

Evaluación de las propiedades mecánicas del cemento sometido a condiciones HPHT mediante  
simulación con dinámica molecular

Diego Armando Rincón Sánchez y Alejandro Sánchez Román

Trabajo de Grado para Optar al Título de Ingenieros de Petróleos

Director

Emiliano Ariza León

Ingeniero de Petróleos

Doctor en Ingeniería Química

Codirectora

Jeimy Alejandra Peña Mateus

Ingeniera de Petróleos

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería de Petróleos

Pregrado Presencial

Bucaramanga

2024

**Dedicatoria**

A Dios, que me guío y me permitió culminar satisfactoriamente este camino, a mi familia por siempre apoyarme y creer en mí. Gracias por todas las enseñanzas que me acompañan siempre.

Alejandro Sánchez

### **Agradecimientos**

Agradezco en primer lugar a Dios que es la fuente de toda fuerza, a mi mamá por su comprensión, dedicación y amor, a mi papá por su apoyo y consejos, a mi abuela Marlene por siempre confiar en mí, a mi abuelo Nicanor por sus consejos que me ayudaron tanto, a mi abuelo Gustavo por sus esfuerzos y atención.

A mis amigos José Reyes, Jesús Ruiz, William Cervantes, Jennifer López, Ángel Gonzales y Oscar Blanco que siempre me apoyaron y ser incondicionales en todo.

A la Universidad Industrial de Santander por aceptarme en ser parte de sus programas, educarme y formarme en esta linda carrera de Ingeniería de Petróleo y brindar el software para la realización de las simulaciones, a la ingeniera Jeimy Peña por ser indispensable dirección y asesoría en la realización de toda esta investigación, al profesor Emiliano Ariza por su acercamiento y dirección y el grupo de estabilidad de pozo que nos brindó su apoyo.

Alejandro Sánchez

### **Dedicatoria**

A Dios, a mis padres Esmith Sánchez, Armando Rincón y hermanos que siempre me han apoyado y que han estado a mi lado a ellos les agradezco.

Diego Rincón.

### **Agradecimientos**

A mi tutora y mentora de trabajo de grado Ing. Alejandra Peña por todo el apoyo y acompañamiento científico durante este periodo de trabajo.

Al Dr. Emiliano Ariza por su valiosa colaboración y empeño en cada comentario constructivo correctivo y participativo en el desarrollo de este proyecto.

Al Dr. German González y Ing. Mario Mendoza por su valiosa colaboración y consejos que permitieron la mejora de nuestra comprensión.

Al grupo GIEP (Grupo de Investigación de Estabilidad de Pozo) que me brindo su asistencia en este periodo de trabajo junto a colegas y compañeros.

A todos los profesionales que hacen parte del área académica que compartieron conmigo su conocimiento y experiencia a través de esta línea de tiempo.

Finalmente, a la Escuela de Ingeniería de Petróleos y a la Universidad Industrial de Santander que fue mi segundo hogar en este proceso.

A todos ellos infinitas gracias.

Diego Rincón.

**Lista de contenido**

|         |                                            |    |
|---------|--------------------------------------------|----|
| 1       | Objetivos .....                            | 25 |
| 1.1     | Objetivo general .....                     | 25 |
| 1.2     | Objetivos específicos .....                | 25 |
| 2       | Marco teórico.....                         | 26 |
| 2.1     | Cementación de pozos .....                 | 26 |
| 2.2     | Sistemas de Sílice – Cal.....              | 26 |
| 2.3     | Cemento con alto contenido de alúmina..... | 27 |
| 2.4     | Cemento Portland.....                      | 28 |
| 2.4.1   | Principales compuestos del cemento .....   | 28 |
| 2.4.1.1 | Silicato tricálcico (Alita) .....          | 29 |
| 2.4.1.2 | Silicato dicálcico (Belita).....           | 29 |
| 2.4.1.3 | Aluminato tricálcico .....                 | 30 |
| 2.4.1.4 | Ferrito aluminato tetracálcico.....        | 30 |
| 2.4.2   | Clases de cemento Portland.....            | 30 |
| 2.4.2.1 | Clase A .....                              | 31 |
| 2.4.2.2 | Clase B .....                              | 31 |
| 2.4.2.3 | Clase C .....                              | 31 |
| 2.4.2.4 | Clase D .....                              | 32 |
| 2.4.2.5 | Clase E.....                               | 32 |
| 2.4.2.6 | Clase F.....                               | 32 |

|         |                                                               |    |
|---------|---------------------------------------------------------------|----|
| 2.4.2.7 | Clase G .....                                                 | 33 |
| 2.4.2.8 | Clase H .....                                                 | 33 |
| 2.4.3   | Hidratación del cemento Portland.....                         | 33 |
| 2.4.4   | Efecto de la temperatura en el cemento Portland.....          | 34 |
| 2.4.5   | Efecto de la temperatura sobre las propiedades mecánicas..... | 36 |
| 2.4.5.1 | Retracción del cemento. ....                                  | 36 |
| 2.4.5.2 | Retroceso en la resistencia. ....                             | 36 |
| 2.4.6   | Efectos de la presión en el cemento Portland.....             | 37 |
| 2.4.7   | Morfología.....                                               | 38 |
| 2.4.8   | Formación del gel C-S-H .....                                 | 39 |
| 2.4.9   | Relación Ca/Si.....                                           | 39 |
| 2.4.10  | Estados de agua.....                                          | 41 |
| 2.4.11  | Densidad y contenido del agua .....                           | 41 |
| 2.5     | Minerales análogos .....                                      | 43 |
| 2.5.1   | Tobermorita.....                                              | 43 |
| 2.5.2   | Jennita.....                                                  | 44 |
| 2.6     | Propiedades mecánicas .....                                   | 45 |
| 2.6.1   | Módulo de Young .....                                         | 46 |
| 2.6.2   | Relación de Poisson.....                                      | 47 |
| 2.6.3   | Módulo de corte .....                                         | 48 |
| 3       | Casos experimentales.....                                     | 50 |
| 3.1     | Caso experimental N°1 .....                                   | 51 |

|         |                                                                                                                                                                                                          |    |
|---------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 3.1.1   | Composición y preparación de las muestras de cemento Portland.....                                                                                                                                       | 51 |
| 3.1.2   | Resultados prueba experimental de las propiedades mecánicas .....                                                                                                                                        | 53 |
| 3.1.2.1 | Módulo de Young .....                                                                                                                                                                                    | 53 |
| 3.1.2.2 | Relación de Poisson.....                                                                                                                                                                                 | 53 |
| 3.1.2.3 | Módulo de corte .....                                                                                                                                                                                    | 53 |
| 3.2     | Caso experimental N°2 .....                                                                                                                                                                              | 54 |
| 3.2.1   | Preparación de las muestras de cemento .....                                                                                                                                                             | 55 |
| 3.3     | Discusión resultados experimentales .....                                                                                                                                                                | 56 |
| 4       | Dinámica molecular .....                                                                                                                                                                                 | 60 |
| 4.1     | Metodología de simulación .....                                                                                                                                                                          | 61 |
| 4.2     | Propiedades termodinámicas de la simulación.....                                                                                                                                                         | 62 |
| 4.3     | Campo de fuerza .....                                                                                                                                                                                    | 63 |
| 4.3.1   | Campo de fuerza ClayFF.....                                                                                                                                                                              | 63 |
|         | Es un campo de fuerza adecuado para la simulación de sistemas hidratados con<br>multicomponentes, y es ampliamente efectivo para simulaciones moleculares de interfaces<br>de fluidos con arcillas. .... | 63 |
| 4.3.2   | Modelo de simulación .....                                                                                                                                                                               | 66 |
| 5       | Análisis de resultados.....                                                                                                                                                                              | 72 |
| 5.1     | Análisis de resultados Caso N°1 .....                                                                                                                                                                    | 72 |
| 5.1.1   | Seguimiento al sistema caso N°1 .....                                                                                                                                                                    | 73 |
| 5.1.2   | Análisis propiedades mecánicas caso N°1 .....                                                                                                                                                            | 79 |

|         |                                               |     |
|---------|-----------------------------------------------|-----|
| 5.1.2.1 | Módulo de Young caso N°1 .....                | 83  |
| 5.1.2.2 | Relación de Poisson caso N°1 .....            | 85  |
| 5.1.2.3 | Módulo de corte caso N°1 .....                | 87  |
| 5.2     | Análisis de resultados Caso N°2 .....         | 88  |
| 5.2.1   | Seguimiento al sistema caso N°2 .....         | 89  |
| 5.2.2   | Análisis propiedades mecánicas caso N°2 ..... | 93  |
| 5.2.2.1 | Módulo de Young caso N°2 .....                | 97  |
| 5.2.2.2 | Relación de Poisson caso N°2 .....            | 99  |
| 5.2.2.3 | Módulo de Corte caso N°2 .....                | 100 |
| 5.3     | Discusión de resultados simulación DM .....   | 102 |
| 6       | Conclusiones .....                            | 106 |
| 7       | Recomendaciones .....                         | 107 |
|         | Referencias Bibliográficas .....              | 109 |
|         | Anexos .....                                  | 118 |

**Lista de tablas**

|                                                                               |    |
|-------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabla 1 .....                                                                 | 52 |
| Condiciones de curado caso experimental. ....                                 | 52 |
| Tabla 2 .....                                                                 | 52 |
| Composición de cada muestra en función del porcentaje caso experimental. .... | 52 |
| Tabla 3 .....                                                                 | 52 |
| Composición de cada muestra en función del porcentaje caso experimental. .... | 52 |
| Tabla 4 .....                                                                 | 53 |
| Resultado Módulo de Young caso experimental. Caso N°1 .....                   | 53 |
| Tabla 5 .....                                                                 | 53 |
| Resultado relación de Poisson caso experimental. Caso N°1 .....               | 53 |
| Tabla 6 .....                                                                 | 53 |
| Resultado módulo de corte caso experimental. Caso N°1 .....                   | 53 |
| Tabla 7 .....                                                                 | 55 |
| Resultados del cálculo de las propiedades mecánicas. Caso N°2 .....           | 55 |
| Tabla 8 .....                                                                 | 66 |
| Parámetros no enlazantes del campo de fuerza ClayFF. ....                     | 66 |
| Tabla 9 .....                                                                 | 66 |
| Parámetros de enlace campo de fuerza SPC. ....                                | 66 |

|                                                                                                            |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabla 10.....                                                                                              | 66 |
| Parámetros de ángulo campo de fuerza.....                                                                  | 66 |
| Tabla 11.....                                                                                              | 68 |
| Número de iones de calcio e hidroxilo incluidos en cada modelo. ....                                       | 68 |
| Tabla 12.....                                                                                              | 68 |
| Número de moléculas de agua que se agregaron a las diferentes relaciones en función del modelo.<br>.....   | 68 |
| Tabla 13.....                                                                                              | 84 |
| Valores del módulo de Young por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM.<br>Caso N°1. .... | 84 |
| Tabla 14.....                                                                                              | 86 |
| Valores del módulo de Young por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM.<br>Caso N°1. .... | 86 |
| Tabla 15.....                                                                                              | 87 |
| Valores del módulo de corte por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM. Caso<br>N°1.....  | 87 |
| Tabla 16.....                                                                                              | 96 |
| Esfuerzos según su dirección en Ca/Si 1.8.....                                                             | 96 |
| Tabla 17.....                                                                                              | 97 |
| Esfuerzos según su dirección en Ca/Si 1.9.....                                                             | 97 |

|                                                                                                            |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tabla 18.....                                                                                              | 97  |
| Valores del módulo de Young por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM.<br>Caso N°2. .... | 98  |
| Tabla 19.....                                                                                              | 99  |
| Relación de Poisson por relación valores determinados por la simulación DM. Caso N°2 .....                 | 99  |
| Tabla 20.....                                                                                              | 100 |
| Módulo de corte valores determinados por la simulación DM. ....                                            | 100 |
| Tabla 21 .....                                                                                             | 102 |
| Comparación de valores en las propiedades mecánicas determinadas.....                                      | 102 |

**Lista de Figuras**

|                                                                                              |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1.....                                                                                | 34 |
| Esquema de hidratación del cemento Portland .....                                            | 34 |
| Figura 2.....                                                                                | 35 |
| Efecto de la temperatura sobre la cinética de hidratación del cemento Portland Clase G ..... | 35 |
| Figura 3.....                                                                                | 40 |
| Histograma frecuencia de la relación Ca/Si en cemento Portland.....                          | 40 |
| Figura 4.....                                                                                | 44 |
| Estructura cristalina de la tobermorita.....                                                 | 44 |
| Figura 5.....                                                                                | 45 |
| Estructura cristalina de la jennita.....                                                     | 45 |
| Figura 6.....                                                                                | 46 |
| Módulo de Young .....                                                                        | 46 |
| Figura 7.....                                                                                | 47 |
| Relación de Poisson.....                                                                     | 47 |
| Figura 8.....                                                                                | 48 |
| Módulo de corte .....                                                                        | 48 |
| Figura 9.....                                                                                | 57 |
| Módulo de Young y Resistencia a la tracción con las relaciones Ca/Si.....                    | 57 |

|                                                                                          |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 10 .....                                                                          | 58 |
| Módulo elástico a 28 y 56 días en relación W/C .....                                     | 58 |
| Figura 11 .....                                                                          | 60 |
| Diagrama de flujo dinámica molecular .....                                               | 60 |
| Figura 12 .....                                                                          | 67 |
| Mapa estructural de la tobermorita 14 Å.....                                             | 67 |
| Figura 13 .....                                                                          | 71 |
| Cadenas de óxido de silicio y calcio junto con moléculas de agua y iones de calcio ..... | 71 |
| Figura 14 .....                                                                          | 73 |
| Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.8 caso N°1 .....                                 | 73 |
| Figura 15 .....                                                                          | 75 |
| Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.9 caso N°1 .....                                 | 75 |
| Figura 16 .....                                                                          | 77 |
| Evolución temporal a través del tiempo Ca/Si 1.8 caso N°1 .....                          | 77 |
| Figura 17 .....                                                                          | 78 |
| Evolución temporal a través del tiempo Ca/Si 1.9 caso N°1 .....                          | 78 |
| Figura 18 .....                                                                          | 80 |
| Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.8 caso N°1 .....                  | 80 |
| Figura 19 .....                                                                          | 82 |

|                                                                         |    |
|-------------------------------------------------------------------------|----|
| Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.9 caso N°1 ..... | 82 |
| Figura 20 .....                                                         | 84 |
| Módulo de Young caso N°1 .....                                          | 84 |
| Figura 21 .....                                                         | 86 |
| Relación de Poisson caso N°1 .....                                      | 86 |
| Figura 22 .....                                                         | 87 |
| Módulo de corte caso N°1 .....                                          | 87 |
| Figura 23 .....                                                         | 89 |
| Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.9 caso N°2 .....                | 89 |
| Figura 24 .....                                                         | 91 |
| Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.9 caso N°2 .....                | 91 |
| Figura 25 .....                                                         | 92 |
| Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.8 caso N°2 .....                | 92 |
| Figura 26 .....                                                         | 93 |
| Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.9 caso N°2 ..... | 93 |
| Figura 28 .....                                                         | 98 |
| Módulo de Young caso N°2 .....                                          | 98 |
| Figura 29 .....                                                         | 99 |
| Relación de Poisson Caso N°2 .....                                      | 99 |

|                                |     |
|--------------------------------|-----|
| Figura 30 .....                | 101 |
| Módulo de corte caso N°2 ..... | 101 |

### Glosario

**Cemento:** material resistente compuesto de polvos finos y suaves utilizado para la estabilidad de pozos.

**Curado:** término utilizado para referirse al tiempo necesario para que el cemento se endurezca por causa de su hidratación.

**DM:** es la abreviatura de “Dinámica Molecular”, o en inglés “Molecular Dynamics” (MD).

**Fraguado:** el cemento es mezclado con agua lo que ocasiona una reacción donde el cemento pasa de estado líquido a sólido.

**HPHT:** se refiere a las condiciones de los pozos geotérmicos indicando “alta presión y alta temperatura”, por sus siglas en inglés.

**Modelos computacionales:** mediante la capacidad de cómputo se usa la simulación para estudiar al comportamiento de sistemas complejos mediante las ciencias básicas.

**Ca/Si:** relación Calcio/Silicio

**W/Si:** relación Agua/Silicio

**W/C:** relación Agua/Cemento

**Gel C-S-H:** por sus siglas en inglés (Calcium-Silicate-Hydrate), es el gel que se forma una vez el cemento Portland entra en contacto con el agua, siendo el principal compuesto del cemento cuyos componentes son calcio (Ca), silicio (Si) y agua (H<sub>2</sub>O).

**LAMMPS:** por sus siglas en inglés (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), es un código de dinámica molecular clásico centrado en el modelado de materiales.

**Fs:** femtosegundos

**Ps:** picosegundos

**CA:** aluminato monocalcico

**Nanoindentación:** técnica que es utilizada para determinar las propiedades mecánicas de un material, por lo que fue diseñado para medir la dureza, el módulo de elástico y demás propiedades.

**MSR:** moderada resistencia a los sulfatos/moderate resistance to sulfates.

**HSR:** alta resistencia a los sulfatos/high resistance to sulfates.

**Geopolímero:** material sólido formado con aluminosilicatos y por activación de silicatos alcalinos. Presentan baja conductividad térmica, lo cual permite su uso como materiales aislantes utilizado en recubrimientos térmicos.

**Ceniza volante:** junto con el hidróxido de calcio en el cemento reduce el tamaño de los poros, lo que contribuye a una mayor resistencia y longevidad.

**LAMMPS:** programa de dinámica molecular de los Laboratorios Nacionales Sandia, por sus siglas en inglés; large-scale atomic/molecular massively parallel simulator.

**Conjunto canónico:** es conformado por un sistema pequeño que está conectado a un sistema grande, donde ambos intercambian energía térmica, pero el sistema grande tiene capacidad significativa para absorber o liberar energía sin experimentar cambios notables en su temperatura.

**Conjunto micro canónico:** es una muestra aleatoria de tamaño fijo tomada del conjunto canónico más grande, donde comparte las mismas propiedades que este.

## Resumen

**Título:** Evaluación de las propiedades mecánicas del cemento sometido a condiciones HPHT mediante simulación con dinámica molecular.\*

**Autores:** Diego Armando Rincón Sánchez, Alejandro Sánchez Román, Jeimy Alejandra Peña Mateus, Emiliano Ariza León.\*\*

**Palabras Clave:** HPHT, cemento, propiedades mecánicas, dinámica molecular, modelos computacionales, simulación DM.

**Descripción:** La cementación térmica, una técnica aplicada en una variedad de pozos profundos, como los destinados a la extracción de petróleo, gas, geotérmicos y de recuperación térmica, ha experimentado en las últimas cinco décadas la prominencia del cemento Portland como material preponderante. En este contexto, la eficiencia en el sector energético requiere formulaciones de lechada que aseguren un revestimiento de cemento resistente capaz de soportar condiciones extremas de presión y temperatura. La integridad estructural de los pozos desempeña un papel esencial en la prevención de posibles fallos, lo que motiva la realización de estudios exhaustivos para evaluar las propiedades mecánicas del cemento como el módulo elástico y la dureza mediante pruebas experimentales. La presente investigación, se centra en la estimación de las propiedades mecánicas del cemento Portland bajo condiciones de alta presión y temperatura (HPHT) a través del método de simulación con dinámica molecular (DM). La simulación DM proporciona una visión detallada del comportamiento mecánico del cemento en condiciones extremas, implementando modelos computacionales para precisar la composición y las condiciones del material. Esta técnica computacional se llevó a cabo con la herramienta de uso libre, LAMMPS, desarrollada por los laboratorios SANDIA, otorgando confiabilidad a la simulación y mejorando la comprensión de los mecanismos que rigen el comportamiento del cemento en entornos geotérmicos. Trabajos anteriores han avanzado en la comprensión del comportamiento mecánico del cemento Portland mediante DM, focalizándose especialmente en el estudio del gel C-S-H, componente principal del cemento. Este estudio extiende la investigación a las propiedades mecánicas del gel C-S-H en pozos geotérmicos, respaldando los resultados obtenidos mediante la simulación con datos experimentales de la literatura. De esta manera, aporta de manera significativa al progreso del conocimiento en este ámbito especializado.

---

\* Trabajo de Grado

\*\* Grupo de Investigación en Estabilidad de Pozo (GIEP), Escuela de Ingeniería de Petróleos, Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas. Universidad Industrial de Santander (UIS). Director: PhD. Emiliano Ariza León. Codirectora: Jeimy Alejandra Peña Mateus.

### Abstract

**Title:** Evaluation of the mechanical properties of cement subjected to HPHT conditions through molecular dynamics simulation\*

**Authors:** Emiliano Ariza León, Jeimy Alejandra Peña Mateus, Diego Armando Rincón Sánchez y Alejandro Sánchez Román.\*\*

**Key Words:** HPHT, cement, mechanical properties, molecular dynamics, computational models, Simulation DM.

**Description:** Thermal cementing, a technique applied in various deep wells such as those used for oil extraction, gas, geothermal, and thermal recovery, has seen the prominence of Portland cement as the predominant material over the past five decades. In this context, efficiency in the energy sector requires slurry formulations that ensure a robust cement sheath capable of withstanding extreme pressure and temperature conditions. The structural integrity of wells plays an essential role in preventing potential failures, prompting comprehensive studies to assess the mechanical properties of cement, such as elastic modulus and hardness, through experimental tests. This research focuses on estimating the mechanical properties of Portland cement under high-pressure and high-temperature (HPHT) conditions using the molecular dynamics (MD) simulation method. MD simulation provides a detailed insight into the mechanical behavior of cement in extreme conditions, employing computational models to precisely determine the composition and conditions of the material. This computational technique was implemented using the freely available LAMMPS tool, developed by SANDIA laboratories, enhancing the reliability of the simulation, and improving the understanding of the mechanisms governing cement behavior in geothermal environments. Previous works have advanced the understanding of the mechanical behavior of Portland cement through MD, particularly focusing on the study of the C-S-H gel, a key component of cement. This study extends the investigation to the mechanical properties of the C-S-H gel in geothermal wells, validating the simulation results with experimental data from the literature. Thus, it significantly contributes to advancing knowledge in this specialized field.

---

\* Thesis.

\*\*Grupo de Investigación en Estabilidad de Pozo (GIEP), Escuela de Ingeniería de Petróleos, Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas. Universidad Industrial de Santander (UIS). Director: PhD. Emiliano Ariza León. Codirector: Jeimy Alejandra Peña Mateus.

## Introducción

La cementación térmica abarca los principales tipos de pozos profundos tales como de petróleo y gas, pozos geotérmicos y pozos de recuperación térmica. Durante los últimos 50 años los cementos más utilizados para completar pozos térmicos ha sido el cemento Portland, los sistemas de sílice-cal y el cemento con alto contenido de alúmina (Erik B y Guillot, 2006). Partiendo de su utilidad en el sector energético es importante tener formulaciones de lechada idóneas que garanticen el aislamiento zonal a través de un buen revestimiento de cemento, que soporte las cargas y los ambientes con altos rangos de temperatura y presión. Por lo tanto, al mantener la estabilidad estructural del pozo desde el inicio, se busca prevenir posibles fallas del cemento. Actualmente se aplican estudios experimentales en laboratorios que emplean como base el cemento Portland para determinar propiedades mecánicas como, por ejemplo, Velez et al. (2001), calcularon el módulo de elasticidad y dureza para los principales componentes del cemento obteniendo resultados con cantidades entre 125 GPa y 145 GPa para el módulo de Young, Boumiz et al. (1997), usaron el método de transmisión de ondas ultrasónicas para calcular el módulo elástico del  $C_3S$  (Silicato tricálcico), entre otros autores que trabajan en la cementación para determinar las propiedades a partir de situaciones prácticas.

Para este trabajo se plantea principalmente evaluar las propiedades mecánicas del cemento Portland sometido a condiciones HPHT empleando la simulación con DM, dada la relevancia del material en el ámbito de la industria energética y la importancia de la evolución metodológica que permite analizar el comportamiento del cemento a nivel molecular bajo una amplia gama de condiciones. Se hace indispensable conocer el marco estructural de las variables y características que son fundamentales para el cemento desde su composición, clases,

relaciones Ca/Si, efectos de la presión y temperatura, morfología, minerales análogos al gel C-S-H, propiedades mecánicas, etc. Las reacciones que este sufre en el momento en que entra en contacto con el agua y forma elementos claves como el gel C-S-H formando las bases de la presente investigación y de los adelantos previos en el tema, en lo que en consecuencia se tienen dos casos de estudio experimentales que cumplen con el requerimiento de presentar condiciones HPHT con el cemento Portland como material de análisis para la medición de las propiedades mecánicas.

Continuando con la elaboración de los modelos computacionales para la simulación con DM que se establece mediante el concepto fundamental de la dinámica molecular que se compone de un campo de fuerza ClayFF que permite modelar la interacción del cemento junto con el comportamiento del agua y las especies iónicas en las capas intermedias de las fases de la estructura. Dándose en marcha bajo la metodología prevista para el sistema por las buenas prácticas inicializando, preparando, estabilizando la energía y finalmente entrando a la etapa de producción, bajo las condiciones termodinámicas NPT, NVT, NVE.

Al aplicar condiciones HPHT en la simulación DM, se obtiene información del comportamiento del cemento a la que no es fácil tener acceso mediante métodos experimentales, sin embargo, la data experimental es muy útil y necesaria para hacer la validación de los resultados de la simulación. De acuerdo con la investigación realizada, a pesar de las escasas publicaciones que abordan la conducta del cemento a partir de DM, diferentes autores han logrado avances al respecto evaluando el comportamiento mecánico del cemento Portland mediante dicha técnica computacional, como Manzano et al. (2009), que estimaron el módulo de elasticidad del  $C_2S$  (silicato dicálcico) y el  $C_3S$  y Sant et al. (2020), que determinaron el comportamiento mecánico del silicato cálcico hidratado o gel C-S-H. Este último, es el principal componente del cemento

Portland ocupando entre un 60% - 70% del material aglutinante y aportándole la resistencia característica del material (Hou, 2020).

Por lo anterior, la evaluación del comportamiento mecánico del cemento mediante la simulación con DM emerge como una herramienta valiosa para predecir y por ende optimizar las propiedades del cemento a condiciones de pozo. Al ser el cemento un material heterogéneo con diferentes fases nanoestructuradas se construye la representación molecular del gel C-S-H o componente principal del cemento, a partir de la estructura cristalina de la tobermorita que resulta análoga al antes mencionado (Hou, 2020). En este estudio, se hablará acerca de las propiedades mecánicas del cemento usados en pozos geotérmicos y de petróleo y gas mostrando diferentes casos experimentales encontrados en revistas científicas con el fin de validar las propiedades obtenidas a través de la simulación con DM, de igual manera, se mostrará el proceso necesario para lograr desarrollar las simulaciones y cómo matemáticamente la DM logra predecir el comportamiento del material a través de las ecuaciones de la primera ley de Newton.

Llegando a resultados del módulo de Young mediante la simulación de DM a partir de los modelos construidos con valores que oscilan en el rango de los calculados en la propiedad a nivel de laboratorio. Respecto al módulo de corte como se ha previsto, en relaciones Ca/Si que fluctúan en un límite de 1.1 a 1.9 y relaciones W/Si que van de 1.3 a 2.1 se ubica en un valor óptimo, logrando hallazgos que posicionan a la herramienta como efectiva para evaluar el comportamiento de los materiales a base de cemento a condiciones extremas. Considerando la importancia de la formulación del cemento, se recomienda indagar cómo diferentes tipos de aditivos afectan las propiedades mecánicas del cemento bajo estas condiciones implementando la simulación con DM, examinando cómo estos interactúan con la matriz del cemento a nivel

molecular, cómo impacta en la resistencia y durabilidad en la integridad del compuesto que reviste al casing de los pozos con alta complejidad en el ambiente térmico.

## **1 Objetivos**

### **1.1 Objetivo general**

- Evaluar el efecto de las condiciones de alta presión y temperatura sobre las propiedades mecánicas del cemento usando simulación con dinámica molecular.

### **1.2 Objetivos específicos**

- Identificar las propiedades mecánicas del cemento sometido a condiciones de alta presión y temperatura a partir de revisión bibliográfica.
- Construir modelos computacionales que representan el cemento.
- Evaluar las condiciones HPHT en las propiedades mecánicas del cemento mediante simulación con dinámica molecular.

## **2 Marco teórico**

### **2.1 Cementación de pozos**

La cementación implica la mezcla y bombeo de cemento, agua y aditivos a través del espacio anular entre la tubería de revestimiento y la formación en un pozo. Es crucial establecer un sello hidráulico entre el cemento y la tubería de revestimiento, así como entre el cemento y la formación, para evitar la migración de fluidos, prevenir el colapso de las formaciones y evitar reventones, garantizando así el rendimiento óptimo del pozo. Cabe resaltar que la cementación de pozos geotérmicos se realiza hasta la superficie.

Durante las últimas cinco décadas, los cementos más empleados para el completamiento de pozos térmicos han sido el cemento Portland, los sistemas de sílice-cal y el cemento con alto contenido de alúmina (Erick B y Guillot, 2006). A continuación, se proporciona una descripción de los materiales más relevantes que componen al cemento.

### **2.2 Sistemas de Sílice – Cal**

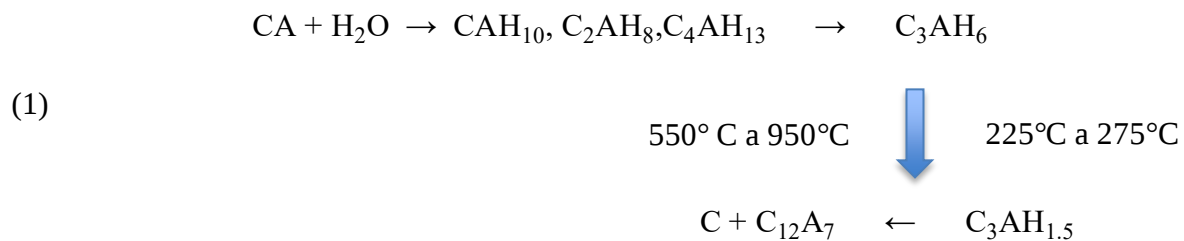
El sistema sílice-cal está formado por arena de cuarzo molida y cal hidratada, siendo la cal reactante a temperaturas superiores a 200°F. Dado que se trata de una reacción superficial, la superficie del área del cuarzo molido controlará la cantidad de hidrato de silicato de calcio formado.

La temperatura durante la reacción determinará la proporción de calcio a sílice y agua a silicato de calcio. Por lo que el cemento silicocalcáreo es una innovación que se desarrolló con el fin de aumentar la confiabilidad del completamiento de pozos profundos (Hook et al., 1971).

### 2.3 Cemento con alto contenido de alúmina

Para este caso, el componente principal del cemento es el aluminato monocálcico (CA). Como se ilustra en la ecuación 1, se mantienen tres niveles iniciales de calcio metaestable donde los hidratos de aluminato se producen cuando se agrega agua al CA, dando lugar a los compuestos  $CAH_{10}$ ,  $C_2AH_8$ , y  $C_4AH_{13}$ , que al final se convierten en  $C_3AH_6$  (Quon y Malhotra, 1979). A diferencia del cemento Portland, el aluminato de calcio fragua el cemento y no contiene hidróxido de calcio.

El  $C_3AH_6$  es probablemente el único aluminato de calcio hidratado estable a temperaturas inferiores de 437°F [225°C], a temperaturas más altas, el contenido de agua comienza a disminuir, y a 527°F [275°C], se aparece el  $C_3AH_{1.5}$ . A medida que la temperatura continúa aumentando, se produce la descomposición de  $C_3AH_{1.5}$  con la liberación de C. Entre 1,022°F [550°C] y 1,742°F [950°C], se produce una recrystalización, resultando finalmente en C y  $C_{12}AH_7$ . Es importante resaltar que, en los pozos de temperatura ultra alta, que alcanzan los 930°F [500°C], la pérdida de resistencia es proporcional en sistemas de cemento con alto contenido de alúmina, a menudo superando la experimentada por los cementos Portland no estabilizados (Erik B y Guillot, 2006).



Nota. En la ecuación se muestran las reacciones del cemento con alto contenido de alúmina a diferentes temperaturas de curado desde el momento en que el CA entra en contacto con el agua.

Tomado de (Nelson y Eilers, 1985).

## **2.4 Cemento Portland**

En términos de cantidad producida, el cemento Portland es el material de unión más importante para los pozos petrolíferos; de hecho, es posiblemente el material manufacturado más común, elaborado en un horno rotatorio a partir de una matriz fundida. Este tipo de cemento se utiliza en casi todas las operaciones de cementación de pozos, y para referirnos a él utilizaremos el término OPC, que corresponde a "Ordinary Portland Cement" en inglés. El tipo más común de cemento hidráulico es el cemento Portland.

La hidratación, una reacción química entre el agua y los compuestos presentes, provoca el fraguado de estos y el desarrollo de resistencia a la compresión. Si la mezcla de cemento y agua se deja reposar, también experimenta un proceso de endurecimiento y fraguado, con el desarrollo de fuerza de manera uniforme. La exposición al agua no afecta negativamente el material endurecido porque el cemento fraguado tiene una baja permeabilidad y es casi insoluble en agua. Estos atributos son fundamentales para mantener el aislamiento zonal (Bensted, 2002, Ghosh, 1983, Taylor, 1997 y Taylor, 1964).

En el contexto de todos los tipos de cemento, el Portland destaca por su calidad, desarrollo de resistencia a la compresión, resistencia a la tensión y resistencia a los sulfatos. Estas propiedades lo convierten en el material ideal para las operaciones de cementación en pozos térmicos, siendo esenciales para que el cemento adquiera y mantenga la integridad en entornos subterráneos.

### **2.4.1 Principales compuestos del cemento**

La producción de cemento Portland genera cuatro productos fundamentales, los cuales comprenden cuatro fases cristalinas distintas originadas por las reacciones entre carbonatos y arcillas.

#### 2.4.1.1 Silicato tricálcico (Alita)

Este es un ortosilicato que contiene tetraedros de  $\text{SiO}_4^{4-}$  y  $\text{O}^{2-}$  por lo que su fórmula puede escribirse  $\text{Ca}_3(\text{SiO}_4)\text{O}$ . En el momento en que se forma puede existir en tres formas; triclínicas (T), monoclinicas (M) o romboédricas (R), por lo general suele ser monoclinica y en pocas ocasiones romboédrica o triclínica. La simetría varía con el aumento de la temperatura, y las temperaturas de inversión de fase se determinan mediante difracción de rayos X, utilizando análisis térmico diferencial para abordar los cambios estructurales relacionados con los efectos térmicos. Este componente, también conocido simbólicamente como  $\text{C}_3\text{S}$ , atribuyéndose como el componente más encontrado en la mayoría de los cementos. Desempeña un papel fundamental en la generación de resistencia temprana o inmediata durante los primeros 28 días. Cuando entra en contacto con el agua, reacciona de manera rápida, dando lugar a la formación de silicato de calcio hidratado o gel C-S-H (Bye, 1999).

#### 2.4.1.2 Silicato dicálcico (Belita)

El silicato dicálcico, también clasificado como ortosilicato, comparte similitudes con las alitas, destacándose principalmente en las diferencias entre polimorfos que afectan la orientación de los tetraedros de  $\text{SiO}_4$ . Experimenta transformaciones en un rango de temperatura específico para su aumento y disminución, y su fórmula se representa como  $\text{Ca}_2(\text{SiO}_4)$ . Comúnmente conocido como  $\text{C}_2\text{S}$ , esta fase presenta una hidratación más lenta en comparación con la alita. Sin embargo, su contribución a la formación del gel C-S-H es gradual, garantizando una buena resistencia en el material dentro del mismo periodo de tiempo de la anterior (Bye, 1999).

### 2.4.1.3 Aluminato tricálcico

El aluminato tricálcico posee una estructura cúbica y no exhibe polimorfismo en su estado puro. Aunque reacciona vigorosamente con el agua, las pastas desarrollan una resistencia limitada. Conocida en el medio como  $C_3A$ , este componente contribuye a la resistencia desde un periodo de tiempo corto, pero no tanto a la resistencia final. Por esta razón, se sugiere reducir el contenido de este compuesto en cementos resistentes a sulfatos, mediante la adición de óxido férrico, lo que conduce a su transformación en  $C_4AF$  a través de reacciones subsiguientes (Bye, 1999).

### 2.4.1.4 Ferrito aluminato tetracálcico

Identificado simbólicamente como  $C_4AF$ , esta fase exhibe una reactividad moderada con el agua, la cual aumenta al incrementar la relación A/F. Sin embargo, su propiedad hidráulica es leve, lo que resulta en una generación limitada de calor de hidratación y resistencia a la compresión. Esto impacta la reología del cemento, la formación de geles y la durabilidad del material. No obstante, cuando este compuesto se forma mediante sinterización a temperaturas más bajas que las necesarias para la fusión parcial, su reactividad mejora, permitiendo así un mejor desempeño hidráulico (Bye, 1999).

## 2.4.2 Clases de cemento Portland

Por otra parte, de acuerdo con la norma API Especificación 10A/ISO 10426-1 (API (American Petroleum Institute), 2005), el cemento Portland se clasifica mediante letras (A, B, C, D, E, F, G y H) y grados (MSR y HSR). Esta clasificación asegura que, para cada aplicación dentro de la industria energética, especialmente en operaciones relacionadas con pozos, exista una designación adecuada según las condiciones específicas del pozo. A continuación, se presentan todas las denominaciones de las clases fueron sustraídas de la norma previamente nombrada.

#### **2.4.2.1 Clase A**

Los aditivos procesados como acelerantes, retardantes, plastificantes, sílice activa entre otros, pueden usarse para producir cemento Clase A, en concordancia con el cumplimiento de los requisitos de la norma ASTM C 465. El Clinker de cemento Portland, está formado principalmente por silicatos de calcio hidráulicos, generalmente contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado. Diseñado para usos en los que no se requieren características únicas. Comparable con la ASTM C 150, Tipo I. Diseñado para usarse a 6.000 pies de profundidad como máximo, con temperaturas de 170 °F.

#### **2.4.2.2 Clase B**

Cemento Portland, formado principalmente por silicatos de calcio hidráulicos, contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado y aditivos procesados como acelerantes, retardantes, plastificantes, sílice activa entre otros, en concordancia con el cumplimiento de los requisitos de la norma ASTM C 465. Designado para uso en condiciones que requieren una resistencia al sulfato moderada (MSR) o alta (HSR), asemejándose a la ASTM C 150. Diseñado para usarse a 6.000 pies de profundidad como máximo, con temperaturas de 170 °F.

#### **2.4.2.3 Clase C**

Este cemento generalmente contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado. Si el cemento Clase C cumple con los requisitos de ASTM C 465, se pueden utilizar aditivos procesados como acelerantes, retardantes, plastificantes, sílice activa entre otros, para producirlo. Está diseñado para situaciones que requieren una resistencia inicial alta junto con una MSR y HSR, similar al de la norma ASTM C 150. Constituido para usarse en lugares donde se

requiere una alta resistencia a la compresión temprana y con una profundidad máxima de 6.000 pies y temperaturas de 170 °F.

#### **2.4.2.4 Clase D**

Cemento Pórtland, que normalmente contiene una o más formas de sulfato de calcio y puede ser fabricado usando aditivos procesados como acelerantes, retardantes, plastificantes, sílice activa entre otros, que cumplen con los requisitos de la norma ASTM C 465. Durante la constitución, los aditivos modificados o ajustados también pueden integrarse o mezclarse, siendo diseñado para funcionar en condiciones de temperatura y presión moderadamente altas. Dispone de grados MSR y HSR. Se emplea a profundidades que van desde 6.000 pies hasta 10.000 pies y a temperaturas que van hasta 230 °F. Similar al que indica la norma ASTM C 150.

#### **2.4.2.5 Clase E**

Cemento Portland, que se compone principalmente de silicatos de calcio hidráulicos, contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado. Los aditivos procesados como acelerantes, retardantes, plastificantes, sílice activa entre otros, que cumplen con los requisitos de la ASTM C 465, pueden usarse para fabricar cemento Clase E. Durante la fabricación, se pueden integrar o mezclar aditivos convenientemente ajustados o modificados. Esta elaborado para soportar altas temperaturas y presiones con HSR y MSR. Utilizado en pozos con alta presión y temperaturas de 290 °F y profundidades de 10.000 a 14.000 pies.

#### **2.4.2.6 Clase F**

Cemento Portland, que se produce principalmente a partir de silicatos de calcio hidráulicos, contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado. Los aditivos procesados,

que cumplen con los requisitos de ASTM C 465, pueden usarse para fabricar cemento Clase F. Durante la fabricación, los aditivos ajustados o modificados pueden integrarse o mezclarse. Diseñado para condiciones de altas temperaturas y presiones con HSR y MSR empleándose a profundidades que van desde 10.000 pies hasta 16.000 pies, con temperaturas de 320 °F, donde exista alta presión.

#### **2.4.2.7 Clase G**

Se obtiene moliendo el Clinker de cemento Portland, que se compone principalmente de silicatos de calcio hidráulicos y contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado. Durante la fabricación del cemento para pozos Clase G, ningún otro aditivo, excepto el sulfato de calcio o agua debe integrarse o mezclarse con el Clinker. Diseñado para usarse como cemento básico en pozos con HSR y MSR, empleado desde la superficie hasta 8.000 pies. En cuanto a su composición, es semejante al cemento clase B, congruente con la ASTM C 465.

#### **2.4.2.8 Clase H**

Sustraído moliendo el Clinker de cemento Portland, que se compone principalmente de silicatos de calcio hidráulicos y contiene una o más formas de sulfato de calcio como aditivo integrado. Durante la fabricación del cemento para pozos Clase H, ningún otro aditivo debe mezclarse con el cemento, excepto el sulfato de calcio, el agua o ambos. Diseñado para usarse como cemento básico en pozos. con HSR y MSR.

### **2.4.3 Hidratación del cemento Portland**

La hidratación del cemento Portland es una secuencia de reacciones químicas superpuestas entre los componentes del cemento, el sulfato de calcio y el agua. Esto conduce a la formación

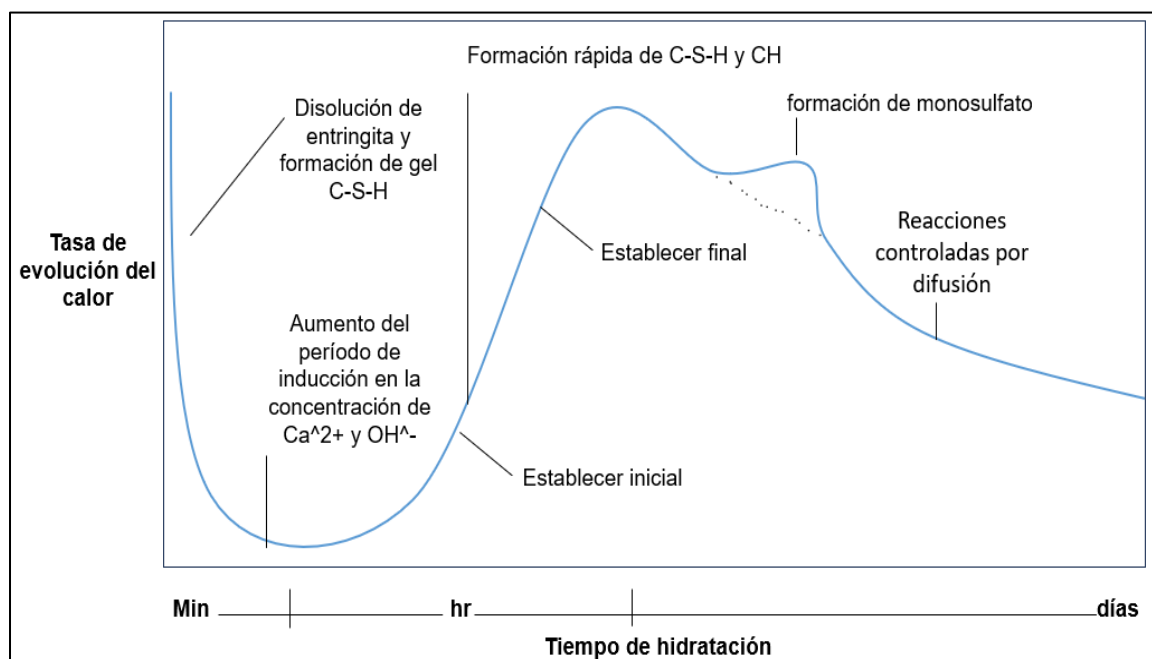
continua, espesamiento y endurecimiento de la lechada de cemento. Es importante tener en cuenta que hay otros parámetros involucrados en este fenómeno. La hidratación y la precipitación del cemento Portland son procesos químicamente complejos, en los cuales diferentes reacciones de hidratación se desarrollan simultáneamente a diferentes velocidades. En la figura 1 se tiene un esquema de temperatura típico para el cemento Portland describiendo la hidratación como la suma de las termogramas ajustados a la concentración relativa (Erik B y Guillot, 2006).

#### 2.4.4 Efecto de la temperatura en el cemento Portland

Uno de los principales factores que afectan la hidratación del cemento Portland es la temperatura. Este parámetro es muy importante para la tasa de hidratación del cemento, así como para la naturaleza, estabilidad y morfología de los productos de hidratación. La hidratación del cemento se acelera con temperaturas de hidratación altas.

**Figura 1**

*Esquema de hidratación del cemento Portland*

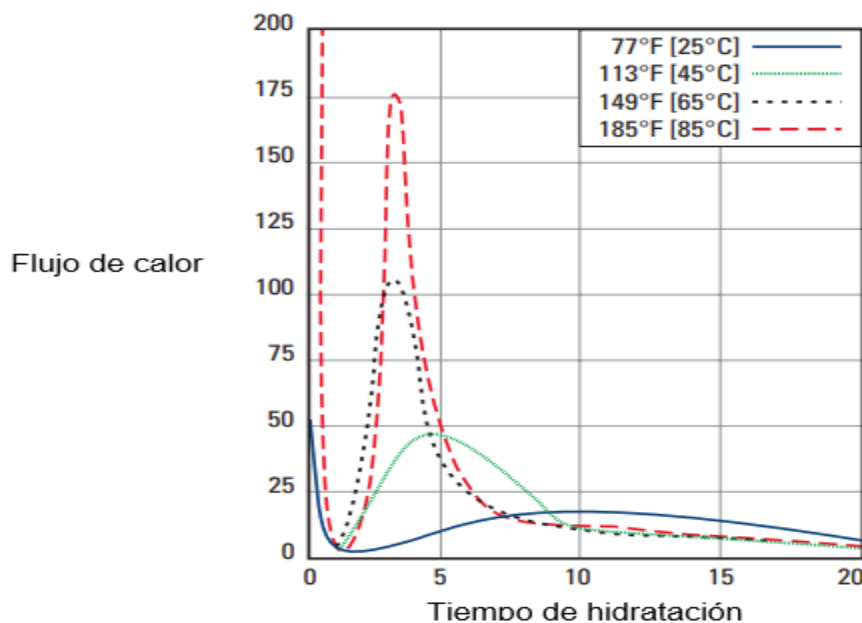


Nota. Representación gráfica de la hidratación a través del tiempo. Tomado y modificado de (Erik B y Guillot, 2006).

A continuación, se presenta un ejemplo donde se ilustra el efecto de la temperatura en la hidratación del cemento Portland Clase G, como se muestra en la figura 2, donde se registra la variación del índice calórico a lo largo del tiempo. Durante el periodo de fraguado, los tiempos se reducen y la tasa de hidratación aumenta. Sin embargo, después de un periodo prolongado de curado, tanto la hidratación como la resistencia última con frecuencia disminuyen. Esto probablemente se atribuye a la formación de una capa densa de gel C-S-H alrededor de las superficies de  $C_3S$ , dificultando su hidratación completa (Bentur, 1979).

### Figura 2

*Efecto de la temperatura sobre la cinética de hidratación del cemento Portland Clase G*



Nota. Tomado de (Erik B y Guillot, 2006).

Basados en los datos proporcionados por la figura 2, los resultados de la hidratación son similares a los producidos a condiciones ambientales hasta 104°F. Sin embargo, a temperaturas

más elevadas, se observan cambios significativos en la microestructura y morfología de la fase del gel C-S-H. El material adquiere una textura más fibrosa y se evidencia una mayor polimerización de las cadenas de silicatos. Al superar los 230 °F, la fase del gel C-S-H deja de ser estable, dando lugar a la formación de hidratos cristalinos de silicato de calcio.

#### **2.4.5 Efecto de la temperatura sobre las propiedades mecánicas**

Las altas temperaturas comprometen la integridad del cemento, lo que a su vez compromete la integridad y estabilidad del activo, los efectos mayormente evidenciados son los siguientes:

##### **2.4.5.1 Retracción del cemento.**

Existen dos tipos y se clasifican en retracción química y volumétrica.

- **Retracción química:** Este proceso ocurre durante la reacción de hidratación del cemento. El volumen de productos de hidratación formados durante esta reacción es menor que el volumen de reactivos, cemento y agua (Barajas, 2023).
- **Retracción volumétrica:** Trata de una reducción en el volumen externo que tiene lugar durante la hidratación del cemento, siendo su periodo más crítico el tiempo posterior al fraguado, lo que significa en una respuesta mecánica a las tensiones y cambios de presión intersticial generados por la retracción química (Sukhachev, 2023).

##### **2.4.5.2 Retroceso en la resistencia.**

Cuando el cemento portland se expone a temperaturas superiores a 110 °C (230°F), se produce un fenómeno conocido como retroceso de la resistencia que se puede definir como cambios en los productos de hidratación como los geles C-S-H amorfos, lo que resulta en una disminución de la resistencia y un aumento en la permeabilidad del cemento, lo que afecta la integridad y aislamiento del pozo (Zhu, 2019), el retroceso en la resistencia también afecta la

fuerza de unión del cemento, este puede separarse cuando se crea rutas de migración de fluidos lo que reduce la presión requerida para iniciar la fractura (Kenton et al., 2020).

Manzano, et al. (2020), mediante simulación DM estudiaron la influencia de la variación de la temperatura en las propiedades mecánicas del gel C-S-H, observó que los módulos de volumen y corte disminuyeron con el aumento de la temperatura, dando a comprender que la resistencia a la tensión y compresión del gel C-S-H en estado saturado disminuyen significativamente en condiciones de aumento de temperatura, especialmente cuando esta variación es considerable.

#### **2.4.6 Efectos de la presión en el cemento Portland**

La presión afecta al cemento durante la colocación y después del fraguado. Durante la colocación, la presión de la formación promueve el colapso de los poros creados por el secado, promoviendo así el desarrollo de la resistencia a la compresión (Abid et al., 2015). Ahora atendiendo esta condición en pozo, después de la solidificación, la redistribución de esfuerzos dentro del cemento durante la producción puede provocar la pérdida de la integridad. Las presiones ejercidas por la formación, como esfuerzos tectónicos, hundimiento y fluencia de la formación, pueden aumentar la presión sobre la superficie externa del cemento. Los cambios en la presión de poro y la temperatura durante la producción también pueden causar una mal formación de los esfuerzos sobre el cemento. Bour (2005), afirma que el efecto de la presión puede explicarse por el aparente aumento de la fracción de volumen sólido (SVF) debido a la mayor compresibilidad de la fase líquida en comparación con la fase sólida. Para una lechada de cemento clase G mezclada a 15,8 lbm/gal, el SVF es 40,6%, asumiendo que la densidad del agua es 8,33 lbm/gal y para el cemento de 26,6 lbm/gal. Suponiendo que la compresibilidad isotérmica de la fase líquida es de  $4 \times 10^{-10} \text{Pa}^{-1}$  y se ignora la compresibilidad isotérmica de la fase sólida, el SVF aumenta sólo

hasta un 40,7 % y la densidad de la suspensión es 15,84 a 10 MPa. /galón. A 100 MPa, el SVF es 41,6 %. El control de la densidad durante las operaciones de cementación es de hasta  $\pm 0,2$  lbm/gal. Por lo tanto, el efecto de la presión debería ser insignificante a menos que la suspensión contenga aditivos compresibles o sensibles a la presión. Las mediciones de laboratorio dan resultados equívocos, incluso si no se toman mediciones al final del período de espesamiento. La presión afecta el tiempo de espesamiento y el desarrollo de la resistencia a la compresión (Erik B y Guillot, 2006).

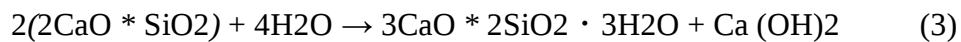
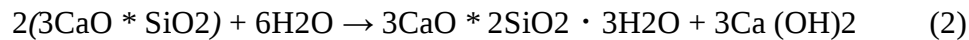
#### **2.4.7 Morfología**

La morfología del gel C-S-H se deriva de la hidratación a escala micrométrica donde se tiene, primeramente, el producto interno que crece cerca de los granos de cemento y tiene una densidad bastante alta que está compuesta por partículas de glóbulos agregados. Por el contrario, hay menos restricciones de espacio para el producto externo y un ambiente de agua suficiente puede hacer que la estructura crezca hasta convertirse en una fibrilla, lo que puede dejar una gran porosidad (Hou, 2020). La microscopía de fuerza atómica (AFM) puede caracterizar el gel C-S-H a una mesoescala, junto con las propiedades mecánicas granulares de las partículas examinadas en series de pruebas de nanoindentación que permite conocer igualmente las formas, tamaños y distribución de empaquetamiento de las partículas del material. No obstante, todavía no se ha descubierto el mecanismo por el cual se forma el coloide del gel C-S-H. Múltiples métodos, incluida la resonancia magnética nuclear (RMN), la SANS y la espectroscopia de rayos X de ángulo pequeño (SAXS), han intentado sondear la estructura molecular del gel C-S-H a nivel nanométrico. Sin embargo, estos métodos no pueden resolver la estructura de manera sencilla y no se puede proponer un modelo totalmente consistente solo utilizando una técnica (Allen, 2007 y Brandt, 2005).

Continuando, es importante conocer cómo se forma el componente que genera una mayor ocupación en todo el cemento una vez entra en contacto con el agua y reacciona con las condiciones del medio.

#### 2.4.8 Formación del gel C-S-H

Una vez que el agua y el cemento Portland se mezclan, se inicia la formación del material hidratado. Esta reacción con el agua se genera a partir de los cuatro compuestos fundamentales del cemento Portland:  $C_3S$ ,  $C_2S$ ,  $C_3A$  y  $C_4AF$ . Por otra parte, es importante comprender la contribución específica de cada uno de estos componentes después de la hidratación que determinan las propiedades y características del cemento Portland. La fase aluminato, por ejemplo, conduce a la formación de etringita, un cristal en forma de aguja, las fases silicato que ocupan un 80% en peso, son los responsables de la composición en su mayoría de los productos hidratados, produciendo hidróxido de calcio más gel silicato de calcio hidratado, mejor conocido como gel C-S-H (Hou, 2019), cómo se observa en las ecuaciones 2 y 3. Mientras que  $C_3S$  se encarga de proporcionar las propiedades de resistencia en las primeras edades,  $C_2S$  que tiene una reacción más lenta proporciona la resistencia al material a largo plazo (Hou, 2019).



#### 2.4.9 Relación Ca/Si

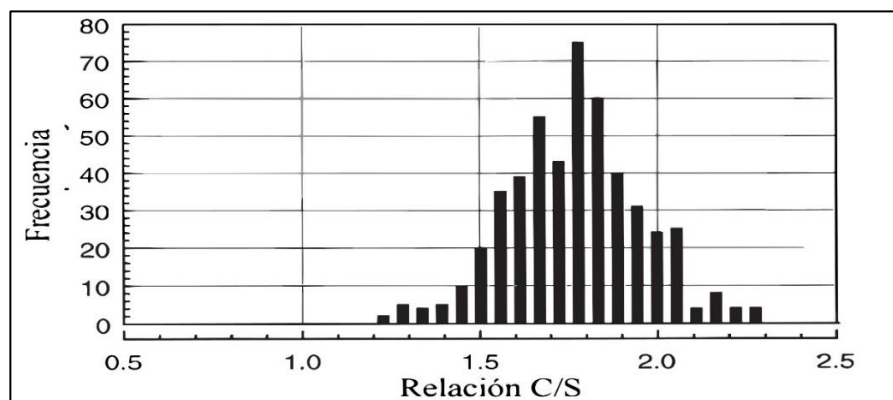
Una variable importante que determina las propiedades del cemento mediante el gel C-S-H, es la relación molar entre los compuestos  $CaO$  y  $SiO_2$ , conocida como la relación Ca/Si. La

mayor parte de los datos experimentales sobre la estructura de este gel se obtiene de métodos como resonancia magnética nuclear de estado sólido (SSNMR), difracción de rayos X en polvo y microscopía electrónica de transmisión (MET).

Se presenta un ejemplo de histograma de la relación Ca/Si en la figura 3, obtenido a través de microanálisis de rayos X con la técnica TEM, en el gel C-S-H presente en pastas de cemento Portland endurecidas durante períodos que van desde 1 día hasta 3 años y medio. La relación Ca/Si varía en este conjunto de datos desde 1,2 hasta 2,3, con una media de 1,75 (hidratado a 20 °C; W/C = 0,4). Se destaca que la frecuencia alcanza su máximo en torno a 1,8 y disminuye progresivamente hacia 2,3. Esta variación muestra la diversidad composicional del gel presente en las pastas. Es importante señalar que, en la literatura, la relación Ca/Si en el gel C-S-H puede variar ampliamente, aproximadamente de 0,8 a 2,0 durante la hidratación del cemento, y el valor más bajo se logra mediante la adición de materiales cementosos suplementarios ricos en sílice, como el humo de sílice (Richardson, 1999). Para la simulación en el caso de estudio, se consideran las relaciones Ca/Si de 1,8 y 1,9, representativas de las frecuencias máximas observadas en diversas muestras de cemento con diferentes tiempos de envejecimiento (Rouhollah et al., 2009).

**Figura 3**

*Histograma frecuencia de la relación Ca/Si en cemento Portland de 1 a 3 años y medio de madurez*



Nota. La gráfica representa la variación de la frecuencia de la relación Ca/Si en cemento Portland. Tomado de (Richardson, 1999).

#### **2.4.10 Estados de agua**

En el proceso de hidratación del cemento, el estado del agua experimenta cambios, pasando de agua en masa a parcialmente agua químicamente ligada, agua físicamente confinada y agua libre a medida que avanza la hidratación. La migración y distribución de agua en los poros y microfisuras es parte de todos los procesos físicos y químicos que afectan la durabilidad del cemento. Con el tiempo, se observa un aumento en la resistencia, disminución en el volumen y un aumento en los poros (Frías y Cabrera, 2000).

Además, se señala que los estados del agua pueden verse afectados por la formación del gel C-S-H, especialmente si se produce un aumento temprano del área de superficie total como resultado de la polimerización. Este proceso reduce el área de superficie total; lo que puede resultar en un aumento gradual en el agua confinada durante el período de nucleación y crecimiento, lo que puede conllevar a mesetas en el agua confinada, así como un aumento sostenido en el agua unida (Jeffrey et al., 2001). El contenido de agua en el gel C-S-H puede variar debido a cambios en las condiciones del ambiente como la carga, la temperatura y la humedad. La fuerza de cohesión puede verse significativamente afectada por la interacción entre agua y gel (Hou, 2014).

#### **2.4.11 Densidad y contenido del agua**

Según el análisis realizado por autores como Bykov, et al. (2021), se han empleado métodos como la derivatografía, para investigar el contenido de agua en el cemento Portland a diferentes rangos de temperatura, que van de 60 a 160 °C; 400–450°C; y 560–720 °C y se observan varios picos más débiles. En el primer rango de temperatura, la pérdida de peso se asocia con la

eliminación del agua adsorbida y de los poros, representando aproximadamente un 16% y 17% del peso total del compuesto (Bykov, 2022). Por lo tanto, la densidad del gel C–S–H está directamente relacionada con el contenido de agua en los poros del gel (Bykov, 2022).

Recientemente, se han utilizado técnicas avanzadas como la dispersión de neutrones y rayos X para determinar con gran precisión (Allen, 2007), la densidad y el contenido de agua de las sustancias saturadas (Allen, 2007). Estos valores incluyen toda el agua, evaporable y no evaporable, dentro de las partículas saturadas de gel C-S-H, pero no incluyen el agua adsorbida en la superficie. La densidad de gel C–S–H en pastas curadas selladas cambia en función del grado de hidratación y la relación W/C (Agua/Cemento) (Hou, 2019). Según Jennings (2008) , se resume la evolución de la densidad del C – S – H en diferentes estados del agua. Una sola lámina de C–S–H, de la cual se ha eliminado toda el agua evaporable, tiene una densidad de  $2,88 \text{ g/cm}^3$ . Sin embargo, un glóbulo saturado sin agua adsorbida en la superficie reduce su densidad a  $2,602 \text{ g/cm}^3$ . Estos hallazgos destacan la importancia de comprender la relación entre la densidad del gel C–S–H y su contenido de agua en distintos estados, lo que contribuye significativamente a la comprensión de las propiedades del cemento Portland.

En resumen, se contextualiza la elección de materiales aglutinantes apropiados para implementarse en operaciones de cementación en áreas de pozos térmicos, determinando que el cemento Portland es el más adecuado para este caso. Desde el marco teórico, se presentó la derivación de cada una de sus clases, respecto a la clasificación que incluye la norma API Especificación 10A/ISO 10426-1. Además, se brindó una introducción general de la transformación del material, destacando las reacciones que ocurren bajo condiciones ambiente específicas. Posteriormente, se exploraron las variaciones del material reportadas

experimentalmente, como la relación Ca/Si, la morfología, las densidades, los efectos de la temperatura, los estados y contenidos de agua, entre otros factores.

## 2.5 Minerales análogos

Para la construcción de los modelos computacionales la literatura proporciona dos minerales análogos que muestran una similitud cercana al gel C-S-H. Los estudios de TEM realizados por Groves (1987) y análisis de XRD llevados a cabo por (Gmira, 2003) indican que el gel C-S-H presenta características en capas similares a la tobermorita (Hamid, 1981) y comparte la estructura con la jennita, según las observaciones de Bonaccorsi, et al. (2004). A continuación, se proporciona una descripción detallada de estas similitudes.

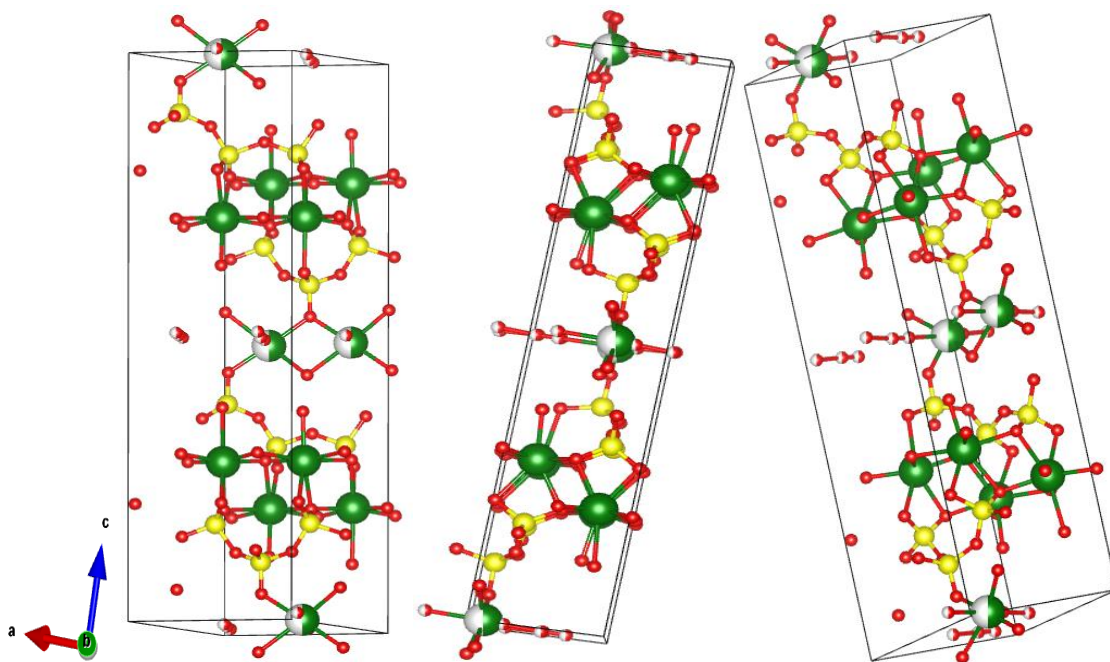
### 2.5.1 Tobermorita

Es un mineral de la familia de los filosilicatos y pertenece al grupo de los silicatos. Se descubrió en Tobermory, Escocia, donde recibe su nombre. Esta se encuentra comúnmente en forma de agregados fibrosos o masas compactas de varios tonos de blanco, amarillo, marrón o verde. Es un componente crucial en la creación de ciertos tipos de cemento Portland y juega un papel importante en su resistencia y durabilidad. Pertenece al grupo de las zeolitas, que son aluminosilicatos hidratados con una estructura porosa formadas en capas, donde se compone central de  $\text{CaO}_2$  comparte solo dos átomos de oxígeno. El tercer puente tetraédrico se encuentra entre los dos tetraedricos emparejados, donde el espacio entre capas entre cada capa se llena con  $\text{Ca}^{+2}$  y moléculas de agua. Se han hecho análisis y se han encontrado tres tipos de tobermorita, que son la 14 Å, 11 Å, 9 Å, estas se distinguen en función del espaciamiento basal correspondiente al grado de hidratación (Bykov et al., 2022). Cabe resaltar que la tobermorita 11 Å tiene una estructura estratificada y consta de una lámina central de calcio con cadenas de silicato

intercaladas, el comportamiento térmico de la tobermorita se analizó utilizando técnicas experimentales y se alcanza a detectar que la tobermorita de 14 Å se transforma en tobermorita de 11 Å a 80-100 °C y luego se eleva a 300 °C para convertirse en tobermorita de 9 Å (Pellenq et al., 2009).

#### Figura 4

*Estructura cristalina de la tobermorita*



Nota. La representación gráfica ilustra la estructura cristalina de la tobermorita, conforme a la distribución de los átomos. el color verde representa los átomos de calcio amarillo silicio y los rojos de oxígeno.

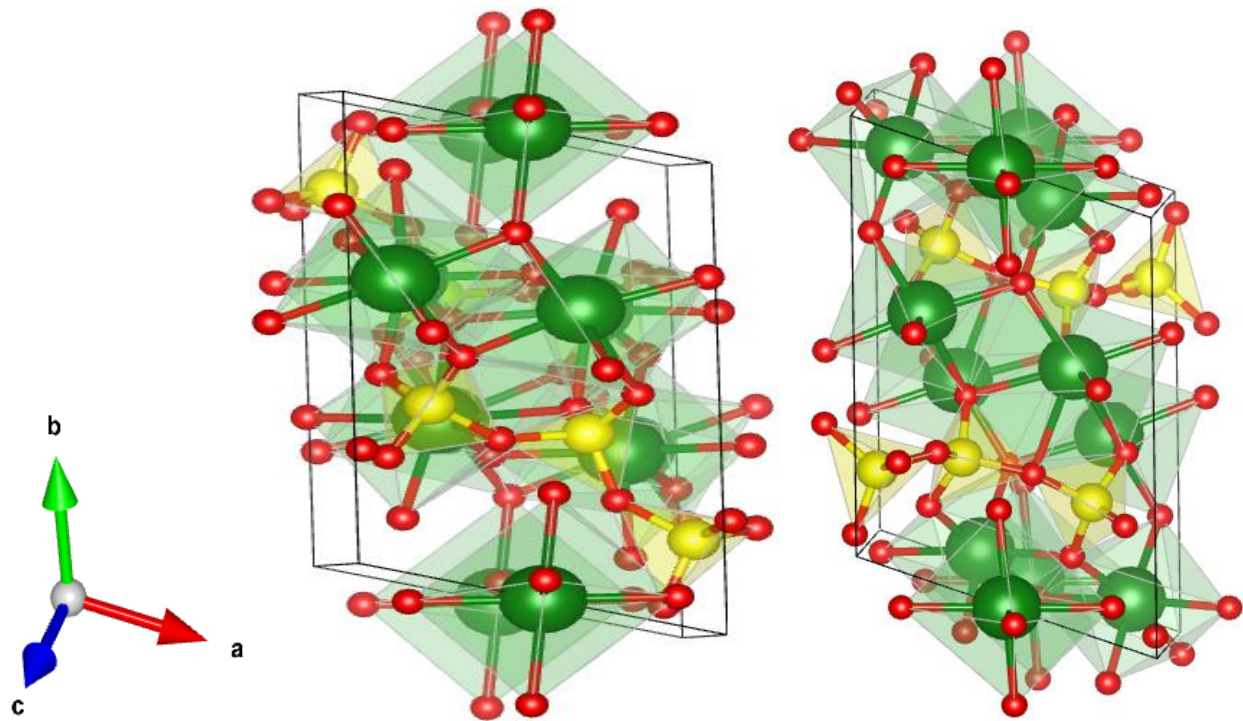
#### 2.5.2 Jennita

Es un mineral natural que pertenece al grupo de filosilicatos. Este es un mineral fibroso que se presenta con frecuencia en forma de masas fibrosas, radiales o estriadas de color blanco, verde, gris o marrón. Se puede encontrar en una variedad de tipos de rocas metamórficas, como el gneis, el esquisto y el mármol. Además, puede formarse en rocas sedimentarias que han sufrido

metamorfismo de contacto, así como en rocas ígneas y metamórficas de alta temperatura. Es comúnmente el resultado de la alteración de minerales ricos en magnesio y calcio en ambientes geológicos particulares. Un punto para resaltar dentro del contexto de su composición es su relación Ca/Si que es 1.5 veces más que la tobermorita donde la estructura de la jennita tiene muchas similitudes con la tobermorita, con una diferencia en la presencia del grupo hidroxilo en la subcapa CaO-OH y la ausencia de Si-OH (Bittnar et al., 2009).

**Figura 5**

*Estructura cristalina de la jennita*



Nota. La estructura cristalina de la jennita se representa como el color verde representa los átomos de calcio, amarillo de silicio y rojo al oxígeno.

## 2.6 Propiedades mecánicas

Las propiedades mecánicas son esenciales para cualquier tipo de análisis que se realice sobre el cemento, al manifestar el estado en que este se encuentra mientras provee la integridad

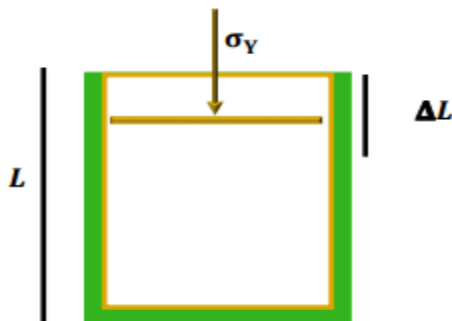
del pozo. Se señalan algunos elementos fundamentales para tener en cuenta como principales propiedades en el momento de la evaluación, junto con la característica que hace esencial su función.

### 2.6.1 Módulo de Young

El módulo de Young es una medida de la rigidez de un material y se define como la relación entre el esfuerzo aplicado y la deformación resultante. En el caso del cemento Portland, el módulo de Young es una propiedad que indica la capacidad del material para resistir deformaciones elásticas bajo una carga externa. Este módulo en el cemento Portland varía según la composición y las condiciones de curado. Es importante destacar que el módulo de Young del cemento puede influir en la resistencia y la durabilidad del material. Un módulo de Young más alto generalmente indica un cemento más resistente y menos propenso a la deformación permanente. Sin embargo, es necesario tener en cuenta otros factores, como la relación agua-cemento y el proceso de curado, que también pueden afectar estas propiedades, en lo referente a su valor el módulo de Young generalmente en la mayoría de los casos llega a ser muy alto en un orden de  $10^9$  (Calderón, 2014).

**Figura 6**

*Módulo de Young*



$$E = \frac{\sigma_Y}{\epsilon_Y} \quad (4)$$

$E$  = Modulo de Young

$\epsilon_Y$  = Deformación uniaxial

$\sigma_Y$  = Esfuerzo uniaxial

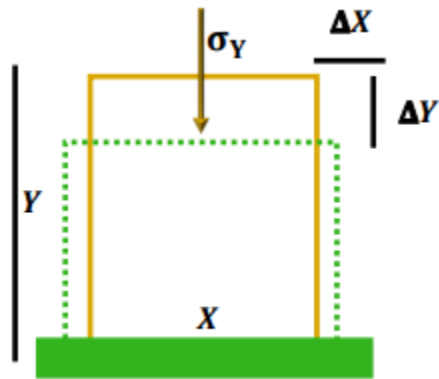
Nota. Imagen de Módulo de Young. Tomada de (Calderón, 2014).

### 2.6.2 Relación de Poisson

Es una medida de la deformación lateral que ocurre en un material bajo carga. En el caso del cemento Portland, esta relación se refiere a cómo el material se deforma lateralmente cuando es sometido a esfuerzos de compresión. Este es un material frágil, por lo que tiende a deformarse de forma muy limitada. Sin embargo, cuando se le aplica una carga de compresión, puede ocurrir una pequeña deformación lateral. La relación de Poisson en este caso es un número adimensional que indica la magnitud de esta deformación lateral en relación con la deformación axial. Para el cemento Portland, la relación de Poisson suele tener un valor cercano a 0,2. Esto significa que, en promedio, por cada unidad de deformación axial que ocurre en el material, se produce una deformación lateral de aproximadamente el 20% de esa unidad. Es importante tener en cuenta que la relación de Poisson no es una constante para todos los tipos de cemento Portland, ya que puede variar en función de la composición y las propiedades específicas del material. Por lo que para los demás valores de la relación que no se encuentran en este rango, alcanzan a estar entre los 0,25 y 0,35 otras excepciones que son más bajas logran tener una cantidad de 0,1 (Orozco, 2016). Además, es importante destacar que la relación de Poisson solo es válida para cargas de compresión, ya que, en el caso de cargas de tracción, el material tiende a deformarse de manera diferente.

#### **Figura 7**

*Relación de Poisson*



$$V = \frac{\sigma_X}{\epsilon_Y} \quad (5)$$

$V$  = Relación de Poisson

$\sigma_X$  = Deformación lateral

$\epsilon_Y$  = Deformación longitudinal

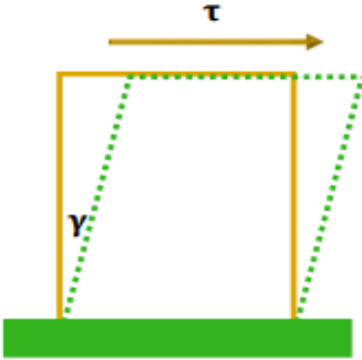
Nota. Relación de Poisson. Tomada de (Calderón, 2014).

### 2.6.3 Módulo de corte

El módulo cortante es una propiedad de deslizamiento característica del cemento Portland que se utiliza para describir su capacidad de resistencia al corte o al deslizamiento o como también denominada una medida de la rigidez del cemento Portland cuando se somete a fuerzas de corte. Definiéndose en una relación entre el esfuerzo cortante aplicado sobre un área de contacto y el desplazamiento relativo resultante entre dos materiales adyacentes. Esta es una propiedad importante por considerar en el diseño y construcción de estructuras, ya que influye en la capacidad del material para resistir el movimiento lateral y la deformación por corte. A medida que se aumenta el módulo del cemento Portland, se mejora su capacidad para resistir el corte y el deslizamiento, lo que puede resultar en una mejora en la resistencia y durabilidad, destacando el módulo de corte entre las propiedades elásticas, caracterizando los desplazamientos y desangulaciones del material o inclusive de cualquier estructura. Lo que facilita la comprensión del comportamiento del material (Zhou, 2014).

### Figura 8

*Módulo de corte*



$$G = \frac{\tau}{\gamma} \quad (6)$$

$G$  = Módulo de corte

$\tau$  = Esfuerzo de corte

$\gamma$  = Deformación de corte

Nota. Módulo de corte tomada de (Calderón, 2014).

También es posible obtener las propiedades elásticas mediante DM a partir del cálculo de las constantes elásticas ( $C_{ij}$ ). Estas se calculan con respecto a los componentes de deformación utilizando las segundas derivadas de la densidad de energía (energía/volumen) como se puede ver a continuación en la siguiente ecuación.

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right) \quad (7)$$

En este caso,  $U$  es la energía,  $V$  es el volumen y  $\varepsilon$  son las partes deformantes. Una matriz simétrica de  $6 \times 6$  representa las seis deformaciones posibles ( $xx$ ,  $yy$ ,  $zz$ ,  $xy$ ,  $xz$  y  $zy$ ). Esta matriz muestra la rigidez del material en relación con las deformaciones.

$$L_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \quad (8)$$

La matriz de ajuste de las propiedades elásticas  $C$ , se obtiene encontrando la matriz inversa de  $L$ .

$$S = C^{-1} \quad (9)$$

También se utilizan constantes elásticas y de ajuste para calcular el módulo de Bulk (K), el módulo de corte (G), el módulo de Young (v) y la relación de Poisson (E) a partir de la expresión de Voight–Reuss–Hill.

$$k_{\text{Voight}} = \frac{1}{9} (C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})) \quad (10)$$

$$K_{\text{Reuss}} = (S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2(S_{12} + S_{13} + S_{23}))^{-1} \quad (11)$$

$$G_{\text{Voight}} = \frac{1}{15} (C_{11} + C_{22} + C_{33} + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}) - C_{12} - C_{13} - C_{23}) \quad (12)$$

$$G_{\text{Reuss}} = \frac{15}{4} (S_{11} + S_{22} + S_{33} - S_{12} - S_{13} - S_{23}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66})^{-1} \quad (13)$$

Voight y Reuss promedian el módulo de Bulk o de corte. La relación de Poisson (E) y el módulo de Young (v) se calculan utilizando los módulos de Bulk total y de corte.

$$V = \frac{3K-2G}{6K+2G} \quad (14)$$

### 3 Casos experimentales

La búsqueda en la literatura se centró en la identificación de casos experimentales que abordaran las propiedades mecánicas del cemento sometido a condiciones HPHT, estableciendo así el contexto esencial para la posterior simulación de DM del gel C-S-H. Durante esta revisión bibliográfica, se identificaron dos casos experimentales particulares que se seleccionaron para el presente estudio. A continuación, se proporcionará una descripción detallada de cada caso,

abordando su propósito, un breve resumen, la composición de las muestras utilizadas y los resultados obtenidos de las mediciones de las propiedades mecánicas correspondientes.

### **3.1 Caso experimental N°1**

#### **Comparación del módulo elástico entre el cemento clase G y el cemento geopolímero en condiciones HPHT.**

Este artículo, se centra en la formulación de un cemento geopolímero que se presentó como una alternativa al cemento clase G. El objetivo es comparar el desempeño de algunas propiedades mecánicas del cemento geopolímero respecto al cemento Portland. Para esto, se preparan dos tipos de muestra una con cemento Portland clase G sin ningún aditivo y la otra de cemento geopolímero que está compuesta por cemento Portland Clase G y una mezcla de cenizas volantes y micro sílice. Todas las muestras de cemento se curan en dos condiciones. La primera es una temperatura de 80 °C y presión de 1500 psi, mientras que la segunda es a una temperatura de 120 °C y presión de 3000 psi, con tiempos de curado de entre 7 y 24 horas.

El escenario de prueba de la temperatura de 120 °C y la presión de 3000 psi es el seleccionado para desarrollar la simulación con DM con el fin de realizar la evaluación de las propiedades mecánicas que se calculan en la etapa experimental para el caso N°1, desarrollado por (Mohd Zulkarnain, 2015).

A continuación, se tiene la composición del material de interés el cemento Portland clase G.

#### **3.1.1 Composición y preparación de las muestras de cemento Portland**

La preparación de las lechadas de cemento se basa en la Norma API RP 10-A. Se preparan muestras de cemento Clase G.

**Tabla 1***Condiciones de curado caso experimental.*

| Muestra / Condición curado | Temperatura: 120°C |          |
|----------------------------|--------------------|----------|
|                            | Presión: 3000 psi  |          |
| Cemento clase G            | 7 horas            | 24 horas |

Nota. Tomado de (Mohd Zulkarnain, 2015).

**Tabla 2***Composición de cada muestra en función del porcentaje caso experimental.*

| Muestra         | Cemento clase G | Cenizas volantes Clase F | Micro sílice |
|-----------------|-----------------|--------------------------|--------------|
| Cemento clase G | 100%            | 0%                       | 0%           |

Nota. Tomado de (Mohd Zulkarnain, 2015).

**Tabla 3***Composición de cada muestra en función del porcentaje caso experimental.*

| Muestra         | Cemento Clase G (g) | Ceniza Clase F | Micro Silice | Silicato de sodio | Hidróxido de sodio | Agua (g) |
|-----------------|---------------------|----------------|--------------|-------------------|--------------------|----------|
| Cemento clase G | 200                 | —              | —            | —                 | —                  | 88       |

Nota. Tomado de (Mohd Zulkarnain, 2015).

Los resultados obtenidos de las pruebas de laboratorio referentes al cálculo de las propiedades mecánicas Módulo de Young, Relación de Poisson, Módulo de Corte del cemento Portland clase G, las cuales se determinaron empleando el método OYO Sonic Viewer. Se muestran a continuación.

### 3.1.2 Resultados prueba experimental de las propiedades mecánicas

#### 3.1.2.1 Módulo de Young

**Tabla 4**

*Resultado Módulo de Young caso experimental. Caso N°1*

| 7<br>HORAS | MUESTRA<br>CEMENTO | N° | Módulo<br>Young<br>(GPa) | 24<br>HORAS | MUESTRA<br>CEMENTO | N° | Módulo<br>Young<br>(GPa) |
|------------|--------------------|----|--------------------------|-------------|--------------------|----|--------------------------|
|            | CLASE G            | 1  | 3.79                     |             | CLASE G            | 1  | 9.03                     |
|            |                    | 2  | 3.73                     |             |                    | 2  | 8.88                     |
|            |                    | 3  | 3.84                     |             |                    | 3  | 9.14                     |
|            |                    | 4  | 3.81                     |             |                    | 4  | 9.06                     |

Nota. Tomado de (Mohd Zulkarnain, 2015).

#### 3.1.2.2 Relación de Poisson

**Tabla 5**

*Resultado relación de Poisson caso experimental. Caso N°1*

| 7<br>HORAS | MUESTRA<br>CEMENTO | N° | Relación<br>Poisson | 24<br>HORAS | MUESTRA<br>CEMENTO | N° | Relación<br>Poisson |
|------------|--------------------|----|---------------------|-------------|--------------------|----|---------------------|
|            | CLASE G            | 1  | 0.1898              |             | CLASE G            | 1  | 0.1968              |
|            |                    | 2  | 0.1901              |             |                    | 2  | 0.1987              |
|            |                    | 3  | 0.1886              |             |                    | 3  | 0.1968              |
|            |                    | 4  | 0.1902              |             |                    | 4  | 0.1956              |

Nota. Tomado de (Mohd Zulkarnain, 2015).

#### 3.1.2.3 Módulo de corte

**Tabla 6**

*Resultado módulo de corte caso experimental. Caso N°1*

| 7<br>HORAS | MUESTRA<br>CEMENTO | Nº | Módulo<br>de corte<br>(kg/m. s <sup>2</sup> ) | 24<br>HORAS | MUESTRA<br>CEMENTO | Nº | Módulo<br>de corte<br>(kg/m. s <sup>2</sup> ) |
|------------|--------------------|----|-----------------------------------------------|-------------|--------------------|----|-----------------------------------------------|
|            | CLASE G            | 1  | 3.7928E+09                                    |             | CLASE G            | 1  | 4.1480E+09                                    |
|            |                    | 2  | 3.7290E+09                                    |             |                    | 2  | 4.0572E+09                                    |
|            |                    | 3  | 3.8439E+09                                    |             |                    | 3  | 4.1938E+09                                    |
|            |                    | 4  | 3.8056E+09                                    |             |                    | 4  | 4.1692E+09                                    |

Nota. Tomado de (Mohd Zulkarnain, 2015).

### 3.2 Caso experimental N°2

#### **Rendimiento de la prueba de elasticidad y expansión de geopolímero como cemento para pozos petroleros.**

Para el caso 2, La resistencia a la compresión del cemento geopolímero es superior a la del cemento Clase G. Sin embargo, esta investigación utilizó trabajos de laboratorio para investigar los componentes físicos y mecánicos del cemento utilizado en los pozos petroleros. para el cemento geopolímero y el cemento Clase G. Las normas API se utilizan para producir muestras de cemento proveniente de la mezcla. En esta situación, se emplearon cenizas volantes clase C. El silicato de sodio se mezcló con la solución de NaOH para crear la solución alcalina. Los gránulos de NaOH se diluyeron con agua destilada hasta 8 M para crear la solución de NaOH. Para recrear la condición del fondo del pozo, las muestras de cemento se curaron a una presión de 3000 psi y una temperatura de 130 °C. Después del curado, el OYO Sonic Viewer se utilizó para evaluar las propiedades elásticas de las muestras (Ridha et al., 2018).

### 3.2.1 Preparación de las muestras de cemento

Para comenzar el experimento con el cemento API clase G, se prepararon cubos de cemento utilizando los procedimientos API RP-10A con un mezclador de velocidad constante (ASTM International, 2008) la lechada de cemento Clase G estaba hecha de una combinación de cemento API Clase G y agua destilada. Luego se fraguaron en un periodo de tiempo de 24 horas. Después de la curación, las muestras de cemento que se sometieron a experimentos elásticos fueron perforadas en forma cilíndrica. Este proceso se conoce como extracción de núcleos. Las muestras de cemento se prepararon con un diámetro mínimo de 1,3 pulgadas y una relación altura/diámetro de 2 a 2,5. El Sonic Viewer-SX de OYO Corporation se utilizó para determinar las propiedades elásticas de las muestras de cemento (Ridha et al., 2018). Los resultados obtenidos de la prueba de laboratorio referentes al cálculo de las propiedades mecánicas módulo de Young, módulo de corte, relación de Poisson, del cemento Portland clase G. Se muestran a continuación.

**Tabla 7**

*Resultados del cálculo de las propiedades mecánicas. Caso N°2*

| <b>Cemento Portland Clase G</b> | <b>Longitud Pulg</b> | <b>Diámetro Pulg</b> | <b>Masa (g)</b> | <b>Densidad (g/cm<sup>3</sup>)</b> | <b>Módulo Young (Psi)</b> | <b>Relación Poisson</b> |
|---------------------------------|----------------------|----------------------|-----------------|------------------------------------|---------------------------|-------------------------|
| CG – 1                          | 3.12                 | 1.56                 | 186.12          | 1.90                               | $1.57 \times 10^6$        | 0.34                    |
| CG – 2                          | 3.10                 | 1.56                 | 185.23          | 1.91                               | $1.91 \times 10^6$        | 0.26                    |
| CG – 3                          | 3.11                 | 1.56                 | 187.91          | 1.93                               | $1.91 \times 10^6$        | 0.30                    |
| CG – 4                          | 3.11                 | 1.56                 | 186.69          | 1.92                               | $1.83 \times 10^6$        | 0.32                    |
| CG – 5                          | 3.09                 | 1.55                 | 184.32          | 1.91                               | $1.91 \times 10^6$        | 0.25                    |

Nota. Tomado de (Ridha et al., 2018).

Una vez se ha hecho la contextualización de los dos casos experimentales seleccionados, que cumplen con la condición de determinar las propiedades mecánicas en el cemento Portland de clase G. Se debe seguir con el desarrollo del segundo objetivo encaminado a la construcción

de modelos computacionales que representan el cemento. Donde, primeramente, se debe conocer que existen materiales análogos en la naturaleza que proporcionan actualmente la estructura molecular más cercana a la semejanza con el material aglutinante. Seguidamente se presentarán.

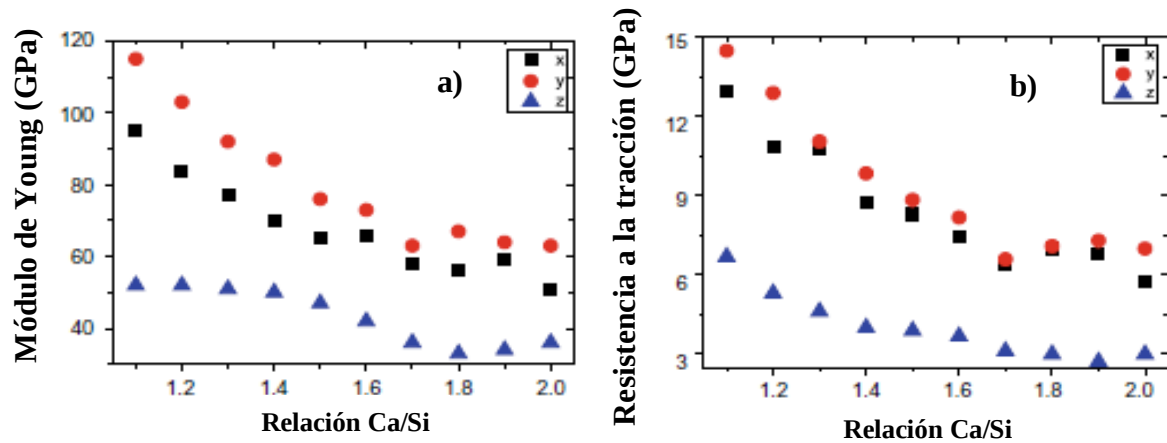
### 3.3 Discusión resultados experimentales

Siguiendo los fundamentos, se comienza con el gel C-S-H, y en la Figura 9, se representa gráficamente la relación Ca/Si en el eje X y el módulo de Young en el eje Y. Esta representación se realiza principalmente mediante pruebas de tensión uniaxial, en las cuales se preparan alrededor de 10 muestras de gel C-S-H. Se aplica fuerza en las direcciones de los ejes x, y, y z, y a partir de estos ensayos, se determinan propiedades mecánicas como el módulo de Young y la resistencia a la tracción.

Cada muestra del gel C-S-H exhibe un comportamiento mecánico heterogéneo: los planos XY muestran una fuerza de cohesión alta y más rigidez que aquellos en la dirección de las capas, a medida que aumentan las relaciones Ca/Si. En la dirección Y, a medida que aumentan las relaciones Ca/Si, la resistencia disminuye gradualmente desde 14,5 GPa hasta menos de 7 GPa. El módulo de Young disminuye de 113,7 GPa a 62,5 GPa y permanece alrededor de 62 GPa cuando Ca/Si varía de 1,7 a 2,0. A lo largo de la dirección X, también muestra la tendencia al debilitamiento de la fuerza. La resistencia a la tracción se reduce de 13 a 5,7 GPa junto con una disminución del módulo de Young 94 a 50 GPa. En la dirección de las capas en la dirección Z, la resistencia a la tracción disminuye de 6,68 a menos de 2,7 GPa, y el módulo de Young también disminuye de 52 a 33 GPa, mostrando menor rigidez, similar a los resultados de la reciente prueba de nanoindentación en geles C-S-H sintetizados en comparación con la del plano XY (Pelisser et al., 2012).

**Figura 9**

*Módulo de Young y Resistencia a la tracción con las relaciones Ca/Si*



Nota. El módulo de Young y resistencia a la tracción determinadas a diferentes relaciones Ca/Si. Tomadas de (Hou, 2019).

Ahora bien, cabe mencionar que cuando la relación molar Ca/Si en el gel C-S-H aumenta de 0.7 a 2.1, el módulo elástico obtenido experimentalmente se reduce de 27 GPa a 20 GPa. Dado que la nanoindentación no puede eliminar la influencia de los nano poros, que debilita significativamente las propiedades mecánicas, los resultados experimentales muestran valores más bajos que los obtenidos en simulaciones.

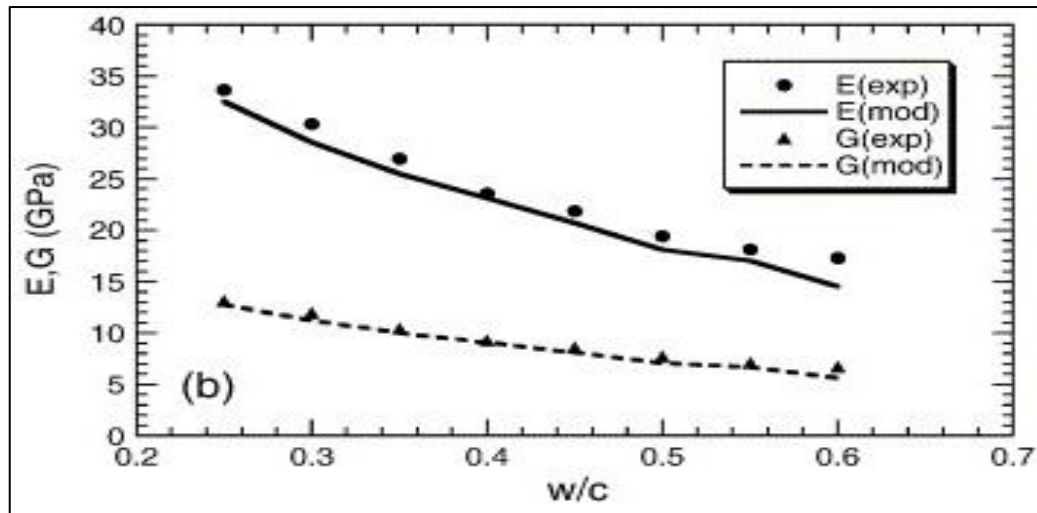
La variación en el comportamiento mecánico relacionado con la relación Ca/Si se debe a la configuración del silicato y a la estructura de las moléculas de agua entre capas. Por un lado, la longitud media de la cadena de silicato se reduce debido a la función de polimerización de los átomos de calcio, y los enlaces Si-OB-Si son sustituidos en gran medida por los enlaces Si-ONB-Ca. Esta variación también es reflejada en el mineral utilizado en estudio, en el caso de la tobermorita que es usada para estos casos, presenta un comportamiento un poco distante del gel C-S-H el cual es su análogo, como lo es en la energía de sus enlaces Si-O y Ca-O (Zhu et al., 2007).

Se observan casos en los cuales se encuentran valores más amplios en escenarios donde el material se expone solo a las variables atmosféricas sin inducir cambios específicos que afecten las propiedades mecánicas. Esto contrasta con el presente estudio, que, además de considerar variables atmosféricas como presión y temperatura, se enfoca en analizar el comportamiento de los modelos al variar el contenido de agua en el sistema, añadiendo así un nivel adicional de complejidad y comprensión al estudio.

Según resultados experimentales que se hallaron por mediciones en laboratorio. Se midieron muestras de ambos cementos y se obtuvieron resultados promedio de tres muestras. En cada valor W/C, se ofrece un valor inferior que corresponde a los resultados arrojados a los 28 días, y un valor superior que corresponde a los resultados hallados a los 56 días (Haecker et al., 2005). Lo que conduce a una variante continua en la manera en que se mezclan las proporciones, para la inducción del proceso de hidratación en el cemento, de acuerdo con lo visto gráficamente en estas condiciones de W/C se conoce un rango en el módulo de Young que oscila entre los (35 - 15) GPa. En la Figura 10 se observa cómo afecta la relación agua cemento las propiedades como el módulo de Young siendo este menor a medida que aumenta la relación W/C, cabe resaltar que para estos procesos de fraguado esta relación no debe superar el 0.5 para el contacto con agua dulce y 0.45 con agua salada.

### **Figura 10**

*Módulo elástico a 28 y 56 días en relación W/C*



Nota. La gráfica ilustra el módulo elástico a 28 y 56 días en relación agua (W)/cemento (C). Tomado de Haecker, et al (2005).

Mediante la revisión bibliográfica de los casos de estudio, se busca obtener las condiciones bajo las cuales se determinaron las propiedades mecánicas. Esto permitirá establecer las condiciones de simulación y facilitará la comparación con los datos experimentales. Dichos casos de estudio muestran, variaciones composicionales en el cemento teniendo en cuenta la relación W/C (Tabla 3) la cual va a influenciar sobre las propiedades mecánicas del cemento jugando un papel fundamental al igual que las relaciones Ca/Si.

Por otro lado, muestran las condiciones ambientales de curado del cemento con una temperatura y presión de 120 °C y 3000 psi, respectivamente, y un tiempo de entre 7 y 24 horas. Finalmente, se miden las propiedades mecánicas a condición atmosférica a través de métodos de ensayo no destructivos por medio de una técnica que induce ondas ultrasónicas en el material sin generar algún daño. Es importante resaltar que estos métodos no son tan precisos como las técnicas convencionales destructivas.

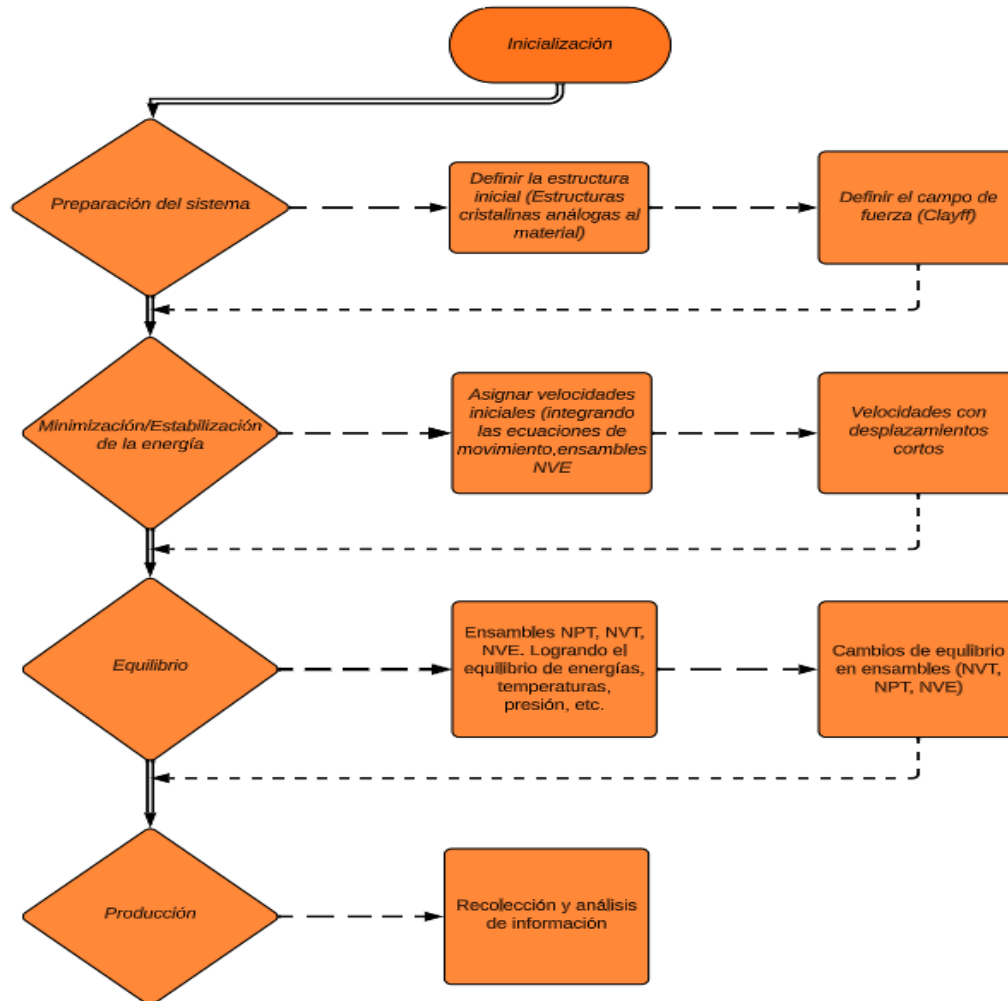
#### 4 Dinámica molecular

La DM posibilita el estudio del movimiento de partículas y la interacción entre átomos mediante la aplicación de la segunda ley de Newton a temperaturas finitas. En este enfoque, la energía potencial se define utilizando los principios de la mecánica molecular. Al emplear la segunda ley de Newton, se describe la evolución temporal del sistema, y se resuelve mediante métodos de integración numérica, como el método de Verlet, para determinar la trayectoria de cada átomo en función del tiempo. Las propiedades termodinámicas macroscópicas del sistema pueden calcularse utilizando la simulación como un promedio temporal del sistema, correspondiente a los promedios de los conjuntos micro canónicos. Para obtener propiedades a una escala mayor, se promedian las trayectorias, posiciones y velocidades de todos los átomos creados a una escala microscópica (Leach, 2001). La Dinámica Molecular es una herramienta computacional que emplea datos numéricos para explicar los movimientos físicos de los átomos durante un período específico en un sistema determinado (Frenkel, 1996).

A continuación, se muestra los pasos a seguir en la simulación con DM. Según las Mejores prácticas para cementaciones en simulaciones moleculares de Braun, et al. (2019).

#### **Figura 11**

*Diagrama de flujo dinámica molecular*



Nota. El diagrama de flujo simboliza la metodología de la dinámica molecular. Tomada a partir de información de las buenas prácticas en DM de (Braun, et al. (2019)).

#### 4.1 Metodología de simulación

Conociendo anteriormente el diagrama de flujo que representa la manera de realizar el paso a paso de una simulación con DM, es preciso conocer más detalles y tomar respaldos de autores que han propuesto metodologías como lo es el caso de Sumit (2019). Inicialmente, se establece una configuración inicial utilizando la estructura del modelo cristalino de la tobermorita 14 Å y se le hacen modificaciones estructurales para que se asemeje lo más posible al gel C-S-H como la polimerización de las cadenas de silicato y la inclusión de moléculas de agua e hidróxidos

de calcio en el espacio interlaminar de la estructura (López et al., 2022). Luego, se define el campo de fuerza ClayFF, que representa de manera precisa las interacciones entre átomos y moléculas, junto con las velocidades y posiciones iniciales que constituyen el sistema. A continuación, se asignan condiciones de contorno, fijando ciertas variables como volumen (V), temperatura (T), presión (P), número de partículas (N) y energía (E).

La simulación se realiza en dos etapas principales. En la primera etapa, se lleva a cabo la preparación, minimización/estabilización y equilibrio del sistema. Durante este período, se realiza un seguimiento de variables clave, como presión, temperatura y energía, hasta alcanzar un grado de estabilización. En la segunda etapa, conocida como la etapa de producción, se recopila la información de las propiedades que se analizan finalmente. Se sigue una premisa en la DM que sugiere que a medida que aumenta el tiempo de simulación, se logra una mejor estructuración de los datos, lo que resulta en una mayor precisión en los resultados.

Es fundamental destacar algunos conceptos clave en esta metodología, como:

#### **4.2 Propiedades termodinámicas de la simulación**

Las propiedades termodinámicas para la simulación son de suma importancia el control de variables como la temperatura, la energía o la presión son cruciales porque determinan el comportamiento termodinámico del sistema, estableciendo las condiciones que describen su física. Esto se logra seleccionando ensambles NVE, NVT y NPT (Martínez, 2018), resultando lo siguiente.

- **NPT** Siguiendo el orden este ensamble tiene el control del número de partículas (N), presión (P) y temperatura (T), lo que se concluye que para este se genera el cambio en volumen y energía dentro del sistema.

- **NVT** El ensamble para este va con el número de partículas (N), volumen (V) y temperatura (T), en lo que se produce la variación para las variables de presión y energía.
- **NVE** Para este ensamble se maneja el número de partículas (N), volumen (V) y energía (E), en lo que varía la presión y la temperatura empleándose como método adiabático en el que no se produce intercambio de calor.

### 4.3 Campo de fuerza

En el campo de la dinámica molecular, un campo de fuerza es la implementación de ciertos parámetros y funciones matemáticas que describen la energía potencial de un conjunto de partículas dentro de un sistema de simulación (Sharma, 2019). Se emplean varios campos de fuerza para estudiar los materiales presentes en el cemento. En este contexto, la construcción del modelo computacional se desarrolló empleando el campo de fuerza ClayFF para simular el gel C-S-H. Que cumple con la siguiente función.

#### 4.3.1 Campo de fuerza ClayFF

Es un campo de fuerza adecuado para la simulación de sistemas hidratados con multicomponentes, y es ampliamente efectivo para simulaciones moleculares de interfaces de fluidos con arcillas.

La elección del campo de fuerza ClayFF en la simulación DM se respalda con estudios previos como el realizado por, Hou (2014). Este señala que el campo de fuerza ClayFF ha sido exitosamente utilizado para modelar estructuras de materiales de óxido e hidróxido, las interacciones de especies acuosas con superficies de óxido e hidróxido y el comportamiento del agua y las especies iónicas en las capas intermedias de las fases de estructura de capa.

Investigaciones de Kirkpatrick, et al. (2005) y Cygan, et al. (2009) han abordado diversas fases del cemento con DM, como Portlandita, aluminatos de calcio hidratados y tobermorita, confirmando la idoneidad del campo de fuerza ClayFF para sistemas de silicato de calcio. Este campo de fuerza está diseñado específicamente para simular sistemas que contienen silicatos y aluminatos, permitiendo la representación precisa de interacciones a nivel atómico, como interacciones electrostáticas, puentes de hidrógeno, los enlaces covalentes y las fuerzas de Van Der Waals. Su implementación ha contribuido significativamente a la comprensión de la dinámica y comportamiento de estos materiales en diversas aplicaciones, lo que destaca su utilidad en la investigación de la física y química de los materiales. Para representar el agua, se emplea el modelo de carga puntual simple flexible (SPC) (Berendsen et al., 1987), en el campo de fuerza ClayFF. Como se ve en la (ecuación 15).

$$U_{ij}^{HA} = \frac{1}{2} k_a (r - r_0)^2 \quad (15)$$

Donde:

**Kb** es la constante de fuerza de estiramiento.

**r0** es la longitud de enlace óptimo entre los tres átomos.

Las interacciones de Coulomb generalmente se restan dentro de un grupo enlazado porque la forma funcional del enlace describe de manera efectiva todas las diferentes contribuciones al enlace químico. Un potencial de tres cuerpos que representa la energía del ángulo H – O – H, de manera similar a los términos de enlace armónico. La energía de interacción total del sistema simulado (Ecuación 16) se encuentra como la suma de un término electrostático para todas las interacciones de Coulomb entre cargas atómicas parciales y un término de Lennard-Jones que representa las interacciones dispersivas de Van Der Waals de corto alcance (Hou, 2019).

$$U = \sum_{ij} \left\{ \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r} + 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} + \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right\} \quad (16)$$

Donde:

**$r_{ij}$**  es la distancia entre los átomos  **$i$**  y  **$j$** .

**$q_i - q_j$**  son cargas parciales centradas en estos átomos.

**$\Sigma$**  es un parámetro del potencial de interacción de Lennard-Jones.

**$\epsilon_0$**  es la permitividad dieléctrica del vacío.

Estos se obtienen mediante la combinación de parámetros de Lennard-Jones con la interacción de diferentes iones (Ecuación 17).

$$\sigma = \frac{\sigma_{ij} + \sigma_{ij}}{2} \quad (17)$$

Donde:

**$\sigma$**  y  **$\epsilon$**  son parámetros del potencial de interacción de Lennard-Jones.

**$\sigma$**  referencia la distancia.

**$\epsilon$**  hace nombramiento a la energía.

En la Tabla 8 se visualizan los parámetros no enlazantes del campo de fuerza ClayFF (Qing Ji et al., 2012), los parámetros de enlace que corresponden a las moléculas de agua se muestran en la Tabla 9, y los parámetros de flexión de la molécula de agua se presentan en la Tabla 10. Este campo de fuerza es no enlazante y las moléculas de agua están descritas por el campo de fuerza SPC.

**Tabla 8**

Parámetros no enlazantes del campo de fuerza ClayFF.

| Especie                                                | Carga (e-) | Do (Kcal/mol)           | Ro (Å) |
|--------------------------------------------------------|------------|-------------------------|--------|
| Hidrógeno de agua (Hw)                                 | 0.4100     | 0.0                     | 0.0    |
| Hidrógeno de hidroxilo (Ho)                            | 0.4250     | 0.0                     | 0.0    |
| Oxígeno de agua (Ow)                                   | -0.8200    | 0.1554                  | 3.5532 |
| Oxígeno de hidroxilo (Oh)                              | -0.9500    | 0.1554                  | 3.5532 |
| Oxígeno puente (OB)                                    | -1.0500    | 0.1554                  | 3.5532 |
| Oxígeno puente con<br>sustitución octaédrica<br>(OBOS) | -1.1808    | 0.1554                  | 3.5532 |
| Silicio (Si)                                           | 2.1000     | $1.8405 \times 10^{-6}$ | 3.7064 |
| Calcio Octaédrico (CaO)                                | 1.3600     | $5.0298 \times 10^{-6}$ | 6.2484 |
| Ion de calcio (CaW)                                    | 2.0        | 0.0470                  | 3.2237 |

Tomado de. Qing Ji, et al. (2012).

**Tabla 9**

Parámetros de enlace campo de fuerza SPC.

| Especie i | Especie j | $K_1$ (Kcal/mol Å <sup>2</sup> ) | $r_o$ (Å) |
|-----------|-----------|----------------------------------|-----------|
| Ow        | Hw        | 554.1349                         | 1.0000    |
| Oh        | Ho        | 554.1349                         | 1.0000    |

Tomado de Cygan, et al. (2004).

**Tabla 10**

Parámetros de ángulo campo de fuerza.

| Especie i | Especie j | $K_1$ (Kcal/mol Å <sup>2</sup> ) | $r_o$ (Å) | $\Theta_o$ (deg) |
|-----------|-----------|----------------------------------|-----------|------------------|
| Hw        | Ow        | Hw                               | 45.7696   | 109.47           |

Tomado de Cygan, et al. (2004).

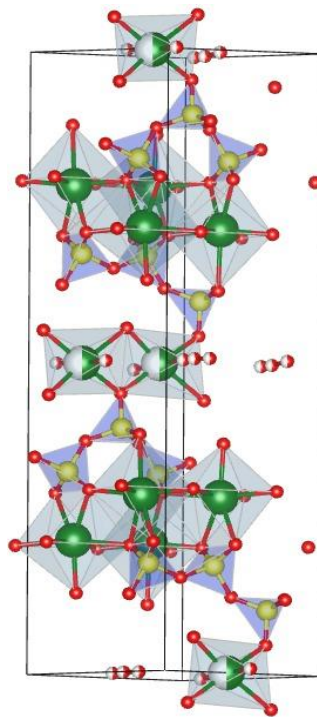
#### 4.3.2 Modelo de simulación

Para la configuración inicial de los sistemas que fueron simulados se utilizó la estructura cristalina de la tobermorita 14 Å, compuesta por dos láminas complejas de cadenas de óxido de

silicio y de calcio con una interlámina de moléculas de agua y de hidróxidos de calcio que puede ser observada en la Figura 12 (Bonaccorsi et al., 2005), y se le hizo una serie de modificaciones como ya fue mencionado.

**Figura 12**

*Mapa estructural de la tobermorita 14 Å*



Nota. Estructura de la tobermorita de 14 Å que se toma como base para la configuración del modelo computacional.

Mediante las tablas 11 y 12 se puede ver la cantidad de moléculas de hidróxido de calcio incluidas a los sistemas para lograr relaciones Ca/Si de 1.8 y 1.9 características del gel C-S-H y la cantidad de moléculas de agua necesarias para variar el contenido de agua en el sistema (relación W/Si = 1.5, 1.7, 1.9 y 2.1), respectivamente. Además de la polimerización de las cadenas de silicato.

**Tabla 11**

*Número de iones de calcio e hidroxilo incluidos en cada modelo.*

| Relación Ca/Si | Número de iones        |         |
|----------------|------------------------|---------|
|                | Campo de fuerza ClayFF |         |
|                | Ca (CaW)               | OH(Ohw) |
| 1.8            | 50                     | 193     |
| 1.9            | 54                     | 210     |

**Tabla 12**

*Número de moléculas de agua que se agregaron a las diferentes relaciones en función del modelo.*

| Relación W/Si | Nº Moléculas de agua |
|---------------|----------------------|
| 1.5           | 68                   |
| 1.7           | 77                   |
| 1.9           | 86                   |
| 2.1           | 95                   |

El resultado de los cambios estructurales se puede observar en la Figura 13, dicha figura representa el material luego del proceso de recocido simulado, donde se forma el espacio poroso característico del cemento y gel C-S-H.

Continuando con el modelado de la simulación se empleó la herramienta computacional LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), que se encuentra en la web como: <http://lammps.sandia.gov>: Siendo construido por los Laboratorios Nacionales Sandia, principalmente por el investigador Steve Plimpton entre otros investigadores. De acuerdo con Meléndez (2021), LAMMPS se define como un simulador de dinámica molecular clásica específicamente diseñado para modelar materiales, destacando su aplicación en el ámbito de sólidos. Este software, caracterizado por ser de código abierto, se destaca por su capacidad para modelar una amplia variedad de sistemas a escala nanométrica, abarcando desde átomos y polímeros hasta metales y granos, y permitiendo la utilización de diversos campos de fuerza y

condiciones de frontera. Meléndez (2021), dice que LAMMPS opera mediante la ejecución de comandos desde un archivo de texto de entrada, donde cada línea tiene un impacto inmediato en la simulación y el orden de los comandos es crucial. La capacidad de ejecutar simulaciones simultáneas en paralelo es una de las ventajas clave de LAMMPS. El software ofrece tipos de átomos y fuerzas predefinidos en sus paquetes, eliminando la necesidad de calcular cada potencial. Además, se puede aplicar una amplia gama de condiciones de presión y temperatura y proporciona resultados detallados, como energía, funciones de correlación, desplazamiento medio de partículas, densidad del sistema, entre a lo largo del tiempo de simulación.

La flexibilidad de LAMMPS se refleja en su capacidad para incorporar fácilmente nuevos tipos de átomos, sistemas orgánicos e inorgánicos, potenciales de Monte Carlo, regiones geométricas y su integración con C++. En sistemas de máquinas en paralelo, el software utiliza técnicas de descomposición espacial para dividir el dominio de simulación 3D en subdominios más pequeños, asignando a cada procesador uno de estos subdominios. La comunicación eficiente entre procesadores y el almacenamiento de información sobre átomos vecinos contribuyen a la eficiencia de LAMMPS en cálculos paralelos, siendo más efectivo en sistemas donde las partículas llenan una caja rectangular 3D con una densidad relativamente uniforme (ehu, n.d. et al, 2023).

En este estudio, se han aplicado las etapas de simulación con relación a la norma que estandariza las buenas prácticas. Mejores prácticas para cimentaciones en simulaciones moleculares (Efrem Braun et al., 2019).

Para ejecutar una simulación en LAMMPS de los modelos de gel C-S-H, se requiere de una estructura con archivos que contengan las fases fundamentales que permitan el adecuado desarrollo de las simulaciones:

- **Inicialización:** Configuración inicial del sistema.

- **Definición de los átomos:** Especificación de los tipos de átomos y sus propiedades.
- **Configuración inicial:** Establecimiento de las posiciones iniciales de cada átomo en el sistema (estructura inicial).
- **Permiso de correr la simulación:** Indicación para iniciar y ejecutar la simulación.

La inicialización del sistema se realiza mediante el archivo de entrada de LAMMPS donde se establece la configuración inicial del sistema como las condiciones de frontera, posteriormente se asignan datos relacionados con los tipos de átomos que van a estar dentro de la caja de simulación como el número de átomos, tipos de enlaces y coeficientes o parámetros del campo de fuerza ClayFF. Además, se incluye la topología del gel C-S-H o configuración inicial del sistema.

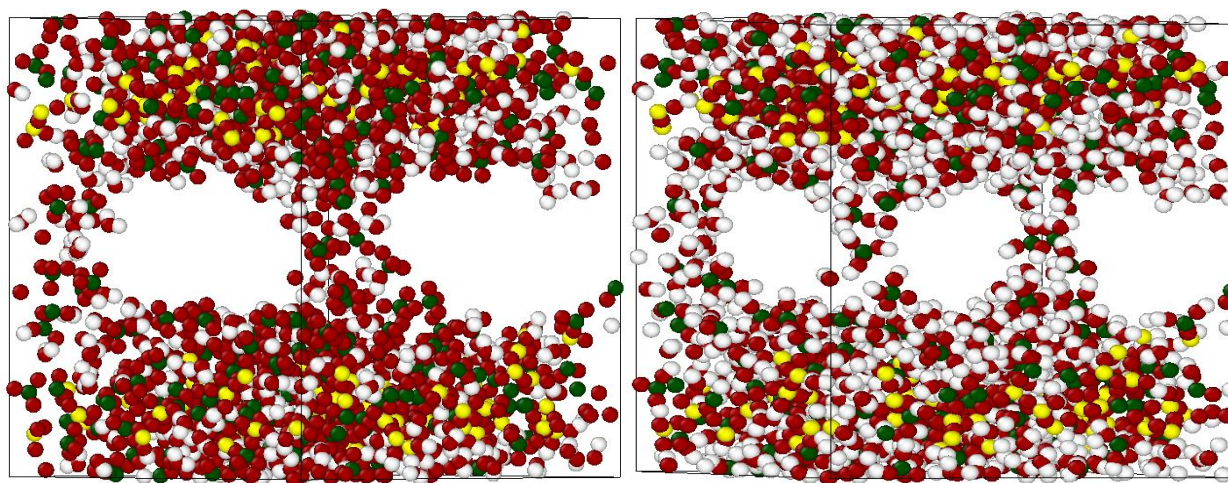
Posteriormente para llevar el sistema a un estado estable o de menor energía, se realiza la minimización de energía, para ello se utilizó el ensamble termodinámico NPT para controlar la temperatura y la presión. Por otro lado, se le aplicó el método de recocido simulado (Simulated Annealing), el cual implica aumentar la temperatura del sistema de manera abrupta desde los 80 °F-27 °C hasta los 1340.33 °F-726.85 °C, con intervalos de -279.67 °F-173.15 °C. Una vez alcanzada esta temperatura máxima, se procede a la fase de equilibrio, donde se inicia la disminución gradual de la temperatura desde los 1340.33 °F-726.85 °C hasta los 80 °F-27 °C, manteniendo el mismo intervalo de -279.67 °F-173.15 °C, pero en sentido regresivo, desde 1340.33 °F-726.85 °C a 1160.33 °F-626.85 °C hasta llegar a 80 °F-27 °C (López, 2022). Durante este proceso, utilizando el ensamble NPT, el sistema mantiene constante la presión y la temperatura en torno a los 80 °F-27 °C y 14.7 psi, con un período de tiempo de 200 ps. Tras llevar a cabo el procedimiento de recocido simulado, se obtiene un archivo de salida de LAMMPS que contiene nuevos datos

estructurales de los modelos simulados, que posteriormente se utilizan en la simulación a condiciones HPHT.

De acuerdo con López (2022), en la estructura de la interlámina se observa un aumento en la formación de huecos (Figura 13) y una reducción en el tamaño de los poros al elevar la temperatura a su valor máximo. En el proceso de enfriamiento, se produce una redistribución de las partículas, generando mayor estabilidad en la lámina y favoreciendo la formación de calcios octaédricos y silicios tetraédricos con mayor solidez, resultando en una estructura de poros más compacta. Este fenómeno contribuye a un mejor empaquetamiento y evita la creación de huecos estructurales en la lámina.

**Figura 13**

*Cadenas de óxido de silicio y calcio junto con moléculas de agua y iones de calcio*



Nota. Láminas complejas compuestas por átomos de Si (amarillo), Ca (verde) y O (rojo), el espacio interlaminar ocupado por moléculas de agua e hidróxido de calcio compuestas por átomos de O (rojo) e H (blanco). Los espacios vacíos representan la porosidad del material.

En este trabajo se utilizaron los escenarios de presión y temperatura planteados para cada caso de estudio. Para el caso N°1 (3000 psi – 247.73 °F ó 120 °C), el caso N° 2 (3000 psi – 265.73

°F ó 130 °C). La forma para controlar la presión fue empleando la técnica de Nosé-Hoover del baróstato, para la temperatura se usó el termostato. De la misma manera para el cálculo de las propiedades se usó este tipo de ensamble NPT, aplicando un paso de tiempo de 0.1 (fs) considerándose adecuado para el caso. El tiempo dinámico entre periodos se determinó en 1000 (fs). Lo que permitió llegar a la estabilización termodinámica que conduce al periodo de producción llegando a la confluencia de las energías, temperatura y presión en el periodo de tiempo total establecido de 12000000 fs.

Una vez el sistema se encuentra en equilibrio se aplica el esfuerzo de deformación a la celda de simulación en un determinado plano mientras las demás permanecen constantes. Este procedimiento se describe más detalladamente en el análisis de propiedades mecánicas, a continuación, donde al finalizar este método se determinan las propiedades mecánicas, incluyendo el módulo de Young, la relación de Poisson y el módulo de corte para el caso estudiado.

## **5 Análisis de resultados**

### **5.1 Análisis de resultados Caso N°1**

#### **Comparación del módulo elástico entre el cemento clase G y el cemento geopolímero en condiciones HPHT.**

Los resultados de la simulación, llevada a cabo mediante los modelos computacionales diseñados según la base teórica de la simulación con DM, revelan la evaluación del efecto de las condiciones HPHT sobre las propiedades mecánicas del cemento. Estas simulaciones se realizaron bajo las condiciones de temperatura y presión establecidas en los casos base, tomadas de la literatura de prácticas experimentales (a una presión de 3000 psi y a una temperatura de 120 °C).

Es importante recordar que se configuraron con relaciones Ca/Si de 1.8 y 1.9, y relaciones de W/Si de 1.5, 1.7, 1.9 y 2.1, teniendo en cuenta la complejidad inherente a las diversas transformaciones que experimenta el gel C-S-H durante la hidratación, se reconoce la presencia de una variabilidad estructural no uniforme en las láminas resultantes.

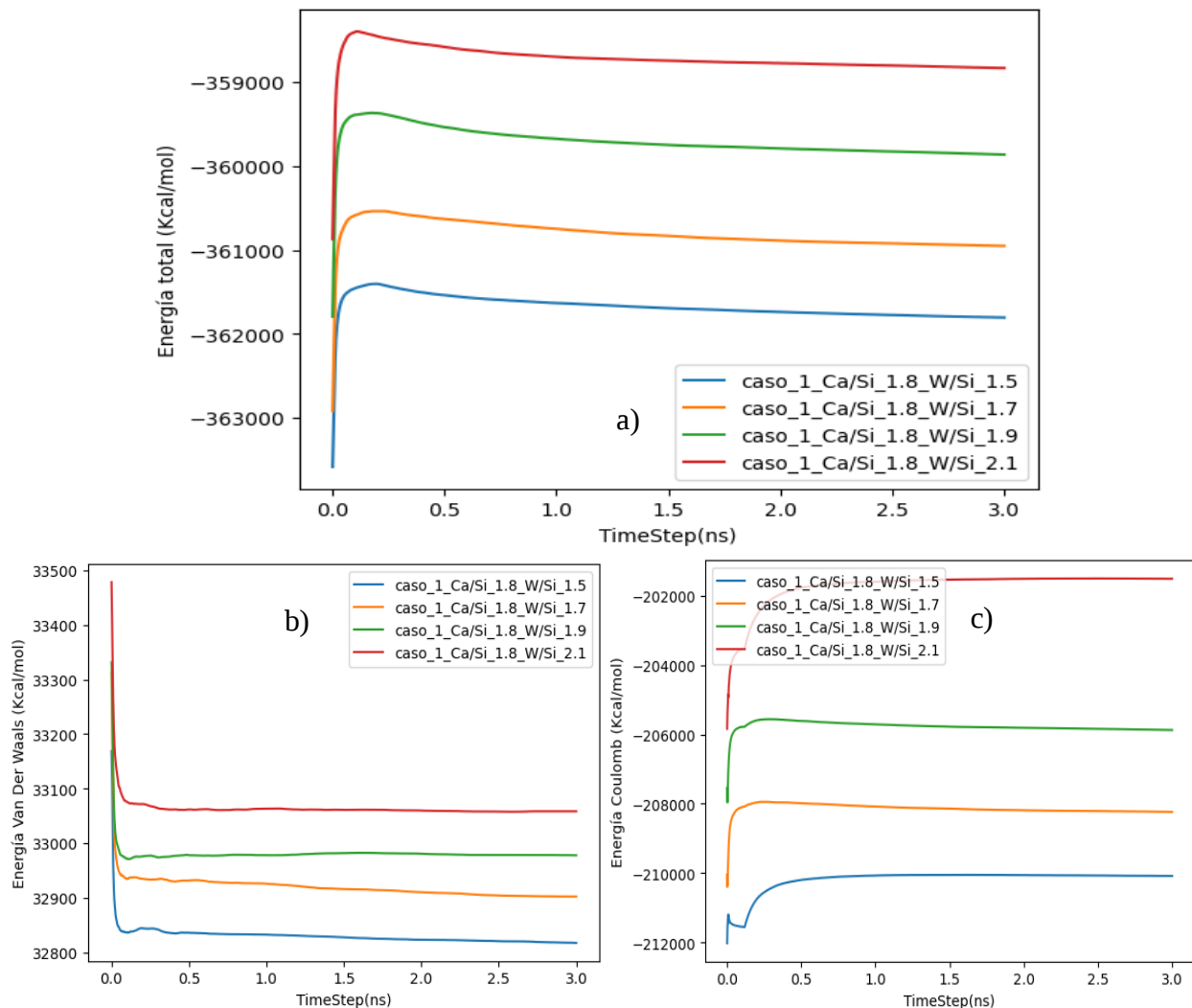
### 5.1.1 Seguimiento al sistema caso N°1

Al iniciar con el seguimiento, se recopila información a lo largo del tiempo de los modelos, que están compuestos por variables cruciales integradas en el sistema, tales como la densidad, la energía potencial, energía cinética, volumen, presión, densidad, temperatura, entre otras. Entre estas variables, algunas destacan, como la energía total, que proporciona información sobre la estabilidad del sistema durante el proceso. En la Figura 14 se presentan estas variables, tomando como ejemplo los modelos con relación Ca/Si de 1.8 en una primera etapa temporal.

En lo que respecta a la energía total del sistema, energía de Van Der Waals y energía de Coulomb, se puede notar que todas ellas aumentan en proporción al tamaño del sistema o a la cantidad de moléculas de agua presentes. Por otro lado, en el caso de la energía de Van Der Waals se observa una oscilación muy parecida en cada una de las curvas. Donde la energía total, mantiene una diferencia una vez se estabiliza oscilando para los cuatro modelos entre los (-362000 y -358900) Kcal/mol, la energía de Van Der Waals estando equilibrada sostiene una disparidad de (328400 – 33080) Kcal/mol, mientras que la energía de Coulomb manifiesta un intervalo más corto fluctuando en (-210000 y -202000). Por lo que se registra una mayor separación entre cantidades en los modelos para la energía total seguida de la energía de Coulomb.

### Figura 14

*Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.8 caso N°1*



Nota. La figura 14 hace referencia al seguimiento que se realiza al sistema de la relación Ca/Si 1.8 en las variables. a) Energía total, b) Energía de Van Der Waals, c) Energía de Coulomb.

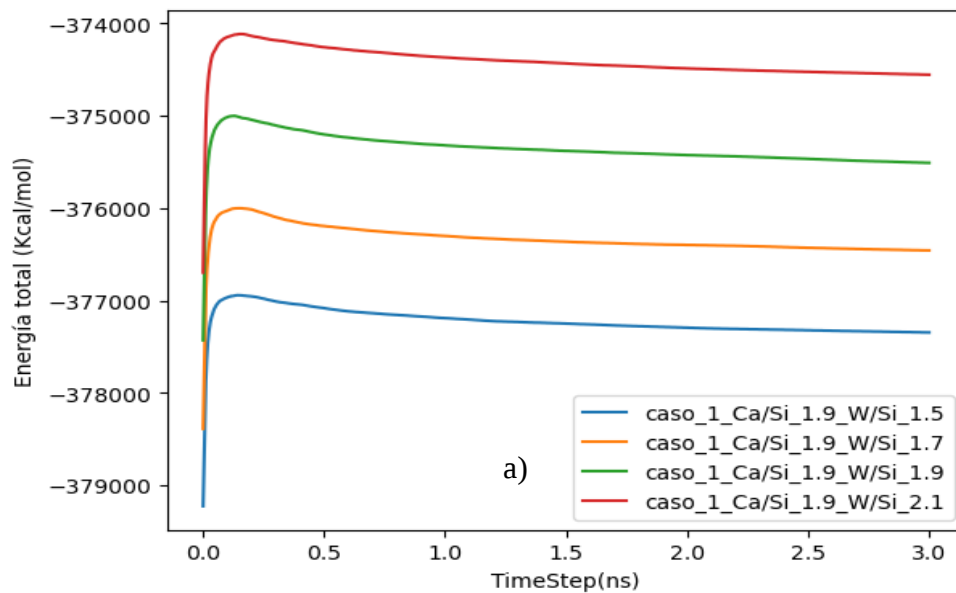
Continuando con el monitoreo de los modelos de la relación Ca/Si 1.9 en la figura 15 se tienen las mismas variables anteriormente visualizadas. En lo que respecta a la energía total del sistema, energía de Van Der Waals y energía de Coulomb, se observa una similitud sin variaciones significativas. Todas estas energías aumentan proporcionalmente al tamaño del sistema o a la cantidad de moléculas de agua presentes, manteniendo el comportamiento previsible de las energías en los modelos de la relación Ca/Si 1.8. En términos de variación entre los valores de las energías, se registra una diferencia una vez estabilizado, oscilando entre (-

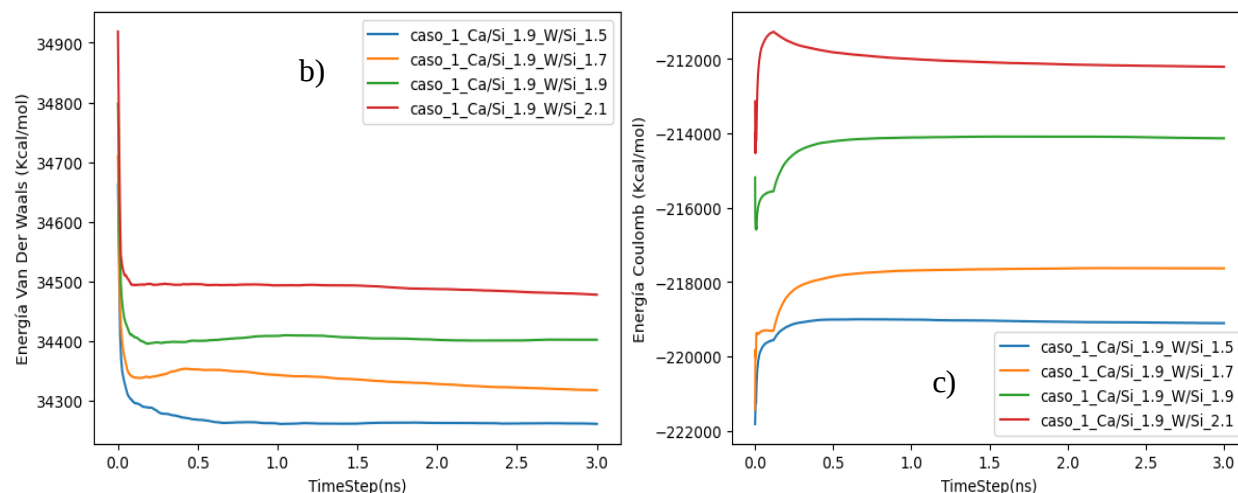
374,200 y -377,100) Kcal/mol para los cuatro modelos. La energía de Van Der Waals, al estar equilibrada, presenta una variante de (34.250 – 34.500) Kcal/mol, mientras que la energía coulombiana manifiesta un intervalo más corto, fluctuando entre (-219.900 y -212.000) Kcal/mol. En este reconocimiento, se observa una separación superior entre modelos en los datos determinados para la energía total, seguida de la energía de Coulomb.

Manteniendo la similitud con las energías de la relación Ca/Si 1.8, se aprecia un leve incremento en estas variables para la relación Ca/Si 1.9. Sin embargo, para esta segunda relación, los intervalos entre energías se vuelven más cortos.

### Figura 15

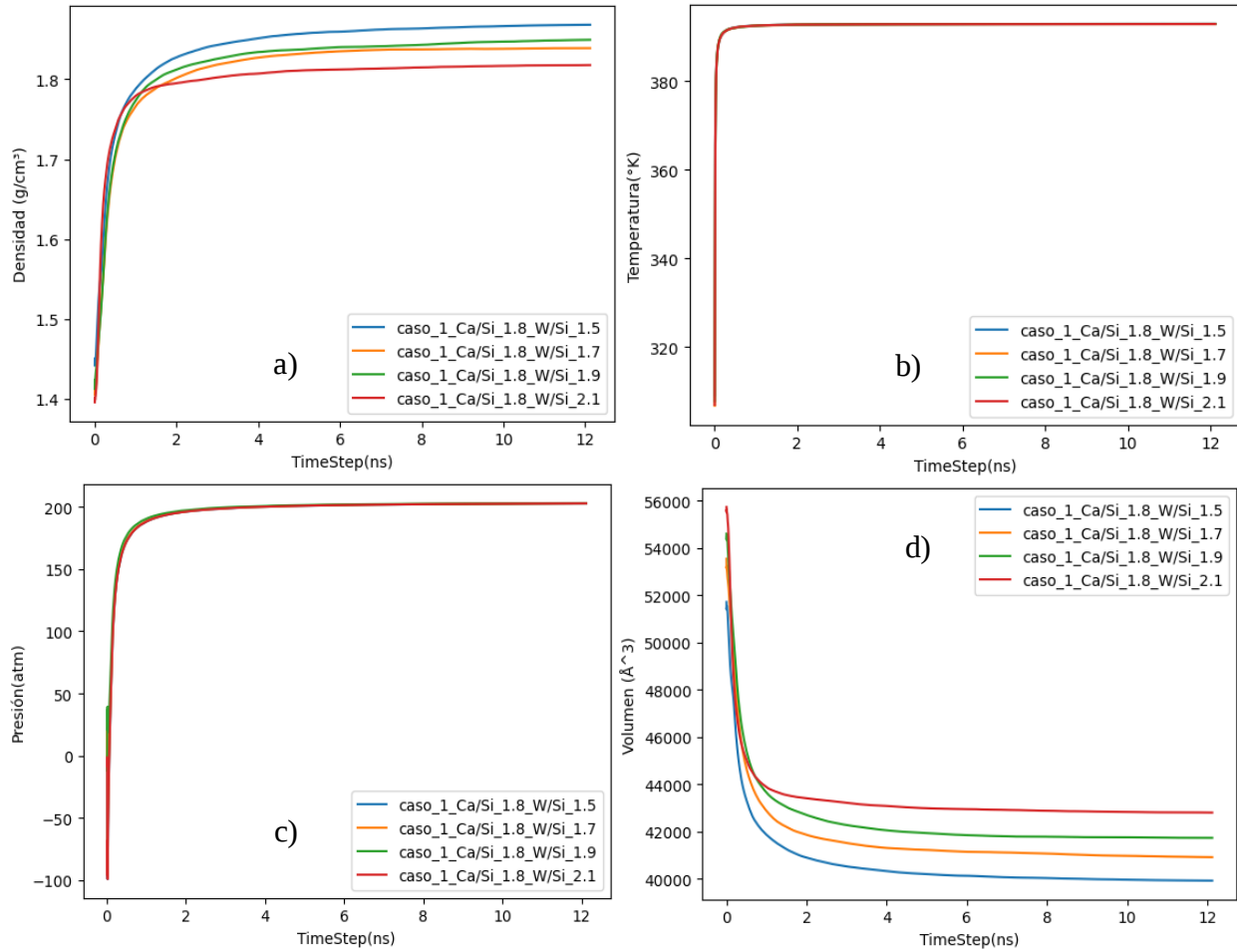
*Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.9 caso N°1*





Nota. La figura 15 hace referencia al seguimiento que se realiza al sistema de la relación Ca/Si 1.9 en las variables energéticas. a) Energía total, b) Energía de Van Der Waals, c) Energía de Coulomb.

Prosiguiendo con la ampliación en el periodo de tiempo logrando los 12 ns, se evaluaron las variables como la densidad, volumen, temperatura y presión de la relación Ca/Si 1.8 y W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1 en cada modelo (Figura 16). Al llegar al final del intervalo, los cuatro modelos se estabilizan mayoritariamente. En cuanto al volumen, este requiere un mayor tiempo para estabilizarse totalmente. No obstante, estas condiciones son coherentes con las expectativas, ya que el volumen aumentará o disminuirá de manera proporcional a la magnitud del sistema, oscilando en un rango de entre los  $40100 \text{ \AA}^3$  y  $43900 \text{ \AA}^3$ . Mientras que la temperatura y la presión permanece constante a través de la línea de tiempo, ahora si se observa la densidad esta se mantiene en una fluctuación cercana entre los  $(1.85 \text{ y } 1.78) \text{ g/cm}^3$  concerniente a las cuatro relaciones W/Si donde finalmente termina equilibrándose mayormente, teniendo cierta similitud a la condición de equilibrio que tiene el volumen al estar estrechamente ligados, llegando al final de la simulación exactamente a como se designaron inicialmente las condiciones HPHT del caso experimental N°1.

**Figura 16***Evolución temporal a través del tiempo Ca/Si 1.8 caso N°1*

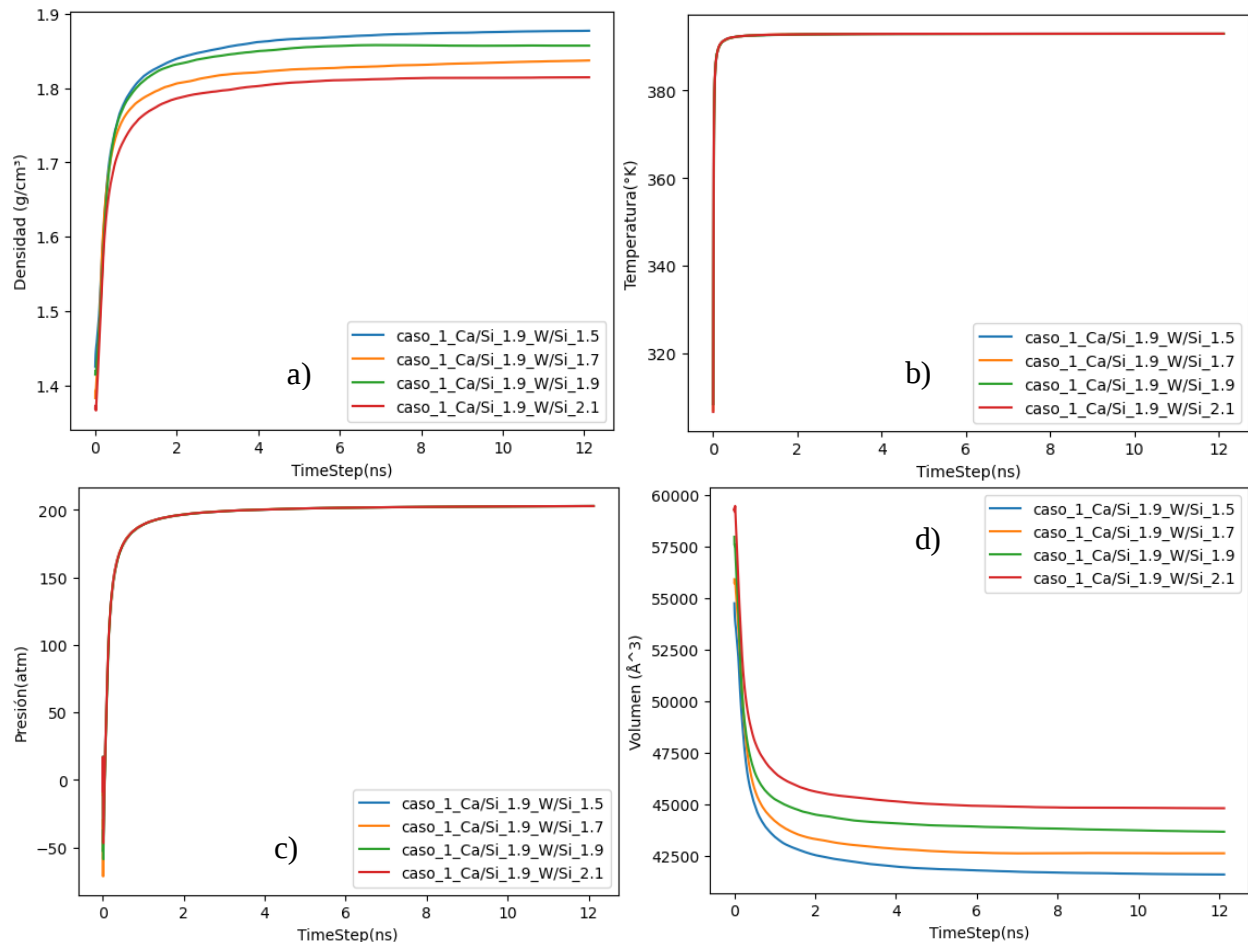
Nota. La ilustración manifiesta la evolución del sistema a través del tiempo de la relación Ca/Si 1.8 de las variables a) Presión, b) Densidad, c) Temperatura, d) Volumen.

Para la siguiente relación Ca/Si 1.9 y W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1 a lo largo del tiempo, la densidad, volumen, temperatura y presión que se obtuvo de cada modelo (Figura 17), sujeto a los ensambles NVE y NPT, las cuatro variantes se estabilizan mayoritariamente. En cuanto al volumen este compromete un mayor tiempo para estabilizarse totalmente, sin embargo, estas condiciones van en sintonía con lo previsto donde va a aumentar o a disminuir al ser proporcional

a la magnitud del sistema lo cual para el actual oscila en un rango de entre los  $41500 \text{ \AA}^3$  y  $45500 \text{ \AA}^3$  teniendo en cuenta las cuatro relaciones W/Si. Mientras que la temperatura y la presión permanece constante a través de la línea de tiempo, ahora si se observa la densidad, esta se mantiene en una variación cercana entre los  $(1.88 \text{ y } 1.80) \text{ g/cm}^3$  en las cuatro relaciones W/Si donde finalmente termina equilibrándose mayormente, teniendo cierta similitud a la condición de equilibrio que tiene el volumen coincidiendo igualmente con la situación de esta variable en la relación Ca/Si 1.8, obteniendo exactamente las condiciones HPHT a como se designaron inicialmente del caso experimental N°1.

**Figura 17**

*Evolución temporal a través del tiempo Ca/Si 1.9 caso N°1*



Nota. La ilustración manifiesta la evolución del sistema a través del tiempo de la relación Ca/Si 1.9 de las variables a) Presión, b) Densidad, c) Temperatura, d) Volumen.

Para el caso, es importante ver la variación en la densidad, principalmente, al cambiar la relación Ca/Si de 1.8 a 1.9, aumentando la cantidad y si se compara las relaciones de W/Si en la medida en que aumentan de 1.5 a 2.1 las densidades disminuyen.

### **5.1.2 Análisis propiedades mecánicas caso N°1**

En el caso de estudio se utilizaron tres variables relevantes: Módulo de Young, relación de Poisson y Módulo de Corte, y se aplicaron deformaciones constantes en los márgenes positivo y negativo a lo largo de cada uno de los ejes  $xx$ ,  $yy$ ,  $zz$ ,  $xy$ ,  $xz$ ,  $yz$ . Los ensambles NPT se utilizaron para formar la matriz elástica necesaria para calcular las propiedades anteriores. Para contextualizar con más detalle los pasos respecto a la deformación en las realizaciones, cada uno de estos pasos se realiza de una manera particular, dirigiendo cada fuerza en la dirección indicada en el eje, mientras que el otro punto permanece neutro (cero). y se mantiene a través del ensamble. Por lo tanto, se calculó si existe relación entre las fuerzas que experimenta cada modelo en los distintos componentes del tensor de presión.

El software OVITO también se utiliza para mostrar y analizar datos a nivel atómico y de partículas. Este se usó para visualizar la estructura de las partículas del gel C-S-H, lo que permitió observarlas en un entorno tridimensional para comprender mejor su estructura y distribución. Este programa también permite calcular distancias, volúmenes, áreas, entre otras variables de las partículas. Siendo útil para cuantificar propiedades importantes del cemento.

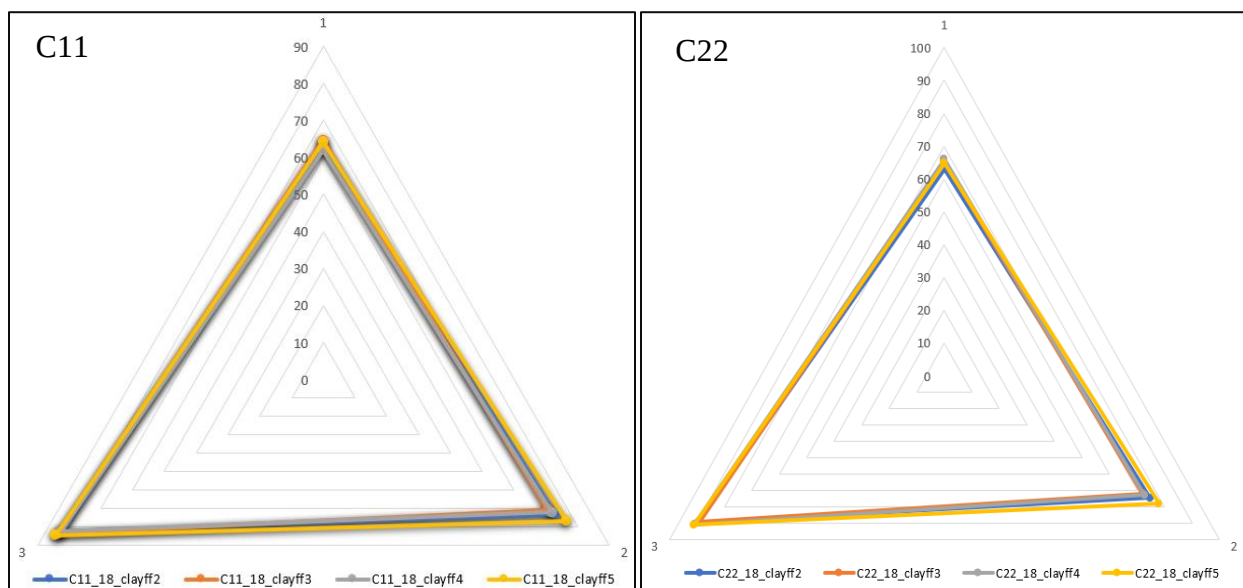
Ahora bien, conociendo el proceso de aplicación para el cálculo de las propiedades mecánicas implementando la programación de los esfuerzos mediante la matriz es relevante

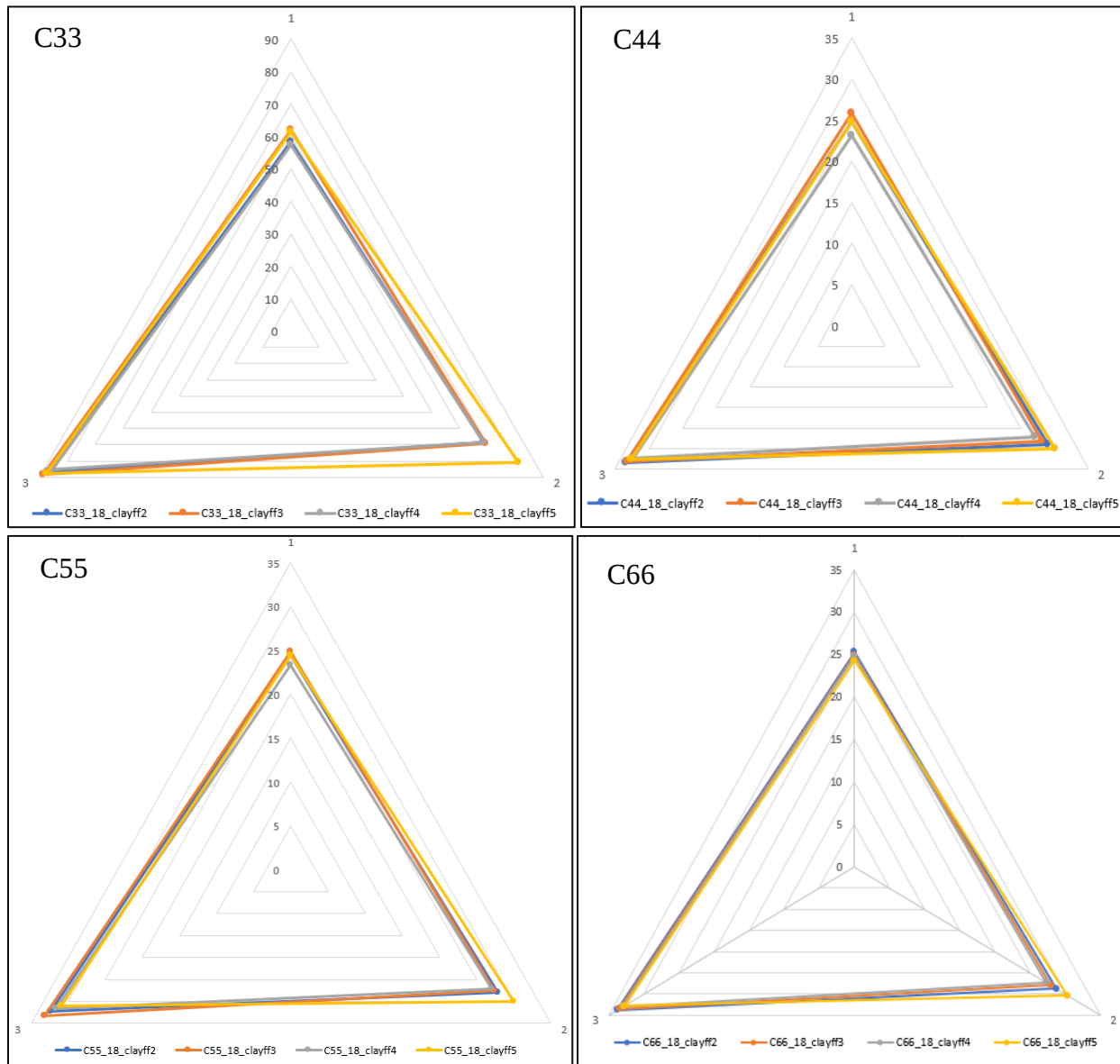
conocer la variante de las cantidades a lo largo de la diagonal principal. Esto aplica para las dos relaciones Ca/Si 1.8 y 1.9, como para las relaciones W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1, expresadas en GPa (Gigapascal).

Iniciando con el modelo Ca/Si 1.8. Al conocer los valores graficados en la Figura 18 se puede ver cómo cambian en la medida en que trascienden. Para el C11 se maneja en un rango entre (63.07 – 84.39) GPa, el C22 en (66.72 – 91.05) GPa, el C33 en (58.45 – 87.33) GPa, C44 en (24.77 - 32,59) GPa, C55 en (24.46 – 30.99) GPa, en C66 (25.32 – 32.74) GPa. De acuerdo con el concepto se afirma que para el caso las posiciones C11, C22, C33 determinan la compresión y el C44, C55, C66 determinan la tracción (Brown, 2006). Se observa un aumento para estas tres primeras variables en un rango igual o mayor a 20 GPa, mientras que para C44, C55 y C66, la variación entre las relaciones W/Si disminuye en más de la mitad. Además, el valor inicial de C44 comienza con una medida de 24.77 GPa, destacando una magnitud considerable, lo que indica la presencia de una variable distinta a las tres primeras mencionadas.

**Figura 18**

*Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.8 caso N°1*





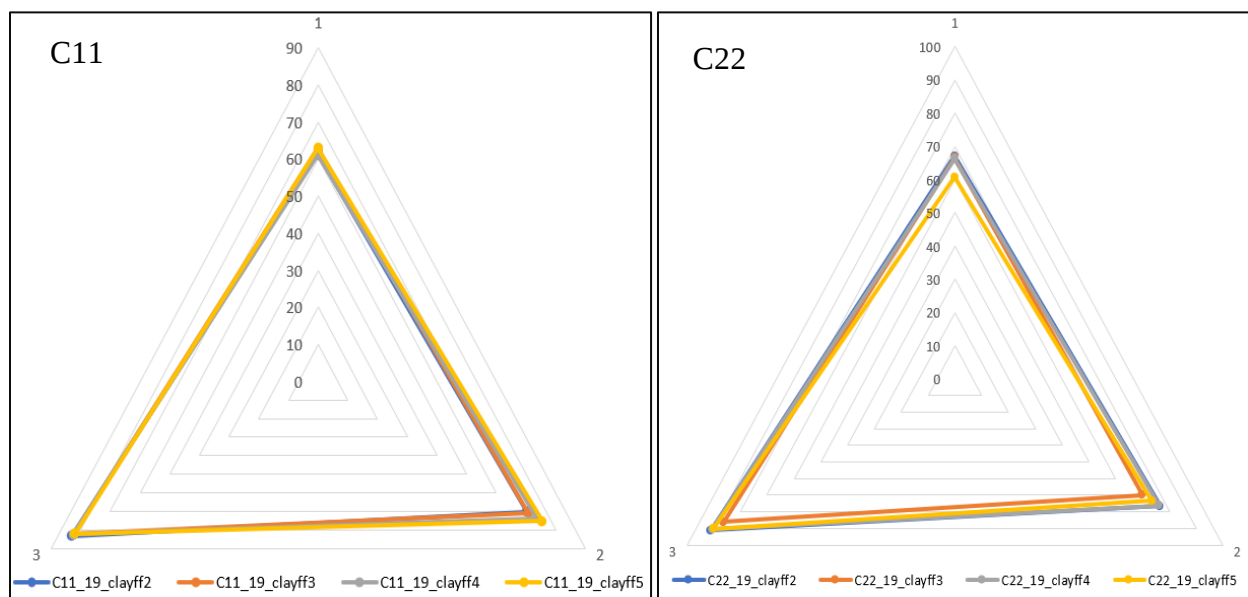
Nota. Esta es la representación gráfica de las constantes de elasticidad del cemento aplicadas en la simulación DM en el caso N°1 de la relación Ca/Si 1.8.

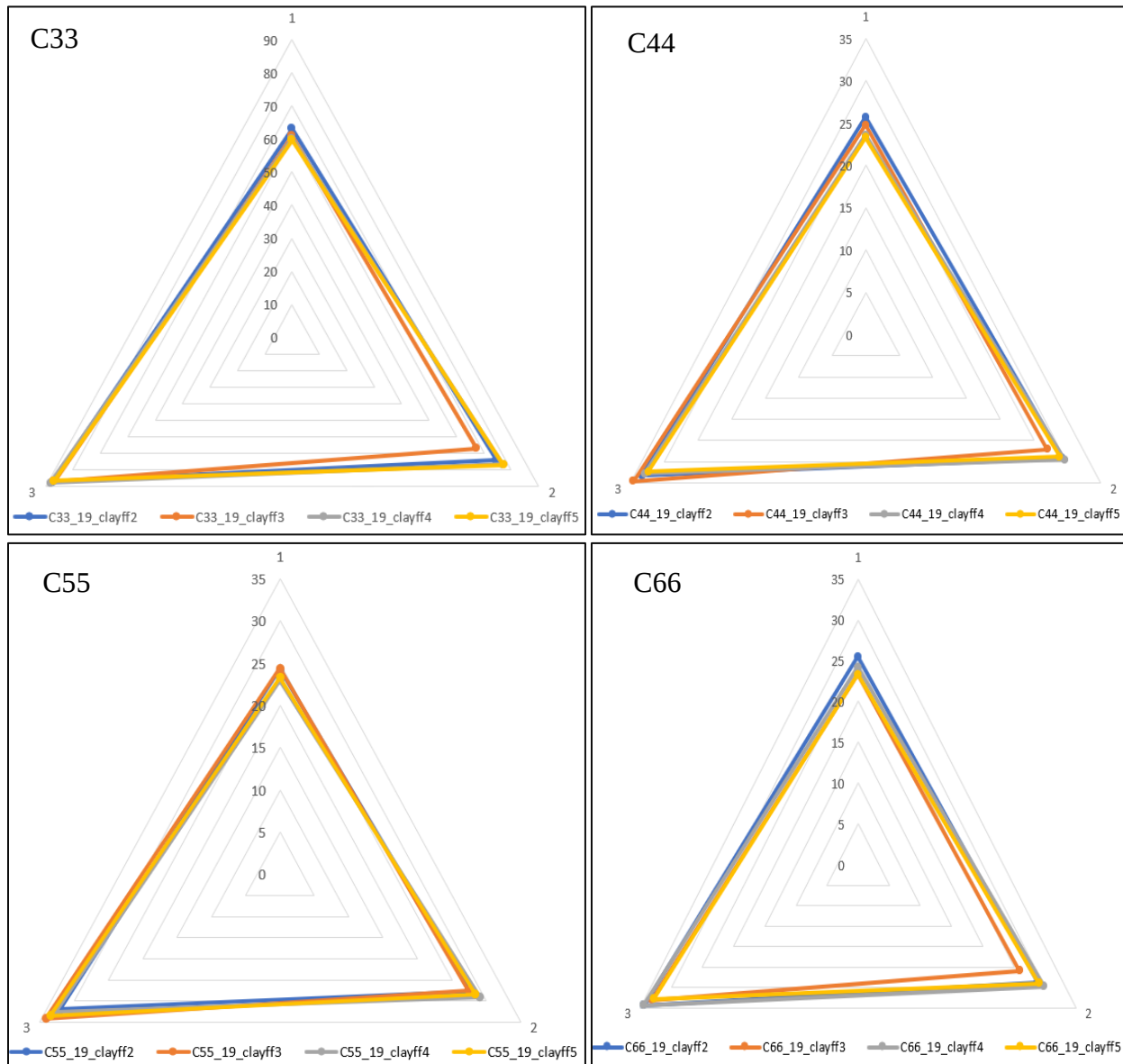
Es el turno para la relación Ca/Si 1.9 y relaciones de W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1 sus rangos vienen para C11 en (61.41 – 82.40) GPa, C22 en (67.01 – 90.10) GPa, C33 en (63.16 – 88.10) GPa, como se puede observar en la Figura 19. Inicialmente estas fuerzas de compresión tienen una cantidad mucho menor en función de la relación W/Si a la anterior que se midió con la

relación Ca/Si 1.8. Disminuyendo en un valor cercano a los 3 GPa y de la misma forma ocurre en el momento en que se llega a la relación W/Si 2.1 que se reduce en comparación con la antes vista. Para la C44 en (25.70 – 34.61) GPa, C55 en (24.27 – 34.13) GPa, C66 en (25.51 – 34.40) GPa. Se observa una situación contraria ya que los valores iniciales respecto a las cantidades calculadas al inicio de la relación W/Si que encabeza la lista mantiene cantidades muy cercanas a las fuerzas de tracción vistas para la relación Ca/Si 1.8, donde la única diferencia representativa se encuentra finalizando, obteniendo un margen cercano a los 2 GPa. Inmediatamente que se aplica este proceso en la simulación se prosigue con la determinación de las propiedades mecánicas del cemento que se están evaluando en el lapso restante en la etapa de producción.

### Figura 19

*Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.9 caso N°1*





Nota. Esta es la representación gráfica de las constantes de elasticidad del cemento aplicadas en la simulación DM en el caso N°1 de la relación Ca/Si 1.9.

#### 5.1.2.1 Módulo de Young caso N°1

Con los resultados obtenidos de las simulaciones usando el método DM, se procede validar y contrastar con las propiedades mecánicas del cemento en condiciones HPHT experimentales. Estas se tabulan (Tabla 13) y se visualizan a través de la Figura 20 para proporcionar una mejor

perspectiva sobre las variaciones de acuerdo con cada modelo con respecto a las relaciones Ca/Si y W/Si.

**Tabla 13**

*Valores del módulo de Young por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM. Caso N°1.*

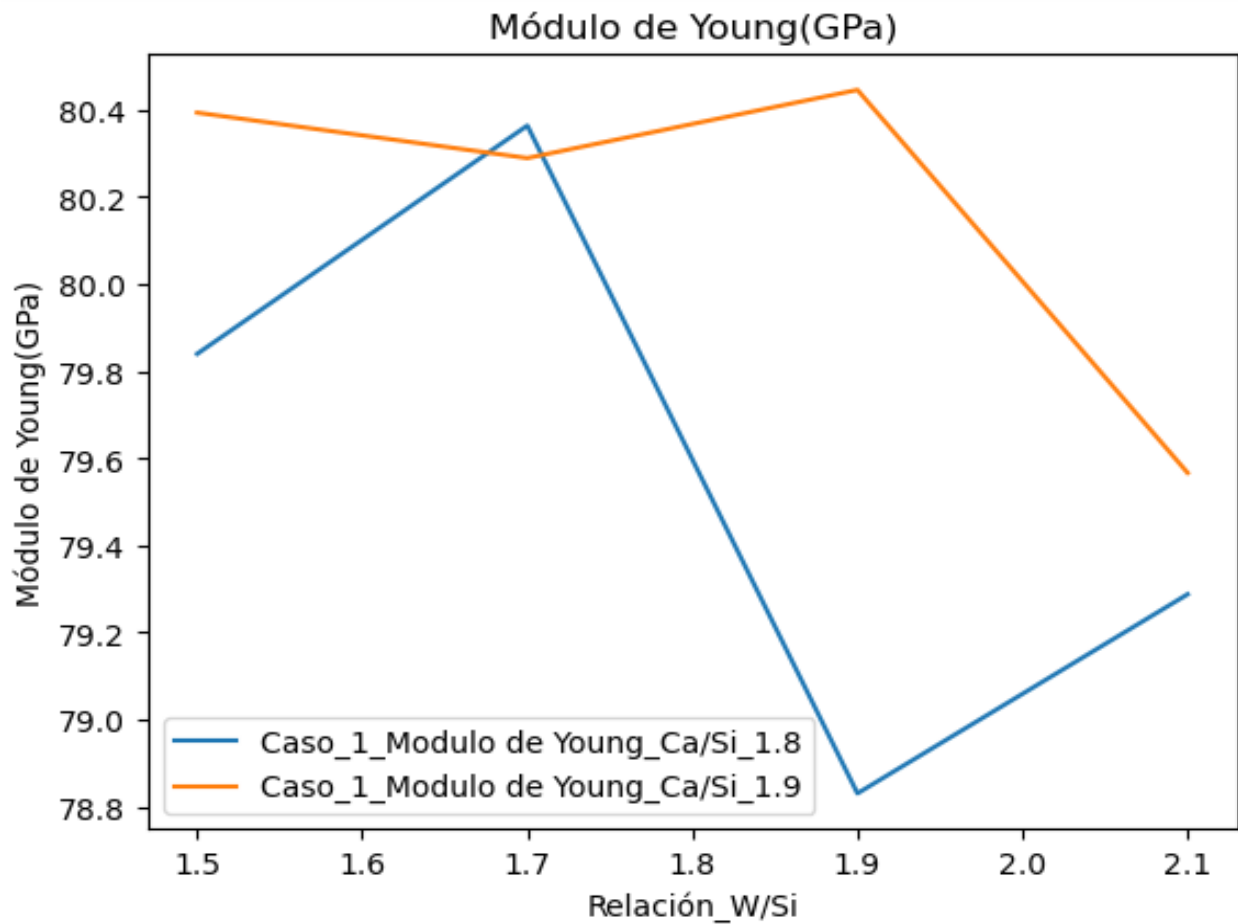
| <b>Módulo de Young (GPa)</b> |            |            |            |            |            |
|------------------------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| <b>Relación W/Si</b>         |            | <b>1.5</b> | <b>1.7</b> | <b>1.9</b> | <b>2.1</b> |
| <b>Relación Ca/Si</b>        | <b>1.8</b> | 79.840     | 80.3644    | 78.830     | 79.287     |
|                              | <b>1.9</b> | 80.394     | 80.290     | 80.446     | 79.567     |

Nota. Se describen las cantidades determinadas en el módulo de Young.

Las cantidades calculadas para ambas relaciones oscilaron entre los 78.83-80.45 GPa como se puede ver en la Figura 20. Sin embargo, para la relación Ca/Si 1.8, se mantuvo en una cantidad más constante alrededor de los 80 GPa. Al comparar esta cifra con la cantidad determinada experimentalmente en el caso de estudio (9.02 GPa para el escenario N°1 con un tiempo de curado de 7 horas y 9.92 GPa para el escenario N°2 con un fraguado de 24 horas), se observa una notable diferencia en los valores del módulo de Young. La disparidad podría atribuirse a diversas razones, entre las cuales se destaca que los modelos simulados solo contemplan el gel C-S-H y no abarcan todos los componentes del cemento en su totalidad.

**Figura 20**

*Módulo de Young caso N°1*



Nota. La gráfica representa la variante que se dio en la simulación DM cuando se da la medición del módulo de Young a medida en que se tiene la relación Ca/Si cuando incrementa la relación W/Si de 1.5 a 2.1.

#### 5.1.2.2 Relación de Poisson caso N°1

Para la relación de Poisson (Tabla 14, Figura 21), los cálculos de la simulación han proporcionado valores que varían en un rango de 0,01 entre las dos relaciones Ca/Si. Al comparar estos datos con las cantidades calculadas experimentalmente, se observa una estrecha correlación, especialmente para el escenario experimental N°1, que tiene un tiempo de curado de 7 horas, donde la relación Ca/Si 1.8 y W/Si 2.1 alcanzan una concordancia precisa con un valor de 0.1886.

Mientras que, para el tiempo de fraguado de 24 horas, se presenta un rango de diferencia fluctuante de (0.01-0.02), considerándose un valor bastante cercano en relación con el simulado.

**Tabla 14**

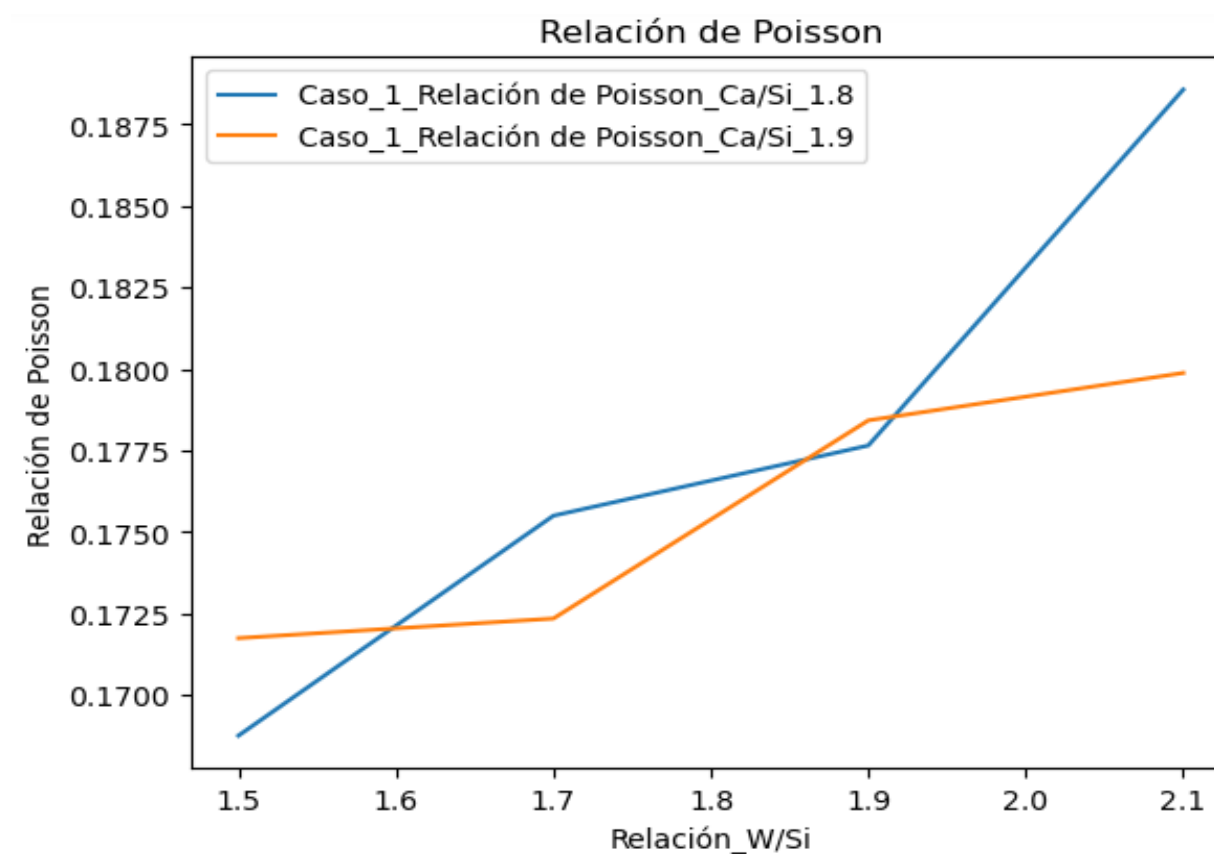
*Valores del módulo de Young por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM. Caso N°1.*

| Relación de Poisson |     |        |        |        |        |
|---------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| Relación W/Si       |     | 1.5    | 1.7    | 1.9    | 2.1    |
| Relación Ca/Si      | 1.8 | 0.1688 | 0.1755 | 0.1777 | 0.1886 |
|                     | 1.9 | 0.1717 | 0.1723 | 0.1784 | 0.1799 |

Nota. Se describen las cantidades determinadas en la relación de Poisson.

**Figura 21**

*Relación de Poisson caso N°1*



Nota. La gráfica representa la variante que se dio en la simulación DM cuando se da la medición de la relación de Poisson a medida en que se tiene la relación Ca/Si cuando incrementa la relación W/Si de 1.5 a 2.1.

### 5.1.2.3 Módulo de corte caso N°1

Para el módulo de corte (Tabla 15, Figura 22) en relación con la simulación, las diferencias entre las relaciones Ca/Si son mínimas, siendo inferiores a 1 GPa. Esta disminución en 1 GPa en la diferencia es menor que la observada en el módulo de Young al comparar las relaciones Ca/Si. Al contrastar los resultados de la simulación con los datos experimentales, se encuentra una variación de aproximadamente 30 GPa para la relación Ca/Si 1.9 y 29 GPa para la relación Ca/Si 1.8. Esto motiva una exploración más profunda entre la relación de las propiedades mecánicas del componente principal del cemento (gel C-S-H) y el comportamiento mecánico del cemento en su conjunto.

**Tabla 15**

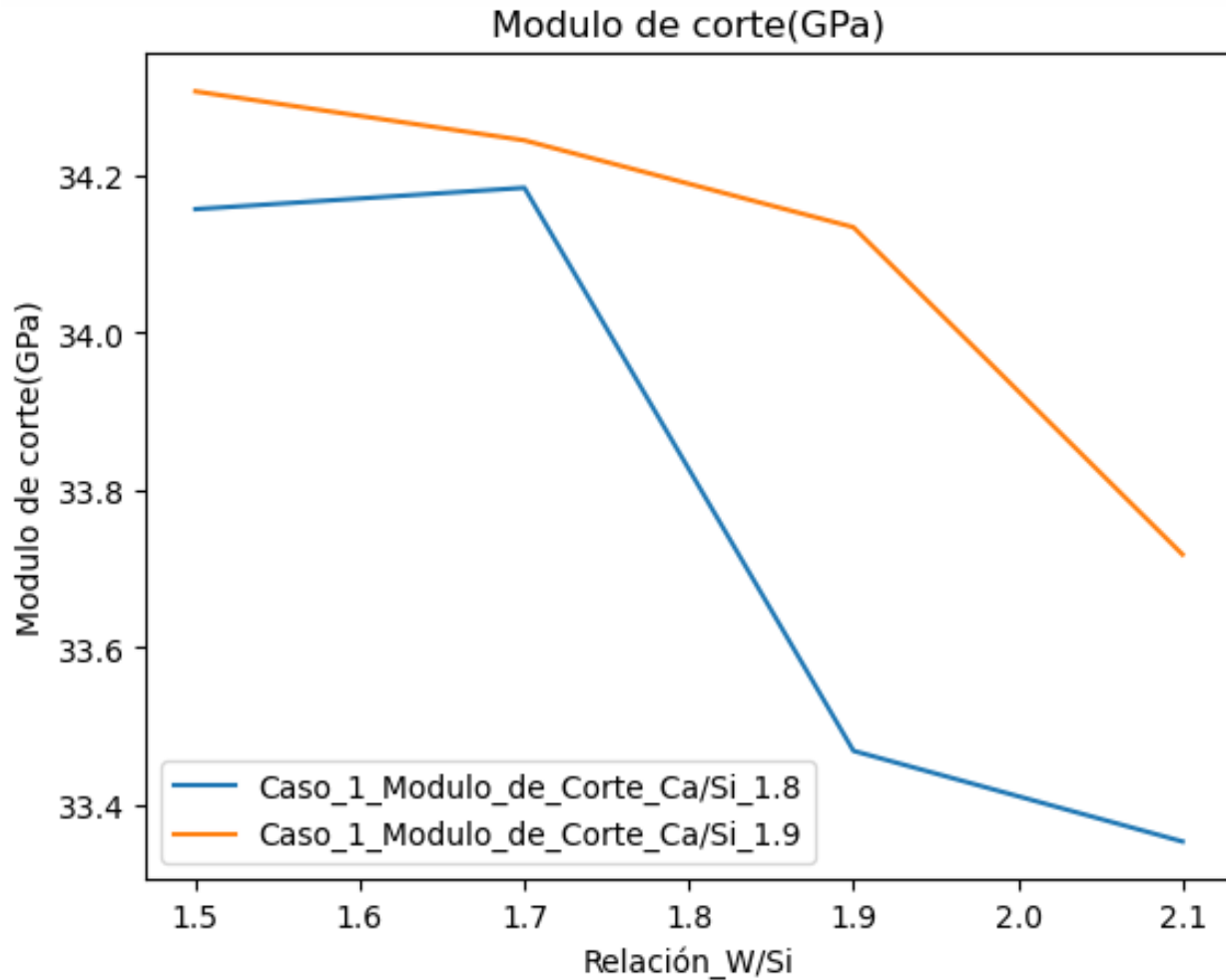
*Valores del módulo de corte por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM. Caso N°1.*

| Módulo de Corte (GPa) |     |        |        |        |        |
|-----------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| Relación W/Si         |     | 1.5    | 1.7    | 1.9    | 2.1    |
| Relación Ca/Si        | 1.8 | 34.156 | 34.183 | 33.469 | 33.354 |
|                       | 1.9 | 34.305 | 34.243 | 34.133 | 33.718 |

Nota. Se describen las cantidades determinadas en el módulo de corte.

**Figura 22**

*Módulo de corte caso N°1*



Nota. La gráfica representa la variante que se dio en la simulación DM cuando se da la medición del módulo de corte a medida en que se tiene la relación Ca/Si cuando incrementa la relación W/Si de 1.5 a 2.1.

## 5.2 Análisis de resultados Caso N°2

### Comparación del módulo elástico entre el cemento clase G y el cemento geopolímero en condiciones HPHT.

Este nuevo caso, también escogido como caso base de la literatura, modifica moderadamente los valores tomados en la temperatura, estos fueron planteados con las mismas características de relaciones Ca/Si y W/Si que el caso anterior.

### 5.2.1 Seguimiento al sistema caso N°2

Para el caso N°2 se simuló el modelo de Ca/Si 1.9 con distintas relaciones W/Si (1.5; 1.7; 1.9; 2.1), mediante las simulaciones se obtienen resultados de las energías principales que indican el comportamiento del sistema, tales como energía potencial, energía cinética, energía de coulomb y energía de van Der Waals.

La energía potencial es negativa lo que indica que el trabajo realizado sobre el campo queda almacenado en forma de energía potencial, y este trabajo será devuelto por el campo cuando el sistema se deje en libertad, es decir que el propio campo realiza el trabajo para obtener dicha distribución de cargas que da como resultado puntos de menor energía potencial. Ahora bien, al aumentar la relación W/Si aumenta la energía potencial.

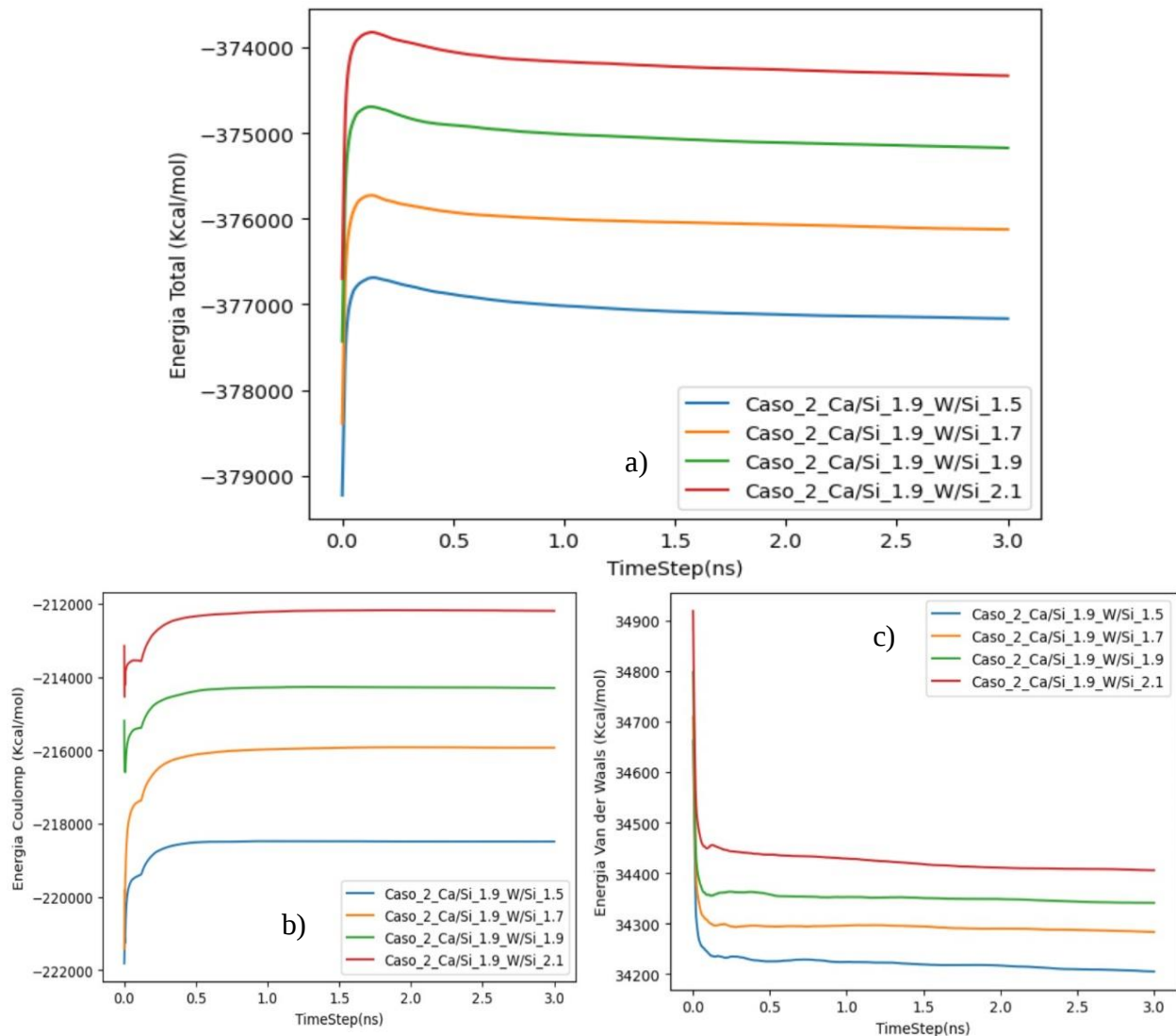
Para que un cuerpo cambie de energía cinética tiene que cambiar su distribución en el espacio, sus coordenadas; si se toma como ejemplo una partícula en reposo que adquiere velocidad para cambiar su posición, esta adquiere energía cinética para realizar el cambio, por lo que entre mayor sea la variación de la posición más energía cinética requerirá para hacerlo.

La ley de coulomb explica que el trabajo que realiza una partícula que se desplaza de un punto a otro depende de la ubicación de los puntos (inicio-fin) más no del resto de detalles del camino (Energía de Coulomb, 2019), conservando las fuerzas y siendo esta la diferencia de trabajos del punto inicial y el punto de llegada. Como es de esperar su valor aumentará junto a la relación W/Si más altas, representada en la figura 17 c).

La energía de van Der Waals representa las fuerzas de atracción y repulsión entre moléculas como lo ilustra la Figura 23 c), esta disminuye en proporción a relaciones W/Si más bajas y tiende a mantenerse como constante.

### Figura 23

*Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.9 caso N°2*



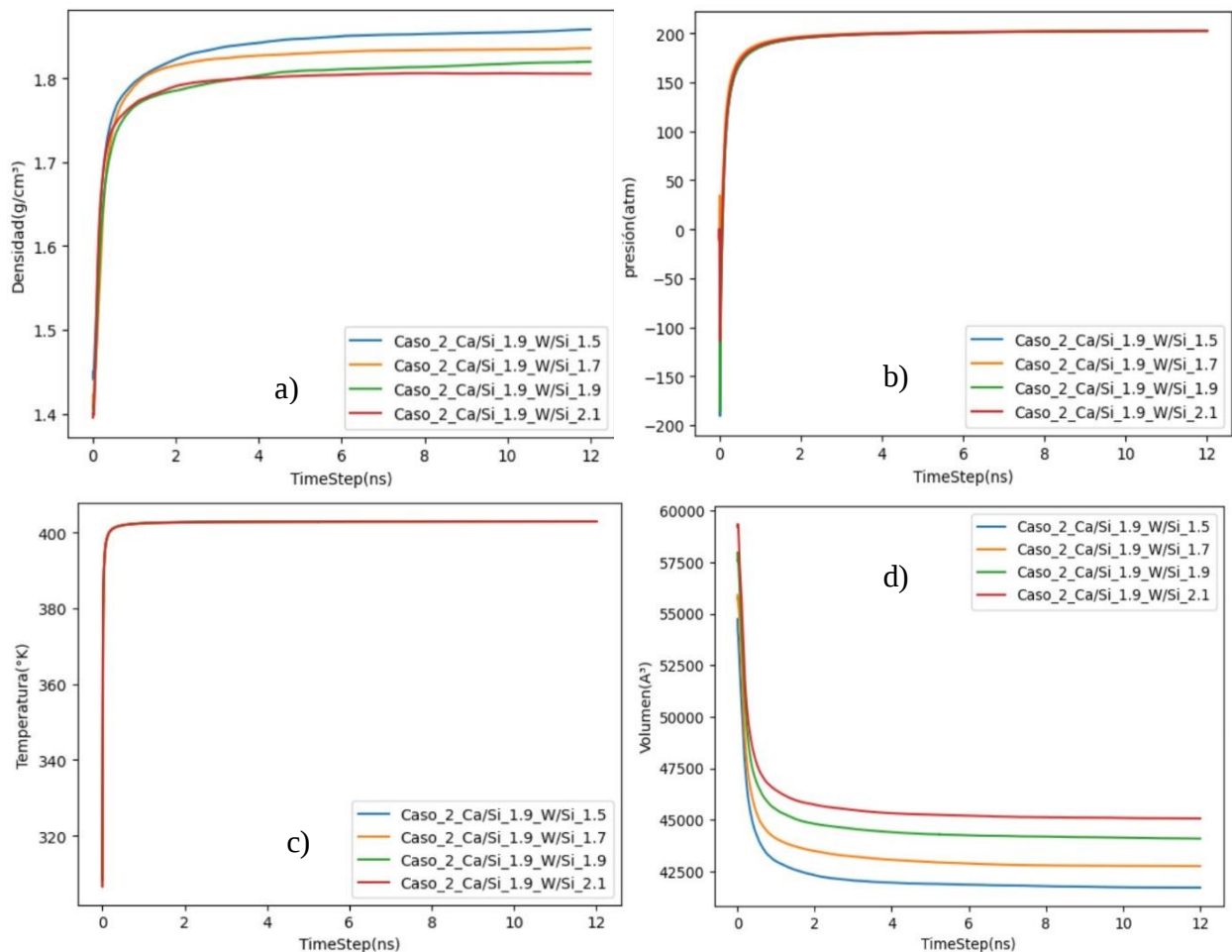
Nota. La figura 23 hace referencia al seguimiento que se realiza al sistema de la relación Ca/Si 1.9 en las variables. a) Energía total, b) Energía de Van Der Waals, c) Energía de Coulomb.

Continuando con el modelo para la relación Ca/Si 1.9 y W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1 los parámetros de presión y temperatura se mantienen constantes como se le indicó para la simulación. Como es de esperar las relaciones que tienen una alta densidad presentan bajos valores de volumen y estos tienden a estabilizarse con mayor tiempo de simulación. En lo que

respecta a los valores de volumen, son mayores con respecto al caso N°1 teniendo valores de  $42500 \text{ \AA}^3$  a  $47500 \text{ \AA}^3$  estos intentan la estabilización en tiempos mayores a 1.5 ns. Mientras que la densidad varia en un intervalo de  $(1,85 - 1,79) \text{ g/cm}^3$ , en lo que si se compara con el aumento de las relaciones W/Si esta funciona inversamente disminuyendo sus valores, característica que se comparte haciendo referencia al caso N°1.

**Figura 24**

*Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.9 caso N°2*

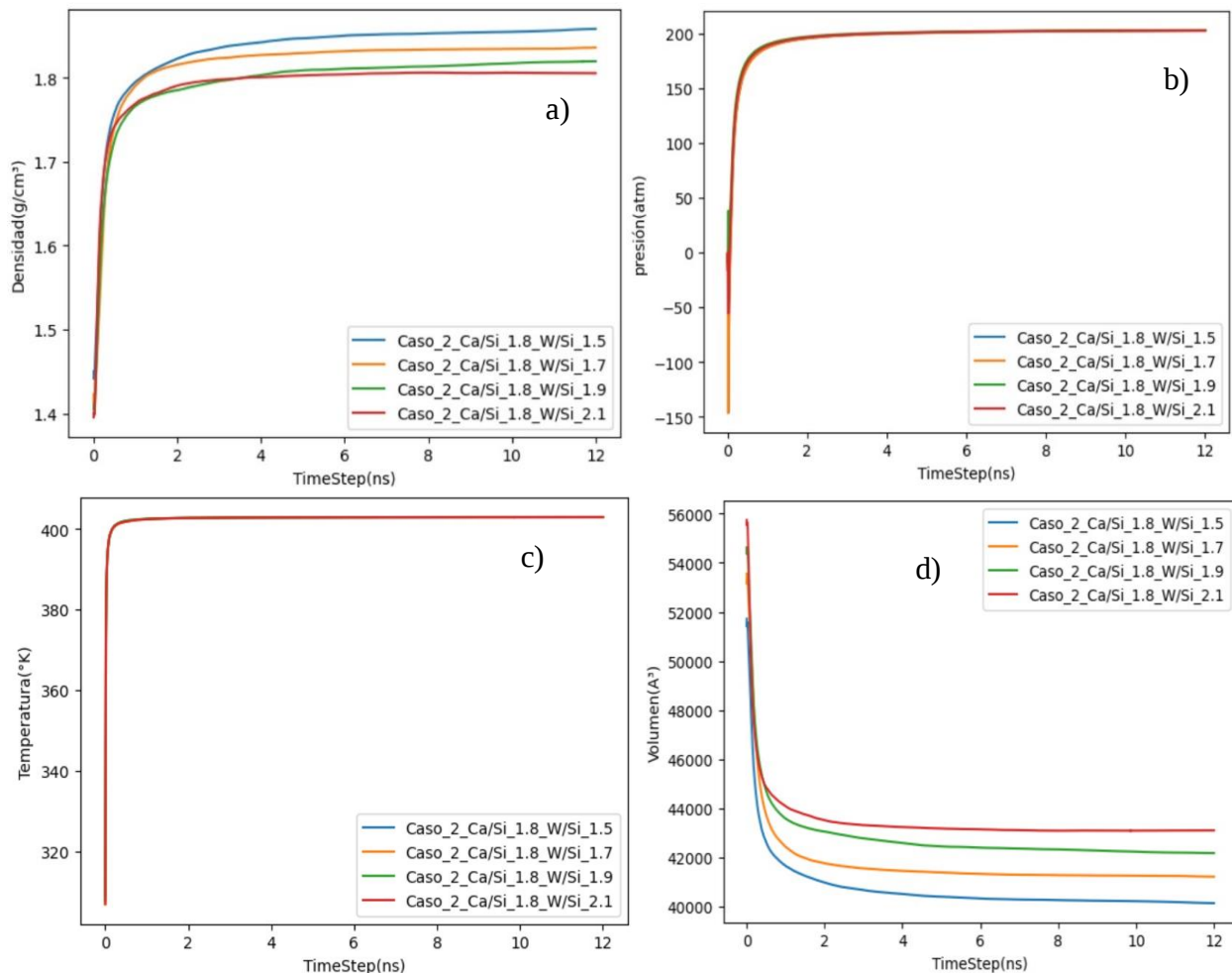


Nota. La ilustración manifiesta la evolución del sistema a través del tiempo de la relación Ca/Si 1.9 de las variables a) Presión, b) Densidad, c) Temperatura, d) Volumen.

En el caso N°2 se realizó la simulación para del sistema con la relación Ca/Si 1.8 y relaciones W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1. Los valores del volumen son más bajos con respecto a la relación Ca/Si 1.9 oscilando en valores de  $40000 \text{ \AA}^3$  a  $45000 \text{ \AA}^3$ . Se mantiene la presión y temperatura constante por lo anteriormente mencionado. Ahora como se puede observar, la densidad al igual que el volumen en la medida en que transcurre el tiempo esta fluctua respecto a cada relación W/Si una vez se estabiliza, con valores que van desde  $(1,83 - 1,78) \text{ g/cm}^3$ , disminuyendo de manera proporcional en la medida en que las relaciones Ca/Si descienden.

**Figura 25**

*Seguimiento al sistema relación Ca/Si 1.8 caso N°2*



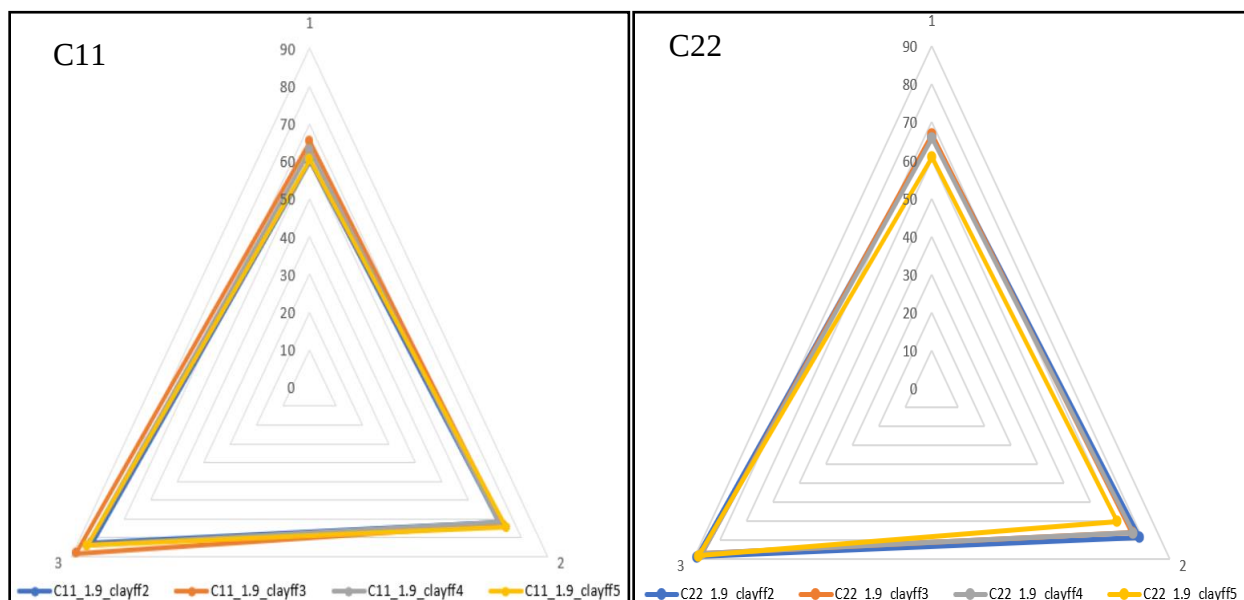
Nota. La ilustración manifiesta la evolución del sistema a través del tiempo de la relación Ca/Si 1.8 de las variables a) Presión, b) Densidad, c) Temperatura, d) Volumen.

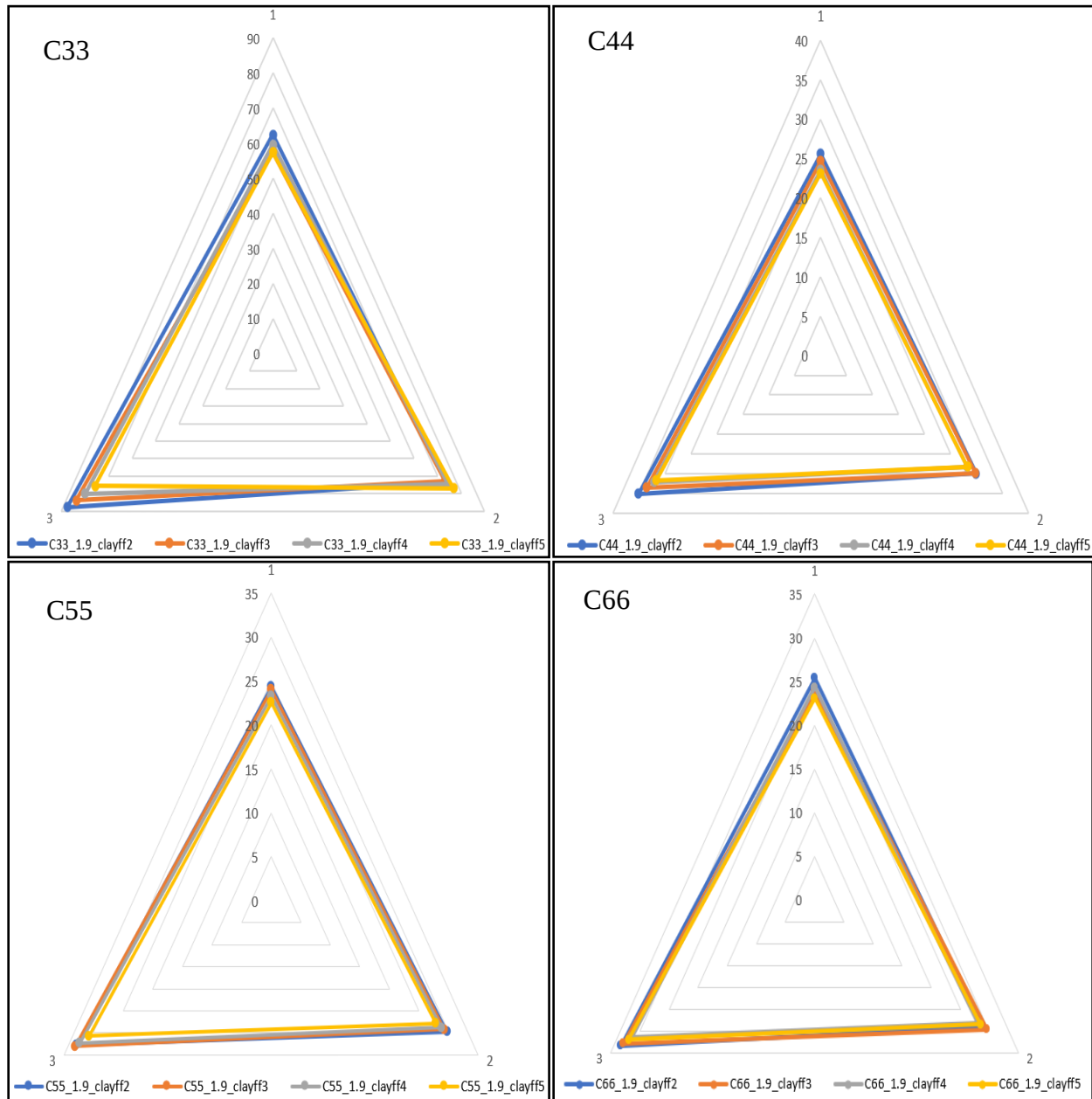
### 5.2.2 Análisis propiedades mecánicas caso N°2

Se realizó el cálculo de las propiedades mecánicas de cada una de las estructuras basado en la determinación de los componentes que hacen parte de la matriz de elasticidad, para la relación Ca/Si 1.9 se conocen valores de esfuerzos que cambian en la medida en que trascienden para el C11 se maneja en un rango entre (60.09-88.31) GPa, el C22 en (60.82-88.77) GPa, el C33 en (57.31-87.55) GPa, C44 en (23.13-35.10) GPa, C55 en (22.53-32.81) GPa, en C66 (23.11-33.28) GPa. De acuerdo con (Brown, 2006) quien afirma que para los elementos C11, C22, C33 determinan la compresión, en igual forma los componentes C44, C55, C66 determinan la tracción; se ve reflejado como los elementos C11, C22, C33 son un 58% superior en gran parte de los datos, por lo tanto, se comprende preeminencia del modelo hacia la compresión que hacia la tracción.

**Figura 26**

*Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.9 caso N°2*





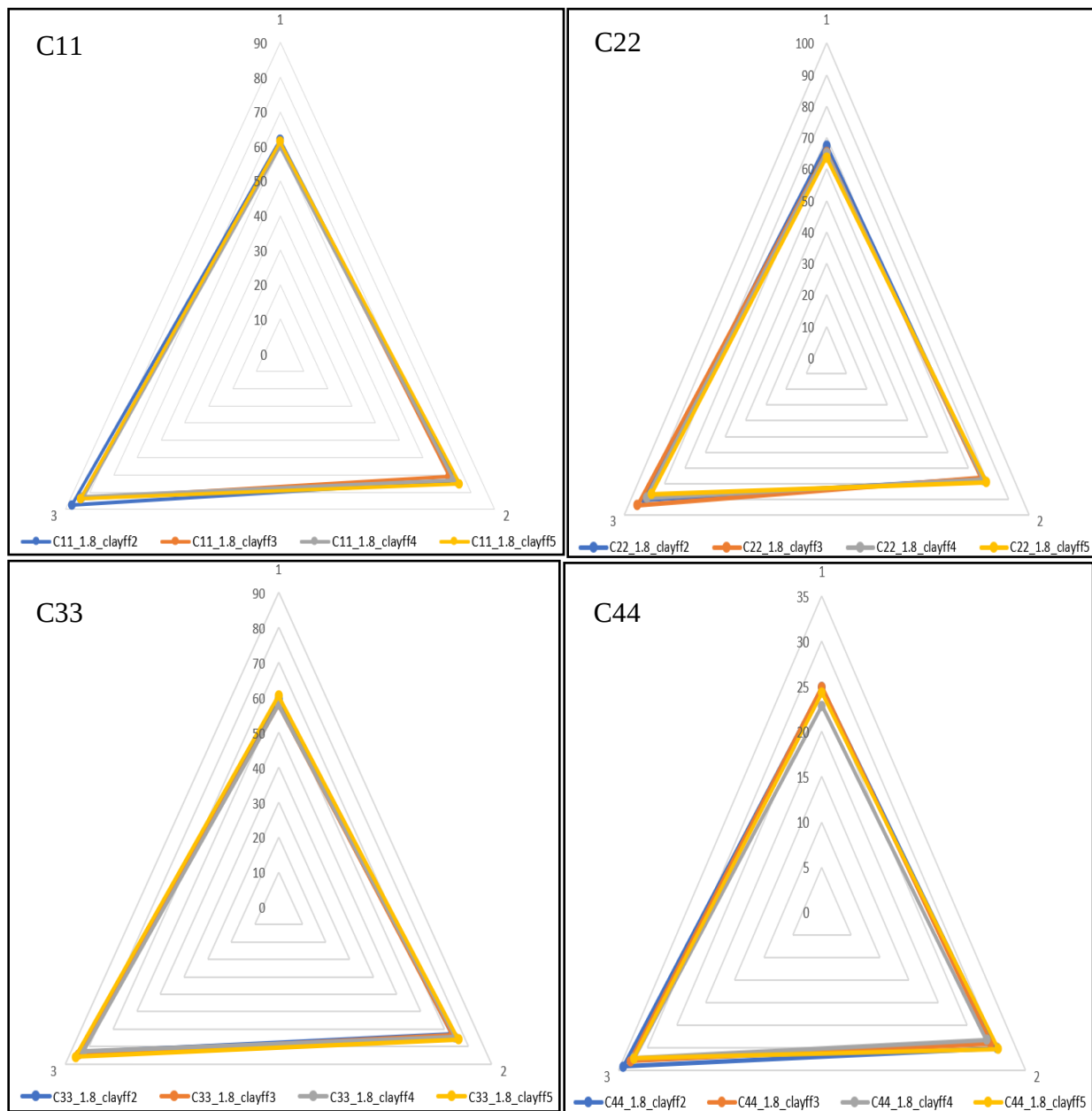
Nota. Esta es la representación gráfica de las constantes de elasticidad del cemento aplicadas en la simulación DM en el caso N°2 de la relación Ca/Si 1.9.

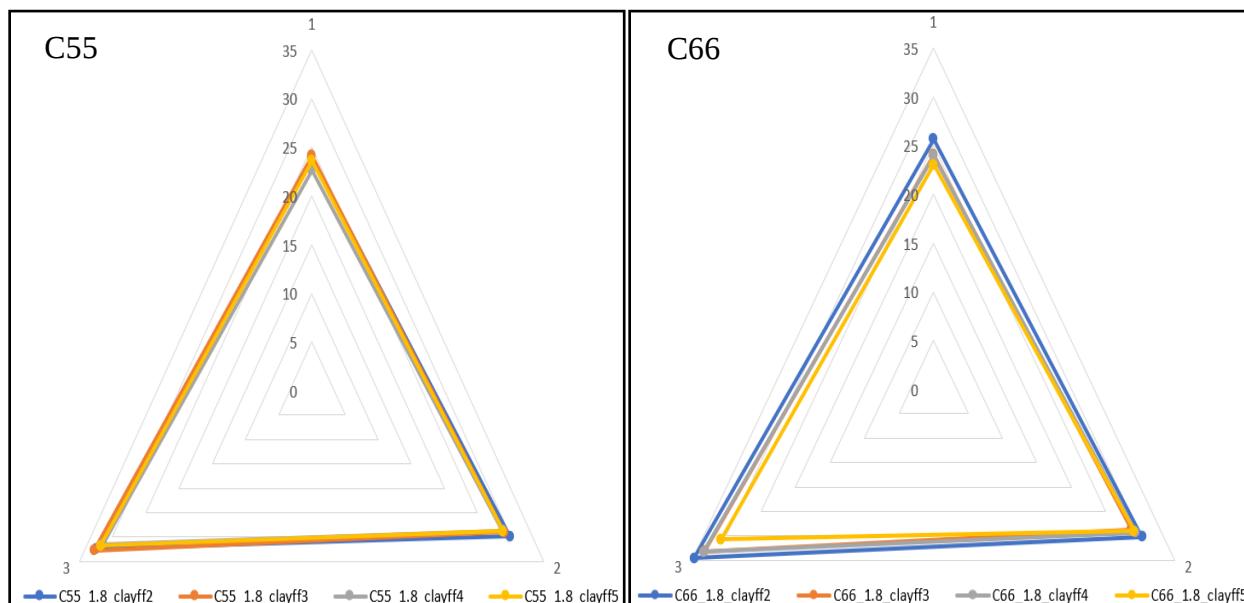
Luego para la relación Ca/Si 1.8 y relaciones de W/Si 1.5, 1.7, 1.9, 2.1 sus rangos vienen para C11 en (60,02 – 87,37) GPa, C22 en (63.65-93.54) GPa, C33 en (57.84-85.72) GPa. Inicialmente estas fuerzas de compresión tienen una magnitud mayor en función de la relación

W/Si a la anterior que se midió con la relación Ca/Si 1.9. Disminuyendo en un valor cercano a los 5 GPa. Para la C44 en (22.86-34.14) GPa, C55 en (22.68-32.80) GPa, C66 en (23.04-34.63) GPa. Se observa valores muy cercanos en los que respecta a la tracción y sus componentes C44, C55 y C66.

**Figura 27**

*Constantes de elasticidad del cemento relación Ca/Si 1.8 caso N°2*





Nota. Esta es la representación gráfica de las constantes de elasticidad del cemento aplicadas en la simulación DM en el caso N°2 de la relación Ca/Si 1.9.

En la Tabla 16, se evidencian las constantes elásticas del modelo con relación Ca/Si 1.8 para ambos casos base, los valores de los componentes de la matriz elásticas son cercanos difiriendo dentro (2 a 3) GPa en la mayoría de los valores. Haciendo cercana la diferencia entre relaciones Ca/Si.

**Tabla 16**

*Esfuerzos según su dirección en Ca/Si 1.8*

| Ca/Si 1.8  |       |       |       |       |
|------------|-------|-------|-------|-------|
| Componente | Caso1 |       | Caso2 |       |
| C11        | 63.07 | 84.39 | 60.02 | 87.37 |
| C22        | 66.72 | 91.05 | 63.65 | 93.54 |
| C33        | 58.45 | 87.33 | 57.84 | 85.72 |
| C44        | 24.77 | 32.59 | 22.86 | 34.14 |
| C55        | 24.46 | 30.99 | 22.68 | 32.8  |
| C66        | 25.32 | 32.74 | 23.04 | 34.63 |

Nota. Se tiene la descripción tabulada de los esfuerzos según su dirección en la relación Ca/Si 1.8.

En la Tabla 17, se observa una discrepancia máxima de 6 GPa en el caso del esfuerzo en la posición C11 para el modelo con relación Ca/Si de 1.9, se puede afirmar que el caso dos es relativamente más estable dada la cercanía de sus diferentes componentes de la matriz elástica.

**Tabla 17**

*Esfuerzos según su dirección en Ca/Si 1.9.*

| Ca/Si 1.9  |       |       |       |       |
|------------|-------|-------|-------|-------|
| Componente | Caso1 |       | Caso2 |       |
| C11        | 61.41 | 82.4  | 60.09 | 88.31 |
| C22        | 67.01 | 90.1  | 60.82 | 88.77 |
| C33        | 63.16 | 88.1  | 57.31 | 87.55 |
| C44        | 25.7  | 34.61 | 25.62 | 35.1  |
| C55        | 24.27 | 34.13 | 22.53 | 33.08 |
| C66        | 25.51 | 34.40 | 23.11 | 33.28 |

Nota. Se tiene la descripción tabulada de los esfuerzos según su dirección en Ca/Si 1.9.

#### 5.2.2.1 Módulo de Young caso N°2

El módulo de Young (Tabla 18, Figura 28) caracteriza el comportamiento elástico de un material, por lo que se podría definir como la magnitud de la resistencia a la compresión o tensión a una fuerza en una o varias direcciones. Comparando con los valores experimentales que oscilan alrededor de 15 GPa, y los obtenidos por simulación (79 GPa en promedio), se observa una discrepancia muy alta lo que nos incita a indagar las causas ya sea en los del procedimiento, campos o propiedades que puedan alterar estos resultados tanto en la simulación como en lo experimental. Como se mencionaba en el anterior análisis, la resistencia a la deformación disminuye en medida que la relación W/Si aumenta, al igual que el caso de la relación Ca/Si al incrementar causa disminución.

**Tabla 18**

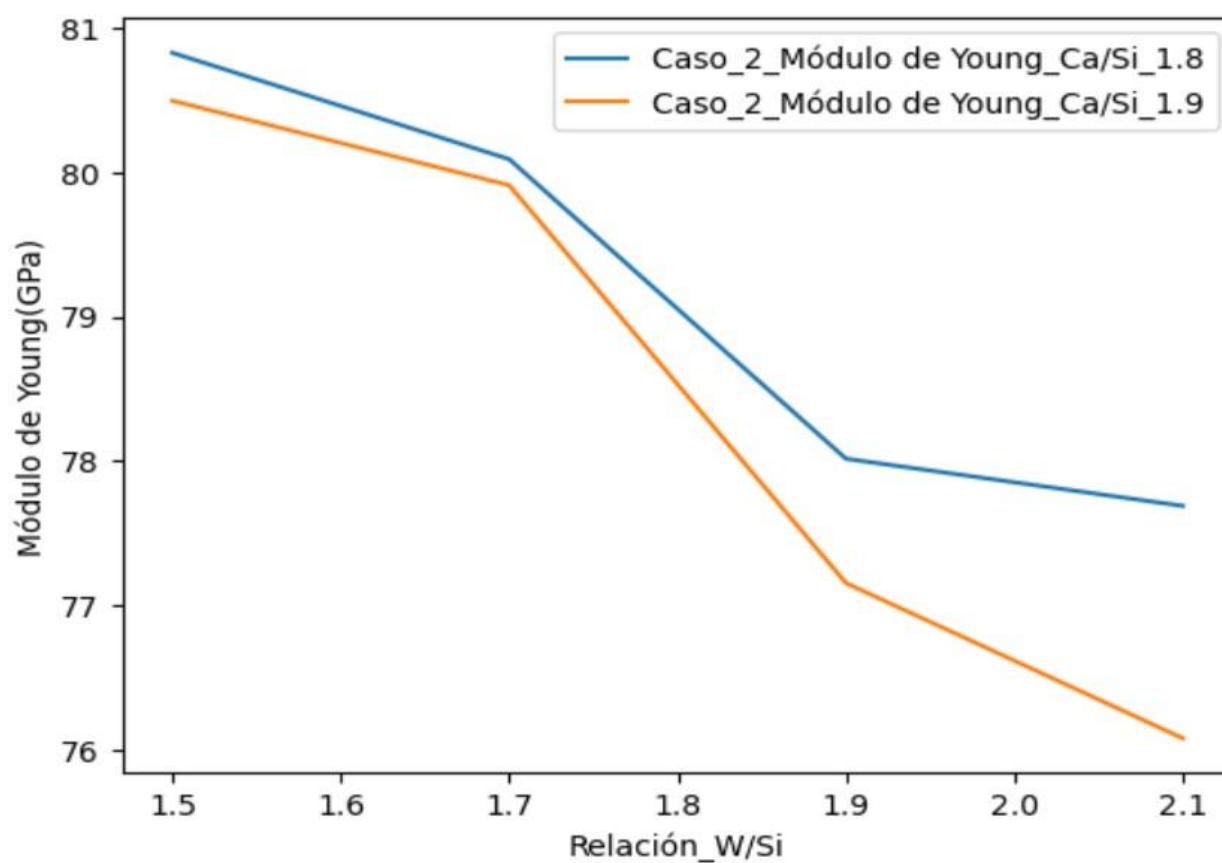
Valores del módulo de Young por relación Ca/Si y W/Si determinados por la simulación DM. Caso N°2.

| Módulo de Young (GPa) |     |        |        |        |        |
|-----------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| Relación W/Si         |     | 1.5    | 1.7    | 1.9    | 2.1    |
| Relación Ca/Si        | 1.8 | 80.829 | 80.092 | 78.150 | 77.688 |
|                       | 1.9 | 80.497 | 79.911 | 77.153 | 76.077 |

Nota. Se describen las cantidades determinadas en el módulo de Young.

**Figura 28**

Módulo de Young caso N°2



Nota. La gráfica representa la variante que se dio en la simulación DM cuando se da la medición del módulo de Young a medida en que se tiene la relación Ca/Si cuando incrementa la relación W/Si de 1.5 a 2.1.

### 5.2.2.2 Relación de Poisson caso N°2

Es la razón entre la deformación lateral y deformación longitudinal. Para la relación de Poisson los valores experimentales oscilan en un valor de 0.294; y los resultados obtenidos por cada relación varían de (0.16-0.1861), como se puede ver en la Tabla 18 y Figura 29. Dejando en evidencia que a mayor relación Ca/Si menor es la relación de Poisson y a medida que sea mayor la relación W/Si esta aumentará.

**Tabla 19**

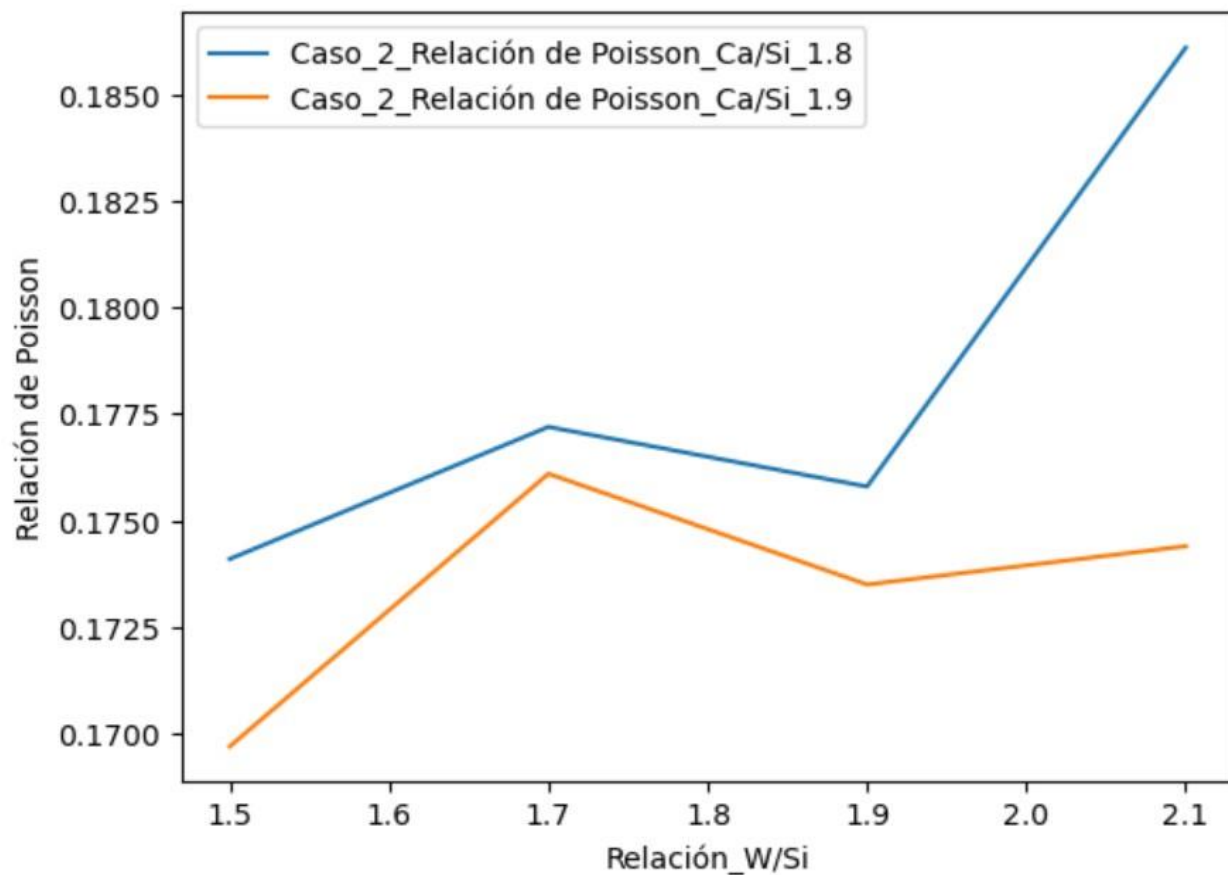
*Relación de Poisson por relación valores determinados por la simulación DM. Caso N°2*

| Relación de Poisson |     |        |        |        |        |
|---------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| Relación W/Si       |     | 1.5    | 1.7    | 1.9    | 2.1    |
| Relación Ca/Si      | 1.8 | 0.1741 | 0.1772 | 0.1758 | 0.1861 |
|                     | 1.9 | 0.1697 | 0.1761 | 0.1735 | 0.1744 |

Nota. Se describen las cantidades determinadas de la relación de Poisson.

**Figura 29**

*Relación de Poisson Caso N°2*



Nota. La gráfica representa la variante que se dio en la simulación DM cuando se da la medición de la relación de Poisson a medida en que se tiene la relación Ca/Si cuando incrementa la relación W/Si de 1.5 a 2.1.

### 5.2.2.3 Módulo de Corte caso N°2

El módulo de corte es un promedio entre los módulos de corte Voight ( $G_v$ ) y Corte Reuss ( $G_r$ ) obtenidos en los resultados de la simulación. En la tabla 20 se ilustra los resultados obtenidos en cada una de las relaciones expuestas. Valores que tienden a disminuir con el aumento de las relaciones W/Si y disminuyen con el aumento de la relación Ca/Si.

**Tabla 20**

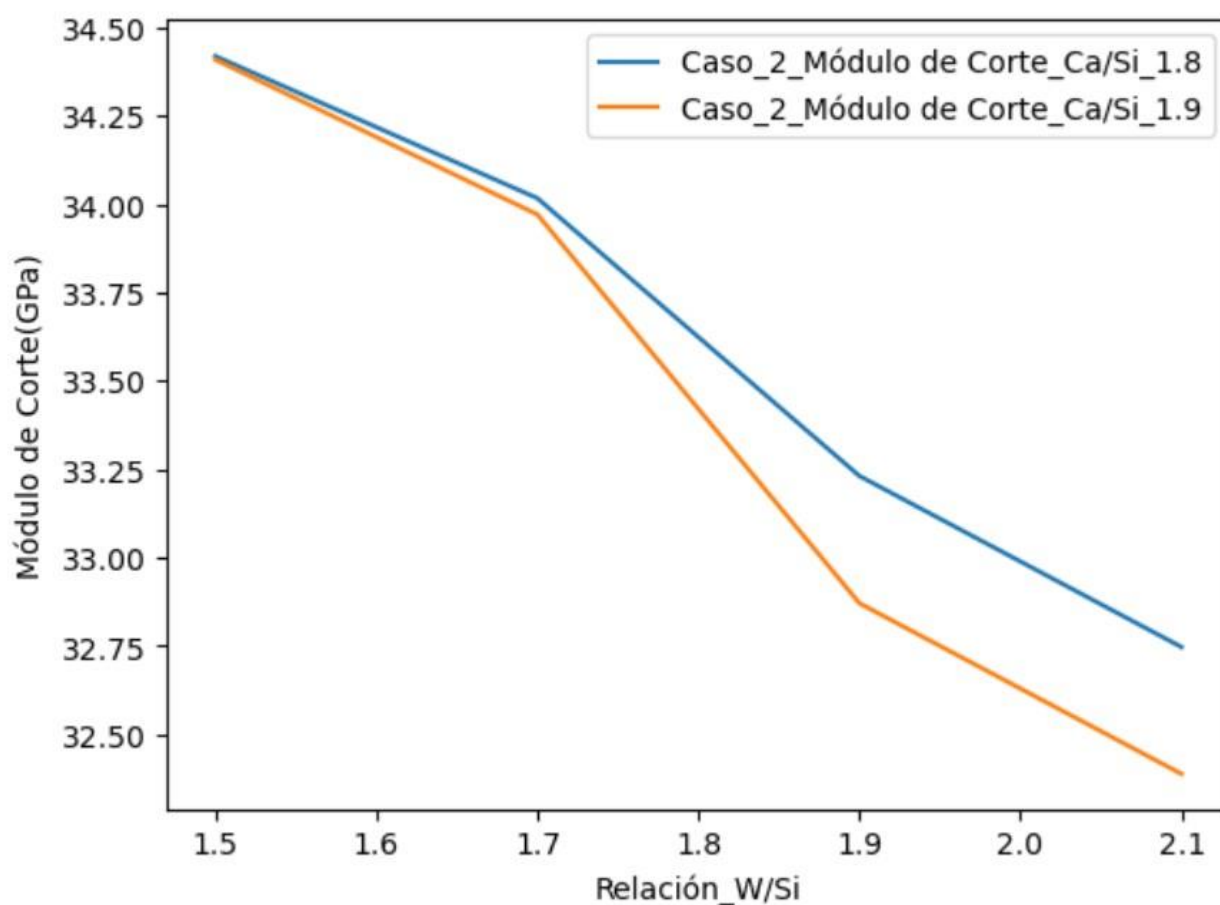
*Módulo de corte valores determinados por la simulación DM.*

| Módulo de corte (GPa) |     |        |        |        |        |
|-----------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| Relación W/Si         |     | 1.5    | 1.7    | 1.9    | 2.1    |
| Relación Ca/Si        | 1.8 | 34.419 | 34.017 | 33.231 | 32.747 |
|                       | 1.9 | 34.409 | 33.971 | 32.871 | 32.388 |

Nota. Se describen las cantidades determinadas del módulo de corte.

**Figura 30**

*Módulo de corte caso N°2*



Nota. La gráfica representa la variante que se dio en la simulación DM cuando se da la medición de la relación de Poisson a medida en que se tiene la relación Ca/Si cuando incrementa la relación W/Si de 1.5 a 2.1.

### 5.3 Discusión de resultados simulación DM

A partir de cada caso se citan nuevamente los resultados obtenidos de las propiedades mecánicas, calculadas experimentalmente y las determinadas empleando la simulación con DM. Con los valores más cercanos respecto a cada estudio.

*Tabla 21*

*Comparación de valores en las propiedades mecánicas determinadas*

| <b>Caso experimental N°1 (Presión 3000 psi, Temperatura 120 °C)</b>    |                            |                                                   |
|------------------------------------------------------------------------|----------------------------|---------------------------------------------------|
| <b>Módulo Young (GPa)</b>                                              | <b>Relación de Poisson</b> | <b>Módulo de corte (GPa)</b>                      |
| 9.0275                                                                 | 0.1886                     | 4.1938                                            |
| <b>Caso simulado con DM N°1 (Presión 3000 psi, Temperatura 120 °C)</b> |                            |                                                   |
| <b>Módulo Young (GPa)</b>                                              | <b>Relación de Poisson</b> | <b>Módulo de corte (GPa)</b>                      |
| 78.830                                                                 | 0.1886                     | 33.469                                            |
| <b>Caso experimental N°2 (Presión 3000 psi, Temperatura 130 °C)</b>    |                            |                                                   |
| <b>Módulo Young (GPa)</b>                                              | <b>Relación de Poisson</b> | <b>Módulo de corte (GPa)</b>                      |
| 13.17                                                                  | 0.25                       | Para el caso experimental N°2 no fue calculado    |
| <b>Caso simulado con DM N°2 (Presión 3000 psi, Temperatura 130 °C)</b> |                            |                                                   |
| <b>Módulo Young (GPa)</b>                                              | <b>Relación de Poisson</b> | <b>Módulo de corte (GPa)</b>                      |
| 76.077                                                                 | 0.1861                     | Para el caso simulado con DM N°2 no fue calculado |

Nota. Comparación de valores en las propiedades mecánicas determinadas experimentalmente respecto a las simuladas.

Tomando como base los estudios experimentales realizados sobre los componentes principales del cemento Portland, como el de Velez, et al. (2001), donde se determinaron propiedades mecánicas como el módulo de elasticidad y dureza a condiciones atmosféricas, obteniendo resultados con cantidades entre 125 GPa y 145 GPa para el módulo de Young, y los estudios realizados por quienes investigaron las propiedades del gel C-S-H con respecto a la variación de la relación Ca/Si en su estructura, obteniendo valores del Módulo de Young entre 113.7 GPa y 62.5 GPa, se observa que los datos obtenidos mediante simulación con DM son consistentes y se encuentran dentro de los rangos experimentales.

Ahora, si se tiene en cuenta referencias de estudios anteriores entorno al campo de fuerza ClayFF se ha determinado que es idóneo para simular materiales como el cemento implementando la DM, donde el sistema mantiene la energía constante predefiniendo las conexiones entre átomos en un estado fijo, este tipo de campo de fuerza generalmente estima valores de módulos elásticos más altos que otros en comparación con COMPASSFF, COMPASSIIF o Universal y estima rangos medianos para la relación de Poisson (Byoung et al., 2020), afirmando el resultado obtenido en dicho comportamiento.

Como bien se ha mencionado sobre la sobreestimación de los módulos, a nivel interatómico se encuentra relaciones que impactan los resultados obtenidos a pesar de tener la certeza del campo de fuerza utilizado para la simulación DM de acuerdo con las recomendaciones bien recibidas, realizadas en trabajos previos en materiales cementosos y en el gel C-S-H. Constatando posibles causas ante esto, se tiene que en el campo ClayFF no tiene en cuenta explícitamente los enlaces covalentes en silicatos, y se utilizan cargas más grandes para átomos de silicio en comparación

con otros campos. Por lo tanto, la naturaleza iónica de estos enlaces se sobreestima en el campo e impacta sustancialmente sus propiedades (Mishra et al., 2013), influyendo sobre el comportamiento elástico del material que se simula con DM (H. Heinz et al., 2013), sabiendo que las constantes elásticas se calcularon mediante métodos estáticos y dinámicos a nivel experimental.

Los módulos encontrados por la homogeneización de las constantes de rigidez, obtenidas mediante la relación Voight-Reuss-Hill, muestran resultados determinados con el campo ClayFF que sobrepasan los resultados experimentales. En este sentido, existen campos de fuerza alternativos que pueden proporcionar una mayor precisión, como el campo Interface (IFF). Este campo incluye términos enlazados cuadráticos para enlaces covalentes en silicatos, detalles electrostáticos y un potencial para interacciones de corto alcance. Este campo ha sido implementado en estudios preliminares que miden el comportamiento mecánico y han demostrado una mayor concordancia con las mediciones experimentales en comparación con el campo ClayFF (Claverie et al., 2021). No obstante, en este ámbito de interacción concerniente a la RDF (función de distribución radial) en la que se conoce el perfil de distribución de los átomos se genera igualmente, una sobrevaloración de las distancias de enlace, que corresponden a los resultados de las constantes de la red que compone al campo de fuerza, que en función de estas valoraciones son fundamentales para realizar ajustes para el desarrollo de modelos futuros (Zhou et al., 2022).

Desde su estandarización el campo de fuerza ClayFF se desarrolló como un campo de fuerza transferible con la capacidad de modelar muchos sistemas. Por lo tanto, no se parametrizó específicamente para un sistema en particular. No hay ninguna razón clara por la cual este sobre predice. Aunque, podría deberse en parte a que el campo de fuerza original no incluía propiedades elásticas de segunda derivada en la parametrización. Para este y recientemente, se han realizado varios estudios en los que se utilizaron propiedades de segunda derivada para reparametrizar el

campo de fuerza ClayFF en materiales relacionados con el cemento (Zhang et al., 2016). Representando un reto pendiente que se fundamenta en reparametrizar el campo con propiedades de segunda derivada sosteniendo su generalidad.

Es, por consiguiente, la elección del campo de fuerza es clave en la simulación DM, ya que impacta directamente en los resultados y la precisión de la simulación. Diferentes campos de fuerza son adecuados para la simulación de diferentes tipos de materiales, y un buen campo de fuerza promueve el desarrollo de la simulación molecular de materiales. Sin embargo, los campos de fuerza también necesitan mejoras constantes para garantizar su precisión, compatibilidad y portabilidad.

En los últimos años, el desarrollo de simulaciones de dinámica molecular (DM) en materiales a base de cemento ha estado estrechamente vinculado al establecimiento y mejora de campos de fuerza. Aunque existen varios campos de fuerza para estos materiales, cada uno con sus características y aplicaciones específicas, la elección del campo de fuerza es crucial para la precisión de la simulación.

El campo de fuerza ClayFF ha sido ampliamente utilizado, pero presenta limitaciones, como la sobreestimación de las distancias de enlace y la discrepancia en las cargas puntuales de iones de calcio. Para abordar estos problemas, se ha desarrollado el campo de fuerza ClinkerFF, como una alternativa más adecuada para abordar estos problemas y mejorar la precisión en estudios de fenómenos interfaciales y procesos de disolución en superficies minerales de cemento (Kerisit et al., 2012).

## 6 Conclusiones

Con base en la revisión bibliográfica se concluyó que las propiedades mecánicas del cemento fundamentales para determinar el comportamiento de este son el módulo de Young, la relación de Poisson y el módulo de corte, con las cuales se puede cuantificar la resistencia, compresibilidad, durabilidad y estabilidad que brindará al pozo. Son escasos los estudios encontrados donde estas 3 propiedades junto con las condiciones de alta presión y alta temperatura características básicas de pozos geotérmicos estuvieran involucradas, haciendo complejo el hallazgo de casos experimentales.

De acuerdo con los avances en la construcción de modelos computacionales, se ha concluido que existen diversos diseños de lechadas de cemento con una variedad de aditivos que pueden mejorar el rendimiento de estas. Estos diseños son aplicables en pozos de HPHT. Por lo tanto, es crucial que las simulaciones representen de manera precisa el comportamiento del sistema para evaluar los componentes y sus relaciones más adecuadas con el fin de lograr un mejor desempeño, especialmente en condiciones críticas como las de un pozo geotérmico. Entre estos componentes, el sílice destaca como uno de los más relevantes.

La simulación a condiciones HPHT demostró cierta precisión en algunas de las variables. La relación de Poisson en el primer caso fue muy similar con los resultados experimentales llegando a un cálculo exacto con un valor de 0.1886. Mientras que para el segundo caso con un valor más contiguo estuvo a 0.0639 de diferencia de la cantidad determinada en el experimento siendo de 0.25 y para la hallada en la simulación con DM de 0.1861. En el módulo de Young y el módulo de Corte se obtuvieron resultados que varían respecto a los experimentales estas diferencias sugieren que, a pesar de los estudios específicos sobre el comportamiento mecánico del gel C-S-H, la simulación del gel por sí sola no puede reflejar completamente el comportamiento

mecánico del cemento Portland, debido a que en el material intervienen componentes y factores adicionales tales como el silicato tricálcico (C3S), el silicato dicálcico (C2S) y el aluminato tricálcico (C3A), que contribuyen a la resistencia y durabilidad del cemento una vez se solidifica.

Los resultados obtenidos del módulo de Young mediante la simulación de DM a partir de los modelos construidos (76.1 GPa – 80.83 GPa) ver Tabla 18 están dentro del rango de los valores obtenidos de la misma propiedad a nivel de laboratorio (113.7 GPa - 62.5 GPa). Respecto al módulo de corte como se ha previsto en estudios realizados con DM, que han sido nombrados a lo largo del estudio. En relaciones Ca/Si que oscilan en un rango de 1.1 a 1.9 y relaciones W/Si de 1.3 a 2.1 estos determinan resultados que parte desde los (23.8 GPa – 48.5 GPa). Lo cual para el presente se ubica en un valor óptimo de (33.35 GPa – 34.31 GPa) ver Tabla 15. Estos hallazgos indican que la simulación mediante DM es una herramienta efectiva para evaluar el comportamiento de los materiales a base de cemento, a condiciones extremas como las evaluadas. Para poder evaluar las propiedades mecánicas del gel C-S-H a condiciones HPHT mediante dinámica molecular es necesario contar con datos experimentales a las condiciones de estudio que validen los resultados.

## **7 Recomendaciones**

Se recomienda profundizar en estudios sobre la adherencia y la fuerza de unión del cemento con respecto al casing y respecto a la formación geológica, temática ligada a la estabilidad del pozo junto con la cementación. Esto se debe a la falta de experiencia e investigación en este aspecto.

Se sugiere explorar en la literatura sobre la selección del campo de fuerza a utilizar y simular aquellos que sean más apropiados para los objetivos y casos de estudio específicos. Dado que existe un amplio margen para la exploración en este aspecto, es importante seleccionar

cuidadosamente los métodos de simulación que mejor se adapten a las necesidades de la investigación.

Es recomendable encaminar investigaciones sobre la resistencia a la corrosión del cemento en ambientes agresivos y analizar cómo afecta a las propiedades mecánicas del cemento a condiciones HPHT, podría ser fundamental para garantizar la durabilidad de las estructuras del cemento en condiciones ambientales desafiantes.

Considerando la importancia de los aditivos en la formulación del cemento, se recomienda investigar cómo diferentes tipos de aditivos afectan las propiedades mecánicas del cemento bajo condiciones HPHT y estudiar cómo estos aditivos interactúan con la matriz del cemento a nivel molecular y cómo impacta en la resistencia y durabilidad de este material.

### Referencias Bibliográficas

- Allen. Andrew J., J. J. Thomas., H. M. Jennings. (2007). Composition and density of nanoscale calcium--silicate--hydrate in cement. *Nature Materials*, 6(4), 311–316.  
<https://doi.org/10.1038/nmat1871>
- Andrzej M. Brandt. (2005). Cement-based composites: materials, mechanical properties, and performance. *CRC Press*.
- API (American Petroleum Institute). (2005). *API Especificación 10A/ISO 10426-1 Especificación para Cementos y Materiales para Cementación de pozos* (Vigésima y tercera).
- ASTM International. (2008). A. C 109/C 109M – 07 - Standard test method for compressive strength of hydraulic cement mortars (using 2-in. or [50-mm] cube specimens). *ASTM International*.
- Barajas Silvia F., D. J. O. (2023). *Efecto de la temperatura en el cemento de pozo geotérmico*.
- Bensted, J., and B. P. (2002). *Structure and Performance of Cements* (2nd ed.). Spon Press.
- Bentur, A. (1979). Structural Properties of Calcium Silicate Pastes: II Effect of Curing Temperature. *Journal of the American Ceramic Society*, 62(7–8), 362–366.
- Berendsen H. J. C., J. R. G. T. P. S. (1987). The missing term in effective pair potentials. *Journal of Physical Chemistry*, 97(24), 6269.
- Bonaccorsi, E.; M. S.; & T. H. F. W. (2004). The crystal structure of Jennite  $\text{Ca}_9\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_6 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ . *Cement and Concrete Research*, 34(9), 1481–1488.
- Boumiz. A, D. Sorrentino., C. Vernet., F. C. Tenoudji. (1997). Modelling the development of the elastic moduli as a function of the degree of hydration of cement pastes and

- mortars. *In Second International RILEM Symposium on Hydration and Setting*, 295–316. RILEM Publications SARL.
- Bour, D. (2005). Cyclic steam well design: a new approach to solve an old problem of cement sheath failure in cyclic steam wells. *In: Proceedings of the SPE93868-MS, SPE Western Regional Meeting, Irvine, California. March 30–April 01.*
- Braun Efrem., J. Gilmer., H. B. Mayes., D. L. Mobley., J. I. Monroe., S. Prasad., D. M. Z. (2019). Best Practices for Foundations in Molecular Simulations. *A LiveCoMS Best Practices Guide.*
- Brown, J. M., A. E. H., & A. R. J. (2006a). Triclinic elastic constants for low albite. *Physics and Chemistry of Minerals*, 33(4), 256–265.
- Brown, J. M., A. E. H., & A. R. J. (2006b). Triclinic elastic constants for low albite. *Physics and Chemistry of Minerals*. 256–265.
- Bye G. C. (1999). *Portland Cement: Composition, Production and Properties* (Second Edition).
- Bykov G.L., E. V. A. V. A. E. B. G. E. (2021). Effect of gamma irradiation on Portland cement: Hydrogen evolution and radiation resistance. *Construction and Building Materials*, 295(9).
- Bykov G.L., E. V. A. V. A. E. B. G. E. (2022). Radiolysis of Portland cement and magnesium phosphate cement: Effect of the content and state of water on the Physicochemical properties and the mechanism and kinetics of hydrogen formation. *Radiation Physics and Chemistry*, 190, 109822.
- <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2021.109822>

- Byoung Hooi Cho, W. C. B. H. N. (2020). *Molecular Dynamics Simulation of Calcium-Silicate-Hydrate for Nano-Engineered Cement Composites—A Review*.
- Calderón Carrillo Zuly. (2014). *Introducción a la mecánica de rocas y sus aplicaciones en la industria del petróleo*. [https://www.profitecnicas.com/libro/introduccion-a-la-mecanica-de-rocas-y-sus-aplicaciones-en-la-industria-del-petroleo\\_144081](https://www.profitecnicas.com/libro/introduccion-a-la-mecanica-de-rocas-y-sus-aplicaciones-en-la-industria-del-petroleo_144081)
- C.-J. Haecker, E. J. G. J. W. B. R. B. B. Z. S. S. P. S. T. V. (2005). Modeling the linear elastic properties of Portland cement paste. *Cement and Concrete Research*, 35(10), 1948–1960.
- Claverie Jérôme, S. K.-B. J. M. M. C. F. B. (2021). Assessment of mechanical, thermal properties and crystal shapes of monoclinic tricalcium silicate from atomistic simulations. *Cement and Concrete Research*, 140, 106269. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2020.106269>
- Cygan, R. T., L. J., K. A. G. (2004a). Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field. *Journal of Physical Chemistry*, 108, 1255–1266.
- Cygan, R. T., L. J., K. A. G. (2004b). Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field. *Journal of Physical Chemistry*, 108, 1255–1266.
- Cygan R.T, G. J. A. H. H. K. A. G. (2009). Molecular models and simulations of layered materials. *Journal of Materials Chemistry*, 19(17), 2470–2481.
- Daan Frenkel, B. S. (1996). *Understanding molecular simulation: From algorithms to applications*. Academic Press I00.

E.B. Nelson., E. L. H. (1985). Cementing Steamflood and Fireflood Wells—Slurry Design.

*Journal of Canadian Petroleum Technology*, 24(15), 58–63.

Elena Bonaccorsi, S. M. A. R. K. (2005). The Crystal Structure of Tobermorite 14 Å°

(Plombierite), a C–S–H Phase. *Journal of the American Ceramic Society*, 88(3), 505–512.

*Energía de coulomb*. (2019).

Erick B. Nelson., D. G. (2006). *Well Cementing* (Erick B. Nelson and Dominique Guillot,

Ed.; Second Edition).

Erik B Nelson, D. G. (2006). *Well Cementing* (D. G. Erik B. Nelson, Ed.; Second Edition).

Frías Moisés, C. J. (2000). Pore size distribution and degree of hydration of metakaolin ± cement pastes. *Cement and Concrete Research*, 30(4), 561–569.

Ghosh, S. N. (1983). *Advances in Cement Technology*. Pergamon Press Ltd.

G.L. Bykov, E. V. A. V. A. E. B. G. E. (2022). Radiolysis of Portland cement and magnesium phosphate cement: Effect of the content and state of water on the Physicochemical properties and the mechanism and kinetics of hydrogen formation. *Radiation Physics and Chemistry*, 190.

Gmira, A. (2003). *Etude textural et thermodynamique d'hydrates modèles du ciment*.

Groves, G. (1987). TEM studies of cement hydration. *Materials Research Society Symposium Proceedings*, 85, 3–12.

H. Manzano, J. S. D. A. A. (2009). Elastic properties of the main species present in Portland cement pastes. *Acta Materialia*, 57(5), 1666–1674.

- Hamid S. A. (1981). The crystal structure of the 11 Å natural tobermorite  $\text{Ca}_{2.25}[\text{Si}_3\text{O}_7.5(\text{OH})_{1.5}] \cdot \text{H}_2\text{O}$ . *Zeitschrift Für Kristallographie - Crystalline Materials*, 154(3–4), 189–198.
- Heinz H., T. J. Lin., R. K. Mishra., F. S. E. (2013). Thermodynamically consistent force fields for the assembly of inorganic, organic, and biological nanostructures: the INTERFACE force field. *Langmuir*, 29(6), 1754–1765.
- Hook F. E., E. F. Morris., R. B. R. (1971). Silica-Lime Systems for High Temperature Cementing Applications. *SPE*.
- Hou, D. (2019a). Molecular simulation on cement-based materials: From theory to application. In *Molecular Simulation on Cement-Based Materials: From Theory to Application*. Springer Singapore. <https://doi.org/10.1007/978-981-13-8711-1>
- Hou, D. (2019b). *Molecular simulation on cement-based materials: From theory to application*. Springer Singapore. <https://doi.org/10.1007/978-981-13-8711-1>
- Hou, D., Ma, H., Zhu, Y., & Li, Z. (2014). Calcium silicate hydrate from dry to saturated state: Structure, dynamics, and mechanical properties. *Acta Materialia*, 67, 81–94. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.12.016>
- Hou Dongshuai. (2020). *Molecular Simulation on Cement-Based Materials from Theory to Application*.
- Hou Dongshuai., Z. L. (2014). Molecular dynamics study of water and ions transport in nano-pore of layered structure: A case study of tobermorite. *Microporous and Mesoporous Materials*, 195, 9–20.

- J. Jeffrey. Thomas., S. A. FitzGerald., D. A. Neumann., R. A. L. (2001). State of Water in Hydrating Tricalcium Silicate and Portland Cement Pastes as Measured by Quasi-Elastic Neutron Scattering. *Journal of the American Ceramic Society*, 84, 1811–1816.
- Jennings Hamlin M. (2008). Refinements to colloid model of C-S-H in cement: CM-II. *Cement and Concrete Research*, 38(3), 275–289.
- Kenton A. Rod., P. K. Koech., C. A. Fernandez., M.-T. Nguyen., J. B. Gardiner., N. J. Huerta. , V.-A. Glezakou. , T. V. (2020). *Polymer-cement composites with adhesion and re-adhesion (healing) to casing capability for geothermal wellbore applications*. 1.
- Kerisit. S., J. H. Weare., A. R. F. (2012). Structure and dynamics of forsterite–scCO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O interfaces as a function of water content. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 84, 137–151.
- Khizar Abid, R. G. P. C. B. H. N. (2015). A review on cement degradation under CO<sub>2</sub>-rich environment of sequestration projects. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 27(2), 1149–1157. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.09.061>
- Leach Andrew R. (2001). *Molecular modelling: principles and applications*. Pearson education.
- López M. Andrés C. (2022). *Estudio teórico del efecto de la incorporación de óxido de grafeno sobre el cemento*. 55–56.
- Martínez, A. (2018). *Simulación atomística de manipulación e irradiación de grafito y grafeno*. Tesis doctoral física aplicada.
- Meléndez Laura. (2021). *Simulación con dinámica molecular de las propiedades vibracionales de cintas de grafeno*. 35–37.

- Muhammad Aizat bin Mohd Zulkarnain. (2015). *Comparison of Elastic Modulus between Class G Cement and Geopolymer Cement under HPHT Condition*. Universiti Teknologi PETRONAS.
- Orozco Pineda Juan M. (2016). *Determinación de la relación de Poisson y módulo de elasticidad para concretos de 21 y 28 megapascasles en concretos de la ciudad de Villavicencio*.
- Pelisser, F., G. P. J. P., & M. A. (2012). Effect of the Ca/Si molar ratio on the micro/nanomechanical properties of synthetic C–S–H measured by nanoindentation. *The Journal of Physical Chemistry C*, 116(32), 17219–17227.
- Pellenq Roland J-M., A. Kushima., R. Shahsavari., K. J. V. Vliet., M. J. Buehler., S. Yip., F. (2009). A realistic molecular model of cement hydrates. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 16102–16107.
- Qing Ji a, R. J.-M. P. b, c, K. J. V. V. (2012). Comparison of computational water models for simulation of calcium–silicate–hydrate. *Computational Materials Science*, 53, 234–240.
- Quon, D. H. H., M. V. M. (1979). Performance of High Alumina Cement Concrete at Elevated Temperature. *Journal of the Canadian Ceramic Society*, 48, 7–16.
- R. James Kirkpatrick, A. G. K. J. W. X. H. J. E. A. (2005). *Molecular Modeling of the Vibrational Spectra of Interlayer and Surface Species of Layered Double Hydroxides*. (T. C. M. S. A. CO. C. W. L. S. The Application of Vibrational Spectroscopy to Clay Minerals and Layered, Ed.; Vol. 13).

- Ratan K. Mishra, R. J. F. H. H. (2013). Force Field for Tricalcium Silicate and Insight into Nanoscale Properties: Cleavage, Initial Hydration, and Adsorption of Organic Molecules. *Journal of Physical Chemistry C*, 117(20), 10432–10417.
- Richardson I.G. (1999). The nature of C-S-H in hardened cements. *Cement and Concrete Research*, 9(8), 1131–1147.
- Rouhollah Alizadeh., L. Raki., J. M. Makar., J. J. Beaudoin., I. M. (2009). Hydration of tricalcium silicate in the presence of synthetic calcium–silicate–hydrate. *Journal of Materials Chemistry*, 19(42), 7937–7946. <https://doi.org/10.1039/B910216G>
- S Ridha; AI Abd Hamid; AH Abdul Halim; & NA Zamzuri. (2018). Elasticity and expansion test performance of geopolymer as oil well cement. *IOPSCIENCE (IOP Conference Series: Earth and Environmental Science)*, 140.
- Sant G., K. V. F. (2020). Molecular dynamics simulations of mechanical properties of calcium-silicate-hydrates. *IOPSCIENCE*.  
Septiembre 02-03. (n.d.).
- SHARMA Sumit. (2019). *Molecular Dynamics Simulation of Nanocomposites Using BIOVIA Materials Studio*.
- Taylor, H. F. W. (1964). *The Chemistry of Cements* (Academic Press Inc).
- Taylor, H. F. W. (1997). *Cement Chemistry*. Thomas Telford Publishing.
- Ting Zhu, J. L. X. L. S. Y. (2007). Stress-dependent molecular pathways of silica–water reaction. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 53(7), 1597–1623.
- Velez Karine., S. Maximilien., D. Damidot., G. Fantozzi., F. S. (2001). Determination by nanoindentation of elastic modulus and hardness of pure constituents of Portland cement clinker. *Cement and Concrete Research*, 31(4), 555–561.

- Yang Zhou, H. Z. W. L. T. M. C. M. (2022). A deep learning potential applied in tobermorite phases and extended to calcium silicate hydrates. *Cement and Concrete Research*, 152.
- Zdeněk Bittnar., P. J. M. Bartos., J. Němeček., V. Šmilauer., J. Z. (2009). Nanotechnology in Construction Proceedings of the NICOM3. *SpringerLink*.
- Zhang Ning, R. S. (2016). Balancing strength and toughness of calcium-silicate-hydrate via random nanovoids and particle inclusions: Atomistic modeling and statistical analysis. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 96, 204–222.  
<https://doi.org/10.1016/j.jmps.2016.07.021>
- Zhou, J., C. Y. H. (2014). *Efficient measurement of elastic constants of cross laminated timber using modal testing*. World Conference on Timber Engineering.

## Anexos

```

LAMMPS data file via write data, timestep = 1384000

3424 atoms
11 atom types
1368 bonds
2 bond types
236 angles
1 angle types

-8.2588871182355716e-01 3.3679888711823764e+01 xlo xhi
-3.2571107816502352e+00 2.8555960781648086e+01 ylo yhi
-4.9347829298590336e+00 4.0264781929866459e+01 zlo zhi
1.3648213342069608e+01 0.000000000000000e+00 0.000000000000000e+00 xy xz yz

Masses

1 40.078
2 40.078
3 1.0078
4 15.9996
5 15.9996
6 15.9996
7 28.0855
8 1.0078
9 1.0078
10 15.9996
11 15.9996

Pair Coeffs # lj/cut/coul/long

1 5.0298e-06 5.5667
2 5.0298e-06 2.87199
3 0 0
4 0.1554 3.1655
5 0.1554 3.1655
6 0.1554 3.1655
7 1.8405e-06 3.302
8 0 0
9 0 0
10 0.1554 3.1655
11 0.1554 3.1655

Bond Coeffs # harmonic

1 554.135 1
2 554.135 1

```

Angle Coeffs # harmonic

1 45.7696 109.47

Atoms # full

2401 3 11 -8.1999999999999995e-01 2.8595820906699238e+01 -2.0744096059044064e+00 -3.1083060861220848e+00 -1 0 1  
 2332 3 10 -9.4999999999999996e-01 4.1986044413957181e+01 2.4624878953875587e+01 -2.2734054060508613e+00 -1 0 1  
 1972 3 2 2.0000000000000000e+00 3.1257490832016121e+01 1.8464694731034118e+01 -2.8294345649911095e+00 0 0 0  
 2932 4 10 -9.4999999999999996e-01 2.1733325943066347e+01 7.7965580754508919e+00 -2.2691017822876343e+00 0 0 1  
 3400 4 9 4.0999999999999998e-01 1.6357436873040616e+01 -2.1746459502778630e+00 -2.4527447997563527e+00 1 0 0  
 1116 2 2 2.0000000000000000e+00 7.6292751251314863e+00 1.4329958515467437e+01 -3.0345731822095847e+00 1 -1 0  
 2163 3 8 4.2499999999999999e-01 3.0458662163117047e+01 1.6864375355878696e+01 -1.0841927129018751e+00 0 0 1  
 1511 2 8 4.2499999999999999e-01 2.8129489914286747e+01 1.6365161766680991e+01 -4.6074875323771680e+00 0 0 0  
 1081 2 3 4.2499999999999999e-01 3.9005481634646763e+01 2.1970299698569047e+01 -4.7630748263031286e+00 0 -1 0  
 1111 2 2 2.0000000000000000e+00 1.1142634016404443e+01 2.3449986915075087e+01 -3.8936074963696816e+00 0 0 1  
 2398 3 11 -8.1999999999999995e-01 3.0154476822134448e+01 5.0280144354693421e+00 6.4980610168140807e-01 -1 1 1  
 94 1 6 -9.4999999999999996e-01 2.5859262735338941e+01 2.5093515087388752e+01 -2.1197221005945650e+00 0 -1 0  
 114 1 7 2.1000000000000001e+00 6.6747485430807503e+00 4.2830587634036279e+00 -1.8205343051438831e+00 0 0 0  
 2995 4 8 4.2499999999999999e-01 1.3791887011647075e+01 1.7216657863689992e+01 -4.6412236811784959e+00 0 1 0  
 2886 4 10 -9.4999999999999996e-01 3.3500122448050355e+01 1.0030516369789527e+01 -4.7921025236609340e+00 0 0 1  
 121 1 6 -9.4999999999999996e-01 7.3838978060487399e+00 5.6382091019627305e+00 -2.0867245303249899e+00 0 0 0  
 2169 3 8 4.2499999999999999e-01 3.5554005137327309e+01 2.8349968460285154e+01 -4.5531629254368138e+00 -1 0 1  
 146 1 6 -9.4999999999999996e-01 5.9829599397545925e+00 3.8375671635884565e+00 -3.1780753205516228e+00 0 0 0  
 2905 4 8 4.2499999999999999e-01 2.1873997138275445e+01 5.9354211100079013e+00 -4.8516725321104621e+00 0 0 0  
 559 1 8 4.2499999999999999e-01 2.2904451621646224e+01 2.3708847952116006e+01 -1.6293168817306252e+00 0 -1 0  
 1258 2 10 -9.4999999999999996e-01 3.3109011829833612e+01 2.6002246961810119e+01 -4.5379052297204883e+00 0 -1 0  
 3189 4 8 4.2499999999999999e-01 1.5037511814884489e+01 7.0873192565794643e+00 -3.5159565082193702e+00 0 1 1  
 2423 3 9 4.0999999999999998e-01 1.4009479947280269e+01 1.4082536863275884e+01 -3.2107487518039308e+00 0 0 0  
 2850 4 2 2.0000000000000000e+00 2.4942422382231968e+01 1.5758206894196509e+00 -4.7972378495775541e+00 0 1 0  
 1307 2 8 4.2499999999999999e-01 3.6357589763672273e+01 2.6210120096573576e+01 -4.0633892676377359e+00 -1 1  
 2068 3 10 -9.4999999999999996e-01 1.5119986689850920e+01 1.8457991402145343e+01 -4.2448760240936396e+00 0 1  
 669 1 8 4.2499999999999999e-01 6.6356412658715431e+00 -1.3136606715887780e+00 -4.1486081751706996e+00 0 0 0  
 3078 4 10 -9.4999999999999996e-01 2.4913929575695299e+01 1.2463985901623655e+00 -3.2930071605670106e+00 0 1 0  
 233 1 3 4.2499999999999999e-01 8.2951531753261687e+00 6.0835609721084953e+00 -2.3486489602450371e+00 0 0 0  
 255 1 2 2.0000000000000000e+00 3.3164659552390056e+01 7.2470076871415774e+00 -2.5823140170515813e+00 -1 0 1  
 1312 2 10 -9.4999999999999996e-01 3.3995463305575669e+01 2.3597660834704218e+01 -4.0070779396574157e+00 0 -1 1  
 621 1 8 4.2499999999999999e-01 4.1658415313810892e+01 2.1299610832637722e+01 -4.2878815014227136e+00 -1 0 1  
 2098 3 10 -9.4999999999999996e-01 3.3998793101849145e+01 2.1173659684086903e+01 -3.1271610657892306e+00 -1 0 1  
 460 1 10 -9.4999999999999996e-01 1.2112546144576735e+01 2.2257590656801476e+01 -3.9607378338071042e+00 0 0 1  
 1518 2 10 -9.4999999999999996e-01 2.6446807746764868e+01 1.9427049531457047e+01 -4.1409493140519853e+00 0 0 0  
 3041 4 8 4.2499999999999999e-01 3.9428686747805209e+01 1.2203362719587409e+01 -9.9776674397181120e-01 0 0 0  
 1696 2 9 4.0999999999999998e-01 3.2248436147212041e+00 5.0921262596697776e+00 -2.9473777164327064e+00 0 1 0  
 282 1 2 2.0000000000000000e+00 1.8597968767482815e+01 2.8549544910988576e+01 -4.0676825325573507e+00 0 -1 0  
 723 1 9 4.0999999999999998e-01 3.4038437677367313e+01 2.5261749569973411e+00 -4.3367549506938508e+00 -1 0 0  
 3223 4 8 4.2499999999999999e-01 3.8226360029715039e+01 1.9816648547641236e+01 -3.8164758892292858e+00 0 0 0  
 2069 3 8 4.2499999999999999e-01 1.4494641321728311e+01 1.8629723006790609e+01 -3.4049771072335724e+00 0 0 1

```

#LAMMPS Input file
# Title
clear

# -----other settings -----
variable fs index 1 # 0.1 fs
variable ps index 100000 # 100 ps
variable nfrequ index 100 # = Nevery * Nrepeat
variable nstep equal ${ps}/${fs}
variable nstep2 equal ${ps}/(2*${fs})
variable heatnpt equal 2000
variable heatnvt equal ${heatnpt}*7
variable tdamp equal ${fs}*100
variable pdamp equal ${fs}*100

# ----- Structure settings -----
units real
atom_style full
dimension 3
boundary p p p
timestep ${fs}

# ----- Potential settings -----
pair_style lj/cut/coul/long 10.0 10.0
special_bonds lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dihedral no
pair_modify mix arithmetic
bond_style harmonic
angle_style harmonic
box tilt large

#-----Read structure-----
read_data 300down.dat # read initial data
set type 1 charge 1.3600 #CAO
set type 2 charge 2.0 #Caw
set type 3 charge 0.4250 #Ho
set type 4 charge -1.0532 #Ob
set type 5 charge -1.1808 #Obos
set type 6 charge -0.9500 #Oh
set type 7 charge 2.100 #st
set type 8 charge 0.4250 #How
set type 9 charge 0.410 #Hw
set type 10 charge -0.9500 #Ohw
set type 11 charge -0.8200 #Ow
group water type 9 11
group ohw type 8 10
group caw type 2
group oh type 3 6
kspace_style ppm 1e-4
neighbor 3.0 bin

```

```

#-----TEMP N PRESS RISE-----

print "-----Up 303-313K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 303.0 313.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 313-323K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 313.0 323.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 323-333K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 323.0 333.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 333-343K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 333.0 343.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 343-353K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 343.0 353.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 353-363K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 353.0 363.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 363-373K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 363.0 373.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 373-383K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 373.0 383.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

print "-----Up 383-393K NPT-----"
fix      f2 all npt temp 383.0 393.0 ${tdamp} iso 1.0 1.0 ${pdamp}
run      1000
unfix    f2

# ----- Equilibration (NVT) -----

print "----- Equilibration (NVT) end -----"
fix      f1 all nvt temp 393.0 393.0 ${tdamp}
run      10000
unfix    f1
write_data 393K.dat
write_restart 393K.restart

```

```
# ----- Equilibration (NPT) -----
print "----- Equilibration (NPT) end -----"
fix          f1 all npt temp 393.0 393.0 ${tdamp} iso 1.0 204.0 ${pdamp}
run          100000
unfix        f1
write_data 204atm.dat
write_restart 204atm.restart

# ----- Production (NPT) -----
print "----- Production (NPT) end -----"
fix          f1 all npt temp 393.0 393.0 ${tdamp} iso 204.0 204.0 ${pdamp}
run          12000000
unfix        f1

# ----- Output restart data -----
write_data TP.dat
write_restart TP.restart
include mech.mod

print "=====
print "-----"
print "=====
```

```
#####

if "${opt} == 1" then &
    "variable data string 393K"
if "${opt} == 2" then &
    "variable data string 204atm"
if "${opt} == 3" then &
    "variable data string TP"

#####
include init.mod
#####
# Compute initial state

variable thermostat equal 1
#####
reset_timestep 0

fix ab all shake 0.0001 20 0 b 1 2 a 1

# Setup output

fix avp all ave/time ${nevery} ${nrepeat} ${nfreq} c_thermo_press mode vector
thermo      ${nthermo}
dump        2 all custom 100 md2.lammpstrj id mol type x y z ix iy iz
thermo_style custom step temp pe press f_avp[1] f_avp[2] f_avp[3] f_avp[4] f_avp[5] f_avp[6]
thermo_modify norm no

# Setup MD

timestep ${timestep}
fix 4 all nve
if "${thermostat} == 1" then &
    "fix 5 all langevin ${temp} ${temp} ${tdamp} ${seed}"
#####

run ${nequil}
if "${adiabatic} == 1" &
then "variable thermostat equal 0" &
else "variable thermostat equal 1"

print ${thermostat}

include potential.mod
run ${nrun}
```

```

variable pxx0 equal f_avp[1]
variable pyy0 equal f_avp[2]
variable pzz0 equal f_avp[3]
variable pxy0 equal f_avp[4]
variable pxz0 equal f_avp[5]
variable pyz0 equal f_avp[6]

variable tmp equal lx
variable lx0 equal ${tmp}
variable tmp equal ly
variable ly0 equal ${tmp}
variable tmp equal lz
variable lz0 equal ${tmp}

# These formulas define the derivatives w.r.t. strain components
# Constants uses $, variables use v_
variable d1 equal -(v_pxx1-${pxx0})/(v_delta/v_len0)*${cfac}
variable d2 equal -(v_pyy1-${pyy0})/(v_delta/v_len0)*${cfac}
variable d3 equal -(v_pzz1-${pzz0})/(v_delta/v_len0)*${cfac}
variable d4 equal -(v_pyz1-${pyz0})/(v_delta/v_len0)*${cfac}
variable d5 equal -(v_pxz1-${pxz0})/(v_delta/v_len0)*${cfac}
variable d6 equal -(v_pxy1-${pxy0})/(v_delta/v_len0)*${cfac}

# Write restart
write_restart restart.equil

# uxx Perturbation

variable dir equal 1
include displace.mod

# uyy Perturbation

variable dir equal 2
include displace.mod

# uzz Perturbation

variable dir equal 3
include displace.mod

# uyz Perturbation

variable dir equal 4
include displace.mod

# uxz Perturbation

variable dir equal 5

```

```

units          real
variable cfac equal 0.000101325
variable cunits string GPa

# Define MD parameters
variable nevery equal 10          # sampling interval
variable nrepeat equal 10         # number of samples
variable nfreq equal ${nevery}*${nrepeat} # length of one average
variable nthermo equal ${nfreq}   # interval for thermo output
variable nequil equal 10*${nthermo} # length of equilibration run
#variable nrun equal 3*${nthermo}  # length of equilibrated run
variable nrun equal 10000         # length of equilibrated run
#variable temp equal 293.15        # temperature of initial sample
variable timestep equal 0.001     # timestep
variable adiabatic equal 0        # adiabatic (1) or isothermal (2)
variable tdamp equal 100          # time constant for thermostat
variable seed equal 123457        # seed for thermostat
variable up equal 2.0e-2

# generate the box and atom positions using a diamond lattice
dimension      3                  #
processors      * * *
boundary        p p p             #
atom_style      full              #
pair_style      lj/cut/coul/long 10 10
special_bonds   lj/coul 0.000000 1.00000 1.000000 angle yes dihedral no
pair_modify     mix arithmetic
bond_style      harmonic
angle_style     harmonic
box tilt large

# read data
read_data ${data}.dat

# generate initial velocities
kspace_style ewald 1e-4
neighbor 3.0 bin
neigh_modify every 1 delay 5 check yes

print "=====
print "-----MECHANICAL PROPERTIES - START-----"
print "=====
print "-----393k-----"
clear
variable temp equal 393
variable opt equal 1
include elastic.mod

print "-----204Atm-----"
clear
variable iso equal 204
variable opt equal 2
include elastic.mod

print "-----tp-----"
clear
variable temp equal 393variable opt equal 3
include elastic.mod

print "=====
print "-----MECHANICAL PROPERTIES - END-----"
print "=====

```