

## (2) Molekular-Dynamik (MD)

$$m_i \cdot \ddot{\vec{x}}_i = - \vec{\nabla}_i U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad i=1, \dots, N$$

wobei  $N$  ... Anzahl Atome

$\vec{x}_i$  ... Position des  $i$ -ten Atom

$U$  ... Potential (hängt von allen Atomen ab!)

System gewöhnlicher DGLen 2. Ordnung für die Positionen der Atome  $\vec{x}(t)$  (Im Prinzip einfach nur Newton's Bewegungsgleichungen).

## (3) Maxwell-Gleichungen

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

magnetische Feldstärke  $\vec{H}$ , Stromdichte  $\vec{j}$ , elektrische Flussdichte  $\vec{D}$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

magnetische Flussdichte  $\vec{B}$ , elektrische Feldstärke  $\vec{E}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho$$

elektrische Ladungsdichte  $\rho$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

System von partiellen DGL

(weil partielle Ableitungen auftauchen!)