

Physik

Festkörperanalyse mithilfe des Fermi- Hubbard-Modells

Hugo Hager Fernández
Heidelberger LifeScienceLab

Landeswettbewerb Rheinland-Pfalz



BASF ist Patenfirma des
Landeswettbewerb Jugend forscht
in Rheinland-Pfalz

jugend  forscht 2021

Internal

GEFÖRDERT VOM



Fragestellung und Lösungsansatz

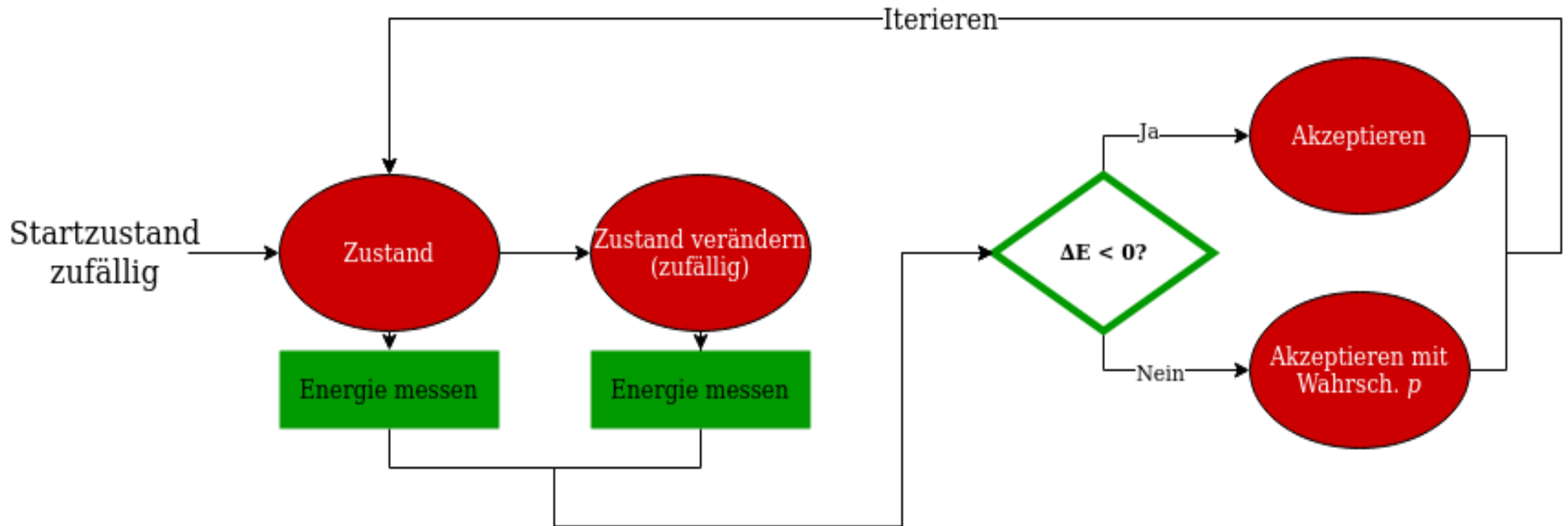
- Von Interesse: Verhalten von **Elektronen** in einem **Festkörper** → physikalisch sehr kompliziert
- Das Hubbard Modell:
 - Vereinfachende Annahmen
- Verhalten der Elektronen bestimmt durch **Zustand der geringsten Energie**
- Exaktes Errechnen dieses Zustands: Rechnerisch extrem aufwendig

→ **Alternative: Approximation**

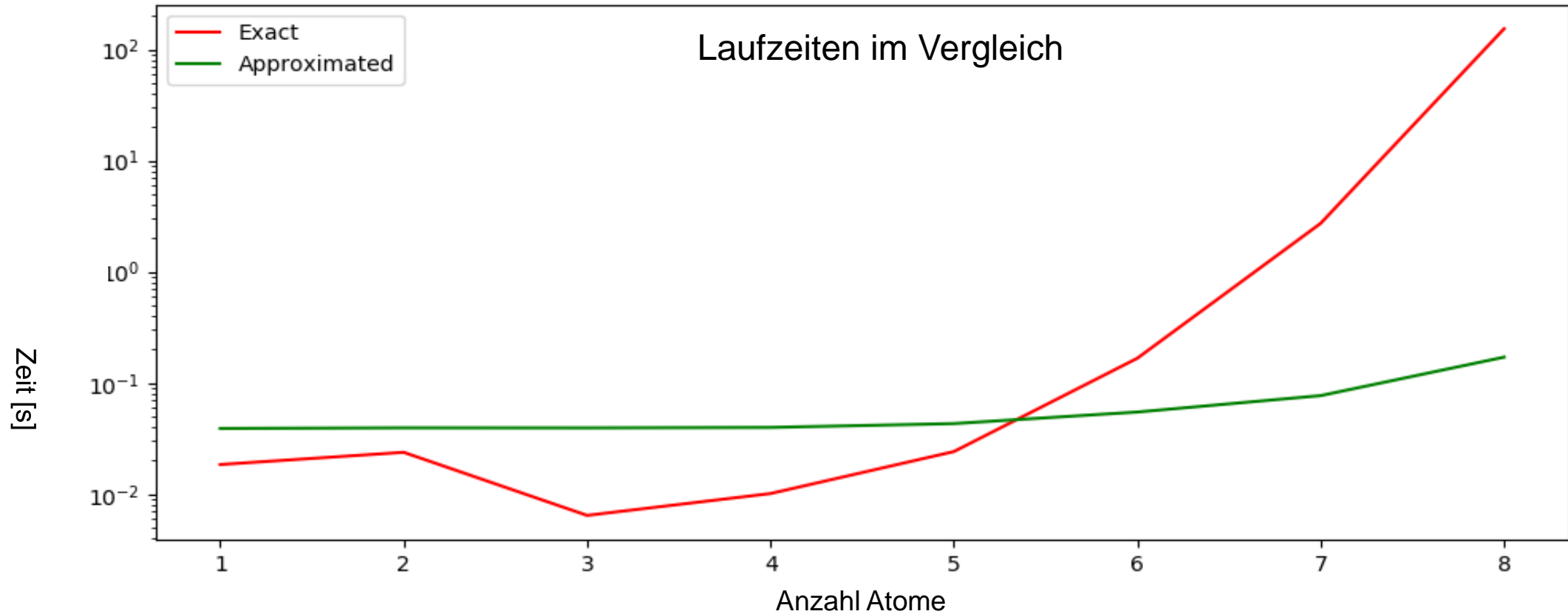
• In dieser Arbeit wurde ein Algorithmus entwickelt, der den Grundzustand eines Festkörpers nähert.

Die Approximation

- Grundgerüst: sog. Random-Walk-Algorithmus:
 - Suche nach einem Zustand mit möglichst geringer Energie



Ergebnisse



→ Ein Laufzeitgewinn von mehreren Größenordnungen

Weitere Infos und der Source Code: <https://github.com/HugoHF/Erwartungswert-Reduzierer>