

INDICE GENERAL

Resumen	iii
Abstract	iv
1. Motivación de la investigación y síntesis	1
2. Modelo Sintético para Sólidos Moleculares (SMMS) y Espectro Sintético de Frecuencias (SFS)	12
2.1. Comentarios previos	13
2.2. Nuevo modelo:	
Modelo Sintético para Sólidos Moleculares (SMMS)	13
2.2.1. Ecuaciones básicas	14
2.2.2. Formalismo a bajas energías.	15
2.2.2.1. Funciones espectrales derivadas de las hipótesis del SFS.	16
2.2.2.1.1. Modos de Red	16
2.2.2.1.2. Modos Rotacionales	18
2.2.2.1.3. Modos Vibracionales	20
2.2.3. Unión entre regímenes	21
2.3. Algunas Aplicaciones: modificaciones en el código NJOY	22
2.3.1. Algoritmo del SMMS en NJOY	23
2.3.2. SCT o no SCT	32
2.3.3. Análisis de los términos componentes de la sección eficaz a partir del SMMS	34
2.4. Sensibilidad de NJOY	38
2.4.1 Espectro Debye convolucionado	38
2.4.2 Espectro de [Mattes (2005)] para grafito: propuesta de espectro de frecuencias de mayor densidad	41
2.5. Conclusiones	43
3. Metano Sólido	45
3.1 Aplicación del SMMS y SFS	46
3.1.1 Funciones diferenciales	49
3.1.1.1. $S(\alpha, \beta)$	50
3.1.1.2. Núcleos de transferencia	51
3.2 Generación de bibliotecas para MCNP	52
3.3. Conclusiones	54
4. Hielo liviano	55
4.1. Primera aproximación y preliminar para el SFS del hielo liviano y aplicación del SMMS	56
4.2. Espectro Sintético de Frecuencias (SFS) (definitivo) para el hielo liviano	60
4.3. Generación de bibliotecas para MCNP	65
4.4. Conclusiones	66

5. Clatrato (metano hidratado)	67
5.1. SFS para el metano hidratado	68
5.2. Generación de bibliotecas para MCNP	72
5.3. Conclusiones	74
6. Grafito	75
6.1. Introducción	76
6.2. Espectros de Frecuencias	77
6.3. Secciones eficaces	80
6.4. SFS para el grafito	81
6.4.2. Funciones diferenciales	84
6.4.2.1. $S(\alpha, \beta)$	84
6.4.2.2. Núcleos de transferencia:	86
6.4.3. Generación de bibliotecas para MCNP	88
6.5. “Hard Carbon”	90
6.6. Medición de la sección eficaz del grafito	93
6.6.1. Técnica de transmisión de neutrones.	93
6.6.1.1. Experimento de transmisión	95
6.6.2. Determinación de los espesores de las muestras	96
6.6.3. Análisis de impurezas de las muestras	98
6.6.4. Irradiación	99
6.7. Conclusiones	103
7. Berilio	106
7.1. Introducción	107
7.2. Espectros de Frecuencias	107
7.2.1. Secciones eficaces	110
7.2.2. Funciones diferenciales	112
7.2.2.1. $S(\alpha, \beta)$	112
7.2.2.2. Núcleos de transferencia.	116
7.2.3. Generación de bibliotecas para MCNP	117
7.3. Conclusiones	119
8. Conclusiones generales	121
APENDICE A	126
APENDICE B	145
APENDICE C	155
APENDICE D	158
Referencias	160
Agradecimientos	164
Publicaciones	165