



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

---

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO  
EN INGENIERÍA**

**Estudio Neutrónico de un Reactor de Sales Fundidas**

**T E S I S**

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

**MAESTRO EN INGENIERÍA**

ENERGÍA – SISTEMAS ENERGÉTICOS

P R E S E N T A:

**FAVIOLA BELÉN GARCÍA BARRÓN**

DIRECTOR:

**DR. JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE**

México, D.F., 2012



INTRODUCCIÓN .....	2
CAPÍTULO 1.....	5
1. DESCRIPCIÓN DEL REACTOR DE SAL FUNDIDA .....	5
1.1. DESCRIPCIÓN DE LAS SALES.....	8
1.2. HASTELLOY G-30.....	15
CAPÍTULO 2.....	17
2. MONTE CARLO .....	17
2.1. INTRODUCCIÓN .....	17
2.2. Seguimiento de la historia del neutrón [1].....	17
2.2.1. Números Aleatorios y Pseudoaleatorios [1].....	19
2.2.2. Estimación del error [1].....	21
2.2.3. Medidas de Desviación [1] .....	22
2.2.4. Técnicas de Muestreo.....	23
2.2.5. Trayectoria de las partículas [2].....	24
2.2.6. Cálculos de criticidad [2].....	27
2.3. Descripción del código MCNPX 2.6.0 [3] .....	29
2.3.1 Cálculos de Quemado [4] .....	32
CAPÍTULO 3.....	38
3. MODELOS DEL MSR PARA ESPECTROS TÉRMICOS Y RÁPIDOS .....	38
3.1. MODELOS CON ESPECTRO TÉRMICOS .....	38
3.2. PRIMER MODELO REALIZADO .....	38
3.2.1 MODELO TÉRMICO .....	40
3.2.2 MODELOS EN ESPECTRO RÁPIDO.....	45
CAPITULO 4.....	51
4. QUEMADO DE COMBUSTIBLE Y LA EVOLUCIÓN DE ISÓTOPOS.....	51

4.1.	QUEMADO DE MODELOS TÉRMICOS.....	52
4.1.1	CONFIGURACIÓN $^{233}\text{U}$ -Th .....	52
4.1.2	CONFIGURACIÓN Pu- $\text{U}_{\text{emp}}$ .....	55
4.1.3	CONFIGURACIÓN $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ . .....	58
4.2.	QUEMADO DE MODELOS RÁPIDOS.....	61
4.2.1	CONFIGURACIÓN $^{233}\text{U}$ -Th .....	62
4.2.2	CONFIGURACIÓN Pu- $\text{U}_{\text{emp}}$ .....	64
4.2.3	CONFIGURACIÓN $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ . .....	67
4.3.	QUEMADO DE MODELOS CON COMBUSTIBLE GASTADO DE UN LWR EN LA SAL-COBIJA .....	70
4.3.1	MODELOS TÉRMICOS .....	71
4.3.2	MODELOS RÁPIDOS .....	74
4.3.3.	MODELOS CON ACTÍNIDOS SIN URANIO.....	77
	CONCLUSIONES .....	81
	APÉNDICE A.....	83
	DENSIDAD ATÓMICA .....	83
	DE UN MATERIAL PARTIENDO DE LA DENSIDA MASICA.....	83
	DOS MATERIALES A PARTIR DE LAS FRACCIONES DE PESO Y DENSIDAD .	84
	DOS MATERIALES CONTANDO CON EL PESO EN FRACCIONES Y LA DENSIDAD DE CADA MATERIAL .....	86
	DOS MATERIALES TENIENDO LAS FRACCIONES ATOMICAS Y LA DENSIDAD DE LA MEZCLA .....	86
	REFERENCIAS:.....	91

## ÍNDICE DE FIGURAS

---

Figura 1 Descripción esquemática de un MSR. [2].....	6
Tabla 1 Diferentes fluoruros según la configuración de sal-combustible y sal-cobija .....	9
Tabla 2 Porcentajes de material físil en el combustible de cada modelo y el material fértil en el sistema.....	14
Tabla 3 Elementos que contiene el Hastelloy G-30.....	16
Tabla 4 Propiedades del Hastelloy G-30.....	16
Tabla 5 Variación de la probabilidad en función de $\lambda$ .....	22
Figura 2 Trayectoria de una partícula en un medio. ....	25
Figura 3 Dirección de la partícula en coordenadas esféricas.....	26
Tabla 6 Tarjetas de superficie MCNPX 2.6.0. ....	31
Figura 4 Diagrama de iteración de los códigos MCNPX y CINDER90.....	32
Tabla 7 Productos de fisión contenidos en los conjuntos TIER.....	36
Figura 5 Representación del modelo transversal homogéneo de un MSR.....	39
Tabla 8 Porcentajes de materiales en el modelo homogéneo. ....	39
Figura 6 Representación del modelo axial homogéneo de un MSR.....	40
Figura 7 Representación del modelo Térmico de un MSR. ....	41
Figura 8 . Efecto sobre la reactividad al utilizar $U_{empobrecido}$ y $U_{natural}$ en el modelo térmico...	42
Figura 9 . Efecto sobre la $K_{eff}$ al variar el factor de moderación para el modelo térmico en la configuración Pu- $U_{emp}$ . ....	43
Tabla 9 Uranio natural y uranio empobrecido. ....	43
Figura 10 Efecto sobre la reactividad de diferentes combustibles en los modelos térmicos de un MSR. ....	44
Figura 11 . Sección eficaz de fisión $^{239}\text{Pu}$ (verde), $^{233}\text{U}$ (rojo) y $^{235}\text{U}$ (azul). ....	45
Figura 12 Efecto de la razón de moderación sobre la $K_{eff}$ para la configuración $^{233}\text{U}$ -Th, modelo rápido en un arreglo de cilindros.....	46
Figura 13 Representación geométrica del modelo Rápido de un MSR.....	47
Figura 14 Variación de la $K_{eff}$ al modificar el volumen de la sal-cobija. ....	48
Figura 15 Diseño de las sales separadas en un MSR, con $^{233}\text{U}$ y Th .....	49
Tabla 10 Porcentajes de material físil en combustible de cada modelo térmicos y rápidos en la sal-combustible.....	50
Tabla 11 Resultados obtenidos en modelos térmicos y rápidos, y el factor de multiplicación de neutrones en cada caso. ....	50
Figura 16 Quemado de la sal-combustible en la configuración $^{233}\text{U}$ -Th en el modelo térmico. ....	53

Figura 17 Quemado de la sal-cobija, configuración $^{233}\text{U}$ -Th, térmico.....	54
Figura 18 Evolución de la $K_{\text{eff}}$ durante el quemado en la configuración $^{233}\text{U}$ -Th modelo térmico.....	55
Figura 19 Quemado de la sal-combustible en la configuración Pu- $U_{\text{emp}}$ , modelo térmico. ....	56
Figura 20 Quemado en sal-cobija de la configuración Pu- $U_{\text{emp}}$ modelo térmico. ....	57
Figura 21 La variación de la $K_{\text{eff}}$ durante el quemado en la configuración de Pu- $U_{\text{emp}}$ .....	58
Figura 22 Quemado de la sal-combustible en la configuración $^{235}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ , térmico.....	59
Figura 23 Quemado de la sal-cobija de la configuración Pu- $U_{\text{emp}}$ , en el modelo térmico.....	60
Figura 24 . Cambio de la $K_{\text{eff}}$ durante los pasos de quemado en la configuración $^{235}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ , modelo térmico.....	61
Figura 25 Figura. Modelo rápido del quemado de la sal-combustible en la configuración $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ .....	62
Figura 26 Quemado en la Sal-Cobija, en espectro rápido y la configuración $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ .....	63
Figura 27 Evolución de la $K_{\text{eff}}$ durante el quemado en la configuración $^{233}\text{U}$ -Th modelo térmico.....	64
Figura 28 Quemado de la Sal-Combustible de la configuración $^{239}\text{Pu}$ - $U_{\text{emp}}$ modelo rápido. ...	65
Figura 29 Quemado de la Sal-cobija en la configuración $^{239}\text{Pu}$ - $U_{\text{emp}}$ , modelo rápido. ....	66
Figura 30 Evolución de la $K_{\text{eff}}$ durante el proceso de quemado. ....	67
Figura 31 Quemado de la Sal-Combustible de la configuración $^{235}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ en modelo rápido. ....	68
Figura 32 Quemado de la Sal-Cobija de la configuración $^{235}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ , modelo rápido.....	69
Figura 33 Evolución de la $K_{\text{eff}}$ , de la configuración $^{238}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ , en modelo rápido.....	70
Tabla 12 Proporción de los isótopos del combustible gastado de un LWR.....	71
Figura 34 Evolución de actínidos en la sal-cobija, en una configuración $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ , modelo térmico con combustible gastado de un LWR.....	72
Figura 35 Quemado de la sal-cobija en la configuración $^{235}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ , modelo térmico con combustible gastado de un LWR. ....	73
Figura 36 Quemado de la sal-cobija en la configuración $^{239}\text{Pu}$ - $U_{\text{emp}}$ , modelo térmico con combustible gastado de un LWR. ....	74
Figura 37 Quemado de la sal-cobija en la configuración $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ , modelo rápido con combustible gastado de un LWR. ....	75
Figura 38 Quemado de la sal-cobija en la configuración $^{235}\text{U}$ - $U_{\text{emp}}$ modelo rápido con combustible gastado de un LWR. ....	76
Figura 39 Quemado de la sal-cobija en la configuración $^{239}\text{Pu}$ - $U_{\text{emp}}$ , modelo rápido con combustible gastado de un LWR. ....	77
Tabla 13 Proporción de nucleídos en el combustible gastado de un LWR sin considerar al uranio.....	78

Figura 40 Quemado de la sal-cobija de la configuración $^{235}\text{U-U}_{\text{emp}}$ en su modelo térmico, con combustible gastado de un LWR, sin uranio.....	79
Figura 41 Quemado de la sal-cobija en la configuración $^{235}\text{U-U}_{\text{emp}}$ en modelo rápido, con combustible gastado de un LWR, sin considerar al uranio.....	80

## ÍNDICE DE TABLAS

---

Tabla 1 Diferentes fluoruros según la configuración de sal-combustible y sal-cobija	9
Tabla 2 Porcentajes de material físil en el combustible de cada modelo y el material fértil en el sistema.	14
Tabla 3 Elementos que contiene el Hastelloy G-30	16
Tabla 4 Propiedades del Hastelloy G-30	16
Tabla 5 Variación de la probabilidad en función de $\lambda$	22
Tabla 6 Tarjetas de superficie MCNPX 2.6.0.	31
Tabla 7 Productos de fisión contenidos en los conjuntos TIER.	36
Tabla 8 Porcentajes de materiales en el modelo homogéneo.	39
Tabla 9 Uranio natural y uranio empobrecido.	43
Tabla 10 Porcentajes de material físil en combustible de cada modelo térmicos y rápidos en la sal-combustible.	50
Tabla 11 Resultados obtenidos en modelos térmicos y rápidos, y el factor de multiplicación de neutrones en cada caso.	50
Tabla 12 Proporción de los isótopos del combustible gastado de un LWR.	71
Tabla 13 Proporción de nucleídos en el combustible gastado de un LWR sin considerar al uranio.	78



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

### AGRADECIMIENTOS

Dedico el presente trabajo a mi familia y amig@s, gracias por el apoyo constante, la paciencia y los consejos que he recibido.

## INTRODUCCIÓN

---

Actualmente, la energía nuclear participa con el 14% de la generación eléctrica mundial; cerca del 5% en México. Sus costos son competitivos con las otras tecnologías de producción eléctrica y en algunos países es la opción de más bajo costo. Asimismo, es una de las fuentes de energía con las emisiones de gases de efecto invernadero más bajas. La tecnología de los reactores nucleares ha ido evolucionando, y hoy en día están en funcionamiento mayoritariamente los reactores de la Generación II. Los de la Generación I fueron los primeros reactores prototipo que operaron entre 1950 y 1970. En el 2000 empezaron a construirse y a entrar en operación los reactores de la Generación III, los cuales son versiones con mejoras tecnológicas que evolucionaron a partir de los reactores de la Generación II. A nivel de investigación y desarrollo, se trabaja en el diseño de los reactores innovadores de Generación IV y en ciclos de combustible avanzado para el futuro más allá del 2030. Son ocho las metas de la Generación IV y se enfocan en cuatro temas: I. (1. Promover la disponibilidad a largo plazo del combustible nuclear y 2. Minimizar los residuos nucleares y reducir las cargas de combustible, Es decir que éstas sean a largo plazo); II. Seguridad y confiabilidad (3. Tener una probabilidad y un grado muy bajos de daño al núcleo del reactor y 4. Eliminar la necesidad de respuesta de emergencia fuera del sitio); III. Economía (5. Costo de ciclo de vida más bajo que el de otras fuentes de energía y 6. Nivel del riesgo financiero comparable a otros proyectos), IV. Resistencia a la proliferación y protección física (7. Ruta muy poco atractiva para la desviación o el hurto de materiales usados en armas y 8. Protección física aumentada contra actos del terrorismo). Los reactores avanzados deben también ofrecer un verdadero potencial para aplicaciones compatibles con un uso ampliado de la energía nuclear, particularmente con la producción de hidrógeno o de hidrocarburos sintéticos, la desalación de agua de mar y la producción del calor de proceso.

Los seis conceptos de reactores nucleares que forman parte de la Generación IV son:

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

- 1) Reactor de Muy Alta Temperatura (Very High Temperature Reactor - VHTR). Opera en el espectro de neutrones térmico y un ciclo de combustible abierto.
- 2) Reactor Enfriado con Agua Supercrítica (Supercritical Water Cooled Reactor - SCWR). El ciclo de potencia utiliza como refrigerante agua supercrítica. Tiene alta eficiencia termodinámica y simplificación de equipos y componentes.
- 3) Reactor Rápido Enfriado por Plomo (Lead Fast Reactor – LFR). Opera en un espectro de neutrones rápido y un ciclo de combustible cerrado para la conversión eficiente de uranio fértil y la gestión de actínidos. Se prevé que el total de actínidos se reprocese en el ciclo de combustible. El sistema puede utilizar un refrigerante de metal líquido eutéctico de plomo o plomo/bismuto.
- 4) Reactor Rápido Enfriado por Sodio (Sodium Cooled Fast Reactor – SFR). Opera en un espectro de neutrones rápido y un ciclo cerrado del combustible con reciclado total de actínidos.
- 5) Reactor de Sales Fundidas (Molten Salt Reactor - MSR) Opera en un espectro de neutrones térmico a rápido, y utiliza un ciclo cerrado del combustible, para la utilización eficiente del plutonio y de los actínidos menores. El combustible del MSR es una mezcla líquida "circulante" de fluoruros de sodio, zirconio y uranio.
- 6) Reactor Rápido Enfriado por Gas (Gas Cooled Fast Reactor – GFR). Funciona con un ciclo directo de turbinas de gas, usa gas helio como refrigerante. Opera en el espectro de energías de neutrones rápidos, ciclo cerrado de combustible, plutonio como material fisible y tiene un alto rendimiento termodinámico.

De entre estos reactores, en esta tesis seleccionamos investigar y estudiar el reactor de sales fundidas, por sus características de flexibilidad en el manejo del combustible, y por su capacidad para operar en un espectro de neutrones térmico o rápido.

El objetivo de este trabajo de investigación es realizar un análisis neutrónico del MSR, enfocado al estudio de las condiciones de criticidad, que presenta principalmente con la variación de la configuración de combustible, analizando la versatilidad de esta tecnología para poder operar en espectro térmico y rápido, además del análisis del quemado de combustible y la evolución de los actínidos del sistema para efectos de cría de combustible; aspecto muy importante en esta

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

tecnología, ya que se puede contar con combustible nuevo durante la operación y favorecer aspectos económicos en recarga de combustible nuevo.

La estructura de esta tesis es la siguiente:

En el Capítulo 1 se presenta una descripción de la tecnología del Molten Salt Reactor y sus principales características.

El Capítulo 2 se avoca a la descripción del Método Monte Carlo para el modelar el transporte de neutrones y así mismo al código MCNPX el cual se utilizó en este trabajo.

El Capítulo 3 se refiere a la descripción física y geométrica de los modelos térmicos y rápidos y sus condiciones de operación y criticidad.

En el capítulo 4 se aborda la descripción del quemado del combustible de cada modelo y en sus diferentes configuraciones de combustible para el análisis de la evolución de actínidos.

## CAPÍTULO 1

---

### 1. DESCRIPCIÓN DEL REACTOR DE SAL FUNDIDA

El Reactor de Sal Fundida (MSR, por sus siglas en inglés), es un reactor nuclear considerado dentro de la generación IV, de alta temperatura, que puede ser utilizado para la cogeneración (por ejemplo de hidrógeno) y para cría de combustible. Una de sus características principales, que lo distingue de otras tecnologías, es el estado físico del combustible; ya que se encuentra en estado líquido, compuesto principalmente de fluoruro de litio (LiF), fluoruro de torio ( $\text{ThF}_4$ ) y tetra fluoruro de uranio  $\text{UF}_4$ . Esta mezcla de sales fluye a través de unos canales dentro del núcleo, el cual puede estar compuesto de grafito o hastelloy (dependiendo de la configuración en la que esté operando). Con grafito para el caso de un espectro térmico de los neutrones, y con hastelloy para en el caso de un espectro rápido. La energía producida por las fisiones va a ser transportada en forma de calor por la sal-combustible. Esta energía va a ser transferida a un sistema secundario de generación, a través de un sistema de refrigeración de un intercambiador de calor intermedio, y después a través de un intercambiador de calor de conversión de energía, alcanzando una temperatura de 700 o 800 °C y una potencia de hasta 1000 MW [1].

En el sistema del ciclo cerrado del combustible se puede obtener un quemado eficiente de plutonio y actínidos menores. Los productos de fisión son eliminados de manera continua y los actínidos pueden ser reciclados totalmente. Por lo que el combustible líquido del MSR puede permitir además la adición de actínidos como el plutonio. Los actínidos y la mayoría de los productos de fisión forman fluoruros en el líquido refrigerante al estar unidos a las sales fundidas, estas sales presentan excelentes características de transferencia de calor y una presión de vapor muy baja lo que reduce las tensiones (vibraciones) en la tubería.

En comparación con los reactores de combustible sólido, este sistema cuenta con inventarios más bajos de material fisible, además, puesto que las sales son tratadas en línea, los daños por la radiación son limitados. Presenta una composición isotópica

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

homogénea del combustible en el reactor; estas características pueden permitir al MSR tener capacidades únicas y una economía competitiva para la generación de actínidos y ampliar o prolongar la disponibilidad de los recursos del nucleares que son utilizados en los diferentes tipos de reactores que están actualmente operando o que están siendo desarrollados.

Otra de sus características sobresaliente es la temperatura de ebullición de las sales, la cual está alrededor de los 1400 °C, por lo cual al llegar a temperaturas de entre 700 y 800 °C no alcanza la ebullición; lo que representa una medida de seguridad inherente del reactor. Los productos de fisión pueden ser retirados de la sal-combustible, mediante un proceso en línea, en el circuito primario (ver Figura 1).

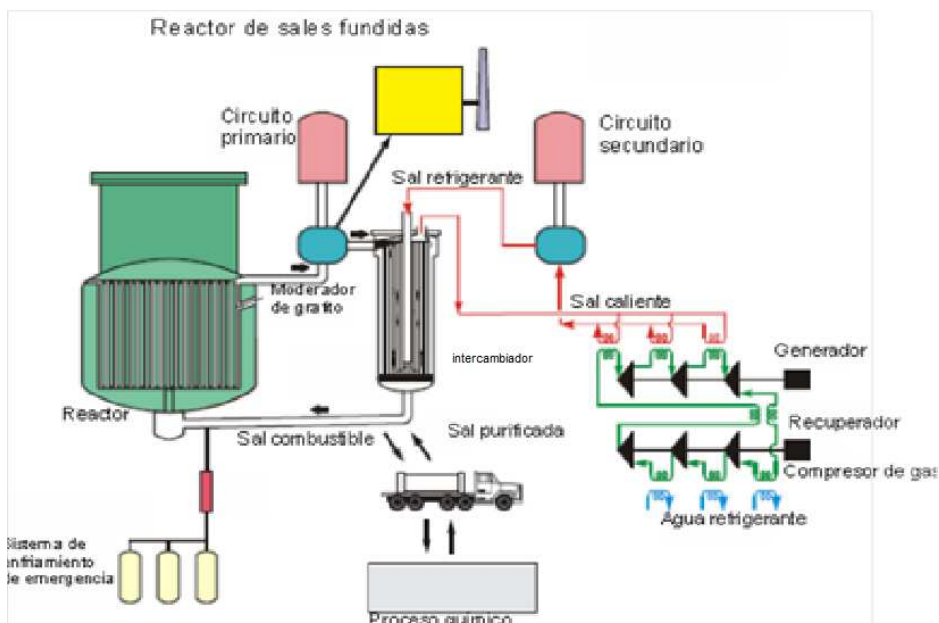


Figura 1 Descripción esquemática de un MSR. [2]

Las características de seguridad y los atributos neutrónicos de los reactores de sales fundidas son únicos de los reactores de combustible líquido. Al presentar un proceso de abastecimiento del combustible de manera continua, en línea, permite tener un exceso de reactividad baja, un bajo inventario de productos de fisión y un término de fuente pequeño. Estos factores hacen que la probabilidad de un accidente grave sea

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

baja, en esta tecnología no existe un accidente en que implique la fundición del combustible, puesto que éste es el estado del mismo, ya que las sales fundidas son estables, no reactivas. Asimismo, son muy eficaces en la transferencia de calor; el fluido opera a temperaturas altas, presiones bajas, y son altamente compatibles con los materiales de la estructura que lo sostiene.

Los reactores de combustible líquido (Fluid-Fuel Reactors, FFR), como el MSR, poseen características de seguridad únicas y deseables [3]. Algunas de estas características son: estructura simple, esto es aplicable especialmente para el enfriamiento externo. El FFR puede tener la remoción continua de los productos de fisión, esto evita tener el exceso de reactividad para compensar el quemado y el envenenamiento del combustible. La seguridad inherente y la facilidad de control se deben al coeficiente de reactividad por temperatura, altamente negativo, asociado a la expansión del líquido cuando es calentado, que puede resultar en la expulsión de combustible del núcleo lo cual reduce la reactividad. Lo anterior combinado con el bajo exceso de reactividad, hacen que el FFR pueda ser auto-controlado. El apagado total final se logra por el drenado del combustible, el cual se da por gravedad, garantizando la subcriticidad en los tanques de drenado. Estas características han sido demostradas en la operación del reactor experimental de sal fundida (MSRE, por sus siglas en inglés) [3].

Uno de los problemas de seguridad asociado con el FFR son las posibles fluctuaciones de la reactividad causada por cambios en la densidad o en la concentración del combustible, por ejemplo, burbujeo de la sal. Una de las preocupaciones principales en el MSR es la presencia de gases disueltos en burbujas y su colapsamiento. Para asegurar que esto no ocurra, se deben remover de manera continua los productos de fisión gaseosos, generalmente por medio de aspersiones.

Las sales fundidas son químicamente estables. No reaccionan rápidamente con la humedad o el aire. Su inercia química impide accidentes que pudieran ser debidos a interacciones químicas; no existe peligro de incendio o de explosión, además también tienen compatibilidad y no son corrosivos con los materiales estructurales.

Las sales fundidas, consideradas para el MSR, son estables a altas temperaturas y a bajas presiones; esta característica permite una alta eficiencia sin exigencias extremas

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

de seguridad sobre los materiales estructurales. Los pequeños derrames no son una fuente de un accidente mayor, ya que no hay reacciones violentas en el evento de un derrame; la sal se congela y no se extiende, y se puede recuperar sin mayor problema. El proceso de congelación es inherente y pasivo. En caso de quedar alguna fuente de calor residual, la sal permanecerá fundida, hasta alcanzar una configuración en la cual el equilibrio termodinámico la lleve a la congelación.

El MSR cuenta con diseños de válvulas de congelación en lugares críticos o donde se considere necesario. Las válvulas de congelación pueden ser secciones ordinarias de tubería que son expuestas a corrientes de enfriamiento, de tal manera que se produce un tapón congelado que bloquea el flujo y actúa como una válvula [3]. Cuando una de estas válvulas tiene una función de seguridad, como en el drenado del combustible a los tanques de almacenamiento, es importante diseñarlas de tal manera que el flujo sea impulsado por la gravedad. La válvula de congelamiento en sí puede ser diseñada de manera tal que cuando la sal sobrepasa una temperatura predeterminada, el calor anula el enfriamiento, funde el tapón congelado y abre la válvula. Tal disposición es pasiva e inherentemente segura.

### 1.1. DESCRIPCIÓN DE LAS SALES

En el concepto moderno de los reactores de combustible líquido (LFR; por sus siglas en inglés), se utiliza principalmente uranio y torio disueltos en las sales de fluoruro de litio y de berilio (según sea el caso). Estas sales son químicamente estables e impermeables a los daños de la radiación, y no son corrosivas para los materiales que las contienen. Esto es debido a su capacidad de tolerar la radiación, cuenta con excelentes propiedades a alta temperatura, y como se mencionó antes, la recarga de combustible se puede dar de manera continua.

El LFR está diseñado para tomar ventaja de la física del ciclo del isótopo que se esté manejando como cría, los ciclos pueden ser principalmente de  $^{232}\text{Th}$  y  $^{238}\text{U}$ . El fluido en el núcleo no está presurizado, lo cual es una ventaja desde el punto de vista de seguridad, puesto que en caso de un accidente las sales no saldrían expulsadas, con la consecuente liberación de radiación. Las sales no se pueden fundir debido a una



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

reacción descontrolada. Además, el estado en el que se encuentran las sales y el combustible, proporciona la facilidad de incorporar sistemas de seguridad pasivos, como ya se mencionó anteriormente.

En este trabajo de investigación, la mezcla de sales que se utilizó para la creación de los modelos de un MSR está compuesta principalmente de LiF, UF<sub>4</sub> y ThF<sub>4</sub>, para una configuración donde el isótopo fisionable es el <sup>233</sup>U y el fértil el <sup>232</sup>Th. En muchos estudios documentados en artículos y revistas, se menciona la participación del BeF<sub>2</sub>, ya que el Berilio es un material que aumenta la eficiencia en la transferencia de calor. En este trabajo para fines prácticos no se incluyó en los materiales, ya que el Berilio no afecta a la población de neutrones presente en el núcleo, es decir, no es considerado como un veneno o parásito dentro del sistema, además el porcentaje del BeF<sub>2</sub> que se considera en la mezcla de las sales es menor al 2%.

A continuación, en la Tabla 1 se presentan los diferentes fluoruros, según la configuración de combustible-cobija para cada caso estudiado:

	<b>Sal-combustible</b>	<b>Sal-cobija</b>
Sales (fluoruros)	LiF, <sup>233</sup> UF <sub>4</sub> y ThF <sub>4</sub>	LiF y ThF <sub>4</sub>
Sales (fluoruros)	LiF, <sup>235</sup> UF <sub>4</sub> y <sup>emp</sup> UF <sub>4</sub>	LiF y <sup>emp</sup> UF <sub>4</sub>
Sales (fluoruros)	LiF, PuF <sub>4</sub> y <sup>emp</sup> UF <sub>4</sub>	LiF y <sup>emp</sup> UF <sub>4</sub>

Tabla 1 Diferentes fluoruros según la configuración de sal-combustible y sal-cobija

Cada una de las combinaciones lleva material fisionable más material fértil; es muy importante el porcentaje que tiene cada una de estas sales que estará presente en cada modelo. Se debe de tomar en cuenta los fluoruros presentes de cada sal y el

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

uranio empobrecido, ya que éste también contiene una fracción de  $^{235}\text{U}$  y  $^{238}\text{U}$ , por lo cual se debe de tomar en cuenta en el cálculo.

Como ya se mencionó, sobre los porcentajes que se le asignaron a cada fluoruro, para poder realizar el archivo de entrada correspondiente en el código MCNPX [3, cap. 2], se realizaron los cálculos de cada material presente en la mezcla. Para esto se utilizó la ecuación (2) [Ver Apéndice A], para obtener la densidad atómica de cada material presente en la mezcla, partiendo de un valor conocido para la densidad de la sal-combustible y la sal-cobija:  $4.05 \text{ g/cm}^3$  [2]

Por ejemplo, en el cálculo de la sal-combustible donde se cuenta con los siguientes porcentajes: 78.3% LiF, 20% ThF<sub>4</sub> y 0.7%  $^{233}\text{UF}_4$ , es la configuración usada para el modelo térmico  $^{233}\text{U-Th}$  [2]; el cálculo se realiza de la siguiente manera:

$$N_{\text{UF}_4} = \frac{w_{\text{UF}_4} \times \rho_{\text{fuel}} \times N_{\text{av}}}{100 \times \text{WA}_{\text{UF}_4}} \dots\dots\dots(1.1)$$

Donde

$N_{\text{UF}_4} \equiv$  Es la densidad atómica del  $\text{UF}_4$

$w_{\text{UF}_4} \equiv$  Es el porcentaje que corresponde de  $\text{UF}_4$  en la mezcla

$\rho_{\text{fuel}} \equiv$  Es la densidad de la sal (mezcla)

$N_{\text{av}} \equiv$  Número de Avogadro

$\text{WA}_{\text{UF}_4} \equiv$  Peso atómico del  $\text{UF}_4$

Al sustituir los respectivos valores para el tetra fluoruro de uranio se tiene lo siguiente:

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

$$N_{UF_4} = \frac{0.7 \times 4.05 \times 0.6022}{100 \times (233.039627 + 4 \times 17.002095)}$$

$$N_{UF_4} = 5.6 \times 10^{-5} \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.2)$$

Este valor es la densidad atómica de <sup>233</sup>UF<sub>4</sub> presente en la mezcla de sales. Para obtener un valor de la densidad atómica del <sup>233</sup>U y del <sup>17</sup>F se aplica la misma expresión, como sigue:

$$N_U = N_{UF_4} = 5.6 \times 10^{-5} \frac{at}{b - cm}$$

$$N_F = 4 \times N_{UF_4} = 4 \times 5.6 \times 10^{-5} = 2.26839 \times 10^{-4} \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.3)$$

En el caso de la densidad atómica del <sup>233</sup>U, es un valor de entrada (input) en el código MCNPX, por esta razón es importante su cálculo. En el caso del <sup>17</sup>F se debe de tomar en cuenta el fluoruro presente con el <sup>7</sup>Li y el <sup>232</sup>Th, respectivamente. Para lo cual también se aplica la misma ecuación.

Ahora se realiza el cálculo del fluoruro de litio:

$$N_{LiF} = \frac{79.3 \times 4.05 \times 0.6022}{100 \times (7.016004 + 17.002095)}$$

$$N_{LiF} = 0.0805249 \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.4)$$

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

Nuevamente para el cálculo del fluoruro y del litio respectivamente se tiene

$$N_{Li} = N_{LiF} = 0.0805249 \frac{at}{b - cm}$$

$$N_F = N_{LiF} = 0.0805249 \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.5)$$

Para el fluoruro de torio se tiene el mismo procedimiento

$$N_{ThF_4} = \frac{20 \times 4.05 \times 0.6022}{100 \times (232.038049 + 4 \times 17.002095)}$$

$$N_{ThF_4} = 0.00162569 \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.6)$$

Nuevamente el torio y el fluoruro

$$N_{Th} = N_{ThF_4} = 0.00162569 \frac{at}{b - cm}$$

$$N_F = 4 \times N_{ThF_4} = 0.00162569 \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.7)$$

Ahora que ya se tienen todas las densidades atómicas de cada material de los presentes en la sal, en el caso del fluoruro que se encuentra en las tres moléculas: el tetra fluoruro de uranio, fluoruro de torio y el fluoruro de litio, se suman para tener

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

un fluoruro total de la mezcla, y así asignarlo en el respectivo archivo de entrada en MCNPX.

$$N_{F_{total}} = 2.26839 \times 10^{-4} + 0.0805249 + 0.00162569$$

$$N_{F_{total}} = 0.0872545 \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.8)$$

Se presenta el mismo procedimiento para obtener las densidades atómicas para las sales cuya composición es: 77.5% LiF y 22.5 ThF<sub>4</sub>. De igual manera que en la sal combustible se tiene una densidad de 4.05 g/cm<sup>3</sup>.

$$N_{LiF} = \frac{77.5 \times 4.05 \times 0.6022}{100 \times (7.016004 + 17.002095)}$$

$$N_{Li} = 0.0786971 \frac{at}{b - cm} \dots\dots\dots (1.9)$$

$$N_F = 0.0786971 \frac{at}{b - cm}$$

En el fluoruro de torio se obtiene lo siguiente

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

$$N_{ThF_4} = \frac{22.5 \times 4.05 \times 0.6022}{100 \times (232.038049 + 4 \times 17.002095)}$$

$$N_{Th} = N_{ThF_4} = 0.0018289 \frac{at}{b - cm}$$

..... (1.10)

$$N_F = 4 \times N_{ThF_4} = 0.0073156 \frac{at}{b - cm}$$

Estos cálculos se realizan para cada configuración de combustible. El porcentaje correspondiente al fluoruro del isótopo físil se determinó con las diferentes pruebas que se hicieron en MCNPX, para lograr el valor del factor efectivo de multiplicación de neutrones deseado, este valor es aproximadamente de 1.05 (lo que se busca), por ejemplo, en el caso que se muestra, se obtuvo un valor de  $^{233}\text{UF}_4$  de 0.7%.

En las pruebas hechas con las diferentes combinaciones de combustible, quedan de la siguiente manera (Tabla 2):

MSR	Térmico	Rápido
Combustible / material fértil	0.7% de $\text{U}^{233}\text{F}_4$ / $\text{ThF}_4$	2.1% de $\text{U}^{233}\text{F}_4$ / $\text{ThF}_4$
Combustible / material fértil	1.5% de $\text{U}^{235}\text{F}_4$ / $\text{U}_{\text{empobrecido}}\text{F}_4$	5.2% de $\text{U}^{235}\text{F}_4$ / $\text{U}_{\text{empobrecido}}\text{F}_4$
Combustible / material fértil	1.5% de $\text{PuF}_4$ / $\text{U}_{\text{empobrecido}}\text{F}_4$	5.1% de $\text{PuF}_4$ / $\text{Pu} / \text{U}_{\text{empobrecido}}\text{F}_4$

Tabla 2 Porcentajes de material físil en el combustible de cada modelo y el material fértil en el sistema.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

En los casos en los que se tiene  $U_{\text{empobrecido}}$  como material fértil, se asignaron los porcentajes correspondientes al  $^{235}\text{U}$  y  $^{238}\text{U}$  presentes en el uranio empobrecido: 99.72% de  $^{238}\text{U}$  y 0.28% de  $^{235}\text{U}$ , ya que en la naturaleza no se encuentra el  $^{238}\text{U}$  solo como tal. Estas proporciones se asignaron al 22.5% en la cobija, de acuerdo a la ecuación 4 (ver Apéndice A).

### 1.2. HASTELLOY G-30

A lo largo de muchas investigaciones [4] se ha desarrollado una multitud de enfoques innovadores para las aleaciones a base de níquel, junto con los avances en la ingeniería de materiales, y un mejor conocimiento en cuanto a las características de la corrosión, conduciendo así a una nueva generación de las aleaciones Hastelloy G-30, la serie G de alta resistencia a la corrosión (ver Tabla 3). Es un material que presenta estabilidad térmica y una importante resistencia al deterioro; como ya se mencionó, su resistencia mejorada es debido a una presencia superior de cromo, éste es de mucha importancia para obtener una buena soldadura del material.

Se han llevado a cabo numerosas pruebas de laboratorio con el fin de obtener una comparación del rendimiento y la resistencia del G-30 con otros modelos de Hastelloy, aceros inoxidable y aleaciones que tienen como base el níquel. En las pruebas de corrosión con ácido fosfórico, la aleación G-30 es la que presentó mejor resistencia a la corrosión. De igual manera, cuando se probó en ácidos obtenidos a partir de diferentes plantas, esta aleación muestra consistentemente las tasas más bajas de corrosión [4]. En la Tabla 4 se presentan las principales propiedades del Hastelloy G-30.

Elemento	Porcentaje
Ni	43%
Cr	29.75%
Fe	15%
Mo	5%
Co	4.5%
W	2.75%

Tabla 3 Elementos que contiene el Hastelloy G-30

<b>Densidad</b>	<b>8.22 g/cm<sup>3</sup></b>
Coeficiente de expansión	12.8µm/m°C (20-100°C)
Módulo de rigidez	77.6 KN/mm <sup>2</sup>
Punto de fusión	1399°C
Módulo de elasticidad	202 KN/mm <sup>2</sup>

Tabla 4 Propiedades del Hastelloy G-30

REFERENCIAS:

1. David LeBlanc, Ottawa Ontario “Molten Salt Reactors: A New Vision for a Generation IV Concept” Physics Department, Carleton University (2010)
2. Charles W. “Forsberg An Advanced Molten Salt Reactor Using High-Temperature Reactor Technology”, Conference Paper Number: 4152 Session: 3.06; Topical Area: 3 Abstract Prepared for 2004 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP -04)
3. [http://www.thoriumsingapore.com/content/index.php?option=com\\_content&view=article&id=50&Itemid=37](http://www.thoriumsingapore.com/content/index.php?option=com_content&view=article&id=50&Itemid=37)
4. HASTELLOY G-30 alloy, Haynes International Technical Information.



## CAPÍTULO 2

---

### 2. MONTE CARLO

#### 2.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo se discutirá el método de Monte Carlo para el análisis del transporte de neutrones, y el código MCNPX que fue utilizado en este trabajo.

De forma general se puede mencionar que, por oposición a los métodos de cálculo numérico puramente determinístico, el de Monte Carlo es un método estadístico que se aplica relacionando el problema físico o matemático en cuestión con un esquema estocástico realizable, que presenta una variable aleatoria cuya esperanza matemática es la solución del problema, de tal forma que, en un número suficientemente grande de realizaciones de este proceso, pueda deducirse una estimación estadística de la solución.

Para la aplicación que nos ocupa en esta tesis, el método Monte Carlo es capaz de reproducir a detalle la distribución de los neutrones en el sistema, la criticidad del mismo, y la evolución isotópica del combustible. Para esto, utiliza funciones de distribución de probabilidad, secciones eficaces y ángulos de dispersión, para estimar la trayectoria aleatoria de las partículas en el medio. Las interacciones de los neutrones con el medio son muestreadas y reproducidas como en una situación físicamente real.

#### 2.2. Seguimiento de la historia del neutrón [1]

El método de Monte Carlo fue introducido en la investigación nuclear en el año 1942 por un grupo de físicos y matemáticos, particularmente Von Neumann y Ulam, y aunque ésta no era una cuestión nueva, puesto que los estadísticos lo conocían desde

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

hacia ya más de cincuenta años bajo el nombre de Teoría de Estimación de Parámetros, constituía, con la colaboración indispensable de las máquinas de cálculo electrónicas, una nueva herramienta para tratar ciertos problemas.

Al proceso estadístico realizable que hay que asociar a un problema planteado, es evidente en algunos casos, cuando el proceso a estudiar es de naturaleza estadística, por ejemplo el estudio del blindaje de un reactor.

En este caso, el problema puede estar planteado en los términos siguientes: dada la lámina de un material de espesor conocido, averiguar qué fracción de los neutrones que entran por una de sus caras sale por la otra; naturalmente se suponen conocidas la distribución angular y energética de los neutrones incidentes en la primera cara de la lámina, y las secciones eficaces del material para las diversas energías en juego.

La aplicación de método de Monte Carlo a este problema, consistirá en realizar un gran número de biografías de neutrones, para obtener una estimación estadística de la transparencia de la lámina para la distribución de neutrones dada.

El procedimiento para hacer una de estas biografías será el siguiente.

- 1) Determinar mediante un juego de azar la energía inicial del neutrón incidente y mediante el mismo procedimiento determinar:
- 2) Ángulo de incidencia.
- 3) Punto donde sufre la primera colisión.
- 4) Tipo de colisión. Si esta colisión resultara ser de absorción, la biografía se habría terminado, si se trata de una dispersión habría que determinar a continuación:
- 5) Energía y dirección del neutrón después de la colisión, y proseguir hasta que el neutrón fuera absorbido o saliera por las dos caras de la lámina.

Existen algunos casos en el que el esquema estocástico realizable no es evidente, y gran parte de la dificultad del problema está en tener la idea de un proceso conveniente; como un ejemplo se puede dar el caso particularmente sencillo de calcular el valor de una integral. Sea:

$$\theta = \int_0^1 f(u) du \dots\dots\dots (2.1)$$

Donde  $0 \leq f(u) \leq 1$  (cualquier otro caso puede reducirse a éste).

Definamos dos funciones aleatorias independientes  $U$  y  $V$  de ley uniforme en el intervalo  $(0,1)$ , y sea  $X$  otra variable aleatoria que toma el valor 1 si  $U \leq f(V)$ , o 0 si  $U > f(V)$ .

La esperanza matemática de  $X$  es:

$$\bar{X} = 1 \cdot P_r(U \leq f(V)) + 0 \cdot P_r(U > f(V)) \dots\dots\dots (2.2)$$

Es decir,

$$\bar{X} = \int_0^1 f(V) dV \dots\dots\dots (2.3)$$

Por lo tanto, el procedimiento a seguir consistirá en elegir un valor para  $U$ , otro para  $V$  y el correspondiente  $f(V)$ , comparar  $U$  con  $f(V)$ , y acumular una unidad si  $U \leq f(V)$ , repetir el proceso un número de veces suficientemente elevado, y dividir la suma total acumulada por dicho número.

### 2.2.1. Números Aleatorios y Pseudoaleatorios [1]

Números aleatorios: una sucesión de números al azar; existen diversas publicaciones con conjuntos de números aleatorios, reportados en tablas [5].

Como un ejemplo del empleo de estas tablas, se considerará una situación en la cual siguiendo la historia de un neutrón, el cual ha sufrido una colisión con un átomo, se

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

trata de determinar si tal colisión fue de dispersión elástica, inelástica o de absorción. Las probabilidades de que ocurran cada uno de estos tres procesos son respectivamente:

$$P_e = \frac{\sigma_e}{\sigma_t}; \quad P_i = \frac{\sigma_i}{\sigma_t}; \quad P_a = \frac{\sigma_a}{\sigma_t}, \quad \dots\dots\dots (2.4)$$

Donde  $\sigma_t = \sigma_e + \sigma_i + \sigma_a$ . Las distribuciones de probabilidad son:

$$P_1 = P_e, \quad P_2 = P_e + P_i, \quad P_3 = P_e + P_i + P_a = 1. \quad \dots\dots\dots (2.5)$$

En las tablas mencionadas se elegiría un número al azar comprendido entre 0 y 1, y si tal número está comprendido, por ejemplo entre  $P_2$  y  $P_3$ , se dice que el proceso fue de absorción.

Si la densidad de probabilidad es continua (por ejemplo en la elección de la energía inicial del neutrón en el problema de blindaje considerado), es igual a la distribución de probabilidad a un número aleatorio comprendido entre 0 y 1, y se resuelve la ecuación resultante.

Sin embargo, el empleo de números aleatorios extraídos de una tabla tiene el inconveniente de gran espacio que ocupa sobre la memoria de la máquina de calcular que se utilice. Consideremos como ilustración, un problema típico en el que el número de historias precisas para que el error sea pequeño, es decir que se encuentre en 10,000, y que cada historia exija por término medio 40 números aleatorios, este caso no sería posible de esta forma.

Otro procedimiento que evita la cuestión anterior, es el construir una fuente experimental de impulsos al azar (por ejemplo los ruidos de un circuito eléctrico), pero a su vez tiene la desventaja de no poder repetir el cálculo a manera de comprobación.

Por todas estas razones, los procedimientos que normalmente se emplean se apoyan en métodos aritméticos. Por ejemplo los residuos de las potencias sucesivas de un número A respecto de un módulo fijo B, forman una sucesión periódica de números, cuyo periodo es muy grande si A y B se eligen apropiadamente; tal sucesión, aunque

obtenida de un modo rigurosamente aritmético, satisface los requisitos usuales de casualidad. Existen otros métodos de obtención de números pseudo-aleatorios, a los que pueden aplicarse las consideraciones anteriores.

2.2.2. Estimación del error [1]

La cuestión fundamental en el método de Monte Carlo, es la determinación del error cometido en la estimación de una magnitud a partir de  $N$  biografías.

Dada la variable aleatoria  $\xi$ , que toma los valores  $x$  con la probabilidad  $f(x)$  y la función  $z(x)$ , su valor medio está dado por la siguiente expresión

$$\bar{z} = \int_{-\infty}^{\infty} z(x) f(x) dx \dots\dots\dots (2.6)$$

Y una estimación de  $\bar{z}$  es

$$\hat{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(x_i) \dots\dots\dots (2.7)$$

Se considera que si  $\bar{z}$  existe y  $N \rightarrow \infty$ ,  $\hat{z} \rightarrow \bar{z}$ . Si  $\overline{z^2}$  también existe, puede hacerse, para grandes valores de  $N$ , una estimación de la cantidad en que  $\hat{z}$  se diferencia de  $\bar{z}$ . Si designamos la varianza de  $z(x)$  por  $\sigma^2$  ésta determinada por lo siguiente

$$\sigma^2 = \overline{(z - \bar{z})^2} = \int_{-\infty}^{\infty} (z - \bar{z})^2 f(x) dx = \overline{z^2} - \bar{z}^2 \dots\dots\dots (2.8)$$

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

En estadística se demuestra la probabilidad de que  $\hat{z}$  exceda a  $\bar{z}$  en más de  $\pm \lambda \frac{\sigma}{N}$  es

$$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{\lambda}^{\infty} e^{-x^2/2} dx \dots\dots\dots(2.9)$$

2.2.3. Medidas de Desviación [1]

En la Tabla 5 se dan algunos valores de esta probabilidad como función de  $\lambda$  Puede observarse que las desviaciones mayores que  $\sigma/\sqrt{N}$  serán frecuentes, mayores que  $2\sigma/\sqrt{N}$  no muy comunes, y mayores que  $3\sigma/\sqrt{N}$  tan poco frecuentes que la probabilidad de que tal hecho ocurra puede, en general, ignorarse. Se puede considerar una medida del error de  $\hat{z}$  respecto a  $z$  de una desviación estándar,  $\sigma/\sqrt{N}$ , que es la semiamplitud de un entorno alrededor de  $z$  tal que la probabilidad de que  $\hat{z}$  se encuentre fuera de dicho entorno es 0.3173.

Otra medida de desviación respecto de  $z$  es el error probable  $0.6745 \sigma/\sqrt{N}$ , y representa la semiamplitud de un entorno alrededor de  $\hat{z}$ , tal que la probabilidad de que  $\hat{z}$  se encuentre dentro de él es la misma de que se encuentre fuera.

$\lambda$	Probabilidad
0.6745	0.5000
1.0000	0.3173
2.0000	0.0475
3.0000	0.0027
4.0000	0.0001

Tabla 5 Variación de la probabilidad en función de  $\lambda$

Como en general no son conocidas  $\overline{z^2}$  ni  $\bar{z}$ , la varianza se estima según la expresión:

$$\hat{V} = \frac{N}{N-1} (\hat{z}^2 - \hat{z}^2) \dots\dots\dots (2.10)$$

Donde

$$\hat{z}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z^2(x_i) \dots\dots\dots (2.11)$$

Y

$$\hat{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(x_i) \dots\dots\dots (2.12)$$

En general se puede decir que siempre que sea necesario estimar valores de expresiones en las que intervengan  $\overline{z^2}$  y  $\overline{z}$ , los valores medios pueden sustituirse por  $\hat{z}^2$  y  $\hat{z}$  respectivamente, el error cometido puede ignorarse si  $N$  es suficientemente grande.

#### 2.2.4. Técnicas de Muestreo

Sea el error probable  $\sigma/\sqrt{N}$ , se observa que si se quiere hacer el error  $m$  veces menor, o bien ha de hacerse  $N m^2$  veces mayor, o bien  $\sigma m$  veces menor; la aplicación de la segunda alternativa da lugar a distintas técnicas como el muestreo de importancia, muestreo sistemático, muestreo por estratos, ruleta rusa, etc.

A manera de ejemplo, a continuación se calculará el error cometido en la estimación de integrales y en la medida de transparencia de una placa para neutrones.

En la estimación de  $\int_0^1 f(u)du$ ,  $X$  tomaba los valores 1 o 0 con probabilidad de  $\theta_0$  y  $1-\theta_0$ , luego de la desviación típica de la variable aleatoria  $X$  es:

$$\sigma = \sqrt{\theta_0(1-\theta_0)} \dots\dots\dots (2.13)$$

Y la desviación estándar de la estimación,

$$\sqrt{\frac{\theta_0(1-\theta_0)}{N}} \dots\dots\dots (2.14)$$

Consideremos otro procedimiento de estimación de  $\theta_0$ . Sea  $f(u)$  una función de variable aleatoria de ley uniforme, definidas ambas en el intervalo (0,1), el valor medio de  $f(u)$  es:

$$\theta_0 = \int_0^1 f(u)du \dots\dots\dots (2.15)$$

Por lo tanto, elegidos al azar  $N$  valores de  $u$  y los correspondientes  $f(u)$ , la expresión:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(u_i) \dots\dots\dots (2.16)$$

Es una estimación de  $\theta_0$ . En este caso es:

$$\sigma = \sqrt{\int_0^1 [f(u) - \theta_0]^2 du} \dots\dots\dots (2.17)$$

Por lo tanto la desviación estándar de la estimación es:

$$\sqrt{\frac{\int_0^1 [f(u) - \theta_0]^2 du}{N}} \dots\dots\dots (2.18)$$

2.2.5. Trayectoria de las partículas [2]



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

Al nacer una partícula, proveniente de una fuente de neutrones externa, o una fisión en un medio homogéneo, tendrá una trayectoria de dispersiones constantes, debido a las colisiones que sufre, ocasionando cambios de dirección y energía en el neutrón; así que tendrá un viaje en zig-zag, hasta que sea absorbida o escape del sistema. Esto representa la historia del neutrón, la cual es un proceso estadístico. Por lo tanto, para obtener mejores resultados, se deben estimar una gran cantidad de historias neutrónicas.

Las variables implicadas en la trayectoria aleatoria en un medio determinan el estado  $\alpha$  de una partícula (ver Figura 2), y las coordenadas esféricas definen su dirección (ver Figura 3).

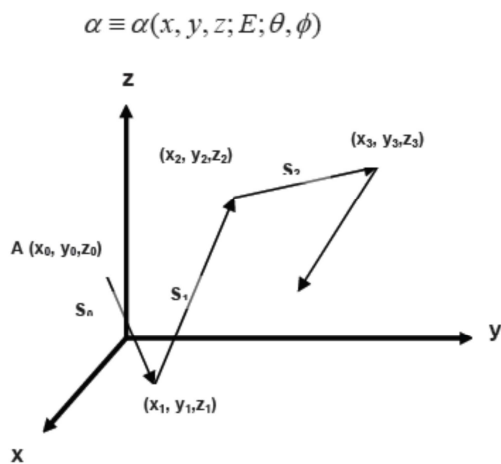


Figura 2 Trayectoria de una partícula en un medio.

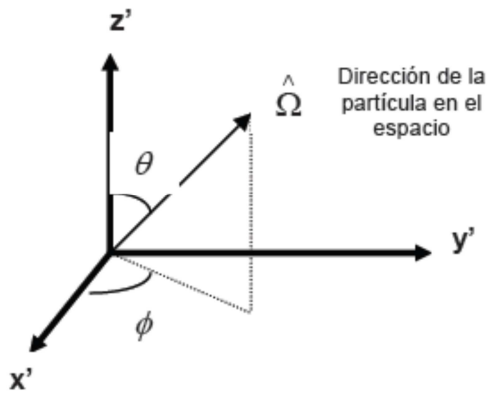


Figura 3 Dirección de la partícula en coordenadas esféricas.

El  $i$ -ésimo estado, representa las coordenadas espaciales del punto donde ocurre la  $i$ -ésima colisión de la partícula, y su energía y dirección después de colisionar.

$$\alpha_i \equiv \alpha_i(x_i, y_i, z_i; E_i; \theta_i, \phi_i)$$

Después del estado inicial de la partícula, cada estado siguiente está en función del estado previo dentro del medio deseado; así se construye la historia de la vida de cada partícula. En una dispersión después de una colisión, las coordenadas del punto de la siguiente colisión de la partícula se calculan de acuerdo a las siguientes variables:

$s$  = longitud de la trayectoria de viaje de la partícula hasta su siguiente colisión.

$\Sigma_t$  =sección eficaz macroscópica total.

$e^{-\Sigma_t s} ds$  = probabilidad de que la partícula viaje la distancia  $s$  sin tener una interacción.

$\Sigma_t ds$  = probabilidad de que la partícula tenga una interacción en el intervalo  $ds$ .

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

$\Sigma_i e^{-\Sigma_i s} ds$  =probabilidad de que la partícula tenga una interacción entre  $s$  y  $s+ds$ .

Posteriormente, se establece, aleatoriamente, un valor de  $s$  ( $s_i$ ) de la función dada por, a continuación, las coordenadas de la siguiente colisión se obtienen de:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + s_i (\text{sen } \theta_i \cos \phi_i) \\ y_{i+1} &= y_i + s_i (\text{sen } \theta_i \text{sen } \phi_i) \\ z_{i+1} &= z_i + s_i (\cos \theta_i) \end{aligned} \dots\dots\dots (2.19)$$

Los ángulos después de la dispersión también se pueden determinar;  $\theta$  es el ángulo de reflexión y  $\phi$  es el ángulo azimutal. Usualmente el ángulo  $\phi$  es distribuido aleatoriamente en el intervalo de 0 a  $2\pi$ .

La energía de la partícula después de la dispersión se obtiene muestreando la función de probabilidad apropiada. La función usada para este fin es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann, para la distribución de energía de los neutrones en equilibrio térmico con los átomos del medio, ésta es:

$$n(E) = \frac{2\pi N}{(\pi kT)^{3/2}} E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT}} \dots\dots\dots (2.20)$$

2.2.6. Cálculos de criticidad [2]

Es de gran importancia estimar el valor del factor efectivo de multiplicación de neutrones ( $k_{\text{eff}}$ ). En estos cálculos, un grupo de historias de neutrones se refiere a un ciclo de  $k_{\text{eff}}$  (en teoría de reactores se define como una generación de neutrones), donde el factor de multiplicación está dado por la razón del número de neutrones

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

generados en los eventos de fisión que se presentan en un ciclo, entre el número de neutrones cuyas historias son evaluadas en este ciclo (es decir, el número de neutrones al inicio de la generación). El valor esperado del factor de multiplicación se estima, promediando sobre los eventos en el ciclo de  $k_{\text{eff}}$ . De la misma forma, también se puede obtener el valor esperado de la probabilidad de fuga o la fracción de eventos que llevan a captura. El error relativo en la estimación de  $k_{\text{eff}}$  usualmente disminuye conforme el número de ciclos de  $k_{\text{eff}}$  aumenta, por lo que se necesita un gran número de ciclos para obtener una buena estimación. El factor de multiplicación se estima mediante la siguiente expresión:

$$\bar{k} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i \dots\dots\dots (2.21)$$

Donde  $\bar{k}$  es el factor de multiplicación estimado para el sistema de interés, y  $k_i$  es el factor de multiplicación estimado del  $i$ -ésimo ciclo.

La aproximación de Monte Carlo se puede resumir como sigue: una secuencia de números aleatorios  $r_i$  ( $0 < r_i < 1$ ) se usa para producir una distribución aleatoria de cantidades que simulan el problema de interés. Un ejemplo de cómo funciona el método de Monte Carlo para obtener el factor de multiplicación en un medio multiplicativo es el siguiente:

1. Para el primer ciclo de cálculo del factor de multiplicación de neutrones ( $k_{\text{eff}}$ ), determinar la posición inicial del neutrón.
2. Utilizar un número aleatorio para seleccionar la energía del neutrón.
3. Usar el siguiente número aleatorio para determinar la dirección coseno del neutrón.
4. Determinar la localización de la siguiente colisión con el siguiente número aleatorio (la distancia que recorra el neutrón depende de la sección eficaz del material).
5. Verificar la nueva posición del neutrón para determinar si ha escapado del sistema; si esto ocurre, agregar un 1 a los escapes totales y regresar al paso 1 empezando otra historia; de otra forma, continuar.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

6. Determinar que tipo de interacción ocurrió en la nueva posición basado en el siguiente número aleatorio. Cada tipo de interacción tiene asociada una sección eficaz que determina su probabilidad de ocurrencia:
  - a) Si la interacción es una dispersión, determinar la energía del neutrón después de la dispersión utilizando el siguiente número aleatorio. Continuar con el paso 3 para saber la trayectoria del neutrón dispersado.
  - b) Si la interacción es una absorción, regresar al paso 1 y empezar otro ciclo con un nuevo neutrón.
  - c) Si la interacción es una fisión, determinar cuántos neutrones se producen en ese nuevo evento de fisión (utilizando las bibliotecas de secciones eficaces del código) y determinar el número total de neutrones que se han producido en el ciclo. También determinar la posición de los neutrones que se produjeron en la fisión para que sirvan como inicio en otro ciclo (esto reemplaza al paso 1 en futuros ciclos de  $k_{\text{eff}}$ ).
7. Cuando se han completado las historias que se han solicitado (las suficientes para una estadística adecuada), evaluar la  $k_{\text{eff}}$  dividiendo el número de nuevos neutrones creados en este ciclo entre el número de historias evaluadas en el ciclo.

Repetir el proceso para tantos ciclos como sean requeridos para obtener una estadística apropiada.

### 2.3. Descripción del código MCNPX 2.6.0 [3]

El código MCNPX (*Monte Carlo N-Particle eXtended code*) se desarrolló en laboratorio de Los Alamos y es uno de los programas de computadora más completos y probados basado en este método. Comúnmente se emplea para el desarrollo de nuevos reactores nucleares, así como en radioterapia, comportamiento de radiación en la atmósfera, evolución estelar, cálculos y predicciones económicas, además de otros

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

campos. Su desarrollo y mantenimiento se encuentra a cargo del grupo *Transport Methods Group* (XTM) del *Applied Theoretical & Computational Physics Division* (X Division) que pertenece a *Los Alamos National Laboratory*. [2]

MCNPX 2.6.0 es un código de transporte de radiación de propósito general basado en Monte Carlo, diseñado para rastrear diferentes tipos de partículas en un amplio intervalo de energías. Incluye muchas capacidades nuevas, con respecto a versiones anteriores, especialmente en las áreas de la transmutación y quemado. Puede ser utilizado para transporte de neutrones, fotones, electrones, o acoplados neutrón/fotón/transporte de electrones, incluyendo la capacidad para calcular los eigenvalores de los sistemas críticos. El código trata una configuración arbitraria en tres dimensiones, con los materiales determinados en las celdas geométricas. Las celdas son definidas y limitadas por superficies de primer, segundo grado, toro elíptico de cuarto grado, superficies definidas por puntos o superficies definidas por macrocuerpos (Tabla 6). Se utilizan datos de secciones eficaces (XS) en el espectro de energía continuo de las bibliotecas de datos nucleares ENDF/B.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
P EX EY EZ	Plane	General	$Ax + By + Cz - D = 0$	A B C D
		Normal to x-axis	$x - D = 0$	D
		Normal to y-axis	$y - D = 0$	D
		Normal to z-axis	$z - D = 0$	D
SO S SX SY SZ	Sphere	Centered at Origin	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
		General	$(x - \bar{x}) + (y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ R$
		Centered on x-axis	$(x - \bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \ R$
		Centered on y-axis	$x^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} \ R$
		Centered on z-axis	$x^2 + y^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{z} \ R$
C/X C/Y C/Z CX CY CZ	Cylinder	Parallel to x-axis	$(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} \ \bar{z} \ R$
		Parallel to y-axis	$(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \ \bar{z} \ R$
		Parallel to z-axis	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ R$
		On x-axis	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
		On y-axis	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
		On z-axis	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	R
K/X K/Y K/Z KX KY KZ	Cone	Parallel to x-axis	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \pm 1$
		Parallel to y-axis	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \pm 1$
		Parallel to z-axis	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ t^2 \pm 1$
		On x-axis	$\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$\bar{x} \ t^2 \pm 1$
		On y-axis	$\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$\bar{y} \ t^2 \pm 1$
		On z-axis	$\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{z} \ t^2 \pm 1$
				$\pm 1$ used only for 1 sheet cone
SQ	Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axis not parallel to x-, y-, or z-axis	$A(x - \bar{x})^2 + B(y - \bar{y})^2 + C(z - \bar{z})^2 + 2D(x - \bar{x}) + 2E(y - \bar{y}) + 2F(z - \bar{z}) + G = 0$	A B C D E F G $\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z}$
GQ	Cylinder Cone Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axes not parallel to x-, y-, or z-axis	$Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dx + Ey + Fz + Gx + Hy + Jz + K = 0$	A B C D E F G H J K
TX TY TZ	Elliptical or Circular Torus.	Axis is parallel to x-, y-, or z-axis	$(x - \bar{x})^2 / B^2 + \left( \sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - A^2 \right) / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$
			$(y - \bar{y})^2 / B^2 + \left( \sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - A^2 \right) / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$
			$(z - \bar{z})^2 / B^2 + \left( \sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - A^2 \right) / C^2 - 1 = 0$	$\bar{x} \ \bar{y} \ \bar{z} \ A \ B \ C$
X Y Z P	Surfaces defined by points (See Sections 5.2.2.2 and 5.2.2.3)			
BOX RPP SPH RCC RHP OF HEX REC TRC ELL WED ARB	Surfaces defined by macrobodies (See Section 5.2.2.4)			

Tabla 6 Tarjetas de superficie MCNPX 2.6.0.

2.3.1 Cálculos de Quemado [4]

La versión 2.6.0 del MCNPX [3] soporta quemado de combustible en el tiempo, a diferencia de las versiones anteriores que no lo consideran. Para el quemado, el código MCNPX está ligado al código CINDER90, es decir, MCNPX realiza los cálculos de factor de multiplicación de neutrones, flujo neutrónico, tasas de reacción, etc.; y CINDER90 hace los cálculos de quemado del combustible nuclear para llegar a un inventario final después de un paso de quemado especificado. Esta información de inventario de isótopos es entregado de nuevo a MCNPX para hacer el cálculo de criticidad para el siguiente paso de tiempo, y así sucesivamente se alternan MCNPX y CINDER90 hasta alcanzar todos los pasos de quemado pedidos en el archivo de entrada (ver Figura 4).

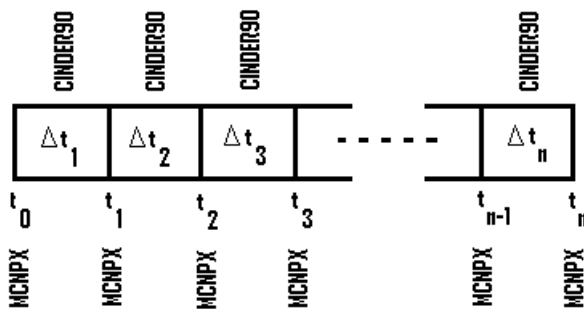


Figura 4 Diagrama de iteración de los códigos MCNPX y CINDER90.

2.3.1.1 Archivo de entrada

El archivo de entrada está formado por tres secciones, cada línea de entrada se llama tarjeta, debido al modo de programación que empleaba tarjetas perforadas para cargar un programa en la computadora. Cuenta con tres bloques, en el primero llamado Tarjetas de celdas se define la geometría de las celdas y los materiales que la forman, el segundo bloque: Tarjetas de superficie, define las superficies que son



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

empleadas por el primer bloque para la definición de celdas. Los datos que se dan o se obtendrán del modelo se modelan en el tercer bloque de Tarjetas de datos.

Bloque de mensajes {opcional}

*Tarjeta en blanco* {opcional}

Tarjeta de Nombre del Programa

Tarjetas de Celdas

Celda# material densidad ---superficies--- datos

*Tarjeta en blanco*

Tarjetas de superficie

Superficie# tipo ---parámetros---

*Tarjeta en blanco*

Tarjetas de datos

Todos lo demás (source, tally, physics, variance,...)

*Tarjeta en blanco*

Para los cálculos de criticidad se emplean las tarjetas KCODE con los datos para el cálculo de criticidad, KSRC o SDEF para ubicar geoméricamente la fuente en el modelo. Para calcular el factor de multiplicación de neutrones se requiere ingresar en KCODE la siguiente información:

KCODE nsrck rkk ikz kct

nsrck número de historias;

rkk tanteo inicial de Keff;

ikz ciclos saltados antes de la acumulación de historias para calcular Keff

kct número total de ciclos en el problema.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

La tarjeta KSRC define la distribución espacial inicial de neutrones de fisión localizada en puntos x, y, z.

KSRC  $x1\ y1\ z1\ x2\ y2\ z2\ \dots$

La tarjeta de ingreso de fuentes de neutrones SDEF sirve para definir fuentes generales, algunas de sus variables más importantes son:

SDEF KEYWORD=value (s) ...

### KEYWORD

CEL número de celda en la que se coloca.

SUR número de superficie, si se encuentra localizada en una superficie.

ERG Energía (MeV). Default ERG=14.

X Coordenada de posición.

Y Coordenada de posición.

Z Coordenada de posición.

Como ya se mencionó, el cálculo de quemado en MCNPX está a cargo del módulo CINDER90. Esta opción se encuentra limitada a problemas de criticidad descritos por la tarjeta KCODE. La biblioteca de CINDER90 incluye 3400 isótopos y 1325 productos de fisión.

En particular, se emplea la tarjeta de quemado definida por la tarjeta BURN para que el código haga la simulación del quemado de los materiales en el modelo con los parámetros que se le incluyen. A continuación se muestra la descripción de la tarjeta.

BURN time=T1, T2, T3,...  $T_i$  duración del tiempo para cada paso de quemado.

pfrac=F1,F2,F3,... Fracción  $f_i$  del total de la potencia del sistema.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

power=P	Potencia total del sistema (MW).
mat= M1, M2, M3,...	Material $M_i$ a ser quemado.
omit=J1,N1,I11,I12,...	Para cada material $J_i$ se omitirán los N isótopos $I_i$ .
afmin=A1 A2	A1 Fracción atómica por debajo del cual un isótopo no será rastreado
transmutación	A2 Criterio de convergencia de la cadena en CINDER90.
bopt=B1, B2, B3	Parámetros de ordenamiento del contenido de la salida, selección del conjunto de productos de fisión TIER1, TIER 2, TIER 3 (ver Tabla 2.2) e inhabilitación de modelos físicos de alta energía si los resultados son menores a un valor marcado.
matvol=V1, V2, V3	$V_i$ es el volumen de todas las celdas con material $mi$

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

Tier1	Tier 2	Tier 3
		<sup>66</sup> Ga <sup>71</sup> Ga
		<sup>70</sup> Ge <sup>72</sup> Ge <sup>73</sup> Ge <sup>74</sup> Ge <sup>76</sup> Ge
	<sup>74</sup> As <sup>75</sup> As	<sup>74</sup> As <sup>75</sup> As
		<sup>74</sup> Se <sup>76</sup> Se <sup>77</sup> Se <sup>78</sup> Se <sup>79</sup> Se <sup>80</sup> Se <sup>82</sup> Se
	<sup>79</sup> Br <sup>81</sup> Br	<sup>79</sup> Br <sup>81</sup> Br
	<sup>78</sup> Kr <sup>80</sup> Kr <sup>82</sup> Kr <sup>83</sup> Kr <sup>84</sup> Kr <sup>86</sup> Kr	<sup>78</sup> Kr <sup>80</sup> Kr <sup>82</sup> Kr <sup>83</sup> Kr <sup>84</sup> Kr <sup>85</sup> Kr <sup>86</sup> Kr
	<sup>85</sup> Rb <sup>87</sup> Rb	<sup>85</sup> Rb <sup>86</sup> Rb <sup>87</sup> Rb
		<sup>84</sup> Sr <sup>86</sup> Sr <sup>87</sup> Sr <sup>88</sup> Sr <sup>89</sup> Sr <sup>90</sup> Sr
	<sup>88</sup> Y <sup>89</sup> Y	<sup>88</sup> Y <sup>89</sup> Y <sup>90</sup> Y <sup>91</sup> Y
<sup>93</sup> Zr	<sup>90</sup> Zr <sup>91</sup> Zr <sup>92</sup> Zr <sup>93</sup> Zr <sup>94</sup> Zr <sup>96</sup> Zr	<sup>90</sup> Zr <sup>91</sup> Zr <sup>92</sup> Zr <sup>93</sup> Zr <sup>94</sup> Zr <sup>95</sup> Zr <sup>96</sup> Zr
	<sup>93</sup> Nb	<sup>93</sup> Nb <sup>94</sup> Nb <sup>95</sup> Nb <sup>97</sup> Nb
<sup>95</sup> Mo	<sup>95</sup> Mo	<sup>92</sup> Mo <sup>94</sup> Mo <sup>95</sup> Mo <sup>96</sup> Mo <sup>97</sup> Mo <sup>98</sup> Mo <sup>99</sup> Mo <sup>100</sup> Mo
<sup>98</sup> Tc	<sup>98</sup> Tc	<sup>98</sup> Tc
<sup>101</sup> Ru	<sup>101</sup> Ru <sup>103</sup> Ru <sup>105</sup> Ru	<sup>96</sup> Ru <sup>96</sup> Ru <sup>99</sup> Ru <sup>100</sup> Ru <sup>101</sup> Ru <sup>102</sup> Ru <sup>103</sup> Ru <sup>104</sup> Ru <sup>105</sup> Ru <sup>106</sup> Ru
		<sup>103</sup> Rh <sup>105</sup> Rh
	<sup>102</sup> Pd <sup>104</sup> Pd <sup>105</sup> Pd <sup>106</sup> Pd <sup>108</sup> Pd <sup>110</sup> Pd	<sup>102</sup> Pd <sup>104</sup> Pd <sup>105</sup> Pd <sup>106</sup> Pd <sup>107</sup> Pd <sup>108</sup> Pd <sup>110</sup> Pd
	<sup>107</sup> Ag <sup>108</sup> Ag	<sup>107</sup> Ag <sup>109</sup> Ag <sup>111</sup> Ag
	<sup>106</sup> Cd <sup>108</sup> Cd <sup>110</sup> Cd <sup>111</sup> Cd <sup>112</sup> Cd <sup>113</sup> Cd	<sup>106</sup> Cd <sup>108</sup> Cd <sup>110</sup> Cd <sup>111</sup> Cd <sup>112</sup> Cd <sup>113</sup> Cd <sup>114</sup> Cd <sup>116</sup> Cd
		<sup>113</sup> In <sup>115</sup> In
	<sup>120</sup> Sn	<sup>112</sup> Sn <sup>113</sup> Sn <sup>114</sup> Sn <sup>115</sup> Sn <sup>116</sup> Sn <sup>117</sup> Sn <sup>118</sup> Sn <sup>119</sup> Sn <sup>120</sup> Sn <sup>122</sup> Sn <sup>123</sup> Sn <sup>124</sup> Sn <sup>125</sup> Sn <sup>126</sup> Sn
		<sup>121</sup> Sb <sup>123</sup> Sb <sup>124</sup> Sb <sup>125</sup> Sb <sup>126</sup> Sb
		<sup>120</sup> Te <sup>122</sup> Te <sup>123</sup> Te <sup>124</sup> Te <sup>125</sup> Te <sup>126</sup> Te <sup>128</sup> Te <sup>130</sup> Te <sup>132</sup> Te
	<sup>127</sup> I <sup>129</sup> I <sup>135</sup> I	<sup>127</sup> I <sup>129</sup> I <sup>130</sup> I <sup>131</sup> I <sup>132</sup> I <sup>133</sup> I <sup>134</sup> I <sup>135</sup> I
<sup>131</sup> Xe <sup>134</sup> Xe	<sup>124</sup> Xe <sup>126</sup> Xe <sup>128</sup> Xe <sup>129</sup> Xe <sup>130</sup> Xe <sup>131</sup> Xe <sup>132</sup> Xe <sup>134</sup> Xe <sup>135</sup> Xe <sup>136</sup> Xe	<sup>123</sup> Xe <sup>124</sup> Xe <sup>126</sup> Xe <sup>128</sup> Xe <sup>129</sup> Xe <sup>130</sup> Xe <sup>131</sup> Xe <sup>132</sup> Xe <sup>133</sup> Xe <sup>134</sup> Xe <sup>135</sup> Xe <sup>136</sup> Xe
<sup>133</sup> Cs <sup>137</sup> Cs	<sup>133</sup> Cs <sup>134</sup> Cs <sup>135</sup> Cs <sup>136</sup> Cs <sup>137</sup> Cs	<sup>133</sup> Cs <sup>134</sup> Cs <sup>135</sup> Cs <sup>136</sup> Cs <sup>137</sup> Cs
<sup>138</sup> Ba	<sup>138</sup> Ba	<sup>130</sup> Ba <sup>132</sup> Ba <sup>133</sup> Ba <sup>134</sup> Ba <sup>135</sup> Ba <sup>136</sup> Ba <sup>137</sup> Ba <sup>138</sup> Ba <sup>140</sup> Ba
		<sup>138</sup> La <sup>139</sup> La <sup>140</sup> La
		<sup>136</sup> Ce <sup>138</sup> Ce <sup>139</sup> Ce <sup>140</sup> Ce <sup>141</sup> Ce <sup>142</sup> Ce <sup>143</sup> Ce <sup>144</sup> Ce
<sup>141</sup> Pr	<sup>141</sup> Pr	<sup>141</sup> Pr <sup>142</sup> Pr <sup>143</sup> Pr <sup>145</sup> Pr
<sup>143</sup> Nd <sup>145</sup> Nd	<sup>143</sup> Nd <sup>146</sup> Nd <sup>147</sup> Nd <sup>148</sup> Nd <sup>150</sup> Nd	<sup>142</sup> Nd <sup>143</sup> Nd <sup>144</sup> Nd <sup>145</sup> Nd <sup>146</sup> Nd <sup>147</sup> Nd <sup>148</sup> Nd <sup>150</sup> Nd
	<sup>147</sup> Pm <sup>149</sup> Pm	<sup>147</sup> Pm <sup>148</sup> Pm <sup>149</sup> Pm <sup>151</sup> Pm
	<sup>147</sup> Sm <sup>149</sup> Sm <sup>150</sup> Sm <sup>151</sup> Sm <sup>152</sup> Sm	<sup>144</sup> Sm <sup>147</sup> Sm <sup>148</sup> Sm <sup>149</sup> Sm <sup>150</sup> Sm <sup>151</sup> Sm <sup>152</sup> Sm <sup>153</sup> Sm <sup>154</sup> Sm
	<sup>151</sup> Eu <sup>152</sup> Eu <sup>153</sup> Eu <sup>154</sup> Eu <sup>155</sup> Eu	<sup>151</sup> Eu <sup>152</sup> Eu <sup>153</sup> Eu <sup>154</sup> Eu <sup>155</sup> Eu <sup>156</sup> Eu <sup>157</sup> Eu
	<sup>152</sup> Gd <sup>154</sup> Gd <sup>155</sup> Gd <sup>156</sup> Gd <sup>157</sup> Gd <sup>158</sup> Gd <sup>160</sup> Gd	<sup>152</sup> Gd <sup>153</sup> Gd <sup>154</sup> Gd <sup>155</sup> Gd <sup>156</sup> Gd <sup>157</sup> Gd <sup>158</sup> Gd <sup>160</sup> Gd
		<sup>150</sup> Tb <sup>160</sup> Tb
		<sup>156</sup> Dy <sup>158</sup> Dy <sup>160</sup> Dy <sup>161</sup> Dy <sup>162</sup> Dy <sup>163</sup> Dy <sup>164</sup> Dy
	<sup>165</sup> Ho	<sup>165</sup> Ho
		<sup>162</sup> Er <sup>164</sup> Er <sup>166</sup> Er <sup>167</sup> Er <sup>168</sup> Er <sup>170</sup> Er
	<sup>169</sup> Tm	<sup>169</sup> Tm

Tabla 7 Productos de fisión contenidos en los conjuntos TIER.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

### Referencias.

1. Caro Rafael, Física de Reactores Nucleares, JEN Madrid 1976.
2. François, Juan Luis. Apuntes de la asignatura Análisis de Reactores Nucleares, Facultad de Ingeniería-UNAM, 2008.
3. Briesmeister, J.F. "MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code.". Los Alamos, Manual La-12625-M, Version 4B, March 1997.
4. Pelowitz, D. B. "MCNPX USER 'S MANUAL. Version 2.6.0". Report LA-CP-07-1473. April 2008.
5. Gallego, N. A "Componentes Aleatorios Cerrados. Estimación y Simulación de Imágenes" IX Conferencia Española de Biometría la Coruña, 28-30 de Mayo 2003.

## CAPÍTULO 3

---

### 3. MODELOS DEL MSR PARA ESPECTROS TÉRMICOS Y RÁPIDOS

#### 3.1. MODELOS CON ESPECTRO TÉRMICOS

Como se ha mencionado a lo largo de este trabajo de investigación, una de las ventajas del MSR es su versatilidad para poder operar a diferentes rangos de energía de los neutrones. En esta parte se abordarán los modelos térmicos. Como ya es conocido, existen diferentes tipos de reactores, los que operan en espectro térmico y los que lo hacen en el rápido. En el caso de los reactores térmicos, los neutrones deben de bajar su energía de 2 MeV hasta unos cuantos electrón-volts, lo cual se conoce como termalización de los neutrones; de manera que éstos pueden ser aprovechados por los núcleos físiles, y lograr mantener una reacción de fisión en cadena.

Uno de los objetivos de este trabajo relacionado con el análisis neutrónico del MSR, es encontrar las condiciones óptimas para obtener la criticidad del sistema. Para esto se pueden tener diferentes combinaciones de sales físiles y fértiles, además de variaciones en la geometría.

#### 3.2. PRIMER MODELO REALIZADO

El primer modelo desarrollado es uno homogéneo, el cual tiene asignados los materiales más importantes que están presentes en un MSR (ver Figura 5).

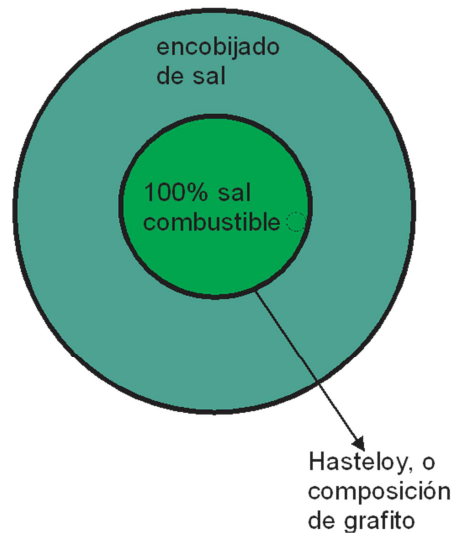


Figura 5 Representación del modelo transversal homogéneo de un MSR.

Como se muestra en la Figura 5 se presenta la sal-combustible en el núcleo del reactor cubierto por la sal-cobija, las cuales se asignaron de la siguiente manera (Tabla 8)

<b>Sales</b>	<b>UF<sub>4</sub></b>	<b>ThF<sub>4</sub></b>	<b>LiF</b>
% mol en sal-combustible	2 %	20 %	78 %
% mol en sal-cobija.	----	22.5 %	77.5 %

Tabla 8 Porcentajes de materiales en el modelo homogéneo.

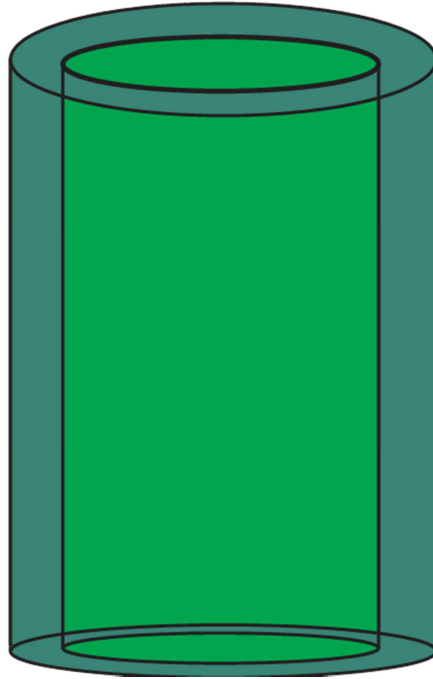


Figura 6 Representación del modelo axial homogéneo de un MSR.

En la Figura 6 se presenta el primer modelo de forma axial implementado en MCNPX de manera infinita, esto se realizó con fines de encontrar las primeras composiciones y cantidades de las sales para lograr un factor de multiplicación infinito óptimo, lo cual se logró después de varias pruebas con diferentes porcentajes de material fisible, con los datos reportados en la tabla mostrada anteriormente.

### 3.2.1 MODELO TÉRMICO

Al realizar el modelo homogéneo anterior, lo único que se involucró fue el Hastelloy como material que delimita a las sales. En toda la documentación encontrada se utiliza este material, sin embargo, en el modelo térmico final se tiene la asignación de un material muy importante que funciona como el moderador de neutrones: el grafito. Para dar una mejor representación de la geometría del núcleo de un MSR, se



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

realizó un modelo donde se representaron explícitamente unos tubos por donde circula la sal combustible (ver Figura 7).

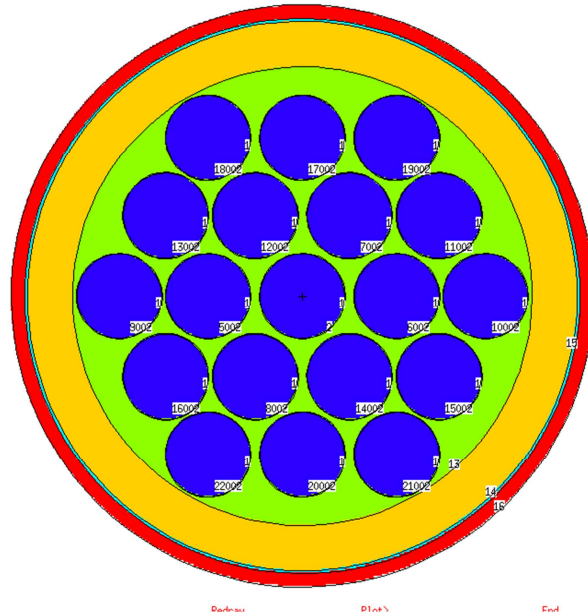


Figura 7 Representación del modelo Térmico de un MSR.

Los tubos cilíndricos (color azul) (ver Figura 7) se encuentran contenidos en un cilindro lleno de grafito (color verde). Los tubos están delimitados del grafito por un encamisado de Hastelloy G-30, el cual, a su vez, delimita el grafito de la sal-cobija (color naranja), del acero (color azul) y del carburo de boro ( $B_4C$ , color rojo).

Es importante mencionar que la presencia del carburo de boro en el último cilindro de la Figura 7, es introducida como una medida de seguridad debido a las propiedades que posee dicho material para absorber neutrones.

En este modelo se dejó constante el volumen presente en la sal-combustible a  $20m^3$ , distribuido de manera equitativa entre los 19 cilindros presentes en el núcleo. Una vez que se encontraron las condiciones de criticidad, es decir alcanzar aproximadamente una  $K_{eff}$  de 1.05, considerada óptima en estos modelos, con las diferentes configuraciones de combustible-cobija asignados, se realizó una variante en

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

la presencia del moderador con el fin de encontrar un valor óptimo de la razón de moderación ( $V_m/V_f$ ) para un factor de multiplicación efectivo ideal.

Al analizar los modelos con las diferentes configuraciones de combustible y material fértil asignado (ver Tabla 8), se encontró la importancia de utilizar el uranio empobrecido en lugar de uranio natural. Con esto se logra un ahorro de uranio natural, ya que el uranio empobrecido es el resultado de las colas de enriquecimiento del uranio, que se utiliza en los reactores LWR, por ejemplo.

En las figuras 8 y 9 se ha graficado el factor de multiplicación efectiva para en función de la razón de volumen de moderador a volumen de combustible, llamado factor de moderación, y se puede apreciar que el porcentaje de  $^{235}\text{U}$  presente en el uranio natural, mayor que el del uranio empobrecido, hace una diferencia en el comportamiento del factor de multiplicación efectivo, ya que el  $^{235}\text{U}$  tiene una importante participación en aumentar la probabilidad de fisión en el sistema. Una ventaja de usar el uranio empobrecido es la posibilidad de tener un mejor proceso de cría de plutonio, debido a la mayor presencia del  $^{238}\text{U}$ .

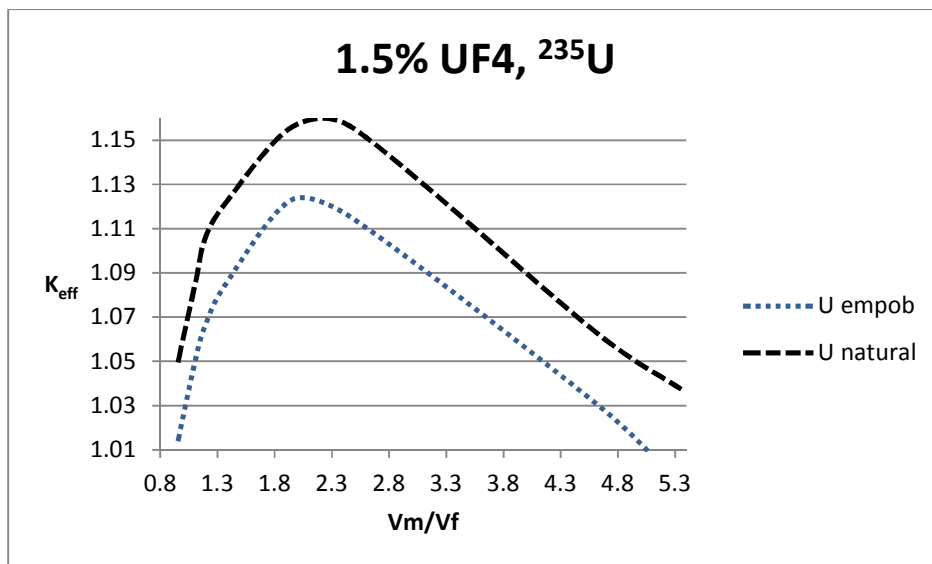


Figura 8 . Efecto sobre la reactividad al utilizar  $U_{empobrecido}$  y  $U_{natural}$  en el modelo térmico.

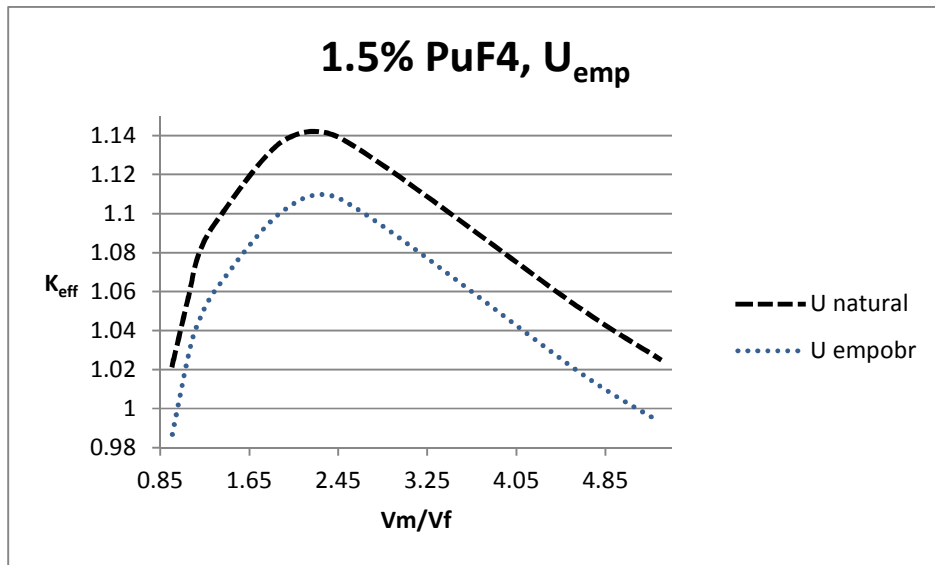


Figura 9 . Efecto sobre la  $K_{eff}$  al variar el factor de moderación para el modelo térmico en la configuración Pu-U<sub>emp</sub>.

Uranio Natural	Uranio Empobrecido
99.3 % de <sup>238</sup> U	99.72 % de <sup>238</sup> U
0.7% de <sup>235</sup> U	0.28 % de <sup>235</sup> U

Tabla 9 Uranio natural y uranio empobrecido.

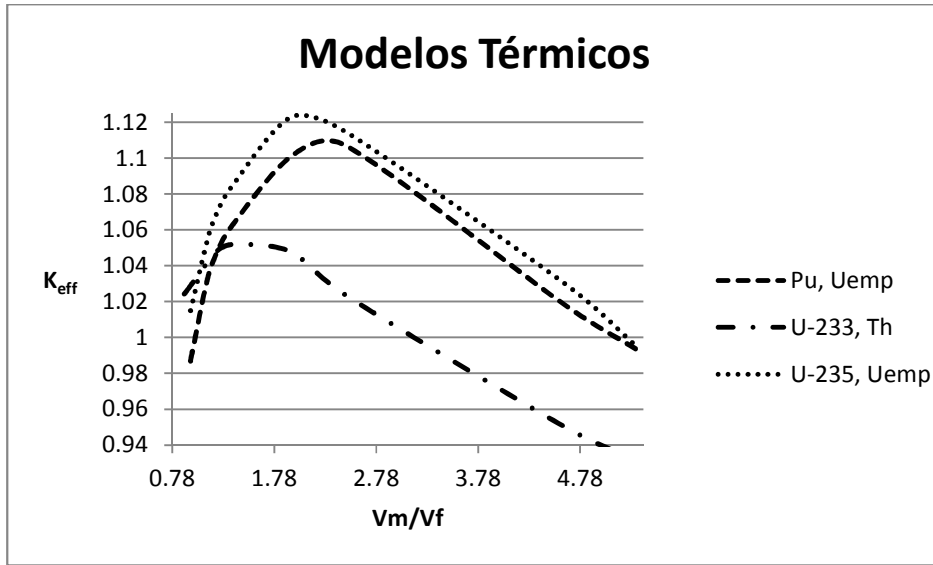


Figura 10 Efecto sobre la reactividad de diferentes combustibles en los modelos térmicos de un MSR.

En la Figura 10 se presentan los resultados de los diferentes modelos térmicos de cada una de las configuraciones de combustible. El modelo que presenta requerir una mayor moderación es el del  $^{239}\text{Pu}$ , es decir, posee un menor efecto sobre el factor de multiplicación efectivo, pues sin embargo se observa en la Figura 11, el  $^{239}\text{Pu}$  tiene un valor alto de la sección eficaz de fisión a bajas energías (térmicas). A su vez, el caso con  $^{235}\text{U}$  requiere menos moderación que el caso del  $^{239}\text{Pu}$ , y finalmente, el caso con  $^{233}\text{U}$  es el que requiere menos moderación para lograr obtener su valor máximo del factor de multiplicación de neutrones, pero sin alcanzar valores de  $K_{\text{eff}}$  como en los casos de  $^{235}\text{U}$  y  $^{239}\text{Pu}$ . Dentro de la experiencia se esperaría tener un efecto de  $K_{\text{eff}}$  más elevado para la configuración del  $^{239}\text{Pu}$  (ver figura 11), sin embargo, es importante observar que en la configuración del  $^{235}\text{U}$  la presencia del  $^{235}\text{U}$  en el  $\text{U}_{\text{emp}}$ , presenta una contribución en el factor de multiplicación efectivo, es decir, que sea más grande para el caso del  $^{235}\text{U}$ , en el caso del  $^{233}\text{U}$  su configuración de sal combustible-sal fértil es la propiedad además de que el porcentaje que tiene del “fluoruro combustible” en la sal combustible es menor lo cual hace la diferencia en la curva de la Figura 10. Ver Tabla 10.

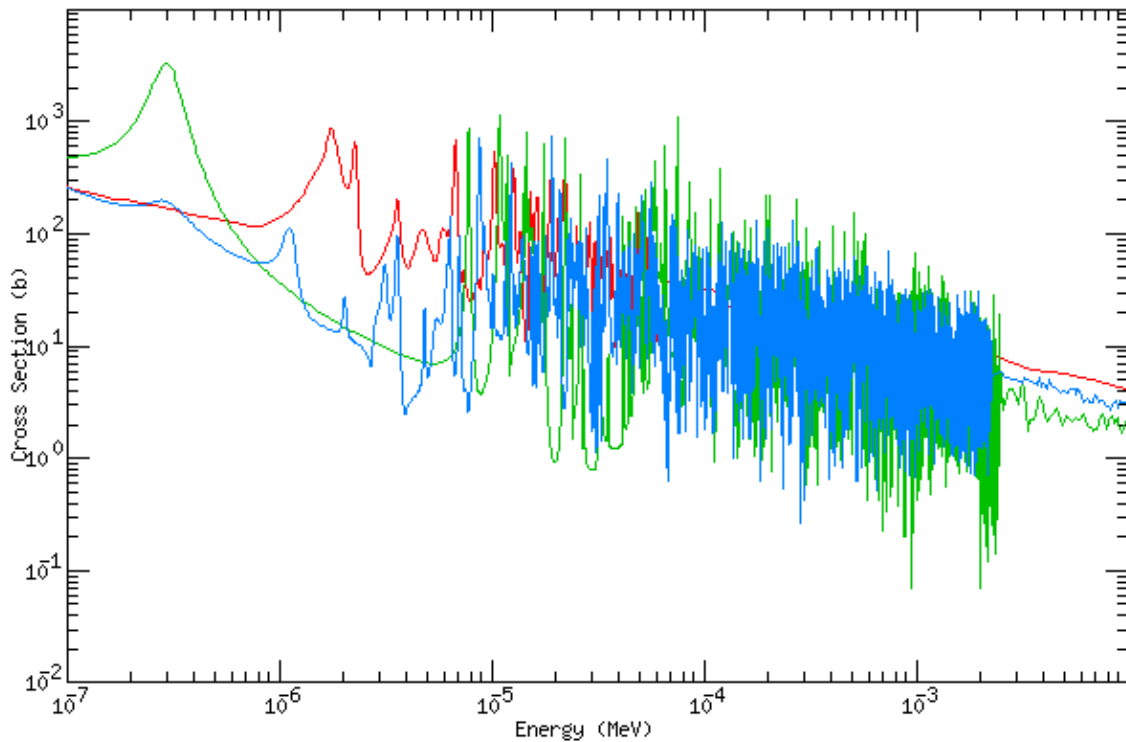


Figura 11 . Sección eficaz de fisión  $^{239}\text{Pu}$  (verde),  $^{233}\text{U}$  (rojo) y  $^{235}\text{U}$  (azul).

### 3.2.2 MODELOS EN ESPECTRO RÁPIDO

En la representación de un MSR con una configuración de espectro rápido, no se cuenta con la presencia de un material que se encargue de la termalización de los neutrones, ya que en estos modelos es lo que no se requiere, por lo que los que mantienen las reacciones de fisión en cadena son los neutrones rápidos, es decir, los de alta energía.

En principio, se realizaron modelos rápidos de la misma forma que el modelo térmico anterior, únicamente sustituyendo el grafito por el Hastelloy. En un ejemplo, en donde se asignó  $^{233}\text{UF}_4$  con 3.5% en el modelo del arreglo de cilindros, se observó que la cantidad de material fisil se debía de aumentar al 4% de  $^{233}\text{UF}_4$  para obtener un valor del factor efectivo de multiplicación de neutrones aceptable (ver Figura 12).

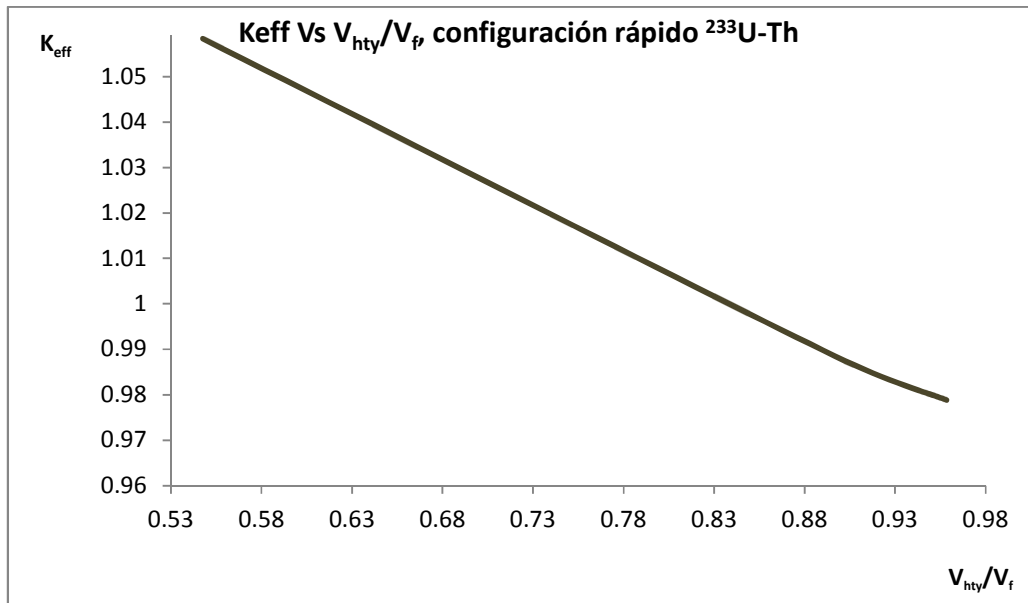


Figura 12 Efecto de la razón de moderación sobre la  $K_{eff}$  para la configuración  $^{233}\text{U-Th}$ , modelo rápido en un arreglo de cilindros.

Al analizar la curva de la Figura 12, se concluye que el factor de multiplicación efectiva es más grande mientras más pequeña es la distancia que existe entre las barras. Por lo tanto, se consideró modelar el caso de espectro rápido en forma de cilindros concéntricos, de esta manera se representan cilindros a través de los cuales la sal pudiera circular dentro del reactor, como se observa en la Figura 13.

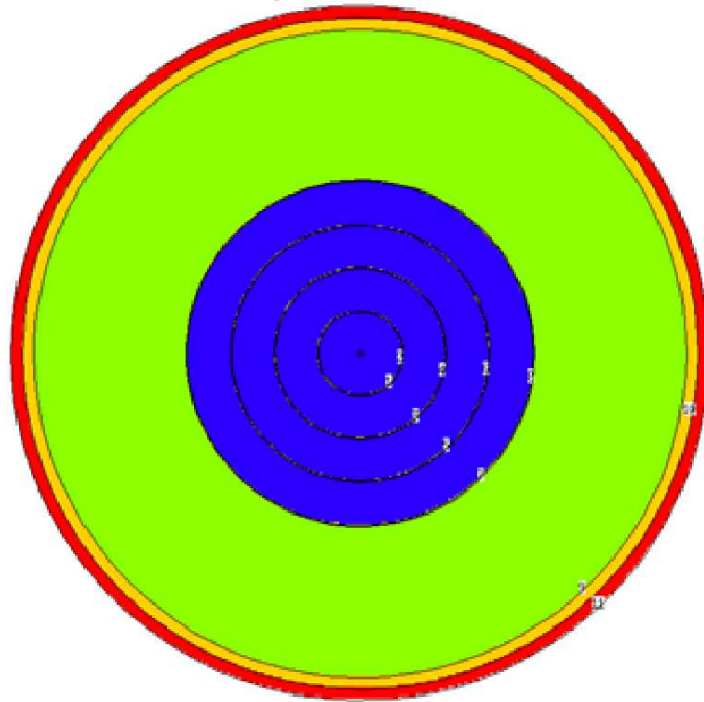


Figura 13 Representación geométrica del modelo Rápido de un MSR

En la Figura 13 se tiene un corte transversal del modelo en espectro rápido. El color azul representa a la sal-combustible en cilindros concéntricos, delimitados por Hastelloy, el color verde es la sal-cobija, el color amarillo es el acero inoxidable que sostiene al reactor recubierto por carburo de boro, color rojo.

Para los modelos en espectro rápido, la variable que se involucró en el diseño fue la variación del volumen de la sal-cobija, observando cómo esta variación afecta al factor efectivo de multiplicación de neutrones (ver Figura 14).

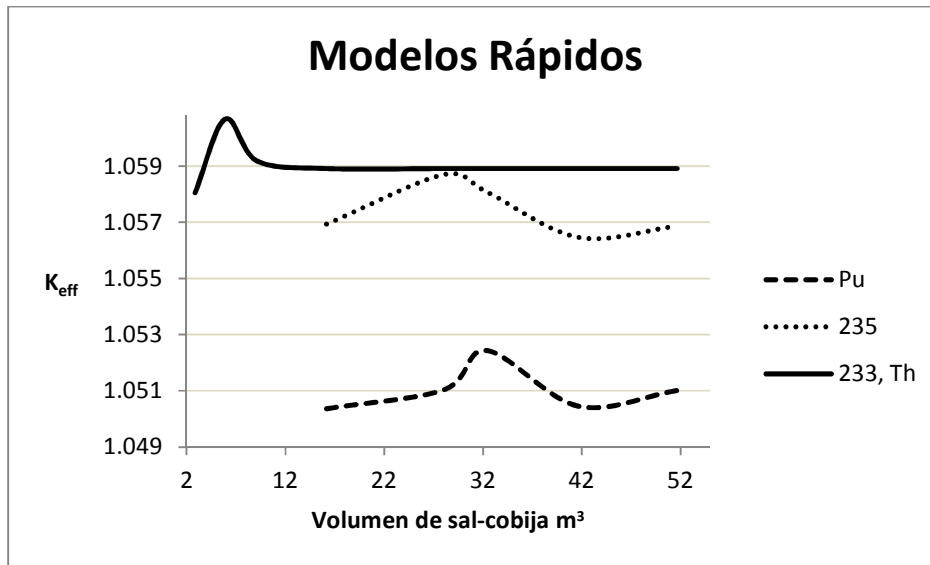


Figura 14 Variación de la  $K_{\text{eff}}$  al modificar el volumen de la sal-cobija.

En la Figura 14 se presenta cómo se ve afectada la  $K_{\text{eff}}$  al variar el volumen de la sal-cobija. Es importante observar que todos los valores encontrados de la  $K_{\text{eff}}$  están dentro de lo aceptable de 1.05 aproximadamente. Este valor considera, por un lado, el efecto de temperatura, ya que las simulaciones están hechas con librerías de secciones eficaces en frío, y por otro lado la aparición de productos de fisión que se saturan y actúan como venenos.

En la curva que representa a la configuración con  $^{233}\text{U}-\text{Th}$ , se observa que al tener una menor presencia de sal-cobija, se logra obtener un máximo de  $K_{\text{eff}}$  con espesor de 20 cm de la sal-cobija, es decir, un volumen de  $5.9 \text{ m}^3$  de sal-cobija. A partir de este valor la  $K_{\text{eff}}$  baja y al aumentar el volumen de la sal-cobija no muestra ningún efecto en la  $K_{\text{eff}}$ , es constante. La curva que representa a la configuración con  $^{235}\text{U}-\text{U}_{\text{emp}}$  es la que se encuentra por de bajo de la del  $^{233}\text{U}-\text{Th}$ , presentando un valor máximo de la  $K_{\text{eff}}$  para un espesor de 80 cm de la sal-cobija, es decir, un volumen de  $28.08 \text{ m}^3$  de sal-cobija presente. Para el caso  $\text{Pu}-\text{U}_{\text{emp}}$  el máximo del factor de multiplicación en esta configuración se encuentra para un espesor de 90 cm de la sal-cobija del reactor, es decir  $32.42 \text{ m}^3$ .

En este modelo se siguió con la misma cantidad de volumen de la sal-combustible que el modelo térmico, es decir,  $20 \text{ m}^3$ . Como en el capítulo 1 se menciona, el objetivo



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

de tener la sal cobija es aprovechar los neutrones producidos de las reacciones de fisión en la sal-combustible y así ser absorbidos por el material fértil, presente en la sal-cobija, para ser convertido en material físil nuevo (ver Figura 15).

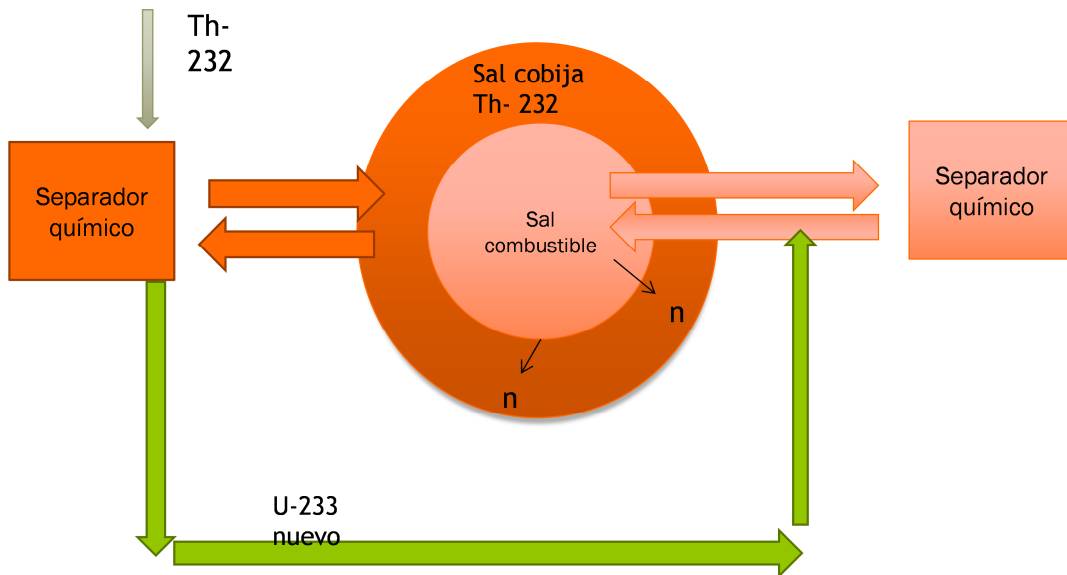


Figura 15 Diseño de las sales separadas en un MSR, con  $^{233}\text{U}$  y Th

El proceso descrito en la Figura 15 se utiliza tanto en el modelo rápido como en el térmico, ya que en los dos casos se sigue aprovechando la producción de los neutrones provenientes de las fisiones en el material físil.

Las cantidades de sales presentes en cada modelo se representan en la Tabla 10.

MSR	Térmico	Rápido
Combustible / material fértil	0.7% de $^{233}\text{UF}_4$ / 79.3% de $^{232}\text{ThF}_4$	2.1% de $^{233}\text{UF}_4$ / 77.9 de $^{232}\text{ThF}_4$
Combustible / material	1.5% de $^{235}\text{UF}_4$ / 78.5	5.2% de $^{235}\text{UF}_4$ / 74.8

Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

fértil	de $U_{\text{empobrecido}}F_4$	de $U_{\text{empobrecido}}F_4$
Combustible / material fértil	1.5% de $^{239}\text{Pu}F_4$ / $U_{\text{empobrecido}}F_4$	5.1% de $^{239}\text{Pu}F_4$ / $U_{\text{empobrecido}}F_4$

Tabla 10 Porcentajes de material fértil en combustible de cada modelo térmicos y rápidos en la sal-combustible.

Espectro	Sal-combustible 20% LiF	Sal-cobija	Keff
Térmico	0.7% $^{233}\text{UF}_4$ , 79.3% $\text{ThF}_4$	22.5% $\text{ThF}_4$ , 77.5% LiF	1.051
Térmico	1.5% $^{235}\text{UF}_4$ , 78.5% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$	22.5% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$ , 77.5% LiF	1.050
Térmico	1.5% $^{239}\text{Pu}F_4$ , 78.5% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$	22.5% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$ , 77.5% LiF	1.062
Rápido	2.1% $^{233}\text{UF}_4$ , 77.9% $\text{ThF}_4$	22.5% $\text{ThF}_4$ , 77.5% LiF	1.059
Rápido	5.2% $^{235}\text{UF}_4$ , 74.8% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$	22.5% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$ , 77.5% LiF	1.058
Rápido	5.1% $^{239}\text{Pu}F_4$ , 74.9% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$	22.5% $^{\text{emp}}\text{UF}_4$ , 77.5% LiF	1.052

Tabla 11 Resultados obtenidos en modelos térmicos y rápidos, y el factor de multiplicación de neutrones en cada caso.

## CAPITULO 4

---

### 4. QUEMADO DE COMBUSTIBLE Y LA EVOLUCIÓN DE ISÓTOPOS.

Una vez que se establecen los modelos y las cantidades específicas de los materiales presentes en cada uno, es decir, que se encuentren en una condición de criticidad óptima, es importante conocer qué tan eficaz es cada uno de ellos en sus capacidades de cría y de transmutación de actínidos, ya que son algunos de los objetivos que se tiene en un reactor como el MSR.

En cada uno de los casos que se plantearon en el capítulo anterior, se realizaron las corridas correspondientes para conseguir un resultado que indique la evolución de los isótopos presentes a lo largo de cierto periodo de tiempo, así como la generación de los actínidos y, lo más importante, la generación de nuevo combustible para poder ser utilizado en la sal-combustible, completando el ciclo.

El análisis del quemado de combustible se va hacer de forma separada, es decir, sal-combustible y sal-cobija. En cada una se va a dar una diferente evolución de isótopos, ya que se encuentran diferentes materiales en cada una de ellas; de esta manera se observará a detalle la generación de nuevos isótopos, y lo más importante, la cría que se genere en cada modelo.

Se analizaron dos modos de operación. En el primero, no se considera la recarga del combustible en línea, sino que se supone que después de un cierto tiempo hay que parar el reactor para cambiar la sal-combustible, y por lo tanto es necesario tener un exceso de reactividad, y el factor de multiplicación de neutrones disminuirá con el tiempo. En el segundo modo de operación se simula como si la sal-combustible se estuviera renovando en línea y los productos de fisión se estuvieran retirando continuamente, manteniendo un nivel de criticidad constante, sin necesidad de tener un exceso de reactividad para compensar el quemado del combustible. Solamente se consideró un exceso de 5% dK para compensar la antireactividad debida a la saturación de productos de fisión antes de su limpieza, y a efectos de temperatura, ya que las secciones eficaces utilizadas en MCNPX están a temperatura ambiente.

### 4.1. QUEMADO DE MODELOS TÉRMICOS

#### 4.1.1 CONFIGURACIÓN $^{233}\text{U}$ -Th

En la Tabla 8 del capítulo anterior se presentaron las concentraciones de las sales-combustible y de las sales-cobija, con las cantidades de  $\text{UF}_4$  para cada una de las configuraciones que se realizaron de combustible/material fértil. Para todos los modelos la cantidad de  $\text{ThF}_4$  es del 20% siempre, y la suma de  $\text{LiF} + \text{UF}_4$  es del 80%, por lo que se encontró la cantidad de  $\text{UF}_4$  para cada uno de los casos en los que se presentara la criticidad deseada  $K \approx 1.05$ . Con las cantidades de los materiales establecidos se realizaron las corridas de quemado.

En la Figura 16 se ha graficado la diferencia de masa final menos la inicial para cada nucleido, este valor representa el quemado de la sal-combustible a 48 GWd/MT (toneladas métricas), que corresponde a un quemado de descarga típico del combustible de un reactor de agua ligera. En la figura se muestra un claro consumo del  $^{232}\text{Th}$  (color verde), que como es sabido produce  $^{233}\text{U}$  nuevo. Esta producción de  $^{233}\text{U}$  se puede apreciar en la generación de  $^{233}\text{Pa}$ ; ya que a partir del decaimiento de éste se obtiene el  $^{233}\text{U}$  nuevo. Sin embargo, se tiene también un consumo de  $^{233}\text{U}$ , ya que este material es el que funciona como combustible para este caso. Al igual que el  $^{233}\text{Pa}$ , también se encuentra la generación de otros actínidos como son el  $^{234}\text{U}$ , el  $^{235}\text{U}$ , el  $^{236}\text{U}$ , entre otros. En el caso del  $^{235}\text{U}$  es un material físil; algunos otros, en su mayoría, son “parásitos” en el sistema. Es importante mencionar que el porcentaje de  $^{232}\text{Th}$  que se consumió, durante el proceso de quemado que se simuló, y que se transmutó en  $^{233}\text{Pa}$ , fue de 35.5%; una cantidad importante.

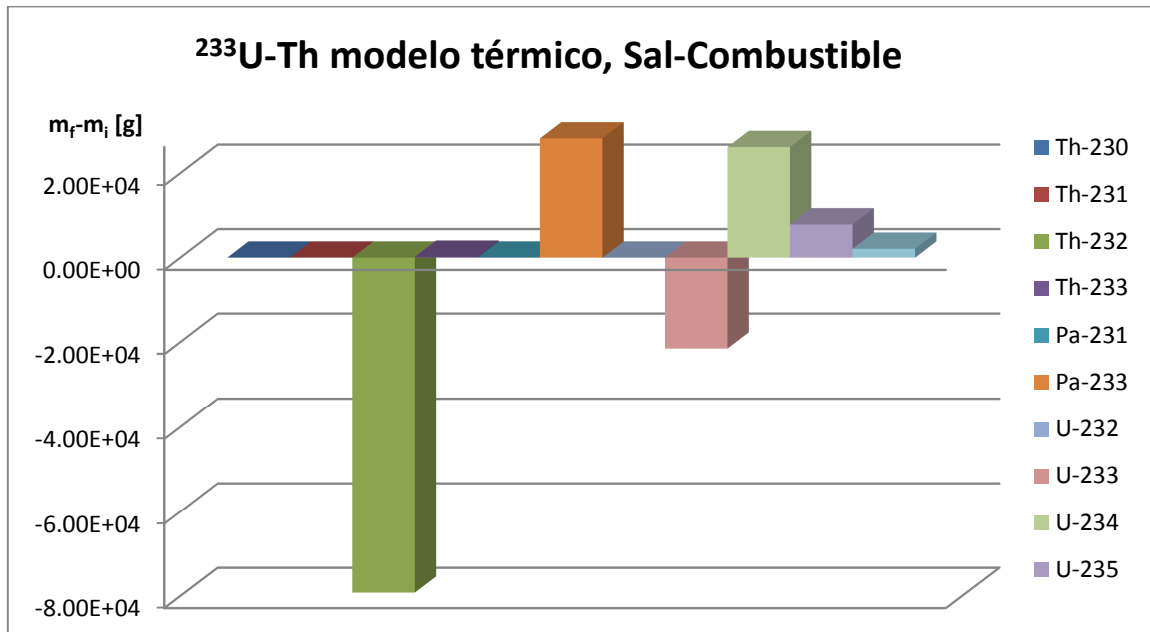


Figura 16 Quemado de la sal-combustible en la configuración  $^{233}\text{U-Th}$  en el modelo térmico.

En la Figura 17 se encuentra el quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{233}\text{U-Th}$ . Se aprecia notablemente el consumo del  $^{232}\text{Th}$ , ya que este material al recibir el bombardeo neutrónico transmuta a  $^{233}\text{Pa}$  y posteriormente a  $^{233}\text{U}$ . Para este caso, en la sal-cobija, el porcentaje de trasmutación se calcula a partir de la cantidad del  $^{232}\text{Th}$  consumido, es decir el inicial menos el final, es de 89.22% en  $^{233}\text{Pa}$  y de 10.28% en  $^{233}\text{U}$ .

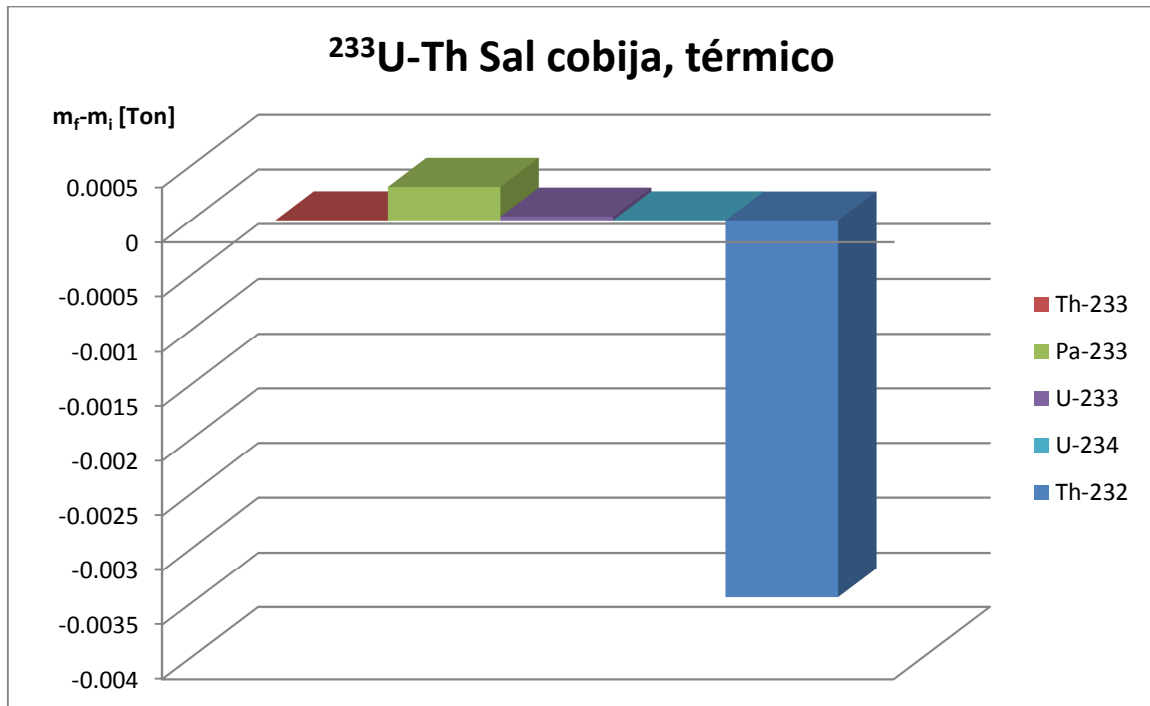


Figura 17 Quemado de la sal-cobija, configuración  $^{233}\text{U}$ -Th, térmico.

Este caso se simuló en el modo de operación sin recarga en línea del combustible, por lo que, como se aprecia en la Figura 18, el factor de multiplicación de neutrones decrece rápidamente con el quemado del combustible. No es la intención de este análisis buscar el exceso de reactividad requerido para lograr un ciclo de operación determinado, sino constatar la pérdida de reactividad con la utilización de las sales, y sobre todo estimar la evolución isotópica de las mismas.

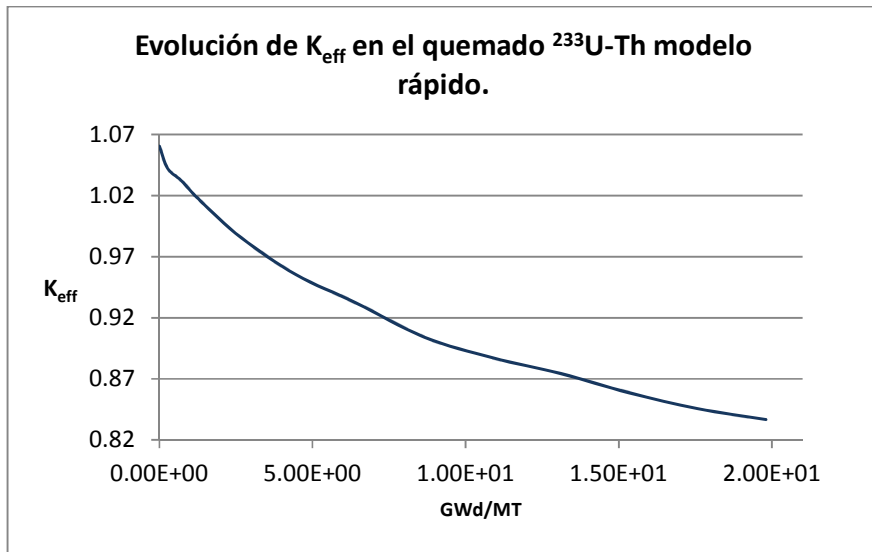


Figura 18 Evolución de la  $K_{\text{eff}}$  durante el quemado en la configuración  $^{233}\text{U}$ -Th modelo térmico.

#### 4.1.2 CONFIGURACIÓN Pu- $U_{\text{emp}}$

A continuación se presenta la evolución de los isótopos del modelo térmico con la sal-combustible de Pu- $U_{\text{emp}}$ .

En la Figura 19 se presenta el quemado de la sal-combustible, en la que puede apreciar claramente el consumo que presenta el  $^{238}\text{U}$ , como material fértil asignado a esta configuración, y la generación de  $^{239}\text{Np}$ , ya que este isótopo se produce por captura neutrónica del  $^{238}\text{U}$ , y posteriormente se convierte por medio de decaimiento beta a  $^{239}\text{Pu}$ . En este caso la generación de  $^{239}\text{Pu}$  no es apreciable ya que se encuentra asignado como combustible también, y por lo tanto se consume más de lo que se produce. En esta figura se observa también la generación de actínidos menores como son el  $^{240}\text{Pu}$ , el  $^{241}\text{Pu}$ , y el  $^{242}\text{Pu}$ , entre otros. Para esta configuración, a partir del consumo de  $^{238}\text{U}$  la cantidad que transmuta en  $^{239}\text{Np}$  es de 59.58%, que es una cantidad importante, ya que este isótopo, al presentar un decaimiento beta, se transforma en  $^{239}\text{Pu}$  nuevo.

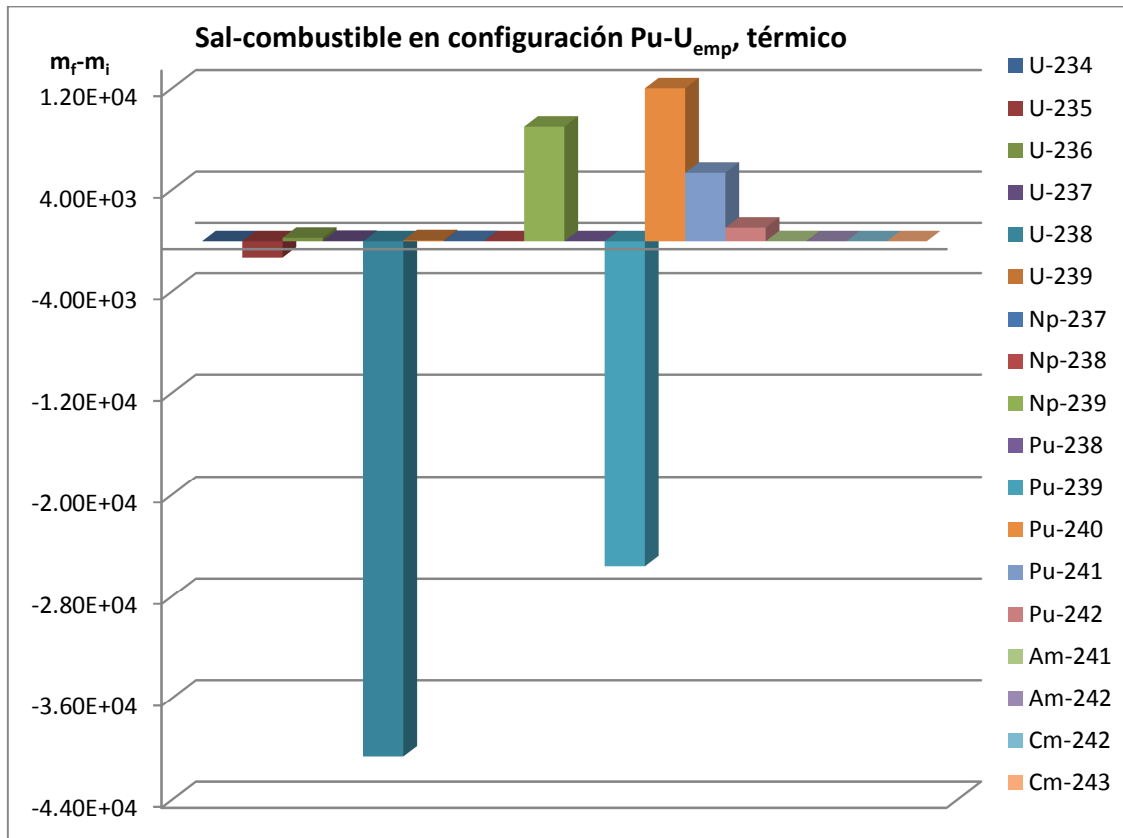


Figura 19 Quemado de la sal-combustible en la configuración Pu-U<sub>emp</sub>, modelo térmico.

Para esta configuración con Pu-U<sub>emp</sub> en el modelo térmico, en la sal-cobija se tiene la siguiente evolución de isótopos.



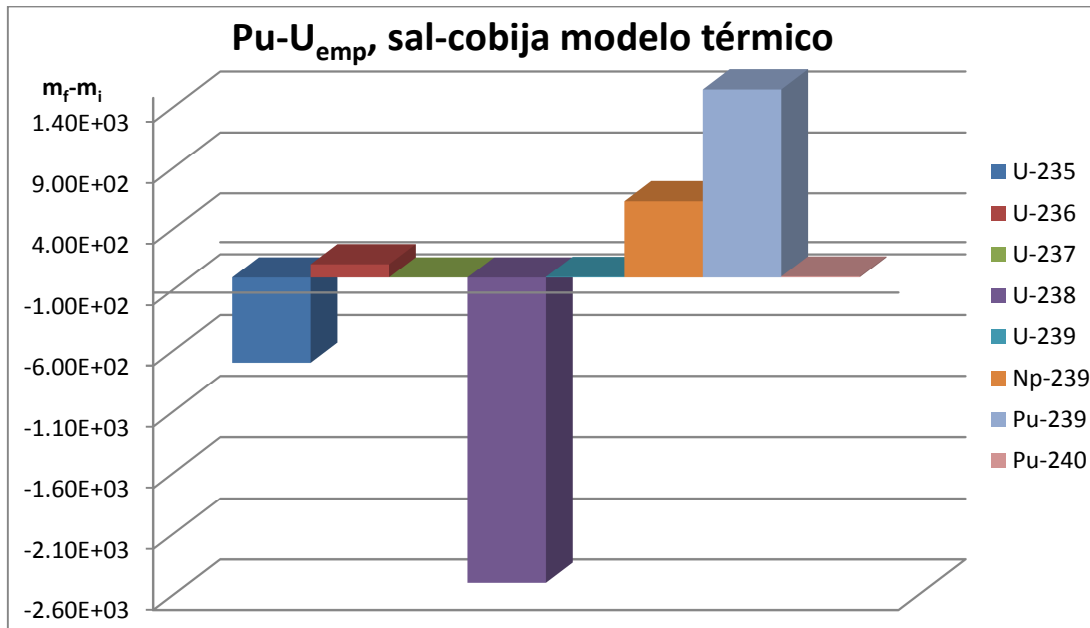


Figura 20 Quemado en sal-cobija de la configuración Pu-U<sub>emp</sub> modelo térmico.

En la Figura 20 anterior se distingue el consumo del <sup>235</sup>U (azul). El <sup>235</sup>U presente en el uranio empobrecido es poco. También se tiene el consumo del <sup>238</sup>U y la generación de los isótopos <sup>239</sup>Np y <sup>239</sup>Pu. En este a partir del <sup>238</sup>U consumido, es decir, el <sup>238</sup>U<sub>inicial</sub> - <sup>238</sup>U<sub>final</sub> del ciclo de quemado el cual transmuta, es de 25.01% en <sup>239</sup>Np y de 61.73% en <sup>239</sup>Pu.

Al igual que en el caso anterior, éste se simuló también en el modo de operación sin recarga en línea del combustible, por lo que, como se aprecia en la Figura 21, el factor de multiplicación de neutrones decrece también rápidamente con el quemado del combustible, resultado de la aparición de los productos de fisión (venenos) y del consumo del material físil.

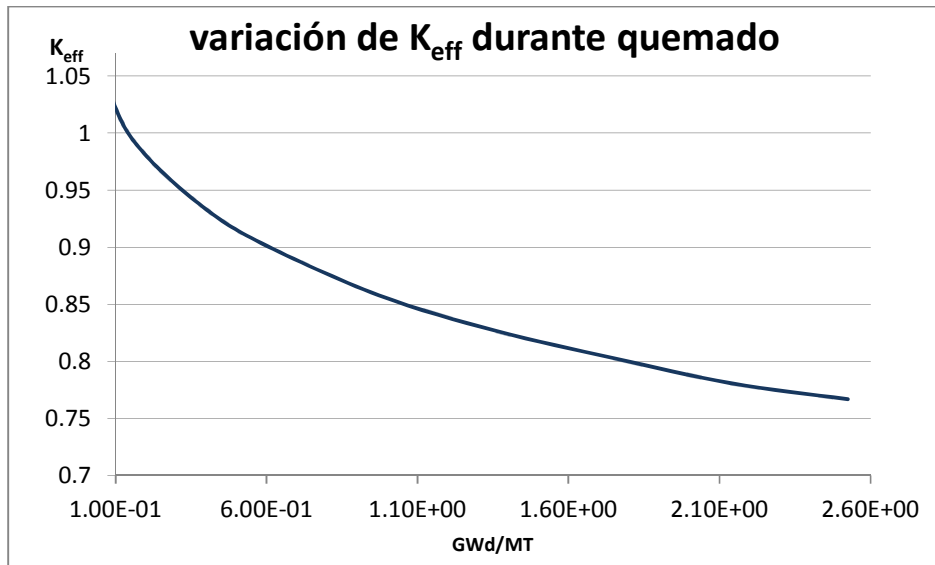


Figura 21 La variación de la  $K_{\text{eff}}$  durante el quemado en la configuración de Pu- $U_{\text{emp}}$

#### 4.1.3 CONFIGURACIÓN $^{235}\text{U}-U_{\text{emp}}$ .

Para la configuración de combustible  $^{235}\text{U}-U_{\text{emp}}$ , la evolución de isótopos en la sal-combustible, en el modelo térmico, se presenta en la siguiente Figura 22.

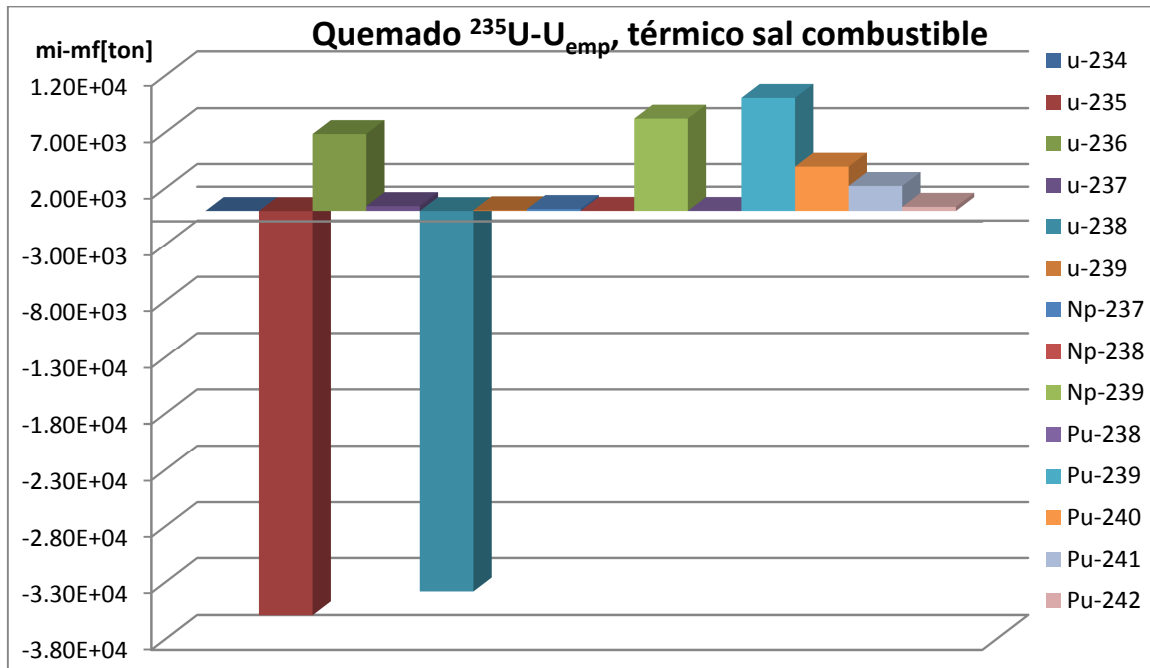


Figura 22 Quemado de la sal-combustible en la configuración  $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ , térmico.

En la Figura 22 anterior se aprecia claramente el consumo que presenta el  $^{235}\text{U}$  (color rojo), ya que es el principal material fisible de este modelo. También destaca el consumo del  $^{238}\text{U}$  (color azul) para dar paso a la generación de  $^{239}\text{Np}$  y  $^{239}\text{Pu}$  (color verde y azul claro). La generación de  $^{239}\text{Np}$  y  $^{239}\text{Pu}$  es importante en este caso ya que es la muestra de cómo se genera nuevo combustible. Es importante mencionar el porcentaje del  $^{238}\text{U}$  consumido durante el quemado simulado, es de 24.34% en  $^{239}\text{Np}$  y de 29.73% en  $^{239}\text{Pu}$ .

En la Figura 23 se presenta la evolución de los isótopos de la sal-cobija de la configuración de combustible  $\text{Pu}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ . En esta figura se puede apreciar el consumo del  $^{238}\text{U}$  para generar  $^{239}\text{Np}$  y  $^{239}\text{Pu}$ ; también se aprecia un pequeño consumo que tiene el  $^{235}\text{U}$ , debido a la poca cantidad de este isótopo en el uranio natural. En este caso, en la sal-cobija, el  $^{238}\text{U}$  consumido que ha transmutado es de 5.19% en  $^{239}\text{Np}$  y de 11.71% en  $^{239}\text{Pu}$ .

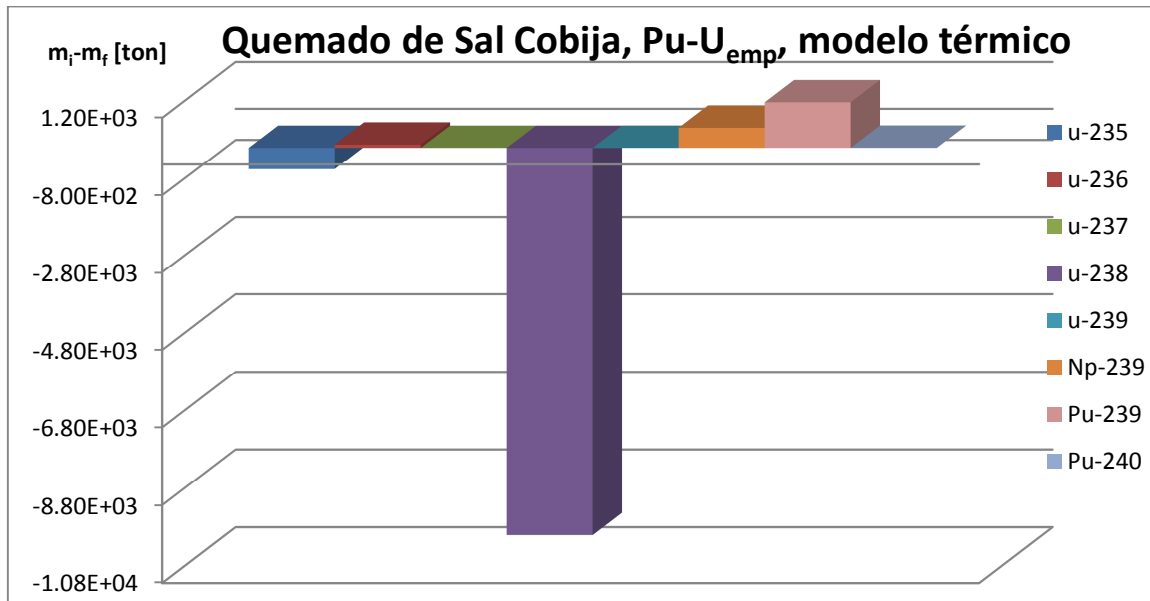


Figura 23 Quemado de la sal-cobija de la configuración Pu-U<sub>emp</sub>, en el modelo térmico

Al igual que en los casos anteriores, éste se simuló también en el modo de operación sin recarga en línea del combustible, por lo que, como se aprecia en la Figura 24, el factor de multiplicación de neutrones decrece también rápidamente con el quemado del combustible, resultado, nuevamente, de la aparición de los productos de fisión (venenos), de los actínidos y del consumo del material físil.

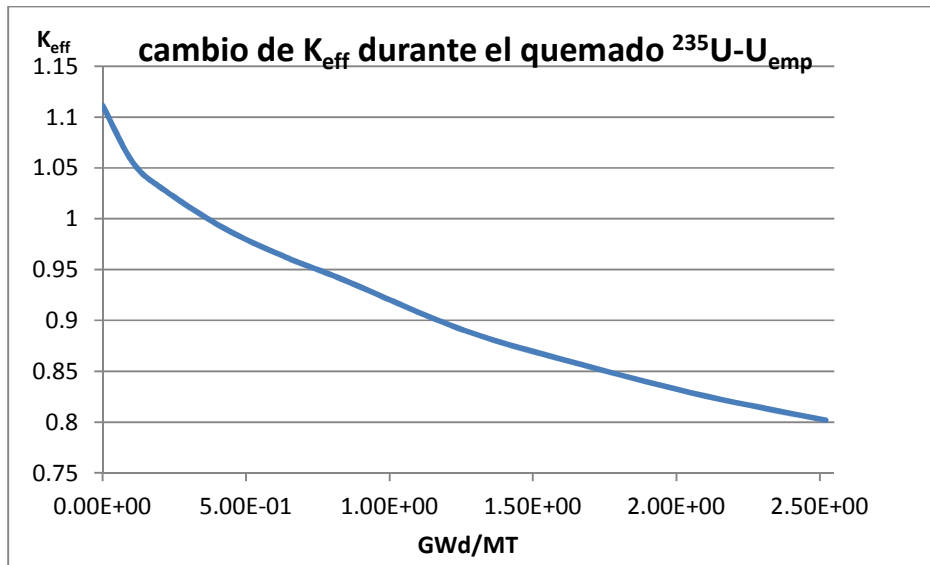


Figura 24 . Cambio de la  $K_{\text{eff}}$  durante los pasos de quemado en la configuración  $^{235}\text{U}-\text{U}_{\text{emp}}$ , modelo térmico.

#### 4.2. QUEMADO DE MODELOS RÁPIDOS

De igual manera que para las configuraciones de los modelos térmicos, se simularon arreglos con espectro rápido de neutrones, es decir, modelos en los que no interviene un material moderador, ya que, en estas configuraciones, lo que menos se necesita es quitarle energía a los neutrones que nacen de las reacciones de fisión que se producen en el núcleo del reactor.

En estos modelos se cambia la geometría, como la presentada en la Figura 13, de manera que la distancia que delimita cada frontera de la sal combustible sea la mínima posible.

El análisis del quemado de combustible se va hacer de forma separada, es decir, sal-combustible y sal-cobija. En cada una se va a dar una diferente evolución de isótopos, ya que se encuentran diferentes materiales en cada una de ellas; de esta manera se observará, a detalle, la transmutación de los isótopos y la cría que se genere en cada modelo.

#### 4.2.1 CONFIGURACIÓN $^{233}\text{U}$ -Th

En la Figura 25 se presenta la evolución de los isotopos durante el quemado simulado, en el cual se presenta un claro consumo de  $^{232}\text{Th}$ , y por lo tanto la generación de  $^{233}\text{Pa}$ , ya que este isótopo es del que se genera  $^{233}\text{U}$  nuevo. Al igual que el  $^{233}\text{Pa}$ , también se muestra la generación de otros isótopos como son el  $^{234}\text{U}$  y el  $^{235}\text{U}$ , donde el primero se considera como un parásito dentro del sistema. Cabe mencionar que el  $^{233}\text{U}$  se genera y se consume a la vez, porque es el material combustible de esta configuración. Para este modelo es importante mencionar, que a partir del  $^{232}\text{Th}$  que se ha consumido durante el quemado simulado (15 pasos de quemado), el porcentaje que se ha convertido en  $^{233}\text{Pa}$  es de 15.7%, la cual es una cantidad importante.

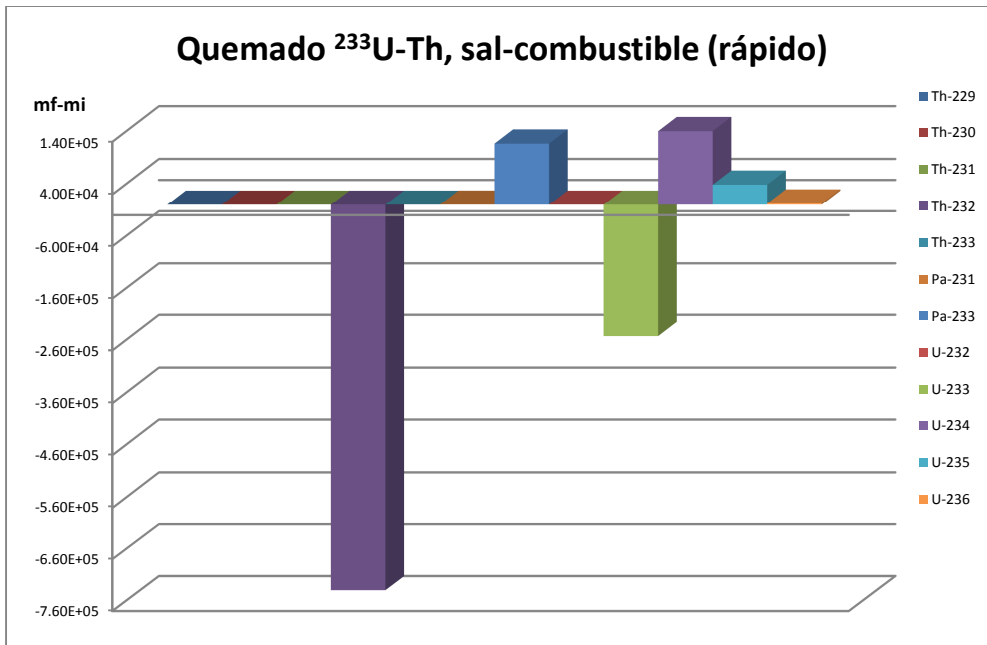


Figura 25 Figura. Modelo rápido del quemado de la sal-combustible en la configuración  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ .

En la Figura 26 se presenta la evolución de los isótopos de la misma configuración anterior  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ , en este caso es el quemado de la sal-cobija (con  $^{232}\text{ThF}_4$ ) del sistema. Es claro el consumo del  $^{232}\text{Th}$ . Este material se consume a partir del bombardeo neutrónico que recibe de las reacciones de fisión que se presentan en la

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

sal-combustible, para convertirse en  $^{233}\text{Pa}$ , y este isótopo a su vez se convierte en  $^{233}\text{U}$ . El porcentaje del  $^{232}\text{Th}$  consumido durante el quemado simulado que se ha convertido en  $^{233}\text{Pa}$  ( $^{232}\text{Th} \rightarrow \beta^- \rightarrow ^{233}\text{Pa} \rightarrow \beta^- \rightarrow ^{233}\text{U}$ ) es de 22.6%, y lo que se convierte en  $^{233}\text{U}$  es de 70.0%.

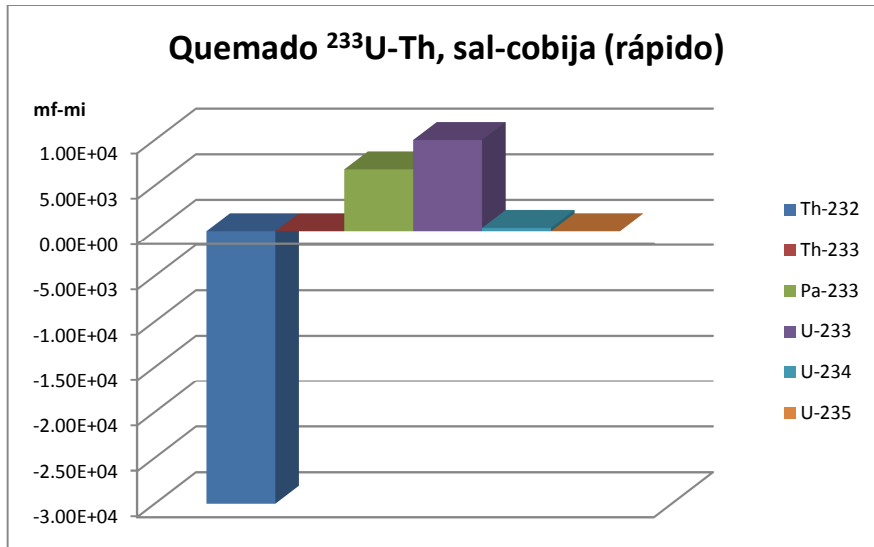


Figura 26 Quemado en la Sal-Cobija, en espectro rápido y la configuración  $^{233}\text{U}_{-}^{232}\text{Th}$ .

Este caso, como en el caso térmico, se simuló en el modo de operación sin recarga en línea del combustible, por lo que, como se aprecia en la Figura 27, el factor de multiplicación de neutrones decrece rápidamente con el quemado del combustible. No es la intención de este análisis buscar el exceso de reactividad requerido para lograr un ciclo de operación determinado, sino constatar la pérdida de reactividad con la utilización de las sales, y sobre todo estimar la evolución isotópica de las mismas.

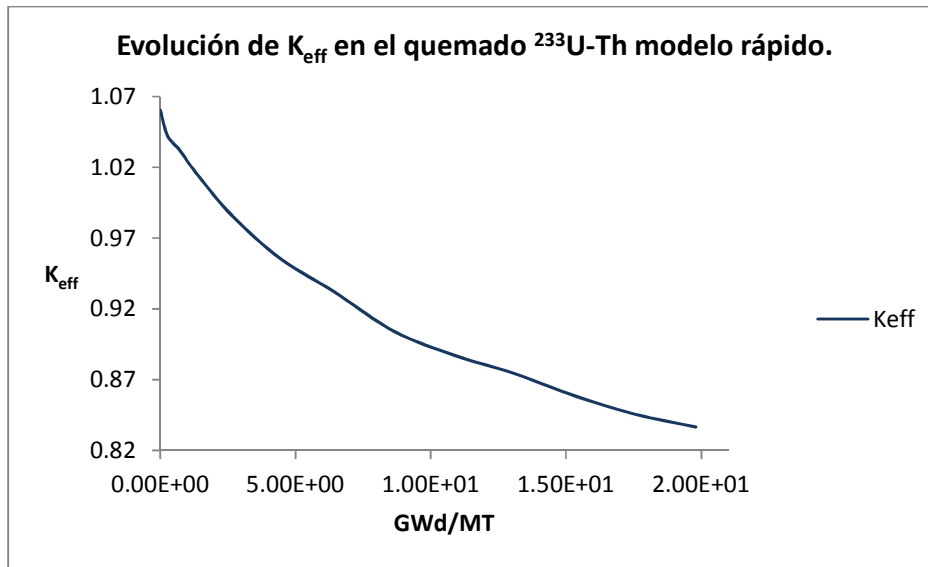


Figura 27 Evolución de la  $K_{\text{eff}}$  durante el quemado en la configuración  $^{233}\text{U}$ -Th modelo térmico.

#### 4.2.2 CONFIGURACIÓN Pu- $\text{U}_{\text{emp}}$

En la Figura 28 se presenta el quemado de la sal-combustible de la configuración  $^{239}\text{Pu}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ , en la cual se aprecia un claro consumo del  $^{238}\text{U}$  presente en el uranio empobrecido, de igual manera el consumo del  $^{239}\text{Pu}$ , ya que es éste el material fisible en esta configuración. Para este caso, el porcentaje que se ha convertido en  $^{239}\text{Np}$ , a partir del  $^{238}\text{U}$  consumido, es de 1.2%. Es un valor bajo, porque el  $^{239}\text{Np}$  decae en poco tiempo en  $^{239}\text{Pu}$ . En esta sal-combustible, el  $^{239}\text{Pu}$  se genera y se consume simultáneamente.



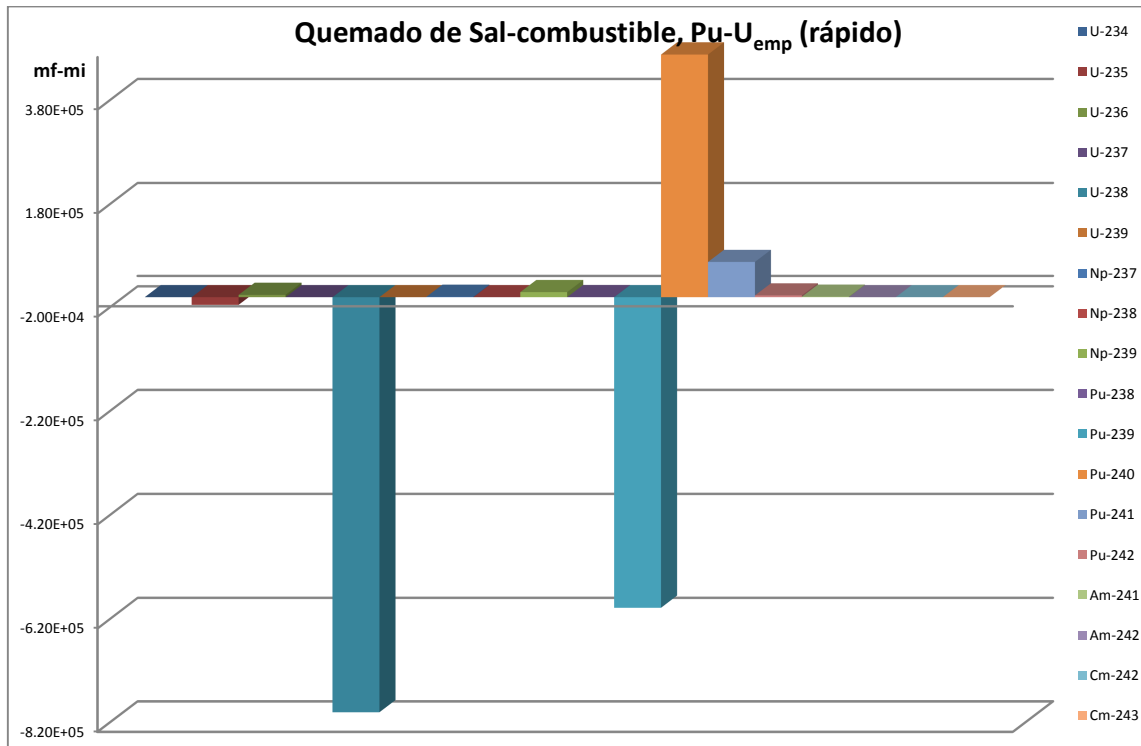


Figura 28 Quemado de la Sal-Combustible de la configuración  $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$  modelo rápido.

En la Figura 29 se presenta la evolución de los isótopos a partir del quemado de la Sal-Cobija en la configuración  $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$ , en la cual se puede apreciar un claro consumo de  $^{238}\text{U}$  presente en el uranio empobrecido. Este consumo se da a partir del bombardeo neutrónico que recibe de las reacciones de fisión que se presentan en la Sal-Combustible. Es importante mencionar que el porcentaje del  $^{238}\text{U}$  consumido, que se ha convertido en  $^{239}\text{Np}$  es de 1.3% y en Pu-239 es de 90.2%, como combustible nuevo. En este modelo se constata que el proceso de cría es muy importante.

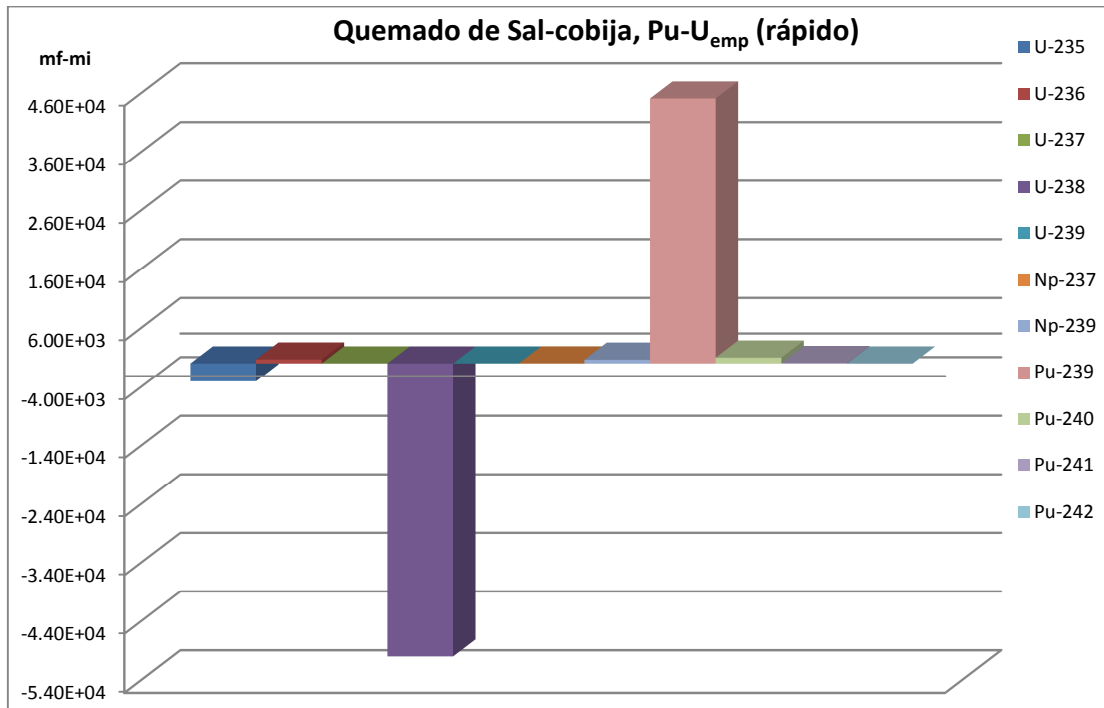


Figura 29 Quemado de la Sal-cobija en la configuración  $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$ , modelo rápido.

Al igual que en el caso anterior, éste se simuló también en el modo de operación sin recarga en línea del combustible, por lo que, como se aprecia en la Figura 30, el factor de multiplicación de neutrones decrece también rápidamente con el quemado del combustible, resultado de la aparición de los productos de fisión (venenos) y del consumo del material físil.

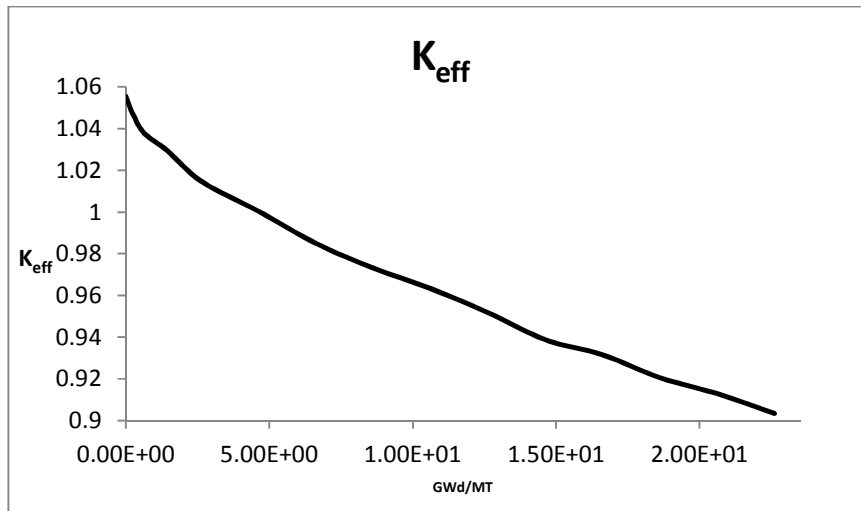


Figura 30 Evolución de la  $K_{eff}$  durante el proceso de quemado.

#### 4.2.3 CONFIGURACIÓN $^{235}\text{U}-\text{U}_{emp}$ .

En la Figura 31 se presenta el quemado de la configuración  $^{235}\text{U}-\text{U}_{emp}$ , en espectro rápido. En dicha figura se aprecia un claro consumo del  $^{238}\text{U}$  que se encuentra presente en el uranio empobrecido. Dicho consumo se debe al bombardeo neutrónico que recibe a partir de las reacciones de fisión que ocurren en el mismo sistema; además, como el espectro es rápido, el  $^{238}\text{U}$  también se logra fisiónar. Otro consumo importante que se presenta es el del  $^{235}\text{U}$ , ya que éste es el material combustible presente en esta configuración. Este consumo se debe en gran medida a las reacciones de fisión de dicho isótopo. Ya que el  $^{238}\text{U}$  es el isótopo fértil, es importante mencionar que el porcentaje que se convierte en  $^{239}\text{Np}$  es de 1.3%, y en  $^{239}\text{Pu}$  es de 77.1%, los cuales son importantes porcentajes obtenidos.

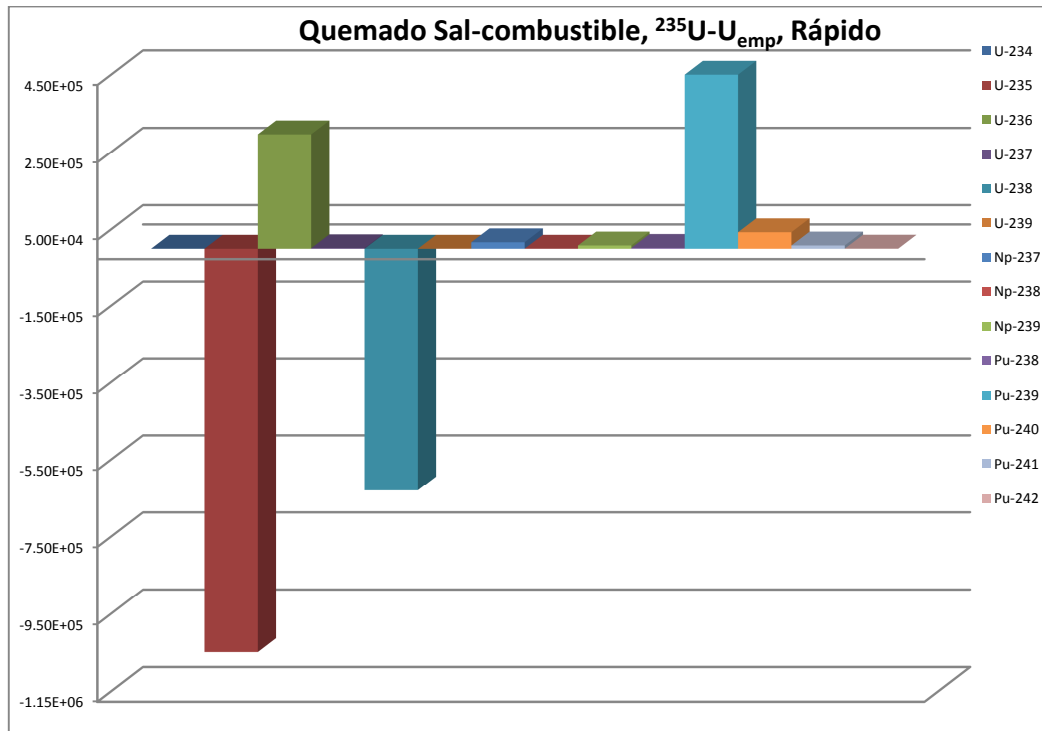


Figura 31 Quemado de la Sal-Combustible de la configuración  $^{235}\text{U-U}_{\text{emp}}$  en modelo rápido.

En la Figura 32 se presenta el quemado de la Sal-Cobija del sistema, la cual cuenta en gran medida con la presencia de material fértil. Analizando la evolución de los isótopos de esta figura, se observa un importante consumo de  $^{238}\text{U}$  presente en el uranio empobrecido; de la misma manera, se aprecia un bajo consumo de  $^{235}\text{U}$ , presente en dicho material. El  $^{238}\text{U}$  recibe el bombardeo neutrónico que ocurre en la Sal-Combustible, para así capturar un neutrón y convertirse en  $^{239}\text{Np}$ , y éste a su vez decaer y convertirse en  $^{239}\text{Pu}$ . A partir del  $^{238}\text{U}$  consumido en esta sal, el porcentaje que se ha convertido en  $^{239}\text{Np}$  es de 1.4% y en  $^{239}\text{Pu}$  es de 91.9%, los cuales son importantes porcentajes conseguidos.

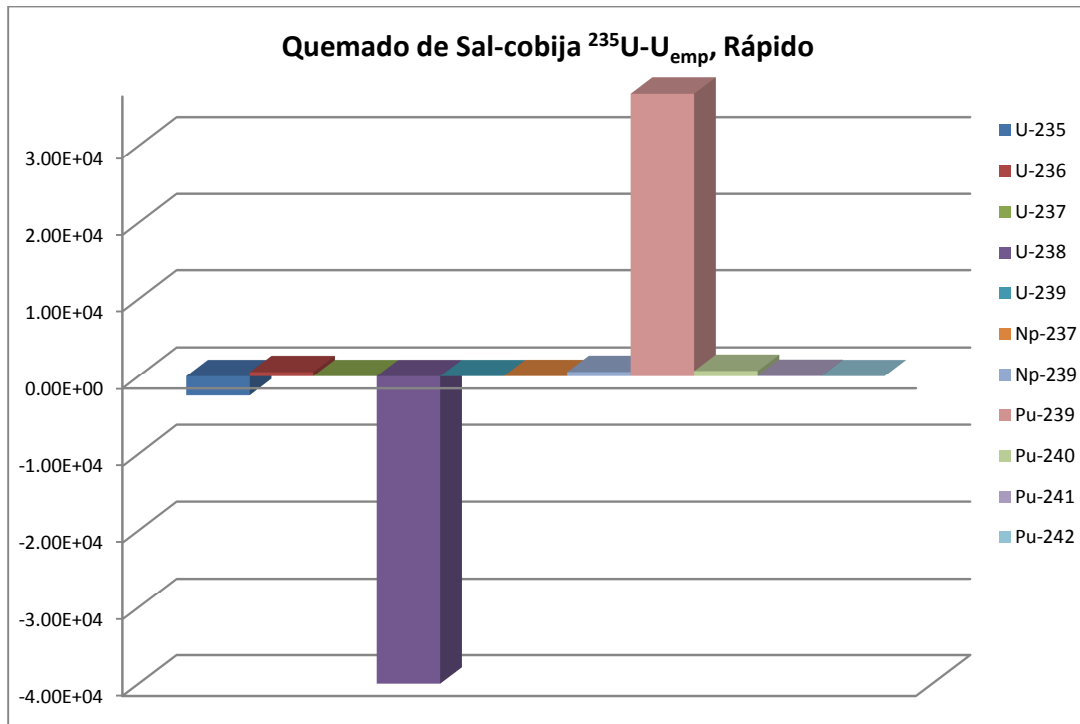


Figura 32 Quemado de la Sal-Cobija de la configuración  $^{235}\text{U}-\text{U}_{\text{emp}}$ , modelo rápido.

De la misma manera que en los casos anteriores, éste se simuló también en el modo de operación sin recarga en línea del combustible, por lo que, como se aprecia en la Figura 33, el factor de multiplicación de neutrones decrece también rápidamente con el quemado del combustible, resultado de la aparición de los productos de fisión (venenos) y del consumo del material físil.

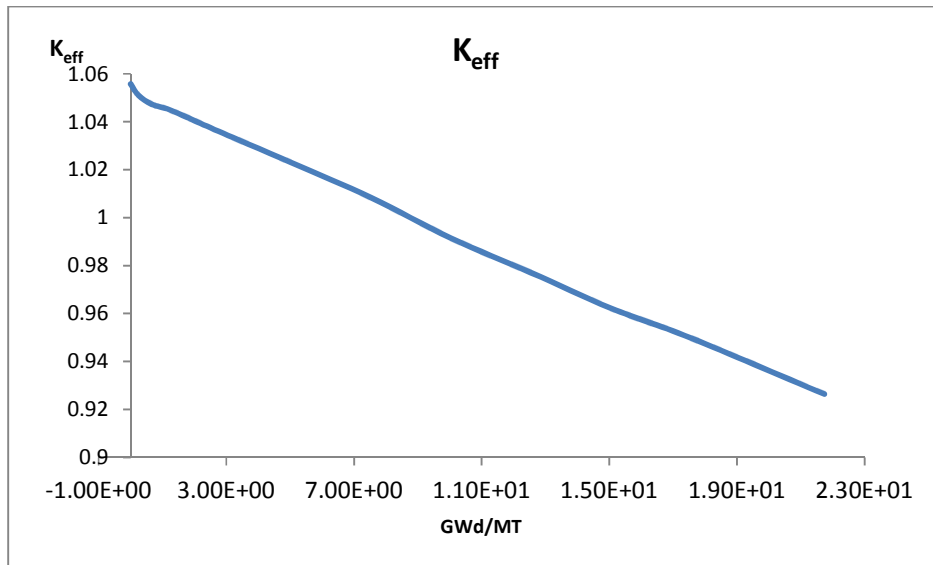


Figura 33 Evolución de la  $K_{eff}$ , de la configuración  $^{238}\text{U}-\text{U}_{emp}$ , en modelo rápido

#### 4.3. QUEMADO DE MODELOS CON COMBUSTIBLE GASTADO DE UN LWR EN LA SAL-COBIJA

Los modelos presentados anteriormente se simularon utilizando material nuevo. En estos modelos, en las sales de la cobija, se ha asignado una serie de actínidos, los cuales se encuentran presentes en el combustible gastado de los reactores de agua ligera (LWR), en el cual las proporciones de los isótopos son las que se presentan en la Tabla 11 siguiente.

Isótopo	%
U-235	0.21878305
U-238	86.3829753
Pu-238	0.33624775
Pu-239	6.09524732
Pu-240	3.17275788
Pu-241	1.25134217
Pu-242	0.96070786
Np-237	0.6862199
Am-241	0.57723203
Am-243	0.23936965
Cm-244	0.07911712

Tabla 12 Proporción de los isótopos del combustible gastado de un LWR.

De manera que la sal-cobija será una mezcla de fluoruros con cada uno de los materiales presentados en la Tabla 11 anterior.

#### 4.3.1 MODELOS TÉRMICOS

##### 4.3.1.1 CONFIGURACIÓN $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$

En la Figura 34 se presenta la evolución de isótopos en la sal-cobija que tiene la configuración  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ . En esta simulación se presenta un importante consumo de  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  y  $^{241}\text{Pu}$ , y la generación de otros nucleídos como son el  $^{241}\text{Am}$ , el  $^{240}\text{Pu}$  y el  $^{248}\text{Pu}$ . Debido a la gran presencia de diferentes actínidos en el combustible gastado de un LWR, es que se tiene una importante presencia de diferentes nucleídos en esta simulación, en donde la mayoría de ellos no presentan una participación como de cría; sin embargo, sí de consumo, lo cual es un importante objetivo para disminuir actínidos menores del combustible gastado.

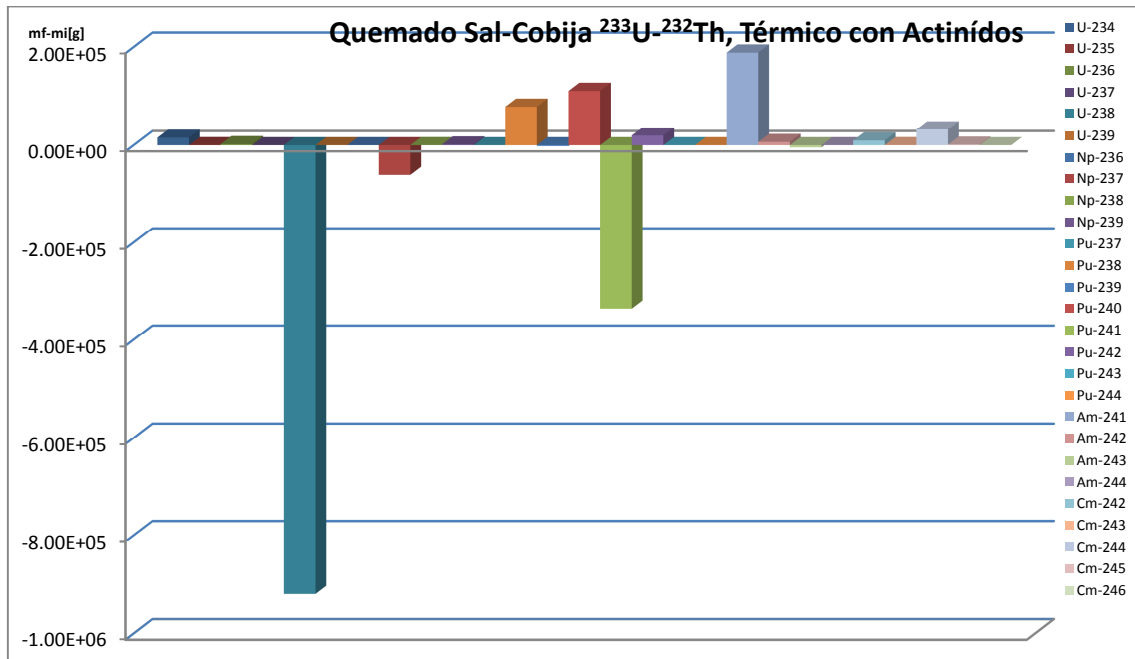


Figura 34 Evolución de actínidos en la sal-cobija, en una configuración  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ , modelo térmico con combustible gastado de un LWR.

#### 4.3.1.2 CONFIGURACIÓN $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$

En la Figura 35 se presenta la evolución de los isótopos durante el quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ . En esta simulación, la sal-cobija presenta una evolución similar a la anterior, debido a que los nucleídos presentes son los mismos y el bombardeo neutrónico se da de forma similar por medio de las reacciones de fisión que ocurren en la sal-combustible. Se aprecia un importante consumo de  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  y  $^{241}\text{Pu}$ ; y a su vez, la generación de  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  y  $^{241}\text{Am}$ , entre otros.



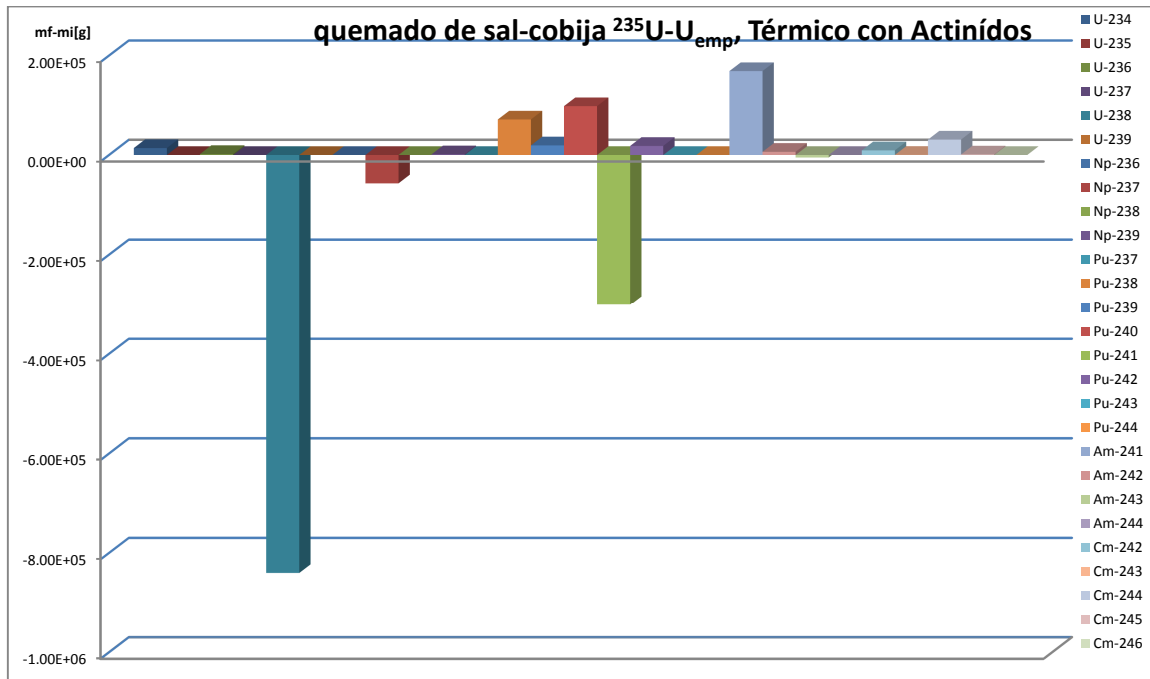


Figura 35 Quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ , modelo térmico con combustible gastado de un LWR.

#### 4.3.1.3 CONFIGURACIÓN $^{239}\text{Pu}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$

En la Figura 36 se presenta la evolución de los isótopos en la sal-cobija de la configuración  $^{239}\text{Pu}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$  en la sal-combustible. Se aprecia notablemente, como en los dos casos anteriores, un importante consumo de  $^{238}\text{U}$ , ya que éste es el material que tiene mayor presencia en el combustible gastado de un LWR; igualmente se observa un consumo de  $^{237}\text{Np}$  y  $^{241}\text{Pu}$ . También se presenta la generación de otros nucleídos como son el  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  y  $^{241}\text{Am}$ , entre otros.

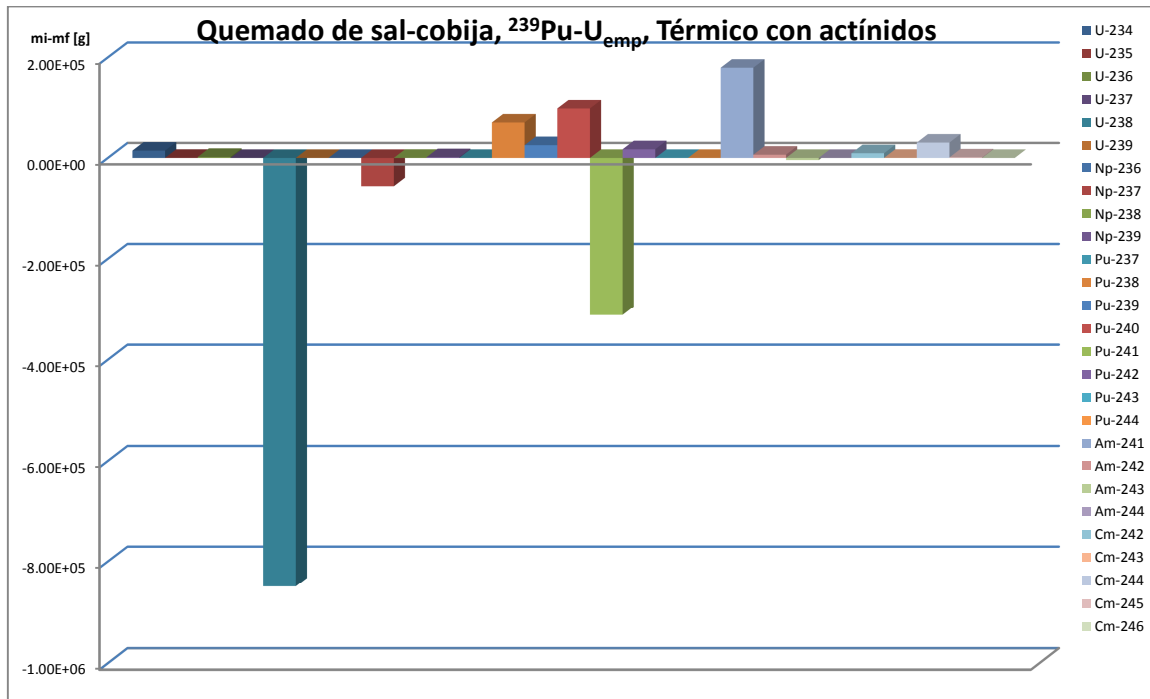


Figura 36 Quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$ , modelo térmico con combustible gastado de un LWR.

En resumen se puede decir que en estos modelos térmicos, la configuración de la sal-cobija es similar, lo que los hace diferentes es el material físil en la sal-combustible, donde ocurren las reacciones de fisión, y donde nacen nuevos neutrones que llegan a la sal-cobija para lograr la transmutación de actínidos y se logre un consumo de éstos, en el caso del combustible gastado de un LWR. Por esta razón la evolución de los isótopos se da de manera similar.

#### 4.3.2 MODELOS RÁPIDOS

En los siguientes modelos se presenta el quemado de la sal-cobija que se simularon en espectro rápido de energía. Para estos modelos, como en los casos anteriores, se incluyeron isótopos que se encuentran en el combustible gastado de un reactor de agua ligera. El quemado de la sal-combustible no se presentará para cada caso, únicamente el de la sal-cobija, y se analizará la evolución de los isótopos.

4.3.2.1 CONFIGURACIÓN  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$

En la Figura 37 se presenta la simulación del quemado de la sal-cobija, en la configuración  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$  modelo rápido, el cual presenta un importante consumo de algunos nucleídos como son:  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  y  $^{241}\text{Pu}$ , y la generación de otros como son:  $^{238}\text{Pu}$  y  $^{240}\text{Pu}$ , entre otros. Un isótopo que se produce de manera importante en esta simulación es el  $^{239}\text{Pu}$ , el cual puede ser utilizado como combustible nuevo en la sal-combustible.

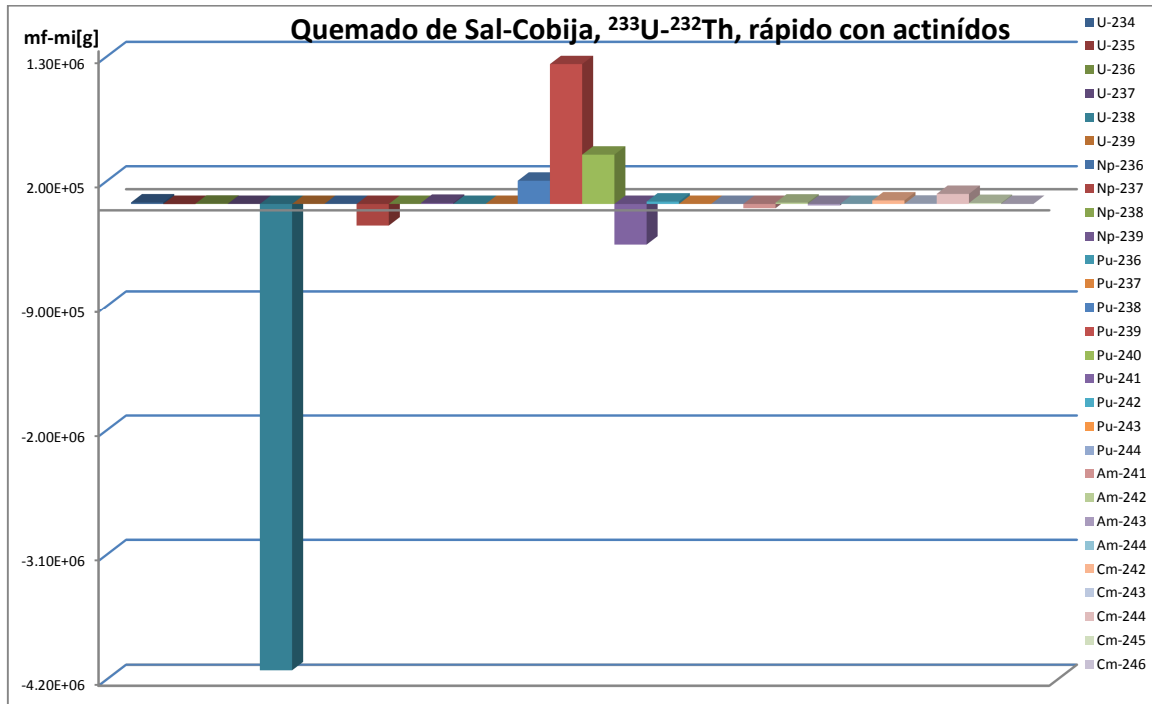


Figura 37 Quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$ , modelo rápido con combustible gastado de un LWR.

4.3.2.2 CONFIGURACIÓN  $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

En la Figura 38 se presenta la simulación del quemado de la sal-cobija en la configuración de  $^{235}\text{U-U}_{\text{emp}}$  con combustible gastado de un LWR, el cual presenta un importante consumo de  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  y  $^{241}\text{Pu}$ ; así como la generación de isótopos como son:  $^{234}\text{U}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$  y  $^{241}\text{Am}$ , entre otros. En este caso, la generación de  $^{239}\text{Pu}$  es también de suma importancia, ya que se puede utilizar en la sal-combustible como isótopo físil.

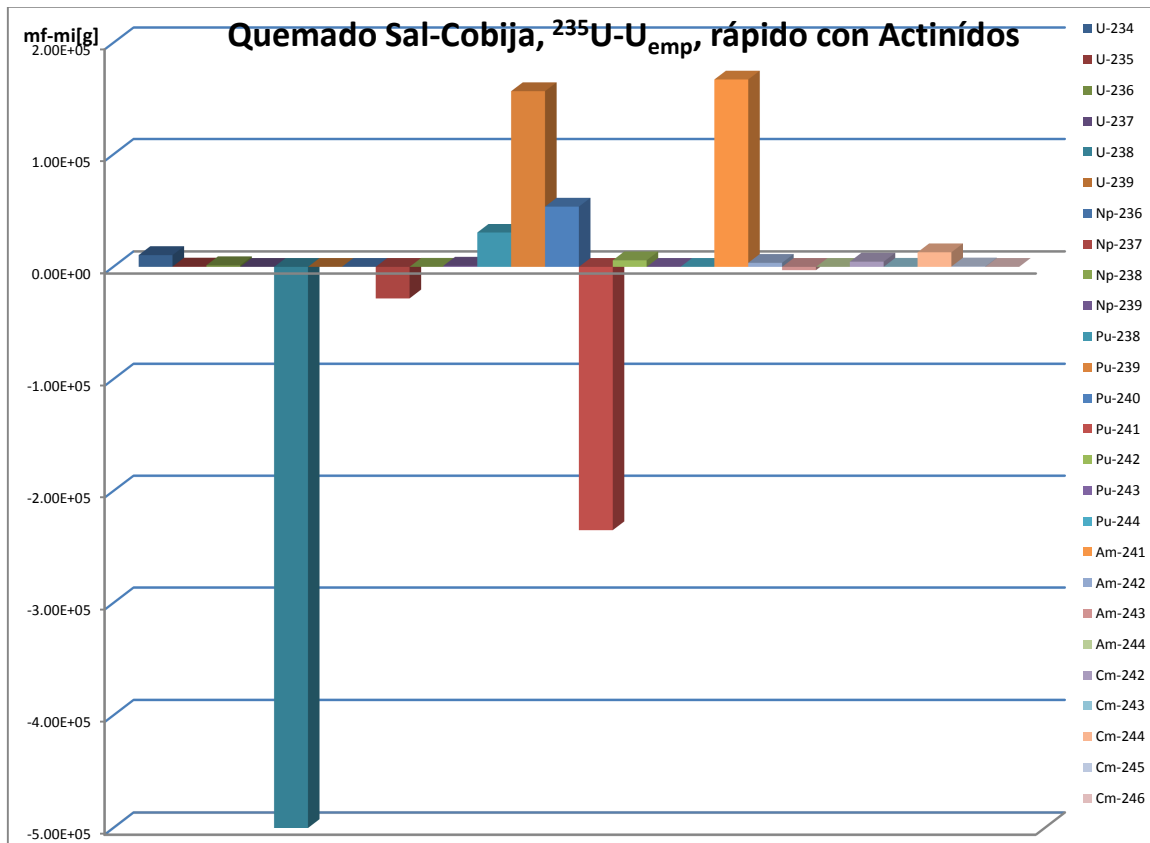


Figura 38 Quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{235}\text{U-U}_{\text{emp}}$  modelo rápido con combustible gastado de un LWR.

### 4.3.2.3 CONFIGURACIÓN $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$

En la Figura 39 se presenta la simulación del quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$  con combustible gastado de un LWR. En este caso se

aprecia un importante consumo de  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  y  $^{241}\text{Pu}$ ; de igual manera se presenta la generación de  $^{234}\text{U}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$  y  $^{244}\text{Cm}$  entre otros.

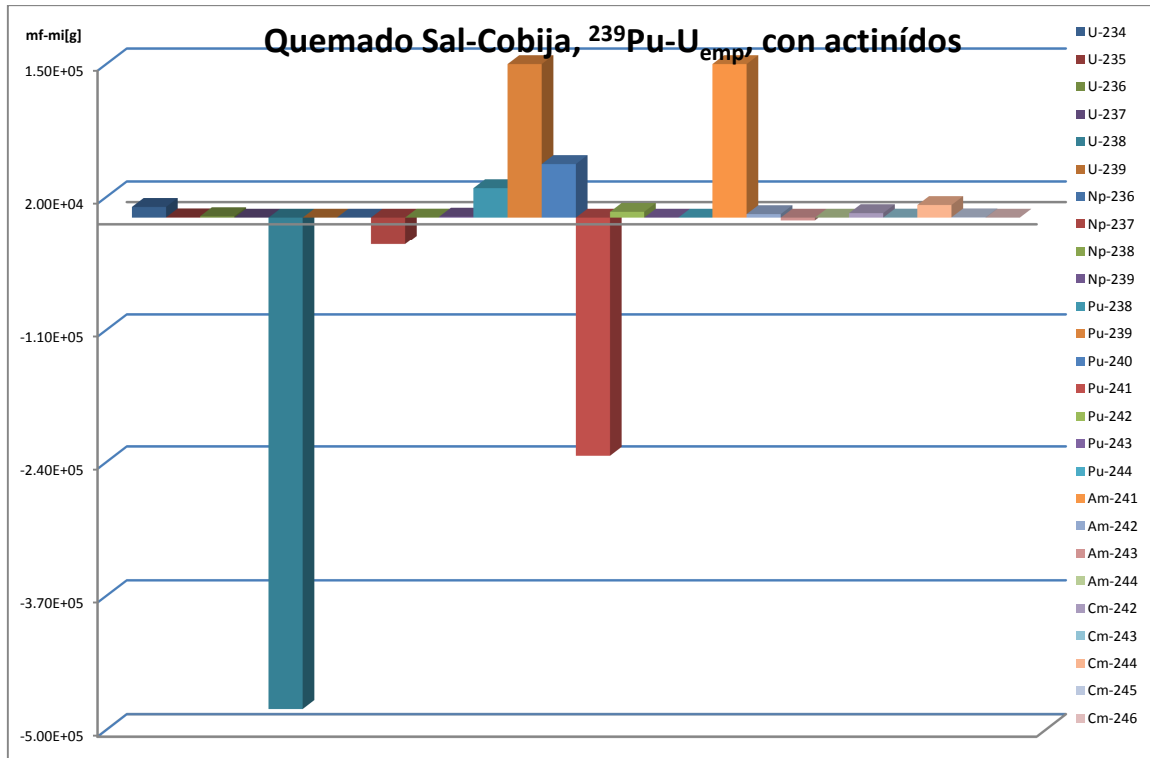


Figura 39 Quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{239}\text{Pu-U}_{\text{emp}}$ , modelo rápido con combustible gastado de un LWR.

#### 4.3.3. MODELOS CON ACTÍNIDOS SIN URANIO

Los casos siguientes se modelaron sin considerar uranio en el conjunto de isótopos presentes en el combustible gastado de un LWR. Estas simulaciones se hicieron con la finalidad de analizar lo que sucede con los demás isótopos presentes, es decir, tener un análisis de la transmutación del plutonio y los actínidos menores del combustible gastado. Al eliminar el uranio de la mezcla de los isótopos contenidos en el combustible gastado, sus proporciones quedan como sigue; ver Tabla 12 siguiente.

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

Isótopo	%
Pu-238	2.50964088
Pu-239	45.4928899
Pu-240	23.6804049
Pu-241	9.3395999
Pu-242	7.17040251
Np-237	5.12171608
Am-241	4.30826705
Am-243	1.78657508
Cm-244	0.59050374

Tabla 13 Proporción de nucleídos en el combustible gastado de un LWR sin considerar al uranio.

Para estas simulaciones, y de manera representativa, se consideró únicamente la configuración  $^{235}\text{U}-\text{U}_{\text{emp}}$ , en los dos espectros de energía: rápido y térmico.

### 4.3.3.1. MODELO TÉRMICO

En la Figura 40 se presenta la simulación del quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{235}\text{U}-\text{U}_{\text{emp}}$  en el modelo térmico, con combustible gastado de un LWR sin uranio. Se aprecia un importante consumo del  $^{239}\text{Pu}$  principalmente, y de  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{241}\text{Pu}$  y  $^{241}\text{Am}$  en menor medida. A diferencia de los casos anteriores, estos nucleídos se consumen, en lugar de producirse; los isótopos que se generan son:  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  y  $^{242}\text{Cm}$ , entre otros.

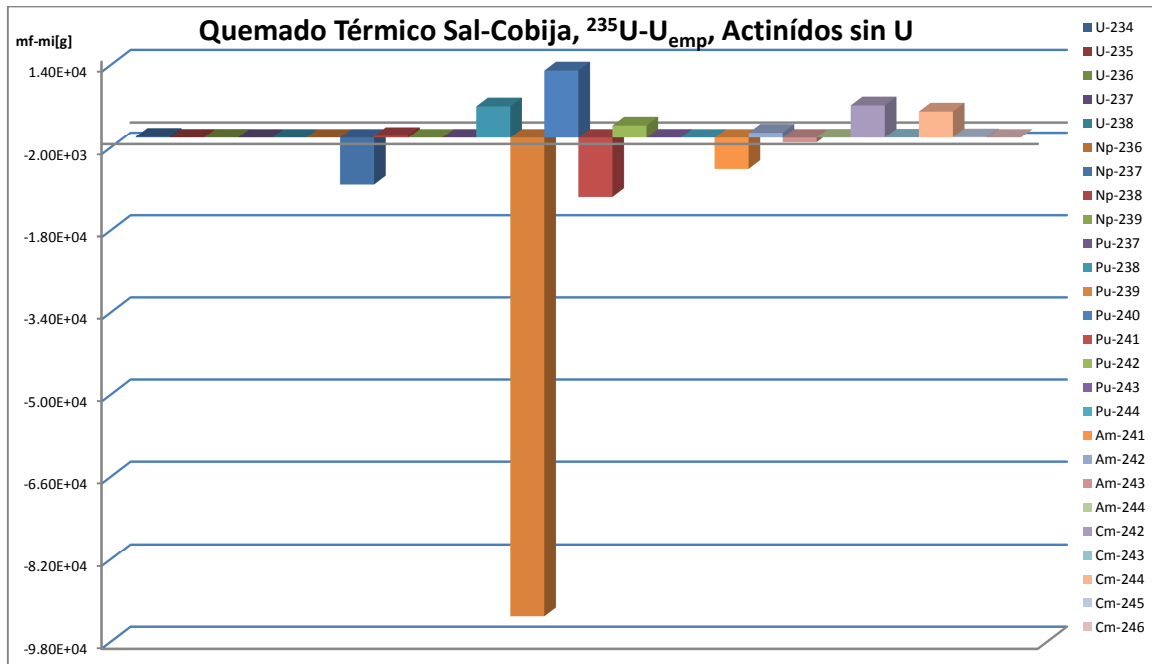


Figura 40 Quemado de la sal-cobija de la configuración <sup>235</sup>U-U<sub>emp</sub> en su modelo térmico, con combustible gastado de un LWR, sin uranio.

#### 4.3.3.2. MODELO RÁPIDO

En la Figura 41 se presenta la evolución de los isótopos de la simulación de la sal-cobija en la configuración <sup>235</sup>U-U<sub>emp</sub> en su modelo rápido, con combustible gastado de un LWR sin considerar al uranio. Al igual que el caso anterior, se aprecia un importante consumo de <sup>239</sup>Pu y de <sup>237</sup>Np, y <sup>241</sup>Pu en menor medida. De la misma manera los materiales que se generan son: <sup>238</sup>Pu, <sup>240</sup>Pu, <sup>242</sup>Pu, <sup>242</sup>Cm y <sup>244</sup>Cm, entre otros, los cuales pueden ser considerados como “parásitos” en el sistema.

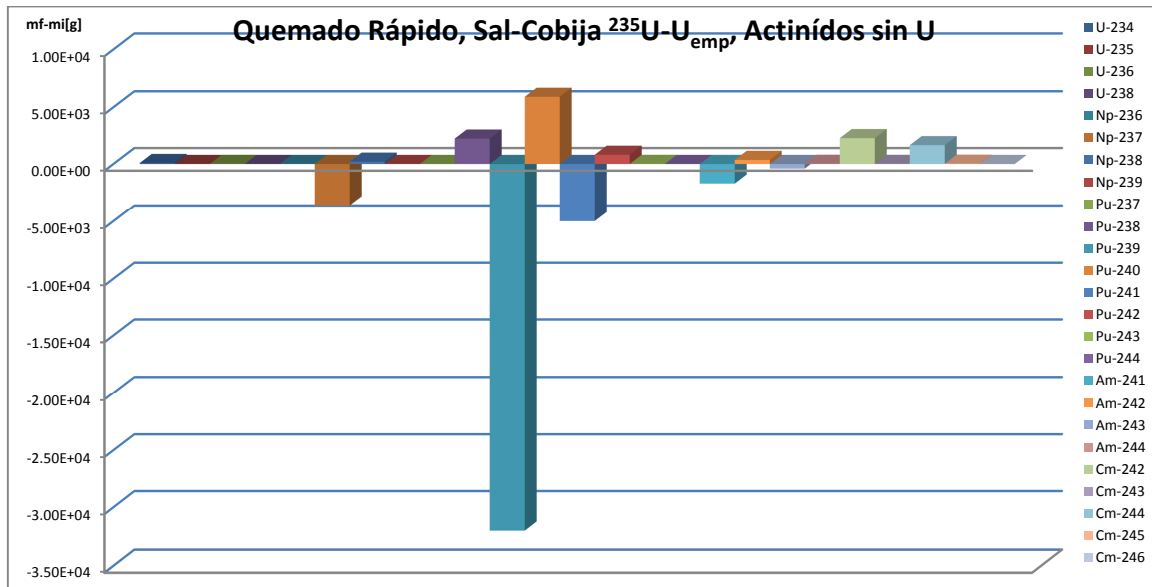


Figura 41 Quemado de la sal-cobija en la configuración  $^{235}\text{U}-\text{U}_{\text{emp}}$  en modelo rápido, con combustible gastado de un LWR, sin considerar al uranio.



## CONCLUSIONES

Los resultados presentados en este trabajo de investigación ponen de manifiesto la versatilidad del reactor de sales fundidas para poder funcionar en espectro térmico y rápido, además de la particularidad del estado físico de las sales en el reactor, lo cual le permite una recarga del combustible en línea este modo de operación evita la necesidad de elevados excesos de reactividad, lo que se puede traducir en menores costos de combustible y por otro lado se puede facilitar el apagado seguro del reactor. Un comportamiento importante de mencionar es la utilización de uranio empobrecido en lugar de uranio natural, ya que esto tiene una ventaja económica al utilizar un recurso que actualmente se considera como residuo, y aprovechar el  $^{238}\text{U}$  para la cría de plutonio.

Las variaciones de la  $K_{\text{eff}}$  en los primeros modelos simulados (rápidos y térmicos) en la variación de la distancia entre cilindros de sal-combustible fue determinante para determinar la geometría para cada modelo: una para el térmico y otra para el rápido, es decir, que para el modelo rápido se requiere que la sal combustible se encuentre lo más cercana posible, para evitar la pérdida de energía de los neutrones, disminuir las capturas parásitas, y aprovechar mejor la relación captura a fisión que presentan los isótopos pesados a altas energías.

Cada una de las diferentes combinaciones de sal-combustible y sal-cobija, de cada caso analizado, tiene su peculiar evolución de actínidos y su criticidad. Para los modelos térmico y rápido, se encontró que la criticidad es aceptable con poco material combustible para el caso del  $^{233}\text{U}$ , comparado con los casos con  $^{235}\text{U}$  y  $^{239}\text{Pu}$ , es decir, que se requiere menos  $^{233}\text{UF}_4$  para que el sistema sea crítico que en los casos de los otros materiales físi les.

Es importante mencionar también que en los análisis de quemado de sal-combustible y sal-cobija, la configuración de  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$  presenta una menor generación de actínidos menores, en comparación de las configuraciones  $^{235}\text{U}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$  y  $^{239}\text{Pu}$ - $\text{U}_{\text{emp}}$ ; este último caso es el que más generación de actínidos menores genera. Esto muestra una ventaja de la configuración  $^{233}\text{U}$ - $^{232}\text{Th}$  sobre las demás configuraciones.



## APÉNDICE A

### DENSIDAD ATÓMICA

En la mayoría de los códigos de Monte Carlo (en los códigos neutrónicos) se requiere que se conozcan los datos de las densidades atómicas de los materiales involucrados en el análisis del modelo a evaluar. El problema que a menudo se puede encontrar es que los datos asignados a los modelos se conocen únicamente en forma de porcentaje en peso, de porcentaje en volumen, densidad de la solución, densidad de elementos individuales, etc. Estos datos no siempre son directamente compatibles (interpretados) por el código a usar, en este caso MCNPX. Por lo tanto, es necesario transformar a densidades atómicas los datos que tengamos disponibles.

#### DE UN MATERIAL PARTIENDO DE LA DENSIDAD MASICA.

Por ejemplo, cálculo de la densidad atómica del Uranio-238 (U-238) para una densidad nominal de  $19.1 \text{ g/cm}^3$ .

La ecuación para la densidad atómica es

Ecuación 1

$$n = \frac{\rho N_a}{A}$$

Donde

$n \equiv$  densidad atómica (átomos/cm<sup>3</sup>)

$\rho \equiv$  densidad del material (g/cm<sup>3</sup>)

$N_a \equiv$  número de avogadro =  $0.6022 \times 10^{24}$  (átomos/mol)

$A \equiv$  peso atómico del isótopo (g/mol)

Para este ejemplo,

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

$$\rho = 19.1 \text{ g / cm}^3 \quad N_a = 0.6022 \times 10^{24} \text{ atomos / mol} \quad A = 238.05 \text{ gr / mol}$$
$$n = 4.832 \times 10^{22} \text{ atomos / cm}^3$$

La densidad atómica del U-238 en este ejemplo es de  $4.832 \times 10^{22}$  átomos por  $\text{cm}^3$ , estas unidades son bien interpretadas por algunos códigos, pero de otra manera requieren que se indique en átomos por barn-cm ya que la sección eficaz generalmente se representa en barns. Recordando que un barn es  $10^{-24} \text{ cm}^2$ , por lo que se puede multiplicar el resultado por este valor, dado así este valor en una densidad atómica de U-238 de  $4.832 \times 10^{-2}$  átomos por barn-cm. Sin embargo, en lugar de realizar este paso para cada cálculo, el número de Avogadro a menudo se expresa como  $0.6022 \text{ átomos-cm}^2 \text{ por mol-barn}$ . Esta representación del número de Avogadro incorpora las propias unidades directamente, dadas en cada cálculo de los valores de la densidad atómica en átomos por barn-cm.

## DOS MATERIALES A PARTIR DE LAS FRACCIONES DE PESO Y DENSIDAD

Cuando se tiene una mezcla de materiales con una densidad conocida y una fracción individual de cada material, la ecuación de la densidad atómica está dada por la siguiente expresión:

$$N_i = \frac{\rho_{mix} \times w f_i \times N_a}{A_i}$$

Ecuación 2

Donde:

$N_i \equiv$  Densidad atómica del material  $i$

$\rho_{mix} \equiv$  Densidad de la mezcla

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

$wf_i \equiv$  Es la fracción presente del material  $i$

$A_i \equiv$  Peso atómico del material  $i$ .

Como ejemplo, una muestra de cómo se calcula las densidades del U-235 y el U-238 en porcentaje de uranio enriquecido.

$$N_{U235} = \frac{(18.9 \text{ g/cm}^3) \times (0.03) \times (0.6022 \text{ átomos} \cdot \text{cm}^2 / \text{mol} \cdot \text{b})}{235.04 \text{ g/mol}}$$

$$N_{U238} = \frac{(18.9 \text{ g/cm}^3) \times (0.97) \times (0.6022 \text{ átomos} \cdot \text{cm}^2 / \text{mol} \cdot \text{b})}{235.04 \text{ g/mol}}$$

$$N_{U235} = 0.0014527 \cdot \frac{\text{átomos}}{\text{b} \cdot \text{cm}}$$

$$N_{U238} = 0.0463774 \cdot \frac{\text{átomos}}{\text{b} \cdot \text{cm}}$$

Por lo tanto las fracciones atómicas están dadas por:

$$U-235 = \frac{(1.45E-3)}{(1.45E-3) + (4.64E-2)} = 0.0303$$

$$U-238 = \frac{(4.64E-2)}{(1.45E-3) + (4.64E-2)} = 0.9697$$

Los pesos atómicos de los dos isótopos están dados por un porcentaje; hay una diferencia entre las fracciones de peso y las fracciones atómicas. Siempre que se conozca la densidad de la mezcla, y las fracciones individuales de cada material que contiene ésta, se aplica a los materiales presentes.

## DOS MATERIALES CONTANDO CON EL PESO EN FRACCIONES Y LA DENSIDAD DE CADA MATERIAL

Las densidades individuales y las fracciones en peso son conocidas, entonces la densidad de la mezcla se determina de la forma:

Ecuación 3

$$\frac{1}{\rho_{mix}} = \frac{wf_1}{\rho_1} + \frac{wf_2}{\rho_2} + \dots + \frac{wf_i}{\rho_i}$$

En el ejemplo previo, se asume la densidad de U-235 de 18.6 g/cm<sup>3</sup> y para el U-238 de 18.9 g/cm<sup>3</sup>, por lo tanto:

$$\frac{1}{\rho_{mix}} = \frac{0.03}{18.6} + \frac{0.97}{18.9}$$

$$\rho_{mix} = 18.89 \frac{g}{cm^3}$$

Después de obtener la densidad de la mezcla, las densidades atómicas se calculan usando la ecuación de N<sub>i</sub> (Ver Ecuación 1)

## DOS MATERIALES TENIENDO LAS FRACCIONES ATOMICAS Y LA DENSIDAD DE LA MEZCLA

Aunque las fracciones en peso generalmente se usan para enriquecimientos, las fracciones atómicas se pueden encontrar documentadas y al alcance. Al usar fracciones atómicas, un promedio del peso atómico se puede determinar por:

Ecuación 4

$$\bar{A} = af_1 \times A_1 + af_2 \times A_2 + \dots + af_i \times A_i$$

El promedio del peso atómico se usa en el cálculo de la densidad atómica de la mezcla:

Ecuación 5

$$N_{mix} = \frac{\rho_{mix} \times N_a}{\bar{A}}$$

Por lo tanto, la densidad atómica individual es calculada:

$$N_i = af_i \times N_{mix}$$

Por ejemplo, el boro natural tiene una densidad de 2.34 g/cm<sup>3</sup> con una fracción de 0.199 de B-10 y 0.801 de B-11.

$$\bar{A} = 0.199 \times 10.01 + 0.801 \times 11.01 = 10.81 g \frac{B_{nat}}{mol}$$

$$N_{mix} = N_{B_{nat}} = \frac{2.34 g \frac{B_{nat}}{cm^3} \times 0.6022 \frac{atom - cm^2}{mol - b}}{10.81 \frac{B_{nat}}{mol}}$$

$$= 1.304 \times 10^{-1} \frac{atoms_{B_{nat}}}{b - cm}$$

Ahora como ya se conoce qué fracción de boro natural es B-10, se puede calcular la densidad atómica de B-10 en el boro natural.

$$N_{B-10} = 0.199 \frac{atom_{B-10}}{atom_{B_{nat}}} \times 1.304 \times 10^{-1} \frac{atom_{B_{nat}}}{b - cm} = 2.59 \times 10^{-2} \frac{atom_{B-10}}{b - cm}$$

De la misma manera para el B-11

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

$$N_{B-11} = 0.801 \frac{atom_{B-11}}{atom_{B_{nat}}} \times 1.304 \times 10^{-1} \frac{atom_{B_{nat}}}{b - cm} = 1.045 \times 10^{-1} \frac{atom_{B-11}}{b - cm}$$



## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

### APÉNDICE B

#### EJEMPLO DE UN INPUT EN MCNPX.

MSR Rapido con 5.1% PuF4 U emp en cobija cilind concent

```
1 2 -7.92          -11 15 -12          IMP:N=1
2 1 0.162450972  -1 12 -13          IMP:N=1
3 4 -8.22          1 -2 12 -13          IMP:N=1
4 1 0.162450972  2 -3 12 -13          IMP:N=1
5 4 -8.22          3 -4 12 -13          IMP:N=1
6 1 0.162450972  4 -5 12 -13          IMP:N=1
7 4 -8.22          5 -6 12 -13          IMP:N=1
8 1 0.162450972  6 -7 12 -13          IMP:N=1
9 4 -8.22          7 -8 12 -13          IMP:N=1
10 3 0.35804655   8 -9 12 -13          IMP:N=1
11 4 -8.22          9 -10 12 -13          IMP:N=1
12 5 -2.51         10 -11 12 -13          IMP:N=1
13 2 -7.92         -11 13 -14          IMP:N=1
14 0              11:14:-15          IMP:N=0
```

C superficie

```
1 cz 36
2 cz 37
3 cz 73
4 cz 74
5 cz 110
6 cz 111
7 cz 148.4
8 cz 149.4
9 cz 229.4
10 cz 239.4
11 cz 249.4
12 pz 0
13 pz 295
```

## Estudio Neutrónico de un Reactor Nuclear de Sales Fundidas

```
14 pz 305
15 pz -10
C datos de celda
kcode 4000 1.0 15 115
ksrc 0 0 170
m1 94239.60 0.000436852 92238.60 0.00178795 92235 0.00000507013
    3007 0.0756508 9019 0.0845703
m2 26000 -0.695 24000 -0.190 28000 -0.095 25055 -0.020
m3 92235 3.96556E-06 92238 0.0347836 94238 0.00013573
    94239 0.00244836 94240 0.00127186 94241 0.0005007
    94242 0.00038228 93237 0.00027703 95241 0.00023082
    95243 9.5084E-05 96244 2.35393E-06 9019 0.239224 3007 0.0786971
m4 28000 -0.43 24000 -0.2975 26000 -0.15 42000 -0.05
    27059 -0.045 74000 -0.0275
m5 5010 -0.1557374 5011 -0.6268626 6000 -0.2174
print
```

REFERENCIAS:

CAPITULO 1

1. David LeBlanc, Ottawa Ontario “Molten Salt Reactors: A New Vision for a Generation IV Concept” Physics Department, Carleton University (2010)
2. Charles W. “Forsberg An Advanced Molten Salt Reactor Using High-Temperature Reactor Technology”, Conference Paper Number: 4152 Session: 3.06; Topical Area: 3 Abstract Prepared for 2004 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP >04)
3. Introduction to the LFTR, the Liquid Fluoride Thorium. [http://www.thoriumsingapore.com/content/index.php?option=com\\_content&view=article&id=50&Itemid=37](http://www.thoriumsingapore.com/content/index.php?option=com_content&view=article&id=50&Itemid=37) [Consulta Febrero 2011]
4. HASTELLOY G-30 alloy, Haynes International Technical Information.

CAPITULO 2

1. Caro Rafael, Física de Reactores Nucleares, JEN Madrid 1976.
2. François, Juan Luis. Apuntes de la asignatura Análisis de Reactores Nucleares, Facultad de Ingeniería-UNAM, 2008.
3. Briesmeister, J.F. “MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code.”. Los Alamos, Manual La-12625-M, Version 4B, March 1997.
4. Pelowitz, D. B. “MCNPX USER´S MANUAL. Version 2.6.0”. Report LA-CP-07-1473. April 2008.
5. Gallego, N. A “Componentes Aleatorios Cerrados. Estimación y Simulación de Imágenes” IX Conferencia Española de Biometría la Coruña, 28-30 de Mayo 2003.