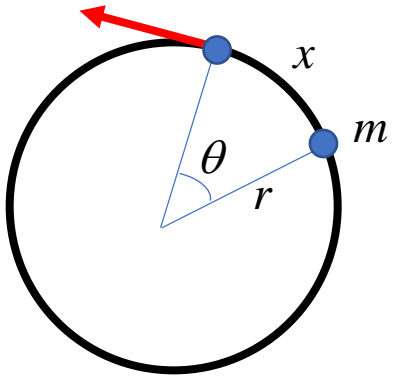


# Aula 13

**Rotação a 2 Dimensões**  
**(Modelo da Partícula num Anel**  
**ou Rotor Rígido 2D)**

# Rotação a Duas Dimensões (Modelo da Partícula num Anel ou Rotor Rígido 2D)



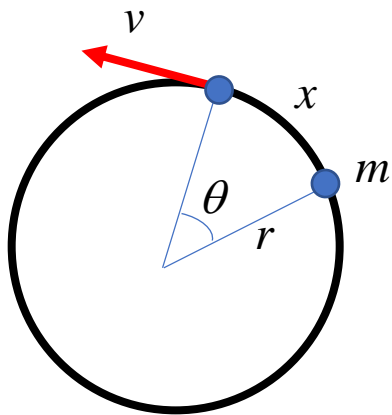
## Ideias chave:

1. O estudo do movimento rotacional introduz a noção de **momento angular** ( $J$ )
2. O **momento angular** ( $J$ ) e a **energia** ( $E$ ) de um objeto em rotação estão **quantificados**

## Aplicação:

O **momento angular** ( $J$ ) é essencial para:

- Descrever a estrutura eletrónica de átomos e moléculas
- Interpretar espectros atómicos e moleculares



$$\theta = x/r \text{ rad}$$

$$x = r \theta$$

## Translação

### Velocidade linear

$$v = dx/dt$$

$$v = r d\theta/dt = r\omega$$

### Massa

$$m$$

## Rotação

### Velocidade angular

$$\omega = d\theta/dt$$

### Momento de inércia

$$I = mr^2$$

↑ Análogo da massa para a rotação  
Representa a resistência de um corpo à mudança do seu estado de rotação

### Momento linear

$$p = mv$$

$$J = pr$$

### Momento angular

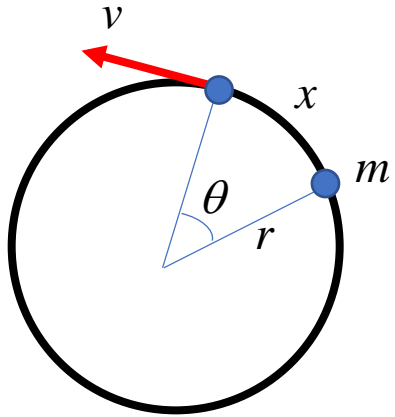
$$J = I\omega$$

$$\begin{aligned} J &= I\omega \\ &= mr^2\omega \\ &= mr^2 v/r \\ &= mrv \\ &= pr \end{aligned}$$

### Energia cinética

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{J^2}{2mr^2} = \frac{J^2}{2I}$$

# Rotação

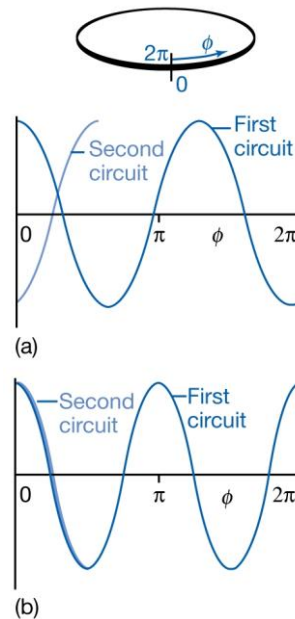


## Quantificação de $J$

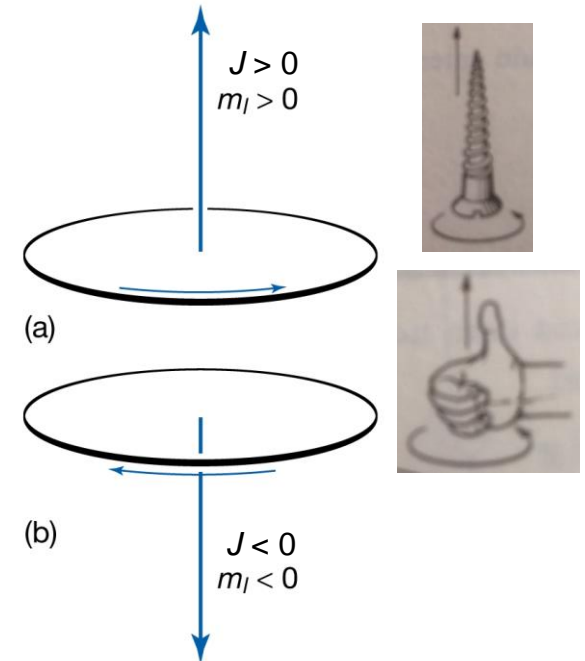
$$J = pr \quad \xrightarrow{p = \frac{h}{\lambda}} \quad J = \frac{h}{\lambda} r \quad \xrightarrow{\lambda = \frac{2\pi r}{|m_l|}} \quad J = \frac{|m_l| h r}{2\pi r} \quad \xrightarrow{} \quad J = \frac{|m_l| h}{2\pi} \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

Relação de de Broglie

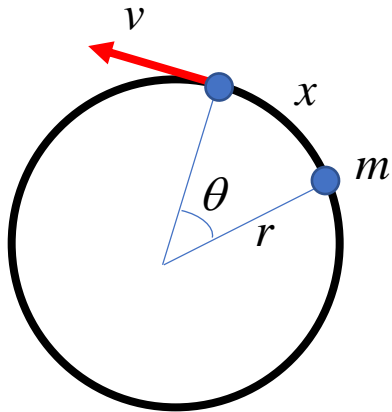
O número quântico  $m_l$  surge porque  $\lambda$  deve ser múltiplo de  $2\pi r$ . Caso contrário  $\psi$  anula-se por interferência destrutiva ao longo do processo de rotação



$m_l$  assume valores positivos e negativos porque o sentido de  $J$  é positivo para rotação no sentido retrógrado e negativo no caso contrário.



## Rotação



## Quantificação de E

$$E = \frac{J^2}{2I} \quad \xrightarrow{\quad} \quad E = \frac{m_l^2 h^2}{8\pi^2 I} \quad \xrightarrow{\quad} \quad E = \frac{m_l^2 h^2}{8\pi^2 m r^2} \quad \xrightarrow{\quad} \quad E = \frac{m_l^2 h^2}{2mL^2} \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots)$$

$J = \frac{m_l h}{2\pi}$

$I = m r^2$   
Massa da partícula

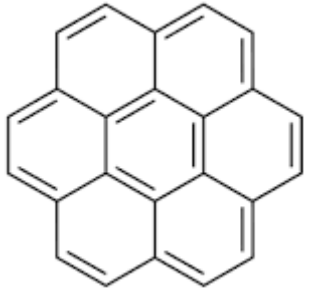
Perímetro do anel  
 $L = 2\pi r$

## Diferença de energia entre níveis adjacentes $\Delta E$

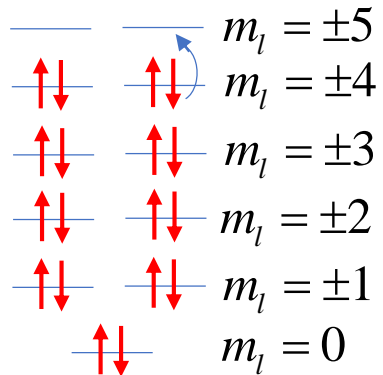
$$E_{m_l+1} - E_{m_l} = [(m_l+1)^2 - m_l^2] \frac{h^2}{2mL^2}$$
$$= [\cancel{m_l^2} + 2m_l + 1 - \cancel{m_l^2}] \frac{h^2}{2mL^2}$$

$$\Delta E = (2m_l + 1) \frac{h^2}{2mL^2}$$

## Problema 7.D.1 (p. 343)



Usando o modelo da partícula no anel, calcular a energia mínima necessária para excitar um electrão  $\pi$  do coroneno. Admita que o raio do anel tem o triplo do comprimento da ligação C-C no benzeno,  $d(\text{C-C})_{\text{benzeno}} = 139 \text{ pm}$ , e que os electrões em causa estão confinados à periferia da molécula.



- O enunciado indica que o raio do anel é  $r = 3 \times d(\text{C-C})_{\text{benzeno}} = 3 \times 1.39 \times 10^{-10} \text{ m} = 4.17 \times 10^{-10} \text{ m}$
- 9 ligações  $\pi$  na priferia
- 18 electrões  $\pi$

$$m_l(\text{HOMO}) = 4$$

$$m_l(\text{LUMO}) = 5$$

$$m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ Kg}$$

$$h = 6.022 \times 10^{31} \text{ J.s}$$

$$\Delta E = (2m_l + 1) \frac{h^2}{8\pi^2 m r^2} = (2 \times 4 + 1) \frac{(6.626 \times 10^{-34})^2}{8 \times (3.1416)^2 \times 9.109 \times 10^{-31} (4.17 \times 10^{-10})^2}$$

$$\Delta E = 3.16 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\Delta E = 0.001 \times 6.022 \times 10^{23} \times 3.16 \times 10^{-19} = 190 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

## Questão: Consistência de unidades da expressão da energia da partícula no anel

$$E = \frac{m_l^2 h^2}{8\pi m r^2} \equiv \frac{(\text{J} \cdot \text{s})^2}{(\text{kg})(\text{m})^2} \equiv \frac{(\text{Kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2})^2 \cdot \text{s}^2}{\text{Kg} \cdot \text{m}^2} \equiv (\text{Kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2})(\text{Kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2})(\text{Kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^2) \equiv \text{Kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \equiv \text{J}$$

$h \equiv \text{J} \cdot \text{s}$      $\text{J} \equiv \text{Kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$   
 $m \equiv \text{Kg}$   
 $r \equiv \text{m}$