



PROPIEDADES DE SUPERFICIES DE Zr HEXAGONAL Y ZrO₂ TETRAGONAL DE BAJO ÍNDICE.

Paula R. Alonso^{(1)*}, Pablo H. Gargano⁽¹⁾, Gerardo H. Rubiolo^(1,2)

⁽¹⁾ Comisión Nacional de Energía Atómica – Centro Atómico Constituyentes (CNEA-CAC) e Instituto Sabato (UNSAM-CNEA), Av. General Paz 1499, San Martín, Buenos Aires, Argentina.

⁽²⁾ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Av. Rivadavia 1917, CABA, Arg.

*Correo Electrónico (autor de contacto): pralonso@cnea.gov.ar.

RESUMEN

El uso de los reactores nucleares como fuente de energía se ha extendido y consolidado en la segunda mitad del siglo XX y en los inicios de este siglo XXI. La continuidad de este recurso depende en gran medida de que las plantas nucleares sean cada vez más seguras y confiables, lo cual implica un mejoramiento de todos los aspectos relacionados con su operación. Entre ellos se cuenta la integridad de los elementos estructurales, que depende fuertemente de la estabilidad mecánica de los óxidos protectores. En las centrales CNA I y CNA II se utiliza en los canales refrigerantes [1]. Sin embargo, esta aleación presenta problemas de corrosión que, por ejemplo, motivaron el reemplazo de los canales refrigerantes de CNA I en 1988 [2]. En este trabajo analizamos desde la teoría de la funcional densidad las propiedades de superficies de bajo índice de Zr hexagonal y de la superficie (001) observada experimentalmente en circonia tetragonal (*t*-ZrO₂). Nuestros resultados permiten predecir la superficie de Zr(10 $\bar{1}$ 0) como la de menor energía superficial. Estos resultados nos permitirán la evaluación de la estabilidad mecánica de la interfase Zr(10 $\bar{1}$ 0) / *t*-ZrO₂(001) observada experimentalmente.

ABSTRACT

The use of nuclear reactor as a source of electric energy has been extended and consolidated during the second half of last century and the beginnings of XXI century. The continuity of this resource relies on the reliability and security of nuclear plants, requiring the improvement of all features related to their operation. Among them, the structural elements integrity that depends strongly on the mechanical stability of protective oxides must be taken into account. Zircaloy-4 (zirconium based alloy with Sn, Fe and Cr additions) is used for the coolant channels at CNA I and CNA II plants [1]. However, this alloy suffers corrosion problems which have caused, for example, the replacement of coolant channels at CNA I in 1988 [2]. In this work we analyze from functional density theory the properties of low index hexagonal Zr surface and of the experimentally observed (001) tetragonal ZrO₂ (*t*-ZrO₂) surface. Our results allow the prediction of Zr(10 $\bar{1}$ 0) as the one with the lowest superficial energy. These results will allow the evaluation of mechanical stability of the experimentally observed interfase Zr(10 $\bar{1}$ 0) / *t*-ZrO₂(001).

REFERENCIAS

1. Piquin Rubén y Pablo Zanni, “Estimación del comportamiento mecánico de canales refrigerantes irradiados de una central nuclear para su desmantelamiento”, Jornadas SAM CONAMET, SIMPOSIO MATERIA 2003, trabajo 12-11.
2. José Manuel Guala, “Parada de Actualización y Mantenimiento de la Central Nuclear Atucha I”, Boletín Energético N°11. <http://www.cnea.gov.ar/sites/default/files/guala.pdf>

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T18*

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): *P (poster)*