NUCLEBRÁS/CDTN	NOTA TÉCNICA	DETR.PD 114/80	PG 1 / 12
DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA DE REATORES			DATA 01/08/80
DIVISÃO DE ELEMENTO COMBUSTÍVEL			

DETR.PD-072/79

TITULO

MODELO DE DENSIFICAÇÃO ASSMANN-STEHLE PARA OS CASOS DE PORO NO CONTORNO DO GRÃO E DE PORO EM PONTO TRIPLO

NOTAS CORRELATAS

DETR.PD 109/80

OBJETIVO

Modelar a contração da porosidade situada nos contornos de grão e nos pontos triplos.

LISTA DE DISTRIBUIÇÃO

SUPED	*	(1)
ASPC.PD	*	(1)
DETR.PD		(2)
DIAAC.PD	*	(1)
DIECB.PD		(1)
DIFNU.PD	*	(1)
DISCO.PD		( )
DITES.PD		( )
LABFRE.PD		( )
LABTEH.PD		( )
AUTOR(ES)		(1)
SEDOTE.PD		(1)
OUTROS		
DITCO.PD		(1)

* Apenas folha de rosto

cma.

Nº. CÓPIAS 10

RESUMO E CONCLUSÕES

No presente trabalho é proposto um modelo para a contração de poros situados nos contornos de grão e nos pontos triplos e a consequente densificação provocada no combustível. O modelo está baseado numa geometria simples com poros e grãos esféricos.

ÍNDICE

1. Introdução 2/12
2. Poro no Contorno de Grão 2/12
3. Poro em Pontos Triplos 5/12
4. Ângulo Inicial Máximo Θ_{max}^{in} 6/12
5. Cálculo da Taxa de Decréscimo dos Poros 6/12
Referência
Figuras 8/12

AUTOR(ES)	VISTO	DATA	APROVAÇÃO	VISTO	DATA
F.S.LAMEIRAS	p/p [signature]	01.08.80	CHEFE DO LAB. OU GRUPO		
			CHEFE DA DIVISÃO	[signature]	04.08.80
			CHEFE DO DEPARTAMENTO	[signature]	4.8.80

CLASSIFICAÇÃO

TAREFA: 11.21.03
21.01

MODELO DE DENSIFICAÇÃO ASSMANN-STEHLE PARA OS CASOS DE PORO NO CONTORNO DO GRÃO E DE PORO EM PONTO TRIPLO

1. INTRODUÇÃO

O modelo de densificação elaborado por Assmann e Stehle tem sido aceito como uma teoria geral da densificação, uma vez que ele abrange contribuição térmica e o efeito da irradiação. Neste modelo é considerada uma situação geométrica simples, ou seja, grão esférico com poro também esférico situado no centro do grão, visando obter soluções fechadas para este complexo problema. Considera-se a produção de lacunas nas proximidades da superfície dos poros e a migração destas lacunas para os contornos do grão que são tomados como sumidouros efetivos. Uma descrição completa deste modelo pode ser encontrada na referência [1].

Como o percurso de difusão é menor para poros situados nos contornos de grão, pode resultar uma taxa de densificação mais alta para baixas queimas, principalmente em combustíveis onde esta situação é mais frequente. Com o aumento da queima, este efeito seria compensado pelo aumento de produtos de fissão gasosos.

Este trabalho é uma tentativa para abordar a situação de poros no contorno de grão e também em ponto triplo.

2. PORO NO CONTORNO DE GRÃO

A situação geométrica está apresentada na figura 1. Tanto o grão quanto o poro são considerados possuir geometria esférica. O percurso seguido pelas lacunas é perpendicular às superfícies de isoconcentração. A concentração de lacunas é C_i na superfície do poro e C_T no contorno do grão. O acréscimo Δx_{n+1} da superfície n para a superfície n + 1 está relacionado com o acréscimo angular $\Delta\Theta_{n+1}$ através da relação:

$$\Delta x_{n+1} = \frac{r_n(\rho_n + \Delta x_{n+1})}{\xi_n} \cdot \frac{\text{sen}\ \Delta\Theta^c_{n+1}}{\text{sen}\ (\Theta^c_n + \Delta\Theta^c_{n+1})} \qquad (1)$$

Esta relação pode ser aproximada para o limite de $n+1 \to \infty$ para:

$$\Delta\Theta^{c}_{n+1} = f(\xi_n, \Theta^{c}_n) \cdot \Delta x_{n+1} \tag{2}$$

onde

$$f(\xi_n, \Theta^{c}_n) = \frac{\xi_n \cdot \text{sen}\ \Theta^{c}_n}{r_n \cdot \rho_n} \tag{3}$$

$$r = \xi \cdot \cos\Theta + (\xi^2 \cdot \cos^2\Theta - \rho^2 \cdot \xi + \rho^2)^{1/2} \tag{4}$$

$$\rho = \sqrt{\rho^2 + \xi^2 - \rho^2 \xi} \tag{5}$$

para $o \leq \xi \leq 1$

Da equação (4) temos que:

$$\Delta r = \frac{\partial r}{\partial \xi} \Delta\xi + \frac{\partial r}{\partial \Theta} \Delta\Theta \tag{6}$$

Aplicando (3) em (5), com $\Delta r = \Delta x$, ou seja:

$$\Delta x_{n+1} = \left.\frac{\partial r}{\partial \xi}\right|_{\xi_n} \cdot \Delta\xi_{n+1} + \left.\frac{\partial r}{\partial \Theta}\right|_{\Theta^{c}_n} \cdot f(\xi_n, \Theta^{c}_n) \cdot \Delta x_{n+1} \tag{7}$$

Portanto, Δx_{n+1}, se relaciona com $\Delta\xi_{n+1}$, através de:

$$\Delta x_{n+1} = \frac{\left.\frac{\partial r}{\partial \xi}\right|_{\xi_n}}{1 - \left.\frac{\partial r}{\partial \Theta}\right|_{\Theta^{c}_n} \cdot f(\xi_n, \Theta^{c}_n)} \cdot \Delta\xi_{n+1} \tag{8}$$

Através de (8) e (2) é possível calcular numericamente as funções $x\ (\xi, \Theta^{in}, \rho)$ e $\Theta^{c}\ (\xi, \Theta^{in}, \rho)$; onde Θ^{in} é a posição angular de partida da lacuna na superfície do poro. A figura 2 mostra $x\ (\xi, \Theta^{in}, \rho)$ para alguns valores de Θ^{in} e ρ e a figura 3 mostra $\Theta^{c}\ (\xi, \Theta^{in}, \rho)$.

O fluxo de lacunas $\Delta Q\ (\Theta^{in})$ entre os angulos iniciais Θ^{in} e $\Theta^{in} + \Delta\Theta^{in}$ é dado por:

$$\Delta Q(\Theta^{in}) = -D\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{\Theta^{in}} .2.\pi.r(\xi,\Theta^{c}).\mathrm{sen}\ \Theta^{c}.\rho(\xi).\Delta\Theta^{c}\Big|_{\xi} \qquad (9)$$

onde

$$\Delta\Theta^{c}\Big|_{\xi} = \frac{\partial\Theta^{c}}{\partial\Theta^{in}}\,\Delta\Theta^{in} \qquad (10)$$

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{\Theta^{in}} = \frac{\partial C}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial \xi}{\partial x} \qquad (11)$$

Combinando (8) e (11)

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{\Theta^{in}} = \frac{\partial C}{\partial \xi}\cdot\frac{1-\left.\frac{\partial r}{\partial\Theta}\right|_{\Theta^{c}}.f(\xi,\Theta^{c})}{\left.\frac{\partial r}{\partial \xi}\right|_{\Theta^{c}}} \qquad (12)$$

Substituindo (12) e (10) em (9):

$$\Delta Q(\Theta^{in}) = -2\pi D\,\frac{\partial C}{\partial \xi}.\frac{1-\left.\frac{\partial r}{\partial\Theta}\right|_{\Theta^{c}}.f(\xi,\Theta^{c})}{\left.\frac{\partial r}{\partial \xi}\right|_{\Theta^{c}}}.\frac{\partial\Theta^{c}}{\partial\Theta^{in}}.\mathrm{sen}\ \Theta^{c}.\rho(\xi).r(\xi,\Theta^{c}).\Delta\Theta^{in} \qquad (13)$$

Integrando em ξ:

$$-2\pi D(C_i-C_T)\,\frac{\Delta\Theta^{in}}{\Delta Q(\Theta^{in})} = \int_0^1 \frac{\left.\frac{\partial r}{\partial \xi}\right|_{\Theta^{c}}}{\left[1-\left.\frac{\partial r}{\partial\Theta}\right|_{\Theta^{c}}.f(\xi,\Theta^{c})\right]\frac{\partial\Theta^{c}}{\partial\Theta^{in}}.\rho(\xi).r(\xi,\Theta^{c}).\mathrm{sen}\ \Theta^{c}}\,d\xi \qquad (14)$$

Colocando

$$I(\theta^{in},\rho) = \int_0^1 \frac{\left.\frac{\partial r}{\partial \xi}\right|_{\theta^c}}{\left[1 - \left.\frac{\partial r}{\partial \theta}\right|_{\theta^c} . f(\xi,\theta^c)\right] \frac{\partial \theta^c}{\partial \theta^{in}} . \rho(\xi) . r(\xi,\theta^c) . \text{sen } \theta^c} \, d\xi \qquad (15)$$

e integrando em θ^{in}

$$Q(\rho) = - 2\pi D(C_i - C_T) \int_0^{\theta^{in}_{max}} \frac{1}{I(\theta^{in},\rho)} \, d\theta^{in} \qquad (16)$$

sobre θ^{in}_{max} veja seção 4.

3. PORO EM PONTOS TRÍPLOS

A única diferença em relação ao caso anterior é que as equações (4) e (5) devem ser substituídas, respectivamente, por (figura 4):

$$r = \xi . \cos \theta + (\xi^2 . \cos^2 \theta - \rho . \xi + \rho^2)^{1/2} \qquad (17)$$

$$\rho = \sqrt{\rho^2 + \xi^2 - \rho\xi} \qquad (18)$$

para $o \le \xi \le 1 + \Delta\rho$, onde:

$$\Delta\rho = \frac{\rho + \sqrt{4 - 3\rho^2}}{2} - 1 \qquad (19)$$

4. ÂNGULO INICIAL MÁXIMO Θ_{max}^{in}

A situação está apresentada na figura 5. No modelo deve ser considerado um caminho mínimo x_{min}, pois senão teríamos uma divergência do gradiente de lacunas para Θ = arcos $\rho/2$ (contorno de grão) ou $\Theta = \Pi/3$ (ponto triplo). Este caminho x_{min} está relacionado com Θ_{max}^{in}, que por sua vez está relacionado com o ângulo ψ de curvatura do contorno de grão na superfície do poro através de:

$$\Theta_{max}^{in} \approx \arccos \frac{\rho}{2} - \operatorname{arcsen}\left(\frac{\delta}{\rho} \cdot \operatorname{sen} \frac{\psi}{2}\right) \tag{20}$$

onde δ é a profundidade de abertura.

Além do mais,

$$\psi = 2.\arccos \frac{\gamma_{cg}}{2\gamma_s} \tag{21}$$

onde:

γ_{cg} = tensão superficial nos contornos de grão;

γ_s = tensão superficial

5. CÁLCULO DA TAXA DE DECRÉSCIMO DOS POROS

Calculada a integral (16), $Q(\rho)$ está relacionado com a variação de volume através da equação:

$$\frac{dV}{dt} = j \cdot Q(\rho) \cdot R \tag{22}$$

sendo R o raio do grão e j um parâmetro que depende do caso:

$j = 2$ para poro no contorno de grão;

$j = 3$ para poro em ponto triplo.

Então,

$$4\pi R^2\rho^2 R\frac{d\rho}{dt} = -j.Q(\rho).R$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -j.Q(\rho)/4\pi R^2\rho^2 \qquad (23)$$

REFERÊNCIA

[1] ASSMANN, H. e STEHLE, H. Thermal and In-reactor Densification of UO_2: Mechanims and Experimental Results. Nuclear Engineering and Design, England, 48 (1): 49-67,Jun,1978

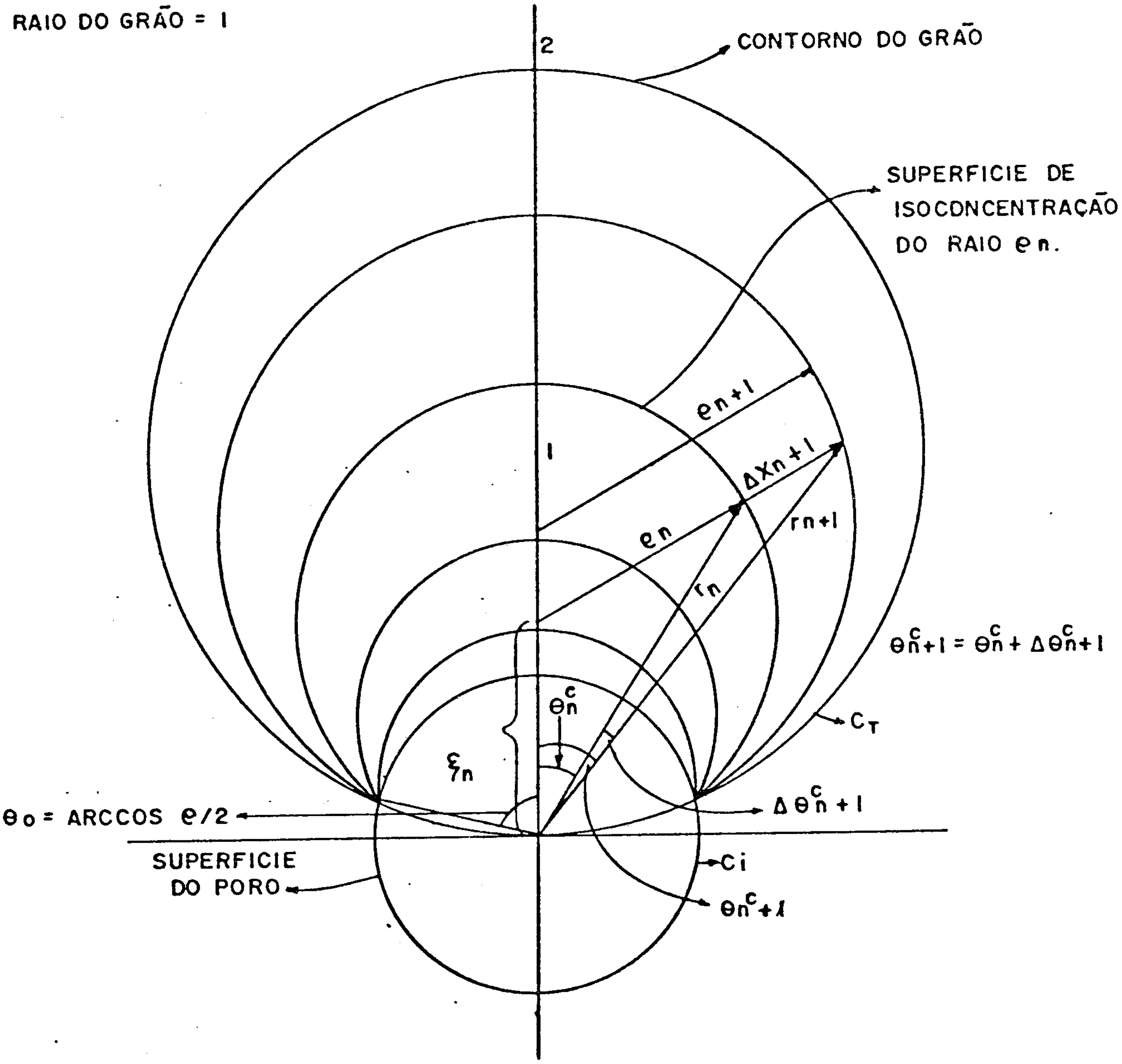


FIGURA 1: Poro no Contorno de Grão.

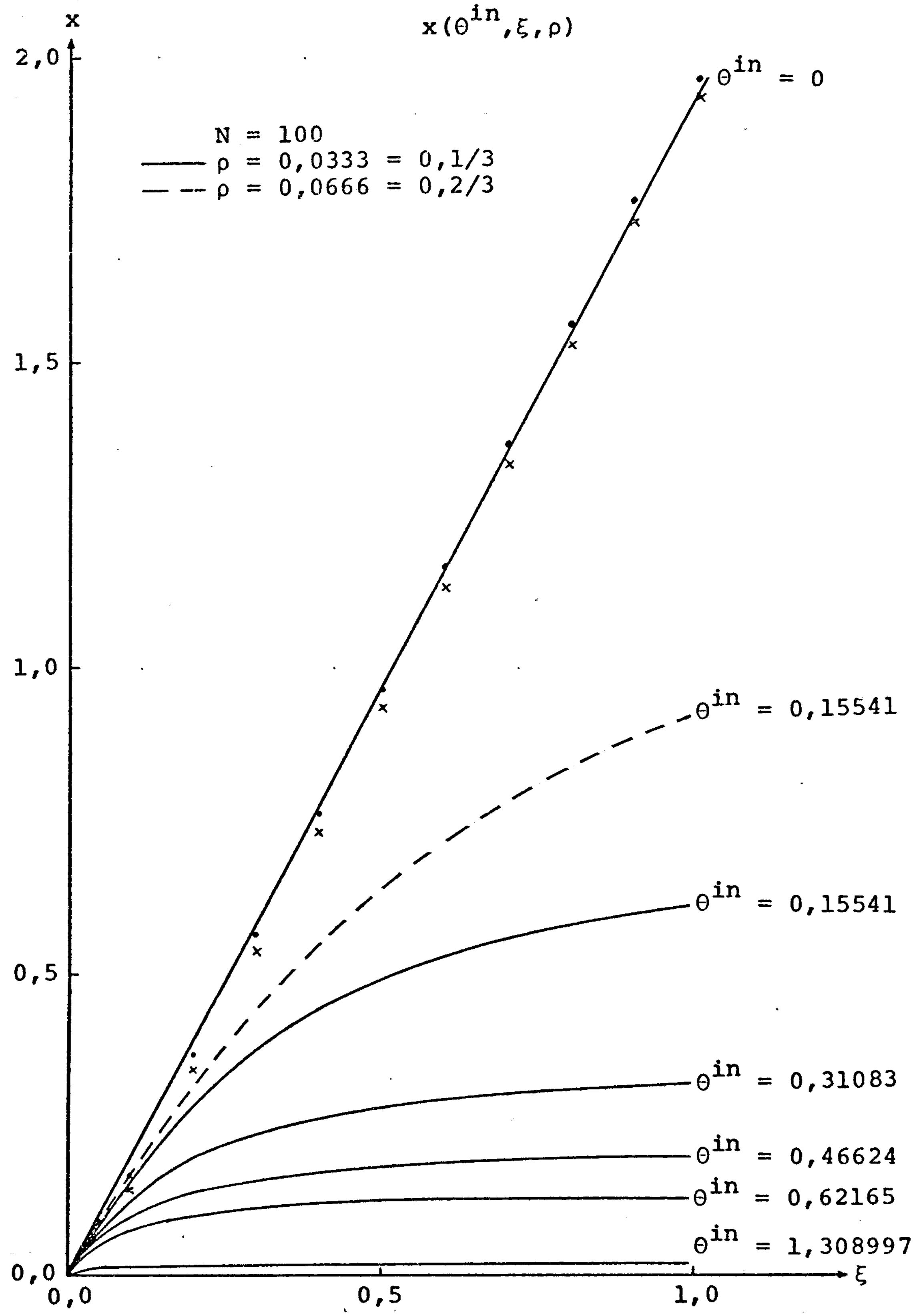


FIGURA 2: Variação de $x(\Theta^{in},\xi,\rho)$

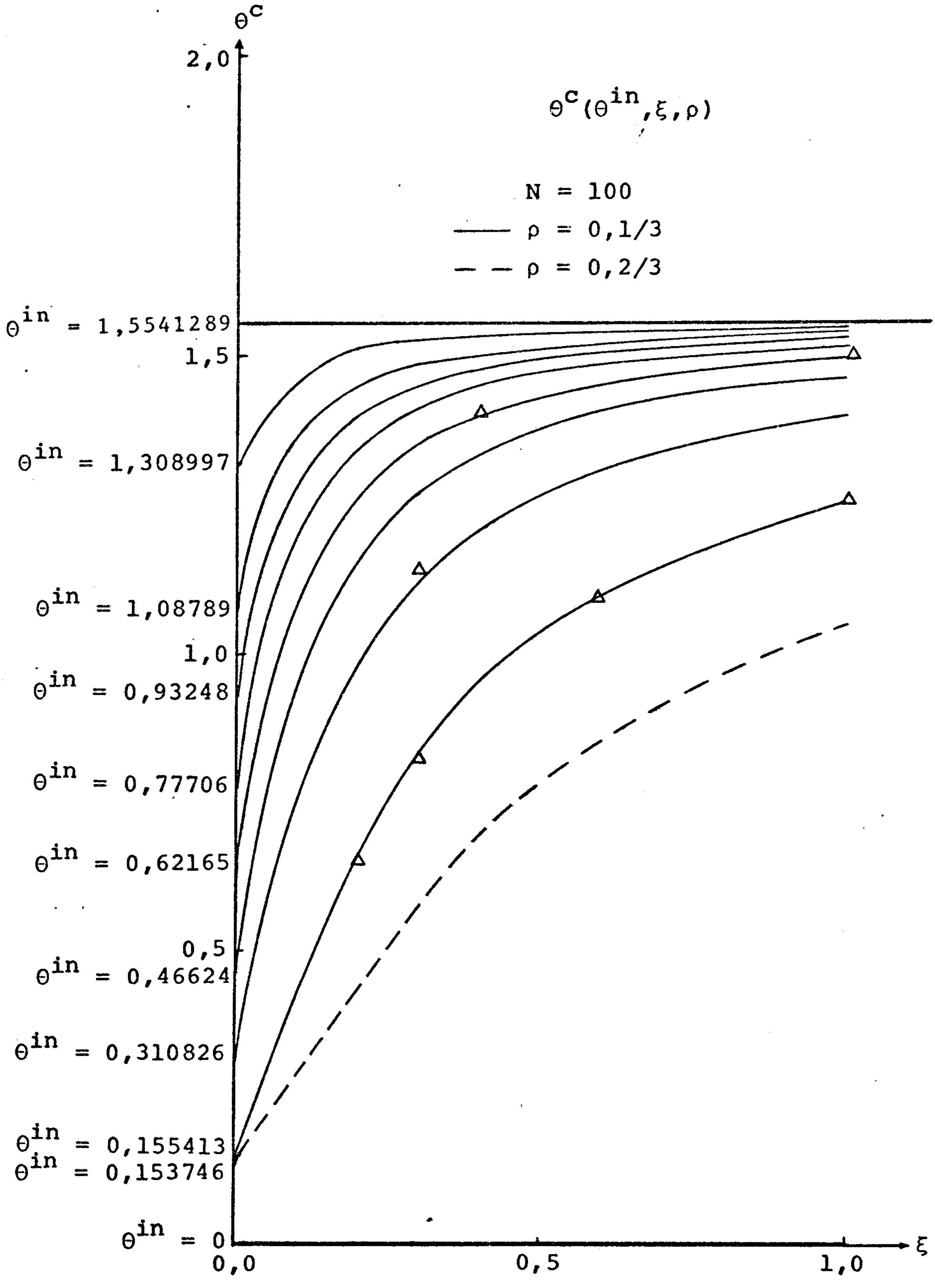


FIGURA 3: Variação de $\theta^{c}(\theta^{in},\xi,\rho)$

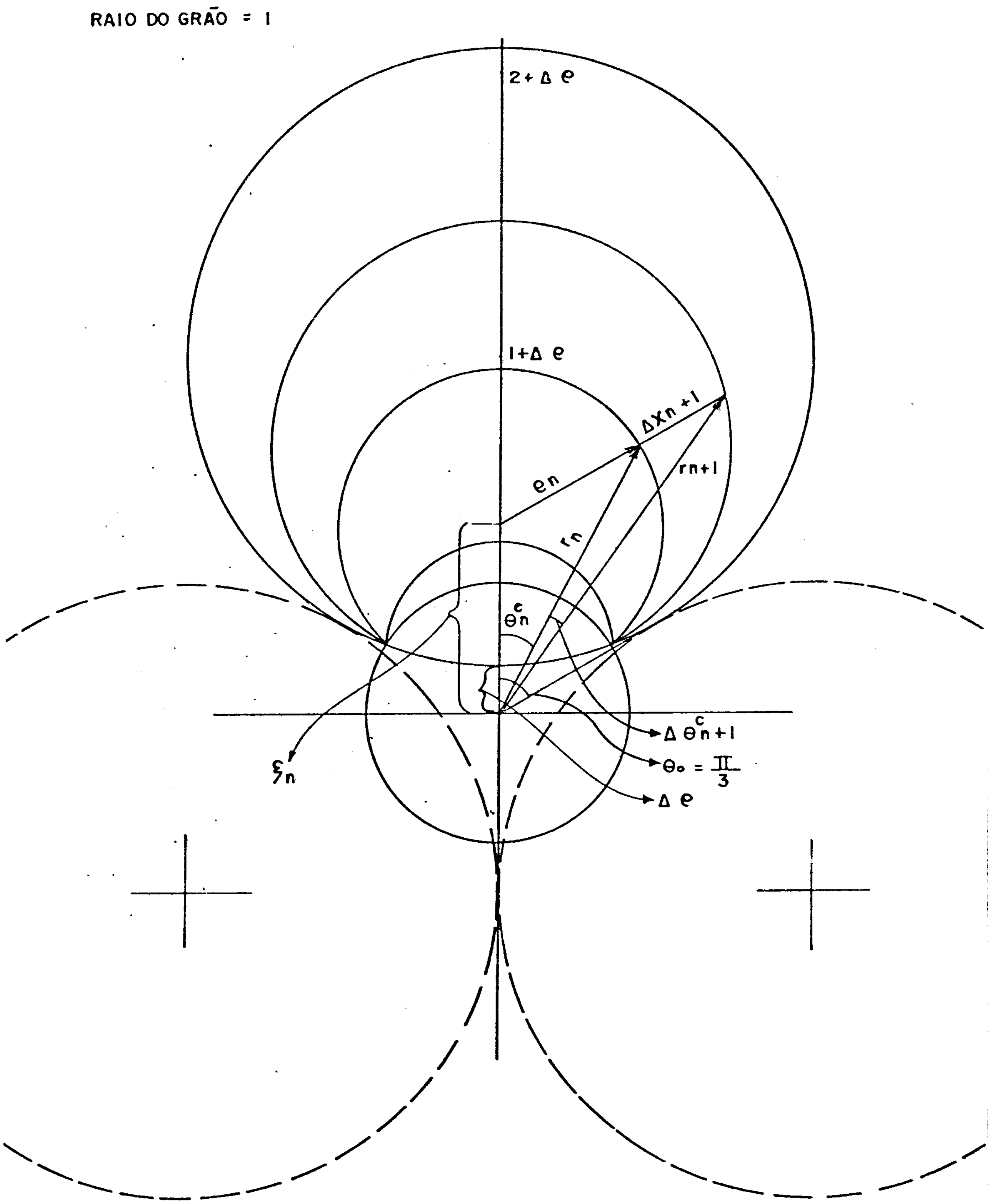
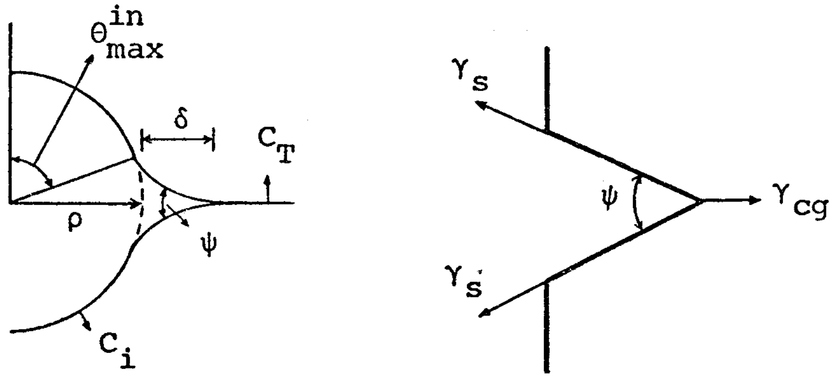


FIGURA 4: Poro no Ponto Triplo.



UO_2 : $\gamma_{cg} \simeq 3 \times 10^{-5}$ J/cm²

$\gamma_s \simeq 6 \times 10^{-5}$ J/cm²

FIGURA 5: Condições geométricas e de equilíbrio de tensões superficiais no encontro do poro com o contorno de grão.