M.Ü. Atatürk Eğitim Fakültesi Eğitim Bilimleri Dergisi
Yıl: 1990, Sayı: 2, Sayfa: 175 - 185

BİLGİSAYAR DESTEKLİ EĞİTİM: POTANSİYEL PROBLEMLERİNİN BİLGİSAYAR SİMÜLASYONU

Sedat ÖZSOY*

Prof. Dr. M. Ali ÇORLU**

ÖZET

Bu çalışmada, konumun sürekli veya sürekli olmayan fonksiyonları şeklindeki potansiyel ifadeleri ile tanımlanan sistemlerin özfonksiyonları ve özdeğerleri kavramlarını işlemeye yardımcı olacak bir bilgisayar simülasyon verilmiştir.

SUMMARY

COMPUTER AIDED EDUCATION: COMPUTER SIMULATION OF POTENTIAL PROBLEMS

In this study a mathematical model and its computer simulation, to obtain the eigenvalues and the eigenfunction of the system described by potential functions, were given.

1. GİRİŞ

Bilgisayarların eğitimde kullanım şekli iki ana gruba ayrılabilir: Birincisi, "Bilgisayar Destekli Ders (BDD)"; ikincisi, "Bilgisayar Destekli Laboratuvar (BDL)". BDD, konuların, bilgisayar ortamında elde edilen şekil, grafik ve çizelgeler yardımıyla işlendiği bir eğitim şeklidir. BDD'de şekil, grafik ve çizelgeler statiklikten kurtulup dinamik bir yapı kazanır. Öğrenci, üzerinde çalıştığı şekil, grafik ve çizelgenin son halini değil, oluşumunu izleyebilir ve parametrelere değişik değerler vererek, bunun sonuçları nasıl etkilediğini görebilir. Bununla birlikte, öğrencinin bilgisayarla yalnız başına çalışması sırasında, çalışmanın daha verimli olabilmesi için, özel olarak hazırlanmış "Bilgisayar Destekli Ders Kitabı" olmalıdır. Ancak, öğrencinin dikkatinin kitap ile bilgisayar arasında dağılması gibi bir sakınca ortaya çıkabilir. Ayrıca, öğrencinin şekil, grafik çizme ve çizelge hazırlama gibi hünerlerinin gelişmesine de zararı dokunabilir. Bütün bunlara rağmen, BDD yetişmiş öğretmenler tarafından ve bilgisayar bir "elektronik kara tahta" olarak kullanılarak yapılarsa, faydasının zararından daha fazla olacağı da şüphesizdir. BDD ve simülasyon, nümerik analizden istatistiğe, mekanikten elektromanyetizmaya, optikten nükleer fiziğe uzanan pek çok alanda etkin bir biçimde kullanılabilmektedir (Harding 1986; Carle, Greenslade 1986, Ragget 1978; Thomas, Grows 1984; Brilhart, Bell 1983; Hayden 1984; Kagan 1984; Fleracker, Janssen, Paulis 1989; Dodd 1983).

BDL'ye gelince, bir laboratuvar çalışmasının gerektirdiği çalışmalardan bazıları öğrenciden alınıp bilgisayara verilebilir. Bir bilgisayarın,

- Gözlem gücünü artırma,
- Ölçme kalitesini artırma,
- Veriyi ekonomik şekilde kaydetme,
- Yüksek kalitede fazla bilgi sağlayacak yorumu kolaylaştırma,
- Veriyi incelemek için hesaplama ve analiz etmede yardımcı olma gibi potansiyellerinin olması, sağlıklı bir laboratuvar çalışmasında yapılması gereken,

- Cihaz kullanma,
- Gözlem yapma,
- Soru sorma,
- Ölçme,
- Veri kaydı,
- Veri analizi

*Erciyes Ü. Müh. Fakültesi Elektronik Mühendislik Bölümü Öğretim Elemanı.
**Marmara Ü. Atatürk Eğitim Fakültesi Fizik Eğitimi Bölümü Öğretim Üyesi.

- Sonuç çıkarma,
- Sonuçların sunulması

gibi faaliyetlerden bazılarının bilgisayar tarafından yapılması ile, ne oranda bir kazanç elde edileceğini açıkça ortaya koymaktadır.

Bilgisayarların laboratuvarda kullanılmasıyla, öğrenci dikkatinin ve zamanının çoğunu elde edilen verinin karşılaştırılmasına, analize ve yoruma ayırır. Verinin bilgisayarla toplanmasının bir diğer faydası da, öğrenciyi tek bir veri takımıyla yetinmekten kurtarması ve yeter sayıda veri elde etme kolaylığı sağlamasıdır. Ayrıca, geleneksel araçlarla ölçmenin zor olduğu özellikleri araştırmada bilgisayar destekli ölçme tekniği en uygun yoldur. Bununla birlikte, geleneksel ölçme teknikleriyle bilgisayar destekli ölçme tekniklerinin kullanımı dengelenmelidir; aksi takdirde öğrencilerin doğru deney ve ölçme yapma gibi hünerleri gelişmeyebilir.

Bilgisayarların laboratuvarlarda sensörler, transdüserler ve diğer elektronik düzenler yardımıyla zaman, voltaj, viskozite vb. gibi pekçok fiziksel parametrenin ölçülmesinde kullanıldığı görülmektedir (Rogers 1987; Wepfer, Oehmke 1987).

2. POTANSİYEL FONKSİYONLARININ BİLGİSAYAR SİMÜLASYONUYLA ÖZDEĞERLERİNİN ELDESİ

2.1. Teori

Bir boyutlu veya bir boyuta indirgenebilen potansiyeller için zamandan bağımsız bir boyutlu Schrödinger dalga denklemi,

$$\frac{d\psi^2}{dX^2}=\frac{-8\Pi^2 m}{h^2}[E - V(X)]\psi \qquad (1)$$

biçimindedir. V(x) potansiyeti konunun sürekli veya sürekli olmayan bir fonksiyonu olabilir. Ayrıca, x'e göre simetrik veya simetrik olmayan potansiyeller de bulunabilir. İlk olarak,

$$V(X)=\frac{1}{2}kX^2$$

ile tanımlanan bir boyutlu harmonik osilatör potansiyeli gibi x'in çift fonksiyonu olan simetrik potansiyel durumunu inceleyelim. Böyle bir potansiyel fonksiyonu, herhangi özel bir X: değeri için aldığı değeri -X: için de alır. Potansiyelin kendisinin olduğu gibi, bu potansiyel içindeki parçacığın da aynı simetrik davranışı göstermesi beklenir. Born postülatına göre parçacığın davranışı ψ^2 ile belirlendiği için ψ^2 X'e göre çift fonksiyon olmalıdır. Bu ise ψ 'nin ya tek veya çift bir fonksiyon olması anlamına gelir (Şekil-1). Yani

$$\psi(-x_i)=+\psi(x_i)$$

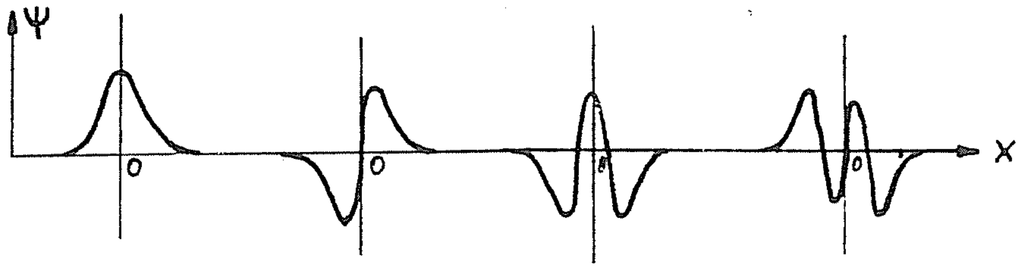
veya

$$\psi(-x_i)=-\psi(x_i)$$

olmalıdır. Böylece ψ^2, her iki durumda da,

$$\psi^2(-x_i)=+\psi^2(x_i)$$

olur. ψ^2'nin simetrisinden dolayı, çözümleri x eksininin yalnız pozitif yarısı için belirlemek yeterli olur.



Şekil-1: Harmonik osilatör potansiyeli için ilk birkaç özfonksiyon

Şekil-1'den dalga fonksiyonlarının başlangıç değerlerinin (x=0 için) ya

$$\frac{d\psi}{dx} = 0 \tag{2}$$

veya

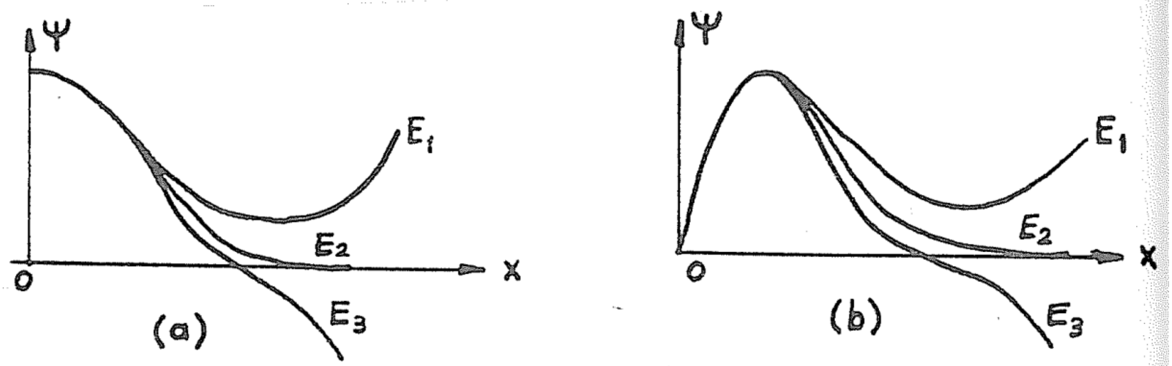
$$\psi = 0 \tag{3}$$

olması gerektiği açıkça görülmektedir (2) şartı bir "çift" fonksiyon, (3) şartı bir "tek" fonksiyon verir. Çift fonksiyon durumu için ψ 'nin, tek fonksiyon durumu için ise $d\psi/dx$ 'in başlangıç değerinin nasıl seçileceği çok önemli değildir. Denk. (1) ψ 'ye göre leneer olduğundan, başlangıç değerlerinin bir çarpanla çarpılması yoluyla bir büyültme veya küçültme, ψ 'nin bütün değerlerinin aynı oranda değişmesine yolaçar; fakat özfonksiyonların esas davranışını çok önemli ölçüde değiştirmez.

Çift veya tek fonksiyon durumunun her ikisinin birden, sadece x=o'a göre simetrik potansiyel problemlerinde ortaya çıkacağı açıktır. x=o'da sonsuz olan potansiyeller gibi diğer bazı potansiyel problemlerinin çözümünde, elbette sadece tek fonksiyonlar aranacaktır; çünkü potansiyel sonsuz olduğu sınırda dalga fonksiyonu sıfır olmalıdır. (1) dalga denkleminin çözümleri üzerinde sınır ve süreklilik şartları ve fiziksel olup olmama gibi hususların önceden bilinmesi gerekir. (1) dalga denkleminin çözümlerinin fiziksel olabilmesi için ψ dalga fonksiyonunun ve birinci türevi $d\psi/dx$ in her yerde sünakli ve tek değerli olması gerekir [$V(x) = \infty$ durumunda $d\psi/dx$ tanımsızdır] (Schiff 1982; Eisberg 1961).

2.1.1 Schrödinger Teorisinde Enerjinin Kuantumlu Olması

Enerjinin kuantumlu olması, Schrödinger teorisinin tabiî bir sonucudur. Fiziksel (karesi integrallenebilir) bir çözüm ancak E enerjisinin bazı kesikli değerleri için bulunabilir ve bu enerjilerin herbirine sistemin bağlı bir duraklı durumu karşılık gelir (Eisberg 1961; Feynman 1966). Şekil-2a veb'de, tek ve çift dalga fonksiyonları için kabul edilebilir çözümler gösterilmiştir.



Şekil-2: (a) Uygun ilk çift dalga fonksiyonu ve karşı gelen enerji (E_2); (b) Uygun ilk tek dalga fonksiyonu ve karşı gelen enerji (E_2).

2.2. Nümerik Yöntem

$$\frac{d^2y}{dx^2} = C\left(x, y, \frac{dy}{dx}\right) \qquad 4$$

şeklinde verilmiş olan ikinci mertebeden bir diferansıyel denklemin nümerik çözümü, x_0, y_0 , ve $(dy/dx)_0$ başlangıç değerleri verilmek üzere,

$$\frac{dy}{dx_{1/2}} = \frac{dy}{dx_0} + C.\frac{\Delta x}{2} \qquad 5$$

$$\frac{dy}{dx_{i+1/2}} = \frac{dy}{dx_{i-1/2}} + C.\Delta x \qquad 6$$

$$y_{i+1} = y\,(x_i+h) = y_i + \frac{dy}{dx_{i+\frac{1}{2}}}\,.\,\Delta x \quad ; \quad i = 0, 1, 2, \ldots\ldots, n \qquad 7$$

denklemiyle elde edilebilir. Yöntemin adım başına kesme hatası $(\Delta x)^3$ mertebesindedir. Yöntemin doğruluğu hakkında hemen hemen bütün durumlarda aşağıdaki hususlar geçerlidir (Biondi, Midoro, Pescetti 1979; Eisberg 1976).

- Δx artışı (adım büyüklüğü) ne kadar küçük seçilirse doğruluk o kadar artar,
- İstenen doğruluğa ulaşmak için, eğim ne kadar büyükse adım büyüklüğü o kadar küçük seçilir,
- Eğer Denk. (4)'deki C(x, y,y'), birinci mertebeden türevi de ihtiva ediyorsa

doğruluk azalır.

Bu yöntemle çözümü yapılacak olan (1) tipi denklemlerde karşılaşılacak olan C ifadeleri, dalga fonksiyonunun birinci mertebeden türevini ihtiva etmediğinden, sonuçların iyi bir doğrulukla eldesi beklenir.

2.3. Matematik Model ve Nümerik Çözümler

Denk. (1), çeşitli potansiyeller için probleme uygun boyutsuz değişkenler ve parametreler kullanılarak, Kesim-2.2'deki nümerik yöntemin hemen uygulanabileceği,

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = C\,(u, \psi) \qquad 8$$

haline sokulur. Burada u, boyutsuz konum değişkenidir.

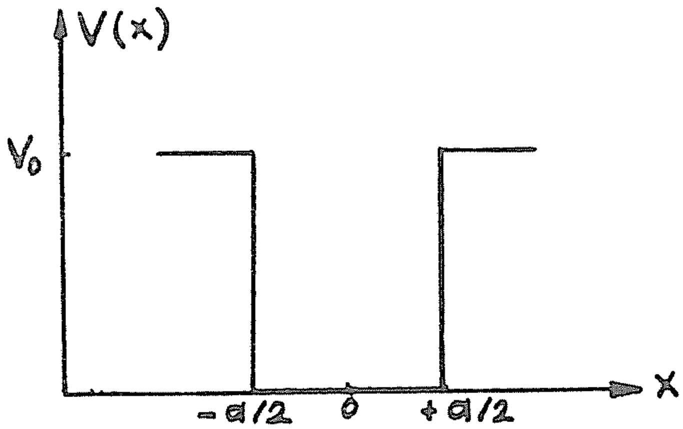
Aşağıda, sürekli olmayan potansiyel fonksiyonuna örnek olarak kare kuyu potansiyel; sürekli potansiyel fonksiyonuna örnek olarak Wodd-Saxon potansiyeli kullanılarak, enerji özdeğerlerinin bilgisayar simülasyonuyla eldesi verilmiştir.

2.3.1. Sonlu Kare Kuyu Potansiyeli

Şekil-3'de sonlu bir kare kuyu potansiyel örneği verilmiştir.
Bu potansiyel bir boyutludur ve

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \;; & x < \frac{a}{2},\ x > \frac{a}{2} \\ O \;; & -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2} \end{cases}$$

ile tanımlanır.



Şekil-3: Bir boyutlu sonlu kare kuyu potansiyel

Denk.(1) bu potansiyel için,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \begin{cases} -\frac{8\Pi^2 m}{h^2} E.\Psi \;; & -\frac{a}{2} < x < +\frac{a}{2} \\ -\frac{8\Pi^2 m}{h^2} (E - V_0)\Psi \;; & x < -\frac{a}{2},\ x > +\frac{a}{2} \end{cases} \qquad 9$$

haline gelir. Şimdi,

$$u = \frac{x}{a} \tag{10}$$

şeklinde boyutsuz bir değişken,

$$\beta = \frac{8\Pi^2 m a^2 V_0}{h^2} \tag{11}$$

şeklinde boyutsuz bir kuyu parametresi ve

$$\varepsilon = \frac{E}{V_0} \tag{12}$$

olarak da boyutsuz bir enerji parametresi tanımlarsak, Denk. (9),

$$\frac{d^2\Psi}{du^2} = \begin{cases} -\beta\varepsilon\Psi \ ; & -\frac{1}{2} < u < \frac{1}{2} \\ -\beta\left(\varepsilon - 1\right)\Psi \ ; & x < -\frac{1}{2}\ , u > \frac{1}{2} \end{cases} \tag{13}$$

haline gelir. Son olarak

$C_1 = -\beta\,(\varepsilon - 1)\,\psi$ $\qquad C_2 = -\beta\varepsilon\psi$ ve

gösterimlerini kullanırsak, Denk. (9), istenen

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = C$$

biçimine dönüştürülmüş olur.

2.3.2. Wood-Saxon Potansiyeli

Bir nötronun ağır bir çekirdekle etkileşmesini tanımlamak için kullanılan,

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)} \qquad a \ll R \tag{14}$$

potansiyel fonksiyonu, Wood-Saxon potansiyeli olarak bilinir (Flügge 1971). Bu potansiyel ifadesi amaca uygunluk için,

$$u = \frac{r}{2R} \qquad \text{ve} \qquad \delta = \frac{a}{2R}$$

olmak üzere,

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{|u| - 0{,}5}{\delta}\right)} \tag{15}$$

şekline sokulabilir. Bu durumda,

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = -\frac{8\Pi^2 m}{h^2}\left[E - V(r)\right]\psi(r) \quad ; \; l = 0 \qquad (16)$$

zamandan bağımsız radyal Schröringer denklemi, bu potansiyel için,

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = -\frac{8\Pi^2 m}{h^2}\left[E + \frac{V_0}{1+\exp\left(\frac{|u| - 0,5}{\delta}\right)}\right]\psi(r) \qquad (17)$$

halini alır. Şimdi,

$$\beta = \frac{32\Pi^2 m R^2 V_0}{h^2} \; , \; \varepsilon = \frac{E}{V_0}$$

değişken ve parametreleri kullanılırsa, Denk. (17),

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = -\beta\left[\varepsilon + \frac{1}{1+\exp\left(\frac{|u| - 0,5}{\delta}\right)}\right]\psi \qquad (18)$$

biçimine indirgenir. Bu da,

$$C = -\beta\left[\varepsilon + \frac{1}{1+\exp\left(\frac{|u| - 0,5}{\delta}\right)}\right]\psi$$

olmak üzere, nümerik çözüm için istenen,

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = C$$

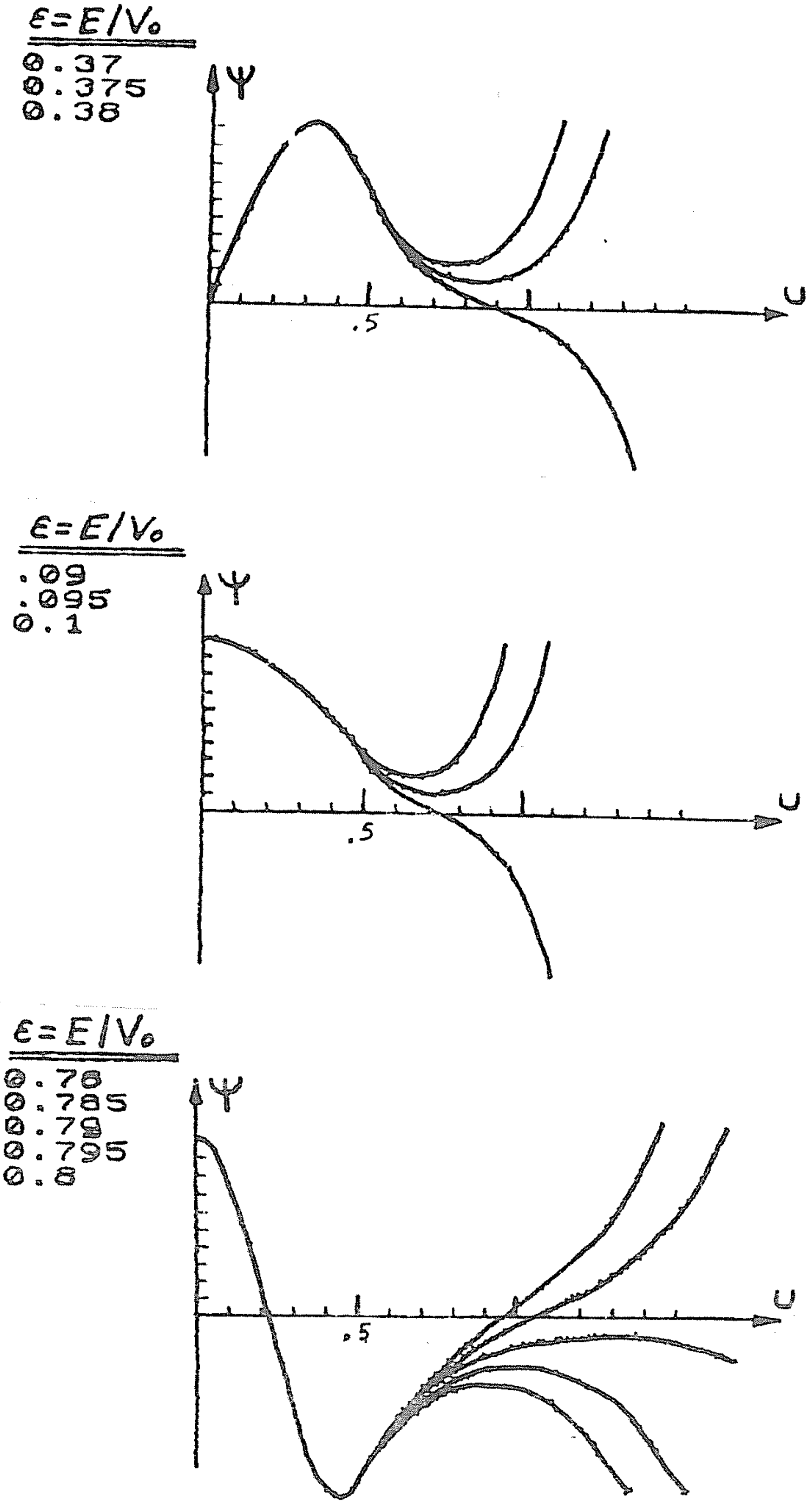
biçiminde bir diferansiyel denklemdir.

Kare kuyu potansiyel için β=64, Wood-Saxon potansiyeli için β=64 ve δ=0,01 alınarak, ilk birkaç özfonksiyon ve karşıgelen özdeğerlerin eldesi Şekil-4 ve 5'de verilmiştir.

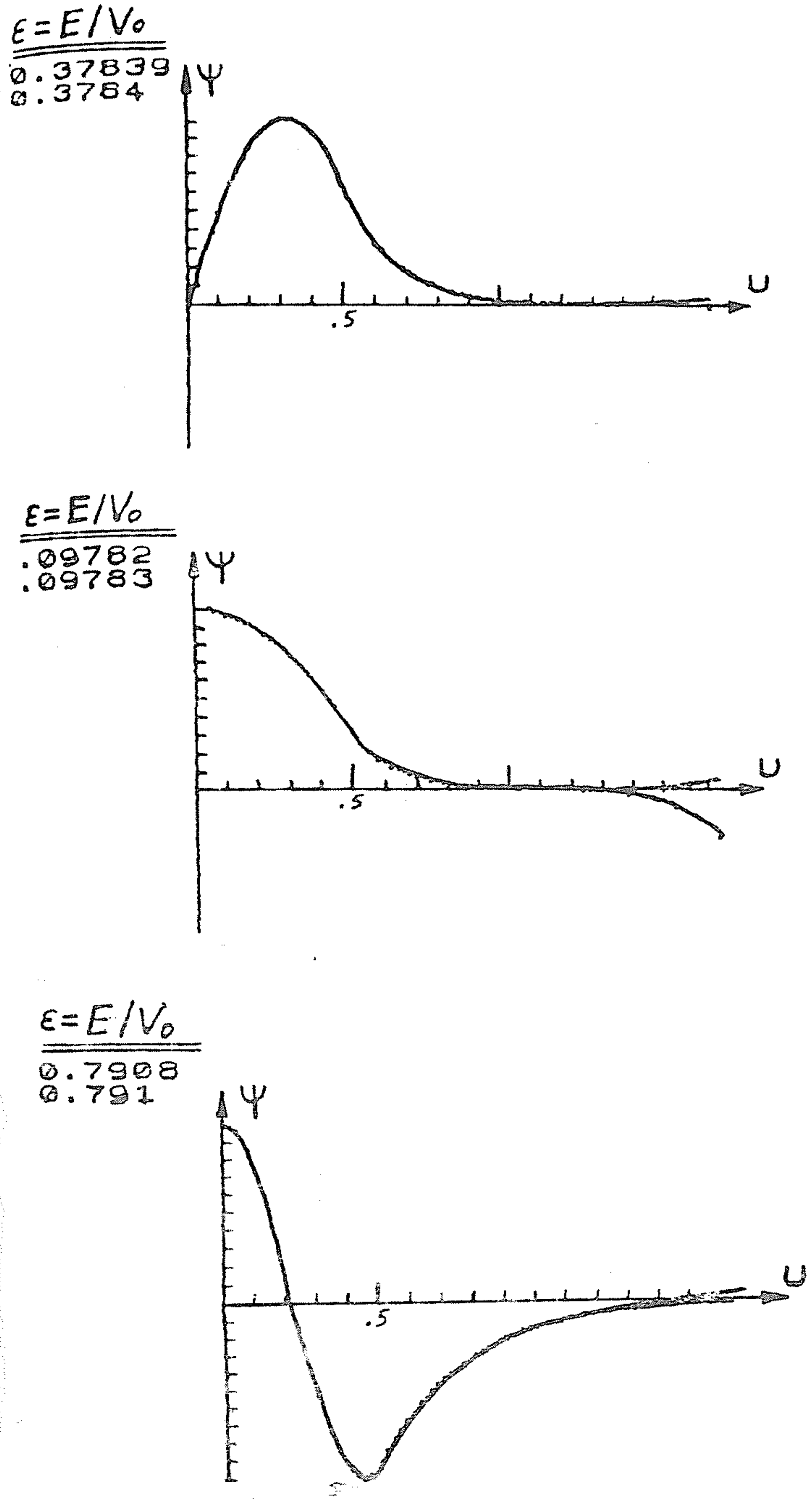
3. İRDELEME

Kabul edilebilir fonksiyonların belli bir noktadan sonra tamamen sıfır olması gerekirken, belirlenen özdeğer sınırlamalarında ya artı veya eksi sonsuza gittiği görülmektedir. Bu durum, sonsuz küçük adım büyüklükleri ile işlem yapabilen ve her sayıyı sonsuz sıfırla gösterebilen, böylece yuvarlatma hatasını yok eden bir bilgisayar bulunamadığı sürece, yöntem hatası ne kadar küçültülürse küçültülsün yine ortaya çıkacaktır.

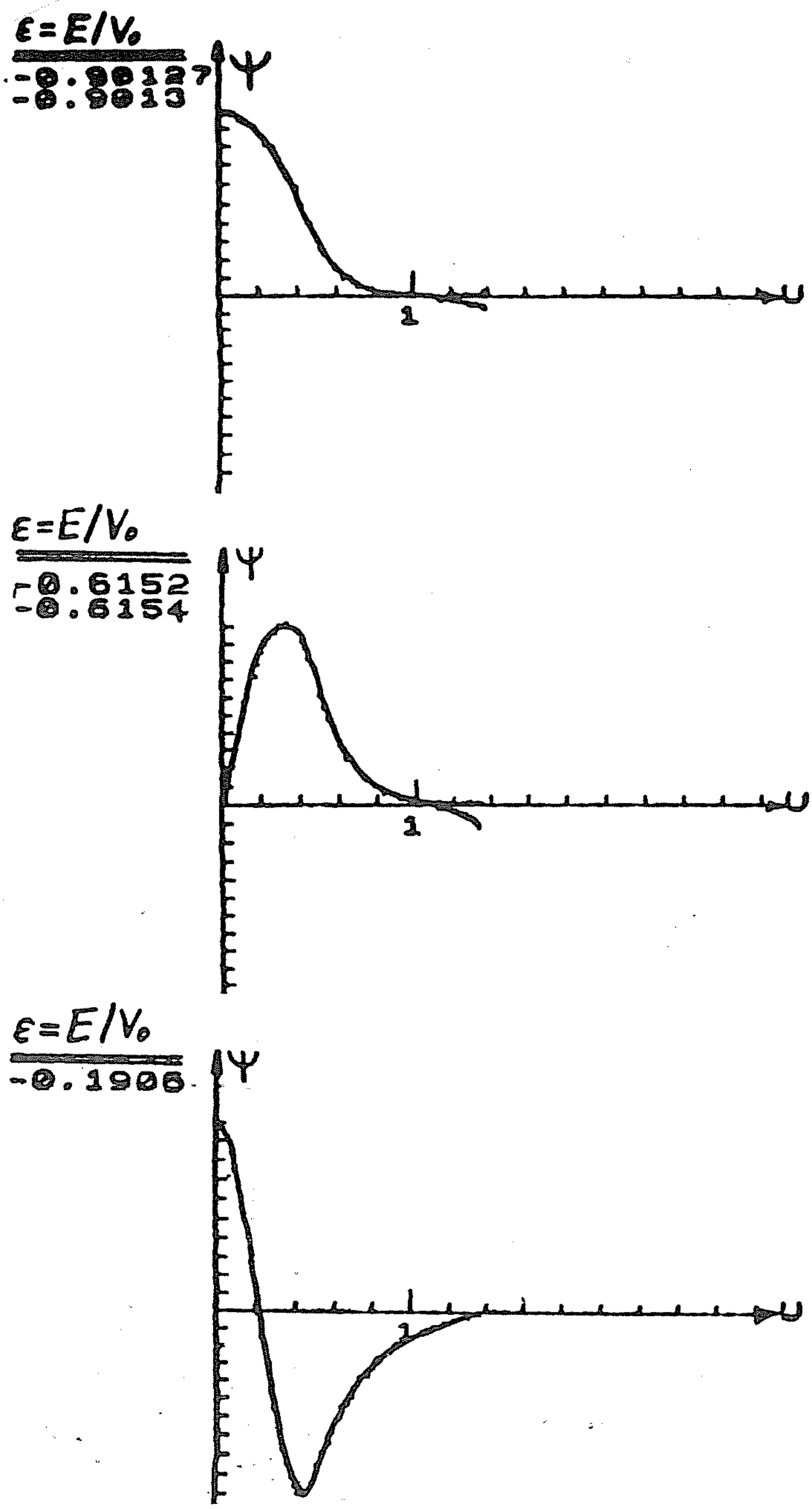
Sürekli olmayan potansiyellere ait özdeğerleri elde ederken, Δu adım büyüklüğünün, u'nun süreksizliği sınırındaki değeri elde edelecek şekilde seçilmesi gerekmektedir. Bazı potansiyel tiplerinde bazı parametrelerin belli bir sınırın altında belirlenmesi (Wood-Saxon potansiyelinde δ parametresi gibi), potansiyel fonksiyonunun alacağı değeri çok büyüttüğünden, özfonksiyonların davranışını belli u değerlerinden sonra izlemek mümkün olmamaktadır.



Şekil-4 a : Kare Kuyu Potansiyel İçin
İlk Üç Özdeğerin Aranması [17].



Şekil-4 b : Kare Kuyu Potansiyel İçin
Kabul Edilebilir Üç Özdeğer [17].



Şekil-5 : Wood-Saxon Potansiyeli İçin
Kabul Edilebilir İlk Üç Özdeğer [17].

KAYNAKLAR

BRILHART, L.V., and BELL, E., **Computer Graphics By Students For Students: Enhancing Science Education,** JCST, September-October 1983.

BIONDI, M., MIDORO, V., PESCETTI, D., **The Use Of Programmable Pocket Calculators İn Engineering İntroductory Courses,** Int.J.Elctr. Eng. Educ., v.16, no.2-3, 138-146, April 1979.

CARLE, M., GREENSLADE, T.B., **Computer Generated Diagrams For The Classroom,** The Physics Teacher, January 1986.

DODD, N.A., **Computer Simulation Of Diffraction Patterns,** Phys. Educ. v. 18, 1983, North Ireland.

EISBERG, R.M., **Fundamentals Of Modern Physics,** Jhon Wiley and Sons, 1961.

EISBERG, R.M., **Applied Mathematical Physics With Programmable Pocket Calculators,** McGraw-Hill, New York, 1976.

FLERACKERS, E.L.M., JANSSEN, H.J., POULIS, J.A., **Combination Of Thin Lenses-a Computer Oriented Method,** Phys. Educ., v.19, 1989, N. Ireland.

FEYNMAN, R.R., LEIGHTON, R.B., SANDS, M., **The Feynman Lectures on Physics,** Addison-Wesley Pub. Comp., 1966.

FLÜGGE, S., **Practical Quantum Mechanics I,** Springer-Verlag, New York 1971.

HARDING, R.D., **Computer Illustrated Texts, Phys.** Educ., 21, 1986, GB.

HAYDEN, H.C., **Computer Simulation Of F=m.a,** The Physics Teacher, April, 1984.

KAGAN, D.T., **Three Computer Programs For Use İn İntroductory Level Physics Laboratories,** The Physics, Teacher, October, 1984.

RAGGET, G.F., **Computer Graphics For Numerical Analysis Tuition,** Int. J. Math. Educ. Sci. Technol., v.9, no.2, 183-191, 1978.

ROGERS, L.T., **The Computer Assisted Laborators,** Physics Education, 22, 1987, U.K.

SCHIFF, L.I., **Quantum Mechanics,** Third Edition, McGraw-Hill, 1982.

THOMAS, W.E., GROUWS, D.A., **Projectile Motion İn A Resistif Medium: A Computer Simulation,** Sch. Sci. and Math./ v.84, no.4, April 1984.

WEBFER, W.J., OEHMKE, R.L.T., **Computer Based Data Acquisition İn The Undergraduate Lab.,** Comput. Educ., no.1, 21-32, 1987.