

(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 Stromdichte elektrische Flussdichte

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

magnetische Flussdichte

elektrische Feldstärke

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

elektrische Ladungsdichte

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

System von partiellen DGL

(weil partielle Ableitungen auftauchen!)