

Mecânica Quântica: do Átomo à Sua Startup

Quantum Mechanics: from the Atom to Your Startup

Antonio Carlos Borin^{*a} 

^a Universidade de São Paulo, Instituto de Química, Departamento de Química Fundamental, CEP 05508-000, São Paulo-SP, Brasil

*E-mail: ancborin@iq.usp.br

Submissão: 30 de Junho de 2025

Aceite: 21 de Outubro de 2025

Publicado online: 30 de Outubro de 2025

In this contribution, we present a brief historical review of quantum mechanics, highlighting key theoretical and experimental developments that culminated in the formulations proposed by Werner Heisenberg and Erwin Schrödinger a century ago. We then discuss several technological applications that have emerged from the fundamental insights of quantum mechanics, applications that became possible only through the analytical methods introduced by this theory. We hope this overview inspires students to dive deeper into this fascinating and challenging subject, which, despite its complexities, offers immense intellectual and practical rewards.

Keywords: História da mecânica quântica; Werner Heisenberg; Erwin Schrödinger; aplicações da mecânica quântica em química; Equação de Schrödinger; mecânica quântica matricial.

1. Introdução

Para celebrar a importância atual da mecânica quântica e estimular investimentos nessa área da ciência, a Assembleia Geral das Nações Unidas, em sua octogésima oitava sessão plenária (item 18 da agenda), realizada em 19 de junho de 2024, com a participação de 70 países representando 5 bilhões de pessoas, declarou por aclamação o ano de 2025 como o Ano Internacional da Ciência e Tecnologia Quântica (*International Year of Quantum Science and Technology, IYQ*). A data se justifica porque ela marcaria o centenário do desenvolvimento inicial da mecânica quântica, como indicado no site do IYQ (<https://quantum2025.org>): “*The 2025 International Year of Quantum Science and Technology (IYQ) recognizes 100 years since the initial development of quantum mechanics.*”

Mas será que o desenvolvimento inicial da mecânica quântica realmente ocorreu em 1925?

Como descrito em diversos livros-texto, os fundamentos da mecânica quântica foram estabelecidos antes deste ano, entre 1900 e 1925, período conhecido como “Mecânica Quântica Antiga” (*Old Quantum Mechanics*). Nesse período, foram introduzidos diversos conceitos fundamentais amplamente utilizados em química, tais como o do spin, o princípio da exclusão de Pauli e as regras de Hund, entre outros. Em 1901, Max Planck propôs a hipótese da quantização da energia para explicar a distribuição espectral da radiação do corpo negro.¹ Por essa razão, o ano de 1900 (data da publicação do trabalho de Planck) também é reconhecido como o marco inicial da mecânica quântica. Em comemoração ao centenário dessa revolução científica, importantes periódicos como a *Science*² e a *Nature*³ publicaram, no ano de 2000, edições especiais celebrando os “100 Anos da Mecânica Quântica”.

Outro trabalho fundamental desse período foi publicado em 1905 por Albert Einstein utilizando a hipótese da quantização da luz para explicar o efeito fotoelétrico. Em 1913, Niels Bohr introduziu a quantização do momento angular das órbitas circulares dos elétrons ao redor do núcleo em seu modelo atômico. Em 1917, Einstein demonstrou que, além da absorção e da emissão espontânea de fótons, deveria existir um terceiro processo: a emissão estimulada, fenômeno que constitui a base do funcionamento dos lasers modernos. Em 1924, Louis de Broglie, em sua tese de doutorado, desenvolveu uma teoria inovadora ao propor a dualidade partícula-onda da matéria. Esses e outros trabalhos teóricos, realizados antes de 1925, foram decisivos para a consolidação dos fundamentos da mecânica quântica. No entanto, nenhum desses modelos apresentava uma formulação teórica completa e livre de questionamentos.

O que aconteceu em 1925 para que esse ano fosse reconhecido pela ONU como o marco inicial da mecânica quântica?

Foi naquele ano que Werner Heisenberg publicou um artigo seminal⁴ apresentando a primeira formulação matemática da chamada “nova” mecânica quântica, a mecânica quântica matricial. Após apresentar e discutir sua proposta com Max Born e Pascual Jordan, dois artigos subsequentes

foram publicados,^{5,6} sistematizando formalmente essa abordagem e estabelecendo os fundamentos da mecânica quântica matricial.

No ano seguinte, em 1926, Erwin Schrödinger, inspirado pelas ideias de Louis de Broglie, propôs uma formulação alternativa: a mecânica quântica ondulatória. Sua teoria, baseada em uma equação diferencial parcial, que posteriormente passou a ser conhecida como equação de Schrödinger, oferecia uma abordagem intuitiva e matemática para descrever sistemas quânticos. Schrödinger aplicou sua equação com sucesso à resolução de diversos problemas físicos fundamentais, como o átomo de hidrogênio, além dos efeitos Zeeman e Stark. Sua formulação rapidamente ganhou popularidade na comunidade científica, consolidando-se como uma das principais bases da mecânica quântica moderna.

A aceitação quase imediata dessas novas teorias marcou o início de um período de intensa atividade científica, durante o qual os fundamentos da mecânica quântica foram desenvolvidos e refinados em um espaço de tempo extraordinariamente curto. É importante destacar que, desde o início do século XX, esses avanços teóricos caminhavam lado a lado com experimentos fundamentais que não apenas motivaram novas formulações, como também confirmaram as previsões da teoria quântica emergente.

Vamos, então, celebrar o ano de 2025 como o Ano Internacional da Mecânica Quântica (IYQ), lembrando os 100 anos das publicações pioneiras de Werner Heisenberg e Erwin Schrödinger, sem nos esquecermos dos demais pesquisadores que participaram ativamente da formulação e do desenvolvimento dessa notável teoria.

Devemos lembrar que o período de 1900 a 1926 não testemunhou apenas o nascimento espetacular da mecânica quântica. Esse mesmo intervalo histórico também foi marcado por eventos profundamente trágicos como a Primeira Guerra Mundial, um conflito que mobilizou cerca de 70 milhões de soldados, que resultou na morte de aproximadamente 5 milhões de militares e 4 milhões de civis, além de deixar milhões de pessoas com sequelas permanentes. Muitos jovens cientistas que contribuíam para o avanço da mecânica quântica abandonaram suas pesquisas para lutar e não retornaram para seus familiares. Outros foram separados por barreiras ideológicas, enquanto o mundo assistia ao crescimento do nazismo e do fascismo. Se hoje enfrentamos grandes desafios, é difícil imaginar as adversidades daquele tempo. Mesmo assim, a mecânica quântica sobreviveu!

Será que, como naquela época, estamos às portas de novas descobertas científicas igualmente transformadoras?

Nas próximas seções, revisitaremos alguns dos eventos centrais e as figuras-chave que moldaram o desenvolvimento da mecânica quântica, buscando entender como esses marcos históricos se conectam com as aplicações atuais da teoria.

Vamos também ilustrar como a mecânica quântica impacta diretamente a química e o nosso cotidiano, nos ajudando a compreender a natureza de forma cada vez mais

profunda, sofisticada e fascinante, abrindo caminhos para inovações tecnológicas que hoje permeiam praticamente todos os aspectos da vida moderna. Como afirmou Richard Phillips Feynman:⁷ “... *I’m not happy with all the analyses that go with just the classical theory, because nature isn’t classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you’d better make it quantum mechanical, and by golly it’s a wonderful problem, because it doesn’t look so easy.*” (Feynman compartilhou o Prêmio Nobel de Física de 1965 com Sin-Itiro Tomonaga e Julian Schwinger, “por seus trabalhos fundamentais em eletrodinâmica quântica, com profundas consequências para a física das partículas elementares”).

Prepare-se, então, para um “teletransporte” quântico para darmos um pequeno passeio por esse universo e experimentar algumas de suas surpreendentes aplicações!

2. 1900 - 1925: A Velha Mecânica Quântica (Old Quantum Mechanics)

2.1. 1901: Max Planck e a radiação do corpo negro

Sabemos que os objetos mudam de cor ao serem aquecidos. Por exemplo, à medida que a temperatura de uma barra de ferro aumenta, sua coloração muda de vermelho para branco. Esse fenômeno ocorre porque o objeto aquecido absorve a radiação incidente e, em seguida, emite parte dessa energia na forma de radiação eletromagnética, que é percebida por nossos olhos como luz de determinada cor.

De forma geral, todo objeto com temperatura acima do zero absoluto (0 K, ou -273 °C) emite radiação eletromagnética, cobrindo praticamente todos os comprimentos de onda do espectro. A distribuição dessa radiação depende diretamente da temperatura do corpo.

O termo radiação de corpo negro é utilizado para descrever a relação entre a temperatura de um objeto e os comprimentos de onda da radiação eletromagnética que ele emite. Um corpo negro é um objeto idealizado que absorve completamente toda a radiação que incide sobre ele; também é um emissor perfeito de radiação em todos os comprimentos de onda. Apesar disso, existe um comprimento de onda específico no qual a intensidade da radiação emitida é máxima, o qual determina a cor que o corpo aparenta ter quando aquecido.

Esse fenômeno era conhecido na época, e os físicos buscavam uma expressão matemática (uma função) capaz de descrever corretamente a distribuição da radiação emitida por um corpo negro. A partir de 1860, diversos cientistas, tais como Gustav Robert Kirchhoff, Josef Stefan, Ludwig Boltzmann, Wilhelm Wien e John William Strutt (3º Barão de Rayleigh), utilizaram argumentos da física clássica na tentativa de compreender essa distribuição. Embora suas abordagens tenham obtido sucesso parcial em certas faixas do espectro, nenhum modelo conseguiu descrever satisfatoriamente toda a distribuição espectral da radiação de corpo negro.

Por exemplo, o modelo proposto por Wilhelm Wien (vencedor do Prêmio Nobel de Física em 1911 “*pelas suas descobertas sobre as leis que regem a radiação térmica*”) descrevia com precisão a região de altas frequências (radiação ultravioleta). Já a expressão derivada por Rayleigh e posteriormente ajustada por James Jeans, conhecida como lei de Rayleigh-Jeans, apresentava bons resultados para baixas frequências (radiação infravermelha), mas levava a um resultado divergente nas altas frequências, conhecido como a catástrofe do ultravioleta.

Foi apenas em 1901 que Max Planck¹ publicou um artigo fundamental intitulado “*On the theory of the energy distribution law of the normal spectrum*”, propondo um modelo físico capaz de descrever com precisão toda a distribuição espectral da radiação de corpo negro. Utilizando técnicas de interpolação e argumentos termodinâmicos, Planck obteve uma expressão semiempírica válida tanto nas regiões de alta quanto de baixa frequência. No entanto, sua fórmula continha um parâmetro ajustável que, naquele momento, ele não conseguia justificar fisicamente.

Alguns meses depois, em um avanço conceitual revolucionário, Planck percebeu que sua fórmula poderia ser derivada se fosse feita uma suposição ousada e inédita: ele propôs que as paredes do corpo negro eram constituídas por um conjunto de osciladores harmônicos, cada um com uma frequência característica ν . Diferentemente do que previa a termodinâmica clássica (que assumia a absorção contínua de energia, com valor médio kT ; k é a constante de Planck), Planck postulou que cada oscilador poderia somente absorver ou emitir energia em quantidades discretas, ou seja, em múltiplos inteiros de uma unidade elementar de energia (E) proporcional à sua frequência (ν): $E = h\nu$.

2.2. 1905: Albert Einstein, a radiação do corpo negro e o efeito fotoelétrico

Em 1887, Heinrich Hertz⁸ observou que superfícies metálicas, quando irradiadas com ondas eletromagnéticas em certas faixas de frequências, emitiam partículas carregadas. Esse fenômeno, reconhecido posteriormente como efeito fotoelétrico, não podia ser explicado com os conhecimentos disponíveis da física clássica da época.

Em 1897, Joseph John Thomson⁹ realizou experimentos demonstrando que as partículas emitidas nos experimentos de Hertz possuíam carga negativa. Essas partículas, que viriam a ser chamadas de elétrons, representaram a primeira evidência direta da existência de constituintes subatômicos da matéria. No ano seguinte, em 1898, Thomson propôs seu famoso modelo atômico do “*pudding de passas*” (*plum-pudding model*), segundo o qual os elétrons estariam distribuídos em uma esfera de carga positiva uniforme, conferindo ao átomo uma estrutura estável e eletricamente neutra. Por suas contribuições teóricas e experimentais fundamentais para o entendimento da condução de eletricidade em gases, Thomson foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física em 1906, “*em reconhecimento aos grandes*

méritos de suas investigações teóricas e experimentais sobre a condução de eletricidade por gases.”

Em 1900, os resultados experimentais obtidos por Philipp Lenard¹⁰ (Philipp Eduard Anton von Lenard, laureado com o Prêmio Nobel de Física em 1915, “*por seu trabalho sobre raios catódicos*”) revelaram aspectos ainda mais surpreendentes do fenômeno do efeito fotoelétrico. Lenard observou que a emissão de partículas carregadas ocorria apenas quando a radiação eletromagnética incidente possuía uma energia mínima (comprimento de onda máximo) independentemente da intensidade ou da duração da incidência da radiação sobre a superfície metálica.

Esse resultado contrariava o entendimento clássico vigente na época, segundo o qual a emissão de elétrons deveria ocorrer sempre que a radiação incidente, independentemente de sua frequência, fosse suficientemente intensa ou aplicada por tempo suficiente para fornecer a energia necessária para a ejeção das partículas. Portanto, mesmo radiações de baixa frequência, se suficientemente intensas, deveriam causar emissão, o que não era observado experimentalmente.

Em 1905, Albert Einstein¹¹ publicou um artigo fundamental na *Annalen der Physik*, propondo um modelo teórico revolucionário para explicar diversos fenômenos envolvendo radiação eletromagnética. Por este trabalho, que inclui a explicação do efeito fotoelétrico, Einstein recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1921, “*pelos seus serviços à Física Teórica, e especialmente pela sua descoberta da lei do efeito fotoelétrico.*”

Neste artigo, Einstein supera os limites da física clássica postulando que a radiação eletromagnética é composta por pacotes discretos e indivisíveis de energia (*quanta*, plural de *quantum*) cuja energia é dada por: $E = h\nu$.

Einstein argumentou que esses *quanta* de energia eram totalmente absorvidos ao interagirem com a matéria. Com essa hipótese, ele forneceu uma explicação mais abrangente para a radiação do corpo negro do que a apresentada anteriormente por Planck, que havia quantizado a energia dos osciladores do corpo negro, mas não a da própria radiação. Além disso, o modelo de Einstein foi capaz de explicar de forma consistente o efeito fotoelétrico, prevendo um limiar de frequência para a emissão de elétrons, fenômeno que desafiava a física clássica.

2.3. 1913: Niels Bohr e o modelo atômico

Niels Bohr concluiu seu doutorado na Universidade de Copenhague em 1911, investigando o comportamento dos elétrons em metais. Em seguida, realizou um pós-doutorado no Laboratório Cavendish, em Cambridge, sob a orientação de Thomson. Seu objetivo era desenvolver um trabalho experimental para complementar a formação teórica adquirida durante o doutorado.

Naquele período, Ernest Rutherford - então professor na Universidade de Manchester, ex-aluno de Thomson e seu sucessor como professor de Física em Cavendish - retornou a Cambridge para uma série de reuniões. Durante essa

visita, encontrou o jovem Bohr e convidou-o a visitá-lo em Manchester. Thomson, Rutherford e Bohr chegaram a um bom acordo, e Bohr seguiu para Manchester em 1912. Ao final de seu trabalho ali, entregou a Rutherford um resumo das ideias iniciais do que viria a ser seu modelo atômico.

De volta a Copenhague, Bohr tomou contato com os trabalhos de John W. Nicholson sobre a constituição do átomo, nos quais o momento angular associado ao movimento do elétron em torno do núcleo surgia como múltiplos de uma determinada quantidade. Em 1913, em uma trilogia de artigos inovadores e revolucionários¹²⁻¹⁴ - *On the Constitution of Atoms and Molecules*, Partes I, II e III - Bohr apresentou seu modelo atômico, demonstrando sua validade por meio de diversas aplicações.

Na introdução do primeiro artigo da trilogia, Bohr destacou a limitação das teorias clássicas ao tratar sistemas atômicos, afirmando: *"The result of the discussion of these questions seems to be a general acknowledgement of the inadequacy of the classical electrodynamics in describing the behaviour of systems of atomic size. Whatever the alteration in the laws of motion of the electrons may be, it seems necessary to introduce in the laws in question a quantity foreign to the classical electrodynamics, i.e. Planck's constant, or as it often is called the elementary quantum of action. By the introduction of this quantity the question of the stable configuration of the electrons in the atoms is essentially changed, as this constant is of such dimensions that the magnitude that it, together with the mass and charge of the particles, can determine a length of the order of magnitude required"*.¹² Com essa afirmação, Bohr justificava a necessidade de incorporar a constante de Planck para descrever configurações atômicas, rompendo definitivamente com a descrição fornecida pela física tradicional (física clássica).

No modelo atômico proposto por Bohr, os elétrons movem-se em órbitas circulares ao redor do núcleo, e o momento angular associado a esse movimento é quantizado. Em estados estacionários, o momento angular do elétron em relação ao centro da órbita (o núcleo) assume valores múltiplos inteiros de $h/(2\pi)$, onde h é a constante de Planck. Essa quantização do momento angular foi uma das hipóteses fundamentais do modelo, marcando a ruptura com a descrição clássica do movimento dos elétrons nos átomos.

Ernest Rutherford recebeu o Prêmio Nobel de Química em 1908, *"por suas investigações sobre a desintegração dos elementos e a química das substâncias radioativas"*. Niels Henrik David Bohr foi laureado com o Prêmio Nobel de Física em 1922, *"pelos seus serviços na investigação da estrutura dos átomos e da radiação que deles emana"*.

2.4. Os experimentos de Robert A. Millikan, Arthur H. Compton, James Franck e Gustav Hertz

Tantas hipóteses revolucionárias não poderiam ser facilmente aceitas sem a devida confirmação experimental. E foi exatamente isso que ocorreu; diversos experimentos

foram planejados para testá-las. A seguir, destacaremos os principais resultados e as consequências de alguns desses experimentos. Vale observar que, muitas vezes, os desenvolvimentos teóricos e os experimentais avançavam lado a lado, um estimulando o progresso do outro.

Iniciamos pela proposta apresentada por Einstein e pela relação entre ela e o efeito fotoelétrico. Robert A. Millikan,¹⁵ o mesmo que identificou experimentalmente a carga do elétron, publicou em 1916 um artigo no periódico *Physical Review*, apresentando resultados e conclusões de experimentos iniciados em 1905 sobre o efeito fotoelétrico. Os dados apresentados nesse trabalho são amplamente reconhecidos como a comprovação experimental dos "fótons" de luz propostos por Einstein, embora o próprio Millikan tenha rejeitado essa interpretação em suas conclusões. Robert A. Millikan foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física em 1923, *"pelo seu trabalho sobre a carga elementar da eletricidade e sobre o efeito fotoelétrico"*.

Talvez ainda mais conclusivos, em relação à comprovação das hipóteses de Einstein sobre o efeito fotoelétrico, tenham sido os resultados obtidos por Arthur H. Compton,¹⁶ envolvendo estudos sobre o espalhamento de raios X empregando um espectrômetro de Bragg. Os resultados foram publicados em 1923 e mostraram que os raios X, ao interagirem com elétrons, apresentavam variações de comprimento de onda compatíveis com o comportamento de partículas (fótons) corroborando de forma decisiva a natureza corpuscular da luz. Arthur H. Compton foi laureado com o Prêmio Nobel de Física em 1927, *"por sua descoberta do efeito que leva seu nome"*.

O modelo atômico proposto por Bohr, no qual o momento angular dos elétrons é quantizado e a transição entre órbitas envolve a emissão ou a absorção de um fóton, explicava de forma satisfatória os espectros do átomo de hidrogênio e do íon He^+ . A confirmação experimental desse modelo surgiu em 1914, com os resultados publicados por James Franck e Gustav Hertz.^{17,18} Em seus experimentos sobre colisões inelásticas entre elétrons e átomos, eles conseguiram evidenciar a existência de níveis discretos de energia nos átomos, como previsto por Bohr.

James Franck e Gustav Hertz foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física em 1925, *"por sua descoberta das leis que regem o impacto de um elétron sobre um átomo"*.

2.5. 1916: A proposta de Arnold Sommerfeld

O experimento de Franck e Hertz forneceu uma evidência experimental em favor do modelo proposto por Bohr, embora muitas questões ainda permanecessem em aberto. Arnold Sommerfeld¹⁹ também usou esse modelo para explicar o efeito Zeeman (desdobramento de uma linha espectral em seus componentes pela aplicação de um campo magnético), mas percebeu que seriam necessárias algumas modificações e passou a adotar a condição de quantização da ação, indo além da quantização do momento angular da órbita, como proposta por Bohr. Com isso, introduziu um

segundo número quântico, correspondente à quantização do componente “z” do momento angular. A partir desse ponto, o número quântico introduzido por Bohr passou a ser denominado número quântico principal (n), enquanto o de Sommerfeld passou a ser chamado de número quântico azimutal (ou secundário, m).

Além disso, Sommerfeld considerou a possibilidade de órbitas elípticas e a necessidade de limitar “arbitrariamente” o número de elétrons por órbita. Esse modelo atômico, conhecido como modelo de Bohr-Sommerfeld, merece destaque por ter sido o primeiro a explicar, ainda que superficialmente, a tabela periódica dos elementos, além de prever que as propriedades químicas estavam relacionadas aos elétrons da camada mais externa.

Embora tenha sido indicado diversas vezes, Sommerfeld não recebeu o Prêmio Nobel. No entanto, quatro de seus doutorandos e três de seus pós-doutorandos foram laureados com o Nobel em Física ou Química. Entre seus alunos de doutorado, destacam-se: Werner Heisenberg, Hans Bethe, Peter Debye, Walter Heitler e Wolfgang Pauli.

2.6. O spin: Wolfgang Ernst Pauli, George Eugene Uhlenbeck e Samuel Abraham Goudsmit

Otto Stern e Walther Gerlach realizaram um experimento decisivo para testar a quantização do momento angular, conforme proposto no modelo de Sommerfeld. Inicialmente idealizado por Otto Stern em 1921, o experimento foi executado em colaboração com Walther Gerlach entre 1921 e 1922.²⁰⁻²²

No experimento, um feixe de átomos de prata ($Z = 47$) ou de cério ($Z = 55$), ambos com número atômico ímpar e, portanto, número ímpar de elétrons, foi direcionado através de um campo magnético não homogêneo e perpendicular à trajetória do feixe. O resultado observado foi a separação do feixe em dois componentes distintos, o que contradizia as previsões clássicas. Esse resultado forneceu evidência experimental para a quantização dos valores de energia e momento angular, conforme previsto pela teoria quântica emergente baseada no modelo de Bohr-Sommerfeld.

O impacto do experimento foi profundo. Otto Stern recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1944 “*por sua contribuição para o desenvolvimento do método dos raios moleculares e pela descoberta do momento magnético do próton*”. Entretanto, a análise dos dados com base apenas no momento angular orbital revelou-se insuficiente. De acordo com a mecânica clássica e o modelo de Bohr-Sommerfeld, o momento angular orbital l admite $2l+1$ projeções possíveis, todas inteiras. Portanto, um número ímpar de orientações seria esperado (1, 3, 5, ...). O fato de o experimento de Stern-Gerlach ter evidenciado apenas dois componentes indicava a presença de uma propriedade adicional do elétron não explicável pela quantização orbital.

Um desafio análogo surgia na interpretação do denominado efeito Zeeman anômalo,²³ caracterizado pelo desdobramento anômalo de linhas espectrais na presença de

campos magnéticos intensos (tipicamente superiores a 0,1 T). Pieter Zeeman e Hendrik Lorentz foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física de 1902 “*por suas contribuições à compreensão da influência do magnetismo sobre os fenômenos de radiação*”, sendo que Lorentz propôs uma interpretação baseada em modelos clássicos. Em alguns casos específicos, como o dos metais alcalinos, o comportamento observado não podia ser interpretado com explicações puramente clássicas, nem com o formalismo de quantização do momento angular orbital, evidenciando a necessidade de uma descrição mais completa do momento angular eletrônico.

Nesse contexto, destaca-se a contribuição de Wolfgang Ernst Pauli, orientado por Arnold Sommerfeld durante o doutorado e por Niels Bohr no pós-doutorado. Motivado pela dificuldade em explicar o efeito Zeeman anômalo e pelas regularidades observadas na tabela periódica, Pauli concluiu que os três números quânticos então conhecidos (número quântico principal (n), número quântico orbital (l) e número quântico magnético (m_l)) eram insuficientes para descrever completamente os estados eletrônicos em átomos.

Em 1925, Pauli propôs²⁴ a existência de um quarto número quântico, associado a uma nova propriedade intrínseca do elétron. Essa proposta surgiu em seu trabalho sobre a influência da dependência da massa do elétron com a velocidade no efeito Zeeman anômalo. Posteriormente, Pauli afirmou que essa nova propriedade não poderia ser explicada por meio da física clássica e demandava uma formulação quântica mais fundamental.

O novo número quântico, na notação moderna designado por m_s , poderia assumir apenas dois valores: $+1/2$ ou $-1/2$. Essa quantização binária revelou-se essencial para a formulação do Princípio de Exclusão de Pauli, que estabelece que dois *férmions* idênticos (como elétrons) não podem ocupar o mesmo estado quântico em um sistema. Pela descoberta do Princípio da Exclusão, denominado posteriormente Princípio de Exclusão de Pauli, Wolfgang Pauli foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física em 1945, “*pela descoberta do Princípio da Exclusão, também conhecido como Princípio de Pauli*”.

Em 1925 (com publicação em 1926), a compreensão da estrutura do momento angular eletrônico sofreu uma mudança fundamental. George E. Uhlenbeck e Samuel A. Goudsmit,²⁵ então doutorandos, propuseram a existência de uma nova propriedade intrínseca do elétron: o *spin*. Em artigo publicado na *Nature*, os autores sugeriram que o momento angular poderia possuir componentes em meios inteiros ao longo do eixo z, hipótese inédita à época, que se tornava necessária para explicar observações experimentais, como aquelas obtidas por Stern e Gerlach.

A proposta introduzia um número quântico adicional, o número quântico de spin S, com valor fixo $S = 1/2$ para o elétron. De modo análogo ao momento angular orbital, as projeções do spin ao longo do eixo z são determinadas por $m_s = \pm 1/2$, correspondendo a $2S+1$ orientações possíveis (no caso do elétron, como $s=1/2$, temos 2 valores, orientações,

possíveis). Essa quantização binária explicava diretamente o desdobramento duplo observado no experimento de Stern-Gerlach, algo que não podia ser justificado exclusivamente pelo momento angular orbital, cujos valores são inteiros e resultam em um número ímpar de projeções.

É importante destacar que o spin é uma propriedade fundamental do elétron, intrínseca à partícula. Assim, o valor de $S = 1/2$ é fixo, e o número quântico magnético de spin m_s assume apenas os valores $\pm 1/2$. Surgia, portanto, ainda antes da formulação completa da mecânica quântica, o conceito de spin, que viria a desempenhar papel central na física moderna e em diversas aplicações tecnológicas futuras.

A aceitação da hipótese foi reforçada por Niels Bohr,²⁶ que, em carta publicada logo após o artigo de Uhlenbeck e Goudsmit, afirmou: *“This possibility must be the more welcomed at the present time, when the prospect is held out of a quantitative treatment of atomic problems by the new quantum mechanics initiated by the work of Heisenberg, which aims at a precise formulation of the correspondence between classical mechanics and the quantum theory.”* Com isso, não apenas o experimento de Stern-Gerlach podia ser explicado de forma satisfatória, como também o efeito Zeeman anômalo encontrava uma descrição coerente dentro da nova teoria quântica que estava sendo formulada.

O conceito de que o spin do elétron corresponderia a uma rotação intrínseca da partícula em torno de seu próprio eixo enfrentou resistência significativa na comunidade científica da época, devido ao seu caráter profundamente inovador. Mesmo Wolfgang Pauli, que havia proposto o quarto número quântico, inicialmente demonstrou ceticismo em relação à interpretação física do spin como um momento angular associado a uma rotação real. Niels Bohr também hesitou, mas foi convencido por Albert Einstein de que essa propriedade deveria possuir uma origem relativística.

A confirmação teórica veio em 1926, com o trabalho de Llewellyn Hillel Thomas,²⁷ que aplicou a teoria da relatividade restrita para descrever o comportamento de partículas com spin. Thomas demonstrou que a precessão relativística do spin corrigia adequadamente as previsões teóricas da estrutura fina do espectro atômico, em particular, a duplicação das linhas espectrais observada experimentalmente.

Esse resultado forneceu a fundamentação teórica necessária para consolidar o modelo do spin como uma propriedade intrínseca e relativisticamente consistente do elétron. Desde então, o conceito de spin tornou-se uma das peças centrais tanto da física como da química modernas, com implicações fundamentais na estrutura da matéria e, como será discutido adiante, em diversas aplicações tecnológicas recentes, incluindo a ressonância magnética e a computação quântica.

2.7. Louis de Broglie e a dualidade partícula-onda

Paralelamente aos desenvolvimentos relacionados à propriedade do spin eletrônico, uma outra proposta

teórica fundamental amadurecia: a *dualidade partícula-onda*, isto é, a ideia de que entidades físicas podem exibir simultaneamente características corpusculares e ondulatórias. Para compreender esse conceito, é necessário recuar até o início do século XX, mais especificamente ao ano de 1900, quando Albert Einstein publicou suas análises estatísticas sobre a radiação do corpo negro. Nelas, ele sugeria a existência de *quanta* de energia luminosa, antecipando a ideia de um dualismo entre partícula e onda.

Essa questão foi retomada por Louis de Broglie em 1923. Utilizando conceitos da teoria da relatividade restrita, de Broglie desenvolveu uma hipótese inovadora: toda partícula material deveria possuir propriedades ondulatórias associadas. Sua tese de doutorado, apresentada em 1924, propunha uma teoria da matéria baseada na dualidade partícula-onda; notavelmente, essa teoria foi publicada ainda antes da defesa formal de sua tese.²⁸

Um dos maiores êxitos dessa proposta foi demonstrar que a condição de estabilidade das órbitas eletrônicas no modelo atômico de Bohr, relacionada à quantização do momento angular orbital, surgia naturalmente a partir do modelo apresentado. A proposta estabelecia que o comprimento de onda associado ao elétron deveria ajustar-se exatamente à circunferência da órbita, justificando, assim, a quantização observada.

Pelo desenvolvimento da teoria da natureza ondulatória dos elétrons, Louis Victor Pierre Raymond de Broglie foi agraciado com o Prêmio Nobel de Física em 1929, *“por sua descoberta da natureza ondulatória dos elétrons”*.

A confirmação experimental da hipótese proposta por de Broglie não tardou a ocorrer. Em 1927, dois grupos independentes de pesquisadores obtiveram resultados decisivos: Clinton Joseph Davisson e Lester Halbert Germer,²⁹ utilizando elétrons de baixa energia, observaram padrões de difração ao incidir um feixe de elétrons sobre um cristal de níquel. Simultaneamente, George Paget Thomson (filho de J. J. Thomson) e Alexander Reid,^{28,29} empregando elétrons de alta energia, registraram padrões semelhantes ao atravessar filmes finos de materiais.

No experimento de Davisson-Germer, em particular, foram identificados picos de intensidade associados à interferência construtiva, os quais podiam ser precisamente descritos assumindo que os elétrons possuíam comprimento de onda conforme previsto pela relação de de Broglie. Esses resultados forneceram evidência experimental direta do caráter ondulatório das partículas materiais.

Por seus trabalhos fundamentais, Clinton Joseph Davisson e George Paget Thomson foram laureados com o Prêmio Nobel de Física de 1937, *“por sua descoberta experimental da difração de elétrons por cristais”*.

Já entre 1922 e 1925, Arthur Holly Compton havia realizado experimentos que demonstravam o comportamento corpuscular da luz.^{16,32,33} Ao estudar a dispersão de raios X por materiais leves, Compton observou que o comprimento de onda da radiação espalhada variava com o ângulo de espalhamento, um efeito que só podia ser explicado

assumindo que os fótons possuíam momento linear. Esses resultados, conhecidos como efeito Compton, lhe renderam o Prêmio Nobel de Física em 1927, “*pela descoberta do efeito que leva seu nome*”.

Assim, os experimentos de Davisson-Germer e de Thomson-Reid demonstraram que partículas (como elétrons) exibem propriedades ondulatórias, enquanto os experimentos de Compton evidenciaram que radiações (como a luz) exibem características corpusculares. Esses resultados experimentais corroboraram de forma inequívoca a dualidade onda-partícula proposta por de Broglie e estabeleceram um dos pilares fundamentais da moderna teoria quântica.

3. 1925: A Nova Mecânica Quântica

3.1. Heisenberg, Born e Jordan e a Mecânica Quântica matricial

Werner Karl Heisenberg realizou seu doutorado em física sob a orientação de Arnold Sommerfeld. Durante sua formação, Heisenberg teve contato direto com temas avançados, abrangendo áreas como relatividade, óptica, física estatística e as então emergentes teorias quânticas, participando de diversas disciplinas ministradas por Sommerfeld.

Heisenberg obteve o título de Doutor em Física em 1923, com a nota mínima exigida para aprovação. A baixa avaliação deveu-se, em grande parte, à sua dificuldade em responder adequadamente a perguntas experimentais elementares formuladas por Wilhelm Wien, um dos membros da banca examinadora. Apesar disso, o sistema de avaliação considerava o desempenho global do candidato, incluindo tanto os aspectos experimentais quanto teóricos. Como sua excelência na abordagem teórica era indiscutível, Heisenberg foi aprovado.

Imediatamente após concluir seu doutorado, Werner Heisenberg transferiu-se para Göttingen, onde passou a trabalhar com Max Born. Born, à época, estava profundamente convencido da necessidade de uma reformulação teórica da física em escala atômica, a qual denominava *mecânica quântica*.³⁴

Em 1924, durante uma estadia no Instituto de Física Teórica em Copenhague, Heisenberg teve a oportunidade de apresentar a Niels Bohr as ideias preliminares de sua abordagem teórica. Essa interação foi decisiva para o amadurecimento de sua concepção teórica, que buscava descrever os fenômenos quânticos sem recorrer a representações orbitais clássicas.

No ano seguinte, em 1925, Heisenberg retornou a Göttingen, onde, apesar de receber algumas críticas iniciais, além de enfrentar problemas de saúde, conseguiu finalizar sua proposta teórica. Aos 24 anos de idade, publicou o artigo seminal que deu origem à formulação da *mecânica matricial*.⁴ Nesse trabalho, Heisenberg introduziu uma

abordagem radicalmente nova: ao invés de descrever trajetórias eletrônicas, concentrou-se exclusivamente em grandezas observáveis, como frequências e intensidades de radiação, representando-as por matrizes.

Em um artigo publicado em 1975, Heisenberg³⁵ revelou que, durante o desenvolvimento inicial de sua teoria, não possuía conhecimento prévio sobre álgebra matricial: “... *I must confess I did not know what a matrix was and did not know the rules of matrix multiplication*”. Naquele período, o uso de matrizes ainda era pouco difundido entre os físicos teóricos, e até mesmo para Max Born, o conceito era relativamente novo.

Após a apresentação do trabalho por Heisenberg, Born reconheceu o potencial da nova abordagem, mas identificou a necessidade de uma formalização matemática mais rigorosa. Para isso, recorreu à colaboração de um de seus jovens e talentosos assistentes, Pascual Jordan, que possuía sólida formação em matemática. A parceria entre Heisenberg, Born e Jordan culminou na consolidação da mecânica quântica matricial por meio de dois artigos fundamentais: o primeiro, assinado por Born e Jordan;⁵ e o segundo, mais extenso, publicado por Heisenberg, Born e Jordan,⁶ que ficou conhecido na literatura como o *three-man paper*.

Esses trabalhos consolidaram formalmente a mecânica matricial como uma estrutura matemática robusta e autônoma para a descrição dos fenômenos quânticos, representando um marco decisivo na transição da antiga teoria quântica para a nova mecânica quântica. A abordagem matricial inaugurou uma formulação não-clássica, baseada em operadores e grandezas observáveis, rompendo definitivamente com as descrições baseadas em trajetórias determinísticas.

Em reconhecimento a essa contribuição seminal, Werner Heisenberg foi laureado com o Prêmio Nobel de Física de 1932, “*pela criação da mecânica quântica, cuja aplicação, entre outras, levou à descoberta das formas alotrópicas do hidrogênio*”. Apesar da honra, Heisenberg demonstrou insatisfação com o fato de que seus colaboradores diretos, Max Born e Pascual Jordan, não tenham sido igualmente reconhecidos pela Academia. Esse desconforto foi registrado em correspondências enviadas logo após a premiação: uma carta a Max Born, datada de 25 de novembro de 1933,³⁶ e outra a Pascual Jordan, em 6 de junho de 1934.³⁷

3.2. 1925: Schrödinger e a função de onda

Inspirado pelas ideias apresentadas por de Broglie, Schrödinger desenvolveu uma formulação distinta da mecânica quântica, na qual um sistema de partículas (por exemplo, um átomo ou molécula) é representado por uma função de onda que satisfaz uma equação diferencial parcial, conhecida como equação de Schrödinger. As energias do sistema passam a ser determinadas como em um problema de autovalores. Além disso, as condições de quantização, até então introduzidas de forma ad hoc (por exemplo, o

momento angular da órbita do elétron ao redor do núcleo ser um múltiplo inteiro da constante de Planck), surgiam agora de maneira natural.

Embora tenha sido concluída durante o inverno de 1925, a série de artigos foi publicada em 1926.³⁸⁻⁴³ O próprio Schrödinger apresentou soluções da equação para diversos sistemas, como o átomo de hidrogênio, o oscilador harmônico, o rotor rígido com eixo fixo no espaço, o rotor não rígido, além dos efeitos Zeeman e Stark. Posteriormente, ele desenvolveu a teoria de perturbação, que permite resolver uma variedade de problemas. O experimento de Davisson e Germer, que envolveu a difração de elétrons por um cristal de níquel, constitui uma comprovação da abordagem de Schrödinger.

Diferentemente da mecânica matricial proposta por Heisenberg, Born e Jordan, a mecânica quântica ondulatória desenvolvida por Schrödinger era mais intuitiva e foi bem recebida pela comunidade científica da época, que reconheceu suas vantagens para a realização de cálculos.

Para concluir, vale um breve comentário: Schrödinger possuía uma sólida formação matemática (incluindo equações de autovalores e autofunções) quando defendeu sua tese de doutorado em 1910, sob orientação de Friedrich Hasenöhl (físico e matemático), que havia sucedido Ludwig Boltzmann como chefe do Departamento de Física Teórica da Universidade de Viena. Contrariando as expectativas, sua tese de doutorado abordava questões experimentais. Em 1914, já atuando como *lecturer* na Universidade de Viena, foi enviado à guerra. Retornando em 1918, passou a trabalhar na Universidade de Jena como assistente de Wilhelm Wien. Em 1921, transferiu-se para a Universidade de Zürich.

Erwin Schrödinger foi laureado com o Prêmio Nobel de Física em 1933 (compartilhado com Paul Adrien Maurice Dirac), “*pela descoberta de novas formas produtivas de teoria atômica*”.

3.3. A equivalência entre as teorias matricial e ondulatória

Paul Adrien Maurice Dirac, por meio de seu orientador Sir Ralph Howard Fowler (Universidade de Cambridge; um dos poucos pesquisadores britânicos envolvidos com a mecânica quântica na época), tomou conhecimento do trabalho de Heisenberg em 1925 e percebeu que poderia apresentar uma formulação alternativa, por meio da qual a proposta de Heisenberg poderia ser mais bem compreendida. Seu trabalho foi publicado em 1925, com o título *The Fundamental Equations of Quantum Mechanics*.⁴⁴ Em 1926, ele publicou outro artigo,⁴⁵ demonstrando a equivalência entre as formulações matricial (Heisenberg) e ondulatória (Schrödinger) da mecânica quântica. Vale, no entanto, destacar que o próprio Schrödinger³⁸ e von Neumann⁴⁶ também já haviam demonstrado essa equivalência.

Paul Adrien Maurice Dirac foi laureado com o Prêmio Nobel de Física em 1933 (compartilhado com Erwin Schrödinger), “*pela descoberta de novas formas produtivas de teoria atômica*”. É interessante mencionar que Sir Ralph

Howard Fowler, seu orientador, não recebeu o Prêmio Nobel, embora três de seus alunos o tenham recebido: Subrahmanyan Chandrasekhar (Prêmio Nobel de Física em 1983), Nevill Francis Mott (Prêmio Nobel de Física em 1977) e o próprio Dirac. Além disso, Fowler orientou também Douglas Rayner Hartree e John Lennard-Jones, entre vários outros cientistas de destaque.

Outra contribuição fundamental de Dirac refere-se ao desenvolvimento da mecânica quântica relativística, apresentado em seu artigo publicado em 1928 com o título *The Quantum Theory of the Electron*,⁴⁷ no qual estabelece os fundamentos da eletrodinâmica quântica, teoria que descreve a interação da radiação com a matéria. Dirac tinha apenas 25 anos quando fez todas essas contribuições.

Para resumir um de seus artigos,⁴⁸ Dirac escreveu: “*The general theory of quantum mechanics is now almost complete, the imperfections that still remain being in connection with the exact fitting in of the theory with relativity ideas. These give rise to difficulties only when high-speed particles are involved, and are therefore of no importance in the consideration of atomic and molecular structure and ordinary chemical reactions, in which it is, indeed, usually sufficiently accurate if one neglects relativity variation of mass with velocity and assumes only Coulomb forces between the various electrons and atomic nuclei. The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. It therefore becomes desirable that approximate practical methods of applying quantum mechanics should be developed, which can lead to an explanation of the main features of complex atomic systems without too much computation.*”

Como podemos observar, Dirac já antevia as dificuldades enfrentadas na aplicação da nova mecânica quântica à química!

4. Mecânica Quântica no Dia a Dia

4.1. Radiação do corpo negro e o efeito estufa

Como sabemos, a radiação eletromagnética emitida pelo Sol (energia solar) atravessa a atmosfera, sendo uma parte absorvida pela superfície da Terra e outra refletida. Esse processo remete ao problema da radiação do corpo negro. Se toda a energia emitida pela Terra retornasse ao espaço, a temperatura média do planeta seria, aproximadamente, de -15°C. No entanto, os gases que compõem a atmosfera são capazes de reter parte dessa radiação, aquecendo a superfície terrestre; em condições ideais, a temperatura média seria em torno de 15°C.

Utilizando a distribuição de energia prevista pelo modelo da radiação do corpo negro, sabemos que a energia emitida pela Terra está na região do infravermelho. Com

base na mecânica quântica, como no modelo do oscilador harmônico descrito por Schrödinger, compreendemos que essa é a faixa característica dos movimentos vibracionais. Os gases presentes na atmosfera absorvem parte dessa radiação infravermelha e a reemitem, mantendo a Terra aquecida (processo conhecido como efeito estufa). Entre esses gases (gases do efeito estufa) estão o vapor d'água, o CO_2 , o O_3 , o CH_4 , os CFCs, entre outros. O problema, portanto, não está na presença desses gases, mas sim na sua concentração.

Assim, a mecânica quântica, por meio do modelo de distribuição de radiação do corpo negro e dos modelos que descrevem os movimentos vibracionais, nos ajuda a compreender e a propor alternativas para minimizar o aquecimento global.

4.2. Efeito fotoelétrico e renovação da matriz energética

Uma das maneiras de reduzir as emissões de CO_2 é encontrar fontes alternativas de energia que não dependam de combustíveis fósseis. Dentre as opções disponíveis, destaca-se atualmente o uso de células fotovoltaicas, uma fonte de energia limpa, renovável e inesgotável.

As células fotovoltaicas convertem a radiação (luz) solar em energia. Elas podem ser instaladas de diversas formas, desde pequenos painéis em telhados residenciais até grandes usinas compostas por extensos conjuntos de painéis. O fenômeno físico central por trás dessa tecnologia é o efeito fotoelétrico, que, como vimos anteriormente, é um fenômeno descrito quanticamente por Einstein.

Relembrando, a incidência de radiação eletromagnética sobre uma superfície metálica faz com que elétrons sejam emitidos (fotoelétrons), gerando corrente elétrica. Esse fenômeno foi observado por Hertz em 1887 e explicado por Einstein em 1905, ao adaptar as ideias de quantização introduzidas por Planck para explicar o espectro da radiação do corpo negro. As células fotovoltaicas são compostas por materiais semicondutores que absorvem a luz solar e a convertem em energia elétrica, conforme descrito no efeito fotoelétrico. Uma célula solar típica contém duas camadas de semicondutores de silício: a uma das camadas adiciona-se boro, criando regiões com deficiência de elétrons (*holes*), carregadas positivamente - chamadas camadas do tipo *p*; à outra camada, adiciona-se fósforo para gerar excesso de elétrons, criando regiões negativamente carregadas - chamadas tipo *n*. Quando a luz solar incide sobre essas camadas, elétrons são removidos (pelo efeito fotoelétrico), formando *holes* adicionais. Conectando as duas camadas a um circuito elétrico, o campo elétrico resultante faz com que os elétrons se movam através do circuito, gerando corrente elétrica. O principal desafio tecnológico está em desenvolver materiais que sejam eficientes tanto na absorção da luz solar quanto na emissão de fotoelétrons.

4.3. O laser

O *laser* (acrônimo de *Light Amplification by Stimulated*

Emission of Radiation) movimenta atualmente bilhões de dólares e está dentre as dez maiores conquistas tecnológicas do século XX. É utilizado em tratamentos dermatológicos (por exemplo, remoção de tatuagens, varizes, lesões cutâneas), em doenças oculares, no tratamento de cânceres (terapia fotodinâmica), em sessões de fisioterapia, para cortes precisos e soldagem de materiais, em leitores de códigos de barras, dispositivos ópticos (CDs, DVDs, Blu-Rays), em telecomunicações (fibras ópticas) e comunicações via satélite, como apontadores em salas de aula (*laser pointer*), e até em shows de luzes (por exemplo, em eventos musicais).

A inspiração para o desenvolvimento dos lasers vem do trabalho publicado por Einstein em 1917,⁴⁹ no qual ele introduziu o conceito de emissão estimulada de radiação. Esse processo ocorre quando radiação eletromagnética de uma determinada frequência estimula um átomo ou molécula, que se encontra em estado excitado, a retornar ao estado fundamental, emitindo radiação com a mesma frequência da radiação incidente.

O primeiro dispositivo criado com base na proposta da emissão estimulada de radiação foi desenvolvido por Charles Hard Townes em 1954, envolvendo micro-ondas - o chamado *maser* (*Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation*). Em 1958, Townes e Arthur Schawlow conceberam um dispositivo capaz de operar com comprimentos de onda que iam do infravermelho até a região óptica do espectro eletromagnético. Em 1960, Theodore Harold Maiman⁵⁰ desenvolveu o primeiro dispositivo a *laser*.

Em 1964, o Prêmio Nobel de Física foi compartilhado por Charles Hard Townes (50%) e Nicolay Gennadiyevich Basov e Aleksandr Mikhailovich Prokhorov (50%) “*por trabalhos fundamentais no campo da eletrônica quântica, que levaram à construção de osciladores e amplificadores baseados no princípio maser-laser*”.

4.4. O exame de ressonância magnética

A ressonância magnética (assim como o raio-X, tomografias computadorizadas e ultrassom, por exemplo) é uma técnica de diagnóstico não invasiva (nenhum instrumento é introduzido no corpo do paciente), que gera imagens do interior do organismo. É amplamente empregada em exames clínicos para avaliar estruturas e funções internas, com o objetivo de auxiliar no tratamento e no acompanhamento de diversas enfermidades. Sem dúvida, muitos já foram submetidos a um exame de ressonância magnética.

A ressonância magnética está fundamentada na propriedade do momento angular de spin, observada inicialmente nos experimentos de Stern e Gerlach, realizados em 1921, e posteriormente formulada em termos quânticos por Pauli (por meio do princípio da exclusão de Pauli) e Dirac (por meio da mecânica quântica relativística), conforme descrito anteriormente. Em resumo, devido à propriedade de spin, os elétrons possuem momento angular e momento magnético intrínsecos.

Entre o final da década de 1920 e o início da de 1930, David Mathias Dennison e Ralph Howard Fowler publicaram diversos artigos. Em 1927,⁵¹ reportaram observações experimentais indicando que partículas nucleares e alguns núcleos também possuem momento angular e magnético de spin intrínsecos. A partir de então, a comunidade científica passou a aceitar que elétrons, prótons e nêutrons possuem o mesmo valor de spin, ou seja, momento angular de spin igual a $(1/2)\hbar$. No entanto, as medições das propriedades magnéticas nucleares eram extremamente difíceis na época, pois as propriedades magnéticas atômicas e moleculares eram dominadas pelos efeitos eletrônicos (de spin e orbitais), dado que os elétrons são muito mais leves do que as partículas nucleares.

Na década de 1930, um grupo de pesquisadores da Universidade da Califórnia, liderado por Isidor Isaac Rabi,⁵¹⁻⁵⁴ realizou uma série de experimentos utilizando técnicas de feixes moleculares similares às de Stern (com quem Rabi havia trabalhado em Hamburgo), conseguindo medir o spin de vários núcleos de metais alcalinos, além dos prótons e do deutério. Em 1946, de maneira independente e praticamente simultânea, Edward Mills Purcell⁵⁵ (Massachusetts Institute of Technology – Radiation Laboratory) e Felix Bloch^{56,57} (Stanford University) ampliaram essas investigações experimentais para amostras sólidas e líquidas. Desde então, a ressonância magnética desenvolveu-se rapidamente, tornando-se uma das técnicas mais utilizadas em química.

O desenvolvimento da técnica de transformada de Fourier associada à ressonância magnética nuclear (*Fourier Transform NMR Spectroscopy*), introduzida por Richard Robert Ernst em 1966,⁵⁸ também foi fundamental para a geração de imagens obtidas por meio da ressonância magnética. Finalmente, o trabalho publicado em 1973 por Paul Christian Lauterbur⁵⁹ foi decisivo para o avanço da ressonância magnética nuclear voltada à formação de imagens.

Os trabalhos originais de Stern e Gerlach, Pauli e Dirac sobre a propriedade de spin foram essenciais para o desenvolvimento da ressonância magnética por imagem, tal como a utilizamos hoje. Para se ter uma ideia da importância dos frutos gerados a partir da semente que eles plantaram: Isidor Isaac Rabi recebeu o Prêmio Nobel de Física em 1944 (“*por seu método de ressonância para registrar as propriedades magnéticas dos núcleos atômicos*”); Felix Bloch e Edward Mills Purcell compartilharam o Prêmio Nobel de Física em 1952 (“*pelo desenvolvimento de novos métodos para medições precisas de ressonância magnética nuclear e descobertas relacionadas a eles*”); Richard Robert Ernst recebeu o Prêmio Nobel de Química em 1991 (“*por suas contribuições ao desenvolvimento da metodologia de espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) de alta resolução*”); e Paul Christian Lauterbur e Peter Mansfield compartilharam o Prêmio Nobel de Fisiologia ou Medicina em 2003 (“*por suas descobertas relativas à imagens de ressonância magnética*”).

4.5. Nanotecnologia

A nanotecnologia, termo muito empregado atualmente, é uma das áreas da ciência e tecnologia que se dedica ao estudo e às aplicações de compostos com estruturas da ordem de nanômetros (10^{-9} metros). Para se ter uma ideia sobre a dimensão de que estamos falando, o diâmetro de um fio de cabelo humano é da ordem de 80.000 - 100.000 nanômetros! Para estudar e aplicar estruturas com essa ordem de grandeza - na qual fenômenos não observados classicamente se manifestam - devemos utilizar a mecânica quântica.

Muitos consideram que a semente da nanotecnologia (embora esse termo não tenha sido utilizado) foi plantada por Feynman em 1959, durante uma palestra no Caltech (California Institute of Technology), intitulada “*There’s Plenty of Room at the Bottom*”. Nela, ele desafiou a ideia de que havia um limite para o que poderia ser feito em pequena escala (miniaturização de equipamentos), argumentando que havia “bastante espaço” para construir máquinas e dispositivos complexos usando átomos e moléculas individuais. Com isso, ele deu um grande impulso ao desenvolvimento de equipamentos como o microscópio de varredura por tunelamento (*scanning tunneling microscope*) e o microscópio de força atômica (*atomic force microscope*), com os quais podemos manipular nanocompostos. Usando um tom apocalíptico, ele diz: “*In the year 2000, when they look back at this age, they will wonder why it was not until the year 1960 that anybody began seriously to move in this direction.*”

Atualmente, os nanomateriais estão presentes em praticamente todos os aspectos de nossas vidas, da medicina e da eletrônica à ciência da computação, física, química, biologia e engenharia de materiais. Essa ampla aplicação se deve às propriedades que esses materiais exibem em escala nanométrica, reveladas pela mecânica quântica. A seguir, vamos comentar um pouco mais sobre apenas uma dessas aplicações.

4.5.1. Pontos quânticos (*quantum dots*)

O Prêmio Nobel de Química de 2023 foi compartilhado por Mounqi Gabriel Bawendi, Louis Eugene Brus e Alexey Ivanovich Ekimov “*pela descoberta e síntese de quantum dots*”, um dos exemplos de como as leis da mecânica quântica estão presentes em inúmeros aspectos de nosso cotidiano, como, por exemplo, em *light-emitting diodes* (LEDs), células fotovoltaicas, fotorreceptores e detectores, biomedicina, dentre outros. Os *quantum dots* (pontos quânticos) são capazes de absorver luz (radiação eletromagnética) de uma cor (frequência) e emitir em outra, sendo muito mais eficientes do que outros dispositivos convencionais.

Podemos dizer que tudo começou no final dos anos 1970 e início dos anos 1980, quando Ekimov⁶⁰ observou que propriedades ópticas de nanocristais de cloreto de cobre variavam com o tamanho das partículas. A partir

dos resultados publicados por Ekimov, Alexander Efros⁶¹ desenvolveu uma teoria geral para descrever a influência do tamanho das partículas (*size quantization*) sobre as propriedades ópticas de algumas classes de semicondutores. Paralelamente, Brus⁶²⁻⁶⁴ também observou os mesmos efeitos em nanocristais de sulfeto de cádmio e desenvolveu um modelo teórico para descrevê-los.

Além de estruturas unidimensionais, podemos ter as bidimensionais (conhecidas como *quantum wires*) e as tridimensionais (conhecidas como *quantum wells*). Essas estruturas tridimensionais são chamadas *quantum dots* e, como dissemos, podem ser encontradas em diversos aspectos de nossas vidas. Uma ampla lista de tópicos relevantes sobre avanços na síntese, aplicações atuais e futuras podem ser encontradas no trabalho do Prof. Liberatto Manna,⁶⁵ editor da revista *Nano Letters*.

4.6. Computação quântica

Desde seu início, os pesquisadores perceberam que a mecânica quântica (tanto na abordagem proposta por Heisenberg quanto por Schrödinger) permitia “observar” as propriedades do sistema de maneira indireta, isto é, a partir da solução das equações que ela propunha. Infelizmente, obter soluções analíticas ainda é um problema bastante difícil devido à complexidade envolvida. Na ausência de soluções analíticas, a alternativa é empregar procedimentos numéricos.

Douglas Rayner Hartree, um físico-matemático que trabalhou nas Universidades de Manchester e Cambridge, no Reino Unido, foi pioneiro na aplicação de métodos numéricos para resolver as equações da mecânica quântica, tendo feito sua primeira contribuição em 1928! Ele logo percebeu que seria necessário o auxílio de algum dispositivo para realizar os cálculos. No início da década de 1930, permaneceu alguns anos no MIT e, em 1934, publicou um artigo⁶⁶ utilizando o equipamento mais avançado da época capaz de resolver problemas numéricos: o *Differential Analyzer*. Anos depois, em 1945, durante uma visita ao Moore School of Electrical Engineering (Universidade da Pensilvânia, EUA), teve contato com o primeiro computador eletrônico (ENIAC - *Electronic Numerical Integrator and Computer*) e constatou que poderia ser utilizado para os cálculos numéricos da mecânica quântica.⁶⁷

Desde então, os computadores evoluíram enormemente e as alternativas para aplicar métodos quânticos no estudo de problemas químicos não pararam de crescer, contribuindo para o surgimento de uma área extremamente ativa de investigação: a Química Quântica Computacional. Infelizmente, a complexidade computacional cresce muito mais rapidamente do que a capacidade dos computadores convencionais, inviabilizando algumas aplicações.

Embora tenha adicionado uma dificuldade extra - ou seja, o uso de computadores digitais para obter a solução de suas equações -, a mecânica quântica também propõe sua própria alternativa: a computação quântica! Os

computadores tradicionais empregam “bits” para processar as informações. Os bits podem assumir apenas dois valores (binários), normalmente representados por 1 (ligado) ou 0 (desligado), e os computadores clássicos só podem estar em um estado de cada vez. Os computadores quânticos, por outro lado, empregam os *qubits* (*quantum bits*), que podem ser 0, 1 ou qualquer combinação permitida entre 0 e 1. Para representar os dois estados de um *qubit*, pode-se empregar, por exemplo, a propriedade do spin eletrônico, que possui dois valores, $+1/2$ (up) e $-1/2$ (down); a polarização de fótons, que pode ser horizontal ou vertical; ou dois níveis energéticos de um átomo. De modo geral, um computador quântico com n *qubits* pode estar em uma combinação de 2^n estados, o que permite um número extremamente grande de operações - esta é a diferença fundamental entre computadores quânticos e clássicos.

Para mensurar melhor a velocidade de processamento dos computadores quânticos, apresentamos dois exemplos. Utilizando um processador quântico contendo 53 *qubits* (correspondente a um espaço de 253 dimensões), chamado *Sycamore*, a Google anunciou,⁶⁸ em 2019, ter sido capaz de analisar a saída de um circuito quântico pseudoaleatório em apenas 200 segundos, enquanto o supercomputador clássico mais poderoso da época levaria 10.000 anos. No entanto, a IBM logo questionou⁶⁹ esse feito, afirmando que um computador clássico levaria apenas 2,5 dias (216.000 segundos) para resolver o mesmo problema. Mais recentemente, a Google anunciou⁷⁰ que seu novo dispositivo quântico, chamado *Willow*, contendo 105 *qubits*, resolveria em aproximadamente 5 minutos um problema que o maior supercomputador atual levaria 10^{25} anos para resolver! Além da Google, outras gigantes da tecnologia, como a Microsoft e a Amazon (via AWS), bem como diversos grupos de pesquisa universitários, têm investido intensamente nessa área.

O termo *computador quântico* foi utilizado pela primeira vez por Paul Benioff,⁷¹ em 1980. Pouco depois, em 1982, Feynman⁷ apresentou a primeira descrição da arquitetura de um computador quântico, explicando como ele poderia ser usado para realizar cálculos. Atualmente, a computação quântica é uma realidade em diversas áreas, como ciência dos materiais,⁷² química,⁷³⁻⁷⁶ biologia e bioquímica,⁷⁷ farmacologia,⁷⁸ indústria, inteligência artificial e criptografia, para citar apenas alguns exemplos.

Algumas características da matéria, reveladas pela mecânica quântica, explicam o funcionamento dos computadores quânticos. Vamos mencionar apenas três:

(i) *Superposição*: é a propriedade segundo a qual uma partícula pode estar em uma combinação de diferentes estados ao mesmo tempo. Em mecânica quântica, uma partícula é descrita por meio de sua função de onda determinada pela equação de Schrödinger. Embora isso seja difícil de imaginar sob uma perspectiva clássica, é um efeito natural no contexto da função de onda.

(ii) *Entanglement* (*emaranhamento*): é um estado no qual as funções de onda de dois ou mais *qubits* interagem

e se entrelaçam, formando um único objeto quântico. As propriedades de qubits emaranhados continuam correlacionadas, mesmo quando separados por grandes distâncias - uma propriedade descrita como *nonlocality*. Isso contrasta com os computadores clássicos, nos quais os bits são independentes uns dos outros.

(iii) *Interferência*: como vimos, por meio do emaranhamento, os *qubits* formam uma única função de onda que descreve o estado do computador quântico. Alterando os *qubits*, podemos gerar interferência construtiva (para reforçar a probabilidade de resultados corretos) ou destrutiva (para reduzir a probabilidade de erros).

Sem dúvida, essa é uma área que desperta grande interesse atualmente.

4.7. Biologia e Bioquímica

O livro *What is Life?*,⁷⁹ publicado em 1944 por Schrödinger, pode ser considerado o ponto de partida da visão mecânico-quântica da biologia e bioquímica. Nele, Schrödinger ressaltava que a estabilidade das estruturas moleculares responsáveis pela vida pode ser compreendida apenas por meio da mecânica quântica, uma vez que é somente com ela que podemos compreender as moléculas. Atualmente, a Biologia Quântica é uma área de pesquisa muito ampla e de intensa atividade, explorando fenômenos baseados em princípios quânticos. A seguir, vamos explorar alguns deles.

Os complexos de coleta de luz (*light-harvesting*) em fotossíntese estão entre os tópicos mais estudados atualmente. Esses complexos são capazes de absorver (coletar) a luz solar e transferir a energia para o centro de reação, dando início a uma série de processos bioquímicos. Esse processo é muito eficiente (rendimento quântico acima de 95%), por isso merece ser investigado e compreendido, o que só pode ser feito com modelos quânticos.^{80,81} Para compreender esses processos, é necessário estudar a dinâmica de estados excitados,^{82,83} incluindo processos de transferência de energia e separação de cargas.

A visão é um outro processo que só pode ser compreendido empregando-se conceitos mecânico-quânticos.^{84,85} De uma maneira geral, a luz é absorvida por um cromóforo presente na proteína rodopsina, conhecido como 11-*cis*-retinal (derivado da vitamina A). Imediatamente após absorver o fóton, um elétron é fotoexcitado para o primeiro estado eletrônico singlete excitado. Em seguida, ainda no estado excitado, ocorre a isomerização *cis* → *trans* (*trans*-retinal), um processo que requer apenas 200 femtossegundos antes do composto retornar ao estado fundamental. Ao retornar ao estado fundamental, agora na forma *trans*-retinal, tem início uma série de eventos que compõem o processo de visão.

A fotoestabilidade das bases nucleicas canônicas (adenina, guanina, citosina, uracila e timina) na era prebiótica também é outra propriedade que pode ser compreendida apenas se utilizarmos mecânica quântica.

As condições da atmosfera primitiva, bilhões de anos

atrás, eram muito distintas da atual. Dentre outros fatores, não havia a camada protetora de ozônio e o fluxo de radiação ultravioleta sobre a Terra era 100 vezes maior do que o atual, o que significa que a dose letal seria atingida em apenas 0,3 segundos (em comparação com as condições atuais).⁸⁶ As nucleobases canônicas absorvem radiação ultravioleta com comprimento de onda da ordem de 260 - 200 nm (região do UV-C), que é parcialmente absorvida pela camada de ozônio antes de atingir nossa atmosfera, minimizando os efeitos deletérios sobre as nucleobases canônicas.

Como as nucleobases canônicas se protegiam sem o escudo protetor da camada de ozônio?

A fotoestabilidade das nucleobases canônicas é uma propriedade intrínseca. Uma vez fotoexcitadas, elas retornam rapidamente (em femtossegundos ou picossegundos) para o estado fundamental, minimizando a possibilidade de reações fotoquímicas que poderiam degradar suas estruturas. Usando técnicas químico-quânticas computacionais conseguimos⁸⁷⁻⁸⁹ desvendar os detalhes desse processo ultrarrápido de retorno ao estado fundamental. Esses estudos, que só foram realizados graças ao desenvolvimento de métodos quânticos computacionais sofisticados, abriram caminhos para estudarmos outras propriedades, como a luminescência e o uso de compostos derivados em terapia fotodinâmica.

5. Conclusões

Como vimos, a mecânica quântica surgiu a partir do esforço de muitos pesquisadores, experimentais e teóricos, que tinham como objetivo compreender as propriedades das substâncias. Heisenberg e Schrödinger foram os primeiros a apresentar modelos físicos e matemáticos sólidos, aceitos pela comunidade científica, que revolucionaram não apenas a maneira de interpretar os resultados experimentais, mas também permitiram prever o comportamento das substâncias.

A partir da mecânica quântica, passamos a entender a natureza física de propriedades que até então permaneciam obscuras. A partir de então, outros pesquisadores começaram a vislumbrar aplicações tecnológicas para muitas delas. Atualmente, podemos notar a presença da mecânica quântica em boa parte daquilo que utilizamos, transformando para melhor o nosso cotidiano.

Como disse Feynman, a natureza não é clássica; ou seja, se quisermos compreendê-la e explorar os benefícios que oferece, precisamos estudar mecânica quântica, o que é, além de tudo, um desafio maravilhoso e recompensador.

Em dezembro de 1808, Gay-Lussac⁹⁰ apresentou o trabalho “Mémoire sur la combinaison des substances gazeuses les unes avec les autres” dizendo num tom profético: “*J’espère donner par là une preuve de ce qu’ont cienc des chimistes cie distingués, qu’on n’est peut-être pas cie éloigné de l’époque à laquelle on pourra soumettre au calcul la plupart des phénomènes chimiques*”. Certamente, a

mecânica-quântica é uma ferramenta que está nos ajudando a realizar essa profecia.

Deixo uma sugestão para os alunos em geral, mas principalmente para os de química: estudem Mecânica Quântica e Química Quântica! Assim, vocês poderão descobrir muitas coisas novas capazes de melhorar a vida de muitas pessoas.

Agradecimentos

O autor agradece ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pela Bolsa de Produtividade em Pesquisa (Projetos: 311821/2021-9 e 306596/2024-5). Os trabalhos de pesquisa do autor, empregando técnicas quânticas computacionais, são realizados utilizando os recursos computacionais do STI (Superintendência de Tecnologia da Informação da USP), do CENAPAD-SP (Centro Nacional de Computação de Alto Desempenho – Campinas – São Paulo), do cluster Coaraci (FAPESP Proc. 2019/17874-0) e do Center for Computing in Engineering and Science at Unicamp (FAPESP Proc. 2013/08293-7). O Resumo Gráfico foi concebido a partir de ideias originais do autor, que utilizou o Copilot exclusivamente no processo de execução da ilustração.

Referências Bibliográficas

1. Planck, M.; Ueber das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum. *Annalen der Physik* **1901**, 309, 553. [Crossref]
2. Kleppner, D.; Jackiw, R.; One Hundred Years of Quantum Physics. *Science* **2000**, 289, 893. [Crossref]
3. Zeilinger, A.; The Quantum Centennial. *Nature* **2000**, 408, 639. [Crossref]
4. Heisenberg, W.; Über Quantentheoretische Umdeutung Kinematischer und Mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik* **1925**, 33, 879. [Crossref]
5. Born, M.; Jordan, P.; Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **1925**, 34, 858. [Crossref]
6. Born, M.; Heisenberg, W.; Jordan, P.; Zur Quantenmechanik. II. *Zeitschrift für Physik* **1926**, 35, 557. [Crossref]
7. Feynman, R. P.; Simulating Physics with Computers. *International Journal of Theoretical Physics* **1982**, 21, 467. [Crossref]
8. Hertz, H.; Ueber Einen Einfluss des Ultravioletten Lichtes auf die Electriche Entladung. *Annalen der Physik* **1887**, 267, 983. [Crossref]
9. Thomson, J. J.; XL. Cathode Rays. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1897**, 44, 293. [Crossref]
10. Lenard, P.; Erzeugung von Kathodenstrahlen durch Ultraviolettes Licht. *Annalen der Physik* **1900**, 307, 359. [Crossref]
11. Einstein, A.; Über Einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes Betreffenden Heuristischen Gesichtspunkt. *Annalen der Physik* **1905**, 322, 132. [Crossref]
12. Bohr, N.; I. On the Constitution of Atoms and Molecules. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1913**, 26, 1. [Crossref]
13. Bohr, N.; XXXVII. On the Constitution of Atoms and Molecules. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1913**, 26, 476. [Crossref]
14. Bohr, N.; LXXXIII. On the Constitution of Atoms and Molecules. Part III. Systems Containing Several Nuclei. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1913**, 26, 857. [Crossref]
15. Millikan, R. A.; A Direct Photoelectric Determination of Planck's "h". *Physical Review* **1916**, 7, 355. [Crossref]
16. Compton, A. H.; A Quantum Theory of the Scattering of X-rays by Light Elements. *Physical Review* **1923**, 21, 483. [Crossref]
17. Franck, J.; Hertz, G.; Über Zusammenstöße zwischen Elektronen und den Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung desselben. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **1914**, 16, 457. [Link]
18. Franck, J.; Hertz, G.; Über die Erregung der Quecksilberresonanzlinie 253,6 μ durch Elektronenstöße. *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* **1914**, 16, 512. [Link]
19. Sommerfeld, A.; Zur Quantentheorie der Spektrallinien. *Annalen der Physik* **1916**, 356, 1. [Crossref]
20. Stern, O.; Ein Weg zur Experimentellen Prüfung der Richtungsquantelung im Magnetfeld. *Zeitschrift für Physik* **1921**, 7, 249. [Crossref]. Versão em inglês: Stern, O.; A Way Towards the Experimental Examination of Spatial Quantisation in a Magnetic Field. *Zeitschrift für Physik* **1988**, 10, 114. [Crossref]
21. Gerlach, W.; Stern, O.; Der Experimentelle Nachweis des Magnetischen Moments des Silberatoms. *Zeitschrift für Physik* **1922**, 8, 110. [Crossref]
22. Gerlach, W.; Stern, O.; Das Magnetische Moment des Silberatoms. *Zeitschrift für Physik* **1922**, 9, 353. [Crossref]
23. Zeeman, P.; XXXII. On the Influence of Magnetism on the Nature of the Light Emitted by a Substance. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1897**, 43, 226. [Crossref]
24. Pauli, W.; Über den Einfluß der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Elektronenmasse auf den Zeemaneffekt. *Zeitschrift für Physik* **1925**, 31, 373. [Crossref]
25. Uhlenbeck, G. E.; Goudsmit, S.; Spinning Electrons and the Structure of Spectra. *Nature* **1926**, 117, 264. [Crossref]
26. Bohr, N.; Spinning Electrons and the Structure of Spectra. *Nature* **1926**, 117, 265. [Crossref]
27. Thomas, L. H.; The Motion of the Spinning Electron. *Nature* **1926**, 117, 514. [Crossref]
28. de Broglie, L.; XXXV. A Tentative Theory of Light Quanta. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1924**, 47, 446. [Crossref]
29. Davisson, C.; Germer, L. H.; Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel. *Physical Review* **1927**, 30, 705. [Crossref]
30. Thomson, G. P.; Reid, A.; Diffraction of Cathode Rays by a Thin Film. *Nature* **1927**, 119, 890. [Crossref]
31. Thomson, G. P.; Experiments on the Diffraction of Cathode Rays. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*,

- Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **1928**, 117, 600. [[Crossref](#)]
32. Compton, A. H.; The Spectrum of Scattered X-Rays. *Physical Review* **1923**, 22, 409. [[Crossref](#)]
 33. Compton, A. H.; Simon, A. W.; Directed Quanta of Scattered X-Rays. *Physical Review* **1925**, 26, 289. [[Crossref](#)]
 34. Born, M.; Über Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **1924**, 26, 379. [[Crossref](#)]
 35. Heisenberg, W.; Development of Concepts in the History of Quantum Theory. *American Journal of Physics* **1975**, 43, 389. [[Crossref](#)]
 36. The Papers of Professor Max Born. Correspondence with Werner Heisenberg, 1933 - 1953, GBR/0014/BORN 1/3/2/4. *Churchill Archives Centre*, University of Cambridge [[Link](#)]
 37. Werner Heisenberg Papers. *Archives of the Max Planck Society*, Archive 1515/2, Berlin. [[Link](#)]
 38. Schrödinger, E.; Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik* **1926**, 384, 361. [[Crossref](#)]
 39. Schrödinger, E.; Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik* **1926**, 384, 489. [[Crossref](#)]
 40. Schrödinger, E.; Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der Meinem. *Annalen der Physik* **1926**, 384, 734. [[Crossref](#)]
 41. Schrödinger, E.; Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik* **1926**, 386, 109. [[Crossref](#)]
 42. Schrödinger, E.; Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik* **1926**, 385, 437. [[Crossref](#)]
 43. Schrödinger, E.; An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules. *Physical Review* **1926**, 28, 1049. [[Crossref](#)]
 44. Dirac, P. A. M.; The Fundamental Equations of Quantum Mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **1925**, 109, 642. [[Crossref](#)]
 45. Dirac, P. A. M.; On the theory of Quantum Mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **1926**, 112, 661. [[Crossref](#)]
 46. von Neumann, J.; *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press: Princeton, 1955.
 47. Dirac, P. A. M.; The Quantum Theory of the Electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **1928**, 117, 610. [[Crossref](#)]
 48. Dirac, P. A. M.; Quantum Mechanics of Many-Electron Systems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **1929**, 123, 714. [[Crossref](#)]
 49. Einstein, A.; Zur Quantentheorie der Strahlung (The Quantum Theory of Radiation). *Physikalische Zeitschrift* **1917**, 18, 121. [[Link](#)]
 50. Maiman, T. H.; Stimulated Optical Radiation in Ruby. *Nature* **1960**, 187, 493. [[Crossref](#)]
 51. Dennison, D. M.; Fowler, R. H.; A Note on the Specific Heat of the Hydrogen Molecule. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **1927**, 115, 483. [[Crossref](#)]
 52. Kellogg, J. M. B.; Rabi, I. I.; Zacharias, J. R.; The Gyromagnetic Properties of the Hydrogens. *Physical Review* **1936**, 50, 472. [[Crossref](#)]
 53. Rabi, I. I.; Space Quantization in a Gyating Magnetic Field. *Physical Review* **1937**, 51, 652. [[Crossref](#)]
 54. Rabi, I. I.; Zacharias, J. R.; Millman, S.; Kusch, P.; A New Method of Measuring Nuclear Magnetic Moment. *Physical Review* **1938**, 53, 318. [[Crossref](#)]
 55. Purcell, E. M.; Torrey, H. C.; Pound, R. V.; Resonance Absorption by Nuclear Magnetic Moments in a Solid. *Physical Review* **1946**, 69, 37. [[Crossref](#)]
 56. Bloch, F.; Hansen, W. W.; Packard, M.; Nuclear Induction. *Physical Review* **1946**, 69, 127. [[Crossref](#)]
 57. Bloch, F.; Hansen, W. W.; Packard, M.; The Nuclear Induction Experiment. *Physical Review* **1946**, 70, 474. [[Crossref](#)]
 58. Ernst, R. R.; Anderson, W. A.; Application of Fourier Transform Spectroscopy to Magnetic Resonance. *Review of Scientific Instruments* **1966**, 37, 93. [[Crossref](#)]
 59. Lauterbur, P. C.; Image Formation by Induced Local Interactions: Examples Employing Nuclear Magnetic Resonance. *Nature* **1973**, 242, 190. [[Crossref](#)]
 60. Ekimov, A. I.; Onushchenko, A. A.; Quantum Size Effect in Three-Dimensional Microscopic Semiconductor Crystals. *JETP Letters* **2023**, 118, S15. [[Crossref](#)]
 61. Efros, A. L.; Interband Absorption of Light in a Semiconductor Sphere. *SPIE milestone series* **2005**, 180, 71. [[Link](#)]
 62. Rossetti, R.; Nakahara, S.; Brus, L. E.; Quantum Size Effects in the Redox Potentials, Resonance Raman Spectra, and Electronic Spectra of CdS Crystallites in Aqueous Solution. *The Journal of Chemical Physics* **1983**, 79, 1086. [[Crossref](#)]
 63. Brus, L. E.; A Simple Model for the Ionization Potential, Electron Affinity, and Aqueous Redox Potentials of Small Semiconductor Crystallites. *The Journal of Chemical Physics* **1983**, 79, 5566. [[Crossref](#)]
 64. Brus, L. E.; Electron–Electron and Electron–Hole Interactions in Small Semiconductor Crystallites: The Size Dependence of the Lowest Excited Electronic State. *The Journal of Chemical Physics* **1984**, 80, 4403. [[Crossref](#)]
 65. Manna, L.; The Bright and Enlightening Science of Quantum Dots. *Nano Letters* **2023**, 23, 9673. [[Crossref](#)]
 66. Hartree, D. R.; Approximate Wave Functions and Atomic Field for Mercury. *Physical Review* **1934**, 46, 738. [[Crossref](#)]
 67. Hartree, D. R.; The Eniac, an Electronic Computing Machine. *Nature* **1946**, 158, 500. [[Crossref](#)]
 68. Arute, F.; Arya, K.; Babbush, R.; Bacon, D.; Bardin, J. C.; Barends, R.; Biswas, R.; Boixo, S.; Brandao, F. G. S. L.; Buell, D. A.; Burkett, B.; Chen, Y.; Chen, Z.; Chiaro, B.; Collins, R.; Courtney, W.; Dunsworth, A.; Farhi, E.; Foxen, B.; Fowler, A.; Gidney, C.; Giustina, M.; Graff, R.; Guerin, K.; Habegger, S.; Harrigan, M. P.; Hartmann, M. J.; Ho, A.; Hoffmann, M.; Huang, T.; Humble, T. S.; Isakov, S. V.; Jeffrey, E.; Jiang, Z.; Kafri, D.; Kechedzhi, K.; Kelly, J.; Klimov, P. V.; Knysh, S.; Korotkov, A.; Kostritsa, F.; Landhuis, D.; Lindmark, M.; Lucero, E.; Lyakh, D.; Mandrà, S.; McClean, J. R.; McEwen, M.; Megrant, A.; Mi, X.; Michielsen, K.; Mohseni, M.; Mutus, J.; Naaman, O.; Neeley, M.; Neill, C.; Niu, M. Y.; Ostby, E.; Petukhov, A.; Platt, J. C.;

- Quintana, C.; Rieffel, E. G.; Roushan, P.; Rubin, N. C.; Sank, D.; Satzinger, K. J.; Smelyanskiy, V.; Sung, K. J.; Trevithick, M. D.; Vainsencher, A.; Villalonga, B.; White, T.; Yao, Z. J.; Yeh, P.; Zalcman, A.; Neven, H.; Martinis, J. M.; Quantum Supremacy Using a Programmable Superconducting Processor. *Nature* **2019**, 574, 505. [Crossref]
69. Pednault, E.; Gunnels, J. A.; Nannicini, G.; Horesh, L.; Wisnieff, R.; Leveraging Secondary Storage to Simulate Deep 54-qubit Sycamore Circuits. *arXiv: Quantum Physics* **2019**, 1. [Link]
70. Google Quantum AI and Collaborators; Quantum Error Correction Below the Surface Code Threshold. *Nature* **2025**, 638, 920. [Crossref]
71. Benioff, P.; The Computer as a Physical System: A Microscopic Quantum Mechanical Hamiltonian Model of Computers as Represented by Turing Machines. *Journal of Statistical Physics* **1980**, 22, 563. [Crossref]
72. Alexeev, Y.; Amsler, M.; Barroca, M. A.; Bassini, S.; Battelle, T.; Camps, D.; Casanova, D.; Choi, Y. J.; Chong, F. T.; Chung, C.; Codella, C.; Córcoles, A. D.; Cruise, J.; Meglio, A. D.; Duran, I.; Eckl, T.; Economou, S.; Eidenbenz, S.; Elmegreen, B.; Fare, C.; Faro, I.; Fernández, C. S.; Ferreira, R. N. B.; Fuji, K.; Fuller, B.; Gagliardi, L.; Galli, G.; Glick, J. R.; Gobbi, I.; Gokhale, P.; Puente Gonzalez, S. de la; Greiner, J.; Gropp, B.; Grossi, M.; Gull, E.; Healy, B.; Hermes, M. R.; Huang, B.; Humble, T. S.; Ito, N.; Izmaylov, A. F.; Javadi-Abhari, A.; Jennewein, D.; Jha, S.; Jiang, L.; Jones, B.; Jong, W. A. de; Jurcevic, P.; Kirby, W.; Kister, S.; Kitagawa, M.; Klassen, J.; Klymko, K.; Koh, K.; Kondo, M.; Kürkçüoğlu, D. M.; Kurowski, K.; Laino, T.; Landfield, R.; Leininger, M.; Leyton-Ortega, V.; Li, A.; Lin, M.; Liu, J.; Lorente, N.; Luckow, A.; Martiel, S.; Martin-Fernandez, F.; Martonosi, M.; Marvinnay, C.; Medina, A. C.; Merten, D.; Mezzacapo, A.; Michielsen, K.; Mitra, A.; Mittal, T.; Moon, K.; Moore, J.; Mostame, S.; Motta, M.; Na, Y.-H.; Nam, Y.; Narang, P.; Ohnishi, Y.-y.; Ottaviani, D.; Otten, M.; Pakin, S.; Pascuzzi, V. R.; Pednault, E.; Piontek, T.; Pitera, J.; Rall, P.; Ravi, G. S.; Robertson, N.; Rossi, M. A. C.; Rydlichowski, P.; Ryu, H.; Samsonidze, G.; Sato, M.; Saurabh, N.; Sharma, V.; Sharma, K.; Shin, S.; Slessman, G.; Steiner, M.; Sitdikov, I.; Suh, I.-S.; Switzer, E. D.; Tang, W.; Thompson, J.; Todo, S.; Tran, M. C.; Trenev, D.; Trott, C.; Tseng, H.-H.; Tubman, N. M.; Tureci, E.; Valiñas, D. G.; Vallecorsa, S.; Wever, C.; Wojciechowski, K.; Wu, X.; Yoo, S.; Yoshioka, N.; Yu, V. W.-z.; Yunoki, S.; Zhuk, S.; Zubarev, D.; Quantum-Centric Supercomputing for Materials Science: A Perspective on Challenges and Future Directions. *Future Generation Computer Systems* **2024**, 160, 666. [Crossref]
73. Olson, J.; Cao, Y.; Romero, J.; Johnson, P.; Dallaire-Demers, P.-L.; Sawaya, N.; Narang, P.; Kivlichan, I.; Wasielewski, M.; Aspuru-Guzik, A.; Quantum Information and Computation for Chemistry. *arXiv:1706.05413*, **2016**. [Link]
74. Bauer, B.; Bravyi, S.; Motta, M.; Chan, G. K.-L.; Quantum Algorithms for Quantum Chemistry and Quantum Materials Science. *Chemical Reviews* **2020**, 120, 12685. [Crossref]
75. Claudino, D.; The Basics of Quantum Computing for Chemists. *International Journal of Quantum Chemistry* **2022**, 122, e26990. [Crossref]
76. Sangiogo Gil, E.; Oppel, M.; Kottmann, J. S.; González, L.; SHARC Meets TEQUILA: Mixed Quantum-Classical Dynamics on a Quantum Computer Using a Hybrid Quantum-Classical Algorithm. *Chemical Science* **2025**, 16, 596. [Crossref]
77. Pal, S.; Bhattacharya, M.; Lee, S.-S.; Chakraborty, C.; Quantum Computing in the Next-Generation Computational Biology Landscape: From Protein Folding to Molecular Dynamics. *Molecular Biotechnology* **2024**, 66, 163. [Crossref]
78. Santagati, R.; Aspuru-Guzik, A.; Babbush, R.; Degroote, M.; González, L.; Kyoseva, E.; Moll, N.; Oppel, M.; Parrish, R. M.; Rubin, N. C.; Streif, M.; Tautermann, C. S.; Weiss, H.; Wiebe, N.; Utschig-Utschig, C.; Drug Design on Quantum Computers. *Nature Physics* **2024**, 20, 549. [Crossref]
79. Schrödinger, E.; *What Is Life? The Physical Aspect of the Living Cell*, Cambridge University Press: Cambridge, 1944.
80. Scholes, G. D.; Fleming, G. R.; Olaya-Castro, A.; van Grondelle, R.; Lessons from Nature about Solar Light Harvesting. *Nature Chemistry* **2011**, 3, 763. [Crossref]
81. Häse, F.; Roch, L. M.; Friederich, P.; Aspuru-Guzik, A.; Designing and Understanding Light-Harvesting Devices with Machine Learning. *Nature Communications* **2020**, 11, 4587. [Crossref]
82. Ishizaki, A.; Fleming, G. R.; Quantum Coherence in Photosynthetic Light Harvesting. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **2012**, 3, 333. [Crossref]
83. Fiebig, O. C.; Harris, D.; Wang, D.; Hoffmann, M. P.; Schlau-Cohen, G. S.; Ultrafast Dynamics of Photosynthetic Light Harvesting: Strategies for Acclimation Across Organisms. *Annual Review of Physical Chemistry* **2023**, 74, 493. [Crossref]
84. Migani, A.; Sinicropi, A.; Ferré, N.; Cembran, A.; Garavelli, M.; Olivucci, M.; Structure of the Intersection Space associated with Z/E Photoisomerization of Retinal in Rhodopsin Proteins. *Faraday Discussions* **2004**, 127, 179. [Crossref]
85. Gueye, M.; Manathunga, M.; Agathangelou, D.; Orozco, Y.; Paolino, M.; Fusi, S.; Haacke, S.; Olivucci, M.; Léonard, J.; Engineering the Vibrational Coherence of Vision into a Synthetic Molecular Device. *Nature Communications* **2018**, 9, 313. [Crossref]
86. Sagan, C.; Ultraviolet Selection Pressure on the Earliest Organisms. *Journal of Theoretical Biology* **1973**, 39, 195. [Crossref]
87. Serrano-Andrés, L.; Merchán, M.; Borin, A. C.; Adenine and 2-Aminopurine: Paradigms of Modern Theoretical Photochemistry. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2006**, 103, 8691. [Crossref]
88. Serrano-Andrés, L.; Merchán, M.; Borin, A. C.; A Three-State Model for the Photophysics of Adenine. *Chemistry – A European Journal* **2006**, 12, 6559. [Crossref]
89. Serrano-Andrés, L.; Merchán, M.; Borin, A. C.; A Three-State Model for the Photophysics of Guanine. *Journal of the American Chemical Society* **2008**, 130, 2473. [Crossref]
90. Gay-Lussac, J. L.; Mémoire sur la Combinaison des Substances Gazeuses, les unes avec les Autres. *Mémoires de la Société de Physique et de Chimie de la Société d'Arcueil* **1809**, 2, 207. [Link]; Gay-Lussac, J. L.; Mémoire sur la Combinaison des Substances Gazeuses les unes avec les Autres. *Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure* **1886**, 3, 89. [Crossref]