



**UNSAM**  
UNIVERSIDAD  
NACIONAL DE  
SAN MARTÍN



Comisión Nacional  
de Energía Atómica

Instituto de Tecnología Nuclear Dan Beninson

Universidad Nacional del General San Martín

Comisión Nacional de Energía Atómica

Julio 2019

**Tesis de Ingeniería en Aplicaciones Nucleares**

---

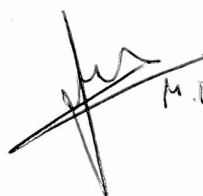
**Modelos de Crecimiento de Vaina en  
Combustibles Nucleares bajo condiciones  
normales de operación en Reactores  
PWR/PHWR/BWR**

---

**Martín A. Togneri**

**Director: Alejandro Soba**

**Co-director: Mauricio Cazado**



M. E. Cazado



MARTÍN  
A. TOGNERI

*La biblioteca destinada a la educación universal,  
es más poderosa que nuestros ejércitos.*

*José de San Martín*

## Resumen

El crecimiento inducido por irradiación en las aleaciones de circonio es un tema de gran interés en el ámbito de la ingeniería nuclear, dado que éstas constituyen parte de la estructura del núcleo de una central nuclear de potencia. Al momento de diseñar las dimensiones de cada componente del núcleo de un reactor es imprescindible considerar cuantitativamente este fenómeno para garantizar la integridad de la planta y el correcto funcionamiento de la misma.

Numerosos autores han investigado este fenómeno en las aleaciones de circonio, proponiendo modelos matemáticos para su predicción. El avance en la tecnología computacional ha dado la posibilidad de resolver modelos mas complejos, con mayor grado de detalle y exactitud. Por lo tanto, la búsqueda y actualización de modelos y programas es una tarea constante para las instituciones que diseñan, operan y/o asesoran centrales nucleares.

En este trabajo de tesis se presenta un modelo para el cálculo de crecimiento inducido por irradiación para vainas de Zircaloy para elementos combustibles de reactores nucleares de potencia. Este modelo ha sido programado en un entorno matemático y contrastado con datos experimentales para probar su desempeño. Las simulaciones han arrojado resultados satisfactorios, prediciendo de manera confiable el crecimiento por irradiación de las aleaciones de circonio para diversas condiciones de contorno probadas, características de un reactor nuclear de potencia.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Reactores BWR, PWR y PHWR . . . . .	1
1.2. Reactores argentinos . . . . .	4
1.3. DIONISIO . . . . .	6
1.4. Objetivos y organización de la tesis . . . . .	7
<b>2. El circonio y sus aleaciones</b>	<b>9</b>
2.1. El circonio . . . . .	9
2.2. Crecimiento inducido por irradiación . . . . .	11
2.3. Factor de textura y trabajado en frío . . . . .	15
<b>3. Modelos de crecimiento por irradiación</b>	<b>19</b>
3.1. Datos experimentales . . . . .	19
3.2. Antecedentes . . . . .	22
3.3. Modelos empíricos . . . . .	24
3.4. Modelos Teóricos . . . . .	26
<b>4. Resultados y discusiones</b>	<b>35</b>
4.1. Programación del modelo . . . . .	35
4.2. Simulación para aleaciones trabajadas en frío . . . . .	38
4.3. Simulación para aleaciones recocidas . . . . .	42
<b>5. Conclusiones</b>	<b>49</b>
<b>Referencias</b>	<b>51</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>55</b>



# Capítulo 1

## Introducción

Una central nuclear de potencia es una instalación industrial diseñada para obtener energía eléctrica a partir de la fisión en cadena de un combustible nuclear fósil, siendo el  $^{235}\text{U}$  uno de los isótopos más empleados. A lo largo de los años se han desarrollado diversos conceptos de centrales, con un propósito común: calentar un fluido para la generación de vapor, y con éste mover las aspas de una turbina, la cual se acopla a un generador que transforma la energía mecánica de la turbina en energía eléctrica. Sin ir más lejos, una central nuclear es similar a una central termoeléctrica, con la salvedad de la fuente de calor: en vez de utilizar un combustible fósil, utiliza un combustible nuclear.

Desde los inicios de la era nuclear, se han estudiado exhaustivamente las disciplinas que intervienen en un reactor nuclear, tales como la física neutrónica, la termohidráulica, la seguridad nuclear, protección radiológica, el ciclo de combustible y los componentes estructurales, entre otros. En el presente trabajo se implementan códigos de simulación para tratar una problemática específica de uno de los componentes estructurales de un reactor nuclear: las vainas de los elementos combustibles. Dicha problemática es el *crecimiento de las aleaciones de circonio inducido por radiación*.

### 1.1. Reactores BWR, PWR y PHWR

Existen distintos modelos de reactores nucleares de potencia comerciales, siendo los siguientes los más comunes: Reactor de Agua en Ebullición (BWR por sus siglas en inglés *Boiling Water Reactor*), Reactor de Agua Presurizada (PWR por sus siglas en inglés *Pressurized Water Reactor*) y Reactor de Agua Pesada Presurizada

(PHWR por sus siglas en inglés *Pressurized Heavy Water Reactor*). La principal diferencia entre los reactores de agua presurizada y el de agua en ebullición está en el diseño de los sistemas de extracción de calor.

Dentro un reactor de agua en ebullición, se encuentra un único circuito cerrado de agua, la cual se convierte en vapor al entrar en contacto con la fuente caliente del ciclo térmico: el núcleo del reactor. A continuación, el vapor ingresa en las turbinas, como se observa en la figura 1.1. Seguido de la turbina, el vapor es enfriado en un condensador donde vuelve al estado líquido, y tras una bomba centrífuga ingresa al núcleo del reactor, completando el ciclo.

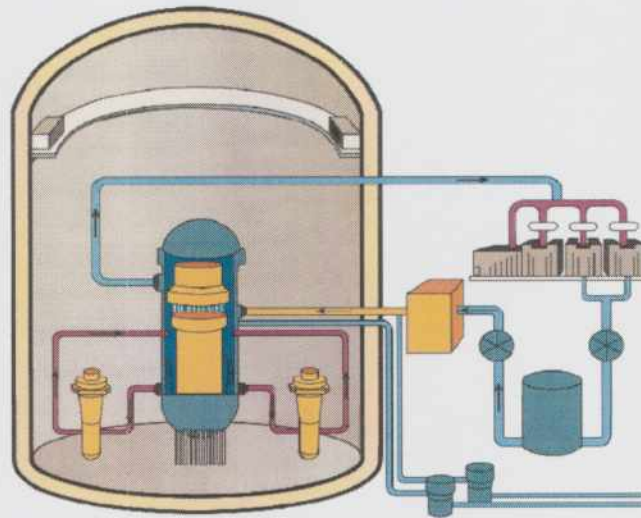


Figura 1.1: Esquema de un reactor tipo BWR [1]

Los reactores de agua presurizada cuentan con dos circuitos de agua cerrados, como se observa en la figura 1.2. En el circuito principal el agua es presurizada a aproximadamente 150 atmósferas para evitar la ebullición a las altas temperaturas de trabajo (típicamente 300 °C). Al atravesar el núcleo, el fluido aumenta su temperatura para transferirle su calor al circuito secundario a través de un generador de vapor. Con la ayuda de una bomba centrífuga el fluido regresa al núcleo para completar el ciclo de este circuito. El agua del circuito secundario se encuentra a una presión menor, suficiente para transformarse en vapor en el intercambiador de calor y hacer girar las aspas de la turbina. Al igual que el caso anterior, el fluido ingresa a un condensador para bajar su temperatura, volver al estado líquido y reingresar al generador de vapor.

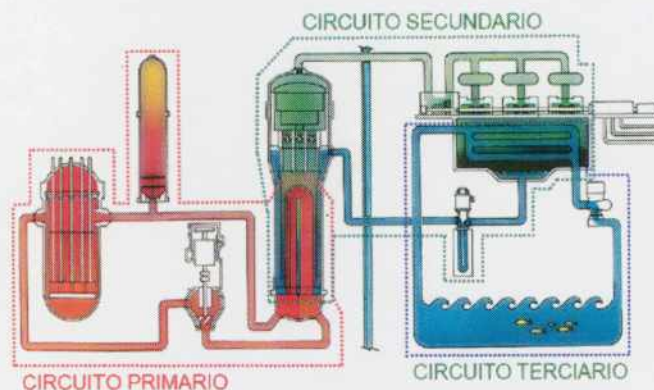


Figura 1.2: Esquema de un reactor tipo PWR/PHWR [2]

En todas las centrales nucleares, existe un último sistema de extracción de energía, ya sea un segundo o tercer circuito, dependiendo del modelo de reactor. En general, es un río o alguna fuente fría natural cercana a la instalación nuclear, aunque también puede ser una torre de enfriamiento. Esta es considerada como la fuente fría del ciclo térmico, por lo que se busca que sea la temperatura más baja posible para aumentar el rendimiento del ciclo, con el menor costo energético posible.

Entre los reactores PWR y PHWR, la principal diferencia no se encuentra en el diseño de circuitos de refrigeración, sino en el moderador/refrigerante del circuito primario, y el grado de enriquecimiento del uranio. Estos últimos utilizan agua pesada o agua deuterada ( $D_2O$ ), modificando las propiedades neutrónicas del núcleo.

La seguridad nuclear es un factor de gran importancia a la hora de diseñar estos diversos modelos de reactores. En particular, en caso de accidente con una posible fuga en un reactor de agua presurizada, el material radioactivo es confinado en el circuito primario, sin entrar en contacto con las turbinas, las cuales requerirían un gran esfuerzo y un alto costo de mantenimiento ante una situación de accidente. La principal desventaja de este modelo es el costo de incluir un segundo circuito de refrigeración, considerando los materiales y la construcción de un circuito primario que soporte las altas presiones de operación. Un reactor de agua en ebullición ahorra costos de construcción y aumenta la eficiencia térmica, aunque ante un incidente o escape de material radioactivo las consecuencias son mayores, incrementando las posibilidades de fuga de productos de fisión hacia el ambiente.

Las diferencias entre el agua pesada ( $H_2O$ ) y el agua pesada ( $D_2O$ ) se encuentran en las propiedades nucleares del núcleo. Específicamente, la sección eficaz de captura

macroscópica para neutrones térmicos es menor en agua pesada que en agua liviana. Debido a esta condición, se puede utilizar combustibles nucleares de dióxido de uranio natural, evitando el proceso de enriquecimiento. Por otro lado, se consideran reactores más seguros en cuanto a términos de salvaguardia nuclear.

## 1.2. Reactores argentinos

Actualmente, en Argentina, existen tres reactores nucleares de potencia en operación. Dos de ellos se encuentran en la ciudad de Lima, partido de Zárate, Buenos Aires, llamados “Central Nuclear Presidente Juan Domingo Perón”, puesta en marcha en 1974, conocida como Atucha I en memoria José Atucha quién compró las tierras en 1867 y “Central Nuclear Presidente Dr. Néstor Carlos Kirchner” conocida como Atucha II, puesta en marcha en junio de 2014. Por último, en la localidad de Río Tercero, provincia de Córdoba, se encuentra la central nuclear Embalse, la cual entró en servicio en enero de 1984. Las tres centrales son del tipo PWHR, siendo Atucha I y Atucha II dos prototipos argentinos de diseño alemán, en cambio Embalse corresponde a un modelo CANDU (*CANada Deuterium Uranium* por sus siglas en inglés).

Las principales diferencias entre nuestras centrales se encuentran en la disposición geométrica del núcleo del reactor y en el circuito primario de refrigeración. En el caso de las Atuchas, el núcleo se ubica dentro de un recipiente de presión cilíndrico dispuesto verticalmente, como puede observarse en la figura 1.3(a), donde se encuentra el agua pesada que cumple el rol tanto de refrigerante como de moderador. Los elementos combustibles tienen unos 12 metros de longitud, con 6 metros de zona activa.

Para el caso de Embalse, el núcleo se encuentra dentro de una calandria, que es un recipiente metálico dispuesto horizontalmente, como se observa en la figura 1.3(b). Si bien el moderador y el refrigerante son agua pesada, éstos no se cruzan. Dentro de la calandria se encuentra el moderador a 80 °C y presión atmosférica, y también se encuentran los 380 tubos de presión, los cuales contienen el refrigerante a 100 atmósferas y 300 °C promedio. Dentro de estos tubos de presión, hechos de una aleación de circonio-niobio (Zr-2,5%Nb), se alojan los elementos combustibles de 0,5 metros de longitud.

Tanto para el caso de Atucha como Embalse, los elementos combustibles están formados por un arreglo 37 de vainas cilíndricas de Zircaloy-4, con pastillas de dióxido de uranio ( $\text{UO}_2$ ) en su interior de 1 cm de diámetro por 1 cm de altura. El enriquecimiento de Atucha I es de 0.8% en peso de  $^{235}\text{U}$ , a diferencia de Atucha II y Embalse, que utilizan la relación isotópica natural de 0.711%.

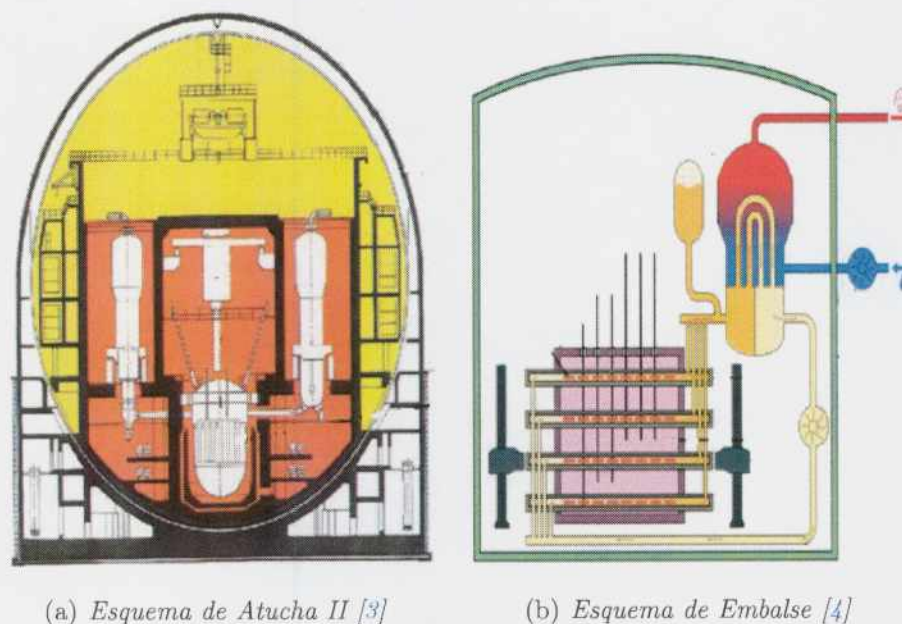


Figura 1.3: Centrales tipo PHWR

Si bien las aleaciones de circonio son las más utilizadas como material estructural en los reactores nucleares, por sus buenas propiedades nucleares y mecánicas, uno de sus mayores inconvenientes es el alargamiento que presenta este metal al ser sometido a un campo de radiación neutrónica. El mecanismo de este proceso se detalla en el siguiente capítulo. Su crecimiento es suficiente para ser tenido en cuenta en el diseño del núcleo, ya que puede presentar problemas de estancamiento, o fracturas. En agosto de 1989 se realizó una medición de un tubo de presión de Embalse, luego de 1570 días de operación a plena potencia (dpp) y el resultado extrapolado a 30 años de operación (vida útil típica de una central nuclear) reveló un crecimiento de 107 milímetros. Es por esto que es importante contar con un código de simulación que prediga el crecimiento, dependiendo de las condiciones de operación de un determinado reactor.

### 1.3. DIONISIO

La línea de trabajo en la cual se enmarca esta tesis tiene como objetivo el modelado del crecimiento por irradiación que pueda llegar a sufrir un elemento estructural basado en alguna aleación de circonio. En este sentido, el grupo de Códigos y Modelos de la Gerencia Ciclo del Combustibles Nucleares viene trabajando desde 2004 en el desarrollo de un programa de cálculo numérico llamado DIONISIO.

DIONISIO es un código multidimensional que está constituido por un conjunto de modelos con el objetivo de simular el comportamiento de combustibles nucleares bajo irradiación dentro de un reactor de potencia. DIONISIO simula la mayor parte de los fenómenos físicos y químicos que ocurren en una barra combustible durante su quemado. Entre éstos se encuentran la distribución de temperatura, dilatación térmica, deformaciones elástica y plástica, fluencia, crecimiento por irradiación, interacción mecánica entre la pastilla y la vaina, liberación de gases de fisión, hinchamiento y densificación. En la versión en 2D del código, se supone simetría axial y el dominio r-Z (Ver Figura 1.4) se discretiza utilizando elementos finitos. La estructura del código es modular y comprende más de 40 modelos interconectados [5, 6, 7].

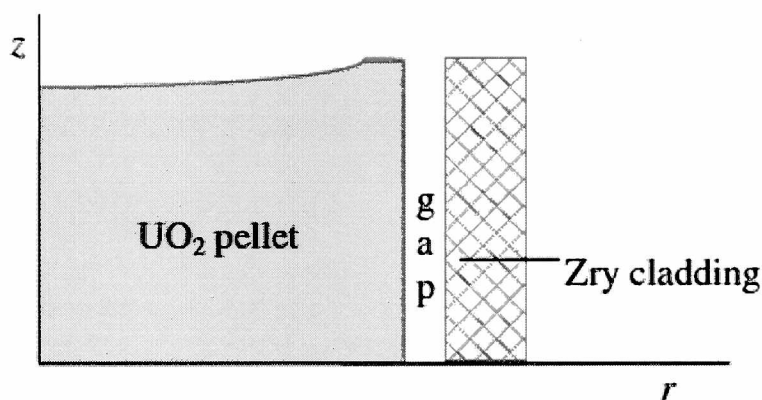


Figura 1.4: Sistema pastilla-gap-vaina analizado en DIONISIO

Para el cálculo del comportamiento de una barra combustible, se involucran los materiales de interés en el sistema. Estos materiales son: el combustible (UO<sub>2</sub> o combustible mixto (U,Pu)<sub>2</sub>) y la vaina de Zircaloy. Los modelos y condiciones que utiliza el código se adecuan a reactores LWR (por sus siglas en inglés *Light Water Reactor*) y PHWR, que además, supone una historia de potencia que depende de los casos a simular.

Actualmente DIONISIO cuenta con una subrutina encargada de predecir el cre-

cimiento por irradiación de las vainas de los elementos combustibles de un reactor de potencia, sin embargo, es materia de continuo trabajo del grupo Códigos y Modelos la revisión y actualización de los modelos que forman parte del código, para contemplar condiciones más amplias.

Existe, asimismo, una versión del código en geometría rectangular, denominada DIONISIO-PLACA, destinada a la simulación de una placa combustible estándar para reactor de investigación. Si bien muchos de los fenómenos físicos y químicos son comunes a ambos tipos de combustibles, este trabajo se centra en el análisis de aquellos que ocurren en una barra típica de un reactor de potencia.

## **1.4. Objetivos y organización de la tesis**

El objetivo principal de este trabajo es desarrollar un modelo del crecimiento bajo irradiación de la vainas de combustibles nucleares construidas con Zircaloy. Este modelo será incluido con posterioridad en el código de combustible DIONISIO.

En el capítulo 2 de este trabajo se explican las propiedades y características del circonio y sus aleaciones, tanto mecánicas como nucleares. Se mencionan los efectos que sufren estos componentes al estar bajo irradiación en un campo neutrónico rápido, cómo actúan los mecanismos atómicos de la red cristalina y sus efectos macroscópicos.

En el capítulo 3 se discuten las consideraciones previas tenidas en cuenta al momento de elegir los modelos matemáticos que mejor representan este fenómeno de crecimiento por irradiación, y se da a conocer el modelo propuesto en este trabajo.

En el capítulo 4 se describe cómo fueron implementados los modelos seleccionados y los resultados obtenidos, comparándolos con datos experimentales.

En el capítulo 5 se resumen las conclusiones de este trabajo de tesis y se comentan las perspectivas futuras de esta línea de trabajo.

# Capítulo 2

## El circonio y sus aleaciones

En este capítulo se describe el rol que cumple el circonio y sus aleaciones en la industria nuclear; la importancia de este metal y por qué es elegido como componente estructural del núcleo de reactores nucleares de potencia refrigerados por agua. Luego, se detallan las aleaciones más utilizadas para cada componente de interés en este trabajo, y se explican las reacciones nucleares que tienen lugar al interactuar los neutrones provenientes de la fisión del uranio con la red cristalina de las vainas y de los componentes estructurales, y los defectos que esto ocasiona.

Por último, se mencionan las características más importantes de estas aleaciones, y cuáles son sus impactos en las propiedades mecánicas finales.

### 2.1. El circonio

El circonio es un metal de transición, cuyo número atómico es 40, su número másico es 91,224 y pertenece al grupo 4 de la tabla periódica de los elementos. En la naturaleza se encuentra presente en distintos minerales, siendo los más comunes el circón ( $\text{ZrSiO}_4$ ) y la circonia ( $\text{ZrO}_2$ ). Este metal posee alta dureza, ductilidad y resistencia a la corrosión. A temperatura ambiente, el circonio presenta una fase  $\alpha$ -Zr con estructura cristalina hexagonal compacta (HCP). Su temperatura de fusión es de 1854 °C [8], muy por encima de la temperatura típica de trabajo de un reactor (300 °C), aunque aproximadamente a los 860 °C cambia a una estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC)  $\beta$ -Zr. En cuanto a las propiedades nucleares, el circonio presenta una baja sección eficaz de captura neutrónica (6,4 barns para  $E_n = 1$  MeV y 0,18 barns para  $E_n = 0,025$  eV) [9, 10]. Esto es una gran ventaja para la economía

neutrónica de un reactor, ya que de esta manera, los neutrones térmicos interactúan preferentemente con el uranio para generar fisiones, y se reduce la absorción por el metal.

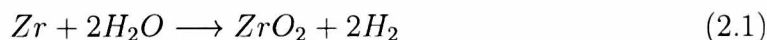
Las aleaciones más utilizadas en la industria nuclear son las siguientes: Zircaloy-2, Zircaloy-4 y Zr-2.5%Nb. En la tabla 2.1 se detalla la composición química de cada una de estas aleaciones [11].

Nombre	Zircaloy-2	Zircaloy-4	Zr-2.5%Nb
Estaño	1,20 - 1,70	1,20 - 1,70	—
Hierro	0,07 - 0,20	0,18 - 0,24	—
Cromo	0,05 - 0,15	0,07 - 0,13	—
Níquel	0,03 - 0,08	—	—
Niobio	—	—	2,40 - 2,80

Tabla 2.1: *Composición química de las aleaciones de circonio utilizadas en la industria nuclear.*

Estas aleaciones de circonio son utilizadas como material estructural en reactores nucleares. Particularmente, para vainas de elementos combustibles se utilizan las aleaciones de Zircaloy-2 o Zircaloy-4. La mayor diferencia entre estas dos aleaciones radica en una mejora tecnológica en cuanto a la resistencia a la corrosión, manteniendo las propiedades mecánicas. Para el caso de tubos guías de combustibles o tubos de presión, se elige la aleación de Zr-2.5%Nb.

Cabe destacar que la resistencia a la corrosión es un factor de suma importancia para la seguridad nuclear. A partir de los 425 K estas aleaciones, que se encuentran en contacto con el agua dentro del núcleo del reactor, sufren una reacción de oxidación (ecuación 2.1). Una vez sobrepasado el límite de solubilidad, el hidrógeno precipita en forma de hidruros de fórmula genérica  $ZrH_x$ . En la figura 2.1 se observa que pueden existir en tres fases:  $\gamma$ ,  $\delta$  y  $\epsilon$  [12]. Los hidruros generalmente exhiben muy baja ductilidad y por lo tanto bajo ciertas condiciones tienen un efecto perjudicial sobre el comportamiento mecánico de componentes realizados con estas aleaciones [13].



El crecimiento inducido por radiación es uno de los fenómenos más importantes que deben ser analizados con el fin de mantener la integridad física del reactor, ya que los materiales sufren un cambio dimensional sin aplicar esfuerzo externo. Este es un parámetro importante a tener en cuenta al momento de diseñar la estructura

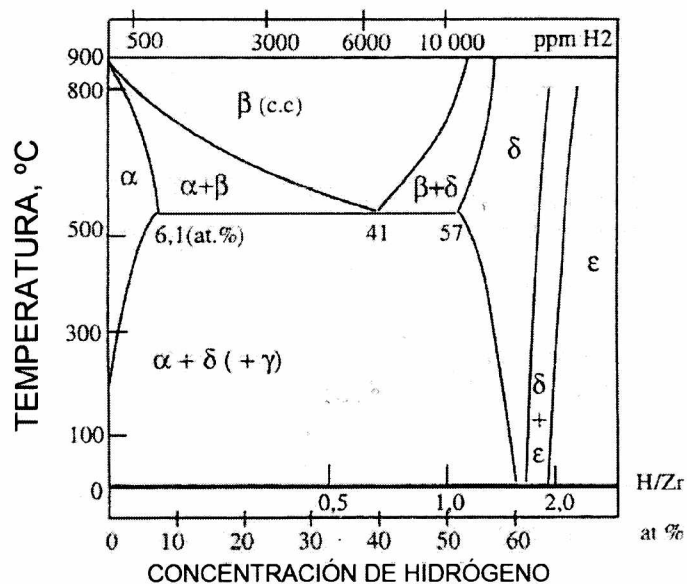


Figura 2.1: Diagrama de fases del sistema Zr-H

del núcleo del reactor. Es de gran importancia realizar un preciso cálculo de las dimensiones de los componentes del núcleo del reactor, dejando un óptimo espaciado entre las boquillas de montaje y los elementos combustibles, tubos de presión y canales de elementos combustibles. En caso de no contemplar este fenómeno mecánico, los componentes pueden presentar fallas y desviarse de su funcionamiento previsto, como por ejemplo, provocando obstrucciones en los elementos combustibles, pandeo en los canales, contacto entre el canal y el elemento combustible, contacto entre vainas, fisuras por reducción de espesor en las vainas, entre otros. Estas complicaciones mecánicas aumentan la probabilidad de problemas en el confinamiento del material radioactivo en situaciones accidentales. En las últimas décadas ha crecido el interés en el estudio de este proceso, desarrollando distintas vías de investigación, tanto experimentales, teóricas como computacionales.

## 2.2. Crecimiento inducido por irradiación

Para las temperaturas de trabajo de un reactor nuclear, el circonio y sus aleaciones presentan una distribución de sus átomos formando una estructura hexagonal compacta HCP, como se observa en la figura 2.2. En la fabricación de las vainas de combustibles nucleares, tanto para el Zircaloy-2 como para el Zircaloy-4 se determinó que las mejores propiedades mecánicas se consiguen al orientar los granos

de modo tal que el eje  $\langle c \rangle$  se encuentre paralelo a la dirección radial, como se observa en la figura 2.3

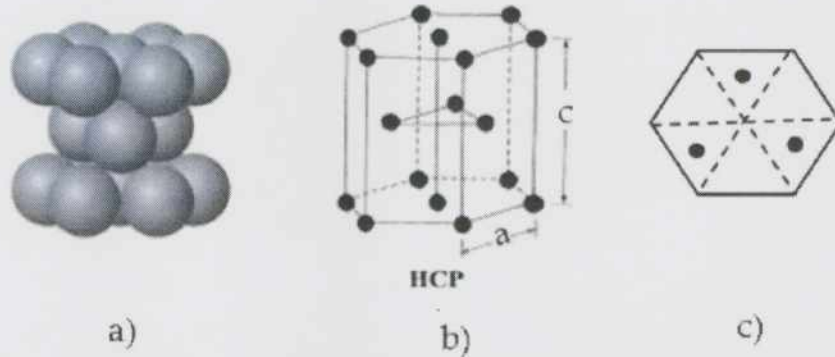


Figura 2.2: a) Representación de la distribución de los átomos en un cristal hexagonal compacto de circonio. b) Representación de la ubicación de los átomos de circonio sobre un prisma hexagonal. c) Representación de la ubicación de los átomos de circonio en la sección intermedia.

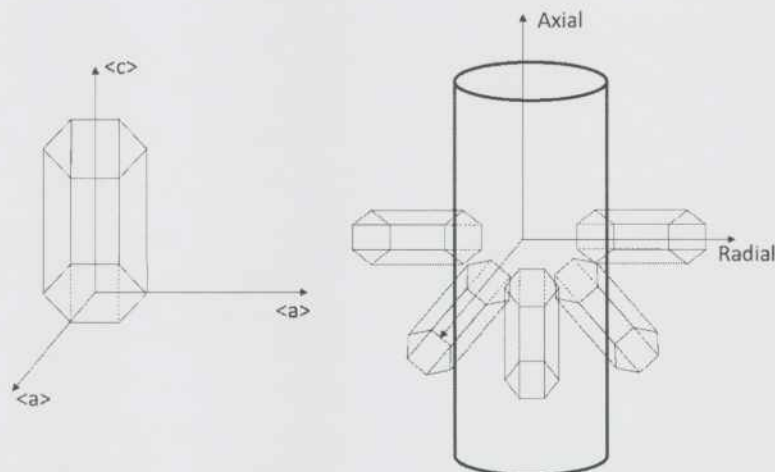


Figura 2.3: Orientación de la estructura hexagonal en una vaina de Zircaloy

Cuando estas aleaciones son bombardeadas con neutrones rápidos, se producen regiones con vacancias e intersticiales debido a las colisiones elásticas. Estos defectos tienen la posibilidad de escapar la zona de daño y migrar libremente por la red. A la vez, las vacancias e intersticiales pueden aglomerarse formando lazos de dislocaciones. En el presente trabajo sólo se considerarán lazos formados por intersticiales para simplificar el cálculo. Además de los defectos mencionados, los metales presentan dislocaciones. Para simplificar el tratamiento, en este trabajo se consideran sólo dislocaciones de borde. En la figura 2.4 se puede observar un esquema de los tipos de dislocaciones que presentan estas aleaciones. En la figura 2.5 se puede observar la imagen de una microscopía óptica de Zircaloy-4 recocido a 560 K.

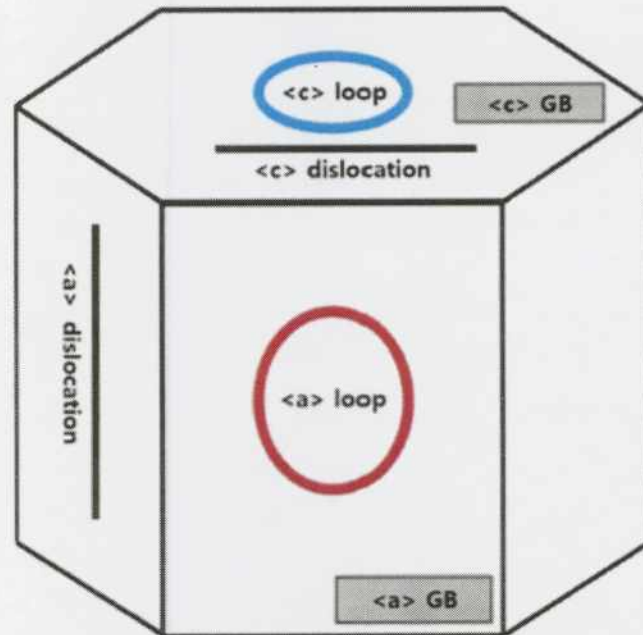


Figura 2.4: Loops de dislocaciones en estructura HCP [14]

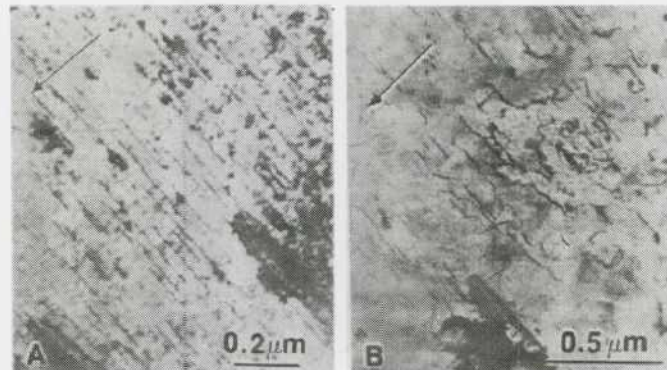


Figura 2.5: Microscopía óptica de Zircaloy-4 a 560 K. a)  $8,5 \times 10^{25} \text{ n/m}^2$  en BWR, b)  $7 \times 10^{25} \text{ n/m}^2$  en un PHWR. Vector de difracción:  $g = (0002)$  [15]

Las dislocaciones se caracterizan por sus vectores de Burgers. Los lazos de dislocaciones tipo  $\langle a \rangle$  tienen un vector de Burgers  $b = -1/3 \langle 1120 \rangle$  paralelos al eje  $\langle a \rangle$  y yacen paralelo al eje prismático (1010) (ver figura 2.6). Los lazos de dislocaciones tipo  $\langle c \rangle$  yacen en el plano basal (0001) y su vector de Burgers es  $b = 1/2 \langle 0001 \rangle$  o  $b = 1/6 \langle 20\bar{2}3 \rangle$  a lo largo del eje  $\langle c \rangle$ . Además, los lazos tipo  $\langle a \rangle$  se generan inmediatamente después de la irradiación, mientras que las tipo  $\langle c \rangle$  aparecen luego de varios dpa (por sus siglas en inglés *displacement per atom*).

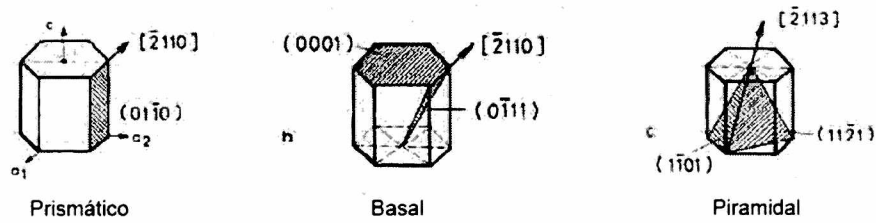


Figura 2.6: Planos de una celda unitaria HCP con sus índices de Miller [12]

Entre los parámetros que afectan al crecimiento por irradiación se encuentran la temperatura, el porcentaje de trabajado en frío previo al que fue sometido el metal, el factor de textura y el tamaño de grano. La respuesta del crecimiento por irradiación es diferente para cada eje [15]. Experimentalmente se determinó que los efectos en la estructura HCP genera expansión en la dirección  $\langle a \rangle$  y contracción en la dirección  $\langle c \rangle$ , como se observa en la figura 2.7. A su vez, en la figura 2.8 puede observarse que este cambio dimensional sin aplicar esfuerzos externos se da a volumen constante, y se registra un aumento en la superficie del plano basal mientras que la altura o las caras prismáticas decrecen [16].

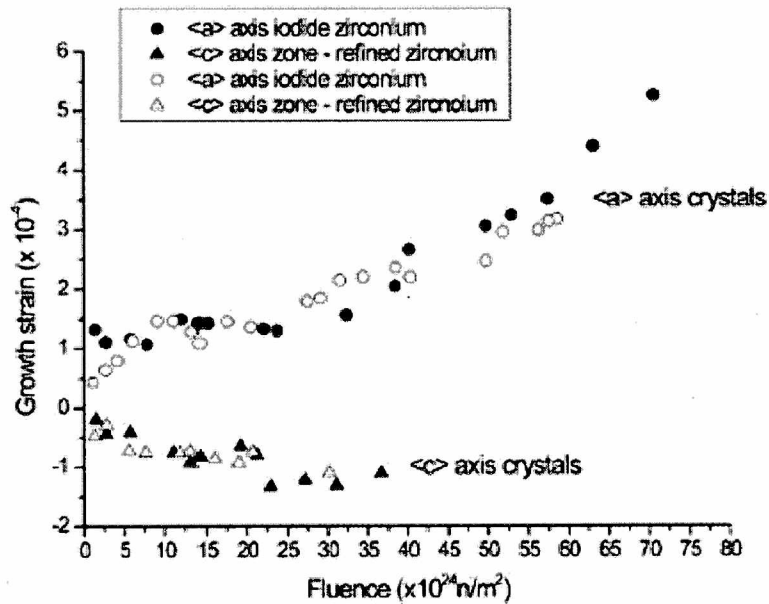


Figura 2.7: Comportamiento de los distintos ejes de la estructura HCP [15].

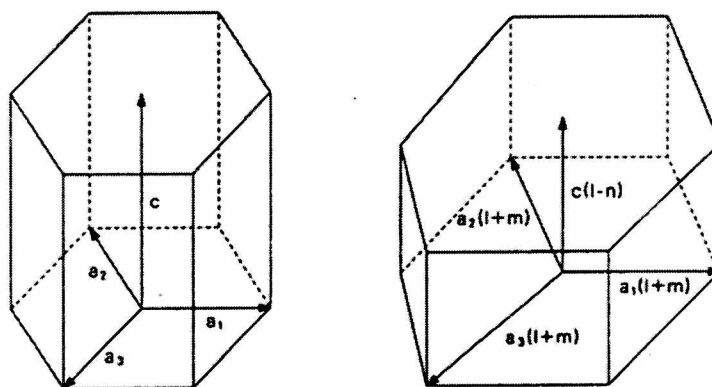


Figura 2.8: El crecimiento de células unitarias esquemáticas en un grano [16].

A escala macroscópica, debido a la irradiación, resulta en un crecimiento longitudinal y en una disminución de espesor del material, tanto para vainas como para tubos. Este fenómeno depende de las características iniciales del material, por lo tanto es preciso conocer detalladamente cada uno de estos factores.

### 2.3. Factor de textura y trabajado en frío

Debido a la anisotropía intrínseca de la estructura hexagonal, este material presenta estructura de granos con orientaciones preferenciales determinadas por diferentes procesos termomecánicos [17]. Estas orientaciones preferenciales son conocidas como textura cristalina y es la responsable de la anisotropía en las propiedades mecánicas y físicas presentes en este material.

Las vainas de Zircaloy para elementos combustibles se obtienen mediante diferentes pasos de laminación en frío. Este proceso se denomina “cold-pilger-process” y se parte de un tubo TREX (tubo de materia prima extruido y laminado en frío). Para obtener un tubo con dimensiones específicas, es necesario llegar a las dimensiones finales gradualmente mediante distintos pasos de laminación. Esta zona de deformación gradual se denomina zona de transición de deformación plástica. Los cambios en la textura cristalina son evaluados mediante figuras de polos obtenidas a partir de los anillos de difracción y los factores de Kearns.

Los factores de Kearns son los indicadores de la fracción de polos basales que presenta la estructura hexagonal del material, proyectados en las tres direcciones principales de un componente: axial, radial y tangencial en el caso de un cilindro

( $f_a$ ,  $f_r$  y  $f_t$  respectivamente). Los factores de Kearns se calculan a partir de las figuras de polos de acuerdo a la siguiente ecuación 2.2:

$$f_z = \int_{x=0}^{x=\frac{\pi}{2}} I_{(0002)}(\varphi) \sin(\varphi) \cos^2(\varphi) d\varphi \quad (2.2)$$

donde  $z$  es la dirección de interés, y  $I_{(0002)}(\varphi) \sin(\varphi)$  representa la fracción de cristales que tiene su eje  $\langle c \rangle$  a un ángulo  $\varphi$  de la dirección elegida. Por su definición, los factores de Kearns cumplen con la relación:

$$f_a + f_r + f_t = 1 \quad (2.3)$$

El método para determinar estas direcciones es a través de la técnica de difracción de rayos X. Haciendo un barrido de rayos X a distintos ángulos en una probeta de Zircaloy, y a partir de la Ley de Bragg (ecuación 2.4) se puede conocer a qué ángulo existe difracción. Cada pico de difracción pertenece a un plano particular de la estructura cristalina del elemento en cuestión. Para el caso del Zircaloy, siendo una estructura cristalina HCP, el primer pico que aparece es a  $32^\circ$ , y es el del plano prismático, cuyo índice de Miller es  $(10\bar{1}0)$ , y el segundo es el plano basal a los  $34,8^\circ$   $(0002)$ .

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (2.4)$$

Una vez caracterizados los ángulos donde se hallan los planos de interés, se procede a realizar la figura de polos. Para ello, se coloca la probeta con la cara superior mostrando la zona de interés del metal a estudiar, por ejemplo un corte transversal o sagital de la vaina, como se observa en la figura 2.9.

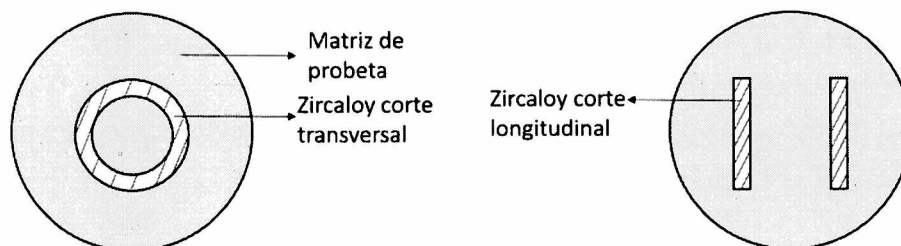


Figura 2.9: Esquema de probeta para difracción de rayos X

Se direcciona la lámpara a un ángulo respecto de la superficie de la probeta de tal manera que los rayos X incidan con el ángulo de difracción que se quiere estudiar,

y se provocan unos pequeños movimientos de la probeta, para así generar cambios menores a un grado en la superficie de la muestra.

Si en la posición en estudio, los granos se encuentran preferencialmente en la dirección esperada, se detecta un pico de difracción. A medida que la orientación de los granos se aleja de la esperada, la figura presenta una imagen más difusa. A continuación, se muestra en la figura 2.10 una figura de polos de Zircaloy del plano basal (0002), para distintos momentos del trabajado en frío, hasta llegar al espesor deseado con un 71 % de trabajado en frío.

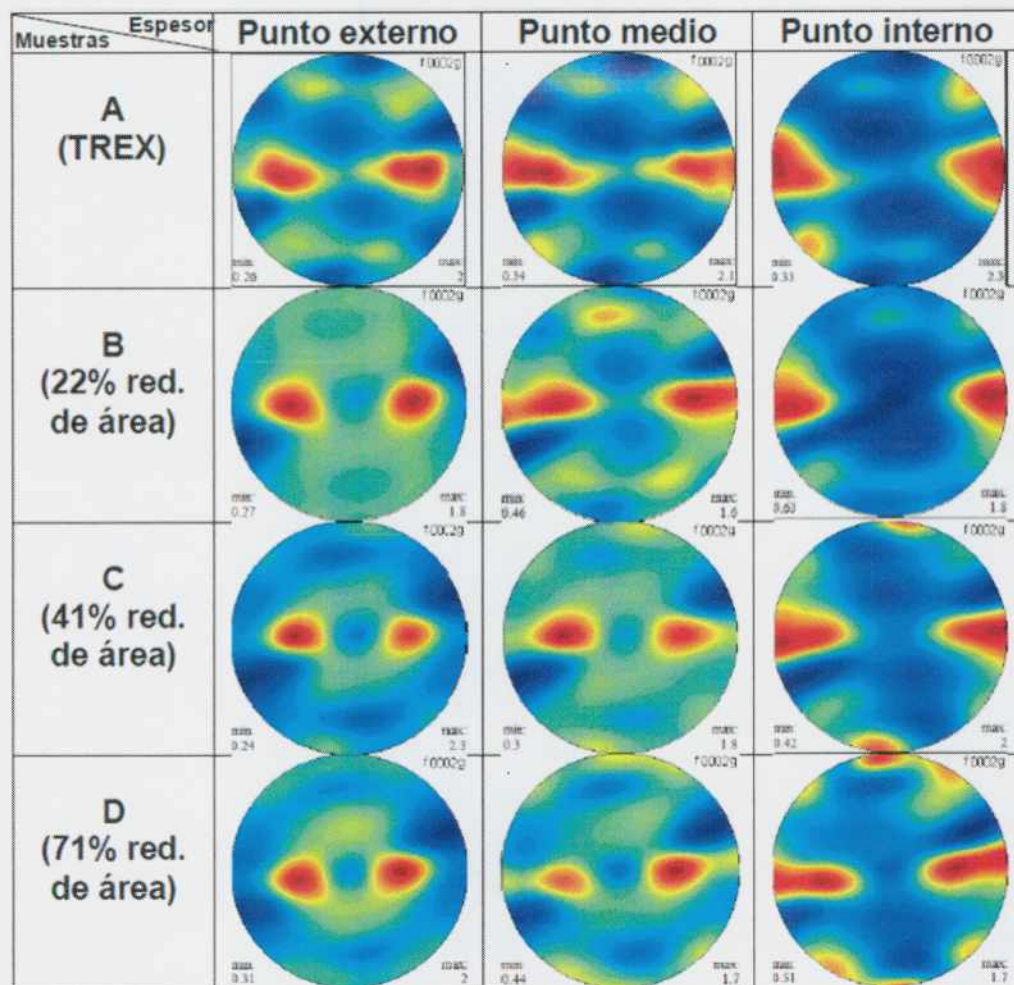


Figura 2.10: Figura de polos (polo (0002)) para tres puntos del espesor en tres muestras de Zircaloy-4 [17].

donde los colores indican la intensidad de la difracción de rayos X en el plano de interés. En este caso, el color rojo indica una mayor cantidad de granos con el plano basal orientado en la dirección radial, y conforme se va reduciendo el espesor, los granos cambian gradualmente su orientación.

## Capítulo 3

# Modelos de crecimiento por irradiación

En este capítulo se presentan los modelos que han sido seleccionados de la bibliografía [14, 15, 16, 18, 19] para el estudio del crecimiento de las aleaciones de circonio por irradiación, y los códigos mayormente utilizados en la actualidad para predecir el crecimiento máximo de estas aleaciones. A su vez, se describe el modelo propuesto en este trabajo.

### 3.1. Datos experimentales

En noviembre de 1962 se alcanzó la primera criticidad del reactor EBR-II (por sus siglas en inglés *Experimental Breeder Reactor*) en el Laboratorio Nacional de Argonne, en Chicago, Estados Unidos [20]. Este fue un reactor rápido reproductor refrigerado por sodio, el cual estuvo en servicio durante 30 años. Entre los principales objetivos de este reactor se encontraban la generación de energía eléctrica y la demostración del funcionamiento de una planta de reprocesamiento en línea, así como también ensayos de materiales y combustibles para reactores rápidos.

Fue en este reactor donde se realizaron pruebas con aleaciones de circonio para el estudio del crecimiento por irradiación. Posteriormente, algunos autores han realizado cuantificaciones de las mismas [18, 19] de las cuales se propusieron algunos modelos matemáticos para su simulación [14, 15, 16, 21, 22].

Dentro de las instalaciones para la irradiación de muestras en el núcleo del EBR-II, los especímenes de Zircaloy fueron sujetos por carcasas de aluminio con el

espacio suficiente para permitir el crecimiento, como se muestra en la figura 3.1. Dichos especímenes contaban con un control de temperatura durante la irradiación. Los cambios de longitud fueron monitoreados a través de una técnica de comparación, en la cual dos transductores diferenciales de variable lineal comparaban la longitud del zircaloy contra un espécimen testigo de una aleación de níquel (Nilo-K) con un coeficiente de expansión similar al circonio. Estas mediciones obtuvieron una incertidumbre de entre 0,5 y 1  $\mu\text{m}$ .

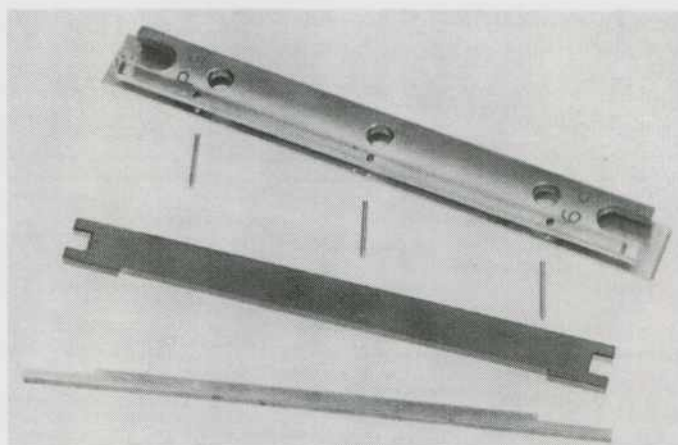


Figura 3.1: *Especímen para medición de crecimiento por irradiación en carcasa de aluminio [18].*

Los especímenes se encontraban dentro de elementos combustibles vacíos, en tres plataformas, con un total de 34 cajas de aluminio conteniendo las aleaciones de circonio. La instalación contó con posiciones de irradiación con el instrumental adecuado para calefaccionar las muestras con gas helio-neón durante la irradiación, llevados a la temperatura de trabajo con resistencias eléctricas, siendo 353 K, 553 K, 573 K, 633 K y 673 K. Estas posiciones de irradiación se ubicaron dentro del núcleo del EBR-II con una distribución como se observa en la figura 3.2, para obtener distintos flujos neutrónicos interactuando con las muestras. El flujo máximo del reactor fue de  $6 \times 10^{18} \text{ n/m}^2 \text{ s}$  y el flujo promedio de las muestras varió desde 4,1 a  $10,8 \times 10^{17} \text{ n/m}^2 \text{ s}$  ( $E_n > 1 \text{ MeV}$ ) medido mediante la técnica de análisis por activación neutrónica con hojuelas de  $^{54}\text{Fe}$ .

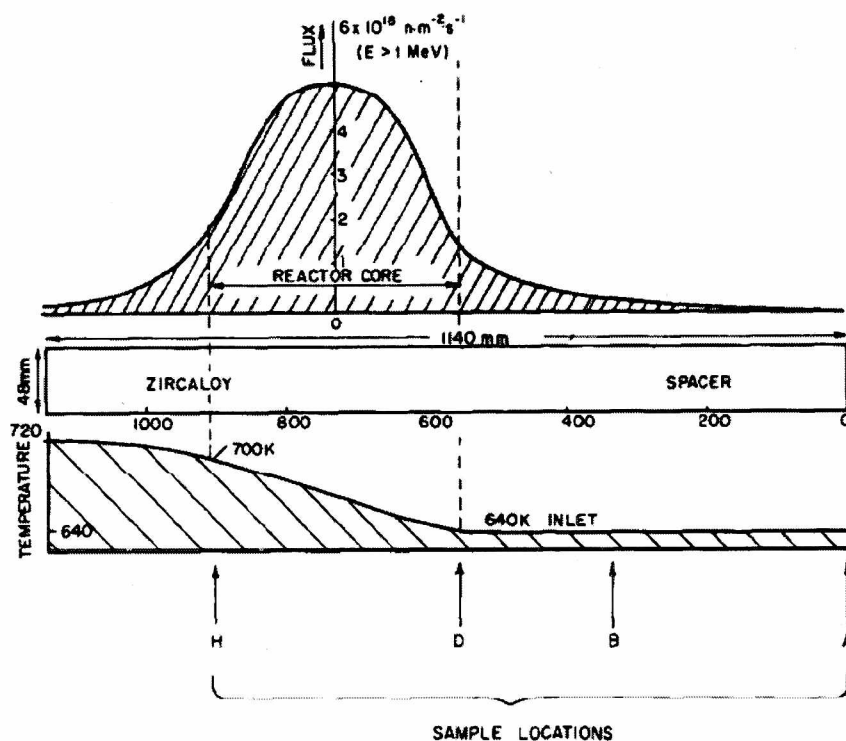


Figura 3.2: Distribución de flujo y temperatura en el núcleo del EBR-II, posición de los especímenes en función del radio del núcleo [19].

En este trabajo se utilizaron los datos experimentales obtenidos a partir del ensayo en el reactor EBR-II para comparar con los resultados de las simulaciones.

Una primera observación que puede mencionarse es que el crecimiento de las aleaciones presentan distintos comportamientos si el metal fue previamente trabajado en frío (sin importar el porcentaje) o si el material ha sido recocido (0% trabajado en frío más un tratamiento térmico) [23]. Dichos comportamientos se muestran en la figura 3.3. Como puede notarse, para metales con trabajado en frío se observan crecimientos prácticamente lineales, mientras que para metales recocidos se distinguen tres etapas; a bajas dosis se observa un comportamiento lineal, para dosis medias se halla una zona de saturación o asintótica, y para altas dosis un crecimiento acelerado, también conocido como *breakaway*.

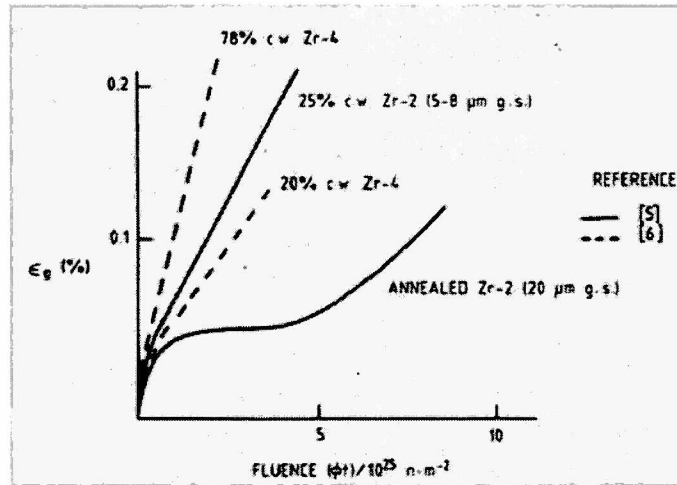


Figura 3.3: Crecimiento por irradiación de Zircaloy-2 y -4 recocido y trabajado en frío con factor de textura  $f \sim 0,1$  a 550 - 580 K [23].

### 3.2. Antecedentes

El Organismo Internacional de Energía Atómica (IAEA por su sigla en inglés *International Atomic Energy Agency*) propuso en el año 1976 un modelo empírico para la predicción del crecimiento por irradiación de aleaciones de circonio [24], caracterizado por la ecuación 3.1:

$$\frac{\Delta L}{L} = (\phi t)^n (1 - 3f) \quad (3.1)$$

donde  $\phi t$  es la fluencia de neutrones rápidos,  $n$  es un exponente de crecimiento y  $f$  es el factor de textura. Actualmente, DIONISIO tiene incorporado este modelo empírico en su código, eligiendo  $n = 1$  y  $f = 0$ .

DIONISIO posee otro modelo más completo, con componentes para la deformación longitudinal, radial y tangencial, propuesto por A. Soba *et al.* [5]:

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon_z}{dt} &= 4,942 \times 10^{-20} \frac{cm^2 s}{n \text{ dia}} \phi t & (3.2) \\ \frac{d\epsilon_r}{dt} &= -0,941 \frac{d\epsilon_z}{dt} \\ \frac{d\epsilon_t}{dt} &= -0,059 \frac{d\epsilon_z}{dt} \end{aligned}$$

donde  $\frac{d\epsilon_z}{dt}$  es la tasa de crecimiento axial,  $\frac{d\epsilon_r}{dt}$  es la tasa de crecimiento radial y  $\frac{d\epsilon_t}{dt}$  la tasa de crecimiento tangencial. Se puede destacar que el crecimiento axial es pro-

porcional al flujo neutrónico rápido para este modelo, y en las otras dos direcciones es una fracción de este crecimiento axial. También cabe destacar que para las direcciones radial y tangencial, la constante tiene un valor negativo, debido a que al ser un cambio a volumen constante, el espesor de la vaina se reduce conforme aumenta la longitud, tal como se explicó en el capítulo anterior.

La limitación de este modelo está en que no distingue entre los diversos modelos de vainas disponibles en la industria, con sus características tanto del material como de las condiciones a las que son sometidas. Sin embargo, la constante y el exponente de crecimiento se han elegido de modo tal que sea un modelo conservativo, calculando la tasa de crecimiento en exceso, como puede observarse en la figura 3.4.

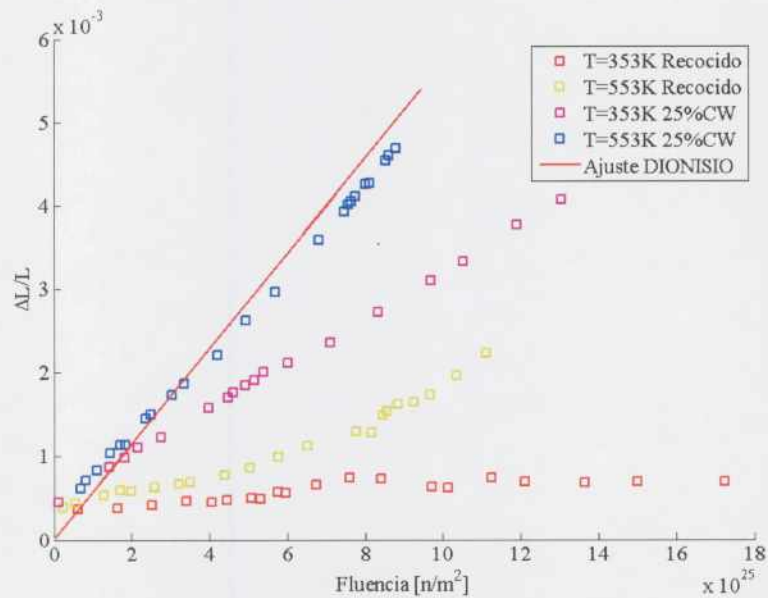


Figura 3.4: Datos experimentales de [18] y simulación de crecimiento con DIONISIO

Para la implementación de un modelo alternativo para el crecimiento por irradiación de aleaciones de circonio, se realizó una búsqueda bibliográfica en la literatura específica para el estudio y conocimiento del estado del arte de la materia. De entre todos los modelos hallados, se han elegido los más completos, se han ensayado para entender su comportamiento, y en base a ellos se ha seleccionado el más adecuado para ser incluido en DIONISIO.

### 3.3. Modelos empíricos

Los modelos empíricos de crecimiento por irradiación consisten en expresiones matemáticas, en general en función de la fluencia de neutrones rápidos, obtenidas a partir de la parametrización e interpolación de datos experimentales. Algunos modelos también incluyen otras dependencias, como la temperatura, el factor de textura o la fracción de trabajado en frío.

Entre la bibliografía disponible, se han seleccionado dos modelos empíricos, con el objetivo de estudiarlos, así como también compararlos con datos experimentales.

El primer modelo seleccionado fue el propuesto por F. Garzarolli *et al.* en el *Comité científico para propiedades de materiales para elementos combustibles de reactores de agua y métodos de mediciones*, en Viena, 1986 [24]. También se analizó el modelo incluido en la biblioteca de propiedades de materiales de reactores de agua liviana MatPro (Material Properties) del Departamento de Energía de Estados Unidos [16].

Matpro ha propuesto un modelo actualizado, en su cuarta edición del año 1993. Este modelo es una ampliación del que propone la IAEA como puede apreciarse en comparación con la ecuación 3.1:

$$\frac{\Delta L}{L} = A[\exp(240, 8/T)](\phi t)^{1/2}(1 - 3f_z)(1 + 2CW) \quad (3.3)$$

donde  $\frac{\Delta L}{L}$  es la fracción de cambio axial debido al crecimiento,  $A$  es una constante que toma el valor de  $1,407 \times 10^{16}(n/m^2)^{1/2}$ ,  $T$  es la temperatura de la vaina en Kelvin,  $\phi$  es el flujo de neutrones rápidos en  $n/m^2s$ ,  $t$  es el tiempo en segundos,  $f_z$  es el factor de textura y  $CW$  es la fracción de trabajado en frío (*Cold Work*).

En primer lugar, se puede apreciar que este modelo considera diversos factores que afectan al crecimiento por irradiación de las aleaciones de circonio. A continuación en las figuras 3.5 y 3.6, se muestran gráficos donde se comparan datos experimentales con el modelo de MatPro.

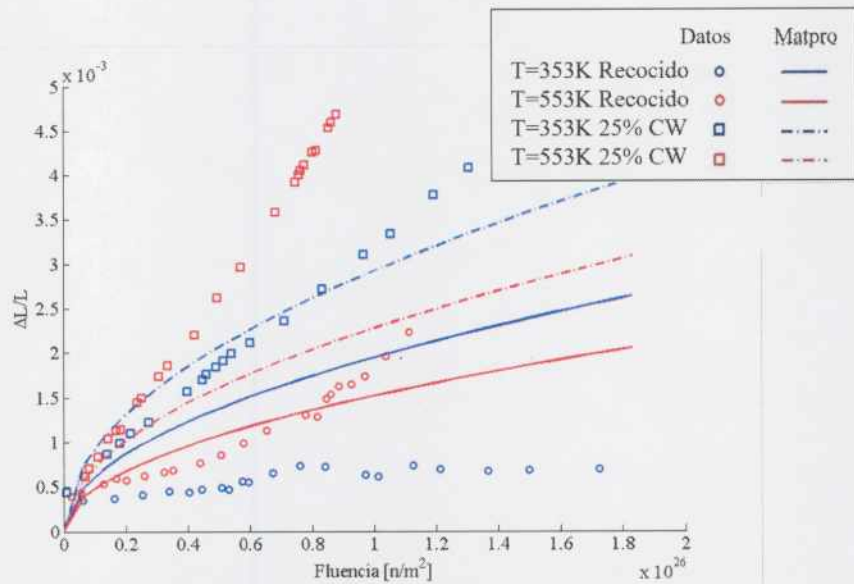


Figura 3.5: Datos experimentales recopilados por A. Rogerson y simulación con el modelo propuesto por MatPro [18].

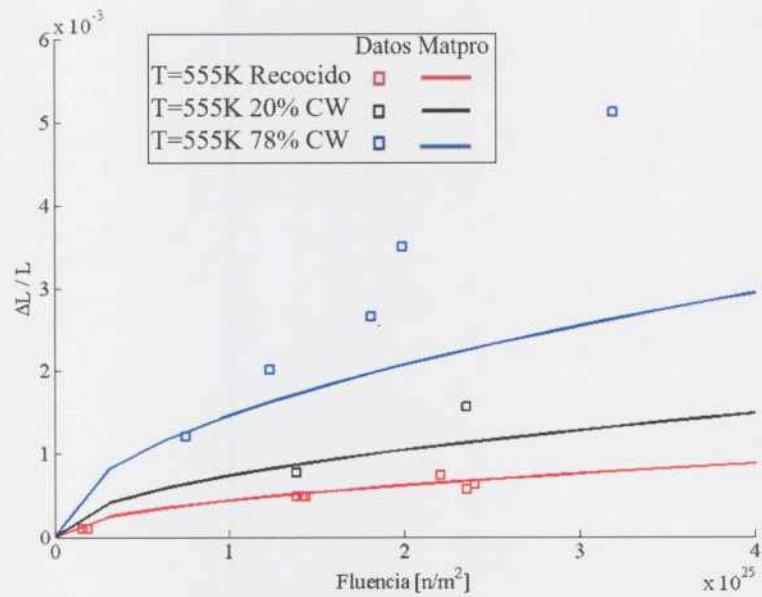


Figura 3.6: Datos experimentales recopilados por R.B. Adamson y simulación con el modelo propuesto por MatPro [19].

En concordancia con la ecuación 3.3, es posible observar en las figuras 3.5 y 3.6 que el modelo para el crecimiento es proporcional a la raíz cuadrada de la fluencia. Como se ha comentado en la sección 3.1, dependiendo de la condición inicial del material presenta distinto comportamiento: lineal para trabajados en frío, y comportamiento en tres etapas para recocidos. Sin embargo se destaca en principio, que

para fluencias promedio de la vida útil de un reactor nuclear de potencia, los resultados de la simulación comparados con los datos experimentales se encuentran todos dentro del mismo orden de magnitud. Algunos resultados, tales como para el caso de Rogerson a 353 K recocido (figura 3.5), la diferencia es de 4 veces mayor para la simulación, o en el caso de Adamson a 555 K y 78 % de trabajado en frío (figura 3.6) la diferencia es de casi dos veces menor para la simulación. Esta diferencia muestra que el modelo posee una gran incerteza en sus predicciones.

### 3.4. Modelos Teóricos

Los neutrones rápidos ( $E > 1 \text{ MeV}$ ) son los responsables del desplazamiento de los átomos de la red cristalina del Zircaloy. Estos desplazamientos provocan defectos puntuales, tales como vacancias e intersticiales, como se observa en la figura 3.7

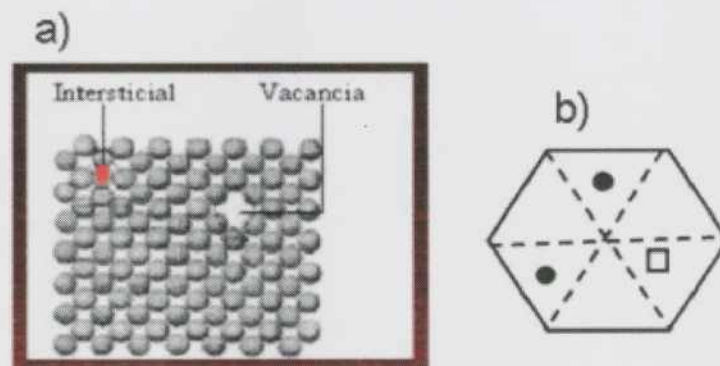


Figura 3.7: a) Representación de una vacancia y de un intersticial. b) Vacancia ubicada en la sección intermedia de una estructura hexagonal compacta.

Una vacancia es la ausencia de un átomo en la estructura cristalina, mientras que un intersticial es un átomo ubicado fuera de su posición normal en la estructura cristalina [25]. Los intersticiales pueden ser debido a impurezas o a los mismos átomos de la red. Cada metal tiene una concentración de vacancias y de intersticiales en equilibrio termodinámico, es decir, que depende de la temperatura a la que se encuentra.

Una vacancia o intersticial puede moverse cuando supera una energía de activación que corresponde a la energía para producir una distorsión en la red cristalina tal que permita la migración del defecto. (figura 3.8). La magnitud que da noción de

cuán rápido puede moverse un defecto por la red cristalina se denomina coeficiente de difusión, el cual puede expresarse según la ecuación de Arrhenius 3.4:

$$D_{v,i} = D_{v,i}^0 \exp\left(\frac{-H_{v,i}^m}{kT}\right) \quad (3.4)$$

donde  $D_{i,v}^0$  es el factor de frecuencia de salto de intersticiales o vacancias,  $H_{(v,i)}^m$  es la entalpía de migración para vacancias o intersticiales,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura absoluta.

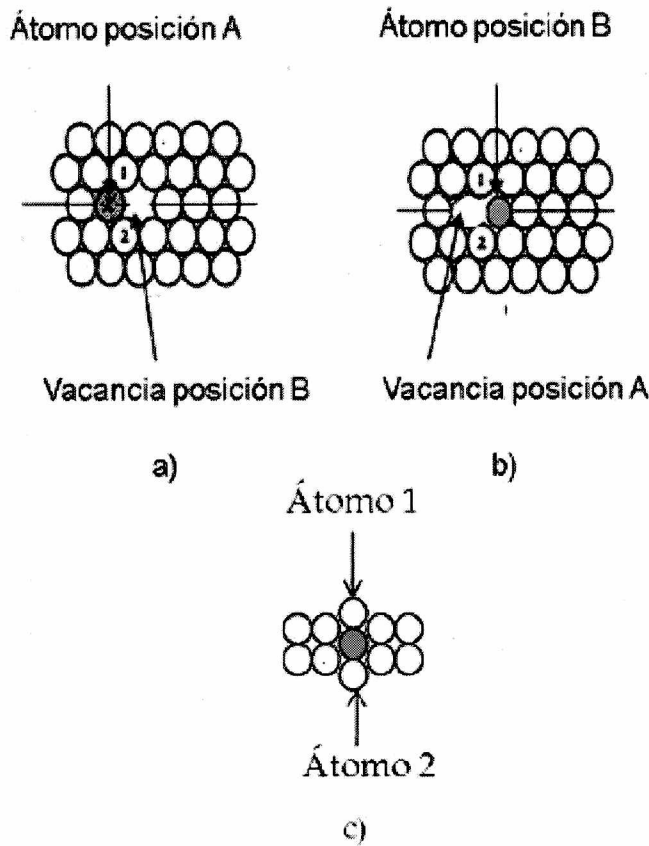


Figura 3.8: Movimiento de una vacancia de la posición B a la posición A dentro de un cristal. a) Posición inicial del átomo y la vacancia, b) posición final del átomo y la vacancia, c) posición intermedia de los átomos durante el pasaje de una a otra.

Una gran cantidad de autores han investigado el fenómeno del crecimiento inducido por irradiación del Zircaloy. La búsqueda de ecuaciones que expliquen la interacción de la radiación neutrónica con la red cristalina de las aleaciones de circonio, dan lugar a una serie de ecuaciones diferenciales acopladas que siguen paso a paso los mecanismos de interacción explicados en el capítulo 2.2.

Las vacancias e intersticiales producidos por la radiación, a la temperatura que se

encuentran son lo suficientemente móviles para que puedan ser recombinadas. Las recombinaciones pueden ser directas entre intersticial y vacancia, o éstas pueden migrar hacia los bordes de grano u otros sumideros de defectos.

A partir del modelo propuesto por D. Fainstein-Pedraza y C.C. Dollins [21], y sumando consideraciones propias, se obtuvieron las siguientes ecuaciones para determinar la evolución temporal de las vacancias e intersticiales:

$$\frac{dC_v}{dt} = K - \alpha C_i C_v - Z_v \rho D_v (C_v - C_e) - D_v Z_{vl} \rho_l (C_v - C_e f_{el}) - K_{gb} D_v (C_v - C_e) \quad (3.5)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = K(1 - \epsilon) - K_i D_i C_i - \alpha C_i C_v \quad (3.6)$$

donde  $K$  es el número de pares Frenkel que se generan por unidad de tiempo,  $D_v$  y  $D_i$  son los coeficientes de difusión para vacancias e intersticiales,  $\alpha$  es la constante de recombinación directa,  $K_i$ ,  $K_v$  y  $K_{gb}$  son las probabilidades de captura de intersticiales por todos los sumideros, de vacancias por todos los sumideros, y de vacancias por bordes de grano, respectivamente.  $C_e$  es la concentración de vacancias en equilibrio termodinámico, dado por la ecuación  $C_e = \exp(-1, 2[ev]/kT)$ ,  $Z_{v,i}$  es el coeficiente bias de vacancias e intersticiales respectivamente,  $\rho_l$  es la densidad de lazos de dislocaciones,  $\rho$  es la densidad lineal de dislocaciones,  $f_{el}$  es una función que depende de las propiedades elásticas del Zircaloy, que mide cómo afecta la geometría de un lazo de dislocación en la concentración de vacancias en equilibrio termodinámico (ecuación 3.7) y  $\epsilon$  es la fracción de los intersticiales que se generan que van a formar nuevos lazos de dislocaciones [21], ya que en este modelo se considera que los loops solo son formados por intersticiales (ecuación 3.8). La energía de formación de intersticiales es mayor que para vacancias por lo que para las temperaturas de interés, se considera que la concentración en equilibrio termodinámico de intersticiales es despreciable.

$$f_{el} = \exp\left(\frac{\frac{-\mu(0,01b)^4}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{r_l+b}{b}\right)}{(b+r_l)0,01kT}\right) \quad (3.7)$$

$$\epsilon = \frac{dN}{dt} \pi r_{i0}^2 \quad (3.8)$$

$$N_l = \frac{N_0}{(1 + F)} \log(51kT + 1) \quad (3.9)$$

$$F = \frac{7,2 \times 10^{18}}{\exp(27660/T)} \quad (3.10)$$

donde  $r_l$  es el radio del lazo,  $b$  es el vector de Burgers,  $\mu$  es el módulo de corte,  $\nu$  es el coeficiente de Poisson,  $N_0$  es la concentración de lazos inicial,  $N$  es la concentración de lazos en función del tiempo,  $k$  es la constante de Boltzmann, y  $r_{l0}$  es el radio inicial de loops.

A partir de los datos experimentales proporcionados por D.O. Northwood *et al.* [26] se calcularon el módulo de corte y el coeficiente de Poisson para el Zircaloy mediante un ajuste paramétrico a distintas temperaturas, como se puede observar en la figura 3.9 y 3.10, obteniéndose para cada uno de ellos las expresiones:

$$\mu = 3,9 \times 10^{10} - 1,2 \times 10^7 T - 7,34 \times 10^3 T^2 \quad (3.11)$$

$$\nu = 0,376 - 1,93 \times 10^{-5} T - 5,1 \times 10^{-8} T^2 \quad (3.12)$$

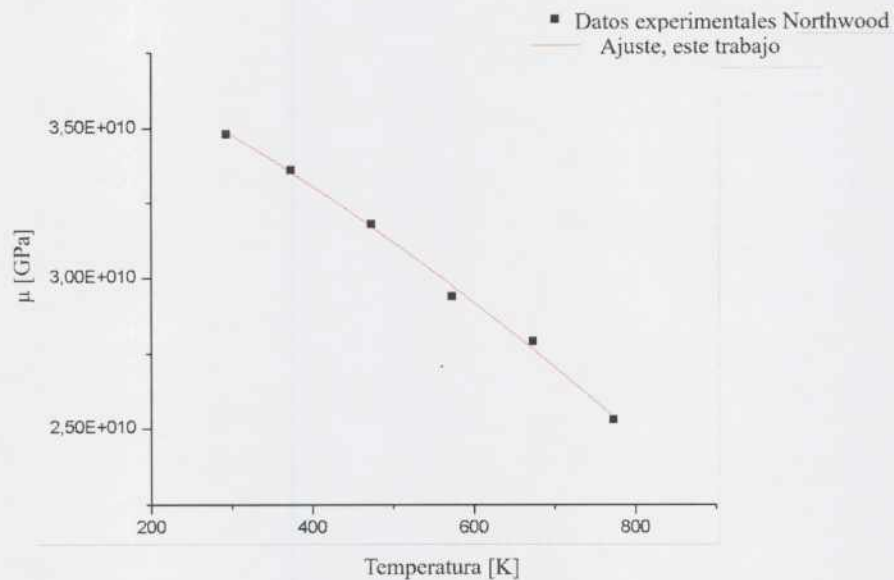


Figura 3.9: Ajuste para el módulo de corte del Zircaloy en función de la temperatura.

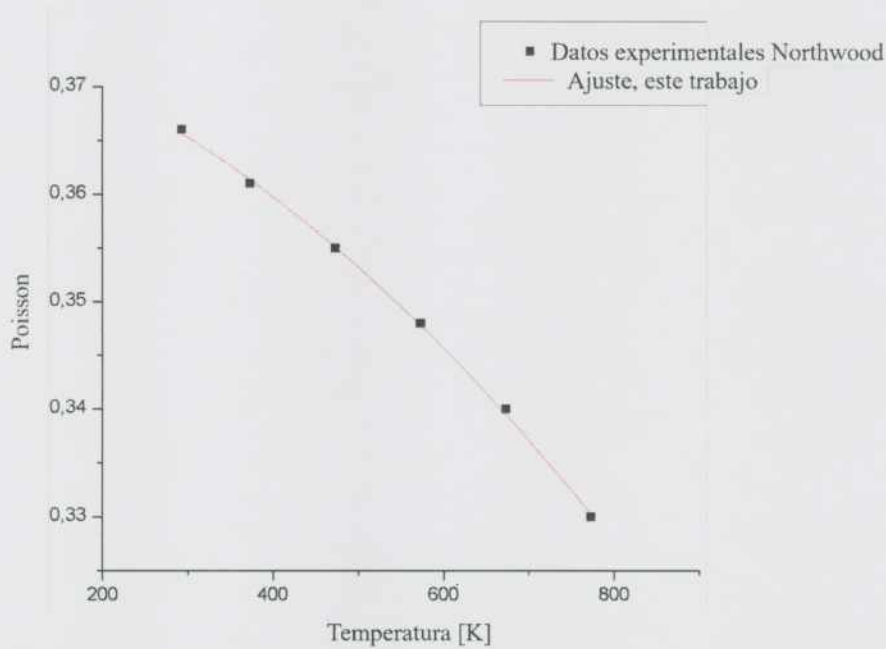


Figura 3.10: Ajuste para el coeficiente de Poisson del Zircaloy en función de la temperatura.

En las ecuaciones 3.5 y 3.6 se observa que la concentración de defectos resulta de una competencia entre la generación de pares Frenkel y la recombinación de estos por los medios posibles en el material.

Una vez formados los lazos de dislocaciones, estos tienen la posibilidad de modificar su tamaño debido al intercambio neto de defectos puntuales que se produce entre el lazo y la red cristalina. De acuerdo con Dollins [28] se obtiene que:

$$\frac{dr_l}{dt} = \frac{1}{b} [Z_i D_i C_i - Z_v D_v (C_v - C_e f_{el})] + \frac{\epsilon K}{\rho_l} \quad (3.13)$$

La tasa de deformación del material presenta tres contribuciones, y se considera que el volumen no varía, tal que:

$$\frac{d\epsilon_{tot}}{dt} = (1 - 3f) \left( \frac{d\epsilon_l}{dt} + \frac{d\epsilon_d}{dt} + \frac{d\epsilon_{bg}}{dt} \right) \quad (3.14)$$

donde  $\epsilon_{tot}$  es el crecimiento total,  $f$  es el factor de Kearns o factor de textura para la dirección de interés,  $\epsilon_l$  es el crecimiento debido a los loops de dislocaciones,  $\epsilon_d$  es el crecimiento debido a las dislocaciones lineales y por último  $\epsilon_{bg}$  es el crecimiento debido a los defectos que migran hacia los bordes de grano. Tomando como referencia el eje longitudinal de la vaina, el factor de Kearns axial  $f_a$  pertenece al intervalo  $[0 ; 0,33]$ , por lo tanto la ecuación 3.14 toma valores positivos, indicando un alargamiento

en dicha dirección. Más aún, y en concordancia con la relación 2.3, el  $f_r$  toma valores mayores a 0,34 otorgándole valores negativos a la ecuación 3.14, lo cual coincide con la teoría y las mediciones experimentales, ya que el eje  $\langle c \rangle$  de la estructura HCP se espera que reduzca su longitud. Cada uno de los términos de la ecuación 3.14 se expresan como [14, 27]:

$$\frac{d\varepsilon_l}{dt} = \rho_l [Z_i D_i C_i - Z_v D_v (C_v - C_e)] = \pi b N r_l^2 \quad (3.15)$$

$$\frac{d\varepsilon_d}{dt} = \frac{\rho}{2} [Z_i D_i C_i - Z_v D_v (C_v - C_e)] \quad (3.16)$$

$$\frac{d\varepsilon_d}{dt} = \frac{0,5}{3} [K_{gbi} D_i C_i - K_{gbv} D_v (C_v - C_e)] \quad (3.17)$$

donde  $K_{gbi,v}$  es el sumidero de borde de grano para intersticiales y vacancias,  $b$  es el vector de Burgers y  $N$  es la concentración de loops de dislocaciones.

Los coeficientes de difusión de intersticiales y vacancias son, respectivamente [27]:

$$D_i = 7,5 \times 10^{-4} \frac{cm^2}{s} \exp\left(\frac{-0,3eV}{kT}\right) \quad (3.18)$$

$$D_v = 0,01 \frac{cm^2}{s} \exp\left(\frac{-1,1eV}{kT}\right) \quad (3.19)$$

donde  $k$  es la constante de Boltzmann en  $ev/K$  y  $T$  es la temperatura en Kelvin.

Un par Frenkel consta de una vacancia y un intersticial producidos por el desplazamiento de un átomo de su lugar de origen en la red cristalina, debido a la interacción con un neutrón rápido. El factor  $K$  es proporcional al flujo neutrónico rápido, y se expresa como [29]:

$$K = \Psi \times \phi \quad (3.20)$$

donde  $\Psi$  es una constante de ajuste cuyo valor es  $2,3 \times 10^{-21} cm^2/s$ ,  $\phi$  es el flujo en  $n/cm^2s$ . Los coeficientes bias, que expresan la probabilidad de que una dislocación capture un intersticial o una vacancia [27], y se expresan como:

$$Z_v = \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{rmd}{3b}\right)} \quad (3.21)$$

$$Z_{vl} = \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{3r_l}{3b}\right)} \quad (3.22)$$

$$Z_i = \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{rmd}{3b+\Delta R}\right)} \quad (3.23)$$

$$Z_{il} = \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{3r_l}{3b+\Delta R}\right)} \quad (3.24)$$

donde  $Z_i$  y  $Z_v$  son los bias para dislocaciones lineales,  $Z_{il}$  y  $Z_{vl}$  son los bias para loops,  $rmd$  es la distancia media entre dos dislocaciones, y  $\Delta R$  es una función que depende del módulo de Young  $\mu$ , la temperatura y el radio del loop, este factor estima el campo de interacción efectivo, el cual hace mayor al  $Z_i$ , dado que la interacción de un intersticial hacia una vacancia es más fuerte que una vacancia hacia un intersticial.

$$\Delta R = \frac{0,014ba^3\mu}{10^6kT} \quad (3.25)$$

La distancia media entre dos dislocaciones se puede aproximar como:

$$rmd = (\pi\rho_t)^{-1/2} \quad (3.26)$$

donde  $\rho_t$  es densidad total de dislocaciones, como muestra la siguiente ecuación:

$$\rho_t = \rho + \rho_l \quad (3.27)$$

La densidad lineal de dislocaciones depende del porcentaje de trabajado en frío de la aleación, mientras que la densidad de loops depende del radio del mismo y de la concentración de loops, como se describe en las siguientes ecuaciones:

$$\rho = 9,55 \times 10^7 + 9,98 \times 10^9 \ln(CW + 1,135) \quad (3.28)$$

$$\rho_l = 2\pi r_l N_l \quad (3.29)$$

La ecuación para las dislocaciones lineales se obtuvo mediante un ajuste paramétrico, a partir de datos experimentales [30], como se observa en la siguiente figura 3.11

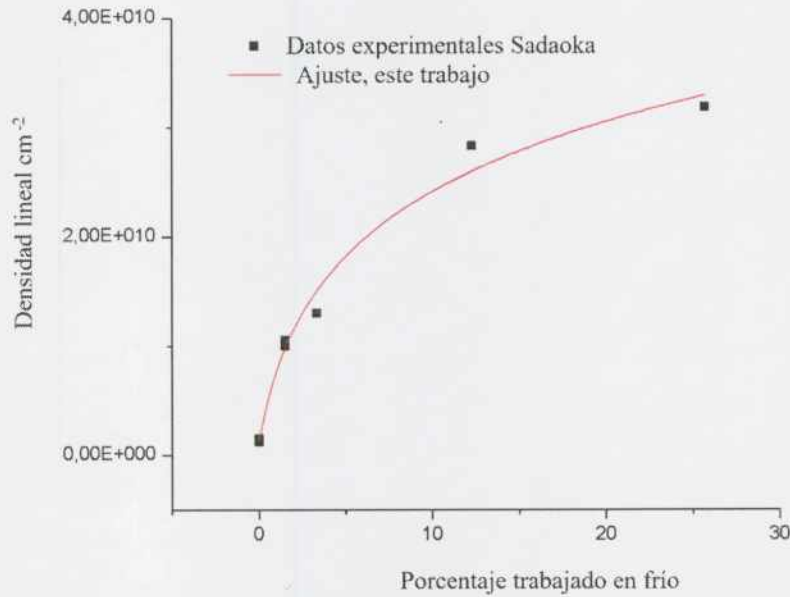


Figura 3.11: Ajuste para el cálculo de la densidad de dislocaciones lineales para el Zircaloy en función de la temperatura.

Para el cálculo de los factores de recombinación, por un lado se encuentra la recombinación mutua de intersticial con vacancia, que se expresa mediante la ecuación 3.30 y por otro lado la recombinación debida a los sumideros tanto por borde de grano como por dislocaciones, también conocido como *sinks*, expresada por la ecuación 3.31:

$$\alpha = \frac{4\pi a(D_i + D_v)}{\Omega} \quad (3.30)$$

$$Kbg_{i,v} = \frac{6}{dg} \sqrt{(Z_{i,v}\rho + Z_{li,v}\rho_l)} \quad (3.31)$$

$$K_{i,v} = (Z_{i,v}\rho + Z_{li,v}\rho_l) + \frac{6}{dg} \sqrt{(Z_{i,v}\rho + Z_{li,v}\rho_l)}$$

donde  $Kbg_{i,v}$  es el sumidero o *sink* por migración de defectos al borde de grano, y  $K_{i,v}$  es el sumidero total, para intersticiales o vacancias respectivamente, y  $\Omega$  es el volumen atómico de una celda hexagonal compacta, que se calcula de la siguiente manera:

$$\Omega = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2 c \quad (3.32)$$

donde  $a$  y  $c$  son los parámetros de red, que para el Zircaloy son  $3,232\text{\AA}$  y  $5,147\text{\AA}$  respectivamente [31].

Con el modelo completo, se procedió a comparar su predicción contra resultados experimentales obtenidos de la bibliografía.

# Capítulo 4

## Resultados y discusiones

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos para las simulaciones a partir del modelo propuesto en el capítulo anterior (secc. 3.4), comparando con los datos disponibles de la bibliografía.

### 4.1. Programación del modelo

Las ecuaciones diferenciales acopladas propuestas en este trabajo no tienen solución analítica, por lo que se debe recurrir al empleo de algún método numérico capaz de resolverlas. Para las ecuaciones de la tasa de concentraciones de defectos como para la tasa de crecimiento (3.5, 3.6, 3.14, 3.15, 3.16 y 3.17) se utilizó el método de cálculo de *Euler indirecto*, mientras que para el cálculo del crecimiento del radio de lazos (ec. 3.13) se utilizó el método de *Runge-Kutta de cuarto orden* [32]. Todas estas ecuaciones que componen el modelo han sido desarrollados en un entorno de programación matemático específico, para posteriormente exportarlo a FORTRAN 90 y ser incluidos en el código DIONISIO.

Como ejemplo se muestra el desarrollo para el cálculo de la concentración de vacancias en el tiempo utilizando el método de Euler indirecto. Si se considera que la variación vacancias respecto del tiempo puede expresarse de la siguiente manera:

$$\frac{dC_v}{dt} = A_v + B_v C_v \quad (4.1)$$

donde  $A_v$  y  $B_v$  contempla todos los parámetros de la ecuación 3.5 que no dependen explícitamente de las concentraciones de vacancias, entonces la concentración en el tiempo  $n + 1$  puede expresarse como:

$$C_v^{n+1} = C_v^n + \frac{dC_v^{n+1}}{dt}h \quad (4.2)$$

reordenando 4.1 en 4.2 se llega a la expresión:

$$C_v^{n+1} = \frac{C_v^n + A_v h}{1 + B_v h} \quad (4.3)$$

Programar las ecuaciones con este enfoque permite considerar pasos de tiempo no tan pequeños, con la ventaja de que a la hora de ejecutarlos, no consume tanto tiempo de cálculo en un procesador, como si lo haría si se utilizara el método de Euler directo. En el Apéndice A se muestra un extracto del código, donde se detalla cómo fue programado.

Estas ecuaciones se resuelven de manera iterativa hasta que el error entre el evento anterior y el actual sea menor que una tolerancia establecida, por ejemplo  $10^{-4}$ .

El valor inicial para los parámetros de cada una de estas ecuaciones se elige de manera apropiada con algún criterio justificado, o se extrae algún valor representativo de la bibliografía. Por ejemplo, para el radio inicial se elige  $10^{-7}$  [27] debido a que cuando se crean los lazos de dislocaciones, considera que existe un radio mínimo a partir del cual comienzan a crecer; mientras que las concentraciones de defectos en el instante inicial se considera que están dados por los valores del estado estacionario que existe debido al equilibrio termodinámico.

En la figura 4.1 se muestran los resultados de una corrida del código con el objetivo de probar su desempeño, eligiendo arbitrariamente parámetros de entrada típicos de una vaina de Zircaloy. A continuación se especifican las entradas del código:

- $T = 533K$
- $\phi = 5,2 \times 10^{13}n/cm^2s$
- $CW = 29,5\%$
- $f = 0,08$

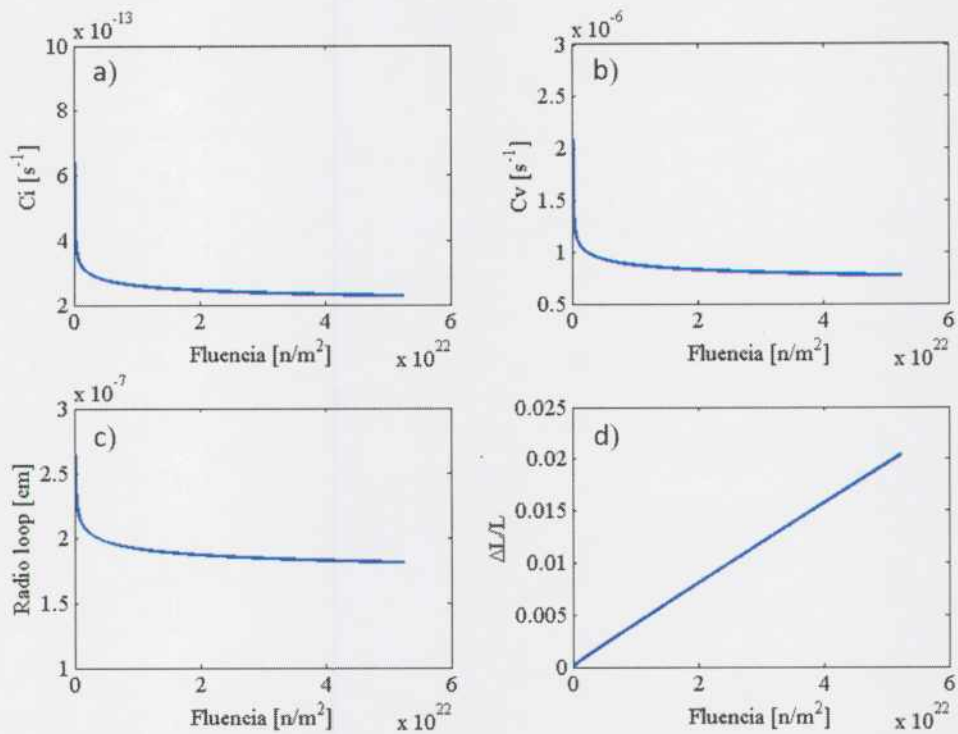


Figura 4.1: Prueba de desempeño del modelo propuesto en este trabajo. a) Tasa de concentración de intersticiales, b) tasa de concentración de vacancias, c) tasa de variación de radio de loop, d) crecimiento total.

En las figuras 4.1 a) y b) puede observarse la simulación de la concentración de vacancias e intersticiales respectivamente en función de la fluencia. Se aprecia que al principio de la irradiación la tasa de generación de defectos es alta, pero conforme avanza el tiempo, disminuye y se estabiliza de manera asintótica. Es decir, se siguen generando defectos debido a la radiación, pero a su vez las recombinaciones son más probables, por lo que el ritmo de generación neta disminuye.

Por otra parte, se puede notar en la figura 4.1 c) cómo es la variación del radio del lazo de intersticiales en función del tiempo. Como es de esperarse, sigue un comportamiento similar a la concentración de defectos, ya que de la cantidad de defectos depende el radio del loop.

Finalmente el crecimiento total, que se muestra en la figura 4.1 d) tiene la forma esperada para un metal trabajado en frío, y sus valores máximos de deformación concuerdan con el promedio para una aleación similar.

## 4.2. Simulación para aleaciones trabajadas en frío

Rogerson ha sido el autor que recopiló de manera más completa los resultados de las mediciones de crecimiento por irradiación de especímenes de Zircaloy, llevadas a cabo en el reactor EBR-II. En esta sección se han seleccionado los datos experimentales de Zircaloy-2 trabajados en frío [33]. Para cada una de estas temperaturas se ha realizado una simulación con el modelo propuesto en este trabajo, ingresando todos los parámetros de entrada característicos de cada aleación. A continuación se muestran los gráficos con los resultados obtenidos.

- Nombre de espécimen = L14F
- Temperatura = 353 K
- Fluencia máxima =  $155 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 25 %
- $f=0,1$

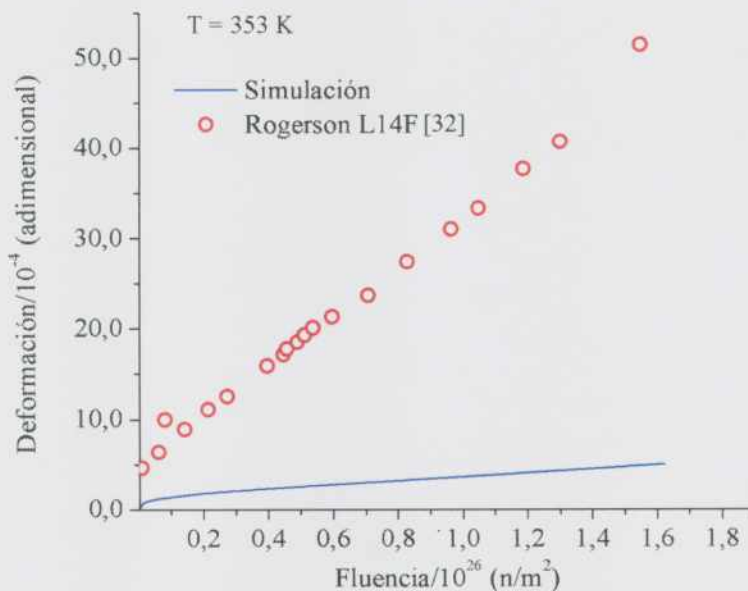


Figura 4.2: Datos experimentales L14F a 353 K y simulación

En la figura 4.2 se observa que la simulación tiene un error por defecto. Es decir que a bajas temperaturas (80 °C) este modelo no ajusta de manera correcta para

Zircaloy-2 trabajado en frío. Este detalle no invalida el modelo sino que reduce su rango de validez. Además, se debe tener en cuenta que no es un rango de temperatura de operación para un reactor. En otras palabras, no habría crecimiento por irradiación a esta temperatura, ya que el reactor no estaría en operación.

- Nombre de espécimen = L2D
- Temperatura = 553 K
- Fluencia máxima =  $87,7 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 25 %
- $f=0,1$

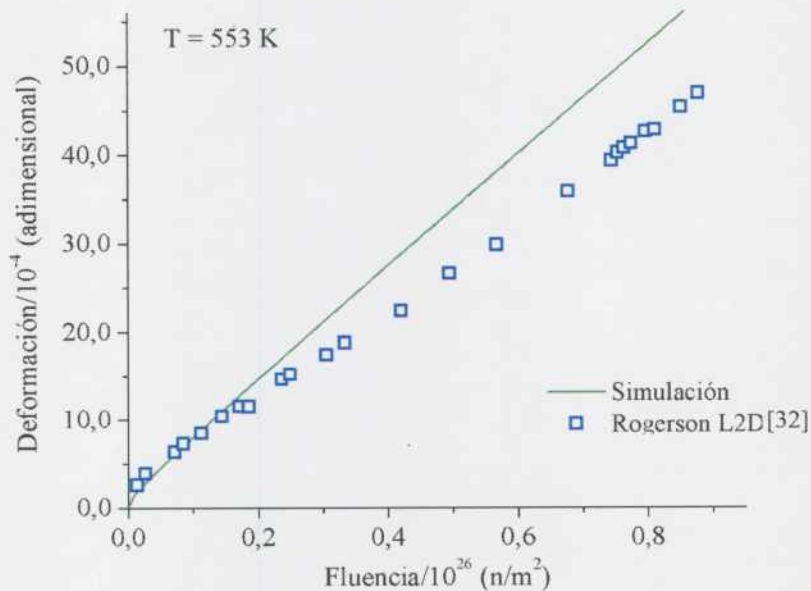


Figura 4.3: Datos experimentales L2D a 553 K y simulación.

En la figura 4.3 la simulación concuerda con los datos experimentales hasta una fluencia de  $20 \times 10^{24} \text{ n/m}^2$ . A partir de dicha fluencia, el crecimiento disminuye de manera suave su pendiente, quedando la simulación con un error por exceso. A pesar de estas pequeñas desviaciones se observa que el error relativo entre el modelo y los datos experimentales es menor al 15 %.

- Nombre de espécimen = L10L y L10N
- Temperatura = 573 K
- Fluencia máxima (L10L) =  $18,9 \times 10^{24} n/m^2$
- Fluencia máxima (L10N) =  $11,3 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 25 %
- $f=0,1$

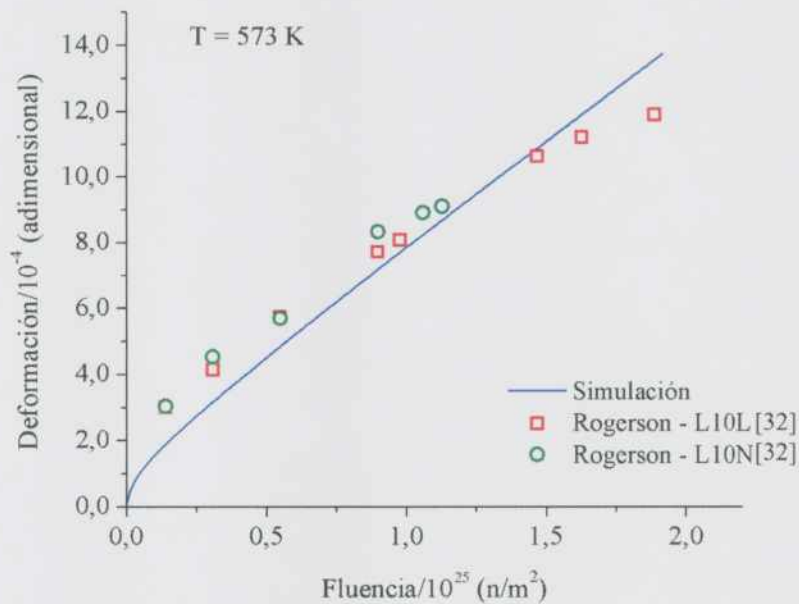


Figura 4.4: Datos experimentales L10L y L10N a 573 K y simulación

En primera instancia se observa en la figura 4.4 que los datos experimentales de distintos especímenes a las mismas condiciones de trabajo presentan similar comportamiento. Además, en la simulación realizada tiene buen acuerdo con los datos experimentales. Asimismo, cabe destacar que la temperatura de este experimento es la más cercana a un reactor de potencia tipo PHWR en condiciones de operación normal. Por ejemplo, la temperatura de salida del refrigerante para Atucha II es de 296 °C.

- Nombre de espécimen = L10J y L10K
- Temperatura = 633 K
- Fluencia máxima (L10J) =  $19,2 \times 10^{24} n/m^2$
- Fluencia máxima (L10K) =  $32,1^{24} n/m^2$
- CW = 25 %
- $f=0,1$

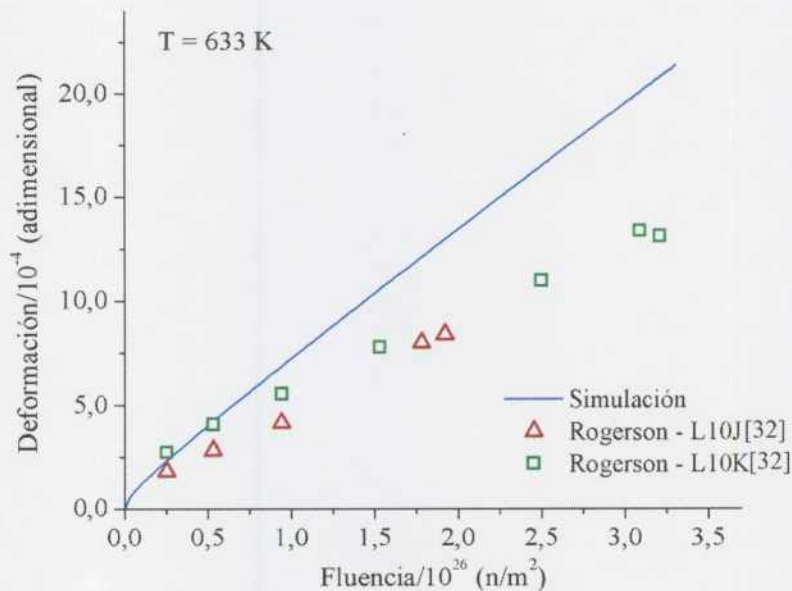


Figura 4.5: Datos experimentales L10J y L10K a 633 K y simulación

En las figuras 4.5 y 4.6 se observan los datos experimentales, para distintas muestras sometidas a irradiación bajo las mismas condiciones, y su comparación con la simulación realizada con el modelo presentado en el capítulo 3. Si bien los valores obtenidos a partir del cálculo numérico están en el orden de magnitud de los datos experimentales, la simulación presenta una sobreestimación a partir de  $5 \times 10^{21} \text{ n/m}^2$  de fluencia. El error relativo observado es menor al 25 %.

- Nombre de espécimen = L10H y L10G
- Temperatura = 673 K
- Fluencia máxima (L10H) =  $29,6 \times 10^{24} n/m^2$
- Fluencia máxima (L10G) =  $18,7 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 25 %
- $f=0,1$

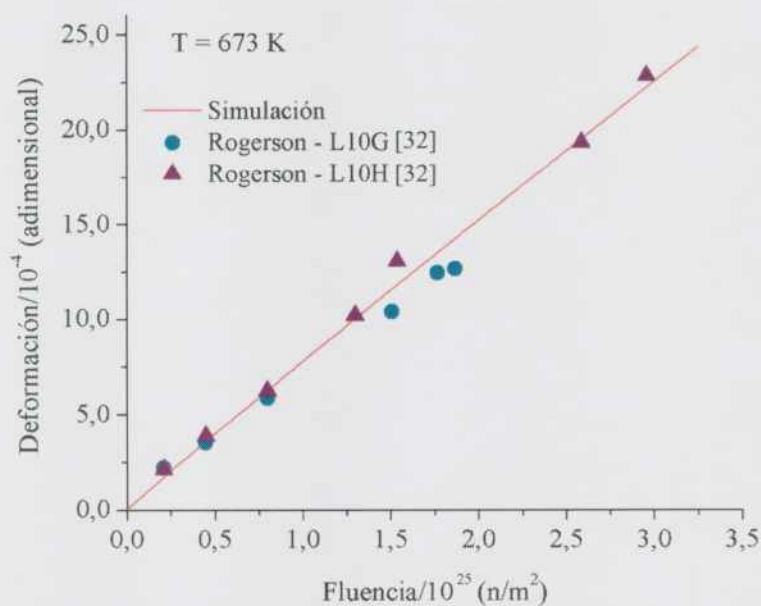


Figura 4.6: Datos experimentales L10H y L10G a 673 K y simulación

Por último, en el experimento que se muestran en la figura 4.6, a la mayor temperatura alcanzada experimentalmente, la simulación es consistente con los datos experimentales para los dos especímenes de Zircaloy-2 a 673 K.

### 4.3. Simulación para aleaciones recocidas

De igual manera que en la sección anterior, se han seleccionado los datos experimentales de Zircaloy-2 recocido, a distintas temperaturas de trabajo [33]. A

continuación se muestran los gráficos con los resultados obtenidos de las simulaciones.

- Nombre de espécimen = A18L
- Temperatura = 353 K
- Fluencia máxima =  $172,3 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 0%
- $f=0,1$

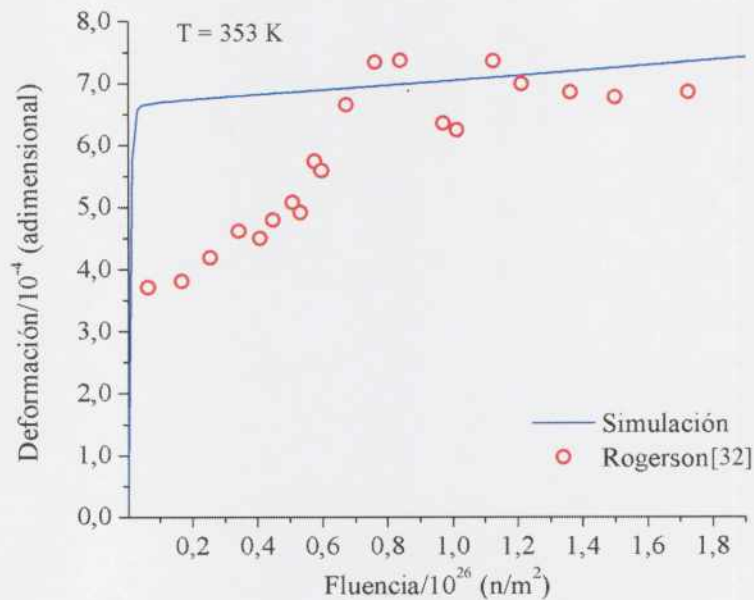


Figura 4.7: Datos experimentales A18L a 353 K y simulación.

En la figura 4.7 se observa el comportamiento de la deformación con la fluencia para Zircaloy-2 para 353 K. Se puede notar que a aproximadamente  $0,8 \times 10^{26} n/m^2$  se satura, sin haber llegado a la etapa de *breakaway*. Si bien la simulación no presenta una muy buena descripción, el orden de magnitud y el comportamiento es consistente con los datos experimentales.

- Nombre de espécimen = A9L
- Temperatura = 553 K
- Fluencia máxima =  $111 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 0%
- $f=0,1$

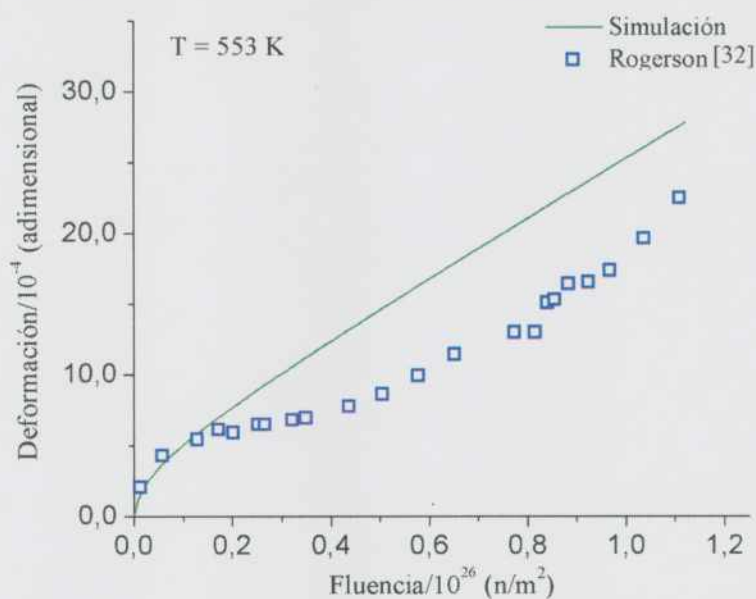


Figura 4.8: Datos experimentales A9L a 553 K y simulación.

En la figura 4.8 se muestra la deformación en función de la fluencia para datos experimentales a 553 K y su comparación con la simulación realizada. De acuerdo a las medidas experimentales se pueden observar las tres etapas del crecimiento por irradiación características de una aleación recocida [34]. En el rango de fluencias entre 0 y  $0,2 \times 10^{26} n/m^2$  se encuentra la etapa de alta tasa de crecimiento. Entre  $0,2 \times 10^{26} n/m^2$  y  $0,4 \times 10^{26} n/m^2$  se halla la etapa de muy baja tasa de crecimiento, y por último a partir de los  $0,4 \times 10^{26} n/m^2$  el metal presenta la etapa de *breakaway*. La simulación no sigue la forma de estas tres etapas, sino que se adapta a la primera (de alta tasa de crecimiento) y, al extrapolarlo para fluencias más altas, predice valores superiores a los experimentales.

- Nombre de espécimen = A53 y A56
- Temperatura = 573 K
- Fluencia máxima (A53) =  $34,2 \times 10^{24} n/m^2$
- Fluencia máxima (A56) =  $31,6 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 0%
- $f=0,1$

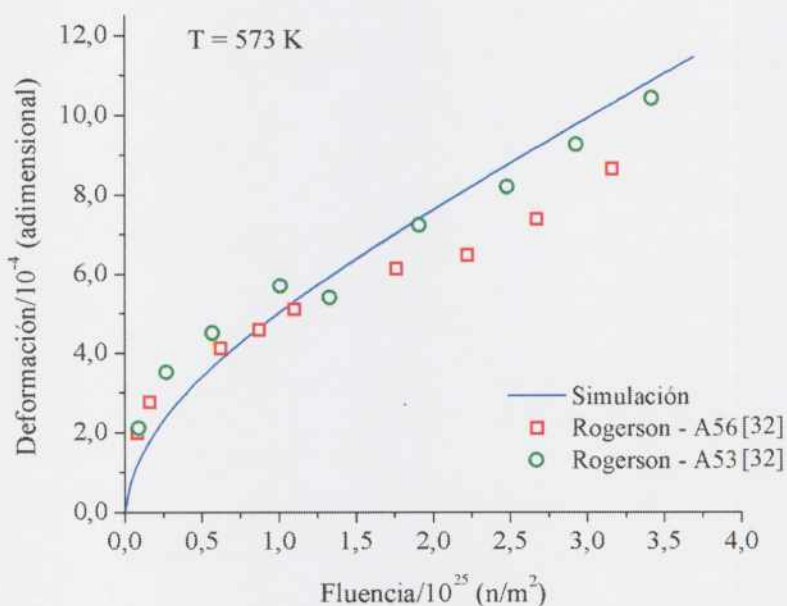


Figura 4.9: Datos experimentales A53 y A56 a 573 K y simulación.

En la figura 4.9 se muestra la comparación entre datos experimentales y simulación para muestras sometidas a irradiación alcanzando una temperatura de 573 K. El cálculo numérico muestra un buen acuerdo con las medidas experimentales.

- Nombre de espécimen = A52 y A55
- Temperatura = 633 K
- Fluencia máxima (A52)=  $58,3 \times 10^{24} n/m^2$
- Fluencia máxima (A55)=  $55,1 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 0%
- $f=0,1$

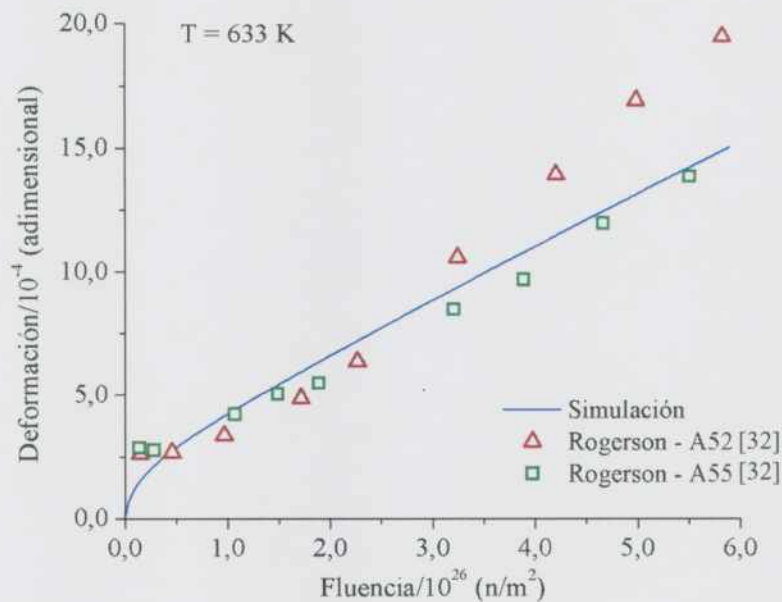


Figura 4.10: Datos experimentales A52 y A55 a 633 K y simulación.

En la figura 4.10 se muestra la comparación entre datos experimentales y la simulación en función de la fluencia para muestras irradiadas a una temperatura de 633 K. El modelo presenta un ajuste consistente con los datos del espécimen A55. No obstante, presenta un desvío dejando un pequeño error por defecto con el espécimen A52. A pesar de las desviaciones mostradas, la simulación está en el orden de magnitud de los datos experimentales.

- Nombre de espécimen = A51 y A55
- Temperatura = 673 K
- Fluencia máxima (A51) =  $49,1 \times 10^{24} n/m^2$
- Fluencia máxima (A55) =  $47,1 \times 10^{24} n/m^2$
- CW = 0%
- $f=0,1$

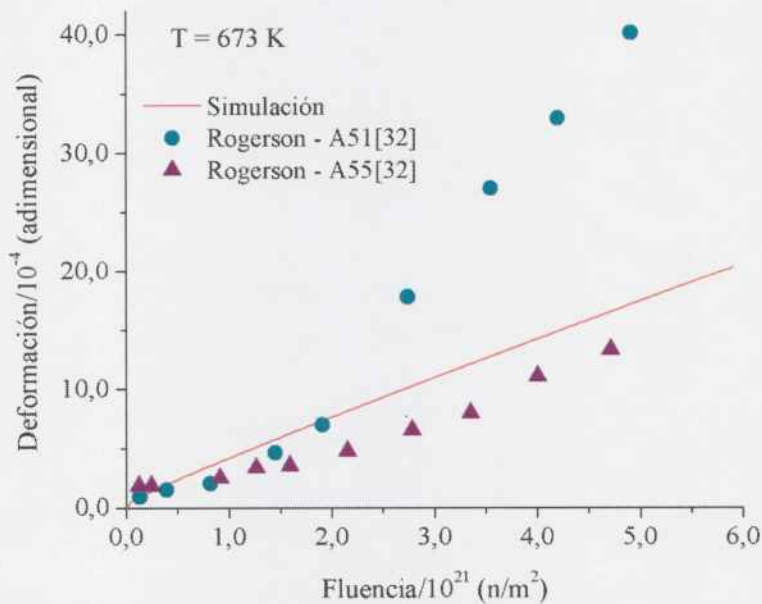


Figura 4.11: Datos experimentales A51 y A55 a 673 K y simulación.

Por último, en la figura 4.11 puede verse que a la mayor temperatura experimentada, el modelo presenta un comportamiento lineal, el cual se posiciona ligeramente por arriba de los datos experimentales del espécimen A55. Por el contrario, la simulación se aleja del espécimen A51, con un error considerable por defecto.

En términos generales, para Zircaloy-2, tanto trabajado en frío como para recocido, a las temperaturas normales de operación de un reactor nuclear, el modelo presenta resultados consistentes con las mediciones experimentales.

# Capítulo 5

## Conclusiones

En el presente trabajo se desarrolló un modelo para el cálculo de crecimiento inducido por irradiación en aleaciones de circonio. Este modelo propone un análisis microscópico de la interacción de los neutrones rápidos ( $E > 1$  MeV) con la red cristalina de una vaina de Zircaloy. Luego, se partió de una búsqueda bibliográfica de los modelos actuales para la predicción de este fenómeno, y se dividieron en dos categorías: modelos empíricos y modelos teóricos. En primera instancia se analizaron los modelos empíricos, entre ellos el que actualmente tiene incorporado DIONISIO en su código, se realizaron ajustes de los parámetros de estos modelos, y se llegó a la conclusión de que presenta una limitación a la hora de simular la gran variedad de aleaciones disponibles en la industria nuclear para las vainas de elementos combustibles.

Acto seguido, se estudió el mecanismo de generación de defectos en la estructura cristalina del Zircaloy, y cómo la acumulación de estos defectos afectan a escala macroscópica a los elementos estructurales de un reactor.

El modelo propuesto en este trabajo fue programado en un entorno matemático, y resuelto utilizando los métodos numéricos de *Euler* y *Runge-Kutta de cuarto orden*. Las simulaciones de este modelo fueron comparadas con datos experimentales disponibles en la bibliografía y los resultados fueron satisfactorios. Se probaron aleaciones en distintas condiciones iniciales, siendo en la mayoría de los casos la simulación consistente con los datos experimentales, mientras que para otros casos se observan ciertas desviaciones que pueden atribuirse a las simplificaciones del modelo propuesto.

Como trabajo futuro se propone incorporar esta subrutina al código DIONISIO.

Para ello será necesario reprogramar la subrutina desarrollada en lenguaje FORTRAN, que es el lenguaje en el que está escrito el código DIONISIO. Por último, acoplar este modelo con los demás fenómenos que resuelve el código para un elemento combustible en condiciones normales de operación en un reactor nuclear de potencia.

# Bibliografía

- [1] <https://www.nrc.gov/reactors/bwrs.html>
- [2] <https://www.nrc.gov/reactors/pwrs.html>
- [3] C. Rey, Centrales Nucleares, la seguridad relacionada al diseño de las mismas
- [4] G. Bereznai, Introduction to CanDu Systems and Operation
- [5] A. Soba, A. Denis, Simulation with DIONISIO 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods (2008)
- [6] A. Soba, A. Denis, DIONISIO 2.0: New version of the code for simulating a whole nuclear fuel rod under extended irradiation
- [7] E. Rubinstein, Proyecto Comercialización del sistema DIONISIO
- [8] W. M. Haynes, Handbook of Chemistry and Physics, 95<sup>TH</sup> Edition (2014)
- [9] <https://www.nndc.bnl.gov/exfor>
- [10] <http://www.oecd-nea.org/janisweb>
- [11] C. L- Whitmarsh, Review of Zircaloy-2 and Zircaloy-4 properties relevant to N.S. Savannah Reactor Design
- [12] M. Rengel, Integridad estructural de vainas de combustible nuclear en condiciones de almacenamiento temporal en seco
- [13] G. Juarez, Microestructura y orientación de hidruros en tubos de Zircaloy-4 para elementos combustibles CAREM 25
- [14] S. Choi, Modeling of sink-induced irradiation growth of single-crystal and polycrystal zirconiums in nuclear reactors, 2016

- [15] S. Choi, Radiation-induced dislocation and growth behavior of zirconium and zirconium alloys
- [16] U.S. Department of Energy, A library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis
- [17] G. Juarez, Estudio de la textura cristalina en tubos de Zirzalo-4 para vainas de elementos combustibles obtenidos mediante laminación en frío (cold pilger process)
- [18] A. Rogerson, Irradiation growth in zirconium and its alloys, 1988
- [19] R.B. Adamson, Neutron damage in zirconium alloys irradiated at 644 to 710 K, 1987
- [20] C. Westfall, Vision and reality: The EBR-II story
- [21] D. Fainstein-Pedraza, Irradiation-growth of zirconium-base alloys, 1977
- [22] A.J. Pedraza, Irradiation growth of zirconium-base alloys, 1979
- [23] M. Griffiths, Accelerated irradiation growth of Zirconium alloys, 1989
- [24] IAEA, properties of materials for water reactor fuel elements and methods of measurements, 1986
- [25] A. Sarce, Crecen algunos tubos metálicos
- [26] D.O. Northwood, Elastic constants of Zirconium alloys, 1975
- [27] C.C. Dollins, In-pile dimensional changes in neutron irradiated zirconium base alloys, 1976
- [28] C.C. Dollins, Depleted zone formation and recovery during neutron irradiation, 1971
- [29] N. Sadaoka, Effects of microstructural factors on irradiation growth in zirconium-base alloys
- [30] C.H. Woo, A diffusion approach to modelling of irradiation-induced cascades

- [31] R.A. Versaci, Microscopía electrónica de aleaciones de Zirconio de interés nuclear, CNEA, 1986
- [32] S. Chapra, Numerical methods for engineers, seventh edition
- [33] A. Rogerson, Irradiation growth in annealed and 25 % cold-worked zircaloy-2 between 353-673 K
- [34] S. Golubov, Radiation growth of HCP metals under cascade damage conditions

# Agradecimientos

A mi director, Alejandro Soba, por su dedicación, predisposición e invaluable ayuda durante toda la tesis.

A Mauricio Cazado, por su inagotable paciencia y permanente predisposición para explicar, discutir y generar nuevas ideas.

A Alicia Denis y toda la gente del grupo Códigos y Modelos, por abrirme las puertas y haber brindado su apoyo a este trabajo.

A los compañeros de todos los días por hacer tan agradable el trabajo cotidiano y por estar siempre a mano para dar una mano: Emilio, Ezequiel, Martín y Matías.

A Alex, Pablo, Gabriel, Emanuel, Rosana y Hernán, por haber recorrido este camino juntos, por los lindos momentos que quedarán en nuestras memorias para siempre, y por las largas mañanas, tardes y noches de estudio.

A todo el personal del Instituto Dan Beninson, Natalia, Ricardo, Valeria, Pablo, Ana, Carla, Federico, Adrián, Mariano, Manuel, Verónica, los Javis, Leti, Adriel y Alejandro, que con su esfuerzo y predisposición hacen que este Instituto sea nuestro segundo hogar.

A Nicolás, Fernando y Joaquín por su constante ayuda, el apoyo, las risas y la amistad.

A Diego, Javi y Cheto, por estar siempre en todas, por ser excelentes músicos y amigos, porque son los mejores compañeros de banda, y porque son lo más.

A la educación pública, gratuita, laica y soberana.

Y a mi familia, por darme la oportunidad, por mostrarme el camino y saber esperar a que lo recorra.

# Apéndice A

## Subrutinas

En este apéndice se presenta esquemáticamente el modelo propuesto y el modo en que éste fue implementado.

%Esquema del modelo desarrollado.

% tasa de concentracion de intersticiales

```
function [Ci] = fun_ci(Ci_ant,h,K,Ki,alfa,Di,eK,Cv)
```

```
    Ai = K-eK;
```

```
    Bi = Di*Ki + alfa*Cv;
```

```
    Ci = (Ci_ant + Ai*h)/(1 + Bi*h);
```

```
end
```

% tasa de concentracion de vacancias

```
function [Cv]=fun_cv(Cv_ant,h,K,zv,zvl,Ce,fel,Kv,Kbgv,den_lin,...  
                    densloop,alfa,Dv,Ci)
```

```
    Av = K + (zv*den_lin + Kbgv)*Dv*Ce + zvl*densloop*Dv*Ce*fel;
```

```
    Bv = Dv*Kv + alfa*Cv;
```

```
    Cv = (Cv_ant + Av*h)/(1 + Bv*h);
```

```
end
```

% tasa de variacion del radio de loop (Runge-Kutta)

```
function [rloop] = fun_rloop(rl_ant,h,b,zi,Di,Ci,zv,Dv,Cv,Ce,...  
                             mu,nu,T,kb,eK,r10,N1)
```

```

r1 = rl_ant;
fel1 = fun_fel(mu,b,r1,nu,T,kb);
K1=(1/b)*(zi*Di*Ci - zv*Dv*(Cv - Ce*fel1) + eK*(1 -...
    (r1/rl0)^2)/(2*pi*Nl*r1));

r2 = rl_ant + 0.5*K1*h;
fel2 = fun_fel(mu,b,r2,nu,T,kb);
K2=(1/b)*(zi*Di*Ci - zv*Dv*(Cv - Ce*fel2) + eK*(1 -...
    (r2/rl0)^2)/(2*pi*Nl*r2));

r3 = rl_ant + 0.5*K2*h;
fel3= fun_fel(mu,b,r3,nu,T,kb);
K3=(1/b)*(zi*Di*Ci - zv*Dv*(Cv - Ce*fel3) + eK*(1 -...
    (r3/rl0)^2)/(2*pi*Nl*r3));

r4 = rl_ant + K3*h;
fel4 = fun_fel(mu,b,r4,nu,T,kb);
K4=(1/b)*(zi*Di*Ci - zv*Dv*(Cv - Ce*fel4) + eK*(1 -...
    (r4/rl0)^2)/(2*pi*Nl*r4));

rloop = rl_ant + (1/6.0)*h*(K1 + 2*K2 + 2*K3 + K4);

if rloop <=0
    rloop = 1E-8;
end

end

% crecimiento por irradiacion

crec_loop(i) = 1*pi*b*Nloop(i)*(rl(i)^2);

crec_disl(i) = crec_disl(i-1)+0.5*(den_lin)*(zi(i)*Di*Ci(i)-...
    zv(i)*Dv*(Cv(i)-Ce));

crec_grain(i) = crec_grain(i-1)+(0.5/3.0)*(Kbgi(i)*Di*Ci(i)-...
    Kbgv(i)*Dv*(Cv(i)-Ce));

Crec_tot(i) = (1 - 3*f)*(crec_loop(i)+crec_disl(i)+crec_grain(i));

```