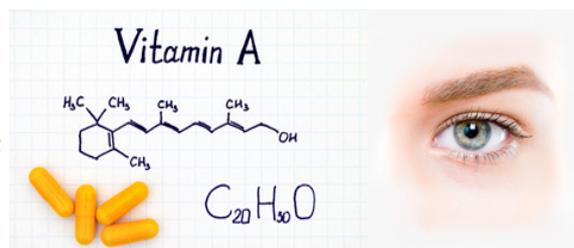




Конья, морковь, бета-каротин, витамин А, иммунная система, зрение



Великий персидский поэт Мевлана (Руми) жил в городе Конья в 13 веке. А еще в этом городе выращивают 65% всей турецкой моркови, из которой получают витамин А.

Морковь – важный источник β -каротина, который придает овощу оранжевый цвет. Это вещество из группы каротиноидов – пигмент красно-оранжевого цвета, который содержится в овощах и фруктах и является провитамином А. β -Каротин превращается в витамин А, который участвует в работе иммунной системы и в механизмах зрения.

π -Электронная система β -каротина включает протяженную цепь сопряженных двойных связей, образованных 22 атомами углерода. Максимум в спектре поглощения находится при $\lambda_{max} = 455$ нм. Все связи между C_1 и C_{22} – сопряженные, в молекуле 22 π -электрона (Рисунок 1).

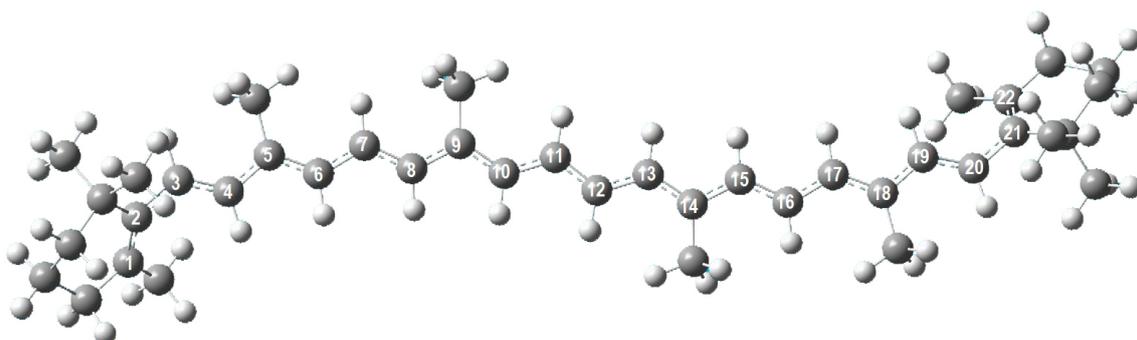


Рисунок 1. Модель молекулы β -каротина. Серые и белые кружочки – атомы углерода и водорода, соответственно. Пронумерованные атомы углерода образуют линейную сопряженную π -систему молекулы

В самом грубом приближении $2p_z$ -электроны атомов С свободно движутся в молекуле, не взаимодействуя друг с другом. Такое движение π -электронов можно представить моделью **частицы в одномерном ящике** (ось x) с бесконечно высокими стенками.

Волновые функции и квантованные уровни энергии электрона в этой модели имеют вид:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (1)$$

где n – квантовое число, $n = 1, 2, 3, 4, \dots, \infty$, а L – ширина ящика.

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8m_e L^2} \quad (2)$$



В двумерном прямоугольном ящике волновая функция является произведением одномерных волновых функций, а энергия равна сумме энергий движения в каждом из двух измерений. Выражение для энергии имеет вид:

$$E_{n_x, n_y} = \left[\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right] \left\{ \frac{h^2}{8m_e} \right\} \quad (3)$$

где n_x, n_y – квантовые числа, L_x, L_y – размеры ящика в 2D модели.

- 5.1** Какие два из приведенных ниже утверждений верные? **Отметьте** только одну пару в листе ответов. 13.0pt

β -каротин имеет оранжевый цвет благодаря тому, что:

- i) поглощает в видимом диапазоне электромагнитного спектра.
- ii) переход ВЗМО \rightarrow НСМО происходит при поглощении ИК излучения.
- iii) разность между 22-м и 23-м уровнями энергии равна энергии ИК фотона, имеющего длину волны, которая соответствует оранжевому цвету.
- iv) молекула поглощает синий и зеленый свет, а желтый и оранжевый – пропускает.
- v) каротин поглощает в УФ-видимом диапазоне из-за того, что молекула не имеет постоянного дипольного момента.

В очень грубом приближении сопряженная система молекулы является линейной и к ней применима модель частицы в одномерном ящике (Рисунок 2). Ширина ящика равна $L = 1.40 \times n_C$ (Å), где n_C – число атомов углерода в сопряженной системе.

Используя эту модель, ответьте на вопросы 5.2-5.6.

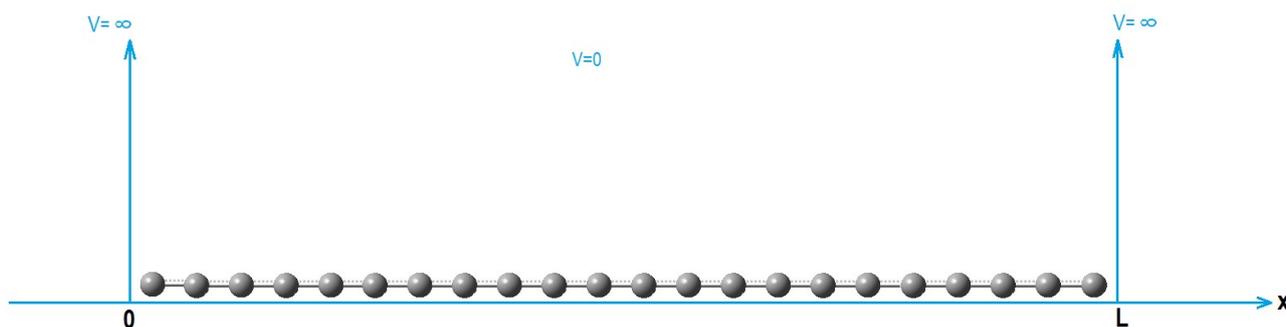


Рисунок 2. Схема сопряженной системы β -каротина – одномерного ящика шириной L

- 5.2** **Рассчитайте** энергию (в Дж) первых двух уровней. 13.0pt

- 5.3** **Изобразите** волновые функции, соответствующие первым двум уровням энергии. Пометьте необходимые точки на оси x . 15.0pt



- | | | |
|-----|---|--------|
| 5.4 | Изобразите схематично диаграмму уровней энергии вплоть до $n = 4$, обращая внимание на расстояние между уровнями. | 8.0pt |
| 5.5 | Чему равна полная π -электронная энергия (в Дж) молекулы? | 12.0pt |
| 5.6 | Рассчитайте длину волны (в нм), при которой происходит переход между высшим заполненным и низшим свободным уровнями энергии. | 10.0pt |

Используя модель частицы в двумерном ящике, ответьте на вопросы 5.7–5.8.

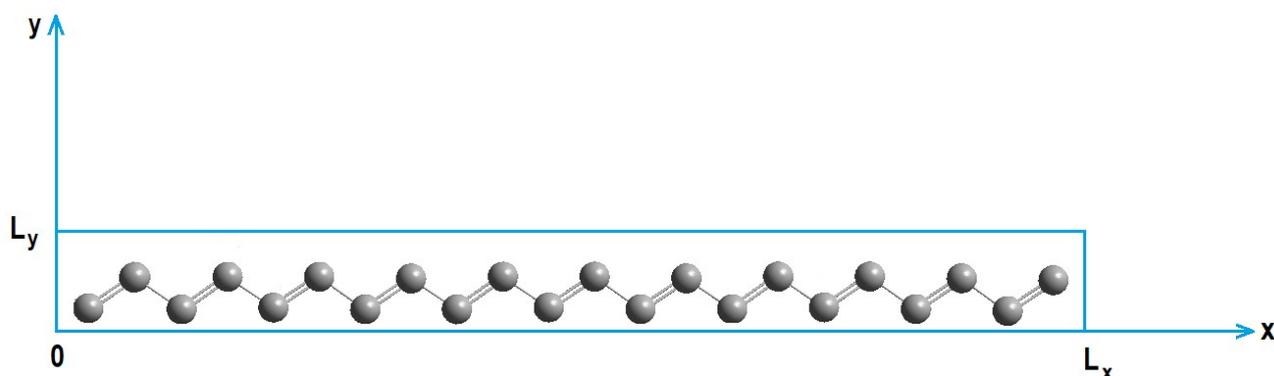


Рисунок 3. Схематическое изображение сопряженной системы β -каротина в двумерном ящике

Предположим, что все двойные связи в сопряженной системе имеют *транс*-конфигурацию. Движение π -электронов в такой системе моделируется двумерным прямоугольным ящиком с размерами $L_x = 26.0 \text{ \AA}$, $L_y = 3.0 \text{ \AA}$ (Рисунок 3).

- | | | |
|-----|--|--------|
| 5.7 | Рассчитайте энергии (в Дж) высшего заполненного и низшего свободного уровней энергии, а также длину волны (в нм), при которой происходит переход между этими уровнями. | 17.0pt |
| 5.8 | Каким должно быть значение L_x (в \AA) в этой модели, чтобы молекула поглощала свет при $\lambda_{max} = 455 \text{ нм}$, считая L_y постоянным и равным 3.0 \AA ? (Примите, что квантовые числа ВЗМО и НСМО – такие же, как в вопросе 5.7.). | 12.0pt |