

**MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA NUCLEAR**

JONNATHAN TOSHIO OGIHARA

**ESTIMATIVA DE DANOS CAUSADOS PELA RADIAÇÃO IONIZANTE EM
LIGA DE AÇO COM FUNÇÃO ESTRUTURAL EM INSTALAÇÕES
NUCLEARES UTILIZANDO SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL**

**RIO DE JANEIRO
2024**

JONNATHAN TOSHIO OGIHARA

ESTIMATIVA DE DANOS CAUSADOS PELA RADIAÇÃO IONIZANTE EM
LIGA DE AÇO COM FUNÇÃO ESTRUTURAL EM INSTALAÇÕES
NUCLEARES UTILIZANDO SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação
em Engenharia Nuclear do Instituto Militar de Engenharia,
como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre
em Ciências em Engenharia Nuclear.

Orientador(es): Fernando M. Araújo-Moreira, D.Sc.

Rio de Janeiro

2024

©2024

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
Praça General Tibúrcio, 80 – Praia Vermelha
Rio de Janeiro – RJ CEP: 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmар ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do(s) autor(es) e do(s) orientador(es).

Ogihara, Jonnathan Toshio.

Estimativa de danos causados pela radiação ionizante em liga de aço com função estrutural em instalações nucleares utilizando simulação computacional / Jonnathan Toshio Ogihara. – Rio de Janeiro, 2024.

144 f.

Orientador(es): Fernando M. Araújo-Moreira.

Dissertação (mestrado) – Instituto Militar de Engenharia, Engenharia Nuclear, 2024.

1. segurança nuclear; dano da radiação; efeito da radiação; dpa; liga de aço; MCNP; vaso de pressão do reator. i. Araújo-Moreira, Fernando M. (orient.) ii. Título

JONNATHAN TOSHIO OGIHARA

**Estimativa de danos causados pela radiação ionizante em
liga de aço com função estrutural em instalações nucleares
utilizando simulação computacional**

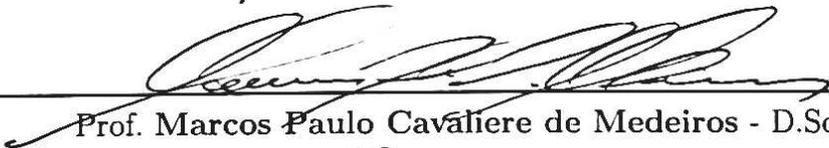
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Nuclear.

Orientador(es): Fernando M. Araújo-Moreira.

Aprovada em 20 de fevereiro de 2024, pela seguinte banca examinadora:



Prof. Fernando M. Araújo-Moreira - D.Sc. do IME - Presidente



Prof. Marcos Paulo Cavaliere de Medeiros - D.Sc. do IME



Eng. Marco André Talarico - D.Sc. da COGESN/MB

Rio de Janeiro

2024

À próxima geração.

AGRADECIMENTOS

À Deus.

À Marinha do Brasil pela oportunidade e apoio na realização deste curso, em especial ao meu encarregado e ao meu orientador técnico no transcurso desta etapa.

Ao Instituto Militar de Engenharia, onde contei com a disposição e o esforço da chefia, coordenação, professores e funcionários da SE-7 para assimilar um pouco do conhecimento secular presente nesta Instituição. Contribuíram substancialmente neste sentido os diversos eventos promovidos pela SE-7, como visitas técnicas e seminários realizados durante o período de curso.

Ao Instituto de Engenharia Nuclear pela disponibilização de seu corpo técnico e instalações para instrução dos alunos do curso.

Ao meu orientador pela paciência e pelos ensinamentos valorosos, os quais, muitas vezes, transbordam a vida acadêmica.

Ao TC Marcos Paulo pela disponibilização do código MCNP.

Aos amigos e colegas de curso que proporcionaram diversas discussões para apurar o que foi apreendido e, assim, penetrar níveis mais profundos de conhecimento.

À minha família pela compreensão e apoio nesta etapa, que me furtou do convívio em momentos diversos sempre na pretensão do bem maior.

Aos Ogihara, Wakimoto, Nardino e Palombo, insurgentes contra seus destinos, que venceram as batalhas de seus tempos e me legaram mais esta oportunidade.

RESUMO

O funcionamento das instalações nucleares deve satisfazer os requisitos de segurança nuclear. Uma das análises dos componentes destas instalações centra-se nos materiais estruturais. A queima do combustível nuclear resultará em danos causados pela radiação ionizante. Devido ao funcionamento contínuo, os danos causados pela radiação se acumularão e podem resultar na manifestação de efeitos macroscópicos da radiação. Estes efeitos podem alterar as propriedades mecânicas, físicas e químicas das ligas estruturais. Neste sentido, este trabalho tem como objetivo a compreensão dos processos que geram danos de radiação em liga de aço durante a operação de uma instalação nuclear, abrangendo a degradação resultante no desempenho do material com o acúmulo destes danos. Uma revisão foi fornecida sobre os conceitos necessários associados à caracterização microscópica das ligas de aço e de suas propriedades, além da física da fissão nuclear. Os danos e efeitos da radiação foram explicados a partir destes conceitos e com base nas referências. A definição de seção de choque de deslocamento foi desenvolvido para o cálculo do deslocamento por átomo (dpa) para materiais irradiados. Investigações para irradiação de amostras para análise de alterações nas propriedades mecânicas de liga de interesse no irradiador de pesquisa do CTE_x e no reator Argonauta foram realizadas. Estimativas para as taxas de dpa foram calculadas com base na norma ASTM-E693-23 para dois cenários no reator Argonauta. Os baixos valores verificados foram atribuídos ao fluxo neutrônico limitado daquela instalação nuclear. O cálculo de dpa também foi performado empregando-se o código MCNP para obtenção do espectro neutrônico na parede interna do vaso de pressão do núcleo de Angra II, estimando-se o dpa para a vida útil de operação desta instalação nuclear. O resultado obtido encontrou-se aderente às referências, validando a metodologia aplicada.

Palavras-chave: segurança nuclear; dano da radiação; efeito da radiação; dpa; liga de aço; MCNP; vaso de pressão do reator.

ABSTRACT

The operation of nuclear facilities must satisfy the nuclear safety requirements. An analysis of the components of these facilities focus on the structural materials. The nuclear fuel burn will result in damage caused by ionizing radiation. Due to continuous operation, radiation damage will build up and may result on the manifestation of macroscopic radiation effects. Such effects may change the mechanical, physical and chemical properties of structural alloys. Thus, this work aims to understand the processes causing radiation damage to alloy steel during the operation of a nuclear facility, including the resulting degradation in material performance as this damage accumulates. A review was provided about the concepts associated to the microscopic characterization of alloy steels and their properties, as well as nuclear fission physics. The radiation damage and radiation effects were explained on the basis of these concepts and the references. The definition of the displacement cross-section was developed to calculate the displacement per atom (dpa) for irradiated materials. Investigations aiming sample irradiation to study changes in the mechanical properties of the selected alloy in CTE_x research irradiator and in Argonauta reactor were conducted. Estimations for the dpa rates were calculated based on the ASTM-E693-23 standard for two scenarios at the Argonauta reactor. The low values observed were attributed to the limited neutron flux in that nuclear facility. The dpa calculation was also performed using the MCNP code to obtain the neutron spectrum on the inner wall of the Angra II reactor pressure vessel, estimating the dpa for the lifetime operation of this nuclear facility. The results obtained were considered in accordance with the references, thus validating the methodology applied.

Keywords: nuclear safety; radiation damage; radiation effect; dpa; alloy steel; MCNP; reactor pressure vessel.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema do circuito primário e secundário de um reator de água pressurizada e materiais constituintes	21
Figura 2 – Alterações decorrentes da irradiação em componentes de reatores: (a) arqueamento das varetas do elemento combustível e (b) fragilização e fratura de dutos de montagem	23
Figura 3 – Número de usinas nucleares e capacidade líquida instalada de geração de energia elétrica em função do tempo de operação	24
Figura 4 – Estruturas cristalinas comumente encontrada nos metais, (a) cúbica de corpo centrado - CCC; (b) cúbica de face centrada - CFC, e (c) hexagonal compacta - HC	27
Figura 5 – Empilhamentos de planos compactos para estruturas cristalinas, (a) CFC - padrão ABC e (b) HC - padrão AB	27
Figura 6 – Defeitos pontuais em uma rede cristalina em duas dimensões, monovacância (1), autoinstersticial (2), átomo de impureza intersticial (3), átomo de menor dimensão substitucional (4) e átomo de maior dimensão substitucional(5)	28
Figura 7 – Representação dos instersticiais para uma célula CFC nas posições octaedro e tetraedro, respectivamente	29
Figura 8 – Representação de uma linha de discordância que possui caráter cunha, helicoidal ou mista a depender da região do cristal	31
Figura 9 – Representações de defeitos interfaciais de contornos de grão (a), fase coerente (b) e incoerente (c) e de macla (d)	32
Figura 10 – Curva típica de tensão-deformação de engenharia	34
Figura 11 – Curvas típicas obtidas a partir de ensaios de fluência com variação na temperatura ou na tensão aplicada, respectivamente	37
Figura 12 – Representação da deformação plástica em um cristal pelo movimento de discordâncias em cunha e helicoidal	39
Figura 13 – (a), (b) Dobras e (c), (d) degraus em discordâncias em cunha e helicoidal, respectivamente	40
Figura 14 – Movimentação de discordância do tipo aresta por escalagem: absorção de vacâncias na configuração (b), que resultará em uma escalagem positiva (a), e emissão de vacâncias da configuração (b), que resultará em uma escalagem negativa (c)	41
Figura 15 – Banda de estabilidade nuclear e modos de decaimento	46
Figura 16 – Probabilidades de interação de fóton a partir de sua energia para o chumbo	47

Figura 17 – Energia de ligação por núcleon	48
Figura 18 – Produção dos produtos de fissão do U-235 de acordo com o número de massa	49
Figura 19 – a) Distribuição dos nêutrons produzidos em uma fissão térmica de U-235 e b) função da distribuição de Maxwell-Boltzmann aplicável a nêutrons térmicos	49
Figura 20 – Seções de choque microscópica total, de fissão, de captura radioativa e de espalhamento elástico para nêutrons no U-235	50
Figura 21 – Alargamento Doppler da ressonância de captura radioativa para U-238	51
Figura 22 – Esquema de diferentes tipos de radiação produzidos na fissão de um núcleo pesado	53
Figura 23 – (a) Pico de deslocamento descrito por Brinkman e (b) Conceito refinado por Seeger do evento do dano primário em metais CFC	54
Figura 24 – Escalas de tempo e espaço envolvidas no processo de inchaço de vazio .	55
Figura 25 – Efeitos da radiação mais pronunciados na degradação dos materiais com as representativas microestruturas conforme os regimes de temperatura	56
Figura 26 – Curvas de tensão-deformação de engenharia de materiais irradiados em temperatura ambiente	57
Figura 27 – Variação da temperatura de transição dúctil frágil para um material irradiado e não irradiado	58
Figura 28 – Seções de choque microscópica de produção prótons e alfa para o Fe-58 com a incidência de nêutrons energéticos	60
Figura 29 – Seções de choque microscópica do Ni-58 e Ni-59 para incidência de nêutrons	62
Figura 30 – Comparação entre a resistência ao escoamento da liga 316 SS irradiada em três diferentes instalações apresentada em função da fluência neutrônica e dpa	63
Figura 31 – Diferenças na morfologia do dano, eficiência do deslocamento e energia média de recuo transferida por diferentes tipos de partículas incidentes no níquel	64
Figura 32 – Projeção das direções do átomo atingido K para posição L por diferentes barreiras de potencial para uma célula CFC e representação da variação de energia do átomo de acordo com seu movimento na direção	68
Figura 33 – Número de átomos deslocados em uma cascata em função da energia transferida ao PKA, conforme modelo K-P	69
Figura 34 – Comparação do número de átomos deslocados gerados por um PKA no modelo K-P e no modelo NRT	72
Figura 35 – Seção de choque de deslocamento para o ferro	72

Figura 36 – Seção de choque de deslocamento para o ferro obtidas pelos modelos NRT e arc-dpa.	73
Figura 37 – Irradiador de pesquisa do CTEEx com indicação das câmaras de irradiação e região da fonte	76
Figura 38 – Esquema de decaimento do Cs-137	76
Figura 39 – Perspectiva e arranjo do núcleo e do canal de irradiação J-9 do reator Argonauta	77
Figura 40 – Seção de choque de deslocamento e fluxo neutrônico dependente da energia para o canal J-9	81
Figura 41 – Seção de choque de deslocamento e fluxo neutrônico dependente da energia para o canal J-9	82
Figura 42 – História aleatória acompanhada pelo MCNP de um nêutron incidente em uma placa dotada de material físsil	85
Figura 43 – Corte na direção axial do modelo desenvolvido no código MCNP para o comprimento ativo do núcleo de Angra 2 com a identificação das suas estruturas elaborado com o programa Vised	87
Figura 44 – Corte na direção radial do modelo desenvolvido no código MCNP para o núcleo de Angra 2 com as representações dos diferentes níveis de enriquecimento de urânio e detalhe das estruturas elaborado com o programa Vised	88
Figura 45 – Visualização das emissões, trajetórias e colisões dos nêutrons produzidos na fonte programa com o programa Vised	89
Figura 46 – Comparação entre os dados das seções de choque de deslocamento disponíveis na norma ASTM E693-23 e os empregados no código desenvolvido para Angra 2	90
Figura 47 – Espectro do fluxo neutrônico que atinge a parede interna do vaso de pressão do reator de Angra 2 e os erros relativos calculados para cada ponto	93
Figura 48 – Espectro do fluxo neutrônico por unidade de letargia que atinge a parede interna do vaso de pressão do reator de Angra 2	94
Figura 49 – (a) Vetores de velocidade nos sistemas do laboratório e do centro de massa (CM), e (b) Diagrama composto relacionando as velocidades nos dois sistemas	133
Figura 50 – Energia transferida como função do ângulo de espalhamento do CM	135
Figura 51 – Espalhamento no elemento de ângulo sólido	135
Figura 52 – Seção de choque de para o aço inoxidável 18/10 para nêutrons	143
Figura 53 – Seção de choque de para o aço inoxidável 18/10 para nêutrons considerando a contribuição da reação de captura radioativa	144

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Energia liberada na fissão nuclear	52
Tabela 2	– Limites de energia para diferentes tipos de radiação para deslocamentos de átomos com $E_d = 25$ eV	65
Tabela 3	– Valores recomendados de energias de deslocamento efetivas para utilização no cálculo dos deslocamentos atômicos	68
Tabela 4	– Valores de fluxo de nêutrons térmico, conforme manual do reator Argonauta	79
Tabela 5	– Fluxo neutrônico e taxa de dpa calculados para o canal J-9	81
Tabela 6	– Fluxo neutrônico e taxa de dpa calculados para o canal J-9	82
Tabela 7	– Tabela comparativa entre os valores de referência e calculados para os coeficientes de multiplicação infinito dos elementos combustíveis com enriquecimento 1,9%, 2,5% e 3,2% de U-235	91
Tabela 8	– Estimativa da taxa de deslocamento por átomo (dpa) para o canal J-9 do reator Argonauta	102
Tabela 9	– Estimativa da taxa de deslocamento por átomo (dpa) para a região do núcleo do reator Argonauta	107
Tabela 10	– Estimativa do deslocamento por átomo (dpa) para a parede interna do vaso de pressão de Angra 2	128
Tabela 11	– Energia Transferida e Seção de Choque de Transferência de Energia para Diversos Tipos de Colisão Nêutron-Núcleo	138

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABACC	Agência Brasileiro-Argentina de Contabilidade e Controle de Materiais Nucleares
AIEA	Agência Internacional de Energia Atômica
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
CCC	Cúbica de corpo centrado
CFC	Cúbica de face centrada
CNEN	Comissão Nacional de Energia Nuclear
CRP	<i>Coordinated Research Project</i>
CTEx	Centro Tecnológico do Exército
DBTT	<i>Ductile-to-brittle transition temperature</i> ou temperatura de transição dúctil-frágil
ENDF	<i>Evaluated Nuclear Data File</i>
HC	Hexagonal compacta
IEN	Instituto de Engenharia Nuclear
IPEN	Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
IRDFF-II	<i>International Reactor Dosimetry and Fusion File</i>
LABGENE	Laboratório de Geração Núcleo-Elétrica
LASREF	<i>Los Alamos Spallation Radiation Effects Facility</i>
MCNP	<i>Monte Carlo N-Particle</i>
MSS	<i>Mesoscale science</i> ou ciência da mesoescala
NDS	<i>Nuclear Data Services</i>
OWR	<i>Omega West Reactor</i>
PKA	<i>Primary Knock-on Atom</i> ou átomo colisional primário
PNM	Programa Nuclear da Marinha

PWR	<i>Power water reactor</i> ou reator de água pressurizada
RTNS-II	<i>Rotating Target Neutron Source-II</i>
SCP	Submarino convencionalmente armado com propulsão nuclear
SFT	<i>Stacking fault tetrahedron</i> ou falha no empilhamento em tetraedro
SIPN	<i>Stress-induced preferential nucleation</i> ou nucleação preferencial induzida pela tensão

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Constante de Rede para um sistema cúbico
A	Massa atômica
A_0	Área da seção transversal inicial de um corpo de prova de um ensaio de tensão uniaxial
Å	Angstrom ou 10^{-10} m
b	Vetor de Burgers ou barn, $1b = 10^{-24} \text{cm}^2$
c	Constante de Rede para um sistema cúbico e hexagonal ou velocidade da luz do vácuo, $c = 299.792.458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
c_i	Concentração de equilíbrio de autointersticiais
c_v	Concentração de equilíbrio de vacâncias
d	Distância interplanar
dpa	Deslocamento por átomo
$d\Omega$	Elemento de ângulo sólido
E	Módulo de elasticidade ou módulo de Young
E_c	Energia de corte eletrônica
E_d	Limite de deslocamento ou energia de deslocamento
E_i	Energia de formação de autointersticiais ou energia da partícula incidente
E_v	Energia de formação de vacâncias
eV	Elétron-volt
\check{E}	Energia mínima da partícula incidente
\hat{E}	Energia máxima da partícula incidente
F	Força aplicada na direção axial do corpo de prova de um ensaio de tensão uniaxial
f	Função de distribuição de fluência
J	Joule

k	Constante de Boltzmann, $k = 1,380649 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$ ou coeficiente de multiplicação
k_{eff}	Coeficiente de multiplicação efetivo
k_{∞}	Coeficiente de multiplicação infinito
L	Comprimento inicial do corpo de prova de um ensaio de tração uniaxial
m	Metro ou massa da partícula incidente
M	Massa do átomo ou núcleo alvo
MW_e	Megawatt elétrico
n	Nêutron ou quantidade de radiação
N	Densidade numérica ou quantidade de átomos
N_o	Densidade numérica inicial ou quantidade de átomos inicial
nm	Nanômetro ou 10^{-9} m
ns	Nanosegundo ou 10^{-9} s
Q	Energia de ligação nuclear
R	Taxa de reação nuclear
ppm	Parte por milhão
ps	Picosegundo ou 10^{-12} s
s	Segundo
t	Tempo
T	Temperatura ou energia cinética depositada
T_{dam}	Energia de dano
T_m	Temperatura de fusão
$T_{1/2}$	Meia-vida
u	Letargia
v	Velocidade
\bar{x}	Livre caminho médio

Z	Número atômico
α	Radiação alfa
β	Eficiência de deslocamento
β^-	Radiação beta menos
β^+	Radiação beta mais
γ	Radiação gama
ΔL	Varição do comprimento do corpo de prova de um ensaio de tração uniaxial em um instante
Δu	Varição de letargia
ΔUSE	Varição de <i>upper shelf energy</i> ou energia do limite superior
ϵ	Deformação de engenharia
λ	Constante de decaimento
Λ	Relação mássica entre a partícula incidente e o núcleo alvo
μ	Coefficiente de atenuação linear
$\frac{\mu}{\rho}$	Coefficiente de atenuação de massa
μm	Micrômetro ou 10^{-6} m
$\nu(T)$	Função de deslocamento
ρ	Densidade de discordâncias ou densidade
σ	Tensão de engenharia ou desvio-padrão
Σ	Seção de choque macroscópica
σ_a	Seção de choque microscópica de absorção
σ_D	Seção de choque microscópica de deslocamento
$\sigma(E_i, T)$	Seção de choque de transferência de energia
σ_s	Seção de choque microscópica de espalhamento
σ_t	Seção de choque microscópica total
τ	Vida média

τ_{PN}	Tensão de Peierls-Nabarro
τ_{tcr}	Tensão de cisalhamento resolvida crítica
ϕ	Fluxo de radiação ou ângulo de espalhamento no sistema de centro de massa
$\phi(E_i)$	Fluxo de partículas incidente dependente da energia
Φ	Fluência
Ω	Volume atômico

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
1.1	OBJETIVOS	24
2	CARACTERIZAÇÃO DAS LIGAS DE AÇO	26
2.1	MICROESTRUTURA DOS METAIS	26
2.1.1	DEFEITOS PONTUAIS	28
2.1.2	DEFEITOS LINEARES	30
2.1.3	DEFEITOS INTERFACIAIS E DEFEITOS VOLUMÉTRICOS	32
2.2	SOLICITAÇÃO DO MATERIAL E SUAS PROPRIEDADES MECÂNICAS	33
2.2.1	CARREGAMENTO GRADUAL	33
2.2.2	IMPACTO	36
2.2.3	CARREGAMENTO EM TEMPERATURAS ELEVADAS	37
2.3	MECANISMOS ATUANTES NA MICROESTRUTURA	38
2.3.1	TEORIA DAS DISCORDÂNCIAS	38
2.3.2	PROCESSAMENTO DOS METAIS	41
3	INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA	44
3.1	CONCEITOS ASSOCIADOS À FISSÃO NUCLEAR	44
3.2	DANOS E EFEITOS DA RADIAÇÃO	52
3.2.1	ENDURECIMENTO E FRAGILIZAÇÃO PELA RADIAÇÃO EM BAIXAS TEM- PERATURAS	57
3.2.2	PRECIPITAÇÃO E SEGREGAÇÃO DE SOLUTOS PELA RADIAÇÃO	58
3.2.3	INSTABILIDADE DIMENSIONAL	59
3.2.4	FRAGILIZAÇÃO POR HÉLIO EM ALTAS TEMPERATURAS	61
3.3	CÁLCULO DO DANO DA RADIAÇÃO	62
3.3.1	CONSIDERAÇÕES SOBRE A RADIAÇÃO INCIDENTE	64
3.3.2	SEÇÃO DE CHOQUE DE DESLOCAMENTO	65
3.3.2.1	DETERMINAÇÃO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA	66
3.3.2.2	DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE DESLOCAMENTOS POR PKA	67
3.3.2.3	CÁLCULO DAS SEÇÕES DE CHOQUE DE DESLOCAMENTO PARA OUTROS MODELOS	70
4	ANÁLISE DOS DANOS E EFEITOS DA RADIAÇÃO	75
4.1	ANÁLISE DA VIABILIDADE EXPERIMENTAL	75
4.1.1	IRRADIADOR CTEX	75
4.1.2	REATOR ARGONAUTA	76

4.1.2.1	METODOLOGIA DO CÁLCULO DO DPA	78
4.1.2.2	RESULTADOS E ANÁLISE	80
4.2	DANOS DE RADIAÇÃO EM UM VASO DE PRESSÃO DE UM REATOR PWR	83
4.2.1	O CÓDIGO MCNP	84
4.2.2	MODELAGEM DO NÚCLEO DE ANGRA 2	86
4.2.3	RESULTADOS E ANÁLISE	91
5	CONCLUSÃO	95
	REFERÊNCIAS	97
	APÊNDICE A – MEMÓRIA DE CÁLCULO PARA ESTIMATIVA DA TAXA DE DESLOCAMENTO POR ÁTOMO (DPA) PARA O CANAL J-9 DO REATOR ARGONAUTA	102
	APÊNDICE B – MEMÓRIA DE CÁLCULO PARA ESTIMATIVA DA TAXA DE DESLOCAMENTO POR ÁTOMO (DPA) PARA A REGIÃO DO NÚCLEO DO REATOR ARGONAUTA	107
	APÊNDICE C – ARQUIVO DE ENTRADA PARA O MCNP DO MODELO DESENVOLVIDO PARA ANGRA 2	112
	APÊNDICE D – MEMÓRIA DE CÁLCULO PARA ESTIMATIVA DO DESLOCAMENTO POR ÁTOMO (DPA) NA PAREDE INTERNA DO VASO DE PRESSÃO A PARTIR DO MODELO DE ANGRA 2	128
	ANEXO A – DEMONSTRAÇÃO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA PARA O ESPALHAMENTO ELÁSTICO PARA NÊUTRONS INCIDENTES EM UM NÚCLEO ALVO	132
	ANEXO B – DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DE RECUO DO NÚCLEO COM A EMISSÃO DE UM RAIOS-GAMA POR MEIO DA CAPTURA RADIOATIVA DE UM NÊUTRON	137

ANEXO C – ENERGIA TRANSFERIDA E SEÇÃO DE CHOQUE DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA PARA DIVERSOS TIPOS DE COLISÃO NÊUTRON-NÚCLEO . . .	138
ANEXO D – DEMONSTRAÇÃO DO NÚMERO DE DESLOCAMENTOS PARA O MODELO DE KINCHIN E PEASE PARA O DESLOCAMENTO DE ÁTOMOS	140
ANEXO E – SEÇÕES DE CHOQUE DE DESLOCAMENTO PARA O AÇO INOXIDÁVEL 18/10	143

1 INTRODUÇÃO

Uma instalação nuclear é definida pela Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN)¹ (1) como sendo uma instalação devidamente autorizada, na qual material nuclear é produzido, processado, reprocessado, utilizado, manuseado ou estocado em quantidades relevantes. Estão compreendidos nesta definição os reatores nucleares e as usinas que utilizam combustível nuclear para produção de energia térmica ou elétrica para fins industriais, dentre outras instalações em que há o manuseio de materiais do ciclo do combustível nuclear.

Neste tipo de instalação, a concepção, operação e controle de um reator nuclear perpassam por diversas análises, independentemente de sua finalidade, seja ela de potência, pesquisa, propulsão, entre outras. Um dos parâmetros de grande importância a ser estudado recai sobre os diversos materiais estruturais empregados nos componentes (2), conforme exemplificado na Figura 1.

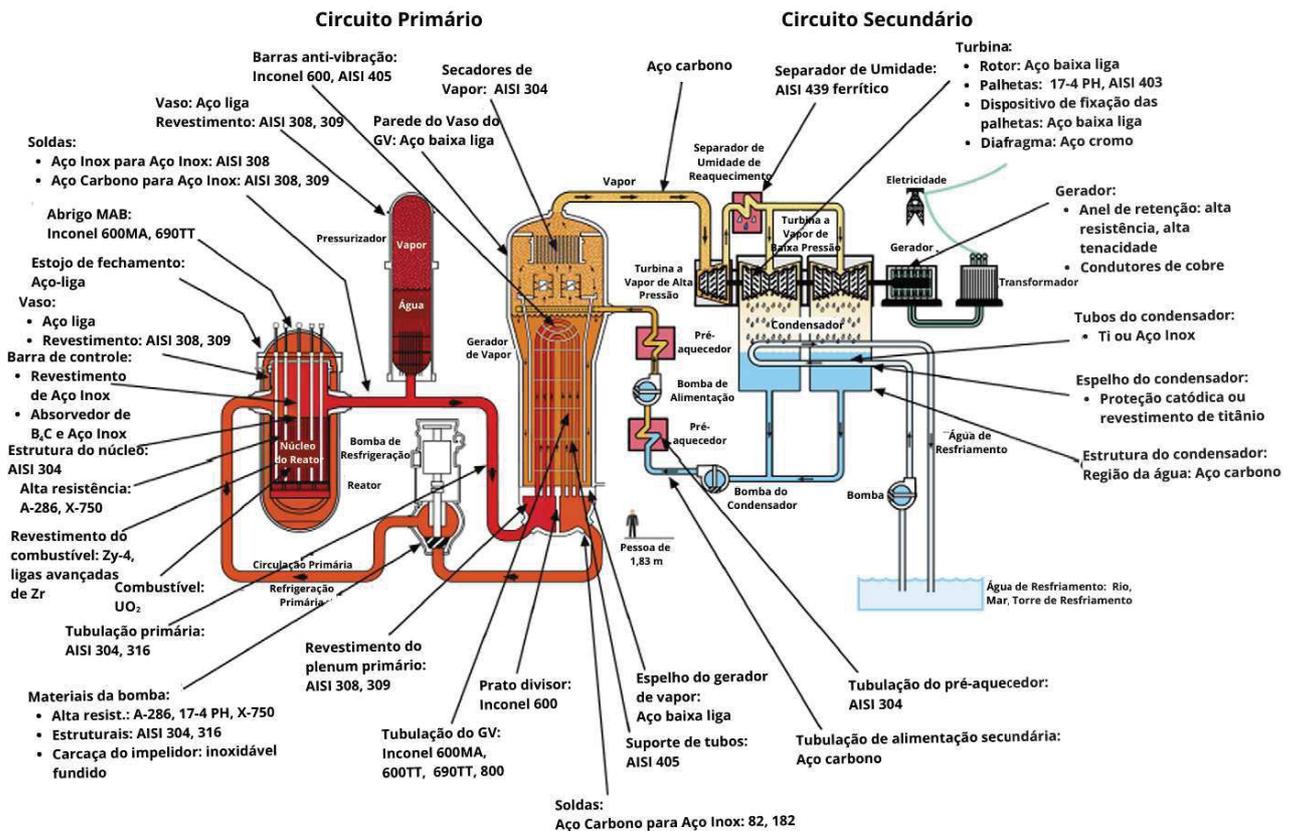


Figura 1 – Esquema do circuito primário e secundário de um reator de água pressurizada (PWR) e materiais constituintes (3).

¹ A CNEN, autarquia federal, criada pela Lei n°4.118, de 27 de agosto de 1962, tem a competência de baixar diretrizes específicas para radioproteção e segurança nuclear, atividade científico-tecnológica, industriais e demais aplicações nucleares, conforme inciso II, Art. 2°, Lei n° 7.781, de 27 de junho de 1989.

Estes materiais devem possuir características que garantam a confiabilidade no seu desempenho dentro dos critérios de projeto durante o funcionamento de um reator nuclear (2). Em outras palavras, devem ser capazes de atender plenamente os requisitos de segurança nuclear, definida pela CNEN (1) como a obtenção de condições operacionais, prevenção e controle de acidentes e mitigação apropriada das consequências de acidente, resultando em proteção dos indivíduos e do meio ambiente contra os riscos da radiação.

Observa-se que tais materiais estão inseridos em um ambiente extremamente agressivo, principalmente no núcleo do reator, em que pese destacar as altas temperaturas, altas tensões, favorecimento da corrosão e danos provocados por partículas de grande energia liberadas durante o processo de fissão das reações em cadeias do combustível nuclear (4). Para um reator do tipo PWR, como ilustrado na Figura 1, o refrigerante do circuito primário absorve o calor gerado pelas fissões nos elementos combustíveis presentes no núcleo do reator, sendo mantido na fase líquida pelo pressurizador tipicamente nas condições de pressão de operação de cerca de 15 MPa, sendo a temperatura do refrigerante na entrada e na saída do núcleo de 275°C e 325°C, respectivamente. De forma similar às demais usinas termoelétricas, o vapor (circuito secundário) que fornece a força motriz para as turbinas para conversão de energia elétrica no gerador é produzido a partir da troca de calor com o circuito primário (2).

É neste cenário que ao longo da vida de operação de um reator nuclear seus materiais experimentam uma contínua degradação de suas propriedades. Vale apontar que a forma dominante de degradação dependerá do tipo de material e das diferentes condições do ambiente no qual o componente estará inserido (4). A partir de determinado nível de dano, caso não sejam previstas, as alterações nas propriedades dos materiais podem resultar na alteração na performance e falhas. A depender da estrutura em que este material esteja sendo empregado, este tipo de falha é inadmissível, comprometendo o requisito de segurança nuclear (2).

A Figura 2 apresenta dois exemplos deste tipo de situação. Observa-se na Figura 2.a o arqueamento das varetas constituintes do elemento combustível do reator de potência Zion, devido ao alongamento axial excessivo associado ao crescimento de irradiação na liga de zircônio constituinte do *cladding*. Esta situação é indesejável, pois altera a performance termohidráulica e neutrônica do reator, além de se traduzir em problemas na integridade do *cladding*, responsável por reter os produtos de fissão do combustível (5). Na Figura 2.b, a fragilização e fratura são observadas em dutos de montagem do refletor de aço inoxidável austenítico do reator rápido de pesquisa BOR-60. A falha ocorreu durante uma manutenção programada envolvendo a retiradas dos dutos, sendo associada às altas tensões no procedimento e o inchaço de vazios decorrente da irradiação (6).

Dessa forma, denota-se a importância do tema em se buscar a segurança e previsibilidade no comportamento dos materiais estruturais utilizados neste tipo de instalação

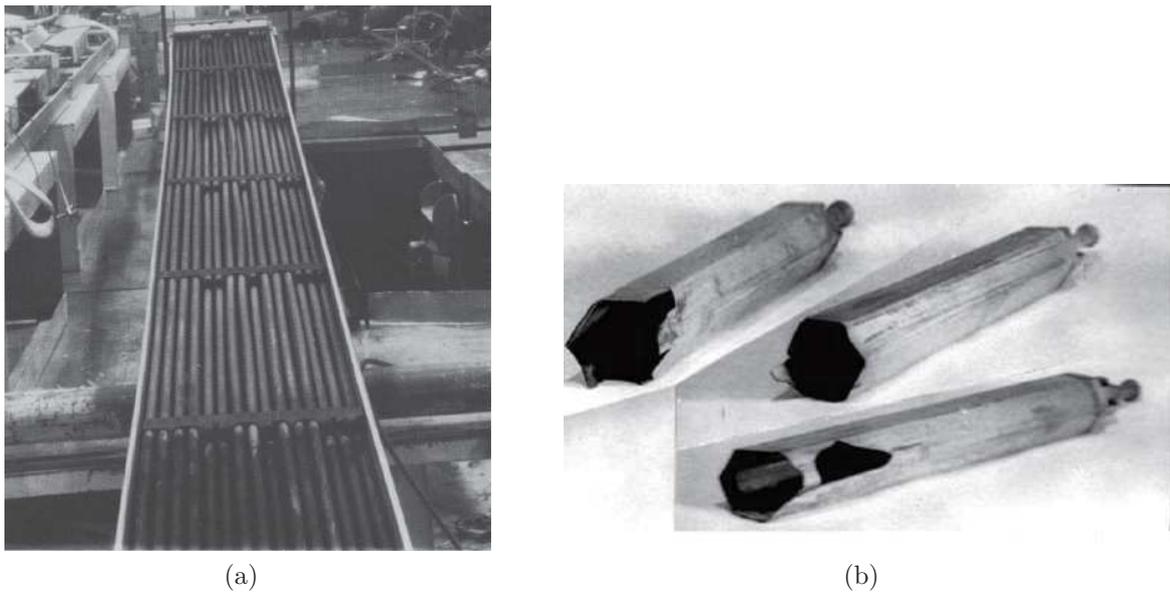


Figura 2 – Alterações decorrentes da irradiação em componentes de reatores: (a) arqueamento das varetas do elemento combustível (5) e (b) fragilização e fratura de dutos de montagem (6).

durante sua vida útil. Assim, o conhecimento destas características é essencial para o desenvolvimento de qualquer projeto de uma instalação nuclear, incluindo-se os de relevância que estão em andamento atualmente no país. Especificamente, convém mencionar o Programa Nuclear da Marinha (PNM), que abarca o domínio do ciclo do combustível nuclear e a construção do Laboratório de Geração Núcleo-Elétrica (LABGENE), cujo propósito é o desenvolvimento da capacitação tecnológica no projeto, construção, comissionamento, operação e manutenção de reatores nucleares do tipo PWR (7). Tal domínio tecnológico se mostra primordial para a construção do submarino convencionalmente armado com propulsão nuclear (SCPN).

Destaca-se que a análise do tema também ganha relevância em um cenário de extensão de vida útil de uma usina nuclear, como é o caso de Angra I, cuja licença operacional expira no ano de 2024, quarenta anos após o seu início de operação (8). Ressalta-se que as duas usinas em operação na Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto são do tipo PWR, sendo responsáveis pela geração de $1.884 MW_e$, conforme informações constantes no banco de dados da Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA²) (9).

A extensão de vida de uma usina nuclear é de grande interesse, tendo em vista suas características de alto custo de implantação e menores custos associados ao combustível para geração de energia elétrica, quando comparadas com outros tipos de usinas. Durante este processo de licenciamento, especial atenção é dada à análise dos potenciais efeitos do

² No âmbito nacional, as informações disponibilizada pela Agência estão amparadas no acordo promulgado entre a República Federativa do Brasil, a República da Argentina, a Agência Brasileiro-Argentina de Contabilidade e Controle de Materiais Nucleares (ABACC) e Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA) para aplicação de salvaguardas por meio do Decreto n° 1.065, de 24 de fevereiro de 1994.

envelhecimento dos componentes e sistemas, assim como suas formas de mitigação (10). A situação ilustrada na Figura 3, em que se observa uma grande quantidade de reatores com mais de três décadas de operação, enseja o estudo da extensão de vida para operação eficiente e segura (2). Convém registrar que usinas nucleares do tipo PWR correspondem a maior parcela das empregadas no mundo, totalizando 303 das 437 em operação até 2021 (9).

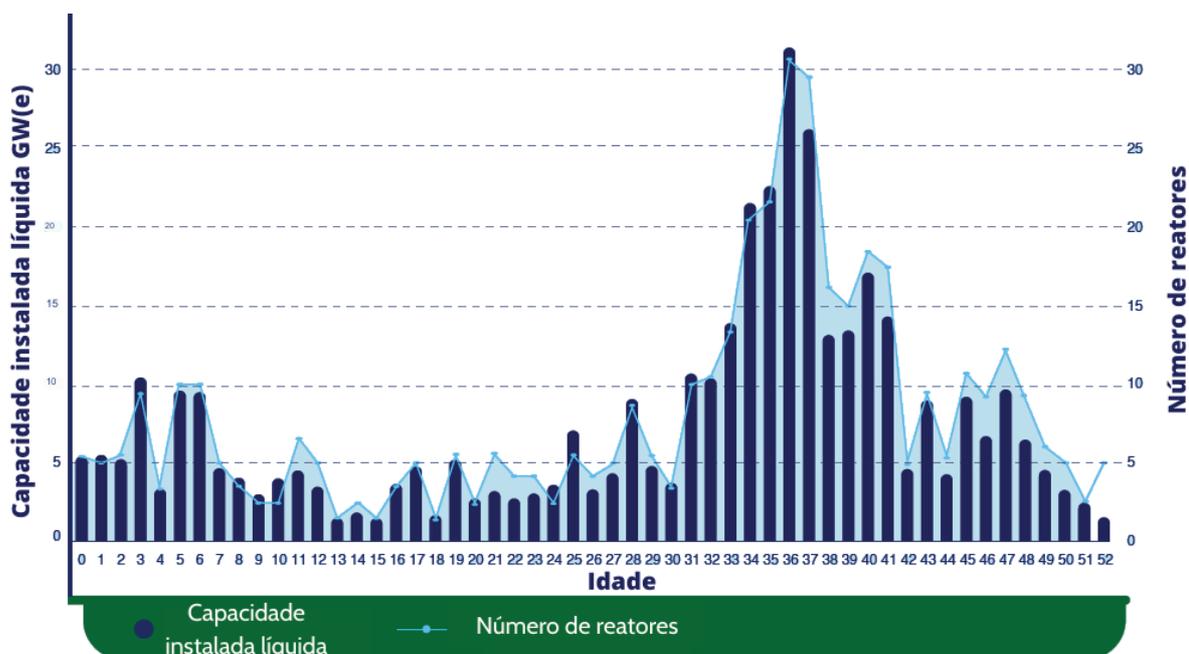


Figura 3 – Número de usinas nucleares e capacidade líquida instalada de geração de energia elétrica em função do tempo de operação (9)

Outra relevante contribuição do tema reside na compreensão e no desenvolvimento dos materiais empregados nas instalações nucleares almejando a próxima geração mais eficiente de reatores. Os projetos de reatores avançados propostos utilizam outros tipos de refrigerante, como sódio, sal líquido ou gás, que requerem temperaturas de operação mais altas e, por conseguinte, exigem ainda mais dos materiais empregados. Outro processo ainda em pesquisa é a geração de energia por meio da fusão nuclear, que também solicitará materiais específicos para sustentar as reações produzidas em um ambiente de alta temperatura pelo plasma responsável pela liberação de energia (2).

1.1 Objetivos

Em face ao exposto, verifica-se a relevância do estudo proposto nesta dissertação, cujo objetivo geral é apresentar uma metodologia para o cálculo da exposição aos danos de radiação em liga de aço em instalações nucleares, a partir de uma simulação computacional. Para consecução da pesquisa, verificou-se a necessidade do entendimento dos fenômenos microscópicos que ocorrem com a interação da radiação ionizante com o material e resultam

na alteração das suas propriedades físicas, químicas e mecânicas. O principal interesse recai sobre as propriedades de resistência dos materiais, que, por vezes, acabam sendo explicada por meio das alterações físicas e químicas no material.

Dessa forma, elencam-se os seguintes objetivos específicos alcançados no trabalho:

- apresentação dos danos e efeitos da radiação em instalações nucleares com base nas referências, assim como o desenvolvimento dos conceitos associados ao cálculo do dano de radiação;
- investigação da possibilidade de estudo experimental com irradiação de amostras no irradiador de pesquisa do Centro Tecnológico do Exército (CTEx) e do reator de pesquisa Argonauta do Instituto de Engenharia Nuclear (IEN) com vistas a analisar o endurecimento e a fragilização em baixas temperaturas pela radiação; e
- desenvolvimento de estimativa da exposição do dano da radiação para o vaso de pressão do núcleo do reator de potência de Angra 2 a partir de modelagem computacional com emprego do código *Monte Carlo N-Particle* (MCNP).

Para o atendimento destes objetivos, esta dissertação está estruturada da seguinte forma: será apresentada no Capítulo 2 uma explanação geral sobre os tópicos de interesse da ciência dos materiais para a caracterização das ligas de aço em análise; no Capítulo 3 serão apresentados os fundamentos das interações da radiação com a matéria associados à fissão nuclear e os danos e efeitos da radiação em ligas, incluindo-se uma métrica para mensuração do dano; o Capítulo 4 propõe-se a apresentar as investigações desenvolvidas sobre a viabilidade de irradiação de ligas de aço no irradiador de pesquisa do Centro Tecnológico do Exército (CTEx) e no Reator Argonauta e o desenvolvimento dos cálculos para o dano de radiação para o vaso de pressão de um reator de potência modelado a partir dos dados de Angra 2 com o emprego do código MCNP; por fim, o Capítulo 5 apresentará as conclusões do trabalho com base nos resultados obtidos sobre o tema.

2 CARACTERIZAÇÃO DAS LIGAS DE AÇO

A finalidade deste capítulo é apresentar a caracterização do material por meio de sua microestrutura e a forma com que este arranjo influencia as suas propriedades físicas, mecânicas e químicas. Com esta perspectiva, será possível desenvolver o entendimento de como a incidência da radiação ionizante promoverá alterações nestas propriedades. Para tal, o capítulo divide-se em três seções: na primeira, são apresentados os conceitos envolvidos na caracterização da microestrutura dos metais; na segunda, apresenta-se os conceitos relacionados à solitação do material, bem como suas principais propriedades mecânicas; e, na terceira, descreve-se alguns mecanismos atuantes na microestrutura de interesse para esta pesquisa.

2.1 Microestrutura dos Metais

As ligas de aço que são o objeto de estudo desta dissertação pertencem aos metais, assim definidos pela ciência dos materiais. Os metais são constituídos a partir da ligação primária principal entre seus elementos, denominada ligação metálica. O arranjo consiste na formação de núcleos iônicos que são mantidos unidos pelos elétrons de valência, aqueles que ocupam a última camada atômica, definida pelo número quântico principal. Estes elétrons formam o usualmente chamado "mar de elétrons" que por possuírem uma baixa energia de ligação aos núcleos nesta configuração são responsáveis por algumas propriedades físicas comuns aos metais, como a boa condutividade elétrica e térmica (11).

Considerando um modelo atômico de esferas rígidas, em que cada esfera representa um núcleo iônico, observa-se que a maioria dos metais se arranjam em padrões repetitivos para grandes distâncias atômicas em condições normais de solidificação, característica denominada cristalinidade. A menor divisão dentro desta estrutura cristalina repetitiva é chamada de célula unitária e é agrupada em sistemas a partir de seus parâmetros de rede (relações entre distâncias e ângulos formadas pelo arranjo dos átomos nas coordenadas de referência). As principais estruturas cristalinas encontradas nos metais são as cúbicas de corpo centrado (CCC), cúbicas de face centrada (CFC) e hexagonais compactas (HC), ilustradas na Figura 4. Observa-se que, para o sistema cúbico, a distância entre os átomos do seu vértice é a mesma em qualquer uma das coordenadas, sendo esta definida como a constante de rede (a) para o sistema. Já o sistema hexagonal possui duas constantes de rede, denominadas a e c . Convém mencionar que a ausência desta regularidade caracteriza um material amorfo (11).

Para os materiais CFC e HC, tem-se estruturas verdadeiramente compactas, constituídas a partir do empilhamento de planos de maior densidade planar de átomos (número

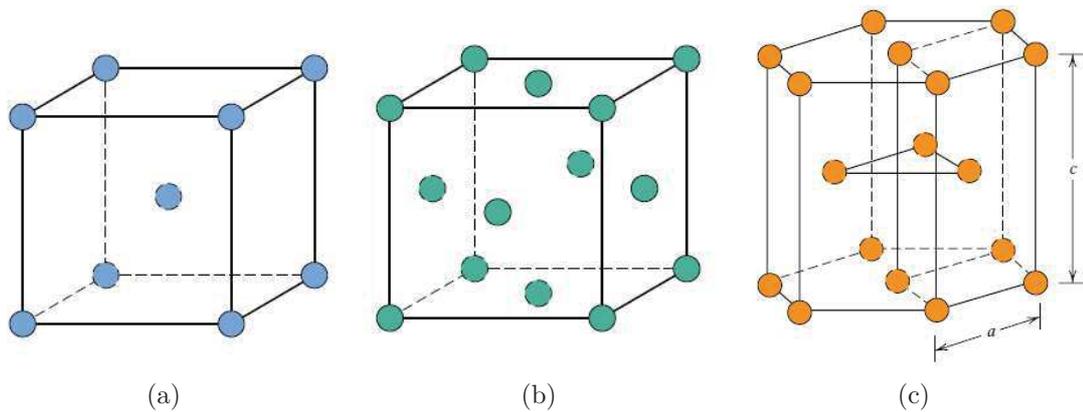


Figura 4 – Estruturas cristalinas comumente encontrada nos metais, (a) cúbica de corpo centrado - CCC, (b) cúbica de face centrada - CFC e (c) hexagonal compacta - HC.

Figuras adaptadas de (11).

de átomos por área). Estes arranjos podem ser visualizados na Figura 5. A distância de separação entre os planos é chamada de espaçamento interplanar (d). Convencionou-se com base em um sistema de coordenadas que tais planos são descritos pela família de planos $\{111\}$ para os CFC e $\{0001\}$ para os HC (planos basais), observados nas Figuras 5.a e 5.b, respectivamente (12).

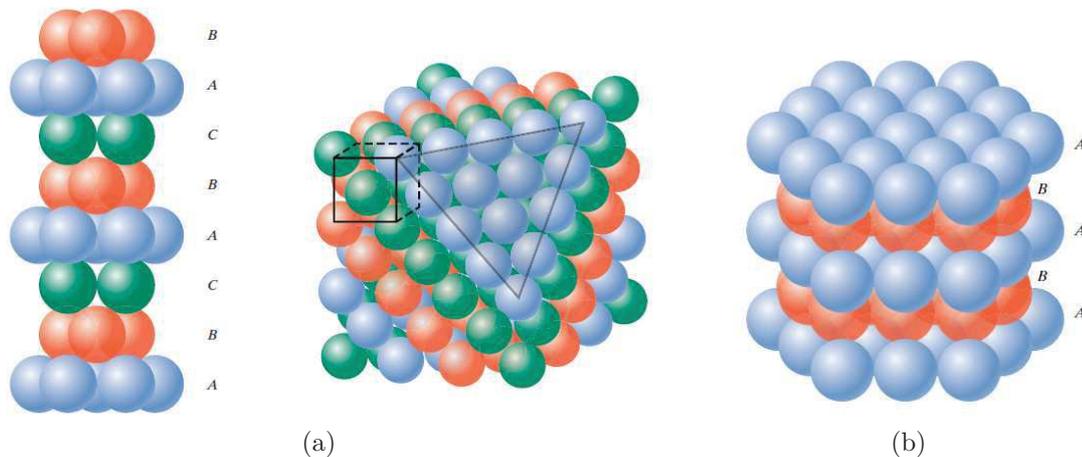


Figura 5 – Empilhamentos de planos compactos para estruturas cristalinas, (a) CFC - padrão ABC e (b) HC - padrão AB. Figuras adaptadas de (11).

No entanto, estruturas cristalinas perfeitas, como as abordadas até o momento, só seriam possíveis com átomos em completo repouso na temperatura do zero absoluto. Assim, devido à sua natureza física e ao processamento dos metais, tais materiais são dotados de defeitos que afetam suas propriedades. Estes defeitos podem ser classificados em pontuais, lineares, interfaciais e volumétricos (12).

2.1.1 Defeitos Pontuais

Os defeitos pontuais são chamados de dimensão zero e estão exemplificados na Figura 6. Os primeiros a serem descritos são as vacâncias, formadas pela ausência de um átomo de alguma das posições da rede cristalina. A energia de formação de uma vacância (E_v) é definida como a energia necessária para se retirar um átomo da sua posição e colocá-lo na superfície do cristal. Com base nos princípios da termodinâmica, pode-se definir a concentração de equilíbrio das vacância (c_v) a partir energia livre mínima no sistema por meio da Equação 2.1, em função da temperatura do material (T) e da constante de Boltzmann (k). As vacâncias estão sujeitas ao fenômeno de transporte de massa por movimentação atômica denominado difusão, a qual ocorrerá no material em face dos gradientes de concentração. A energia de formação de uma vacância é da ordem de 1 eV e sua variação para os diversos tipos de metais tem grande impacto na concentração de vacância em função do caráter exponencial da referida equação (12).

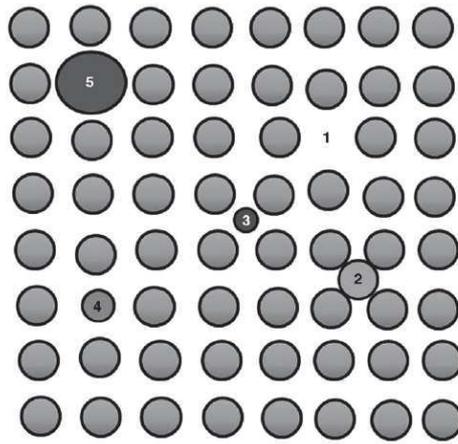


Figura 6 – Defeitos pontuais em uma rede cristalina em duas dimensões, monovacância (1), autointersticial (2), átomo de impureza intersticial (3), átomo de menor dimensão substitucional (4) e átomo de maior dimensão substitucional(5) (12).

$$c_v = e^{\left(\frac{-E_v}{kT}\right)} \quad (2.1)$$

Os intersticiais são formados pela ocupação de átomos nos sítios intersticiais da rede cristalina, posições que não estariam sendo normalmente ocupadas, as quais também estão exemplificadas na Figura 7 para um material CFC. Os intersticiais podem ser formados por átomos da própria rede (autointersticial) ou por impurezas presentes no material. Para os autointersticiais, a sua concentração de equilíbrio pode ser descrita por meio da Equação 2.2, semelhante à concentração de vacâncias. A energia de formação (E_i) é interpretada como a energia necessária para introduzir um átomo que estava na superfície da rede em um sítio intersticial. Observa-se que esta posição é menor que a do átomo e, por isso, este defeito gera distorções na rede, além de possuir uma energia de formação maior do que de uma vacância para o mesmo cristal (11) (12). Vale apontar que um tipo de defeito de

interesse para esta pesquisa é o par Frenkel, formado quando um átomo da rede cristalina se desloca de sua posição original e passa a ocupar um dos interstícios, dando origem a um par vacância e autointersticial (12).

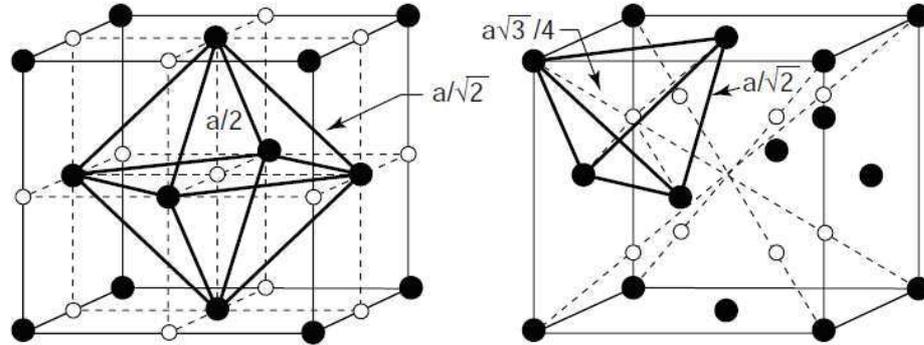


Figura 7 – Representação dos intersticiais para uma célula CFC nas posições octaedro e tetraedro, respectivamente (12).

$$c_i = e^{\left(-\frac{E_i}{kT}\right)} \quad (2.2)$$

Em uma comparação entre as vacâncias e autointersticiais, observa-se que a energia de formação é menor para a primeira (menores que 2 eV contra maiores que 2 eV), enquanto a energia de migração é menor para a segunda (maiores que 0,5 eV contra menores que 2 eV). Já as distorções e tensões geradas na rede cristalinas são maiores, em módulo, para os autointersticiais (de $+1\Omega$ a $+2\Omega$) do que para as vacâncias (de $-0,1\Omega$ a $-0,5\Omega$), que resultarão em interações mais fortes com outros elementos da rede cristalina (12).

Quanto aos defeitos pontuais relacionados às impurezas, os elementos presentes nas ligas podem ser naturais ou inseridos para conferir propriedades desejadas aos materiais. Quando determinada quantidade de impureza (soluto) é adicionada a um material hospedeiro (solução), conservando-se a sua estrutura cristalina, tem-se a formação de uma solução sólida, terminologia empregada para as ligas (11).

Por oportuno, convém mencionar que existe uma concentração máxima em que os solutos se dissolvem no material matriz, chamado de limite de solubilidade. A partir deste ponto, tem-se a formação de uma nova fase no sistema, ou seja, outra porção com características físicas e/ou químicas diferentes da inicial. Este limite depende da temperatura a qual o material está submetido e sua variação também pode ocasionar a mudança de fase deste material (11). Como exemplos de interesse, tem-se que o ferro puro a temperatura ambiente possui uma estrutura CCC e é chamado de ferrita ou ferro α . A partir da temperatura de 912°C , a ferrita se arranja em austenita ou ferro γ , que possui uma estrutura CFC. A introdução da concentração de carbono superior ao limite de solubilidade nestas estruturas poderá levar a formação de uma nova fase, a cementita (Fe_3C) (11) (12).

Uma impureza pode se arranjar na estrutura cristalina ocupando a posição intersticial. Um dos fatores que favorecem a acomodação destes átomos é o seu raio atômico. Geralmente, como estes sítios são bem menores comparados aos das posições da estrutura cristalina, elementos como hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, boro e carbono são intersticiais comumente encontrados (12).

Outra manifestação das impurezas na rede cristalina ocorre como átomos substitucionais, caracterizados como impurezas que ocupam uma posição da célula unitária em detrimento do átomo da rede. Para sua formação, as regras de Hume-Rothery acerca da solubilidade geralmente são atendidas: diferenças entre raios atômico menor do que 15% para o átomo hospedeiro e o soluto (fator do tamanho atômico); baixa diferença de eletronegatividade entre o soluto e o solvente (fator de afinidade química); mesmo número de valência (fator de valência relativa) e mesma estrutura cristalina (fator da estrutura cristalina) dos átomos constituintes da liga para solubilidade extensiva. Como pode ser observado na Figura 6, a depender do tamanho do átomo substitucional, surgirão deformações diversas na estrutura cristalina: se o átomo substitucional for de maior dimensão, ele tende a gerar compressões nas suas adjacências, enquanto que, se for menor, surge uma tendência de tração na vizinhança (11) (12).

2.1.2 Defeitos Lineares

Os defeitos lineares ou unidimensionais são chamados de discordâncias e podem ser de três tipos: cunha (ou aresta); helicoidal (ou espiral) e mistas. A maioria das discordâncias se manifestam na forma mista em um cristal, ou seja, não são puramente cunha nem helicoidal. Na ilustração constante da Figura 8, pode-se observar uma exemplificação em que uma mesma linha de discordância em uma determinada posição (região próxima do ponto A) possui um caráter de uma discordância helicoidal e em outra (região próxima do ponto B) assume as características de uma discordância em cunha (11).

Uma característica importante das discordância é representada pelo vetor de Burgers (b), que expressa a magnitude e a direção da distorção gerada na rede. Nota-se que para um metal, este vetor apontará para a direção cristalográfica compacta e sua magnitude será de um espaçamento interatômico, como representado na Figura 8 (11). A natureza de uma discordância é definida a partir da orientação deste vetor e da linha de discordância: são paralelos para as do tipo helicoidal e perpendiculares para as do tipo cunha (13).

Todos os tipos de discordâncias geram distorções na rede cristalina, produzindo campos de tensões nas suas redondezas e aumentando a energia do cristal. Observa-se que a discordância em cunha na forma da representação da Figura 8 produz campos de compressão na região superior e de tração na inferior. Esta condição pode ser "visualizada" ao se interpretar a sua formação como a inserção de um semi plano extra na rede cristalina. Já a discordância em hélice produzem efeitos de cisalhamento puro, que resultam no tipo

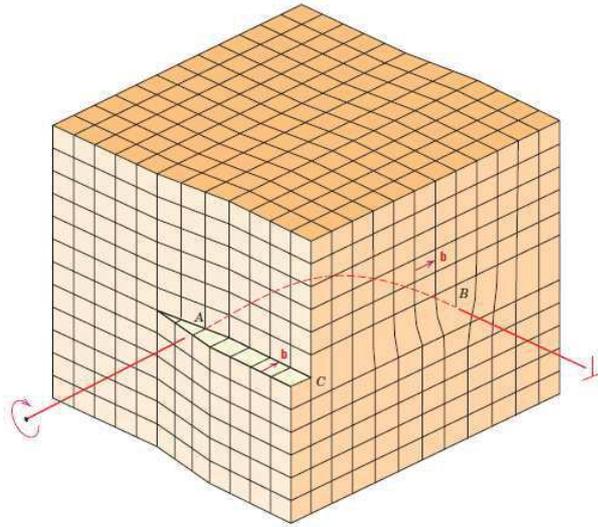


Figura 8 – Representação de uma linha de discordância que possui caráter cunha, helicoidal ou mista a depender da região do cristal (11).

de deformação ilustrada (11) (13).

Neste contexto, é importante notar que as discordâncias não estão em equilíbrio no sistema por possuírem uma energia associada maior do que o acréscimo gerado na entalpia do sistema, em contraste às vacâncias e autointersticiais. Dessa forma, a formação das discordâncias está associada às tensões mecânicas e térmicas, colapso de vacâncias, entre outros, sendo introduzidas pelos processamento dos materiais, por exemplo, durante a solidificação, resfriamento e trabalho mecânico, ou até mesmo pela exposição de radiação de alta energia (12).

A quantificação destes defeitos lineares pode ser feita por meio da densidade de discordâncias (ρ), definida como o comprimento total das discordâncias por unidade de volume. Outra definição deste parâmetro é o número de discordâncias que atravessa uma área e geralmente é expressa nas unidades cm^{-2} ou m^{-2} . Valores típicos para cristais de metais recozidos estão entre 10^{10} e $10^{12} m^{-2}$ e aumentam rapidamente com a deformação plástica (13).

Estas discordâncias tendem a formar um emaranhado de linhas no cristal. É importante observar que suas terminações não ocorrem no interior do cristal, devendo formar um anel ou se filiar a outras discordâncias em pontos chamados de nós. Como as discordâncias carregam seus vetores de Burgers, a condição necessária para a formação destes nós é que este vetor seja conservado. Por exemplo, ao observar uma discordância que se abre em duas outras, seus vetores de Burgers devem obedecer a equação $\vec{b}_1 = \vec{b}_2 + \vec{b}_3$. Na região externa ao cristal, tais discordâncias podem terminar na sua superfície ou contornos de grãos (13).

2.1.3 Defeitos Interfaciais e Defeitos Volumétricos

As referidas superfícies livres e contornos de grãos pertencem aos grupos de defeitos interfaciais ou planares, definidos como superfícies que separam regiões dos materiais que possuem estruturas cristalinas e/ou orientações cristalográficas diferentes. As superfícies livres são as mais óbvias e são delimitadas pela região onde o cristal acaba. A ausência de átomos e, por conseguinte, ligações dão origem a chamada de energia de superfície, que favorecem as interações químicas na região (11).

Por sua vez, os contornos de grãos são formados a partir do encontro das interfaces na solidificação de diferentes direções de núcleos cristalinos. Com o resfriamento gradual do metal, diversos pontos de nucleação dos cristais surgem e passam a crescer com a sucessiva adição de átomos. A orientação distinta entre os cristais dará origem a estes contornos de grãos formando uma estrutura policristalina, como a dos aços (11).

A diferença de orientação caracteriza um contorno de grão de baixo ângulo (cerca de 10°) ou de alto ângulo (de 10° a 15°). Os de baixo ângulo podem ser descritos com base em um arranjo de discordâncias em cunha (contorno de inclinação), como observado na Figura 9.a, ou helicoidais (contorno de torção). O ângulo é definido a partir da relação entre o vetor de Burgers (b) e o espaçamento entre as discordâncias. Para os de alto ângulo, a irregularidade nas ligações favorece a formação de regiões quimicamente ativas, como as descritas para a superfície livre, e as impurezas tendem a se segregar preferencialmente nestes pontos (11) (12).

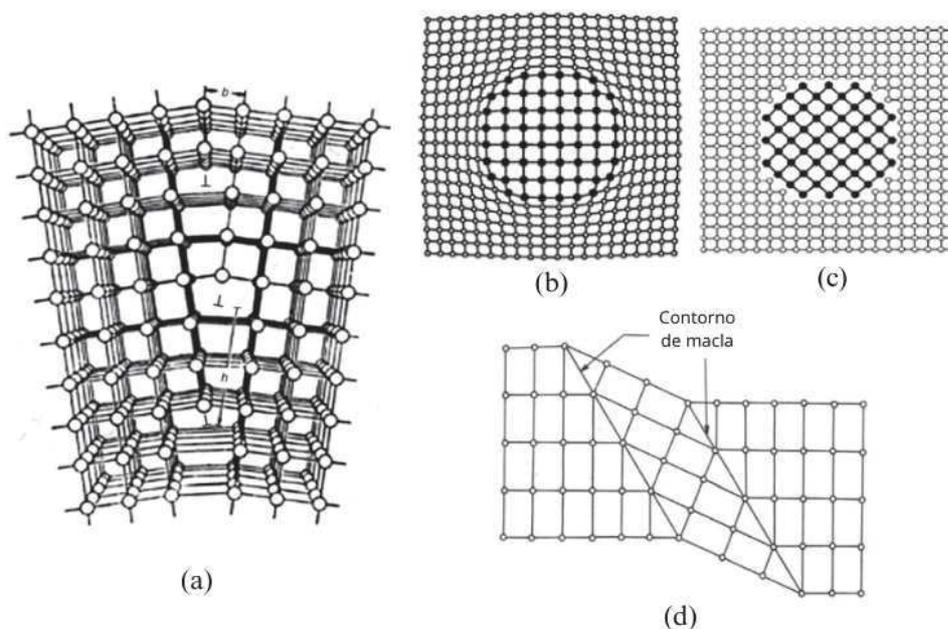


Figura 9 – Representações de defeitos interfaciais de contornos de grão (a), fase coerente (b) e incoerente (c) e de macla (d) (12).

Outros defeitos interfaciais de contorno se manifestam nas fases ou em decorrência

à deformação plástica e tratamento térmico do material. Um material pode possuir mais de uma fase e as regiões de interface entre elas definirão os contornos de fase. Estes contornos serão caracterizados pela sua coerência (grau de correspondência entre os átomos de cada fase), podendo ser coerentes (Figura 9.b), semicoerentes ou incoerentes (Figura 9.c). A deformação plástica e o recozimento podem dar origem aos contornos de macla (Figura 9.d), arranjo de átomos espelhados neste contorno que surgem em função de uma tensão de cisalhamento localizada (11) (12).

Conforme mencionado anteriormente, as estruturas cristalinas podem ser interpretadas como sobreposição de planos atômicos. Para os CCC e HC tem-se o empilhamento de planos no padrão AB, enquanto que para os CFC o padrão é ABC (ver Figura 5). Quando ocorre uma alteração nesta sequência de empilhamento os defeitos planares de falhas no empilhamento. Observa-se que, pelo modelo de esferas rígidas, para as estruturas CFC, após o plano A não há distinção geométrica entre os planos B ou C, possibilitando que regiões com este defeito surjam no cristal (11). Tais defeitos podem ser distinguidas entre intrínsecas, quando se tem parte do plano removido, ou extrínsecas, quando se tem parte de um plano extra inserido (13). Um condição particular é observada falhas no empilhamento em tetraedro (SFT - *stacking fault tetraedron* formado por 4 planos trinagulares nas famílias de planos $\{111\}$, que constituem a maioria dos conglomerados de vacâncias em metais CFC e ligas (12).

Por fim, quanto aos defeitos volumétricos também chamados de defeito de massa, cita-se as trincas, precipitados, dispersóides, vazios e bolhas (12). Cavidade é o termo genérico para descrever vazios e bolhas. Historicamente, vazios são caracterizados para coleções de vacâncias livres de gases (6). As bolhas são assim denominadas quando as cavidades contém hidrogênio ou hélio (14). Normalmente, são inseridos no processamento e fabricação de materiais, mas a irradiação também é capaz de produzir estes defeitos tridimensionais (12).

2.2 Solicitação do Material e suas Propriedades Mecânicas

Com base na caracterização da microestrutura dos metais, é possível desenvolver um melhor entendimento sobre os mecanismos atuantes durante a solicitação do material. Para tal, serão apresentadas situações comuns em que podem ser extraídas propriedades aplicáveis na concepção de diversas estruturas, incluindo-se as instalações nucleares.

2.2.1 Carregamento Gradual

A aplicação de carga ao material resultará em diversos estados de tensões e, conseqüentemente, deformações na estrutura cristalina caracterizada na seção anterior. Uma primeira abordagem ao assunto pode ser feita na distinção da forma em que estes

materiais se deformam. Com o carregamento em uma taxa que permita a acomodação dos átomos, tem-se inicialmente uma região de deformação linearmente proporcional, definindo-se o regime de deformação elástico. Este movimento pode ser entendido a partir de alterações nas distâncias atômicas e estiramento das ligações. Após a retirada da carga, há a restituição das dimensões originais, que pode ser interpretada como o retorno dos átomos à posição inicial da rede cristalina de menor energia (11).

Com o acréscimo da carga aplicada, o material pode atravessar uma região de transição e adentrar ao regime plástico de deformação, em que se tem a conservação de parte destas deformações após o seu descarregamento. Diferentemente do regime elástico, um grande número de átomos devem ter suas ligações interatômicas rompidas e rearranjadas em uma nova configuração. Ao se retirar o esforço aplicado, os átomos passarão à ocupar as novas posições energeticamente favoráveis formadas, resultando em uma deformação permanente no material (11).

Um dos ensaios mais comuns empregados em que pode-se distinguir estes regimes é o ensaio de tração uniaxial. O ensaio consiste na aplicação de uma carga de tração uniforme acrescida gradativamente, geralmente em uma condição de taxa de deformação constante, a um corpo de prova padronizado, até o momento de sua ruptura. O alongamento na direção da carga é medida e, com base nestas informações, pode ser esboçada uma curva de tensão-deformação de engenharia, como a apresentada na Figura 10. No eixo das abscissas, expressa-se a deformação de engenharia (ϵ) em percentual como sendo a razão entre a variação do comprimento (ΔL) e o comprimento total (L) do corpo de prova ensaiado em um dado instante. No eixo das ordenadas, expressa-se a tensão de engenharia (σ) aplicada ao corpo de prova calculada a partir da razão entre a força aplicada na direção axial (F) e a seção transversal inicial do corpo de prova (A_o) (12).

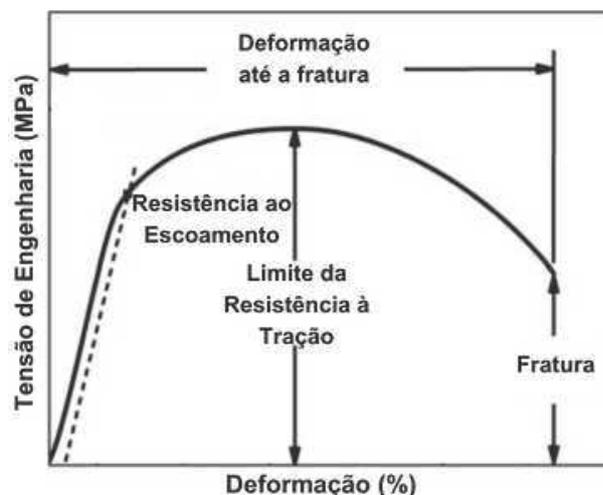


Figura 10 – Curva típica de tensão-deformação de engenharia (12).

A utilização desta curva de simples elaboração fornece resultados práticos, apesar de não se tratar da curva de tensão-deformação verdadeira. A distinção entre as duas

ocorre em face da redução da seção transversal da amostra em função do alongamento produzido na direção da carga. Na realidade, a tensão no material não diminui como mostrado na curva de engenharia. O valor é crescente até a ruptura do corpo de prova ensaiado. As diferenças entre os valores fornecidos pelas curvas divergem substancialmente a partir do ponto em que se inicia o empescoçamento, estrangulamento da seção do corpo de prova (11) (12).

Com base na curva de tensão-deformação de engenharia diversas propriedades mecânicas podem ser extraídas, sendo as principais de interesse a rigidez, resistência, dureza, ductilidade, resiliência e tenacidade (11).

Como mencionado, no regime elástico, em que a deformação é linearmente proporcional, define-se a rigidez de um material por meio de seu módulo de elasticidade (E), também chamado de módulo de Young. Esta medida é calculada pela inclinação da reta nesta região da curva, conforme Equação 2.3 e fornece uma indicação do quanto um material é resistente à deformação elástica (11).

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon} \quad (2.3)$$

Convém citar alguns pontos obtidos a partir das tensões expressadas nas ordenadas da curva de tensão-deformação de engenharia que configuram a resistência do material, capacidade de suportar deformações devido à carga aplicada. O início do comportamento plástico do material delimita o limite de proporcionalidade do material (11). Considera-se por convenção a resistência ao escoamento como o ponto de intersecção da curva obtido a partir da extensão da reta do módulo de elasticidade para $\epsilon = 0,2\%$. Este procedimento é adotado em virtude da transição para alguns materiais não ser definida com exatidão (15). Já o valor máximo obtido na curva define o limite de resistência à tração ou resistência última do material, ponto a partir do qual, mantendo-se a carga aplicada, ocorrerá a sua ruptura (11).

Apesar da determinação da dureza de um material ser obtido a partir de outros ensaios (tipicamente ensaio de dureza tipo Rockwell e Brinell, além de ensaios de microdureza como Knoop e Vickers), a resistência do escoamento extraído da curva de tensão deformação pode ser empregado como um indicativo de dureza, tendo em vista que há uma relação aproximada de proporcionalidade entre eles. Por definição, a dureza de um material é caracterizada como a sua resistência à deformação plástica (11).

No regime de deformação plástica, pode-se observar a ductilidade de um material, que representa a sua capacidade de se deformar permanentemente sem que ocorra fratura. A ductilidade é uma propriedade desejável aos materiais estruturais, pois atua a favor da segurança possibilitando a verificação de deformações excessivas devido a esforços não previstos antes da ruptura (11).

As propriedades de resiliência e tenacidade medem a capacidade com que o material absorve energia durante a deformação e pode ser interpretada como a área abaixo da curva de tensão deformação. O que diferencia as duas propriedades é o regime de deformação que estão inseridas: a resiliência considera somente a energia absorvida no regime elástico e a tenacidade abrange a totalidade da deformação. Tal qual a ductilidade, a tenacidade também é uma propriedade interessante para as instalações nucleares, uma vez que materiais tenazes requererão maiores energias para que fraturem (11).

2.2.2 Impacto

Alternativamente, a resiliência e a tenacidade de um material podem ser avaliadas a partir de um ensaio de impacto. O modo com que os materiais se rompem pode caracterizar uma fratura frágil ou dúctil. Para materiais frágeis, a energia absorvida pelo material está integralmente associada à sua resiliência. Em materiais dúcteis, a tenacidade é responsável pela maior parte da energia absorvida (11).

Por oportuno, releva apontar algumas características da fratura em materiais submetidos a esforços trativos. O processo está associado a formação e propagação de trincas, um tipo de defeito volumétrico na rede cristalina. Quanto ao tipo de fratura, surgem padrões distintos nas rupturas das amostras. Para um material frágil, a amostra pouco se deforma e apresenta um padrão granular na sua seção, que pode ser caracterizado pela propagação da trinca de forma sucessiva e repetida nas ligações atômicas ao longo dos planos cristalográficos (clivagem) ou ao longo dos contornos dos grãos (intergranular). Para um material dúctil, verifica-se uma deformação na amostra por meio do empescoamento e a ruptura em um padrão fibroso, decorrente da formação vazios que coalescem para formar a trinca (11).

A tenacidade à fratura pode ser analisada qualitativamente por meio dos ensaios de simples realização como os de impacto Charpy e Izod, convencionalmente. Amostras preparadas com um entalhe (concentrador de tensão) para direcionar a fratura são submetidas à queda de um martelo que terá seu movimento restringido pela capacidade da amostra de absorver sua energia. Apesar das informações extraídas destes ensaios serem qualitativas, com base em uma série de ensaios com amostras de um mesmo material em diferentes temperaturas, é possível esboçar uma curva de transição entre a fratura dúctil e frágil para alguns materiais. Por meio desta curva é possível observar em que faixa de temperatura a ruptura do material deixará de acontecer na forma dúctil e passará para frágil (11).

Em termos de projeto, o comportamento dúctil do material estrutural representa um fator de segurança, como já mencionado na seção anterior. Um exemplo da importância do conhecimento desta característica no âmbito das instalações nucleares se mostra durante à parada a frio de um reator para recarga, rotina em que ocorre uma grande variação de

temperatura em diversos componentes (3).

2.2.3 Carregamento em Temperaturas Elevadas

Um último fenômeno associado a falhas a ser abordado é a fluência, que ocorre quando o material é deformado em função do tempo nas condições de temperaturas elevadas e aplicação de tensões mecânicas, usualmente provenientes de uma carga estática. Este comportamento pode ser analisado em um ensaio típico de fluência. Busca-se aferir a deformação (ϵ) ocorrida em uma amostra em função do tempo transcorrido, mantendo-se um carregamento uniaxial de tração em um valor constante, assim como a sua temperatura. Dessa forma, suas curvas são esboçadas em função destes dois parâmetros, como pode ser observado na Figura 11 (12).

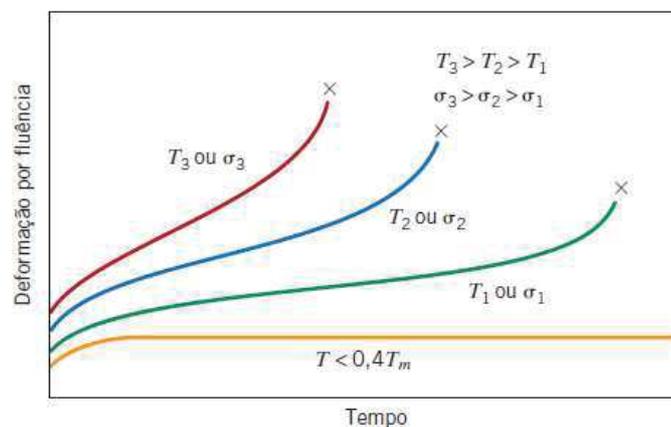


Figura 11 – Curvas típicas obtidas a partir de ensaios de fluência com variação na temperatura ou na tensão aplicada (11).

Esta curva pode ser dividida em três estágios denominados fluência primária, secundária e terciária. A distinção se dá na forma com que ocorre a concorrência entre os mecanismos de deformação causados pela tensão aplicada e a recuperação da microestrutura possibilitada pela temperatura elevada. Na primeira fase de fluência transiente, a taxa de deformação é decrescente, o que denota um incremento na resistência à deformação (encruamento). No segundo estágio ou fluência estacionária, a taxa de deformação é constante, sugerindo um equilíbrio entre os processos. Esta é também a região de grande importância tecnológica, já que é a condição em que o material estará submetido durante maior parte de sua vida útil em uma instalação. Por fim, ocorre a ruptura com o acréscimo na taxa de deformação (11) (16). Estes mecanismos serão abordados novamente na próxima seção deste capítulo.

Como pode ser observado na Figura 11, com o acréscimo da temperatura ou carregamento aplicado durante o ensaio, obtém-se aumentos na deformação instantânea inicial e na taxa de fluência estacionária, assim como a diminuição no tempo da ruptura. É importante observar que o fenômeno passa a ocorrer em temperaturas superiores a 0,3 ou

0,4 da temperatura de fusão (T_m) do material ($0,5T_m$ para algumas ligas (12)). Portanto, fora destas condições, a deformação é independente do tempo após a deformação inicial (11) (16).

A partir da realização destes ensaios com temperaturas e/ou tensões acima do regime de operação previsto na aplicação, é possível elaborar uma extrapolação dos resultados em um período de tempo menor. Tal prática é fundamental, tendo em vista que, no âmbito das instalações nucleares, alguns componentes como o vaso de contenção do reator são insubstituíveis e operam durante toda a sua vida útil (tipicamente 40 anos para PWR, podendo-se estender por mais 20 anos em usinas nucleares). Além de se traduzir em um fator de segurança, a previsibilidade deste fenômeno também se mostra essencial para garantir a eficiência da instalação durante sua operação, em face das deformações excessivas nos componentes de uma instalação nuclear (12).

2.3 Mecanismos Atuantes na Microestrutura

Considerando as definições apresentadas relacionadas à caracterização e às propriedades mecânicas dos metais, é possível apresentar o entendimento de como se sucedem alguns mecanismos atuantes na microestrutura do material de interesse para a pesquisa. Tais mecanismos se prestam a justificar o comportamento destes materiais. Ademais, se mostram fundamental para o entendimento das alterações causadas pela incidência da radiação no material.

2.3.1 Teoria das Discordâncias

A deformação plástica de um cristal pode ser interpretada como o escorregamento entre seus planos devido as tensões de cisalhamento locais resultantes da carga aplicada. A tensão necessária para dar início a este processo é denominada tensão de cisalhamento resolvida crítica (τ_{tcr}). No entanto, o que se observou para monocristais é que a tensão teórica para que o escorregamento ocorra era muito superior aos valores encontrados na prática (10^2 até 10^6 para cristais recozidos) (13). Em um monocristal, a tensão τ_{tcr} corresponde a resistência de escoamento observado na curva de tensão-deformação de engenharia para materiais policristalinos (12).

Um dos fatores que contribui na explicação de tal discrepância se deve à presença das discordâncias nos cristais, possibilitando que o movimento atômico ocorra de forma parcelada ao invés de se manifestar no plano atômico como um todo. As distorções causadas pela presença das discordâncias favorecem a troca das ligações dos átomos da rede cristalina com mais facilidade (11). Logo, a tensão aplicada necessária para movimentação das discordâncias é muito menor do que a tensão τ_{tcr} e é denominada de tensão de Peierls-Nabarro (τ_{PN}) (12).

O movimento das discordâncias pode se dar de duas formas: por deslizamento ou por escalagem. A primeira forma conservativa ocorre no plano em que contém o vetor da linha da discordância e seu vetor de Burgers e caracteriza uma discordância de maior mobilidade (*glissile*). A segunda ocorre em uma forma não conservativa e o movimento da discordância se dá na direção normal à superfície do deslizamento, geralmente associada à discordâncias de menor mobilidade (*sessile*). O escorregamento dos cristais que resulta na deformação plástica é vista como o resultado de muitos deslizamentos. Este processo é exemplificado na Figura 12, em que um cristal submetido a uma tensão de cisalhamento produzirá uma deformação plástica no cristal por meio do movimento de discordâncias em cunha e helicoidal (13).

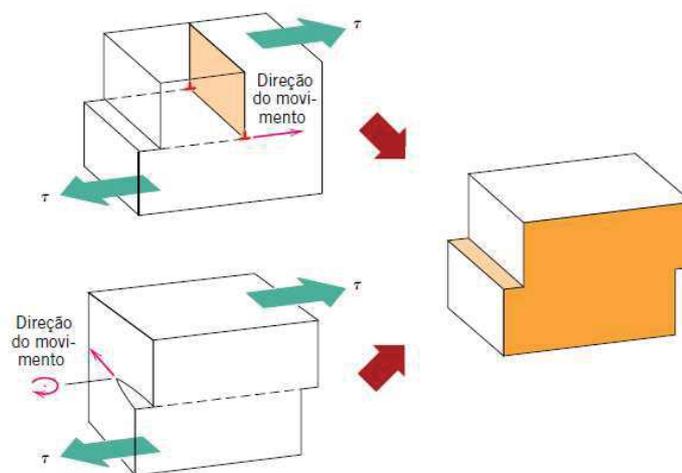


Figura 12 – Representação da deformação plástica em um cristal pelo movimento de discordâncias em cunha e helicoidal.

Adaptado de (11).

Vale apontar que o deslizamento das discordâncias no âmbito das estruturas cristalinas será energeticamente favorável entre planos de maior densidade atômica e em alguma das direções compactas (maior densidade atômica linear). Um cristal CFC possui doze sistemas de escorregamento preferenciais, constituídos dos quatro planos compactos $\{111\}$ combinados às três direções compactas $\langle 110 \rangle$. Já uma estrutura HC possui apenas três sistemas (plano basal combinado a três direções), o que limita a liberdade de deslizamento das discordâncias. As estruturas CCC não possuem um sistema preferencial de escorregamento, visto que não constituem uma estrutura verdadeiramente compacta como as citadas anteriormente. Por isso, há a tendência da necessidade de uma tensão mais elevada para movimentação das discordâncias, apesar da maior quantidade de sistemas de escorregamento dos CCC. Os planos mais compactos $\{110\}$ são seguidos de perto pelos $\{112\}$ e $\{123\}$ em termos de densidade atômica nas direções $\langle 110 \rangle$ (12).

Neste contexto, convém registrar que a movimentação das discordâncias nos cristais pode gerar interações entre elas que podem resultar em degraus e dobras. Estas alterações na linha da discordância podem restringir seu movimento (*sessile*), como o exemplo da

Figura 13.d, em que uma discordância em espiral com ampla mobilidade desenvolve um degrau de caráter cunha com plano preferencial para o escorregamento não coincidente com os planos ativados. Esta restrição não ocorre nas demais discordâncias com dobras e degraus da Figura 13.a, b e c (13). Este mecanismo serve para exemplificar limitações impostas à movimentação das discordâncias (12).

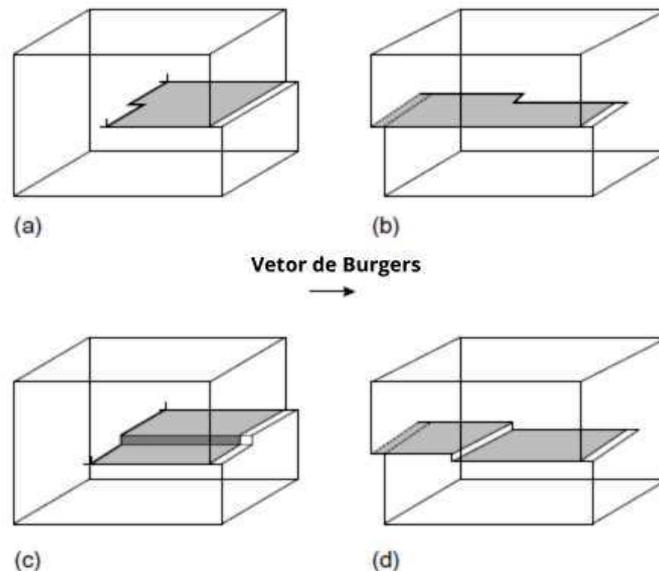


Figura 13 – (a), (b) Dobras e (c), (d) degraus em discordâncias em cunha e helicoidal, respectivamente (13).

A produção de degraus nas discordâncias também pode decorrer da escalagem em temperaturas mais altas onde há o favorecimento da difusão de defeitos. Nesta condição, as vacâncias podem interagir com as discordâncias do tipo aresta, resultando na sua absorção (positiva) ou emissão (negativa), conforme ilustrado no processo representado na Figura 14. Dessa forma, os degraus podem ser considerados como fontes e sumidouros de vacâncias. Similarmente, o mesmo pode ocorrer com os autointersticiais.

Outra situação em que há restrição do movimento das discordâncias é caracterizado pela presença de soluções sólidas substitucionais ou intersticiais. Conforme apresentado, estes elementos geram campos de tensões na rede cristalina que interagirão entre si. Um exemplo da oposição ao movimento pode ser vislumbrada ao se analisar os campos de tração e compressão gerados por uma discordância em cunha, os quais interagem com os campos destes elementos e podem gerar interações atrativas entre si (11).

A deformação plástica de metais tende a resultar em acréscimos na quantidade de discordâncias, que podem ser explicadas por meio de diversos mecanismos de multiplicação de discordâncias (fontes de Frank-Read, múltiplos escorregamentos cruzados, expansão de anéis prismático, espiralização de discordâncias, entre outros). Para metais recozidos que possuem uma baixa quantidade de discordâncias, este aumento se dá de forma mais intensa (13).

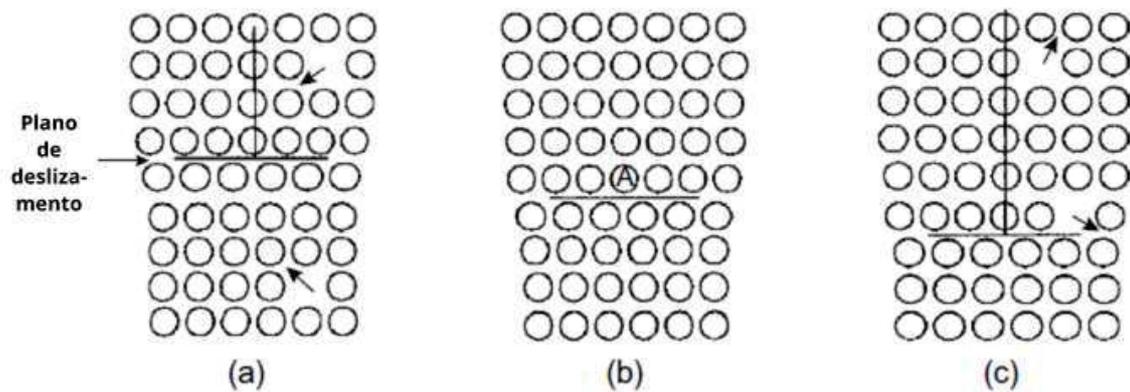


Figura 14 – Movimentação de discordância do tipo aresta por escalagem: absorção de vacâncias na configuração (b), que resultará em uma escalagem positiva (a), e emissão de vacâncias da configuração (b), que resultará em uma escalagem negativa (c) (13).

O aumento no número de discordâncias e a diminuição na sua capacidade de se movimentar nos cristais dos materiais conferirão alterações nas suas propriedades mecânicas. A deformação plástica ocorrerá em função da capacidade com que as discordâncias superem as barreiras que opõem seu movimento, como outras discordâncias, contornos de grãos, átomos de soluto, precipitados, dispersóides. Quando as discordâncias se acumulam no material e não são liberadas a partir deste tipo de deformação, tem-se o aumento da energia nos seus cristais (12). Estes conceitos se mostram importantes para o entendimento das alterações das propriedades mecânicas decorrentes destes processos, geralmente associadas ao acréscimo da resistência e dureza do material e diminuição da ductilidade e, por conseguinte, da tenacidade (11).

2.3.2 Processamento dos Metais

Nesta seara, tratando-se das ligas de aço, ressalta-se que o material é um metal policristalino, formados por diversos grãos. Quando este tipo de material se deforma plasticamente, a integridade mecânica e coesão são mantidas ao longo dos contornos de grãos. Portanto, o deslizamento dos planos por meio das discordâncias tem limitações impostas também nas regiões dos contornos dos grãos. Esta restrição também contribui para conferir ao material as alterações explicitadas de aumento de resistência e dureza (11).

Incremento nestas propriedades pode ser obtido a partir do processamento do material, como o refino dos grãos. Com a diminuição dos tamanhos dos grãos, aumenta-se a área dos seus contornos que, por sua vez, aumentarão a quantidade de barreiras impostas à movimentação das discordâncias. A orientação dos grãos tem um papel importante no processo. A discordância deve ter a capacidade de alterar seu plano de deslizamento para que possa atravessar este contorno interfacial, o que fica ainda mais limitado se o contorno

for de alto ângulo. A impossibilidade de vencer esta barreira faz com que as discordâncias se empilhem e gerem pontos concentradores de tensão, os quais serão responsáveis pela geração de novas discordâncias (11) (12).

Outro tipo de processamento que pode produzir estes efeitos nas propriedades mecânicas dos aços é o trabalho realizado a frio. Esta técnica consiste deformar plasticamente o material em temperaturas frias (temperatura ambiente para a maioria dos metais) em relação ao seu ponto de fusão, o que resultará no aumento das discordâncias e no encruamento da liga. O aumento da densidade de discordâncias impõe restrições ao seu movimento, o que aumentará a tensão necessária para deformar o material (11) (13).

Convém observar que outro resultado deste processo é o alongamento dos grãos na direção da conformação, conferindo textura ao material, caracterizada pela orientação preferencial dos seus grãos constituintes. Tal processo resultará na anisotropia, ou seja, alteração das propriedades em função da direção apreciada do material. Apesar dos grãos serem essencialmente anisotrópicos, as diferentes orientações de seus grãos constituintes reduzem esta propriedade no material policristalino nas condições normais de resfriamento (12).

A capacidade da discordância se movimentar entre os planos também está associada à temperatura. Com uma maior energia fornecida ao cristal pelo acréscimo da temperatura, outros sistemas de escorregamento podem ser ativados, aumentando a mobilidade das discordâncias (12). Dessa forma, o material pode ser tratado termicamente como no processo de recozimento, o qual já foi abordado algumas vezes no decorrer deste capítulo. O processo consiste em aquecer e manter o material até determinada temperatura, seguindo-se de um resfriamento gradual. A maior mobilidade das discordâncias permitirá que muitas delas acabem por se aniquilar ao reagirem com discordâncias opostas e diminuir a sua quantidade no cristal, resultando em um alívio das tensões e diminuição de sua energia. O processo pode ser subdividido em função das suas alterações microestruturais em recuperação e recristalização, que pode ser seguido pelo crescimento dos grãos (11).

Na recuperação ocorre somente o alívio das tensões e diminuição das discordâncias. Na recristalização, novos conjuntos de grãos equiaxiais com baixa densidade de discordâncias são formados. Interessante notar que, uma liga encruada a frio seguida pela recristalização dos seus grãos pode ser empregada como uma técnica de refino dos grãos (11). No crescimento dos grãos, ocorrerá um aumento do tamanho médio dos grãos pelo movimento de seus contornos, que se dará pelo sacrifício dos menores. Tal processo ocorre em razão do material buscar uma configuração de menor energia livre, que será mais baixa com a redução da área dos contornos dos grãos (13).

Em baixas temperaturas e nas condições de equilíbrio de defeitos pontuais, a difusão é restrita e a movimentação das discordâncias se dá quase exclusivamente ao deslizamento (13). Por este motivo, a aniquilação de discordâncias por processos de escalagem envolvendo

a emissão ou absorção de defeitos pontuais acaba ficando mais restrito (16).

3 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA

Até o momento, esta dissertação tem se debruçado sobre as interações atômicas que formam a base do conhecimento das ciências dos materiais. Para o desenvolvimento da pesquisa é essencial abordar também as interações nucleares entre os diferentes tipos de radiação incidentes e a estrutura atômica, que serão apresentados na primeira seção deste capítulo. A partir de todo este conhecimento, é possível compreender os processos de danos e efeitos causados pela radiação nas ligas, constante da segunda seção deste capítulo. Na terceira seção, serão apresentados os conceitos necessários para o desenvolvimento do cálculo do dano da radiação.

3.1 Conceitos Associados à Fissão Nuclear

A radiação é uma forma de transporte de energia, cujo fenômeno pode ser analisado sob a ótica da propagação de ondas eletromagnéticas ou de partículas no meio. Uma primeira distinção quanto à sua caracterização pode ser feita com base na sua capacidade de produzir pares de íons na matéria a partir da liberação de ao menos um elétron de seu átomo, daí a sua classificação em radiação ionizante. Ainda, é possível definir como radiação indiretamente ionizante (por exemplo, nêutrons e fótons) aquela cuja interação direta com o meio produz uma quantidade de ionizações insignificante comparada com as geradas secundariamente (10).

Já as radiações dotadas de diferentes cargas elétricas transferem sua energia principalmente pela atuação de seu campo elétrico para muitos átomos ao mesmo tempo, caracterizando-as em radiações diretamente ionizantes (17). Neste grupo, inserem-se partículas carregadas pesadas como prótons, α e fragmentos de fissão e, devido à sua elevada massa comparada com elétrons, elas são apenas levemente espalhadas pela eletrosfera dos átomos do meio. Como a transferência de energia é pequena e gradual nesta situação, a passagem da radiação diretamente ionizante pode ser tratada como um processo de contínua desaceleração. Daí, a definição da taxa de perda de energia por unidade de distância percorrida, denominada *stopping power* (10).

As radiações também podem ser diferenciadas com base na sua origem, sendo a artificial obtida com o bombardeamento de núcleos com determinadas partículas, induzindo a emissão de radiação. As naturais são observadas a partir de reações ou desintegrações espontâneas em núcleos instáveis de átomos. Estas reações dependem do tempo e sua probabilidade de ocorrência obedece a lei do decaimento exponencial, cuja fórmula geral está apresentada na Equação 3.1. A taxa com que o decaimento ocorre para cada tipo de isótopo é caracterizado pela constante de desintegração (λ). Dessa forma, o número de

átomos (N) em um determinado tempo (t) pode ser calculado com base nesta constante, a partir da quantidade de átomos inicial ou em um tempo zero (N_0). Já a taxa de desintegrações está relacionada com o conceito de atividade (A) do material, podendo ser expressa pela Equação 3.2. Além da constante de decaimento, outras duas quantidades podem ser empregadas para caracterização da razão pela qual ocorre a desintegração. São elas a meia-vida ($T_{1/2}$), que corresponde ao tempo necessário para que metade dos átomos radioativos se desintegre, e a vida-média (τ), que expressa a expectativa média de vida dos átomos radioativos (18).

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} \quad (3.1)$$

$$A = N\lambda \quad (3.2)$$

Os núcleos instáveis tendem a buscar a estabilidade nuclear entre seus nêutrons e prótons, alcançado com o equilíbrio das forças dominantes no conjunto: coulombianas (repulsivas) e nucleares forte (atrativas). Como pode ser observado na Figura 15, grosso modo, há um cinturão de estabilidade quando o número de nêutrons é aproximadamente igual ao número de prótons ou número atômico (Z), parâmetro que define o elemento químico. Os átomos de um elemento que possuem diferentes massas atômicas (A) são chamados de isótopos. A deficiência ou abundância de nêutrons nestes átomos comparadas aos dos elementos estáveis, que levam a instabilidade nuclear e, por conseguinte, ao decaimento radioativo, definem um radioisótopo. No geral, os radioisótopos de menores meia-vida são os mais afastados do cinturão de estabilidade. Convém observar também a existência de regiões com formas de decaimento predominantes: β^- em átomos com excesso de nêutrons; β^+ ou captura de elétrons em átomos com excesso de prótons; emissões de partícula α em núcleos pesados, assim como fissões espontâneas e emissões de prótons e nêutrons em núclídeos periféricos (10).

Quanto às formas de decaimento, tem-se que, para emissões α , ocorre a liberação do núcleo de uma partícula que é composta por dois nêutrons e dois prótons, comumente expresso como um íon de hélio (${}^4_2\text{He}^+$). Para os decaimentos β^- ou β^+ , ocorre a conversão de um nêutron em próton ou vice-versa, que resulta na emissão de um elétron ou um pósitron, respectivamente, além dos seus correspondentes anti-neutrinos e neutrinos (partículas de massa extremamente leve de alguns poucos eV e sem carga) (19). A captura de elétrons é decorrente da absorção de um elétron da camada mais próxima do núcleo e também resulta na conversão de um próton em nêutron, análoga a emissão β^+ . A distinção entre os dois decaimentos é feita a partir da energia de emissão do fóton resultante do processo, geralmente na faixa dos raios X (20). O decaimento γ não resulta na alteração da composição do núcleo do elemento, apenas na emissão de um fóton do núcleo que se encontra em um estado de maior excitação para um nível menor. Este estado de maior

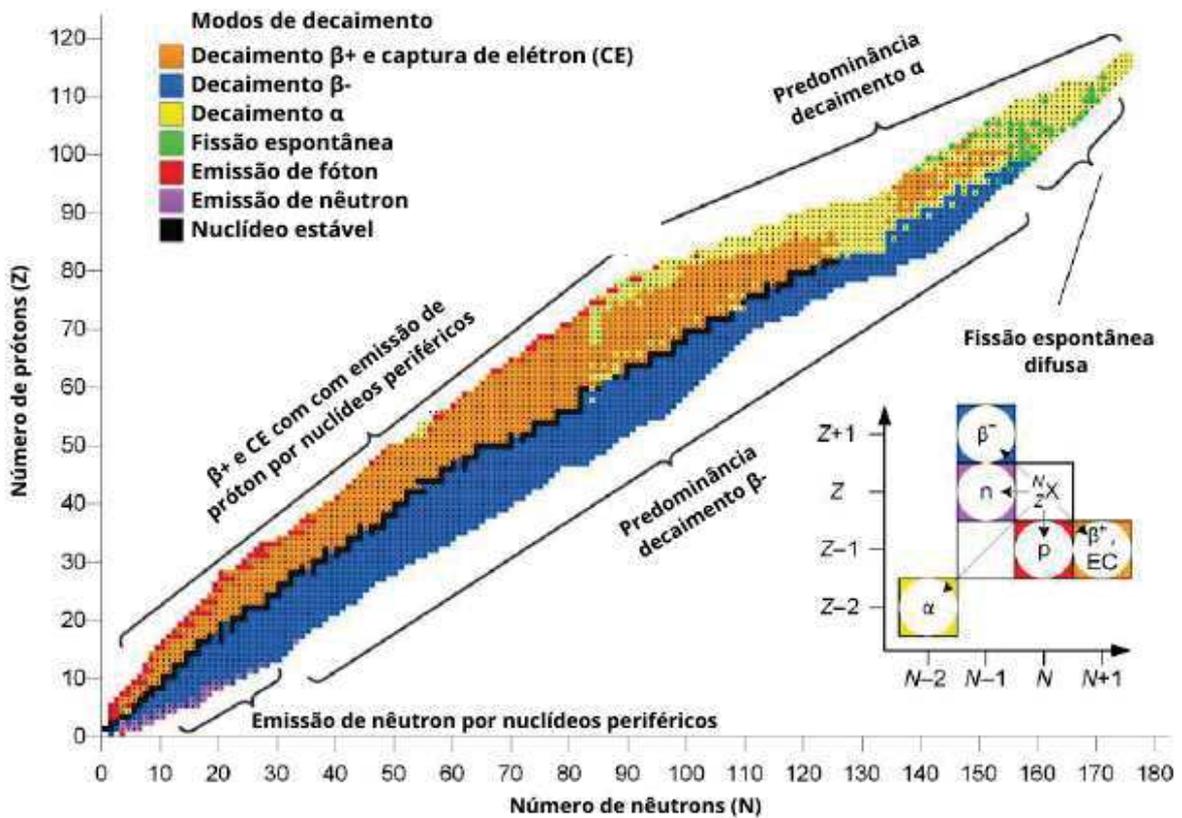


Figura 15 – Banda de estabilidade nuclear e modos de decaimento (10).

energia geralmente é simbolizado por um asterisco, por exemplo, $^{87}_{38}\text{Sr}^*$. Os fótons são caracterizados de acordo com sua quantidade de energia e é possível estabelecer frequência e comprimento de onda correspondentes, sendo os ionizantes encontrados nas bandas dos raios γ , raios X e parte dos ultravioletas (10).

Por sua vez, os raios γ interagem predominantemente por meio do efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares, como observado no gráfico da Figura 16. O coeficiente de atenuação de massa ($\frac{\mu}{\rho}$) é expressado a partir da razão entre o coeficiente de atenuação linear (μ), análogo à seção de choque macroscópica, e a densidade do material (ρ). Em síntese, no efeito fotoelétrico, o fóton com energia suficiente para vencer a energia de ligação do elétron é absorvido por esta partícula, liberando-a e ionizando o átomo; no efeito Compton, o fóton é defletido com uma energia inferior em função do ângulo de espalhamento após a interação com o elétron do átomo, sendo a outra parcela de energia transferida para esta partícula, rompendo sua ligação com o núcleo e deixando o átomo ionizado; e, na produção de par, a interação com o campo coulombiano gerado pelo átomo faz com que o fóton com energia superior a $1,022 \text{ MeV}$ (equivalente de massa) seja convertido em matéria, produzindo um par de pósitron-elétron. Para o espalhamento Rayleigh, o fóton é meramente defletido sem perda de energia. Outra possibilidade é a reação nuclear que pode gerar a emissão de outros tipos de radiação (10).

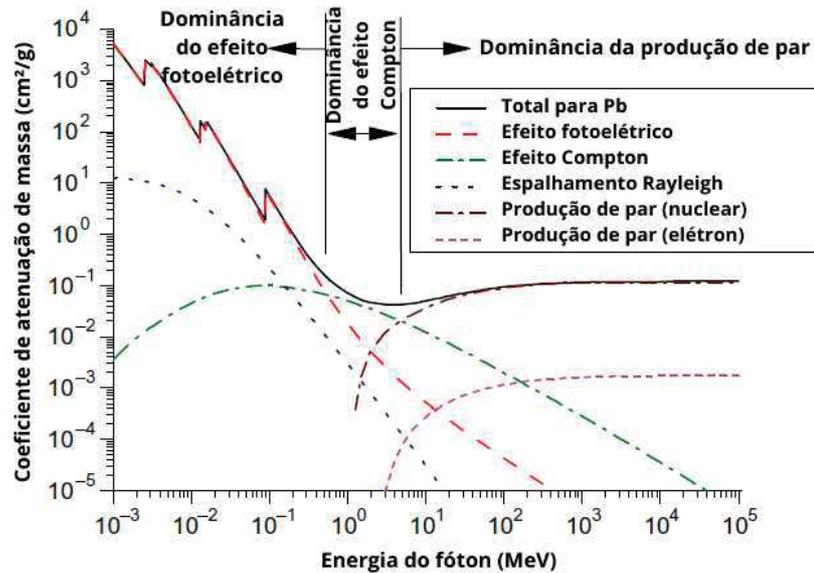


Figura 16 – Probabilidades de interação de fóton a partir de sua energia para o chumbo (10).

O decaimento radioativo também pode ser interpretado como uma reação nuclear. Dessa forma, algumas princípios físicos são obedecidos neste processo: conservação do momento, da energia, do número de prótons e nêutrons constituintes do núcleo e da carga. As transmutações nucleares também podem ser induzidas a partir de reações nucleares com a interação da matéria e da radiação incidente, como fótons, elétrons, prótons, nêutrons, partículas α , partículas pesadas, dando origem a mais de dois mil isótopos conhecidos. Uma nomenclatura usual consiste no emprego de termos entre parênteses para representar uma reação binária compacta, em que o primeiro termo refere-se a partícula incidente e o segundo o resultante. Por exemplo, a reação de um nêutron que resulta na emissão de uma partícula α pode ser expressa como (n,α) (10).

Usualmente, observa-se que os componentes destas reações possuem uma diferença mássica, também chamada de defeito de massa. Com base no princípio da equivalência entre massa e energia, em que ambos podem ser compreendidos como diferentes manifestações de um mesmo aspecto físico, esta diferença pode ser interpretada como a absorção ou liberação de energia na reação. Tais resultados advêm da alteração na energia de ligação dos núcleons (nêutrons e prótons constituintes do núcleo), a energia que mantém os seus prótons e nêutrons coesos na estrutura nuclear. Ao se calcular a energia de ligação por núcleon é possível elaborar o gráfico constante da Figura 17, em que se pode averiguar que o elemento mais estável com maior energia de ligação em seus núcleons é o $^{56}_{26}\text{Fe}$ (20).

A partir desta figura, denota-se que em um processo de fissão de um núcleo pesado em núcleos mais leves, em geral, há um incremento na energia de ligação por núcleon dos núcleos filhos. Tal processo resulta na disponibilização de energia que é liberada durante esta reação, como pode ser observada na Equação 3.3 em uma das possíveis reações de

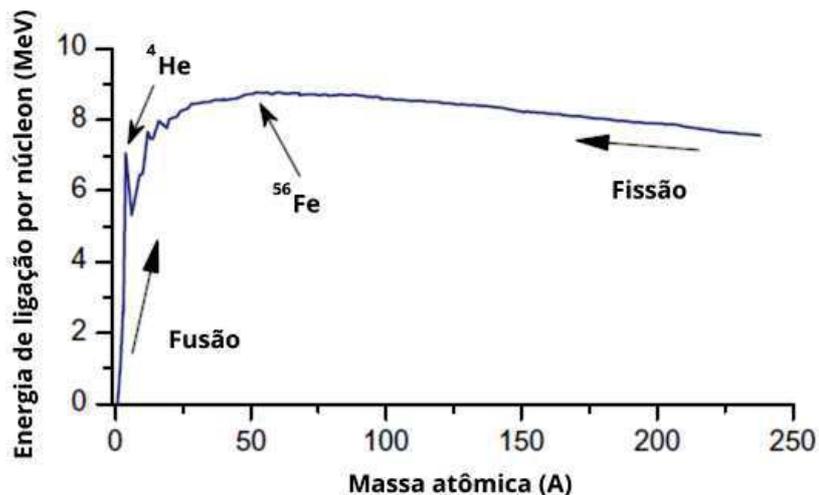
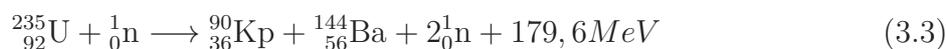


Figura 17 – Energia de ligação por núcleon (10).

fissão de um núcleo de ${}_{92}^{235}\text{U}$. Por meio desta reação é possível perceber a enorme diferença de energia liberada entre a fissão nuclear e reações químicas, como a combustão de carvão e derivados do petróleo, que envolvem rearranjo dos elétrons e liberam energia na ordem de eV (cerca de 100 milhões de vezes menor) (20).



Considerando o exemplo da reação de fissão nuclear apresentado, verifica-se que esta não é a única possível. Para o ${}_{92}^{235}\text{U}$, há um amplo espectro de produtos da fissão em que alguns são mais prováveis do que outros, como pode ser observado na distribuição constante da Figura 18. Em geral, os núcleos filhos possuem um excesso de nêutrons ou deficiência de prótons comparados aos elementos de ocorrência natural (10). Tal fato resulta em diversos processos de decaimento até as configurações mais estáveis dos elementos, inclusive com a emissão nêutrons denominados atrasados (pelo menos 45 formas diferentes), que são essenciais para o controle na taxa de reações de um reator nuclear (19). Outro aspecto que chama a atenção é o fato de que esta distribuição é alterada em decorrência da energia do nêutron incidente que deu origem a reação nuclear (10), em que se distingue os térmicos (podem ser de energia na faixa de 0,003 a 0,4 eV , mas o termo é normalmente associado a energia de 0,0253 eV) dos rápidos (energias a da ordem de 200 keV a 10 MeV) (12).

Um dos fatores que permite o aproveitamento desta energia em uma instalação nuclear é a liberação de outros nêutrons durante a fissão dos núcleos pesados. Estes nêutrons possibilitam a continuidade das fissões dos núcleos em um processo denominado reação em cadeia, que é sustentada pela manutenção destas partículas no sistema. Em uma reação com nêutrons térmicos com o ${}_{92}^{235}\text{U}$, a distribuição de energia dos nêutrons produzidos pode ser observado na Figura 19.a. Verifica-se que a energia média corresponde a cerca de 2 MeV , em um espectro que varia de valores próximos a zero até mais de 10 MeV .

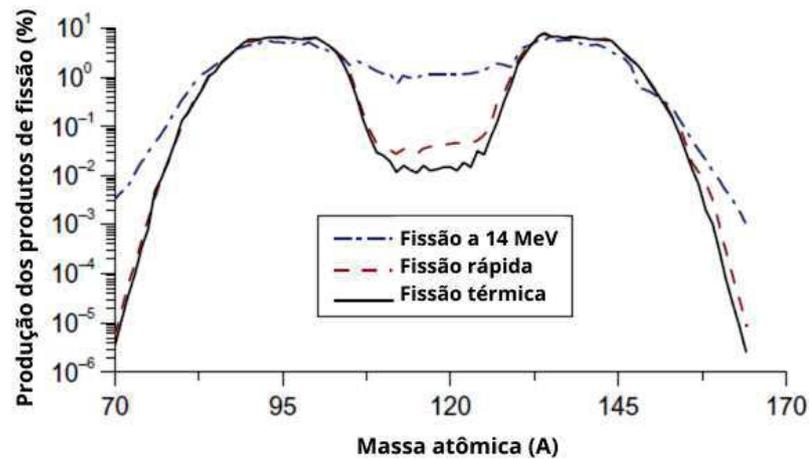


Figura 18 – Produção dos produtos de fissão do U-235 de acordo com o número de massa (10).

Como ocorre a produção de, em média, 2,5 nêutrons, a parcela de energia transferidas para estas partículas da reação é de 5 MeV (10). Uma representação semiempírica do espectro de fissão dos nêutrons prontos pode ser obtida da Equação 3.4 denominada espectro de fissão de Watt e pode ser útil para estimativas do comportamento de reações em cadeia de fissões (19).

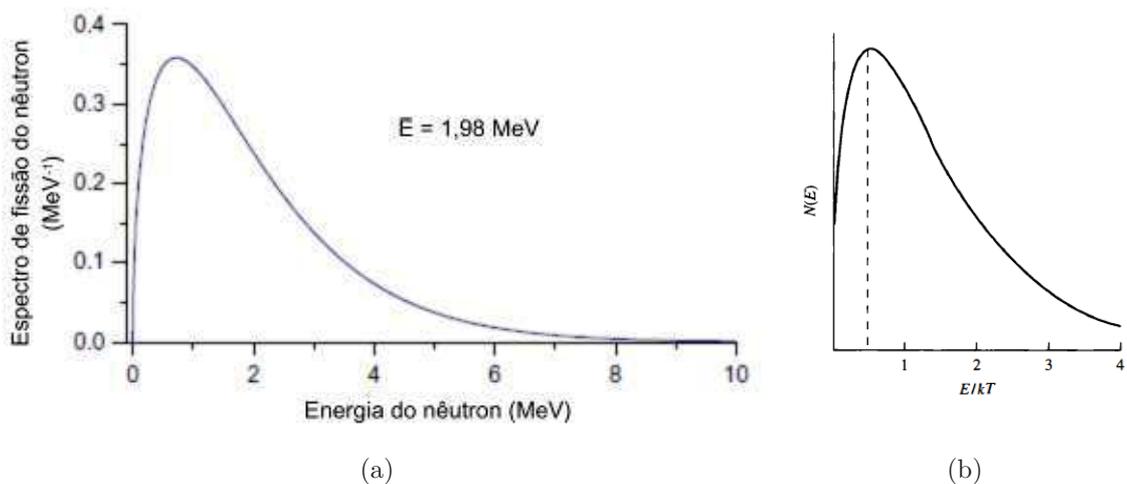


Figura 19 – a) Distribuição dos nêutrons produzidos em uma fissão térmica de U-235 (10) e b) Função da distribuição de Maxwell-Boltzmann aplicável a nêutrons térmicos (21).

$$\chi(E) = 0,453e^{-1,036E} \sinh \sqrt{2,29E} \tag{3.4}$$

Com a diminuição da energia dos nêutrons para regiões comparáveis às energias de agitação térmica dos átomos do meio, os nêutrons podem ganhar ou perder energia em uma colisão. Dessa forma, os membros dos grupos de nêutrons possuem várias energias e se verificou que podem ser tratados como os grupos de gases de uma distribuição de

Maxwell-Boltzmann. Um grupo de nêutrons em uma temperatura ambiente de $20^{\circ}C$ ou $293,15 K$ apresentará uma energia cinética mais provável correspondente de $0,0253 eV$ (10). Esta distribuição pode ser observada na Figura 19.b, cuja densidade numérica de nêutrons $N(E)$ é regida pela Equação 3.5 (21).

$$N(E) = \frac{2\pi N}{(\pi kT)^{3/2}} E^{1/2} e^{-E/kT} \quad (3.5)$$

É fundamental analisar a energia dos nêutrons em decorrência da sua probabilidade de causar a fissão, a qual pode ser quantificada por meio de um parâmetro definido como seção de choque microscópica (σ). A sua unidade de medida usual é cm^2 ou *barn* (b), que corresponde a $10^{-24} cm^2$, e pode ser interpretada como a área seccional de interação do núcleo para determinada radiação incidente. É importante ressaltar que esta seção não se trata da área geométrica do núcleo, podendo diferir significativamente para mais ou menos. A seção de choque microscópica total (σ_t) corresponde a soma de duas parcelas decorrentes da interação da radiação: a de espalhamento (σ_s) e de absorção (σ_a). A primeira pode ser dividida em espalhamento elástico (núcleo permanece no estado fundamental após a interação) e inelástico (deposição de parte da energia da radiação no núcleo, deixando-o excitado, seguida emissão de uma partícula virtualmente idêntica a incidente e raio γ). Na segunda parcela, inclui-se a fissão (n,f), captura radioativa (n, γ) e produção de partícula (n,p), (n, α), (n,2n), entre outras (19). O comportamento de algumas seções de choque microscópica para nêutrons no $^{235}_{92}U$ pode ser observado na Figura 20.

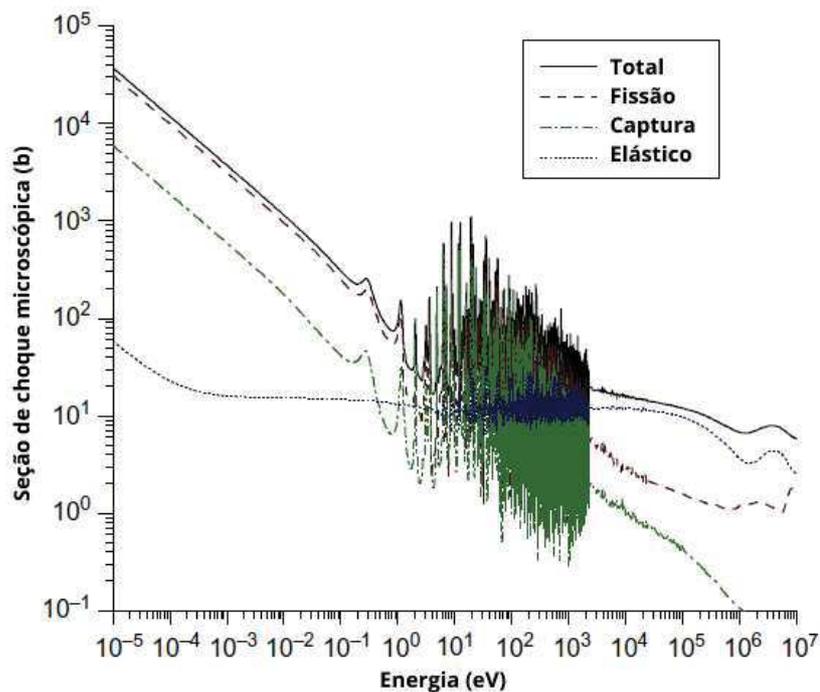


Figura 20 – Seção de choque microscópica total, de fissão, de absorção e de espalhamento elástico para nêutrons no U-235 (10).

Por oportuno, é interessante observar também que as seções de choque microscópicas apresentam dependência da temperatura, como está ilustrado na Figura 21. Com o aumento da temperatura, as ressonâncias (picos na seção de choque formados quando a energia da radiação combina exatamente com algum dos níveis de excitação discretos do núcleo em questão) (20) se alargam e seus picos tem sua altura diminuídas, decorrente da agitação térmica do núcleo alvo em relação a radiação incidente. A esse efeito deu-se o nome de alargamento Doppler das ressonâncias, em analogia com as mudanças de frequência no som e na luz a partir dos movimentos relativos entre fonte e observador.

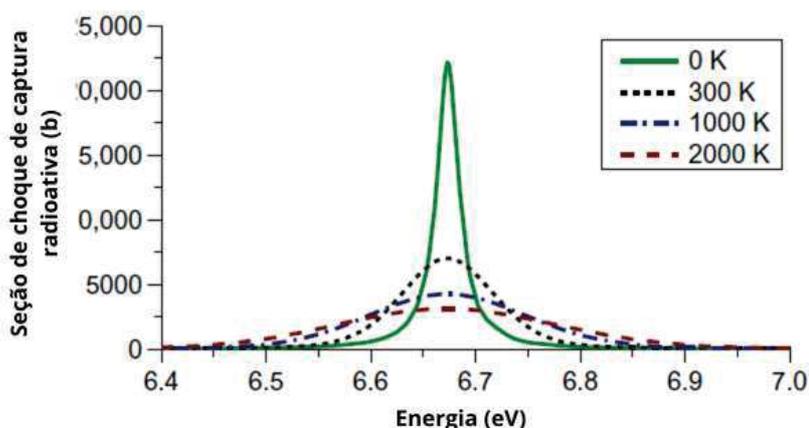


Figura 21 – Alargamento Doppler da ressonância de captura radioativa para U-238 (10).

A partir da probabilidade de interação da radiação com o meio é possível obter-se informações sobre as distância percorridas. Para tal, emprega-se o conceito de livre caminho médio (\bar{x}) como sendo a distância média percorrida pela radiação sem que haja interação com o meio e representada pelo inverso das seções de choque macroscópicas (Σ). As seções de choque macroscópicas são obtidas pela multiplicação da seção de choque microscópica (σ) pela densidade numérica (N) do meio, número de átomos por unidade de volume. O termo Σ possui unidade de medida geralmente é expressa em cm^{-1} e pode ser interpretado como a probabilidade de interação no meio por unidade de distância, sendo fundamental para o cálculo das taxas de reação (19).

No que tange ao equacionamento do taxas de reação (R), conforme Equação 3.6, as condições do meio são representadas pela seção de choque macroscópica (Σ) e a incidência da radiação é quantificada pelo fluxo (ϕ). Este parâmetro é definido pela quantidade de radiação (n) em um volume com mesma velocidade (v) que atravessa uma área, geralmente expressa em $cm^{-2}.s^{-1}$ (10).

$$R = \phi\Sigma = (nv)(N\sigma) \quad (3.6)$$

Percebe-se por meio das diversas interações possíveis, algumas diferenciadas na Figura 20, que os processos são concorrentes, ensejando a necessidade de uma configuração

adequada para a "economia" dos nêutrons e a manutenção das reações em cadeia em um reator nuclear. Isto posto, especial atenção deve ser dada aos eventos que não resultam na fissão, como fuga dos nêutrons rápidos e térmicos, captura radioativa altamente prováveis nas regiões de ressonância e absorção por outros elementos não físeis (19).

Para mensuração da contabilidade dos nêutrons no sistema, emprega-se o coeficiente de multiplicação (k) para nêutrons, em que: para $k > 1$, tem-se um sistema supercrítico com o aumento da população de nêutrons de uma geração para a outra; para $k < 1$, o sistema encontra-se subcrítico com a diminuição da população dessas partículas; e, para $k = 1$, o sistema encontra-se em equilíbrio. Ainda, dois diferentes fatores são comumente utilizados, sendo o coeficiente de multiplicação infinito (k_{∞}) utilizado para avaliação de materiais nucleares isolados quanto ao potencial alcance da criticalidade e o coeficiente de multiplicação efetivo (k_{eff}) para descrever a população neutrônica em um sistema de geometria finita, incluindo-se as fugas, conforme Equações 3.7 e 3.8.

$$k_{\infty} = \frac{\text{Número de nêutrons produzidos}}{\text{Número de nêutrons absorvidos}} \quad (3.7)$$

$$k_{eff} = \frac{\text{Número de nêutrons produzidos}}{\text{Número de nêutrons absorvidos} + \text{Número de nêutrons que escaparam}} \quad (3.8)$$

Com base nos conceitos apresentados, os produtos da fissão nuclear e os seus percentuais correspondentes à energia, ao alcance e ao tempo de emissão estão compilados na Tabela 1 para reações da ordem de 200 MeV por fissão. Uma ilustração do processo pode ser observada na Figura 22.

Tabela 1 – Energia liberada na fissão nuclear (19).

Produtos da reação	Energia (%)	Alcance	Tempo
Energia cinética dos fragmentos de fissão	80	<0,01 cm	Instantâneo
Nêutrons rápidos	3	10-100 cm	Instantâneo
γ de fissão	4	100 cm	Instantâneo
Produtos de fissão de decaimento β	4	Curto	Atrasado
Neutrinos	5	Não recuperável	Atrasado
Captura de nêutrons que não resultam em fissão	4	100 cm	Atrasado

3.2 Danos e Efeitos da Radiação

A partir dos conceitos apresentados sobre a fissão nuclear, envolvendo a liberação de grande parcela de energia, é possível compreender a agressividade do meio em que

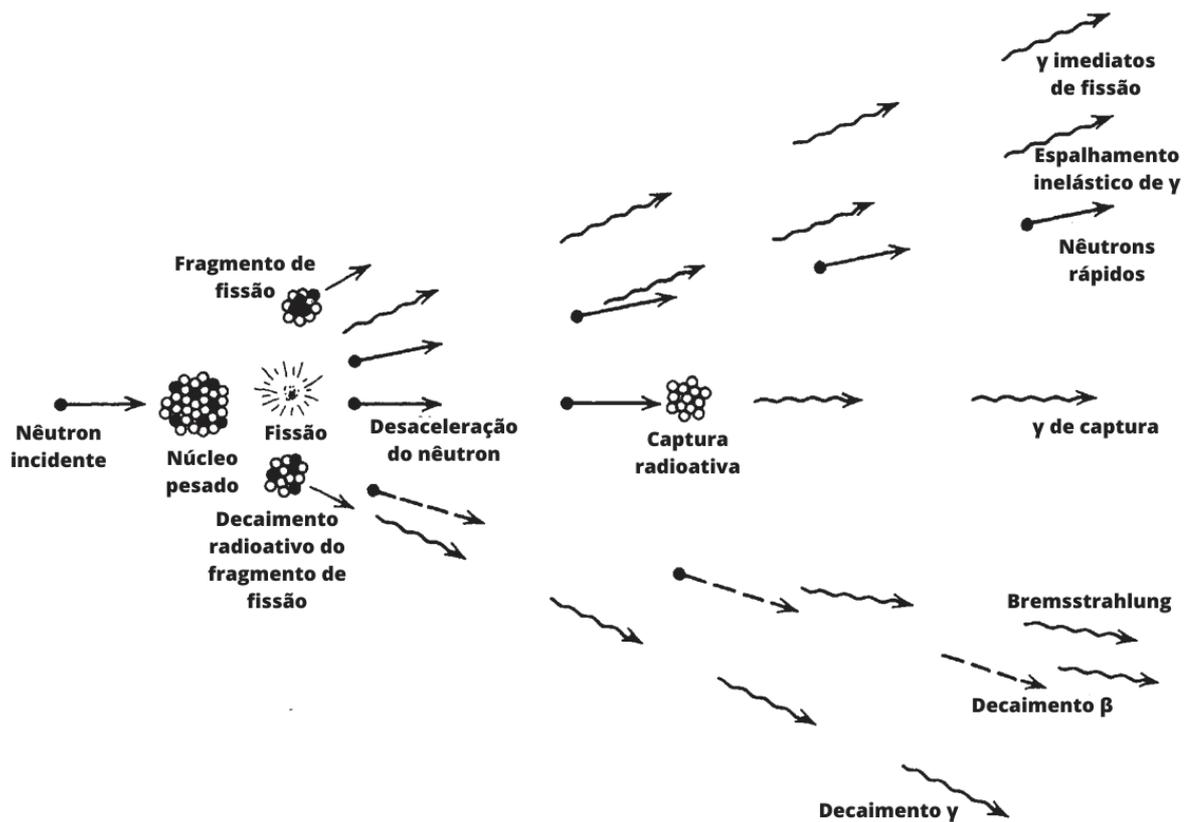


Figura 22 – Esquema de diferentes tipos de radiação produzidos na fissão de um núcleo pesado (19).

os componentes de uma instalação nuclear estão inseridos. Tais condições forneceram diferentes tipos de degradação em face do tipo e do fluxo de radiação em que estão submetidos. No âmbito dos metais, os principais danos da radiação nestes materiais são causados por radiação de alta energia, principalmente por nêutrons e subprodutos da fissão (3). Os danos de radiação são caracterizados como os defeitos microscópicos produzidos pela irradiação. O acúmulo destes defeitos resulta em mudanças macroscópicas nas propriedades físicas, químicas e mecânicas do material, fenômeno definido como efeitos da radiação (12).

A interação da radiação com o material pode produzir uma miscelânea de defeitos. São eles vacâncias, intersticiais, átomos de impureza produzidos a partir da transmutação nuclear, picos térmicos, zonas esvaziadas, vazios, bolhas e colisões substitucionais (12). A partir de uma aproximação dos átomos em esferas rígidas, foi proposto um modelo por Brinkman (Figura 23.a) (22), a fim de explicar o pico de deslocamento como um núcleo de vacâncias cercadas por uma casca de autointersticiais. Posteriormente, o modelo foi refinado por Seeger (Figura 23.b) (23), em que foram incluídos os conceitos relacionados à cristalinidade, como a sequência de colisões centradas, e o transporte de massa de longo alcance, além de nomear o termo do núcleo de vacâncias de zonas esvaziadas (16).

Pela teoria do deslocamento, a partícula incidente deve possuir energia suficiente para deslocar um átomo de sua posição na rede cristalina (limite de deslocamento) e

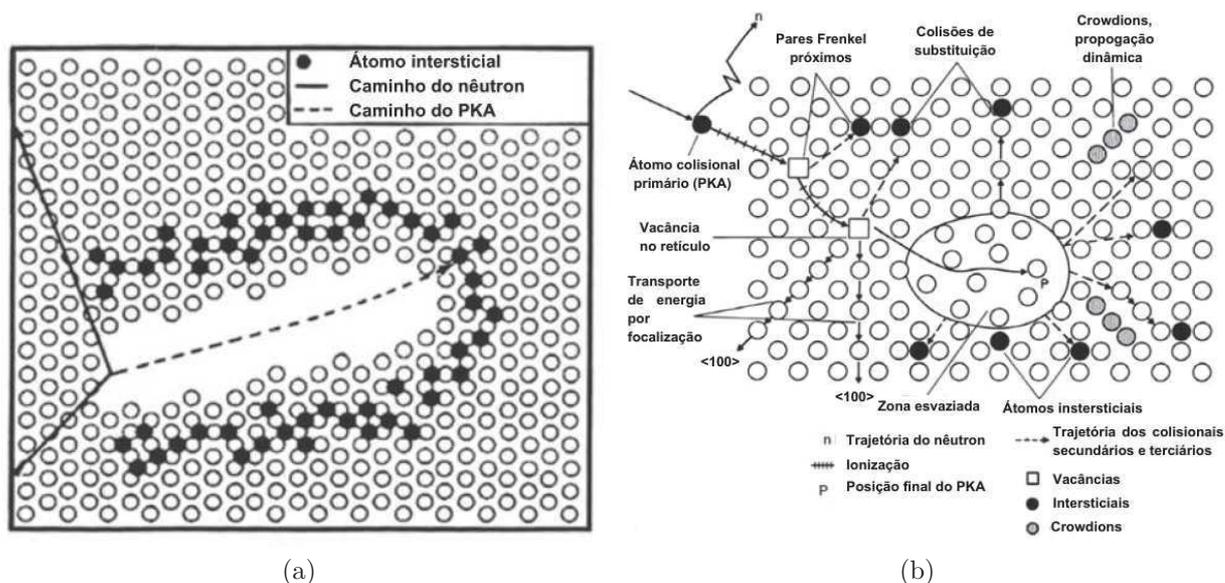


Figura 23 – (a) Pico de deslocamento descrito por Brinkman (22) e (b) Conceito refinado por Seeger do evento do dano primário em metais CFC (23).

transferir parte de sua energia. Este primeiro evento define a criação de um *primary knock-on atom* (PKA - átomo colisional primário). Por sua vez, o PKA dotado de uma energia cinética depositada (T) interagirá com outros átomos da rede cristalina dando origem a diversos defeitos e interações, como vacâncias, intersticiais, pares Frenkel, átomos colisionais secundários ou terciários e transferências de energia em direções cristalográficas por colisão, como os *crowdions* (configuração instável de existência temporária em que o átomo é deslocado de sua posição na rede cristalina, mas não assume uma posição intersticial). Foi cunhado o termo cascata de deslocamento para caracterizar esta coleção de defeitos iniciada pelo PKA. O evento terminará no momento em que o PKA repousar em uma posição intersticial no cristal, observando-se uma região esvaziada nas suas adjacências em decorrência destas interações (16).

Sob a ótica das dimensões espacial e temporal em que o evento ocorre, a Figura 24 ilustra o processo para um dos efeitos da radiação que é o inchaço de vazios (*void swelling*). A interação da radiação com a rede cristalina transferindo parte de sua energia a um dos seus átomos e dando origem ao PKA está ilustrado em (a), evento de escala atômica (Å - Angstrom ou 10^{-10} m) e na ordem de 10^{-18} segundos. O pico térmico (b) alcança diversos átomos adentrando na escala dos nonômetros (nm) e picosegundos (ps - 10^{-12} segundos), seguindo-se do recozimento local do cristal (c). A coleção de defeitos pontuais produzidos (d) passa a ser absorvida em sumidouros de defeitos, como contornos de grãos, e sofrer a recombinação de vacância-autointersticial, na ordem dos nanosegundos (ns), processos favorecidos pela migração térmica. A quantidade de defeitos remanescentes (e) constituídos de pares Frenkel e conglomerados de defeitos (vacâncias ou intersticiais) é muito menor dos que produzidos na cascata de deslocamento e passa a se difundir pelo

crystal na ordem de grandeza dos micrômetros (μm) (14). Murty e Charit (12) afirmam que a parcela remanescente de defeitos corresponde a cerca de 1%. A nova configuração servirá de pontos de nucleação de vazios (f), que posteriormente poderá se organizar em um cristal com um padrão semiregular (g) por meio de interações de longo alcance. Os efeitos macroscópicos dos crescimentos destes vazios com o passar do tempo e acúmulo das interações poderá ser observado (h) (14) (16). Segundo Short e Yip (14), os processos de (a) a (e) são bem compreendidos e podem ser trabalhados em múltiplas simulações. No entanto, a passagem para o domínio da ciência da mesoescala (*Mesoscale Science - MSS*), ou seja, de (e) para (f), ainda é de difícil predição para os materiais no mundo real.

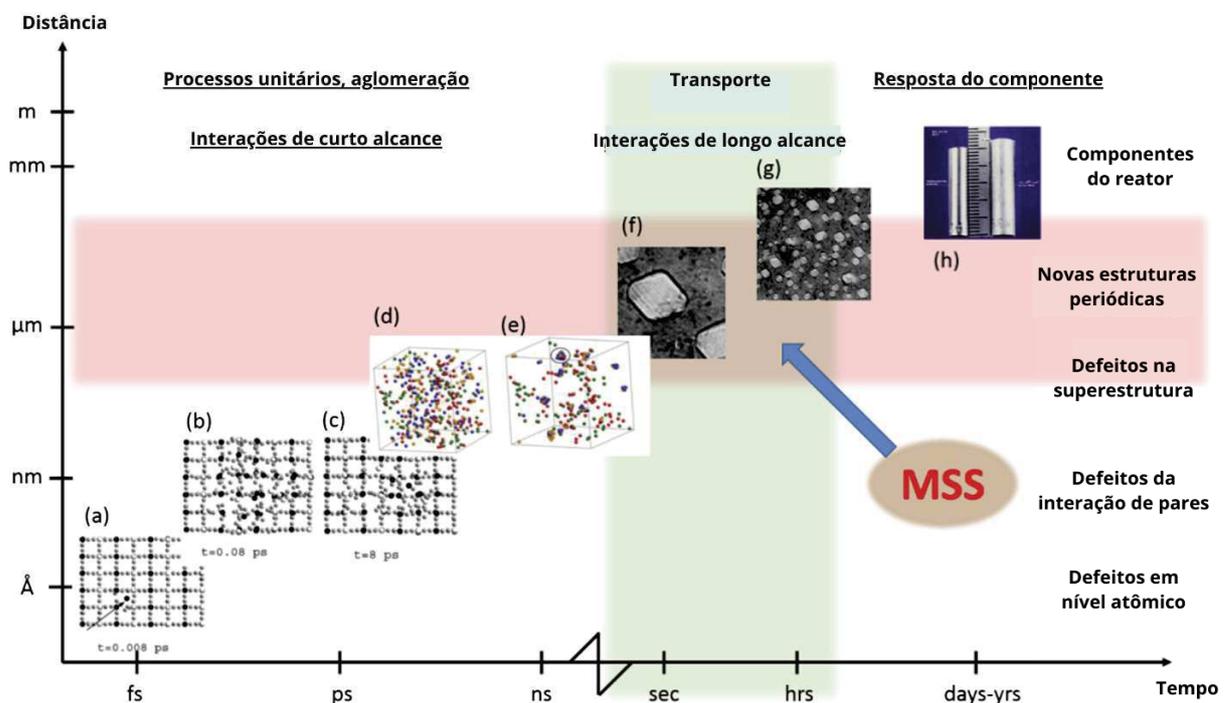


Figura 24 – Escalas de tempo e espaço envolvidas no processo de inchaço de vazio (14).

Conforme abordado, o inchaço de vazios é um dos efeitos observados pelos danos de radiação no âmbito das propriedades mecânicas dos metais. A Figura 25 apresenta outros efeitos que podem ocorrer simultaneamente a depender da faixa de temperatura que o material for irradiado (escala da razão da temperatura - T pela temperatura de fusão do material - T_m). Os processos de degradação pela radiação incluem endurecimento e fragilização pela radiação em baixas temperaturas (*low-temperature radiation hardening and embrittlement*), precipitação e segregação de solutos modificadas pela radiação (*radiation-modified solute segregation and precipitation*), instabilidade dimensional, associada ao inchaço de vazios, fluência de irradiação (*irradiation creep*) e crescimento de radiação (*radiation growth*), e fragilização por hélio em altas temperaturas (*high-temperature helium embrittlement*) (6).

Segundo Zinkle (24), os três estágios de recuperação dos materiais destacados na escala de temperatura demarcam o início da migração de longo alcance dos autointersticiais

(estágio I), o início da migração de vacâncias (estágio III) e a dissociação térmica de aglomerados de vacâncias *sessiles* (estágio V). Os processos de migração de aglomerados de autointersticiais e complexos de autointersticiais-impurezas e a migração de aglomerados de vacâncias-impurezas são características dos estágios II e IV, respectivamente (24).

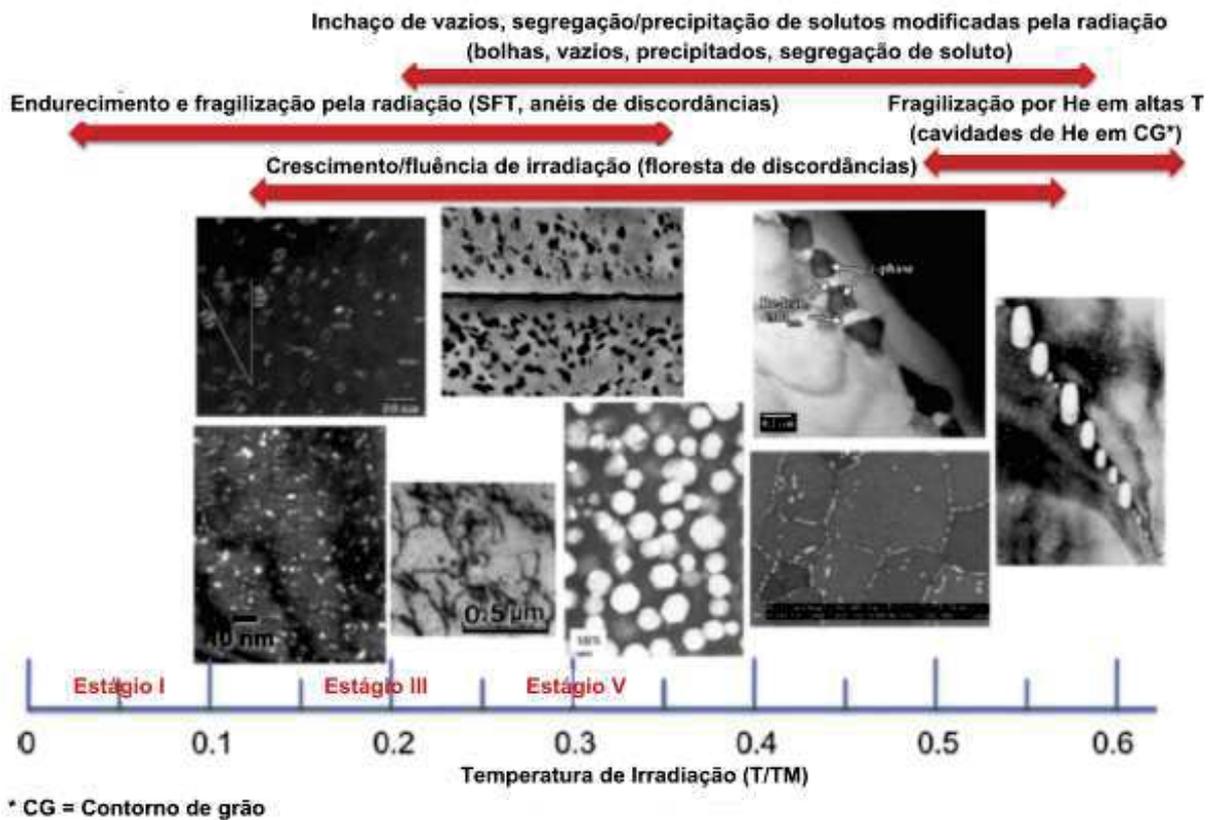


Figura 25 – Efeitos da radiação mais pronunciados na degradação dos materiais com as representativas microestruturas conforme os regimes de temperatura (6).

Além da temperatura e taxa de dose da radiação, cuja metodologia de cálculo será abordada na próxima seção deste capítulo, outros parâmetros também podem exercer influência no processo dos efeitos da radiação nos materiais. O baixo peso atômico dos elementos constituintes como alumínio favorecem maior difusão espacial das cascatas de deslocamento devido a menor interação nuclear e eletrônica (*stopping power*) (24).

Com relação à estrutura cristalina, em geral, o acúmulo de defeito na forma de inchaço de vazios é menor em materiais CCC quando comparados com CFC, apesar de exceções observadas em algumas ligas CCC (24). Por outro lado, com base em simulações de dinâmica molecular desenvolvidas em metais CCC, CFC e HC, a produção de defeitos aparenta não ser fortemente afetada pelo tipo da estrutura cristalina (25). Já evidências a partir de estudos de resistividade elétrica em metais irradiados com nêutrons de fissão sugerem que a produção de defeitos é maior em estruturas HC (26), sugerindo que este aspecto seja melhor tratado de forma individualizada.

A relação com o tipo de ligação atômica é um fator potencial a ser considerado

quando se compara a evolução microestrutural entre metais e não-metais ou entre diferentes materiais não-metálicos, que possuem diferentes quantidades de ligações direcionais covalentes ou iônicas. Para materiais compostos por ligações metálicas, a ionização provocada pela radiação não desempenha um papel de relevância, tendo em vista a abundante disponibilidade de elétrons de condução, diferentemente de materiais semicondutores ou isolantes (24).

3.2.1 Endurecimento e Fragilização pela Radiação em Baixas Temperaturas

No que tange aos efeitos da radiação, a fragilização e endurecimento em baixas temperaturas decorrem dos aumentos de defeitos na rede cristalina do metal. Tais defeitos microestruturais são aglomerados de defeitos formados por anéis de discordâncias, falhas no empilhamento em tetraedro (para metais CFC), bolhas, precipitados e aglomerados de defeitos e solutos (6).

Como já abordado, o incremento da quantidade de defeitos na microestrutura do material, constituem obstáculos para a movimentação de discordâncias e, conseqüentemente, da deformação plástica no material. Esse processo traduzido no aumento na resistência ao escoamento pode ser benéfico, porém, geralmente, vem acompanhado do sacrifício da ductilidade e resistência à fratura, que atuam a favor da segurança de uma instalação (6). Tais efeitos podem ser observados na Figura 26, que apresenta as curvas de tensão-deformação de engenharia para níquel e cobre policristalino de alta pureza e aço inoxidável 316 comercial (316 SS) irradiados com nêutrons com nêutrons de $E > 0,1 \text{ MeV}$ em uma faixa de fluência de $1, 1.10^{17}$ a $6, 3.10^{20} \text{ n.cm}^{-2}$ (27).

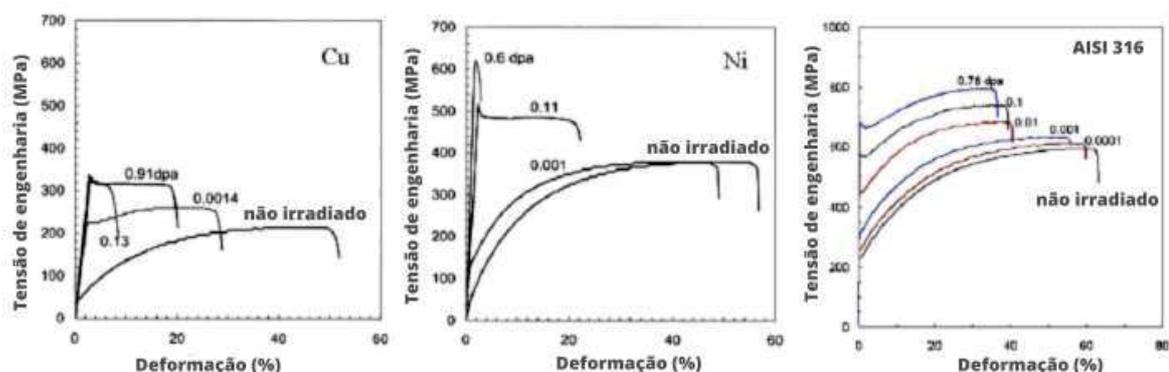


Figura 26 – Curvas de tensão-deformação de engenharia de materiais irradiados em temperatura ambiente (27).

Convém apontar que o endurecimento pela irradiação diminui rapidamente com o aumento da temperatura, tendo-se como referência valores característicos de cerca de $0, 3T_m$. Neste limite, processos associados à recuperação do material passam a exercer influência nesta propriedade mecânica do material. Observa-se também que a alteração não é linear, podendo apresentar um pico de endurecimento em temperaturas intermediárias

para alguns materiais devido a processos como a precipitação de soluto induzida ou aumentada pela radiação (6).

Outra importante alteração nas propriedades do material irradiado pode ser observado na Figura 27, em que se verifica o aumento da temperatura para transição dúctil-frágil na fratura (DBTT). As curvas são construídas a partir de diversos ensaio de impacto Charpy, sendo convencionado o ponto de energia absorvida de 41 J, C_{41} , para determinação da variação da temperatura. Ainda, a o acúmulo da radiação resulta na diminuição da energia absorvida pelo material, verificado com a redução da energia do limite superior da curva (ΔUSE - *upper shelf energy*). Além disso, na análise do ponto de baixa absorção de 10 J, o incremento de temperatura na curva DBTT faz com que o material irradiado passe a exibir um comportamento de ruptura frágil em temperaturas próximas da ambiente, atuando em desfavor à segurança para instalações nucleares (16).

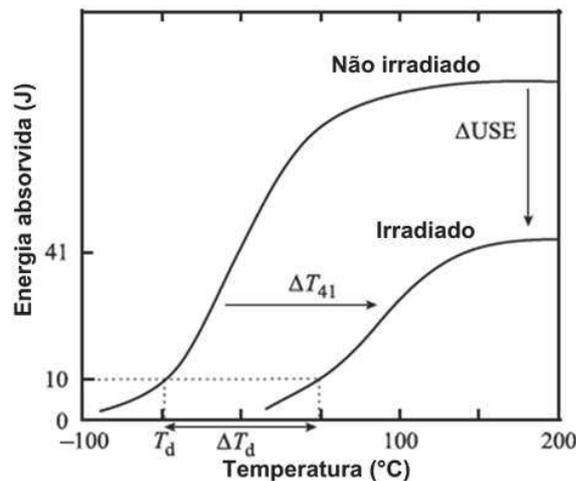


Figura 27 – Variação da temperatura de transição dúctil frágil para um material irradiado e não irradiado (16).

3.2.2 Precipitação e Segregação de Solutos pela Radiação

A precipitação ocorre quando o limite de solubilidade em uma região do material é atingido, decorrente do acúmulo de determinado átomo de soluto. Este processo é favorecido pelo aumento nos fluxos atômicos na rede cristalina, em face da difusão dos defeitos produzidos pelo dano da radiação e sobreviventes à recombinação. A interação de átomos e defeitos pode resultar em atração ou repulsão, a depender de fatores como tamanho atômico e estrutura eletrônica. Em geral, tais interações acabam por fornecer direcionalidade ao fluxo atômico para sumidouros de defeitos pontuais, como discordâncias e contornos de grãos (28).

A redistribuição do soluto decorrente deste processo pode alterar a química local e resultar na precipitação de fases não esperadas em uma liga com compostos homoganeamente distribuídos. Nota-se que a difusão preferencial de um soluto acaba por gerar regiões

enriquecidas do seu elemento, assim como outras esvaziadas, podendo levar à alteração na estabilidade de fase e, por conseguinte, nas propriedades do material (16).

Pode-se diferenciar os termos concernentes à precipitação associada aos processos de segregação devido à radiação. A indução pela radiação (*radiation-induced*) descreve a formação de fases devido a segregação do soluto fora do equilíbrio devido à irradiação e que se dissolve durante o recozimento subsequente. O aumento pela radiação (*radiation-enhanced*) é empregado para caracterizar a aceleração da formação de precipitados em baixas temperaturas devido à radiação, que são termicamente estáveis. Por fim, a modificação pela radiação (*radiation-modified*) se refere à precipitação de compostos quimicamente diferentes daqueles formados em condição de estabilidade termodinâmica (24).

Sob o aspecto da temperatura do material, a segregação induzida é relevante em faixas intermediárias para ligas (entre $0,3T_m$ e $0,5T_m$), considerando que a força motriz deste processo reside na condição de não-equilíbrio térmico dos defeitos criados pela radiação (6). Em temperaturas elevadas, o aumento de concentração das vacâncias térmicas resulta no acréscimo da taxa de difusão, assim como a taxa de recombinação dos defeitos. Dessa forma, ocorre uma diminuição do fluxo atômico em direção aos sumidouros de defeitos, enquanto os elementos já segregados tem sua difusão favorecida para regiões de menores concentrações. Na banda das temperaturas inferiores, o processo dominante é a recombinação dos defeitos produzidos pela radiação, devido a mobilidade limitada das vacâncias. Assim, o resultado é uma menor taxa de difusão de longo alcance dos solutos (ordem de μm). Em ambas situações, a segregação induzida pela radiação é minimizada (6) (16).

3.2.3 Instabilidade Dimensional

Além das mudanças de fase, há três outros principais fenômenos induzidos pela radiação que podem levar à instabilidade dimensional em materiais estruturais: inchaço de vazios, fluência de irradiação e crescimento de irradiação (6).

O inchaço de vazios ou cavidades é o resultado da agregação de vacâncias induzidas pela cascata de deslocamentos que se formam em níveis muito além do seu equilíbrio térmico na faixa de temperatura entre $0,3T_m$ e $0,6T_m$ (6). Os limites inferiores e superiores para medida deste efeito aumentam com a taxa de dose da radiação. A temperatura do material deve ser mínima para permitir a mobilidade destes defeitos e não pode ser elevada o bastante para alterar a condição de supersaturação de vacâncias produzida pela radiação e favorecer a recuperação do material (24). Como os vazios são resultados do acúmulo de vacâncias, os intersticiais produzidos devem ser absorvidos em outros pontos do material, como nas discordâncias que acabam interagindo mais fortemente com este tipo de defeito. Os aglomerados de vacâncias podem se empilhar colapsando em anéis de discordâncias ou formar os defeitos volumétricos conhecidos como vazios (12).

Segundo Was (16), há evidências que sugerem que a nucleação de um vazio está sempre associado com átomos de gases. Durante a irradiação, os principais gases envolvidos são o hidrogênio e o hélio, originados a partir das reações nucleares de transmutação, como (n,p) e (n,α) . Observa-se que estas seções de choque são relativamente elevadas para nêutrons de alta energia, como pode ser observado na Figura 28 para o $^{58}_{26}\text{Fe}$, caracterizando outro aspecto importante da influência do tipo da radiação, bem como sua energia associada, para este efeito (6).

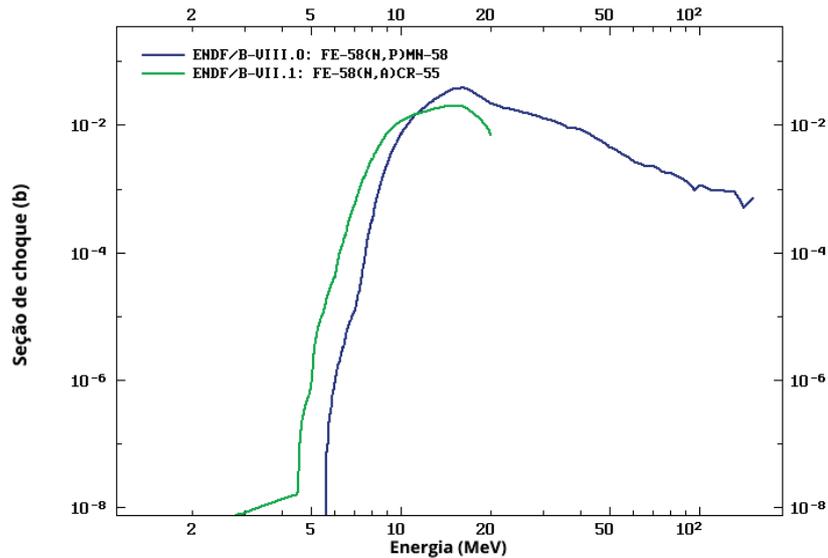


Figura 28 – Seções de choque microscópica de produção prótons e alfa para o Fe-58 com a incidência de nêutrons energéticos (29)

Curvas plotadas a partir do banco de dados *Evaluated Nuclear Data Sheet*, disponível em <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>

A fluência de irradiação é um processo inter-relacionado com o inchaço de vazios, sendo caracterizado pelas mudanças dimensionais ocorridas durante a irradiação em temperaturas intermediárias (entre $0,2T_m$ e $0,45T_m$) com a aplicações de tensões no material. Nesta faixa de temperatura, a magnitude da deformação associada à fluência pela irradiação pode ser de ordens superiores à da térmica. Em baixas temperaturas, geralmente, o fenômeno é suprimido devido à baixa mobilidade dos defeitos pontuais, além das recombinações dos defeitos causados pelos sumidouros formados pela radiação. No limite superior de temperatura, tem-se a diminuição dos efeitos da fluência de irradiação associada com a condição de supersaturação dos defeitos e a fluência térmica ($0,5T_m$) passa a dominar o processo (6).

O fenômeno da fluência de irradiação é relativamente complexo e pesquisas são desenvolvidas para o entendimento dos efeitos em sistemas de diferentes materiais (12). O efeito da irradiação não pode ser vista como um mero acréscimo na aceleração da fluência térmica. A fluência de irradiação deve ser entendida no contexto do acréscimo da produção de defeitos, tensão aplicada e desenvolvimento da microestrutura irradiada,

além de ter pouca dependência com a temperatura do material já que os defeitos são produzidos pela radiação (16). O principal mecanismo envolvido neste processo consiste no favorecimento da orientação dos defeitos pela tensão aplicada no material durante a formação de anéis de intersticiais e de vacâncias. Tal processo denominado de nucleação preferencial induzida pela tensão (*stress-induced preferential nucleation* - SIPN) resultará no acréscimo em comprimento na direção da tensão trativa aplicada. Outros mecanismos envolvendo o deslizamento e escalagem de discordâncias também são empregados para explicar a magnitude da deformação provocada pelo efeito (6) (16).

Diferentemente da fluência de irradiação, o crescimento da radiação não requer a aplicação de tensão e ocorre somente em materiais com textura. Tal fenômeno também se caracteriza por alterações dimensionais lineares, sem que haja mudanças volumétricas significativas. Em termos de magnitude dos efeitos de instabilidade dimensional, as variações de comprimento para o crescimento de radiação são menores do que os da fluência de irradiação, ocorrendo na ordem de 0,1% a 1,0% (6). Para o inchaço de vazios, Garner (30) aponta que significativas reduções nas resistências de aços austeníticos são observadas na condição de deformação causada pelo inchaço de radiação superior a 10%.

3.2.4 Fragilização por Hélio em Altas Temperaturas

Como já mencionado, o hélio pode ser produzido por meio de transmutação nuclear do tipo (n,α) . A produção do hélio é relevante em ligas que possuem níquel em sua constituição, sendo prováveis para nêutrons tanto na faixa térmica quanto na rápida. Tal processo ocorre por meio de duas reações nucleares, cujas seções de choque microscópicas constam na Figura 29: ${}^{58}_{28}\text{Ni}(n,\gamma){}^{59}_{28}\text{Ni}$ e ${}^{59}_{28}\text{Ni}(n,\alpha){}^{56}_{26}\text{Fe}$. Reações similares podem ocorrer entre nêutrons rápidos e ferro (já apresentado na Figura 28), cromo e nitrogênio (12).

O hélio produzido é essencialmente insolúvel em sólidos (31) e acaba ocupando uma posição intersticial na rede cristalina como uma impureza. Este elemento possui grande mobilidade neste estado e afinidade para ser aprisionado em vacâncias, o que resulta em aglomerados de baixa mobilidade na rede. Em temperaturas elevadas (a partir de aproximadamente $0,5T_m$), estes aglomerados ganham mobilidade térmica e podem migrar e se acumular nos contornos de grãos. Esta alteração na microestrutura pode levar a falha prematura de componentes devido ao enfraquecimento das interações dos contornos dos grãos. O modo de fratura predominante de materiais sob este efeito é o intergranular, diferentemente da fratura dúctil transgranular que ocorre em ligas usualmente (6).

A capacidade do hélio se movimentar no material e alcançar os contornos de grãos está intimamente ligada às características do material, como tipo da liga, composição e a microestrutura inicial (31). Dessa forma, precipitações e dispersóides podem aprisionar o hélio e impedi-lo de alcançar os contornos de grãos. Por outro lado, a tensão aplicada ao material contribui para o desenvolvimento das cavidades aumentando a magnitude do

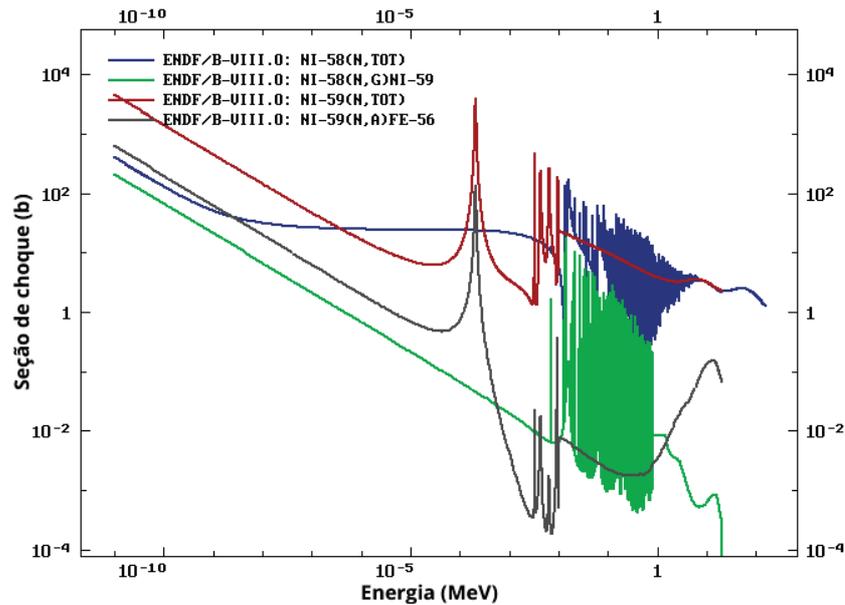


Figura 29 – Seções de choque microscópica do Ni-58 e Ni-59 para incidência de nêutrons (29)

Curvas plotadas a partir do banco de dados *Evaluated Nuclear Data Sheet*, disponível em <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>

efeito (6). Em geral, observa-se que este efeito decorre do favorecimento da difusão dos aglomerados de vacâncias e hélio com a aplicação da tensão para os contornos de grão (32).

3.3 Cálculo do Dano da Radiação

A partir da contextualização dos efeitos da radiação apresentada, denota-se que um dos principais fatores de impacto para o desenvolvimento desses efeitos está associado à quantidade de radiação recebida pelo material. Uma das métricas adotada para se avaliar o dano da radiação foi definida como sendo o *displacement per atom* ou deslocamento por átomo (dpa) (12). Esta unidade de exposição à radiação afere a quantidade média que um átomo é deslocado da sua posição na rede cristalina (33).

Ao se desconsiderar os diferentes espectros associados ao fluxo incidente, a análise dos danos causados com base somente na fluência pode fornecer valores com pouca correlação para um mesmo tipo de material. Esta situação está ilustrada na Figura 30, em que se observam os resultados obtidos para as alterações da resistência do escoamento para amostras da liga de aço inoxidável 316 irradiadas em três diferentes instalações: *Los Alamos Spallation Radiation Effects Facility* (LASREF) tem um fluxo dotado de um largo espectro de nêutrons de alta energia, obtidos a partir de uma fonte de berílio Be(d,n); *Rotating Target Neutron Source-II* (RTNS-II) emite um feixe de nêutrons monoenergéticos de 14 MeV; e *Omega West Reactor* (OWR) fornece um espectro típico de reatores de

água leve (16) (34). Ao se apresentar os resultados em função do dpa, observa-se que o endurecimento apresentou uma boa correlação, sendo possível verificar um comportamento comum a partir desta métrica (16).

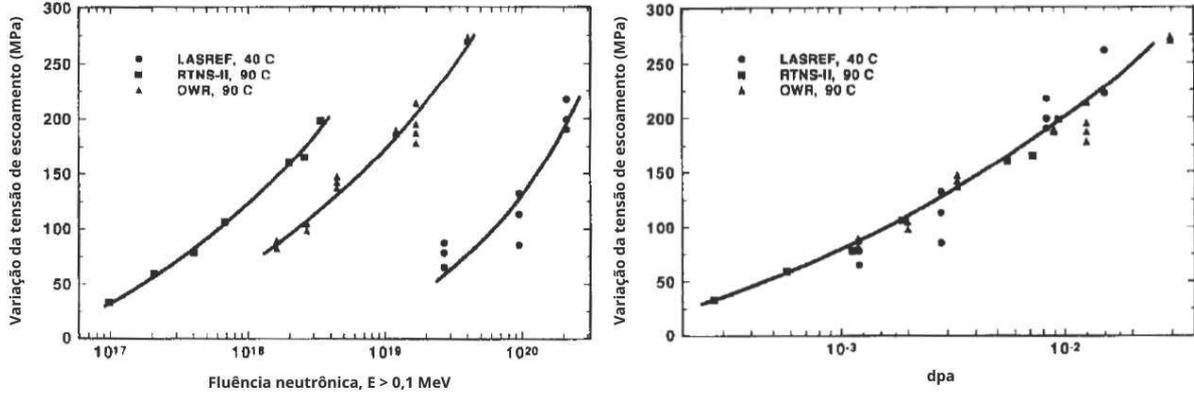


Figura 30 – Comparação entre à resistência ao escoamento da liga 316 SS irradiada em três diferentes instalações apresentada em função da fluência neutrônica e dpa (34).

A taxa de deslocamento por átomo pode ser obtida a partir da equação padrão de taxas de reações descrita na Equação 3.6. Dessa forma, os termos podem ser arranjados na forma da Equação 3.9, em que a taxa de reação R_d será equivalente ao número de átomos deslocados por unidade de volume em um determinado tempo, N é a densidade numérica do material, \check{E} e \hat{E} correspondem à energia mínima e máxima da partícula incidente, $\phi(E_i)$ é o fluxo de partículas incidente dependente da energia e $\sigma_D(E_i)$ é a seção de choque microscópica de deslocamento dependente da energia da partícula incidente (16). Rearranjando-se os termos, a taxa de deslocamento por é definida por meio da Equação 3.10 (12).

$$R_d = N \int_{\check{E}}^{\hat{E}} \phi(E_i) \sigma_D(E_i) dE_i \quad (3.9)$$

$$\frac{dpa}{t} = \int_{\check{E}}^{\hat{E}} \phi(E_i) \sigma_D(E_i) dE_i \quad (3.10)$$

Outra variável inserida nestas equação se refere a seção de choque microscópica de deslocamento, que é definida por meio da Equação 3.11, em que \check{T} e \hat{T} se referem às mínimas e máximas energias transferidas na colisão da partícula incidente de energia E_i para o átomo da rede, respectivamente, $\sigma(E_i, T)$ representa a seção de choque para a colisão da partícula de energia E_i que resulta na transferência de energia T para o átomo atingido, $\nu(T)$ é o número de deslocamentos por PKA (16).

$$\sigma_D(E_i) = \int_{\tilde{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T) \nu(T) dE_i \quad (3.11)$$

3.3.1 Considerações sobre a Radiação Incidente

Segundo Murty e Charit (12), os fragmentos de fissão e os nêutrons são os principais responsáveis pelo dano de radiação. Outros tipos de radiação não possuem energia necessária ou não são produzidas em densidade numérica suficiente para causar maiores danos de radiação. Esta situação fica evidente na ilustração fornecida por Was (16), que apresenta as diferenças na morfologia do dano, eficiência do dano e energia de recuo do átomo média para alguns tipos de radiação com mesma energia (1 MeV) para o níquel. Nesse sentido, Kinchin e Pease (35) apresentam a Tabela 2, em que calculam a energia mínima da radiação incidente necessária para deslocar átomos em materiais de diferentes pesos atômicos com energia limite (E_d) de 25 eV, conforme seu modelo proposto que será abordado na próxima seção.

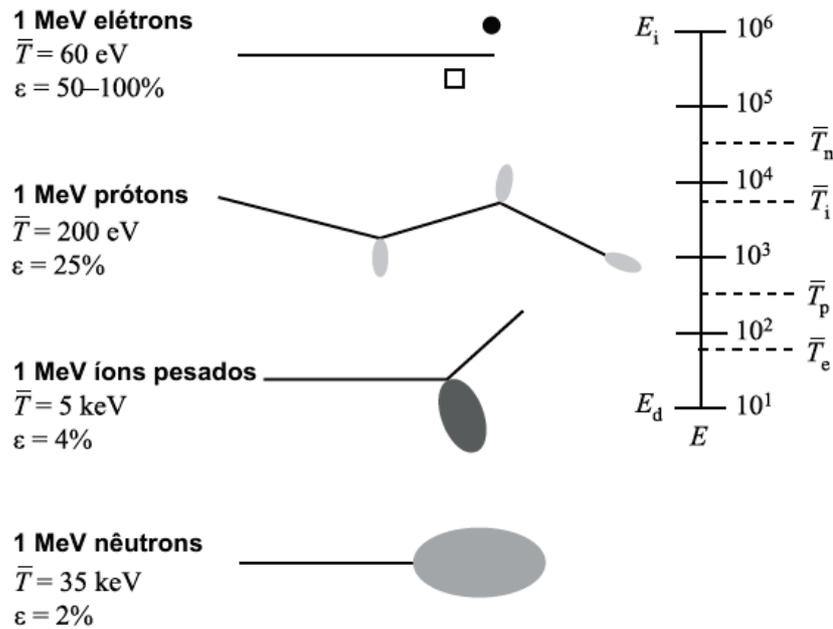


Figura 31 – Diferenças na morfologia do dano, eficiência do deslocamento e energia média de recuo transferida por diferentes tipos de partículas incidentes no níquel (16).

Conforme Kinchin e Pease (35), o deslocamento de átomos detectado em metais por raios gamas são oriundos principalmente da interação por elétrons produzidos pelo efeito fotoelétrico e espalhamento Compton. Os autores observam ainda que nem toda absorção fotoelétrica deslocará o átomo em questão, já que a emissão do elétron será limitada pelo raio γ incidente, em linha com o apresentado na Figura 16. Por sua vez, os

Tabela 2 – Limites de energia para diferentes tipos de radiação para deslocamentos de átomos com $E_d = 25 \text{ eV}$ (35).

Peso atômico de átomos estacionários	10	50	100	200
Nêutrons e prótons (eV)	76	325	638	1263
Elétrons e raios γ (MeV)	0,10	0,41	0,68	1,10
Partículas α	31	91	169	325
Fragmentos de fissão	85	30	25	27

elétrons deslocam átomos por interação coulombiana com o núcleo e devem invariavelmente ser capazes de penetrar a camada eletrônica K para tal (35).

A situação em que os raios γ desempenham um ponto de atenção para as instalações nucleares se refere às interações que ocorrem com refrigerantes a base de água, produzindo íons H^+ e OH^- . Além de favorecer a corrosão com a produção destes íons, as interações de raios γ geram acréscimos na temperatura para diversos componentes (3).

Em outras situações, a ionização provocada pela radiação é relevante para materiais semicondutores e isolantes, em face da liberação dos elétrons constituintes do material (24). Para os isolantes, o deslocamento de elétrons produz efeitos notadamente na coloração de haletos alcalinos (35).

Considerando o ambiente do núcleo do reator, em que os produtos de fissão ficam contidos no interior das varetas dos elementos combustíveis, os danos de radiação recebidos pelo vaso de pressão do reator advém principalmente dos nêutrons incidentes. Dessa forma, o desenvolvimento dos cálculos passará a se concentrar neste tipo de radiação incidente.

3.3.2 Seção de Choque de Deslocamento

A seção de choque de deslocamento para o nêutron incidente pode ser definida como o somatório das parcelas decorrentes de cada tipo de interação, sendo relevante os espalhamentos elástico e inelástico, reações de multiplicação de nêutrons ($n,2n$) e captura radioativa (n,γ), constantes da Equação 3.12, (16) (33). Conforme Was (16), as interações por espalhamento inelástico e de produção de nêutrons ($n,2n$) tornam-se consideráveis para nêutrons com energia na faixa de 1,0 e 8,0 MeV, respectivamente.

$$\sigma_D = \sigma_{Ds} + \sigma_{Di} + \sigma_{D(n,2n)} + \sigma_{D\gamma} \quad (3.12)$$

Retomando-se à Equação 3.11, verifica-se a necessidade da definição das duas incógnitas para definição de cada uma das parcelas da Equação 3.12: $\sigma(E_i, T)$, que representa a seção de choque para a colisão da partícula de energia E_i que resulta na transferência de energia T para o átomo atingido, e $\nu(T)$, que é o número de deslocamentos por PKA.

3.3.2.1 Determinação da Seção de Choque de Transferência de Energia

Considerando o modelo de esfera rígidas e a conservação de energia cinética e momento para o espalhamento isotrópico elástico, a partir do equacionamento da interação no nêutron incidente de massa m com um átomo de massa M na comparação de referenciais de laboratório e centro de massa, é possível extrair a Equação 3.13 para o espalhamento elástico (ver Anexo A). É importante notar que $\sigma_s(E_i, T)$, a probabilidade que o nêutron de energia E_i , espalhado elasticamente por um átomo de massa M , que deposita a energia T no átomo atingido, não depende da energia de recuo. Em outras palavras, $\sigma_s(E_i, T)$ é independente de T e possui comportamento proporcional à seção de choque microscópica de espalhamento elástico (16).

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\Lambda E_i} \quad (3.13)$$

Para a reação de captura radioativa (n, γ), a energia de recuo do núcleo após a emissão da radiação γ é aproximada conforme Equação 3.14 (ver Anexo B). Já para a seção de choque de captura radioativa, Was (16) sugere a Equação 3.15 obtida a partir da simplificação derivada da fórmula de único nível de Breit-Wigner, constante em Evans (36), nos termos de σ_0 , que é o valor máximo da seção de choque microscópica de captura radioativa ($E = E_0$), E_0 , que é a energia de ressonância, ou seja, a energia cinética incidente do nêutron que forma o núcleo os núcleos compostos de níveis de excitação E , e Γ , a largura total do nível de excitação do núcleo composto.

$$\tilde{T} \cong \frac{E_\gamma^2}{2(m + M)c^2} \quad (3.14)$$

$$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \sigma_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_i}} \left\{ \frac{1}{[2(E_i - E_0)/\Gamma]^2 + 1} \right\} \quad (3.15)$$

O espalhamento inelástico é caracterizado por uma reação em que a partícula emitida é virtualmente igual a partícula incidente, porém com perda de energia cinética no sistema. O nêutron incidente é absorvido pelo núcleo alvo formando um núcleo composto, que emitirá um nêutron e raios γ , enquanto permanecer excitado. A seção de choque de espalhamento inelástico pode ser equacionada de diferentes formas nas regiões de ressonância resolvida e não resolvida, sendo que esta ocorre quando o núcleo está excitado em energias altas o suficiente para que os níveis de ressonância se sobreponham e não sejam mais individualmente distinguíveis (16).

Já para a reação ($n, 2n$), um segundo nêutron pode ser emitido quando a energia residual após a emissão do primeiro supere a energia de ligação do nêutron com o núcleo

resultante. Sua seção de choque pode ser interpretadas como um caso especial da seção de choque do espalhamento inelástico (16).

Uma tabela resumo das energias transferidas T para os átomos atingidos por um nêutron incidente e as seções de choque de transferência de energia $\sigma_{E_i, T}$ decorrentes das interações citadas pode ser vista no Anexo C.

3.3.2.2 Determinação do Número de Deslocamentos por PKA

Para o cálculo da variável $\nu(T)$, que representa a quantidade de átomos deslocados, parte-se inicialmente do modelo proposto por Kinchin-Pease (modelo K-P) (35) (37), tendo em vista ser um dos mais simples para explicar o cálculo do dano da radiação (12). Este modelo adota algumas premissas (16):

1. a cascata de deslocamentos é criada por uma sequência binária de colisões elásticas;
2. deslocamentos atômicos ocorrem somente quando $T > E_d$;
3. nenhuma energia é transferida para a rede durante a fase de colisão;
4. perda de energia por *stopping power* eletrônico é dada pela energia de corte eletrônica (E_c);
5. a seção de choque de transferência de energia é dada pelo modelo de esferas rígidas; e
6. não considera os efeitos da estrutura cristalina, arranjo atômico randômico.

O limite de deslocamento ou energia de deslocamento (E_d) é caracterizado como a mínima energia que deve ser transferida para o átomo da rede para que ele seja deslocado de sua posição. Na realidade, a magnitude de E_d dependerá da estrutura cristalina da rede, da direção de incidência, da energia térmica do átomo da rede, entre outros, e da natureza da transferência de momento (12).

Se a energia transferida T pela radiação incidente ao átomo da rede é menor do que E_d , o átomo apenas vibrará em torno da sua posição de equilíbrio e não será deslocado. Estas vibrações serão transferidas para os átomos vizinhos por interações de seus campos de potencial e a energia se manifestará na forma de calor. Observa-se que, como metais possuem uma estrutura cristalina, as barreiras de potencial ao redor de uma posição de equilíbrio da rede não são uniformes em todas as direções, situação exemplificada na Figura 32.

Na representação, o átomo atingido K em uma posição de equilíbrio com energia E_{eq} atravessa diferentes barreiras E^* nas famílias de direções cristalográficas $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ e

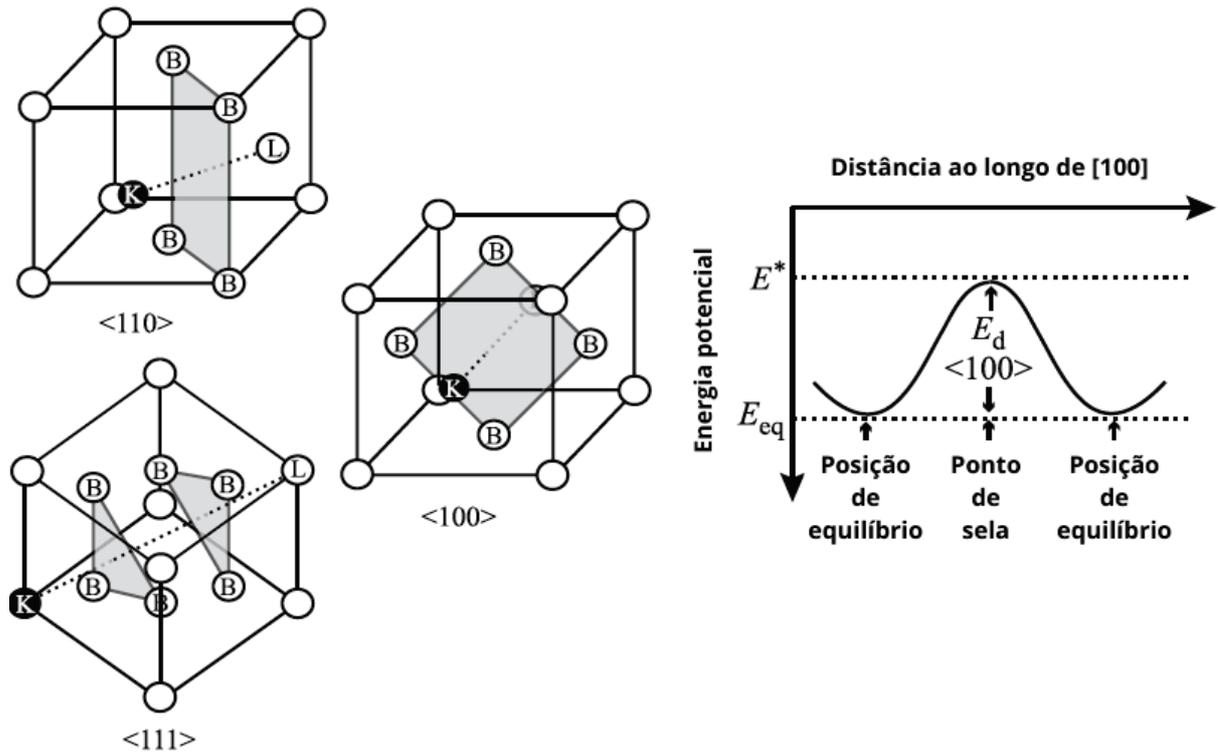


Figura 32 – Projeção das direções do átomo atingido K para posição L por diferentes barreiras de potencial para uma célula CFC e representação da variação de energia do átomo de acordo com seu movimento na direção (16).

<111>, para se deslocar até L em uma célula CFC. Ao se esboçar o gráfico da energia potencial necessária para vencer esta barreira, verifica-se um ponto de sela para a barreira das famílias <100>, já que esta energia é maior do que a da direção <110> e menor do que a da <111> (16). Assim, os valores para E_d acabam se traduzindo em uma média e, a fim de padronizar os cálculos de deslocamentos, a *American Society for Testing and Materials* (ASTM) recomenda por meio da norma E521-23 (33) alguns valores de $E_{d,min}$ e E_d para diferentes metais, conforme Tabela 3.

Tabela 3 – Valores recomendados de energias de deslocamento efetivas para utilização no cálculo dos deslocamentos atômicos (33).

Metal	$E_{d,min}$ (eV)	E_d (eV)
Al	16	25
Ti	19	30
Cr	28	40
Mn	-	40
Fe	20	40
Ni	23	40
Cu	19	30
Mo	33	60
Aço		40

Outro conceito necessário para compreensão do modelo é a energia de corte eletrônica (E_c), que representa o limite superior onde nenhum deslocamento adicional será produzido até que o átomo deslocado tenha sua energia reduzida para este valor. Esta simplificação implica que toda energia acima deste valor será perdida na excitação eletrônica (16).

Com base nos conceitos e premissas elencados, o resultado completo extraído do modelo K-P para $\nu(T)$, o número de deslocamentos por PKA, é representado na forma da Equação 3.16, cujo comportamento é observado no gráfico da Figura 33. A demonstração do valor de $\nu(T)$ consta do Anexo D (16).

$$\nu(T) = \begin{cases} 0 & \text{para } T < E_d \\ 1 & \text{para } E_d < T < 2E_d \\ \frac{T}{2E_d} & \text{para } 2E_d < T < E_c \\ \frac{E_c}{2E_d} & \text{para } T > E_c \end{cases} \quad (3.16)$$

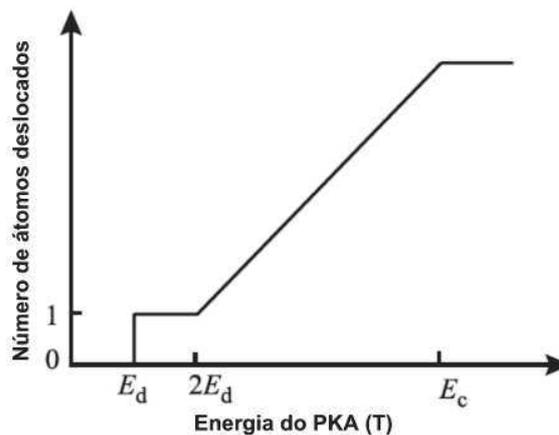


Figura 33 – Número de átomos deslocados em uma cascata em função da energia transferida ao PKA, conforme modelo K-P (16)

No entanto, ajustes no modelo K-P foram propostos para uma descrição física mais realista do processo. Nesse sentido, a premissa 3 pode considerar o consumo de energia E_d para cada colisão e que ambos átomos podem se movimentar. Dessa forma, a contribuição no número de átomos deslocados será diminuída pela contabilização da energia E_d e aumentada pela liberdade na movimentação dos átomos, fornecendo um ajuste fino aos valores (16).

Segundo Was (16), o ponto fraco do modelo K-P está na premissa 5, que considera as colisões atômicas no modelo de esferas rígidas. Assim, o autor afirma que seções de choque mais realistas podem ser utilizadas mantendo-se a proporcionalidade proposta no modelo, aplicando-se correção por meio de constantes. Já a perda de energia por excitação eletrônica adotada na premissa 4 também pode ser tratada de forma mais apurada ao discretizar as interações do PKA ao percorrer o sólido em colisão com o elétron e átomo,

com base na teoria da partição de energia proposta por Lindhard e seus colaboradores (16).

Por fim, os efeitos da cristalinidade do material desconsiderados na premissa 6 consistem na focalização (*focusing*) e na canalização (*channeling*), que reduzem o número de átomos deslocados, porém resultam no transporte de longo alcance de intersticiais das regiões de cascata e do PKA. Focalização consiste na transferência de energia por colisões centradas ao longo de linhas de átomos, que podem gerar a substituições de átomos no processo com apoio dos átomos da vizinhança. Canalização é caracterizado pelo deslocamento de átomos que ocorre nas direções abertas na estrutura cristalina (canais), permitindo que o átomo se mova em longo alcance sendo direcionado por colisões resvalantes nas paredes de átomos do canal. Estes efeitos possuem dependência com a direção do movimento atômico e com sua energia. Em termos de energia, a focalização que resulta na transferência de energia ocorre até valores até valores próximos de $\frac{E_d}{4}$. A substituição dos átomos por colisões focalizadas ocorrerá a partir deste limite até . A canalização se dá em energias próximas de 300 eV para o cobre, por exemplo. Dessa forma, $\nu(T)$ pode considerar estes efeitos (16).

3.3.2.3 Cálculo das Seções de Choque de Deslocamento para Outros Modelos

Com base na exposição sobre o modelo K-P e o cálculo da seção de choque de deslocamento apresentada é possível perceber as nuances que envolvem a definição de seus valores. Assim, denota-se que o cálculo de deslocamentos para nêutrons não é totalmente equivalente, pois são empregadas diferentes conjuntos de dados e tratamentos para as seções de choque para nêutrons (33).

Neste contexto, um modelo ainda empregado foi proposto por Norgett, Robinson e Torrens (modelo NRT)¹ (38), em que $\nu(T)$ é proporcional a um fator de eficiência β , a energia de dano T_{dam} associado com o PKA de energia T e a energia limite E_d , conforme Equação 3.17. Com base na teoria da partição de energia de Lindhard et al., definem-se as Equações 3.18, 3.19, 3.20, 3.21 e 3.22, em que $g(\epsilon)$ é uma função universal que depende do raio atômico de Bohr (a_0), da carga elétrica (e), dos números atômicos do projétil e do alvo (Z_1 e Z_2) e de suas respectivas massas atômicas (A_1 e A_2).

$$\nu(T) = \frac{\beta T_{dam}}{2E_d} \quad (3.17)$$

$$T_{dam} = \frac{T}{1 + kg(\epsilon)} \quad (3.18)$$

¹ Os termos empregados pelos autores foram padronizados neste trabalho com base nas definições de Was (16) e da norma ASTM E521-23 (33).

$$k = 0,1337Z_1^{1/6} \sqrt{\frac{Z_1}{A_1}} \quad (3.19)$$

$$g(\epsilon) = 3,4008\epsilon^{1/6} + 0,40244\epsilon^{3/4} + \epsilon \quad (3.20)$$

$$\epsilon = \frac{A_2 T}{A_1 + A_2} \left(\frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} \right) \quad (3.21)$$

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} \frac{a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} Z_2^{2/3}}} \quad (3.22)$$

O modelo NRT é incorporado nas normas técnicas ASTM E521-23 (33) e ASTM E693-23 (39), que propõem algumas simplificações para o número de deslocamentos produzidos por um PKA de energia T , sendo aceitas pela AIEA para ferro, níquel e suas ligas. A Equação 3.23 apresenta esta simplificação, sendo os valores recomendados para a eficiência de deslocamento $\beta = 0,8$ e energia limite $E_d = 40$ eV. Ainda, por praticidade, a norma técnica ASTM E521-23 (33) sugere considerar $\nu(T) = \frac{2E_d}{\beta}$ para quaisquer valores de T . A comparação entre o comportamento de $\nu(T)$ dos modelos K-P e NRT pode ser observada na Figura 34.

$$\nu(T) = \begin{cases} 0 & \text{para } T < E_d \\ 1 & \text{para } E_d < T < \frac{2E_d}{\beta} \\ \frac{\beta T_{dam}}{2E_d} & \text{para } T \geq \frac{2E_d}{\beta} \end{cases} \quad (3.23)$$

Por sua vez, Doran (40) calculou as seções de choque de deslocamento para o nêutron incidente em alguns materiais. Dessa forma, observa-se na Figura 35 as seções de choque de deslocamento para a energia incidente do nêutron para diferentes tipos de interação para o ferro, considerando-se uma energia limite de $E_d = 33$ eV. No Anexo E, observa-se as seções de choque para um aço inoxidável composto por 18% de cromo e 10% de níquel com e sem a contribuição da reação de captura radioativa (n, γ), sendo possível perceber o acréscimo de tal reação para σ_D na faixa térmica dos nêutrons.

Convém mencionar que, em 2013, a AIEA (NDS) iniciou um projeto de pesquisa coordenada (CRP) com o principal objetivo de revisar e recomendar funções de resposta de dano primário para nêutrons e íons em materiais cristalinos. Um dos resultados foi a emissão de um relatório (41), em que propõe-se a função arc-dpa (*athermal recombination-corrected*). O grupo enfatizou que tal método de cálculo não visava substituir os baseados

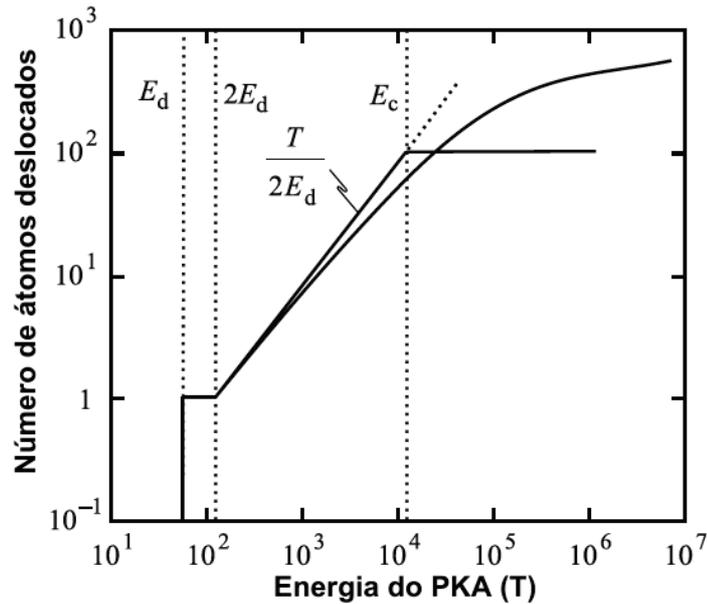


Figura 34 – Comparação do número de átomos deslocados gerados por um PKA no modelo K-P e no modelo NRT (16).

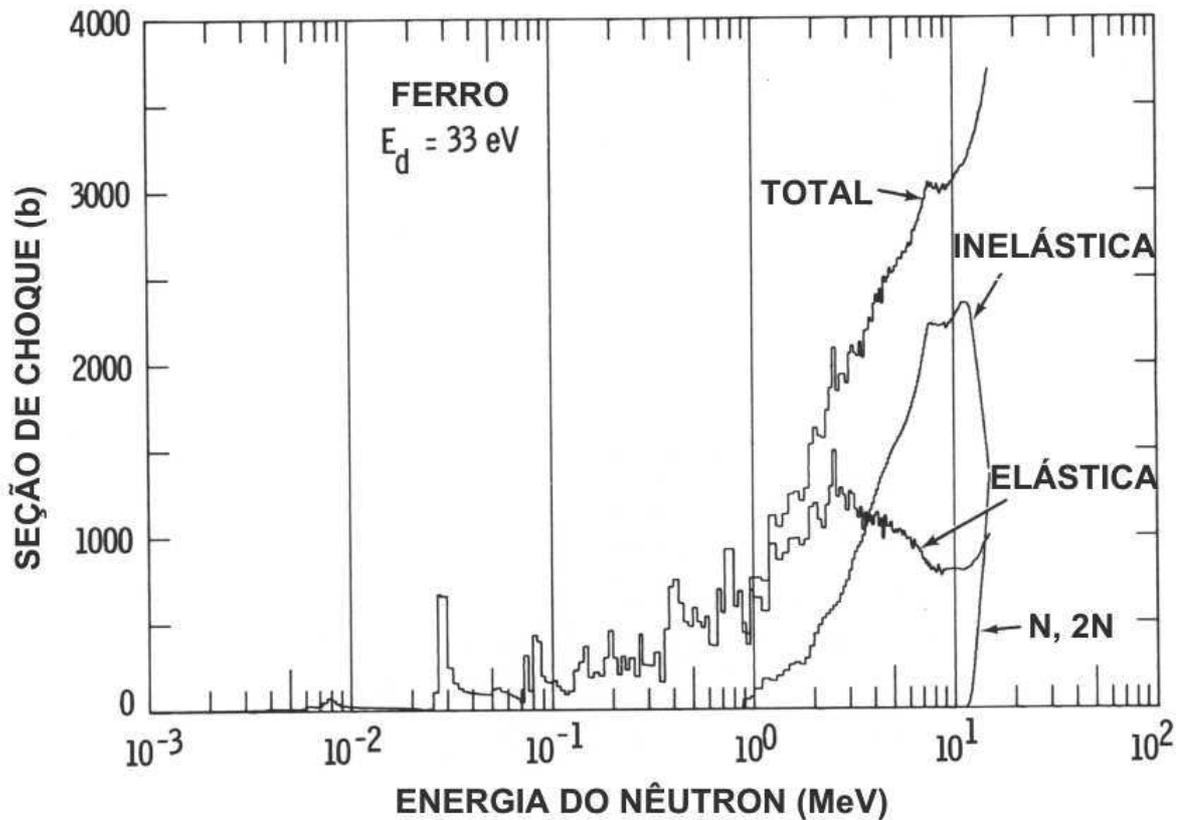


Figura 35 – Seção de choque de deslocamento para o ferro (40).

no modelo NRT, que ainda se mostram válidos como uma conveniente unidade de deposição de energia e são úteis para aplicações como na comparação de diferentes tipos de irradiação. No entanto, observou-se que o conceito arc-dpa possui algumas vantagens que permitem a captura de fenômenos físicos adicionais, em que pese destacar:

1. a morfologia da cascata do PKA e, por conseguinte, a energia de dano eventualmente liberada nos átomos da rede são total e exatamente simulados, o que significa a contabilização exata para um espectro de nêutrons incidentes e a correta comparação de diferentes instalações na base acumulada da fluência-dpa;
2. permite validação empírica de defeitos congelados em temperaturas criogênicas (não observáveis no NRT);
3. contabiliza a temperatura ambiente e a taxa de produção de dano durante a fase da cascata quente; e
4. torna-se um parâmetro mais viável de comparação entre o dano induzido por nêutrons e por partículas carregadas ou íons.

Uma comparação entre os valores das seções de choque de deslocamento para o ferro elaborados por meio dos modelos NRT e arc-dpa pode ser observada na Figura 36, sendo perceptível que o primeiro modelo fornece valores mais elevados do que o segundo.

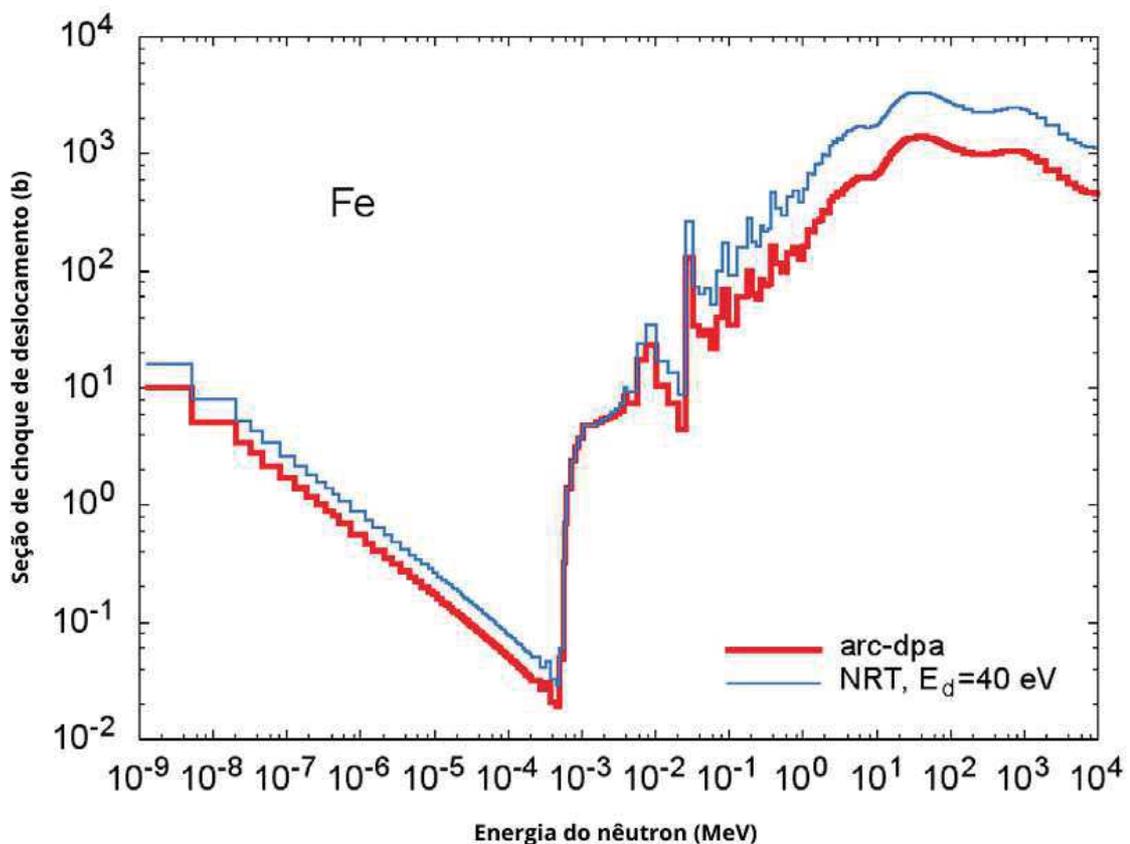


Figura 36 – Seção de choque de deslocamento para o ferro obtidas pelos modelos NRT e arc-dpa (42).

Com base na determinação da seção de choque de deslocamento, torna-se possível calcular a taxa de reações de deslocamentos da Equação 3.9 e a taxa de dpa da Equação 3.10 para determinado fluxo de nêutrons em um material. O objetivo final do cálculo destas

taxas consiste em prover uma previsão para a extensão da mudanças de uma propriedade em particular do material sob irradiação (16).

4 ANÁLISE DOS DANOS E EFEITOS DA RADIAÇÃO

4.1 Análise da Viabilidade Experimental

Inicialmente, propôs-se uma análise experimental dos danos e efeitos da radiação em uma liga de aço de interesse. As amostras seriam confeccionadas, irradiadas e submetidas a ensaios de tração uniaxial com o intuito de se promover a avaliação do endurecimento e fragilização causados pela radiação em baixas temperaturas. Para tal, levou-se em consideração a infraestrutura disponível para irradiação da amostra, que consistia do irradiador de raios γ do Centro Tecnológico do Exército (CTEx) e do reator de pesquisa Argonauta, sob responsabilidade do Instituto de Engenharia Nuclear (IEN).

4.1.1 Irradiador CTEx

Nos termos da CNEN (1), um irradiador é definido como um equipamento utilizado para irradiação, contendo uma fonte radioativa que, quando não se encontra em uso, permanece trancada no seu interior, adequadamente blindada. Nesse sentido, o acondicionamento do irradiador do CTEx que emprega uma fonte de $^{137}_{55}\text{Cs}$ caracteriza uma instalação radiativa¹, diferentemente das instalações nucleares.

O irradiador empregado no CTEx com a finalidade de pesquisa foi projetado e montado em 1969 pelo *Brookhaven National Laboratory*. É um irradiador composto por um sistema pneumático, cujo peso total é de 19 toneladas, incluindo-se a blindagem de chumbo da fonte, localizada na sua parte posterior. Possui duas câmaras de irradiação, superior e inferior, conforme Figura 37, e volume útil de 100 litros (43).

A fonte do irradiador é selada, encerrada hermeticamente em encapsulamento duplo em aço inoxidável de 0,3 mm, e constituída de cloreto de cério (CsCl) e aglutinante. A atividade inicial da fonte em 10 de janeiro de 1969 era de 108 kCi (43). O esquema de decaimento do $^{137}_{55}\text{Cs}$ está representado da Figura 38, observando-se que o decaimento deste radionuclídeo ocorrerá com uma meia-vida ($T_{1/2}$) de 30,018 anos por β^- para $^{137}_{56}\text{Ba}$, envolvendo uma diferença na energia de ligação nuclear (Q) entre o radionuclídeo e o isótopo estável de 1.175,63 keV . Durante este processo, podem ser formados dois níveis de energia metaestáveis do $^{137}_{56}\text{Ba}$, sendo o mais provável (94,61 %) o indicado em 2, cuja meia-vida é 2,5545 minutos e decai em γ de 661,657 keV para $^{137}_{56}\text{Ba}$ estável em 85,05 % dos decaimentos do $^{137}_{55}\text{Cs}$.

Com base nos conceitos apresentados no Capítulo 3, especialmente na Seção

¹ espaço físico, local, sala, prédio ou edificação de qualquer tipo onde pessoa jurídica, legalmente constituída, utilize, produza, processe, distribua ou armazene fontes de radiação (1).

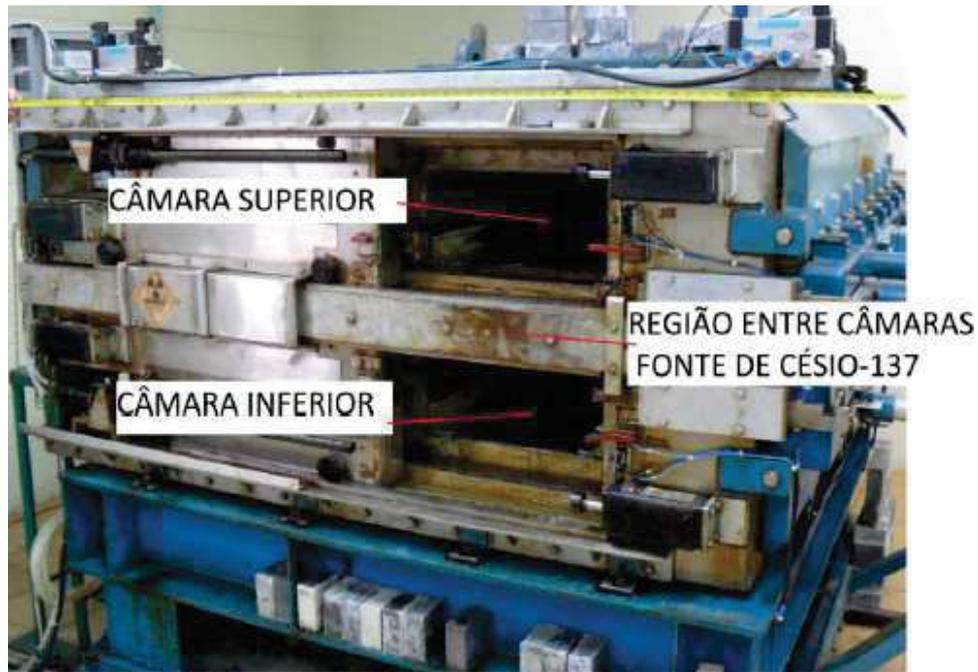


Figura 37 – Irradiador de pesquisa do CTEX com indicação das câmaras de irradiação e região da fonte (43).

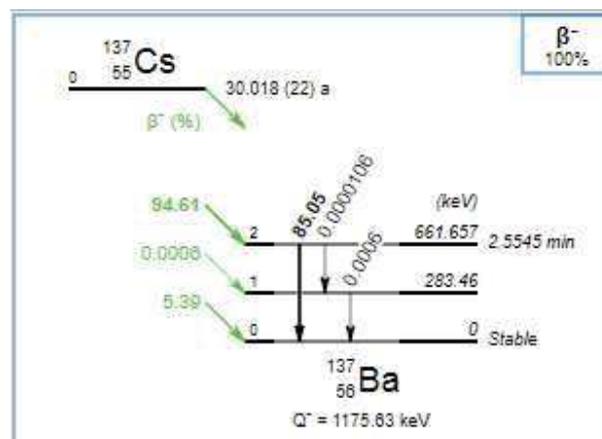


Figura 38 – Esquema de decaimento do Cs-137 (44).

3.3.1, sobre os danos e efeitos da radiação, verificou-se a inadequabilidade de realização experimental por meio do irradiador γ , em que pese destacar a limitação deste tipo de radiação em promover as cascatas de deslocamento, como ilustrado na Figura 31. Além disso, os principais danos causados pela radiação no vaso de pressão de um reator são decorrentes dos nêutrons incidentes.

4.1.2 Reator Argonauta

O reator foi projetado no *Argonne National Laboratory* e construído pela empresa CBV Ltda por meio de um contrato com a CNEN. A sua construção na Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, ensejou alterações no projeto inicial com o propósito de possibilitar o uso

de componentes existentes no mercado brasileiro, sendo a primeira reação de criticidade atingida em 20 de fevereiro de 1965 (45).

A potência máxima de projeto do reator é de 10 *kW* para carregamento em duas lâminas de combustível e de 5 *kW* para uma lâmina. Na atual configuração, o reator pode atingir uma potência de pico de 1 *kW* para uma hora de operação e de 500 *W* para operação contínua. Como principais utilizações, tem-se o treinamento de pessoal, desenvolvimento de pesquisa e testes de materiais e equipamentos. No âmbito das pesquisas, as atuações principais estão relacionadas à física de reatores, irradiação de amostras e realização de ensaios não destrutivos com nêutrons térmicos (45) (46).

Como pode ser visto na Figura 39, o núcleo do reator é arranjado em dois cilindros de alumínio posicionados concentricamente de modo a formar um anel, denominada região do combustível. A distribuição nesta região consiste em 24 posições para arranjo dos elementos combustíveis, sendo a configuração atual a alocação de apenas um segmento de anel. O cilindro interno é preenchido de grafita nuclearmente pura, formando a coluna interna do reator. O cilindro externo envolve a coluna interna, formando o tanque interno do reator.

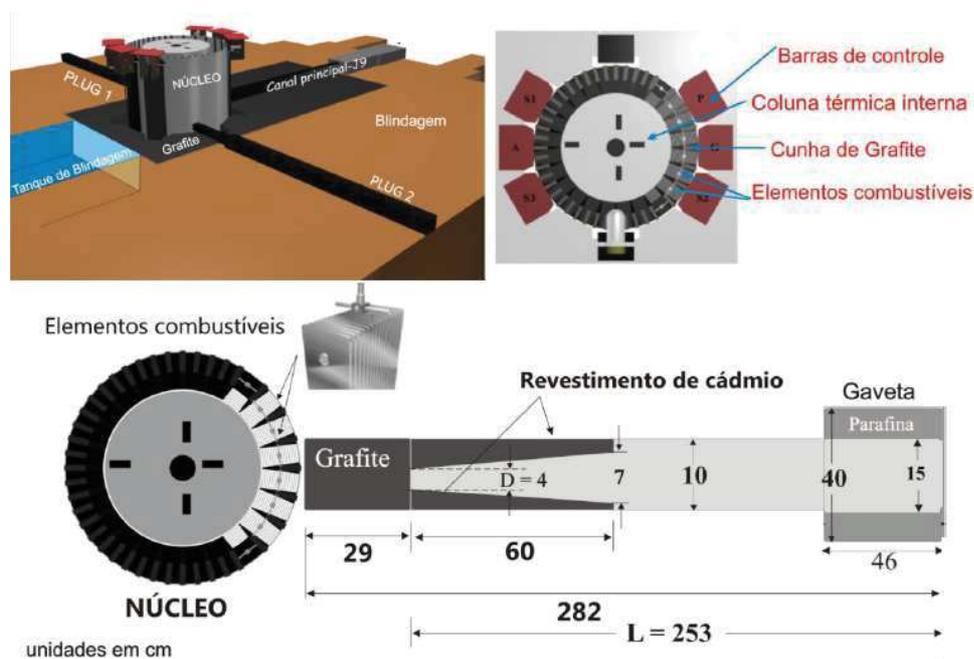


Figura 39 – Perspectiva e arranjo do núcleo e do canal de irradiação J-9 do reator Argonauta (46).

Durante a operação, água deionizada é inserida no tanque atuando principalmente como moderador de nêutrons. A reflexão fica a cargo da grafita posicionada interna e externamente, assim como em cunhas entre os elementos combustíveis. A água também atua como refletor nas direções axiais. A blindagem é realizada por meio de blocos de concreto empilhados em torno do refletor nas direções radiais e possui um escudo de concreto revestido com chapa de aço no topo. Há também um tanque denominado tanque

de blindagem preenchido com água que pode ser removida para permitir acesso a detectores localizados no refletor (45) (46).

O carregamento atual do reator consiste em quatro elementos (denominados normal) com dezessete placas com cerca de 20 g de $^{235}_{92}\text{U}$, dois elementos (denominados EMX) também com dezessete placas, sendo onze com cerca de 20 g de $^{235}_{92}\text{U}$ e seis com cerca de 10 g de $^{235}_{92}\text{U}$, e dois elementos (denominados EGP) com sete placas de cerca de 10 g de $^{235}_{92}\text{U}$ e meio prisma de grafita. As placas são constituídas de uma mistura de alumínio e octóxido de triurânio (U_3O_8), enriquecido em 19,91 % de $^{235}_{92}\text{U}$ (45) (46).

Destaca-se a segurança na operação do referido reator. Por ser de baixa potência, consequentemente, o combustível atinge baixas temperaturas, o que possibilita que a água possa ser retirada totalmente em uma parada intencional ou de emergência. Ademais, possui coeficiente de reatividade negativo de temperatura e de vazio, o que lhe confere uma segurança inerente. Em outras palavras, o acréscimo de temperatura resultará na diminuição na geração de nêutrons no reator e, por conseguinte, na sua potência. Outro sistema de segurança do reator está associado à injeção de nitrogênio para produção de bolhas no moderador, inserindo reatividade negativa no reator. Ainda, as barras de controle e segurança de cádmio são inseridas no reator por meio da gravidade em situações de emergência, ao serem desacopladas de embreagem magnética, em um tempo inferior a 0,5 s. A água do reator também pode ser extraída por gravidade para o tanque de dreno que está localizado em um poço de cota inferior em relação ao piso do salão (45) (46).

O reator possui treze canais de irradiação, sendo o principal deles o J-9, pois alcança o tanque externo a meia altura (maior fluxo neutrônico), ilustrado na Figura 39 (46). O reator ainda conta com *plug* 1 e *plug* 2, que atravessam a blindagem até o núcleo, e um sistema de transferência de amostras que dá acesso ao núcleo por meio de sonda de tubulação de alumínio (45).

4.1.2.1 Metodologia do Cálculo do dpa

Para definição da seção de choque de deslocamento, é possível empregar a norma ASTM-E693-23. Observa-se que os valores obtidos para o ferro são uma aproximação adequada para o cálculo de deslocamentos para os aços, quase totalmente constituídos deste elemento (95 a 100%), nos campos de radiação em que processos de danos secundários não são importantes (39). Nesse sentido, o emprego dessa norma se mostra adequada para a correlação de parâmetros para irradiação de nêutrons, como o aço de baixa liga (47), amplamente aplicado na constituição de vasos de pressão de reatores (48).

Dessa forma, conforme a referida norma, adotou-se os valores de seção de choque de deslocamento para o ferro natural para nêutrons disponibilizados nesta norma (39) discretizados em 139 conjuntos de dados no intervalo com valores para as energias de nêutron incidente entre $0,000105 \leq E_n \leq 0,12 \text{ eV}$. O limite inferior do intervalo trata-se

do primeiro dado disponível na referência e o superior delimita a região em que o fluxo neutrônico não é significativo.

Para definição do fluxo neutrônico, foi realizado um levantamento em diversos trabalhos desenvolvidos no reator Argonauta, sendo a maior parte referente ao canal de irradiação J-9. Voi (49) apresenta um fluxo de nêutrons com distribuição aproximadamente maxwelliana emergente do núcleo de $1,14 \cdot 10^9 \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$. Cunha (50) apresenta valores de fluxo térmico extraídos do manual do reator, conforme Tabela 4. Por meio de modelagem computacional do reator, o autor ainda apresenta o perfil fluxo em um dos elementos centrais pressupondo ser a região em que o valor é máximo (elemento 6), obtendo um fluxo máximo de cerca de $8,00 \cdot 10^9 \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ para nêutrons entre 0 e $0,625 \text{ eV}$ e de cerca de $1,00 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ para nêutrons entre 0,01 e 20 MeV .

Tabela 4 – Valores de fluxo de nêutrons térmico, conforme manual do reator Argonauta (50).

Posição	Fluxo ($\text{n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)
Plug 1	$1,60 \cdot 10^8$
Plug 2	$6,50 \cdot 10^8$
Elemento 6	$2,01 \cdot 10^9$
J-9 tanque	$1,60 \cdot 10^9$
J-9 saída	$2,24 \cdot 10^5$

Os estudos desenvolvidos nestas referências tomaram a configuração inicial do reator Argonauta, com o emprego de seis elementos combustíveis (normal) no seu núcleo. Na configuração atual, Souza (46) apresenta valores para o fluxo térmico no núcleo de $7,00 \cdot 10^9 \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ na potência de 500 W . Para o J-9, o fluxo térmico disposto é de $4,46 \cdot 10^9 \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ no início do canal.

Com a finalidade de se verificar a possibilidade de desenvolver estudo com irradiações de amostras no reator Argonauta, para o canal J-9, considerou-se um fluxo térmico máximo superestimado de $10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, discretizado a partir da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann nos valores de energia dos 139 conjuntos de dados mencionados anteriormente. A função da distribuição de Maxwell-Boltzmann $f_{MB}(E_n)$ foi calculada como (51):

$$f_{MB}(E_n) = \frac{2\pi}{(\pi kT)^{3/2}} E_n^{1/2} e^{-E_n/kT} \quad (4.1)$$

em que $m = 1,67494 \cdot 10^{27} \text{ kg}$, $k = 8,617 \cdot 10^{-5} \text{ eV/K}$ e $T = 293 \text{ K}$.

O fluxo dependente da energia $\phi(E_n)$ foi calculada como:

$$\phi(E_n) = \phi \cdot f_{MB}(E_n) \quad (4.2)$$

em que $\phi = 10^{10} \text{ n.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$.

O intervalo de energia ΔE_n foi calculado como (39):

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \quad (4.3)$$

em que, para $n = 140$, $E_{140} = 0,1275 \text{ eV}$

O fluxo no intervalo de energia é obtido adotando-se:

$$\phi_n = \phi(E_n) \cdot \Delta E_n \quad (4.4)$$

A taxa de dpa foi calculada como (lembrando-se que $1b = 10^{24} \text{ cm}^2$ para conversão de unidades):

$$\frac{dpa}{t} = \sum_{i=1}^n \sigma_D(E_n) \cdot \phi(E_n) \cdot \Delta E_n \quad (4.5)$$

Os resultados do procedimento descrito podem ser verificados na memória de cálculo constante do Apêndice A.

Ainda, para uma análise mais abrangente, cálculos também foram realizados aplicando-se o espectro de fissão de Watt. Assume-se que esta seria a condição ideal para a irradiação, sendo este o espectro mais duro emergente do núcleo do reator Argonauta. A mesma metodologia de cálculo foi realizada, adotando-se um total de $n = 136$ conjunto de dados de seções de choque de deslocamento para energias de nêutrons incidentes entre $0,1 \leq E_n \leq 10 \text{ MeV}$, sendo $E_{137} = 10,1 \text{ MeV}$. Definiu-se os limites inferiores e superiores a partir dos valores da taxa do dpa discretizada que não contribuiu significativamente para o total. A Equação 4.1 foi substituída pela Equação 4.6.

$$\chi(E_n) = 0,453e^{-1,036E_n} \sinh \sqrt{2,29E_n} \quad (4.6)$$

Os resultados do procedimento descrito podem ser verificados na memória de cálculo constante do Apêndice B.

4.1.2.2 Resultados e Análise

Com a finalidade de se apresentar os resultados e sua análise, os valores discretizados foram agrupados e são apresentados na forma de tabela. Para o canal J-9, o resultado consta da Tabela 5. O comportamento da seção de choque de deslocamento e do fluxo dependente da energia como função da energia do nêutron incidente no intervalo adotado pode ser visualizado na Figura 40.

Tabela 5 – Fluxo neutrônico e taxa de dpa calculados para o canal J-9.

n	Energia do nêutron incidente (eV)	Fluxo neutrônico		Taxa de dpa	
		($n.cm^{-2}.s^{-1}$)	%	(s^{-1})	%
1-35	0,00011-0,00063	2,89E+07	0	2,49E-15	2
36-70	0,00066-0,00380	3,96E+08	4	1,39E-14	12
71-105	0,00400-0,02200	3,47E+09	35	5,27E-14	45
106-139	0,02300-0,12000	6,16E+09	61	4,80E-14	41
Total		$\approx 1.00E+10$	100	1,17E-13	100

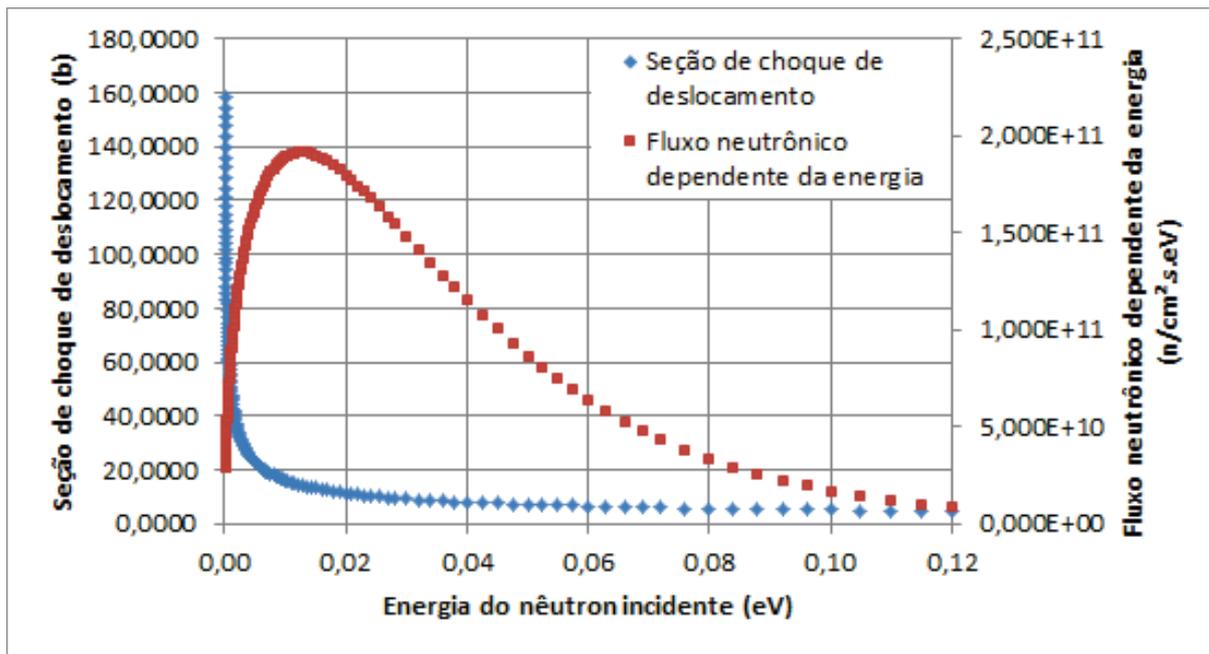


Figura 40 – Seção de choque de deslocamento e fluxo neutrônico dependente da energia para o canal J-9.

Assim, a taxa de dpa calculada nas condições descritas para o canal J-9 equivale a $1,17.10^{-13} s^{-1}$ ou $4,21.10^{-10} h^{-1}$. Considerando uma rotina de operação máxima de 6 horas (50) e a possibilidade de alterações apreciáveis no material em deslocamento por átomo de 0,0001 (27) (34), seriam necessário mais de 395.000 dias de irradiação das amostras nestas condições. Portanto, demonstra-se a inviabilidade de experimentos visando resultados de endurecimento e fragilização em baixas temperaturas.

Analisando-se os grupos formados pelas faixas de energia dos nêutrons incidentes, verifica-se que o fluxo neutrônico para o primeiro grupo da Tabela 5 é insignificante ($\approx 0\%$), porém ainda é capaz de contribuir com uma taxa de dpa proporcionalmente muito mais elevada (2%). Este fato se deve aos maiores valores na seção de choque de deslocamento nesta faixa energética, que decorre das reações nucleares de captura radioativa (n,γ). Este tipo de reação é capaz de deslocar átomos na rede cristalina em função da energia de recuo do núcleo por ocasião da emissão da radiação, atendendo ao princípio de conservação de momento (16). Com o acréscimo da energia do nêutron incidente, a probabilidade desta

reação diminui atendendo a proporção $1/v$ ou $1/\sqrt{E}$ (19). Por isso, observa-se que terceiro grupo apresenta maior contribuição para a taxa de dpa do que o quarto (45% x 41%), apesar do fluxo neutrônico desse ser inferior (35% x 45%).

Adicionalmente, ressalta-se que a taxa de dpa calculada poderia ser ainda menor se fosse empregado um fluxo neutrônico realístico para o canal de irradiação. Além disso, outra redução neste valor poderia ser obtida se outros bancos de dados de seções de choque de deslocamento fossem empregados, como, por exemplo, conjuntos de dados baseados no modelo arc-dpa que apresentam valores levemente inferiores quando comparados aos obtidos por meio do modelo NRT (Figura 36).

Para os cálculos desenvolvidos empregando-se o espectro de fissão de Watt, o resultado consta da Tabela 6. O comportamento da seção de choque de deslocamento e do fluxo dependente da energia como função da energia do nêutron incidente no intervalo adotado também pode ser visualizado na Figura 41.

Tabela 6 – Fluxo neutrônico e taxa de dpa calculados para o canal J-9.

n	Energia do nêutron incidente (MeV)	Fluxo neutrônico		Taxa de dpa	
		($n.cm^{-2}.s^{-1}$)	%	(s^{-1})	%
1-35	0,10-0,60	1,64E+09	16	4,69E-13	5
36-70	0,63-3,40	6,86E+09	69	5,42E-12	65
71-105	3,50-6,90	1,42E+09	14	2,23E-12	27
106-136	7,00-10,00	1,08E+08	1	2,17E-13	3
Total		$\approx 1.00E+10$	100	8,34E-12	100

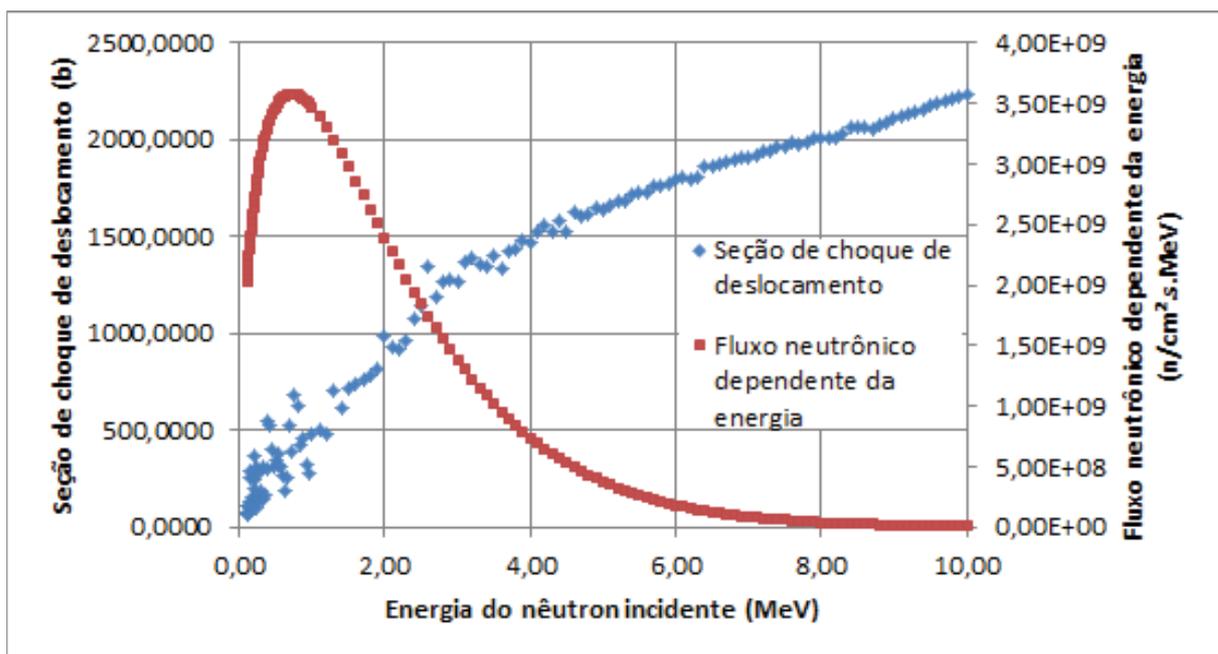


Figura 41 – Seção de choque de deslocamento e fluxo neutrônico dependente da energia para o canal J-9.

Nestas condições, a taxa de dpa calculada foi de $8,34 \cdot 10^{-12} \text{ s}^{-1}$ ou $3,00 \cdot 10^{-8} \text{ h}^{-1}$. Observa-se que os resultados obtidos estão em consonância com a teoria apresentada nesta dissertação: tendo-se o mesmo fluxo neutrônico, as taxas de dpa serão maiores para espectros mais energéticos ou duros e, por conseguinte, causarão maior dano de radiação ao material. Isso decorre do PKA produzido pelo nêutron incidente ($E > 0,1 \text{ MeV}$) possuir maior energia depositada e ter a capacidade de gerar uma cascata de deslocamentos maior (16). Este comportamento está refletido nos resultados apresentados na Tabela 6, em que o grupo mais energético é capaz de produzir cerca de três vezes mais dano para um fluxo equivalente.

Convém rememorar que outras reações nucleares começam a ter maiores probabilidades de ocorrência, como o espalhamento inelástico (n, n') e a produção de nêutrons ($n, 2n$), com nêutrons incidentes com energia superior a $1,0 \text{ MeV}$ e $8,0 \text{ MeV}$, respectivamente (16). A contribuição destas reações fica evidente na Figura 35 e também pode ser percebida no comportamento da seção de choque de deslocamento da Figura 41.

Mesmo nesta condição em que é considerado um espectro mais duro para o fluxo neutrônico, o tempo de irradiação para obtenção de $0,0001 \text{ dpa}$ ainda seria de cerca de 555 dias. Portanto, é possível afirmar que a principal limitação para danos de irradiação utilizando o reator Argonauta é seu baixo fluxo neutrônico. Para comparação, Hashimoto, Byun e Farrel (27) irradiaram amostras com fluência neutrônica entre $1,1 \cdot 10^{17}$ e $6,3 \cdot 10^{20} \text{ n.cm}^{-2}$ com nêutrons de $E > 0,1 \text{ MeV}$, atingindo níveis entre $0,0001$ e $0,92 \text{ dpa}$.

É interessante pontuar que Corrêa (52) desenvolveu um estudo sobre o comportamento da fluência do aço 316 SS com 50% de redução a frio em diferentes condições de temperatura e tensão aplicada, após irradiação neutrônica. As amostras irradiadas receberam um fluxo integrado de $8,6 \cdot 10^{17} \text{ n.cm}^{-2}$ de nêutrons rápidos ($E \geq 0,1 \text{ MeV}$) proveniente do reator de pesquisa IEA-R1, instalado no Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), em São Paulo. Mesmo com este fluxo superior comparado ao reator Argonauta, Corrêa (52) apontou uma tendência de fragilização devido à irradiação neutrônica, não observando grandes mudanças estruturais ainda devido ao baixo fluxo integrado de nêutrons rápidos.

4.2 Danos de Radiação em um Vaso de Pressão de um Reator PWR

Desconsiderando-se a realização de irradiação de amostras do material e sua submissão a ensaio de tração axial para análise do efeito da radiação de endurecimento e fragilização em baixas temperaturas, buscou-se outras alternativas para o prosseguimento da pesquisa. Assim, verificou-se a possibilidade do desenvolvimento de modelagem de uma instalação nuclear com emprego do código MCNP para estimativa do dano de radiação no vaso de pressão do núcleo do reator. O objetivo desta modelagem é a extração do

espectro neutrônico do fluxo que atinge região central da parede interna do vaso de pressão, possibilitando o cálculo da taxa de dpa neste local.

Para consecução deste objetivo, adotou-se os dados nucleares disponíveis para o primeiro carregamento do núcleo do reator de potência de Angra 2 (53). Desenvolveu-se o modelo que abrange o comprimento ativo do núcleo no código MCNP. Este modelo foi validado a partir da comparação entre parâmetros físicos (k_{∞} e k_{eff}) calculados pelo código e disponíveis na referência (53), sendo implementados ajustes no modelo até se atingir uma diferença aceitável que não traria impactos significativos para o resultado final. Com a validação do modelo, prosseguiu-se com a execução do código para obtenção do fluência neutrônica discretizada nos canais de energia na parede interna do vaso de pressão. Com base nestes resultados, elaborou-se o espectro neutrônico nesta região para a instalação nuclear modelada, sendo ainda realizada uma análise do comportamento obtido. Por fim, adotando-se o conjunto de dados de seção de choque de deslocamento (39) e um valor médio para a fluência neutrônica em vasos de pressão do tipo PWR após quarenta anos de operação (48), calculou-se o dpa total a parede interna do vaso de pressão da instalação nuclear considerada. O procedimento descrito e os resultados obtidos serão apresentados nas próximas seções com maior detalhamento.

4.2.1 O Código MCNP

O MCNP é código de uso geral desenvolvido para o acompanhamento do transporte de diferentes tipos de partículas em um amplo espectro de energia, em que se destaca a possibilidade de aplicação em projetos de reatores e segurança nuclear para criticalidade (54). Para a versão 5, a qual foi empregada no desenvolvimento da modelagem, a faixa de energia dos nêutrons acompanhados é de 10^{-11} MeV a 20 MeV para todos os isótopos, podendo atingir até 150 MeV para determinados átomos (55).

O código se baseia no método estatístico de Monte Carlo obtendo respostas a partir de simulações individuais de partículas governadas pelas distribuições de probabilidades aleatoriamente amostradas. Estas respostas são registradas (*tallies*) e, a partir do seu acúmulo, são utilizadas para representar um comportamento médio. Tal método é adequado para emular teoricamente processos estatísticos, como a interação de partículas nucleares com materiais, sendo particularmente útil para a solução de problemas complexos que não podem ser modelados em códigos computacionais que empregam métodos determinísticos. Assim, o método de Monte Carlo pode ser interpretado como uma técnica realística para desenvolvimento de um experimento numérico envolvendo o acompanhamento de partículas (55).

As partículas são acompanhadas desde sua criação até sua morte (absorção, escape, entre outros). Por meio da Figura 42, é possível exemplificar os processos do MCNP decorrentes de uma história acompanhada. As partículas acompanhadas nesta situação se

referem a nêutrons e fótons, iniciando-se com a entrada do nêutron em uma região que contém uma placa de material fissil. Números entre 0 e 1 são sorteados para determinar o tipo de interação e o seu local de ocorrência, considerando as leis físicas e as probabilidades que regem o processo e os materiais envolvidos. No evento 1, ocorre a colisão do nêutron com o meio resultando no seu espalhamento e produção de um fóton, que é temporariamente armazenado no código para posterior análise. O nêutron espalhado percorre seu caminho até interagir novamente com o material e resultar na fissão nuclear no evento 2, produzindo dois nêutrons e um fóton. Um desses nêutrons e o fóton também são armazenados para posterior análise, passando-se a acompanhar o outro nêutron, que é capturado no evento 3 e tem sua história encerrada. O nêutron armazenado é liberado, passa a ser acompanhado pelo código e não interage com o meio, escapando da região da placa no evento 4. Em seguida, o fóton produzido na fissão é acompanhado, sofre uma colisão no evento 5 e também escapa da região da placa no evento 6. O primeiro fóton produzido no espalhamento do nêutron passa a ser acompanhado e é capturado no evento 7. Finalmente, a história do nêutron incidente está completa e, com o acúmulo de mais histórias de nêutrons e fótons no meio modelado, o código fornecerá os valores dos resultados solicitados acompanhados da incerteza estatística (55).

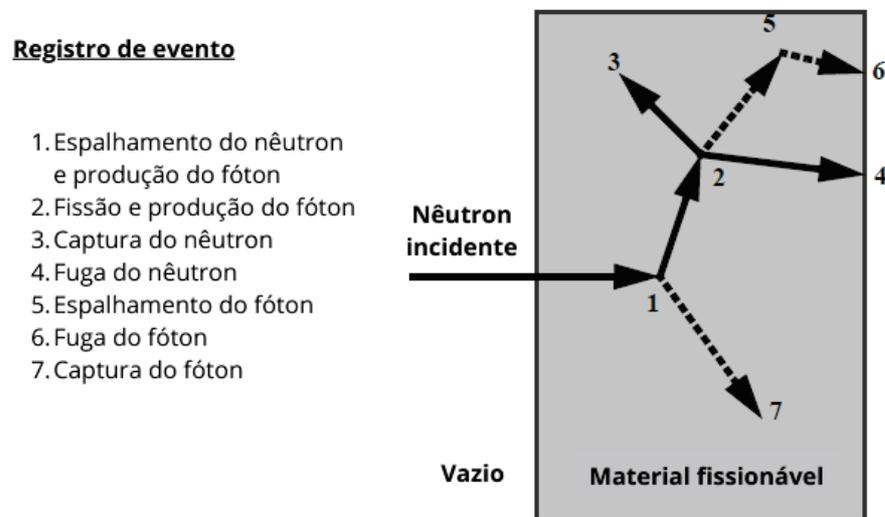


Figura 42 – História aleatória acompanhada pelo MCNP de um nêutron incidente em uma placa dotada de material fissil (55).

No que tange aos aspectos físicos compreendidos no código, alguns comentários merecem ser feitos adicionalmente aos apresentados no Capítulo 3, especialmente na Seção 3.1. O código faz uso do tratamento térmico do gás livre para a interação de nêutrons com outros átomos para considerar os efeitos do movimento térmico do meio. Além disso, os efeitos das ligações químicas e da estrutura cristalina para nêutrons com energia inferior a 4 eV também são considerados por meio das bibliotecas de espalhamento térmico $S(\alpha, \beta)$, apesar de estarem restritas a algumas substâncias e temperaturas. Mesmo com as

limitações dos modelos, estes tratamentos permitem que o código promova correções e alcance resultados mais realísticos nas simulações (55).

Quanto às probabilidades dos eventos, o caminho percorrido pela partícula no meio é sorteado considerando-se a sua seção de choque macroscópica total, assim como o peso de cada interação nuclear é balizado pelas suas respectivas seções de choque microscópicas. O código é dotado com bibliotecas que contemplam tais informações, oriundas de diversos bancos de dados nucleares. Para nêutrons, na versão 5, o código conta com mais de 836 tabelas de para cerca de 100 diferentes tipos de elementos e seus isótopos (55).

Por sua vez, os resultados extraídos dos *tallies* são apresentados, em quase na totalidade dos casos, a partir de uma normalização da partícula inicial, estando relacionados à corrente e fluxo das partículas e energia depositada. A variação esperada dentro dos resultados obtidos se refere ao erro relativo no nível de um desvio padrão, sendo geralmente confiável abaixo de 0,10. É fundamental observar que este valor está associado apenas a precisão dos cálculos e não à exatidão do resultado, medida do quão próximo é o resultado com o verdadeiro valor físico do problema (55).

O código é alimentado pelo usuário por meio de um arquivo de entrada que deve obedecer a sua sintaxe e deverá conter ao menos três blocos de informações, denominados cartões. O cartão de células é o primeiro bloco e contará com a numeração das células (volume) do problema, a identificação do material de preenchimento e sua densidade e a especificação da geometria das células. O segundo bloco refere-se ao cartão de superfícies que contará com a definição das superfícies empregas na geometria das células. Por fim, o terceiro bloco do cartão de dados requer diversas informações para execução do problema como a designação da partícula para o código e para as células, as especificações da fonte, dos resultados desejados (*tallies*) e do material, além de estabelecer o critério de parada do problema (54). A referida estrutura pode ser observado no código desenvolvido que consta do Apêndice C.

Ademais, a versão 5 conta com o apoio de um software de visualização gráfica denominado VISED, em que se destaca a possibilidade do usuário efetuar a verificação do modelo programado e a identificação de inconsistências geométricas nos cortes da estrutura modelada. Ainda, é possível a elaboração da geometria em três dimensões e a visualização dos trajetos, colisões e fontes da partículas no modelo, além de conter ferramentas que auxiliam a implementação da sintaxe no MCNP.

4.2.2 Modelagem do Núcleo de Angra 2

Conforme mencionado anteriormente, para desenvolvimento do modelo, empregou-se os dados nucleares disponíveis em Medeiros (53) relacionados especialmente à especificação de materiais e geometria, dimensões e posicionamento dos componentes atinentes ao

núcleo do reator de potência de Angra 2. A condição adotada foi do primeiro carregamento totalmente fresco (sem *burnup*), livre dos produtos de fissão, na temperatura de 20°C e com potência zero. A partir dessas informações, a região modelada se refere ao comprimento ativo do núcleo do reator, incluindo-se os seus 193 elementos combustíveis, as estruturas circundantes suportantes do núcleo, que delimitam a entrada e saída do refrigerante e o vaso de pressão, que conta com um revestimento interno, conforme corte observado na Figura 43.

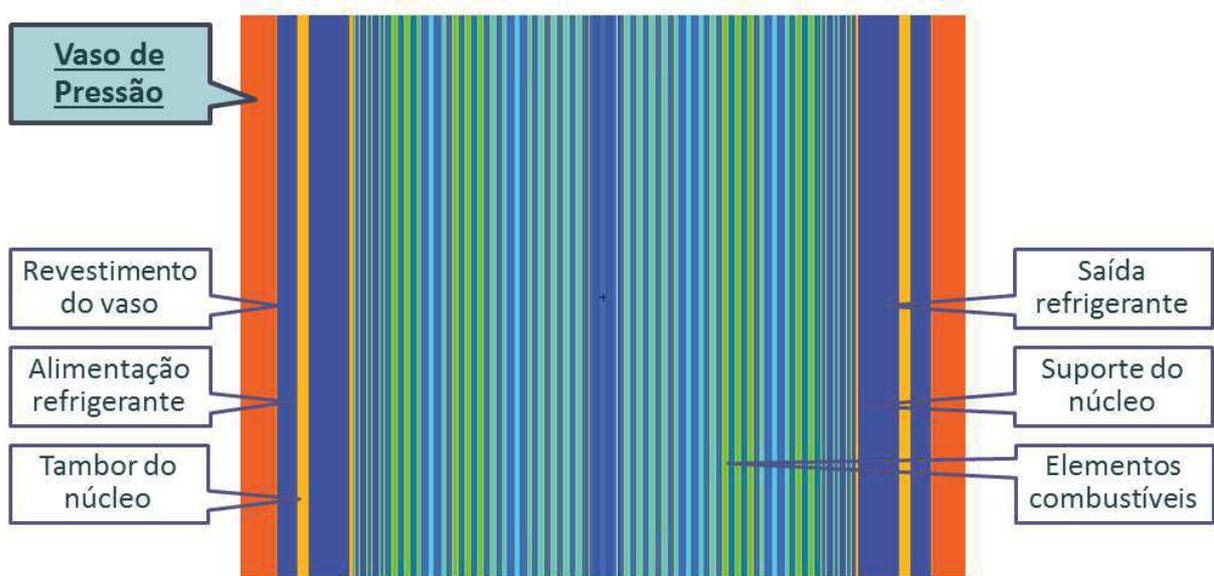


Figura 43 – Corte na direção axial do modelo desenvolvido no código MCNP para o comprimento ativo do núcleo de Angra 2 com a identificação das suas estruturas representado no programa Vised.

Cada elemento combustível é construído em uma matriz de 16 x 16 posições, em que 236 são ocupadas por varetas do combustível e as outras 20 por tubos guias. Uma primeira distinção entre os elementos combustíveis consiste na instalação ou não do conjunto de barras de controle, que são inseridas no núcleo ativo durante a operação através dos tubos guia. No primeiro carregamento, determinados elementos combustíveis possuíam 8 ou 12 varetas com absorvedores de nêutrons queimáveis de óxido de gadolínio (Gd_2O_3), na fração de 7% em peso, incorporado a uma matriz de dióxido de urânio (UO_2) com enriquecimento de 0,71% de ^{235}U . Outra diferença entre os elementos está no combustível inserido nas varetas que contam com pastilhas com níveis de distintos de enriquecimento de (1,9%, 2,5% e 3,2% em peso) ^{235}U . Estas peculiaridades foram incorporadas no modelo e a Figura 44 ilustra a configuração do núcleo.

Quanto à composição dos materiais empregados no modelo, empregou-se também o compêndio de materiais (56) recomendado pelos desenvolvedores do código. Além dos materiais já mencionados, adotou-se água borada a 2200 ppm para o refrigerante, hélio no preenchimento das varetas de combustível, Zircaloy-4 para a estrutura das varetas, uma liga de prata-índio-cádmio para as barras de controle, uma liga de aço inoxidável para as

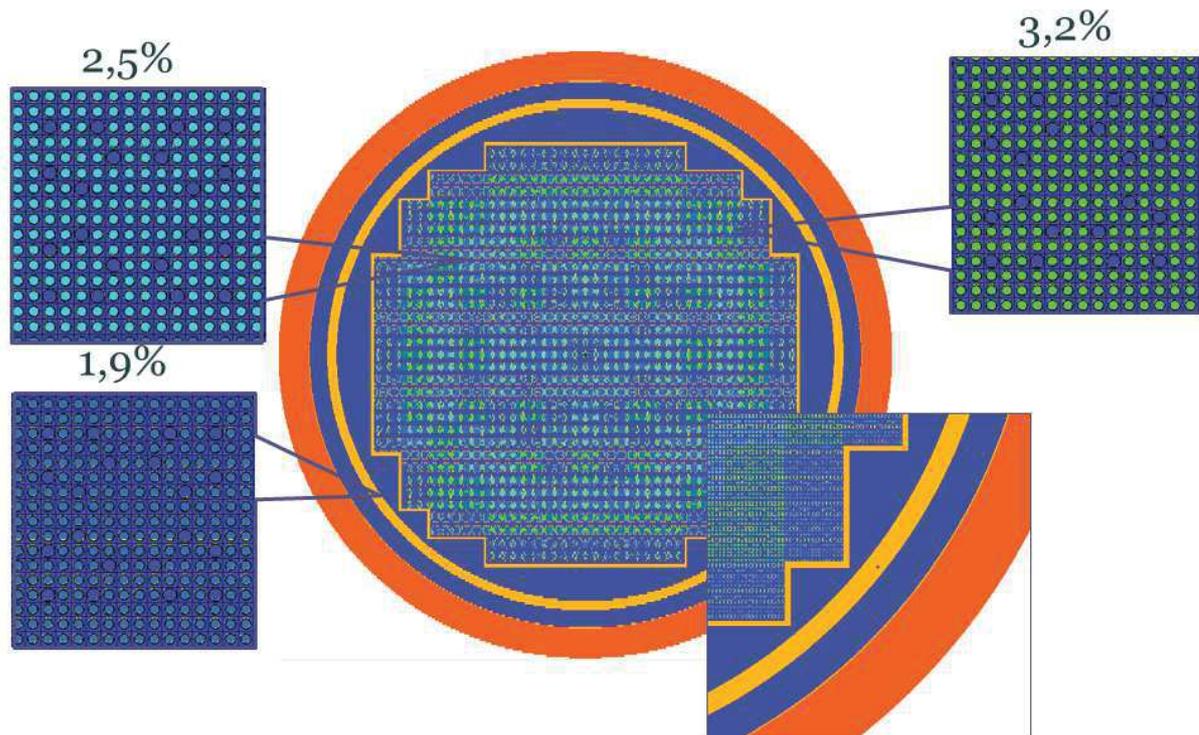


Figura 44 – Corte na direção radial do modelo desenvolvido no código MCNP para o núcleo de Angra 2 com as representações dos diferentes níveis de enriquecimento de urânio e detalhe das estruturas elaborado com o programa Vised

estruturas de suporte do núcleo e o revestimento do vaso de pressão e uma liga de aço especial 20MnMoNi55 para o vaso de pressão. É importante observar que a composição da liga do vaso de pressão atende aos requisitos da norma ASTM-E693-23, sendo um aço baixa liga constituído de mais de 96,75% de ferro. Tais composições podem ser verificadas no modelo desenvolvido que consta do Apêndice C.

Destaca-se que devido a quantidade de componentes necessários na modelagem, fez-se uso de comandos no código para inclusão de estruturas repetitivas, como a inserção de reticulados (*lattice*) e seu preenchimento com universos, estruturas previamente programados em diferentes camadas do código. Estas regiões são acessadas no MCNP por meio de comandos que criam "janelas" para estes outros níveis, podendo-se criar ainda outros níveis dentro dos universos programados. Tais aplicações podem ser observadas no código do Apêndice C com a programação dos conjuntos de células das varetas (pastilha de combustível, preenchimento de hélio, estrutura de revestimento e refrigerante circundante), dos tubos guias (preenchimento com refrigerante, estrutura de revestimento e refrigerante circundante), dos elementos combustíveis (combinações de conjuntos de varetas e conjuntos de tubos guias) e, finalmente, do núcleo (combinações dos diferentes tipos de elementos combustíveis).

A fonte adotada para o modelo consiste de emissões de nêutrons igualmente prováveis oriundos do interior de cada vareta central dos elementos combustíveis, a meia

altura, com exceção dos mais externos. A energia de emissão destas partículas obedecem as probabilidades do espectro de fissão de Watt. Considera-se que esta condição consiste de uma adequada aproximação da distribuição espacial da geração de nêutrons no sistema para levantamento de um espectro neutrônico produzido na regiões de achatamento do fluxo no vaso de pressão do reator. Algumas histórias podem ser acompanhadas pelas trajetórias na cor verde das diversas emissões representadas na Figura 45 para o modelo desenvolvido.

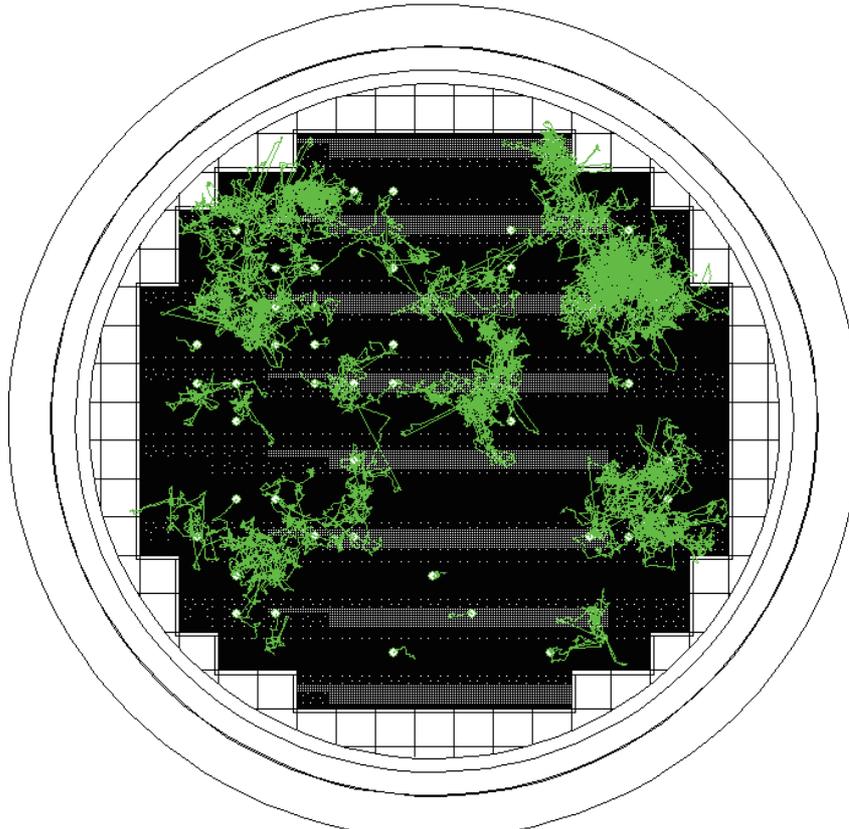


Figura 45 – Visualização das emissões, trajetórias e interações dos nêutrons produzidos na fonte programa com o programa Vised

Para definição do *tally*, foi programado o fluxo pela superfície interna do vaso de pressão discretizado em energias entre $3,06 \cdot 10^{-10}$ e 15 MeV , considerando-se o conjunto de dados das seções de choque de deslocamento empregadas neste trabalho (39). Uma seleção na amplitude dos canais foi realizada com o objetivo de otimizar o código, tendo em vista que faixas de energia cada vez menores demandariam números crescentes de histórias para se atingir um resultado com erro relativo aceitável. Por outro lado, levou-se em consideração que a discretização não poderia ser grosseira a ponto de descaracterizar o comportamento da seção de choque de deslocamento a ser aplicada posteriormente para o cálculo do dpa. Os pontos adotados podem se observados na programação do código no bloco dos *tallies* do Apêndice C e uma comparação entre os conjuntos de dados da norma ASTM-E693-23 e os selecionados está representada na Figura 46. Convém ressaltar que a

região de menor energia bem comportada que obedecia a relação $1/v$ demandou a adoção de poucos pontos, em contraste às regiões das ressonâncias do material.

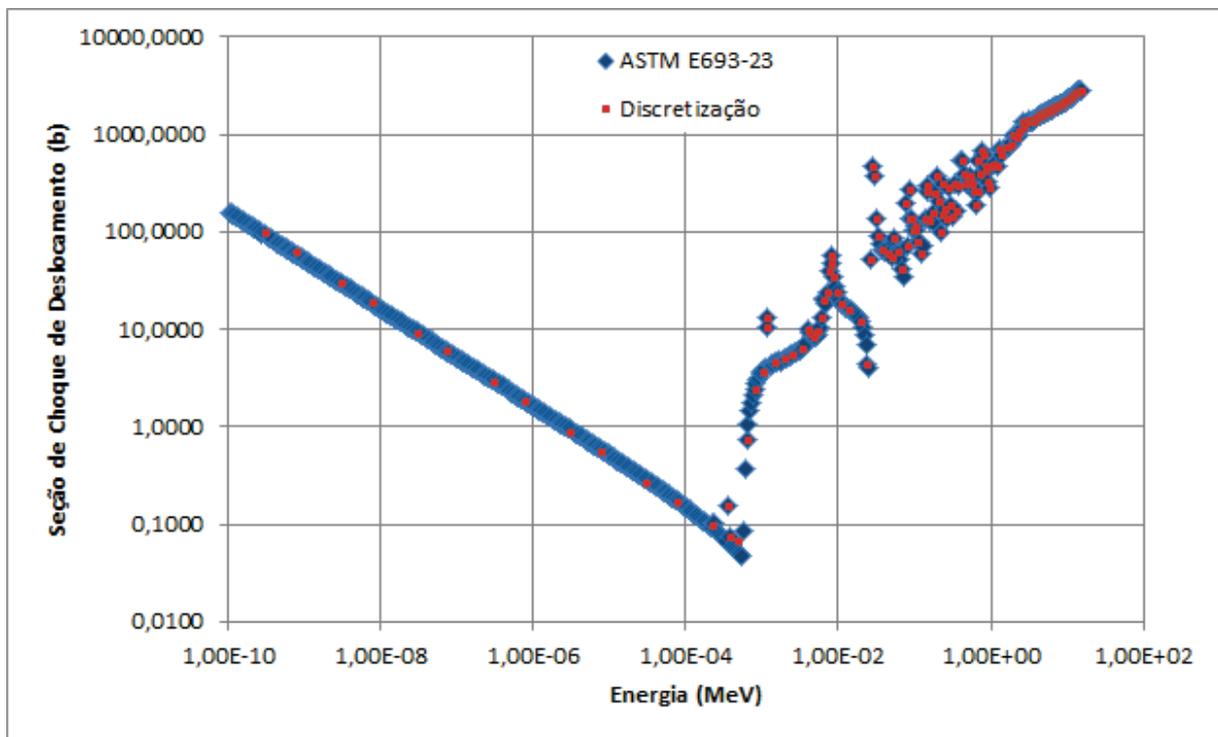


Figura 46 – Comparação entre os dados das seções de choque de deslocamento disponíveis na norma ASTM E693-23 e os empregados no código desenvolvido para Angra 2

Por fim, o número de histórias programada como critério de parada foi limitado pelo tempo de execução do código e a obtenção de resultados com erros relativos aceitáveis para cada canal de energia. Impacta diretamente no tempo de processamento as características do *hardware* do computador empregado. Para este trabalho, foi utilizado um modelo comercial cujo processador é Intel(R) Core(TM) i7-9700 e memória RAM instalada de 16 GB.

Antes de executar o código nestas condições, foi necessário validar o modelo com base nos valores nos coeficientes de multiplicação de nêutron, tal qual realizada por Medeiros (53), empregando-se o cartão KCODE. Tal implementação fornece informações sobre uma fonte especial de criticalidade que mudará de ciclo para ciclo. Estes ciclos são estimativas computacionais para as gerações de nêutrons das fissões no modelo programado. Cada um deles é terminado pelo código em nêutrons de fissão, que são utilizados como fonte de nêutrons para o próximo ciclo. O usuário deve configurar um número de ciclos iniciais a serem pulados com a finalidade de fornecer ao código uma distribuição espacial de fontes de equilíbrio. A partir deste ponto, o MCNP passará a acumular três diferentes estimativas dos valores de k_{eff} , com a finalidade de combiná-los e fornecer uma estimativa final para o modelo. Assim como os demais resultados fornecidos pelo MCNP, o k_{eff} também se refere a um intervalo de confiança com o valor final estimado de k_{eff} associado

a um desvio padrão. Para cálculos válidos, o manual do código recomenda que todos os materiais físeis sejam amostrados e se garanta que as distribuições espaciais de nêutrons sejam alcançadas e mantidas durante os ciclos ativos de k_{eff} (55).

Além dessa, outras validações foram realizadas nos elementos combustíveis com enriquecimento de $^{235}_{92}\text{U}$ em 1,9%, 2,5% e 3,2%, considerando-se o coeficiente de multiplicação infinito k_{∞} para estas situações. Para tal, foi necessário o ajuste de alguns parâmetros, como a programação de barreiras periódicas para simular uma estrutura infinita repetitiva dos elementos combustíveis, o ajuste na concentração de boro no refrigerante para 1000 ppm e a distribuição da fonte no centro do combustível da cada vareta.

4.2.3 Resultados e Análise

A partir da descrição do modelo apresentada anteriormente, o código foi executado com o cartão KCODE para a sua validação física. Os resultados obtidos para os elementos combustíveis estão contemplados na Tabela 7, acompanhados do valor de referência e a variação elaborada a partir do valor médio.

Tabela 7 – Tabela comparativa entre os valores de referência e calculados para os coeficientes de multiplicação infinito dos elementos combustíveis com enriquecimento 1,9%, 2,5% e 3,2% de U-235.

% $^{235}_{92}\text{U}$	k_{∞} referência	k_{∞} calculado		Variação %
		\bar{x}	σ	
1,9	1,03690	1,03038	0,00037	-0,63
2,5	1,13770	1,13023	0,00048	-0,66
3,2	1,22080	1,21288	0,00043	-0,65

É importante ressaltar que os valores de referência são calculados por meio do código MEDIUM3, um dos módulos do código SAV90, que resolve a equação da teoria da difusão em três dimensões de coordenadas cartesianas aplicando método de expansão nodal em malhas grossas e complementado com uma correção não linear do *burnup* para contabilizar as variações espaciais das seções de choque macroscópicas induzidas pela queima (53). É evidente a diferença nas metodologias de cálculo dos códigos e, portanto, variações entre os resultados são esperadas.

Para o núcleo do reator, o resultado de k_{eff} foi de 0,94006, com desvio-padrão (σ) de 0,0044, residindo entre $0,93919 \leq k_{eff} \leq 0,94094$ para um intervalo de confiança de 95%. Em comparação com o valor de referência de $k_{eff} = 0,92$, tem-se uma variação aproximada de 2,18%. Além das diferenças nas metodologias de cálculo dos valores mencionadas anteriormente, observa-se que o modelo desenvolvido neste trabalho inclui somente o comprimento ativo do núcleo, resultando em variações adicionais quando comparadas com as obtidas por Medeiros (53) (-0,51%). Eventualmente, os nêutrons escapavam pelas extremidades axiais, sendo limitado pelo código somente a perda de dez nêutrons. Assim,

a distribuição espacial inicial da fonte implementada foi a meia altura, região de máximo fluxo neutrônico e favorecimento para fissão dos nêutrons, acarretando em aumento do valor calculado. A inclusão das estruturas adjacentes possibilitaria uma melhor amostragem do reator como um todo, não se concentrando na região mais ativa dos elementos, o que poderia resultar em uma diminuição do valor do k_{eff} calculado e aproximá-lo mais do valor de referência. Apesar das variações nos resultados da validação do modelo, considera-se que as diferenças estão dentro de valores aceitáveis para a extração do espectro do fluxo na parede interna do vaso de pressão.

Dessa forma, o código foi executado com a utilização de 7 dos 8 núcleos de processamento do computador empregado e necessitou de mais de 168 horas para acompanhar as 10^9 histórias, estabelecidas como critério de parada. Um total de 35549945646 *tracks* foram acompanhados, o que se traduz num número médio aproximado de 35,55 por nêutron gerado na fonte. Apenas 429844 *tracks* ou 0,00121% desse total atingiram a superfície interna do vaso de pressão e contribuíram para a acúmulo de histórias do fluxo neutrônico normalizado para os resultados. Estes *tracks* estão distribuídos nos 159 canais de energia, resultando em erros relativos menores que 5% na maior parcela dos pontos. É importante ressaltar que os *tracks* se prestam apenas para contabilização e não possuem um significado físico associado (57). No entanto, a partir de tais dados, pode-se compreender o tempo de processamento computacional consumido para se atingir resultados confiáveis.

Um outro dado relevante nesse sentido é o número de 1355852 *tracks* que escapam do volume de controle. As fugas podem ter ocorrido em decorrência da saída de nêutrons pelo vaso de pressão ou pelas extremidades axiais do modelo. Em comparação com o número total de *tracks* do modelo, este valor corresponde a apenas 0,00381% do total, denotando-se que a ausência da modelagem dos componentes inferiores e superiores do núcleo pode não ter exercido uma influência significativa nos resultados.

Assim, com base nos resultados obtidos com o *tally F2* do código, foi possível construir os gráficos apresentados na Figura 47, onde se verifica a distribuição do fluxo neutrônico que atinge a parede interna do vaso de pressão do reator de Angra 2 discretizado nos canais de energia programado, acompanhada do erro relativo de cada ponto. Para a construção do espectro neutrônico, foram desconsiderados os pontos cujo erro relativo superava o valor de 10%. Assim, o ponto do limite inferior corresponde a $7,69 \cdot 10^{-9}$ MeV e o do superior a 13,9 MeV.

Como esperado, as regiões onde as janelas de energia eram menores apresentaram maiores erros relativos. O mesmo se sucedeu nos extremos superior e inferior. No primeiro caso, a probabilidade da emissão de nêutrons para o espectro de Watt a partir de 10 MeV se torna muito pequena e poucos nêutrons acabam atingindo a superfície interna do vaso de pressão. Na segunda situação, o extremo da distribuição maxwelliana também pode ser utilizada para justificar a pequena probabilidade de detecção de nêutrons abaixo na

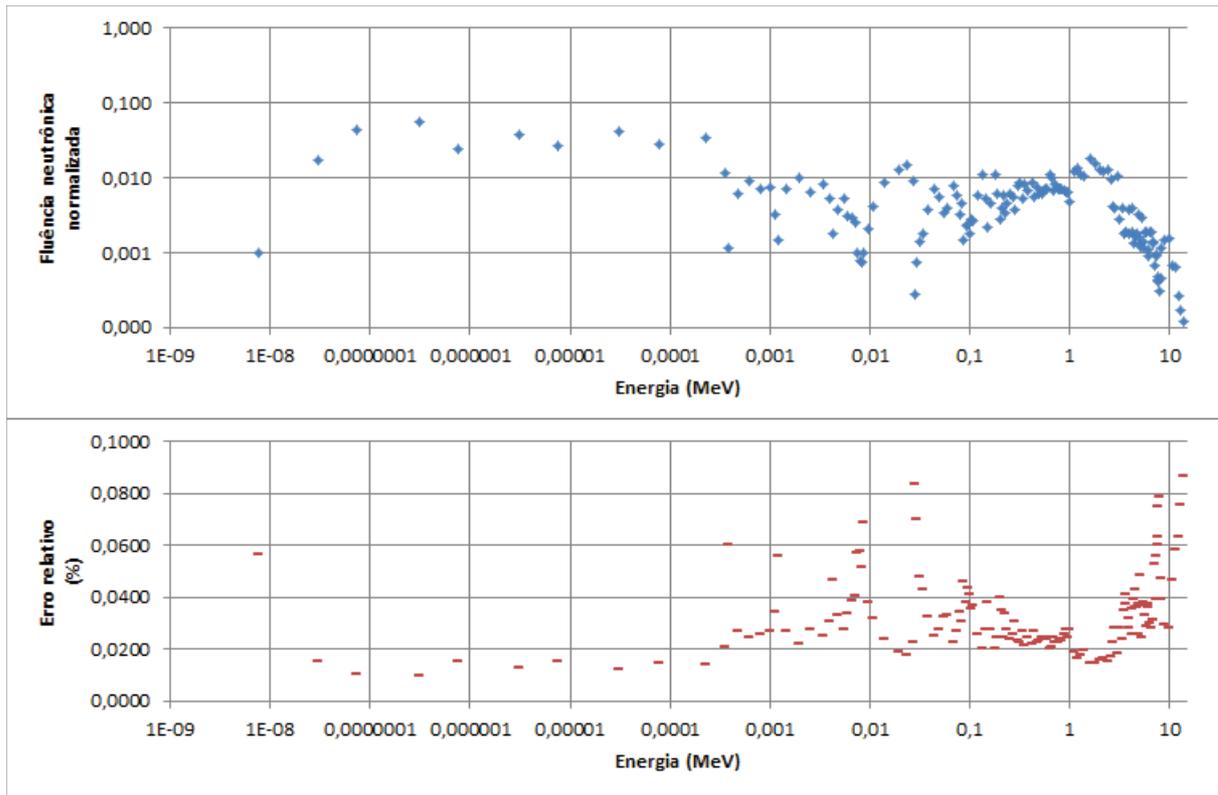


Figura 47 – Espectro do fluxo neutrônico que atinge a parede interna do vaso de pressão do reator de Angra 2 e os erros relativos calculados para cada ponto.

energia térmica do meio. Destaca-se que nenhum ponto intermediário foi descartado com base no critério de erro relativo superior a 10%.

Para análise do espectro, é útil efetuar a plotagem do fluxo neutrônico por variação de letargia, como mostrado na Figura 48. Este ajuste visa apresentar um tratamento matemático ao gráfico do espectro, tornando-o mais representativo ao minimizar os efeitos das diferentes amplitudes de cada canal (34). A letargia é calculada pela Equação 4.7, sendo E_o uma energia arbitrada, normalmente a máxima a ser alcançada no problema (19).

$$u = \ln \frac{E_o}{E} \quad (4.7)$$

logo:

$$\Delta u_n = \ln \frac{E_n}{E_{n-1}} \quad (4.8)$$

Dessa forma, a partir do gráfico da Figura 48, observa-se o comportamento típico para espectros de instalações nucleares refrigeradas à água e reatores de potência (34). Os nêutrons de alta energia produzidos pela fissão do combustível são relativamente menos afetados pelo meio, por isso a região de $E > 1 \text{ MeV}$ se assemelha ao espectro de fissão

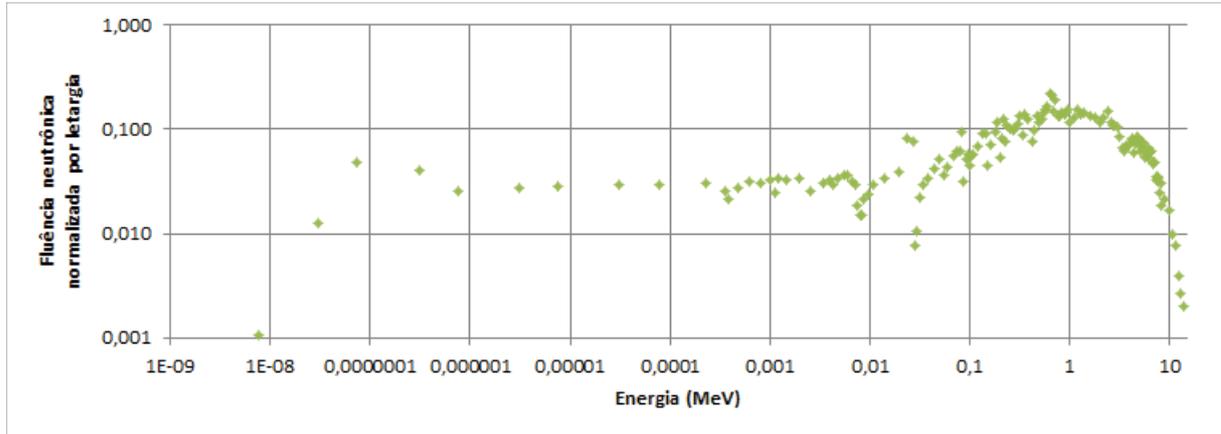


Figura 48 – Espectro do fluxo neutrônico por unidade de letargia que atinge a parede interna do vaso de pressão do reator de Angra 2.

de Watt. No outro extremo, observa-se um esboço de uma curva que se assemelha a uma distribuição maxwelliana, que surge no espectro principalmente em decorrência do alto poder de moderação da água.

A partir do espectro calculado, considerou-se uma fluência neutrônica típica na superfície interna do vaso de pressão para quarenta anos de operação de $5 \cdot 10^{19} \text{ n.cm}^{-2}$ para $E > 0,1 \text{ MeV}$, conforme Willians e Nanstad (48). Com base nesta premissa, distribuiu-se esta fluência para os diversos canais do espectro levantado com o modelo desenvolvido, aplicando-se uma condição de normalização para os valores no intervalo de $0,1 \text{ MeV} \leq E \leq 13,9 \text{ MeV}$ e obtendo-se os valores para a função de distribuição da fluência (f). Assim, calculou-se a fluência para cada um dos pontos por meio da seguinte equação:

$$\Phi(E_n) = f(E_n) \cdot \Phi \quad (4.9)$$

para $\Phi = 5 \cdot 10^{19} \text{ n.cm}^{-2}$.

O dpa total pôde ser calculado aplicando-se:

$$dpa = \sum_{i=1}^n \sigma_D(E_n) \cdot \Phi(E_n) \quad (4.10)$$

empregando-se os dados de σ_D constantes da norma ASTM-E693-23 (39).

O valor calculado foi de $0,033 \text{ dpa}$ para o vaso de pressão de Angra 2 na condição de operação descrita, como pode ser verificada na memória de cálculo que consta do Apêndice D. Este resultado está aderente em termos de ordem de grandeza com as referências, sendo apontado por Zinkle e Was que os níveis de dano de deslocamento na parede de um vaso de pressão do núcleo para um PWR são tipicamente de $\approx 0,05 \text{ dpa}$, após quarenta anos de operação (3). Assim, considera-se que a metodologia aplicada apresentou resultados satisfatórios para a situação descrita, podendo ser testada em outras instalações nucleares.

5 CONCLUSÃO

Considerando o que foi apresentado neste trabalho, conclui-se que os seus objetivos foram alcançados, especialmente quanto a apresentação de metodologia para o cálculo da exposição aos danos de radiação em liga de aço em instalações nucleares. Para tal, conceitos com base nas referências estudadas foram evocados para caracterização do material e entendimento das alterações promovidas pela interação com a radiação incidente.

Em análise aos parâmetros das instalações nucleares propostos inicialmente para o desenvolvimento experimental de irradiação de amostras para avaliação em ensaio de tração do endurecimento e fragilização em baixas temperaturas promovidas pela radiação, verificou-se a inadequabilidade do tipo de radiação para o irradiador do CTE_x e a insuficiência do fluxo neutrônico para o reator Argonauta para o material de interesse. Alternativamente, desenvolveu-se um modelo para um reator de potência empregando-se o código MCNP para o cálculo do espectro neutrônico na parede interna do vaso pressão do núcleo do reator, visando o prosseguimento da pesquisa. Análises puderam ser realizadas com base nos cálculos levando-se em consideração os diversos aspectos físicos dos problemas.

Com base nesta metodologia adotada, considera-se que os resultados obtidos foram coerentes com as referências consultadas, constituindo-se uma evidência no que tange à sua adequabilidade de aplicação. Assim, vislumbra-se a possibilidade da análise no emprego desta metodologia para outros projetos de relevância em desenvolvimento no país, em que pese destacar o PNM, estando incluso o LABGENE, assim como a construção do SCPN.

No que tange ao desenvolvimento de trabalhos futuros, verifica-se a oportunidade de complementação das informações empregadas no modelo desenvolvido, visando o refinamento dos resultados. Destaca-se que as condições de operação de um reator de potência perpassam por regimes transientes de potência e contam com variações na composição do seu combustível e refrigerante e parâmetros físicos durante sua vida útil. Além disso, valores reais para a fluência neutrônica podem ser aplicados, substituindo-se a utilização de um valor médio. Ainda, contribuiria para uma maior precisão nos resultados a utilização de um computador com maior capacidade de processamento.

Além da complementação supramencionadas, outros trabalhos futuros também podem ter como alvo os outros efeitos da radiação além do endurecimento e fragilização em temperatura ambiente, inclusive verificando-se a possibilidade de desenvolvimento experimental nas instalações nucleares estudadas. Outra linha que pode ser seguida são comparações com o emprego das diferentes metodologias aplicadas para os cálculos das seções de choque de deslocamento e elaboração de análises a partir destes resultados.

Por fim, com base na compreensão dos processos desenvolvida, pode-se propor o

estudo de diferentes tipos de materiais que seja do interesse para aplicação em instalações nucleares, até mesmo para diferentes componentes dos abordados.

REFERÊNCIAS

- 1 COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR. *CNEN: Glossário do setor nuclear e radiológico brasileiro*. Rio de Janeiro, 2020. 50 p.
- 2 BUSBY, J. T. Overview of structural material in water-cooled fission reactor. In: _____. *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications*. Amsterdam: Elsevier, 2019. p. 1–21.
- 3 ZINKLE, S. J.; WAS, G. S. Materials challenge in nuclear energy. *Acta Materialia*, v. 61, n. 3, p. 735–758, 2013.
- 4 ALLEN, T.; BUSBY, J.; MEYER, M.; PETTI, D. Materials challenge for nuclear systems. *Materials Today*, v. 13, n. 12, p. 14–23, 2010.
- 5 FRANKLIN, D. G.; ADAMSON, R. B. Implications of zircaloy creep and growth to light water reactor performance. *Journal of Nuclear Materials*, v. 159, p. 12–21, 1988.
- 6 ZINKLE, S. J.; TANIGAWA, H.; WIRTH, B. D. Radiation and thermomechanical degradation effects in reactor structural alloys. In: _____. *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications*. Amsterdam: Elsevier, 2019. p. 163–210.
- 7 MARINHA DO BRASIL. *Programa Nuclear da Marinha*. 2024. 17 fev. de 2024. Disponível em: <<https://www.marinha.mil.br/ctmsp/programa-nuclear-da-marinha>>.
- 8 ELETRONUCLEAR. *Eletronuclear solicita à CNEN extensão de vida útil de Angra 1*. 2019. 23 mar. de 2023. Disponível em: <<https://www.eletronuclear.gov.br/Imprensa-e-Midias/Paginas/Eletronuclear-solicita-a-CNEN-extensao-de-vida-util-de-Angra-1.aspx>>.
- 9 INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Power Reactor Information System - PRIS*. 2023. 5 jun. de 2023. Disponível em: <<https://pris.iaea.org/PRIS/home.aspx>>.
- 10 MURRAY, R. L.; HOLBERT, K. E. *Nuclear Energy - An Introduction to the Concepts, Systems, and Applications of Nuclear Processes*. 8. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2020. 606 p.
- 11 CALLISTER Jr., W. D.; RETHWISCH, D. G. *Ciência e Engenharia de Materiais - Uma Introdução*. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016. 865 p.
- 12 MURTY, K. L.; CHARIT, I. *An Introduction to Nuclear Materials - Fundamentals and Applications*. 1. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2013. 382 p.
- 13 HULL, D.; BACON, D. J. *Introduction to Dislocations*. 5. ed. Oxford: Elsevier, 2011. 257 p.
- 14 SHORT, M. P.; YIP, S. Materials aging at the mesoscale: Kinetics of thermal, stress, radiation activations. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, v. 19, n. 4, p. 245–252, 2015.
- 15 ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. *NBR 6028: Materiais metálicos - ensaio de tração - parte 1: Método de ensaio à temperatura ambiente*. Rio de Janeiro, 2013. 70 p.

- 16 WAS, G. S. *Fundamentals of Radiation Materials Science - Metals and Alloys*. 1. ed. Heidelberg: Springer Berlin, 2017. 827 p.
- 17 TAUHATA, L.; SALATI, I.; PRINZIO, R. D.; PRINZIO, A. R. D. *Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos*. 10. ed. Rio de Janeiro: IRD/CNEN, 2014. 344 p.
- 18 KAPLAN, I. *Física Nuclear*. 2. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978. 633 p.
- 19 DUDERSTADT, J. J.; HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. 1. ed. New York: John Wiley and Sons, 1976. 650 p.
- 20 BEISER, A. *Concepts of Modern Physics*. 6. ed. New York: McGraw-Hill, 2002. 543 p.
- 21 LAMARSH, J. R.; BARATTA, A. J. *Introduction to Nuclear Engineering*. 3. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2001. 650 p.
- 22 BRINKMAN, J. A. Production of atomic displacement by high-energy particles. *American Journal of Physics*, v. 24, n. 4, p. 246–267, 1956.
- 23 SEEGER, A. On the theory of radiation damage and radiation hardening. *UN*, v. 6, n. 9, p. 250, 1958.
- 24 ZINKLE, S. J. Radiation-induced effects on microstructure. *Comprehensive Nuclear Materials*, v. 1, p. 65–98, 2012.
- 25 BACON, D. J.; GAO, F.; OSETSKY, Y. N. The primary damage state in fcc, bcc and hcp metals seen in molecular dynamics simulations. *Journal of Nuclear Materials*, v. 276, n. 1-3, p. 1–12, 2000.
- 26 KLABUNDE, C. E.; COLTMAN Jr., R. R. Fission neutron damage rates and efficiencies in several metals. *Journal of Nuclear Materials*, v. 108-109, p. 183–192, 1982.
- 27 HASHIMOTO, N.; BYUN, T. S.; FARRELL, K. Microstructural analysis of deformation in neutron-irradiated fcc materials. *Journal of Nuclear Materials*, v. 351, n. 1-3, p. 295–302, 2006.
- 28 ARDELL, A. J.; BELLON, P. Radiation-induced solute segregation in metallic alloys. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, v. 20, n. 3, p. 115–139, 2016.
- 29 BROWN, D. A.; CHADWICK, M. B.; CAPOTE, R.; KAHLER, A. C.; TRKOV, A.; HERMANANDAND, M. W.; SONZOGNI, A. A.; Y. DANON; CARLSON, A. D.; DUNN, M.; SMITH, D. L.; HALE, G. M.; ARBANAS, G.; ARCILLA, R.; BATES, C. R.; BECK, B.; BECKER, B.; BROWN, F.; CASPERSON, R. J.; CONLIN, J.; CULLEN, D. E.; DESCALLE, M. A.; FIRESTONE, R.; GAINES, T.; GUBER, K. H.; HAWARI, A. I.; HOLMES, J.; JOHNSON, T. D.; KAWANO, T.; KIEDROWSKI, B. C.; KONING, A. J.; KOPECKY, S.; LEAL, L.; LESTONE, J. P.; LUBITZ, C.; DAMIÁN, J. I. M.; MATTOON, C. M.; MCCUTCHAN, E. A.; MUGHABGHAB, S.; NAVRATIL, P.; NEUDECKER, D.; NOBRE, G. P. A.; NOGUERE, G.; PARIS, M.; PIGNI, M. T.; PLOMPEN, A. J.; PRITYCHENKO, B.; PRONYAEV, V. G.; ROUBTSOV, D.; ROCHMAN, D.; ROMANO, P.; SCHILLEBEECKX, P.; SIMAKOV, S.; SIN, M.; SIRAKOV, I.; SLEAFORD, B.; SOBES, V.; SOUKHOVITSKII, E. S.; STETCU, I.; TALOU, P.; THOMPSON, I.; MARCK, S. V. D.; WELSER-SHERRILL, L.; WIARDA, D.; WHITE, M.; WORMALD, J. L.; WRIGHT, R. Q.; ZERKLE, M.; ŽEROVNIK, G.; ZHU, Y. ENDF/B-VIII.0: The 8th

- major release of the nuclear reaction data library with cielo-project cross sections, new standards and thermal scattering data. *Nuclear Data Sheets*, v. 148, p. 1–142, 2018.
- 30 GARNER, F. A. Radiation damage in austenitic steel. *Comprehensive Nuclear Materials*, v. 4, p. 33–95, 2012.
- 31 DAI, Y.; ODETTE, G. R.; YAMAMOTO, T. The effects of helium in irradiated structural alloys. *Comprehensive Nuclear Materials*, v. 1, p. 141–193, 2012.
- 32 BRASKI, D. N.; SCHROEDER, H.; ULLMAIER, H. The effect os tensile stress on the growth of helium bubbles in an austenitic stainless steel. *Journal of Nuclear Materials*, v. 83, n. 2, p. 265–277, 1979.
- 33 AMERICAN ASSOCIATY FOR TESTING AND MATERIALS. *ASTM E521-23*: Standard practice for investigating the effects of neutron radiation damage using charged-particle irradiation. West Conshohocken, 2023. 22 p.
- 34 GREENWOOD, L. R. Neutron interactions and atomic recoil spectra. *Journal of Nuclear Materials*, v. 215, p. 29–44, 1994.
- 35 KINCHIN, G. H.; PEASE, R. S. The displacement of atoms in solids by radiation. *Reports on Progress in Physics*, v. 18, n. 1, p. 1–52, 1955.
- 36 EVANS, R. D. *The Atomic Nucleus*. 1. ed. Bombay: McGraw-Hill, 1955. 972 p.
- 37 KINCHIN, G. H.; PEASE, R. S. The mecanism of the irradiation disordering of alloys. *Journal of Nuclear Energy*, v. 1, n. 3-4, p. 200–202, 1955.
- 38 NORGETT, M. J.; ROBINSON, M. T.; TORRENS, I. M. A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nuclear Engineering and Design*, v. 33, n. 1, p. 50–54, 1975.
- 39 AMERICAN ASSOCIATY FOR TESTING AND MATERIALS. *ASTM E693-23*: Standard practice for characterizing neutron exposures in iron and low alloy steels in terms od displacement per atom (dpa). West Conshohocken, 2016. 8 p.
- 40 DORAN, D. G. Neutron displacement cross secction for stainless and tantalum based on a lindhard model. *Nuclear Science and Engineering*, v. 49, n. 2, p. 130–144, 1972.
- 41 STOLLER, R. E.; GREENWOOD, L. R.; SIMAKOV, S. P. *Primary Radiation Damage Cross Section - Summary Report of the Second Research Coordination Meeting*. Vienna, 2015. 122 p.
- 42 KONOBEYEV, A. Yu; FISCHER, U.; SIMAKOV, S. P. Atomic displacement cross-sections for neutron irradiation of materials from Be to Bi using the arc-dpa model. *Nuclear Engineering and Design*, v. 51, n. 1, p. 170–175, 2019.
- 43 GOMES, R. G. *Cálculo do ambiente gama do irradiador de pesquisa do CTEEx usando o código MCNPX*. 67 p. Mestrado em Engenharia Nuclear — Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2012.
- 44 LABORATOIRE NATIONAL HENRI BECQUEREL. *Nucléide-Lara - Library for gamma and alpha emissions*. 2023. 24 jul. de 2023. Disponível em: <<http://www.lnhb.fr/nuclear-data/module-lara/>>.

- 45 INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR. *Notas de aula: Disciplina de Laboratório Nuclear*, 14 de setembro a 16 de novembro de 2022. Rio de Janeiro, 2020. 16 p.
- 46 SOUZA, E. S. *Caracterização de um sistema digital de aquisição de imagens radiográficas utilizando nêutrons térmicos e raios gama para inspeção de componentes mecânicos*. 123 p. Mestrado em Engenharia Mecânica — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012. 25 jul. de 2023. Disponível em: <<https://www.bdt.d.uerj.br:8443/handle/1/11699>>.
- 47 TRKOV, A.; GRIFFIN, P.; SIMAKOV, S.; GREENWOOD, L.; ZOLOTAREV, K.; CAPOTE, R.; ALDAMA, D.; CHECHEV, V.; DESTOUCHES, C.; KAHLER, A.; KONNO, C.; KOSTAL, M.; MAJERLE, M.; MALAMBU, E.; OHTA, M.; PRONYAEV, V.; RADULOVIC, V.; SATO, S.; SCHULC, M.; SIMECKOVA, E.; VAVTAR, I.; WAGEMANS, J.; WHITE, M.; YASHIMA, H. IRDFF-II: A new neutron metrology library. *Special issue of Nuclear Data Sheets*, v. 163, p. 1–108, 2020.
- 48 WILLIAMS, T.; NANSTAD, R. Low-alloy steels. In: _____. *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications*. Amsterdam: Elsevier, 2019. p. 163–210.
- 49 VOI, D. L. *Estudo da estrutura e da dinâmica moleculares da baquelite através de medidas de seções de choque para nêutrons*. 104 p. Doutorado em Ciências em Engenharia Nuclear e Planejamento Energético — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1990. 16 jun. de 2023. Disponível em: <<https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/65440>>.
- 50 CUNHA, V. L. L. *Simulação do Reator Argonauta do IEN Utilizando o Código MCNPX*. 61 p. Mestrado em Engenharia Nuclear — Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2010. Disponível em: <http://https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/49/072/49072011.pdf>.
- 51 OLANDER, D. R. *Fundamental Aspect of Nuclear Reactor Fuel Elements*. 1. ed. Springfield: United State Department of Commerce, 1976. 613 p.
- 52 CORRÊA, D. A. C. *Estudo de fluência do aço inoxidável AISI-316 irradiado com nêutrons rápidos e partículas alfa*. 122 p. Mestrado em Tecnologia Nuclear — Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 1986. 9 fev. de 2023. Disponível em: <<http://repositorio.ipen.br/bitstream/handle/123456789/9886/03180.pdf>>.
- 53 MEDEIROS, M. P. C. de. *Simulação computacional do núcleo do reator nuclear Angra-2 utilizando o código MCNPX*. 91 p. Mestrado em Ciências em Engenharia Nuclear — Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2012. 7 fev. de 2012.
- 54 JAMES, M. R.; PELOWITZ, D. B.; FALLGREN, A. J.; MCMATH, G. E.; BOOTH, T. E.; BROWN, F. B.; BULL, J. S.; COX, L. J.; ELSON, J. S.; DURKEE JR., J. W.; FENSIN, M. L.; FORSTER III, R. A.; GOORLEY, J. T.; HENDRICKS, J. S.; HUGHES III, H. G.; JOHNS, R. C.; KIEDROWSKI, B. C.; MCKINNEY, G. W.; MARTZ, R. L.; MASHNIK, S. G.; PRAEL, R. E.; SWEEZY, J. E.; WILCOX, T. A.; ZUKAITIS, A. J. *MCNP6™ User's Manual Code Version 6.1.1 Beta*. Los Alamos, 2014.
- 55 X-5 Monte Carlo Team. *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 - Volume 1: Overview and Theory*. Los Alamos, 2003.

56 DETWILER, R. S.; MCCONN JR., R. J.; GRIMES, T. F.; UPTON, S. A.; ENGEL, E. J. *Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling*. Richland, 2021. Disponível em: <<https://www.osti.gov/biblio/1782721>>.

57 X-5 Monte Carlo Team. *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 - Volume 2: User's Guide*. Los Alamos, 2003.

APÊNDICE A – MEMÓRIA DE CÁLCULO PARA ESTIMATIVA DA TAXA DE DESLOCAMENTO POR ÁTOMO (DPA) PARA O CANAL J-9 DO REATOR ARGONAUTA

Tabela 8 – Estimativa da taxa de deslocamento por átomo (dpa) para o canal J-9 do reator Argonauta.

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f_{MB}(E_n)$ (eV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . eV ⁻¹)	ΔE_n (eV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0,000105	158,3543	2,868	2,87.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁶	1,43.10 ⁵	2,27.10 ⁻¹⁷
0,00011	154,6209	2,9349	2,93.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁶	1,47.10 ⁵	2,27.10 ⁻¹⁷
0,000115	151,1395	3,0003	3.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁶	1,5.10 ⁵	2,27.10 ⁻¹⁷
0,00012	147,8895	3,0642	3,06.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁶	2,3.10 ⁵	3,4.10 ⁻¹⁷
0,0001275	144,1054	3,1575	3,16.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁶	2,37.10 ⁵	3,41.10 ⁻¹⁷
0,000135	139,9202	3,2481	3,25.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁶	2,44.10 ⁵	3,41.10 ⁻¹⁷
0,0001425	136,086	3,3361	3,34.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁶	2,5.10 ⁵	3,41.10 ⁻¹⁷
0,00015	132,5445	3,4218	3,42.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	3,42.10 ⁵	4,54.10 ⁻¹⁷
0,00016	128,7502	3,5326	3,53.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	3,53.10 ⁵	4,55.10 ⁻¹⁷
0,00017	124,786	3,6399	3,64.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	3,64.10 ⁵	4,54.10 ⁻¹⁷
0,00018	121,1728	3,7439	3,74.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	3,74.10 ⁵	4,54.10 ⁻¹⁷
0,00019	117,8527	3,845	3,85.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	3,84.10 ⁵	4,53.10 ⁻¹⁷
0,0002	114,8137	3,9433	3,94.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	3,94.10 ⁵	4,53.10 ⁻¹⁷
0,00021	111,9561	4,0391	4,04.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	4,04.10 ⁵	4,52.10 ⁻¹⁷
0,00022	109,3199	4,1325	4,13.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	4,13.10 ⁵	4,52.10 ⁻¹⁷
0,00023	106,8646	4,2237	4,22.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	4,22.10 ⁵	4,51.10 ⁻¹⁷
0,00024	104,5694	4,3129	4,31.10 ¹⁰	1,5.10 ⁻⁵	6,47.10 ⁵	6,76.10 ⁻¹⁷
0,000255	101,893	4,443	4,44.10 ¹⁰	1,5.10 ⁻⁵	6,66.10 ⁵	6,79.10 ⁻¹⁷
0,00027	98,93331	4,5691	4,57.10 ¹⁰	1.10 ⁻⁵	4,57.10 ⁵	4,52.10 ⁻¹⁷
0,00028	96,65981	4,6511	4,65.10 ¹⁰	2.10 ⁻⁵	9,3.10 ⁵	8,99.10 ⁻¹⁷
0,0003	94,12717	4,8105	4,81.10 ¹⁰	2.10 ⁻⁵	9,62.10 ⁵	9,06.10 ⁻¹⁷
0,00032	91,05218	4,9643	4,96.10 ¹⁰	2.10 ⁻⁵	9,93.10 ⁵	9,04.10 ⁻¹⁷
0,00034	88,24872	5,1131	5,11.10 ¹⁰	2.10 ⁻⁵	1,02.10 ⁶	9,02.10 ⁻¹⁷
0,00036	85,68787	5,2571	5,26.10 ¹⁰	2.10 ⁻⁵	1,05.10 ⁶	9,01.10 ⁻¹⁷
0,00038	83,33912	5,3969	5,4.10 ¹⁰	2.10 ⁻⁵	1,08.10 ⁶	9.10 ⁻¹⁷
0,0004	81,17265	5,5327	5,53.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,38.10 ⁶	1,12.10 ⁻¹⁶

Continua na próxima página

Tabela 8 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f_{MB}(E_n)$ (eV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . eV ⁻¹)	ΔE_n (eV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0,000425	78,92472	5,6974	5,7.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,42.10 ⁶	1,12.10 ⁻¹⁶
0,00045	76,63646	5,8567	5,86.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,46.10 ⁶	1,12.10 ⁻¹⁶
0,000475	74,53734	6,0113	6,01.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,5.10 ⁶	1,12.10 ⁻¹⁶
0,0005	72,5993	6,1613	6,16.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,54.10 ⁶	1,12.10 ⁻¹⁶
0,000525	70,81827	6,3072	6,31.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,58.10 ⁶	1,12.10 ⁻¹⁶
0,00055	69,1479	6,4493	6,45.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,61.10 ⁶	1,11.10 ⁻¹⁶
0,000575	67,59222	6,5877	6,59.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻⁵	1,65.10 ⁶	1,11.10 ⁻¹⁶
0,0006	66,13822	6,7227	6,72.10 ¹⁰	3.10 ⁻⁵	2,02.10 ⁶	1,33.10 ⁻¹⁶
0,00063	64,64189	6,8806	6,88.10 ¹⁰	3.10 ⁻⁵	2,06.10 ⁶	1,33.10 ⁻¹⁶
0,00066	63,12039	7,0341	7,03.10 ¹⁰	3.10 ⁻⁵	2,11.10 ⁶	1,33.10 ⁻¹⁶
0,00069	61,70157	7,1837	7,18.10 ¹⁰	3.10 ⁻⁵	2,16.10 ⁶	1,33.10 ⁻¹⁶
0,00072	60,37332	7,3295	7,33.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	2,93.10 ⁶	1,77.10 ⁻¹⁶
0,00076	58,92732	7,5184	7,52.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	3,01.10 ⁶	1,77.10 ⁻¹⁶
0,0008	57,39681	7,7015	7,7.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	3,08.10 ⁶	1,77.10 ⁻¹⁶
0,00084	55,97892	7,8792	7,88.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	3,15.10 ⁶	1,76.10 ⁻¹⁶
0,00088	54,65984	8,0519	8,05.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	3,22.10 ⁶	1,76.10 ⁻¹⁶
0,00092	53,4322	8,2198	8,22.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	3,29.10 ⁶	1,76.10 ⁻¹⁶
0,00096	52,28703	8,3833	8,38.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁵	3,35.10 ⁶	1,75.10 ⁻¹⁶
0,001	51,21545	8,5427	8,54.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁵	4,27.10 ⁶	2,19.10 ⁻¹⁶
0,00105	50,07727	8,7363	8,74.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁵	4,37.10 ⁶	2,19.10 ⁻¹⁶
0,0011	48,89598	8,9242	8,92.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁵	4,46.10 ⁶	2,18.10 ⁻¹⁶
0,00115	47,79609	9,1068	9,11.10 ¹⁰	5.10 ⁻⁵	4,55.10 ⁶	2,18.10 ⁻¹⁶
0,0012	46,7687	9,2842	9,28.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁵	6,96.10 ⁶	3,26.10 ⁻¹⁶
0,001275	45,57125	9,5416	9,54.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁵	7,16.10 ⁶	3,26.10 ⁻¹⁶
0,00135	44,25006	9,7891	9,79.10 ¹⁰	7,5.10 ⁻⁵	7,34.10 ⁶	3,25.10 ⁻¹⁶
0,001425	43,03653	10,0275	10,03.10 ¹¹	7,5.10 ⁻⁵	7,52.10 ⁶	3,24.10 ⁻¹⁶
0,0015	41,91761	10,2575	10,26.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,03.10 ⁷	4,3.10 ⁻¹⁶
0,0016	40,71708	10,5521	10,55.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,06.10 ⁷	4,3.10 ⁻¹⁶
0,0017	39,46333	10,8339	10,83.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,08.10 ⁷	4,28.10 ⁻¹⁶
0,0018	38,32018	11,1039	11,1.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,11.10 ⁷	4,26.10 ⁻¹⁶
0,0019	37,26968	11,3631	11,36.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,14.10 ⁷	4,23.10 ⁻¹⁶
0,002	36,30967	11,6122	11,61.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,16.10 ⁷	4,22.10 ⁻¹⁶
0,0021	35,4071	11,852	11,85.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,19.10 ⁷	4,2.10 ⁻¹⁶
0,0022	34,57391	12,083	12,08.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,21.10 ⁷	4,18.10 ⁻¹⁶

Continua na próxima página

Tabela 8 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f_{MB}(E_n)$ (eV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . eV ⁻¹)	ΔE_n (eV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0,0023	33,79705	12,3057	12,31.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,23.10 ⁷	4,16.10 ⁻¹⁶
0,0024	33,06956	12,5207	12,52.10 ¹¹	1,5.10 ⁻⁴	1,88.10 ⁷	6,21.10 ⁻¹⁶
0,00255	32,22424	12,8297	12,83.10 ¹¹	1,5.10 ⁻⁴	1,92.10 ⁷	6,2.10 ⁻¹⁶
0,0027	31,28942	13,1235	13,12.10 ¹¹	1.10 ⁻⁴	1,31.10 ⁷	4,11.10 ⁻¹⁶
0,0028	30,57002	13,3115	13,31.10 ¹¹	2.10 ⁻⁴	2,66.10 ⁷	8,14.10 ⁻¹⁶
0,003	29,76999	13,67	13,67.10 ¹¹	2.10 ⁻⁴	2,73.10 ⁷	8,14.10 ⁻¹⁶
0,0032	28,79791	14,007	14,01.10 ¹¹	2.10 ⁻⁴	2,8.10 ⁷	8,07.10 ⁻¹⁶
0,0034	27,91048	14,3242	14,32.10 ¹¹	2.10 ⁻⁴	2,86.10 ⁷	8.10 ⁻¹⁶
0,0036	27,10139	14,6233	14,62.10 ¹¹	2.10 ⁻⁴	2,92.10 ⁷	7,93.10 ⁻¹⁶
0,0038	26,35879	14,9055	14,91.10 ¹¹	2.10 ⁻⁴	2,98.10 ⁷	7,86.10 ⁻¹⁶
0,004	25,67357	15,1721	15,17.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	3,79.10 ⁷	9,74.10 ⁻¹⁶
0,00425	24,96309	15,485	15,49.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	3,87.10 ⁷	9,66.10 ⁻¹⁶
0,0045	24,2396	15,7771	15,78.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	3,94.10 ⁷	9,56.10 ⁻¹⁶
0,00475	23,57548	16,0498	16,05.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	4,01.10 ⁷	9,46.10 ⁻¹⁶
0,005	22,96268	16,3045	16,3.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	4,08.10 ⁷	9,36.10 ⁻¹⁶
0,00525	22,3992	16,5427	16,54.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	4,14.10 ⁷	9,26.10 ⁻¹⁶
0,0055	21,87094	16,7652	16,77.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	4,19.10 ⁷	9,17.10 ⁻¹⁶
0,00575	21,37982	16,9732	16,97.10 ¹¹	2,5.10 ⁻⁴	4,24.10 ⁷	9,07.10 ⁻¹⁶
0,006	20,91994	17,1675	17,17.10 ¹¹	3.10 ⁻⁴	5,15.10 ⁷	1,08.10 ⁻¹⁵
0,0063	20,44705	17,3838	17,38.10 ¹¹	3.10 ⁻⁴	5,22.10 ⁷	1,07.10 ⁻¹⁵
0,0066	19,96509	17,5828	17,58.10 ¹¹	3.10 ⁻⁴	5,27.10 ⁷	1,05.10 ⁻¹⁵
0,0069	19,51724	17,7657	17,77.10 ¹¹	3.10 ⁻⁴	5,33.10 ⁷	1,04.10 ⁻¹⁵
0,0072	19,0967	17,9336	17,93.10 ¹¹	4.10 ⁻⁴	7,17.10 ⁷	1,37.10 ⁻¹⁵
0,0076	18,63984	18,1355	18,14.10 ¹¹	4.10 ⁻⁴	7,25.10 ⁷	1,35.10 ⁻¹⁵
0,008	18,15581	18,3143	18,31.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁴	7,33.10 ⁷	1,33.10 ⁻¹⁵
0,0084	17,70708	18,4718	18,47.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁴	7,39.10 ⁷	1,31.10 ⁻¹⁵
0,0088	17,29049	18,6095	18,61.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁴	7,44.10 ⁷	1,29.10 ⁻¹⁵
0,0092	16,90205	18,7288	18,73.10 ¹⁰	4.10 ⁻⁴	7,49.10 ⁷	1,27.10 ⁻¹⁵
0,0096	16,54074	18,831	18,83.10 ¹¹	4.10 ⁻⁴	7,53.10 ⁷	1,25.10 ⁻¹⁵
0,01	16,20166	18,9174	18,92.10 ¹¹	5.10 ⁻⁴	9,46.10 ⁷	1,53.10 ⁻¹⁵
0,0105	15,84242	19,0046	19.10 ¹¹	5.10 ⁻⁴	9,5.10 ⁷	1,51.10 ⁻¹⁵
0,011	15,46908	19,0706	19,07.10 ¹¹	5.10 ⁻⁴	9,54.10 ⁷	1,48.10 ⁻¹⁵
0,0115	15,12094	19,1171	19,12.10 ¹¹	5.10 ⁻⁴	9,56.10 ⁷	1,45.10 ⁻¹⁵
0,012	14,79594	19,1455	19,15.10 ¹¹	7,5.10 ⁻⁴	1,44.10 ⁸	2,12.10 ⁻¹⁵

Continua na próxima página

Tabela 8 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f_{MB}(E_n)$ (eV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . eV ⁻¹)	ΔE_n (eV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0,01275	14,41855	19,1574	19,16.10 ¹¹	7,5.10 ⁻⁴	1,44.10 ⁸	2,07.10 ⁻¹⁵
0,0135	14,00095	19,1362	19,14.10 ¹¹	7,5.10 ⁻⁴	1,44.10 ⁸	2,01.10 ⁻¹⁵
0,01425	13,61661	19,0854	19,09.10 ¹¹	7,5.10 ⁻⁴	1,43.10 ⁸	1,95.10 ⁻¹⁵
0,015	13,26338	19,0084	19,01.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,9.10 ⁸	2,52.10 ⁻¹⁵
0,016	12,88403	18,8698	18,87.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,89.10 ⁸	2,43.10 ⁻¹⁵
0,017	12,48759	18,6956	18,7.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,87.10 ⁸	2,33.10 ⁻¹⁵
0,018	12,12633	18,4909	18,49.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,85.10 ⁸	2,24.10 ⁻¹⁵
0,019	11,79428	18,2602	18,26.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,83.10 ⁸	2,15.10 ⁻¹⁵
0,02	11,49039	18,0074	18,01.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,8.10 ⁸	2,07.10 ⁻¹⁵
0,021	11,2076	17,7359	17,74.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,77.10 ⁸	1,99.10 ⁻¹⁵
0,022	10,94298	17,4487	17,45.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,74.10 ⁸	1,91.10 ⁻¹⁵
0,023	10,69745	17,1484	17,15.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,71.10 ⁸	1,83.10 ⁻¹⁵
0,024	10,46804	16,8373	16,84.10 ¹¹	1,5.10 ⁻³	2,53.10 ⁸	2,64.10 ⁻¹⁵
0,0255	10,20132	16,3549	16,35.10 ¹¹	1,5.10 ⁻³	2,45.10 ⁸	2,5.10 ⁻¹⁵
0,027	9,906717	15,8588	15,86.10 ¹¹	1.10 ⁻³	1,59.10 ⁸	1,57.10 ⁻¹⁵
0,028	9,679449	15,523	15,52.10 ¹¹	2.10 ⁻³	3,1.10 ⁸	3,01.10 ⁻¹⁵
0,03	9,427035	14,8447	14,84.10 ¹¹	2.10 ⁻³	2,97.10 ⁸	2,8.10 ⁻¹⁵
0,032	9,118745	14,1645	14,16.10 ¹¹	2.10 ⁻³	2,83.10 ⁸	2,58.10 ⁻¹⁵
0,034	8,838819	13,4891	13,49.10 ¹¹	2.10 ⁻³	2,7.10 ⁸	2,38.10 ⁻¹⁵
0,036	8,582926	12,8236	12,82.10 ¹¹	2.10 ⁻³	2,56.10 ⁸	2,2.10 ⁻¹⁵
0,038	8,347962	12,1721	12,17.10 ¹¹	2.10 ⁻³	2,43.10 ⁸	2,03.10 ⁻¹⁵
0,04	8,131618	11,5376	11,54.10 ¹¹	2,5.10 ⁻³	2,88.10 ⁸	2,35.10 ⁻¹⁵
0,0425	7,907534	10,7721	10,77.10 ¹¹	2,5.10 ⁻³	2,69.10 ⁸	2,13.10 ⁻¹⁵
0,045	7,678809	10,0399	10,04.10 ¹¹	2,5.10 ⁻³	2,51.10 ⁸	1,93.10 ⁻¹⁵
0,0475	7,468805	9,3431	9,34.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻³	2,34.10 ⁸	1,74.10 ⁻¹⁵
0,05	7,276812	8,6826	8,68.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻³	2,17.10 ⁸	1,58.10 ⁻¹⁵
0,0525	7,097598	8,0586	8,06.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻³	2,01.10 ⁸	1,43.10 ⁻¹⁵
0,055	6,930767	7,471	7,47.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻³	1,87.10 ⁸	1,29.10 ⁻¹⁵
0,0575	6,775607	6,9192	6,92.10 ¹⁰	2,5.10 ⁻³	1,73.10 ⁸	1,17.10 ⁻¹⁵
0,06	6,630701	6,402	6,4.10 ¹⁰	3.10 ⁻³	1,92.10 ⁸	1,27.10 ⁻¹⁵
0,063	6,482083	5,8255	5,83.10 ¹⁰	3.10 ⁻³	1,75.10 ⁸	1,13.10 ⁻¹⁵
0,066	6,330435	5,2949	5,29.10 ¹⁰	3.10 ⁻³	1,59.10 ⁸	1,01.10 ⁻¹⁵
0,069	6,188963	4,8076	4,81.10 ¹⁰	3.10 ⁻³	1,44.10 ⁸	8,93.10 ⁻¹⁶
0,072	6,056631	4,3611	4,36.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	1,74.10 ⁸	1,06.10 ⁻¹⁵

Continua na próxima página

Tabela 8 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f_{MB}(E_n)$ (eV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . eV ⁻¹)	ΔE_n (eV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0,076	5,913148	3,8244	3,82.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	1,53.10 ⁸	9,05.10 ⁻¹⁶
0,08	5,760298	3,3491	3,35.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	1,34.10 ⁸	7,72.10 ⁻¹⁶
0,084	5,618617	2,9293	2,93.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	1,17.10 ⁸	6,58.10 ⁻¹⁶
0,088	5,4869	2,5591	2,56.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	1,02.10 ⁸	5,62.10 ⁻¹⁶
0,092	5,364337	2,2334	2,23.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	8,93.10 ⁷	4,79.10 ⁻¹⁶
0,096	5,250029	1,9474	1,95.10 ¹⁰	4.10 ⁻³	7,79.10 ⁷	4,09.10 ⁻¹⁶
0,1	5,143171	1,6964	1,7.10 ¹⁰	5.10 ⁻³	8,48.10 ⁷	4,36.10 ⁻¹⁶
0,105	5,029254	1,4262	1,43.10 ¹⁰	5.10 ⁻³	7,13.10 ⁷	3,59.10 ⁻¹⁶
0,11	4,911427	1,1976	1,2.10 ¹⁰	5.10 ⁻³	5,99.10 ⁷	2,94.10 ⁻¹⁶
0,115	4,801945	1,0046	1.10 ¹⁰	5.10 ⁻³	5,02.10 ⁷	2,41.10 ⁻¹⁶
0,12	4,699714	0,8419	0,84.10 ⁹	7,5.10 ⁻³	6,31.10 ⁷	2,97.10 ⁻¹⁶
Somatório					1.10 ¹⁰	1.17.10 ⁻¹³

Conclusão

APÊNDICE B – MEMÓRIA DE CÁLCULO PARA ESTIMATIVA DA TAXA DE DESLOCAMENTO POR ÁTOMO (DPA) PARA A REGIÃO DO NÚCLEO DO REATOR ARGONAUTA

Tabela 9 – Estimativa da taxa de deslocamento por átomo (dpa) para a região do núcleo do reator Argonauta.

E_n (MeV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$\chi(E_n)$ (MeV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . MeV ⁻¹)	ΔE_n (MeV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0, 1	113, 716	0, 203	2, 03.10 ⁹	0, 005	1, 01.10 ⁷	1, 15.10 ⁻¹⁵
0, 105	105, 5489	0, 2073	2, 07.10 ⁹	0, 005	1, 04.10 ⁷	1, 09.10 ⁻¹⁵
0, 11	78, 43095	0, 2115	2, 11.10 ⁹	0, 005	1, 06.10 ⁷	8, 29.10 ⁻¹⁶
0, 115	78, 06753	0, 2155	2, 16.10 ⁹	0, 005	1, 08.10 ⁷	8, 41.10 ⁻¹⁶
0, 12	60, 44543	0, 2194	2, 19.10 ⁹	0, 0075	1, 65.10 ⁷	9, 95.10 ⁻¹⁶
0, 1275	70, 4743	0, 2251	2, 25.10 ⁹	0, 0075	1, 69.10 ⁷	1, 19.10 ⁻¹⁵
0, 135	134, 1587	0, 2305	2, 3.10 ⁹	0, 0075	1, 73.10 ⁷	2, 32.10 ⁻¹⁵
0, 1425	255, 363	0, 2356	2, 36.10 ⁹	0, 0075	1, 77.10 ⁷	4, 51.10 ⁻¹⁵
0, 15	293, 0161	0, 2405	2, 41.10 ⁹	0, 01	2, 41.10 ⁷	7, 05.10 ⁻¹⁵
0, 16	133, 09	0, 2468	2, 47.10 ⁹	0, 01	2, 47.10 ⁷	3, 28.10 ⁻¹⁵
0, 17	122, 7596	0, 2527	2, 53.10 ⁹	0, 01	2, 53.10 ⁷	3, 1.10 ⁻¹⁵
0, 18	156, 0143	0, 2583	2, 58.10 ⁹	0, 01	2, 58.10 ⁷	4, 03.10 ⁻¹⁵
0, 19	244, 41	0, 2636	2, 64.10 ⁹	0, 01	2, 64.10 ⁷	6, 44.10 ⁻¹⁵
0, 2	370, 7627	0, 2687	2, 69.10 ⁹	0, 01	2, 69.10 ⁷	9, 96.10 ⁻¹⁵
0, 21	205, 3339	0, 2735	2, 73.10 ⁹	0, 01	2, 73.10 ⁷	5, 62.10 ⁻¹⁵
0, 22	101, 0349	0, 278	2, 78.10 ⁹	0, 01	2, 78.10 ⁷	2, 81.10 ⁻¹⁵
0, 23	307, 5111	0, 2824	2, 82.10 ⁹	0, 01	2, 82.10 ⁷	8, 68.10 ⁻¹⁵
0, 24	146, 9613	0, 2866	2, 87.10 ⁹	0, 015	4, 3.10 ⁷	6, 32.10 ⁻¹⁵
0, 255	171, 8077	0, 2924	2, 92.10 ⁹	0, 015	4, 39.10 ⁷	7, 54.10 ⁻¹⁵
0, 27	135, 3387	0, 2979	2, 98.10 ⁹	0, 01	2, 98.10 ⁷	4, 03.10 ⁻¹⁵
0, 28	282, 5501	0, 3014	3, 01.10 ⁹	0, 02	6, 03.10 ⁷	1, 7.10 ⁻¹⁴
0, 3	187, 6945	0, 3078	3, 08.10 ⁹	0, 02	6, 16.10 ⁷	1, 16.10 ⁻¹⁴
0, 32	142, 0391	0, 3136	3, 14.10 ⁹	0, 02	6, 27.10 ⁷	8, 91.10 ⁻¹⁵
0, 34	315, 5791	0, 319	3, 19.10 ⁹	0, 02	6, 38.10 ⁷	2, 01.10 ⁻¹⁴
0, 36	166, 553	0, 3238	3, 24.10 ⁹	0, 02	6, 48.10 ⁷	1, 08.10 ⁻¹⁴

Continua na próxima página

Tabela 9 – Continuação

E_n (MeV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$\chi(E_n)$ (MeV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . MeV ⁻¹)	ΔE_n (MeV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
0,38	302,1184	0,3282	3,28.10 ⁹	0,02	6,56.10 ⁷	1,98.10 ⁻¹⁴
0,4	545,7117	0,3322	3,32.10 ⁹	0,025	8,31.10 ⁷	4,53.10 ⁻¹⁴
0,425	528,401	0,3367	3,37.10 ⁹	0,025	8,42.10 ⁷	4,45.10 ⁻¹⁴
0,45	400,4412	0,3407	3,41.10 ⁹	0,025	8,52.10 ⁷	3,41.10 ⁻¹⁴
0,475	309,7825	0,3441	3,44.10 ⁹	0,025	8,6.10 ⁷	2,67.10 ⁻¹⁴
0,5	351,4453	0,3471	3,47.10 ⁹	0,025	8,68.10 ⁷	3,05.10 ⁻¹⁴
0,525	381,0001	0,3497	3,5.10 ⁹	0,025	8,74.10 ⁷	3,33.10 ⁻¹⁴
0,55	327,4008	0,3518	3,52.10 ⁹	0,025	8,8.10 ⁷	2,88.10 ⁻¹⁴
0,575	316,9469	0,3537	3,54.10 ⁹	0,025	8,84.10 ⁷	2,8.10 ⁻¹⁴
0,6	264,2091	0,3551	3,55.10 ⁹	0,03	1,07.10 ⁸	2,81.10 ⁻¹⁴
0,63	190,8042	0,3565	3,56.10 ⁹	0,03	1,07.10 ⁸	2,04.10 ⁻¹⁴
0,66	255,5292	0,3574	3,57.10 ⁹	0,03	1,07.10 ⁸	2,74.10 ⁻¹⁴
0,69	529,8745	0,358	3,58.10 ⁹	0,03	1,07.10 ⁸	5,69.10 ⁻¹⁴
0,72	389,0167	0,3582	3,58.10 ⁹	0,04	1,43.10 ⁸	5,57.10 ⁻¹⁴
0,76	680,431	0,358	3,58.10 ⁹	0,04	1,43.10 ⁸	9,74.10 ⁻¹⁴
0,8	627,3019	0,3572	3,57.10 ⁹	0,04	1,43.10 ⁸	8,96.10 ⁻¹⁴
0,84	427,2328	0,356	3,56.10 ⁹	0,04	1,42.10 ⁸	6,08.10 ⁻¹⁴
0,88	461,2467	0,3544	3,54.10 ⁹	0,04	1,42.10 ⁸	6,54.10 ⁻¹⁴
0,92	327,1398	0,3524	3,52.10 ⁹	0,04	1,41.10 ⁸	4,61.10 ⁻¹⁴
0,96	278,1719	0,35	3,5.10 ⁹	0,04	1,4.10 ⁸	3,89.10 ⁻¹⁴
1	479,7678	0,3473	3,47.10 ⁹	0,1	3,47.10 ⁸	1,67.10 ⁻¹³
1,1	498,4922	0,3395	3,4.10 ⁹	0,1	3,4.10 ⁸	1,69.10 ⁻¹³
1,2	477,6893	0,3304	3,3.10 ⁹	0,1	3,3.10 ⁸	1,58.10 ⁻¹³
1,3	707,1735	0,3203	3,2.10 ⁹	0,1	3,2.10 ⁸	2,26.10 ⁻¹³
1,4	616,464	0,3094	3,09.10 ⁹	0,1	3,09.10 ⁸	1,91.10 ⁻¹³
1,5	716,4101	0,298	2,98.10 ⁹	0,1	2,98.10 ⁸	2,14.10 ⁻¹³
1,6	734,1659	0,2864	2,86.10 ⁹	0,1	2,86.10 ⁸	2,1.10 ⁻¹³
1,7	758,8353	0,2745	2,75.10 ⁹	0,1	2,75.10 ⁸	2,08.10 ⁻¹³
1,8	784,558	0,2627	2,63.10 ⁹	0,1	2,63.10 ⁸	2,06.10 ⁻¹³
1,9	819,3325	0,2508	2,51.10 ⁹	0,1	2,51.10 ⁸	2,05.10 ⁻¹³
2	989,3265	0,2391	2,39.10 ⁹	0,1	2,39.10 ⁸	2,37.10 ⁻¹³
2,1	928,7681	0,2276	2,28.10 ⁹	0,1	2,28.10 ⁸	2,11.10 ⁻¹³
2,2	923,3754	0,2163	2,16.10 ⁹	0,1	2,16.10 ⁸	2.10 ⁻¹³
2,3	969,48	0,2054	2,05.10 ⁹	0,1	2,05.10 ⁸	1,99.10 ⁻¹³

Continua na próxima página

Tabela 9 – Continuação

E_n (MeV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$\chi(E_n)$ (MeV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . MeV ⁻¹)	ΔE_n (MeV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
2, 4	1079, 716	0, 1947	1, 95.10 ⁹	0, 1	1, 95.10 ⁸	2, 1.10 ⁻¹³
2, 5	1143, 224	0, 1844	1, 84.10 ⁹	0, 1	1, 84.10 ⁸	2, 11.10 ⁻¹³
2, 6	1348, 954	0, 1744	1, 74.10 ⁹	0, 1	1, 74.10 ⁸	2, 35.10 ⁻¹³
2, 7	1192, 105	0, 1649	1, 65.10 ⁹	0, 1	1, 65.10 ⁸	1, 97.10 ⁻¹³
2, 8	1263, 538	0, 1557	1, 56.10 ⁹	0, 1	1, 56.10 ⁸	1, 97.10 ⁻¹³
2, 9	1277, 801	0, 1469	1, 47.10 ⁹	0, 1	1, 47.10 ⁸	1, 88.10 ⁻¹³
3	1271, 578	0, 1385	1, 38.10 ⁹	0, 1	1, 38.10 ⁸	1, 76.10 ⁻¹³
3, 1	1364, 006	0, 1304	1, 3.10 ⁹	0, 1	1, 3.10 ⁸	1, 78.10 ⁻¹³
3, 2	1387, 724	0, 1227	1, 23.10 ⁹	0, 1	1, 23.10 ⁸	1, 7.10 ⁻¹³
3, 3	1358, 466	0, 1155	1, 15.10 ⁹	0, 1	1, 15.10 ⁸	1, 57.10 ⁻¹³
3, 4	1346, 851	0, 1085	1, 09.10 ⁹	0, 1	1, 09.10 ⁸	1, 46.10 ⁻¹³
3, 5	1398, 034	0, 1019	1, 02.10 ⁹	0, 1	1, 02.10 ⁸	1, 43.10 ⁻¹³
3, 6	1334, 743	0, 0957	9, 57.10 ⁸	0, 1	9, 57.10 ⁷	1, 28.10 ⁻¹³
3, 7	1424, 447	0, 0898	8, 98.10 ⁸	0, 1	8, 98.10 ⁷	1, 28.10 ⁻¹³
3, 8	1440, 708	0, 0842	8, 42.10 ⁸	0, 1	8, 42.10 ⁷	1, 21.10 ⁻¹³
3, 9	1483, 88	0, 0789	7, 89.10 ⁸	0, 1	7, 89.10 ⁷	1, 17.10 ⁻¹³
4	1464, 868	0, 0739	7, 39.10 ⁸	0, 1	7, 39.10 ⁷	1, 08.10 ⁻¹³
4, 1	1526, 371	0, 0692	6, 92.10 ⁸	0, 1	6, 92.10 ⁷	1, 06.10 ⁻¹³
4, 2	1560, 443	0, 0648	6, 48.10 ⁸	0, 1	6, 48.10 ⁷	1, 01.10 ⁻¹³
4, 3	1530, 309	0, 0606	6, 06.10 ⁸	0, 1	6, 06.10 ⁷	9, 27.10 ⁻¹⁴
4, 4	1582, 916	0, 0566	5, 66.10 ⁸	0, 1	5, 66.10 ⁷	8, 97.10 ⁻¹⁴
4, 5	1523, 34	0, 0529	5, 29.10 ⁸	0, 1	5, 29.10 ⁷	8, 07.10 ⁻¹⁴
4, 6	1626, 724	0, 0495	4, 95.10 ⁸	0, 1	4, 95.10 ⁷	8, 05.10 ⁻¹⁴
4, 7	1600, 863	0, 0462	4, 62.10 ⁸	0, 1	4, 62.10 ⁷	7, 39.10 ⁻¹⁴
4, 8	1617, 455	0, 0431	4, 31.10 ⁸	0, 1	4, 31.10 ⁷	6, 97.10 ⁻¹⁴
4, 9	1653, 609	0, 0402	4, 02.10 ⁸	0, 1	4, 02.10 ⁷	6, 65.10 ⁻¹⁴
5	1642, 833	0, 0375	3, 75.10 ⁸	0, 1	3, 75.10 ⁷	6, 17.10 ⁻¹⁴
5, 1	1660, 075	0, 035	3, 5.10 ⁸	0, 1	3, 5.10 ⁷	5, 81.10 ⁻¹⁴
5, 2	1682, 554	0, 0326	3, 26.10 ⁸	0, 1	3, 26.10 ⁷	5, 49.10 ⁻¹⁴
5, 3	1687, 286	0, 0304	3, 04.10 ⁸	0, 1	3, 04.10 ⁷	5, 13.10 ⁻¹⁴
5, 4	1716, 469	0, 0283	2, 83.10 ⁸	0, 1	2, 83.10 ⁷	4, 86.10 ⁻¹⁴
5, 5	1731, 089	0, 0264	2, 64.10 ⁸	0, 1	2, 64.10 ⁷	4, 57.10 ⁻¹⁴
5, 6	1729, 785	0, 0246	2, 46.10 ⁸	0, 1	2, 46.10 ⁷	4, 25.10 ⁻¹⁴
5, 7	1760, 852	0, 0229	2, 29.10 ⁸	0, 1	2, 29.10 ⁷	4, 03.10 ⁻¹⁴

Continua na próxima página

Tabela 9 – Continuação

E_n (MeV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$\chi(E_n)$ (MeV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . MeV ⁻¹)	ΔE_n (MeV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)
5, 8	1760, 538	0, 0213	2, 13.10 ⁸	0, 1	2, 13.10 ⁷	3, 75.10 ⁻¹⁴
5, 9	1768, 656	0, 0198	1, 98.10 ⁸	0, 1	1, 98.10 ⁷	3, 5.10 ⁻¹⁴
6	1792, 105	0, 0184	1, 84.10 ⁸	0, 1	1, 84.10 ⁷	3, 3.10 ⁻¹⁴
6, 1	1811, 511	0, 0171	1, 71.10 ⁸	0, 1	1, 71.10 ⁷	3, 1.10 ⁻¹⁴
6, 2	1800, 94	0, 0159	1, 59.10 ⁸	0, 1	1, 59.10 ⁷	2, 87.10 ⁻¹⁴
6, 3	1811, 547	0, 0148	1, 48.10 ⁸	0, 1	1, 48.10 ⁷	2, 68.10 ⁻¹⁴
6, 4	1859, 081	0, 0137	1, 37.10 ⁸	0, 1	1, 37.10 ⁷	2, 55.10 ⁻¹⁴
6, 5	1859, 125	0, 0128	1, 28.10 ⁸	0, 1	1, 28.10 ⁷	2, 37.10 ⁻¹⁴
6, 6	1879, 237	0, 0119	1, 19.10 ⁸	0, 1	1, 19.10 ⁷	2, 23.10 ⁻¹⁴
6, 7	1890, 037	0, 011	1, 1.10 ⁸	0, 1	1, 1.10 ⁷	2, 08.10 ⁻¹⁴
6, 8	1891, 762	0, 0102	1, 02.10 ⁸	0, 1	1, 02.10 ⁷	1, 93.10 ⁻¹⁴
6, 9	1909, 485	0, 0095	9, 48.10 ⁷	0, 1	9, 48.10 ⁶	1, 81.10 ⁻¹⁴
7	1909, 076	0, 0088	8, 79.10 ⁷	0, 1	8, 79.10 ⁶	1, 68.10 ⁻¹⁴
7, 1	1914, 442	0, 0082	8, 16.10 ⁷	0, 1	8, 16.10 ⁶	1, 56.10 ⁻¹⁴
7, 2	1936, 414	0, 0076	7, 57.10 ⁷	0, 1	7, 57.10 ⁶	1, 47.10 ⁻¹⁴
7, 3	1941, 75	0, 007	7, 02.10 ⁷	0, 1	7, 02.10 ⁶	1, 36.10 ⁻¹⁴
7, 4	1966, 663	0, 0065	6, 51.10 ⁷	0, 1	6, 51.10 ⁶	1, 28.10 ⁻¹⁴
7, 5	1963, 306	0, 006	6, 03.10 ⁷	0, 1	6, 03.10 ⁶	1, 18.10 ⁻¹⁴
7, 6	1986, 044	0, 0056	5, 59.10 ⁷	0, 1	5, 59.10 ⁶	1, 11.10 ⁻¹⁴
7, 7	1976, 213	0, 0052	5, 18.10 ⁷	0, 1	5, 18.10 ⁶	1, 02.10 ⁻¹⁴
7, 8	1989, 243	0, 0048	4, 8.10 ⁷	0, 1	4, 8.10 ⁶	9, 54.10 ⁻¹⁵
7, 9	2003, 646	0, 0044	4, 44.10 ⁷	0, 1	4, 44.10 ⁶	8, 9.10 ⁻¹⁵
8	2006, 771	0, 0041	4, 12.10 ⁷	0, 1	4, 12.10 ⁶	8, 26.10 ⁻¹⁵
8, 1	2009, 093	0, 0038	3, 81.10 ⁷	0, 1	3, 81.10 ⁶	7, 66.10 ⁻¹⁵
8, 2	2013, 259	0, 0035	3, 53.10 ⁷	0, 1	3, 53.10 ⁶	7, 1.10 ⁻¹⁵
8, 3	2032, 588	0, 0033	3, 27.10 ⁷	0, 1	3, 27.10 ⁶	6, 64.10 ⁻¹⁵
8, 4	2064, 755	0, 003	3, 02.10 ⁷	0, 1	3, 02.10 ⁶	6, 24.10 ⁻¹⁵
8, 5	2063, 837	0, 0028	2, 8.10 ⁷	0, 1	2, 8.10 ⁶	5, 77.10 ⁻¹⁵
8, 6	2061, 365	0, 0026	2, 59.10 ⁷	0, 1	2, 59.10 ⁶	5, 33.10 ⁻¹⁵
8, 7	2059, 507	0, 0024	2, 39.10 ⁷	0, 1	2, 39.10 ⁶	4, 93.10 ⁻¹⁵
8, 8	2072, 344	0, 0022	2, 21.10 ⁷	0, 1	2, 21.10 ⁶	4, 59.10 ⁻¹⁵
8, 9	2089, 976	0, 002	2, 05.10 ⁷	0, 1	2, 05.10 ⁶	4, 28.10 ⁻¹⁵
9	2107, 525	0, 0019	1, 89.10 ⁷	0, 1	1, 89.10 ⁶	3, 99.10 ⁻¹⁵
9, 1	2122, 58	0, 0018	1, 75.10 ⁷	0, 1	1, 75.10 ⁶	3, 72.10 ⁻¹⁵

Continua na próxima página

Tabela 9 – Continuação

E_n (MeV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$\chi(E_n)$ (MeV ⁻¹)	$\phi(E_n)$ (cm ⁻² .s ⁻¹ . MeV ⁻¹)	ΔE_n (MeV)	ϕ_n (cm ⁻² .s ⁻¹)	$\frac{dpa}{t}$ (s ⁻¹)	
9,2	2135,077	0,0016	1,62.10 ⁷	0,1	1,62.10 ⁶	3,46.10 ⁻¹⁵	
9,3	2147,577	0,0015	1,5.10 ⁷	0,1	1,5.10 ⁶	3,21.10 ⁻¹⁵	
9,4	2160,074	0,0014	1,38.10 ⁷	0,1	1,38.10 ⁶	2,99.10 ⁻¹⁵	
9,5	2172,482	0,0013	1,28.10 ⁷	0,1	1,28.10 ⁶	2,78.10 ⁻¹⁵	
9,6	2185,892	0,0012	1,18.10 ⁷	0,1	1,18.10 ⁶	2,58.10 ⁻¹⁵	
9,7	2199,95	0,0011	1,09.10 ⁷	0,1	1,09.10 ⁶	2,4.10 ⁻¹⁵	
9,8	2213,918	0,001	1,01.10 ⁷	0,1	1,01.10 ⁶	2,23.10 ⁻¹⁵	
9,9	2226,698	0,0009	9,3.10 ⁶	0,1	9,3.10 ⁵	2,07.10 ⁻¹⁵	
10	2238,281	0,0009	8,59.10 ⁶	0,1	8,59.10 ⁵	1,92.10 ⁻¹⁵	
Somatório						1.10 ¹⁰	8.34.10 ⁻¹²

Conclusão

APÊNDICE C – ARQUIVO DE ENTRADA PARA O MCNP DO MODELO DESENVOLVIDO PARA ANGRA 2

```

c Modelo da regioao do comprimento ativo do primeiro carregamento do nucleo
c de Angra II para calculo do espectro neutrônico na parede do vaso de
c pressao do nucleo do reator.
c Desenvolvido por Ogihara, J.T. (2023)
c
c *****
c *                               Cartao de Celulas                               *
c *****
c
c Definição dos universos empregados na modelagem do nucleo:
c
c   u=1: Vareta de combustível enriquecido a 1.9%
c   u=2: Tubo guia preenchido com agua borada
c   u=3: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 1.9%
c   u=4: Elemento combustível enriquecido a 1.9%
c   u=5: Tubo guia com barra de controle
c   u=6: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 1.9% com
c         sistema de barras de controle
c   u=7: Elemento combustível enriquecido a 1.9% com sistema de barras de
c         controle
c
c   u=8: Vareta de combustível enriquecido a 2.5%
c   u=9: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 2.5%
c   u=10: Elemento combustível enriquecido a 2.5%
c   u=11: Vareta de combustível enriquecido a 2.5% preenchida parcialmente
c         com mistura de Gd
c   u=12: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 2.5% com 12
c         a varetas de mistura de Gd
c   u=13: Elemento combustível enriquecido a 2.5% com 12 varetas de
c         mistura de Gd
c   u=14: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 2.5% com 12
c         varetas de mistura de Gd e sistema de barras de controle
c   u=15: Elemento combustível enriquecido a 2.5% com 12 varetas de
c         mistura de Gd e sistema de barras de controle

```

```

c
c   u=16: Vareta de combustível enriquecido a 3.2%
c   u=17: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 3.2%
c   u=18: Elemento combustível enriquecido a 3.2%
c   u=19: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 3.2% com
c         sistema de barras de controle
c   u=20: Elemento combustível enriquecido a 3.2% com sistema de barras de
c         controle
c   u=21: Vareta de combustível queimavel parcialmente preenchida com Gd
c         e combustível enriquecido a 3.2%
c   u=22: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 3.2% com 8
c         varetas de mistura de Gd
c   u=23: Elemento combustível enriquecido a 3.2% com 8 varetas de mistura
c         de Gd
c   u=24: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 3.2% com 8
c         varetas de mistura de Gd e sistema de barras de contole
c   u=25: Elemento combustível enriquecido a 3.2% com 8 varetas de mistura
c         de Gd e sistema de barras de contole
c   u=26: Preenchimento do elemento combustível enriquecido a 3.2% com 12
c         varetas de mistura de Gd e sistema de barras de contole
c   u=27: Elemento combustível enriquecido a 3.2% com 12 varetas de
c         mistura de Gd e sistema de barras de contole
c
c   u=30 a 41: Suporte
c   u=50: Preenchimento do nucleo do reator
c
c *****
c *      Elementos      *
c *****
c
c Vareta de combustível enriquecida a 1.9%
c
101 2 -10.40000 -1    u=1 imp:n=1 $pallet
102 6 -0.000166  1 -2 u=1 imp:n=1 $helio
103 7 -6.560000  2 -3 u=1 imp:n=1 $cladding
104 1 -1.000000  3    u=1 imp:n=1 $H2O
c
c Tubo guia preenchido com agua borada
c

```

```

105 1 -1.00 -4    u=2 imp:n=1 $H20
106 7 -6.56  4 -5 u=2 imp:n=1 $guia
107 1 -1.00  5    u=2 imp:n=1 $H20
c
c Elemento combustível enriquecido a 1.9%
c
108 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=3 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 1 1
    1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1
    1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1 1
    1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1
    1 1 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
109 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=4 imp:n=1 fill=3
c
c Tubo guia com barra de controle
c
110 10 -10.17 -4 39 u=5 imp:n=1 $controle
111 1 -1.00 -4 -39 u=5 imp:n=1 $H20
112 7 -6.56  4 -5 u=5 imp:n=1 $guia
113 1 -1.00  5    u=5 imp:n=1 $H20
c
c Elemento combustível enriquecido a 1.9% com sistema de barras de controle
c
114 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=6 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
    1 1 5 1 1 5 1 1 1 1 5 1 1 5 1 1
    1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

```

```

1 1 1 1 1 1 5 1 1 5 1 1 1 1 1 1
1 1 5 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 5 1 1
1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1
1 1 5 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 5 1 1
1 1 1 1 1 1 5 1 1 5 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 5 1 1 5 1 1 1 1 5 1 1 5 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
115 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=7 imp:n=1 fill=6
c
c Vareta de combustível enriquecido a 2.5%
c
116 3 -10.40000 -1 u=8 imp:n=1 $pallet
117 6 -0.000166 1 -2 u=8 imp:n=1 $helio
118 7 -6.560000 2 -3 u=8 imp:n=1 $cladding
119 1 -1.000000 3 u=8 imp:n=1 $H20
c
c Elemento combustível enriquecido a 2.5%
c
120 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=9 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 2 8 8 2 8 8 8 8 2 8 8 2 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 2 8 8 2 8 8 8 8 8 8
8 8 2 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 2 8 8
8 8 8 8 2 8 8 8 8 8 8 2 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 2 8 8 8 8 8 8 2 8 8 8 8
8 8 2 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 2 8 8
8 8 8 8 8 8 2 8 8 2 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 2 8 8 2 8 8 8 8 2 8 8 2 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8

```



```

8 8 5 8 8 5 8 11 8 8 5 8 8 5 8 8
8 8 8 11 8 8 8 8 8 8 8 11 8 8 8
8 8 8 8 8 8 5 8 8 5 8 8 8 8 8 8
8 8 5 8 8 11 8 8 8 8 11 8 8 5 8 8
8 8 8 8 5 8 8 8 8 8 8 5 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 11 8 8
8 8 11 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 5 8 8 8 8 8 8 5 8 8 8 8
8 8 5 8 8 11 8 8 8 8 11 8 8 5 8 8
8 8 8 8 8 8 5 8 8 5 8 8 8 8 8 8
8 8 8 11 8 8 8 8 8 8 8 11 8 8 8
8 8 5 8 8 5 8 8 11 8 5 8 8 5 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8
8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8 8

```

130 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=15 imp:n=1 fill=14

c

c Vareta de combustível enriquecido a 3.2%

c

131 4 -10.40000 -1 u=16 imp:n=1 \$pallet

132 6 -0.000166 1 -2 u=16 imp:n=1 \$helio

133 7 -6.560000 2 -3 u=16 imp:n=1 \$cladding

134 1 -1.000000 3 u=16 imp:n=1 \$H2O

c

c Elemento combustível enriquecido a 3.2%

c

135 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=17 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0

```

16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 16
16 16 2 16 16 16 16 16 16 16 16 16 2 16 16
16 16 16 16 2 16 16 16 16 16 2 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 2 16 16 16 16 16 2 16 16 16 16
16 16 2 16 16 16 16 16 16 16 16 16 2 16 16
16 16 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16

```

```

16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
136 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=18 imp:n=1 fill=17
c
c Elemento combustível enriquecido a 3.2% com sistema de barras de controle
c
137 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=19 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 16 16 16 16 16 16 16 5 16 16
16 16 16 16 5 16 16 16 16 16 5 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 5 16 16 16 16 16 5 16 16 16 16
16 16 5 16 16 16 16 16 16 16 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
138 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=20 imp:n=1 fill=19
c
c Vareta de combustível queimável parcialmente preenchida com Gd e
c combustível enriquecido a 3.2%
c
139 5 -10.12000 -1 37 -38 u=21 imp:n=1 $gd
140 4 -10.40000 (-1 -37):(-1 38) u=21 imp:n=1 $pallet
141 6 -0.000166 1 -2 u=21 imp:n=1 $helio
142 7 -6.560000 2 -3 u=21 imp:n=1 $cladding
143 1 -1.000000 3 u=21 imp:n=1 $H20
c
c Elemento combustível enriquecido a 3.2% com 8 varetas de mistura de Gd
c
144 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=22 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16

```

```
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16
16 16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16 16
16 16 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 16 16
16 16 2 16 16 19 16 16 16 16 19 16 16 2 16 16
16 16 16 16 2 16 16 16 16 16 16 2 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 2 16 16 16 16 16 16 2 16 16 16 16
16 16 2 16 16 19 16 16 16 16 19 16 16 2 16 16
16 16 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 16 16
16 16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16 16
16 16 2 16 16 2 16 16 16 16 2 16 16 2 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
145 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=23 imp:n=1 fill=22
c
c Elemento combustível enriquecido a 3.2% com 8 varetas de mistura de Gd e
c sistema de barras de controle
c
146 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=24 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16
16 16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16 16
16 16 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 19 16 16 16 16 19 16 16 5 16 16
16 16 16 16 5 16 16 16 16 16 16 5 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 5 16 16 16 16 16 16 5 16 16 16 16
16 16 5 16 16 19 16 16 16 16 19 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 16 16
16 16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16 16
16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
147 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=25 imp:n=1 fill=24
c
```

c Elemento combustível enriquecido a 3.2% com 12 varetas de mistura de Gd e
c sistema de barras de controle

c

148 1 -1.00 12 -13 14 -15 u=26 imp:n=1 lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0

```
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 5 16 19 16 16 5 16 16 5 16 16
16 16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16 16
16 16 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 16 16
16 16 5 16 16 19 16 16 16 16 19 16 16 5 16 16
16 16 16 16 5 16 16 16 16 16 16 5 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16
16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 5 16 16 16 16 16 16 5 16 16 16 16
16 16 5 16 16 19 16 16 16 16 19 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 5 16 16 5 16 16 16 16 16 16
16 16 16 19 16 16 16 16 16 16 16 16 19 16 16 16
16 16 5 16 16 5 16 16 19 16 5 16 16 5 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16 16
```

149 1 -1.00 6 -7 8 -9 u=27 imp:n=1 fill=26

c

c *****

c * Suporte *

c *****

c

c Lado inteiro

c

201 8 -8.00 -25 u=30 imp:n=1

202 1 -1.00 25 u=30 imp:n=1

203 8 -8.00 -27 u=31 imp:n=1

204 1 -1.00 27 u=31 imp:n=1

205 8 -8.00 -28 u=32 imp:n=1

206 1 -1.00 28 u=32 imp:n=1

207 8 -8.00 -26 u=33 imp:n=1

208 1 -1.00 26 u=33 imp:n=1

c

c L

c

```
209 8 -8.00 -26 u=34 imp:n=1
210 8 -8.00 -29 u=34 imp:n=1
211 1 -1.00 26 29 u=34 imp:n=1
212 8 -8.00 -26 u=35 imp:n=1
213 8 -8.00 -30 u=35 imp:n=1
214 1 -1.00 26 30 u=35 imp:n=1
215 8 -8.00 -25 u=36 imp:n=1
216 8 -8.00 -31 u=36 imp:n=1
217 1 -1.00 25 31 u=36 imp:n=1
218 8 -8.00 -25 u=37 imp:n=1
219 8 -8.00 -32 u=37 imp:n=1
220 1 -1.00 25 32 u=37 imp:n=1
c
c Vertices
c
221 8 -8.00 -33 u=38 imp:n=1
222 1 -1.00 33 u=38 imp:n=1
223 8 -8.00 -34 u=39 imp:n=1
224 1 -1.00 34 u=39 imp:n=1
225 8 -8.00 -35 u=40 imp:n=1
226 1 -1.00 35 u=40 imp:n=1
227 8 -8.00 -36 u=41 imp:n=1
228 1 -1.00 36 u=41 imp:n=1
c
c *****
c * Nucleo do Reator *
c *****
c
301 1 -1.000 6 -7 8 -9 u=50 imp:n=1 lat=1 fill=-9:9 -9:9 0:0
    50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50
    50 50 50 50 50 39 30 30 30 30 30 30 30 38 50 50 50 50
    50 50 50 39 30 36 4 4 4 4 4 4 4 37 30 38 50 50 50
    50 50 39 36 4 4 18 25 23 25 23 25 18 4 4 37 38 50 50
    50 50 31 4 20 23 15 10 15 10 15 10 15 23 20 4 32 50 50
    50 39 36 4 23 15 10 27 4 27 4 27 10 15 23 4 37 38 50
    50 31 4 18 15 10 15 4 13 10 13 4 15 10 18 10 4 32 50
    50 31 4 25 10 27 4 27 4 15 4 27 4 27 10 25 4 32 50
    50 31 4 23 15 4 13 4 13 10 13 4 13 4 15 23 4 32 50
    50 31 4 25 10 27 10 15 10 7 10 15 10 27 10 25 4 32 50
```

```

50 31 4 23 15 4 13 4 13 10 13 4 13 4 15 23 4 32 50
50 31 4 25 10 27 4 27 4 15 4 27 4 27 10 25 4 32 50
50 31 4 18 15 10 15 4 13 10 13 4 15 10 18 10 4 32 50
50 40 35 4 23 15 10 27 4 27 4 27 10 15 23 4 34 41 50
50 50 31 4 20 23 15 10 15 10 15 10 15 23 20 4 32 50 50
50 50 40 35 4 4 18 25 23 25 23 25 18 4 4 34 41 50 50
50 50 50 40 33 35 4 4 4 4 4 4 4 34 33 41 50 50 50
50 50 50 50 50 40 33 33 33 33 33 33 33 41 50 50 50 50
50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50
302 1 -1.000 -16 17 -18 19 10 -11 -20 imp:n=1 fill=50
303 8 -8.000 20 -21 10 -11 imp:n=1
304 1 -1.000 21 -22 10 -11 imp:n=1
305 8 -8.000 22 -23 10 -11 imp:n=1
306 9 -9.125 23 -24 10 -11 imp:n=1
307 0 -10:11:24 imp:n=0 $outside

```

```

c *****
c *                               Cartao de Superfícies                               *
c *****
1 C/Z -0.71875 -0.71875 0.4555 $pallet
2 C/Z -0.71875 -0.71875 0.4650 $clad int
3 C/Z -0.71875 -0.71875 0.5375 $clad ext
4 C/Z -0.71875 -0.71875 0.6200 $guia int
5 C/Z -0.71875 -0.71875 0.6900 $guia ext
6 PX -11.500 $lado elem
7 PX 11.500 $lado elem
8 PY -11.500 $lado elem
9 PY 11.500 $lado elem
10 PZ -195.000 $lim elem
11 PZ 195.000 $lim elem
12 PX -1.4375 $reticulado
13 PX 0 $reticulado
14 PY -1.4375 $reticulado
15 PY 0 $reticulado
16 PX 218.5 $L nucleo
17 PX -218.5 $L nucleo
18 PY 218.5 $L nucleo
19 PY -218.5 $L nucleo
20 CZ 202.5 $out H20

```

21 CZ 210.5 \$refletor
 22 CZ 224.4 \$in H20
 23 CZ 225 \$cladding
 24 CZ 250 \$RPV
 25 RPP -11.5 11.5 -11.5 -9 -196 196 \$refletor p1
 26 RPP -11.5 11.5 9 11.5 -196 196 \$refletor p1
 27 RPP -11.5 -9 -11.5 11.5 -196 196 \$refletor p1
 28 RPP 9 11.5 -11.5 11.5 -196 196 \$refletor p1
 29 RPP 9 11.5 -11.5 9 -196 196 \$refletor p2
 30 RPP -11.5 -9 -11.5 9 -196 196 \$refletor p2
 31 RPP -11.5 -9 -9 11.5 -196 196 \$refletor p2
 32 RPP 9 11.5 -9 11.5 -196 196 \$refletor p2
 33 RPP 9 11.5 -11.5 -9 -196 196 \$refletor p3
 34 RPP -11.5 -9 -11.5 -9 -196 196 \$refletor p3
 35 RPP -11.5 -9 9 11.5 -196 196 \$refletor p3
 36 RPP 9 11.5 9 11.5 -196 196 \$refletor p3
 37 PZ -165 \$gd
 38 PZ 150 \$gd
 39 PZ 200 \$Posição barra de controle

c *****

c * Cartao de Dados *

c *****

mode n

c

c *****

c * Materiais *

c *****

c

c agua borada 2200ppm d=1.00

m1 1001.66c -0.1112444 1002.24c -0.0000256 5010.66c -0.0004061 &
 5011.66c -0.0017972 8016.62c -0.8855955 8017.66c -0.0009316

mt1 lwtr.60t

c UO2 1.9% U-235 d=10.40

m2 8016.62c -0.1184453 8017.66c -0.0000454 92235.66c -0.0167487 &
 92238.66c -0.8647606

c UO2 2.5% d=10.40

m3 8016.62c -0.1184532 8017.66c -0.0000454 92235.66c -0.0220375 &
 92238.66c -0.8594639

```

c UO2 3.2% d=10.40
m4 8016.62c -0.1184624 8017.66c -0.0000454 92235.66c -0.0282077 &
92238.66c -0.8532845
c UO2 93% + Gd203 7% d=10.12
m5 8016.62c -0.11943246 8017.66c -0.000045871 64154.66c -0.001330077 &
64155.66c -0.009009889 64156.66c -0.012456549 64157.66c -0.009526132 &
64158.66c -0.015110627 64160.66c -0.013300749 92235.66c -0.026233161 &
92238.66c -0.793554492
c Helio d=0.000166
m6 2004.66c -1.00
c Zircaloy-4 d=6.56
m7 8016.62c -0.001196 24000.50c -0.000997 26000.21c -0.001994 &
40000.58c -0.981858 50000 -0.013955
c AISI 316L d=8.00
m8 6000.50c -0.0003 14000.60c -0.01 15031.24c -0.00045 &
24000.50c -0.17000 25055.50c -0.02 26000.21c -0.65395 28000.50c -0.12000 &
42000.66c -0.02500
c 20MnMoNi55 d=9.125
m9 6000.50c -0.0019 14000.60c -0.002 15031.24c -0.00007 &
16000.66c -0.00008 24000.50c -0.0012 25055.50c -0.0129 26000.21c -0.96745 &
28000.50c -0.008 29000.50c -0.0011 42000.66c -0.0053
c Liga Ag80In15Cd5 d=10.17
m10 47000.55c 0.80 48000.42c 0.05 49000.66c 0.15
c
c *****
c *           Fonte           *
c *****
c
sdef par=1 pos=d1 erg=d2
si1 1 -69.71875 137.28125 0 -46.71875 137.28125 0 -23.71875 137.28125 0 &
-0.71875 137.28125 0 22.28125 137.28125 0 45.28125 137.28125 0 &
68.28125 137.28125 0 &
-115.71875 114.28125 0 -92.71875 114.28125 0 -69.71875 114.28125 0 &
-46.71875 114.28125 0 -23.71875 114.28125 0 -0.71875 114.28125 0 &
22.28125 114.28125 0 45.28125 114.28125 0 68.28125 114.28125 0 &
91.28125 114.28125 0 114.28125 114.28125 0 &
-115.71875 91.28125 0 -92.71875 91.28125 0 -69.71875 91.28125 0 &
-46.71875 91.28125 0 -23.71875 91.28125 0 -0.71875 91.28125 0 &
22.28125 91.28125 0 45.28125 91.28125 0 68.28125 91.28125 0 &

```

91.28125 91.28125 0 114.28125 91.28125 0 &
-138.71875 68.28125 0 -115.71875 68.28125 0 -92.71875 68.28125 0 &
-69.71875 68.28125 0 -46.71875 68.28125 0 -23.71875 68.28125 0 &
-0.71875 68.28125 0 22.28125 68.28125 0 45.28125 68.28125 0 &
68.28125 68.28125 0 91.28125 68.28125 0 114.28125 68.28125 0 &
137.28125 68.28125 0 &
-138.71875 45.28125 0 -115.71875 45.28125 0 -92.71875 45.28125 0 &
-69.71875 45.28125 0 -46.71875 45.28125 0 -23.71875 45.28125 0 &
-0.71875 45.28125 0 22.28125 45.28125 0 45.28125 45.28125 0 &
68.28125 45.28125 0 91.28125 45.28125 0 114.28125 45.28125 0 &
137.28125 45.28125 0 &
-138.71875 22.28125 0 -115.71875 22.28125 0 -92.71875 22.28125 0 &
-69.71875 22.28125 0 -46.71875 22.28125 0 -23.71875 22.28125 0 &
-0.71875 22.28125 0 22.28125 22.28125 0 45.28125 22.28125 0 &
68.28125 22.28125 0 91.28125 22.28125 0 114.28125 22.28125 0 &
137.28125 22.28125 0 &
-138.71875 -0.71875 0 -115.71875 -0.71875 0 -92.71875 -0.71875 0 &
-69.71875 -0.71875 0 -46.71875 -0.71875 0 -23.71875 -0.71875 0 &
-0.71875 -0.71875 0 22.28125 -0.71875 0 45.28125 -0.71875 0 &
68.28125 -0.71875 0 91.28125 -0.71875 0 114.28125 -0.71875 0 &
137.28125 -0.71875 0 &
-138.71875 -23.71875 0 -115.71875 -23.71875 0 -92.71875 -23.71875 0 &
-69.71875 -23.71875 0 -46.71875 -23.71875 0 -23.71875 -23.71875 0 &
-0.71875 -23.71875 0 22.28125 -23.71875 0 45.28125 -23.71875 0 &
68.28125 -23.71875 0 91.28125 -23.71875 0 114.28125 -23.71875 0 &
137.28125 -23.71875 0 &
-138.71875 -46.71875 0 -115.71875 -46.71875 0 -92.71875 -46.71875 0 &
-69.71875 -46.71875 0 -46.71875 -46.71875 0 -23.71875 -46.71875 0 &
-0.71875 -46.71875 0 22.28125 -46.71875 0 45.28125 -46.71875 0 &
68.28125 -46.71875 0 91.28125 -46.71875 0 114.28125 -46.71875 0 &
137.28125 -46.71875 0 &
-138.71875 -69.71875 0 -115.71875 -69.71875 0 -92.71875 -69.71875 0 &
-69.71875 -69.71875 0 -46.71875 -69.71875 0 -23.71875 -69.71875 0 &
-0.71875 -69.71875 0 22.28125 -69.71875 0 45.28125 -69.71875 0 &
68.28125 -69.71875 0 91.28125 -69.71875 0 114.28125 -69.71875 0 &
137.28125 -69.71875 0 &
-115.71875 -92.71875 0 -92.71875 -92.71875 0 -69.71875 -92.71875 0 &
-46.71875 -92.71875 0 -23.71875 -92.71875 0 -0.71875 -92.71875 0 &
22.28125 -92.71875 0 45.28125 -92.71875 0 68.28125 -92.71875 0 &

```

91.28125 -92.71875 0 114.28125 -92.71875 0 &
-115.71875 -115.71875 0 -92.71875 -115.71875 0 -69.71875 -115.71875 0 &
-46.71875 -115.71875 0 -23.71875 -115.71875 0 -0.71875 -115.71875 0 &
22.28125 -115.71875 0 45.28125 -115.71875 0 68.28125 -115.71875 0 &
91.28125 -115.71875 0 114.28125 -115.71875 0 &
-69.71875 -138.71875 0 -46.71875 -138.71875 0 -23.71875 -138.71875 0 &
-0.71875 -138.71875 0 22.28125 -138.71875 0 45.28125 -138.71875 0 &
68.28125 -138.71875 0

```

sp1 1 148r

sp2 -3 0.965 2.29

c

c *****

c * Tally *

c *****

c

F2:N 23 \$Superfície interna do vaso de pressao do nucleo do reator

```

E2 3.06E-10 7.69E-10 3.06E-09 7.69E-09 3.06E-08 7.44E-08
3.06E-07 7.69E-07 3.06E-06 7.69E-06 3.06E-05 7.69E-05
2.26E-04 3.60E-04 3.80E-04 4.75E-04 6.33E-04 8.00E-04
1.01E-03 1.15E-03 1.20E-03 1.49E-03 2.00E-03 2.58E-03
3.40E-03 4.00E-03 4.25E-03 4.75E-03 5.50E-03 6.00E-03
6.60E-03 7.20E-03 7.60E-03 8.00E-03 8.40E-03 8.80E-03
9.60E-03 1.10E-02 1.43E-02 2.00E-02 2.40E-02 2.70E-02
2.80E-02 3.00E-02 3.20E-02 3.40E-02 3.80E-02 4.50E-02
5.00E-02 5.50E-02 6.00E-02 6.90E-02 7.60E-02 8.00E-02
8.40E-02 8.80E-02 9.20E-02 9.60E-02 1.00E-01 1.05E-01
1.10E-01 1.20E-01 1.35E-01 1.43E-01 1.50E-01 1.60E-01
1.80E-01 1.90E-01 2.00E-01 2.10E-01 2.20E-01 2.30E-01
2.40E-01 2.55E-01 2.70E-01 2.80E-01 3.00E-01 3.20E-01
3.40E-01 3.60E-01 3.80E-01 4.25E-01 4.50E-01 4.75E-01
5.00E-01 5.25E-01 5.50E-01 5.75E-01 6.00E-01 6.30E-01
6.60E-01 6.90E-01 7.20E-01 7.60E-01 8.00E-01 8.40E-01
8.80E-01 9.20E-01 9.60E-01 1.00E+00 1.10E+00 1.20E+00
1.30E+00 1.40E+00 1.60E+00 1.80E+00 2.00E+00 2.20E+00
2.40E+00 2.60E+00 2.70E+00 2.80E+00 3.10E+00 3.20E+00
3.40E+00 3.50E+00 3.60E+00 3.70E+00 3.90E+00 4.00E+00
4.20E+00 4.30E+00 4.40E+00 4.50E+00 4.60E+00 4.70E+00
4.90E+00 5.00E+00 5.10E+00 5.20E+00 5.40E+00 5.50E+00
5.60E+00 5.80E+00 6.00E+00 6.10E+00 6.20E+00 6.40E+00

```

6.60E+00 6.80E+00 7.00E+00 7.10E+00 7.30E+00 7.50E+00
7.60E+00 7.70E+00 7.80E+00 7.90E+00 8.20E+00 8.40E+00
9.00E+00 9.90E+00 1.06E+01 1.15E+01 1.23E+01 1.31E+01
1.39E+01 1.47E+01 1.50E+01

nps 1E+9

APÊNDICE D – MEMÓRIA DE CÁLCULO PARA ESTIMATIVA
DO DESLOCAMENTO POR ÁTOMO (DPA) NA PAREDE
INTERNA DO VASO DE PRESSÃO A PARTIR DO MODELO DE
ANGRA 2

Tabela 10 – Estimativa do deslocamento por átomo (dpa) para a parede interna do vaso de pressão de Angra 2.

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f(E_n)$	$\Phi(E_n)$ (cm^{-2})	dpa
0,1	113,716	0,0038	$1,91 \cdot 10^{17}$	0,000022
0,105	105,5489	0,0057	$2,87 \cdot 10^{17}$	0,00003
0,11	78,43095	0,0057	$2,85 \cdot 10^{17}$	0,000022
0,12	60,44543	0,0124	$6,22 \cdot 10^{17}$	0,000038
0,135	134,1587	0,0228	$1,14 \cdot 10^{18}$	0,000153
0,143	255,363	0,0113	$5,63 \cdot 10^{17}$	0,000144
0,15	293,0161	0,0045	$2,26 \cdot 10^{17}$	0,000066
0,16	133,09	0,0096	$4,82 \cdot 10^{17}$	0,000064
0,18	156,0143	0,0235	$1,18 \cdot 10^{18}$	0,000183
0,19	244,41	0,0132	$6,61 \cdot 10^{17}$	0,000161
0,2	370,7627	0,0059	$2,93 \cdot 10^{17}$	0,000109
0,21	205,3339	0,0084	$4,2 \cdot 10^{17}$	0,000086
0,22	101,0349	0,0124	$6,21 \cdot 10^{17}$	0,000063
0,23	307,5111	0,0071	$3,53 \cdot 10^{17}$	0,000109
0,24	146,9613	0,0097	$4,83 \cdot 10^{17}$	0,000071
0,255	171,8077	0,0131	$6,57 \cdot 10^{17}$	0,000113
0,27	135,3387	0,0118	$5,92 \cdot 10^{17}$	0,00008
0,28	282,5501	0,0078	$3,88 \cdot 10^{17}$	0,00011
0,3	187,6945	0,0166	$8,29 \cdot 10^{17}$	0,000156
0,32	142,0391	0,0186	$9,28 \cdot 10^{17}$	0,000132
0,34	315,5791	0,0112	$5,58 \cdot 10^{17}$	0,000176
0,36	166,553	0,0169	$8,47 \cdot 10^{17}$	0,000141
0,38	302,1184	0,0143	$7,13 \cdot 10^{17}$	0,000215
0,425	528,401	0,0183	$9,17 \cdot 10^{17}$	0,000485
0,45	400,4412	0,0117	$5,85 \cdot 10^{17}$	0,000234
0,475	309,7825	0,0155	$7,74 \cdot 10^{17}$	0,00024

Continua na próxima página

Tabela 10 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f(E_n)$	$\Phi(E_n)$ (cm^{-2})	dpa
0,5	351,4453	0,0128	$6,38.10^{17}$	0,000224
0,525	381,0001	0,0128	$6,39.10^{17}$	0,000244
0,55	327,4008	0,0141	$7,04.10^{17}$	0,00023
0,575	316,9469	0,0147	$7,35.10^{17}$	0,000233
0,6	264,2091	0,0151	$7,54.10^{17}$	0,000199
0,63	190,8042	0,023	$1,15.10^{18}$	0,00022
0,66	255,5292	0,0212	$1,06.10^{18}$	0,00027
0,69	529,8745	0,014	$7,01.10^{17}$	0,000371
0,72	389,0167	0,0171	$8,56.10^{17}$	0,000333
0,76	680,431	0,0153	$7,65.10^{17}$	0,000521
0,8	627,3019	0,0147	$7,37.10^{17}$	0,000463
0,84	427,2328	0,0146	$7,31.10^{17}$	0,000312
0,88	461,2467	0,0139	$6,95.10^{17}$	0,00032
0,92	327,1398	0,0137	$6,85.10^{17}$	0,000224
0,96	278,1719	0,0137	$6,84.10^{17}$	0,00019
1	479,7678	0,0102	$5,11.10^{17}$	0,000245
1,1	498,4922	0,0263	$1,31.10^{18}$	0,000654
1,2	477,6893	0,0285	$1,43.10^{18}$	0,000682
1,3	707,1735	0,0236	$1,18.10^{18}$	0,000835
1,4	616,464	0,0223	$1,12.10^{18}$	0,000689
1,6	734,1659	0,0372	$1,86.10^{18}$	0,001366
1,8	784,558	0,0322	$1,61.10^{18}$	0,001264
2	989,3265	0,0263	$1,32.10^{18}$	0,001301
2,2	923,3754	0,0257	$1,29.10^{18}$	0,001187
2,4	1079,716	0,027	$1,35.10^{18}$	0,00146
2,6	1348,954	0,0198	$9,9.10^{17}$	0,001335
2,7	1192,105	0,0087	$4,34.10^{17}$	0,000517
2,8	1263,538	0,0083	$4,17.10^{17}$	0,000527
3,1	1364,006	0,0223	$1,11.10^{18}$	0,001518
3,2	1387,724	0,0058	$2,89.10^{17}$	0,000401
3,4	1346,851	0,0084	$4,21.10^{17}$	0,000566
3,5	1398,034	0,0037	$1,86.10^{17}$	0,000261
3,6	1334,743	0,0041	$2,03.10^{17}$	0,000271
3,7	1424,447	0,004	$1,98.10^{17}$	0,000282
3,9	1483,88	0,0078	$3,9.10^{17}$	0,000579

Continua na próxima página

Tabela 10 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f(E_n)$	$\Phi(E_n)$ (cm^{-2})	dpa
4	1464,868	0,0038	$1,89.10^{17}$	0,000277
4,2	1560,443	0,0085	$4,23.10^{17}$	0,000661
4,3	1530,309	0,0039	$1,94.10^{17}$	0,000297
4,4	1582,916	0,0029	$1,44.10^{17}$	0,000228
4,5	1523,34	0,0035	$1,73.10^{17}$	0,000264
4,6	1626,724	0,0035	$1,77.10^{17}$	0,000287
4,7	1600,863	0,0038	$1,92.10^{17}$	0,000307
4,9	1653,609	0,0068	$3,38.10^{17}$	0,000559
5	1642,833	0,0035	$1,75.10^{17}$	0,000287
5,1	1660,075	0,0029	$1,43.10^{17}$	0,000237
5,2	1682,554	0,0026	$1,28.10^{17}$	0,000215
5,4	1716,469	0,0061	$3,05.10^{17}$	0,000524
5,5	1731,089	0,0029	$1,45.10^{17}$	0,00025
5,6	1729,785	0,0024	$1,2.10^{17}$	0,000207
5,8	1760,538	0,0039	$1,97.10^{17}$	0,000347
6	1792,105	0,004	$1,98.10^{17}$	0,000355
6,1	1811,511	0,0019	$9,4.10^{16}$	0,00017
6,2	1800,94	0,0023	$1,16.10^{17}$	0,000208
6,4	1859,081	0,004	$1,98.10^{17}$	0,000368
6,6	1879,237	0,004	$2,01.10^{17}$	0,000377
6,8	1891,762	0,003	$1,5.10^{17}$	0,000284
7	1909,076	0,0028	$1,4.10^{17}$	0,000268
7,1	1914,442	0,0014	$7,2.10^{16}$	0,000138
7,3	1941,75	0,002	$1,01.10^{17}$	0,000197
7,5	1963,306	0,0019	$9,34.10^{16}$	0,000183
7,6	1986,044	0,001	$4,96.10^{16}$	0,000098
7,7	1976,213	0,0009	$4,64.10^{16}$	0,000092
7,8	1989,243	0,0009	$4,28.10^{16}$	0,000085
7,9	2003,646	0,0007	$3,29.10^{16}$	0,000066
8,2	2013,259	0,0024	$1,2.10^{17}$	0,000241
8,4	2064,755	0,001	$4,77.10^{16}$	0,000099
9	2107,525	0,0031	$1,54.10^{17}$	0,000325
9,9	2226,698	0,0033	$1,67.10^{17}$	0,000372
10,6	2313,91	0,0014	$7,03.10^{16}$	0,000163
11,5	2421,344	0,0013	$6,7.10^{16}$	0,000162

Continua na próxima página

Tabela 10 – Continuação

E_n (eV)	$\sigma_D(E_n)$ (b)	$f(E_n)$	$\Phi(E_n)$ (cm^{-2})	dpa
12,3	2519,598	0,0006	$2,75 \cdot 10^{16}$	0,000069
13,1	2630,343	0,0003	$1,75 \cdot 10^{16}$	0,000046
13,9	2738,112	0,0003	$1,27 \cdot 10^{16}$	0,000035
Somatório			$5 \cdot 10^{19}$	0,033046

Conclusão

ANEXO A – DEMONSTRAÇÃO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA PARA O ESPALHAMENTO ELÁSTICO PARA NÊUTRONS INCIDENTES EM UM NÚCLEO ALVO

A desmontração apresentada consta de Was (16).

A Figura 49 apresenta as trajetórias de um nêutron e um núcleo alvo antes e depois do espalhamento, visto de ambos sistemas de referência do laboratório e do centro de massa. A forma mais fácil de se obter uma relação entre a energia do nêutron incidente, ângulo de espalhamento e transferência de energia é analisando a dinâmica da colisão no sistema do centro de massa (CM). Quando a colisão é vista no sistema CM, as partículas que recuam parecem se mover para longe uma das outras em direções opostas. Com base na conservação do momento:

$$\begin{cases} v_c m - V_c M = 0 \\ v'_c m - V'_c M = 0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

e da conservação da energia cinética:

$$\frac{1}{2} m v_c^2 + \frac{1}{2} M V_c^2 = \frac{1}{2} m v'_c{}^2 + \frac{1}{2} M V'_c{}^2 \quad (\text{A.2})$$

Utilizando-se a Equação A.1 para eliminar v_c e v'_c , tem-se:

$$\left[\frac{1}{2} m \left(\frac{M}{m} \right)^2 + \frac{1}{2} M \right] V_c^2 = \left[\frac{1}{2} m \left(\frac{M}{m} \right)^2 + \frac{1}{2} M \right] V'_c{}^2 \quad (\text{A.3})$$

portanto,

$$\begin{aligned} V_c &= V'_c \\ v_c &= v'_c \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Desde que o núcleo alvo esteja em descanso no sistema do laboratório e se movendo para a esquerda com velocidade V_c no sistema do CM, o mesmo sistema CM deve estar se movendo para direita em relação ao sistema do laboratório com mesma velocidade V_c . Logo, ao utilizar V_{CM} para denotar a velocidade do sistema CM em relação ao sistema do laboratório, as magnitudes de V_{CM} e V_c serão as mesmas, porém em direções opostas. Isto pode ser estabelecido da seguinte forma:

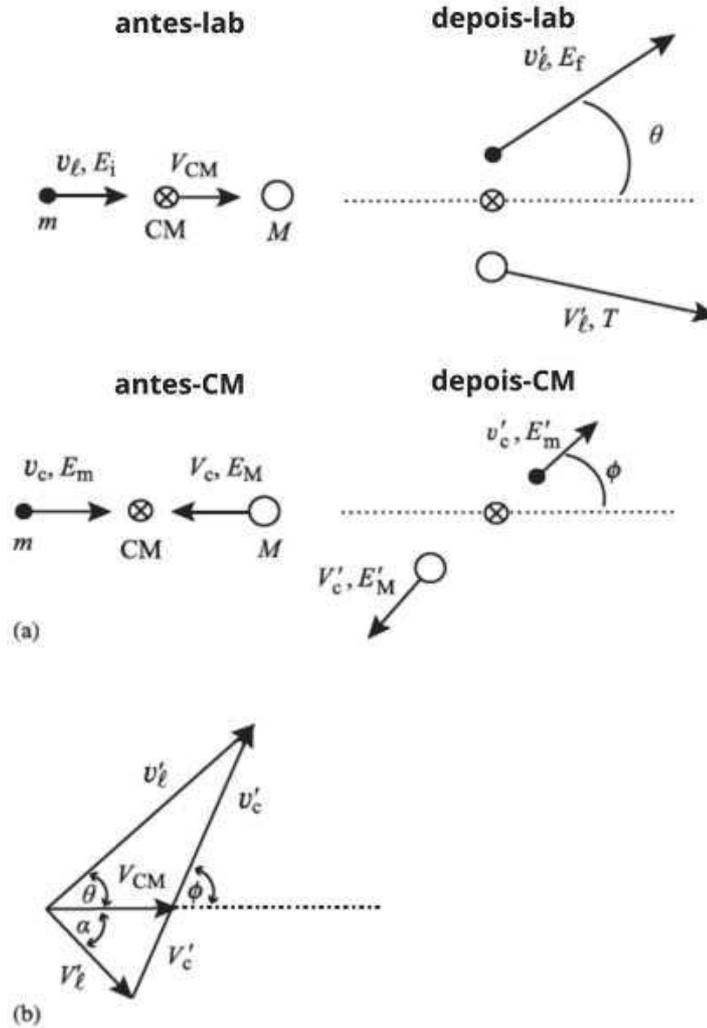


Figura 49 – (a) Vetores de velocidade nos sistemas do laboratório e do centro de massa (CM), e (b) Diagrama composto relacionando as velocidades nos dois sistemas (16).

$$v_c = v_\ell - V_{CM} = v_\ell - V_c \quad (\text{A.5})$$

e utilizando-se a Equação A.1, obtém-se:

$$V_{CM} = \left(\frac{m}{M + m} \right) v_\ell \quad (\text{A.6})$$

Relembra-se o objetivo de relacionar T , a energia transferida para o átomo atingido, com ϕ , o ângulo de espalhamento no sistema CM. Utilizando-se a adição de vetores, pode-se relacionar a velocidade de recuo do núcleo alvo do sistema da laboratório, V'_ℓ , com ϕ , como apresentado na Figura 49.b, composta a partir das interações dos sistemas do laboratório e do CM da Figura 49.a. Utilizando a lei dos cossenos:

$$V'^2_\ell = V_c M^2 + V_c'^2 - 2V_{CM}V'_c \cos\phi \quad (\text{A.7})$$

e rescrevendo as velocidades da Equação A.7 nos termos de energia:

$$V_\ell'^2 = \frac{2T}{M}, V_C M^2 = \frac{2E_i}{m} \left(\frac{m}{m+M} \right)^2, \text{ e } V_c'^2 = \frac{2m}{M^2} E_m' \quad (\text{A.8})$$

e substituindo estas expressões na Equação A.7, tem-se:

$$T = \frac{mM}{(m+M)^2} E_i + \frac{m}{M} E_m' - 2 \left(\frac{m}{m+M} \right) (E_i E_m')^{\frac{1}{2}} \cos\phi \quad (\text{A.9})$$

ou

$$T = \eta_1 \eta_2 E_i + \frac{\eta_1}{\eta_2} E_m' - 2 \eta_1 (E_i E_m')^{\frac{1}{2}} \cos\phi \quad (\text{A.10})$$

onde $\eta_1 = \frac{m}{(m+M)}$ e $\eta_2 = \frac{M}{(m+M)}$.

Para encontrar a energia transferida T como função da energia inicial e do ângulo de espalhamento apenas, utiliza-se as relações entre E_i e E_m' para eliminar E_m' . Das Equações A.5 e A.6, tem-se que:

$$v_c' = v_\ell - \left(\frac{m}{m+M} \right) v_\ell = v_\ell \left(\frac{M}{m+M} \right) \quad (\text{A.11})$$

Reescrevendo a Equação A.11 nos termos de energia:

$$E_m' = E_i \left(\frac{M}{m+M} \right)^2 = \eta_2^2 E_i \quad (\text{A.12})$$

Substituindo na Equação A.10 e simplificando, tem-se que:

$$T = \frac{\Lambda}{2} E_i (1 - \cos\phi) \quad (\text{A.13})$$

onde define-se

$$\Lambda = \frac{4mM}{(M+m)^2} = \frac{4A}{(1+A)^2} \quad (\text{A.14})$$

para $m = 1$ e $M = A$. Portanto, T depende apenas da variável desconhecida ϕ . Observa-se que a dependência angular de T em ϕ está demonstrada na Figura 50.

O interesse recai em obter-se a probabilidade de uma energia T ser transferida para o átomo. Isto depende da seção de choque diferencial. Define-se $\sigma_s(E_i, \phi) d\Omega$ como a probabilidade de uma colisão que espalha a partícula incidente no CM em $(\phi, d\Omega)$, em que $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido que espalha na direção ϕ . Como probabilidades

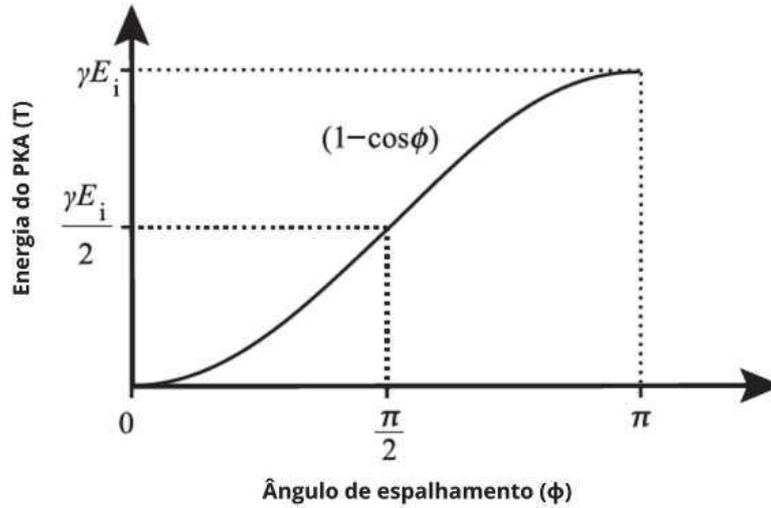


Figura 50 – Energia transferida como função do ângulo de espalhamento do CM (16).

diferencias podem ser escritas em variáveis equivalentes, $\sigma_s(E_i, \phi)$ pode ser escrita nos termos das variáveis de CM:

$$\sigma_s(E_i, T)dT = \sigma_s(E_i, \phi)d\Omega \quad (\text{A.15})$$

Empregando-se a Figura 51.a para relacionar $d\Omega$ com $d\phi$, tem-se por definição:

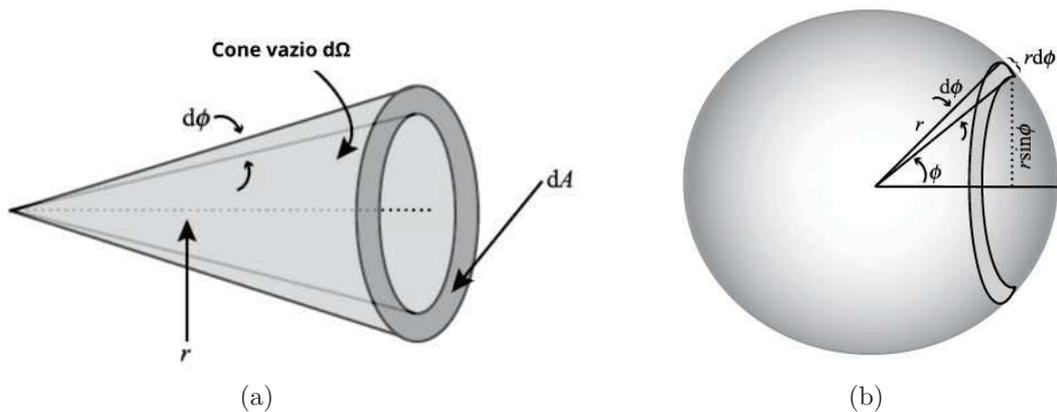


Figura 51 – Espalhamento no elemento de ângulo sólido (16).

$$d\Omega = \frac{dA}{r^2} \quad (\text{A.16})$$

e por meio da Figura 51.b, tem-se que:

$$d\Omega = \frac{rd\phi(2\pi r \sin\phi)}{r^2} = 2\pi \sin\phi d\phi \quad (\text{A.17})$$

Substituindo-se a Equação A.17 na Equação A.15, tem-se:

$$\sigma_s(E_i, T)dT = \sigma_s(E_i, \phi)d\Omega = 2\pi\sigma_s(E_i, \phi)\text{sen}\phi d\phi \quad (\text{A.18})$$

Como $T = \frac{\Lambda}{2}E_i(1 - \cos\phi)$, logo $dT = \frac{\Lambda}{2}E_i\text{sen}\phi d\phi$, tem-se que:

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{4\pi}{\Lambda E_i}\sigma_s(E_i, \phi) \quad (\text{A.19})$$

Apesar do número de átomos espalhados em um incremento $d\phi$ quando $\phi = \frac{\pi}{2}$ ser maior do que o incremento de $d\phi$ quando $\phi = 0$ ou π , o número de átomos interceptando a superfície esférica por unidade de ângulo sólido é constante em todos os ângulos ϕ . Logo, $\frac{dT}{d\phi}$ varia de modo senoidal com ϕ , mas $\frac{dT}{d\Omega}$ é independente de ϕ .

Considerando que a probabilidade total de espalhamento elástico para nêutrons com energia E_i é:

$$\sigma_s(E_i) = \int \sigma_s(E_i, \Omega)d\Omega \quad (\text{A.20})$$

utilizando-se a Equação A.19, a seção de choque de espalhamento elástico é:

$$\sigma_s(E_i) = \int \sigma_s(E_i, \phi)d\Omega = 2\pi \int \sigma_s(E_i, \phi)\text{sen}\phi d\phi \quad (\text{A.21})$$

Assumindo-se que o espalhamento elástico no sistema CM é independente do ângulo de espalhamento, ou seja, espalhamento é isotópico, logo:

$$\sigma_s(E_i) = \int \sigma_s(E_i, \phi)d\Omega = 2\pi\sigma_s(E_i, \phi) \int \text{sen}\phi d\phi = 4\pi\sigma_s(E_i, \phi) \quad (\text{A.22})$$

Portanto:

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\Lambda E_i} \quad (\text{A.23})$$

ANEXO B – DETERMINAÇÃO DA ENERGIA DE RECUO DO NÚCLEO COM A EMISSÃO DE UM RAIOS-GAMA POR MEIO DA CAPTURA RADIOATIVA DE UM NÊUTRON

A demonstração apresentada consta de Was (16).

Considera-se as Equações A.1 e A.2 de conservação de momento e de energia cinética, respectivamente, e a Figura 49. Para reação (n, γ) , $E_i \sim 0$ (reação ocorre para nêutrons térmicos de energia 0,025 eV), $E_f \equiv 0$ (não há nêutron espalhado) e Q é o equivalente à diferença de massa entre as partículas iniciais e o núcleo composto. Quando o núcleo se desexcita, há a emissão de um γ com esta energia. Pela conservação do momento, o núcleo deve recuar com momento:

$$(m + M)V'_c = \frac{E_\gamma}{c} \quad (\text{B.1})$$

Nota-se que esta é uma aproximação, já que não se subtraiu o defeito de massa do núcleo composto. Elevando ambos os lados da Equação B.1 e, em seguida, dividindo-se por $2(m + M)$, tem-se que:

$$\frac{1}{2}(m + M)V_c'^2 = \frac{E_\gamma^2}{2(m + M)c^2} \quad (\text{B.2})$$

Assim como mostrado no Apêndice A, T é dado por:

$$T = (V_{CM}^2 + V_c'^2 - 2V_{CM}V_c'\cos\phi) \left(\frac{M + m}{2} \right) \quad (\text{B.3})$$

Como $V_{CM} \ll V_c'$, pode-se estimar:

$$T \cong \left(\frac{M + m}{2} \right) V_c'^2 = \frac{E_\gamma^2}{2(m + M)c^2} \quad (\text{B.4})$$

Assume-se que este valor de T representa a máxima energia de recuo. Mas como nem toda energia de Q será emitida em um único γ , aproxima-se a energia de recuo média como metade do valor da máxima energia de recuo. Logo:

$$\tilde{T} \cong \frac{E_\gamma^2}{2(m + M)c^2} \quad (\text{B.5})$$

ANEXO C – ENERGIA TRANSFERIDA E SEÇÃO DE CHOQUE DE TRANSFERÊNCIA DE ENERGIA PARA DIVERSOS TIPOS DE COLISÃO NÊUTRON-NÚCLEO

Tabela 11 – Energia Transferida e Seção de Choque de Transferência de Energia para Diversos Tipos de Colisão Nêutron-Núcleo (16).

Tipo de Colisão	Energia Transferida (T) e Seção de Choque de Transferência de Energia (σ)
Espalhamento elástico	$T = \frac{\Lambda}{2} E_i (1 - \cos\phi)$ $\sigma_s(E_i, T) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\Lambda E_i}$
Espalhamento inelástico	$T(E_i, Q, \phi) = \frac{\Lambda}{2} E_i - \frac{\Lambda}{2} \left[E_i \left(E_i + Q_i \frac{A+1}{A} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cos\phi + \frac{Q_j}{A+1}$ <p style="text-align: center;">Região de ressonância</p> $\sigma_{s,j}(E_i, Q_j, T) = \frac{\sigma_{s,j}(E_i, Q_j)}{\Lambda E_i \left(1 + \frac{Q_j}{E_i} \frac{1+A}{A} \right)^{\frac{1}{2}}}$ <p style="text-align: center;">Região de ressonância não resolvida</p> $\sigma_{is}(E_i, T) = \sigma_{is}(E_i) \int_0^{E'_m{}^{max}} \frac{f(E_i, E'_m)}{4 \frac{1}{A+1} (E_i E'_m)^{1/2}} dE'_m$
(n,2n)	$T = \frac{A}{A-1} \frac{\eta_1}{\eta_2} E''_m + \frac{A-1}{A} \tilde{T}_\ell - 2 \left(\frac{\eta_1}{\eta_2} \right)^{\frac{1}{2}} (\tilde{T}_\ell E''_m)^{\frac{1}{2}} \cos\phi$ $\sigma_{n,2n}(E_i, T) = \int_0^{E_i} \frac{E'_m}{I(E_i)} e^{-E'_m/E_D} \times \int_0^{E_i-E'_m} \frac{E''_m}{I(E_i, E'_m)} e^{-E''_m/E_D} dE'_m dE''_m$
(n, γ)	$\tilde{T} \cong \frac{E_\gamma^2}{2(m+M)c^2}$ $\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \sigma_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_i}} \left\{ \frac{1}{[2(E_i - E_0)/\Gamma]^2 + 1} \right\}$

T - Energia cinética depositada

Λ - Relação mássica entre a partícula incidente e o núcleo alvo

E_i - Energia da partícula incidente

ϕ - Ângulo de espalhamento no sistema de centro de massa

$\sigma_s(E_i, T)$ - Seção de choque microscópica de espalhamento elástico de transferência de energia

$\sigma_s(E_i)$ - Seção de choque microscópica de espalhamento elástico

Q - Diferença de energia de excitação entre os núcleos produzidos

A - Massa atômica

$\sigma_{s,j}(E_i, Q_j, T)$ - Seção de choque microscópica de espalhamento inelástico para região de ressonância resolvida de transferência de energia

$\sigma_{s,j}(E_i, Q_j)$ - Seção de choque microscópica de espalhamento inelástico para região de ressonância resolvida

$\sigma_{is}(E_i, T)$ - Seção de choque microscópica de espalhamento inelástico para região de ressonância não resolvida de transferência de energia

$\sigma_{is}(E_i)$ - Seção de choque microscópica de espalhamento inelástico para região de ressonância não resolvida

$f(E_i, E'_m)$ - Função da distribuição para nêutrons espalhados no referencial do centro de massa

η_1 - Relação entre as massas do nêutron incidente e do núcleo alvo, $\eta_1 = \frac{m}{(m + M)}$

η_2 - Relação entre as massas do nêutron incidente e do núcleo alvo, $\eta_2 = \frac{M}{(m + M)}$

E''_m - Energia cinética do núcleo após a segunda emissão

\tilde{T}_ℓ - Energia média de recuo após a emissão do primeiro nêutron

$\sigma_{n,2n}(E_i, T)$ - Seção de choque microscópica para (n,2n) de transferência de energia

$I(E_i)$ - Fator de normalização para função de distribuição dependente da energia do nêutron incidente

$I(E_i, E'_m)$ - Fator de normalização para função de distribuição dependente do nêutron incidente e da energia do núcleo após a primeira emissão

E_D - Temperatura nuclear, $E_D = kt$

$\sigma_{n,\gamma}(E_i)$ - Seção de choque microscópica para (n, γ) de transferência de energia

σ_0 - Máximo valor para seção de choque microscópica (n, γ)

E_0 - Energia de ressonância

Γ - Largura total do nível de excitação do núcleo composto

ANEXO D – DEMONSTRAÇÃO DO NÚMERO DE DESLOCAMENTOS PARA O MODELO DE KINCHIN E PEASE PARA O DESLOCAMENTO DE ÁTOMOS

A demonstração apresentada consta de Was (16).

Considerando dois átomos em movimento criados quando um PKA atinge um átomo estacionário. Depois da colisão, o PKA tem energia residual $T - \epsilon$ e o átomo atingido recebe a energia $\epsilon - E_d$. Assim:

$$\nu(T) = \nu(T - \epsilon) + \nu(\epsilon - E_d) \quad (\text{D.1})$$

onde E_d é a energia consumida na reação. Negligenciando-se E_d em comparação com ϵ , ou seja, $\epsilon \gg E_d$, então a Equação D.1 se torna:

$$\nu(T) = \nu(T - \epsilon) + \nu(\epsilon) \quad (\text{D.2})$$

Equação D.2 não é suficiente para determinar $\nu(T)$, tendo em vista que ϵ é desconhecido. Já que o PKA e os átomos da rede são idênticos ($\Lambda = 1$), ϵ pode residir em qualquer valor entre 0 e T . Entretanto, se se definir a probabilidade de transferir energia no intervalo $(\epsilon, d\epsilon)$ em uma colisão, pode-se multiplicar a Equação D.2 por esta probabilidade e integrar em todos os valores permitidos de ϵ . Isto produzirá o número médio de deslocamentos.

Utilizando o modelo da esfera rígida, a seção de choque de transferência de energia é dada por:

$$\sigma(T, \epsilon) = \frac{\sigma(T)}{\Lambda T} = \frac{\sigma(T)}{T} \quad (\text{D.3})$$

e a probabilidade do PKA de energia T transfira energia no alcance $(\epsilon, d\epsilon)$ para o átomo atingido é:

$$\frac{\sigma(T, \epsilon)d\epsilon}{\sigma(T)} = \frac{d\epsilon}{T} \quad (\text{D.4})$$

Multiplicando-se o lado direito da Equação D.2 por $d\epsilon/dT$ e integrando de 0 a T , tem-se que:

$$\nu(T) = \frac{1}{T} \int_0^T [\nu(T - \epsilon) + \nu(\epsilon)] d\epsilon = \frac{1}{T} \left[\int_0^T \nu(T - \epsilon) d\epsilon + \int_0^T \nu(\epsilon) d\epsilon \right] \quad (D.5)$$

Uma mudança de variável de ϵ para $\epsilon' = T - \epsilon$ na primeira integral promoverá as seguintes alterações na Equação D.5:

$$\nu(T) = \frac{1}{T} \int_0^T \nu(\epsilon') d\epsilon' + \frac{1}{T} \int_0^T \nu(\epsilon) d\epsilon \quad (D.6)$$

que é na realidade uma soma de duas integrais idênticas. Logo:

$$\nu(T) = \frac{2}{T} \int_0^T \nu(\epsilon) d\epsilon \quad (D.7)$$

Antes de resolver a Equação D.7, examina-se o comportamento de $\nu(\epsilon)$ próximo da região do limite E_d . Claramente quando $T < E_d$, não há deslocamentos, logo:

$$\nu(T) = 0, \text{ para } 0 < T < E_d \quad (D.8)$$

Se T é maior que E_d , mas menor do que $2E_d$, dois resultados são possíveis. O primeiro é que o átomo atingido é deslocado de sua posição na rede e o PKA, agora com energia menor do que E_d , fica preso à esta posição. Se o PKA original transferir energia inferior a E_d , o átomo atingido permanece na sua posição e nenhum deslocamento ocorre. Em ambos os casos, somente um deslocamento é possível para um PKA com energia entre E_d e $2E_d$, logo:

$$\nu(T) = 1, \text{ para } E_d < T < 2E_d \quad (D.9)$$

Utilizando-se as Equações D.8 e D.9, pode-se dividir a integral constante da Equação D.7 nos limites de 0 para E_d , E_d para $2E_d$ e $2E_d$ para T , resultando em:

$$\nu(T) = \frac{2}{T} \left[\int_0^{E_d} 0 d\epsilon + \int_0^{E_d} 1 d\epsilon + \int_0^{E_d} \nu(\epsilon) d\epsilon \right] = \frac{2E_d}{T} + \frac{2}{T} \int_0^{E_d} \nu(\epsilon) d\epsilon \quad (D.10)$$

A solução da Equação D.10 pode ser obtida por meio da multiplicação por T e diferenciando-se ao respectivo T :

$$T \frac{d\nu}{dT} = \nu \quad (D.11)$$

cuja solução é:

$$\nu = cT \quad (\text{D.12})$$

Substituindo-se a Equação D.12 na Equação D.10, tem-se que:

$$c = \frac{1}{E_d} \quad (\text{D.13})$$

e, portanto:

$$\nu(T) = \frac{T}{2E_d}, \text{ para } 2E_d < T < E_c \quad (\text{D.14})$$

O limite superior é definido pela energia de corte eletrônica E_c . Quando um PKA nasce com energia $T > E_c$, o número de deslocamentos é $\nu(T) = \frac{E_c}{2E_d}$ para $T > E_c$.

ANEXO E – SEÇÕES DE CHOQUE DE DESLOCAMENTO
PARA O AÇO INOXIDÁVEL 18/10

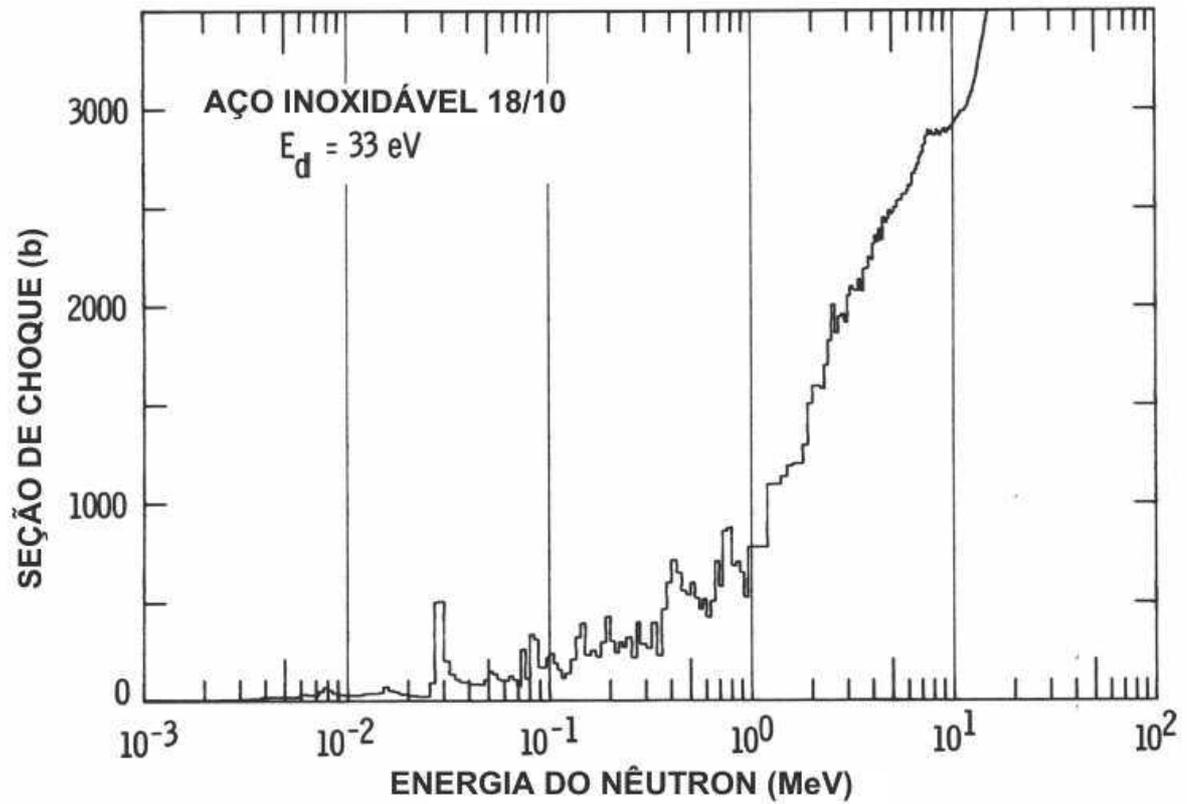


Figura 52 – Seção de choque de para o aço inoxidável 18/10 para nêutrons (40).

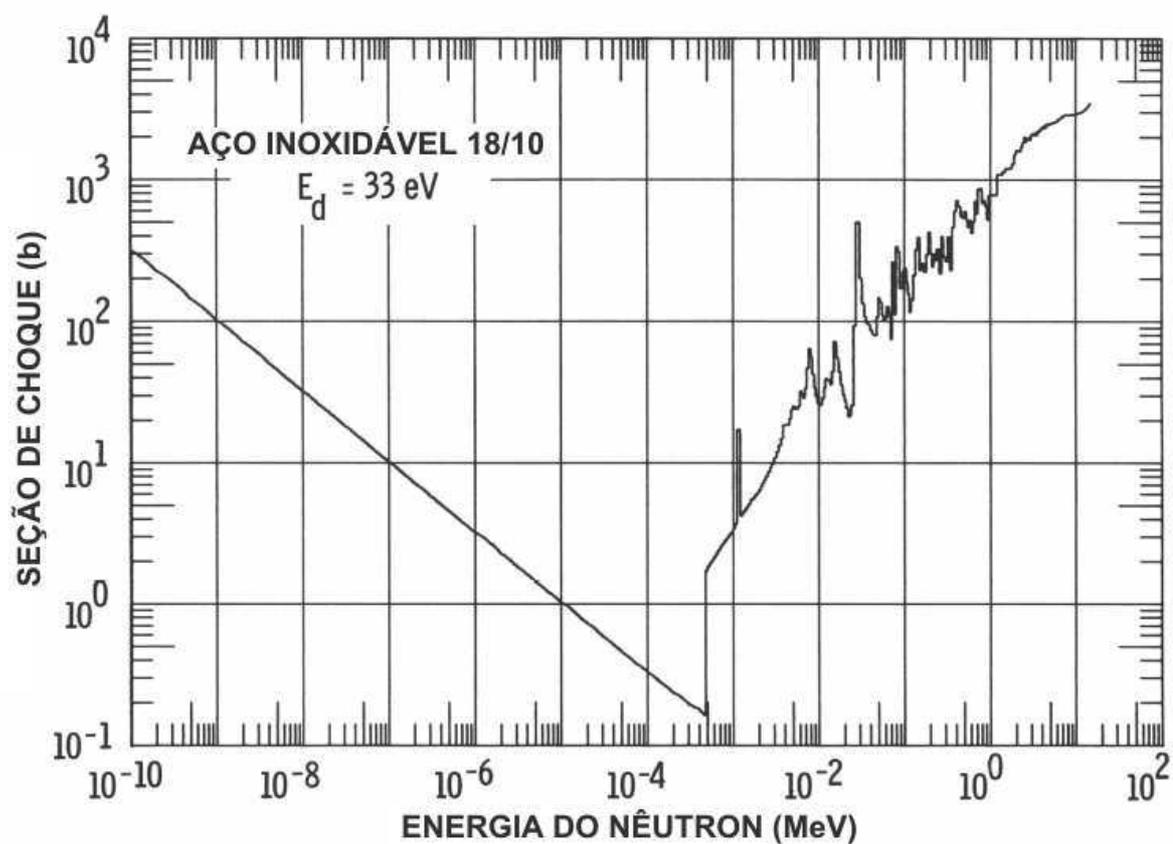


Figura 53 – Seção de choque de para o aço inoxidável 18/10 para nêutrons considerando a contribuição da reação de captura radioativa (40).