

# Contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>8</b>
1.1	Motivación y estudios previos . . . . .	8
1.2	Organización de la Tesis . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Fundamentos físicos de las diferentes espectroscopias utilizadas</b>	<b>14</b>
2.1	Espectroscopia de Resonancia Paramagnética Electrónica . . . . .	15
2.1.1	Hamiltoniano de spin . . . . .	15
2.1.2	Resonancia Paramagnética Electrónica . . . . .	17
2.2	Espectroscopía Mössbauer . . . . .	18
2.3	Espectroscopía Óptica . . . . .	20
2.3.1	Espectroscopía Raman . . . . .	21
2.3.2	Espectroscopía de Absorción . . . . .	23
2.3.3	Fotoluminiscencia . . . . .	24
2.3.4	Espectroscopía Raman Resonante . . . . .	25
2.4	Equipo experimental . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Estudio del daño generado por irradiación en cristales de L-alanina</b>	<b>28</b>
3.1	Estructura cristalina de la L-alanina . . . . .	28
3.2	Preparación de las muestras . . . . .	30
3.2.1	Fabricación de monocristales de L-alanina . . . . .	30
3.2.2	Irradiación de monocristales de L-alanina . . . . .	31

3.2.3	Determinación del número de defectos	31
3.3	EPR en cristales de L-alanina irradiados	32
3.4	Espectroscopía Raman y Fotoluminiscencia en cristales de L-alanina irradiados	35
3.5	Cálculo del defecto electrónico	47
3.6	Conclusiones.	51
<b>4</b>	<b>L-alanina con impurezas paramagnéticas</b>	<b>53</b>
4.1	L-alanina con impurezas de Cu(II)	54
4.1.1	Preparación de las muestras	54
4.1.2	Espectroscopía de Resonancia Paramagnética Electrónica	54
4.1.3	Espectroscopía Raman	57
4.1.4	Transmisión Óptica	58
4.1.5	Análisis y discusión de los resultados	61
4.2	L-alanina con impurezas de Fe(III)	64
4.2.1	Preparación de las muestras	64
4.2.2	Espectrometría Mössbauer en cristales de L-alanina con impurezas de Fe(III)	66
4.2.3	EPR en cristales de L-alanina con impurezas de Fe(III)	67
4.2.4	Análisis y discusión de los resultados	72
4.2.5	RRS y PL en cristales de Lalanina con impurezas de Fe(III)	74
4.2.6	Análisis y discusión de los resultados	78
4.3	L-alanina con impurezas de Mn(II)	82
4.3.1	Preparación de las muestras	82
4.3.2	EPR de cristales de Lalanina con impurezas de MnII)	82
4.4	Cu(L-alanina) <sub>2</sub>	89
4.4.1	Estructura cristalina del complejo Cu(L-alanina) <sub>2</sub>	89
4.4.2	Resultados de espectroscopía Raman	89
4.4.3	Análisis y discusión de los resultados	92

4.5 Conclusiones . . . . .	95
<b>5 Aplicaciones: Dosimetria EPR/alanina</b>	<b>100</b>
5.1 Fabricación de los sensores . . . . .	100
5.2 Protocolo de medición . . . . .	102
5.3 Aplicaciones . . . . .	103
5.3.1 Irradiación de sangre . . . . .	103
5.3.2 Irradiación en Reactor RA6I . . . . .	105
5.4 Conclusiones . . . . .	106
<b>6 Conclusiones Generales</b>	<b>108</b>
<b>A Fabricación de una muestra patrón para determinar el número de spins</b>	<b>114</b>
A.1 EPR . . . . .	115
A.1.1 Cálculo de los campos resonantes y de las probabilidades de transición	115
A.1.2 Resultados experimentales . . . . .	116
A.2 Medición del número de spins . . . . .	117
A.3 Comparación con una muestra standard . . . . .	118
<b>B Cálculo de la estructura electrónica</b>	<b>120</b>
B.1 Aproximación de Hartree-Fock autoconsistente . . . . .	121
B.2 Calculo de Hartree-Fock restringido y sin restringir . . . . .	122
B.3 Configuration Interaction . . . . .	123
B.4 Métodos semiempíricos . . . . .	124