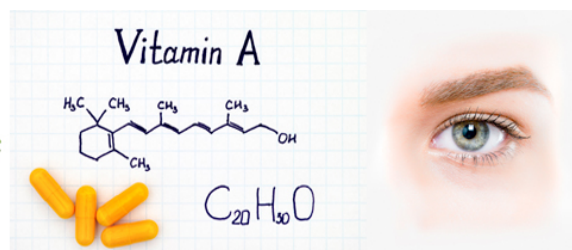




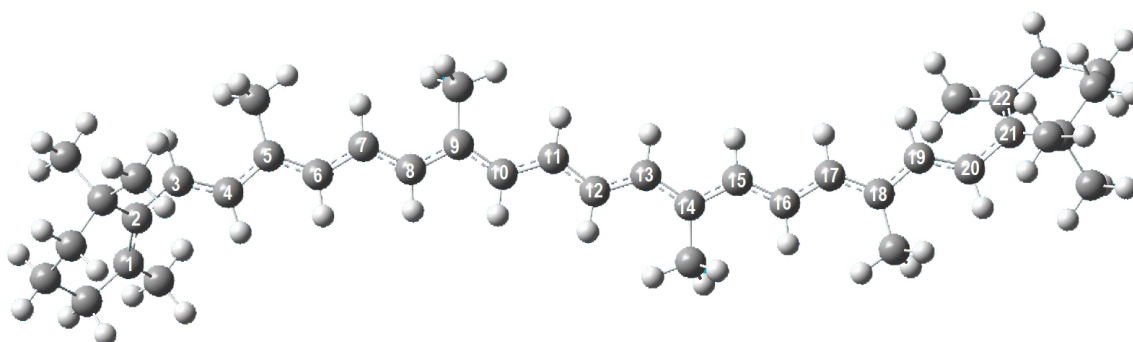
## Конья, морковь, бета-каротин, витамин А, иммунная система, зрение



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  $\beta$ -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.  $\beta$ -Каротин превращается в витамин А, который участвует в работе иммунной системы и в механизмах зрения.

$\pi$ -Электронная система  $\beta$ -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  $\pi$ -электрона (Рисунок 1).



**Рисунок 1.** Модель молекулы  $\beta$ -каротина. Серые и белые кружочки – атомы углерода и водорода, соответственно. Пронумерованные атомы углерода образуют линейную сопряженную  $\pi$ -систему молекулы

В самом грубом приближении  $2p_z$ -электроны атомов С свободно движутся в молекуле, не взаимодействуя друг с другом. Такое движение  $\pi$ -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.

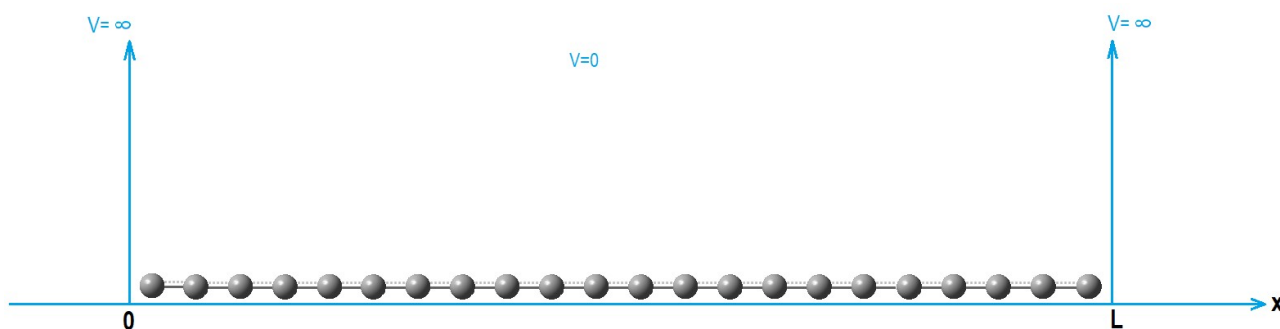
- 5.1** Какие два из приведенных ниже утверждений верные? **Отметьте** только одну пару в листе ответов. 13.0pt

**$\beta$ -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  $\beta$ -каротина – одномерного ящика шириной  $L$

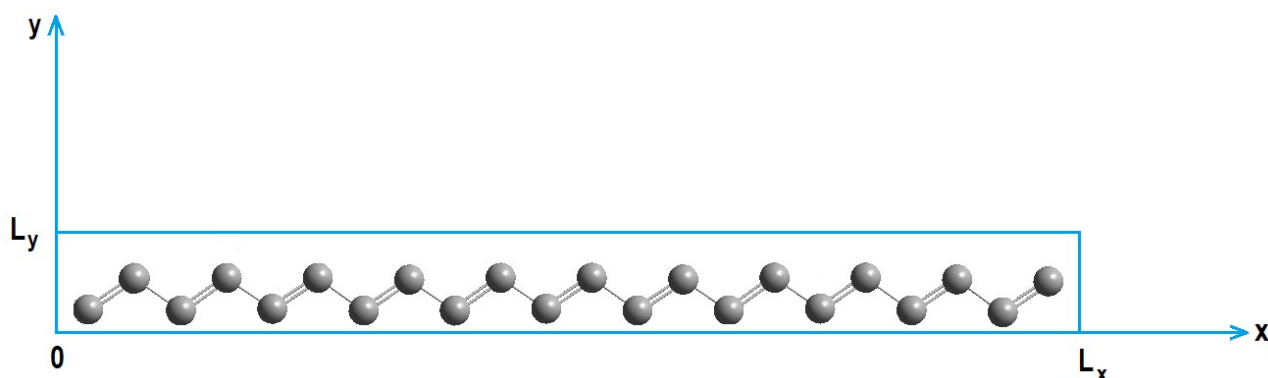
- 5.2** **Рассчитайте** энергию (в Дж) первых двух уровней. 13.0pt

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



- |     |   |        |
|-----|---|--------|
| 5.4 | <b>Изобразите</b> схематично диаграмму уровней энергии вплоть до $n = 4$ , обращая внимание на расстояние между уровнями.           | 8.0pt  |
| 5.5 | Чему равна полная $\pi$ -электронная энергия (в Дж) молекулы?   | 12.0pt |
| 5.6 | <b>Рассчитайте</b> 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  $\beta$ -каротина в двумерном ящике

Предположим, что все двойные связи в сопряженной системе имеют *транс*-конфигурацию. Движение  $\pi$ -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 | <b>Рассчитайте</b> 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 $\text{\AA}$ ) в этой модели, чтобы молекула поглощала свет при $\lambda_{max} = 455 \text{ нм}$ , считая $L_y$ постоянным и равным $3.0 \text{ \AA}$ ? (Примите, что квантовые числа ВЗМО и НСМО – такие же, как в вопросе 5.7.). | 12.0pt |