

Contenidos

1	Introducción	8
1.1	Motivación y estudios previos	8
1.2	Organización de la Tesis	12
2	Fundamentos físicos de las diferentes espectroscopias utilizadas	14
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
3	Estudio del daño generado por irradiación en cristales de L-alanina	28
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
4	L-alanina con impurezas paramagnéticas	53
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) ₂	89
4.4.1	Estructura cristalina del complejo Cu(L-alanina) ₂	89
4.4.2	Resultados de espectroscopía Raman	89
4.4.3	Análisis y discusión de los resultados	92

4.5 Conclusiones	95
5 Aplicaciones: Dosimetria EPR/alanina	100
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
6 Conclusiones Generales	108
A Fabricación de una muestra patrón para determinar el número de spins	114
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 Cálculo de la estructura electrónica	120
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