





دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران مرکزی

دانشکده علوم، گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.Sc)

گرایش: فیزیک، ذرات بنیادی و نظریه میدان ها

عنوان :

شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب گاز هلیم روی نانو مخروط های کربنی

استاد راهنما:

دکتر پوریا پدram

استاد مشاور:

دکتر رضا رشیدی

پژوهشگر:

شمسی قنبرزاده

تابستان ۱۳۹۱

تقدیم به:

سینای عزیزم
و همسرم

تشکر و قدردانی:

بدینوسیله از استاد عزیزم خانم دکتر رویا مجیدی که در این پایان نامه نقش اساسی داشته اند تشکر و قدردانی می کنم. همچنین از اساتید گرامی آقایان دکتر پدرام و رشیدی که زحمت این پایان نامه را تقبل کردند کمال تشکر را دارم.

فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
	فصل ۱: شبیه سازی دینامیک مولکولی
۲	۱-۱ مقدمه.....
۵	۲-۱ ارتباط شبیه سازی با تجربه.....
۶	۳-۱ شبیه سازی مولکولی.....
۷	۴-۱ دینامیک مولکولی.....
۸	۱-۴-۱ دینامیک نیوتنی.....
۹	۲-۴-۱ دینامیک هامیلتونی.....
۱۲	۵-۱ مسیرهای فضای فاز.....
۱۴	۶-۱ مطالعه سیستم های کوچک.....
۱۴	۱-۶-۱ شرایط مرزی دوره ای.....
۱۹	۲-۶-۱ معیار حداقل تصویر یا پتانسیل قطع.....
۲۱	۷-۱ پتانسیل برهمکنش و میدان های نیرو.....
۲۳	۱-۷-۱ روش های مکانیک مولکولی.....
۲۶	۲-۷-۱ برهمکنش های ناپیوندی و اندروالسی.....
۲۹	۳-۷-۱ پتانسیل لnard- جونز.....

۳۲ ۴-۷-۱ برهمکنش های پیوندی.....
۴۲ ۸-۱ روش های محاسبات عددی معادلات دیفرانسیل.....
۴۳ ۱-۸-۱ روش پیش بینی و تصحیح گیر.....
۴۶ ۲-۸-۱ الگوریتم ورله.....
۴۷ ۳-۸-۱ روش پرش قورباغه.....
۴۸ ۴-۸-۱ روش سرعت ورله.....
۴۹ ۵-۸-۱ الگوریتم بیمن.....
۵۰ ۶-۸-۱ انتخاب گام زمانی.....
۵۱ ۹-۱ هنگرد مکانیک آماری.....
۵۲ ۱۰-۱ دینامیک مولکولی در دمای ثابت.....
۵۳ ۱-۱۰-۱ شیوه مقیدی.....
۵۴ ۲-۱۰-۱ شیوه تصادفی.....
۵۵ ۳-۱۰-۱ شیوه دستگاه گسترش یافته.....
۵۶ ۴-۱۰-۱ معادلات حرکت نوزه- هوور.....

فصل ۲: نانوساختارهای کربنی

۶۳ ۱-۲ مقدمه.....
۶۳ ۲-۲ الماس.....
۶۴ ۳-۲ فولرین.....
۶۵ ۴-۲ گرافیت.....
۶۶ ۵-۲ نانولوله های کربنی.....
۶۹ ۱-۵-۲ ساختار نانولوله های کربنی یک لایه.....

۷۸ ۲-۵-۲ روشهای تولید نانولوله های کربنی
۷۹ ۳-۵-۲ کاربردهای نانولوله های کربنی
۸۵ ۶-۲ نانومخروط های کربنی

فصل ۳: جذب و ذخیره سازی گاز

۸۸ ۱-۳ مقدمه
۸۹ ۲-۳ گازهای نجیب
۹۰ ۱-۲-۳ هلیم
۹۲ ۲-۲-۳ نئون
۹۲ ۳-۲-۳ آرگون
۹۳ ۴-۲-۳ کریپتون
۹۳ ۵-۲-۳ زنون
۹۴ ۳-۳ جذب گازهای نجیب روی نانولوله های کربنی
۹۷ ۴-۳ جذب گاز روی نانومخروط های کربنی

فصل ۴: نتایج شبیه سازی

۱۰۰ ۱-۴ مقدمه
۱۰۰ ۲-۴ روش شبیه سازی و معرفی سیستم
۱۰۱ ۳-۴ نتایج شبیه سازی
۱۰۳ ۱-۳-۴ مقادیر جذب داخل و خارج نانومخروط
۱۰۵ ۲-۳-۴ اثر زاویه نانومخروط روی میزان جذب
۱۰۷ ۳-۳-۴ اثر دما روی میزان جذب
۱۰۸ ۴-۳-۴ اثر طول نانومخروط روی میزان جذب

- ۴-۴ مقایسه میزان جذب روی نانومخروط با نانولوله های کربنی..... ۱۰۹
- ۵-۴ نتیجه گیری..... ۱۱۰
- ۶-۴ پیشنهادات..... ۱۱۱

فهرست منابع و مآخذ

- چکیده انگلیسی..... ۱۱۵

فهرست جدول ها

<u>عنوان</u>	<u>صفحه</u>
۱-۱ جدول مقادیر پارامتر های σ و ε/k_B	۳۰
۱-۲ جدول مقادیر پارامترهای ویژه برای نانولوله های خاص.....	۷۶
۲-۲ جدول مشخصات نانولوله های کربنی.....	۷۷
۱-۳ جدول مقادیر نسبت جذب در نانولوله هایی با قطر و کایرالیته متفاوت.....	۹۵
۱-۴ جدول مشخصات نانومخروط های مورد استفاده در شبیه سازی.....	۱۰۰

فهرست شکل ها

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
۱۵	۱-۱ شکل سیستم دو بعدی دوره ای.....
۱۶	۲-۱ شکل شرایط مرزی دوره ای.....
۱۷	۳-۱ شکل اعمال شرایط مرزی در دو بعد.....
۲۰	۴-۱ شکل معیار حداقل تصویر در دو بعد.....
۲۴	۵-۱ شکل یک مدل مکانیک مولکولی برای پروپان.....
۲۵	۶-۱ شکل نمایش چهار سهم عمده در میدان های نیروی مکانیک مولکولی.....
۳۰	۷-۱ شکل پتانسیل لنارد- جونز.....
۳۲	۸-۱ شکل تفکیک پتانسیل لنارد- جونز به بخش های جاذبه ای و دافعه ای.....
۳۳	۹-۱ شکل تغییر انرژی پیوندی با فاصله بین اتم ها.....
۳۵	۱۰-۱ شکل مقایسه پتانسیل هماهنگ ساده (قانون هوک) با منحنی مورس.....
۳۵	۱۱-۱ شکل یک پتانسیل کشش پیوندی مکعبی.....

- ۱۲-۱ شکل تغییر زاویه های پیوندی..... ۳۶
- ۱۳-۱ شکل زاویه های دو وجهی (زاویه های پیچشی)..... ۳۷
- ۱۴-۱ شکل دو روش مدل سازی خمش های خارج از صفحه ای..... ۳۹
- ۱۵-۱ شکل جفت شدگی بین کشش پیوند ها با بسته شدن یک زاویه..... ۴۰
- ۱۶-۱ شکل جمله های ترکیبی مختلفی که در میدان های نیرو اهمیت دارند..... ۴۱
- ۱۷-۱ شکل های مختلف الگوریتم ورله..... ۴۹
- ۱۸-۱ شکل توزیع سرعت مایع لنارد- جونز..... ۶۰
- ۱۹-۱ شکل واکنش سیستم به افزایش ناگهانی دما..... ۶۱
- ۲۰-۱ شکل اثر ثابت جفت شدگی Q روی میانگین مربعی جابجایی مایع لنارد- جونز... ۶۱
- ۱-۲ ساختار شبکه الماس..... ۶۴
- ۲-۲ ساختار مولکول C₆₀..... ۶۵
- ۳-۲ ساختار گرافیت..... ۶۶
- ۴-۲ نانولوله ها از نظر رسانایی..... ۶۸
- ۵-۲ نانولوله های تک لایه و چند لایه..... ۶۸
- ۶-۲ تصویر شماتیک از تشکیل نانولوله با پیچش صفحه گرافن..... ۶۹
- ۷-۲ تصویر شماتیک نحوه پیچش صفحه گرافن برای ساخت انواع نانولوله..... ۷۰
- ۸-۲ تصویر شماتیک از نحوه پیچش نانولوله زیگزاگ (۷و۰)..... ۷۱
- ۹-۲ تصویر شماتیک از نحوه پیچش نانولوله نوع صندلی (۶و۶)..... ۷۱
- ۱۰-۲ تصویر شماتیک از نحوه پیچش نانولوله نامتقارن (۹و۲)..... ۷۲
- ۱۱-۲ نمایش بردار کایرال وانتقال در شبکه گرافن..... ۷۳
- ۱۲-۲ نمایش انواع نانولوله های کربنی تک دیواره صندلی، زیگزاگ و نامتقارن..... ۷۳

- ۱۳-۲ نانومخروط ۱۲۰ درجه و صفحه گرافن مربوط به آن ۸۶
- ۱-۳ گازهای نجیب در جدول تناوبی ۸۹
- ۲-۳ میزان جذب زنون در داخل نانولوله کربنی برحسب فشار در دمای ۹۵ کلوین ۹۶
- ۳-۳ جذب نئون داخل نانومخروط و خارج نانومخروط ۹۷
- ۴-۳ میزان جذب روی سطح درونی و خارجی نانو مخروط در دمای ۲۲/۷ کلوین ۹۸
- ۵-۳ میزان جذب نئون در داخل نانومخروط 240° در دماهای مختلف ۹۸
- ۱-۴ تصویری از جذب هلیم روی قسمت بیرونی و داخلی نانومخروط با زاویه 240° ... ۱۰۲
- ۲-۴ جذب هلیم روی سطح داخلی و سطح خارجی نانومخروط 300° ۱۰۳
- ۳-۴ شش نوع نمودار جذب ۱۰۴
- ۴-۴ مقدار جذب هلیم داخل نانومخروط های 180° ، 240° و 300° ۱۰۶
- ۵-۴ مقدار جذب هلیم خارج نانومخروط های 180° ، 240° و 300° ۱۰۷
- ۶-۴ مقدار جذب هلیم خارج و داخل نانومخروط های مختلف ۱۰۸
- ۷-۴ مقدار جذب هلیم داخل نانومخروط 240° و 300° بر حسب طول نانومخروط ۱۰۹
- ۸-۴ نمودار میزان جذب خارج و داخل نانولوله (۵و۵) باز بر حسب فشار ۱۱۰

چکیده

در این پایان نامه با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، اثر زاویه نانومخروط روی ظرفیت جذب گاز هلیم در نانومخروط های کربنی مطالعه شد. مقادیر جذب برای نانومخروط های 180° , 240° و 300° در دماهای مختلف، مقایسه شد. نتایج نشان می دهد که جذب اتم های هلیم روی خارج و داخل نانومخروط ها اتفاق می افتد. در شرایط اشباع مقدار جذب داخل با افزایش زاویه کاهش می یابد. این همچنین فهمیده شد که دما اثر قابل ملاحظه ای در مقدار جذب روی نانومخروط های کربنی دارد. مقایسه مقدار جذب در نانومخروط ها با نانولوله های کربنی نشان می دهد که مقدار جذب نانومخروط ها بیشتر از نانولوله ها است. نتایج در حقیقت نشان می دهد که نانومخروط ها کاندیدای مناسبی برای ذخیره گاز هستند.

فصل ۱

شبیه سازی دینامیک مولکولی

۱-۱ مقدمه

با پیشرفت علم و پیدایش کامپیوتر تحولات اساسی در پروژه های علمی پدیدار شد. برخورد انسان با طبیعت همواره از طریق مطالعه نظری و تجربی بوده است. اما با ورود و رشد چشم گیر کامپیوترها، امروزه دانشمندان از طریق شبیه سازی کامپیوتری این امکان را یافته اند که فرایندهای مختلف را از جنبه های گوناگون با دقت بیشتری مورد مطالعه قرار دهند. اولین شبیه سازی دینامیک مولکولی در جنگ جهانی دوم، به منظور شبیه سازی انفجار هسته ای در پروژه منتهن اتفاق افتاد. بخشی از دنیای فیزیکی که توجه خود را به آن معطوف می سازیم، سیستم نامیده می شود. سیستم زیر مجموعه ای از جهان است. سیستم می تواند متشکل از تعدادی از اجزای مشابه یا متفاوت باشد و شرایط این اجزاست که حالت سیستم را مشخص می کند. برای بررسی و توضیح رفتار سیستم، به راه هایی برای نسبت دادن مقادیر عددی به حالت سیستم یا توابع حالت آن نیاز داریم؛ این مقادیر مشاهده پذیرهای سیستم نامیده می شوند. با استفاده از برهمکنش ها می توان حالت یک سیستم را از محیط کنترل کرد. برهمکنش های مجاز به ماهیت مرزهایی محدود می شود که سیستم را از محیط جدا می کند. معمولاً نمی توان یک سیستم را با مشاهده مستقیم حالت آن مطالعه کرد؛ بلکه بررسی حالت سیستم به صورت غیر مستقیم و از طریق کنترل و اندازه گیری مشاهده پذیرها انجام می گیرد. سیستم ایزوله سیستمی است که با محیط اطراف خود هیچ گونه تبادل انرژی یا ماده ندارد. در یک سیستم ایزوله هیچ تماسی با محیط وجود ندارد. بنابراین با اندازه گیری مشاهده پذیرها قبل از ایزوله شدن سیستم

ها، می توانیم مقادیری برای این کمیت ها داشته باشیم. در اینجا ما تنها سیستم های ایزوله را در نظر می گیریم. برای ساماندهی، توصیف و شاید حتی پیش بینی مشاهده پذیرها، نظریه ها ابداع می شوند. نظریه ها ممکن است در سطوح مختلفی به گرفته شوند. در ساده ترین سطح، یک نظریه تنها رابطه ای میان مشاهده پذیرها برقرار می کند. قانون گازهای کامل ($PV = NKT$) که از ساماندهی نتایج حاصل از اندازه گیری فشار، حجم و دمای گازهای با چگالی کم به دست آمده، نمونه ای از یک نظریه علمی در این سطح است. در سطح بعدی، نظریه هایی قرار دارند که مشاهده پذیرها را با حالت مورد نظر سیستم مرتبط می کنند. نمونه ای از این مورد، نظریه جنبشی گازها است که از طریق سرعت های مولکولی، مشاهده پذیر دما را به حالت سیستم مربوط می سازد. نظریه ها در این سطح، تفسیر یا توضیحی برای مشاهده پذیرها فراهم می کنند؛ اما اگر حالت سیستم، خود یک مشاهده پذیر نباشد، این نظریه ها را نمی توان برای محاسبه مقادیر مشاهده پذیرها به کار گرفت.

برای غلبه بر مشکل محاسباتی، دو راهبرد پیشنهاد شده است:

۱- ساختن نظریه هایی در سطوح بالاتر

۲- انجام شبیه سازی رایانه ای

نظریه های پیشرفته تر در راستای حل مشکلات محاسباتی می کوشند تا اطلاعات مفصلی را که در باره سیستم و برای محاسبه مقادیر مشاهده پذیرها مورد نیاز است، از نو سازمان دهی و خلاصه کنند. مکانیک آماری نیز همین هدف را دنبال می کند. در مکانیک آماری آنچه به مشاهده پذیرها مرتبط می شود، حالت مورد نظر سیستم نیست، بلکه احتمال وجود سیستم در یک حالت خاص است.

راه دوم، استفاده از شبیه سازی کامپیوتری است. در یک شبیه سازی کامپیوتری به حالت های سیستم مقدارهای عددی نسبت داده می شود. بنابراین، این حالت ها تبدیل به مشاهده پذیر می شوند. پس از آنکه به حالت ها مقدارهای عددی نسبت داده شد، می توان با استفاده از رابطه های نظری نظریه جنبشی، مقدار مشاهده پذیرهایی را که در تجربه قابل دسترس هستند محاسبه کرد. شبیه سازی های

رایانه ای نقش ارزشمندی در حل بعضی از مسایل مکانیک آماری ایفا می کنند، مسائلی که بدون وجود شبیه سازی فقط با استفاده از روشهای تقریبی قابل حل هستند و گاهی نیز اساسا روش دیگری برای حل آنها وجود ندارد. شبیه سازی های کامپیوتری ویژگی های میکروسکوپی یک سیستم را به خواص ماکروسکوپی آن پیوند می دهند، خواصی که از دیدگاه تجربی از اهمیت چشم گیری برخوردار است. از آنجا که امروزه بررسی های نظری معمولا با استفاده از مدل سازی، و شبیه سازی یا هر دو انجام می شود، شناخت تفاوت های مدل سازی و شبیه سازی بسیار مفید خواهد بود.

هدف یک کار نظری ایجاد ارتباط بین مشاهده پذیرهای خروجی و ورودی های کنترل شده است. بخشی از یک مسئله نظری، تعریف حالت است. این حالت باید به گونه ای تعریف شود که بر همکنش های پیچیده بین متغیر های حالت، تفکیک یا لااقل ضعیف شود و بتوان مشاهده پذیرهای خروجی را محاسبه کرد.

در یک مدل تلاش می شود تا بر هم کنش هایی که اثر کمی بر مشاهده پذیرهای مورد مطالعه دارند یا بر آن ها بی تاثیرند، تفکیک یا حذف شوند. در نتیجه یک مدل ساده به حالت هایی دسترسی دارد که برای سیستم اصلی قابل دسترسی نیست و بر عکس. به عبارتی یک مدل یک زیر مجموعه یا زیر سیستم از سیستم اصلی است.

بر خلاف مدل سازی، یک شبیه سازی پیچیده تر از سیستم مورد مطالعه است. یک شبیه سازی عموما می تواند به تعداد حالتهای بسیار بیشتری نسبت به سیستم اصلی دست یابد. بنابر این در شبیه سازی ها محدودیت هایی اعمال می شود تا خروجی شبیه سازی شده، دست کم برای مجموعه معدودی از ورودی ها با خروجی سیستم اصلی سازگار باشد. یک شبیه سازی معمولا هیچ رابطه ساختاری با سیستم اصلی ندارد؛ به عنوان مثال، شیوه اعمال محدودیت ها در شبیه سازی ممکن است با مکانیسمی که سیستم اصلی را به حالت های معینی محدود می کند، تفاوت داشته باشد. با آنکه شبیه سازی پیچیده تر از سیستم اصلی است، نمی توان نتیجه گیری کرد که سیستم اصلی مدلی از شبیه

سازی است. معمولاً در شبیه سازی ماده مورد مطالعه و مشاهده پذیرهای آن انتخاب شده، سپس مدلی برای آن ماده پیشنهاد می شود. به عنوان مثال برای مطالعه خواص ترمودینامیکی آرگون از مدل پتانسیل جمع پذیر جفتی لnard-جونز با فرض تقارن کروی مولکول ها استفاده می شود. این به درستی یک مدل است: پتانسیل لnard-جونز^۱ ساده تر از پتانسیل واقعی آرگون است، زیرا اتم های آرگون، کره های کاملی نیستند و برهمکنش آنها نیز فقط از نوع پتانسیل جمع پذیر جفتی نیست. پس از انتخاب مدل، شبیه سازی به اجرا در می آید، اما آنچه در این جا شبیه سازی می شود نه خود آرگون بلکه تنها مدل لnard-جونز آرگون است. این شبیه سازی از مدل پیچیده تر است، اما این پیچیدگی مضاعف، واقعی بودن مشاهده پذیرهای خروجی را افزایش نمی دهد. کسانی که ادعا می کنند، دینامیک مولکولی آرگون، آب، پروتئین ها یا هر ماده دیگری را شبیه سازی می کنند، در اشتباهند. زیرا در واقع، تنها مدل های مولکولی این مواد است که شبیه سازی می شود. [۱]

۱-۲ ارتباط شبیه سازی با تجربه

برخی مسائل در مکانیک آماری به طور دقیق حل می شوند. منظور این است که توصیف کاملی از خواص میکروسکوپی سیستم (از قبیل هامیلتونی یک مدل ایده آل) به طور مستقیم و به راحتی منجر به مجموعه ای از نتایج جالب یا خواص ماکروسکوپی (مانند معادله حالت) می شود. فقط تعداد کمی از مسائل در مکانیک مولکولی به راحتی قابل حل هستند، مدل ایزینگ^۲ دو بعدی نمونه معروفی از این گونه مسائل قابل حل است. برخی مسائل در مکانیک آماری ممکن است به طور دقیق قابل حل نباشند، اما می توان آنها را بر مبنای یک الگوی تقریبی تجزیه و تحلیل کرد. در این مورد، کامپیوترها نقش بسیار مهم دارند. شبیه سازی کامپیوتری نقش با ارزشی در فراهم آوردن نتایج دقیق برای

^۱ Lennard-jones

^۲ Ising model

مسایلی در مکانیک آماری ایفا می کند که ممکن است با روش های دیگر قابل حل نباشد یا فقط بتوان آنها را با روشهای تقریبی حل کرد. نتایج شبیه سازی را می توان با نتایج آزمایش های واقعی نیز مقایسه کرد. در قدم اول، این خود آزمونی از مدل مورد استفاده در یک شبیه سازی کامپیوتری است. سرانجام اگر مدل خوب باشد، کسی که شبیه سازی می کند امیدوار است که به آزمایشگرها دیدگاه های تازه ای پیشنهاد دهد و به توصیف نتایج جدید کمک کند. شبیه سازی کامپیوتری راه مستقیمی از ویژگی های میکروسکوپی یک سیستم (جرم اتم ها، برهم کنش بین آن ها، ساختار مولکولی و ...) به خواص ماکروسکوپی و تجربی مورد نظر (معادله حالت، ضرایب انتقال، پارامتر های ترتیب ساختاری و ...) در اختیار قرار می دهد. این نوع اطلاعات هم از نظر تحقیقاتی و هم از نظر صنعتی سودمند هستند. اجرای برخی آزمایش ها در شرایط دما و فشار بسیار بالا مشکل یا ناممکن است، در حالی که شبیه سازی کامپیوتری آن به طور کامل قابل اجرا است. [۲۱]

۱-۳ شبیه سازی مولکولی

یک شبیه سازی در مقیاس مولکولی متشکل از سه مرحله اصلی است:

۱- ساختن یک مدل

۲- محاسبه مسیرهای مولکولی

۳- تجزیه و تحلیل مسیرها و محاسبه مقدار خواص ترمودینامیکی

در ساخت مدل شبیه سازی نیاز به یک پتانسیل مناسب که از دو قسمت زیر تشکیل می شود داریم:

۱- برهمکنش بین مولکول ها با خودشان

۲- برهمکنش بین مولکول ها و محیط اطرافشان

این تابع پتانسیل به طور ضمنی شکل هندسی مولکول‌ها و به عبارتی توزیع ابرهای الکترونی آن‌ها را توضیح می‌دهد. تعیین نمودن تابع پتانسیل، مدلی را برای ساختار مولکول‌ها تعریف می‌کند و این نخستین قدم برای شبیه‌سازی است.

در بسیاری از شبیه‌سازی‌ها انرژی پتانسیل بین مولکولی به صورت زوج‌های برهمکنشی در نظر گرفته می‌شود.

$$U = \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad (1-1)$$

که $U(r_{ij})$ تابع انرژی پتانسیل بین جفت‌ها می‌باشد و r_{ij} فاصله بین اتم‌های i و j می‌باشد و در نتیجه نیرو از رابطه

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial \vec{r}_i} \quad (2-1)$$

بدست می‌آید. قسمت دوم مدل شبیه‌سازی مربوط به مرزها می‌شود که در آن نحوه برهمکنش با محیط اطراف مشخص می‌شود شرایطی که تحت آن شبیه‌سازی انجام می‌گیرد به طور گسترده‌ای بر شرایط مرزی تأثیر می‌گذارد. برای مقاصد کنونی ما، فقط شرایطی که سیستم‌های ایزوله را تعریف می‌کنند، مهم می‌باشند. بنابراین هیچ برهمکنشی بین سیستم و محیط اطراف در نظر نمی‌گیریم. در دینامیک مولکولی به وسیله حل عددی معادلات دیفرانسیل حرکت، می‌توانیم مکان را بدست آوریم.

۱-۴ دینامیک مولکولی

به طور کلی، روش دینامیک مولکولی برای دو حالت کلی به کار برده می‌شود:

۱- سیستم‌های در حال تعادل

۲- سیستم‌های غیر تعادلی

دینامیک مولکولی تعادلی معمولاً برای سیستم‌های ایزوله به کار می‌رود که شامل تعداد مشخص N مولکول در حجم ثابت V است. از آنجا که سیستم ایزوله می‌باشد انرژی کل E که در مجموع انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی است، نیز ثابت است. با این توضیح، می‌توان گفت که متغیرهای N ، V و E حالت ترمودینامیکی سیستم را مشخص می‌کنند. در دینامیک مولکولی N ، V و E مکان‌های مولکولی از حل معادله حرکت نیوتن به دست می‌آید.

$$\vec{F}_i(t) = m\vec{\ddot{r}}_i(t) = -\frac{\partial U(\vec{r}^N)}{\partial \vec{r}_i} \quad (3-1)$$

که \vec{F}_i نیروی اعمال شده بر مولکول i ام از طرف $N-1$ مولکول دیگر است. با یک بار انتگرال‌گیری از رابطه ۳-۱ اندازه حرکت خطی بدست می‌آید و با انتگرال‌گیری مجدد مکان مولکول‌ها بدست می‌آید. اگر این عمل را برای تک تک مولکول‌ها انجام دهیم مسیرهای متفاوتی حاصل می‌شود بنابراین مسیرهای عددی متوسط می‌تواند از طریق فرمول زیر بدست آید.

$$\langle A \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} A(\tau) d\tau \quad (4-1)$$

این رابطه را می‌توان این گونه تعبیر کرد که اگر $A(\tau)$ یکی از خواص سیستم در لحظه τ باشد، میانگین زمانی آن یکی از خواص ماکروسکوپی را بدست می‌دهد. در زیر به طور خلاصه مواردی در ارتباط با دینامیک نیوتنی و دینامیک هامیلتونی بیان می‌کنیم.

۱-۴-۱ دینامیک نیوتنی

در بیان دینامیک نیوتنی جابجایی مولکول i ام ناشی از نیروهای خارجی است که بر آن اعمال شده است. تغییر مکان این مولکول r_i و نیروی وارد بر آن \vec{F}_i از طریق قانون دوم نیوتن به هم مربوط می‌شوند.