

## แบบจำลองทางคณิตศาสตร์อย่างง่ายสำหรับการถ่ายโอนอิเล็กตรอนภายในระบบแสง II ด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีตามแบบจำลองมาร์คอฟ

### A simplified mathematical model for the electron transfer in photosystem II by path integral method based on Markov model

สรายยุทธ์ พานเทียน

Sarayut Pantian

คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏเทพสตรี อำเภอเมืองลพบุรี จังหวัดลพบุรี 15000

Faculty of Science and Technology, Thepsatri Rajabhat University, Meung, Lopburi province 15000

E-mail: sarayut.p@lawasri.tru.ac.th

#### บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้เป็นการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์อย่างง่ายสำหรับอธิบายพฤติกรรมของการถ่ายโอนอิเล็กตรอนในระบบแสง II ภายใต้กระบวนการสังเคราะห์แสงที่ไม่สามารถระบุทิศทางของการถ่ายโอนได้โดยตรง ทั้งนี้แบบจำลองนี้สมมติให้ระบบแสง II อยู่ภายใต้ศักย์ฮาร์มอนิกแบบไร้ระเบียบ และพิจารณาพฤติกรรมเชิงควอนตัมด้วยแนวคิดของไฟน์แมนผลที่ได้ประกอบไปด้วยตัวแปรที่มีความคล้ายคลึงกับศักย์ฮาร์มอนิกแบบปกติ เพียงแต่มีเทอมของเวลาเข้ามามีผลต่อแอมพลิจูดของตัวแปร ทว่าค่าความน่าจะเป็นในการพบอิเล็กตรอนมีแนวโน้มเดียวกันกับศักย์ฮาร์มอนิกแบบปกติ และพลังงานที่ได้จากการคำนวณพบว่ามีค่ามากกว่าการวัดด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีถึงสองเท่า จากนั้นหาความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอนไปยังชั้นพลังงานอื่นด้วยตัววิธีการของมาร์คอฟ พบว่า ที่ระยะ 1.5 อังสตรอม อิเล็กตรอนมีความน่าจะเป็นที่จะไม่เปลี่ยนระดับชั้นพลังงานมากที่สุดเท่ากับ 0.53

**คำสำคัญ :** การถ่ายโอนอิเล็กตรอน, อินทิเกรตตามวิถี, ตัวแบบมาร์คอฟ, การสังเคราะห์แสง

#### Abstract

The mathematical model for the electron transfer in photosystem II is built by path integral method with nonlocal harmonic oscillator potential. The results show that the amplitude of propagator and wave function depend on time. By the way, the trend of wave function is according to wave function with the constant forced harmonic oscillator. The energy is more than twice the energy value obtained from spectroscopy technique. The probability of electron transfer to another energy level state is then determined using the Markov method which found that the electron has the greatest probability of not changing its energy level, 0.53 at  $x = 1.5$  angstrom.

**Keywords :** Electron transfer, Path integral, Markov model, Photosynthesis

#### บทนำ

กระบวนการสังเคราะห์แสงเป็นกระบวนการตามธรรมชาติหนึ่งที่มีความจำเป็นต่อการดำรงชีวิตของสิ่งมีชีวิตบนโลก ด้วยเหตุเพราะสามารถเปลี่ยนรูปพลังงานจากแสงให้อยู่ในรูปของพลังงานเคมีได้ ความสามารถอันน่าอัศจรรย์นี้ไม่สามารถเกิดขึ้นกับทุกสรรพสิ่งทว่าเกิดขึ้นกับสิ่งมีชีวิตที่มีรงควัตถุสร้างจากสารประกอบโปรตีน

ที่มีความสามารถในการจับแสงได้ อาทิเช่น คลอโรฟิลล์ (chlorophyll, Chl) ไฟโคบิลิน (Phycobilin) แคโรทีนอยด์ (carotenoid) และอื่น ๆ อีกมากมาย ซึ่งรงควัตถุเหล่านี้มีโครงสร้างและองค์ประกอบทางไฟฟ้าที่มีความจำเป็นอย่างมากกับรับและถ่ายโอนพลังงานแสงไปยังรงควัตถุอื่นจนท้ายที่สุดของกระบวนการเกิดเป็นน้ำตาลโมเลกุลเดี่ยว (Blankenship, 2002) ทั้งนี้ รงควัตถุดังกล่าวจะไม่อยู่อย่างโดดเดี่ยวแต่จะอยู่กันอย่างเป็นระบบ เรียกว่า ระบบแสง (Photosystem) ในกระบวนการสังเคราะห์แสงหนึ่งจะประกอบด้วยระบบแสง I (photosystem I) และระบบแสง II (photosystem II) โดยทั้งสองระบบนี้มีกระบวนการทำงานคล้ายคลึงกัน กล่าวคือ ดูดกลืนแสงในช่วงขีดความถี่ค่าหนึ่งและนำพลังงานแสงที่ดูดกลืนไปใช้กระตุ้นอิเล็กตรอนภายในรงควัตถุให้มีสถานะเปลี่ยนไปขณะหนึ่งหรือเกิดการถ่ายโอนอิเล็กตรอนไปยังรงควัตถุอื่นแบบสุ่มอย่างไร้ระเบียบและจบการถ่ายโอนอิเล็กตรอนภายในระบบแสงที่จุดศูนย์กลางปฏิกิริยา (reaction center) จากนั้นอิเล็กตรอนจะถ่ายโอนไปยังอวัยวะอื่นในกระบวนการสังเคราะห์แสง สำหรับความแตกต่างประการหนึ่งด้านการรับและถ่ายโอนอิเล็กตรอนของระบบแสง I และ ระบบแสง II คือ รงควัตถุในระบบแสง I จะรับพลังงานในช่วงคลื่นที่มีความยาวคลื่นไม่ต่ำกว่า 700 นาโนเมตร ในขณะที่รงควัตถุระบบแสง II จะรับพลังงานแสงที่มีช่วงคลื่นไม่ต่ำกว่า 680 นาโนเมตร (Hall et al, 1999)

นอกเหนือจากความสามารถของกระบวนการสังเคราะห์แสงในการเปลี่ยนรูปพลังงานในแบบที่ไม่มีสิ่งอื่นทำได้ยังพบว่ากระบวนการสังเคราะห์แสงตามธรรมชาติมีการสูญเสียพลังงานระหว่างกระบวนการน้อยมากเมื่อเทียบกระบวนการอื่นที่มีการเปลี่ยนรูปพลังงาน (Pach'on et al, 2011) ด้วยเหตุนี้ นักวิจัยจำนวนมากจึงพยายามสร้างสิ่งหรืออุปกรณ์เลียนแบบกระบวนการสังเคราะห์แสงตามธรรมชาติเพื่อนำไปใช้ประโยชน์ทั้งในโลกและนอกโลก (Lee et al, 2021) สำหรับการสร้างอุปกรณ์เลียนแบบกระบวนการสังเคราะห์แสงนั้น เราจำเป็นต้องมีความเข้าใจรวมถึงต้องทราบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์กระบวนการทำงานของกระบวนการสังเคราะห์แสงเสียก่อนจึงจะสามารถสร้างได้อย่างสมบูรณ์

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ทำนายกระบวนการสังเคราะห์แสงของสิ่งมีชีวิตที่ได้รับความนิยม ได้แก่ แบบจำลองสารประกอบโปรตีนของเฟнна-แมททิวส์-โอลสัน (The Fenna-Matthews-Olson model, FMO) โดยแบบจำลองนี้แสดงถึงการถ่ายโอนพลังงานและอิเล็กตรอนในสถานะกระตุ้น (Excitation energy transfers, EET) ภายในคลอโรฟิลล์ งานวิจัยที่ผ่านมาโดยส่วนมากสนใจการสังเคราะห์แสงของแบคทีเรียบางชนิดในสถานะสมนัย (coherent state) ที่เริ่มต้นสร้างรูปแบบสมการจากพิจารณาตัวดำเนินการแฮมิลโท-เนียนในสถานะการณที่แตกต่างกันออกไปจากนั้นใช้วิธีการของซโรดิงเงอร์และของไฮนเซนเบิร์กในการแก้ปัญหา (Liang, 2010) ทั้งนี้ พบว่าการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ทำนายกระบวนการสังเคราะห์แสงการสังเคราะห์แสงของสิ่งมีชีวิตด้วยวิธีการไฟฟ์แมนยังมีน้อยมาก และที่สำคัญแบบจำลองดังกล่าวจะต้องให้ผลที่สอดคล้องกับการทดลองที่สังเกตด้วยวิธีการที่ง่ายที่สุดด้วย

งานวิจัยนี้จึงเป็นการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์อย่างง่ายสำหรับอธิบายการถ่ายโอนอิเล็กตรอนภายในระบบแสง II ของแบคทีเรียด้วยวิธีการอินทิเกรตตามวิถีของไฟฟ์แมนด้วยการพิจารณาอิเล็กตรอนที่อยู่ภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์โมนิกแบบไร้ระเบียบ (nonlocal harmonic oscillator potential) ในระบบพิกัดแบบคาร์ทีเซียนหนึ่งมิติที่มีสองสถานะ คือ สถานะพื้นและสถานะถูกกระตุ้น จากนั้นทำนายความน่าจะเป็นในการที่อิเล็กตรอนจะอยู่ในสถานะใดด้วยวิธีการของมาร์คอฟ (Markov's process) เพื่อเป็นข้อมูลเบื้องต้นสำหรับการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ทำนายความน่าจะเป็นสถานะอิเล็กตรอนที่มีหลายสถานะและคำนวณค่าความน่าจะเป็นตามแบบจำลองมาร์คอฟซ่อนเร้น (Hidden Markov Model, HMM) ให้นำไปสู่ทำการออกแบบการทดลองในอนาคต

## วิธีการดำเนินการวิจัย

กระบวนการคำนวณหาพฤติกรรมของอิเล็กตรอนด้วยการอินทิเกรตตามวิถีของไฟน์แมนนั้นจะมุ่งเน้นไปที่การหาตัวแพร่ (propagator) เพื่อเชื่อมโยงไปถึงฟังก์ชันคลื่น (wave function) ซึ่งเป็นตัวแทนพฤติกรรมของอิเล็กตรอนรวมถึงการหาค่าพลังงานในแต่ละสถานะ ทว่าในรายละเอียดการคำนวณนั้นจะมีความแตกต่างกันขึ้นอยู่กับรูปแบบสมการที่กำหนดโดยศัลยและเทคนิคทางคณิตศาสตร์ที่เราใช้ในการพิจารณา ด้วยเหตุนี้ ผู้วิจัยจึงขอนำเสนอวิธีการคำนวณดังขั้นตอนต่อไปนี้

1. คำนวณตัวแพร่ของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกสแบบไร้ระเบียบในระบบพิกัดแบบคาร์ทีเซียนหนึ่งมิติ

1.1 กำหนดลากรางเจียน (lagrangian) ของระบบ (Chanana et al, 1994) ดังสมการ

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}; t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m}{2T} \frac{\omega^2}{2} \int_0^T [x(t) - x(\sigma)]^2 d\sigma \quad (1)$$

เมื่อ  $\vec{r}(t)$  คือ เวกเตอร์ระบุตำแหน่งของอิเล็กตรอนในระบบพิกัดแบบคาร์ทีเซียนสองมิติบนระนาบ ณ เวลาใดใด  $t$  ซึ่งสามารถกระจายได้ว่า  $\vec{r}(t) = x(t)\hat{i}$  ในขณะที่  $\dot{\vec{r}}(t)$  คือ เวกเตอร์ระบุความเร็วของอิเล็กตรอนในการเปลี่ยนตำแหน่ง ณ เวลาใดใด  $t$  ซึ่งสามารถกระจายได้ว่า  $\dot{\vec{r}}(t) = \dot{x}(t)\hat{i}$  ในส่วนของ  $m$  คือ ขนาดมวลสมมติของอิเล็กตรอนที่ประพฤติตัวเป็นตัวกวัดแกว่งที่อยู่กันอย่างไร้ระเบียบสั่นด้วยความถี่เชิงมุม  $\omega$  ทั้งนี้ เราสามารถบ่งชี้ตำแหน่งของตัวกวัดแกว่งใดใดได้จากการอินทิเกรตผลต่างกำลังสองของตำแหน่งอิเล็กตรอนที่เวลาใด ๆ กับตำแหน่งของอิเล็กตรอน ณ เวลาที่เปลี่ยนไปเล็กน้อย  $d\sigma$  ตั้งแต่เวลา 0 วินาที จนถึง  $T$  วินาที และ  $x(\sigma)$  คือ ตำแหน่งของอิเล็กตรอนเมื่อเวลาเปลี่ยนไปเล็กน้อย

1.2 กำหนดตัวแพร่การกำหนดตัวแพร่ตามวิธีการอินทิเกรตตามวิถีนั้นจะเป็นไปตามสมการ

$$K(b, a) = \int_a^b e^{iS[b, a]} D[\vec{r}(t)] \quad (2)$$

เมื่อ  $S[b, a] = \int_0^T L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}; t) dt$  คือ แอคชันของระบบ ทั้งนี้ เราสามารถหาตัวแพร่ได้จากการนำลากรางเจียนจากสมการที่ (1) แทนค่าลงในสมการแอคชันของระบบและแทนค่าแอคชันดังกล่าวลงในสมการที่ (2) เราพบว่าสมการที่ได้นั้นมีความซับซ้อน

1.3 กำหนดตัวแพร่ยังผล (effective propagator) เพื่อหลีกเลี่ยงความซับซ้อนของสมการด้วยการใช้เอกลักษณ์स्ताโทโนวิชเปลี่ยนรูปสมการ (Sa-yakanit et al, 1987) ดังสมการ

$$\exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \frac{m\omega^2}{2T} \left\{ \int_0^T \int_0^T x(t)x(\sigma) dt d\sigma \right\} \right) \right] = \left\langle \exp \left( \frac{i}{\hbar} \left( f_x \int_0^T x(t) dt \right) \right) \right\rangle \quad (3)$$

เมื่อ  $f_x$  คือ แรงฮาร์มอนิกสที่กระทำในแนวแกน  $x$  และสัญลักษณ์  $\langle \dots \rangle$  คือ การหาค่าเฉลี่ยแบบเกาเซียน โดยรูปแบบสมการหาค่าเฉลี่ยที่สอดคล้องกับสมการที่ (3) ได้แก่

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-iT}{2\hbar m\omega^2} f_x^2\right] A df_x}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-iT}{2\hbar m\omega^2} f_x^2\right] df} \quad (4)$$

ดังนั้น ตัวแปรตามสมการที่ (2) สามารถเขียนใหม่ตามการแปลงรูปสมการได้ว่า

$$K(b, a) = \langle K_{eff}(b, a) \rangle \quad (5)$$

เมื่อ  $K_{eff}(b, a)$  คือ ตัวแปรที่ยังผลที่เป็นผลมาจากการแปลงรูปสมการ จากการคำนวณพบว่าตัวแปรที่ยังผลเขียนได้ตามสมการ

$$K_{eff}(b, a) = \iint Dx(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left( \frac{m}{2} \int_0^T (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt \right) + \int_0^T f_x x(t) dt \right] \quad (6)$$

ทั้งนี้พบว่าลากรางเจียนยังผลที่สอดคล้องกับตัวแปรที่ยังผลเขียนได้ดังสมการ

$$L_{eff}(\bar{r}, \dot{\bar{r}}; t) = \frac{m}{2} [\dot{x}^2 - \omega^2 x^2] + f_x x \quad (7)$$

1.4 คำนวณหาตัวแปรที่แท้จริงด้วยการใช้กำหนดพรีแฟกเตอร์ของตัวแปรที่ยังผลด้วยสูตรของวาน-วเลค (Van Vleck) และเพาลี (Pauli) (เอกพันธ์ จันผง และคณะ, 2551) ที่ได้ระบุว่าพรีแฟกเตอร์เขียนได้ในรูป  $F(t'', t')$  เมื่อ  $t''$  คือ เวลา ณ จุดสุดท้าย ซึ่งในงานวิจัยนี้กำหนดให้เป็นตัวแปร  $T$  วินาทีและ  $t'$  คือ เวลา ณ จุดเริ่มต้น ซึ่งในงานวิจัยนี้กำหนดให้เป็น 0 วินาที เพราะฉะนั้นจะเขียนได้ว่า

$$K_{eff}(b, a) = F_{eff}(T, 0) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_{eff}^{el}(\bar{r}_b, \bar{r}_a; T)\right] \quad (8)$$

เมื่อ  $F_{eff}(T, 0)$  คือ พรีแฟกเตอร์ยังผลที่เมื่อคำนวณแล้วมีค่าเท่ากับ

$$F_{eff}(T, 0) = \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \quad (9)$$

ในขณะที่  $S_{eff}^{el}(\bar{r}_b, \bar{r}_a; T)$  คือ แอคชันแบบยังผล ที่สามารถหาค่าได้ด้วยการนำลากรางเจียนยังผลไปอินทิเกรตเทียบกับเวลาตั้งแต่ 0 จนถึง  $T$  จากนั้นเมื่อแทนค่าต่าง ๆ ลงในสมการที่ (8) เพื่อหาค่าตัวแปรที่ยังผล และนำตัวแปรที่ยังผลที่ได้มาแทนค่าลงในสมการที่ (5) จะได้ค่าตัวแปรที่แท้จริง ดังสมการ

$$K(b, a) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right) \left( \frac{\omega T}{2 \sin(\omega T / 2)} \right)^2 \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m\omega}{4} [(x_b - x_a)^2] \cot \frac{\omega T}{2} \right\} \right] \quad (10)$$

2. คำนวณฟังก์ชันคลื่นและพลังงานของอิเล็กตรอนภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกแบบไร้ระเบียบในระบบพิกัดแบบคาร์ทีเซียนหนึ่งมิติ ด้วยการนำสมการที่ (10) มาจัดรูปสมการโดยนำพจน์เอกซ์โพเนนเชียลมาใช้สูตรของออยเลอร์ (Euler's formula) ร่วมกับการกระจายอนุกรมเทย์เลอร์ใช้สมการความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรและฟังก์ชันคลื่น ดังสมการ

$$\begin{aligned} K(b, a) = & \frac{m\omega^2 T}{2\pi \hbar} \left\{ 1 + 2e^{-i\omega T} + 3e^{-2i\omega T} + 4e^{-3i\omega T} + \dots \right\} \cdot \exp \left[ -i\omega T - \frac{m\omega}{4\hbar} (x_b - x_a)^2 \right] \\ & \cdot \left\{ 1 + \left[ \frac{-m\omega}{2\hbar} (x_b - x_a)^2 (e^{-i\omega T} + e^{-2i\omega T} + e^{-3i\omega T} + \dots) \right] \right. \\ & + \left[ \frac{-m\omega}{2\hbar} (x_b - x_a)^2 (e^{-i\omega T} + e^{-2i\omega T} + e^{-3i\omega T} + \dots) \right]^2 \\ & \left. + \left[ \frac{-m\omega}{2\hbar} (x_b - x_a)^2 (e^{-i\omega T} + e^{-2i\omega T} + e^{-3i\omega T} + \dots) \right]^3 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (11)$$

จากนั้นใช้สมการความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรและฟังก์ชันคลื่นจะได้ค่าพลังงาน ดังสมการ

$$K(b, a) = \sum_n \psi_n(\vec{r}_b) \psi_n^*(\vec{r}_a) e^{-i \frac{E_n T}{\hbar}} \quad (12)$$

กำหนดค่าระดับชั้นสถานะที่ต้องการพิจารณา ในงานวิจัยนี้พิจารณาเพียงสองระดับชั้นเท่านั้น ได้แก่  $n=0$  คือสถานะพื้น และ  $n=1$  คือ สถานะกระตุ้น จะได้ฟังก์ชันคลื่นและค่าพลังงานในแต่ละระดับชั้นดังต่อไปนี้

$$E_n = (2n+1)\hbar\omega \quad (13)$$

3. กำหนดแบบจำลองแบบมาร์คอฟและคำนวณความน่าจะเป็นแบบมาร์คอฟ

3.1 สมมติให้สถานะของอิเล็กตรอนมี 2 สถานะ ได้แก่ สถานะพื้น กับ สถานะถูกกระตุ้น และกำหนดให้  $P_{11}$  คือ ความน่าจะเป็นของอิเล็กตรอนในการที่จะอยู่ในสถานะพื้นโดยไม่เป็นแปลง,  $P_{12}$  คือ ความน่าจะเป็นของอิเล็กตรอนในการที่เปลี่ยนจากสถานะพื้นไปเป็นสถานะกระตุ้น,  $P_{21}$  คือ ความน่าจะเป็นของอิเล็กตรอนในการที่เปลี่ยนจากสถานะกระตุ้นไปเป็นสถานะพื้น,  $P_{22}$  คือ ความน่าจะเป็นของอิเล็กตรอนในการที่จะอยู่ในสถานะกระตุ้นโดยไม่เป็นแปลง (Fine et al, 1998) ทั้งนี้ ค่าความน่าจะเป็นจะหาได้จาก การนำฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากการเปรียบเทียบสมการที่ (11) และสมการที่ (12) ในแต่ละระดับชั้นที่สนใจมาหาค่าสัมบูรณ์และยกกำลังสอง นอกจากนี้ในงานวิจัยนี้ยังกำหนดให้เวลาในการเปลี่ยนแปลงสถานะอยู่ในสเกลเฟมโตวินาที โดยอ้างอิงจากรายงานวิจัยของ (Niels et al, 1997) ที่แสดงการเปลี่ยนแปลงความสามารถในการดูดกลืนแสงในแต่ละช่วงความยาวคลื่นของสารไฮโดรคาร์บอนซึ่งปรากฏในสเกลเฟมโตวินาที

3.2 กำหนดให้  $a_{ij}$  คือ เมทริกซ์ความน่าจะเป็น ดังสมการ

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{bmatrix} \quad \text{เมื่อ } i, j = 1, 2 \quad (14)$$

โดยเมทริกซ์ความน่าจะเป็นนี้อยู่ภายใต้เงื่อนไข  $\sum a_{ij} = 1$

3.3 คำนวณความน่าจะเป็นแบบมาร์คอฟ โดยการใช้สมการ

$$P = P\langle O | \text{model} \rangle \quad (15)$$

เมื่อ  $O$  คือ สถานะที่ต้องการทดสอบ ในงานวิจัยนี้จะทดสอบ 2 สถานะ ได้แก่ สถานะปัจจุบัน และสถานะถัดไป ตามตารางที่ 1

ตารางที่ 1 แสดงแบบจำลองสถานะที่ใช้ในการทดสอบตามวิธีการมาร์คอฟ

ชื่อสถานะ	สถานะปัจจุบัน	สถานะถัดไป
$H_1$	สถานะพื้น	สถานะพื้น
$H_2$	สถานะพื้น	สถานะกระตุ้น
$H_3$	สถานะกระตุ้น	สถานะพื้น
$H_4$	สถานะกระตุ้น	สถานะกระตุ้น

4. จัดทำผลการวิจัยซึ่งแบ่งออกเป็น 3 ส่วนได้แก่

4.1 ค่าความน่าจะเป็นในการพบอิเล็กทรอนิกส์ในตำแหน่งที่กำหนด โดยการเปรียบเทียบสมการที่ (11) และสมการที่ (12) ในแต่ละระดับชั้นที่สนใจมาหาค่าสัมบูรณ์และยกกำลังสอง

4.2 ค่าพลังงานของอิเล็กทรอนิกส์ในแต่ละชั้นพลังงานจากสมการที่ (13)

4.3 ค่าความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะตามแบบจำลองสถานะที่ใช้ในการทดสอบตามวิธีการมาร์คอฟตามตารางที่ 1

5. วิเคราะห์ผลการวิจัย

6. สรุปผลการวิจัย

## ผลการวิจัย

1. ค่าความน่าจะเป็นในการพบอิเล็กตรอนในตำแหน่งที่กำหนด

ตารางที่ 2 แสดงค่าความน่าจะเป็นในการพบอิเล็กตรอนในระบบแสง II ขนาด 3.0 x3.0 อังสตรอม ที่อยู่ภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบ กำหนดให้ค่าค่าความถี่เท่ากับ 480 เทระเฮิรตซ์

ตำแหน่ง x (อังสตรอม)	ค่าความน่าจะเป็นสถานะพื้น (n=0)	ค่าความน่าจะเป็นสถานะกระตุ้น (n=1)
0.5	0.94	0.09
1.0	0.86	0.45
1.5	0.73	0.85
2.0	0.56	0.97

2. แสดงค่าพลังงานของอิเล็กตรอนในแต่ละชั้นพลังงานภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบ

ตารางที่ 3 แสดงค่าพลังงานของอิเล็กตรอนในแต่ละชั้นพลังงานภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบ และความต่างของพลังงานในแต่ละระดับชั้น

ระดับชั้นพลังงาน	ค่าพลังงาน	ค่าความต่างของพลังงาน
0	$\hbar\omega$	-
1	$3\hbar\omega$	$2\hbar\omega$
2	$5\hbar\omega$	$2\hbar\omega$
3	$7\hbar\omega$	$2\hbar\omega$

3. ค่าความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะตามแบบจำลองสถานะที่ใช้ในการทดสอบตามวิธีการมาร์คอฟ

ตารางที่ 4 ค่าความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะตามแบบจำลองสถานะที่ใช้ในการทดสอบตามวิธีการมาร์คอฟ ตามสมมติฐานดังตารางที่ 1 โดยกำหนดตำแหน่งที่มาทำการทดสอบ ได้แก่ 1.5 อังสตรอม และกำหนดให้เวลาที่เป็นระดับชั้นพลังงานเท่ากับ 1 เฟมโตวินาที โดยการใช้สมการที่ (15) ในการคำนวณ

ชื่อสถานะ	สถานะปัจจุบัน	สถานะถัดไป	ค่าความน่าจะเป็น
$H_1$	สถานะพื้น	สถานะพื้น	0.53
$H_2$	สถานะพื้น	สถานะกระตุ้น	0.19
$H_3$	สถานะกระตุ้น	สถานะพื้น	0.11
$H_4$	สถานะกระตุ้น	สถานะกระตุ้น	0.12

## วิจารณ์ผล

ผลการวิจัยครั้งนี้ พบว่า ฟังก์ชันคลื่นจากอิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบมีลักษณะคล้ายกับศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบคงที่โดยจะมีเทอมของเวลาเข้ามามีผลต่อแอมพลิจูดของฟังก์ชันคลื่น ซึ่งเทอมดังกล่าวส่งผลค่าความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนในสถานะต่าง ๆ เมื่อเวลาเปลี่ยนไป อย่างไรก็ตามเมื่อเราทำการระบุเวลาที่ 1 เฟมโตวินาทีและทำการศึกษาความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนที่ตำแหน่งต่าง ๆ ในระบบแสง II ขนาด 3.0 x 3.0 อังสตรอม ที่อยู่ภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบ กำหนดให้ค่าค่าความถี่เท่ากับ 480 เทระเฮิรตซ์ ดังแสดงในตารางที่ 2 พบว่า ที่สถานะพื้นค่าความน่าจะเป็นลดลงเมื่อระยะเพิ่มขึ้นและค่าน่าจะเป็นเท่ากับศูนย์

ที่ระยะ 4.8 อังสตรอม ในขณะที่ที่สถานะกระตุ้นค่าความน่าจะเป็นกลับเพิ่มขึ้นและมีค่าใกล้เคียงหนึ่งที่ระยะ 2.2 อังสตรอม ซึ่งอยู่ในระยะการเกิดการถ่ายโอนอิเล็กตรอนในคลอโรฟิลล์ตามรายงานของ (Hall et al, 1999)

ในส่วนของค่าพลังงานของอิเล็กตรอนในแต่ละชั้นพลังงานภายใต้อิทธิพลศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบ นั้น พบว่า ค่าพลังงานที่ได้จากการคำนวณดังสมการที่ (13) มีขนาดเป็นสองเท่าของค่าพลังงานของแต่ละระดับชั้น ทัศนศาสตร์แบบฮาร์มอนิกส์แบบปกติ นั้นหมายความว่า หากภายในระบบแสงมีลักษณะศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ ระเบียบแล้ว ในการเปลี่ยนชั้นพลังงานจำเป็นต้องใช้พลังงานมากกว่าศักย์แบบฮาร์มอนิกส์แบบปกติถึงสองเท่า ซึ่งรายงานของ (Liang, 2010) กล่าวว่าความต่างของระดับชั้นพลังงานที่ได้จากเทคนิคสเปกโตรสโคปีแบบสองมิติ นั้นมีค่าเพียง  $\hbar\omega$  เท่านั้น

สำหรับการทำนายว่าอิเล็กตรอนจะมีโอกาสเป็นสถานะชั้นพลังงานมากน้อยเพียงใดนั้นนอกจากพลังงาน ที่ใช้ในการกระตุ้นแล้วยังต้องพิจารณาความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะอีกด้วยซึ่งแบบจำลองอย่างง่ายแสดงผล ความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะตามแบบจำลองสถานะที่ใช้ในการทดสอบตามวิธีการมาร์คอฟตามสมมติฐาน ดังตารางที่ 1 โดยกำหนดตำแหน่งที่มาทำการทดสอบ ได้แก่ 1.5 อังสตรอม และกำหนดให้เวลาที่เป็นระดับชั้น พลังงานเท่ากับ 1 เฟมโตวินาที ดังตารางที่ 4 พบว่า ณ ตำแหน่งนี้ มีความน่าจะเป็นที่อิเล็กตรอนที่อยู่สถานะพื้น เช่นเดิมมากที่สุดเท่ากับ 0.53 และมีค่าความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะจากสถานะกระตุ้นมายังสถานะพื้น น้อยที่สุดเท่ากับ 0.11

## สรุปผล

จากการวิจัยพบว่าลักษณะฟังก์ชันคลื่นและค่าความน่าจะเป็นในการพบอิเล็กตรอนที่ตำแหน่งต่าง ๆ จาก การสมมติให้ระบบแสง II มีศักย์ฮาร์มอนิกส์แบบไร้ระเบียบนั้นสอดคล้องกับระยะการเกิดปฏิกิริยาในกระบวนการ สังเคราะห์แสง ทว่าค่าพลังงานในการเปลี่ยนระดับชั้นพลังงานมีค่าน้อยไม่สอดคล้องกับการทดลองโดยพบว่ามีความ มากกว่าถึงสองเท่า ในส่วนของค่าความน่าจะเป็นในการเปลี่ยนสถานะนั้นให้ค่าที่พบว่าอาจเป็นไปได้และนำไปสู่ การพิจารณาด้วยแบบจำลองมาร์คอฟแบบซ่อนเร้นในกรณีที่ไม่สามารถตรวจวัดการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน ได้โดยตรง

## เอกสารอ้างอิง

- เอกพันธ์ จันผิง, อัญญาชัย ถาวรสุวรรณ, วิทยา ทิพย์อักษร และ นิคม ชูศิริ. 2551. อินทิกรัลตามเส้นทางสำหรับกึ่ง ฮาร์มอนิกออสซิลเลเตอร์. วารสารมหาวิทยาลัยทักษิณ. 11(2): 24-29.
- Blankenship, R. E. 2002. Molecular mechanisms of photosynthesis. 2nd Edition. Oxford, UK: Blackwell Science.
- Chanana, N., Menon, V. J. and Singh, Y., 1994. Path integration of a general two time action involving local and nonlocal harmonic oscillator potentials. J. Chem. Phys. 101: 651–661.
- Fine, S., Singer, Y., 1998. The hierarchical hidden markov model: Analysis and applications. Machine Learning. 32 (1): 41–62.
- Hall, D. O. and Rao, K.K. 1999. Photosynthesis. 6th Edition. Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- Lee, W. H., Lim, C., Ban, E., Bae, S., Ko, J., Lee, H. S., Min, B. K., Lee, K. Y., Yu, J. S. and Ho, H. S., 2021. W@Ag dendrites as efficient and durable electrocatalyst for solar-to-CO conversion using scalable photovoltaic-electrochemical system. Applied Catalysis B: Environmental.



297 : 120427.

Liang, X. T. 2010. Excitation energy transfer: Study with non-Markovian dynamics. PHYSICAL REVIEW E. 82 : 051918.

Niels, H. D., Giulio, C., Alvin, T. Y. and Thomas, R. B., 1997. Femtosecond Dynamics of Excited-State Evolution in [Ru(bpy)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>. Science. 275(5296): 54-7.

Pach'on, L. A and Brumer, P., 2011. The Physical Basis for Long-lived Electronic Coherence in Photosynthetic Light Harvesting Systems. J. Phys. Chem. Lett. 21 (2) : 2728–2732.

Sa-yakanit, V., Choosiri, N. and Robkob, U. 1987. Exact Propagator of a Two-Dimensional Random System. Physical Rev.B. 37 (18) : 10851-10853.