



AVALIAÇÃO NEUTRÔNICA E TÉRMICA DE LIGAS METÁLICAS PARA ELEMENTOS COMBUSTÍVEIS TIPO PLACA

Roberto Jr. A. Miranda¹, Fabio C. A. Filho¹, Miguel A. D. Schmitt¹, Anderson P. Resende¹, Daniel A. P. Palma², Marcelo V. Silva¹, Máira C. A. Lobo¹, Giovanni L. de Stefani¹

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro (Av. Horácio Macedo, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.)

² Instituto de Engenharia Nuclear - IEN (R. Hélio de Almeida, Rio de Janeiro, RJ, Brasil)

robjr.artmir.20231@poli.ufrj.br

Palavras-Chave: Combustível metálico, neutrônica, combustível tipo placa.

RESUMO

Este trabalho apresenta uma análise neutrônica e térmica, a posteriori, de elementos combustíveis do tipo placa, utilizando diferentes materiais metálicos, mas com a mesma massa de material fissil. O objetivo é determinar a melhor performance operacional, bem como os níveis de segurança e eficiência térmica. Para a análise neutrônica, foi utilizado o código SERPENT, estimando-se parâmetros como k_{inf} , frações de nêutrons efetivos, razão de conversão e produção de Pu-239 e U-233. Adicionalmente, foi avaliado o comportamento térmico (ponto de fusão) dos elementos combustíveis, no caso do tipo placa, garantindo a integridade do revestimento ao longo do ciclo de vida, evitando problemas como derretimento ou falhas operacionais no reator. Após o estudo, conclui-se que a liga U20Zr tem as melhores características térmicas e neutronicas para constituir um elemento combustível de placa tendo a intenção de construir um reator *breeder*.

1. INTRODUÇÃO

O combustível nuclear é usualmente configurado em varetas com pastilhas de UO_2 em seu interior, porém têm-se investigado a viabilidade de elementos combustíveis tipo placa na busca de materiais estruturais inovadores que possam ser implementados em ciclos avançados de combustível nuclear[1]. Este estudo analisa ligas metálicas adequadas para a fabricação desses elementos e foca exclusivamente na avaliação do combustível no núcleo do reator.

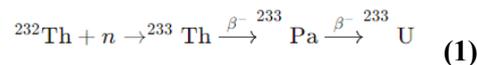
O uso de urânio puro em reatores de água leve não é viável devido à sua baixa resistividade elétrica, anisotropia pronunciada, propriedades mecânicas inadequadas e alta instabilidade dimensional. Nesse contexto, a adição de outros elementos para formar ligas metálicas de urânio surge como uma solução eficaz para melhorar suas propriedades físicas e mecânicas, garantindo maior estabilidade e desempenho operacional [2].

Elementos combustíveis do tipo placa podem oferecer vantagens significativas sobre o combustível em pastilhas, como manuseio mais simples, maior flexibilidade geométrica e melhorias em segurança. No conceito seed-blanket de Radkowsky [3], esse combustível se destaca devido à geometria que facilita a fuga de nêutrons, direcionando-os para a região de blanket, aumentando a produção de material fissil e permitindo que o reator funcione como *breeder*. Este estudo avaliou preliminarmente a viabilidade desse tipo de combustível por meio de análises neutronicas e térmicas em diferentes ligas metálicas, mantendo a mesma massa de material fissil.

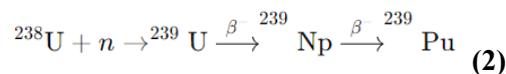


O objetivo do estudo é alcançar um reator reprodutor (*breeder*), isto é, com razão de conversão superior a um. Esses reatores são projetados para converter materiais férteis em materiais físsis, como Th-232 em U-233 e U-238 em Pu-239, e têm a capacidade de gerar mais material físsil do que consomem, aumentando a eficiência do ciclo de combustível nuclear e prolongando o uso dos recursos nucleares disponíveis [4]. Os reatores *breeders* são cruciais no contexto da energia nuclear sustentável, pois permitem o uso eficiente de materiais férteis abundantes que de outra forma teriam um valor limitado como combustível [4]. O único caso conhecido de reator *breeder* do tipo PWR da história foi o ciclo final do reator Indian Point I que usou o conceito de seed-blanket [3].

Na conversão, o material fértil captura nêutrons e depois de decaimentos radioativos se transforma em material físsil. O Th-232 captura um nêutron (n, γ), transforma-se em Th-233 que decai para Pa-233, e, por fim, se converte em U-233 [5], como ilustrado na equação 1. O U-233 é altamente desejado em reatores de tório, que já é utilizado em reatores de água leve (LWR)[6], devido à sua alta probabilidade de fissão com nêutrons térmicos, tornando-o eficiente para sustentar a reação em cadeia e gerar energia [7].



A formação de plutônio ocorre quando o U-238 captura um nêutron e se converte em U-239 que decai para Np-239 e, por fim, em Pu-239 [7], como ilustrado na equação 2.



2. METODOLOGIA

O SERPENT [8] é um código baseado no método Monte Carlo para transporte de nêutrons e fótons de energia contínua, desenvolvido no Centro de Pesquisa Técnica VTT da Finlândia. Ele permite a simulação em geometrias complexas do transporte e interações de nêutrons, fótons e sistemas acoplados, sendo amplamente utilizado para o cálculo de distribuições de fluxo, potência e taxa de reação em células geométricas e materiais. Essa capacidade de reconstruir distribuições espaciais em forma funcional torna-o uma ferramenta poderosa para a análise de combustíveis nucleares.

2.1 Geometria modelada e condições de simulação

A simulação foi realizada com base em uma célula de combustível representativa contendo elementos combustíveis do tipo placa. A geometria modelada inclui o combustível, o revestimento e a água de refrigeração, detalhados na Fig. 1.

Para cada simulação, foram considerados cinco tipos de ligas metálicas: U10Zr[9], U20Zr[9], U20Pu10Zr[10], U10Mo[12] e U7,5Nb2,5Zr[2]. A Tab. 1 apresenta a composição isotópica detalhada de cada liga utilizada no estudo, incluindo as densidades atômicas dos principais isótopos presentes. As propriedades isotópicas foram obtidas do Kaeri [13] e configuradas no input do código SERPENT.

A composição isotópica de todas as ligas usadas podem ser encontradas na Tab. 1. A composição isotópica dos nuclídeos que não possuem enriquecimento estabelecido (Zr, Mo, Nb) foram retiradas da biblioteca Kaeri [13]. O SERPENT usa a biblioteca ENDF/B-VII como fonte



de dados . Parâmetros como o número de partículas simuladas (10.000 partículas e 1000 ciclos), as condições de fronteira foram configuradas como refletoras para simular um reator infinito.

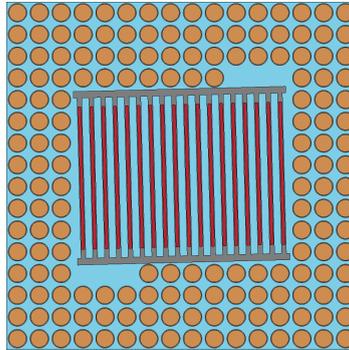


Fig. 1. Geometria detalhada do reator seed-blanked

Tab. 1: composição isotópica das ligas metálicas

Liga	% de Zr	% de U	% de Pu	% de Mo	% de Nb
U10Zr	10%	90% (15,36 w/o U-235)	-	-	-
U20Zr	20%	80%(18,58 w/o U-235)	-	-	-
U20Pu10Zr	10%	70%(20 w/o U-235)	20	-	-
U10Mo	-	90%(16,27 w/o U-235)	-	10	-
U7,5Nb2,5Zr	2,5%	90%(15,22 w/o U-235)	-	-	7,5

O reator epitérmico, foco deste estudo, opera com um espectro de nêutrons ajustado para energias intermediárias, onde as seções de choque de captura ressonante do Th-232 são maximizadas. Essa configuração é crucial para aumentar a produção de U-233 a partir do tório, utilizando as altas probabilidades de captura das seções de choque na região de ressonância [14]. O pitch do combustível, que influencia a moderação dos nêutrons, não é pré-definido e deve ser ajustado para otimizar a captura ressonante, maximizando a eficiência do ciclo de combustível.

3. RESULTADOS

Neste estudo, cinco ligas metálicas de tório e urânio foram avaliadas, com foco em parâmetros como o fator de multiplicação de nêutrons (k_{inf}), a eficácia dos nêutrons atrasados (β_{eff}), as taxas de conversão de Th-232 para U-233, o ponto de fusão das ligas e a produção de Pu-239. Entre elas, a liga U7,5Nb2,5Zr destacou-se pelo equilíbrio desses fatores, mostrando-se promissora para aplicações em reatores com maior razão de conversão a longo prazo. A liga escolhida deve também satisfazer critérios de segurança, como resistência à fusão, e oferecer condições neutrônicas ideais.



3.1 Fator de multiplicação infinito (k_{inf}) a partir do Serpent

O fator de multiplicação infinito (k_{inf}) é crucial porque reflete a capacidade de sustentação da reação em cadeia. Os valores iniciais de (k_{inf}) para as cinco ligas analisadas são apresentados na Tab. 2 juntamente com seus respectivos desvios padrão, que indicam a incerteza dos resultados simulados.

A liga U20Pu10Zr (Liga 4) iniciou com um k_{inf} baixo de 1,09325, o que se traduz em uma reatividade inicial de aproximadamente 8.539 pcm, caindo rapidamente para cerca de 3.559 pcm ao final do período. Isso confirma suas limitações para aplicação em reatores *breeders*, onde uma alta reatividade sustentada é essencial.

A liga U10Mo (Liga 2) começou com um k_{inf} de 1,15124, correspondendo a uma reatividade inicial de 13.122 pcm. Ao longo do tempo, a liga apresentou uma diminuição mais acentuada, terminando com uma reatividade de aproximadamente 7.052 pcm, mostrando que, embora seja eficiente no início, perde sua capacidade de sustentação mais rapidamente.

Por fim, a liga U7,5Nb2,5Zr (Liga 5) manteve-se com um k_{inf} inicial de 1,15412, resultando em uma reatividade inicial de cerca de 13.352 pcm, com um declínio gradual até cerca de 7.164 pcm ao longo do tempo. Essa liga equilibra bem a necessidade de alta reatividade e estabilidade, tornando-se uma excelente opção para reatores *breeders* que exigem operação de longa duração.

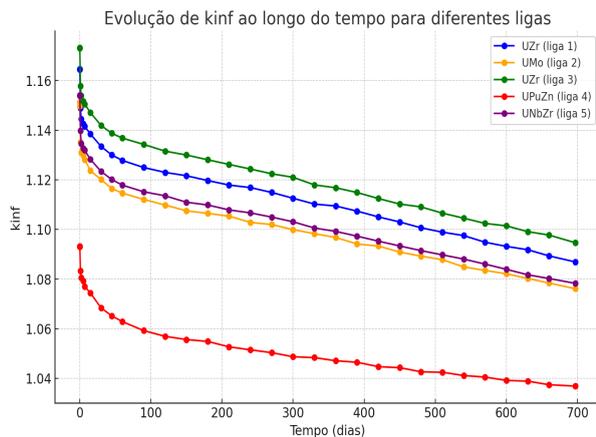


Fig. 1: Evolução De k_{inf} Ao Longo Do Tempo Para Diferentes Ligas (gráfico gerado no python)

Liga	k_{inf} Inicial	Desvio Padrão
UZr (liga 1)	1.16466	0.00033
UMo (liga 2)	1.15124	0.00034
UZr (liga 3)	1.17304	0.00033
UPuZn (liga 4)	1.09325	0.00039
UNbZr (liga 5)	1.15412	0.00034

Tab. 2: Valores iniciais de k_{inf} e Desvios Padrão

A Fig. 1 ilustra a evolução de k_{inf} ao longo do tempo para todas as ligas, com as respectivas barras de erro representando as incertezas. Observa-se que as ligas U10Zr (liga 1) e U20Zr (liga 3) mantêm valores de (k_{inf}) elevados por um período mais longo, tornando-as opções promissoras para reatores *breeders* de longa duração. A liga U20Pu10Zn (liga 4), por outro lado, mostra uma queda acentuada em (k_{inf}) logo no início, o que pode limitar sua aplicação em reatores de longa operação.

3.2. Análise de β_{eff}



O fator de eficácia dos nêutrons atrasados β_{eff} é um parâmetro fundamental para o controle da reatividade e a segurança operacional em reatores nucleares. Conforme ilustrado na Fig. 2, o valor de β_{eff} para as ligas analisadas apresenta variações significativas ao longo do tempo.

A liga U20Pu10Zn (liga 4) apresenta os menores valores de β_{eff} , com um valor inicial de 0.00554 e uma queda gradual até 0.00468 após 697 dias de operação. Esse comportamento implica em uma margem de controle de reatividade reduzida, o que pode limitar a flexibilidade operacional do reator durante as variações de potência.

Por outro lado, as ligas U10Zr (liga 1), U10Mo (liga 2) e U20Zr (liga 3) mostraram valores mais elevados de β_{eff} ao longo do tempo, apesar da terceira apresentar uma maior oscilação ao longo do tempo. Pelo comportamento semelhante no trio, ocorrendo oscilações não tão significativas, podem se apresentar como promissoras, já que é mantido uma reatividade controlável, porém deve-se atentar às ocorrências temporais.

Sobretudo, a liga contendo urânio e nióbio, como U7,5Nb2,5Zr, exibem valores de β_{eff} mais elevados e estáveis, proporcionando maior controle sobre a reatividade e maior segurança operacional. Essa característica é essencial para reatores que operam em regimes de potência variáveis, permitindo uma resposta mais controlada e segura às mudanças na demanda de energia.

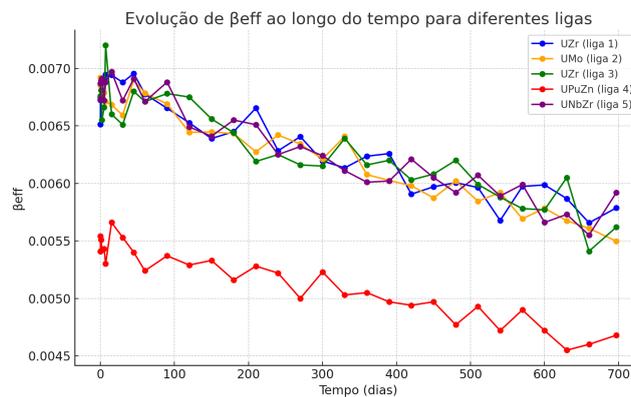


Figura 2: Evolução do Fator de Eficácia de Nêutrons Atrasados (β_{eff}) longo do tempo

3.3. Análise de conversão

A liga U20Pu10Zr apresentou a maior eficiência de conversão, estabilizando-se em torno de 0,85, destacando-se na produção de combustível fissil. No entanto, sua baixa estabilidade térmica e reatividade limitada comprometem sua viabilidade operacional. As ligas U10-20Zr e U7,5Nb2,5Zr, embora com conversões menores, demonstraram melhor desempenho em k_{inf} e β_{eff} , proporcionando um equilíbrio mais favorável para reatores *breeders*. Vê-se Fig. 3.

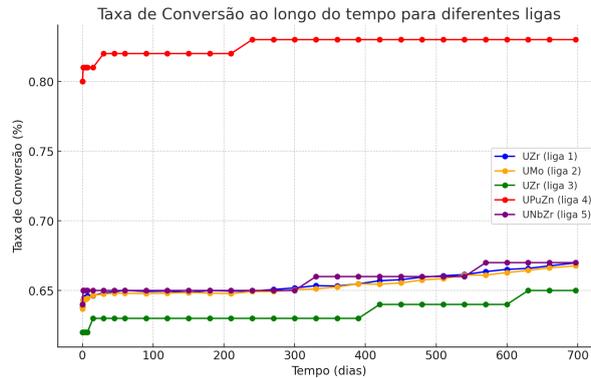


Fig. 3: Evolução do Fator de taxa de conversão ao longo do tempo.

3.4. Produção de Urânio-233 e Plutônio-239 pela captura de nêutrons

Observa-se na Fig.4 que, ao longo do tempo, todas as ligas apresentam um comportamento semelhante de aumento progressivo da fração de U-233 em relação ao Th-232 consumido. No entanto, a liga U20Pu10Zn (liga 4) destacou-se por apresentar uma taxa de conversão ligeiramente mais alta que as demais ligas, atingindo cerca de 0,81382% após 697 dias de operação. Esse resultado sugere que a liga U20Pu10Zn (liga 4) pode ser mais eficiente na conversão de Th-232 em U-233, o que é altamente desejável em reatores *breeders*.

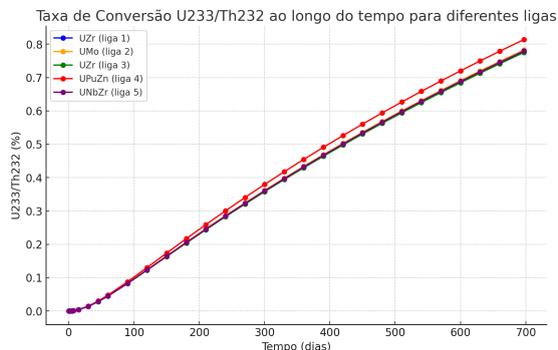


Fig. 4: Taxa de Conversão U-233/Th-232 ao longo do tempo para diferentes ligas analisadas.

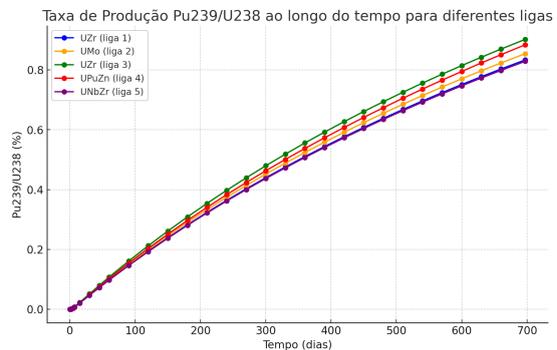


Fig. 5: Taxa de Produção Pu-239/U-238 ao longo do tempo para diferentes ligas analisadas.

Por outro lado, as ligas U10Zr (liga 1) e U7,5Nb2,5Zr (liga 5) mostraram um comportamento muito próximo, com taxas de conversão de 0,7774% e 0,7798%, respectivamente, após o mesmo período. Apesar de estarem ligeiramente abaixo da U20Pu10Zn (liga 4), essas ligas também demonstram um bom desempenho ao longo do ciclo de combustível, sendo opções viáveis para reatores *breeders*. A liga U10Mo (liga 2) também apresentou uma taxa de conversão similar à U10Zr (liga 1), chegando a 0,7826%, sugerindo uma alta eficiência na produção de U-233 a partir do Th-232.

Esses resultados indicam que, apesar de todas as ligas serem adequadas para a conversão de Th-232 em U-233, a U20Pu10Zn (liga 4) se destaca como a opção mais eficiente, seguida de perto pelas ligas U10Zr (liga 1), U7,5Nb2,5Zr (liga 5) e U10Mo (liga 2), todas elas com um desempenho semelhante em termos de conversão de combustível ao longo do tempo.



A análise comparativa dos resultados na Fig. 5 mostra que a liga U7,5Nb2,5Zr também mantém uma taxa de produção de Pu-239 elevada e estável, posicionando-se como uma escolha equilibrada para operações de longa duração. Já a liga U20Pu10Zr, com desempenho inferior, apresenta limitações tanto na eficiência da conversão de U-238 quanto na estabilidade da reatividade, comprometendo sua aplicabilidade.

Portanto, as ligas U10Zr e U7,5Nb2,5Zr se destacam como as opções mais promissoras para reatores *breeders*, oferecendo uma combinação favorável de conversão eficiente e controle operacional, enquanto a liga U20Pu10Zr é menos indicada devido às suas limitações de desempenho.

A Fig.5 mostra a produção de Pu-239 ao longo do tempo, evidenciando que a liga 3 de U20Zr apresenta a maior taxa de crescimento, o que favorece a formação contínua de combustível físsil. Por outro lado, a liga U20Pu10Zr apresenta a menor taxa de crescimento devido à sua composição inicial já contendo plutônio, que afeta a medição da produção atribuída exclusivamente à captura de nêutrons.

3.5. Ponto de fusão das ligas

A resistência térmica de cada liga foi avaliada com base nos pontos de fusão obtidos (Tab. 3). O ponto de fusão mais alto foi registrado para a liga U7,5Nb2,5Zr (1523 K), sugerindo alta resistência a temperaturas operacionais elevadas, o que é crucial para a longevidade do combustível em reatores. A liga U20Pu10Zr, com o ponto de fusão mais baixo (1350 K), poderia apresentar limitações devido à sua menor resistência térmica.

Tab. 3: Pontos de Fusão das Ligas Metálicas Analisadas

Liga	Ponto de Fusão (K)
U10Zr	1452 [9]
U20Zr	1521[9]
U20Pu10Zr	1350 [11]
U10Mo	1455 [12]
U7,5Nb2,5Zr	1523 [2]

4. CONCLUSÃO

A análise realizada neste estudo demonstrou que a liga U20Zr (liga 3) é a opção mais promissora para aplicação em reatores *breeders* epitérmicos, devido ao seu desempenho superior em termos de produção de Pu-239, controle eficaz da reatividade (β_{eff}) e boa conversão de Th-232 em U-233. Essa liga manteve valores elevados de k_{inf} ao longo do ciclo de operação, tornando-se uma escolha viável para reatores de longo prazo. A presença de picos de ressonância nas seções de choque de captura do Th-232 favorece o uso de um espectro epitérmico, maximizando a produção de U-233.

A liga U7,5Nb2,5Zr (liga 5) também se mostrou uma opção equilibrada, apresentando boa estabilidade térmica e produção significativa de plutônio, embora com desempenho ligeiramente inferior à U20Zr (liga 3) em termos de eficiência global. Por outro lado, a liga U20Pu10Zr (liga 4), apesar de alcançar a maior taxa de conversão de tório, enfrentou limitações iniciais devido à necessidade de subtração da quantidade inicial de plutônio presente, o que compromete sua estabilidade operacional no início do ciclo.

Observou-se que a liga U20Zr (liga 3) destaca-se como a melhor escolha para reatores *breeders* de tório e urânio, equilibrando segurança, eficiência e estabilidade. A otimização do pitch do



combustível e a definição do espectro de nêutrons epitérmico são etapas futuras necessárias para maximizar a performance do reator. Além disso, estudos adicionais sobre o comportamento dessas ligas sob irradiação e análises de viabilidade econômica são recomendados para confirmar a aplicabilidade da liga U20Zr (liga 3) em operações de longo prazo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos financiadores FAPERJ e CNPq por contribuírem com o desenvolvimento tecnológico do país, fomentando orçamento para a aquisição de maquinários necessários para a realização deste trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Balbaud, F., et al. “A NEA Review on Innovative Structural Materials Solutions, Including Advanced Manufacturing Processes for Nuclear Applications Based on Technology Readiness Assessment”. *Nuclear Materials and Energy*, vol. 27, junho de 2021, p. 101006.
- [2] LOPES, D. A. Inteiração entre precipitação e recristalização em liga de urânio contendo nióbio e zircônio (Mulberry alloy). 2014, Tese (Doutorado), Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, EPUSP, São Paulo - SP.
- [3] Galperin, Alex, et al. “Thorium Fuel for Light Water Reactors—Reducing Proliferation Potential of Nuclear Power Fuel Cycle”. *Science & Global Security*, vol. 6, n° 3, junho de 1997, p. 265–90.
- [4] Stacey, W. M. *Nuclear Reactor Physics*. Wiley, 2007.
- [5] Glaser, A. "On the Proliferation Potential of Uranium Fuel for Nuclear Reactors." *Science & Global Security*, vol. 14, no. 1, 2006, pp. 1-24.
- [6] Du Toit, Maria Hendrina, et al. “Review of Thorium-Containing Fuels in LWRs”. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 170, maio de 2024, p. 105136.
- [7] Kazimi, M. S., et al. *Thorium Fuel for Nuclear Energy: Overview*. Massachusetts Institute of Technology, 2010.
- [8] <<https://serpent.vtt.fi/serpent/>> acessado em 15/09/2024
- [9] Abdelghafar Galahom, A., et al. “Investigation of the Possibility of Using a Uranium–Zirconium Metal Alloy as a Fuel for Nuclear Power Plant AP-1000”. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 406, maio de 2023, p. 112257.
- [10] Janney, Dawn E., et al. “A Critical Review of the Experimentally Known Properties of U-Pu-Zr Alloys. Part 2: Thermal and Mechanical Properties”. *Nuclear Technology*, vol. 206, n° 1, janeiro de 2020, p. 1–22
- [11] Carmack, W. J., et al. «Metallic Fuels for Advanced Reactors». *Journal of Nuclear Materials*, vol. 392, n.º 2, julho de 2009, pp. 139–50.
- [12] Yun, Di, et al. “In Situ TEM and Synchrotron Characterization of U–10Mo Thin Specimen Annealed at the Fast Reactor Temperature Regime”. *Materials Characterization*, vol. 110, dezembro de 2015.
- [13] <<https://atom.kaeri.re.kr/nuchart/>> acessado em 21/10/2024
- [14] Duderstadt, J. J., Hamilton, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. Wiley, 1976. Lamarsh, J. R., *Introduction to Nuclear Reactor Theory*.sse