 0,027	11	9,2	0,271 $\pm$ 0,008
Mn	3	50,0 $\pm$ 1,1	2,2	7,4	54 $\pm$ 3
Rb	4	9,8 $\pm$ 0,2	2,0	3,9	10,2 $\pm$ 1,5
Sb	4	0,017 $\pm$ 0,003	17,6	-	(0,014)
Sc	5	0,031 $\pm$ 0,003	1,0	-	(0,03)
Se	3	0,055 $\pm$ 0,014	25,4	10	0,050 $\pm$ 0,009
Zn	3	12,7 $\pm$ 0,2	1,6	1,6	12,5 $\pm$ 0,3

n = número de determinações; X = valor médio; DP = desvio padrão; DPR = desvio padrão relativo; Er = erro relativo percentual; * valores informativos são apresentados entre parênteses.

Fonte: adaptado do Trabalho 1 do espaço amostral

A partir de tais dados e da apresentação dos resultados constantes no trabalho, como consta na Tabela 14, utilizou-se a planilha desenvolvida para realização dos cálculos, comparação e validação das fórmulas e da metodologia da planilha. Mediante ao acesso aos dados originais constantes na Tabela 13, utilizou-se de tais informações para a realização de cálculos e a comparação de resultados, conforme a Tabela 15.

Além da utilização da planilha, a partir dos dados constantes na Tabela 13, utilizou-se a plataforma desenvolvida para realização dos cálculos e validação dos códigos e da metodologia da plataforma, os dados da plataforma podem ser utilizados com um print da página, ou mesmo selecionando, copiando e colando as informações, conforme a Tabela 16:

Tabela 15 - Valores recalculados do Trabalho 1, através da planilha, utilizando os dados originais

NIST-1515 Apple Leaves												
Elemento	n	Valores recalculados do conjunto de dados 1									Certificado	
		X	±	DP	Diferença Absoluta	DPR (%)	Er (%)	Z	Z Horwitz	Zeta	Valor Certificado	Incerteza expandida
As	4	0,036	±	0,01	0,00	16,20	-6,58	-0,36	-3,20	-0,43	0,038	0,01
Br*	4	2,125	±	0,29	0,33	0,47	-	-	0,97	32,50	1,8	-
Ca (%)	4	1,548	±	0,05	0,02	2,26	1,41	1,43	0,08	0,61	1,526	0,02
Cl	4	495,250	±	15,34	-83,75	5,20	-14,46	-3,64	-2,45	-3,25	579	23,00
Co (ng g ⁻¹)*	5	0,107	±	0,00	0,02	2,80	-	-	0,01	5,67	0,09	-
Cr (ng g ⁻¹)*	5	0,846	±	0,10	0,55	2,46	-	-	0,00	26,23	0,3	-
Fe	4	81,725	±	1,54	-1,28	2,08	-1,54	-0,26	-0,17	-0,75	83	5,00
K (%)	4	1,620	±	0,05	0,01	0,77	0,62	0,50	0,04	0,80	1,61	0,02
La*	5	20,200	±	1,22	0,20	0,50	1,00	-	0,09	2,00	20	-
Mg (%)	3	0,247	±	0,02	-0,02	12,16	-8,98	-3,04	-0,45	-0,81	0,271	0,01
Mn	3	50,000	±	1,65	-4,00	2,20	-7,41	-1,33	-0,82	-3,64	54	3,00
Rb	4	9,775	±	0,34	-0,43	1,53	-4,17	-0,28	-0,35	-2,83	10,2	1,50
Sb (ng g ⁻¹)*	4	0,017	±	0,00	0,00	15,55	-	-	0,01	1,20	0,014	-
Sc (ng g ⁻¹)*	5	0,031	±	0,00	0,00	0,98	-	-	0,00	2,53	0,03	-
Se	3	0,055	±	0,00	0,00	24,85	10,00	0,56	4,13	0,37	0,05	0,01
Zn	3	12,733	±	1,03	0,23	1,57	1,87	0,78	0,15	1,17	12,50	0,30

n = número de determinações; X = valor médio; DP = desvio padrão; DPR(%) = desvio padrão relativo; Er (%) = erro relativo percentual; z = índice z; Z Horwitz = índice z utilizando equação de Horwitz, modificada por Thompson; Zeta = índice zeta

Fonte: autor da dissertação

Tabela 16 - Valores recalculados do conjunto de dados 1, recalculado pela da plataforma, utilizando os dados originais

Elemento	N	X	DP	DPR (%)	Er (%)	Z	Z Horwitz	Zeta	Valor Certificado	Incerteza Expandida
As	4	0,0355	0,0059	16,1972	-6,5789	-0,3571	-3,2010	-0,2760	0,03800	0,00700
Br *	4	2,1250	0,2861	0,4706	-	-	0,9736	-	1,80000	-
Ca	4	1,5475	0,0460	2,2617	1,4089	1,4333	0,3372	0,5646	1,52600	0,01500
Cl	4	495,2500	15,3358	5,1994	-14,4646	-3,6413	-2,4452	-2,4257	579,00000	23,00000
Co *	5	107,0000	2,2804	2,8037	-	-	45,4163	-	0,09000	-
Cr *	5	845,6000	96,3548	2,4598	-	-	5,5394	-	0,30000	-
Fe	4	81,7250	1,5352	2,0801	-1,5361	-0,2550	-0,1720	-0,2414	83,00000	5,00000
K	4	1,6200	0,0515	0,7716	0,6211	0,5000	0,1509	0,4240	1,61000	0,02000
La *	5	20,2000	1,2215	0,4950	-	-	0,0885	-	20,00000	-
Mg	3	0,2467	0,0249	12,1622	-8,9791	-3,0417	-1,8163	-0,7837	0,27100	0,00800
Mn	3	50,0000	1,6513	2,2000	-7,4074	-1,3333	-0,8191	-1,2518	54,00000	3,00000
Rb	4	9,7750	0,3419	1,5345	-4,1667	-0,2833	-0,3482	-0,2819	10,20000	1,50000
Sb *	4	17,2000	1,4526	15,5523	-	-	45,4175	-	0,01400	-
Sc *	5	30,7600	1,0557	0,9753	-	-	45,4102	-	0,03000	-
Se	3	0,0550	0,0037	24,8485	10,0000	0,5556	4,1322	0,3056	0,05000	0,00900
Zn	3	12,7333	1,0274	1,5707	1,8667	0,7778	0,1527	0,6472	12,50000	0,30000

* Tipo de Concentração Informada; N = Número de Determinações; X = Valor Médio; DP = Desvio Padrão; DA = Diferença Absoluta; DPR(%) = desvio padrão relativo; Er (%) = erro relativo percentual; En = erro normalizado; z = índice z; Z Horwitz = índice z utilizando equação de Horwitz, modificada por Thompson; Zeta = índice zeta

Fonte: autor da dissertação

Com a finalidade de comparar os resultados, os valores recalculados para o DPR%, foram expostos de forma conjunta, resultando em valores próximos, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 24.

Figura 24 - DPR% do conjunto de dados 1 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

Com a mesma finalidade também foram comparados os valores para o ER%, resultando também em valores muito próximos ou iguais, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 25.

Figura 25 - ER% do conjunto de dados 1 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

Fato bastante comum, ao analisar os cálculos realizados nos trabalhos do espaço amostral, é utilização de uma incerteza de grau superior de confiabilidade, em um teste que exige menor grau de incerteza. Naturalmente, isso leva a crer que os resultados são ainda mais confiáveis por utilizarem uma incerteza superior à abrangência necessária, porém esta não é uma análise correta, pois cada teste, como a diferença padronizada (Bode) e o erro normalizado, foram demonstrados com critérios matemáticos definidos para cada cenário.

Ao comparar os resultados, percebe-se valores muito próximos para DPR, entre os resultados do trabalho original e os valores recalculados, assim como para o Er, entretanto, este apresenta para alguns elementos, pequenas discrepâncias, demonstrando assim uma possibilidade de limitações do Er. O índice z de Horwitz, por outro lado, mesmo para elementos que não possuem incertezas, apresentou bons valores para o Br e La, por exemplo. O Trabalho original, cita para o conjunto de dados 1, que a falta reprodutibilidade e/ou exatidão de alguns resultados obtidos pode ser atribuída às baixas concentrações desses elementos, no caso da ordem de ng g^{-1} , dificultando a quantificação destes elementos, o que ressalta a necessidade da combinação com outros testes, como o índice z.

O índice z utilizando a equação de Horwitz modificada por Thompson, traz valores que dão outra possibilidade de análise, pois utiliza somente a concentração do elemento e o valor de referência certificado. Sendo assim, pode demonstrar um possível erro no processo de medição, uma vez que a única variável que se utiliza no cálculo, é a concentração do elemento, produzida por quem está realizando a medição, a outra variável é o valor certificado, que atende aos rigorosos padrões para receber o título de certificado.

Para o mesmo conjunto de dados, o respectivo trabalho adotou o critério definido por (BODE, 1996) para o cálculo da diferença padronizada, o mesmo definido como índice zeta, pela (ISO, 2015), como consta na Figura 9.

Figura 26 - Gráfico para diferença padronizada calculados no Trabalho 1

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

Embora o trabalho original apresente os valores para o índice z somente como gráfico de dispersão, é possível notar em comparação aos resultados da planilha que os valores são os mesmos, ou estão bem próximos. Para facilitar a visualização, a Figura 27 apresenta o gráfico de dispersão gerado pela planilha de cálculo utilizada neste trabalho.

Figura 27 - Gráfico de dispersão gerado pela planilha de cálculo

Fonte: autor da dissertação.

Com o gráfico de dispersão gerado, é possível verificar que os resultados são bem próximos, demonstrando que para este parâmetro as fórmulas estão organizadas de forma correta na planilha, e com um ótimo benefício que é a comparação imediata com os resultados de outros testes.

A partir da plataforma, uma série cálculos foram realizados utilizando os dados originais dos trabalhos disponibilizados, com o objetivo de comparar e validar as fórmulas desenvolvidas. A Tabela 17 apresenta dados individuais referente ao Certificado NIST – 1573a *Tomato Leaves*, para ao conjunto de dados 2, retirados de um dos trabalhos do espaço amostral, contendo concentração e incerteza.

Tabela 17 – Conjunto de dados 2 retirados de trabalho original que utiliza MRC (mg kg⁻¹)

Elemento	Dados individuais - NIST-1573a Tomato Leaves
Br	$1092 \pm 2^*$; 1089 ± 2 ; 1086 ± 2
Ca (%)	$5,53 \pm 0,23$; $5,5 \pm 0,23$; $4,5 \pm 0,1$; $4,77 \pm 0,12$
Cl (mg g ⁻¹)	$5,6 \pm 0,2$; $5,8 \pm 0,2$; $5,9 \pm 0,3$; $6,1 \pm 0,1$
Co	$0,57 \pm 0,02$; $0,63 \pm 0,01$; $0,59 \pm 0,01$
Cr	$1,96 \pm 0,03$; $2,00 \pm 0,03$; $2,21 \pm 0,02$; $1,95 \pm 0,04$
Cs (ng g ⁻¹)	$53,7 \pm 3,3$; $53,3 \pm 3,3$; $56,0 \pm 2,0$; $53,0 \pm 3,0$
Fe	366 ± 10 ; 361 ± 10 ; $3,58 \pm 3$; $3,46 \pm 4$
K (%)	$2,95 \pm 0,10$; $2,21 \pm 0,30$; $2,91 \pm 0,17$; $2,92 \pm 0,23$; $2,31 \pm 0,17$
La	$2,16 \pm 0,02$; $2,21 \pm 0,02$; $2,10 \pm 0,01$; $2,20 \pm 0,02$
Mg (%)	$1,11 \pm 0,05$; $1,26 \pm 0,05$; $1,10 \pm 0,08$; $1,14 \pm 0,05$
Mn	206 ± 2 ; 235 ± 5 ; 231 ± 6 ; 242 ± 6
Na	151 ± 12 ; 129 ± 15 ; 143 ± 10 ; 153 ± 14 ; 131 ± 7
Rb	$15,3 \pm 0,2$; $14,9 \pm 0,5$; $13,9 \pm 0,3$; $13,9 \pm 0,2$
Sb	$0,07 \pm 0,01$; $0,07 \pm 0,01$
Sc (ng g ⁻¹)	103 ± 1 ; 102 ± 1 ; 108 ± 1 ; 103 ± 1
Se	$0,109 \pm 0,020$; $0,055 \pm 0,015$
Zn	$30,8 \pm 0,6$; $30,8 \pm 0,6$; $29,3 \pm 0,2$; $31,1 \pm 0,2$

* Incerteza calculada considerando erros nas medições das taxas de contagens da amostra e do padrão

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

A Tabela 18 apresenta os resultados obtidos no trabalho original, referente ao conjunto de dados 2, retirado do espaço amostral.

Tabela 18 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 2

Elemento	Conjunto de dados 2 - NIST-1573a Tomato Leaves				Valor do certificado (NIST, 1995)
	n	X $\pm$ DP	DPR (%)	Er (%)	
Br	3	1089 $\pm$ 2	0,2	-	(1300) *
Ca (%)	4	5,08 $\pm$ 0,18	3,5	0,6	5,05 $\pm$ 0,09
Cl (mg g ⁻¹)	4	5850 $\pm$ 210	3,6	-	(6600)
Co	3	0,60 $\pm$ 0,01	1,7	5,3	0,57 $\pm$ 0,02
Cr	4	2,03 $\pm$ 0,03	1,5	2,0	1,99 $\pm$ 0,06
Cs	4	0,054 $\pm$ 0,003	5,5	-	(0,053)
Fe	4	358 $\pm$ 8	2,2	2,7	368 $\pm$ 7
K (%)	5	2,66 $\pm$ 0,21	7,9	1,5	2,70 $\pm$ 0,05
La	4	2,16 $\pm$ 0,02	1,0	-	(2,3)
Mg (%)	4	1,15 $\pm$ 0,06	5,2	-	(1,2)
Mn	4	229 $\pm$ 5	2,2	4,1	246 $\pm$ 8
Na	5	141 $\pm$ 12	8,5	3,7	136 $\pm$ 4
Rb	4	14,5 $\pm$ 0,3	2,1	2,6	14,89 $\pm$ 0,27
Sb	2	0,072 $\pm$ 0,011	15	14	0,063 $\pm$ 0,06
Sc	4	0,104 $\pm$ 0,001	1,0	-	(0,1)
Se	2	0,093 $\pm$ 0,018	19,4	72	0,054 $\pm$ 0,003
Zn	4	30,5 $\pm$ 0,5	1,6	1,3	30,9 $\pm$ 0,7

n = número de determinações; X = valor médio; DP = desvio padrão; DPR = desvio padrão relativo; Er = erro relativo; * valores informativos são apresentados entre parênteses.

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

Através da plataforma desenvolvida, a partir dos dados originais, os cálculos foram refeitos com a finalidade de comparação e validação dos valores, utilizando o conjunto de dados 2, conforme descrito na Tabela 19.

Tabela 19 - Valores recalculados do conjunto de dados 2, através da plataforma

Elemento	N	X	DP	DPR (%)	Er (%)	Z	Z Horwitz	Zeta	Valor Certificado	Incerteza Expandida
Br *	3	1089,0000	2,4495	0,2249	-	-	-3,1543	-	1300,00000	-
Ca	4	5,0750	0,4504	8,8741	0,4950	0,2778	1,1097	0,1300	5,05000	0,09000
Cl *	4	5850,0000	180,2776	3,0817	-	-	-2,6881	-	6600,00000	-
Co	3	0,5967	0,0249	4,1806	4,6784	1,3333	0,2350	1,1094	0,57000	0,02000
Cr	4	2,0300	0,1056	5,2017	2,0101	0,6667	0,1246	0,5963	1,99000	0,06000
Cs *	4	54,0000	1,1811	2,1872	-	-	10,3485	-	0,05300	-
Fe	4	357,7500	7,3612	2,0576	-2,7853	-1,4643	-0,3945	-1,0541	368,00000	7,00000
K	5	2,6600	0,3284	12,3455	-1,4815	-0,8000	-0,3960	-0,1997	2,70000	0,05000
La *	4	2,1675	0,0432	1,9944	-	-	-0,3903	-	2,30000	-
Mg *	4	1,1525	0,0638	5,5346	-	-	-0,9570	-	1,20000	-
Mn	4	228,5000	13,5739	5,9404	-7,1138	-2,1875	-0,9857	-1,8809	246,00000	8,00000
Na	5	141,4000	9,9116	7,0096	3,9706	1,3500	0,4573	0,4401	136,00000	4,00000
Rb	4	14,5000	0,6164	4,2513	-2,6192	-1,4444	-0,2286	-0,9663	14,89000	0,27000
Sb	2	0,0700	0,0000	0,0000	11,1111	0,1167	4,5455	0,1151	0,06300	0,06000
Sc *	4	104,0000	2,3452	2,2550	-	-	-	-	0,10000	-
Se	2	0,0820	0,0270	32,9268	51,8519	9,3333	15,5211	1,5770	0,05400	0,00300
Zn	4	30,5000	0,7036	2,3068	-1,2945	-0,5714	-0,1247	-0,4961	30,90000	0,70000

* Tipo de Concentração Informada; N = Número de Determinações; X = Valor Médio; DPR(%) = Desvio Padrão Relativo; Er(%) = Erro Relativo Percentual; En = Erro Normalizado; Z = Índice Z; Z Horwitz = Índice Z Aplicando Fator Horwitz;

Fonte: autor da dissertação

Os valores recalculados para o DPR%, foram expostos de forma conjunta, resultando em valores próximos, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 28.

Figura 28 - DPR% do conjunto de dados 2 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

Com a mesma finalidade, foram comparados os valores para o ER%, resultando também em valores muito próximos ou iguais, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 29.

Figura 29 - ER% do conjunto de dados 2 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

Para facilitar a visualização e comparação entre os índices calculados no trabalho original e os realizados na plataforma, foram gerados gráficos de dispersão, como na Figura 30. O gráfico do trabalho original encontra-se em

destaque na região retangular. Para os valores apresentados pelos cálculos da plataforma, é possível comprar os índices e obter alguns resultados que não foram calculados no trabalho original, pois a concentração informada para alguns elementos no Certificado NIST – 1573a *Tomato Leaves*, não possuem incerteza, ou seja, são valores informativos.

Figura 30 – Índices recalculados e índice z do conjunto de dados 2

Fonte: autor da dissertação

Ao utilizar uma combinação entre os índices z, zeta e o índice z utilizando a equação de Horwitz modificada por Thompson, foi possível obter índices dentro dos parâmetros, mesmo para valores informativos, pois o último critério leva em consideração apenas a concentração do elemento. Dentro da plataforma, tais valores futuramente, com uma massa de dados adequada, pode auxiliar no uso de valores informativos indicados nos certificados.

A Tabela 20 apresenta dados individuais referente ao Certificado NIST – INCT-TL-1 *Tea Leaves*, referente ao conjunto de dados 3, retirados de um dos trabalhos do espaço amostral, contendo concentração e incerteza.

Tabela 20 – Conjunto de dados 3 retirados de trabalho que utiliza MRC (mg kg⁻¹)

Elemento	Dados individuais - Tea Leaves (INCT-TL-1)
As (ng g ⁻¹)	99,4 ± 9,4*
Br	12,91 ± 0,04 ; 12,60 ± 0,07
Ca (%)	0,547 ± 0,002 ; 0,578 ± 0,005
Co (ng g ⁻¹)	410 ± 6 ; 392 ± 8
Cr	1,87 ± 0,03 ; 1,92 ± 0,03
Cs	4,06 ± 0,04 ; 3,73 ± 0,03
Fe	506 ± 4 ; 509 ± 5
K (%)	1,74 ± 0,01 ; 1,73 ± 0,01
La	0,93 ± 0,01 ; 0,99 ± 0,01
Na	24,5 ± 0,3 ; 21,1 ± 0,1
Rb	81,5 ± 0,9 ; 78,0 ± 1,0
Sb (ng g ⁻¹)	90 ± 2 ; 65 ± 3
Sc (ng g ⁻¹)	266 ± 2 ; 259 ± 1
Se	0,083 ± 0,018 ; 0,055 ± 0,006
Zn	36,8 ± 0,4 ; 34,0 ± 0,3

* Incerteza calculada considerando erros nas medições das taxas de contagens da amostra e do padrão

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

A Tabela 21 apresenta os resultados obtidos no trabalho original, referente ao conjunto de dados 3, retirado do espaço amostral.

Tabela 21 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 3

Elemento	Conjunto de dados 3 - INCT-TL-1 Tea Leaves				Valor do certificado (INCT-TL-1, 2002)
	n	X $\pm$ DP	DPR (%)	Er (%)	
As (ng g ⁻¹)	1	99,4 $\pm$ 9,5 *	-	6,2	106 $\pm$ 21
Br	2	12,8 $\pm$ 0,1	0,8	4,1	12,3 $\pm$ 1,0
Ca (%)	2	0,55 $\pm$ 0,01	1,8	5,5	0,582 $\pm$ 0,052
Co (ng g ⁻¹)	2	401 $\pm$ 7	1,7	3,6	387 $\pm$ 42
Cr	2	1,90 $\pm$ 0,03	1,6	0,5	1,91 $\pm$ 0,22
Cs	2	3,89 $\pm$ 0,04	1,0	7,8	3,61 $\pm$ 0,37
Fe	2	508 $\pm$ 5	1,0	-	(432) **
K (%)	3	1,73 $\pm$ 0,01	0,6	1,8	1,70 $\pm$ 0,12
La	2	0,96 $\pm$ 0,01	1,0	4,0	1,00 $\pm$ 0,07
Na	2	22,8 $\pm$ 0,2	0,9	7,7	24,7 $\pm$ 3,2
Rb	2	79,8 $\pm$ 0,9	1,1	2,1	81,5 $\pm$ 6,5
Sb (ng g ⁻¹)	2	77,8 $\pm$ 2,7	3,5	-	(50)
Sc	2	263 $\pm$ 2	0,8	1,1	266 $\pm$ 24
Se	2	0,069 $\pm$ 0,013	18,8	-	(0,076)
Zn	2	35,4 $\pm$ 0,4	1,1	2,0	34,7 $\pm$ 2,7

n = número de determinações; X = valor médio; DP = desvio padrão; DPR = desvio padrão relativo; Er = erro relativo; * incerteza calculada considerando erros nas medições das taxas de contagens da amostra e padrão; ** valores informativos são apresentados entre parênteses.

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

A partir dos dados originais os cálculos foram refeitos utilizando a plataforma com a finalidade de comparação e validação dos valores, utilizando o conjunto de dados 3, de acordo com a Tabela 22.

Tabela 22 - Valores recalculados do conjunto de dados 3, através da plataforma

Elemento	N	X	DP	DPR (%)	Er (%)	Z	Z Horwitz	Zeta	Valor Certificado	Incerteza Expandida
As	1	0,0994	0,0000	0,0000	-6,2264	-0,3143	-3,0181	-0,2869	0,10600	0,02100
Br	2	12,7550	0,1550	1,2152	3,6992	0,4550	0,2974	0,4543	12,30000	1,00000
Ca	2	0,5625	0,0155	2,7556	-3,3505	-0,3750	-0,7226	-0,3742	0,58200	0,05200
Co	2	0,4010	0,0090	2,2444	3,6176	0,3333	0,1729	0,3288	0,38700	0,04200
Cr	2	1,8950	0,0250	1,3193	-0,7853	-0,0682	-0,0495	-0,0676	1,91000	0,22000
Cs	2	3,8950	0,1650	4,2362	7,8947	0,7703	0,5103	0,7668	3,61000	0,37000
Fe *	2	507,5000	1,5000	0,2956	17,4769	-	2,1590	-	432,00000	-
K	3	1,6933	0,0591	3,4882	-0,3922	-0,0556	-0,0969	-0,0552	1,70000	0,12000
La	2	0,9600	0,0300	3,1250	-4,0000	-0,5714	-0,2353	-0,5657	1,00000	0,07000
Na	2	22,8000	1,7000	7,4561	-7,6923	-0,5938	-0,7582	-0,5926	24,70000	3,20000
Rb	2	79,7500	1,7500	2,1944	-2,1472	-0,2692	-0,2410	-0,2664	81,50000	6,50000
Sb *	2	0,0775	0,0125	16,1290	55,0000	-	16,1290	-	0,05000	-
Sc	2	0,2625	0,0035	1,3333	-1,3158	-0,1458	-0,0620	-0,1455	0,26600	0,02400
Se *	2	0,0690	0,0140	20,2899	-9,2105	-	-4,6113	-	0,07600	-
Zn	2	35,4000	1,4000	3,9548	2,0173	0,2593	0,1922	0,2571	34,70000	2,70000

* Tipo de Concentração Informada para o certificado; N = Número de Determinações; X = Valor Médio; DP = Desvio Padrão; DPR(%) = Desvio Padrão Relativo; Er(%) = Erro Relativo Percentual; Z = Índice Z; Z Horwitz = Índice Z Aplicando a equação de Horwitz; Zeta = Índice Zeta

Fonte: autor da dissertação

Os valores recalculados para o DPR%, no conjunto de dados 3, foram expostos de forma conjunta, resultando novamente em valores próximos, e valores com algumas discrepâncias para alguns elementos, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 31. A diferença constatada nos valores foi em razão de valores distintos para o desvio padrão, o que pode ocorrer dependendo se o desvio padrão toma todos os dados como parâmetro ou apenas uma amostra dos dados, no momento de realização dos cálculos. Este trabalho adota o desvio padrão populacional, ou seja, todos os dados disponíveis.

Figura 31 - DPR% do conjunto de dados 3 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

Com a mesma finalidade também foram comparados os valores para o ER% para o conjunto de dados 3, resultando também em valores próximos e algumas diferenças para alguns elementos, com alguns valores menores, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 32.

Figura 32 - ER% do conjunto de dados 3 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

A Figura 33 apresenta os índices calculados no trabalho original e os realizados na plataforma, para o conjunto de dados 3, na forma de gráficos de dispersão. O gráfico do trabalho original encontra-se em destaque na região retangular. Para os valores apresentados na plataforma, novamente obteve-se alguns valores que não foram calculados no trabalho original, pois a concentração informada para alguns elementos no Certificado NIST – INCT-TL-1 Tea Leaves, não possuem incerteza.

Figura 33 – Índices recalculados e índice z do conjunto de dados 3

Fonte: autor da dissertação

A Tabela 23 apresenta dados individuais referente ao Certificado IAEA *Soil-7*, referente ao conjunto de dados 4, retirados de um dos trabalhos do espaço amostral, contendo concentração e incerteza.

Tabela 23 – Conjunto de dados 4 retirados de trabalho que utiliza MRC (mg kg⁻¹)

Elemento	Dados individuais -IAEA-SOIL-7
Ca (%)	16,2 ± 0,3* ; 16,6 ± 0,3 ; 16,7 ± 0,1
Ce	63,3 ± 0,5 ; 63,6 ± 0,5 ; 62,5 ± 0,5 ; 64,0 ± 0,5
Eu	1,03 ± 0,03 ; 0,98 ± 0,03 ; 0,94 ± 0,03 ; 1,04 ± 0,04
Fe (%)	2,52 ± 0,03 ; 2,45 ± 0,04 ; 2,56 ± 0,07 ; 2,56 ± 0,03
Hf	4,89 ± 0,04 ; 5,09 ± 0,05 ; 4,83 ± 0,05 ; 5,18 ± 0,05
La	27,9 ± 0,8 ; 26,5 ± 0,1 ; 24,5 ± 0,2 ; 26,3 ± 0,1
Lu	0,347 ± 0,004 ; 0,352 ± 0,003 ; 0,321 ± 0,005 ; 0,382 ± 0,009
Nd	25,4 ± 1,8 ; 27,8 ± 1,7 ; 29,9 ± 3,8 ; 30,1 ± 3,1
Rb	50,4 ± 1,4; 46,6 ± 1,5 ; 51,3 ± 1,3 ; 50,3 ± 1,3
Sc	8,8 ± 0,1 ; 8,4 ± 0,1 ; 7,8 ± 0,1 ; 8,7 ± 0,1
Sm	5,22 ± 0,04 ; 4,78 ± 0,01 ; 4,50 ± 0,02 ; 4,88 ± 0,01
Tb	0,64 ± 0,03 ; 0,65 ± 0,04 ; 0,62 ± 0,03 ; 0,67 ± 0,04
Th	7,82 ± 0,05 ; 7,91 ± 0,07 ; 8,36 ± 0,06 ; 8,27 ± 0,07
U	2,19 ± 0,06 ; 2,46 ± 0,06 ; 2,01 ± 0,12
Yb	2,33 ± 0,09 ; 2,23 ± 0,02 ; 2,00 ± 0,03 ; 2,38 ± 0,05
Zn	104 ± 1; 104 ± 2; 109 ± 2 ; 100 ± 1

* Incerteza calculada considerando erros nas medições das taxas de contagens da amostra e do padrão

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

A Tabela 24 apresenta os resultados obtidos no trabalho original, referente ao conjunto de dados 4, retirado do espaço amostral.

Tabela 24 – Resultados do trabalho original para o conjunto de dados 4

Elemento	Conjunto de dados 4 - IAEA Soil-7				Valor do certificado (IAEA, 2000)
	n	X $\pm$ DP	DPR (%)	Er (%)	
Ca (%)	4	17,1 $\pm$ 0,6	3,5	-	16,3 (15,7 – 17,4)*
Ce	4	63,4 $\pm$ 0,5	0,8	3,9	61 (50 – 63)
Eu	4	1,00 $\pm$ 0,03	3,0	0,0	1,0 (0,9 – 1,3)
Fe (%)	4	2,52 $\pm$ 0,04	1,6	-	2,57 (2,52 – 2,63)*
Hf	4	5,00 $\pm$ 0,05	1,0	2,0	5,1 (4,8 – 5,5)
La	4	26,3 $\pm$ 0,4	1,5	6,1	28 (27 – 29)
Lu	4	0,35 $\pm$ 0,01	2,9	-	0,3 (0,1 – 0,4)*
Nd	4	28,3 $\pm$ 2,6	9,2	5,7	30 (22 – 34)
Rb	4	49,7 $\pm$ 1,4	2,8	2,5	51 (47 – 56)
Sc	4	8,43 $\pm$ 0,07	0,8	1,6	8,3 (6,9 – 9,0)
Sm	4	4,85 $\pm$ 0,02	0,4	4,9	5,1 (4,8 – 5,5)
Tb	4	0,64 $\pm$ 0,04	6,2	6,6	0,6 (0,5 – 0,9)
Th	4	8,09 $\pm$ 0,33	4,1	1,3	8,2 (6,5 – 8,7)
U	4	2,13 $\pm$ 0,09	4,2	18	2,6 (2,2 – 3,3)
Yb	4	2,18 $\pm$ 0,04	1,8	9,2	2,4 (1,9 – 2,6)
Zn	4	104 $\pm$ 2	1,9	0,3	104 (101 – 113)

n = número de determinações; X = valor médio; DP = desvio padrão; DPR = desvio padrão relativo; Er = erro relativo; * indicam valores informativos.

Fonte: adaptado de trabalho do espaço amostral

A partir dos dados originais os cálculos foram refeitos utilizando a plataforma com a finalidade de comparação e validação dos valores, utilizando o conjunto de dados 4, de acordo com a Tabela 25.

Tabela 25 - Valores recalculados do conjunto de dados 4, através da plataforma, utilizando os dados originais

Elemento	N	X	DP	DPR (%)	Er (%)	Z	Z Horwitz	Zeta	Valor Certificado	Incerteza Expandida
Ca *	3	16,5000	0,2160	1,3092	1,2270	0,1176	0,4924	0,1166	16,30000	1,70000
Ce	4	63,3500	0,5500	0,8682	3,8525	0,1808	0,3936	0,1806	61,00000	13,00000
Eu	4	0,9975	0,0402	4,0335	-0,2500	-0,0063	-0,0142	-0,0062	1,00000	0,40000
Fe *	4	2,5225	0,0449	1,7812	-1,8482	-0,4318	-0,4919	-0,4028	2,57000	0,11000
Hf	4	4,9975	0,1427	2,8558	-2,0098	-0,1464	-0,1485	-0,1461	5,10000	0,70000
La	4	26,3000	1,2083	4,5943	-6,0714	-0,8500	-0,6009	-0,8406	28,00000	2,00000
Lu *	4	0,3505	0,0217	6,1804	16,8333	0,1683	0,6993	0,1683	0,30000	0,30000
Nd	4	28,3000	1,9013	6,7184	-5,6667	-0,1417	-0,5646	-0,1385	30,00000	12,00000
Rb	4	49,6500	1,8035	3,6324	-2,6471	-0,1500	-0,2781	-0,1483	51,00000	9,00000
Sc	4	8,4250	0,3897	4,6257	1,5060	0,0595	0,1162	0,0595	8,30000	2,10000
Sm	4	4,8450	0,2574	5,3135	-5,0000	-0,3643	-0,3793	-0,3641	5,10000	0,70000
Tb	4	0,6450	0,0180	2,7950	7,5000	0,1125	0,3712	0,1121	0,60000	0,40000
Th	4	8,0900	0,2295	2,8363	-1,3415	-0,0500	-0,1058	-0,0500	8,20000	2,20000
U	3	2,2200	0,1849	8,3303	-14,6154	-0,3455	-1,0968	-0,3445	2,60000	1,10000
Yb	4	2,2350	0,1460	6,5338	-6,8750	-0,2357	-0,4735	-0,2352	2,40000	0,70000
Zn	4	104,2500	3,1918	3,0617	0,2404	0,0208	0,0274	0,0207	104,00000	12,00000

* Tipo de Concentração Informada; N = Número de Determinações; X = Valor Médio; Y = Incerteza Padrão Média; DP = Desvio Padrão; DA = Diferença Absoluta; DPR(%) = Desvio Padrão Relativo; Er(%) = Erro Relativo Percentual; En = Erro Normalizado; Z = Índice Z; Z Horwitz = Índice Z Aplicando Fator Horwitz; Zeta = Índice Zeta

Fonte: autor da dissertação

Os valores recalculados para o DPR%, resultando em alguns valores próximos, e a maior parte com uma discrepância nos dados, ao se comparar o trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 34. A diferença constatada novamente, foi identificada no cálculo para obtenção do desvio padrão, como ocorreu para o conjunto de dados 3.

Figura 34 - DPR% do conjunto de dados 4 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

Com a mesma finalidade, foram comparados os valores para o ER%, resultando em valores próximos ou iguais, em comparação ao trabalho original e os cálculos realizados pela plataforma, como segue na Figura 35.

Figura 35 - DPR% do conjunto de dados 4 e recalculados pela da plataforma

Fonte: autor da dissertação

A Figura 36 apresenta os índices calculados no trabalho original e os realizados na plataforma, para o conjunto de dados 4, na forma de gráficos de dispersão. O gráfico do trabalho original encontra-se em destaque na região retangular. Para os valores apresentados na plataforma, novamente obteve-se alguns valores que não foram calculados no trabalho original, pois a concentração informada para alguns elementos no Certificado IAEA Soil-7, não possuem incerteza.

Figura 36 – Índices recalculados e índice z do conjunto de dados 4

Fonte: autor da dissertação

A forma como os MRCs é utilizada nos processos de determinação de exatidão no LAN são diversas. Existe uma forma padrão de utilização, inclusive em decorrência das informações que estão disponíveis nos certificados, entretanto possuem variações no seu uso. A determinação do desvio padrão em uma análise, por exemplo, pode influenciar no resultado, se o desvio padrão é um desvio populacional ou se é um desvio amostral. Essas diferenças foram encontradas em alguns dos trabalhos analisados, o que provocam algumas diferenças de resultados. A plataforma, assim como a planilha desenvolvida, mediante os cálculos realizados e comparações com os trabalhos desenvolvidos no LAN, demonstrou

que as fórmulas da planilha e códigos implementados na plataforma, mesmo com a massa de dados não sendo a ideal, apresentou bons valores para a validação.

Quanto maior o número de dados, mais cálculos são realizados e maior a chance desses cálculos serem os mais precisos para a finalidade que eles são destinados, desta forma a plataforma ao ser utilizada no LAN e alimentada com os dados disponibilizados pelos pesquisadores, pode alavancar e melhorar de forma exponencial o uso da plataforma, assim como a precisão dos seus resultados.

5.4 Protocolo sugerido para os trabalhos produzidos no LAN

Tal protocolo tem como finalidade realizar sugestões para o CERPq, baseado nos estudos realizados nas dissertações e teses deste centro.

Sugere-se que a plataforma online <<http://slan.pythonanywhere.com//>> seja utilizada com a finalidade de comparação e verificação da exatidão nos processos de medição no LAN, para assim unificar e padronizar as avaliações de resultados obtidos.

Sugere-se que os trabalhos desenvolvidos no LAN possuam um capítulo denominado “Tratamento de dados”, no qual deve-se descrever os meios pelos quais a análise dos dados foi realizada, incluindo a descrição das fórmulas.

Sugere-se que os trabalhos desenvolvidos no LAN possuam um ambiente comum para disponibilização dos dados individuais, para uso futuro dos dados, para estudos.

6 CONCLUSÕES

O LAN possui um sistema de gestão da qualidade, com uma série de procedimentos padronizados que devem ser adotados em diversos contextos, incluindo os processos de avaliação da exatidão com uso de MRC em INAA, porém os trabalhos, de forma geral, variam, especialmente de acordo com cada orientador, há um padrão, especialmente na forma de exposição dos resultados, porém não há padronização definida para a realização dos cálculos. O LAN não possui uma ferramenta unificada, como um software ou sistema, para a realização dos cálculos para a verificação da exatidão, que proporciona menor risco e incerteza para o processo, como a utilização de planilhas diversas por cada pesquisador.

Foi desenvolvida uma planilha de cálculos, assim como a plataforma *online* utilizando a linguagem Python para avaliação do cálculo do índice z no LAN. Entretanto, surgiram fatores dificultadores deste estudo, como a ausência da descrição clara dos métodos utilizados e a falta de acesso aos dados originais. Sem os dados não é possível replicar estudos, o que remete de forma imediata ao *e-Science*, termo utilizado para definir a potencialização da ciência através da tecnologia. Tal abordagem vai contra a transparência dos dados, assim como pode retardar soluções à sociedade, uma vez que o compartilhamento de dados pode melhorar o desenvolvimento de estudos. Como recomendação tem-se a prática proativa de compartilhamento de dados de pesquisa entre pesquisadores da mesma instituição – ou mesmo de instituições distintas – para fins de uso mais eficiente de recursos e da busca conjunta de compreensão de realidades e do desenvolvimento de soluções para as demandas da sociedade.

A análise dos resultados aqui obtidos e a sua comparação com o referencial teórico existente possibilitou as seguintes conclusões:

1. O índice z pode ser utilizado com eficiência na verificação da qualidade dos resultados das análises INAA com MRs e MRCs.
2. O índice z e a sua variação resultante da equação de Horwitz modificada por Thompson são adequados para análise de resultados.
3. A combinação do índice z com o índice zeta (o mesmo definido por (BODE, 1996)) é eficiente para identificar e reduzir as falhas no processo de medição.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Materiais de referência – guia para caracterização e avaliação da homogeneidade e estabilidade***. 1 ed. Rio de Janeiro: ABNT, 2020 (ABNT ISSO GUIA 30:2020).

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Materiais de referência - boas práticas no uso de materiais de referência***. 1 ed. Rio de Janeiro: ABNT, 2019 (ABNT ISO GUIA 33:2019).

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Avaliação da conformidade — Requisitos gerais para ensaios de proficiência***. Rio de Janeiro: ABNT, 2017a (ABNT NBR ISO/IEC 17043).

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Materiais de referência - conteúdo de certificados, rótulos e documentação associada***. 3 ed. Rio de Janeiro: ABNT, 2017b (ABNT ISO GUIA 31:2017).

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Requisitos gerais para a competência de produtores de material de referência***. 1 ed. Rio de Janeiro: ABNT, 2017c (ABNT NBR ISO 17034:2017).

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Requisitos gerais para a competência de laboratórios de ensaio e calibração***. Rio de Janeiro: ABNT, 2017d (NBR ISO/IEC 17025:2017).

ABNT, ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. ***Materiais de referência - termos e definições selecionados***. 1 ed. Rio de Janeiro: ABNT, 2016 (ABNT ISO GUIA 30:2016).

AMBROGI, J. B. ***Avaliação dos teores de elementos essenciais e tóxicos em alimentos da dieta da população de São Paulo, segundo a POF 2008-2009***. 2016. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2016.tde-26092016-145056>>. Acesso em: 12 out. 2020.

AMORIM, E. P. ***Avaliação da concentração de metais e outros elementos de interesse em amostras de sedimentos dos estuários de Santos/São Vicente e Cananéia, Estado de São Paulo, Brasil***. 2012. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2012.tde-16012013-142056>>. Acesso em: 12 out. 2020.

AVEGLIANO, R. P. ***Estudo de dieta total no Estado de São Paulo: estimativa de ingestão dietética de elementos tóxicos (Arsênio e Cádmio) e essenciais (Cálcio, Cromo, Ferro, Selênio, Sódio, Potássio e Zinco)***. 2009. Tese (Doutorado

em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2009.tde-16112009-143136>>. Acesso em: 12 out. 2020.

BACCAN, N.; ANDRADE, J. C.; GODINHO, O.; BARONE, J. S. **Química analítica quantitativa elementar**. 3. ed. rev. ampl. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. BCR, COMMUNITY BUREAU OF REFERENCE. **Certificate of analysis, BCR 482, Trace elements in lichen**, 1995.

BODE, P. **Instrumental organizational aspects of a neutron activation analysis laboratory**. 1996. Delft University of Technology, Delft, The Netherlands.

BOLFARINE, H.; SANDOVAL, M. C. **Introdução à inferência estatística**. 3. ed. Rio de Janeiro: SBM, 2010.

BORTOLI, M. C. **Avaliação dos níveis sanguíneos do hormônio tireoidiano ativo (T3) e do estado nutricional relativo ao selênio de mulheres residentes em área de exposição ao mercúrio**. 2009. Tese (Doutorado em Nutrição Experimental) - Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.9.2010.tde-26032010-084201>>. Acesso em: 12 out. 2020.

BOSTELMANN, E. **Avaliação da concentração de metais em amostras de sedimentos do Reservatório Billings, Braço Rio Grande, São Paulo, Brasil**. 2006. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2006.tde-22052007-165423>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CARVALHO, P. R. **Estudo comparativo dos algoritmos hierárquicos de análise de agrupamentos em resultados experimentais**. 2018. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-31102018-112210>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CASTRO, F. J. V. **Disponibilidade dos metais Cd e Pb e do metaloide As na bacia hidrográfica do Rio Ribeira do Iguape e afluentes: uma avaliação da contaminação ambiental**. 2012. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2012.tde-08032013-140828>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CASTRO, L. P. **Radionuclídeos naturais e ^{137}Cs em cogumelos comestíveis comercializados em São Paulo - Brasil**. 2008. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008. Disponível em:

<<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2008.tde-21092009-104055>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CASTRO, L. **Preparo e caracterização de um material de referência de rim bovino**. 2017. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2018.tde-09022018-095407>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CAVALCANTE, C. Q. **Estudo sobre a determinação de paládio em amostras biológicas pelo método de análise por ativação com nêutrons**. 2007. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2007.tde-25062007-154921>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CHIOZZINI, V. G. **Estudo da abundância, proveniência e padrões de distribuição elementar em sedimentos de superfície e perfis sedimentares no Complexo Estuarino-Lagunar de Cananéia-Iguape, São Paulo - Brasil, com ênfase aos elementos terras raras e seu significado ambiental**. 2017. Tese (Doutorado em Oceanografia Química) - Instituto Oceanográfico, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.21.2018.tde-19032018-153950>>. Acesso em: 12 out. 2020.

COUTINHO, S. N. **Estudo de bioacumulação de metais tóxicos e elementos traço em amostras de macrófitas aquáticas flutuantes do Reservatório Guarapiranga, São Paulo - SP, Brasil**. 2018. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-13042018-162720>>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CURCHO, M. R. S. M. **Avaliação de micro e macroelementos, elementos tóxicos (Cd, Hg e Pb) e ácidos graxos, em peixes disponíveis comercialmente para consumo em Cananéia e Cubatão, Estado de São Paulo**. 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2009.tde-16092009-143806>>. Acesso em: 12 out. 2020.

CURRIE, L.A. Detection and quantification limits: origins and historical overview. *Anal. Chim. Acta*, v. 391, p. 127-134, 1999.

DANIELE, A. P. **Determinação de elementos essenciais em vinhos por Análise por Ativação com Nêutrons**. 2016. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2017.tde-16022017-111238>>. Acesso em: 12 out. 2020.

FARIAS, L. A. **Avaliação do conteúdo de Mercúrio, Metilmercúrio e outros elementos de interesse em peixes e em amostras de cabelos e dietas de pré-escolares da Região Amazônica**. 2006. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2006.tde-24052007-161122>>. Acesso em: 12 out. 2020.

FERREIRA, A. B. **Avaliação do risco humano a poluentes atmosféricos por meio de biomonitoramento passivo: um estudo de caso em São Mateus do Sul, Paraná**. 2009. Tese (Doutorado em Patologia) - Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.5.2009.tde-25022010-152944>>. Acesso em: 12 out. 2020.

FRANCISCONI, L. S. **Determinação dos constituintes inorgânicos em plantas medicinais e seus extratos**. 2014. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2014.tde-13062014-091006>>. Acesso em: 12 out. 2020.

FRANKLIN, R. L. **Determinação de mercúrio total e orgânico e avaliação dos processos de metilação e desmetilação em sedimentos do reservatório Rio Grande, Estado de São Paulo**. 2010. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2010.tde-29082011-155133>>. Acesso em: 12 out. 2020.

FRAZÃO, S. V. **Estudo da determinação de elementos traço em cabelos humanos pelo método de análise por ativação com nêutrons**. 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2009.tde-02062009-133415>>. Acesso em: 12 out. 2020.

FUGA, A. **Uso de líquens epifíticos no biomonitoramento da poluição atmosférica da região metropolitana de São Paulo**. 2006. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2006.tde-15052012-133838>>. Acesso em: 12 out. 2020.

GONÇALVES, R. D. M. R. **Avaliação de micronutrientes e sua influência no metabolismo secundário de *Bidens pilosa* e *Salvia officinalis*, plantas usadas no tratamento de diabetes**. 2015. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2015. Disponível em:

<<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2016.tde-14042016-155831>>. Acesso em: 12 out. 2020.

GOUVÊA, P. F. M. ***Avaliação clínica em pacientes portadores de Osteoartrite, tratados com a Lama Negra de Peruíbe, caracterização química, radiológica e estabelecimento de protocolos de boas práticas para a obtenção e uso deste pelóide***. 2018. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2018.tde-10052018-111413>>. Acesso em: 12 out. 2020.

GUIMARÃES, G. M. ***Avaliação da concentração de metais e elementos traço em amostras de sedimento do reservatório Guarapiranga, Bacia do Alto Tietê, São Paulo, Brasil***. 2011. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2011.tde-26082011-101237>>. Acesso em: 12 out. 2020.

HAZENFRATZ-MARKS, R. ***Nêutrons, radiação e arqueologia: estudo de caso multianalítico de cerâmicas da tradição borda incisa na Amazônia Central***. 2014. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2014.tde-02072014-140014>>. Acesso em: 12 out. 2020.

IAEA, INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, ***Reference Sheet. Reference Material IAE A – 336 Trace and Minor Elements In Lichen, 1999.***

IAEA, INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Reference Sheet. Reference material IAEA-Soil-7, 2000.***

IAEA, INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Reference Sheet. Reference material IAEA-407, Trace Elements And Methylmercury In Fish Tissue, 2003.***

IAEA, INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. ***Reference Sheet. Reference Material IAEA-085 Methylmercury, Total Mercury and Other Trace Elements In Human Hair (Methylmercury Spiked), 2000.***

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, ***Orientações gerais sobre os requisitos da ABNT NBR ISO 17034***, rev. 02, Rio de Janeiro: INMETRO, 2018 (DOQ-CGCRE-086).

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, ***Vocabulário Internacional de Metrologia - Conceitos Fundamentais e Gerais e Termos Associados***, Rio de Janeiro: INMETRO, 2012 (VIM3 - JCGM 200:2012).

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Orientação sobre validação de métodos de ensaios químicos**, revisão 07, Rio de Janeiro: INMETRO, 2018a (DOQ-CGCRE-008). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torganismo=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Orientações sobre análise crítica da documentação associada aos materiais de referência adquiridos**, rev. 01, Rio de Janeiro: INMETRO, 2018b (DOQ-CGCRE-033). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torganismo=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Orientação para a acreditação de laboratórios, produtores de materiais de referência e provedores de ensaios de proficiência**, rev. 18, Rio de Janeiro: INMETRO, 2020 (DOQ-CGCRE-001). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torganismo=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Orientações para a seleção e uso de materiais de referência com foco em ensaios químicos**, rev. 07, Rio de Janeiro: INMETRO, 2019 (DOQ-CGCRE-016). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torganismo=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Definições de termos utilizados nos documentos relacionados à acreditação de laboratórios, produtores de materiais de referência e provedores de ensaios de proficiência**, rev. 09, Rio de Janeiro: INMETRO, 2019 (DOQ-CGCRE-020). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torganismo=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Orientações para aplicação dos requisitos técnicos da ABNT NBR ISO/IEC 17025 na acreditação de laboratórios de calibração para o grupo de serviço de físico-química**, rev. 03, Rio de Janeiro: INMETRO, 2019 (DOQ-CGCRE-022). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torganismo=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, **Versão brasileira do documento diretrizes da OCDE de boas práticas para centros de recursos biológicos**, rev. 00, Rio de Janeiro: INMETRO, 2012 (DOQ-CGCRE-034). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torgano=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INMETRO, INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL, ***Orientações gerais sobre a acreditação de laboratórios que realizam calibração de equipamentos com o uso de materiais de referência certificados (MRC)***, rev. 01, Rio de Janeiro: INMETRO, 2016 (DOQ-CGCRE-083). Disponível em:

<http://www.inmetro.gov.br/credenciamento/organismos/doc_organismos.asp?torgano=calibensaio> Acesso em: 10 out. 2020.

INTC, INSTITUTE OF NUCLEAR CHEMISTRY AND TECHNOLOGY, ***Polish Certified Reference Material for multielement trace analysis. Tea Leaves (INCT-TL-1). Poland***, 2002a.

INTC, INSTITUTE OF NUCLEAR CHEMISTRY AND TECHNOLOGY, ***Polish Certified Reference Material for multielement trace analysis. FINE FLY ASH (CTA-FFA-1)***, 1990.

INTC, INSTITUTE OF NUCLEAR CHEMISTRY AND TECHNOLOGY, ***Polish Certified Reference Material for multielement trace analysis. Mixed Polish Herbs (INCT-MPH-2)***, 2002b.

ISO, INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION. ***Statistical methods for use in proficiency testing by interlaboratory comparisons***. Geneva, Switzerland: 2015 (ISO 13528).

JAMES, B. ***Probabilidade: um curso em nível intermediário***. 4. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2015.

KONIECZKA, P.; NAMIEŚNIK, J. ***Quality assurance and quality control in the analytical chemical laboratory: a practical approach***. Florida: CRC Press, 2009.

LANGE, C. N. ***Avaliação da contaminação de solos e água subterrânea por elementos potencialmente tóxicos em um pátio de recolhimento de veículos. Estudo de caso: Ribeirão Pires, SP***. 2018. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/T.85.2018.tde-25042018-104820>>. Acesso em: 12 out. 2020.

LIMA, N. P. ***Validação do método de análise por ativação com nêutrons para determinação de urânio em amostras ambientais***. 2018. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-23112018-140537>>. Acesso em: 12 out. 2020.

LUCIA, S. R. ***Desenvolvimento de um software de espectrometria gama para análise por ativação com nêutrons utilizando o conceito de código livre***.

2008. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2008.tde-01122009-095027>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MAJCEN, N. A need for clearer terminology and guidance in the role of reference materials in method development and validation. *Accred. Qual. Assur.* v. 8, p.108-112, 2003.

MARIANO, D. B. ***Implementação do método k0-INAA no laboratório de análise por ativação com nêutrons do IPEN utilizando o programa k0-IAEA. Aplicação à análise de amostras geológicas.*** 2011. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2012.tde-03042012-104529>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MARTINS, M. A. G. ***Variação da composição e toxicidade do material particulado ao longo do dia na cidade de São Paulo.*** 2010. Tese (Doutorado em Patologia) - Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.5.2010.tde-27082010-175749>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MATSUBARA, T. C. M. ***Estudo sobre a determinação de antimônio em amostras ambientais pelo método de análise por ativação com nêutrons. validação da metodologia e determinação da incerteza da medição.*** 2011. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2011.tde-21112011-094305>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MENDES, S. U. R. ***Avaliação dos teores de mercúrio em cabelos de crianças residentes em área de garimpo no município de Chapada de Natividade - Tocantins.*** 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, University of São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2017.tde-10082017-095454>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MONTEZANI, E. ***Estudo sobre a composição elementar nas amostras de líquen epifítico utilizado como bioindicador da poluição aérea na cidade de São Paulo.*** 2010. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2010.tde-01082011-092551>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MOREIRA, E. G. ***Preparo e caracterização de um material de referência de mexilhão Perna (Linnaeus, 1758).*** 2010. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em:

<<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2010.tde-21062011-093245>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MOREIRA, E. G.; SEO, D.; VASCONCELLOS, M. B. A.; SAIKI, M. Trace element determination in a mussel reference material using short irradiation instrumental neutron activation analysis. *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, v. 293, p. 251-254, 2013.

MOREIRA, T. C. L. ***Biomonitoramento intra-urbano da poluição de origem veicular: utilização da casca de árvore na identificação de Fontes de poluição atmosférica***. 2015. Tese (Doutorado em Patologia) - Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.5.2016.tde-08042016-160957>>. Acesso em: 12 out. 2020.

MORETTIN, L.G. ***Estatística básica: probabilidade e inferência: volume único***. Pearson Prentice Hall, 2010.

MOURA, P. L. C. ***Determinação de elementos essenciais e tóxicos em cogumelos comestíveis por análise por ativação com nêutrons***. 2008. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2008.tde-01092009-164737>>. Acesso em: 12 out. 2020.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1515 Apple Leaves***, 1995.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1573a Tomato Leaves***, 1993.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1400 Bone Ash***, 1992.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1633c Trace Elements in Coal Fly Ash***, 2011.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1646a Estuarine Sediment***, 2004.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1566b Oyster tissue***, 2017.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 1547 Peach Leaves***, 2019.

NIST, NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS & TECHNOLOGY, ***Certificate of Analysis. Standard Reference Material 2976 Trace Elements and Methylmercury in Mussel Tissue (Freeze-Dried)***, 2018.

NOGUEIRA, C. A. ***Avaliação da poluição atmosférica por metais na região metropolitana de São Paulo utilizando a Bromélia Tillandsia Usneoides L. como biomonitor.*** 2006. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2006.tde-29052007-135539>>. Acesso em: 12 out. 2020.

NOYORI, A. ***Estudo sobre determinação de alumínio em amostras ambientais pelo método de análise por ativação com nêutrons.*** 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2017.tde-07122017-113255>>. Acesso em: 12 out. 2020.

NRCC, NATIONAL RESEARCH COUNCIL OF CANADA, ***Certificate of analysis, DORM-4, Fish protein certified reference material for trace elements***, 2012.

NRCC, NATIONAL RESEARCH COUNCIL OF CANADA, ***Certificate of analysis, DOLT-5, Dogfish liver certified reference material for trace metals and other constituents***, 2014.

NUNES, K. P. ***Estudos arqueométricos do sítio arqueológico Hatahara.*** 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2009.tde-23062009-164021>>. Acesso em: 12 out. 2020.

OLIVEIRA, J. A. S. ***Uso de macrófitas para remoção de metais em efluentes líquidos.*** 2018. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-22102018-113828>>. Acesso em: 12 out. 2020.

PEREZ, C. ***Estudo sobre a determinação de elementos tóxicos (As, Cu e Hg) em amostras de biomonitoradores da poluição atmosférica pelo método de análise por ativação com nêutrons.*** 2018. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-23072018-092731>>. Acesso em: 12 out. 2020.

PETRONI, R. ***Validação dos métodos de análise por ativação do Laboratório de Análise por Ativação Neutrônica do IPEN - CNEN/SP visando à produção de materiais de referência certificados.*** 2015. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2015.tde-18062015-143835>>. Acesso em: 12 out. 2020.

PUERTA, D. C. ***Aplicação do método k0-INAA no Laboratório de Análise por Ativação com Nêutrons do IPEN utilizando o programa k0-IAEA. Análise de amostras biológicas***. 2013. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2013.tde-22082013-143640>>. Acesso em: 12 out. 2020.

REIS, R. A. S. ***Caracterização de componentes inorgânicos em suplementos nutricionais pelo método de análise por ativação com Nêutrons***. 2006. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2006.tde-01062007-161704>>. Acesso em: 12 out. 2020.

RIBEIRO JUNIOR, I. S. ***Determinação de fatores de interferência de produtos de fissão do urânio na Análise por Ativação Neutrônica***. 2014. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2014.tde-22092014-144404>>. Acesso em: 12 out. 2020.

RIBEIRO JUNIOR, I. S. ***Uso de sistema de coincidência gama-gama associado à espectroscopia simples em medidas de análise por ativação neutrônica***. 2019. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2019.tde-22072019-080949>>. Acesso em: 12 out. 2020.

RIBEIRO, A. P. ***Procedimentos de fracionamento comparados a modelo de atenuação para a avaliação de mobilidade de metais pesados em sedimentos da Baía de Sepetiba, Rio de Janeiro***. 2006. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2006.tde-30052007-163407>>. Acesso em: 12 out. 2020.

RIBEIRO, R. B. ***Caracterização físico-química da cerâmica do sítio arqueológico São Paulo II***. 2013. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2013.tde-04072013-170829>>. Acesso em: 12 out. 2020.

ROCHA, R. R. ***Avaliação da poluição atmosférica de elementos químicos pela análise de líquen epifítico no campus da Cidade Universitária de São Paulo***. 2015. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2015.tde-02122015-085541>>. Acesso em: 12 out. 2020.

ROSA, M. M. L. **Avaliação dos teores de U, Th, Ra-226, Ra-228, Pb-210 e outros elementos de interesse presentes em cogumelos em uma região de elevada radioatividade natural no Brasil.** 2012. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2012.tde-04062012-152126>>. Acesso em: 12 out. 2020.

RUBY, E. C. **Qualidade ambiental de solos agrícolas da bacia do Rio Jaguari -São Paulo.** 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/D.85.2009.tde-11032010-153933>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SANTOS, U. P. M.; LOURENÇO, F. R.; MOREIRA, E. G. Experimental design and z-score are useful tools for optimizing instrumental neutron activation analysis procedures. **J. Radioanal. Nucl. Chem.**, v. 325, p. 707-718, 2020.

WISE, S. A.; POSTER, D. L.; KUCKLICK, J. R.; KELLER, J. M.; VANDERPOL, S. S.; SANDER, L. C.; SCHANTZ, M. M. Standard reference materials (SRM) for determination of organic contaminants in environmental samples. **Anal. Bioanal. Chem.** 386, 1153-1190 (2006).

SANCHES, T. P. **Estudo sobre determinação de elementos químicos em unhas humanas pelo método de análise por ativação com nêutrons.** 2012. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2012.tde-23102012-153919>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SANTOS, E. C. **Estudo da poluição aérea de elementos químicos pelas análises de cascas de árvore.** 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2017.tde-24112017-142556>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SANTOS, J. O. **Estudos arqueométricos de sítios arqueológicos do baixo São Francisco.** 2007. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2007.tde-18052012-134947>>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SANTOS, P. S. **Avaliação dos teores de elementos essenciais no leite materno de mães de recém-nascidos prematuros e a termo e em fórmulas infantis por meio da análise por ativação com nêutrons.** 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009.

Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2009.tde-27102009-095644>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SAUEIA, C. H. R. ***Distribuição elementar e de radionuclídeos na produção e uso de fertilizantes fosfatados no Brasil***. 2006. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2006.tde-22032012-173112>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SEMMLER, M. G. M. C. ***Biomonitoração de Hg, Cd, Pb e outros elementos em áreas costeiras do Estado de São Paulo por meio do mexilhão transplantado - Perna (Linnaeus, 1758)***. 2007. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2007.tde-27112007-140442>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SEO, D. ***Avaliação dos teores de Br, Cl, K, Mg, Mn e V em mexilhões Perna perna (Linnaeus, 1758: Mollusca, Bivalvia) coletados no litoral do estado de São Paulo, Brasil***. 2012. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2012.tde-08032013-161647>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SILVA, D. P. ***Otimização da análise por ativação neutrônica instrumental para o estudo de homogeneidade dentro do frasco de materiais de referência de origem marinha***. 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2017.tde-23062017-100736>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SILVA, L. S. ***Avaliação da concentração de metais e elementos terras raras em amostras de sedimentos dos reservatórios dos sistemas Billings e Guarapiranga***. 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2017.tde-06092017-093701>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SILVA, R. C. A. ***Estudo da espécie Garça-Branca-Grande Ardea alba (Linnaeus, 1758), para uso como bioindicadora da contaminação ambiental, na região metropolitana de São Paulo***. 2013. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2013.tde-14102013-135313>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SOARES, E. P. ***Estudo do método radiométrico para avaliação da migração de elementos de embalagens plásticas para o seu conteúdo***. 2008. Tese

(Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2008.tde-06072009-162508>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SOARES, W. A. A. ***Estudo da distribuição de metais em água, sedimento e organismos aquáticos de rios e reservatórios pertencentes à rede de monitoramento da qualidade dos sedimentos do Estado de São Paulo, Brasil***. 2012. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2012.tde-16012013-144500>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SORDO FILHO, G. D. ***Estudo da adsorção de íons metálicos em caulinita para água de reuso***. 2015. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2016.tde-25042016-102831>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SOUZA, E. S. ***Adsorção de cobalto em caulinita***. 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-23022018-093900>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SOUZA, V. I. ***Estudo sobre a composição elementar de suplementos dietéticos pelo método de análise por ativação com nêutrons***. 2017. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2018.tde-29012018-095346>>. Acesso em: 12 out. 2020.

STEWART, J. ***Cálculo, vol. 1***, 8ª edição. Editora Thompson, p. 518-524, 2016.

SUSSA, F. V. ***Efeito do manejo agrícola, da sazonalidade e dos elementos traço na produção dos óleos voláteis de erva-cidreira (Melissa officinalis L.)***. 2017. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/T.85.2017.tde-16022017-142812>>. Acesso em: 12 out. 2020.

SUSSA, F. V. ***Estudo da composição inorgânica e avaliação da atividade biológica de Peperomia pellucida no crescimento de Aspergillus flavus***. 2011. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2011. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2011.tde-03042012-144912>>. Acesso em: 12 out. 2020.

TAPPIZ, B. **Determinação de contaminantes inorgânicos em pescados consumidos em São Paulo como contribuição à garantia da segurança alimentar**. 2019. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2019.tde-13092019-140016>>. Acesso em: 12 out. 2020.

THOMPSON, M.; ELLISON, S. L. R.; WOOD, R. The international harmonized protocol for the proficiency testing of analytical chemistry laboratories. (IUPAC Technical Report). **Pure Appl. Chem.** v. 78 n. 1, p. 145-196, 2006.

TONDIN, J. E. M. **Prospecção de implementação de ensino à distância para a disciplina de fundamentos de física nuclear na Pós- Graduação do IPEN utilizando infra - estrutura de software livre**. 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2009.tde-20082009-184625>>. Acesso em: 12 out. 2020.

TORRECILHA, J. K. **Extração sequencial aplicada à lama negra de Peruíbe**. 2014. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2014.tde-18122014-112107>>. Acesso em: 12 out. 2020.

TOYOTA, R. G. **Caracterização química da cerâmica marajoara**. 2009. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/D.85.2009.tde-09092009-174353>>. Acesso em: 12 out. 2020.

TRIOLA, M. F. **Introdução à estatística**, Tradução de FARIAS, A. A.; SOARES, E.F.; FLORES, V. R. L. F. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 1999.

TUDELA, D. R. G. **Caracterização físico-química de sedimentos do sítio arqueológico Lapa Grande de Taquaraçu, MG**. 2013. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/D.85.2013.tde-23092013-131738>>. Acesso em: 12 out. 2020.

UNIVERSITY OF MISSOURI RESEARCH REACTOR. **Overview of Neutron Activation Analysis**. 2017. Disponível em: <https://archaeometry.missouri.edu/naa_overview.html#prompt>. Acesso em: 12 set 2020.

VALLINOTO, P. **Determinação de elementos essenciais e tóxicos em alimentos comerciais infantis por análise por ativação com nêutrons e espectrometria de absorção atômica**. 2013. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e

Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2013.tde-04072013-144252>>. Acesso em: 12 out. 2020.

YAMASHITA, C. I. ***Estudo sobre os constituintes inorgânicos presentes em diferentes espécies da planta medicinal do gênero 'casearia' coletadas em regiões distintas da Mata Atlântica, SP***. 2006. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.11606/D.85.2006.tde-05062007-152847>>. Acesso em: 12 out. 2020.

ZAMPIERI, M. C. T. ***Estudo sobre os efeitos do cobre e zinco no crescimento da plântula de "Aechmea blanchetiana" (BAKER) L. B. Smith cultivada "in vitro". Aplicação da análise por ativação com nêutrons***. 2010. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear - Aplicações) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/doi:10.11606/D.85.2010.tde-12082011-144211>>. Acesso em: 12 out. 2020.

Conjunto de dados 1 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Sb	0,11	0,02	0,20	0,03	0,12	0,02	0,80	0,10	0,06	0,02
Sm	7,70	0,10	3,56	0,06	3,35	0,05	2,26	0,04	8,90	0,10
As	0,46	0,08	1,12	0,09	0,66	0,07	4,70	0,20	0,85	0,09
La	48,30	0,70	27,10	0,40	29,10	0,40	17,70	0,20	78,00	1,00
Lu	0,26	0,03	0,14	0,01	0,12	0,01	0,25	0,02	0,17	0,02
Ce	189,00	5,00	104,00	2,00	80,00	2,00	103,00	2,00	270,00	7,00
Co	11,80	0,40	4,90	0,10	7,90	0,20	3,60	0,10	6,60	0,10
Cr	33,00	1,00	30,00	1,00	22,30	0,90	68,00	2,00	41,00	1,00
Cs	2,60	0,20	4,60	0,40	2,10	0,10	1,10	0,10	2,40	0,20
Eu	2,80	0,10	1,33	0,05	1,39	0,06	0,81	0,03	1,72	0,07
Hf	16,60	0,40	12,30	0,30	15,60	0,30	27,90	0,60	25,60	0,60
Fe %	5,17	0,03	3,82	0,02	3,44	0,02	6,88	0,05	3,77	0,02

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Sb	0,10	0,02	0,39	0,06	0,05	0,01	0,17	0,04	0,19	0,04
Sm	6,90	0,10	1,96	0,03	3,50	0,06	5,33	0,09	3,42	0,05
As	0,85	0,09	3,20	0,10	3,70	0,60	1,40	0,20	0,40	0,08
La	41,80	0,60	15,60	0,20	26,80	0,40	44,90	0,70	25,90	0,40
Lu	0,26	0,02	0,22	0,02	0,22	0,02	0,30	0,03	0,38	0,04
Ce	148,00	4,00	112,00	3,00	131,00	4,00	152,00	4,00	103,00	2,00
Co	11,00	0,30	4,20	0,10	3,50	0,10	5,10	0,10	9,90	0,20
Cr	28,00	1,00	71,00	3,00	50,00	2,00	47,00	2,00	29,00	1,00
Cs	1,70	0,10	1,10	0,10	2,10	0,10	3,60	0,20	3,70	0,20
Eu	2,40	0,10	0,91	0,04	0,91	0,04	1,12	0,05	0,93	0,04
Hf	14,30	0,30	29,90	0,70	22,60	0,60	37,00	1,00	13,60	0,30
Fe %	5,81	0,04	6,81	0,05	4,59	0,04	2,84	0,02	3,60	0,03

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Sb	0,11	0,02	0,05	0,01	0,21	0,04	0,14	0,03	0,80	0,20
Sm	1,79	0,03	3,13	0,05	1,94	0,03	0,80	0,01	1,56	0,02
As	1,00	0,10	0,60	0,10	0,70	0,10	0,80	0,10	3,50	0,20
La	21,50	0,30	20,40	0,30	9,70	0,10	4,39	0,07	13,20	0,20
Lu	0,19	0,02	0,37	0,03	0,29	0,03	0,16	0,01	0,34	0,03
Ce	255,00	6,00	158,00	4,00	46,00	1,00	52,00	1,00	81,00	2,00
Co	1,77	0,06	5,60	0,10	*	0,00	2,03	0,07	4,20	0,10
Cr	39,00	1,00	33,00	1,00	119,00	5,00	30,00	1,00	58,00	2,00
Cs	1,31	0,09	2,90	0,10	3,50	0,20	1,90	0,10	3,60	0,20
Eu	0,54	0,02	1,19	0,05	0,75	0,03	0,19	0,01	0,55	0,03
Hf	9,90	0,20	10,60	0,20	7,30	0,20	8,20	0,20	17,60	0,40
Fe %	2,73	0,02	2,51	0,02	4,76	0,04	2,45	0,02	4,77	0,04

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Sb	0,39	0,05	0,25	0,04	0,15	0,02	0,15	0,02	0,18	0,02
Sm	1,15	0,02	3,19	0,05	1,29	0,02	1,49	0,02	1,16	0,02
As	3,30	0,20	2,20	0,20	0,48	0,07	0,57	0,08	0,92	0,09
La	6,80	0,10	13,20	0,20	7,40	0,10	10,50	0,10	6,90	0,10
Lu	0,23	0,02	0,22	0,02	0,18	0,02	0,37	0,04	0,30	0,03
Ce	43,00	1,00	72,00	2,00	29,00	0,80	42,00	1,00	46,00	1,00
Co	5,00	0,10	35,00	1,00	0,78	0,03	0,98	0,04	2,31	0,08
Cr	61,00	2,00	159,00	7,00	11,50	0,50	15,90	0,70	24,00	1,00
Cs	1,10	0,10	0,70	0,10	0,78	0,06	0,84	0,07	1,27	0,09
Eu	0,42	0,02	1,57	0,07	0,39	0,02	0,43	0,02	0,48	0,02
Hf	15,90	0,40	9,20	0,20	14,00	0,30	21,20	0,50	18,90	0,50
Fe %	5,05	0,04	16,50	0,10	0,60	0,01	0,67	0,01	1,91	0,01

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
-------	-------	---------	-------	---------	-------	---------	-------	---------	-------	---------

Sb	0,25	0,03	0,90	0,20	0,30	0,04	0,70	0,10	0,39	0,05
Sm	4,94	0,08	1,99	0,03	0,90	0,01	0,60	0,01	0,89	0,01
As	1,90	0,20	3,50	0,30	2,20	0,20	2,30	0,10	2,10	0,10
La	38,40	0,60	17,70	0,20	6,30	0,10	3,34	0,06	4,90	0,08
Lu	0,25	0,02	0,45	0,04	0,31	0,03	0,23	0,02	0,22	0,02
Ce	193,00	5,00	84,00	2,00	32,80	0,90	25,70	0,70	36,00	1,00
Co	4,90	0,10	5,40	0,10	3,70	0,10	2,90	0,10	1,61	0,06
Cr	39,00	1,00	68,00	3,00	47,00	2,00	39,00	1,00	29,00	1,00
Cs	3,80	0,20	3,70	0,20	0,80	0,10	1,40	0,10	2,10	0,10
Eu	0,97	0,04	0,82	0,04	0,34	0,02	0,24	0,01	0,32	0,01
Hf	20,20	0,50	15,20	0,40	18,80	0,50	14,80	0,40	9,70	0,20
Fe %	3,25	0,02	7,31	0,06	4,60	0,04	3,50	0,03	2,88	0,02

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Sb	0,20	0,02			0,30	0,10	0,27	0,07
Sm	0,77	0,01	5,41	0,09	0,89	0,01	1,17	0,02
As	0,90	0,10	1,40	0,20	3,90	0,50	0,80	0,10
La	3,79	0,06	21,10	0,30	4,39	0,07	6,50	0,10
Lu	0,23	0,02	0,49	0,05	0,30	0,03	0,25	0,02
Ce	37,00	1,00	100,00	2,00	35,00	1,00	32,70	0,90
Co	1,18	0,04	61,00	1,00	2,91	0,09	1,50	0,05
Cr	21,80	0,90	42,00	1,00	48,00	2,00	24,00	1,00
Cs	0,94	0,08	1,90	0,20	0,97	0,09	1,90	0,10
Eu	0,30	0,01	3,30	0,10	0,29	0,01	0,36	0,01
Hf	18,20	0,40	12,70	0,30	17,10	0,40	15,40	0,30
Fe %	1,37	0,01	16,40	0,10	3,77	0,03	1,37	0,01

Conjunto de dados 2 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Rb	23,00	1,00	69,00	2,00	*	0,00	50,00	2,00	17,00	1,00
Sc	11,80	0,40	8,20	0,20	17,20	0,60	10,90	0,30	16,20	0,50
Nd	32,00	1,00	34,00	2,00	28,00	1,00	90,00	4,00	62,00	3,00
Ta	2,30	0,10	1,16	0,08	3,80	0,20	1,60	0,10	2,40	0,10
Tb	0,40	0,05	0,55	0,06	0,51	0,07	1,00	0,10	1,20	0,10
Th	8,10	0,30	7,60	0,30	24,00	1,00	54,00	2,00	6,00	0,20
Zn	46,00	2,00	56,00	3,00	43,00	2,00	66,00	3,00	89,00	4,00
U	1,80	0,10	0,50	0,08	1,90	0,10	1,70	0,10	0,80	0,10
Yb	0,93	0,06	0,66	0,04	1,20	0,07	1,37	0,08	2,10	0,10

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Rb	*	0,00	*	0,00	36,00	4,00	152,00	15,00	7,00	2,00
Sc	17,00	0,60	13,90	0,50	9,30	0,30	11,10	0,40	7,60	0,20
Nd	26,90	0,10	32,00	1,00	51,00	2,00	28,00	1,00	15,00	1,00
Ta	3,40	0,20	2,10	0,10	2,40	0,10	2,40	0,10	2,20	0,10
Tb	0,58	0,08	*	0,00	*	0,00	*	0,00	*	0,00
Th	32,00	1,00	34,00	1,00	33,00	1,00	17,00	0,70	16,60	0,70
Zn	23,00	1,00	56,00	3,00	67,00	3,00	52,00	3,00	43,00	2,00
U	1,70	0,10	2,80	0,20	2,40	0,20	3,20	0,20	4,30	0,30
Yb	1,27	0,07	1,48	0,09	1,70	0,10	2,50	0,10	0,79	0,05

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Rb	50,00	5,00	46,00	6,00	31,00	3,00	*	0,00	*	0,00
Sc	6,50	0,20	16,80	0,60	8,60	0,30	14,50	0,50	16,30	0,50
Nd	28,00	1,00	14,50	0,90	5,90	0,40	13,80	0,80	9,30	0,70
Ta	1,30	0,10	1,60	0,10	2,90	0,20	2,20	0,20	2,00	0,20
Tb	*	0,00	*	0,00	*	0,00	0,26	0,05	*	0,00

Th	11,50	0,40	6,70	0,20	15,60	0,60	17,20	0,70	12,80	0,50
Zn	102,00	5,00	52,00	3,00	35,00	2,00	49,00	3,00	90,00	5,00
U	2,50	0,20	2,70	0,20	3,10	0,20	2,80	0,30	2,50	0,20
Yb	2,50	0,10	1,90	0,10	0,66	0,04	1,70	0,10	1,15	0,07
Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Rb	*	0,00	*	0,00	12,40	0,80	*	0,00	40,00	2,00
Sc	50,00	1,00	2,45	0,08	3,50	0,10	6,60	0,20	11,30	0,40
Nd	24,00	1,00	10,90	0,60	11,20	0,70	9,30	0,50	47,00	2,00
Ta	2,00	0,20	*	0,00	0,46	0,05	1,10	0,10	2,50	0,20
Tb	1,20	0,10	0,24	0,03	0,40	0,04	0,24	0,04	1,00	0,10
Th	8,30	0,30	5,00	0,20	7,00	0,30	5,50	0,20	27,00	1,00
Zn	91,00	5,00	16,00	1,00	11,00	1,00	9,00	1,00	56,00	3,00
U	1,20	0,20	1,10	0,10	1,80	0,10	1,50	0,10	5,80	0,50
Yb	1,80	0,10	1,08	0,06	2,30	0,10	1,80	0,10	1,90	0,10
Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Rb	10,00	2,00	*	0,00	*	0,00	*	0,00	3,70	0,50
Sc	21,20	0,70	12,30	0,40	9,70	0,30	6,40	0,20	4,20	0,10
Nd	17,00	1,00	9,60	0,80	2,60	0,40	6,90	0,50	5,10	0,40
Ta	2,40	0,20	2,30	0,20	1,80	0,20	0,80	0,10	0,77	0,07
Tb	0,43	0,07	*	0,00	*	0,00	0,32	0,05	0,25	0,03
Th	16,80	0,70	8,70	0,30	9,80	0,40	8,40	0,30	4,60	0,10
Zn	50,00	3,00	22,00	1,00	20,00	1,00	18,00	1,00	2,70	0,70
U	3,10	0,30	2,20	0,20	2,20	0,20	1,00	0,10	1,40	0,10
Yb	2,50	0,10	1,60	0,10	1,31	0,08	1,30	0,08	1,42	0,08

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Rb	*	0,00	*	0,00	23,00	1,00
Sc	46,00	1,00	11,50	0,40	5,30	0,10
Nd	47,00	2,00	7,60	0,60	10,20	0,60
Ta	3,50	0,20	2,10	0,10	0,64	0,06
Tb	1,60	0,10	0,38	0,05	0,40	0,04
Th	6,90	0,30	14,00	0,50	7,00	0,30
Zn	133,00	7,00	34,00	2,00	*	0,00
U	1,40	0,10	2,50	0,20	1,60	0,10
Yb	3,60	0,20	1,79	0,10	1,49	0,09

Conjunto de dados 3 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.
As	7,78	5,86	5,32	6,48	5,11	7,01	6,50	16,50	16,80	16,30
Ba	531,00	472,00	149,00	371,00	327,00	205,00	475,00	424,00	575,00	592,00
Ce	106,00	87,00	119,00	169,00	62,00	126,00	91,00	52,00	51,00	57,00
Co	7,50	6,00	2,00	6,80	3,50	3,60	5,40	5,20	8,20	17,30
Cr	183,00	52,00	7,40	40,00	47,00	16,00	42,00	75,00	87,00	81,00
Cs	3,45	2,57	2,32	3,87	2,24	3,46	6,40	3,62	2,41	2,57
Eu	0,75	0,51	0,10	0,45	0,42	0,53	0,78	0,41	0,50	0,52
Fe (%)	3,81	3,99	1,60	3,58	3,54	2,42	2,73	5,88	6,30	6,61
Hf	8,90	9,70	5,10	8,70	8,00	8,80	7,80	8,90	7,20	6,80
La	29,50	13,00	10,10	17,70	12,20	43,20	34,20	9,40	10,20	10,50
Lu	0,52	0,58	0,46	0,56	0,63	0,45	0,51	0,69	0,69	0,70
Nd	21,40	16,80	5,87	9,68	8,20	50,20	28,40	5,90	<0,005	27,30
U	3,90	3,40	5,10	4,60	3,60	7,50	4,20	4,50	5,50	5,40

Th	17,70	16,20	21,20	21,10	13,50	20,40	15,90	18,00	17,30	17,30
Rb	73,00	66,00	37,00	61,00	45,00	31,00	87,00	45,00	48,00	49,00
Sc	13,00	15,00	6,70	13,00	12,00	6,10	10,00	18,00	20,00	22,00
Sm	4,60	2,30	2,10	3,00	2,30	5,40	5,80	2,20	2,50	2,30
Ta	1,40	1,40	4,50	2,00	1,50	3,50	1,70	1,80	1,60	1,60
Tb	0,77	0,56	0,49	0,45	0,58	0,89	1,10	1,10	0,88	0,91
Yb	3,50	3,70	2,80	3,80	4,00	2,80	3,50	5,00	4,60	4,90
Zn	110,00	41,00	19,00	48,00	34,00	42,00	55,00	44,00	43,00	45,00
Zr	283,00	285,00	143,00	239,00	243,00	274,00	249,00	242,00	222,00	247,00
As	9,87	19,10	8,36	5,76	11,60	3,98	5,47	7,96	8,44	3,81
Ba	407,00	256,00	452,00	361,00	562,00	462,00	618,00	601,00	223,00	282,00
Ce	77,00	77,00	65,00	147,00	85,00	108,00	132,00	109,00	58,00	96,00
Co	7,20	3,10	5,00	3,60	5,70	7,20	9,10	11,70	3,20	4,90
Cr	89,00	87,00	75,00	63,00	91,00	69,00	80,00	94,00	56,00	37,00
Cs	11,30	15,50	8,40	8,05	12,20	1,40	2,67	2,31	3,49	3,74
Eu	0,45	0,47	0,76	0,74	0,56	0,49	0,60	0,77	0,65	0,64
Fe (%)	4,16	3,44	3,79	3,27	4,60	3,82	4,39	5,50	1,93	2,58
Hf	8,60	10,40	8,80	11,00	9,50	13,00	7,40	8,40	10,00	9,10
La	11,80	22,00	28,10	21,00	17,10	11,20	22,00	25,30	28,10	28,40
Lu	0,61	0,56	0,58	0,61	0,62	0,70	0,57	0,70	0,42	0,43
Nd	10,60	15,10	18,20	41,70	19,90	9,18	19,40	22,70	21,70	24,40
U	3,90	6,60	4,70	7,50	5,80	5,80	4,60	5,30	6,60	5,10
Th	15,10	18,10	14,90	17,20	16,60	18,90	17,10	18,00	14,70	19,80
Rb	61,00	45,00	59,00	44,00	68,00	52,00	86,00	93,00	47,00	68,00
Sc	15,00	11,00	14,00	14,00	18,00	13,00	17,00	20,00	7,40	9,20
Sm	3,80	5,00	6,60	6,90	4,80	2,60	3,70	3,80	4,80	4,50
Ta	1,40	3,40	1,40	2,40	1,60	1,80	1,80	1,50	3,40	2,00
Tb	0,60	0,74	0,79	0,70	0,56	0,66	0,81	1,00	0,61	0,54

Yb	4,60	4,00	4,20	4,40	4,30	4,50	3,80	4,80	2,60	2,70
Zn	54,00	40,00	<3,7	37,00	38,00	26,00	55,00	44,00	62,00	49,00
Zr	241,00	292,00	241,00	322,00	332,00	414,00	235,00	249,00	343,00	288,00
As	8,26	8,43	10,10	4,65	9,72	14,90	14,20	9,90	12,30	6,85
Ba	541,00	636,00	639,00	397,00	598,00	350,00	443,00	486,00	483,00	279,00
Ce	100,00	49,00	49,00	92,00	440,00	33,00	82,00	106,00	72,00	89,00
Co	4,10	5,20	5,20	2,90	30,00	3,90	5,60	3,20	3,80	7,00
Cr	28,00	83,00	84,00	39,00	88,00	62,00	58,00	62,00	45,00	38,00
Cs	4,25	1,59	1,60	3,32	2,07	3,55	2,01	1,77	3,82	4,68
Eu	0,72	0,44	0,44	0,47	0,43	0,44	0,46	0,49	0,67	0,68
Fe (%)	2,09	6,04	6,06	2,59	5,88	4,32	3,93	4,47	3,37	2,52
Hf	8,30	7,80	7,80	11,00	7,90	8,80	9,60	7,90	4,20	9,10
La	33,40	19,60	8,30	27,80	7,00	15,20	14,70	12,50	34,30	29,50
Lu	0,46	0,66	0,74	0,47	0,62	0,58	0,59	0,57	0,40	0,45
Nd	34,00	13,90	<0,005	20,00	12,30	17,80	6,72	12,30	15,40	24,00
U	5,20	5,10	6,30	7,10	4,90	4,00	4,60	3,90	3,80	5,00
Th	13,20	19,20	19,30	21,60	17,50	14,40	14,90	16,00	10,90	18,40
Rb	88,00	69,00	69,00	53,00	60,00	47,00	56,00	58,00	87,00	64,00
Sc	7,20	24,00	24,00	12,00	23,00	14,00	16,00	17,00	13,00	10,00
Sm	5,90	3,90	2,10	4,50	2,40	2,40	2,30	2,70	3,00	3,40
Ta	1,30	1,70	1,70	2,70	1,80	1,90	1,60	1,20	1,30	1,90
Tb	0,63	0,54	0,54	0,67	0,76	0,69	0,74	0,62	0,55	0,75
Yb	3,00	4,30	4,70	3,00	4,20	4,30	4,20	4,10	3,10	3,30
Zn	77,00	18,00	18,00	39,00	43,00	63,00	28,00	44,00	49,00	65,00
Zr	255,00	203,00	203,00	256,00	197,00	277,00	295,00	287,00	173,00	339,00
As	4,22	5,05	10,08	3,77	3,59	3,05	5,01	8,69	12,80	4,67
Ba	285,00	426,00	790,00	356,00	584,00	277,00	217,00	466,00	354,00	397,00

Ce	133,00	87,00	48,00	130,00	134,00	194,00	82,00	86,00	60,00	77,00
Co	8,10	3,80	9,30	7,10	19,70	17,20	2,90	7,50	5,50	4,20
Cr	45,00	33,00	92,00	42,00	103,00	102,00	67,00	88,00	92,00	60,00
Cs	1,40	1,90	1,71	4,18	1,81	40,10	3,23	4,83	2,02	4,25
Eu	0,35	0,74	0,52	0,86	0,51	0,81	0,62	0,62	0,44	0,69
Fe (%)	4,35	2,57	6,15	2,94	5,45	3,59	3,25	4,48	5,78	2,67
Hf	8,50	8,40	7,10	13,00	6,60	13,00	13,00	9,20	11,00	8,10
La	7,20	37,20	11,30	26,90	7,00	30,10	27,00	18,50	10,60	34,50
Lu	0,58	0,45	0,73	0,40	0,65	0,41	0,40	0,61	0,74	0,40
Nd	7,60	39,70	10,50	37,20	6,09	24,10	21,40	22,30	7,02	27,50
U	2,90	3,40	5,70	6,40	4,60	18,00	6,40	4,00	5,40	3,90
Th	12,80	15,00	21,70	30,00	16,50	33,90	27,90	14,70	19,10	16,20
Rb	38,00	52,00	76,00	58,00	77,00	233,00	36,00	65,00	43,00	71,00
Sc	14,00	8,70	26,00	11,00	22,00	14,00	9,00	16,00	15,00	7,30
Sm	2,10	7,40	3,00	5,60	2,50	5,50	5,20	4,10	3,20	5,20
Ta	1,50	1,50	2,40	2,40	1,60	15,00	3,30	2,10	2,20	1,60
Tb	0,65	0,84	1,00	0,71	0,63	0,80	0,48	0,67	0,76	0,76
Yb	4,10	3,10	5,00	2,30	4,30	2,70	2,40	4,10	5,00	2,60
Zn	29,00	66,00	40,00	35,00	127,00	72,00	65,00	352,00	47,00	151,00
Zr	146,00	293,00	151,00	328,00	206,00	340,00	359,00	234,00	263,00	276,00

Conjunto de dados 4 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.
Ce	145,50	94,10	105,60	115,10	86,90	99,90	83,80	97,50	92,30	86,60
Cr	87,30	93,20	101,20	86,10	84,50	84,50	88,40	82,00	85,70	85,30
Cs	9,70	7,90	9,00	9,20	8,00	8,80	7,00	8,30	8,90	7,80
Eu	2,30	1,60	2,00	2,10	1,50	1,90	1,40	1,80	1,80	1,80
Fe(%)	5,70	4,30	5,50	5,00	5,80	5,00	5,10	4,80	6,20	5,00
Hf	6,10	6,40	5,90	5,80	6,40	5,00	6,50	4,80	6,20	5,60

K(%)	2,40	1,40	1,80	2,70	2,50	2,10	2,30	2,00	2,20	1,60
La	62,60	48,90	55,20	59,50	47,10	50,00	48,00	50,00	49,90	47,50
Lu	0,70	0,60	0,60	0,70	0,60	0,50	0,50	0,50	0,50	0,50
Na(%)	0,50	0,50	0,40	0,50	0,60	0,50	0,60	0,50	0,60	0,40
Sc	18,90	18,60	20,60	18,90	18,00	17,90	17,00	17,70	17,60	18,30
Tb	2,10	0,90	0,90	1,90	1,80	1,30	0,70	0,60	0,90	1,10
Th	18,00	17,60	19,80	18,70	18,10	16,70	17,30	16,40	17,90	17,30
U	3,90	3,60	3,90	4,70	4,50	3,70	3,40	2,90	3,30	4,50
Yb	3,80	3,50	4,10	3,90	3,50	3,50	3,30	3,30	2,50	3,40
Ce	104,30	113,30	109,40	137,00	102,60	134,20	111,40	101,80	91,40	168,40
Cr	95,40	91,40	96,40	93,10	91,30	107,10	93,10	82,90	83,10	90,40
Cs	10,60	9,60	9,50	7,50	8,80	9,00	8,10	6,80	9,10	8,20
Eu	1,90	1,80	1,90	2,30	1,70	2,40	1,80	1,80	1,60	2,00
Fe(%)	6,00	4,90	4,90	5,50	5,40	5,70	5,30	4,80	3,90	5,10
Hf	6,90	6,90	7,00	9,80	5,80	6,70	6,60	7,40	6,40	8,70
K(%)	1,90	4,20	3,20	2,20	2,20	2,20	3,20	1,80	2,20	1,60
La	56,90	57,70	59,00	64,50	55,90	69,60	57,70	53,50	47,60	61,10
Lu	0,60	0,60	0,60	0,70	0,60	0,60	0,70	0,60	0,50	0,60
Na(%)	0,60	0,50	0,70	0,40	0,40	0,50	0,40	0,10	0,50	0,50
Sc	20,10	20,40	19,80	18,30	19,80	21,60	19,60	17,40	18,40	17,10
Tb	1,10	1,30	1,10	1,50	1,20	1,50	1,20	0,70	0,50	1,50
Th	20,50	19,30	19,40	19,20	20,00	21,80	19,60	17,60	17,90	17,10
U	4,40	3,90	3,70	4,90	4,50	4,10	4,50	4,10	3,20	4,40
Yb	3,90	4,00	3,90	5,00	3,30	4,20	4,00	3,90	3,30	4,50
Ce	150,80	119,60	117,50	109,90	118,40	96,90	124,40	97,60	115,30	89,20
Cr	89,10	93,90	98,10	102,30	97,10	88,00	99,30	88,60	95,90	75,20

Cs	7,20	10,00	11,10	9,70	8,70	10,00	10,90	9,90	9,20	7,00
Eu	2,40	1,90	1,90	1,70	2,30	1,70	2,10	1,60	2,00	1,50
Fe(%)	5,10	5,50	5,40	4,80	4,40	5,80	5,30	5,80	5,30	5,20
Hf	8,70	6,70	6,90	7,90	6,60	9,30	7,40	10,60	7,70	9,80
K(%)	1,50	2,30	2,30	2,10	1,60	2,20	2,60	1,80	1,90	2,60
La	66,20	61,90	63,30	60,10	56,90	54,10	65,20	52,80	60,40	46,80
Lu	0,70	0,60	0,60	0,60	0,60	0,50	0,70	0,60	0,60	0,60
Na(%)	0,40	0,50	0,40	0,50	0,30	0,50	0,40	0,50	0,40	0,50
Sc	17,10	19,20	20,30	19,80	19,10	18,70	20,80	17,80	19,30	15,90
Tb	1,60	1,10	1,10	1,10	1,50	1,20	1,60	1,10	1,40	0,60
Th	18,00	19,60	19,30	20,10	18,60	19,30	21,60	17,80	20,00	16,60
U	3,80	4,70	4,90	4,30	3,70	4,30	3,90	3,00	4,80	3,80
Yb	5,00	3,60	4,10	4,10	4,70	3,90	4,50	4,10	3,90	3,60
Ce	105,70	92,90	110,90	113,10	116,00	109,30	108,60	107,00	109,30	95,20
Cr	86,50	100,00	97,90	97,60	93,10	95,30	89,20	95,10	88,60	91,30
Cs	7,30	8,60	8,20	11,20	10,40	9,20	8,90	7,50	8,20	8,00
Eu	1,50	1,40	1,70	2,00	1,90	1,90	1,80	1,80	1,90	1,80
Fe(%)	5,10	5,00	4,80	6,00	5,60	5,00	5,10	4,90	5,30	4,20
Hf	6,80	6,20	6,90	6,60	7,00	8,70	7,40	6,70	6,40	7,10
K(%)	2,20	2,10	2,20	2,40	2,20	2,50	3,20	2,70	1,60	1,10
La	48,50	51,80	58,20	60,10	56,40	58,90	55,60	52,70	58,70	44,10
Lu	0,50	0,50	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60	0,50	0,50	0,70
Na(%)	0,50	0,50	0,50	0,50	0,40	0,40	0,60	0,50	0,60	0,20
Sc	17,00	19,00	18,70	20,40	19,40	18,70	18,60	18,80	17,80	17,00
Tb	0,80	0,80	1,20	1,10	0,90	1,00	0,80	1,00	1,40	1,20
Th	17,40	19,80	18,80	20,70	20,30	19,90	18,40	20,80	16,90	16,10
U	4,70	4,00	4,50	5,70	3,40	5,00	3,50	4,50	3,10	3,00
Yb	3,40	3,30	3,90	4,40	3,90	4,30	4,00	3,90	4,10	4,10

Ce	100,70	118,00	88,80	117,40	120,30	98,60	112,80	94,90	94,00	98,90
Cr	83,50	85,60	86,70	101,20	97,30	101,30	101,20	96,90	72,50	88,60
Cs	7,70	9,70	6,70	5,90	10,90	10,30	11,30	9,10	7,60	9,20
Eu	1,60	1,90	1,60	1,90	1,90	1,70	2,00	1,70	1,70	1,60
Fe(%)	4,90	5,50	6,50	6,10	6,10	4,70	5,10	5,80	5,10	6,00
Hf	6,30	8,00	5,50	8,90	6,40	6,70	7,00	7,80	6,90	10,30
K(%)	1,50	1,70	1,50	1,30	1,80	1,80	1,90	1,60	2,40	3,10
La	53,50	57,60	43,90	59,10	59,80	53,40	60,80	51,60	49,90	51,90
Lu	0,50	0,50	0,50	0,60	0,60	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60
Na(%)	0,40	0,50	0,40	0,40	0,60	1,20	0,40	0,50	0,50	0,50
Sc	17,30	18,00	17,30	19,70	19,80	19,60	20,50	18,30	16,60	17,80
Tb	0,90	1,00	1,10	1,30	1,20	0,90	0,60	0,90	0,90	0,80
Th	15,90	17,00	16,20	19,00	18,90	18,20	18,20	17,80	16,20	17,50
U	3,60	3,60	3,80	3,10	3,80	4,20	5,00	4,30	3,00	3,00
Yb	3,60	4,00	3,40	2,50	4,20	3,30	3,70	3,80	3,20	4,00

Ce	132,80	115,10	101,00	102,10	92,00	112,20	106,30	119,20	113,60	111,80
Cr	103,20	90,60	91,10	93,40	93,90	99,60	91,10	88,90	96,60	96,20
Cs	9,70	10,40	8,90	8,20	10,20	11,60	10,50	11,40	9,50	8,60
Eu	1,80	2,00	1,80	1,80	1,60	1,90	1,70	1,90	1,90	2,00
Fe(%)	6,40	5,90	7,00	6,30	6,40	6,10	5,60	5,60	6,00	6,50
Hf	6,80	7,30	9,40	8,00	8,10	8,20	7,40	8,70	5,30	6,00
K(%)	2,50	2,00	2,50	2,30	2,90	3,10	2,50	2,90	1,90	1,70
La	62,40	61,00	52,50	52,40	50,70	58,40	57,20	55,60	56,60	58,40
Lu	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60
Na(%)	0,40	0,30	0,50	0,60	0,50	0,40	0,70	0,60	0,40	0,50
Sc	21,00	18,30	18,00	18,00	18,60	20,60	19,20	18,00	18,90	20,00

Tb	1,00	0,90	1,10	0,90	0,50	1,10	0,40	1,20	1,20	1,30
Th	19,10	18,20	18,00	18,80	18,90	19,80	18,80	17,60	18,00	18,40
U	3,60	4,60	3,50	3,30	3,60	3,50	3,20	3,20	4,20	3,50
Yb	4,30	4,00	4,10	3,20	3,40	3,90	3,70	4,20	3,80	4,20
Ce	102,20	104,90	102,30	101,10	94,10	99,70	121,60	91,70	96,10	113,40
Cr	80,90	88,10	91,70	80,00	90,60	94,00	96,90	79,70	76,60	100,80
Cs	7,40	8,30	10,70	7,70	9,20	9,00	12,60	9,00	8,60	9,00
Eu	1,90	1,90	1,60	1,60	1,50	1,50	2,30	1,60	1,60	1,90
Fe(%)	4,70	5,50	5,50	5,00	5,30	6,40	6,90	4,70	4,50	4,90
Hf	9,30	5,80	8,20	9,20	8,40	7,20	6,20	5,60	8,00	7,70
K(%)	1,60	2,10	2,20	1,80	2,00	2,30	2,10	2,20	2,10	2,40
La	52,00	52,90	55,10	49,20	50,80	52,00	62,50	45,60	48,50	58,40
Lu	0,70	0,50	0,70	0,50	0,50	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60
Na(%)	0,50	0,50	0,70	0,50	0,50	0,50	0,60	0,40	0,70	0,50
Sc	16,30	18,80	19,30	16,40	18,00	19,10	20,60	18,10	16,40	18,80
Tb	1,20	1,00	0,80	1,10	0,80	0,90	1,00	1,20	0,60	1,30
Th	16,60	18,40	19,10	16,50	17,60	18,90	18,90	16,70	15,60	19,00
U	4,50	3,10	4,60	3,80	4,60	3,50	3,70	3,60	3,80	4,30
Yb	4,30	3,70	3,80	3,70	3,60	3,70	4,00	3,50	3,40	4,30
Ce	101,50	96,90	126,30	94,50	85,40	92,00	119,20	106,40	125,60	108,40
Cr	93,50	94,20	90,70	88,20	95,70	90,70	97,20	94,70	104,60	101,40
Cs	11,60	10,70	10,20	7,30	7,60	8,60	9,30	9,70	9,60	9,20
Eu	1,80	1,80	2,00	1,60	1,30	1,80	2,10	1,80	1,90	1,80
Fe(%)	5,40	5,50	6,00	5,40	7,00	5,50	5,30	5,30	6,40	5,10

Hf	7,00	9,40	5,90	4,70	6,00	5,70	5,40	5,80	4,70	6,70
K(%)	2,20	2,40	2,90	1,80	1,70	1,70	2,10	2,20	2,10	2,20
La	55,50	51,10	67,50	50,90	46,80	47,30	61,40	53,60	65,00	55,40
Lu	0,60	0,50	0,60	0,50	0,50	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60
Na(%)	0,50	0,70	0,70	0,50	0,50	0,60	0,60	0,60	0,30	0,70
Sc	19,50	18,30	19,10	17,40	18,50	17,90	20,20	19,10	22,30	18,20
Tb	1,10	1,40	1,10	1,40	1,10	0,90	0,90	0,90	0,80	0,90
Th	17,20	18,00	18,50	16,50	17,80	16,60	19,60	19,20	23,10	18,00
U	3,80	4,80	5,10	3,30	4,40	2,90	4,30	3,30	3,90	4,90
Yb	3,50	4,00	4,10	3,70	3,50	3,20	3,90	3,90	3,70	3,30

Ce	101,20	116,50	114,70	96,50	113,60	97,80	79,10	93,10	98,50	127,40
Cr	86,50	87,60	99,30	80,60	87,90	74,70	87,30	77,40	86,90	88,80
Cs	7,80	11,10	11,10	7,70	11,30	8,40	6,30	7,80	8,80	6,60
Eu	1,70	2,10	2,00	1,90	2,30	1,80	1,60	1,90	1,40	1,80
Fe(%)	6,90	6,20	5,70	5,20	4,90	4,30	4,30	4,90	7,00	6,00
Hf	7,70	6,60	6,10	7,80	4,90	5,80	5,90	8,50	7,30	7,10
K(%)	2,30	3,10	2,70	3,40	2,40	2,70	1,80	1,90	2,00	1,40
La	55,70	63,00	57,90	49,80	59,80	51,60	39,00	48,60	48,00	60,40
Lu	0,50	0,60	0,70	0,60	0,60	0,40	0,50	0,60	0,50	0,70
Na(%)	0,40	0,40	0,50	0,50	0,50	0,50	0,30	0,30	0,60	0,60
Sc	19,90	20,00	19,40	17,50	20,30	17,20	16,80	18,10	17,10	18,00
Tb	1,40	1,10	0,90	0,80	0,90	1,10	0,80	1,00	0,60	1,10
Th	19,60	18,90	18,20	17,50	19,00	16,40	14,80	17,80	17,40	17,40
U	4,00	4,60	3,40	3,40	4,00	3,00	4,30	4,10	3,80	4,00
Yb	4,00	3,90	3,90	3,80	3,60	3,30	3,30	3,60	3,40	4,00

Ce	93,30	102,00	114,70	115,70	114,50	116,60	100,00	113,30	100,20	99,30
-----------	-------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	-------

Cr	83,70	73,00	68,90	105,00	61,00	108,40	69,90	89,70	82,20	87,30
Cs	9,10	10,80	10,70	11,80	6,30	9,40	8,80	8,50	6,90	7,80
Eu	1,70	1,90	1,90	2,10	1,90	2,30	1,90	2,10	1,80	2,00
Fe(%)	5,70	3,40	2,80	6,20	2,50	7,10	2,90	5,30	5,20	4,90
Hf	6,00	5,70	6,00	5,20	5,70	7,10	4,50	7,00	6,70	7,00
K(%)	1,80	1,60	1,80	2,30	1,20	1,70	1,80	2,30	2,10	2,20
La	48,40	53,10	58,10	62,20	62,50	61,50	53,50	58,20	53,30	53,80
Lu	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,70	0,60	0,60	0,60	0,60
Na(%)	0,40	0,40	0,40	0,50	0,40	0,40	0,40	0,50	0,50	0,50
Sc	18,40	17,60	16,70	20,80	13,90	21,10	16,00	19,00	16,90	17,70
Tb	0,80	1,00	1,20	1,10	1,30	1,40	1,20	1,40	1,10	1,00
Th	17,60	18,00	18,50	20,00	15,70	19,80	16,40	17,50	16,50	16,60
U	3,60	4,80	4,50	3,50	3,80	4,30	4,50	3,90	3,60	3,20
Yb	3,70	3,80	3,90	4,00	4,00	4,20	3,80	3,90	3,70	3,60
Ce	131,00	97,80	120,00	97,70	89,90	107,80	119,70	90,10	124,40	107,80
Cr	96,20	90,70	101,20	91,50	92,20	105,20	102,00	72,30	101,10	91,40
Cs	8,70	7,10	9,70	9,50	8,40	10,80	10,00	6,80	12,00	7,00
Eu	1,90	1,90	2,10	1,70	1,70	2,10	2,20	1,70	2,20	2,20
Fe(%)	6,30	5,80	5,40	6,00	3,90	5,90	7,30	5,40	6,20	5,80
Hf	6,10	7,70	7,40	8,20	7,90	6,90	6,30	8,90	6,10	9,20
K(%)	2,20	2,50	2,00	2,30	1,80	2,30	2,20	1,90	2,40	1,60
La	58,80	54,20	62,70	52,50	46,30	56,00	63,00	46,10	64,30	59,80
Lu	0,60	0,60	0,70	0,60	0,60	0,70	0,70	0,60	0,60	0,70
Na(%)	0,60	0,60	0,40	0,60	0,40	0,70	0,60	0,40	0,70	0,50
Sc	19,00	17,50	20,30	18,50	18,00	19,80	20,60	15,60	21,30	18,30
Tb	1,30	1,20	1,40	0,90	1,00	1,00	1,40	1,20	1,50	0,90
Th	18,30	17,40	19,10	18,70	16,60	18,90	20,00	15,70	19,80	17,90

U	4,00	3,60	4,80	3,90	3,80	3,90	4,50	3,70	4,50	4,30
Yb	3,80	3,60	4,10	4,20	3,50	3,90	4,10	3,70	4,00	4,40
Ce	113,70	120,10	92,20	115,60	103,70	117,00	108,80	110,60	136,80	116,30
Cr	106,30	104,80	85,30	97,90	102,70	98,70	95,50	97,50	99,00	105,20
Cs	7,80	9,40	7,60	7,60	8,90	11,40	7,70	9,50	10,50	10,90
Eu	2,00	2,00	1,80	2,00	1,70	2,00	2,00	1,90	2,00	2,00
Fe(%)	6,10	7,90	6,80	6,40	6,30	5,80	7,10	5,90	6,90	5,10
Hf	7,50	5,60	6,60	6,60	5,90	6,00	7,10	7,20	6,70	6,80
K(%)	1,60	2,30	2,20	2,40	2,10	2,20	1,80	2,50	3,10	2,00
La	59,50	57,30	45,20	60,90	54,60	61,20	52,00	57,20	58,50	61,90
Lu	0,70	0,60	0,60	0,70	0,50	0,60	0,70	0,60	0,50	0,50
Na(%)	0,50	0,50	0,40	0,40	0,50	0,30	0,90	0,70	0,70	0,50
Sc	19,60	20,00	17,20	18,40	20,00	21,00	18,70	19,20	19,40	21,80
Tb	1,20	1,30	1,10	1,10	0,90	0,90	1,50	1,00	1,40	1,60
Th	19,80	19,10	16,20	18,00	18,90	18,80	17,20	17,40	18,20	19,10
U	4,20	3,70	3,80	4,50	3,80	3,80	4,50	4,20	5,20	5,40
Yb	4,20	4,10	3,80	4,20	3,50	4,00	4,20	4,10	4,30	4,00
Ce	90,40	111,20	107,20	124,70	108,70	113,10	107,60	83,00	107,80	114,70
Cr	83,50	87,50	85,20	91,80	95,70	86,80	83,20	60,60	85,20	92,50
Cs	8,70	7,90	10,00	11,00	9,70	10,00	9,10	8,20	10,60	10,40
Eu	1,50	1,90	1,60	1,90	2,10	1,90	1,80	1,60	1,70	1,90
Fe(%)	5,00	5,10	5,70	6,20	5,20	5,80	4,80	3,00	5,30	5,70
Hf	6,10	10,40	7,20	7,20	9,70	7,10	9,90	3,60	8,70	7,10
K(%)	1,70	1,80	2,10	1,90	1,60	2,00	1,80	2,40	2,50	2,50
La	47,80	58,80	55,50	59,00	59,80	58,10	54,30	44,10	56,60	61,20

Lu	0,60	0,60	0,50	0,50	0,60	0,60	0,60	0,50	0,60	0,70
Na(%)	0,60	0,50	0,70	0,60	0,30	0,50	0,70	0,10	0,50	0,50
Sc	18,20	17,80	18,30	20,00	19,90	19,90	17,20	15,50	18,10	20,40
Tb	0,90	2,10	1,30	1,10	1,00	1,50	1,30	0,80	1,40	1,50
Th	16,30	17,70	17,00	18,70	19,40	18,70	17,10	14,60	17,20	18,60
U	3,80	4,60	4,60	4,20	4,60	3,40	2,80	3,80	3,30	3,60
Yb	3,70	4,50	4,00	4,10	4,70	4,00	3,90	2,90	4,10	4,20
Ce	112,50	119,10	109,30	98,10	92,40	102,50	93,10	86,50	95,40	92,80
Cr	95,50	98,80	84,90	85,20	78,20	70,70	77,10	85,80	76,20	95,50
Cs	8,60	8,50	8,20	9,00	7,40	10,60	7,40	7,40	8,40	10,60
Eu	1,90	2,00	1,80	1,70	1,50	1,70	1,60	1,30	1,60	1,60
Fe(%)	5,20	4,60	5,30	5,80	4,70	2,90	4,80	5,80	5,00	5,30
Hf	8,50	7,10	7,10	7,20	8,10	6,20	9,30	7,40	8,90	6,30
K(%)	2,10	1,60	2,00	2,60	2,60	2,10	2,10	2,00	2,00	1,80
La	58,90	60,60	54,80	49,80	48,60	50,10	47,70	45,90	49,10	45,30
Lu	0,70	0,70	0,60	0,60	0,50	0,60	0,60	0,60	0,50	0,60
Na(%)	0,40	0,90	0,50	0,60	0,60	0,30	0,50	0,60	0,60	0,40
Sc	19,10	19,60	18,50	18,30	16,70	17,50	15,50	17,30	16,30	19,80
Tb	1,10	1,30	0,90	0,90	1,00	0,70	1,00	0,90	0,90	1,10
Th	18,20	19,30	17,30	17,50	16,40	18,00	15,40	17,30	16,70	20,00
U	3,70	4,60	3,20	3,20	3,70	4,50	4,10	3,80	3,20	4,20
Yb	4,50	4,30	3,80	3,60	3,50	3,70	3,70	2,60	3,50	3,60
Ce	81,40	105,20	111,50	94,70	139,80	111,70	93,50	105,10	125,10	114,40
Cr	72,10	93,10	102,90	83,50	96,10	99,70	86,90	96,50	63,60	83,80
Cs	9,30	9,60	9,30	8,80	8,20	9,10	8,00	10,00	6,20	5,70
Eu	1,40	1,80	1,90	1,30	1,90	1,50	1,40	1,80	2,10	2,30

Fe(%)	2,80	6,10	5,80	6,70	5,30	4,70	4,90	5,50	2,60	4,20
Hf	5,90	8,00	7,60	8,90	7,50	5,70	7,90	6,70	6,70	8,20
K(%)	2,00	2,20	2,20	2,10	2,20	2,90	2,20	2,30	1,30	2,80
La	40,50	55,60	56,40	49,10	61,90	62,00	48,00	54,90	62,60	55,80
Lu	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60	0,70	0,70
Na(%)	0,40	0,40	0,80	0,60	0,50	0,50	0,70	0,60	0,40	0,40
Sc	16,20	19,60	19,30	17,00	18,70	19,50	16,10	19,00	14,60	16,70
Tb	0,70	0,90	1,40	0,60	1,40	1,30	1,70	1,30	1,30	1,00
Th	14,70	20,10	19,20	18,60	18,30	20,40	17,00	18,80	17,20	16,80
U	4,30	4,50	4,50	3,80	4,40	6,10	2,80	4,20	4,20	3,90
Yb	3,70	3,80	3,90	3,30	3,80	3,50	3,30	3,80	4,10	4,40
Ce	112,10	101,00	109,10	107,10	90,60	95,10				
Cr	101,70	95,60	76,20	91,20	91,20	86,90				
Cs	10,80	6,50	10,70	6,60	8,80	9,00				
Eu	2,00	1,80	2,20	2,10	1,50	1,80				
Fe(%)	5,70	6,30	3,40	5,50	5,40	4,30				
Hf	5,90	6,20	6,10	7,00	5,80	8,40				
K(%)	2,20	2,20	2,50	2,10	2,20	2,10				
La	58,10	54,50	54,40	53,20	49,10	49,20				
Lu	0,50	0,50	0,60	0,50	0,60	0,60				
Na(%)	0,50	0,40	0,50	0,50	0,60	0,60				
Sc	21,00	17,60	17,70	17,80	18,90	16,90				
Tb	0,90	0,70	1,00	1,20	0,80	0,70				
Th	20,00	17,70	17,30	18,20	18,40	17,00				
U	4,20	3,60	4,70	2,60	3,60	3,40				
Yb	3,60	3,60	4,20	4,00	3,20	3,80				

Conjunto de dados 5 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.
Ce	34,63	22,46	65,07	25,95	71,53	86,68	34,98	21,89	20,39
Co	6,49	4,22	18,01	4,55	23,49	8,78	3,90	5,06	3,30
Cr	30,81	16,69	43,17	19,49	56,78	34,66	14,07	11,59	13,79
Cs	3,10	1,94	5,72	2,40	6,42	4,94	1,67	1,42	1,71
Eu	0,53	0,46	1,05	0,42	1,53	1,01	0,60	0,40	0,48
Fe	14800,00	9100,00	28400,00	10000,00	40300,00	30300,00	10400,00	7700,00	8800,00
Hf	2,24	3,39	4,10	2,25	5,05	4,63	1,97	1,90	1,76
La	23,82	20,49	35,53	21,35	38,12	47,09	30,21	22,21	22,47
Lu	0,15	0,11	0,36	0,13	0,50	0,27	0,20	0,13	0,11
Na	960,00	860,00	1800,00	900,00	2910,00	1080,00	540,00	660,00	630,00
Sc	5,38	3,30	10,32	3,83	14,03	9,60	3,87	2,59	2,84
Th	6,37	3,92	11,63	5,60	13,16	16,38	5,79	3,44	3,54
U	1,94	1,19	3,32	1,95	2,35	2,26	0,74	0,62	0,67
Yb	1,16	0,63	2,34	0,76	3,14	1,56	1,16	0,66	0,76
Ce	23,22	18,55	23,46	59,13	19,58	37,20	105,44	72,87	44,36
Co	2,48	5,21	3,59	23,02	4,49	7,33	43,69	27,09	5,32
Cr	10,95	27,60	11,65	47,56	19,13	18,34	103,91	61,26	53,09
Cs	1,40	1,80	1,45	6,62	1,99	3,35	14,53	7,75	5,82
Eu	0,53	0,40	0,44	1,22	0,41	0,67	1,95	1,28	0,44
Fe	6300,00	9600,00	8500,00	38100,00	8900,00	16700,00	81600,00	47200,00	28800,00
Hf	1,46	1,80	1,77	3,32	1,77	3,04	6,18	4,19	7,18
La	22,10	16,53	23,54	31,62	16,57	31,04	52,12	36,92	21,16
Lu	0,11	0,13	0,08	0,48	0,09	0,21	0,78	0,47	0,28
Na	470,00	2130,00	560,00	1800,00	1440,00	690,00	1610,00	1630,00	910,00

Sc	2,69	3,16	2,84	12,03	2,65	4,87	25,22	14,72	7,90
Th	3,86	3,25	3,55	9,24	3,87	6,10	19,45	11,69	11,73
U	0,76	0,88	0,76	2,10	0,77	1,61	3,47	1,27	3,05
Yb	0,72	0,69	0,65	3,06	0,76	1,20	5,29	3,19	1,49
Ce	133,13	108,90	92,61	117,02	99,17	99,32	53,20	25,43	30,88
Co	43,55	41,21	35,58	47,19	44,47	39,82	7,81	4,31	5,42
Cr	100,37	100,04	76,11	110,79	85,43	89,11	26,87	20,27	22,33
Cs	12,32	13,17	8,94	15,07	11,48	12,45	3,69	2,44	3,13
Eu	1,98	2,02	1,57	2,25	1,76	1,75	0,91	0,44	0,54
Fe	84400,00	83800,00	60900,00	85200,00	62700,00	67400,00	18000,00	10700,00	13400,00
Hf	6,15	5,51	4,17	6,77	5,22	5,39	3,48	2,70	2,39
La	56,92	56,32	44,40	57,53	48,69	48,18	40,04	22,09	25,03
Lu	0,84	0,84	0,63	0,85	0,64	0,65	0,21	0,10	0,12
Na	1850,00	1870,00	2620,00	1850,00	3050,00	2350,00	1250,00	710,00	790,00
Sc	26,03	25,34	18,60	26,85	18,96	20,73	6,45	3,61	4,82
Th	19,91	19,91	14,25	23,44	16,91	16,93	10,38	4,83	5,85
U	3,29	3,61	3,72	3,19	2,76	2,57	1,20	1,24	1,04
Yb	5,10	4,90	3,88	5,77	4,44	4,64	1,54B	0,83	1,10
Ce	80,08	30,33	35,77	30,02	63,16	53,95	266,10	28,57	79,44
Co	30,41	4,16	4,90	6,75	8,81	5,80	8,24	4,57	8,38
Cr	56,42	21,64	26,44	26,46	43,35	30,02	26,68	15,19	38,61
Cs	7,97	2,09	3,00	2,77	6,61	4,56	5,72	1,69	3,07
Eu	1,58	0,41	0,56	0,54	0,46	0,61	0,53	0,45	1,11
Fe	47900,00	10800,00	14700,00	15900,00	29300,00	24300,00	25840,00	9300,00	28137,00
Hf	4,08	2,17	2,57	1,55	9,05	7,40	4,84	2,25	8,70

La	41,67	24,19	24,09	17,35	29,64	30,12	86,06	20,94	42,10
Lu	0,56	0,15	0,19	0,15	0,30	0,26	0,33	0,12	0,31
Na	2380,0 0	730,00	1200,0 0	940,00	320,00	1040,0 0	20446, 00	1660,0 0	4868,0 0
Sc	14,78	3,71	5,02	4,73	8,59	6,49	9,67	2,88	7,28
Th	12,51	5,84	6,53	5,56	16,03	13,57	103,20	5,17	17,53
U	1,84	0,94	1,58	1,77	3,25	2,09	2,74	1,32	4,12
Yb	3,59	0,97	1,06	0,81	1,77	1,47	0,96	0,67	2,07
Ce	31,21	51,27	51,21	26,72	27,75	18,08	42,21	8,13	28,23
Co	7,49	8,48	8,56	3,88	4,22	3,29	9,15	1,04	6,05
Cr	24,89	29,78	31,75	14,98	13,87	12,49	18,06	4,19	17,21
Cs	3,07	3,73	4,54	1,84	1,57	1,77	2,91	0,64	2,19
Eu	0,62	0,90	0,87	0,57	0,47	0,43	0,76	0,20	0,59
Fe	15100, 00	21200, 00	22100, 00	11000, 00	8700,0 0	8700,0 0	18400, 00	2960,0 0	13400, 00
Hf	2,51	3,89	3,37	1,84	1,65	2,88	2,20	0,77	2,55
La	22,06	35,07	36,46	25,05	27,36	20,51	32,31	22,52	25,19
Lu	0,18	0,26	0,23	0,12	0,11	0,11	0,18	0,12	0,14
Na	830,00	1040,0 0	1020,0 0	690,00	690,00	760,00	830,00	664,00	1180,0 0
Sc	5,36	7,31	7,24	3,19	2,96	2,76	5,32	1,10	3,77
Th	6,20	11,46	9,82	4,25	4,87	2,94	6,73	1,37	5,15
U	1,52	1,53	1,56	0,67	0,48	1,12	1,48	0,76	1,08
Yb	1,03	1,36	1,42	0,68	0,64	0,65	1,11	0,62	0,94
Ce	32,79	18,05	17,02	27,62	28,80	28,43	34,07	29,46	23,84
Co	5,74	3,39	3,18	3,29	4,63	4,09	5,13	3,42	4,82
Cr	21,82	9,20	6,18	13,40	19,46	18,95	16,43	15,78	16,49
Cs	3,00	1,53	0,93	1,68	2,59	2,63	2,33	1,58	1,79

Eu	0,58	0,49	0,36	0,44	0,49	0,44	0,67	0,52	0,46
Fe	15700,00	7200,00	3928,00	8057,00	13000,00	13900,00	13300,00	9100,00	12100,00
Hf	3,23	1,88	0,79	2,43	2,19	3,32	2,08	1,98	1,80
La	24,14	22,97	25,28	26,06	22,13	22,95	29,64	25,83	22,74
Lu	0,18	0,08	0,07	0,12	0,18	0,19	0,16	0,13	0,14
Na	930,00	600,00	427,00	448,00	1030,00	870,00	650,00	610,00	720,00
Sc	4,74	2,58	1,83	3,40	4,05	4,45	4,20	3,51	3,76
Th	5,45	3,34	2,35	5,70	5,08	5,84	5,56	5,19	3,94
U	0,78	0,76	1,93	0,08	1,31	1,15	0,65	1,08	0,93
Yb	1,02	0,55	0,35	0,78	1,04	1,04	0,99	0,98	0,73
Ce	18,85	43,10	28,46	25,69	36,42	26,87			
Co	4,03	5,77	4,50	4,20	5,83	5,02			
Cr	14,47	22,95	18,59	24,16	17,73	17,92			
Cs	1,35	2,15	2,62	2,92	2,41	1,71			
Eu	0,54	0,65	0,52	0,43	0,58	0,45			
Fe	7800,00	16700,00	13400,00	13398,00	17700,00	10300,00			
Hf	1,66	3,34	3,19	2,40	2,15	1,76			
La	23,62	32,54	21,86	19,59	27,73	22,45			
Lu	0,09	0,23	0,15	0,13	0,15	0,12			
Na	620,00	770,00	1130,00	940,00	800,00	1510,00			
Sc	2,85	5,73	4,26	4,70	4,37	3,13			
Th	3,52	10,15	5,65	5,27	6,39	4,45			
U	0,99	1,16	1,46	1,22	0,91	0,87			
Yb	0,77	1,38	0,81	0,93	0,95	0,67			

Conjunto de dados 6 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.
As	93,10	93,00	102,00	96,40	96,10
Ba	982,00	---	832,00	917,00	910,00
Br	4,50	5,90	---	---	5,20
Ce	69,00	68,00	64,00	75,00	69,00
Co	10,20	9,70	9,50	9,10	9,63
Cr	45,00	42,00	46,00	45,00	44,50
Eu	1,06	1,09	1,15	1,12	1,11
Fe (%)	3,05	2,83	2,79	2,73	2,85
K	---	---	---	---	---
La	36,20	40,50	36,30	35,20	37,10
Lu	0,49	0,47	0,46	0,51	0,48
Na (%)	1,06	1,06	1,09	1,10	1,08
Nd	34,80	28,90	17,00	22,00	25,70
Rb	112,00	105,00	107,00	102,00	107,00
Sb	18,70	20,90	18,90	17,70	19,10
Sc	8,81	8,62	8,83	8,60	8,72
Sm	5,12	5,30	5,72	5,66	5,45
Tb	0,68	1,01	---	1,08	0,92
Th	13,10	13,20	12,60	13,00	13,00
U	2,80	3,60	3,60	4,20	3,55
Yb	2,88	2,61	2,77	3,08	2,84
Zn	364,00	---	322,00	330,00	339,00

Elem.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.	Conc.
As	16,50	16,90	18,50	18,00	17,50
Ba	611,00	584,00	492,00	547,00	559,00
Br	---	18,00	---	19,00	18,50
Ce	61,50	60,00	58,00	61,00	60,10
Co	14,90	14,00	14,70	13,90	14,40
Cr	137,00	148,00	149,00	---	145,00
Eu	---	1,18	1,28	1,43	1,30
Fe (%)	6,33	5,86	5,99	5,71	5,97
K	2,55	---	---	---	2,55
La	31,00	28,60	31,00	30,20	30,20
Lu	0,45	0,38	0,39	0,50	0,43
Na (%)	0,66	0,65	0,69	0,68	0,67
Nd	---	---	---	---	---
Rb	87,00	82,00	93,00	91,10	88,30
Sb	---	---	2,30	---	2,30
Sc	9,97	9,74	10,20	9,91	9,96
Sm	---	---	---	---	---
Tb	0,69	0,60	---	---	0,65
Th	---	---	---	---	---
U	3,40	3,00	3,30	---	3,23
Yb	2,80	2,60	2,50	---	2,63
Zn	1491,0 0	1416,0 0	1198,0 0	1337,0 0	1361,0 0

As	16,50	16,90	18,50	18,00	17,50
-----------	-------	-------	-------	-------	-------

Ba	611,00	584,00	492,00	547,00	559,00
Br	---	18,00	---	19,00	18,50
Ce	61,50	60,00	58,00	61,00	60,10
Co	14,90	14,00	14,70	13,90	14,40
Cr	137,00	148,00	149,00	---	145,00
Eu	---	1,18	1,28	1,43	1,30
Fe (%)	6,33	5,86	5,99	5,71	5,97
K	2,55	---	---	---	2,55
La	31,00	28,60	31,00	30,20	30,20
Lu	0,45	0,38	0,39	0,50	0,43
Na (%)	0,66	0,65	0,69	0,68	0,67
Nd	---	---	---	---	---
Rb	87,00	82,00	93,00	91,10	88,30
Sb	---	---	2,30	---	2,30
Sc	9,97	9,74	10,20	9,91	9,96
Sm	---	---	---	---	---
Tb	0,69	0,60	---	---	0,65
Th	---	---	---	---	---
U	3,40	3,00	3,30	---	3,23
Yb	2,80	2,60	2,50	---	2,63
Zn	1491,0 0	1416,0 0	1198,0 0	1337,0 0	1361,0 0

As	---	---	---	---	---
Ba	1266,0 0	1204,0 0	1261,0 0	1223,0 0	1239,0 0

Br	---	---	---	---	---
Ce	131,00	137,00	128,00	158,00	139,00
Co	60,40	57,30	60,30	58,80	59,20
Cr	---	327,00	345,00	338,00	337,00
Eu	---	3,60	3,60	3,50	3,67
Fe (%)	8,99	8,59	8,66	8,43	8,67
K	---	---	---	---	---
La	76,00	83,10	73,80	78,00	77,70
Lu	0,27	0,24	0,27	0,32	0,28
Na (%)	2,01	---	2,04	2,17	2,07
Nd	69,00	61,00	53,00	72,00	63,80
Rb	58,00	40,00	50,00	53,00	50,20
Sb	---	---	---	---	---
Sc	20,00	19,90	21,20	21,00	20,50
Sm	10,40	10,20	10,50	11,30	10,60
Tb	1,50	1,30	---	1,40	1,40
Th	9,50	9,40	10,00	9,90	9,70
U	2,30	2,30	1,80	2,60	2,25
Yb	1,81	1,81	1,57	1,79	1,75
Zn	---	132,00	---	134,00	133,00

Conjunto de dados 7 - NIST - Oyster Tissue 1566b

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert
As	8,00	0,20	7,60	0,20	7,20	0,20	7,60	0,20	7,40	0,20
Ca	826,00	58,00	824,00	58,00	878,00	61,00	775,00	54,00	---	
Cd	2,40	0,20	2,60	0,20	2,40	0,20	2,40	0,20	2,40	0,20
Co	0,37	0,05	0,41	0,05	0,36	0,05	0,36	0,05	0,38	0,05
Fe	205,00	18,00	203,00	18,00	201,00	18,00	207,00	18,00	206,00	18,00
Hg	0,04	0,00	0,04	0,00	0,04	0,00	0,04	0,00	0,04	0,00
Na	3261,0 0	62,00	3383,0 0	64,00	3288,0 0	62,00	3270,0 0	62,00	3361,0 0	64,00
Pb	0,32	0,02	0,31	0,02	0,32	0,02	0,32	0,02	---	
Se	2,20	0,20	2,20	0,20	2,10	0,20	2,00	0,20	2,10	0,20
Zn	1350,0 0	56,00	1366,0 0	92,00	1394,0 0	57,00	1442,0 0	58,00	1418,0 0	58,00

Elem.	Conc.	Incert.
As	8,00	0,20
Ca	---	
Cd	2,40	0,20
Co	0,34	0,04
Fe	199,00	17,00
Hg	---	
Na	---	
Pb	---	
Se	2,10	0,20
Zn	1332,0 0	53,00

Conjunto de dados 8 - NIST 2976 Mussel Tissue

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.
As	13,10	0,40	14,40	0,40	12,50	0,30	12,40	0,30	12,60
Ca	7698,0 0	543,00	7420,0 0	519,00	7939,0 0	556,00	7458,0 0	522,00	---
Cd	0,87	0,07	0,83	0,06	0,81	0,06	0,83	0,06	0,81
Co	0,62	0,07	0,62	0,07	0,62	0,07	0,65	0,07	0,64
Cr	0,52	0,03	0,57	0,04	0,45	0,03	0,46	0,03	0,50
Fe	172,00	15,00	168,00	15,00	174,00	15,00	167,00	14,00	166,00
Hg	0,06	0,01	0,06	0,01	0,06	0,01	0,06	0,01	0,06
Na	30636, 00	582,00	32572, 00	619,00	33041, 00	628,00	33518, 00	637,00	32331, 00
Pb	1,30	0,10	1,09	0,09	1,30	0,10	1,17	0,09	1,18
Se	1,90	0,20	2,00	0,20	2,10	0,20	1,90	0,20	1,90
Zn	137,00	3,00	141,00	6,00	139,00	6,00	144,00	6,00	140,00

Elem.	Incert.	Conc.	Incert.
As	0,30	13,10	0,40
Ca		---	
Cd	0,06	0,86	0,07
Co	0,07	0,64	0,07
Cr	0,04	0,53	0,04
Fe	14,00	---	
Hg	0,01	---	
Na	614,00	33344, 00	634,00
Pb	0,09	1,07	0,08
Se	0,20	1,90	0,20
Zn	6,00	138,00	3,00

Conjunto de dados 9 - NIST-1515 Apple Leaves

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert
As*	0,03	0,01	0,04	0,01	0,03	0,01	0,04	0,00		.
Br	2,10	0,01	2,50	0,01	1,70	0,01	2,20	0,01		
Ca (%)	1,61	0,02	1,57	0,04	1,52	0,02	1,49	0,06		
Cl	485,00	21,00	498,00	26,00	479,00	21,00	519,00	35,00		
Co (ng g ⁻¹)	109,00	3,00	108,00	3,00	106,00	3,00	103,00	2,00	109,00	4,00
Cr (ng g ⁻¹)	984,00	21,00	743,00	19,00	748,00	22,00	825,00	18,00	928,00	24,00
Fe	83,10	1,50	83,40	2,00	80,00	1,30	80,40	2,00		
K (%)	1,67	0,01	1,54	0,01	1,61	0,02	1,66	0,01		
La	20,50	0,10	19,00	0,10	19,90	0,10	19,20	0,10	22,40	0,10
Mg (%)	0,24	0,03	0,22	0,03	0,28	0,03				
Mn	47,70	1,00	51,50	1,30	50,80	1,00				
Rb	10,10	0,20	10,10	0,10	9,60	0,20	9,30	0,10		
Sb (ng g ⁻¹)	18,90	2,10	17,70	2,80	17,30	2,50	14,90	3,30		
Sc (ng g ⁻¹)	30,80	0,20	28,90	0,50	31,50	0,30	32,00	0,20	30,60	0,30
Se	0,05	0,01	0,05	0,02	0,06	0,01				
Zn	13,90	0,30	12,90	0,20	11,40	0,10				

Conjunto de dados 10 - NIST-1573a Tomato Leaves

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert
*Br	1092,0 0	2,00	1089,0 0	2,00	1086,0 0	2,00				.
Ca (%)	5,53	0,23	5,50	0,23	4,50	0,10	4,77	0,12		
Cl (mg g ⁻¹)	5,60	0,20	5,80	0,20	5,90	0,30	6,10	0,10		
Co	0,57	0,02	0,63	0,01	0,59	0,01				
Cr	1,96	0,03	2,00	0,03	2,21	0,02	1,95	0,04		
Cs (ng g ⁻¹)	53,70	3,30	53,30	3,30	56,00	2,00	53,00	3,00		
Fe	366,00	10,00	361,00	10,00	3,58	3,00	3,46	4,00		
K (%)	2,95	0,10	2,21	0,30	2,91	0,17	2,92	0,23	2,31	0,17
La	2,16	0,02	2,21	0,02	2,10	0,01	2,20	0,02		
Mg (%)	1,11	0,05	1,26	0,05	1,10	0,08	1,14	0,05		
Mn	206,00	2,00	235,00	5,00	231,00	6,00	242,00	6,00		
Na	151,00	12,00	129,00	15,00	143,00	10,00	153,00	14,00	131,00	7,00
Rb	15,30	0,20	14,90	0,50	13,90	0,30	13,90	0,20		
Sb	0,07	0,01	0,07	0,01						
Sc (ng g ⁻¹)	103,00	1,00	102,00	1,00	108,00	1,00	103,00	1,00		
Se	0,11	0,02	0,06	0,02						
Zn	30,80	0,60	30,80	0,60	29,30	0,20	31,10	0,20		

Conjunto de dados 11 NCT-TL-1 Tea Leaves

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
As (ng g⁻¹)	99,40	9,4*		
Br	12,91	0,04	12,60	0,07
Ca (%)	0,55	0,00	0,58	0,01
Co (ng g⁻¹)	410,00	6,00	392,00	8,00
Cr	1,87	0,03	1,92	0,03
Cs	4,06	0,04	3,73	0,03
Fe	506,00	4,00	509,00	5,00
K (%)	1,74	0,01	1,73	0,01
La	0,93	0,01	0,99	0,01
Na	24,50	0,30	21,10	0,10
Rb	81,50	0,90	78,00	1,00
Sb (ng g⁻¹)	90,00	2,00	65,00	3,00
Sc (ng g⁻¹)	266,00	2,00	259,00	1,00
Se	0,08	0,02	0,06	0,01
Zn	36,80	0,40	34,00	0,30

Conjunto de dados 12 - IEA Soil-7

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Ca (%)	16,20	0,30	16,60	0,30	16,70	0,10		
Ce	63,30	0,50	63,60	0,50	62,50	0,50	64,00	0,50
Eu	1,03	0,03	0,98	0,03	0,94	0,03	1,04	0,04
Fe (%)	2,52	0,03	2,45	0,04	2,56	0,07	2,56	0,03

Hf	4,89	0,04	5,09	0,05	4,83	0,05	5,18	0,05
La	27,90	0,80	26,50	0,10	24,50	0,20	26,30	0,10
Lu	0,35	0,00	0,35	0,00	0,32	0,01	0,38	0,01
Nd	25,40	1,80	27,80	1,70	29,90	3,80	30,10	3,10
Rb	50,40	1,40	46,60	1,50	51,30	1,30	50,30	1,30
Sc	8,80	0,10	8,40	0,10	7,80	0,10	8,70	0,10
Sm	5,22	0,04	4,78	0,01	4,50	0,02	4,88	0,01
Tb	0,64	0,03	0,65	0,04	0,62	0,03	0,67	0,04
Th	7,82	0,05	7,91	0,07	8,36	0,06	8,27	0,07
U	2,19	0,06	2,46	0,06	2,01	0,12		
Yb	2,33	0,09	2,23	0,02	2,00	0,03	2,38	0,05
Zn	104,00	1,00	104,00	2,00	109,00	2,00	100,00	1,00

Conjunto de dados 13 - NIST- 1577c Bovine Liver

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	617,05	24,90	654,74	26,60	501,92	21,48	532,50	21,21
Cl	2753,20	74,12	2565,91	69,23	2465,21	66,94	2806,28	74,96
Mn	11,06	0,27	8,33	0,21	8,12	0,20	11,22	0,27

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	653,51	27,57	560,67	30,11	595,44	23,66	547,05	22,69
Cl	3191,50	89,04	2286,87	72,43	2793,92	73,55	2550,64	68,99
Mn	9,09	0,22	10,32	0,34	10,28	0,23	8,79	0,22

Conjunto de dados 14 - NIST- 1577c Bovine Liver

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	1929,0 0	20,00	1772,0 8	25,69	1970,0 0	30,00	1797,7 5	24,56
K								
Fe	192,78	4,50	183,72	4,32	173,56	4,05	180,00	4,38
Co	0,31	0,01	0,29	0,01	0,29	0,01	0,28	0,01
Zn	172,41	2,34	166,89	2,23	159,58	2,04	165,80	2,18
Se	2,15	0,13	2,15	0,14	1,92	0,11	1,97	0,13

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	1715,3 8	21,62	1971,9 2	29,99	1825,3 3	18,12	1860,1 4	18,73
K					9604,3 6	275,59	9622,1 4	281,17
Fe	188,13	3,59	187,86	4,18	180,29	3,81	181,80	3,97
Co	0,29	0,01	0,29	0,01	0,33	0,01	0,30	0,01
Zn	169,76	2,31	167,81	2,25	163,75	2,13	166,83	2,18
Se	1,97	0,10	1,95	0,14	1,97	0,13	1,85	0,14

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	1885,8 3	18,90	1724,4 7	17,80	1751,4 6	18,08	1766,7 3	18,43
K	9907,6 8	287,58	9141,9 6	273,67	9600,7 7	366,69	9486,0 0	395,18
Fe	188,36	4,06	160,96	3,86	163,68	4,11		
Co	0,30	0,01	0,26	0,01	0,27	0,01		
Zn	169,46	2,21	151,90	1,99	155,87	2,04		

Se	2,19	0,13	1,84	0,12	1,84	0,12		
Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	1783,5 4	14,16	1729,9 8	14,43	1927,9 6	16,22	1885,9 6	16,29
K	8926,3 3	337,44	8776,7 8	484,03	11734, 52	721,92	9838,8 0	637,08
Fe	190,93	4,47	180,17	4,30	196,19	4,64	178,15	4,76
Co	0,29	0,01	0,28	0,01	0,30	0,01	0,30	0,01
Zn	172,09	2,41	162,08	2,26	170,74	2,35	164,64	2,42
Se	2,16	0,14	1,76	0,14	1,97	0,12	2,02	0,14
Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.				
Na	1797,0 3	15,73	1826,0 0	23,00				
K	8980,2 5	593,50	10105, 55	614,00				
Conjunto de datos 15 - IPEN RB1								
Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	620,96	21,76	740,17	25,64	766,06	34,72	612,39	20,59
Cl	9535,6 5	237,63	8753,4 9	204,12	8652,6 7	209,20	8363,1 8	198,52
Mn	5,19	0,30	5,12	0,26	5,93	0,29	5,10	0,27
Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	692,87	23,68	810,21	28,99	652,92	23,91	613,71	663,50
Cl	9680,7 5	243,77	9319,8 5	230,79	9469,6 5	236,22	7772,0 2	9236,6 5
Mn	6,29	0,32	5,13	0,26	5,33	0,27	4,07	4,58

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	30,18	767,52	33,43	681,58	24,46	868,11	30,18	755,87
Cl	268,33	9045,2 7	217,84	8624,1 3	212,25	9230,4 4	221,95	10169, 87
Mn	0,34	5,22	0,28	5,32	0,28	5,98	0,29	5,03

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	32,60	773,59	32,50	741,37	36,36	600,06	679,79	31,67
Cl	249,74	9250,7 2	226,41	10238, 92	254,26	8711,2 1	8691,6 3	205,07
Mn	0,27	5,28	0,27	4,74	0,25	5,08	4,34	0,22

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	684,08	23,62	704,46	31,78	751,52	26,83	775,61	24,76
Cl	9099,0 8	221,96	9011,1 3	226,23	9364,5 0	232,54	9408,2 1	220,75
Mn	4,32	0,24	5,37	0,27	4,61	0,26	4,46	0,23

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	661,98	23,81	640,58	30,41	668,83	32,65	591,36	21,09
Cl	8844,2 3	219,48	10421, 91	263,71	9059,8 8	221,12	8104,7 1	196,77
Mn	4,79	0,31	5,12	0,29	5,72	0,30	5,21	0,29

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Mg	725,33	35,01	696,72	31,39	728,46	32,29	696,67	24,75
Cl	9849,0 9	242,13	8232,2 3	202,94	10951, 94	281,29	8822,3 3	214,61
Mn	5,67	0,30	4,54	0,24	5,90	0,31	4,59	0,27

Elem.	Conc.	Incert.
Mg	555,70	26,23
Cl	8193,1 5	200,66
Mn	3,87	0,21

Conjunto de datos 16 - IPEN RB1

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	9240,6 8	70,00	8152,3 2	67,00	8540,0 0	92,00	8532,4 1	101,00
K	12758, 16	847,00	10316, 30	814,00	12987, 00	896,00	12113, 66	780,00
Fe	273,50	6,17	242,19	5,55	233,12	4,98	253,04	5,88
Co	1,91	0,03	1,64	0,03	1,77	0,03	1,67	0,04
Zn	94,74	1,28	85,27	1,18	89,09	1,22	89,87	2,10
Se	7,34	0,15	6,43	0,14	6,93	0,15	6,90	0,18

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	8990,7 2	69,00	8365,6 9	68,00	8126,9 4	86,00	8275,8 5	63,00
K	12471, 20	860,00	11061, 76	824,00	12757, 67	880,00	12369, 68	853,00
Fe	270,79	5,68	252,94	5,32	238,34	5,32	243,87	5,18
Co	1,67	0,03	1,72	0,03	1,66	0,03	1,58	0,03
Zn	91,57	1,24	93,49	1,26	87,65	1,20	86,28	1,17
Se	7,08	0,15	6,83	0,15	6,65	0,14	6,63	0,14

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	8361,0 9	90,00	8227,0 5	67,00	8404,5 7	91,00	8289,8 6	68,00
K	12108, 73	812,00	10513, 67	785,00	12944, 65	853,00	10848, 85	795,00
Fe	233,34	5,17	264,17	5,67	235,18	5,13	240,33	5,00
Co	1,63	0,03	1,72	0,03	1,69	0,03	1,65	0,03
Zn	88,18	1,21	91,23	1,26	88,67	1,22	87,94	1,15
Se	6,66	0,14	6,67	0,14	6,67	0,14	6,62	0,14

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.
Na	8471,5 0	92,00	8045,2 0	61,00	8694,2 1	66,00	7907,1 9	84,00
K	12183, 98	875,00	11696, 44	757,00	12668, 99	810,00	11482, 17	723,00
Fe	241,66	5,16	222,84	4,73	259,51	5,54	236,90	5,02
Co	1,68	0,03	1,65	0,03	1,63	0,03	1,66	0,03
Zn	89,22	1,22	85,48	1,16	90,11	1,22	89,54	1,23
Se	6,89	0,15	6,19	0,13	6,67	0,14	6,70	0,14

Conjunto de dados 17 - NIST- 1577b Bovine liver

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert
Na	2252,6 7	26,20	2117,9 8	20,91	2348,9 0	19,09			2305,6 0	23,08
K	9201,6 8	1684,2 2	9071,8 5	1029,0 6	10003, 25	559,14			11344, 76	1490, 30
Fe	176,48	4,09	166,66	3,90	184,22	4,18	172,39	3,89	180,39	3,94
Co	0,23	0,01	0,21	0,01	0,23	0,01	0,22	0,01	0,22	0,01
Zn	113,04	1,53	105,53	1,51	114,36	1,53	109,62	1,50	116,62	1,58
Se	0,65	0,11	0,51	0,10	0,97	0,12	0,62	0,12	0,85	0,14

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert
Na	2214,2 3	21,73	2374,1 0	21,35	2057,8 1	22,89	2053,3 3	17,20	2085,0 3	17,39
K	10834, 97	1192,8 6	8816,8 3	831,49	6559,2 1	1033,7 1	8489,8 5	523,27	8461,6 6	470,1 7
Fe	172,67	4,14	171,60	3,82	184,31	4,15	171,15	4,05	158,71	3,86
Co	0,22	0,01	0,21	0,01	0,22	0,01	0,20	0,01	0,20	0,01
Zn	111,98	1,52	110,46	1,48	116,65	1,62	110,79	1,57	107,41	1,54
Se	0,71	0,10	0,76	0,11	0,75	0,12	0,63	0,11	0,62	0,10

Conjunto de dados 18 - NIST - Oyster Tissue 1566b

Elem.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert.	Conc.	Incert
Mg	3137,0 0	254,00	4764,0 0	318,00	4415,0 0	221,00	3854,0 0	320,00	4064,0 0	439,0 0
Cl	40540, 00	743,00	37934, 00	670,00	36673, 00	677,00	38950, 00	732,00	36997, 00	964,0 0
Br	223,00	9,10	227,00	21,00	228,00	26,00	288,00	35,00	259,00	48,00
Na	18158, 00	202,00	24455, 00	302,00	25103, 00	316,00	20989, 00	257,00	23450, 00	381,0 0
K	7437,0 0	477,80	9291,0 0	1080,0 0	9456,0 0	753,00	8350,0 0	958,00	8791,0 0	1144, 00
Mn	18,20	0,38	25,89	0,56	25,65	0,56	21,23	0,45	23,57	0,57

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Diretoria de Pesquisa, Desenvolvimento e Ensino
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 – Cidade Universitária CEP: 05508-000
Fone/Fax(0XX11) 3133-8908
SÃO PAULO – São Paulo – Brasil
<http://www.ipen.br>

**O IPEN é uma Autarquia vinculada à Secretaria de
Desenvolvimento, associada
à Universidade de São Paulo e gerida técnica e administrativamente pela
Comissão Nacional de Energia Nuclear, órgão do
Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações.**