

MODELADO DE LIBERACIÓN DE GASES DE FISIÓN PARA COMBUSTIBLES DE ÓXIDOS MIXTOS DE TORIO

MODELING OF FISSION GAS RELEASE FOR MIXED OXIDES FUEL OF THORIUM

Matias E. Loza Peralta^a, Emilio González^a, Edgar Bea^b y Alejandro Soba^{a,b}

^a Sección Códigos y Modelos, Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear, CAC, CNEA, Av. Gral. Paz 1499, 1650 Buenos Aires, Argentina, loza@cnea.gov.ar, megonzal@cnea.gov.ar, soba@cnea.gov.ar

^b CONICET,

Palabras clave: liberación de gases de fisión, ciclo de torio, código DIONISIO.

Resumen. El dióxido de torio es un combustible alternativo al dióxido de uranio que presenta ciertas ventajas como la mayor abundancia en la corteza terrestre y mayor eficiencia neutrónica. Además posee una conductividad térmica más elevada que permite evacuar el calor del combustible en forma más eficiente. Observando estas ventajas se estudia uno de los numerosos fenómenos que ocurren en dicho combustible: la liberación de gases de fisión. Para este fenómeno se desarrolla un modelo basado en el ya existente en DIONISIO para dióxido de uranio, que predice el porcentaje de liberación de dichos gases mediante el mecanismo de difusión intergranular, acumulación en borde de grano y posteriormente, una vez alcanzada la saturación, liberación al volumen libre de la barra. Los resultados de este modelo se contrastan con datos experimentales del Programa de Desarrollo de reactores reproductores de agua liviana (LWBR Development Program), llevado adelante por el Departamento de Energía estadounidense. Para caracterizar el material ThO₂, se utilizan propiedades termomecánicas y termoquímicas provistas por la literatura, muchas de las cuales han sido determinadas mediante cálculos electrónicos de primeros principios.

Keywords: fission gas release, thorium cycle, DIONISIO fuel code.

Abstract. Thorium dioxide is an alternative fuel for uranium dioxide that presents several advantages such as more abundance in Earth's crust and greater neutronic efficiency. Moreover, it has a higher thermal conductivity that allows heat to be evacuated from the fuel more efficiently. Observing these advantages, one of the numerous phenomena that occur in this fuel is studied: fission gas release. For this phenomenon, a model based on the one already existing in DIONISIO for uranium dioxide is developed, which predicts the percentage of those gases release by means of intergranular diffusion mechanism, accumulation on grain boundary and later, once saturation is reached, release to rod free volume. This model results are contrasted with experimental data from the LWBR Development Program, carried out by the US Department of Energy. To characterize ThO₂ material, thermomechanical and thermochemical properties provided by the literature are used, many of which have been determined by electronic calculations of first principles.

1 INTRODUCCIÓN

Los combustibles nucleares basados en óxidos de torio estuvieron entre las primeras posibilidades planteadas para alimentar los primeros reactores nucleares destinados a la producción de energía. Si bien la elección primigenia recayó en el ciclo del uranio, se consideraba al torio como un combustible alternativo o complementario. Después del rápido incremento en la cantidad de reactores durante la década de 1970, la industria reconsideró las proyecciones relativas a la demanda mundial de uranio. Por esta razón, la opción de combustibles alternativos fue progresivamente reducida a pequeñas líneas de investigación.

Sin embargo, desde el año 2000 aproximadamente ha habido un resurgimiento en el interés por nuevos combustibles nucleares, debido principalmente a cambios en el contexto mundial relativo a la seguridad y mejoras en el rendimiento de los reactores de próximas generaciones. Por ejemplo actualmente China, India y Turquía han declarado al torio como una parte integral de sus políticas relativas a la energía nuclear. A su vez, las características del dióxido de torio (ThO_2) lo hacen más resistente a la proliferación que el dióxido de uranio (UO_2), dificultando su manipulación fuera de instalaciones adecuadas, además de presentar una cadena de decaimiento que favorecería la gestión de residuos radiactivos en la etapa final del ciclo. Adicionalmente, la necesidad de mezclar el dióxido de torio con un isótopo físil, en particular con plutonio ^{239}Pu , abre la posibilidad de adquirir este elemento desde el material que surge de los programas de reducción de armamento nuclear, lo que indirectamente alentaría la ejecución de los mismos (Ade et al., 2014; International Atomic Energy Agency, 2005).

Por la importancia que adquieren estos tipos de combustibles alternativos, es de interés contar con el conocimiento de las propiedades más relevantes, para desarrollar modelos de simulación que permitan comprender mejor su comportamiento bajo diversas condiciones de operación. En particular el dióxido de torio presenta una conductividad térmica mayor que el dióxido de uranio por lo que se puede extraer calor con mayor facilidad redundando en un montón de beneficios al combustible como la disminución de la temperatura central de la pastilla, mitigando de esta manera algunos fenómenos que ocurren en el combustible ligados a la temperatura del mismo, como la liberación de gases de fisión, el swelling o la interacción mecánica entre la pastilla y la vaina.

En el presente trabajo se propone estudiar mediante simulación numérica computacional el comportamiento de una barra combustible con contenido de torio, como aquella compuesta por pastillas mixtas $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ o $(\text{Th,U})\text{O}_2$, que consisten en una mezcla de dióxidos de torio y plutonio o uranio. En particular nos centraremos en analizar las condiciones térmicas, con especial interés en el modelo de liberación de gases de fisión, que fue diseñado a partir del existente para pastillas de dióxido de uranio e incluido en el código DIONISIO (Soba et al., 2013; Soba & Denis, 2015). Para esto se han incluido en el código parámetros termo mecánicos para combustible basados en óxidos mixtos, especialmente referidos a la conductividad térmica de la pastilla, parámetro fundamental relacionado con la distribución final de temperaturas en el dominio analizado en DIONISIO.

2 MODELO DE LIBERACIÓN DE GASES

El modelo de liberación de gases de fisión en combustibles basados en dióxido de uranio considera granos esféricos y simula la difusión de átomos de gases nobles (Xe y Kr) generados por la fisión del combustible. Para eso tiene en cuenta la formación de burbujas intragranulares que se forman en sitios preferenciales de la red. Estas burbujas funcionan

captan átomos de gas actuando como trampas y eventualmente se redisuelven en la matriz por el impacto de fragmentos de fisión de alta energía. Es así que se produce un equilibrio dinámico entre ambos mecanismos que colaboran en la difusión de gas hacia los bordes de grano formando burbujas intergranulares. El gas en estas se acumula hasta llegar a una concentración de saturación y a la interconexión de burbujas intergranulares por las que sale el gas al volumen libre del combustible.

El modelo de difusión propuesto se resuelve por el método de elementos finitos utilizando un coeficiente de difusión efectivo que tiene en cuenta la captura y la liberación de los átomos de gas en las tramas de la matriz del combustible. Es así que la ecuación diferencial para la difusión en un grano bajo irradiación en coordenadas esféricas es

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) - gc + bm + \beta \quad (1)$$

donde c es la concentración de átomos del gas (libres y atrapados) en la matriz [at/m^3], t el tiempo de irradiación [s], r la coordenada radial en el grano esférico [m], D es el coeficiente de difusión de átomos libres de gas en la matriz [m^2/s], g y b son las probabilidades de captura y liberación de gas en trampas, respectivamente, m la cantidad de átomos atrapados en trampas y β la tasa de generación de átomos de gas producidos por evento de fisión [$\text{at}/\text{m}^3\text{s}$]. Para condiciones de atrapamiento estacionarias, es decir,

$$\frac{\partial m}{\partial t} = g \cdot c - b \cdot m = 0 \quad (2)$$

y definiendo la concentración total de gas en el grano como

$$\psi = c + m = c + \frac{gc}{b} = c \left(1 + \frac{g}{b} \right) = c \left(\frac{b + g}{b} \right) \quad (3)$$

por lo que el coeficiente de difusión efectivo queda como

$$D' = Db/(b + g) \quad (4)$$

y se obtiene la ecuación equivalente

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D' \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \beta \quad (5)$$

donde, con las condiciones de borde de grano como sumidero perfecto ($\psi(r = a) = 0$) y de simetría esférica ($\partial\psi/\partial r (r = 0) = 0$).

El coeficiente de difusión D [cm^2/s] está determinado por más de un mecanismo (Turnbull et al., 1989). El mismo presenta tres términos, cada uno con un peso relativo mayor para un rango de temperatura. Para altas temperaturas, predomina el mecanismo de vacancias catiónicas térmicamente activadas modeladas por una contribución de Arrhenius (Denis & Piotrkowski, 1996; Lösönen, 2002; Maldován et al., 1999)

$$D_1 = 7,6 \cdot 10^{-10} \cdot \exp(-7 \cdot 10^4/RT) \quad (6)$$

donde R es la constante de los gases ideales en $\text{cal}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ y T es la temperatura en K. Para temperaturas intermedias, entre 600 y 1400 °C, predomina el mecanismo regulado por las vacancias e intersticiales producidas por la irradiación. Es así que el segundo término queda de la siguiente manera (Denis & Piotrkowski, 1996; Lösönen, 2002; Maldován et al., 1999):

$$D_2 = S^2 \cdot j_V \cdot C_V \quad (7)$$

donde $S = \sqrt[3]{\Omega}$ es la distancia de salto de átomos, Ω es el volumen atómico, $j_V = 10^{13} C_V^0$ es la frecuencia de salto de vacancias, $C_V^0 = \exp(-55200/RT)$ y C_V es la fracción de sitios de vacancias. Para bajas temperaturas, predominan los mecanismos atérmicos de *recoil* y *knock*

out. La expresión que lo gobierna es proporcional a la tasa de fisiones F (Denis & Piotrkowski, 1996; Lösoenen, 2002; Maldován et al., 1999):

$$D_3 = 2 \cdot 10^{-40} F \quad (8)$$

Así, el coeficiente de difusión [cm^2/s] sobre todo el rango de temperaturas queda como:

$$D = D_1 + 4D_2 + 4D_3 \quad (9)$$

Los parámetros de atrapamiento g y de redisolución b así como el tamaño y concentración de burbujas está dado por White et al. (White & Tucker, 1983). La tasa de producción de átomos gaseosos viene dada por:

$$\begin{cases} yF & \text{para } 0 \leq r \leq a - 2\lambda \\ yF + h(r) & \text{para } a - 2\lambda \leq r \leq a \end{cases} \quad (10)$$

donde y es la fracción de producción de átomos de gas por cada evento de fisión, a es el radio de grano y λ es la distancia de penetración de los átomos redisueltos provenientes burbujas en borde de grano. Además la función $h(r)$ tiene una forma que satisface la siguiente ecuación:

$$\int_{a-2\lambda}^a h(r) 4\pi r^2 dr = 4\pi a^2 \frac{b'N}{2} \quad (11)$$

donde b' es la tasa de redisolución de la burbujas en borde de grano y N es la cantidad de átomos de gas por unidad de área del borde de grano.

El modelo también incorpora el crecimiento de grano a través de una tasa de crecimiento dada por:

$$\frac{da}{dt} = p \left(\frac{1}{a} - \frac{f}{a_m} \right) \quad (12)$$

donde $p = 3.64 \cdot 10^{-9} \exp(-63800/RT)$, $a_m = 1,1 \cdot 10^{-3} \exp(-7620/T)$ y $f = 1 + \nu N/N_s$. Por su parte, la presión dentro de la burbuja considerada como gas ideal debe estar balanceada por las fuerzas externas y la capilaridad. Esto genera una concentración de saturación en átomos por área del borde de grano:

$$N_s = (2\gamma + r_f \cdot P_{ext}) \frac{4wF_s}{3kT} \quad (13)$$

donde r_f es el radio de curvatura de la burbuja, F_s es la fracción de superficie de grano cubierta por la burbuja, γ es la energía libre superficial de la burbuja, w es un parámetro geométrico y P_{ext} es la presión externa ejercida sobre la burbuja.

Antes de alcanzar la saturación, el contenido N_k de átomos por unidad de superficie de borde de grano se obtiene de un balance de ecuaciones que considera diversos factores. Primero el contenido de gas en el volumen de un grano en el tiempo t_{k-1} es

$$C_{k-1} = 4\pi \int_0^{a_{k-1}} r^2 \psi_{k-1} dr \quad (14)$$

Luego el contenido de gas en el borde de grano es

$$4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2} \quad (15)$$

Por otro lado, la cantidad de gas generada por fisión en el intervalo Δt_k es

$$\frac{4}{3} \pi a_k^3 \cdot y \cdot F \cdot \Delta t_k \quad (16)$$

Además, la cantidad de gas incorporado al grano por el crecimiento de grano es

$$\left(C_{k-1} + 4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2} \right) \left(\frac{a_k^3 - a_{k-1}^3}{a_{k-1}^3} \right) \quad (17)$$

Teniendo en cuenta el contenido de gas en el instante t_k y la suma de los cuatro valores anteriores, obtenemos

$$C_k + 4\pi a_k^2 \frac{N_k}{2} = \left(C_{k-1} + 4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2} \right) \left(\frac{a_k^3}{a_{k-1}^3} \right) + \frac{4}{3} \pi a_k^3 \cdot y \cdot F \cdot \Delta t_k \quad (18)$$

con las condiciones iniciales ($t = 0, k = 0$) $C_0 = 0$ y $N_0 = 0$. De aquí determinamos N_k a cualquier instante t_k de la siguiente manera

$$C_k + 4\pi a_k^2 \frac{N_k}{2} = \frac{4}{3} \pi a_k^3 \cdot y \cdot F \cdot t_k \quad (19)$$

Cuando la concentración en borde de grano N_k supera la concentración de saturación N_s , habrá liberación de gas. La cantidad de gas liberado estará dado por:

$$R_k = \max \left(\frac{4\pi a_k^2}{2} (N_k - N_s), R_{k-1} \right) \quad (20)$$

Así, la cantidad de gas liberado no disminuye con un descenso de la temperatura.

Finalmente la fracción de gas liberado queda como:

$$F_k = \frac{R_k}{\frac{4}{3} \pi a_k^3 \cdot y \cdot F \cdot t_k} \quad (21)$$

3 LIBERACIÓN DE GASES DE FISIÓN EN EL DIÓXIDO DE TORIO

Para utilizar el mismo modelo que se realizó para el uranio, se necesitó cambiar el valor de algunas variables como la conductividad térmica, el coeficiente de dilatación térmica, el coeficiente de difusión, entre otros. Particularmente, el coeficiente de difusión pasa a ser una mezcla ponderada por la fracción en peso de dióxido de torio y dióxido de uranio. El valor para el uranio es el mismo que se explicó en el modelo base constituido por tres componentes. Para el plutonio también se usa el mismo modelo hasta encontrar en bibliografía algún modelo mejor. Para el dióxido de torio se utiliza el valor del coeficiente de difusión utilizado por Long (Long, 2002) y Tijero Cavia (Tijero Cavia, 2017):

$$D_{ThO_2} = 1,06 \cdot 10^{-16} \exp(-18893,4/RT) \quad (22)$$

3.1 Parámetros termomecánicos adaptados

En la [Tabla 1](#) se listan los principales modelos termo mecánicos incluidos en DIONISIO para combustibles mixtos basados en torio. Los parámetros modelizados influyen directamente en la temperatura del combustible, y, por lo tanto, influyen indirectamente en la liberación de gases de fisión. En dicha [Tabla w](#) es la fracción atómica de la especie fisionable (Uranio o Plutonio), T la temperatura en Kelvin, Bu el quemado en MWd/kgHM y P la fracción de porosidad.

Propiedades	Modelos matemáticos	
	Plutonio	Uranio
Densidad teórica	$\rho = w \cdot 11,5 + (1 - w) \cdot 10$	$\rho = w \cdot 10,96 + (1 - w) \cdot 10$
Conductividad térmica (Cozzo et al., 2011)	$\kappa = 10^{-2} / (A + B \cdot T - C \cdot T^2)$ Con: $A = (6,071 \cdot 10^{-3} + 0,572 \cdot w + 0,5937 \cdot w^2) \cdot b_1$ $B = 2,6 \cdot 10^{-4} \quad C = 0,035 \cdot 10^{-6} \cdot c_1$ $b_1 = 2,2017 \cdot (1,454196 - \exp(-0,1593 \cdot Bu))$ $c_1 = 0,9013 \cdot (2,109534 - \exp(-0,1457 \cdot Bu))$	$\kappa = \frac{10^{-2}}{A + B \cdot T} \left[\frac{W}{cm \cdot K} \right]$ Con: $A = 4,195 \cdot 10^{-4} + 1,112 \cdot w - 4,499 \cdot w^2$ $B = 2,248 \cdot 10^{-4} - 9,170 \cdot 10^{-4} \cdot w + 4,164 \cdot 10^{-3} \cdot w^2$
Coefficiente de expansión térmica (OIEA, 2006)	$\alpha = A + B \cdot T + C \cdot T^2$ Con: $A = 5,079 \cdot 10^{-4} + 2,251 \cdot 10^{-4} \cdot w$ $B = 2 \cdot (3,732 \cdot 10^{-7} - 2,506 \cdot 10^{-7} \cdot w)$ $C = 3 \cdot (-7,594 \cdot 10^{-11} + 12,454 \cdot 10^{-11} \cdot w)$	$\alpha = A + B \cdot T + C \cdot T^2$ Entre 273 y 923 K: $A = 5,097 \cdot 10^{-4} + 4,705 \cdot 10^{-4} \cdot w$ $B = 2 \cdot (3,732 \cdot 10^{-7} + 4,002 \cdot 10^{-7} \cdot w)$ $C = 3 \cdot (7,594 \cdot 10^{-11} - 11,98 \cdot 10^{-11} \cdot w)$ Entre 923 y 2000 K: $A = 5,097 \cdot 10^{-4} + 6,693 \cdot 10^{-4} \cdot w$ $B = 2 \cdot (3,732 \cdot 10^{-7} + 6,161 \cdot 10^{-7} \cdot w)$ $C = 3 \cdot (7,594 \cdot 10^{-11} - 19,784 \cdot 10^{-11} \cdot w)$
Módulo de Young (Insulander Björk & Kekkonen, 2015)	$E = 10^5 \cdot E(ThO_2) \cdot (1 + 0,0284 \cdot w)$ Con: $E(ThO_2) = 249,1 \cdot (1 - 2,21 \cdot P) \cdot \left(1,023 - 1,405 \cdot 10^{-4} \cdot T \cdot e^{-\frac{181}{T}} \right)$	$E = 10^5 \cdot E(ThO_2) \cdot (1 + 0,063 \cdot w)$ Con:
Módulo de Poisson (Insulander Björk & Kekkonen, 2015)	$v = 0,28$	$v = \left(\frac{Er \cdot (1 - 2,21 \cdot P)}{2 \cdot Gr \cdot (1 - 2,12 \cdot P) + 0,1228 \cdot w} - 1 \right) (1 + 0,1228 \cdot w)$ Con: $Er = 249,16 \text{ GPa} \quad Gr = 96,9 \text{ GPa}$

Tabla 1: Modelos para dióxidos mixtos incluidos en DIONISIO.

4 EXPERIMENTOS ANALIZADOS

La bibliografía sobre ensayos con torio para los que se haya medido la liberación de gases de fisión es escasa. En la década del 70' se realizaron 59 experimentos de liberación de gases de fisión en la mezcla de óxidos de torio y uranio (Goldberg et al., 1978, 1979) pertenecientes al Programa de Desarrollo de Reactores Reproductores de Agua Liviana (LWBR Development Program, en inglés), aunque sólo 5 de esos experimentos estaban suficientemente detallados como para ser reproducidos mediante el cálculo. Las características de las barras combustibles que se podían reproducir se resumen en la [Tabla 2](#).

Barra	79-442	79-506	79-349	79-375	79-405
%w UO ₂	6.6	17.1	20.0	30.0	20.0
% Densidad teórica	96.0	95.3	95.0	92.0	94.0
Diámetro de la pastilla	0.52832	1.17348	1.65608	1.64	1.65
Largo de la pila de pastillas	76.2	91.44	8.128	91.44	91.44
Gap	0.018034	0.017526	0.01016	0.03048	0.01524
Diámetro externo vaina	0.6477	1.33858	1.81864	1.82118	1.82118
FGR medido	0.5	2.0	1.8	8.0	15.0

Tabla 2: Características de las barras combustibles ensayadas

Alternativamente, se encontraron experimentos de barras irradiadas en el reactor PWR KWO, hasta un quemado de 40 MWd/kgHM (*Heavy Metal*, del inglés Metal Pesado) (Somers et al., 2013; Tijero Cavia, 2017). Las pastillas combustibles se fabricaron en *Joint Research Center-Institute for Transuranium Elements* (JRC-ITU) en Karlsruhe. El apilamiento de pastillas tenía una longitud activa total de 206 mm. La parte superior de la barra presenta un *plenum* y un resorte de 47 mm de longitud nominal (Somers et al., 2013). Algunas de esas barras se instrumentaron con termocuplas ubicadas en la posición central dentro de un tubo guía.

Por último se encontró otro grupo de barras irradiadas en el reactor BR-2 entre 2004 y 2006, con una nueva irradiación de una de las mismas entre 2012 y 2015. Dos de ellas se equiparon con una termocupla para medir la temperatura central del combustible, así también con un sensor de presión para conocer la liberación de gases de fisión. A estas barras se las nombró como BI y HI. Otras dos barras no fueron instrumentadas sino que fueron retiradas del reactor para mediciones intermedias (Boer et al., 2016). Una de estas barras no instrumentadas se irradiaron en un segundo ciclo mencionado entre 2012 y 2015 y fue llamada HN. Los detalles de las condiciones de irradiación incluyendo la posición dentro del reactor, la descripción geométrica de las barras y la caracterización química del combustible se pueden obtener en (Boer et al., 2016). Cabe destacar que en la bibliografía encontramos datos de liberación de gases de fisión para las barras BI y HN.

5 RESULTADOS

En base a las modificaciones descritas, se simularon los experimentos detallados en la Sección 0 con el código DIONISIO. Dado que el proceso de difusión de los gases de fisión a través del combustible depende íntimamente de la temperatura del mismo, para los casos en que los experimentos contaban con termocuplas que registraban la temperatura central, se compararon las predicciones simuladas con los valores medidos. En la Figura 1, se puede observar la correspondencia entre los valores de temperatura calculados por DIONISIO y los

valores experimentales para las barras instrumentadas HI y BI irradiadas en el reactor BR-2.

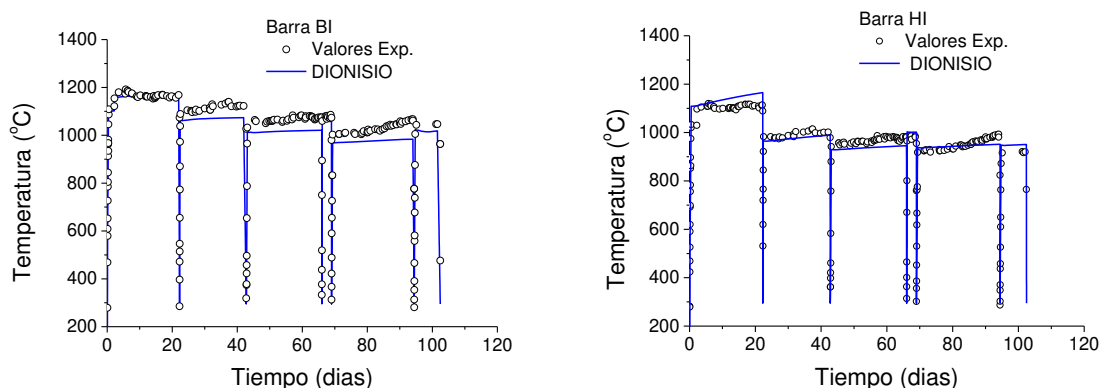


Figura 1: Comparación de los resultados del cálculo con los datos medidos de temperatura

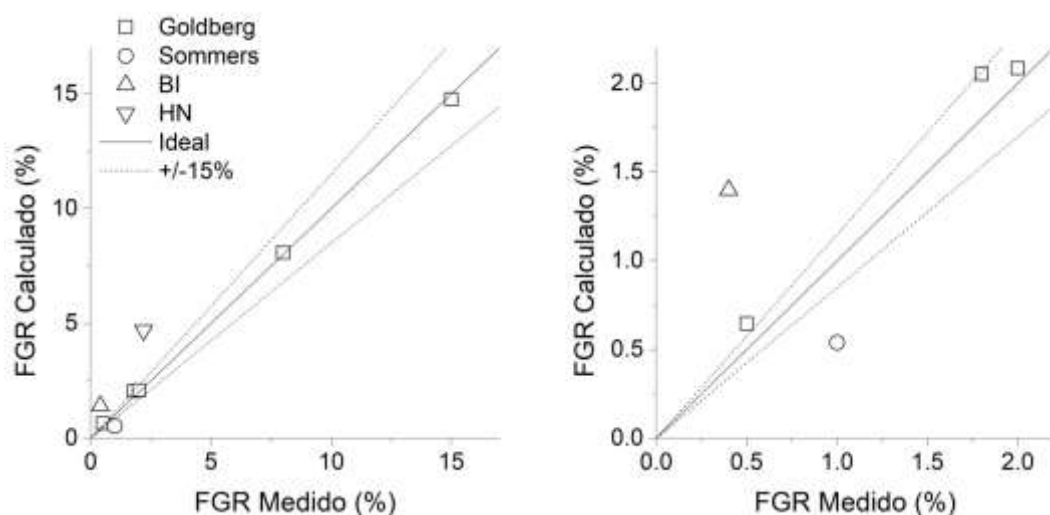


Figura 2: Comparación de los resultados del cálculo con los datos medidos de liberación de gases de fisión

En la [Figura 2](#) se observa la comparación entre los datos experimentales y los calculados en DIONISIO de las medidas de gas liberado. Se encuentra dibujada la recta ideal donde los valores experimental y calculado coincidirían y dos rectas con línea punteada que indican un apartamiento entre el valor experimental de un 10% tanto por exceso como por defecto. Se puede observar que hay una buena correlación entre los datos calculados y los datos experimentales dado que 4 de los 8 experimentos se encuentran dentro de los valores aceptables y 3 de los que no están dentro del rango delimitado por las dos líneas punteadas se encuentran muy cercanos a ellas. Esta dispersión en los datos simulados ingresa dentro de las variaciones esperables en este tipo de modelos ([Pastore et al., 2015](#)), sin embargo, el modelo debe ser contrastado contra más datos experimentales a ser obtenido en el futuro.

6 CONCLUSIONES

La inclusión en el código DIONISIO de modelos térmicos y mecánicos, así como un modelo FGR teniendo en cuenta la nueva mezcla, permitió analizar el rendimiento del combustible de varios experimentos dedicados a probar combustibles mixtos a base de torio.

En general, el código aplicado a los combustibles a base de compuestos de torio muestra un comportamiento adecuado, especialmente en lo que se refiere a la termomecánica de la

pastilla. Se observan algunas discrepancias en el caso de la liberación de gas, especialmente en las comparaciones con estimaciones realizadas en combustibles (Th, Pu) O₂. Sin embargo, esto es razonable ya que el modelo utilizado en DIONISIO es una adaptación de uno desarrollado para UO₂, lo que explica la buena t observada para el caso de (Th, U) O₂. En cualquier caso, son necesarias comparaciones adicionales para seguir validando cada uno de los modelos incluidos en el código.

REFERENCIAS

- Ade, B., Worrall, A., Powers, J., Bowman, S., Flanagan, G., & Gehin, J. (2014). *Safety and Regulatory Issues of the Thorium Fuel Cycle* (ORNL/TM-2013/543; NUREG/CR-7176). Oak Ridge National Lab. (ORNL), Oak Ridge, TN (United States).
<https://doi.org/10.2172/1146984>
- Boer, B., Lemehov, S., Wéber, M., Parthoens, Y., Gysemans, M., McGinley, J., Somers, J., & Verwerft, M. (2016). Irradiation performance of (Th,Pu)O₂ fuel under Pressurized Water Reactor conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 471, 97-109.
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.01.009>
- Cozzo, C., Staicu, D., Somers, J., Fernandez, A., & Konings, R. J. M. (2011). Thermal diffusivity and conductivity of thorium–plutonium mixed oxides. *Journal of Nuclear Materials*, 416(1), 135-141. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2011.01.109>
- Denis, A., & Piotrkowski, R. (1996). Simulation of isothermal fission gas release. *Journal of Nuclear Materials*, 229, 149-154. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(95\)00203-0](https://doi.org/10.1016/0022-3115(95)00203-0)
- Goldberg, I., Spahr, G. L., White, L. S., Waldman, L. A., Giovengo, J. F., Pfennigwerth, P. L., & Sherman, J. (1978). *Fission gas release from ThO₂ and ThO₂—UO₂ fuels (LWBR development program)* (WAPD-TM--1350). Bettis Atomic Power Lab.
http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:10449657
- Goldberg, I., Waldman, L. A., Giovengo, J. F., & Campbell, W. R. (1979). *Fission gas release and grain growth in ThO₂-UO₂ fuel irradiated at high temperature* (DOE/ET/34007--1). Article DOE/ET/34007--1.
http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:11544871
- Insulander Björk, K., & Kekkonen, L. (2015). Thermal–mechanical performance modeling of thorium–plutonium oxide fuel and comparison with on-line irradiation data. *Journal of Nuclear Materials*, 467, 876-885. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2015.11.001>
- International Atomic Energy Agency. (2005). *Thorium fuel cycle: Potential benefits and challenges*. International Atomic Energy Agency.
<http://books.google.com/books?id=yV5TAAAAMAAJ>
- Long, Y. (2002). *Modeling the performance of high burnup thoria and urania PWR fuel* [Thesis, Massachusetts Institute of Technology].
<https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/30000>
- Lösönen, P. (2002). Modelling intragranular fission gas release in irradiation of sintered LWR UO₂ fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 304(1), 29-49.
[https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)00856-5](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)00856-5)
- Maldován, M., Denis, A., & Piotrkowski, R. (1999). Simulation of isothermal fission gas release: An analytical solution. *Nuclear Engineering and Design*, 187(3), 327-337.
[https://doi.org/10.1016/S0029-5493\(98\)00299-4](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(98)00299-4)
- OIEA. (2006). *Thermophysical properties database of materials for light water reactors and heavy water reactors. Final report of a coordinated research project 1999-2005* (IAEA-TECDOC--1496). International Atomic Energy Agency.
http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:37118326
- Pastore, G., Swiler, L. P., Hales, J. D., Novascone, S. R., Perez, D. M., Spencer, B. W., Luzzi,

- L., Van Uffelen, P., & Williamson, R. L. (2015). Uncertainty and sensitivity analysis of fission gas behavior in engineering-scale fuel modeling. *Journal of Nuclear Materials*, 456, 398-408. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.09.077>
- Soba, A., & Denis, A. (2015). DIONISIO 2.0: New version of the code for simulating a whole nuclear fuel rod under extended irradiation. *Nuclear Engineering and Design*, 292, 213-221. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2015.06.008>
- Soba, A., Denis, A., Romero, L., Villarino, E., & Sardella, F. (2013). A high burnup model developed for the DIONISIO code. *Journal of Nuclear Materials*, 433(1), 160-166. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.08.016>
- Somers, J., Papaioannou, D., McGinley, J., & Sommer, D. (2013). Safety assessment of plutonium mixed oxide fuel irradiated up to 37.7GWdaytonne⁻¹. *Journal of Nuclear Materials*, 437(1), 303-309. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.02.046>
- Tijero Cavia, J. I. (2017). *Simulation of thorium material properties under fission reactor conditions* [Dissertation]. Technische Universität München.
- Turnbull, J. A., White, R. J., & Wise, C. (1989). *The diffusion coefficient for fission gas atoms in uranium dioxide* (IWGFPT--32). Article IWGFPT--32. http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:21003206
- White, R. J., & Tucker, M. O. (1983). A new fission-gas release model. *Journal of Nuclear Materials*, 118(1), 1-38. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(83\)90176-9](https://doi.org/10.1016/0022-3115(83)90176-9)