



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA

**TRABAJO FIN DE GRADO EN INGENIERÍA DE LA ENERGÍA**

# **ANÁLISIS DE MONEDAS ROMANAS Y UBICACIÓN TEMPORAL DE LAS MISMAS, MEDIANTE FLUORESCENCIA DE RAYOS X**

AUTOR: Farga Niños, Gonzalo

TUTOR: Ródenas Diago, José

**Curso Académico: 2015-16**

# Agradecimientos

A José Luís Muñoz-Cobo, catedrático de la Universidad Politécnica de Valencia, coleccionista de monedas y propietario de los denarios que se analizan en este proyecto. Muchas gracias por tu participación.

A Belén Juste, por el tiempo gastado permitiéndome realizar mediciones y comprobando que los inputs fueran correctos.

A mis amigos y familia, por el apoyo recibido cuando me embarqué en este proyecto. A Belén, que me sugirió buscar puntos comunes entre la carrera y mis aficiones, a Lara, sin la que no tendría bibliografía de Arqueología con la que comparar los resultados, y a Elena, con la que tanto me he quejado de la cantidad de trabajo que supone un TFG en condiciones.

Y en especial, a Pepe. Por el tiempo, las oportunidades y la paciencia. Muchas gracias de corazón.

## Índice

I.	Introducción	pág. 3
	A. Antecedentes	
	B. Motivación	
	C. Justificación	
	D. Objetivos	
	E. Estructura del trabajo	
II.	Análisis de Fluorescencia de Rayos X	pág.7
	A. Introducción a la Física de Radiaciones	
	B. Producción de Fluorescencia	
	C. Tubos de Rayos X	
	D. Detectores de semiconductor	
III.	El Método de Monte Carlo	pág.20
	A. Introducción	
	B. El programa MCNP5	
	C. Aplicación de MCNP a los cálculos de fluorescencia	
IV.	Arqueometría	pág. 26
	A. El valor del análisis de fluorescencia de rayos X en Arqueometría	
	B. Otros métodos de datación	
V.	Construcción y verificación de un modelo que emplea una muestra certificada	pág. 30
	A. Medidas experimentales y análisis preliminares	
	B. Descripción del input para el modelo validado	
	C. Descripción del output y resultados para el modelo validado	
VI.	Cálculo de la dosis recibida durante las mediciones	pág.52
	A. Descripción del proceso de cálculo y del input	
	B. Resultados	
VII.	Cálculo de composición de monedas romanas	pág.61
	A. Medidas experimentales y análisis preliminares	
	B. Aplicación del modelo	
VIII.	Ubicación temporal de monedas romanas y conclusiones	pág.77
	▪ Anexo I: Tabla energía fluorescencias para cada elemento	
	▪ Anexo II: Datos técnicos del tubo de rayos X	
	▪ Anexo III: Datos técnicos del detector de silicio	
	▪ Anexo IV: Datos técnicos MCNP	
	▪ Anexo V: Inputs completos	

## I. INTRODUCCIÓN

En este proyecto se ha utilizado el Análisis por Fluorescencia de Rayos X, una técnica no destructiva basada en la interacción de los fotones con la materia, que permite calcular la composición de 4 monedas romanas y poder ubicarlas en un período histórico según la devaluación de los metales preciosos en el transcurso de la historia. Se ha creado un modelo en MCNP5 y se ha verificado con una muestra de composición conocida, con el fin de iniciar un proceso iterativo de comparación con los resultados experimentales hasta conseguir la composición de las monedas romanas.

### A. Antecedentes

El Análisis de Fluorescencia de Rayos X comenzó a utilizarse en torno a 1950 [1] y todas sus distintas modalidades han sido empleadas para investigar la composición de monedas con distintos grados de satisfacción en torno a los resultados obtenidos.

En los últimos años de la década de los 70, D. R. Walker publicó un estudio en tres partes titulado *The Metrology of the Roman Silver Coinage* en el que se detalla el análisis de más de 5449 monedas [2] y en el que ya se utilizó el Análisis de Fluorescencia de Rayos X.

Este trabajo, que fue considerado durante un tiempo una obra de referencia en el campo, fue posteriormente criticado porque los resultados mostraban en torno a un 10% más de contenido en plata [3]. Esto se debía a la unión de dos factores: la baja penetración de los rayos X no permitía conseguir información del contenido interno y la existencia de un baño de un mayor contenido en plata que se evidenció con análisis posteriores.

A principios de los años 80, el método de Emisión de Rayos X Inducido por Partículas (PIXE) empezó emplearse para obtener la composición de monedas de oro y plata en los estudios de Ferreira y Gil [4] y de Mommsen y Schmittinger [5]. Los resultados fueron especialmente satisfactorios, ya que elimina la necesidad de emplear estándares de referencia y los protones de alta energía dan una mejor información del contenido de las monedas porque presentan una mejor penetración que los rayos X.

Conforme se desarrollaron nuevos métodos de análisis y fueron evolucionando los ya existentes, el estudio de componentes que se encuentran en proporciones muy pequeñas ha ganado popularidad debido a la cantidad de información que se puede extraer de ellos. En 1995, Butcher y Ponting publicaron un estudio [6] sobre monedas de plata de Capadocia en la época de la Dinastía Flavia (del 69 al 96 d.C.), sobre las que se practicaron perforaciones de pequeño diámetro con el fin de estudiar someter la viruta obtenida al análisis y no cometer el mismo error que en el estudio de Walker. En este caso, se utilizó la técnica de la Espectroscopia de Absorción Atómica ya que permitía conseguir detectar trazas muy pequeñas de elementos [7] y gracias a ello se consiguió información sobre el proceso para acuñar monedas y su proveniencia geográfica.

Los mismos autores han pretendido unificar los conocimientos sobre monedas de plata de la Época Imperial, publicando estudios similares sobre monedas de otros períodos históricos y utilizando las mejores técnicas de análisis disponibles en cada momento. En [8], Butcher y Ponting desacreditan su trabajo previo ya que “las técnicas de muestreo han sido inapropiadas y no se ha tenido plenamente en consideración los procesos para crear monedas de plata utilizadas por los Romanos”. Otros estudios posteriores son [9], [10] y [11], entre otros.

Con el avance de técnicas que no presentan la desventaja de producir resultados representativos únicamente de la superficie, el método de análisis quedó en segundo plano durante algún tiempo. Sin embargo, las recientes mejoras en la óptica de rayos X han permitido dos avances significativos. Por un lado, y junto al desarrollo de detectores de radiación cada vez más pequeños, se han creado aparatos portátiles que son de alta utilidad para analizar muestras en excavaciones arqueológicas o en casos en los que desplazar la muestra supone una gran dificultad, como los frescos. Por otra parte, la aparición de la microespectroscopía de fluorescencia de rayos X permite conseguir resolución espacial de la muestra al poder enfocar a zonas concretas para realizar su análisis. Todo esto ha conseguido que este método de análisis haya vuelto a un primer plano en el estudio de composición de restos arqueológicos.

## B. Motivación (De qué le sirve al alumno)

En primer lugar, es un proyecto de un marcado carácter multidisciplinar. Para su realización se han requerido conceptos de diferentes ámbitos de la ciencia y la ingeniería, como Física de Radiaciones, Ciencia de Materiales o Métodos Numéricos. Esto permite que se aprenda a resolver problemas reales donde se debe dar una solución integrada en todos los ámbitos que sean necesarios.

Otra característica relevante del proyecto es su acusada relación con la ciencia social de la Historia. Así, se motiva la necesidad de dar un valor social a los resultados de un proyecto y además se expanden los conocimientos en materias no ingenieriles

Además, se aprenden las bases de los Métodos de Monte Carlo que se utilizan en distintos ámbitos de la ingeniería, y a desarrollar modelos en un programa muy utilizado tanto en Física de Radiaciones como en Física Nuclear, MCNP5.

El aspecto experimental del análisis de Fluorescencia de Rayos X refuerza el conocimiento de las normas de protección frente a radiación y el tratamiento de espectros de fotones estudiados en la asignatura de Protección Radiológica, así como las características de un buen trabajo de laboratorio para que los resultados obtenidos sean válidos y reproducibles.

Ante la situación de que la bibliografía especializada se encuentra en artículos de revistas internacionales o británicas, el alumno debe aprender a tratar grandes cantidades de información escritas en inglés.

### C. Justificación (Problemas que se pueden solucionar)

El resultado final del Análisis de Fluorescencia por Rayos X será la composición del objeto en cuestión. Esto quiere decir que podría utilizarse para efectuar controles de calidad sobre vidrios, aleaciones u otros bienes producidos industrialmente o para evaluar el contenido en azufre del crudo u otros productos de la industria petrolífera. Como los objetos de examen son monedas romanas, los resultados del proyecto son de interés en el ámbito de la Arqueología y la Conservación del Patrimonio.

En el ámbito arqueológico, conocer la composición de un artefacto puede tener diversas implicaciones: a partir de ella se puede estudiar si la tendencia en la utilización de unos materiales cambia significativamente en el tiempo, obtener información sobre qué tecnologías estuvieron disponibles para producirlo, etc. Con la mejora en la precisión de las técnicas de análisis no destructivas se ha fomentado el estudio de los oligoelementos, componentes que se encuentran en proporciones muy pequeñas, con los que se han llegado a establecer relaciones entre estos y las minas de las que fueron extraídos en el caso de materiales metálicos [12].

Por supuesto, el conocimiento de la composición permitirá a los restauradores establecer planes de restauración y conservación de los artefactos arqueológicos. En el caso de los metales, la oxidación suele ser un problema de gran importancia, frente a la cual el uso de agentes químicos es común y no debe alterar la composición.

Para la detección de falsificaciones, las técnicas de datación absoluta como la datación por carbono 14 o por termoluminiscencia presentan una mayor utilidad, debido a que permiten conocer cuánto tiempo hace del último contacto humano con la muestra. Sin embargo, el Análisis de Fluorescencia de Rayos X es muy eficaz para trabajar en materiales que se espera que tengan una composición homogénea y puede utilizarse como un análisis preliminar debido a que se puede emplear un equipo portátil directamente en el yacimiento.

Por otra parte, MCNP5 es el programa de cálculo que se ha utilizado en este análisis. Utiliza el Método de Monte Carlo para resolver problemas donde el transporte de electrones, neutrones o fotones sea central: dosimetría, diseño de blindajes, cálculos en Física Médica, análisis de criticidad de un reactor nuclear, etc. Es un código genérico muy flexible que permite la resolución de muchos problemas en el ámbito de la Física Nuclear y de Radiaciones.

## D. Objetivos

Los objetivos del proyecto son los siguientes:

- Realizar un Análisis de Fluorescencia de Rayos X sobre las monedas con el fin de identificar cualitativamente los materiales que la componen y de obtener un espectro de rayos X que sirva de base para la comparación.
- Crear un modelo en MCNP5, validado con muestras certificadas, que permita conocer su composición a partir de la comparación del espectro simulado con el experimental.
- Ubicar las monedas es sus correspondientes períodos históricos a partir de la composición obtenida y la información contenida en bibliografía.

## E. Estructura del Trabajo

El proyecto consta de dos partes bien diferenciadas.

En la primera se introducen las bases sobre las que se asienta el proyecto. Se describirán los principios físicos del Análisis por Fluorescencia de Rayos X y se comparará con otros métodos en el campo de la Arqueometría que pueden ofrecer información similar. También se detallarán las bases de los cálculos por Método de Monte Carlo y cómo se aplican en MCNP5.

En la segunda sección, se describen el trabajo de laboratorio realizado y el proceso de diseñar y verificar el modelo en MCNP5 que se utilizará. Posteriormente, se presentarán los resultados obtenidos y se efectuará su análisis para obtener unas conclusiones con las que se cerrará el Trabajo.

Además, se incluyen como anexos la información relativa a los sistemas que han sido necesarios para poder realizar el proyecto, los datos técnicos del programa MCNP5 y los códigos completos empleados para la resolución del proyecto.

## II. ANÁLISIS DE FLUORESCENCIA DE RAYOS X

El método de análisis de fluorescencia de rayos X se basa en el estudio de la radiación emitida cuando una muestra se somete a un campo de rayos X. Esta radiación es característica de cada elemento, por lo que nos proporciona información sobre cuáles se encuentran en la muestra. Para poder realizar el análisis, se debe contar con una fuente de rayos X y un detector, cuyo tipo cambia según la variante del método que se emplee.

### A. Introducción a la Física de Fotones

Las interacciones de los fotones con los átomos de la materia están definidas tanto por conceptos deterministas como estocásticos.

En reacciones nucleares y en interacciones de fotones se deben de cumplir las siguientes leyes de conservación en un sistema blanco-partícula [13]: se deben mantener la carga  $Z$ , el número de nucleones  $A$ , la cantidad de movimiento y la energía. Son la base determinista del problema.

La parte aleatoria se representa con un parámetro denominado sección eficaz microscópica y representa la probabilidad de que se produzca una interacción. Es de esperar que la tasa de interacciones sea proporcional tanto al número de partículas por segundo que viajan en un haz  $I$  y el número de átomos disponibles para interactuar en un medio ( $N A x$ ) que se representa por el producto de su densidad atómica, su espesor y el área menor entre la del haz y la del medio. Este factor probabilístico se define como el cociente entre las interacciones que se producen realmente  $C$  y lo que se encuentra disponible para interactuar [13]:

$$\sigma = \frac{C}{I N A x} \quad (1)$$

Presenta unidades de área, por lo que se puede entender como un área virtual en torno a los átomos que producirá la interacción cuando la partícula proyectil incide sobre ella. Usualmente se utiliza el barn, que equivale a  $10^{-24} \text{ cm}^2$ .

Hasta ahora se ha hablado de la probabilidad de que ocurra una interacción cualquiera, representada por la sección eficaz total. Sin embargo, también se pueden definir secciones eficaces para cada tipo de interacción posible siempre y cuando la suma de todas ellas sea igual a la total:

$$\sigma_t = \sum \sigma_i \quad (2)$$



La principal dependencia de las secciones eficaces es con la energía de la partícula incidente. Para una misma energía, pueden darse distintas interacciones con distintos valores de sección eficaz, una única interacción o ninguna. En Física Nuclear, la unidad de energía base es el electrón-voltio, que supone la variación de energía que obtendría sufrir un electrón al desplazarse entre dos puntos cuya diferencia de potencial es de un voltio, y equivale a  $1,602 \cdot 10^{-19}$  J.

La energía de la radiación se puede calcular mediante una expresión que la relaciona con su longitud de onda  $\lambda$ , la constante de Planck  $h$  y la velocidad de la luz:

$$E = hc/\lambda \tag{3}$$

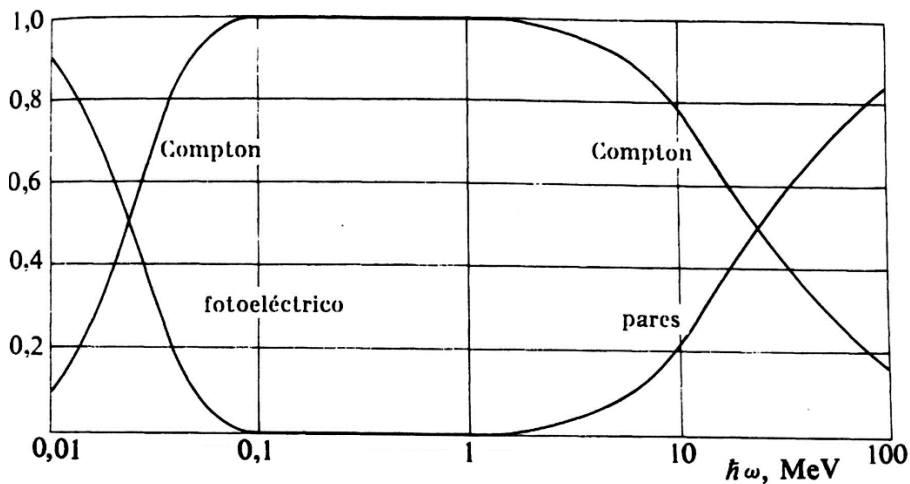


Fig. 1 Contribuciones a la sección eficaz del carbono

En la figura 1, extraída de [14], se puede observar la contribución a la sección eficaz microscópica total para el carbono de las principales interacciones en las que pueden participar los fotones según su energía. Éstas se explicarán detalladamente en el siguiente apartado, pero se corresponden con la absorción de fotones en el efecto fotoeléctrico, la dispersión de Compton y la producción de pares electrón-positrón a altas energías.

Un factor que se debe tener en cuenta en la interacción de fotones con el medio es la atenuación. Conforme el haz penetra en el material, los fotones van produciendo reacciones de tal manera que desaparecen del flujo inicial, bien porque se absorben o bien porque se dispersan y cambian de trayectoria. La ecuación que describe la intensidad del haz en un punto del medio se denomina ley de absorción [13]:

$$I(x) = I_0 e^{-\sigma_t N x} = I_0 e^{-\Sigma_t x} \tag{4}$$

En esta expresión,  $I_0$  representa la intensidad antes de entrar al medio y el producto de la sección eficaz microscópica total y la densidad atómica  $N$  del medio se ha reducido a un solo término  $\Sigma_t$  denominado sección eficaz macroscópica total o, específicamente en la ecuación de la atenuación, coeficiente lineal de atenuación.

La distancia que pueden alcanzar los rayos X atravesando un sólido es muy pequeña. Según [15], los rayos X de 22.1 keV que atraviesan 70 micras de hierro reducen su intensidad en torno al 37%.

Durante el recorrido de una partícula, las sucesivas interacciones que sufre hacen que vaya depositando energía en el medio que atraviesa. Cuando el medio resulta ser un ser humano, una alta deposición de energía puede resultar perjudicial. Es por ello que la Radioprotección define una serie de magnitudes para cuantificar el daño que una persona puede sufrir al encontrarse expuesta a un campo de radiación.

La dosis absorbida  $D$  se define como la cantidad de energía absorbida por un medio material en un punto [16]. Su unidad es el Gray (Gy) que equivale a 1 Julio de energía absorbido por Kilogramo. Sin embargo, no tiene en cuenta que el daño biológico depende de la calidad de la radiación (tipo de partícula y su energía), por lo que [17] define la dosis equivalente  $H$  como la dosis absorbida multiplicada por unos factores de ponderación que son mayores cuanto más peligrosa es la radiación. Otro factor que se debe considerar es que ciertos órganos son más sensibles al efecto dañino de la radiación. Este es el motivo por que la Comisión internacional para la Protección Radiológica define una última magnitud denominada dosis efectiva  $E$  como la suma de las dosis equivalentes ponderadas al tipo de tejido sobre el que incide la radiación, y es ésta la que se debe comparar con los valores que aparecen en la legislación. La unidad de las dos magnitudes anteriores es el Sievert (Sv).

Para el caso de fotones y considerando como una simplificación que el cuerpo entero recibe la misma cantidad de radiación, la dosis efectiva presenta el mismo valor que la dosis absorbida (ambos factores de ponderación son 1 en este caso). Para simplificar el cálculo de la dosis absorbida en el caso de fotones se recurre a definir una magnitud denominada coeficiente másico de absorción de energía  $\mu_a/\rho$  que se define como la fracción de energía de los electrones incidentes que es absorbida por unidad de longitud y la densidad del medio [16]. Este valor depende de la energía de la partícula incidente y de la densidad del medio y aparece tabulado. Gracias a él, la tasa de dosis efectiva en un punto se puede calcular como:

$$\dot{E} = \dot{D} = k_0 \frac{\mu_a}{\rho} \phi E \quad (5)$$

En esta ecuación,  $\phi$  es el número de partículas que atraviesan el punto por unidad de área y tiempo, y  $k_0$  representa una constante de cambio de unidades ya que la parte derecha de la igualdad suele encontrarse en MeV/g-s mientras que la parte izquierda se busca en J/kg-s. Este valor, integrado al tiempo de exposición, permite conocer la dosis efectiva que se ha recibido y así poder comparar con los límites legislados.

Por último, se deben presentar también los cuatro números cuánticos más relevantes para un electrón ligado a un átomo. El primero de ellos es el número  $n$ , que representa el nivel energético del orbital y toma valores naturales, siendo 1 el orbital menos energético y, por tanto, más próximo al núcleo. El número  $l$  simboliza el momento angular debido al movimiento orbital e indica el número de subcapas con las que cuenta un nivel energético. El rango de valores que puede tomar se encuentra entre 0 y  $n - 1$ , siendo cada uno de estos un subnivel. El tercero es el número de espín  $s$ , que puede ser  $\frac{1}{2}$  ó  $-\frac{1}{2}$  y representa el momento angular debido a la rotación de la partícula sobre sí misma. Por último, el número de momento angular total  $j$  es la suma de los números  $l$  y  $s$ .

## B. Producción de Fluorescencia

Las interacciones más importantes en las que puede participar un fotón son la producción de pares, el efecto Compton y el efecto fotoeléctrico.

La producción de pares electrón-positrón se da para energías superiores a 1,022 MeV, que equivale al doble de la energía atribuida por la ecuación de Einstein a la masa de un electrón en reposo. El fotón debe encontrarse en el seno del campo eléctrico de un electrón o un núcleo para que se conserven momento y energía. En este proyecto se ha empleado un tubo de rayos X de 30 kV para producir fotones, por lo que nos encontramos en un rango de energía en el que no se produce.

El efecto Compton consiste en la colisión de un fotón con un electrón suficientemente desligado del átomo para poder considerarlo libre, que será expulsado de su orbital atómico. El fotón debe poseer una energía no despreciable frente a la atribuida a la masa en reposo del electrón, es por ello que es la interacción predominante para un rango de energías entre el centenar de keV y varios MeV [18].

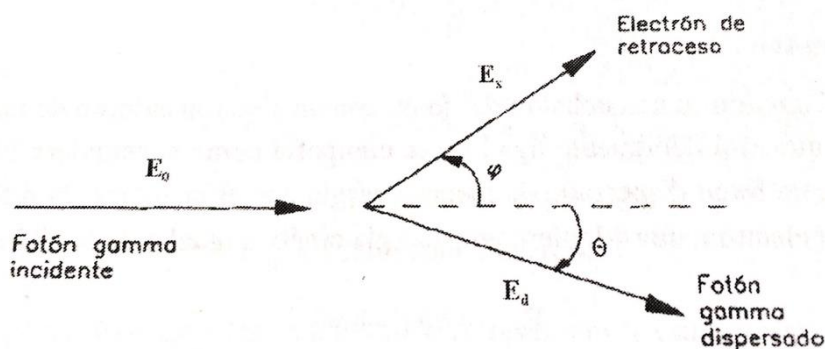


Fig. 2 Esquema de la dispersión Compton

La probabilidad de que un fotón salga dispersado con una energía  $E'$  formando un ángulo  $\theta$  respecto a su trayectoria original se atribuye al concepto de sección eficaz diferencial. Para el efecto Compton es común utilizar la expresión de Klein-Nishina [19], donde  $r_0^2$  es el radio clásico del electrón:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{r_0^2}{4} \left(\frac{E'}{E_0}\right)^2 \left(\frac{E_0}{E'} + \frac{E'}{E_0} - 2 + 4 \cos^2\theta\right) \quad (6)$$

La variación de longitud de onda que sufrirá el fotón como consecuencia de perder energía en el choque sigue [20]:

$$\lambda_f - \lambda_i = \Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (7)$$

Se puede comprobar en la expresión que la longitud de onda apenas varía con ángulos de dispersión pequeños y va aumentando conforme se acerca a la retrodispersión, donde el fotón perdería toda su energía.

El efecto fotoeléctrico es la interacción de mayor relevancia para bajas energías. Consiste en la absorción de un fotón por un átomo que quedará excitado, pudiendo producir la expulsión de un electrón si su energía supera la que lo mantiene en su orbital. Aunque este requerimiento es mayor para los electrones de las capas internas, es necesario que el electrón que participa en la interacción esté muy ligado para que se conserve el momento a través del átomo residual.

La energía de ligadura en cada orbital se puede calcular aproximadamente mediante la ley de Moseley [14], donde  $Rhc=13.605$  eV,  $Z$  es el número atómico,  $n$  es el número de la capa (1 para la capa K, 2 para la capa L, ...) y  $\sigma$  es una constante de apantallamiento cuyo valor depende de la capa (3 para la capa K o 5 para la capa L, aunque un valor más preciso debe tener también en cuenta el orbital: S, P, ...):

$$E = Rhc \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2} \quad (8)$$

La sección eficaz del efecto fotoeléctrico se puede obtener aproximadamente utilizando la siguiente expresión, donde  $K$  es una constante [18]:

$$\tau(E) = K \frac{Z^5}{E^{3.5}} \quad (9)$$

Ésta presenta aumentos bruscos cuando el fotón incidente posee una energía ligeramente superior a la necesaria para arrancar un electrón orbital, denominados *edges*. En la imagen siguiente, obtenida de [21], se puede observar la evolución de la sección eficaz de efecto fotoeléctrico con la energía, de manera que se comprueba que elementos más pesados tienen una mayor probabilidad de que se produzca, que conforme aumenta la energía la sección eficaz disminuye y la aparición de los *edges* en energías cercanas a la de la emisión fluorescente. En la imagen, se indican con letras en qué capa se produce el hueco. Este sistema de notación se detallará más adelante.

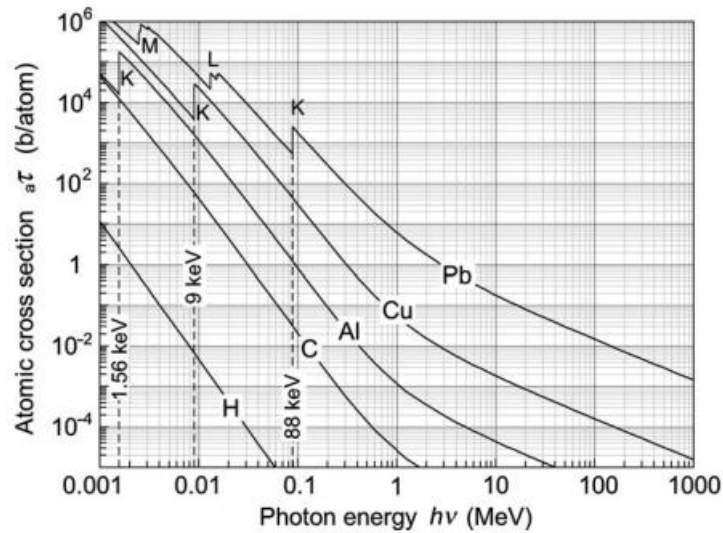


Fig. 3 Sección eficaz del efecto fotoeléctrico en distintos elementos

El resultado de la interacción es un átomo que presenta un hueco en uno de sus orbitales internos, por lo que pueden darse procesos que ayuden al átomo a estabilizarse. En algunos de ellos, un electrón de una capa superior salta para cubrir el hueco emitiendo radiación fluorescente, generando un hueco en una capa superior que otro electrón puede suplir si cambia la capa en la que se encuentra, hasta que el átomo se desexcita. Sin embargo, la conservación de momento impide que ocupe el hueco cualquier electrón. Las transiciones permitidas cumplen las siguientes relaciones entre los números cuánticos de los estados final e inicial, denominadas Reglas de Selección [22]:

$$\Delta j = \pm 1 \text{ o } (\Delta j = 0 \text{ y } \Delta l = \pm 1) \quad (10)$$

Al producirse un hueco en la capa  $K_1$ , el electrón que lo ocupe provendrá con una mayor probabilidad de la capa  $L_3$  ya que se cumple  $\Delta j = 1$ . También existe alguna probabilidad de que la transición que ocurra sea  $K_1 \leftarrow L_2$  ya que  $\Delta l = 1$ , pero  $K_1 \leftarrow L_1$  se encuentra prohibida [23].

En [23] se hace una distinción entre las posibles emisiones fluorescentes que se pueden producir: directa, indirecta secundaria e indirecta terciaria.

La fluorescencia directa es aquella que se produce en la interacción de los fotones provenientes de la fuente y llega hasta el detector sin interaccionar. Desde que el fotón fue emitido por la fuente sufre tres procesos que degradan la energía: la atenuación en los distintos medios hasta producir la fluorescencia, incluyendo el propio medio en el que se produce; la absorción del fotón, ya que se emite como radiación fluorescente únicamente la energía de la transición que se ha producido; y la atenuación hasta llegar al detector.

La fluorescencia indirecta secundaria se da cuando la energía que posee una radiación fluorescente primaria es suficiente para generar otra fluorescencia, mientras que la indirecta terciaria se produciría a partir de la secundaria. Esto implica más procesos de degradación de la energía. Tienen un valor especialmente significativo en medios de varios elementos donde entre estos existe una diferencia de 2 en el número atómico, como ocurre en el acero inoxidable, formado principalmente por cromo, hierro y níquel. En este caso pueden darse tres fluorescencias secundarias (Fe-Cr, Ni-Fe, Ni-Cr) y una terciaria (Ni-Fe-Cr); que contribuyen, respectivamente, un 30% y un 2.5% respecto al número de fotones producidos por fluorescencia directa.

Otros procesos que se puede dar es la expulsión de electrones de capas externas, denominado efecto Auger. Puede sustituir a la emisión de fluorescencia como método para reducir la excitación del átomo, tanto si el hueco lo ha provocado la radiación incidente como si la causa ha sido que el electrón que se encontraba en esa capa ha pasado a cubrir un hueco de una capa inferior. Por tanto, el número de rayos X característicos emitidos es menor que lo esperado. Es por esto que se define un rendimiento fluorescente para cada capa  $\omega_i$  como la probabilidad de que un hueco producido en la capa  $i$  se llene mediante una transición que produzca fluorescencia y no mediante efecto Auger. [24]

Es relevante introducir el sistema de notación Siegbahn, que es el tradicionalmente utilizado en espectroscopia de rayos X para denominar las radiaciones fluorescentes que se producen.

La notación Siegbahn emplea una combinación de letras y números para identificar cada posible estado de un electrón. La siguiente tabla traduce esta la nomenclatura para los tres primeros orbitales a la notación IUPAC comúnmente empleada en Química y a unos valores concretos de los números cuánticos anteriormente presentados [25]:

Tabla 1 Notación Siegbahn para los orbitales electrónicos

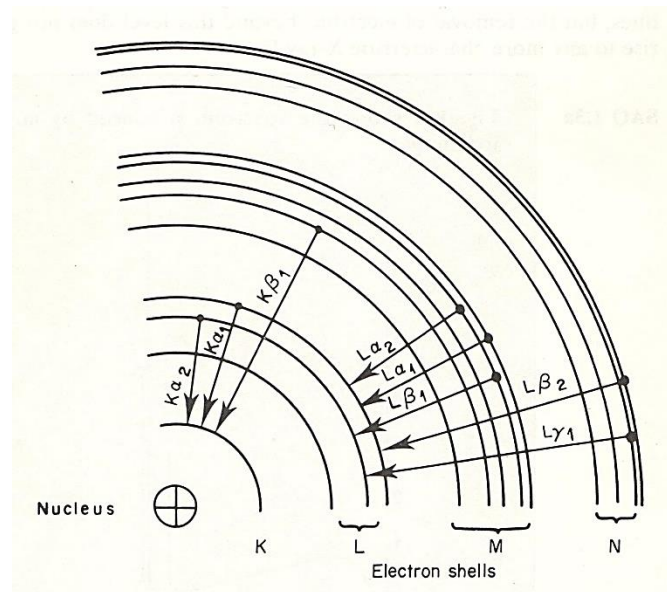
Siegbahn	$n$	$l$	$s$	$j$	IUPAC
K	1	0	$\pm 1/2$	$1/2$	1s
L <sub>1</sub>	2	0	$\pm 1/2$	$1/2$	2s
L <sub>2</sub>	2	1	-1/2	$1/2$	2p <sub>1/2</sub>
L <sub>3</sub>	2	1	$1/2$	$3/2$	2p <sub>3/2</sub>
M <sub>1</sub>	3	0	$\pm 1/2$	$1/2$	3s
M <sub>2</sub>	3	1	-1/2	$1/2$	3p <sub>1/2</sub>
M <sub>3</sub>	3	1	$1/2$	$3/2$	3p <sub>3/2</sub>
M <sub>4</sub>	3	2	-1/2	$1/2$	3d <sub>1/2</sub>
M <sub>5</sub>	3	2	$1/2$	$3/2$	3d <sub>3/2</sub>

La nomenclatura Siegbahn para denominar las transiciones entre orbitales emplea una letra latina para identificar el nivel donde se produce el hueco, una letra griega para establecer de qué orbital proviene el electrón que lo ocupa y un número que representa su número  $j$  del estado inicial. La tabla siguiente muestra cómo se nombran las transiciones más comunes con este sistema de notación [26]:

Tabla 2 Notación Siegbahn para las transiciones entre orbitales

Siegbahn	Estado inicial	Estado final
K $\alpha_1$	L <sub>3</sub>	K
K $\alpha_2$	L <sub>2</sub>	K
K $\beta_1$	M <sub>3</sub>	K
K $\beta_2$	M <sub>2</sub>	K
L $\alpha_1$	M <sub>5</sub>	L <sub>3</sub>
L $\beta_1$	M <sub>4</sub>	L <sub>2</sub>

La siguiente figura [27] muestra de manera simplificada algunas de las transiciones de electrones entre orbitales empleando la notación Siegbahn.



*Fig. 4 Algunas transiciones ilustradas*

El efecto fotoeléctrico es la interacción más importante en este proyecto ya que de ella provienen los fotones característicos que se emplearán para conocer la composición de las muestras. Debido a que es la interacción predominante para bajas energías, se puede justificar la utilización del tubo de rayos X empleado. Un tubo de mayor voltaje podría generar las mismas fluorescencias ya que los fotones empleados tienen suficiente energía para ello, pero la sección eficaz disminuiría y por tanto sería menos eficiente.

Una vez conseguido el espectro de fluorescencia, podemos asignar cualitativamente los distintos picos a ciertos elementos aprovechando que existe una relación unívoca entre energía y el elemento que produce esta radiación. También podemos hallar las proporciones de los elementos referidos a otro, generalmente aquel con un pico más alto, por cociente de áreas debajo de la gaussiana que se forma alrededor de la energía característica. Sin embargo, no podremos establecer qué fracción en masa de elemento hay hasta que se emplee un método de cálculo.



## . Tubos de Rayos X

En un tubo de rayos X, los electrones emitidos por el cátodo son acelerados por una diferencia de potencial hacia un blanco, denominado anticátodo, donde se frenan y se produce la radiación X. El proceso se lleva a cabo en una cápsula de vidrio donde se ha practicado el vacío para evitar la atenuación de la corriente de electrones y los rayos X saldrán de la cápsula a través de una delgada ventana, que normalmente es de berilio.

El cátodo contiene un filamento por el que circula una corriente que lo mantiene a alta temperatura, provocando que los electrones que se encuentran en la nube electrónica adquieran energía suficiente para escapar la atracción de la superficie metálica, lo que se conoce como efecto termoiónico. La ley de Richardson-Dushman [28] modela la densidad de corriente electrónica emitida por un alambre bajo un calentamiento controlado, que depende de la temperatura  $T$  del alambre, la mínima energía necesaria para que el electrón escape  $\phi$ , la constante de Richardson  $A = 1,20173e6 \text{ A/m}^2\text{K}^2$  y  $k$  la constante de Boltzmann:

$$J = A T^2 e^{\frac{-\phi}{kT}} \quad (11)$$

Los electrones producidos en el cátodo son acelerados al existir una diferencia de potencial entre el cátodo y el anticátodo, que varía conforme la utilidad que se quiere dar al tubo. En aplicaciones industriales, se suelen utilizar voltajes entre 100 y 300 kV [29].

Los rayos X se producen cuando los electrones se deceleran al pasar por el campo eléctrico creado por un átomo, perdiendo energía que se emite en forma de radiación electro magnética. Se trata de radiación de frenado, generalmente conocida como *Bremsstrahlung*. La probabilidad con la que se produce una pérdida radiativa de energía es aproximadamente proporcional a  $q^2 Z^2 T / M_0^2$  [24], donde  $q$  es la carga de la partícula como un valor proporcional a la carga del electrón  $e$ ,  $T$  es la energía cinética previa a la pérdida,  $M_0$  es la masa en reposo de la partícula y  $Z$  es el número atómico del blanco.

Debido a que no todos los electrones entran de igual forma en el campo, existen muy distintos resultados de la interacción y por ello la energía de los fotones forma un espectro continuo. La distribución de las energías de los fotones puede representarse tanto en longitud de onda como en energía, debido a que son magnitudes intercambiables ya que se cumple la ecuación (3), si bien son inversamente proporcionales. La ecuación que sigue la distribución en energía de la intensidad de rayos X se puede encontrar en el trabajo de Kulenkampff [30]. Sin embargo, el espectro de rayos X generados por *Bremsstrahlung* posee algunas características sencillas de describir [24]:

- La mínima longitud de onda con la que se producen fotones es la correspondiente a la energía que aporta el voltaje del tubo a un electrón. Esta relación se conoce como la ley de Duane-Hunt:

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eU} \quad (12)$$

- La longitud de onda en la que se da un mayor número de fotones es aproximadamente 1.5 veces  $\lambda_{min}$ .
- La intensidad total (integrada para todas las longitudes de onda) es aproximadamente proporcional al cuadrado del voltaje y a la primera potencia del número atómico del blanco.

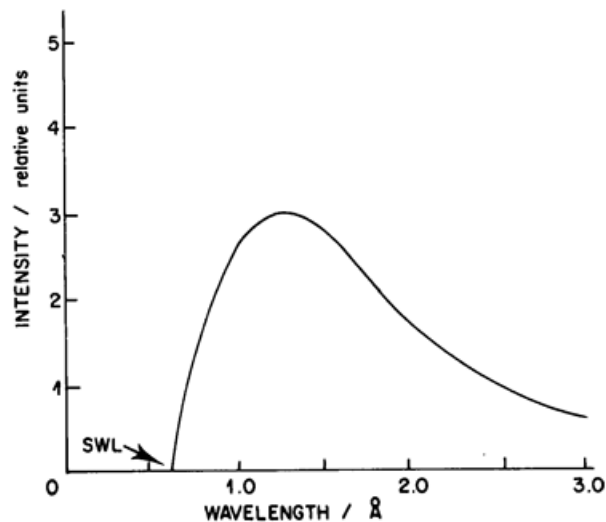


Fig. 5 Espectro de la radiación Bremsstrahlung

En la imagen anterior [27] se presenta el espectro de los rayos X que se producen en un tubo de rayos X empleando 20 kV y el molibdeno como blanco. El espectro equivalente en energía presentaría una forma simétrica respecto al eje Y, donde el punto denominado como SWL sería la mínima longitud de onda. En ella se pueden corroborar las características descritas anteriormente.

Existe otra interacción por la que se producen rayos X. Algunos electrones llegan a ionizar un átomo al colisionar con un electrón interno y lo arrancan del átomo. A partir de este momento, las posibilidades son las mismas que cuando se produce el efecto fotoeléctrico, que se han comentado previamente: puede producirse emisión de fluorescencia, de electrones Auger o una combinación de ambos. Es por ello que el espectro de un tubo de rayos X es generalmente una superposición de dos aportes: el *Bremsstrahlung* y la radiación característica del blanco.

Empleando el mismo blanco de molibdeno y aumentando el voltaje a 25 kV aparece el espectro que se encuentra en la figura siguiente. Empleando este voltaje, un mayor número de electrones adquiere energía suficiente para arrancar electrones internos, de manera que la aportación de la radiación característica al espectro de rayos X producidos se hace más evidente, como se puede observar en la siguiente figura [27].

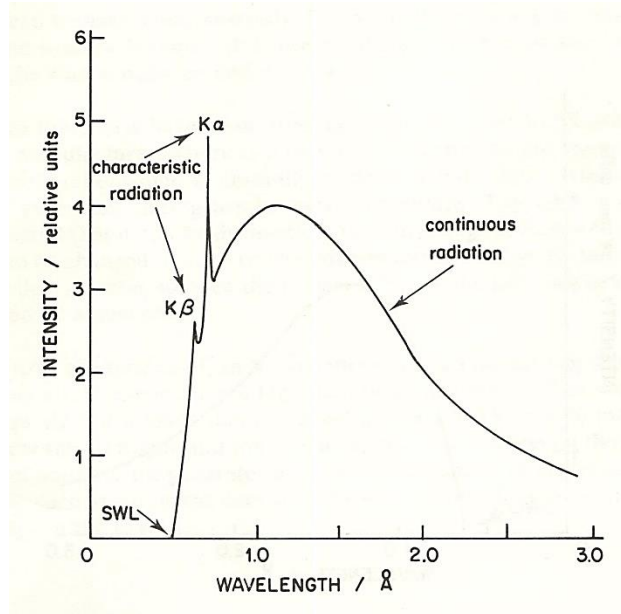


Fig. 6 Espectro de un tubo de rayos X

La eficiencia de producir rayos X en un tubo es muy baja. Se puede obtener aproximadamente según la siguiente expresión [31]:

$$\eta \approx 10^{-6} Z U \quad (13)$$

Este valor puede estar en torno al 0.1-1% en la práctica [31], por lo que existe una gran disipación de calor que debe extraerse para que las temperaturas que se podrían alcanzar no supongan un problema para la integridad de los materiales que lo forman.

#### D. Detectores de Semiconductor

Este apartado se ha basado en [33], que expone de manera sencilla y clara los principios de funcionamiento de estos detectores de radiación.

Los semiconductores son materiales que se caracterizan porque presentan, a temperatura ambiente, una conductividad menor que la de los metales, pero mayor que la de los aislantes. El motivo de este comportamiento se explica según la teoría de bandas electrónicas. Existen dos bandas de energía: la banda de valencia, donde se encuentran los electrones que participan en enlaces químicos, y, a una energía mayor, la banda de conductividad, donde se encuentran momentáneamente los electrones que participan en el movimiento de cargas. La capacidad de un material de conducir corriente eléctrica depende de esta diferencia de energía: si la diferencia de energía es suficientemente pequeña, como ocurre con los metales y, en menor proporción, con los semiconductores; la vibración térmica de los electrones puede conseguir que lleguen a la banda de conductividad.

La deposición de energía por parte de un fotón también consigue que los electrones alcancen la banda de conductividad, generando dos portadores de carga: el propio electrón y el hueco que ha dejado, al que se le considera una carga positiva. Si el material se incluye en un circuito eléctrico, estos portadores se desplazarán hacia los electrodos de signo contrario y se registrará un pulso de corriente. El motivo del uso de semiconductores es que presentan un salto de energía suficientemente grande para discernir que el pulso de corriente se debe a un fotón incidente, pero suficientemente pequeño como para registrar fotones de baja energía. Para evitar en mayor medida que la oscilación térmica de los electrones pueda producir una señal falsa, los semiconductores trabajan a temperatura de nitrógeno líquido, ya sea empleándolo como refrigerante o mediante el uso de termopares.

El silicio y el germanio son los principales elementos semiconductores. Debido a que, a mayor número atómico, mayor probabilidad de que se absorba toda la energía del fotón en el cristal semiconductor; el germanio resulta un material más eficiente y, por tanto, los detectores de silicio necesitan un mayor volumen de éste. Los detectores de silicio se suelen emplear para detectar rayos X entre 1 y 35 keV con una alta definición, es por ello que se utilizarán para realizar las medidas experimentales.

### III. EL MÉTODO DE MONTE CARLO

#### A. Introducción

Los modelos permiten describir situaciones a través de expresiones matemáticas, de manera que introduciendo información al modelo obtenemos resultados, variables que son interesantes para conocer el estado de la situación. Sin embargo, existen situaciones complejas donde para la información que se introduce no existe una única solución, generalmente debido a que en el modelo no se pueden especificar todas las posibles variables que influyen en él o porque presentan una gran variabilidad. Es por ello que la existencia de métodos que permiten tener en cuenta todos los posibles resultados además de un valor medio son de gran importancia en según qué ámbitos de la ciencia y la ingeniería. El Método de Monte Carlo se basa en emplear la estadística para cumplir este cometido. Este apartado se apoya fuertemente en [33] debido a que es un texto sencillo que presenta el método cualitativamente al contrario que la bibliografía más especializada.

En primer lugar, es necesario conocer qué distribuciones estadísticas modelan correctamente el comportamiento aleatorio de ciertas variables y el sentido físico de los parámetros de estas distribuciones. El primero de los objetivos se puede conseguir proponiendo una distribución y empleando el test  $\chi^2$ , entre otros, para conocer cómo de bien se ajusta la distribución al comportamiento real de un muestreo. El segundo requiere emplear las expresiones analíticas para conceptos estadísticos como la esperanza de la distribución, su varianza, etc. y relacionarlas con los resultados de aplicar el mismo operador a los resultados de un muestreo estadístico.

Posteriormente, se emplean generadores de números cuasi-aleatorios de formatos muy diversos, sobre los que se puede trabajar junto con la distribución estadística para conocer un resultado.

Un ejemplo sencillo, es el proceso que emplean programas de diseño asistido por ordenador, o el propio MCNP, para calcular el volumen de una figura. En primer lugar, se encierra la figura en otra de volumen conocido. Después, el programa genera números cuasi-aleatorios que representan un gran número de punto y decide si se encuentran dentro o fuera del cuerpo cuyo volumen queremos conocer, ya que conoce las expresiones analíticas de su superficie. La proporción de puntos que se encuentran dentro de la figura respecto del número total de puntos aleatoriamente generados es la misma proporción que la del volumen desconocido respecto el conocido.

## B. El Programa MCNP

MCNP5 es un “código de propósito general de Método de Monte Carlo para N partículas” que resuelve la ecuación del transporte de partículas en energía continua, para cualquier geometría y puede tener en cuenta el acoplamiento entre fotones, neutrones y electrones debido a las interacciones que se producen. Dado que el código transporta partículas entre eventos sin emplear términos diferenciales de tiempo o espacio, los resultados que genera son independientes del tiempo y se dice que resuelve la ecuación integral del transporte. El funcionamiento del código y la base teórica necesaria están recogidos en dos volúmenes [34] y [35], por lo que este apartado no es más que una descripción cualitativa reducida ya que resulta inabarcable condensarlo todo.

El procedimiento que utiliza MCNP5 es secuencial. El programa sigue la partícula desde la fuente que la produce hasta que desaparece. Mientras, genera números aleatorios entre 0 y 1 muestreando las distribuciones de probabilidad que rigen qué interacciones tienen lugar y dónde. Con estos valores se calcularán los parámetros que definen la trayectoria y los resultados de las interacciones. Una vez la partícula ha finalizado su recorrido, se retoman todas aquellas partículas secundarias que se pueden haber producido en los eventos en un orden inverso al cronológico. El seguimiento de una partícula emitida por una fuente y de todas las partículas que ella genera a través de interacciones con la materia constituye una historia.

El programa simula el comportamiento individual de un gran número de partículas y luego utiliza el Teorema Central del Límite para inferir el comportamiento medio de una partícula. Para cada historia, el programa actualiza la media y la varianza de las variables consideradas de interés, de manera que, cuando el número de historias es elevado, éstas tiendan a una distribución normal.

A continuación, se ejemplifican algunos usos de la generación de números aleatorios para la simulación del recorrido de una partícula. Cuando la partícula se crea en una fuente, la trayectoria que seguirá debe ser creada. En un cuerpo de composición conocida y, por tanto, de sección eficaz macroscópica conocida; la probabilidad de que ocurra una interacción entre  $l$  y  $l + dl$  en la dirección que lleva la partícula sigue la siguiente expresión:

$$p(l)dl = e^{-\Sigma_t l} \Sigma_t dl \quad (14)$$

Si  $\zeta$  es el número pseudoaleatorio entre 0 y 1 generado representa la probabilidad de que ocurra una interacción entre 0 y  $L$ , por lo que:

$$\zeta = \int_0^L e^{-\Sigma_t l} \Sigma_t dl = 1 - e^{-\Sigma_t L} \quad (15)$$

Y de aquí se puede hallar  $L$ , que representa la longitud que avanza la partícula antes de sufrir una interacción.

Una vez la partícula llega al punto donde ocurre la interacción, debe seleccionar con qué núcleo se da. En un material compuesto de  $n$  nucleídos y si  $\xi$  es un número aleatorio, se elige el  $k$ -ésimo nucleído que cumpla:

$$\sum_{i=1}^{k-1} \Sigma_{t,i} < \xi \sum_{i=1}^n \Sigma_{t,i} \leq \sum_{i=1}^k \Sigma_{t,i} \quad (16)$$

Otra decisión que debe tomar es elegir qué interacción se lleva a cabo. Ya se ha establecido en el apartado anterior el motivo por el que, en este orden de bajas energías en el que se trabaja en el proyecto, se dan principalmente dos interacciones, lo cual simplifica el método para escoger cuál se da. Dado un número aleatorio  $\xi$  y conocidas las secciones eficaces de dispersión  $\Sigma_s$  y la sección eficaz total  $\Sigma_t$  del nucleído escogido, se escoge el efecto Compton si se da la siguiente condición:

$$\xi \leq \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \quad (17)$$

MCNP5 emplea celdas para la definición de los volúmenes de sus figuras. Una celda es una región del espacio que se considera que posee un material homogéneo tanto en composición como en densidad. Es por ello que, en este proyecto, las celdas sean cada uno de los cuerpos que deben aparecer en el modelo. Sin embargo, en un proyecto de ingeniería nuclear donde se simulan reactores, un mismo cuerpo puede estar representado en varias celdas debido a diferencias espaciales de densidad o composición.

Debido a que emplea un gran número de historias para alcanzar valores representativos, sólo utiliza para efectuar los cálculos estadísticos aquellas variables que se consideran de interés. Es por ello que el programa pide que se le especifique uno o varios tallies o resultados deseados, de manera que se consideran importantes aquellas que permiten su cálculo. Cada partícula virtual cuya trayectoria se simula en MCNP representa un número  $w$  de partículas físicas. Este valor, no necesariamente un entero, constituye su peso y la acompaña durante su recorrido. Sus funciones son representar la contribución física de esta partícula virtual al resultado deseado y permitir que el resultado del tally esté normalizado por partícula que emite la fuente.

Los tallies se especifican en el código y se identifican con un número que indica a MCNP el tipo de cálculo que debe realizar. Si aparece más de un tally en el código, se deberán numerar empezando por 0, que no se indica, entre la letra f y el número identificativo del tally. La letra puede ir precedida de un símbolo asterisco para indicar a MCNP que la energía de la partícula se debe tener en cuenta. A continuación, se pretende explicar, resumidamente, los tallies empleados en el proyecto y el cálculo que llevan detrás.

El tally F8 permite contar las partículas que llegan a una celda y repartirlas en intervalos de energía, definidos por una función auxiliar E8, de manera similar a la que realiza el detector de silicio en la espectrometría de fotones. Cada partícula que llega a la celda tiene un peso y una energía. El resultado del tally para cada intervalo es el número de partículas que se encuentran dentro del intervalo, según la energía que han perdido en la celda, multiplicado por el valor medio del peso de todas las partículas que llegan a la celda.

El tally F4 calcula la fluencia de partículas promediada en el volumen de una celda. Una partícula de peso  $W$  y energía  $E$  llega a la celda 1 de volumen  $V$  y realiza un recorrido de longitud  $T_l$ , por lo que su aportación al tally F4 es de:

$$W \frac{T_l}{V} \frac{\text{partículas}}{\text{cm}^2 \cdot \text{partícula fuente}} \quad (18)$$

El resultado final del tally F4 resulta ser el valor medio de la aportación que realiza cada partícula que llega a la celda.

El tally \*F4 calcula la fluencia energética promediada en el volumen de una celda. Emplea como aportación el valor anterior multiplicado por la energía del fotón al entrar en la celda.

Los dos tallies anteriores, F4 y \*F4, correctamente definidos y acompañados de unas funciones auxiliares, permiten el cálculo de la dosis efectiva en un punto, que se realizará en el apartado VI, de dos maneras distintas.

Una vez se ha seguido el recorrido un elevado número de partículas y se ha registrado el valor de interés que se ha especificado en cada una de ellas se pueden obtener algunos valores estadísticos, como su media  $\bar{x}$  y la desviación típica de la media, que se puede aproximar como:

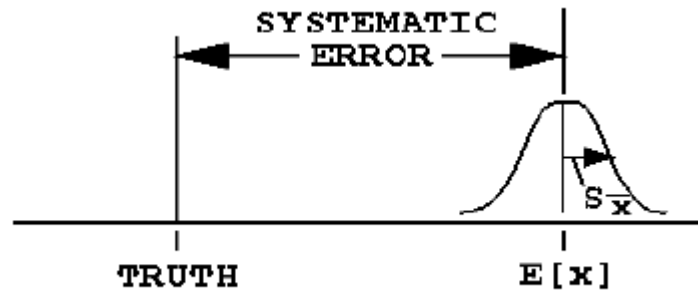
$$S_{\bar{x}} = \sqrt{S_{\bar{x}}^2} = \sqrt{\frac{S^2}{N}} = \sqrt{\frac{\overline{x^2} - \bar{x}^2}{N}} \quad (19)$$

De esta expresión se extrae una de las grandes desventajas del Método de Monte Carlo respecto a recursos computacionales: si se quiere que la desviación típica de la media se reduzca a la mitad, se debe computar 4 veces el número de historias actual.

Para poder aceptar los resultados obtenidos recurre al Teorema Central del Límite, que establece que, si el número de historias elevado y si los valores de interés son aleatorios e independientes, la distribución de su media sigue una función gaussiana. Es por ello que el número de historias debe ser suficientemente elevado como el parecido sea razonablemente bueno. La máxima precisión que se puede alcanzar, definida como la probabilidad de que la media del valor de interés se encuentre a menos de una desviación típica de la esperanza, es del 68% ya que es un valor característico de una función gaussiana.



El problema de la precisión con el Método de Monte Carlo únicamente corresponde a una cuestión computacional: elevar el número de historias hasta que la media de los resultados sea suficientemente semejante a una distribución gaussiana. Sin embargo, el mayor problema es de credibilidad: si el problema no está bien definido no representará la realidad física y ocurrirá un error sistemático del que el método no advierte. Por ello, es posible que se obtengan resultados precisos con unos valores que no son realistas. En la siguiente imagen se puede observar de manera clara como la media puede formar una distribución gaussiana y sin embargo no acercarse a la realidad [36]:



*Fig. 7 Error sistemático, la desviación respecto de la realidad*

### C. Aplicación de MCNP a los Cálculos de Fluorescencia

MCNP5 permite definir los mismos que se utilizan en el Análisis de Fluorescencia de Rayos X: tubo de rayos X, muestra y detector. El primero se definirá en el código como una fuente, el segundo se definirá como una celda y el tercero como un tally F8 aplicado a una celda.

Debido a que el proyecto se basa principalmente en las interacciones de los fotones con la materia, sólo se describe en este apartado cómo MCNP5 trata estos eventos. El programa permite elegir si se quiere emplear un tratamiento simple o detallado para ello. El primero de los modos está diseñado para fotones de alta energía, por lo que no tiene en cuenta la posibilidad de emisiones fluorescentes que representan la base del proyecto. Es por eso, que sólo se trata el segundo modo.

Los resultados de una dispersión Compton son la nueva energía del fotón  $E'$ , el ángulo de desviación respecto a la trayectoria original  $\theta$  y la energía de retroceso del electrón  $E - E'$ . La sección eficaz diferencial que se considera es una modificación de la expresión de Klein-Nishina para disminuir la probabilidad de que el fotón continúe su trayectoria sin desviarse. Cuando los fotones incidentes poseen una energía inferior a 1.5 MeV, como es el caso en este proyecto, se utiliza el método de Kahn para muestrear la sección eficaz diferencial y obtener así el ángulo de dispersión. Una vez conocido, únicamente queda calcular la energía del fotón tras la interacción. Conocidos los resultados de la dispersión, el programa volverá a calcular la longitud que avanza en la nueva dirección.

El efecto fotoeléctrico puede presentar 3 casos distintos. El primero es que no se emita ningún fotón debido a que el efecto Auger libere toda la energía a través de electrones. El segundo es que se emita un fotón de energía algo menor a la ligadura del electrón y la energía residual en el orbital del que proviene el electrón se disipa por efecto Auger. Si la energía residual que deja la primera fluorescencia es mayor que 1 keV, otro electrón ocupará el hueco en el orbital de manera que se emita una segunda fluorescencia. Todos los fotones emitidos se asumen isotropos por lo que no hay ninguna dirección preferente.

En el subapartado anterior se ha explicado el tratamiento que realiza con las partículas MCNP5 cuando se especifica en el código un tally F8. Si se identifica el menor resultado del tally por intervalo distinto de cero, que equivaldría a una cuenta, y se dividen todos los resultados por ese valor, se puede conocer el número de cuentas en cada intervalo de energía. Esto nos permite crear un espectro producido a partir de los resultados.

Si los fotones que llegan a la celda donde se aplica el tally F8 provienen de la interacción de los fotones, provenientes del tubo, con la muestra; podemos obtener un espectro de fluorescencias, de manera similar al que obtenemos en la parte experimental.

Pero necesitamos asegurar que los resultados que produce el modelo son físicamente realistas. Es por ello que se inicia un proceso de verificación del modelo. La verificación de un modelo, en Fluorescencia de Rayos X, consiste en emplear una muestra de composición conocida tanto en el modelo como en las medidas experimentales, e iniciar un proceso iterativo de comparación de los resultados obtenidos de ambas formas hasta que el modelo se ajuste suficientemente bien a la realidad.

Una vez el modelo esté validado, podemos cambiar a la muestra de interés, asumiendo que el único error entonces que puede haber estará en la definición de la muestra. Dado que MCNP5 necesita la composición de la muestra de interés (desconocida hasta el momento), se debe iniciar un proceso iterativo, en el cual se suponen valores composición y se comprueba el error de los resultados del modelo respecto de los experimentales. Por suerte, dado que contamos con el espectro experimental como dato de partida, podemos identificar los elementos que conforman la muestra mediante sus emisiones características, y así únicamente debemos preocuparnos de su fracción en peso.

La ventaja de emplear un programa de método de Monte Carlo, MCNP5, para la resolución de problemas de fluorescencia es que la descripción del modelo puede ser tan simplista o perfeccionista como el usuario pretenda que sea. Dado que el proyecto se enmarca en el contexto de un Trabajo de Fin de Grado, se va a asumir que las muestras son homogéneas y, por tanto, necesitan una única celda para describirlas satisfactoriamente. Puesto que la composición de las monedas es desconocida, podría darse el caso de que no fuera una asunción correcta.

#### IV. ARQUEOMETRÍA

El objetivo de la Arqueología es tratar de comprender el pasado humano de manera completa, de “reconstruir” la manera en la que vivíamos. Al contrario que la Historia, aunque se apoyan mutuamente, no emplea textos escritos en los que basarse para la investigación, sino en los restos de diversas índoles que se pueden encontrar en excavaciones o que se mantienen conservados. Es por ello que comúnmente deben acudir a las ciencias experimentales para poder extraer información de los artefactos encontrados: la identificación de restos animales puede darnos información de qué alimentación llevaban, del análisis metalográfico de unas herramientas podemos concluir qué procesos utilizaban para su fabricación y, por tanto, con qué tecnología contaban, etc.

La Arqueometría recoge las ciencias analíticas aplicadas a la Arqueología que ayudan a comprender el pasado. Martin H. Klaproth fue el primero en hallar la composición química de monedas romanas mediante análisis gravimétrico y separación química de Cu, Pb y Sn [37]. Con los avances recientes en el desarrollo de componentes electrónicos se han conseguido mejoras sustanciales o, incluso, la aparición de nuevas técnicas analíticas que permiten obtener una mayor precisión. Tanto es así que podemos identificar elementos que se encuentran en proporciones del orden de la millonésima, que se denominan oligoelementos. Muchas veces estos oligoelementos se pueden relacionar con la zona donde se obtuvieron ciertos elementos de la pieza [3], proporcionando más información sobre la sociedad a la que se atribuye.

Pero la Arqueometría no sólo se constituye de técnicas de análisis, sino también de métodos de datación. Existen muy variados procedimientos para datar muestras arqueológicas, algunos de ellos muy conocidos como la datación por Carbono 14. Ubicar temporalmente una muestra permite discernir entre originales y reproducciones y atribuir la información que se obtiene a una cultura o periodo cultural.

##### A. El valor del Análisis de Fluorescencia de Rayos X en Arqueometría

Como se ha comentado previamente, el Análisis de Fluorescencia de Rayos X (XRFA, según sus siglas en inglés) se emplea en el campo de la Numismática y de la Arqueometría, especialmente para muestras que se pueden considerar homogéneas ya que uno de sus inconvenientes es la baja penetración de los rayos X, por lo que únicamente podemos obtener información de la superficie de la muestra.

Este método es aplicable en principio para todos los elementos de la tabla periódica, menos los dos primeros debido a que no cuentan con más de un orbital. Si este fuera el caso, el rango de energías de las emisiones fluorescentes que se pueden registrar estaría entre los 50 eV y los 100 keV [Anexo 1]. Por supuesto, los elementos más ligeros que presentan rayos X característicos de menor energía son más difíciles de detectar y requieren de instrumentación y montajes más avanzados. Es por ello que, desde un punto de vista práctico, el elemento más ligero que se puede registrar con un equipo habitual es el Aluminio [37], cuya emisión menos energética es de 1.49 keV [Anexo 1].

El método XRFA permite realizar dos tipos de interpretación de los resultados: un análisis cualitativo y uno cuantitativo. El análisis cualitativo consiste en asignar los picos en el espectro de rayos X obtenido a sus elementos correspondientes; de esta manera conocer los elementos que forman la composición de la muestra, y cuáles se encuentran en mayor o menor medida debido a la intensidad del pico es inmediato. El análisis cuantitativo implica hallar la proporción de cada elemento. Como se verá en su correspondiente apartado, existen diferentes procesos para conseguirlo, pero en este proyecto se ha empleado el Método de Monte Carlo.

La precisión de esta técnica está influenciada por varios factores. El primero de ellos es el comportamiento de superficies rugosas, como las que presentan monedas acuñadas: generalmente la profundidad de la rugosidad es mayor que la distancia que pueden penetrar los rayos X, generando una distorsión en los resultados que se sitúa en torno al 10% para monedas de bronce [1]. Otro factor es la cantidad del elemento que se pretende cuantificar: es normal en técnicas analíticas que los resultados obtenidos en cuanto a elementos que se encuentran en menor proporción sean más inexactos. Según [1], en superficies donde no se den irregularidades, los elementos que se encuentran en proporciones del 1 al 100% pueden presentar un error del 1 al 5%, mientras que los que se encuentran en proporciones del 0.1 al 1% el error estará entre el 10 y el 15%.

El XRFA presenta una serie de características que le proporcionan un valor adicional. En primer lugar, obtener resultados mediante una medición experimental no lleva más que unos pocos minutos, contando la calibración del equipo. Además, su análisis cualitativo permite discernir qué elementos componen la muestra rápidamente, aunque no su porcentaje en composición. Debido a que el estado químico de los elementos no interfiere en el análisis, las muestras no necesitan mayor preparación que una limpieza superficial. Esto, unido a la existencia de equipos portátiles, permite realizar mediciones *in situ* sin tener que desplazar el artefacto. Además, mediante la microespectrometría podemos conseguir una distribución espacial de composiciones que permite identificar alteraciones puntuales.

La posibilidad de que esta técnica analítica se pueda realizar sin comprometer la integridad de la pieza es un valor añadido que los coleccionistas y conservadores aprecian considerablemente. Sin embargo, también disminuye la fiabilidad de los resultados, como se comentó previamente. Es por ello que otros métodos no destructivos como la Emisión de Rayos X Inducida por Protones (PIXE) pueden tener un mayor valor en estos casos.

Además del problema de la superficialidad del análisis, existen otros dos inconvenientes relacionados con los objetivos que se va dar al método en este proyecto. El primero es la necesidad de estándares o muestras de composición conocida y certificada, de manera que podamos atribuir a los canales del detector las energías de las radiaciones que emite. El segundo está relacionado con el empleo del XRFA como método de datación. La datación por composición necesita que se hayan realizado previamente análisis a muestras datadas por otros medios. Así, si existe una variación a lo largo de la Historia en la composición de un mismo tipo de artefacto arqueológico, se podrá atribuir al período donde los resultados sean similares. Es por ello que es realmente necesaria la existencia de una bibliografía abundante para poder datar el objeto de este modo.

El Análisis de Fluorescencia de Rayos X es una técnica muy empleada en Arqueometría. Diversos estudios recientes muestran la variedad de muestras que se analizan con ella y cómo interpretar sus resultados en un enfoque arqueológico. En [37] se muestran varias aplicaciones que pueden dársele: la identificación de pigmentos en capas de pintura o en miniaturas de manuscritos o el análisis de cristal iridiscente. En [38] se estudian los pigmentos de los esmaltes vítreos y se realiza una distribución espacial que demuestra que los colores de una pieza poseen composiciones similares. En [39] se identifica la composición de fragmentos de cristal que formaban navíos en miniatura datados entre el siglo VII y el IX d.C. Se puede identificar el origen de los materiales utilizados en alfarería romana a partir de los oligoelementos [40]. Otro posible estudio es sobre la pureza de oro, [41] emplea monedas de la Reserva Anglosajona de Staffordshire. La diversidad de literatura arqueométrica en la que se ha empleado XRFA como método de análisis demuestra su gran utilidad.

## B. Otros métodos de datación

La principal desventaja del XRFA para datar es la necesidad de contar con información sobre la composición de un mismo tipo de objeto arqueológico previamente datado para poder establecer una comparación. Además, al margen de error que lleva la datación del objeto con el que se compara, se tiene que tener en cuenta el error en la composición de la muestra y de la referencia. Es por ello que no es una forma muy empleada de datación. En este proyecto se emplea, sin embargo, para dar un valor adicional a los resultados del análisis ya que se cuenta con la bibliografía necesaria.

En Arqueología, la datación por radiocarbono y la datación por termoluminiscencia son los dos métodos más empleados para fechar una muestra.

La datación por radiocarbono se basa en medir el contenido de  $C^{14}$  que se puede encontrar en restos de carácter orgánico. Éste se forma constantemente en la atmósfera cuando el nitrógeno interacciona con neutrones producidos por los rayos cósmicos y pasa a formar parte del organismo a través del  $CO_2$ , manteniéndose un sistema estacionario.

Para datar la muestra necesitamos conocer la constante de desintegración, el número de átomos de carbono-14 en la actualidad y estimar el número de átomos de carbono-14 inicial suponiendo que mantiene la misma proporción con el carbono-12, que no se desintegra y por tanto ha permanecido invariable, que la atmósfera. Existen distintas tecnologías para medir el contenido en  $C^{14}$  de una muestra. Recientemente, se ha desarrollado una creciente preferencia por utilizar un acelerador de masas por espectrometría ya que sólo se necesitan entre 5 y 10 mg de muestra [42] para poder obtener un resultado, por lo que se puede emplear para datar restos orgánicos valiosos como la Sábana Santa de Turín o pigmentos pertenecientes a pinturas rupestres.

Este método presenta tres inconvenientes: la imposibilidad de datar directamente materiales inorgánicos, como sería el caso con las monedas romanas; la necesidad de aplicar una serie de correcciones a la fecha obtenida y la facilidad con la que la muestra puede contaminarse, variando su contenido en carbono, debido a causas previas o posteriores a su descubrimiento. Sin embargo, es de especial utilidad si se quieren fechar muestras de hasta 50000 años de antigüedad.

La datación por termoluminiscencia se basa en conocer cuánta radiación ha acumulado la muestra mediante el calentamiento de ésta. Cuando la radiación interacciona con la estructura cristalina de un material inorgánico, los electrones pueden absorber energía y escapar del átomo en el que se encontraban. Sin embargo, pueden quedar atrapados en las imperfecciones de la red cristalina y liberarse exponiendo la muestra al calor. Una vez medida la radiación acumulada total, podemos datar la muestra asumiendo que la radiación que se acumula en un año es una magnitud constante.

Ésta técnica es de especial utilidad cuando se trabaja con materiales cerámicos. Durante su fabricación fueron cocidos, por lo que las trampas de electrones se vaciaron de toda la radiación acumulada previamente. De esta manera, en un material cerámico se fecha la última vez que fue cocido. Sin embargo, existen dos dificultades. La primera es asegurar que la arcilla no ha sido recocida en algún momento significativamente posterior al de interés. La segunda se debe a que los materiales cerámicos pueden contener materiales radiactivos naturales, por lo que se debe cuantificar su radiactividad y su efecto en el almacenamiento de radiación para que la datación sea precisa.

El método puede datar materiales cerámicos de hasta 10000 años de antigüedad y otros materiales inorgánicos como el sílex de más de 50000 años [42]. El mayor problema que presenta es su precisión, ya que muy pocas veces presenta un margen de error inferior al 10% [42].

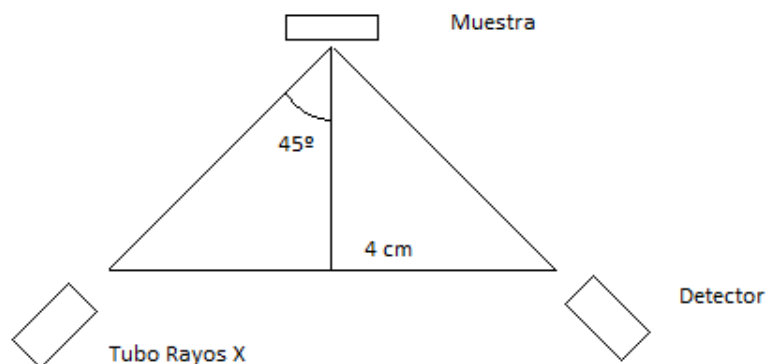
## V. CONSTRUCCIÓN Y VERIFICACIÓN DE UN MODELO QUE EMPLEA UNA MUESTRA CERTIFICADA

Una vez expuestas las bases que definen el proyecto, se puede proceder a la creación de un modelo en MCNP5 para las monedas romanas. Como se ha planteado en el apartado III, el Método de Monte Carlo puede generar resultados que, aunque pasen los controles estadísticos, no reflejen la realidad, por lo que el modelo debe verificarse. Para ello se ha empleado una muestra certificada de composición conocida, de manera que los valores del Método de Monte Carlo se comparen con resultados experimentales. La única diferencia existente entre el modelo de la muestra certificada y el que se emplea para las monedas es el objeto que recibe los rayos X, por lo que es de esperar que si uno produzca resultados realistas el otro también.

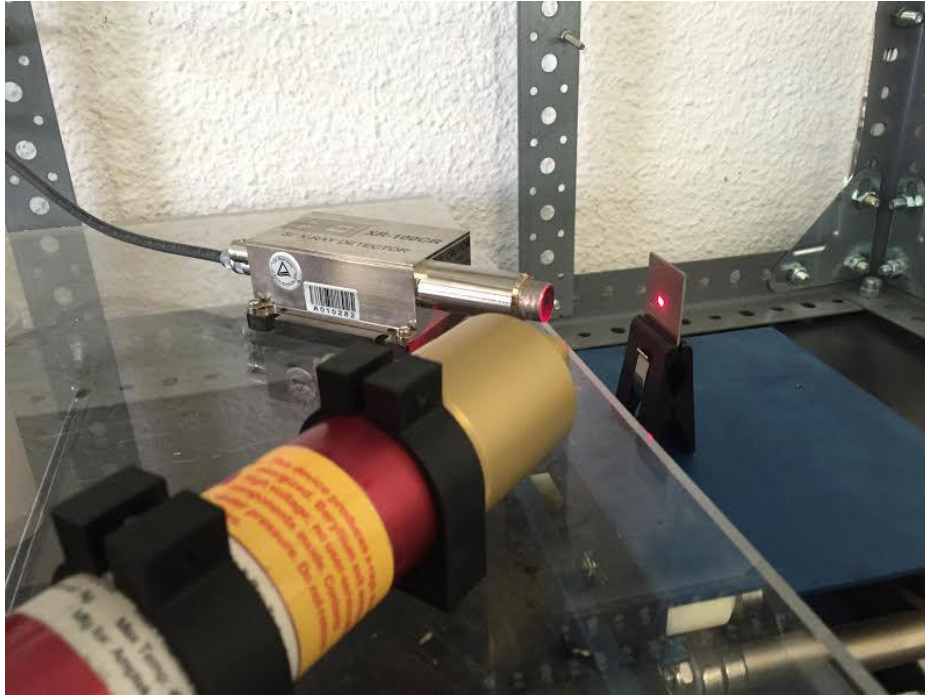
La organización del apartado es la siguiente. En primer lugar, se detalla el proceso de la realización de medidas experimentales y se muestran los espectros obtenidos. En segundo lugar, se describe el código de MCNP5 que modela las circunstancias en las que se producen las mediciones de la muestra certificada. Por último, se comparan los valores alcanzados.

### A. Medidas Experimentales y Análisis Preliminares

El montaje que se ha empleado para realizar las mediciones consta de un tubo de rayos X Eclipse III de FAST ComTec, una pinza que sostiene una placa Petri con la muestra, un detector de radiaciones de silicio XR-100CR de AmpTek y un conjunto de láminas de metacrilato que, junto con las paredes del laboratorio, actúan como protección frente a la radiación. Las especificaciones de ambos equipos se encuentran en los Anexos [2] y [3] respectivamente. La muestra es una aleación de cobre y níquel con la siguiente composición en porcentajes en masa: 68.12% de cobre, 30.35% de níquel, 0.75% de manganeso, 0.68% de hierro, 0.04% de carbono y 0.006% de azufre. Se ha realizado un ensayo de dispersión en energía, por lo que no es necesario un banco móvil ni un cristal de análisis. La configuración espacial es la siguiente:



*Fig. 8 Distribución espacial del montaje para Análisis de Fluorescencia de Rayos X*



*Fig. 9 El montaje experimental en el laboratorio*

El usuario del tubo de rayos X puede elegir la intensidad que circula por la resistencia y la tensión entre el cátodo y el anticátodo, que se relacionan con el flujo de fotones producidos y con la energía que estos poseen respectivamente. Para las mediciones, estos valores se han establecido a  $100 \mu\text{A}$  y  $20 \text{Kv}$ , respectivamente. La muestra ha sido expuesta a la radiación durante 3 minutos y el detector ha contado el nº de fotones recibidos y los ha distribuido según su energía en 1024 canales, produciéndose el espectro que se encuentra en la figura [10]. El programa de tratamiento de espectros utilizado es ADMCA de AmpTek que se incluye con el detector.

El anexo [1] recoge una tabla que se proporciona junto con el detector y que especifica las energías de las radiaciones fluorescentes más comunes para la mayoría de los elementos de la tabla periódica. Sin embargo, únicamente se debe tomar como una referencia debido a que no todos los fotones depositarán su energía íntegramente en el detector. Observando el espectro, podemos distinguir los siguientes picos:



- En torno a 2.81 keV se encuentra el pico del argón del aire. Dado que la diferencia entre la  $K\alpha$  y la  $K\beta$  es muy pequeña ( $\sim 0.2$  keV) se produce un hombro en vez de adoptar la característica forma de campana de Gauss.
- Los picos del manganeso se encuentran en 5.87, y en 6.38 junto con el  $K\alpha$  del hierro. Es por ello que el segundo pico es más alto que el primero aun cuando la muestra contiene ligeramente menos hierro que manganeso y la fluorescencia  $K\beta$  es menos probable. Ambos picos son los que menos cuentas dan dado que son los elementos que se encuentran en menor proporción en la muestra.
- En 7.47 se encuentra el pico  $K\alpha$  del níquel. El pico  $K\beta$  se encuentra junto con el  $K\alpha$  del cobre en torno a 8.05. En este caso, la diferencia de energías entre ambos hace que se solapen en el espectro, pero no se genera un hombro porque la diferencia de contenido entre el cobre y el níquel es considerable, sino que la campana se ensancha algo más de lo que debería.
- En 8.90 está el pico  $K\beta$  del cobre. Forma una campana de Gauss algo alterada por el ensanchamiento del pico anterior.
- Las radiaciones fluorescentes del carbono y del azufre son de energía baja y, además, estos elementos se encuentran en una proporción muy pequeña, por lo que sus fotones no llegan al detector.

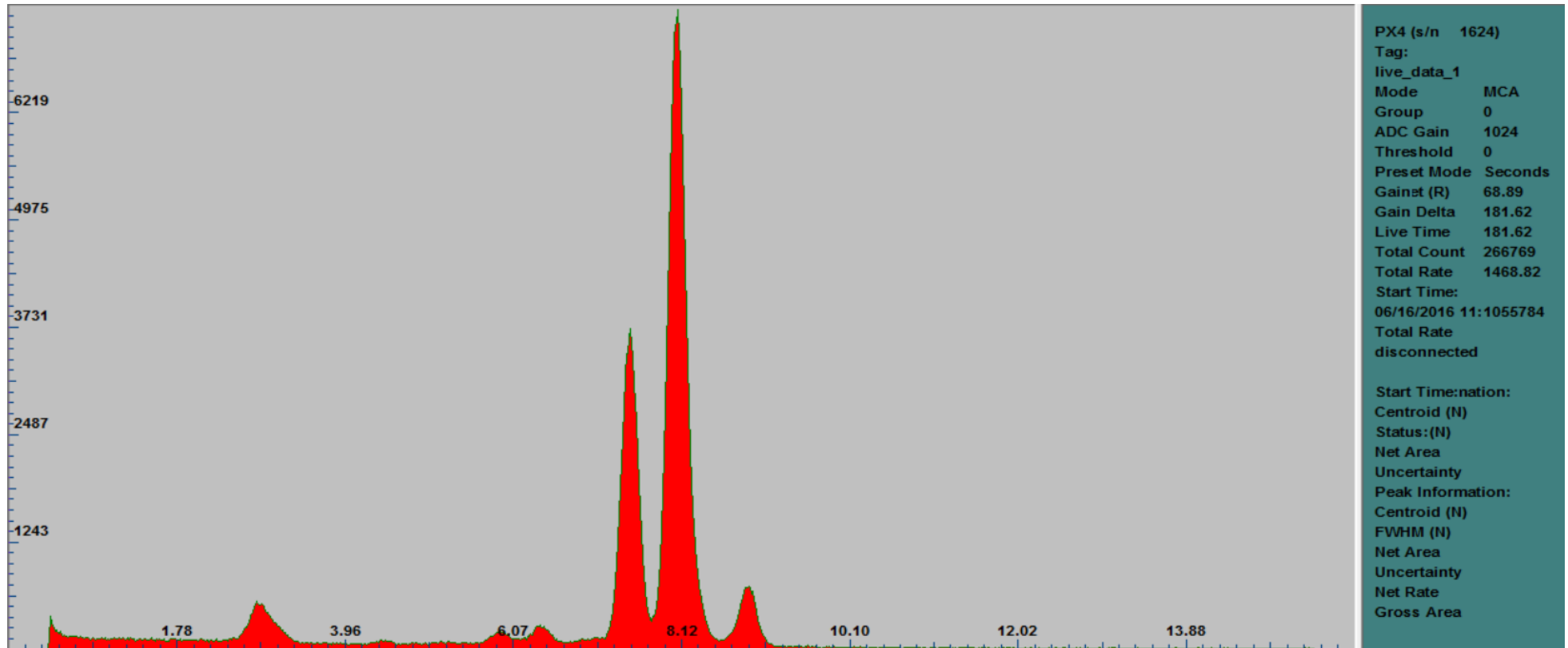


Fig. 10 Espectro experimental, extraído del programa ADMCA

Existe la posibilidad de realizar una serie de análisis a partir de la información contenida en el espectro para poder estimar la composición de la muestra previos al Método de Monte Carlo. Como en este caso es conocida, se pueden realizar para valorar la bondad de los resultados que producen. Se van a utilizar dos métodos: cociente de alturas y cociente de áreas. Ambos se basan en identificar los cocientes de la ecuación (19), donde  $x_Y$  representa la fracción en peso en tanto por uno del elemento Y, con valores que se pueden obtener del espectro anterior.

$$\begin{aligned}
 x_{Ni} + x_{Cu} + x_{Mn} + x_{Fe} &\approx 1 \\
 x_{Cu} \left( 1 + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Mn}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Fe}}{x_{Cu}} \right) &\approx 1 \\
 x_{Cu} &\approx \frac{1}{1 + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Mn}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Fe}}{x_{Cu}}}
 \end{aligned} \tag{20}$$

En un primer lugar, puede hacerse un análisis por alturas de pico. Con este método, se considera el cociente de fracciones en peso aproximadamente igual a la relación entre las alturas de los picos. Una vez obtenida la fracción en peso de cobre, la fracción en peso del resto de elementos se calcula como este valor multiplicado por la relación de alturas entre los picos. Los resultados de los cálculos vienen recogidos en las tablas [3] y [4].

*Tabla 3 Cuentas según ADMCA para cada pico y su proporción respecto a Cu*

Pico	nº cuentas	Proporción respecto a Cu
Cu $K\alpha$	7465	1
Ni $K\alpha$	3729	0.5
Mn $K\alpha$	215	0.029
Fe $K\alpha$	280	0.038

Tabla 4 Comparación entre la composición calculada por el método de alturas y la composición real

Elemento	Cu	Ni	Mn	Fe
Forma de calcular la Fracción	$\frac{1}{1 + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Mn}}{x_{Cu}}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Mn}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Fe}}{x_{Cu}}$
Fracción Calculada	0.639	0.319	0.184	0.24
Fracción Conocida	0.6812	0.3035	0.0075	0.0068

Se puede observar que los resultados se acercan con un cierto error a la composición conocida de la aleación de cuproníquel. El mayor error se encuentra en las fracciones en peso de hierro y manganeso, debido a que el pico  $K\alpha$  del hierro contiene el  $K\beta$  del manganeso, lo que hace que sea más alto y por tanto el resultado es mayor, aunque no debiera serlo.

El análisis por áreas ha sido recomendado por el profesor Luis Peralta de la Universidad de Lisboa. En él, el cociente de fracciones en peso se aproxima al cociente de la suma de las áreas de todos los picos de un mismo elemento. Es conveniente especificar que se trata de áreas netas, que se definen como aquellas a las que se les ha restado la aportación de la radiación de fondo. La manera de obtener las fracciones en peso es análoga al método anterior. Los resultados de los cálculos vienen recogidos en las tablas [5] y [6], y dependen de lo bien que se escojan los límites entre los que considerar las áreas de los picos.

Tabla 5 Área para cada pico según ADMCA, y su relación respecto la suma de los dos picos de Cu

Picos	Rango energías (keV)	Área neta	Proporción respecto a Cu
Cu: $K\alpha$ y $K\beta$	7.82 - 8.46; 8.71 - 9.22	124749	1
Ni: $K\alpha$	7.18 - 7.72	49245	0.395
Mn: $K\alpha$	5.68 - 6.08	1419	0.0114
Fe: $K\alpha$	6.08 - 6.67	2489	0.02

Tabla 6 Comparación entre la composición calculada por ambos métodos y la composición real

Elemento	Cu	Ni	Mn	Fe
Forma de calcular la Fracción	$1 + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Mn}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Fe}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Mn}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Fe}}{x_{Cu}}$
Fracción Calculada áreas	0.7012	0.279	0.008	0.014
Fracción Calculada alturas	0.639	0.319	0.184	0.24
Fracción Conocida	0.6812	0.3035	0.0075	0.0068

Como se puede ver a partir de la tabla anterior, el método de áreas ofrece unos resultados que se ajustan mejor a la realidad que el análisis por alturas, aunque continúa el problema hierro y el manganeso.

#### B. Descripción del Modelo Validado

El objetivo de este subapartado es justificar la aparición de los comandos que se encuentran en el código, que se encuentra íntegro en el Anexo [5], a partir de la selección y el detalle de los bloques en los que se puede dividir, empleando también información contenida en [35] y [43].

En primer lugar, un código de MCNP5 se puede dividir en tres unidades fundamentales de información: celdas, superficies y especificaciones, que aparecen en este orden separadas por una línea blanca. Los dos primeros intervienen en generar la geometría del problema; mientras que el último contiene información significativa sobre materiales, la fuente de partículas y especifica el tally

```

Montaje de XRFA para monedas
c Definicion de celdas
1 1 -8.92 -1 2 -3 $ cuproniquel
2 2 -1.85 -6 -7 8 $ Ventana de Berilio
3 3 -2.42 -8 9 10 -11 12 -13 $ Zona detectora silicio
4 4 -0.001184 -19 20 -21 22 -23 24 #1 #2 #3 $ Entorno considerado
5 0 19:-20:21:-22:23:-24 $ Fotonos fuera del sistema

```

*Fig. 11 Bloque 1: celdas descritas en el código*

La imagen anterior representa el bloque 1, que define las celdas. La primera línea del código es la línea de título y el programa no la lee, así como tampoco tiene en cuenta cualquier línea que comienza por "c ", que se denominan líneas de comentario. El símbolo \$ permite que se incluyan comentarios en líneas útiles ya que a partir de él el programa no leerá.

El método para describir una celda es el siguiente. En primer lugar, se le asigna a la celda un número de manera que quede identificada; después se hace referencia al material que la compone, que se describe en el bloque de especificaciones, y se indica su densidad. Un valor positivo implica que la densidad es atómica, mientras que un valor negativo indica que la densidad es másica, estando estas dos relacionadas mediante el número de Avogadro. Por último, se lista la relación de superficies que definen geoméricamente la celda. Los valores positivos implican que la celda existe desde la superficie en su dirección positiva, mientras que los negativos lo contrario. Así, la primera línea de código se leería: "La celda 1 utiliza el material 1 con una densidad de 5.8467 g/cc y se define en el sentido negativo de la superficie 1, en el sentido positivo de la superficie 2 y en el sentido negativo de la superficie 3".

Existen símbolos que indican operaciones con el espacio que definen las superficies: #celda extrae del espacio definido por las superficies anteriores el volumen reservado para otra celda y (espacio):(espacio) indica que ambos unidos conforman la celda. Es por ello que la parte geométrica en línea correspondiente a la celda 4 se debería leer "El espacio definido por las superficies 19, 20, 21, 22, 23 y 24 contiene las celdas 1, 2 y 3 y por tanto se deben eliminar estos volúmenes".

La celda 5 agrupa todo el espacio que queda fuera de los límites del modelo. Al escribir 0 en la referencia al material se asume que existe vacío y, a no ser que se especifique lo contrario como sucedería en un modelo de un tubo de rayos X, que las partículas que llegan hasta esa celda quedan descartadas.

El bloque 2 especifica las superficies que definen las celdas del modelo. Para ello, se sigue la estructura siguiente: primero se identifica la superficie con un número, después se qué tipo de superficie es a través de un comando y por último se establecen las dimensiones que son características para esa superficie. En [43] existe una lista de comandos para programar las superficies más comunes y qué dimensiones deben especificarse para cada una de ellas. Por ejemplo, "PX 1" indica que existe un plano YZ infinito que intersecta con el eje X a 1 cm del origen de ordenadas; mientras que "CX 1" describe un cilindro infinito cuyo eje es el eje X con un radio de 1 cm.

```
c Definicion de superficies
c Viruta de cuproniquel
1 CX 1.25
2 PX 0
3 PX 0.1
c Ventana de Berilio del detector
6 1 CX 0.25
7 1 PX 0
8 1 PX -0.00125
c Superficie activa detector
9 1 PX -0.03125
10 1 PY -0.12
11 1 PY 0.12
12 1 PZ -0.14
13 1 PZ 0.14
c Delimitacion del entorno
19 PY 7
20 PY -7
21 PZ 7
22 PZ -7
23 PX 0.21
24 PX -7
```

*Fig. 12 Bloque 2: superficies descritas en el código que definen las celdas del bloque anterior*

Como se puede observar por el ejemplo anterior, la posición del origen y la dirección de los ejes tiene una gran importancia para la definición de las superficies más sencillas. Es por ello que el programa nos permite establecer sistemas de coordenadas secundarios, ya sea porque la superficie que pretendemos definir puede resultar más sencilla así o porque no existe ningún otro método para describirla, a través de lo que se denomina transformación de coordenadas. El código que detalla la transformación se encuentra en el bloque de especificaciones, mientras que en el bloque de superficies aparece un número previo al comando que indica qué sistema de coordenadas se debe utilizar. De esta manera, la línea de código en la que se define la superficie 6 debería leerse: "La superficie 6 es un cilindro infinito de 0.25 cm de radio cuyo eje es el eje X con la dirección definida en la transformación 1".

Una vez que se han presentado las celdas y sus superficies, el paso siguiente es justificar que se pretende representar con ellas. En primer lugar, hay que tener en cuenta que la fuente se define en el bloque de especificaciones porque precisa de más información que el resto de objetos del modelo, por lo que no aparece nada relativo a ella en esta parte del código.

La celda 1 constituye la muestra de aleación de cuproníquel de composición conocida que se utiliza para verificar que el modelo es correcto comparando con los resultados experimentales. Esta muestra se presentaba en la forma de una viruta fina que se soportaba en una placa Petri a través de una cinta aislante de doble cara y se ha definido como un cilindro contenido por las superficies 1, 2 y 3. La densidad ha sido calculada a partir de las fracciones en peso y la densidad de cada elemento en condiciones normales.

Las celdas 2 y 3 describen el sistema de detección de manera simplificada. Se ha asumido que las emisiones fluorescentes que atraviesan la carcasa quedarían blindadas, por lo que únicamente se han representado los elementos con los que sí interaccionan los fotones contados, que son una ventana de berilio y el propio detector de silicio. Las dimensiones de los elementos se han tomado de las especificaciones técnicas del equipo, eligiendo como espesor de silicio 300 micras entre las distintas posibilidades para la correcta detección de fotones de baja energía.

Por último, la celda 4 recoge el volumen de aire que los fotones deben atravesar desde la fuente hacia la muestra y desde ésta hacia el detector. Si un fotón atraviesa los límites definidos queda descartado y que continúa con la siguiente partícula. Las dimensiones de la caja de aire han sido escogidas para dar un cierto margen.

Utilizando el programa VisEd que se incluye en la instalación de MCNP5 podemos observar la geometría del modelo que estamos definiendo tanto en 2 dimensiones como en 3D. Dado que la fuente no se ha definido en los bloques 1 y 2, no aparece en las diferentes vistas del modelo.



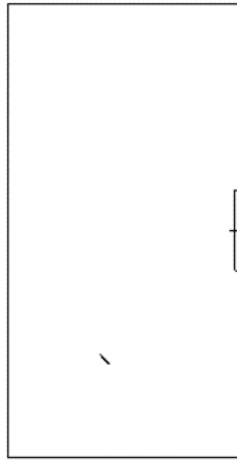


Fig. 13 Alzado extraído de VisEd que representa las celdas del problema

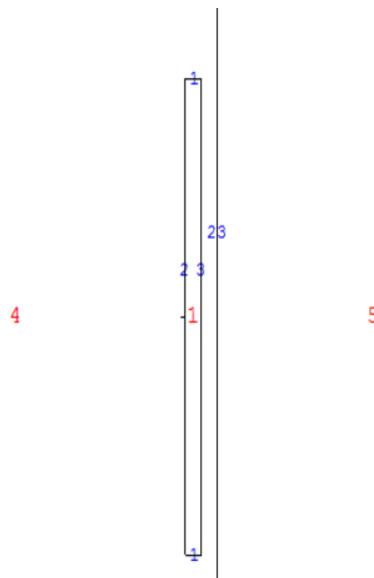


Fig. 14 Detalle de la celda 1. Las celdas se encuentran numeradas en rojo, y las superficies en azul

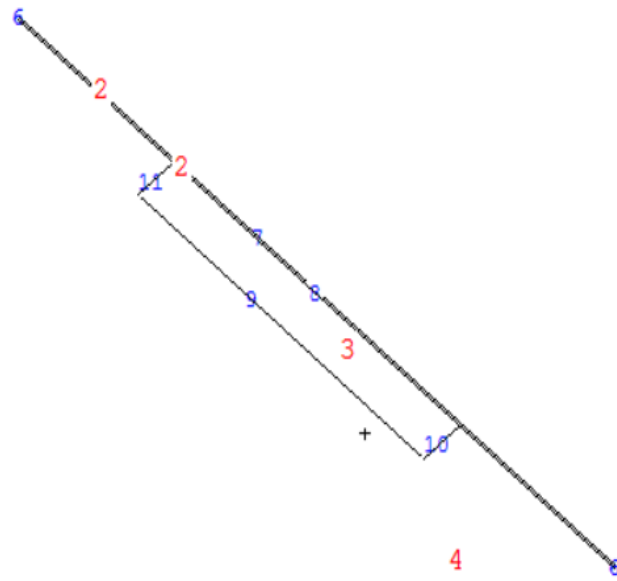


Fig. 15 Detalle de las celdas 2 y 3

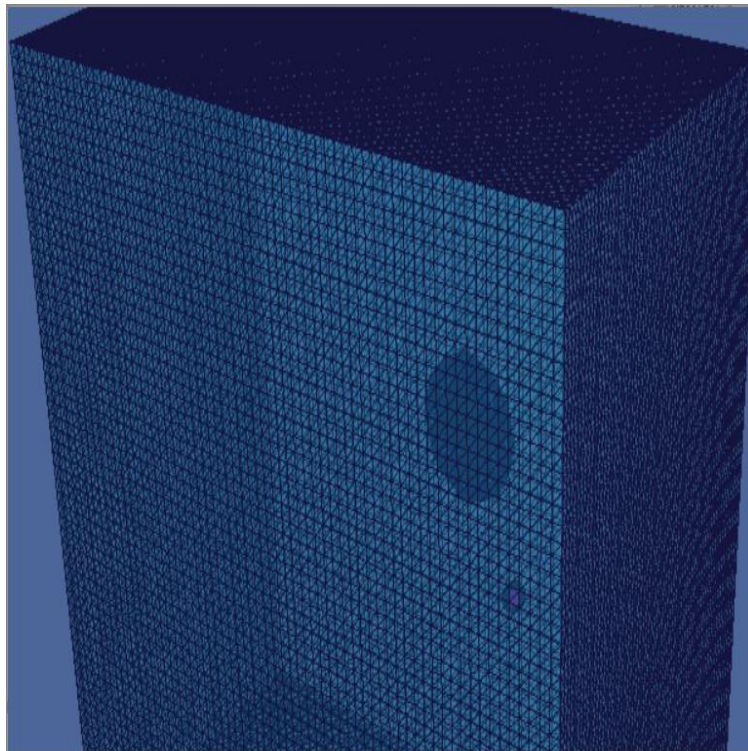
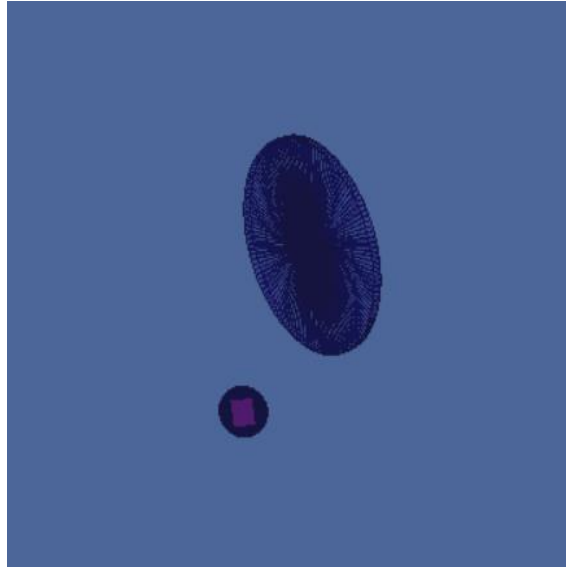


Fig. 16 Modelo completo en 3D. Las celdas interiores se ven a través de la superficie que delimita el modelo



*Fig. 17 Celdas interiores representadas en 3D*

El bloque de especificaciones contiene información vital para el modelo de muy diversa índole. Por tanto, en vez de presentarse en su conjunto se subdividirá para facilitar la interpretación del código.

```

MODE P
IMP:P 1 1 1 1 0
*TR1 -4 -4 0 45 45 90 135 45 90 90 0
c Definicion de materiales
m1 29000.04p -0.6812 28000.04p -0.30404 26000.04p
    -0.0068 25000.04p -0.0075 6000.04p -0.0004 51000.04p -0.00006 $ Cupronique1
m2 4000.04p 1 $ Be puro
m3 14000.04p 1 $ Si puro
m4 7000.04p -0.7552 8000.04p -0.232 18000.04p -0.0128 $ aire con argon

```

*Fig. 18 Extracto del bloque 3, en el que se definen los materiales y las transformaciones geométricas*

Este primer conjunto termina de completar la información de los bloques anteriores. En primer lugar, se especifican qué partículas se pretenden simular y en qué celdas debe simularse su trayectoria, utilizando 1 como 'sí' y 0 como 'no'. Tal como está escrito, la única celda en la que se descartan los fotones es la celda 5.

La siguiente línea define la transformación de coordenadas necesaria para que las celdas 2 y 3 se ajusten a la realidad. El comando “\*TR” necesita un número para identificar la transformación, la posición del origen respecto al predefinido y los ángulos en grados que forman los anteriores ejes y los nuevos. Si denominamos 1, 2 y 3 los nuevos ejes, se podría leer la línea como “El sistema de coordenadas auxiliar 1 tiene un origen de coordenadas en la posición -4 -4 0, el eje 1 forma 45° con el eje X, 45° con el eje Y y 90° grados con el eje Z; el eje 2 forma 135° con el eje X, 45° con el eje Y y 90° con el eje Z; y el eje 3 no ha cambiado de dirección.”

Por último, se definen los materiales mencionados en el bloque 1. La fórmula necesaria para ello es la siguiente: número identificativo y una sucesión de tablas de secciones eficaces que se pretende utilizar y fracción para cada elemento que forma el material. Las tablas de secciones eficaces emplean un sistema de codificación por el cual los primeros dígitos hacen referencia al elemento y la extensión permite elegir la partícula que va a interactuar y qué tabla se va a utilizar de entre las 4 que se encuentran implementadas en MCNP5 para interacción con fotones. Se ha escogido la última debido a que es la más reciente y a que, al contrario que las anteriores, consta de secciones eficaces para efecto fotoeléctrico.

La fracción puede expresarse como un valor positivo o negativo e, igual que la densidad, esto cambia la manera en la que se interpreta el resultado: los valores positivos hacen referencia a fracción atómica mientras que los negativos, a fracción en peso. La composición de la aleación ha sido ligeramente alterada debido a que el contenido completo es desconocido, por lo tanto, la diferencia entre el 1 y la suma de las proporciones de los materiales que sí se conocen (en torno a 0.0005) se ha añadido al níquel.

```
c Definicion de la fuente: Disco monodireccional con espectro de energia
SDEF POS=-4 4 0 AXS=0.7071 -0.7071 0 EXT=0 RAD=d1 PAR=2 ERG=d2
    VEC=0.7071 -0.7071 0 DIR=1
SI1 0 0.6858 $ Limites para sampling de 0 a R
SP1 -21 1 $peso de cada foton producido en el disco definido en primer
si2 L 0 $Distribución energías
sp2 D 0 $Distribución probabilidades
```

*Fig. 19 Extracto del bloque 3, en el que se define el tubo de rayos X*

Esta sección define la fuente de partículas, en este caso un tubo de rayos X. Generalmente las fuentes de fotones pueden considerarse puntuales si el blanco se encuentra a distancia suficiente, pero al no ser el caso se ha representado únicamente la ventana por la que salen del tubo los fotones.

La fuente se ha modelado como un disco plano que se encuentra en una posición simétrica al detector respecto al eje X, que emite partículas colimadas hacia el blanco y que consta de un espectro de energías, adaptando el ejemplo que se encuentra en [43] para una fuente disco monodireccional. En la tabla de la página siguiente se encuentran detallados los comandos que definen la fuente.

En “SI2” y “SP2” deberían comenzar unas listas de valores en las que, debido a su extensión, únicamente se ha mantenido el primer valor de ambas, pero que sí se encuentra íntegras en el Anexo [5]. El espectro del tubo de rayos X que se define es el del equipo Eclipse III que se utiliza en la parte experimental, proviniendo los valores del código de otro proyecto realizado por el Profesor Ródenas.

Tabla 7 Comandos empleados para definir la fuente explicados

Comando	Utilidad
POS=-4 4 0	Establece la posición del centro del disco.
AXS=0.7071 -0.7071 0	Establece la dirección del eje del disco mediante un vector unitario.
EXT=0	Define el coseno del ángulo entre el vector radial y el eje. De esta manera el eje es normal al plano que contiene el disco.
RAD=d1	Define una distribución de probabilidad para que los fotones se generen aleatoriamente dentro del disco.
PAR=2	Establece el fotón como partícula emisora.
ERG=d2	Define una distribución de probabilidad para que los fotones que se generan posean una energía acorde al espectro del tubo.
VEC=0.7071 -0.7071 0	Establece la dirección que llevarán los fotones generados mediante un vector unitario.
DIR=1	Establece el coseno del ángulo entre el eje del disco y la dirección de los fotones. De esta manera, el ángulo entre ellos es 0°
SI1 0 0.6858	Define el espacio alrededor del eje en el que puede generarse un fotón, es decir, entre el propio eje y el radio del disco.
SP1 -21 1	Establece el peso del fotón por generarse en un punto del disco a través de una función interna a MCNP5.
SI2 L	Introduce una lista de valores de energía en MeV para definir el espectro del tubo
SI2 D	Asigna a los valores de energía anteriores la probabilidad que se encuentra en la misma posición, de manera que se crea el espectro de energía

```
c Definicion del tally
F8:P 3
E8 0 1E-5 1024i 0.01565
FT8 GEB 6.356e-4 1.025e-3 0
CTME 150
```

*Fig. 20 Extracto del bloque 3, definición del tally empleado*

Con este bloque se termina de describir la información que necesita nuestro modelo. En primer lugar, se encuentra la definición del tally. El tally F8, cuyo funcionamiento se explicó en el apartado III, se emplea en la celda 3, que realiza la función de la lámina de silicio del en la que se dan las interacciones que permiten la detección de los fotones, y su espesor ha sido escogido para que se deposite su energía íntegramente. Por esto, las primeras líneas de la definición del tally se pueden interpretar como “cuenta los fotones que llegan a la celda 3 y repártelos en los intervalos definidos por el comando E8”, donde 1024i representa 1024 intervalos equiespaciados entre 1e-5 y 0.01565 MeV.

Además, se incluye un comando “FT GEB” que permite que la espectrometría que se obtiene como resultado de la simulación adquiera una forma gaussiana, acercándose más aún a la realidad física. Esta función va acompañada de tres valores que se emplean para introducir la anchura de la campana a mitad de altura o FWHM por sus siglas en inglés siguiendo la expresión [35]:

$$FWHM(E) = a + b\sqrt{E + cE^2} \quad (21)$$

Los valores introducidos al modelo provienen de otros proyectos que se llevan a cabo en el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear.

Por último, el comando “CTME” permite introducir el tiempo en minutos que MCNP5 realizará cálculos.

Una vez el input está completo, debemos acceder al símbolo del sistema y cambiar al directorio donde se encuentra el input en formato hoja de texto con el comando “cd”. Para que el programa comience a procesarlo, se debe ejecutar el comando “MCNP5 i=” seguido del nombre del fichero y su extensión.

### C. Descripción del Output y Resultados para el Modelo Validado

Debido a la extensión del output, en el presente subapartado se presentan únicamente aquellas partes que se consideran de relevancia para el proyecto. Además, se detalla la manera en la que se ha procedido para verificar con valores numéricos que el modelo es correcto.

Uno de los posibles resultados que presenta MCNP5 es el número de fotones que se han producido, tanto en la fuente como por otro tipo de interacciones, entre ellas la emisión de fluorescencia. En la siguiente imagen se indica qué número de partículas se han generado en cada posible interacción, así como el peso y la energía media de los fotones que se han producido.

photon creation	tracks	weight (per source particle)	energy
source	578458978	1.0000E+00	1.4853E-02
weight window	0	0.	0.
cell importance	0	0.	0.
weight cutoff	0	0.	0.
e or t importance	0	0.	0.
dxtran	0	0.	0.
forced collisions	0	0.	0.
exp. transform	0	0.	0.
from neutrons	0	0.	0.
bremsstrahlung	1315541	2.2742E-03	9.6272E-06
p-annihilation	0	0.	0.
photonuclear	0	0.	0.
electron x-rays	0	0.	0.
1st fluorescence	190335129	3.2904E-01	2.5841E-03
2nd fluorescence	0	0.	0.
total	770109648	1.3313E+00	1.7447E-02

*Fig. 21 Detalle del Output: fotones generados en la fuente y en distintas interacciones*

A partir de los valores que se han presentado previamente podemos definir las eficiencias de las distintas etapas del proceso. El rendimiento de producción de fluorescencia se podría definir como el cociente del número de fotones producidos por fluorescencia entre aquellos que genera la fuente:

$$\eta_{fluorescencia} = \frac{\text{Fotones fluorescencia}}{\text{Fotones fuente}} = \frac{190335129}{578458978} = 0.329$$

Como se puede observar por el resultado, la producción de fotones de fluorescencia no es un proceso muy eficiente. La interacción que los produce, el efecto fotoeléctrico, compite con el efecto Compton y, una vez se dé el efecto fotoeléctrico, el efecto Auger compite con la emisión de radiación fluorescente.

Además, el output también indica qué número de fotones entran en cada celda, así como el número de colisiones que se producen en ella o el recorrido libre medio de un fotón en la celda. Según indica la imagen [3], 15944 fotones llegan al detector que se encuentran en la celda 3 sobre ellos se aplicará el tally F8.

	cell	tracks entering	collisions	average track mfp (cm)
1	1	562098606	728293919	3.2782E-03
2	2	46486	130	4.9754E-01
3	3	15944	16435	1.3116E-02
4	4	617570590	20836778	5.8042E+02

*Fig. 22 Detalle del Output: fotones entrantes en las distintas celdas, colisiones que se producen dentro de ella y recorrido libre medio en la celda*

El resultado del tally no se va a presentar en esta subsección con valores numéricos ya que es una lista de 1027 filas y 3 columnas: energía, tally y error relativo. El espectro que se genera a partir del tratamiento de sus resultados, expuesto en el apartado III, se encuentra en la página siguiente.

Por último, el output también incluye la comprobación de que se cumplen los requisitos estadísticos para que el resultado sea estadísticamente correcto, que también se encuentran en la página siguiente.

La comprobación de que los resultados del Método de Monte Carlo son físicamente realistas se ha realizado comparando las relaciones de áreas, similares a las que ya se utilizaron para realizar el análisis preliminar, entre los resultados experimentales y los provenientes de la simulación.



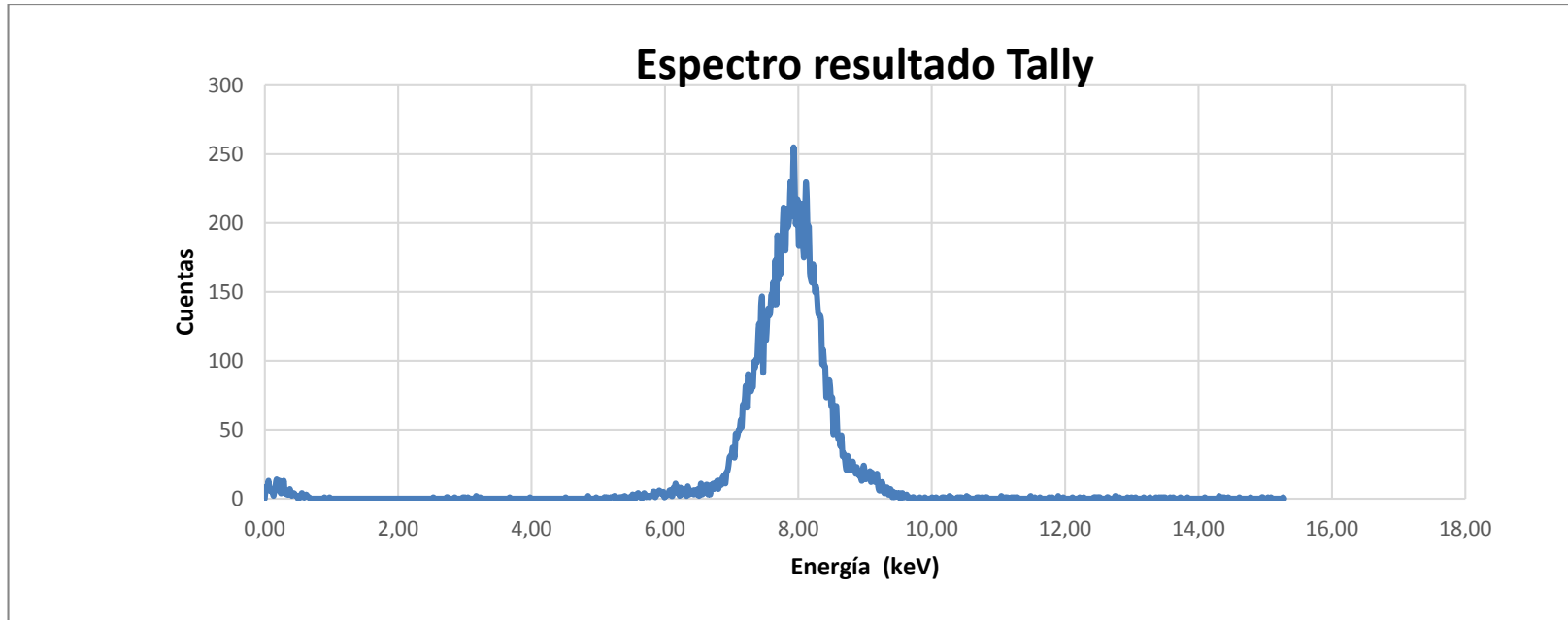


Fig. 23 Espectro obtenido al tratar el resultado del tally F8

results of 10 statistical checks for the estimated answer for the tally fluctuation chart (tfc) bin of tally 8

tfc bin behavior	--mean-- behavior	-----relative error----- value	decrease	decrease rate	----variance of the variance---- value	decrease	decrease rate	--figure of merit-- value	behavior	-pdf-slope
desired	random	<0.10	yes	1/sqrt(nps)	<0.10	yes	1/nps	constant	random	>3.00
observed	random	0.01	yes	yes	0.00	yes	yes	constant	random	10.00
passed?	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes

Fig. 24 Detalle del Output: comprobación de que el resultado cumple todos los test estadísticos

En primer lugar, es necesario establecer entre qué valores de energía se integra el espectro para cada pico. Dado que se hallaron unos valores de área neta para el análisis experimental utilizando el programa ADMCA, se pretenden utilizar los mismos límites de integración. En este caso, únicamente se han tenido en cuenta el níquel y el cobre, que se encuentran en una proporción considerablemente superior al resto de elementos.

Después, se calcula el área de los distintos picos mediante integración numérica, aprovechando la división en intervalos pequeños definida en el input en la integración mediante rectángulos, para conseguir una mejor aproximación. El modelo no genera radiación de fondo por lo que se puede considerar que el resultado es área neta.

Por último, se calculan los cocientes de áreas tanto para la parte experimental como para la simulada, ya que no se han definido de la misma manera que en análisis preliminar. Si la discrepancia entre estos valores es suficientemente pequeña para ambos picos, se acepta que el modelo es válido para producir resultados físicamente realistas.

En las páginas siguientes se puede encontrar un conjunto de tablas que resumen el cálculo realizado. Las dos primeras filas de cada tabla muestran en valores numéricos el espectro que produce el tally. La fila "área rectángulo" calcula el área del rectángulo que se forma si se considera que el número de cuentas a una energía permanece constante hasta el siguiente valor de energía del que se dispone. El área de cada pico será el sumatorio de todas estas áreas de rectángulos.

Las áreas del pico  $K\beta$  del cobre y del pico  $K\alpha$  del níquel se han referido al  $K\alpha$  del cobre dado que es el mayor pico, de manera que se comparan con los resultados obtenidos del espectro experimental. Dado que las relaciones de área según los resultados del modelo se aproximan suficientemente a los resultados que provienen de las mediciones experimentales, podemos dar por bueno el modelo. Su validez implica, de cara a emplearlo con las monedas romanas, que la definición de la fuente, el detector y el entorno es correcta y que únicamente será necesario modificar el código respectivo a la muestra.

Tabla 8 Cálculo de áreas por intervalo para el pico K $\alpha$  de Cu

Energía (keV)	7.72	7.73	7.75	7.76	7.78	7.79	7.81	7.82	7.84	7.85	7.87	7.88	7.90	7.91	7.93	7.94	7.96	7.98	7.99
Cuentas	181	163	181	191	211	208	180	210	197	199	207	230	205	221	255	231	200	208	216
Área rect.	2.75	2.49	2.75	2.92	3.23	3.16	2.75	3.19	3.01	3.02	3.17	3.52	3.12	3.38	3.88	3.53	3.06	3.16	3.30
Energía (keV)	8.01	8.02	8.04	8.05	8.07	8.08	8.10	8.11	8.13	8.14	8.16	8.17	8.19	8.20	8.22	8.23	8.25	8.26	8.28
Cuentas	184	193	194	214	193	175	197	229	217	187	197	164	159	157	170	165	150	154	146
Área rect.	2.80	2.95	2.95	3.27	2.95	2.66	3.01	3.48	3.32	2.86	2.99	2.51	2.42	2.40	2.60	2.51	2.30	2.34	2.23
Energía (keV)	8.30	8.31	8.33	8.34	8.36	8.37	8.39	8.40	8.42	8.43	8.45	8.46	8.48	8.49	8.51	8.52	8.54	8.55	8.57
Cuentas	135	133	133	129	98	108	96	96	74	79	80	86	80	67	73	47	58	65	
Área rect.	2.05	2.03	2.03	1.96	1.50	1.64	1.47	1.47	1.12	1.21	1.22	1.32	1.22	1.03	1.12	0.71	0.89	0.99	

Tabla 9 Cálculo de áreas por intervalo para el pico K $\alpha$  de Ni

Energía (keV)	7.20	7.21	7.23	7.24	7.26	7.27	7.29	7.30	7.32	7.33	7.35	7.36	7.38	7.40	7.41	7.43	7.44	7.46	7.47
Cuentas	72	82	66	90	87	85	78	81	81	99	95	101	99	115	127	114	140	146	92
Área rect.	1.09	1.25	1.00	1.38	1.33	1.29	1.19	1.23	1.24	1.51	1.44	1.55	1.50	1.76	1.93	1.74	2.14	2.22	1.41
Energía (keV)	7.49	7.50	7.52	7.53	7.55	7.56	7.58	7.59	7.61	7.62	7.64	7.65	7.67	7.69	7.70	7.72			
Cuentas	117	124	115	129	138	133	135	148	147	157	141	173	141	191	159				
Área rect.	1.78	1.90	1.76	1.96	2.11	2.02	2.07	2.26	2.23	2.40	2.14	2.65	2.14	2.92	2.43				

Tabla 10 Cálculo de áreas por intervalo para el pico K $\beta$  de Cu

Energía (keV)	8.57	8.59	8.60	8.62	8.63	8.65	8.66	8.68	8.69	8.71	8.72	8.74	8.75	8.77	8.78	8.80	8.81	8.83	8.84
Cuentas	67	49	43	43	38	46	31	33	31	24	21	31	26	21	24	21	27	23	23
Área rect.	1.03	0.75	0.65	0.66	0.58	0.70	0.47	0.50	0.47	0.36	0.32	0.47	0.40	0.32	0.36	0.32	0.41	0.35	0.35
Energía (keV)	8.86	8.88	8.89	8.91	8.92	8.94	8.95	8.97	8.98	9.00	9.01	9.03	9.04	9.06	9.07	9.09	9.10	9.12	9.13
Cuentas	18	23	18	18	16	16	13	21	24	18	14	17	16	15	20	12	19	13	17
Área rect.	0.27	0.35	0.27	0.28	0.24	0.24	0.20	0.32	0.37	0.27	0.21	0.26	0.24	0.23	0.30	0.18	0.29	0.20	0.26
Energía (keV)	9.15	9.17	9.18	9.20															
Cuentas	12	17	18																
Área rect.	0.18	0.26	0.27																

Tabla 11 Comparación entre los cocientes de área para el espectro experimental y el espectro obtenido con el modelo

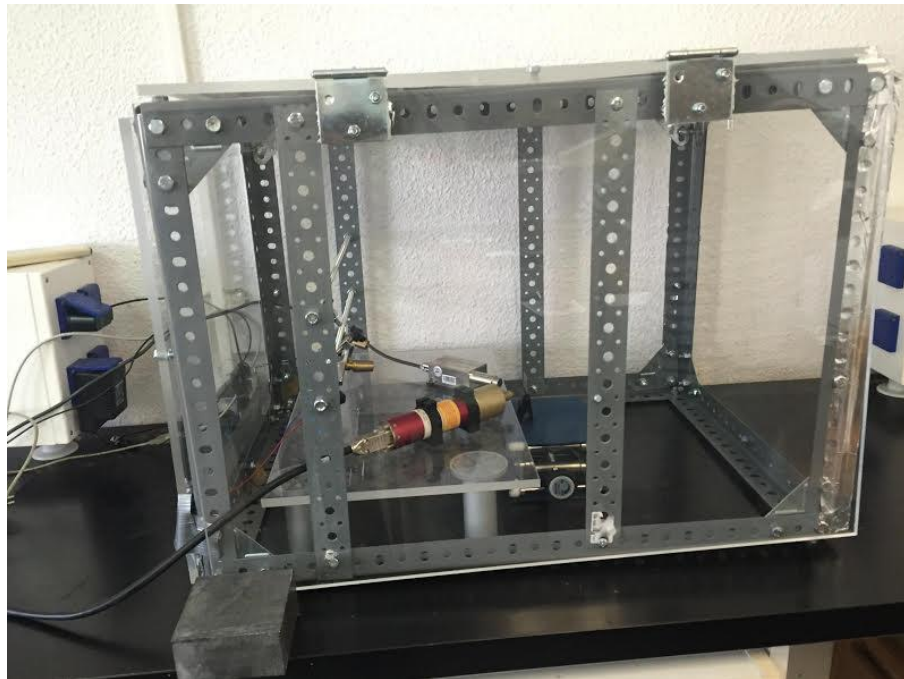
Pico	K $\alpha$ de Cu	K $\alpha$ de Ni	K $\beta$ de Cu
Área Espectro Experimental	114004	49590	13449
Área Espectro Modelo	136.95	61.01	15.21
Relación con K- $\alpha$ de Cu Experimental	1	0.43498	0.11110
Relación con K- $\alpha$ de Cu Modelo	1	0.44550	0.11797
Error Relativo	-	2.42%	5.83%

## VI. Cálculo de la dosis efectiva recibida durante las mediciones

Durante la fase experimental, el alumno y el personal de laboratorio se encuentran expuestos a un campo de radiación producido por el tubo de rayos X, que puede tener consecuencias perjudiciales para la salud debido a que el cuerpo humano también tiene capacidad para absorber su energía.

La magnitud que se utiliza en Radioprotección para cuantificar los efectos de la radiación sobre el cuerpo humano es la dosis efectiva, que tiene en cuenta tanto el flujo de energía que se absorbe como las partículas que lo acompañan y en qué zona del cuerpo incide. La legislación de Protección Radiológica es extensa y regula qué de dosis efectiva pueden recibir las distintas categorías de personas expuestas a radiación. Estos valores se presentarán posteriormente.

El criterio ALARA (As Low As Reasonably Achievable) que se emplea en Radioprotección indica que los sistemas de blindaje contra radiación tienen que encontrar un balance entre inversión necesaria y utilidad. Las medidas de protección que se tomaron durante las mediciones fueron colocar unas placas de metacrilato y colocarse a distancia prudencial de la fuente cuando se encuentra en funcionamiento para que tanto el metacrilato como el aire actúen de blindaje. Además, se cuenta con una alarma luminosa y acústica para avisar en caso de que la caja de metacrilato se cierra correctamente tras colocar la muestra. Como se comprobará, estas medidas aseguran que la exposición a la radiación es suficientemente segura.



*Fig. 25 Montaje de laboratorio con blindaje de metacrilato*

## A. Descripción del proceso de cálculo y del input

MCNP5 permite realizar cálculos para conocer la dosis absorbida en una celda incluyendo un comando para modificar uno de los tallies predefinidos. Sin embargo, el resultado de un tally siempre está normalizado por partícula emitida por la fuente, de manera que para poder comparar con los valores que aparecen en la legislación primero es necesario conocer qué número de partículas se emiten durante una medición de 2 minutos.

El siguiente esquema resume el proceso de cálculo que se ha empleado para obtener la dosis absorbida mediante MCNP5.

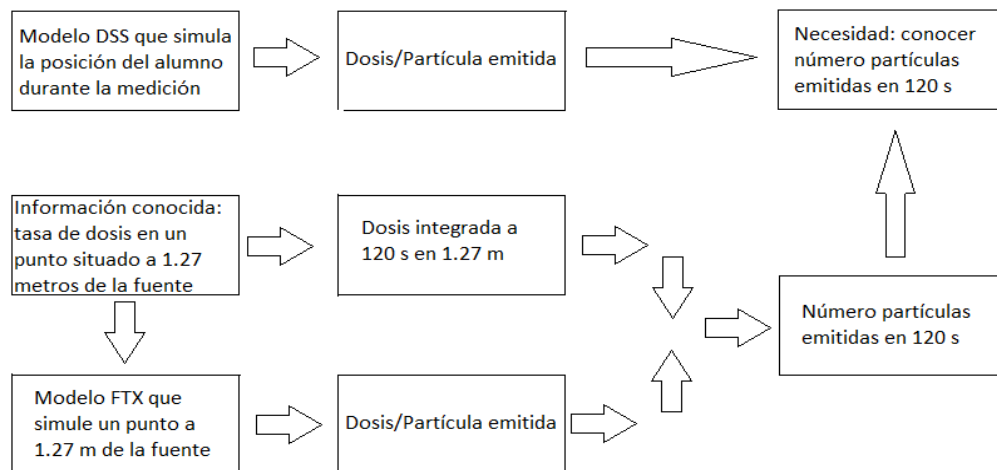


Fig. 26 Esquema cálculo de dosis con MCNP5

En primer lugar, se hallará el número de partículas emitidas en 2 minutos a partir de la tasa de dosis en un punto situado a 1.27 metros de la fuente que aparece en la hoja de especificaciones del Anexo [2]. El código del modelo FTX se encuentra íntegro en el Anexo [5] y únicamente se presentarán las partes de mayor relevancia.

```

c Definicion de celdas
1 1 -0.001184 -1 $ Punto Dosis

c Definición de superficies
c Punto Dosis
1 SPH 127 0 0 1
    
```

Fig. 27 Definición de la celda y la superficie para un punto en MCNP

Dado que se pretende trabajar con flujo promediado a una celda, se ha definido como una esfera de radio 1 cm que se encuentra en (127, 0, 0) cuyo contenido será aire, de manera que se asemeje lo máximo posible a un punto.

```

c Delimitacion del entorno
2 PX 128
3 PX -1
4 PY 5
5 PY -5
6 PZ 5
7 PZ -5

```

Fig. 28 Definición de las superficies que delimitan el modelo

La limitación del espacio considerado dentro del modelo se ha definido de esta forma debido a que la fuente se ha trasladado al origen de coordenadas y la dirección en la que se emiten los fotones es paralela al eje X.

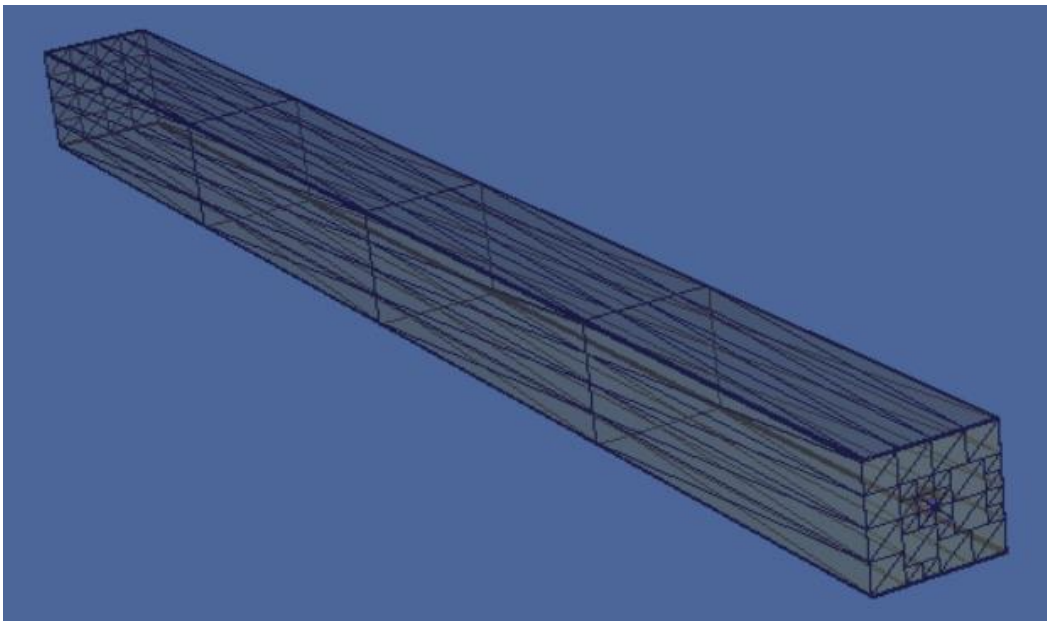


Fig. 29 Imagen 3D del modelo definido FTX. A través de la superficie semitransparente se observa el punto

```

c Definicion del tally
F4:P 1
DE4 0.001 0.0015 0.002 0.003 0.0032029 0.004 0.005 0.006 0.008 0.01
    0.015 0.02 0.03
DF4 5.766E-4 2.855E-4 1.686E-4 7.575E-5 6.824E-5 4.893E-5
    3.149E-5 2.182E-5 1.211E-5 7.597E-6 3.206E-6 1.727E-6 7.387E-7
*F14:P 1
DE14 0.001 0.0015 0.002 0.003 0.0032029 0.004 0.005 0.006 0.008 0.01
    0.015 0.02 0.03
DF14 5.766E-1 1.903E-1 8.430E-2 2.586E-2 2.131E-2 1.223E-2 6.297E-3
    3.637E-3 1.513E-3 7.597E-4 2.137E-4 8.633E-5 2.462E-5

```

Fig. 30 Extracto del input del modelo FTX: definición de los tallies

Tal como se definieron los tallies F4 y \*F14 en el apartado III, podemos hallar la dosis efectiva por partícula emitida por la fuente modificando su resultado si se multiplican por un valor que depende de la energía de la partícula:

$$\frac{E}{\text{partícula fuente}} = F4 \cdot f(E) = F4 \cdot E \cdot g(E) = *F14 \cdot g(E) \quad (22)$$

En el primer caso, la aportación de cada partícula se multiplicaría por su energía, por el coeficiente másico de absorción de energía y por la constante de cambio de unidades, mientras que la aportación de cada partícula al segundo tally ya lleva incluida la energía.

$f(E)$  y  $g(E)$  son las funciones que se definen mediante puntos utilizando los comandos "DE" y "DF": el comando "DE" establece los valores de energía de los puntos mientras que "DF" los valores de  $f(E)$  y  $g(E)$  para cada energía definida. Si la partícula incidente no posee el mismo valor de energía que los definidos, se le atribuye un valor de  $f(E)$  y  $g(E)$  empleando una interpolación logarítmica.

Los valores del coeficiente másico de absorción de energía utilizado provienen de [44]. La siguiente tabla muestra los valores involucrados para conseguir  $f(E)$  y  $g(E)$ .

Tabla 12 Cálculo de  $f(E)$  y  $g(E)$  para convertir F4 y \*F14 en cálculo de dosis efectiva

$k_0 \mu\text{Gy}/(\text{MeV}/\text{g})$	Energía MeV	$\frac{\mu_a}{\rho} \text{cm}^2/\text{g}$	$f(E)$	$g(E)$
1.602E-4	1.00E-03	3.599E3	5.766E-04	5.766E-01
	1.50E-03	1.188E3	2.855E-04	1.903E-01
	2.00E-03	5.262E2	1.686E-04	8.430E-02
	3.00E-03	1.614E2	7.757E-05	2.586E-02
	3.20E-03	1.33E2	6.824E-05	2.131E-02
	4.00E-03	7.636E1	4.893E-05	1.223E-02
	5.00E-03	3.931E1	3.149E-05	6.297E-03
	6.00E-03	2.27E1	2.182E-05	3.637E-03
	8.00E-03	9.446E0	1.211E-05	1.513E-03
	1.00E-02	4.742E0	7.597E-06	7.597E-04
	1.50E-02	1.334E0	3.206E-06	2.137E-04
	2.00E-02	5.389E-1	1.727E-06	8.633E-05
	3.00E-02	1.537E-1	7.387E-07	2.462E-05



El modelo DSS es una modificación del que se emplea en el apartado anterior, de tal manera que se incluyan las medidas de protección contra la radiación que se tomaron.

```

4 5 -1.19 (14 -15 18 -20 -23 26):(-16 17 18 -20 -23 26):
    (-15 17 -18 19 -20 26):(-15 17 19 20 -21 -23) $ Paneles de metacrilato
5 4 -0.001184 -22 $ Punto dosis
6 4 -0.001184 -23 24 -25 26 -27 28 #1 #2 #3 #4 #5 $ Fotones considerados

```

*Fig. 31 Celdas incluidas en el modelo DSS respecto al modelo original*

```

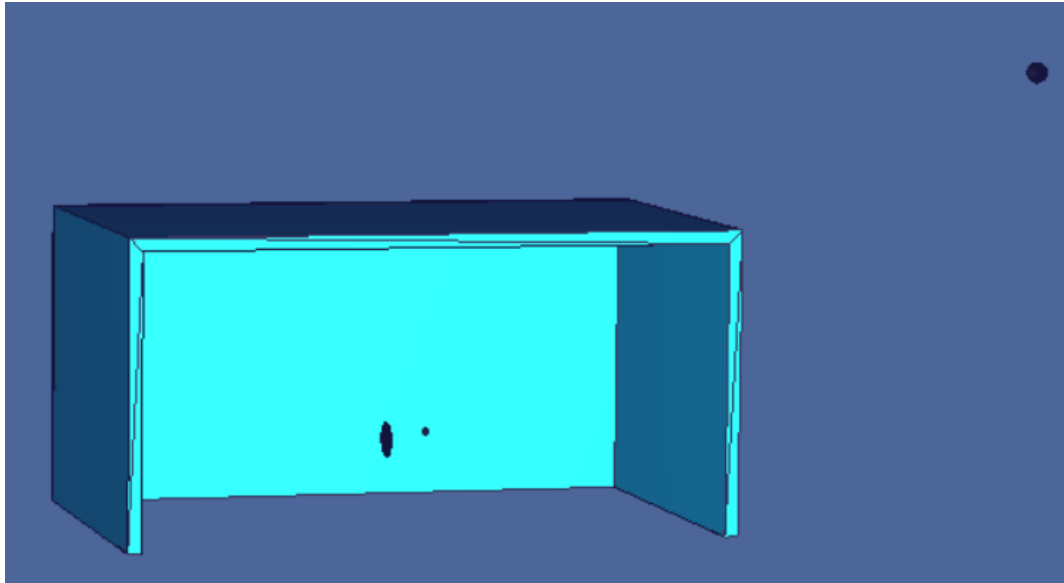
c Caja metacrilato
14 PX 20
15 PX 21
16 PX -24
17 PX -25
18 PY -20
19 PY -21
20 PZ 15
21 PZ 16
c Punto dosis
22 SPH -100 -120 20 1

```

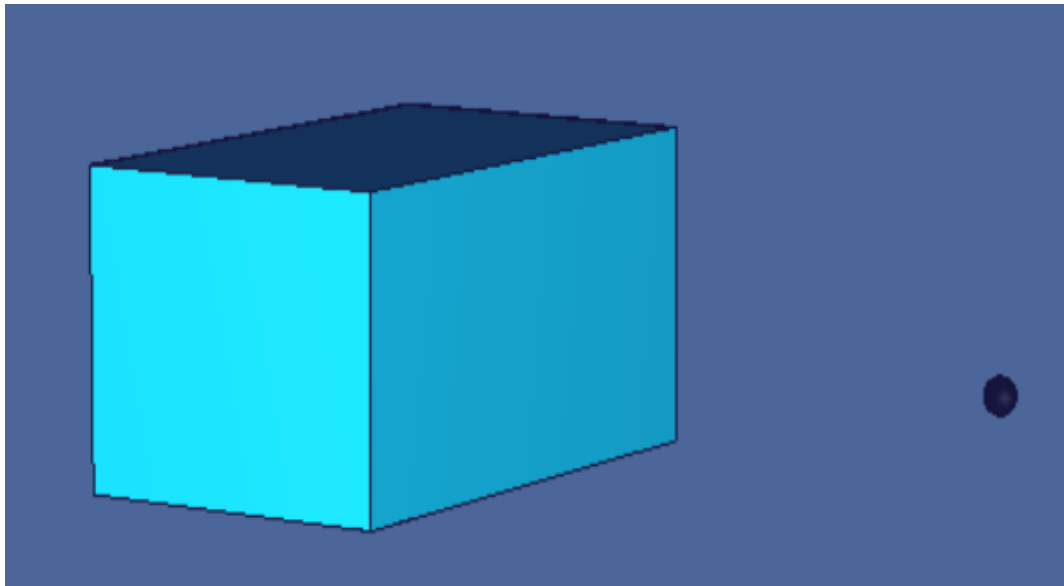
*Fig. 32 Superficies incluidas en el modelo DSS para definir las nuevas celdas*

Se emplearon 4 paneles de metacrilato que, junto al banco de trabajo donde se sostiene el tubo y a una pared, encierran el espacio donde se producen las mediciones. La celda 4 se ha definido uniendo las 4 placas para evitar emplear un mayor número de celdas. De manera similar que con el modelo FTX, la dosis se pretende calcular en un punto definido a partir de una esfera de pequeño radio. Por último, los límites del modelo se han ampliado para permitir albergar el resto de celdas. La representación 3D extraída de VisEd se encuentra en la página siguiente.

Del bloque de especificaciones únicamente se ha modificado, respecto al modelo validado, el tally para utilizar el mismo que en el modelo FTX. El resto del código permanece igual en esencia, aunque se han necesitado algunas ampliaciones en el establecimiento de la importancia de las celdas o en la definición de los materiales para poder tener en cuenta un mayor número de celdas y el metacrilato de la celda 4.



*Fig. 33 Representación 3D del modelo DSS, donde se observan las celdas originales y las nuevas*



*Fig. 34 Representación 3D del modelo DSS. Otra perspectiva.*

## B. Resultados

En primer lugar, se presentan los resultados del modelo FTX, debido a que son necesarios para que el modelo DSS nos proporcione la dosis absorbida. En el apartado anterior ya se presentaron algunos bloques de información que contiene el output y pueden resultar interesantes. Sin embargo, para este primer modelo especialmente, el resultado más relevante es el valor de los tallies.

```
1tally 4          nps = 120719171
  tally type 4    track length estimate of particle flux.
  tally for photons

  this tally is modified by a dose function.

  volumes
    cell:         1
                4.18879E+00

cell 1
      9.61136E-07 0.0001
```

*Fig. 35 Resultado tally F4 para el modelo FTX*

```
1tally 14         nps = 120719171
  tally type 4*   track length estimate of energy flux.
  tally for photons

  this tally is modified by a dose function.

  volumes
    cell:         1
                4.18879E+00

cell 1
      9.61003E-07 0.0001
```

*Fig. 36 Resultado del tally \*F14 para el modelo FTX*

Como se puede observar, el resultado es muy parecido entre ellos, pero no es el mismo aun siendo estadísticamente correctos. Las funciones  $f(E)$  y  $g(E)$ , que modifican los tallies F4 Y \*F14 respectivamente, se definen a puntos, por lo que si un fotón alcanza la celda con una energía distinta a las definidas se recurre a una interpolación. El error que conlleva la interpolación de la función  $f(E)$  es mayor ya que se definió incluyendo la energía, mientras que \*F14 tiene en cuenta la energía real del fotón. Por tanto, se tomará como resultado final el valor de dosis absorbida de  $9.61E-7 \mu\text{Gy/partícula fuente}$ .

Para hallar el número de partículas emitidas por el tubo de rayos X a lo largo de 120 segundos se ha empleado la siguiente ecuación:

$$\frac{\text{Dosis}}{\text{Partícula fuente}_{\text{modelo}}} \cdot n^{\circ} \text{ partículas emitidas} = \text{Tasa dosis}_{\text{especificaciones}} \cdot 2 \text{ minutos} \quad (23)$$

$$9.61E - 7 \frac{\mu\text{Gy}}{\text{partícula emitida}} \cdot x \text{ partículas} = 30 \frac{\mu\text{Gy}}{\text{h}} \cdot 0.017 \frac{\text{h}}{\text{min}} \cdot 2 \text{ min}$$

De esta ecuación obtenemos que, en 2 minutos, el tubo de rayos X emite 1036420 partículas. Este valor lo emplearemos, junto con el resultado del modelo DSS, para hallar la dosis absorbida por el alumno durante una medición.

```

1tally 14          nps = 1935163480
  tally type 4*   track length estimate of energy flux.
  tally for photons

  this tally is modified by a dose function.

  volumes
    cell:          5
                4.18879E+00

cell 5
        6.56425E-15 0.2280
  
```

Fig. 37 Resultado del tally \*F14 para el modelo DSS

El resultado del tally \*F14 para el modelo DSS se muestra en la imagen anterior. El error relativo es mayor que el que MCNP recomienda para aceptar un resultado como estadísticamente correcto (0.23 > 0.1). Sin embargo, cualquier valor en este orden de magnitud produce un resultado similar.

$$6.56425E - 15 \frac{\mu\text{Gy}}{\text{partícula emitida}} \cdot 1036420 \text{ partículas} = 6.8033E - 9 \mu\text{Gy}$$

Teniendo en cuenta que, según se explica en el subapartado II.a, en el caso de fotones de cualquier energía y considerando que el cuerpo entero recibe la misma dosis absorbida, la dosis efectiva, la magnitud de daño real, presenta el mismo valor.

$$E = 6.8033E - 9 \mu Sv$$

La medición de laboratorio empleando un detector de radiación daba únicamente radiación de fondo en el punto donde se encontraba el alumno, por lo que ambos resultados concuerdan en que la dosis que absorbe es despreciable.

Una vez alcanzado este resultado, podemos comparar con los valores que se encuentran en la legislación como límite de dosis efectiva. [17] diferencia entre trabajadores expuestos y público general, según si su actividad económica implica la exposición a un campo de radiación. Los estudiantes mayores de 18 años que deben emplear fuentes de radiación en sus estudios emplean los límites del primer grupo, que, en caso de cuerpo entero, asciende a 50 mSv al año.

El valor anteriormente calculado corresponde a una medición de 2 minutos, pero se han efectuado 5 mediciones (muestra certificada y cuatro monedas romanas), por lo que debe reflejarse en la comparación. Tal como se puede observar, el daño que recibe el alumno en cada medición de fluorescencia de rayos X es bastantes órdenes de magnitud menor que el límite legislado.

$$E = 5 \cdot 6.8033E - 9 \mu Sv = 3.4165E - 8 \mu Sv = 3.4165E - 11 mSv \ll 50 \frac{mSv}{año}$$

Por supuesto, este resultado tiene en cuenta que el alumno no realiza ninguna otra actividad formativa en la que se emplean fuentes de radiación a lo largo del año. Es habitual llevar un seguimiento de la dosis que reciben los trabajadores expuestos para asegurarse de que nunca se superan los valores permitidos por la legislación.

## VII. Cálculo de la composición de monedas romanas

El objetivo de este apartado es hallar la composición de 4 monedas romanas a las que el alumno ha tenido acceso, empleando tanto un análisis de los datos obtenidos experimentalmente como un modelo que se obtuvo modificando ligeramente el modelo validado para asegurar la exactitud de los resultados. A partir de los valores de composición, podremos identificar a qué época temporal pertenecen las monedas consultando la bibliografía, que actualmente se encuentra en expansión y todavía no ha sido unificada.

### A. Medidas experimentales y análisis preliminares

El equipo empleado y las condiciones son los mismos que en la medición del espectro de la aleación de cuproníquel.



*Fig. 38 Primera moneda, muestra el perfil de la esposa de un senador romano*

La página siguiente muestra su espectro. Los picos que en él aparecen son los siguientes:

- En torno a 2.84 keV se encuentra el pico más importante del espectro. La emisión K para estas energías, contando las pérdidas por el recorrido en aire, corresponde al argón; sin embargo, el contenido en argón del aire es demasiado bajo para producir un número de cuentas tan elevado. Es por ello que se considera un pico de la fluorescencia L de la plata. El pico se ensancha hacia la derecha debido a que la diferencia de energía entre la  $L\alpha$  y la  $L\beta$  es bastante pequeña.
- Alrededor de 8.05 keV aparece un pico que corresponde a la fluorescencia  $K\alpha$  del cobre.
- Existen otros picos de menor importancia que se pueden atribuir a níquel y a hierro residuales.
- La parte de más bajas energías del espectro, que corresponde a fotones que no interaccionan completamente con el silicio del detector, se ve ahora considerablemente más alta. Esto se debe a la escala: el número de cuentas en las zonas útiles del espectro es significativamente menor que en la aleación de cuproníquel, de manera que las cuentas en los picos y las correspondientes a retrodispersiones se encuentran en el mismo orden.

Para el análisis preliminar de esta primera moneda se ha utilizado solo el método de áreas, refiriéndolas a la de la plata al encontrarse en un contenido mayor. De manera similar a la ecuación (19), podemos emplear el siguiente razonamiento:

$$\begin{aligned}
 x_{Ag} + x_{Cu} &\approx 1 \\
 x_{Ag} \left(1 + \frac{x_{Cu}}{x_{Ag}}\right) &\approx 1 \\
 x_{Ag} &\approx \frac{1}{1 + \frac{x_{Cu}}{x_{Ag}}}
 \end{aligned} \tag{24}$$

Tabla 13 Áreas netas obtenidas del espectro experimental empleando el programa ADMCA

Picos	Límites energía (keV)	Área neta	Proporción respecto a Ag
Cu: $K\alpha$	7.77 - 8.35	2799	0.0824
Ag: $L\alpha$ y $L\beta$	2.32 - 3.53	33975	1

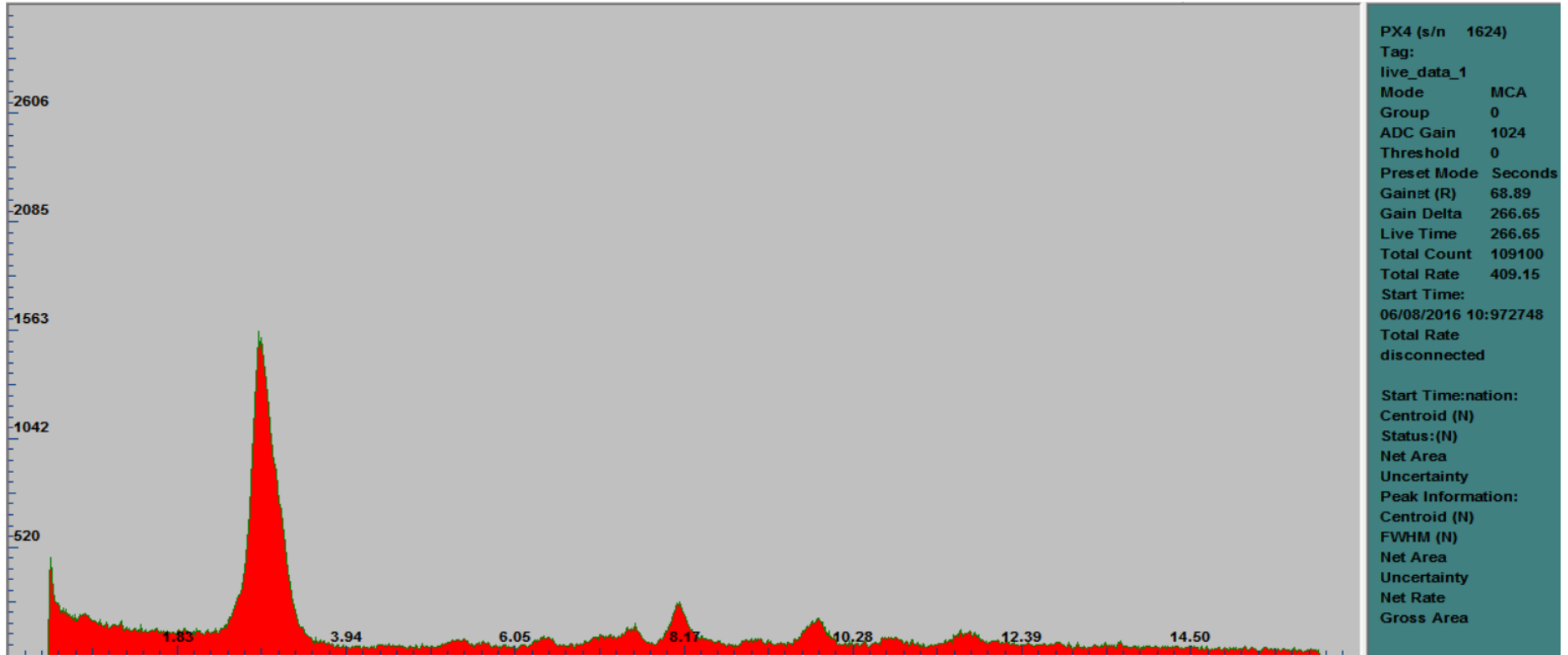


Fig. 39 Espectro experimental del primer denario



Tabla 14 Resultados del análisis del espectro experimental de la primera moneda mediante el método de áreas

Elemento	Ag	Cu
Forma de calcular la Fracción	$\frac{1}{1 + \frac{x_{Cu}}{x_{Ag}}}$	$x_{Ag} * \frac{x_{Cu}}{x_{Ag}}$
Fracción Calculada áreas	0.9239	0.0761

Dadas las características de esta primera moneda, se puede asumir que está compuesta de plata, pero cuenta con un porcentaje muy pequeño de cobre. El contenido en níquel y hierro son completamente despreciables.



Fig. 40 Segunda moneda, muestra el perfil del emperador Septimio Severo. En el reverso aparece un altar.

A partir de su espectro podemos identificar los siguientes picos:

- En 2.85 keV se encuentra el pico L de la plata. Como en el caso anterior, las diferencias de energía entre la emisión  $\alpha$  y la  $\beta$  es tan pequeña que los picos se solapan. Sigue siendo el pico más intenso.
- En torno a 7.49 keV podemos encontrar un pequeño pico  $K\alpha$  del níquel.
- Podemos observar los picos del cobre en sus respectivas energías. La aparición del pico  $K\beta$ , unido a un pico  $K\alpha$  más pronunciado, indica que el contenido en cobre es mayor que en la moneda anterior.
- Existe un pico de hierro, pero es despreciable.

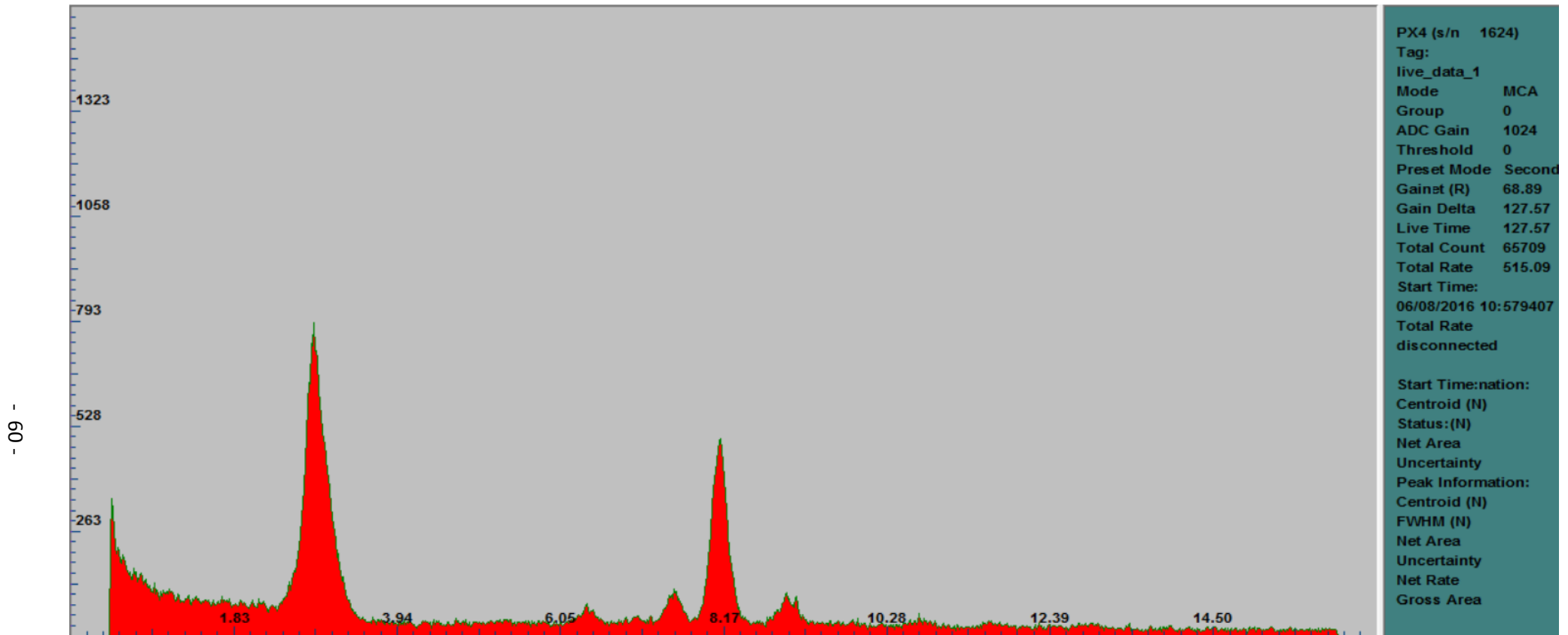


Fig. 41 Espectro experimental del segundo denario

Tabla 15 Áreas netas de la segunda moneda obtenidas del espectro experimental

Picos	Límites energía (keV)	Área neta	Proporción respecto a Cu
Cu: $K\alpha$ $K\beta$	7.82 - 8.46; 8.71 - 9.22	6630; 690	1
Ag: $L\alpha$ $L\beta$	2.37 - 3.53	14292	2.0934
Ni: $K\alpha$	7.26 - 7.72	1008	0.1377

Tabla 16 Resultados de composición para la segunda moneda según el análisis del espectro

Elemento	Cu	Ag	Ni
Forma de calcular la Fracción	$\frac{1}{1 + \frac{x_{Ag}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ag}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}$
Fracción Calculada áreas	0.3094	0.648	0.043



Fig. 42 Tercer denario. En él se muestra el perfil de Septimio Severo. En el reverso se encuentra una representación del dios Marte

Tabla 17 Áreas netas del tercer denario obtenidas del espectro experimental

Picos	Límites energía (keV)	Área neta	Proporción respecto a Cu
Cu: $K\alpha$ $K\beta$	7.74 - 8.58; 8.58 - 9.35	25590; 4405	1
Ag: $L\alpha$ $L\beta$	2.44 - 3.4	20745	0.6916
Ni: $K\alpha$	7.26 - 7.72	1166	0.0389

Tabla 18 Resultados de composición para la tercera moneda según el método de áreas

Elemento	Cu	Ag	Ni
Forma de calcular la Fracción	$\frac{1}{1 + \frac{x_{Ag}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ag}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}$
Fracción Calculada áreas	0.5779	0.3996	0.0225



Fig. 43 Cuarto denario. En él, se muestra a Julia Domna, esposa de Septimio Severo que gobernó tras su muerte

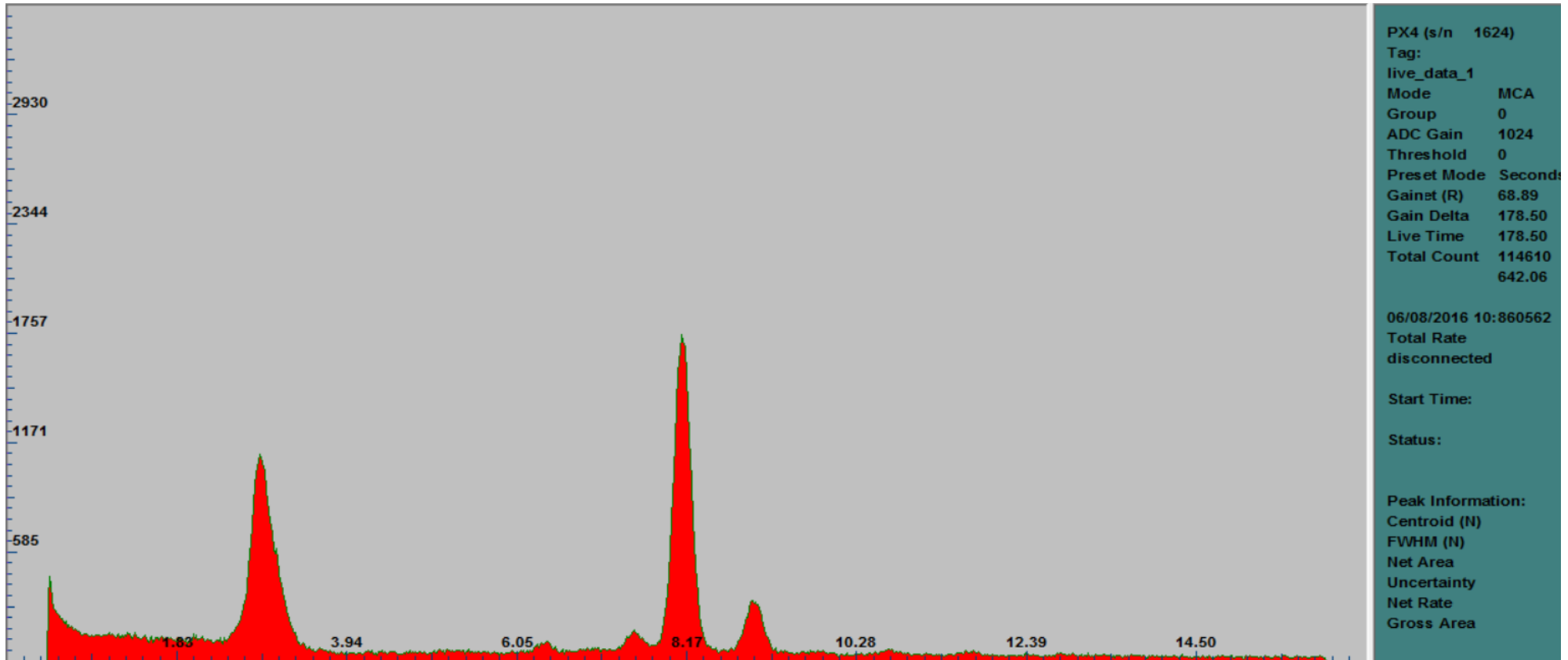


Fig. 44 Espectro experimental del tercer denario

Tabla 19 Áreas netas del cuarto denario obtenidas del espectro experimental

Picos	Límites energía (keV)	Área neta	Proporción respecto a Cu
Cu: $K\alpha$ y $K\beta$	7.72 - 8.53; 8.64 - 9.35	54905; 8050	1
Ag: $L\alpha$ y $L\beta$	2.42 - 3.45	17153	0.2725
Ni: $K\alpha$	7.32 - 7.7	527	0.0084

Tabla 20 Resultados de composición para la cuarta moneda según el análisis preliminar

Elemento	Cu	Ag	Ni
Forma de calcular la Fracción	$\frac{1}{1 + \frac{x_{Ag}}{x_{Cu}} + \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ag}}{x_{Cu}}$	$x_{Cu} * \frac{x_{Ni}}{x_{Cu}}$
Fracción Calculada áreas	0.7807	0.213	0.0065

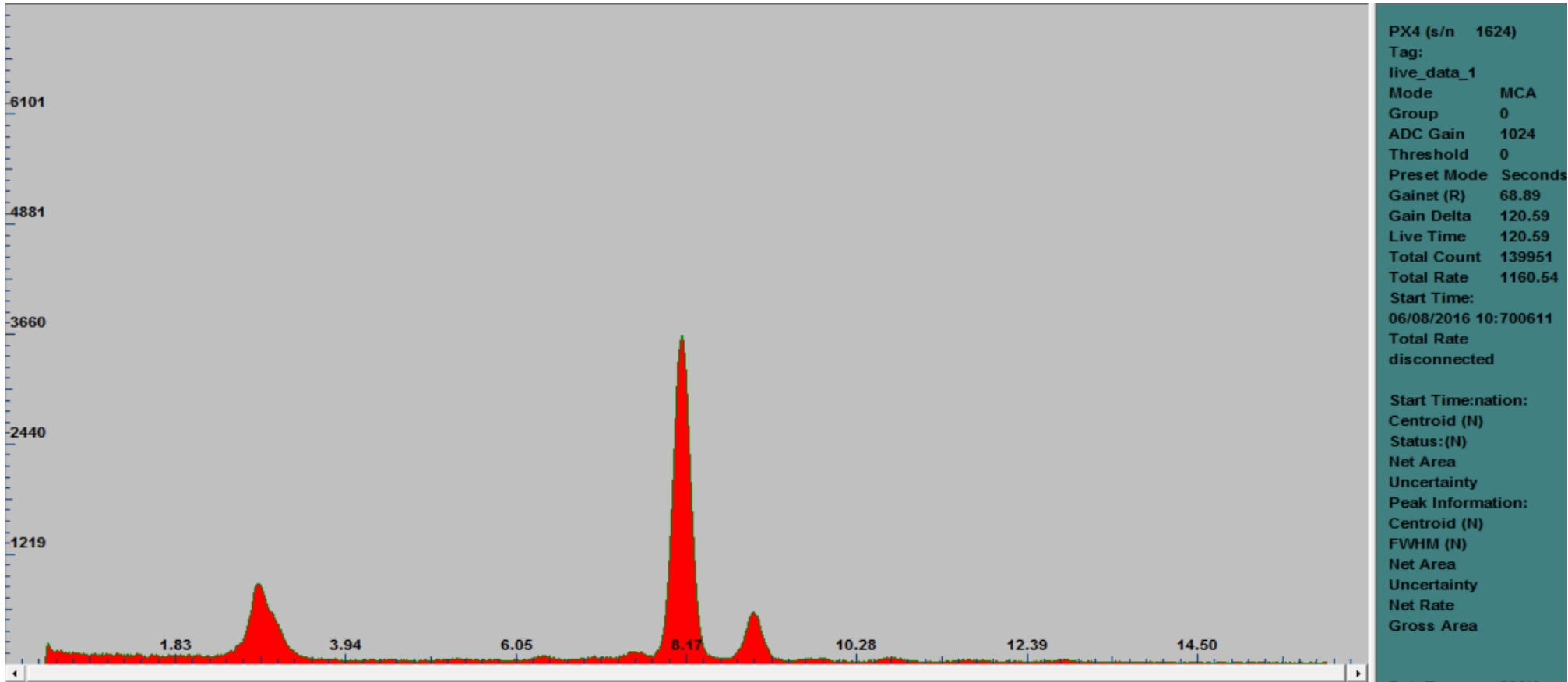
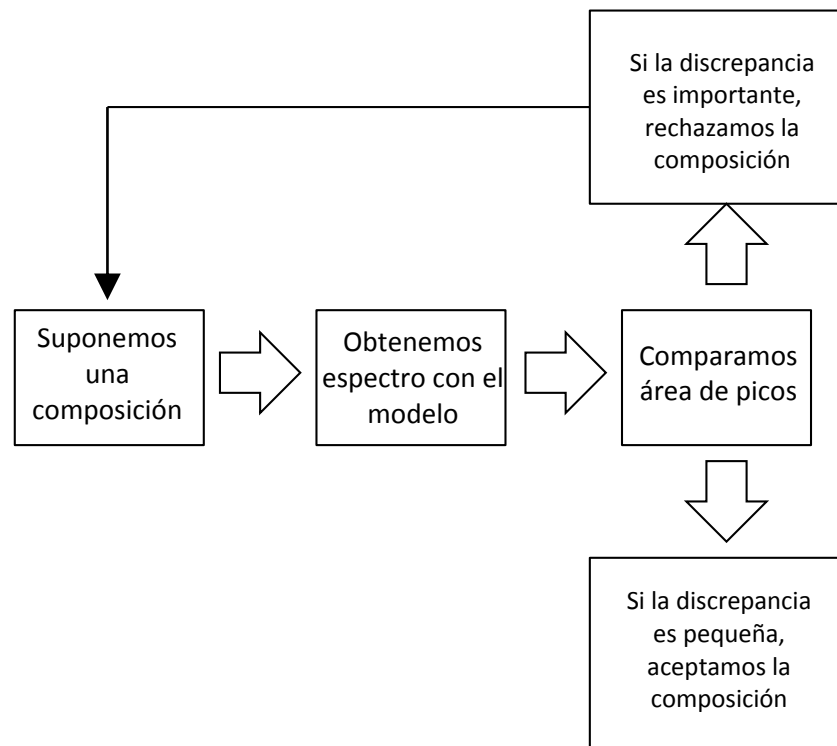


Fig. 45 Espectro experimental del cuarto denario

## B. Aplicación del modelo

El presente objetivo es modificar el código concerniente a la muestra del modelo que se validó en el apartado V, de manera que se obtengan espectros lo más físicamente realistas posible para cada una de las monedas. Dado que su composición es desconocida, el proceso para hallarla es iterativo. Supondremos una composición para las monedas y compararemos las áreas bajo los picos de la misma manera que ya se empleó para confirmar que el modelo era válido. Así, en caso de que exista una discrepancia importante, se volverá a calcular utilizando una composición distinta.



*Fig. 46 Método de cálculo de composición de las monedas empleando MCNP5*

Sin embargo, el resultado de aplicar este método a las monedas es que no se llega a aceptar la composición, el método iterativo no converge. La iteración que se ha considerado la última, aplicándose el método a la cuarta moneda del subapartado anterior, ejemplifica el motivo por el que se ha llegado a esta conclusión.



```

c Definicion de celdas
1 1 -10.144 -1 2 -3 $ moneda
c Moneda
1 CX 0.8
2 PX 0
3 PX 0.15
c Definicion de materiales
m1 29000.04p -0.2 47000.04p -0.8 $ Moneda

```

Fig. 47 Cambios en la muestra respecto al modelo original para representar el denario de Julia Domna

La imagen anterior muestra los únicos cambios que se han realizado respecto al modelo validado. La moneda se considera homogénea y se ha supuesto un contenido en plata considerablemente superior al proveniente del análisis preliminar, alrededor del 21%, que sería un valor lógico para comenzar a iterar. El motivo de esto se dará más adelante. El contenido en níquel se ha despreciado, y la densidad de la celda ha sido calculada a partir de las fracciones en peso y la densidad de cada elemento en condiciones normales.

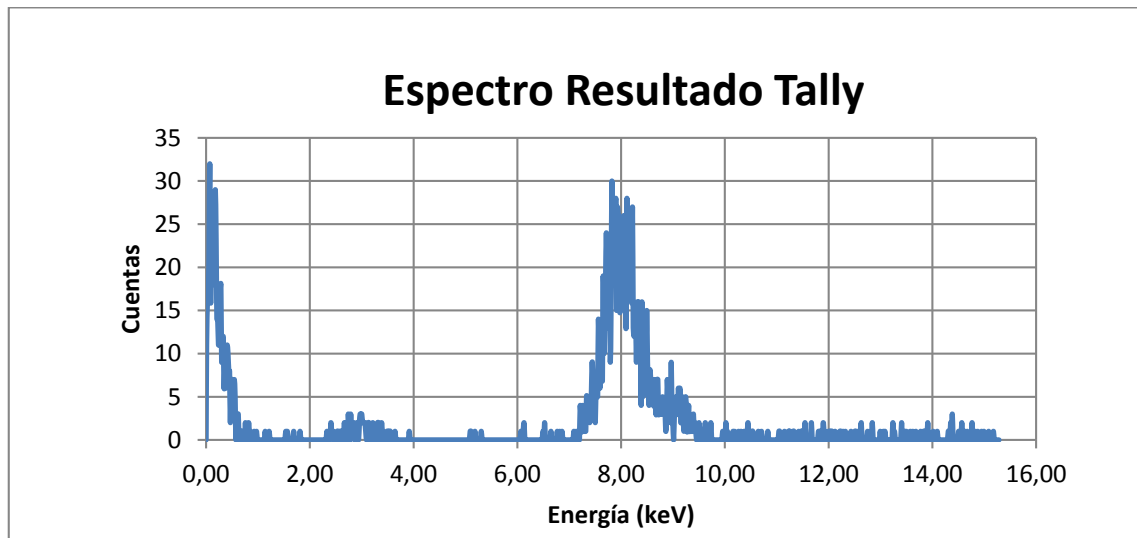


Fig. 48 Espectro modelo obtenido al tratar los resultados del tally

La imagen anterior corresponde al espectro que se puede generar a partir del resultado del output, mientras que en la página siguiente podemos encontrar una tabla que detalla el cálculo de los cocientes de áreas, similar a la que se empleó en el apartado V.

Como se puede observar, la relación entre el área del pico L de plata y el pico  $K\alpha$  del cobre en el espectro proveniente del modelo es significativamente inferior que el mismo resultado para el espectro experimental. Aun contando con un 80% de contenido en plata, el modelo no produce suficiente radiación fluorescente de este elemento. Esta situación se agrava al tener en cuenta que la moneda con la que se compara es la que menor contenido en plata posee. Es por ello que se puede generalizar que el modelo no va a producir resultados realistas para ninguna de las monedas.

Dado que únicamente se ha cambiado, respecto al modelo validado, código concerniente a la muestra, podemos inferir que es donde se encuentra el problema. Los motivos por los que el modelo no aporta un resultado realista son variados, principalmente se puede deber a que la moneda no puede considerarse homogénea o que necesita una descripción detallada de todas las discontinuidades superficiales que se dan al presentar un cuño. El planteamiento de estos problemas dentro del programa MCNP5 queda fuera de los objetivos del presente Trabajo Fin de Grado. Dado que es necesario contar con valores de composición para poder ubicar temporalmente las monedas, se ha optado por emplear los valores obtenidos del análisis preliminar aun sabiendo que no son resultados exactos.

Tabla 21 Cálculo de áreas por intervalos para el pico  $K\alpha$  de Cu del denario de Julia Domna

Energía (keV)	7.72	7.73	7.75	7.76	7.78	7.79	7.81	7.82	7.84	7.85	7.87	7.88	7.90	7.91	7.93	7.94	7.96	7.98	7.99
Cuentas	24	18	13	13	19	9	16	30	18	25	24	21	28	15	27	26	26	15	17
Área rect.	0.36	0.28	0.20	0.20	0.29	0.14	0.24	0.46	0.28	0.38	0.37	0.32	0.43	0.23	0.41	0.40	0.40	0.23	0.26
Energía (keV)	8.01	8.02	8.04	8.05	8.07	8.08	8.10	8.11	8.13	8.14	8.16	8.17	8.19	8.20	8.22	8.23	8.25	8.26	8.28
Cuentas	19	16	17	26	18	19	13	28	20	20	23	21	17	16	27	13	12	14	15
Área rect.	0.29	0.24	0.26	0.40	0.28	0.29	0.20	0.43	0.31	0.31	0.35	0.32	0.26	0.24	0.41	0.20	0.18	0.21	0.23
Energía (keV)	8.30	8.31	8.33	8.34	8.36	8.37	8.39	8.40	8.42	8.43	8.45	8.46	8.48	8.49	8.51	8.52	8.54		
Cuentas	9	16	11	16	9	12	4	16	5	10	9	7	8	15	9	6			
Área rect.	0.14	0.24	0.17	0.24	0.14	0.18	0.06	0.24	0.08	0.15	0.14	0.11	0.12	0.23	0.14	0.09			

Tabla 22 Cálculo de áreas por intervalos para el pico  $K\beta$  de Cu del denario de Julia Domna

Energía (keV)	8.57	8.59	8.60	8.62	8.63	8.65	8.66	8.68	8.69	8.71	8.72	8.74	8.75	8.77	8.78	8.80	8.81	8.83	8.84
Cuentas	7	5	7	5	4	7	4	3	7	7	3	4	3	3	3	5	4	4	4
Área rect.	0.11	0.08	0.11	0.08	0.06	0.11	0.06	0.05	0.11	0.11	0.05	0.06	0.05	0.05	0.05	0.08	0.06	0.06	0.06
Energía (keV)	8.86	8.88	8.89	8.91	8.92	8.94	8.95	8.97	8.98	9.00	9.01	9.03	9.04	9.06	9.07	9.09	9.10	9.12	9.13
Cuentas	1	2	7	4	3	5	2	9	2	2	0	3	3	5	4	3	6	4	6
Área rect.	0.02	0.03	0.11	0.06	0.05	0.08	0.03	0.14	0.03	0.03	0.00	0.05	0.05	0.08	0.06	0.05	0.09	0.06	0.09
Energía (keV)	9.15	9.17	9.18	9.20															
Cuentas	2	2	5																
Área rect.	0.03	0.03	0.08																

Tabla 23 Cálculo de áreas por intervalos para el pico L de Ag del denario de Julia Domna

Energía (keV)	2.42	2.44	2.45	2.47	2.48	2.50	2.51	2.53	2.54	2.56	2.57	2.59	2.60	2.62	2.63	2.65	2.67	2.68	2.70
Cuentas	1	1	1	0	0	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	0	2	0	2
Área rect.	0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.03
Energía (keV)	2.71	2.73	2.74	2.76	2.77	2.79	2.80	2.82	2.83	2.85	2.86	2.88	2.89	2.91	2.92	2.94	2.95	2.97	2.99
Cuentas	1	0	3	1	0	3	1	2	1	2	0	1	1	2	1	0	2	3	3
Área rect.	0.02	0.00	0.05	0.02	0.00	0.05	0.02	0.03	0.02	0.03	0.00	0.02	0.02	0.03	0.02	0.00	0.03	0.05	0.05
Energía (keV)	3.00	3.02	3.03	3.05	3.06	3.08	3.09	3.11	3.12	3.14	3.15	3.17	3.18	3.20	3.21	3.23	3.24	3.26	3.28
Cuentas	3	2	2	2	2	1	0	1	2	2	0	0	1	1	2	0	0	1	1
Área rect.	0.05	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02	0.00	0.02	0.03	0.03	0.00	0.00	0.02	0.02	0.03	0.00	0.00	0.02	0.02
Energía (keV)	3.29	3.31	3.32	3.34	3.35	3.37	3.38	3.40	3.41	3.43	3.44	3.46	3.47	3.49	3.50	3.52	3.53	3.55	3.57
Cuentas	0	2	2	0	0	0	2	1	1	0	0	0	0	1	1	0	1	1	0
Área rect.	0.00	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.03	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.02	0.02	0.00
Energía (keV)	3.58	3.60	3.61	3.63	3.64	3.66	3.67	3.69	3.70	3.72	3.73	3.75	3.76	3.78	3.79	3.81	3.82	3.84	3.86
Cuentas	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Área rect.	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Energía (keV)	3.87	3.89	3.90	3.92	3.93	3.95													
Cuentas	0	0	0	1	0														
Área rect.	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00														

Tabla 24 Comparación de relaciones de área entre los resultados experimentales y los que proporciona el modelo. Como se puede observar, el error obtenido es inadmisibles.

Pico	K $\alpha$ de Cu	K $\beta$ de Cu	L $\alpha$ y L $\beta$ de Ag
Área Espectro Experimental	54905	8050	17153
Área Espectro Modelo	13.73	2.58	1.1442
Relación con K- $\alpha$ de Cu Experimental	1	0.14662	0.31241
Relación con K- $\alpha$ de Cu Modelo	1	0.18776	0.08333
Error Relativo	-	28.06%	73.33%

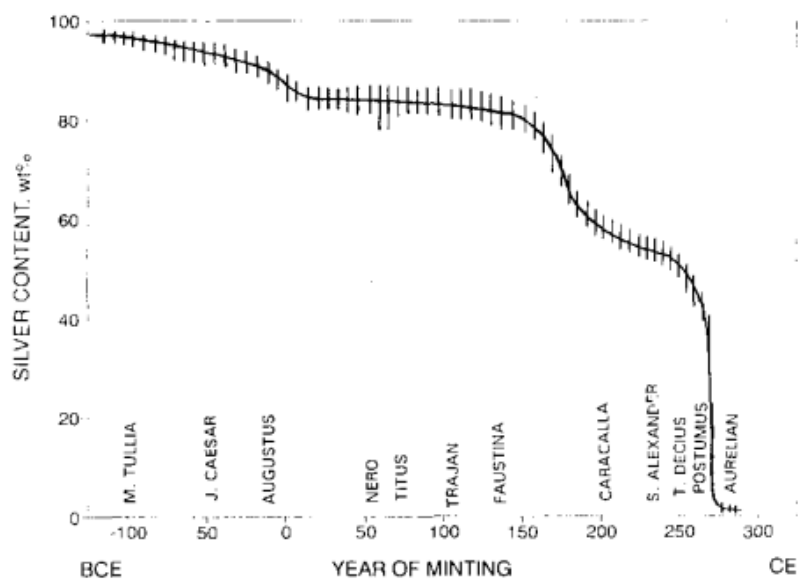
### VIII. Ubicación temporal de monedas romanas y conclusiones

Debido a la dificultad a la hora de definir las monedas romanas dentro del modelo, no ha conseguido hallar su composición; por lo que se emplearán los resultados obtenidos del análisis de sus espectros obtenidos mediante mediciones experimentales, que se resumen en la tabla siguiente.

*Tabla 25 Resumen de composición de los distintos denarios obtenida por el análisis del espectro experimental*

Moneda	Contenido Ag	Contenido Cu	Contenido Ni
1	0.924	0.076	-
2	0.648	0.3094	0.0426
3	0.3997	0.5779	0.0225
4	0.2127	0.7807	0.0065

La tendencia histórica es que las monedas mantuvieran el valor que representaban, pero empleando cada vez materiales más baratos, alejándose de la idea original de que su valor correspondía al valor de los metales que la componían. Por tanto, se puede comprobar que el orden en el que se han presentado corresponde al orden histórico según el cual se emplearon por los ciudadanos romanos. La imagen siguiente muestra la tendencia a emplear un menor contenido en plata [45].

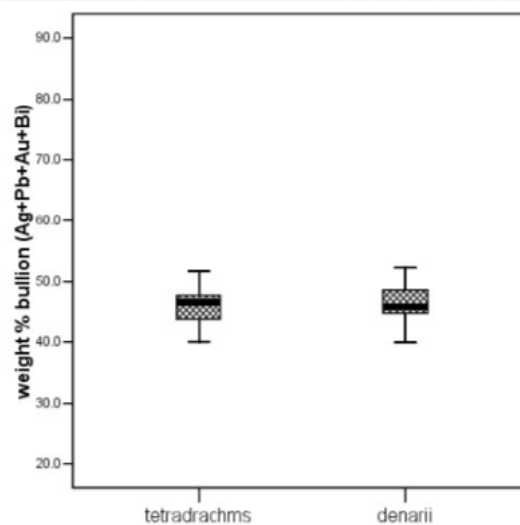


*Fig. 49 Evolución histórica del contenido en plata en los denarios romanos*

Además de la devaluación del valor intrínseco de las monedas, el paso del tiempo produjo que se perdiera el control de la calidad de las monedas. Así, la dispersión del contenido de plata en monedas republicanas es mucho menor que en monedas acuñadas durante el gobierno de Aureliano.

La primera moneda muestra el perfil de la esposa de un senador romano, por lo que sería conveniente consultar la composición de los denarios durante la República. Según [45] a finales de la República y durante el comienzo del Imperio, el contenido en plata del denario se encontraba en sobre el 95% - 98% en peso, por lo que se puede aceptar que la moneda se acuñó durante ese periodo.

La comparación del contenido en plata del segundo denario con la imagen anterior sugiere que data de un periodo en torno a Caracalla como Emperador del Imperio. Los resultados que muestra la bibliografía para esta época son contradictorios. Según [46], para la reforma de Caracalla en 215 d.C. los denarios no contenían más de un 50% de plata, lo que implicaría que la moneda es anterior. [3] muestra la dispersión del contenido en plata de denarios que se produjeron durante los gobiernos de Septimio Severo (193-197) y su esposa Julia Domna (193-211) empleando diagramas de cajas y bigotes. Según esta fuente, sólo una minoría llegaban al 55% de contenido en peso, lo cual supondría que la moneda es anterior incluso.



*Fig. 50 Diagrama de cajas y bigotes para representar la variabilidad del contenido en plata durante la época de Septimio Severo y Julia Domna*

Según la información con la que cuenta el coleccionista, la moneda procede de la época de Septimio Severo. El principal motivo que justifica la discrepancia es la característica superficialidad del Análisis de Fluorescencia de Rayos X, frente a los resultados anteriores que proceden del estudio del interior de la moneda, empleando un análisis destructivo. [8] establece la necesidad de emplear otras técnicas de análisis de composición para evitar el enriquecimiento superficial de plata que, a veces, se practicaba intencionadamente durante este período, con el fin de mejorar el aspecto de monedas con bajo contenido real de este elemento.

La tercera moneda también data de la época de Septimio Severo según la información del coleccionista. En este caso, presenta un contenido en plata algo bajo, aunque aceptable respecto al diagrama anterior. Dado que un contenido menor en plata significaría que el denario pertenece a una época posterior, podemos inferir que no posee un enriquecimiento superficial de plata que falsee el resultado del análisis.

El coleccionista data el 4º denario en la época de Julia Domna. El porcentaje en peso de plata es significativamente menor a lo indicado por la bibliografía, tanto es así que su contenido haría pensar que procede de la época de Póstumo.

El presente proyecto ha conseguido producir un modelo, empleando MCNP5, que permite producir resultados verosímiles para una muestra certificada de una aleación de cuproníquel. El método de comparación de cocientes de área ha permitido asegurar que el error entre el modelo y la realidad es suficientemente pequeño para que se considere válido.

*Tabla 26 Resumen comparación de resultados del modelo original con el espectro experimental de la muestra de cuproníquel con el objetivo de validarlo*

Pico	K $\alpha$ de Ni	K $\beta$ de Cu
Relación con K $\alpha$ de Cu experimental	0.43498	0.11110
Relación con K $\alpha$ de Cu modelo	0.44550	0.11797
Error relativo	2.42%	5.83%

Además, se consigue obtener la dosis efectiva que el alumno recibe durante las mediciones. Esto permite comprobar que no existe peligro alguno para su salud, al comparar con el valor que, según la legislación, no se debe superar de dosis efectiva acumulada en un año.

*Tabla 27 Resumen comparación de resultados de la dosis calculada mediante el modelo DSS con el límite de dosis efectiva que aparece en la legislación*

Dosis efectiva recibida en 5 mediciones de 2 minutos cada una (mSv)	Límite de dosis efectiva acumulada en un año (mSv/año)
3.4165E-11	50



Posteriormente se ha tratado de construir un modelo que simulara el comportamiento de la cuarta moneda. Aún con un alto porcentaje de plata, el modelo no conseguía que el área bajo el pico de plata fuera comparable al experimental. Al tratarse de la moneda que en la realidad cuenta con el menor contenido de plata, se puede afirmar que ninguna otra moneda podrá simularse con éxito. Las dificultades a la hora de definir la superficie de las monedas romanas y la posibilidad de que se comporten como un medio no homogéneo han impedido la utilización del modelo en MCNP5 para hallar su composición.

*Tabla 28 Resumen de la comparación de resultados entre el espectro experimental y el modelo.*

	Modelo	Real
Contenido en plata	80%	21.27%
Relación del pico $L\alpha$ y $L\beta$ de Ag con el pico $K\alpha$ de Cu	0.08333	0.31241
Error relativo	73.33%	

Los resultados del análisis a partir del espectro experimental se han empleado para obtener valores de composición de las monedas. La superficialidad del Análisis de Fluorescencia de Rayos X ha generado discrepancias con los resultados que se encuentran en la bibliografía en monedas no homogéneas. Los 3 primeros denarios se han podido ubicar en un período histórico relativamente correcto respecto a la información con la que contaba el coleccionista, mientras que el último probablemente se tratara de una excepción debida al bajo control sobre la calidad de las monedas en una época de decadencia.

*Tabla 29 Resumen de la comparación entre la composición calculada por el análisis del espectro experimental y la composición de referencia en la bibliografía*

Moneda	Contenido en Ag experimental	Período histórico	Contenido en Ag bibliografía	Justificación discrepancias
1	0.924	República, últimos años	0.95 - 0.98	Correcta
2	0.648	Septimio Severo Emperador de Roma	$0.4 < x < 0.55$	Enriquecimiento superficial
3	0.3997	Septimio Severo Emperador de Roma	$0.4 < x < 0.55$	Correcta
4	0.2127	Julia Domna Emperatriz de Roma	$0.4 < x < 0.55$	¿Bajo control de calidad?

## Bibliografía

- [1] ENGELHARDT, J. (2006) "XRF Application in Numismatics" en *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*. Berlin: Springer.
- [2] BURNETT, A. (1980). The Numismatic Chronicle (1966-), 20 (140), 214-217. <<http://www.jstor.org/stable/42667095>> [Consulta: 15 de junio de 2016]
- [3] GLITER, H., PONTING, M. (2003), "The Silver Coinage of Septimius Severus and His Family, 193-211 AD: A Study of the Chemical Composition of the Roman and Eastern Issues" en *Galux*, núm. 16. <[http://www.academia.edu/362473/H.\\_Gitler\\_and\\_M.\\_Ponting\\_The\\_Silver\\_Coinage\\_of\\_Septimius\\_Severus\\_and\\_His\\_Family\\_193-211\\_AD\\_A\\_Study\\_of\\_the\\_Chemical\\_Composition\\_of\\_the\\_Roman\\_and\\_Eastern\\_Issues\\_Galux\\_16\\_Milan\\_2003](http://www.academia.edu/362473/H._Gitler_and_M._Ponting_The_Silver_Coinage_of_Septimius_Severus_and_His_Family_193-211_AD_A_Study_of_the_Chemical_Composition_of_the_Roman_and_Eastern_Issues_Galux_16_Milan_2003)> [Consulta: 25 de agosto de 2016]
- [4] FERREIRA, G. P., GIL, F. B (1981) "Elemental Analysis of Gold Coins by Particle Induced X-ray Emission (PIXE)" en *Archaeometry*, vol. 23, issue 2, p. 189 – 197. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1475-4754.1981.tb00305.x/abstract>> [Consulta: 17 de junio de 2016]
- [5] MOMMSEN, H., SCHMITTINGER, T (1981) "Test Analysis of Ancient Au and Ag Coins using High Energy PIXE" en *Archaeometry*, vol. 23, issue 1, p. 71 – 76. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1475-4754.1981.tb00956.x/abstract>> [Consulta: 17 de junio de 2016]
- [6] BUTCHER, K., PONTING, M. (1995) "Rome and the East: production of Roman provincial silver coinage for Caesarea in Cappadocia under Vespasian, AD 69 – 79" en *Oxford Journal of Archaeology*, vol. 14, issue 1, p. 17 -36.
- [7] BUTCHER, K., PONTING, M. (2005) "Analysis of Roman Silver coins, Augustus to the reform of Trajan (27 BC – 100 AD) <[http://archaeologydataservice.ac.uk/archives/view/coins\\_lt\\_2005/](http://archaeologydataservice.ac.uk/archives/view/coins_lt_2005/)> [Consulta: 17 de junio de 2016]
- [8] BUTCHER, K., PONTING, M. (2005) "The Roman Denarius under the Julio-Claudian Emperors: Mints, Metallurgy and Technology" en *Oxford Journal of Archaeology*, vol. 24, issue 2, p. 163 – 197. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1468-0092.2005.00231.x/epdf>> [Consulta: 25 de agosto de 2016]
- [9] BUTCHER, K. PONTING, M. (2009) "The Silver Coinage of Roman Syria under the Julio-Claudian Emperors" en *Levant*, núm. 41, p. 59 – 78.
- [10] BUTCHER, K. PONTING, M. (2012) "The Denarius in the First century" en *Proceedings of the XIV International Numismatic Congress*, N. Holmes (ed.), p. 557 – 568.
- [11] BUTCHER, K. PONTING, M. (2014) "The Metallurgy of Roman Silver Coinage: from the Reforms of Nero to the Reform of Trajan". CUP.

- [12] HINDS, M. W., BEVAN, G., BURGESS, R. W. (2014) "The non-destructive determination of Pt in ancient Roman gold coins by XRF spectrometry" en *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, Vol. 29. <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/ja/c4ja00170b>> [Consulta: 17 de junio de 2016]
- [13] RÓDENAS DIAGO, J. (2003) "Reacciones nucleares" en *Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva*. Valencia: Inter Técnica Ediciones.
- [14] SEGRÈ, E. (1972) "Paso de las Radiaciones a través de la Materia" en *Núcleos y Partículas*. Barcelona: Reverté.
- [15] THOMSEN, V., MERCURO, D., SCHATZLEIN, D. (2005) "Tutorial: Attenuation of X-Rays by Matter" en *Spectroscopy*, vol. 20, issue 9. <<http://www.spectroscopyonline.com/tutorial-attenuation-x-rays-matter?id=&pageID=1&sk=&date>> [Consulta: 20 de junio de 2016]
- [16] RÓDENAS DIAGO, J. (2003) "Magnitudes y Unidades Dosimétricas" en *Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva*. Valencia: Inter Técnica Ediciones.
- [17] España. Real Decreto 783/2001, de 6 de julio, de Reglamento sobre protección sanitaria contra radiaciones ionizantes. BOE, 26 de julio de 2001, núm. 178.
- [18] RÓDENAS DIAGO, J. (2003) "Magnitudes y Unidades Dosimétricas" en *Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva*. Valencia: Inter Técnica Ediciones.
- [19] CARRASCO, R. C. *et al.* (2000) "Métodos Monte Carlo aplicados a la física médica" en *Métodos de Simulación Monte Carlo y sus aplicaciones*. Valencia: Editorial UPV.
- [20] *Wikipedia: efecto Compton*. <[https://es.wikipedia.org/wiki/Efecto\\_Compton](https://es.wikipedia.org/wiki/Efecto_Compton)> [Consulta: 22 de junio de 2016].
- [21] PODGORSK, E. B. (2010) "Interactions of Photons with Matter" en *Radiation Physics for Medical Physicists*. Springer. <[http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-00875-7\\_7](http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-00875-7_7)> [Consulta: 20 de agosto de 2016]
- [22] FERNÁNDEZ DE CÓRDOBA CASTELLÁ, P., UCHUEGUÍA SCHÖLZEL, J. F. (2007) *Fundamentos de Física Cuántica para Ingeniería*. México: Limusa y Editorial UPV.
- [23] MANTLER, M. (2006) "Basic Fundamental Parameter Equations" en *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*. Berlin: Springer.
- [24] MARKOWICZ, A (2002) "X-ray Physics" en *Handbook of X-ray Spectrometry*. Basel: Marcel Dekker.
- [25] *Wikipedia: X-ray notation*. <[https://en.wikipedia.org/wiki/X-ray\\_notation](https://en.wikipedia.org/wiki/X-ray_notation)> [Consulta: 23 de junio de 2016]
- [26] *Wikipedia: Notación de Siegbahn*. <[https://es.wikipedia.org/wiki/Notaci%C3%B3n\\_de\\_Siegbahn](https://es.wikipedia.org/wiki/Notaci%C3%B3n_de_Siegbahn)> [Consulta: 23 de junio de 2016]
- [27] WHISTON, C., PRICHARD, F. E. (1987) *X-ray Methods*. Chichester: John Wiley & sons.

- [28] LIANG, S. (2013) *Quantum Tunneling and Field Electron Emission Theories*. WSPC. <<http://site.ebrary.com/lib/BibliotecaUPVes/reader.action?docID=10852268>> [Consulta: 20 de agosto de 2016]
- [29] RÓDENAS DIAGO, J. (2003) “Fuentes de radiación” en *Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva*. Valencia: Inter Técnica Ediciones.
- [30] KULENKAMPPF, H., Schmidt, L. (1953) “Die Energieverteilung im Spektrum der Röntgen-Bremsstrahlung” en *Annalen der Physik*, vol. 448, issue 6 - 7, p. 494 – 512.
- [31] ARAI, T. (2006) “Introduction” en *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*. Berlin: Springer.
- [32] RÓDENAS DIAGO, J. (2003) “Detectores de semiconductor” en *Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva*. Valencia: Inter Técnica Ediciones.
- [33] RAYCHAUDHURI, S. (2008) “Introduction to Monte Carlo simulation” en *Proceedings of the 40th Winter Simulation Conference*. <<http://dl.acm.org/citation.cfm?id=1516768>> [Consulta: 27 de junio de 2016]
- [34] X-5 MONTE CARLO TEAM (2003) “Volume 1: Overview and Theory” en *MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*. Los Álamos: Los Álamos National Laboratory.
- [35] X-5 MONTE CARLO TEAM (2003) “Volume 2: User’s Guide” en *MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*. Los Álamos: Los Álamos National Laboratory.
- [36] X-5 MONTE CARLO TEAM (2003) “Precision and Accuracy” en *MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Vol.1*. Los Álamos: Los Álamos National Laboratory.
- [37] MANTLER, M. (2000) “X-ray fluorescence spectrometry in art and archaeology” en *X-ray Spectrometry*, vol. 29, issue 1, p. 3 -17. <[http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/\(SICI\)1097-4539\(200001/02\)29:1%3C3::AID-XRS398%3E3.0.CO;2-O/full](http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/(SICI)1097-4539(200001/02)29:1%3C3::AID-XRS398%3E3.0.CO;2-O/full)> [Consulta: 3 de julio de 2016]
- [38] Trojek, T. *et al.* (2016) “Enamel Paint techniques in archaeology and their identification using XRF and micro-XRF” en *Radiation Physics and Chemistry*. Elsevier. <<http://dx.doi.org/10.1016/j.radphyschem.2016.02.014>> [Consulta: 5 de julio de 2016]
- [39] TANTRAKARN, K. *et al.* (2012) “The application of a portable X-ray fluorescence spectrometeter to the on-site analysis of glass vessel fragments from Southern Thailand” en *Archaeometry*, vol. 54, issue 3, p. 508 – 527. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1475-4754.2011.00639.x/epdf>> [Consulta: 5 de julio de 2016]
- [40] ADAN-BAYEWITZ, D., ASARO, F., GIAUQUE, R. D. (1999) “Determining pottery provenance: application of a high-precision X-ray fluorescence method and comparison with instrumental neutron activation analysis” en *Archaeometry*, vol. 41, issue 1, p. 1 – 24. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1475-4754.1999.tb00849.x/epdf>> [Consulta: 5 de julio de 2016]

- [41] BLAKELOCK, E.S. (2015) "Never judge a gold object by its surface analysis: a study of surface phenomena in a selection of gold objects from the Staffordshire hoard" en *Archaeomaterials*, vol. 21. <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/arcm.12209/epdf>> [Consulta: 5 de julio de 2016]
- [42] RENFREW, C., BAHN, P. G., GOVANTES EDWARDS, D. (2011) *Arqueología: teorías, métodos y práctica*. Torrejón de Ardoz: Akal, D.L.
- [43] SHULTIS, J. K., FAW, R. E. (2004) *An MCNP Primer*. Manhattan: Kansas State University. <<http://www.mne.k-state.edu/~jks/MCNPprmr.pdf>> [Consulta: 12 de agosto de 2016]
- [44] *National Institute of Standards and Technology. X-ray mass attenuation coefficients*. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/ComTab/air.html> [Consulta: 14 de agosto de 2016]
- [45] PENSE, A. W. (1992) "The Decline and Fall of the Roman Denarius" en *Materials Characterization*, núm. 29, p. 213 – 222. <https://www.lehigh.edu/~inarcmet/papers/pense%201992.pdf> [Consulta: 21 de agosto de 2016]
- [46] HERRERO ALBIÑANA, C. (1994) *Introducción a la numismática antigua: Grecia y Roma*. Madrid: Manuales (Universidad Complutense)