

## Teoretisk modellering: hur vi beskriver verkligheten

Att veta hur något kommer att svara på en handling är viktig information att ha, inom fysiken liksom i vardagen. Medan den mer vanliga typen av handling-respons kanske handlar om att veta om ett föremål går sönder om jag råkar tappa det, så är responsen man tittar på inom materialfysik snarare relaterat till hur någonting utifrån kommer att påverka materialet. Att beräkna denna påverkan är däremot oftast svår, om inte omöjlig, men vi är inte desto mindre intresserade av att beräkna den. Istället har ungefärliga metoder utvecklats, men för att dessa metoder ska kunna användas för riktiga experiment så måste det först fastslås hur bra denna förenklade metod verkligen överensstämmer med verkligheten.

Ett exempel på hur omvärlden kan påverka ett material är helt enkelt genom att skina ljus på det. Detta påverkar elektronerna som åker runt inuti och kan, beroende på ljuset, ha olika effekter på elektronerna. De kan antingen *exciteras*, få mer energi, eller flyga ut ur materialet. Det senare är den typ av experiment som görs på det nyöppnade MAX IV i Lund där de utkastade elektronerna kan användas för att bestämma egenskaper hos materialet, vilket visar på vikten som läggs på den här typen av forskning.

Eftersom den här typen av experiment bevisligen blir mycket dyr är det inte alltid möjligt att undersöka allt som hade önskats. Däremot så kan effekten av den yttre påverkan även räknas ut, kanske inte med papper och penna, men åtminstone en dator. Det kan därför kanske verka perfekt att bara kunna skriva ett litet program och få reda på allt vi någonsin skulle kunna drömma om att veta om materialet i fråga, men dessvärre är det inte så enkelt. Detta beror på den enorma storleken på problemet med ett ofattbart antal elektroner som inte bara påverkas av det yttre utan även interagerar med varandra. Så hur kan man lösa detta? Istället för att titta på ett riktigt material används modeller, som får representera det verkliga problemet, och approximationer som förenklar de inblandade faktorerna. Om då en tillräckligt enkel modell, som representerar en verklig fysisk situation, används, är det möjligt att exakt beräkna vad effekten blir. Genom att jämföra detta med den förenklade approximationen och se ifall de två ger samma svar är det möjligt att se hur denna approximativa metod fungerar. I sin tur ger det oss möjligheten att få information om vad vi kan förvänta oss när vi gör beräkningarna för riktiga material: hur väl överensstämmer vår matte egentligen med verkligheten?