



## بررسی عملکرد نانو کامپوزیت سیمان و گرافن اکساید تحت دما و فشار چاه‌های نفتی به روش دینامیک مولکولی

احسان حسینی<sup>1</sup>، اصغر حبیب‌نژاد کورایم<sup>2\*</sup>

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی عمران - سازه، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

2- استادیار، مهندسی عمران - سازه، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

\* صندوق پستی 1684613114، iust.ac.ir، ahkorayem@iust.ac.ir

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 01 شهریور 1396

پذیرش: 27 مهر 1396

ارائه در سایت: 06 آذر 1396

کلید واژگان:

سیمان

کلسیم سیلیکات هیدراته

گرافن اکساید

خواص مکانیکی

دینامیک مولکولی

### چکیده

عملکرد خمیره سیمان به‌عنوان ماده‌ی تقویت‌کننده دیواره‌ها و لوله انتقال در چاه‌های نفتی بسیار مهم و حائز اهمیت می‌باشد. خواص مکانیکی سیمان سخت شده که می‌تواند تحت تأثیر فشار و دمای بالای چاه تغییر کند، نقش بسزایی در پایداری و عمر مفید یک چاه نفتی دارد. در این مقاله با استفاده از روش دینامیک مولکولی و ایجاد شرایط محیط چاه‌های نفتی به بررسی خواص مکانیکی سیمان در ابعاد مولکولی پرداخته شده است. همچنین با افزودن گرافن اکساید به ماتریس سیمانی تأثیر تقویت‌کنندگی این نانوذره بر خمیره سیمان در شرایط چاه‌های نفتی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل شده در مقیاس نانو بیانگر کاهش خواص مکانیکی اصلی‌ترین ماده تشکیل دهنده سیمان یعنی کلسیم سیلیکات هیدراته در دمای بالای چاه‌های نفتی می‌باشد. افزایش فشار در محدوده متعارف فشار چاه‌های موجود تأثیر قابل توجهی را بر خواص کلسیم سیلیکات هیدراته نشان نمی‌دهد. همچنین اثر تقویت‌کنندگی گرافن اکساید در ماتریس کلسیم سیلیکات هیدراته در مقیاس نانو قابل توجه بوده و این نانوذره با خواص فوق‌العاده می‌تواند به‌عنوان یک تقویت‌کننده عملیاتی مناسب در ماتریس سیمانی مورد استفاده در چاه‌های نفتی پیشنهاد و در صورت بهبود خواص در مقیاس آزمایشگاهی و عملی بکار گرفته شود.

## An investigation on GO-cement nanocomposites performance under the temperature and pressure of oil wells using molecular dynamics method

Ehsan Hosseini, Asghar Habibnejad korayem \*

Department of Civil Engineering, Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran

\* P.O.B. 1684613114 Tehran, Iran, ahkorayem@iust.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 23 August 2017  
Accepted 19 October 2017  
Available Online 27 November 2017

#### Keywords:

Cement  
Calcium silicate hydrate  
Graphene oxide  
Mechanical properties  
Molecular dynamics

### ABSTRACT

The performance of cement paste as the reinforcing element in walls and transferring pipes in oil wells is of considerable importance. It is known that the mechanical properties of hardened cement can be altered under high pressure and temperature of oil well; the gravity of this change has an important role in the stability and service life of the well. This paper investigates the mechanical properties of hardened cement and GO-reinforced cementitious composites at molecular scale under the surrounding conditions similar to those of an oil well using molecular dynamics method. Results in nano scale revealed a decreasing pattern in mechanical properties of calcium silicate hydrate with increasing temperature of the oil well. However, pressure increment in the conventional range of the oil wells did not show any noticeable effect on hardened cement properties. Using GO proved to be beneficial to the calcium silicate hydrate, drastically improving its mechanical properties. Results concluded that GO nanoparticle can act as reinforcing elements in the cementitious matrix. The outcome of this research can provide more insights on the application of GO in the oil well cementitious matrix, in an ideal molecular conditions and thus passed over GO agglomeration, non-homogenous dispersion and impurities in the macro scale.

### 1- مقدمه

عمیق صورت پذیرد. عمیق‌ترین چاه‌های حفر شده دارای 9 تا 12 کیلومتر عمق می‌باشند [1,2]. با افزایش عمق چاه شرایط محیطی تحت تأثیر افزایش دما و فشار درون چاه قرار می‌گیرد. البته دما و فشار درون چاه‌ها متفاوت بوده و به عواملی از جمله نوع پوسته زمین منطقه بستگی دارد. بیشترین دمای ثبت شده در عمق چاه به میزان 600 درجه سانتی‌گراد و بالاترین میزان فشار 250 مگاپاسکال بوده است [1,3]. در این شرایط استخراج فرآورده‌های

امروزه سیر پیشرفت تکنولوژی و رشد روز افزون کشورهای صنعتی، باعث گردیده تمایل و تقاضا برای استخراج نفت و گاز دو چندان شود. در این بین رقابت میان تولیدکنندگان انرژی بیش از پیش افزایش یافته به‌طوری‌که برای یافتن منابع سوخت‌های فسیلی به حفر چاه‌های عمیق و فوق عمیق روی آورده‌اند. این رویکرد باعث گردیده تا اقداماتی برای حفر چاه‌های عمیق و فوق

Please cite this article using:

E. Hosseini, A. Habibnejad korayem, An investigation on GO-cement nanocomposites performance under the temperature and pressure of oil wells using molecular dynamics method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 11, pp. 419-428, 2018 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

در زمینه تأثیرات گرافن و مشتقات آن در سیمان حفاری تاکنون مطالعات اندکی صورت گرفته است [23]. دلایل این امر را می‌توان به نوظهور بودن گرافن در صنعت سیمان و نیز مشکلات فراوان ایجاد شرایط چاه‌های نفتی، از جمله دما و فشار بالای چاه‌های نفت، در کارهای آزمایشگاهی نسبت داد. این در حالی است که با قدرتمندتر شدن رایانه‌ها، می‌توان از طریق فرایندهای شبیه‌سازی به پیش‌بینی و بررسی خواص این مواد با پرهیز از سختی‌های مربوط به ایجاد شرایط واقعی محیط چاه نفت در آزمایشگاه پرداخت. یکی از روش‌های پیشرو و دقیق در زمینه پیش‌بینی خواص رفتاری کامپوزیت‌ها روش دینامیک مولکولی<sup>1</sup> می‌باشد. دینامیک مولکولی یکی از پرکاربردترین روش‌های محاسبات مکانیکی آماری از طریق شبیه‌سازی می‌باشد. در دیدگاه کلی نتایج حاصل از دینامیک مولکولی شباهت نزدیکی با روش نظریه تابعی چگالی (DFT) دارد، با این تفاوت که در دینامیک مولکولی مبنای عمل براساس میدان‌های نیرو حاصل شده از نتایج تجربی می‌باشد [24]. در این پژوهش از طریق روش قدرتمند دینامیک مولکولی و شبیه‌سازی شرایط چاه‌های نفتی به بررسی تأثیرات گرافن و مشتقات آن در سیمان پرداخته شده است. در شبیه‌سازی صورت گرفته با افزودن گرافن اکساید به ماتریس سیمانی، خواص مکانیکی کامپوزیت سیمانی جدید، تحت دما و فشار چاه‌های عمیق مورد بررسی قرار گرفته شده است. نتایج نشانگر آن است که استفاده از نانو ذرات گرافن اکساید می‌تواند موجب بهبود خواص مکانیکی سیمان در شرایط محیطی چاه‌های نفت گردد. این پژوهش می‌تواند زمینه استفاده از نانو مواد را در صنعت حفاری چاه‌های نفتی فراهم‌تر کرده و به برطرف شدن موانع موجود کمک کند.

## 2- سیستم مورد مطالعه

### 2-1- ساختار ژل کلسیم سیلیکات هیدراته<sup>2</sup>

مهم‌ترین ترکیب‌های ایجاد مقاومت و دوام در سیمان، فازهای سه کلسیم سیلیکات و دو کلسیم سیلیکات می‌باشند. ترکیب این دو ساختار با آب در فرایند هیدراتاسیون به تولید ژل کلسیم سیلیکات هیدراته منتهی می‌گردد. این ژل بیشترین ماده موجود در فرایند هیدراتاسیون بوده و عامل اصلی مقاومت سیمان می‌باشد [26,25]. ژل کلسیم سیلیکات هیدراته به سبب تغییرپذیری نسبت کلسیم به سیلیس و درصد متغیر آب موجود در واکنش دارای ساختار واحدی نبوده و ساختاری آمورف گونه را تشکیل می‌دهد. تحقیقات گویای این موضوع می‌باشد که در فرایند هیدراتاسیون نسبت کلسیم به سیلیس تولید شده در ژل کلسیم سیلیکات هیدراته در بازه 1.2 تا 2.3 متغیر بوده و خواص مکانیکی این ژل با نسبت‌های مختلف کلسیم به سیلیس دست‌خوش تغییرات می‌شود [27]. در سال‌های اخیر محققان چندین ماده معدنی مختلف را معرفی نموده‌اند که خواص مکانیکی و ساختار مولکولی نزدیک به ژل کلسیم سیلیکات هیدراته داشته‌اند، در عمده‌ترین این تحقیقات موادی از دسته توپرموریت<sup>3</sup> و جنایت<sup>4</sup> با ساختاری کریستالی نزدیک‌ترین شباهت را به این ژل دارا می‌باشند. ساختارهای معرفی شده به جهت شناخت هرچه بهتر خواص مکانیکی و اندرکنش مولکولی ژل کلسیم سیلیکات هیدراته می‌تواند نقش مؤثری را ایفا نمایند، لیکن به دلیل عدم تداخل در ساختار کریستالی این مواد، مدل‌های معرفی شده برای شبیه‌سازی نانو کامپوزیت‌های سیمانی مناسب نمی‌باشد. نقطه عطف ساختار ژل کلسیم

فسیلی عملیاتی بسیار مشکل و تخصصی بوده و لازمه استخراج، قرارگیری لوله در طول مسیر تا انتهای چاه و محیا نمودن ثبات رفتاری دیواره و لوله انتقالی در درون چاه می‌باشد. یکی از مهم‌ترین مواد در پروسه همگون نمودن لوله با شرایط درون چاه، سیمان می‌باشد. فرایند سیمان‌کاری اطراف لوله و دیواره‌های چاه مزایای گسترده‌ای به همراه دارد که این ماده را به‌عنوان ماده اصلی در حفاظت از چاه برجسته می‌نماید. از فواید قابل توجه سیمان‌کاری می‌توان به عدم نشست چاه، حفاظت از لوله در برابر نیروهای وارده و جلوگیری از خوردگی آن اشاره نمود که تأثیر بسزایی در افزایش پایداری و عمر چاه دارد. سیمانی که فضای خالی بین دیواره و لوله را در برمی‌گیرد باید بتواند تنش‌های مؤثر و فشارهای هیدرواستاتیکی در چاه را تحمل نماید [4-6]. هرچند سیمان بهترین ماده برای محافظت و افزایش دوام چاه می‌باشد اما عمق زیاد چاه مشکلاتی چون سختی پمپ کردن دوغاب سیمان، تأثیرات منفی افزایش دما در فرایند هیدراتاسیون، کاهش خواص مکانیکی، نفوذپذیری و فرسودگی سیمان را موجب می‌گردد. لذا محققان به استفاده از افزودنی‌ها، که روشی مناسب جهت بهبود عملکرد سیمان چاه‌های نفتی می‌باشد روی آورده‌اند.

در مطالعات انجام شده توسط محققین، تأثیر آب، روان‌کننده‌ها و نفت خام بر روی فرایند هیدراتاسیون و مقاومت اولیه دوغاب سیمان بررسی شده است. تحقیقات نشان می‌دهد که این عوامل تغییر بسزایی بر روی خواص مقاومتی سیمان سخت شده ایجاد نمی‌کنند [8,7]. دیگر آزمایش‌های صورت گرفته نشان می‌دهند افزایش ماسه سلیسی باعث بهبود مقاومت در دمای بالا می‌گردد و همچنین اکسیدهای خالص کلسیم و منیزیم به‌عنوان افزودنی‌های قابل انبساط باعث افزایش در مقاومت می‌شوند [10,9]. در سال‌های اخیر توجه محققان این حوزه به ظهور نانومواد با خواص فوق‌العاده جلب شده است. مطالعات تأثیرات نانو مواد بر روی سیمان حفاری به‌طور عمده به بررسی افزایش مقاومت، تسریع فرایند هیدراتاسیون و کاهش احتمال فروریختگی پرداخته و نتایج حاصله به‌صورت پتنت یا مقالات پراکنده ارائه گردیده است [12,11]. مطالعات نشان می‌دهد افزودن نانوسیلیکا و نانوالومینا به ترکیب سیمان حفاری باعث بهبود قابل توجه در مقاومت فشاری می‌گردد [13]. در این بین کشف گرافن به‌عنوان قوی‌ترین ماده موجود، انقلابی را در علم نانو مواد ایجاد نموده است. گرافن از مجموعه اتم‌های کربن سازمان یافته در شبکه‌های شش‌ضلعی با هیبریداسیون  $sp^2$  تشکیل شده است [14]. آزمایش‌های صورت پذیرفته گرافن را با مدول یانگ 1 تراپاسکال به‌عنوان قوی‌ترین ماده معرفی می‌نماید [15]. گرافن دارای ضرایب انتقال حرارت و الکتریسیته بالایی در راستای درون صفحه می‌باشد. این ویژگی سبب شده است گرافن به‌عنوان رسانای الکتریکی برای محیط‌های با حرارت بالا مناسب باشد [16-19]. نتایج اخیر نشان می‌دهد افزودن گرافن به سیمان می‌تواند در خواص مکانیکی و جلوگیری از انتشار ترک نقش مؤثری ایفا نماید. به‌عنوان مثال، حبیب‌نژاد و همکاران باهدف بررسی اثر تقویت‌کنندگی گرافن اکساید در خمیره سیمان، با افزودن گرافن اکساید به مقدار 0.05 درصد وزنی سیمان توانستند مقاومت فشاری را تا 33 درصد و مقاومت خمشی را تا 59 درصد افزایش دهند [20]. هورشکرک و همکاران با افزودن گرافن اکساید به مقدار 0.03 درصد وزنی سیمان توانستند مدول یانگ سیمان را به‌طور چشم‌گیری افزایش دهند [21]. لو و همکاران مقاومت فشاری سیمان را با افزودن گرافن اکساید به مقدار 0.025 درصد وزنی سیمان به میزان 21 درصد افزایش داده‌اند [22].

<sup>1</sup> Molecular dynamics

<sup>2</sup> Calcium silicate hydrate (C-S-H)

<sup>3</sup> Tobermorite

<sup>4</sup> jennite

اپوکسی و کربوکسیل بر روی صفحه گرافن، به شدت تمایل آب‌دوستی در گرافن ایجاد می‌نماید، اما این پیوندهای برقرار شده به دلیل شکستن ساختار اتمی گرافن باعث کاهش خواص مکانیکی در این نانوذره می‌شوند [34].

یکی از فاکتورهای تأثیرگذار بر روی استحکام، رفتار شکست و تمایلات جاذبه صفحات گرافن اکساید تعیین نوع گروه‌های عاملی، نحوه قرارگیری و درصد اختلاط گروه‌های عاملی با گرافن می‌باشد. لذا با تخصیص گروه‌های عاملی اکسیژن‌دار و تعیین مکان قرارگیری این نوع از هترواتم‌ها به صورت آرایش بی‌نظم و آرایش الگومند روی سطح و کناره‌های گرافن، نمونه‌های متفاوتی از گرافن اکساید به وجود می‌آید [35,36]. گرافن اکساید حاصل شده از عامل‌دار نمودن گرافن، زمینه مناسبی برای یک دیسپرسون<sup>1</sup> آبی پایدار و بررسی تغییرات ترمودینامیک آماری ذرات میکروسکوپی، مانند تعامل انرژی، آنترپی و پیوند شیمیایی را فراهم می‌سازد و به شناسایی هر چه بهتر خواص رفتاری گرافن در کامپوزیت کمک می‌نماید. در شبیه‌سازی صورت گرفته در این تحقیق از ترکیب هر سه نوع گروه عاملی هیدروکسیل، اپوکسی و کربوکسیل استفاده شده است. طول و عرض صفحه گرافن به ترتیب 30 و 20 آنگستروم و میزان درصد گروه‌های عاملی در سطح و کناره معادل 17 درصد وزنی صفحه گرافن می‌باشد. برای ایجاد صفحه گرافن اکساید، گروه‌های عاملی به صورت تصادفی و با الگوی نامنظم بر صفحه گرافن نشانده شدند. در "شکل 2a" ساختار مولکولی گرافن، "شکل 2b" ساختار مولکولی گرافن اکساید و در "شکل 2c" ساختار گروه‌های عاملی و اتم کربن در نظر گرفته شده در این تحقیق نشان داده شده است.

البته برای قرار دادن این گروه‌ها با الگوی نامنظم از قوانین مشخصی که براساس ساختارهای هندسی، پایدار ترمودینامیکی و چگالی الکترونی که به شرح ذیل می‌باشد پیروی گردید.

(1) دو گروه عاملی مجاز به برقرار نمودن پیوند با یک اتم کربن نمی‌باشند.

(2) گروه‌های هیدروکسیل می‌توانند به دو اتم کربن مجاور افزوده شوند، یکی در روی صفحه و دیگری در زیر صفحه گرافن.

(3) تعداد گروه‌های عاملی افزوده شده به دو طرف تقریباً باید برابر با کاهش انرژی تنش گرافن باشد.

(4) با توجه به اثرات استرس صفحه گرافن اکساید، در یک پیکربندی شش‌ضلعی گرافن، پیوند بیشتر از چهار اتم کربن با هیدروکسیل و پنج اتم کربن با اپوکسی در مجموع دو طرف صفحه مجاز نمی‌باشد.

(5) گروه‌های عاملی کربوکسیل قادر به برقراری پیوند با اتم‌های کربن در لبه‌های صفحه گرافن می‌باشند.

در فرایند عامل‌دار نمودن گرافن دو رویکرد در ساختار پیوندی اتم‌ها رخ می‌دهد: (الف) صفحه گرافن اکسایدی که همچنان در قسمت‌هایی از صفحه دارای اتم‌های خالص کربن با هیبرید  $SP^2$  می‌باشد. (ب) مناطقی که تحت پیوند با اکسیژن، اکسیده شده و اتم‌های کربن با هیبرید  $SP^3$  دارد [37-39].

### 3- روش شبیه‌سازی

در این پژوهش مبنای اصلی بررسی نانو کامپوزیت سیمانی، بر انجام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و تجزیه و تحلیل نتایج ترمودینامیکی حاصل از آن استوار می‌باشد. در روش دینامیک مولکولی روند فاز ساختار شامل تعدادی ذره برهم‌کنش‌کننده با استفاده از حل معادلات هامیلتون تحت اعمال فرضیه آماری شرایط مرزی مناسب به دست می‌آید. با تحلیل

سیلیکات هیدراته با ارائه مقاله پلینک و همکارانش رخ داد [28]. پلینک و همکاران با در نظر گرفتن نسبت کلسیم به سیلیکات 1.7 و در نظر گرفتن تأثیر تخلخل پذیری در ساختار مولکولی ژل کلسیم سیلیکات هیدراته توانستند یک مدل موفق از ساختار این ژل را ارائه دهند [29]. در تحقیقی دیگر توسط عبدالحسینی قمی و همکاران با تغییر نسبت کلسیم به سیلیس مدل‌های متفاوت دیگری از این ژل کلسیم سیلیکات هیدراته ارائه شده است که همانند مدل پلینک و همکارانش می‌توان نسبت آب به ژل کلسیم سیلیکات هیدراته را تغییر داد [30]. در این تحقیق به منظور بررسی تأثیر خواص تقویت‌کنندگی گرافن اکساید در کامپوزیت سیمانی، مدل ارائه شده توسط پلینک و همکاران برای شبیه‌سازی ژل سیمان مورد استفاده قرار گرفته است. در "شکل 1" ساختار اتمی مدل کلسیم سیلیکات هیدراته استفاده شده در این تحقیق نشان داده شده است.

### 2-2- ساختار گرافن و مشتقات گرافن

گرافن جدیدترین عضو خانواده مواد کربنی گرافیتی چندبعدی است، صفحات گرافن با کنار هم قرار گرفتن اتم‌های کربن تشکیل می‌شود [31,32]. گرافن ورقه‌ای دوبعدی از اتم‌های کربن در یک پیکربندی شش‌ضلعی است که در آن اتم‌های کربن با هیبرید  $SP^2$  به هم متصل شده‌اند. در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن با 3 اتم کربن دیگر پیوند دارد. این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زوایای بین آن‌ها با یکدیگر مساوی و برابر با 120 درجه است. در این حالت، اتم‌های کربن در وضعیتی قرار می‌گیرند که شبکه‌ای از شش‌ضلعی‌های منظم را در حالت ایده‌آل ایجاد می‌کنند. طول پیوند کربن-کربن در گرافن در حدود 0.142 نانومتر است. خصوصیات استثنایی گرافن شامل مدول یانگ درون صفحه‌ای برابر با 1 تراپاسکال و تنش کششی 130 گیگاپاسکال می‌باشد [33]. یکی از دلایل مهم عدم استفاده گرافن در کامپوزیت‌های سیمانی، آب‌گریز بودن گرافن می‌باشد که باعث توزیع نامناسب گرافن در کامپوزیت سیمانی می‌گردد. خواص آب‌گریزی گرافن به واسطه پروسه عامل‌دار کردن شیمیایی و یا پوشش فیزیکی این نانوذره می‌تواند به خواص آب‌دوستی تبدیل شود. عامل‌دار نمودن شیمیایی سطح و کناره گرافن از طریق برقراری پیوند کووالانسی بین اتم‌های کربن و گروه‌های عاملی اکسیژن‌دار توسط فرایند سنتز ایجاد می‌شود. قرارگیری گروه‌های عاملی اکسیژن‌دار مانند هیدروکسیل،

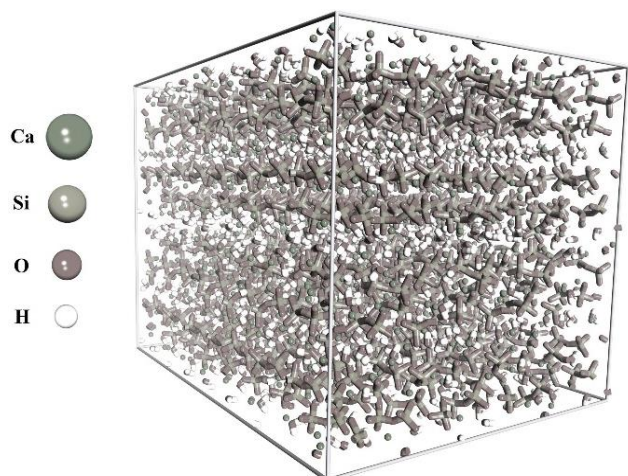


Fig. 1 The molecular structure of hydrated calcium silicate

شکل 1 ساختار مولکولی کلسیم سیلیکات هیدراته

<sup>1</sup> Disperson

پتانسیل و میدان نیروی<sup>1</sup> مناسب می‌باشد. در شبیه‌سازی صورت گرفته با انتخاب میدان نیروی کامپس<sup>2</sup> به‌عنوان یک میدان نیروی مرجع برای معرفی خواص سیمانی و گرافن می‌توان اذعان داشت که روند شبیه‌سازی با الگوی مناسبی به پیش‌بینی خواص نانو کامپوزیت می‌پردازد [42,41]. پارامترهای تعیین شده در این میدان نیرو با دو رویکرد صحت یابی آزمایشگاهی و روش آب-آبیشیو<sup>3</sup> مشخص شده است. لازم به ذکر است که در میدان نیروی کامپس برای بیان برهم‌کنش الکترواستاتیکی از قانون کلمب استفاده گردیده و با در نظر گرفتن پتانسیل لنارد-جونز<sup>6-9</sup> جهت شرح برهم‌کنش‌های واندروالسی، علاوه بر داده‌های تجربی آثار محاسبات کوانتومی از طریق ضرایب این پتانسیل در میدان نیروی کامپس لحاظ گردیده است. در رابطه (1) چگونگی همبستگی پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز<sup>6-9</sup> نشان داده شده است [43].

$$\varphi_{ij} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^9 - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r < rc \quad (1)$$

در رابطه فوق  $\sigma$  اندازه طول مولکولی،  $\epsilon$  شدت برهم‌کنش،  $r_{ij}$  فاصله بین دو مولکول و  $rc$  شعاع قطع برهم‌کنش می‌باشد. برای رفع محدودیت‌های محاسباتی در سیستم شبیه‌سازی، با اعمال فرضیه آماری شرایط مرزی دوره‌ای، دو سلول جداگانه از ماتریس سیمانی و کامپوزیت سیمانی تقویت‌شده با گرافن اکساید طراحی شد [44-46]. به دلیل وابستگی نتایج به تعداد اتم‌های شرکت کننده در سامانه شبیه‌سازی، الگوی منطقی از تعداد اتم‌ها در نظر گرفته شد به‌طوری‌که با گسترش سامانه شبیه‌سازی در نتایج حاصله تغییری ایجاد نمی‌گردد. بر این اساس مجموع تعداد اتم‌های موجود در سلول شبیه‌سازی برابر 4897 اتم می‌باشد که تعداد اتم‌های کلسیم سیلیکات هیدراته برابر 4586 اتم و تعداد اتم‌های گرافن اکساید برابر 311 اتم و نسبت وزنی گرافن اکساید برابر 3 درصد وزنی اتم‌های کلسیم سیلیکات هیدراته می‌باشد. تمامی فرایند شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار مترپال استودیو انجام گردیده است. قبل از شروع فرایند تحلیل دینامیکی، با استفاده از الگوریتم ترکیبی روش‌های کمینه‌سازی نیوتن-رافسون، روش شیب کاهشی و روش گرادیان انرژی هریک از سلول‌ها بهینه‌سازی گردیده و سپس سیستم تحت دو مرحله برهم‌کنش دینامیکی به تعادل رسیده است. در مرحله اول برای به تثبیت رساندن حجم سلول، اتم‌های موجود در شبیه‌سازی به مدت 200 پیکو ثانیه با هنگرد<sup>4</sup>  $NPT$  (تعداد، فشار و دما) تحت برهم‌کنش قرار گرفته اند و سپس در مرحله دوم برای ایجاد پایداری و رسیدن به میزان انرژی تعادلی در نانو کامپوزیت، با استفاده از هنگرد<sup>4</sup>  $NVT$  (تعداد، حجم و دما) به مدت 200 پیکو ثانیه پردازش صورت پذیرفته است. پارامترهای استفاده شده در فرایند شبیه‌سازی در جدول 1 نشان داده شده است.

پیش‌بینی خواص الاستیک در مقیاس نانو براساس پیوندها و نیروهای بین اتمی ارزیابی می‌شود. اگر دو اتم که پیوند مشترک دارند را تحت نیروی کششی خارجی قرار دهیم، طول پیوند افزایش می‌یابد، عامل مقاومتی در این‌جا نیروهای جاذبه داخلی بین اتم می‌باشد. و برعکس این عمل، هنگامی که یک نیروی فشاری خارجی طول پیوند بین دو اتم را کاهش می‌دهد، نیروهای دافعه داخلی، اتم‌ها را دفع می‌کنند. وجود چنین نیروهای جاذبه و دافعه نشان می‌دهد تنها وضعیتی که سیستم به تعادل می‌رسد همسان بودن

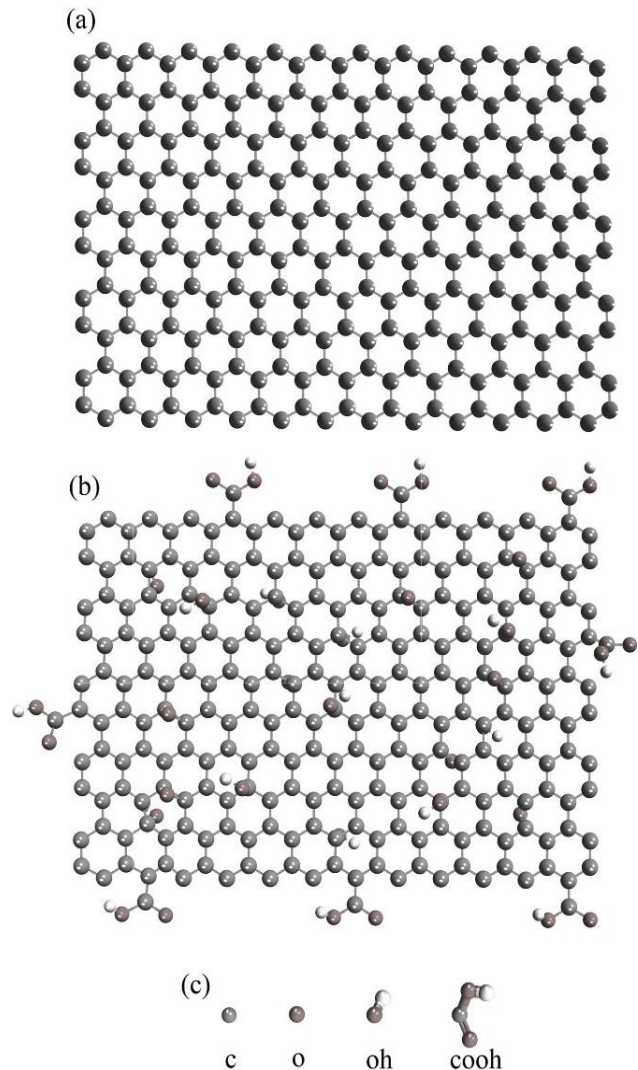


Fig. 2 (a) graphene structure, (b) GO structure (c) structure of functional groups and carbon atoms

شکل 2 (الف) ساختار گرافن، (ب) ساختار گرافن اکساید (ج) ساختار گروه‌های عاملی و اتم کربن

فرایند ذرات در فضای فاز و استفاده از مکانیک آماری به‌عنوان پل ارتباطی کمیت‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی، می‌توان اطلاعاتی در مورد خواص مختلف سیستم از جمله انرژی، خواص ساختاری، خواص دینامیکی و خواص مکانیکی را محاسبه نمود. پروسه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به سبب زمان‌بر بودن حل معادلات در سامانه‌های حاوی چند ده هزار اتمی، معمولاً در سامانه‌های کوچک‌تر چند صد تا چند هزار اتمی به کار می‌رود. در فرایند شبیه‌سازی ابتدا آرایش و سرعت اتم‌ها ثبت گردیده و براساس انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتن، سیر سرعتی و مکان قرارگیری هر اتم برحسب زمان شبیه‌سازی معین می‌گردد. درنهایت با استفاده از بازخورد شبیه‌سازی صورت گرفته در نقطه تعادلی سیستم می‌توان، از طریق بهره‌گیری از تحلیل‌های مکانیک آماری خواص مختلف نانوکامپوزیت را استخراج نمود [40,24]. در روش دینامیک مولکولی اساس و بنیان صحت نتایج به انتخاب صحیح روابط برهم‌کنش الکترواستاتیکی و برهم‌کنش واندروالسی بستگی دارد. لذا مهم‌ترین مشخصه در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتخاب توابع

<sup>1</sup> Force Field  
<sup>2</sup> COMPASS  
<sup>3</sup> Ab initio  
<sup>4</sup> Ensembl

جدول 1 پارامترهای به کار رفته در شبیه‌سازی

Table 1 Simulation parameters		
پارامتر	کلسیم سیلیکات	کلسیم سیلیکات
ابعاد جعبه (انگستروم)	47×29×53	47×29×45
تعداد اتم‌ها	4897	4586
ماژول	فورسایت	فورسایت
میدان نیرو	کامپس	کامپس
هنگرد	تعداد، فشار، دما	تعداد، فشار، دما
هنگرد	تعداد، حجم، دما	تعداد، حجم، دما
کنترل دما	نوز	نوز
کنترل فشار	برندسن	برندسن
گام زمانی (فمتو ثانیه)	1	1
زمان شبیه‌سازی (پیکوثانیه)	200	200

$$E = \frac{9G}{3 + G/K} \quad (5)$$

$$\nu = \frac{3 - 2G/K}{6 + 2G/K} \quad (6)$$

لازم به ذکر است روش فوق برای تمام فرایندهای شبیه‌سازی صدق می‌کند و برای محاسبه خواص الاستیک در شبیه‌سازی انجام شده حداکثر کرنش سیمان تعریف شده 0.003 می‌باشد تا اطمینان حاصل شود که تغییر شکل در محدوده الاستیک باقی می‌ماند.

#### 4- نتایج و تفسیر

##### 4-1- خواص مکانیکی کلسیم سیلیکات هیدراته

در جدول 2 خواص مکانیکی کلسیم سیلیکات هیدراته شبیه‌سازی در این پژوهش با نمونه پلی‌نیک و همکاران مقایسه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج حاصل شده از این تحقیق انطباق خوبی بر نتایج پلی‌نیک و همکاران دارد، به طوری که به عنوان مثال مدول یانگ به دست آمده در این تحقیق برابر 56.3 گیگاپاسکال می‌باشد و تنها 4.5 درصد با نمونه مرجع تفاوت دارد. این تفاوت اندک نیز به دلیل استفاده از میدان‌های نیروی متفاوت در فرایند شبیه‌سازی‌های انجام شده می‌باشد. نتایج حاصله نشان از صحت فرایند شبیه‌سازی و پیش‌بینی صحیح رفتار کلسیم سیلیکات هیدراته دارد.

##### 4-2- بررسی تأثیر دما و فشار چاه بر خواص مکانیکی کامپوزیت سیمانی

مهم‌ترین عامل مؤثر بر عملکرد سیمان در شرایط چاه‌های نفتی، عامل دما و فشار درون چاه می‌باشد. دما و فشار یک تابع متغیر از عمق چاه می‌باشند. فشار تولید شده درون چاه، شامل فشار سربار و فشار منفذی سنگ بوده که با فشار هیدرواستاتیکی سیالات حفاری در تعادل می‌باشد از این رو با محاسبه فشار هیدرواستاتیکی می‌توان شرایط درون چاه را پیش‌بینی نمود [48]. برای بیان تأثیر متغیرهای درون چاه هر یک از پارامترهای دما و فشار به صورت جداگانه شبیه‌سازی شده است و سپس ترکیب هم‌زمان دما و فشار در فرایند شبیه‌سازی اعمال گردیده است.

"شکل 3" میزان تأثیر فشار چاه نفت بر روی ساختار کلسیم سیلیکات هیدراته را نشان می‌دهد. فشار اعمال شده در بازه 0.1 مگاپاسکال تا 500 مگاپاسکال در نظر گرفته شده است. در نتایج حاصل شده، میزان متغیر پارامتر فشار به‌تنهایی نقش بسزای در افزایش یا کاهش مدول یانگ ساختار کلسیم سیلیکات هیدراته نداشته است. تحقیق مشابهی توسط محمد و همکاران بر روی نمونه سیمانی جنایت انجام گردیده که با افزایش فشار در بازه فشار چاه‌های نفتی الگوی مدول یانگ حاصل شده شباهت نزدیکی به مطالعات این پژوهش دارد [49]. با افزایش میزان فشار، مقدار دانسیته در ساختار مولکولی کلسیم سیلیکات هیدراته کمی افزایش یافته و باعث متراکم شدن آن می‌شود. لازم به ذکر است که فشار محیطی زمانی می‌تواند نقش مؤثری در تقویت خواص مکانیکی خمیره سیمان داشته باشد که منجر به کاهش طول پیوندی در ساختار اتمی و در نتیجه افزایش قابل ملاحظه تراکم بالا بردن دانسیته گردد. اما در چاه‌های نفتی فشار موجود به اندازه‌ای نمی‌باشد که قادر به تغییر ساختار اتمی خمیره سیمان و در نتیجه تقویت خواص آن گردد.

مقدار نیروهای خارجی با نیروهای داخلی می‌باشد. لازم به ذکر است که اگر نیروی خارجی اعمال شده به آستانه معینی برسد، پیوند بین اتم‌ها ممکن است شکسته شود، که منجر به تغییرات دائمی در ساختار اتمی می‌گردد. با این حال اگر سیستم در محدوده الاستیک باقی مانده بماند در چنین شرایطی، نیروی بین اتمی متناسب با تغییر در طول پیوند بالانس می‌شود و از رابطه بین تنش و کرنش تانسورها می‌توان ضریب سختی الاستیک، که مربوط به اجزای تنش و کرنش تحت دمای ثابت است را تعریف نمود. در رابطه (2) ضریب سختی الاستیک نشان داده شده است. که در آن  $V_0$  حجم سلول تغییر شکل نیافته و  $A$  ثابت انرژی هلمولتز<sup>1</sup> می‌باشد [47].

$$C_{lmnk} = \frac{\partial \sigma_{lm}}{\partial \varepsilon_{nk}} |T, \varepsilon_{nk}} = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 A}{\partial \varepsilon_{lm} \partial \varepsilon_{nk}} |T, \varepsilon_{nk}, \varepsilon_{nk} \quad (2)$$

خصوصیات الاستیکی مواد ایزوتروپیک به‌طور کامل با محاسبه دو ضریب مستقل مدول حجمی ( $K$ ) و مدول برشی ( $G$ ) تعیین می‌شود. برای دستیابی به اطلاعات ساختار و شرایط کل سیستم بررسی دقیقی لازم است. دو روش ویت<sup>2</sup> و رئوس<sup>3</sup> برای محاسبه مدول برشی و مدول حجمی معرفی شده‌اند که هر یک به ترتیب دامنه پایین و بالای خواص الاستیک را بیان می‌نمایند برای محاسبه خواص الاستیک از روش هیل استفاده می‌شود که از میانگین مقادیر ویت و رئوس محاسبه شده است. رابطه (3) و (4) تقریب ویت-رئوس-هیل را بیان می‌کند. در این روابط  $V, R, H$  به ترتیب نشان دهنده روش‌های ویت، رئوس و هیل<sup>4</sup> هستند.  $K_{VRH}$  و  $G_{VRH}$  نشان دهنده مدول حجمی و مدول برشی به‌صورت تقریب ویت، رئوس و هیل می‌باشند.

$$K_{VRH} = \frac{K_V + K_R}{2} \quad (3)$$

$$G_{VRH} = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (4)$$

هنگامی که مدول حجمی و مدول برشی محاسبه می‌شود، متوسط مدول یانگ و نسبت پواسون<sup>5</sup> را می‌توان با استفاده از معادلات مدول حجمی و مدول برشی بدست آورد. رابطه (5) و (6) مدول یانگ و نسبت پواسون را نشان می‌دهد.

<sup>1</sup> Helmholtz

<sup>2</sup> Vogit

<sup>3</sup> Reuss

<sup>4</sup> Hill

<sup>5</sup> Poisson

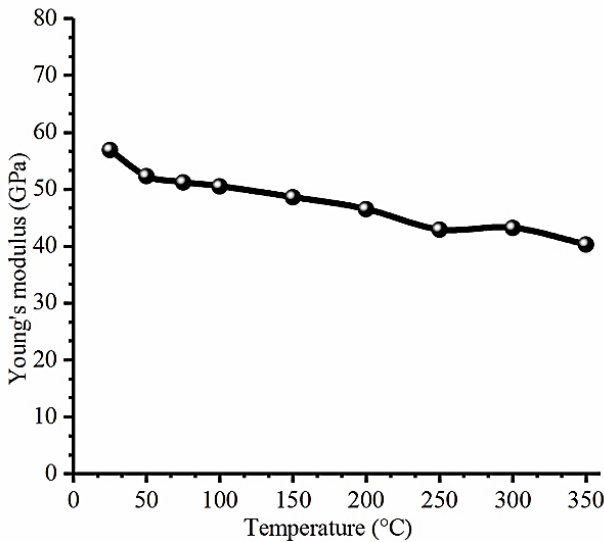


Fig. 4 The effect of oil well temperature on Young's modulus of hydrated calcium silicate

شکل 4 تأثیر دمای چاه بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته

سیلیکات هیدراته به‌گونه‌ای کاهش یافته که تغییرات بدست آمده در شرایط ترکیبی در دمای 200 درجه سانتی‌گراد و فشار 140 مگاپاسکال، به کاهش مدول یانگ به میزان 22 درصدی منجر می‌شود. خواص مکانیکی کلسیم سیلیکات هیدراته تحت تأثیر ترکیب دما و فشار، که شرایط واقعی درون چاه می‌باشد به این موضوع اذعان دارد که محدوده افت مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته در ترکیب دما و فشار بسیار نزدیک به تأثیرات منفی متغیر دما به‌تنهایی می‌باشد.

در جدول 3 ماتریس مدول سختی کلسیم سیلیکات هیدراته در حداکثر حالت مقدار ترکیبی دما و فشار یعنی دمای 350 درجه سانتی‌گراد و فشار 140 مگاپاسکال نشان داده شده است. این شکل روند محاسبه مدول یانگ استخراج شده در فرایند شبیه‌سازی را بیان می‌نماید. برای تمامی مدل‌های شبیه‌سازی شده ماتریس سختی محاسبه گردیده و به کمک این ماتریس خواص مکانیکی به‌دست آمده است.

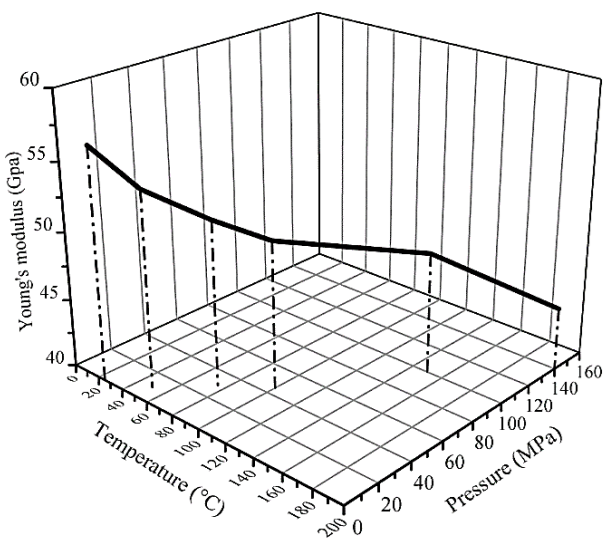


Fig. 5 The combined effect of oil well pressure and temperature on the Young's modulus of calcium silicate hydrate

شکل 5 تأثیر توأم فشار و دمای چاه نفت بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته

جدول 2 خواص مکانیکی کلسیم سیلیکات شبیه‌سازی شده

Table 2 Mechanical properties of simulated CSH

خواص مکانیکی	پلینک و همکاران [29]	مطالعه حاضر
مدول حجمی ویت (گیگاپاسکال)	51	71
مدول حجمی رئوس (گیگاپاسکال)	47	57
مدول حجمی هیل (گیگاپاسکال)	49	64
مدول برشی ویت (گیگاپاسکال)	24	22.1
مدول برشی رئوس (گیگاپاسکال)	22	19.5
مدول برشی هیل (گیگاپاسکال)	23	20.8
مدول یانگ (گیگاپاسکال)	59	56.3
نسبت پواسون	0.30	0.35

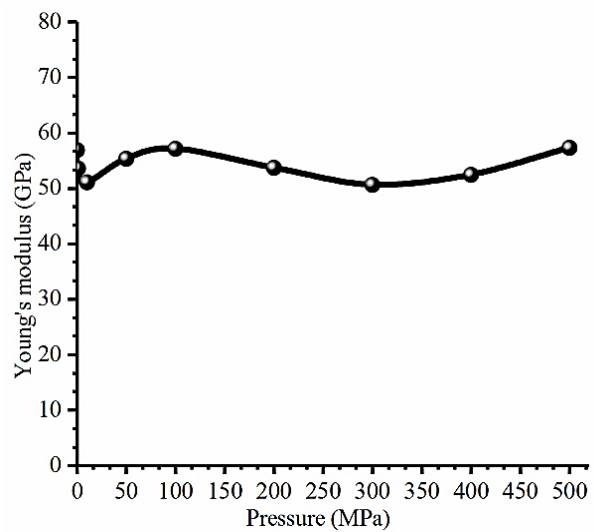


Fig. 3 The effect of oil well pressure on the Young's modulus of hydrated calcium silicate

شکل 3 تأثیر فشار چاه نفت بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته

"شکل 4" اثرات افزایش دما بر خواص مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته را نشان می‌دهد. حداقل و حداکثر دمای اعمالی بین 25 تا 350 درجه سانتی‌گراد در نظر گرفته شده است. با افزایش دما و رسیدن به مقدار 350 درجه سانتی‌گراد میزان مدول یانگ 30 درصد نسبت به دمای 25 درجه سانتی‌گراد کاهش می‌یابد. در توجیه این رفتار می‌توان به این نکته اشاره کرد که یکی از عوامل کاهش مدول یانگ، افزایش سرعت تغییر فاز ساختار کلسیم سیلیکات هیدراته می‌باشد. این موضوع باعث کاهش میزان دانسیته ساختار می‌شود که ناشی از تسریع واکنش در فرایند هیدراتاسیون و خشک شدن ساختار با افزایش دما می‌باشد. نتایج مطالعات آزمایشگاهی صورت پذیرفته در این زمینه تأییدی بر فرایند فوق می‌باشد که با افزایش میزان حرارت مدول یانگ در نمونه سیمان‌های آزمایش شده بشدت کاهش می‌یابد [50].

برسی تأثیر جداگانه دما و فشار نشان می‌دهند که گستره تضعیف خواص مکانیکی کلسیم سیلیکات هیدراته وابستگی بیشتری به دما دارد.

"شکل 5" تأثیر توأم فشار و دمای چاه نفت را بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته نشان می‌دهد. میزان دمای در نظر گرفته شده برابر 25، 50، 75، 100، 150 و 200 درجه سانتی‌گراد و فشار ترکیب شده برابر 0.1، 10، 30، 45، 100 و 140 مگاپاسکال بوده است. در شرایط ترکیبی دمای 25 درجه سانتی‌گراد و فشار 0.1 مگاپاسکال بیشترین مقدار مدول یانگ بدست آمده است و با افزایش ترکیبی میزان دما و فشار، مدول یانگ کلسیم

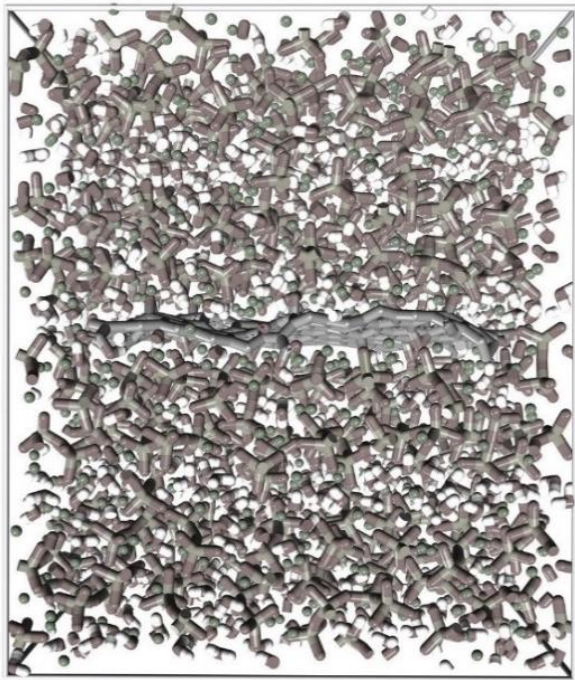


Fig. 6 The molecular structure of GO reinforced calcium silicate hydrated

شکل 6 ساختار مولکولی کلسیم سیلیکات هیدراته تقویت‌شده با گرافن اکساید

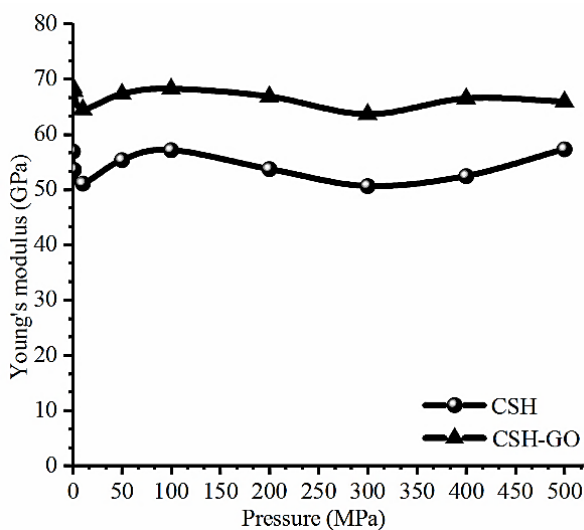


Fig. 7 The effect of GO on the Young's modulus of hydrated calcium silicate under oil well pressures

شکل 7 تأثیر اکسید گرافن بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته تحت تغییرات فشار چاه نفت

واندروالسی و تمایل برقراری پیوند بین اتمی، افزایش انرژی فصل مشترک بین کلسیم سیلیکات هیدراته و گرافن اکساید که باعث مقید نمودن و بروز خواص مقاومتی گرافن اکساید در درون کامپوزیت می‌گردد [52,51].

### 5- نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص مکانیکی ماتریس سیمانی و اثر تقویت‌کنندگی گرافن اکساید در این ماتریس تحت شرایط چاه‌های نفتی و در مقیاس نانو به روش دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است.

جدول 3 ماتریس سختی کلسیم سیلیکات هیدراته در شرایط دمایی 350 درجه سانتی‌گراد و فشار 140 مگاپاسکال

Table 3 Stiffness matrix of calcium silicate hydrates at 350 ° C and 140 MPa

X	Y	Z	YZ	XZ	XY	$C_{ij}$ (GPa)
71.14	36.34	35.20				X
	73.62	35.19				Y
		64.15				Z
			14.63			YZ
				16.77		XZ
					16.17	XY

### 3-4- بررسی تأثیر گرافن اکساید بر عملکرد کامپوزیت سیمانی در شرایط محیطی چاه نفت

برای محاسبه خواص نانو کامپوزیت کلسیم سیلیکات هیدراته تقویت‌شده با گرافن اکساید، طراحی سلول شبیه‌سازی به‌گونه‌ای انجام گردید که گرافن اکساید در بین دو سطح از مولکول‌های کلسیم سیلیکات هیدراته قرار بگیرد و یا به بیان دیگر سلول شبیه‌سازی یک مجموعه سانویچی سه لایه طراحی گردید است. در "شکل 6" سلول شبیه‌سازی نشان داده شده است. تمام پارامترهای دما و فشار نیز همانند بررسی قبلی در خصوص کامپوزیت سیمان استفاده گردیده است.

"شکل 7" رفتار کلسیم سیلیکات هیدراته را بعد از تقویت شدن با اکسید گرافن و در شرایط تغییرات فشار چاه نفت نشان می‌دهد. نمودار نشانگر آن است که افزودن گرافن اکساید می‌تواند مدول یانگ ساختار کلسیم سیلیکات هیدراته را افزایش دهد. به‌گونه‌ای که در نمودار نشان داده شده است مدول یانگ نانو کامپوزیت کلسیم سیلیکات هیدراته تقویت‌شده با گرافن اکساید، تحت فشارهای اعمالی حدوداً به میزان 20 درصد نسبت به حالت نمونه بدون گرافن اکساید رشد نموده است.

تأثیر گرافن اکساید بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته تحت تغییرات دمایی چاه نفت در "شکل 8" نشان داده شده است. با افزایش دما، مدول یانگ کاهش می‌یابد، اما در این حالت میزان تأثیرات منفی به‌مراتب از حالت کامپوزیت کلسیم سیلیکات هیدراته بدون گرافن اکساید کمتر می‌باشد. همچنین در تمام دماهای بررسی شده مدول یانگ نمونه تقویت‌شده حدود 23 درصد از مدول یانگ نظیر نمونه تقویت نشده در آن دما بیشتر می‌باشد. این امر به دلیل نقش تقویت‌کنندگی گرافن اکساید در بهبود خواص کلسیم سیلیکات هیدراته در محیط چاه ایجاد می‌گردد. باوجود افزایش دما نقش تقویت‌کنندگی گرافن اکساید حفظ می‌شود و دلیل کاهش مدول یانگ افت خواص ساختاری کلسیم سیلیکات هیدراته می‌باشد.

در "شکل 9" نیز تأثیر گرافن اکساید بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته در شرایط اعمال توأم فشار و دمایی چاه نفت نشان داده شده است. نمودارها بیانگر بهبود مدول یانگ نانو کامپوزیت حاصل نسبت به حالت کامپوزیت کلسیم سیلیکات هیدراته بدون گرافن اکساید می‌باشد. مینگ لی و همکاران با بررسی تأثیر گرافن اکساید در سیمان حفاری دریافتند که اثر تقویت‌کنندگی گرافن اکساید با افزایش دما حفظ گردیده و باعث افت کمتر خواص مکانیکی سیمان می‌شود [23]. عامل‌های متفاوتی در نقش تقویت‌کنندگی گرافن اکساید تأثیرگذار می‌باشند که از آن جمله می‌توان به موارد ذیل اشاره کرد. خواص فوق‌العاده گرافن اکساید، ایجاد برهمکنش‌های

درصد می‌گردد. لذا استفاده از نانوذره اکسید گرافن می‌تواند از کاهش خواص مکانیکی ماتریس سیمانی در دماهای چاه‌های نفتی جلوگیری نماید. نتایج این تحقیق نشانگر آن است که گرافن اکساید به‌عنوان یک تقویت‌کننده مناسب می‌تواند نقش بسزایی در بهبود کیفیت ماتریس سیمانی در شرایط دما و فشار بالای چاه‌های نفتی داشته باشد. برهم‌کنش‌های صورت پذیرفته بین ماتریس سیمانی و گرافن اکساید باعث بهبود خواص ریزساختار و ایجاد شرایط تقویت‌کنندگی گرافن اکساید در دما و فشار بالا می‌گردد. البته لازم به ذکر است که در این پژوهش مطالعات صورت گرفته در ابعاد نانو صورت پذیرفته و جهت نتیجه‌گیری جامع نیاز به مطالعات وسیع‌تر در ابعاد مکرو نیز می‌باشد. نتایج این تحقیق می‌تواند به استفاده از فناوری نانو در حفاری پایدار چاه‌های نفت و افزایش عمر بهره‌وری آن‌ها کمک کند.

#### 6- فهرست علائم

A	ثابت انرژی هلمولتز
$C_{tmnk}$	ضریب سختی الاستیک
E	مدول یانگ (GPa)
G	مدول حجمی (GPa)
K	مدول حجمی (GPa)
P	فشار (MPa)
T	دما (°C)

#### علائم یونانی

$\text{Å}$	آنگستروم
$\sigma$	تنش
$\varepsilon$	کرنش
$\nu$	نسبت پواسون

#### 7- مراجع

- [1] G. M. Friedman, S. A. Reeckmann, B. Borak, Carbonate deformation mechanisms in the world's deepest wells (~ 9 km), *Tectonophysics*, Vol. 74, No. 3-4, pp. T15-T19, 1981.
- [2] Y. A. Kozlovsky, The world's deepest well, *Scientific American*, Vol. 251, No. 6, pp. 98-104, 1984.
- [3] A. Zharikov, V. Vitovtova, V. Shmonov, A. Grafchikov, Permeability of the rocks from the Kola superdeep borehole at high temperature and pressure: implication to fluid dynamics in the continental crust, *Tectonophysics*, Vol. 37, No. 1, pp. 177-191, 2003.
- [4] A. S. Al-Suwaidi, A. A. Soliman, K. Jammeli, M. B. Arif, B. Elatrache, T. Fattah, M. Agnani, E. W. F. Voon, A New Cement Sealant System for Long-Term Zonal Isolation for Gas Wells in Abu Dhabi, in *Abu Dhabi International Petroleum Exhibition and Conference*, Abu Dhabi, UAE, 3-6, 2008.
- [5] K. Ravi, D. E. McMechan, B. Reddy, R. J. Crook, A Comparative Study of Mechanical Properties of Density-Reduced Cement Compositions, *SPE Drilling & Completion*, Vol. 22, No. 2, pp. 119-126, 2007.
- [6] R. C. Smith, C. A. Powers, T. A. Dobkins, A new ultra-lightweight cement with super strength, *Journal of Petroleum Technology*, Vol. 32, No. 8, pp. 1438-1444, 1980.
- [7] A.S. Dahab, A.E. Omar, Rheology and stability of saudi cement for oil well cementing, *Journal of King Saud University - Engineering Sciences*, Vol. 1, No. 1, pp. 273-286, 1989.
- [8] E. Lécolier, A. Rivereau, G. Le Saoût, A. Audibert-Hayet, Durability of hardened portland cement paste used for oilwell cementing, *Oil & Gas Science and Technology-Revue de l'IFP*, Vol. 62, No. 3, pp. 335-345, 2007.
- [9] R. Rubiandini, S. Siregar, N. Suhascaryo, D. Efril, The Effect of CaO and MgO as Expanding Additives to Improve Cement Isolation Strength under HPHT Exposure, *Journal of Engineering and Technological Sciences*, Vol. 37, No. 1, pp. 29-48, 2005.

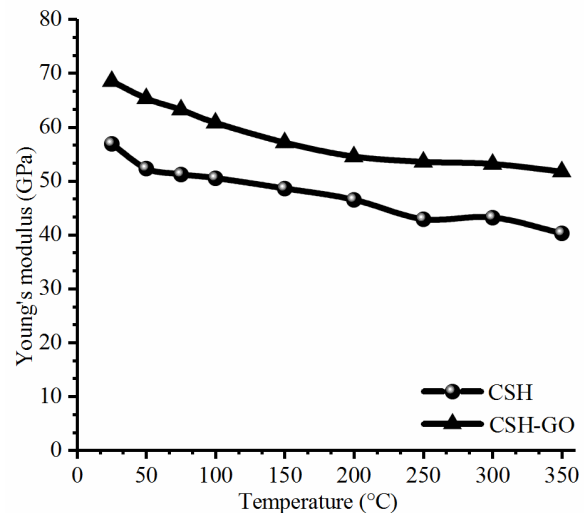


Fig. 8 The effect of GO on the Young's modulus of hydrated calcium silicate under oil well temperatures

شکل 8 تأثیر اکسید گرافن بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته تحت تغییرات دمای چاه نفت

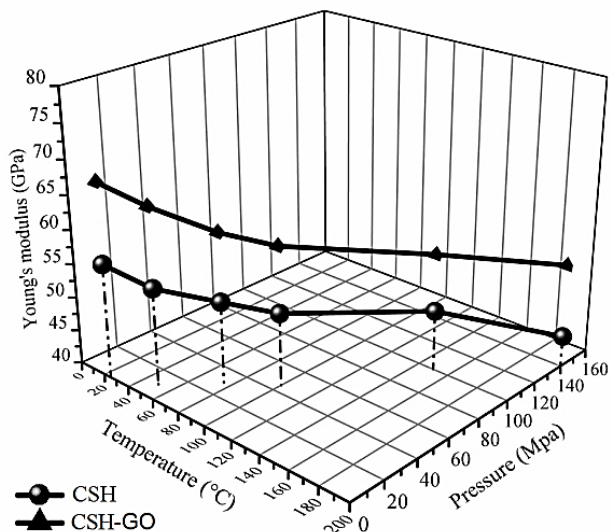


Fig. 9 The effect of GO on the Young's modulus of hydrated calcium silicate under temperature and pressure of oil well

شکل 9 تأثیر گرافن اکساید بر مدول یانگ کلسیم سیلیکات هیدراته تحت اثر توأم فشار و دمای چاه

نتایج حاصل از اعمال فشار و دمای بالا بر روی کلسیم سیلیکات هیدراته، حاکی از کاهش خواص مکانیکی ماتریس سیمانی در این شرایط می‌باشد. در شبیه‌سازی انجام شده افزایش دما عامل تأثیرگذار اصلی بر کاهش خواص مکانیکی ماتریس سیمانی تشخیص داده شد. به طوریکه افزایش دما از 25 به 350 درجه سانتی‌گراد باعث کاهش 30 درصدی مدول یانگ ماتریس سیمانی گردید در حالی که افزایش فشار از 0.1 به 500 مگاپاسکال تغییر محسوسی در مدول یانگ ماتریس سیمانی ایجاد نکرد.

در شرایط فشار و دمای بالای چاه‌های نفتی افزودن نانوذرات اکسید گرافن تأثیر مثبتی بر خواص مکانیکی ماتریس سیمانی در مقیاس نانو دارد. طبق شبیه‌سازی انجام شده در شرایط چاه‌های نفتی افزودن گرافن اکساید به ماتریس سیمانی باعث افزایش مدول یانگ کامپوزیت حاصله به میزان 23



- [30] M. A. Qomi, K. Krakowiak, M. Bauchy, K. Stewart, R. Shahsavari, D. Jagannathan, D. Brommer, A. Baronne, M. Buehler, S. Yip, Combinatorial molecular optimization of cement hydrates, *Nature communications*, Vol. 5, No. 1, pp. 4960, 2014.
- [31] A. K. Geim, K. S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature materials*, Vol. 6, No. 3, pp. 183-191, 2007.
- [32] M. Pumera, A. Ambrosi, A. Bonanni, E. L. K. Chng, H. L. Poh, Graphene for electrochemical sensing and biosensing, *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, Vol. 29, No. 9, pp. 954-965, 2010.
- [33] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *science*, Vol. 321, No. 5887, pp. 385-388, 2008.
- [34] A. Korayem, N. Tourani, M. Zakertabrzi, A. Sabziparvar, W. Duan, A review of dispersion of nanoparticles in cementitious matrices: Nanoparticle geometry perspective, *Construction and Building Materials*, Vol. 153, No. 1, pp. 346-357, 2017.
- [35] D. R. Dreyer, S. Park, C. W. Bielawski, R. S. Ruoff, The chemistry of graphene oxide, *Chemical Society Reviews*, Vol. 39, No. 1, pp. 228-240, 2010.
- [36] S. Mao, H. Pu, J. Chen, Graphene oxide and its reduction: modeling and experimental progress, *Rsc Advances*, Vol. 2, No. 7, pp. 2643-2662, 2012.
- [37] A. M. Dimiev, L. B. Alemany, J. M. Tour, Graphene oxide. Origin of acidity, its instability in water, and a new dynamic structural model, *ACS nano*, Vol. 7, No. 1, pp. 576-588, 2012.
- [38] L. Liu, L. Wang, J. Gao, J. Zhao, X. Gao, Z. Chen, Amorphous structural models for graphene oxides, *Carbon*, Vol. 50, No. 4, pp. 1690-1698, 2012.
- [39] L. Wang, K. Lee, Y.-Y. Sun, M. Lucking, Z. Chen, J. J. Zhao, S. B. Zhang, Graphene oxide as an ideal substrate for hydrogen storage, *ACS nano*, Vol. 3, No. 10, pp. 2995-3000, 2009.
- [40] B. Alder, T. Wainwright, Phase transition for a hard sphere system, *The Journal of chemical physics*, Vol. 27, No. 5, pp. 1208-1209, 1957.
- [41] A. Al-Ostaz, W. Wu, A.-D. Cheng, C. Song, A molecular dynamics and microporomechanics study on the mechanical properties of major constituents of hydrated cement, *Composites Part B: Engineering*, Vol. 41, No. 7, pp. 543-549, 2010.
- [42] W. Wu, A. Al-Ostaz, A. H.-D. Cheng, C. R. Song, Computation of elastic properties of Portland cement using molecular dynamics, *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, Vol. 1, No. 2, pp. 84-90, 2011.
- [43] H. Aminfar, N. Razmara, Molecular dynamics simulation of liquid argon flow in nanochannels using different potential functions, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 6, pp. 114-125, 2013. (in Persian فارسی)
- [44] S. J. Chen, C. Y. Li, Q. Wang, W. H. Duan, Reinforcing mechanism of graphene at atomic level: Friction, crack surface adhesion and 2D geometry, *Carbon*, Vol. 114, No. 1, pp. 557-565, 2017.
- [45] S. Sadeghzadeh, M. Khatibi, Effects of physical boundary conditions on the transverse vibration of single-layer graphene sheets, *Applied Physics A*, Vol. 122, No. 9, pp. 796, 2016.
- [46] G. Heidarinejad, R. Rabani, E. Shirani, The effect of wall force field on temperature distribution in nanochannel contains Lennard-Jones fluid by molecular dynamic simulation, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 6, pp. 23-31, 2017. (in Persian فارسی)
- [47] S. Hajilar, B. Shafei, Nano-scale investigation of elastic properties of hydrated cement paste constituents using molecular dynamics simulations, *Computational Materials Science*, Vol. 101, No. 1, pp. 216-226, 2015.
- [48] M. Shahri, J. J. Schubert, M. Amani, Detecting and Modeling Cement Failure in High-Pressure/High-Temperature (HP/HT) Wells, Using Finite Element Method (FEM), *International Petroleum Technology Conference*, Master Dissertation, University of Texas, Texas, American, 2005.
- [49] A. Mohamed, R. Mohan, J. Rivas, A. Rajendran, W. Hodo, K. Flurchick, A. Kelkar, Molecular Dynamics Modeling of Hydrated Calcium-Silicate-Hydrate (CSH) Cement Molecular Structure, *North Carolina Agricultural And Technical State Univ Greensboro*, 2014.
- [50] I. Hager, Behaviour of cement concrete at high temperature, *Bulletin of the Polish Academy of Sciences: Technical Sciences*, Vol. 61, No. 1, pp. 145-154, 2013.
- [10] C. Noïk, C. Rivereau, A. Oilwell cement durability. SPE 56538, Annual Technical Conference and Exhibition, Houston, Texas, USA, 3-6 October. Noïk, C., Rivereau, A. and Vernet, C. Novel cements materials for high-pressure/high-temperature wells, SPE 50589, *SPE European Petroleum Conference*, The Hague, The Netherlands, 1999.
- [11] C. W. Roddy, Cement compositions and methods utilizing nano-hydraulic cement, *United States patent US 9,512,346*, 2016.
- [12] Y. A. Perera Mercado, J. C. Cano Ramirez, A. C. Hurtado Acevedo, S. I. Martinez Mendez, nano-additive for hydrocarbon well cementing operations, United States patent US 8, 273,173, 2012.
- [13] A. Balza, Y. Perera, J. Brito, A. Hurtado, G. G. Quercia, O. Corona, A. Colina, A. Blanco, Nanoparticles usage tendencies in cementing systems for hydrocarbon wells, *International Congress on the Chemistry of Cement*, Madrid, Spain, pp. 3-8, 2011.
- [14] S. Stankovich, D. A. Dikin, G. H. B. Dommett, K. M. Kohlhaas, E. J. Zimney, E. A. Stach, R. D. Piner, S. T. Nguyen, R. S. Ruoff, Graphene-based composite materials, *Nature*, Vol. 442, No. 7100, pp. 282-286, 2006.
- [15] C. Androulidakis, G. Tsoukleri, N. Koutroumanis, G. Gkikas, P. Pappas, J. Parthenios, K. Papagelis, C. Galiotis, Experimentally derived axial stress-strain relations for two-dimensional materials such as monolayer graphene, *Carbon*, Vol. 81, No. 1, pp. 322-328, 2015.
- [16] A. Balandin, Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials, *Nature materials*, Vol. 10, No. 8, pp. 569, 2011.
- [17] R. Nazemzad, H. Shokrollahi, S. Hosseini-Hashemi, Sandwich beam model for free vibration analysis of bilayer graphene nanoribbons with interlayer shear effect, *Journal of Applied Physics*, Vol. 115, No. 17, pp. 174303, 2014.
- [18] S. Sadeghzadeh, L. Liu, Resistance and rupture analysis of single- and few-layer graphene nanosheets impacted by various projectiles, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 97, No. 1, pp. 617-629, 2016.
- [19] S. Sadeghzadeh, M. Khatibi, Modal identification of single layer graphene nano sheets from ambient responses using frequency domain decomposition, *European Journal of Mechanics-A/Solids*, Vol. 65, No. 1, pp. 70-78, 2017.
- [20] Z. Pan, L. He, L. Qiu, A. H. Korayem, G. Li, J. W. Zhu, F. Collins, D. Li, W. H. Duan, M. C. Wang, Mechanical properties and microstructure of a graphene oxide-cement composite, *Cement and Concrete Composites*, Vol. 58, No. 1, pp. 140-147, 2015.
- [21] E. Horszczaruk, E. Mijowska, R. J. Kalenczuk, M. Aleksandrak, S. Mijowska, Nanocomposite of cement/graphene oxide-Impact on hydration kinetics and Young's modulus, *Construction and Building Materials*, Vol. 78, No. 1, pp. 234-242, 2015.
- [22] Z. Lu, D. Hou, L. Meng, G. Sun, C. Lu, Z. Li, Mechanism of cement paste reinforced by graphene oxide/carbon nanotubes composites with enhanced mechanical properties, *RSC Advances*, Vol. 5, No. 122, pp. 100598-100605, 2015.
- [23] M. Li, F. Meng, X. Y. Guo, Mechanical Properties and Mechanism of Graphite Oxide Reinforced Oil Well Cement, *In Materials Science Forum*, Vol. 847, No. 1, pp. 445-450, 2016.
- [24] B. J. Alder, T. E. Wainwright, Studies in molecular dynamics. I. General method, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 31, No. 2, pp. 459-466, 1959.
- [25] A. Tarighat, D. Tavakoli, Estimation of mechanical properties of hardened cement paste with molecular dynamics simulation method at nano scale, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 2, pp. 459-466, 2016. (in Persian فارسی)
- [26] H. F. Taylor, Proposed structure for calcium silicate hydrate gel, *Journal of the American Ceramic Society*, Vol. 69, No. 6, pp. 71-78, 1986.
- [27] I. Richardson, The nature of CSH in hardened cements, *cement and concrete research*, Vol. 29, No. 8, pp. 1131-1147, 1999.
- [28] M. Eftekhari, S. Mohammadi, Molecular dynamics simulation of the nonlinear behavior of the CNT-reinforced calcium silicate hydrate (C-S-H) composite, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, Vol. 82, No. 1, pp. 78-87, 2016.
- [29] R. J.-M. Pellenq, A. Kushima, R. Shahsavari, K. J. Van Vliet, M. J. Buehler, S. Yip, F.-J. Ulm, A realistic molecular model of cement hydrates, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 106, No. 38, pp. 16102-16107, 2009.

[52]D. Hou, Z. Lu, X. Li, H. Ma, Z. Li, Reactive molecular dynamics and experimental study of graphene-cement composites: Structure, dynamics and reinforcement mechanisms, *Carbon*, Vol. 115, No. 1, pp. 188-208, 2017.

[51]D. Fan, L. Lue, S. Yang, Molecular dynamics study of interfacial stress transfer in graphene-oxide cementitious composites, *Computational Materials Science*, Vol. 139, No. 1, pp. 56-64, 2017.