

# Índice

<b>Motivación</b>	<b>1</b>
<b>1. Introducción teórica</b>	<b>4</b>
1.1. Fuentes de neutrones . . . . .	4
1.2. Interacción de los neutrones con la materia . . . . .	5
1.3. Absorción . . . . .	6
1.4. Dispersión de neutrones . . . . .	6
1.4.1. Definiciones básicas . . . . .	6
1.4.2. Dispersión por un núcleo fijo . . . . .	7
1.4.3. Dispersión por un sistema de núcleos . . . . .	8
1.4.4. Dispersión coherente e incoherente . . . . .	10
1.5. Dispersión de neutrones en cristales . . . . .	13
1.5.1. Factor de Debye-Waller . . . . .	14
1.5.2. Desarrollo en fonones . . . . .	14
1.5.3. Aproximación incoherente . . . . .	17
1.5.4. Aproximación gaussiana . . . . .	17
1.5.5. Aproximación de tiempos cortos de colisión . . . . .	18
1.6. Procesos de moderación y termalización . . . . .	18
<b>2. Herramientas de cálculo</b>	<b>20</b>
2.1. Monte Carlo N-Particle Transport Code: MCNP . . . . .	20
2.2. Sistema de procesamiento de datos nucleares NJOY . . . . .	21
2.3. Programa de cálculo de secciones eficaces incoherentes: CASET . . . . .	23
<b>3. Materiales estudiados</b>	<b>25</b>
3.1. Características químicas . . . . .	26
3.1.1. Estructura molecular . . . . .	26
3.1.2. Estructura de los sólidos hidrogenados . . . . .	27
3.1.3. Resistencia a la radiación . . . . .	28

<b>4. Espectros de frecuencias</b>	<b>30</b>
4.1. Metano . . . . .	32
4.2. Benceno . . . . .	32
4.3. Tolueno . . . . .	33
4.4. Mesitileno . . . . .	34
4.5. Mezclas . . . . .	36
4.5.1. Mesitileno: Tolueno 3:2 en volumen . . . . .	36
<b>5. Métodos y resultados experimentales</b>	<b>38</b>
5.1. Producción y detección de neutrones . . . . .	38
5.1.1. Fuente de neutrones . . . . .	39
5.1.2. Detectores . . . . .	39
5.2. Técnicas experimentales . . . . .	40
5.2.1. Experimentos de transmisión . . . . .	40
5.2.2. Método sample in- sample out . . . . .	41
5.2.3. Técnica de tiempo de vuelo . . . . .	41
5.3. Experimentos realizados . . . . .	41
5.3.1. Mesitileno a 293 K y 89 K . . . . .	41
5.3.2. Mesitileno a 32 K, 120 K y 180 K . . . . .	44
5.3.3. Tolueno a 32 K y 120 K . . . . .	45
5.3.4. Mezcla 3:2 en volumen de mesitileno y tolueno a 32 K y 120 K . . . . .	45
5.3.5. Resultados . . . . .	46
<b>6. Producción y validación de las bibliotecas de secciones eficaces</b>	<b>47</b>
6.1. Generación de bibliotecas . . . . .	47
6.2. Validación de las bibliotecas . . . . .	48
6.2.1. Hidrógeno ligado en metano . . . . .	48
6.2.2. Hidrógeno ligado en benceno . . . . .	49
6.2.3. Hidrógeno ligado en tolueno . . . . .	50
6.2.4. Hidrógeno ligado en mesitileno . . . . .	52
6.2.5. Hidrógeno ligado en la mezcla 3:2 en volumen de mesitileno y tolueno . . . . .	57
6.3. Bibliotecas a 20 K . . . . .	59
6.4. Núcleos de transferencia . . . . .	62
6.5. Análisis de resultados . . . . .	62
6.6. Bibliotecas para muy bajas temperaturas . . . . .	64
6.7. Bibliotecas producidas . . . . .	65

<b>7. Características neutrónicas</b>	<b>67</b>
7.1. Espectros de neutrones . . . . .	67
7.1.1. Temperaturas efectivas . . . . .	74
7.1.2. Comparación con datos experimentales . . . . .	75
<b>8. Conclusiones</b>	<b>78</b>
<b>Apéndices</b>	
<b>A. Funciones intermedias de scattering de sistemas simples</b>	<b>80</b>
A.1. Dispersión por un único átomo libre . . . . .	80
A.2. Dispersión por un gas de partículas libres . . . . .	81
A.3. Dispersión por un cristal . . . . .	81
<b>B. Módulos que integran el sistema de procesamiento de datos nucleares NJOY</b>	<b>83</b>
<b>C. Fuentes frías de neutrones alrededor del mundo</b>	<b>85</b>
<b>D. Lista de programas para el procesamiento de datos experimentales</b>	<b>87</b>
<b>E. Propiedades físicas de los materiales estudiados</b>	<b>88</b>
<b>Referencias</b>	<b>90</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>94</b>
<b>Publicaciones</b>	<b>96</b>