

MODELADO DE LA PRECIPITACIÓN DE HIDRUROS ORIENTADOS DURANTE EL ALMACENAMIENTO DE COMBUSTIBLES NUCLEARES GASTADOS

MODELLING OF THE PRECIPITATION OF ORIENTED HYDRIDES DURING THE STORAGE OF SPENT NUCLEAR FUELS

Francisco Rotea^{a,b}, Ezequiel Goldberg^b, Mauricio E. Cazado^b, María E. de las Heras^c,
Juan I. Mieza^{a,c} y Alejandro Soba^{b,d}

^aComisión Nacional de Energía Atómica, Instituto Sabato, Av. Gral. Paz 1499, San Martín, Buenos Aires, Argentina, <https://www.isabato.edu.ar/>

^bComisión Nacional de Energía Atómica, Gerencia de Área Ciclo del Combustible Nuclear, Sección Códigos y Modelos, Av. Gral. Paz 1499, San Martín, Buenos Aires, Argentina, <http://www.cnea.gov.ar/>

^cComisión Nacional de Energía Atómica, Gerencia de Área Energía Nuclear, División Hidrógeno en Materiales, Av. Gral. Paz 1499, San Martín, Buenos Aires, Argentina, <http://www.cnea.gov.ar/>

^dConsejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Godoy Cruz 2290, CABA, Buenos Aires, Argentina, <https://www.conicet.gov.ar/>

Palabras clave: Hidrógeno, hidruros, reorientación, almacenamiento en seco, combustibles nucleares gastados.

Resumen. Las condiciones de tensión y temperatura a las que se somete a la vaina de un combustible nuclear gastado durante el almacenamiento en seco hacen que el hidrógeno ingresado durante el período de operación pueda precipitar en forma de hidruros orientados radialmente, lo cual puede degradar significativamente las propiedades mecánicas de la vaina. En este trabajo se presenta la implementación de un modelo computacional para simular el fenómeno de reorientación de hidruros, con el objetivo de integrarlo al módulo de almacenamiento en seco del código DIONISIO. El modelo fue validado mediante experimentos propios, así como también con experimentos disponibles en la literatura. En general, se obtuvo un buen acuerdo entre los resultados medidos y simulados.

Keywords: Hydrogen, hydrides, reorientation, dry storage, spent nuclear fuels.

Abstract. The stress and temperature conditions to which a spent nuclear fuel cladding is subjected during dry storage mean that the hydrogen absorbed during the operation period can precipitate in the form of radially oriented hydrides, which can significantly degrade the mechanical properties of the cladding. This paper presents the implementation of a computational model to simulate the hydride reorientation phenomenon, with the aim of integrating it into the dry storage module of the DIONISIO code. The model was validated through our own experiments, as well as with experiments available in the literature. In general, a good agreement between measured and simulated results was obtained.

1. INTRODUCCIÓN

El combustible nuclear que ya no puede mantener las reacciones de fisión de manera eficiente, y que ya no puede utilizarse como combustible propiamente dicho, se denomina “combustible gastado”. Una vez que el combustible gastado se extrae del reactor, se requiere un periodo mínimo de almacenamiento para alcanzar el decaimiento inicial de los radioisótopos, de manera tal que permita cargarlo en un contenedor para su transporte, ya sea a otro lugar de almacenamiento, a una instalación de reprocesado para su posterior reciclaje, o a una instalación de acondicionamiento para su eliminación. Esta desintegración inicial de los radioisótopos se lleva a cabo principalmente bajo el agua, en piletas de combustible gastado situadas en las cercanías de la vasija del reactor. Las piletas de almacenamiento de combustible gastado tienen capacidad para gestionar elevadas cargas térmicas y ofrecen flexibilidad para su futura manipulación. Sin embargo, es un proceso activo y costoso de mantener, ya que el agua debe ser continuamente tratada químicamente y monitoreada. Además, el agua usualmente contiene radiactividad (debido a la formación de tritio, especialmente), con lo cual representa mayores riesgos en caso de accidentes severos (El-Samrah et al., 2021). Por estas razones, el almacenamiento en seco pasa a ser una alternativa viable luego de 5 a 10 años de almacenamiento en pileta. Estos sistemas consisten generalmente en un contenedor metálico donde se sitúa el material radiactivo, rodeado por una estructura de concreto. El almacenamiento en seco cuenta con varias ventajas, entre las que se puede nombrar la nula generación de desechos líquidos, los sistemas de remoción de calor pasivo, una menor probabilidad de corrosión y mayor facilidad para el transporte (por ejemplo, para el caso en que sea necesario el transporte a un repositorio geológico permanente). Además, como se tienen contenedores separados (incluso, en algunas facilidades, bajo tierra) la posibilidad de liberación de radiactividad al ambiente disminuye significativamente.

Durante el período de operación de un reactor nuclear, parte del hidrógeno generado por el proceso de oxidación de la vaina es absorbido por la misma, pudiendo precipitar en forma de hidruros. En condiciones normales de funcionamiento, estos hidruros se orientan preferencialmente en la dirección circunferencial. Esto se debe principalmente a la fuerte textura de los tubos, producto de la microestructura generada por los procesos de laminado en frío y los tratamientos térmicos de relajación de tensiones. Sin embargo, durante el proceso de secado para el posterior almacenamiento en seco, los tubos de vainas de combustible gastado se exponen a temperaturas cercanas a los 400 °C, lo cual provoca la disolución de estos hidruros. Paralelamente, durante la operación normal del reactor se produce la acumulación de productos de fisión gaseosos procedentes de las pastillas combustibles, algunos de los cuales permanecen dentro de la pastilla, mientras que otros difunden a los bordes de grano o al volumen libre de la barra combustible. El hinchamiento de la pastilla y la liberación de gases de fisión, productos de la presencia de estos átomos de gas, da lugar al desarrollo de una presión interna y, por lo tanto, a una tensión circunferencial (*hoop stress*) dentro de los tubos. A la temperatura máxima de las etapas de secado, si las condiciones lo permiten, se generan tensiones circunferenciales que pueden alcanzar los 140 MPa (Billone et al., 2013). Al enfriarse, si la tensión inducida es superior a un umbral de tensión crítico, se produce la precipitación preferencial de hidruros radiales en lugar de circunferenciales. Se ha comprobado que la presencia de este tipo de hidruros compromete notablemente la integridad mecánica de la vaina (Woo y Lee, 2023), con lo cual resulta ser un mecanismo de degradación a tener en cuenta en cuestiones de operación, regulación, manipulación y transporte seguro de los combustibles gastados.

En este contexto, y teniendo en cuenta que el período de almacenamiento de un combustible se puede extender a más de cien años (Konarski et al., 2021), es de suma importancia contar con

herramientas de simulación numérica validadas mediante experimentos para estudiar estos procesos. En este trabajo se presenta la implementación de un modelo computacional para simular el fenómeno de reorientación de hidruros, con el objetivo de integrarlo al módulo de almacenamiento en seco del código DIONISIO, un código de combustible desarrollado por la Sección Códigos y Modelos de la Comisión Nacional de Energía Atómica. La validación del modelo se realizó mediante experimentos propios con vainas de Zry-4 utilizadas en la Central Nuclear Atucha II, así como también con experimentos disponibles en la literatura y que comprenden distintos tipos de historias termomecánicas.

2. MODELO

El modelo implementado se basa en los trabajos de [Kolesnik et al. \(2018\)](#) y [Aliev et al. \(2021\)](#). El modelo permite calcular la evolución de la concentración de hidrógeno en solución sólida (C_s), y en hidruros tangenciales (C_t) y radiales (C_r), teniendo en cuenta los procesos de precipitación y disolución de hidruros. Durante el proceso de precipitación,

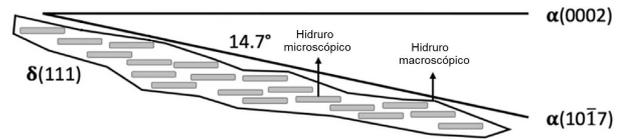


Figura 1: Conjunto de hidruros microscópicos que conforman un hidruro macroscópico ([Motta et al., 2019](#)).

se genera un campo de deformaciones en la matriz metálica que favorece la precipitación de otros hidruros en las cercanías. De esta manera, se generan hidruros macroscópicos (del orden de los micrones) compuestos por la sumatoria de numerosos hidruros microscópicos (del orden de los nanómetros) organizados en una estructura tipo “mazo de cartas” ([Motta et al., 2019](#)), tal como se observa en la Figura 1. El modelo considera un *stack* equivalente de hidruros macroscópicos, que se compone de dos ramas: una tangencial y una radial. Ambas ramas tienen un espesor h_{stack} [m], e incrementan su tamaño a partir de la precipitación de nuevos hidruros, dependiendo de la frecuencia de nucleación de los mismos. Partiendo de la teoría clásica de nucleación, se puede escribir la fracción de hidruros radiales como:

$$F_r = \frac{dC_r}{dC_r + dC_t} = \left[1 + f_0 \exp\left(\frac{\sigma\Omega\Delta\varepsilon}{kT}\right) \frac{C_s - TSSp_t}{C_s - TSSp_r} \right]^{-1} \quad (1)$$

donde f_0 es un parámetro de ajuste que caracteriza la relación entre sitios de nucleación tangenciales y radiales [/], Ω es el volumen de un núcleo de hidruro [m^3], σ es la tensión externa [Pa], $\Delta\varepsilon = \varepsilon_t - \varepsilon_r$ es la diferencia entre las expansiones lineales en la dirección tangencial para los hidruros radiales y tangenciales [/], k es la constante de Boltzmann [J/K], y T es la temperatura absoluta [K]. Las curvas de solubilidad sólida terminal para la precipitación $TSSp_i$ y la disolución $TSSd_i$ con $i = r, t$ para hidruros radiales y tangenciales correspondientemente, están dadas por:

$$\begin{aligned} TSSp_{r/t} &= TSSp \exp\left(-\frac{\sigma\nu\varepsilon_{r/t}}{kT}\right) \\ TSSd_{r/t} &= TSSd \exp\left(-\frac{\sigma\nu\varepsilon_{r/t}}{kT}\right) \end{aligned} \quad (2)$$

donde ν es el volumen de un átomo de hidrógeno dentro del hidruro.

Luego, las ecuaciones de balance de hidrógeno para la precipitación y disolución de hidruros están dadas por:

■ Precipitación de hidruros:

$$\begin{cases} \frac{dC_r}{dt} = F_r \cdot J & \text{si } C_s > \text{TSSp}_r \\ \frac{dC_t}{dt} = (1 - F_r) \cdot J & \text{si } C_s > \text{TSSp}_t \\ \frac{dC_s}{dt} = -\frac{dC_r}{dt} - \frac{dC_t}{dt} \end{cases}$$

■ Disolución de hidruros:

$$\begin{cases} \frac{dC_r}{dt} = j_r & \text{si } C_s < \text{TSSd}_r \\ \frac{dC_t}{dt} = j_t & \text{si } C_s < \text{TSSd}_t \\ \frac{dC_s}{dt} = -\frac{dC_r}{dt} - \frac{dC_t}{dt} \end{cases} \quad (3)$$

donde J hace referencia al flujo de átomos de hidrógeno que difunden desde la matriz metálica hacia los hidruros [wt ppm/s], que está dada por la suma de los flujos difusivos hacia los hidruros radiales (j_r) y tangenciales (j_t) por separado:

$$J = j_r + j_t \quad (4)$$

siendo:

$$j_{r/t} = 2\pi D_H w_{stack} (C_s - \text{TSS}_{r/t}) C_{stack} \quad (5)$$

donde D_H es el coeficiente de difusión del hidrógeno [m^2/s], w_{stack} es el espesor del stack de hidruros [m], y C_{stack} es la concentración de stacks dentro de la matriz metálica [stacks/ m^3]. En la Ecuación 5 se asume que el flujo de hidrógeno hacia el stack de hidruros se da en una esfera que posee un diámetro efectivo w_{stack} . Por último, es importante destacar que el modelo permite tener en cuenta dos efectos de importancia en el proceso de precipitación de hidruros: el efecto de la textura del material y el efecto memoria. La textura cristalográfica del material es importante para simular correctamente la orientación de los hidruros cuando no hay tensiones externas aplicadas. Por otra parte, cuando los hidruros precipitan existe una dilatación volumétrica (de alrededor del 17 %) que resulta en la emisión de lazos de dislocación. Estas dislocaciones pueden permanecer en la matriz metálica incluso luego de la disolución de los hidruros, y contribuyen a la nucleación de hidruros con la misma orientación que los que estaban previamente nucleados. Por otro lado, exposiciones prolongadas a altas temperaturas pueden disminuir el número de dislocaciones. Ambos efectos se introducen al modelo mediante modificaciones a la Ecuación 1. El detalle de su implementación se puede consultar en [Kolesnik et al. \(2018\)](#). En la Tabla 1 se muestran los principales parámetros del modelo.

Parámetro	Valor	Unidad	Ref.
ε_r	0,0720	-	Puls (2012)
ε_t	0,0458	-	Puls (2012)
ν	$1,7 \times 10^{-29}$	m^3	Puls (2012)
C_{stack}	1×10^{13}	stacks/ m^3	Kolesnik et al. (2018)
w_{stack}	1×10^{-6}	m	Kolesnik et al. (2018)
f_0	5000	-	Kolesnik et al. (2018)
Ω	$1,6 \times 10^{-26}$	m^3	Kolesnik et al. (2018)
D_H	$7 \times 10^{-7} \exp(-5360/T)$	m^2/s	Kearns (1972)
TSSp	$6,644 \times 10^4 \exp(-29630/RT)$	wt ppm	Zanellato et al. (2012)
TSSd	$5,108 \times 10^5 \exp(-456100/RT)$	wt ppm	Zanellato et al. (2012)

Tabla 1: Principales parámetros del modelo.

3. EXPERIMENTOS

A partir de una vaina de Zry-4 como las utilizadas en el reactor de la Central Nuclear Atucha II (CNAII), se seccionaron muestras cilíndricas de 10 cm para ser cargadas con hidrógeno. El hidrógeno presente en el material como fue recibido es inferior a 4 wt ppm. El procedimiento de la carga de hidrógeno se realizó en forma gaseosa en un equipo de tipo Sievert, que cuenta con los volúmenes calibrados y a partir de mediciones de presión y temperatura, utilizando la ley de los gases ideales, se puede conocer el hidrógeno ingresado en cada muestra. Se cargaron diez secciones, cinco con una concentración de 20 wt ppm y otras cinco con 100 wt ppm. A todas ellas se les realizó un tratamiento térmico de homogeneización de hidruros que luego se verificó por microscopía óptica.

Posteriormente, a cada una de estas secciones se les realizó un ensayo de reorientación de hidruros (en inglés HRT: *Hydride Reorientation Test*). Estos ensayos consistieron en la presurización interna con argón de cada una de estas secciones cilíndricas, luego en calentar la muestra hasta 400 °C donde todo el hidrógeno está en solución sólida y finalmente en un enfriamiento controlado hasta temperatura ambiente. Las variables estudiadas en este trabajo fueron la presión interna, que se varió de 90 hasta 175 bar, y la velocidad de enfriamiento en 3 y 0,3 °C/h. Finalmente, luego del ensayo HRT, se hizo un corte transversal en cada una de las muestras ensayadas y con una preparación metalográfica se observaron los hidruros en el espesor de la pared de la vaina para cuantificar el grado de reorientación.

Para realizar la cuantificación de hidruros radiales a partir de las micrografías, se hizo uso de una herramienta de software libre denominada HAPPy (*Hydride Analysis Package in Python*) (Maric et al., 2022). En líneas generales, el software trabaja de la siguiente manera:

1. En primer lugar, se tiene una etapa de pre-procesamiento, donde la micrografía es recordada, se minimiza el contraste entre distintos granos de la microestructura, y se corrigen fluctuaciones de luminosidad y contraste.
2. Luego se aplica una máscara de intensidad a modo de umbral, de forma tal de aislar los hidruros de la matriz.
3. Por último, se aplica la transformada de Hough para calcular la distribución de orientaciones de los distintos segmentos de hidruro detectados en el paso anterior.

Una vez que se tienen los ángulos y longitudes de los segmentos de líneas que representan los hidruros, es posible calcular la fracción de hidruros radiales (RHF) de acuerdo a alguno de los múltiples métodos disponibles en la literatura. Para este trabajo, se utiliza la definición de Chu et al. (2008):

$$\text{RHF} = \frac{\Sigma L_r}{\Sigma L_r + \Sigma L_t} \quad (6)$$

donde ΣL_r hace referencia a la longitud total de todos los hidruros radiales, considerados en el rango 50°-90°, y ΣL_t hace referencia a la longitud total de todos los hidruros tangenciales, considerados en el rango 0°-40°. Los hidruros con orientaciones en el rango 40°-50° no son tenidos en cuenta en la clasificación.

En la Figura 2 se observa, a modo de ejemplo, el procesamiento de una micrografía con el software HAPPy. Las condiciones experimentales se corresponden a una muestra con una concentración de 20 wt ppm, sometida a una presión de 175 bar y enfriada a una velocidad de 3 °C/h. A la izquierda se muestra la micrografía original, y a la derecha la micrografía luego de aplicado el procesamiento descrito previamente. Se puede observar que el contorno del

tubo es recortado, los hidruros son aislados (se muestran en color blanco), y la aplicación de la transformada de Hough (líneas verdes dentro de los segmentos de hidruro detectados, en color rojo). La fracción de hidruros radiales calculada en este caso resultó ser $RHF = 0,379$.

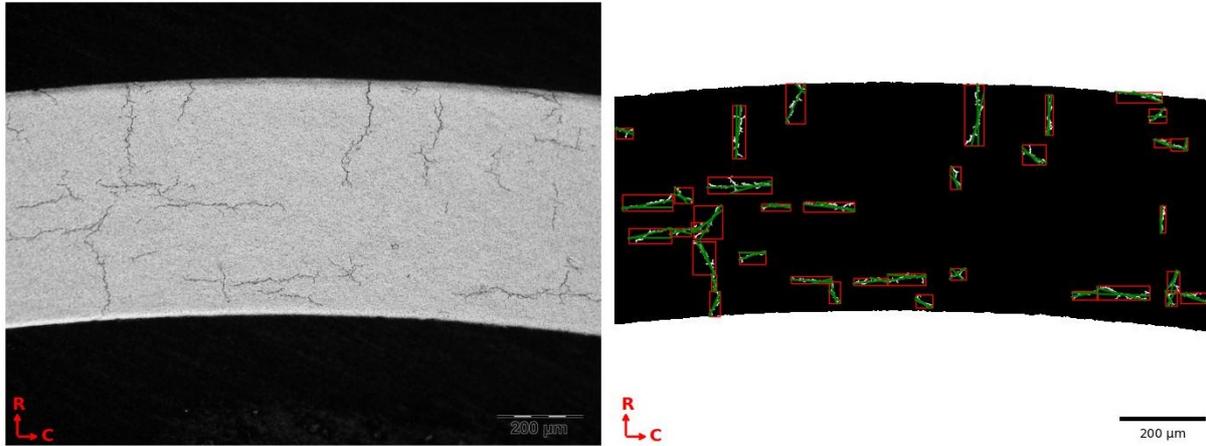


Figura 2: Micrografía original (izq.) y procesada mediante HAPPy (der.) para una muestra con una concentración de 20 wt ppm sometida a una presión de 175 bar y enfiada a una velocidad de 3 °C/h.

4. RESULTADOS

En primer lugar, la implementación del modelo fue verificada mediante la comparación con datos experimentales de la literatura. En las Secciones 4.1 y 4.2 se presentan dos resultados de la serie de experimentos utilizados para realizar la validación. Finalmente, en la sección 4.3 se muestran los resultados de modelo comparados con los datos experimentales obtenidos de las vainas de la CNAII.

4.1. Experimentos de Hardie y Shanahan

Los experimentos de [Hardie y Shanahan \(1975\)](#) contienen mediciones de orientación de hidruros bajo diferentes tensiones en muestras de Zr-2.5 %Nb cargadas con 100 wt ppm de hidrógeno. Las muestras fueron calentadas a una temperatura de 400 °C por una hora, y luego en-

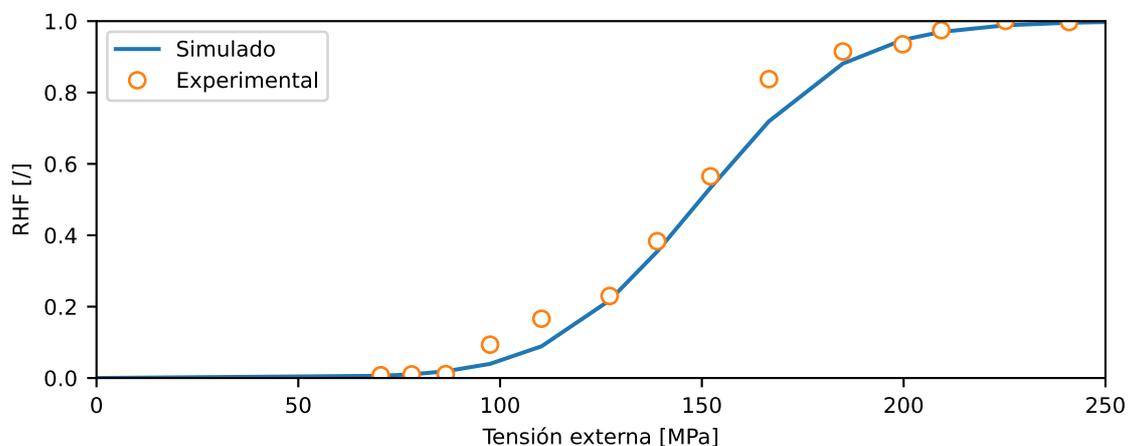


Figura 3: Resultados experimentales y simulados para los experimentos de [Hardie y Shanahan \(1975\)](#).

friadas a una velocidad de $3,3\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ (de $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $300\text{ }^{\circ}\text{C}$), $2,5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ (de $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $200\text{ }^{\circ}\text{C}$), y $1,7\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ (de $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $100\text{ }^{\circ}\text{C}$). En la Figura 3 se muestran los resultados experimentales obtenidos, así como también los resultados del modelo. Como se puede observar, el modelo logra reproducir de manera correcta el aumento de la fracción de hidruros radiales con la tensión. Por otra parte, se puede notar que la tensión umbral para la reorientación se encuentra cercana a los 90 MPa.

4.2. Experimentos de Chu et al.

En los experimentos de Chu et al. (2008), muestras de Zry-4 fueron calentadas a $400\text{ }^{\circ}\text{C}$, se mantuvieron a esa temperatura durante 2 h, y se enfriaron hasta alcanzar los $170\text{ }^{\circ}\text{C}$ a una velocidad de $1\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$, mientras la tensión circunferencial se mantenía a un valor constante de 160 MPa. Los experimentos se realizaron para distintas concentraciones de hidrógeno, que variaron entre 100 wt ppm a 600 wt ppm. Los resultados se muestran en la Figura 4.

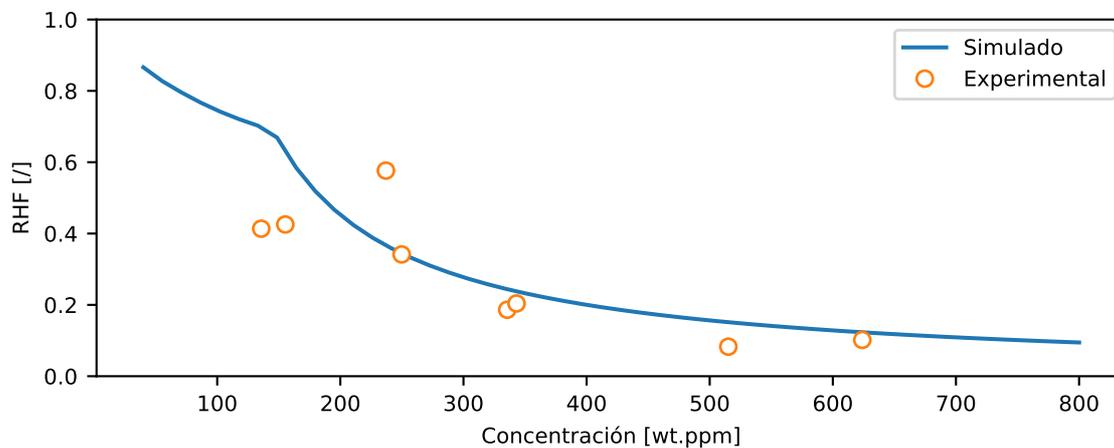


Figura 4: Resultados experimentales y simulados para los experimentos de Chu et al. (2008).

En este caso, se puede notar que la fracción de hidruros radiales tiende a disminuir con el aumento de la concentración. Esto se debe a que, a medida que aumenta la cantidad de hidrógeno en la muestra, el experimento comienza con una cantidad cada vez mayor de hidruros tangenciales, ya que la temperatura de $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ no es suficiente para provocar la disolución total de los mismos. De esta manera, la presencia de estos hidruros al comienzo del experimento conduce a un límite máximo a la fracción de hidruros reorientados que puede alcanzarse, ya que los mismos permanecen sin disolverse a lo largo del experimento.

4.3. Experimentos en vainas de CNAII

Por último, en la Figura 5 se muestran los resultados de la simulación realizada para uno de los experimentos detallados en la Sección 3, correspondiente a muestras con una concentración de hidrógeno de 100 wt ppm enfriadas a $3\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{h}$. Se observa un buen acuerdo del modelo con los datos experimentales. Con respecto a las muestras con un contenido de 20 wt ppm, se observó que la reorientación de los hidruros ocurría preferentemente en la región más cercana al diámetro externo de la vaina. Esto sugiere la posible existencia de un gradiente de tensiones a lo largo del espesor del tubo, probablemente originado por tensiones residuales del proceso de fabricación. Esta hipótesis está actualmente siendo evaluada mediante mediciones de rayos-X. En caso de comprobarse la existencia de un gradiente de tensiones en la muestra, el modelo

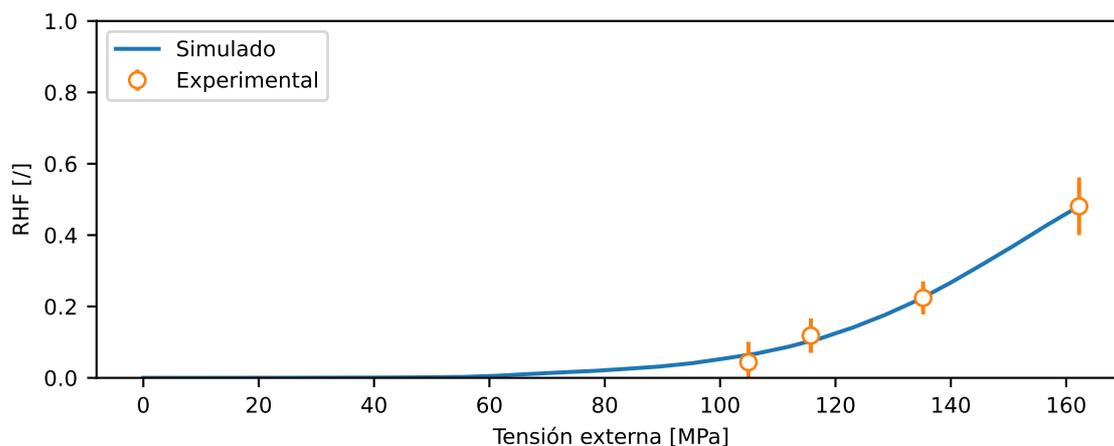


Figura 5: Resultados experimentales y simulados para los experimentos realizados en vainas de la CNAII con 100 wt ppm de hidrógeno y enfriada a 3 °C/h.

implementado deberá ser adecuadamente modificado. El trabajo de Lee et al. (2018) presenta condiciones similares, donde muestras de Zry-4 cargadas con hidrógeno fueron sometidas a un ensayo de tracción de anillo uniaxial (*uniaxial constant ring tensile test*) en condiciones de temperatura típicas de almacenamiento en seco. Este ensayo produce una distribución de tensiones de tracción y compresión a lo largo del espesor del tubo. En estas condiciones, al cuantificar el grado de reorientación de los hidruros en función de la concentración de hidrógeno, se observa un comportamiento claramente diferenciado en dos regiones: (a) una región donde el contenido de hidrógeno se encuentra por debajo de la curva de disolución, en la cual la reorientación aumenta con la concentración y la tensión umbral disminuye con la concentración; y (b) una región donde el contenido de hidrógeno es mayor a la curva de disolución, en la cual el grado de reorientación aumenta y la tensión umbral disminuye en función de la concentración. El modelo presentado en este trabajo predice adecuadamente los resultados correspondientes a la región (b) (por ejemplo, ver Figura 4 de la sección previa). Esto se atribuye a que el modelo fue ajustado con datos provenientes de experimentos con concentraciones de hidrógeno relativamente altas, principalmente debido a que el contenido de hidrógeno típico en una vaina de combustible gastado varía entre 300 y 600 wt ppm (Kim et al., 2013). Sin embargo, una particularidad de las centrales nucleares argentinas es el bajo nivel de quemado alcanzado por sus combustibles, lo cual conduce a menores concentraciones de hidrógeno en la vaina. Por esta razón, es necesario incorporar al modelo una descripción de la región (a) mencionada previamente. Una posible explicación a este comportamiento fue propuesta por Lee et al. (2018), quienes señalaron que, a medida que aumenta el contenido de hidrógeno disuelto, se incrementa el número de átomos disponibles para difundir hacia las regiones de mayor tensión, donde pueden precipitar como hidruros radiales y aumentar la RHF.

En la Figura 6 (a) se muestra, a modo de ejemplo, la evolución de hidrógeno en solución sólida (C_s) y en hidruros tangenciales (C_t) y radiales (C_r) para un determinado conjunto de parámetros experimentales (concentración de 100 wt ppm, velocidad de enfriamiento de 3 °C/h y 125 bar de presión). Se puede observar que el experimento comienza con todo el hidrógeno disuelto, hasta que en un punto determinado del proceso de enfriamiento (50 h, aproximadamente) se alcanza la curva de precipitación para los hidruros tangenciales, con lo cual se da inicio al proceso de nucleación de hidruros con esta orientación preferencial. Unas horas más tarde, antes de alcanzar las 60 h, comienza la precipitación de hidruros radiales. De esta manera,

la fracción de hidruros radiales (RHF) comienza a aumentar, tal como se muestra en la Figura 6 (b). Las condiciones de tensión hacen que, en este caso particular, sea más preponderante la precipitación de hidruros tangenciales, lo cual conduce a una fracción de hidruros radiales de al final del experimento de $RHF = C_r / (C_r + C_t) \approx 20 / (20 + 70) = 0,22$. Este valor coincide adecuadamente con el resultado experimental obtenido.

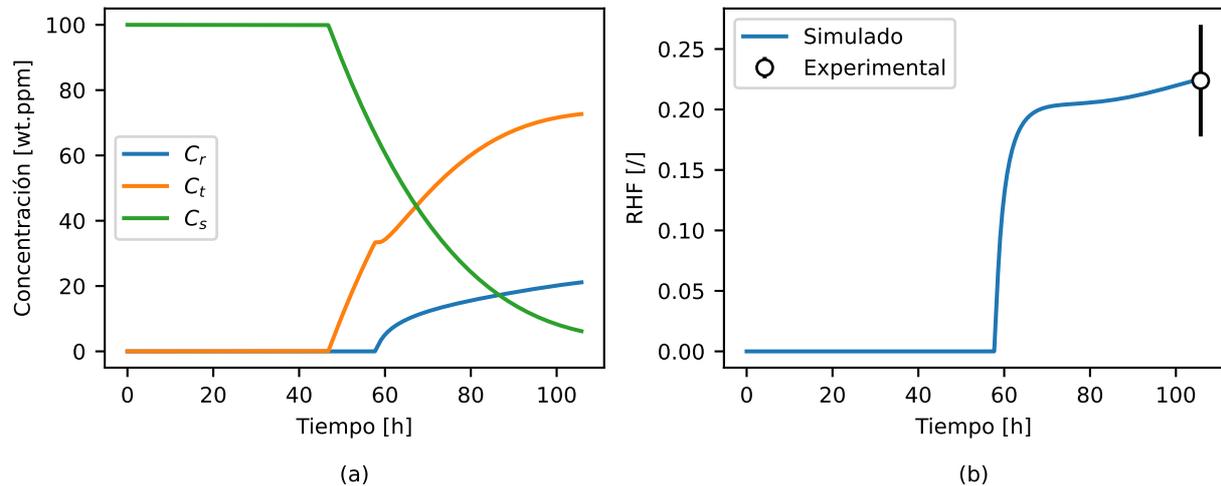


Figura 6: (a) Evolución de la concentración de hidrógeno en solución sólida, y en hidruros tangenciales y radiales, y (b) Evolución de la fracción de hidruros radiales. El gráfico se corresponde a una muestra de 100 wt ppm, enfriada a una tasa de $3\text{ }^\circ\text{C/h}$ y sometida a una presión de 125 bar.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un modelo computacional para simular el fenómeno de reorientación de hidruros en vainas de elementos combustibles bajo condiciones de almacenamiento en seco. Por otra parte, se presentaron los detalles de una colaboración con la División Hidrógeno en Materiales (CNEA), en la cual se realizaron experimentos propios de reorientación de hidruros con vainas de la Central Nuclear Atucha II (CNAII). Por último, la implementación de modelo fue validada a partir de datos experimentales de la literatura. Luego, el modelo fue aplicado para simular el comportamiento de las vainas de la CNAII. Los resultados muestran que el modelo predice adecuadamente la fracción de hidruros radiales para la concentración de 100 wt ppm. Para el caso de menores concentraciones, es necesario continuar con el análisis experimental.

Una de las limitaciones del modelo, tal como está formulado actualmente, es que no considera el efecto de la difusión del hidrógeno disuelto debido a los gradientes de concentración, temperatura y tensión (Motta et al., 2019). Como trabajo futuro, se propone acoplar el modelo actual al modelo de difusión y precipitación de hidruros implementado en el código DIONISIO, de manera de tener una herramienta que permita simular todos los aspectos del comportamiento del hidrógeno en la vaina de un elemento combustible, ya sea durante el período de irradiación como durante el almacenamiento del combustible gastado.

REFERENCIAS

Aliev T., Kolesnik M., Likhanskii V., y Saiutina V. Modeling of hydride reorientation in E110 during thermal cycling. *Journal of Nuclear Materials*, 557:153230, 2021. doi:10.1016/J.

- JNUCMAT.2021.153230.
- Billone M.C., Burtseva T.A., y Einziger R.E. Ductile-to-brittle transition temperature for high-burnup cladding alloys exposed to simulated drying-storage conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 433:431–448, 2013. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2012.10.002.
- Chu H.C., Wu S.K., y Kuo R.C. Hydride reorientation in Zircaloy-4 cladding. *Journal of Nuclear Materials*, 373:319–327, 2008. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2007.06.012.
- El-Samrah M.G., Tawfic A.F., y Chidiac S.E. Spent nuclear fuel interim dry storage; Design requirements, most common methods, and evolution: A review. *Annals of Nuclear Energy*, 160:108408, 2021. doi:10.1016/J.ANUCENE.2021.108408.
- Hardie D. y Shanahan M.W. Stress reorientation of hydrides in zirconium-2.5 % niobium. *Journal of Nuclear Materials*, 55:1–13, 1975. doi:10.1016/0022-3115(75)90132-4.
- Kearns J.J. Diffusion coefficient of hydrogen in alpha zirconium, Zircaloy-2 and Zircaloy-4. *Journal of Nuclear Materials*, 43:330–338, 1972. doi:10.1016/0022-3115(72)90065-7.
- Kim J., Yoon H., Kook D., y Kim Y. A study on the initial characteristics of domestic spent nuclear fuels for long term dry storage. *Nuclear Engineering and Technology*, 45:377–384, 2013. ISSN 1738-5733. doi:10.5516/NET.06.2012.082.
- Kolesnik M., Aliev T., y Likhanskii V. Modeling of hydrogen behavior in spent fuel claddings during dry storage. *Journal of Nuclear Materials*, 508:567–573, 2018. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2018.06.012.
- Konarski P., Cozzo C., Khvostov G., y Ferroukhi H. Spent nuclear fuel in dry storage conditions – current trends in fuel performance modeling. *Journal of Nuclear Materials*, 555:153138, 2021. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2021.153138.
- Lee J.M., Kim H.A., Kook D.H., y Kim Y.S. A study on the effects of hydrogen content and peak temperature on threshold stress for hydride reorientation in Zircaloy-4 cladding. *Journal of Nuclear Materials*, 509:285–294, 2018. ISSN 0022-3115. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2018.07.005.
- Maric M., Thomas R., Nunez-Iglesias J., Atkinson M., Bertsch J., Frankel P., Race C., Barberis P., Bourlier F., Preuss M., y Shanthraj P. A novel method for radial hydride analysis in zirconium alloys: HAPPy. *Journal of Nuclear Materials*, 559:153442, 2022. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2021.153442.
- Motta A.T., Capolungo L., Chen L.Q., Cinbiz M.N., Daymond M.R., Koss D.A., Lacroix E., Pastore G., Simon P.C.A., Tonks M.R., Wirth B.D., y Zikry M.A. Hydrogen in zirconium alloys: A review. *Journal of Nuclear Materials*, 518:440–460, 2019. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2019.02.042.
- Puls M.P. *The effect of hydrogen and hydrides on the integrity of zirconium alloy components: delayed hydride cracking*. Springer Science & Business Media, 2012.
- Woo D. y Lee Y. Understanding the mechanical integrity of zircaloy cladding with various radial and circumferential hydride morphologies via image analysis. *Journal of Nuclear Materials*, 584:154560, 2023. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2023.154560.
- Zanellato O., Preuss M., Buffiere J.Y., Ribeiro F., Steuwer A., Desquines J., Andrieux J., y Krebs B. Synchrotron diffraction study of dissolution and precipitation kinetics of hydrides in Zircaloy-4. *Journal of Nuclear Materials*, 420:537–547, 2012. doi:10.1016/J.JNUCMAT.2011.11.009.