

^a Universidade de São Paulo, Instituto de Física, Rua do Matão 1371, São Paulo-SP, CEP-05508-890, Brasil

*E-mail: canuto@if.usp.br

Submissão: 29 de Agosto de 2025

Aceite: 2 de Dezembro de 2025

Publicado online: 12 de Dezembro de 2025

Uma Breve Resenha do Início da Mecânica Quântica e Sua Atual Extensão para Estudar a Estrutura Eletrônica de Líquidos Moleculares

A Brief Review of the Beginnings of Quantum Mechanics and its Current Extension to Study the Electronic Structure of Molecular Liquids

Kaline Coutinho,^a  Sylvio Canuto^{a,} *

In this brief review, we discuss some of the major advances in quantum physics in the first half of the last century, praising great scientific geniuses and highlighting some aspects that point to great names whose recognition is less than they deserve. These advances culminated in the development of the Schrödinger equation, which paved the way for the study of molecular systems. This extraordinary progress in the new chemistry based solely on the Schrödinger equation—quantum chemistry—is limited when considering the liquid state, more pertinent to everyday laboratory in chemistry and spectroscopy. This has recently led to the development of hybrid methods combining quantum mechanics and statistical physics. The sequential QM/MM, method developed by our group, is briefly presented, and its success is exemplified by describing the absorption spectrum of the chlorophyll-c₂ in methanol, in the ultraviolet-visible region. The solvent effect is significant and very well described, including the inhomogeneous broadening of the intense Soret band.

Keywords: Quantum mechanics; molecular spectroscopy; solvent effects; sequential QM/MM; chlorophyl-c₂.

1. Introdução: A Origem da Mecânica Quântica

Possivelmente a mais bem sucedida e revolucionária teoria científica da humanidade, a Teoria Quântica, rompeu com conceitos bem estabelecidos, revolucionou as ideias sobre o comportamento de sistemas na escala microscópica e foi inicialmente questionada até por alguns dos maiores gigantes da Física no primeiro quarto do século passado. Após suas primeiras descrições com a contribuição de cientistas do mais alto calibre como Max Planck, Albert Einstein, Werner Heisenberg, Niels Bohr, Max Born, Ernest Rutherford, Marie Curie, Paul Dirac, Wolfgang Pauli e Erwin Schrödinger ela atinge seu grande marco com a equação de Schrödinger publicada em 1926. É interessante observar que um ano antes Heisenberg apresentou sua elegante formulação para a mecânica quântica. No entanto, foi a equação de Schrödinger que se estabeleceu e é hoje a mais consistente base para o estudo de sistemas atômicos e moleculares. A supremacia de uma sobre a outra não é bem entendida, mas permite inferir que a proposta de Heisenberg não era tão acessível quanto a proposta de Schrödinger que se baseava em equações diferenciais, um assunto bem mais familiar para os físicos da época. A simplicidade e acessibilidade pode ser a causa principal da supremacia de uma sobre a outra. Nesse ponto, sobressai-se a marcante participação de Max Born. A formulação de Heisenberg não era inicialmente clara e foi Born quem mostrou que se tratava de uma formulação matricial, quando o próprio Heisenberg admitiu que não sabia muito sobre matrizes. Em complemento, quando Schrödinger apresentou a sua equação com uma função de onda, ele também admitiu que não sabia bem o que ela significava. Foi, de novo, Born quem interpretou a função de onda como relacionada a uma amplitude de probabilidade, o conceito que hoje é aceito e funciona com todo esplendor.

A longo do avanço da Física no início do século XX, nomes extraordinários da ciência se consagraram e foram reconhecidos por sua inteligência, persistência e ousadia, o que laureou todos esses acima que citamos, e vários outros, com o Prêmio Nobel de Física. Naturalmente muitos, senão todos no início, se basearam em resultados experimentais e, são vários aqueles que plantaram o problema e seus desafios e foram posteriormente bem menos reconhecidos. Há vários momentos em que a física quântica é dita ter nascido em 1900 quando Planck formula que a energia é múltipla de uma quantidade estabelecida (quantum de energia) e

explica o comportamento da radiância espectral do corpo negro. Mas, lembremos, foi Kirchhoff, em 1859, mais de 40 anos antes, quem observou que um gás rarefeito aquecido emite luz em comprimentos de onda específicos, formando linhas brilhantes no espectro. A posição dessas linhas é característica do gás. Kirchhoff estava assim observando a manifestação dos níveis quantizados de energia, cuja explicação foi posteriormente dada por Niels Bohr, em 1913, portanto décadas depois. Não bastasse isso, foi o próprio Kirchhoff que em 1862 cunhou o termo “radiação de corpo negro”, cuja explicação foi dada por Planck em 1900. Dizer que foi uma “explicação” embute uma certa generosidade, pois o que de fato Planck mostrou foi que a curva de radiância espectral, utilizando uma hipótese que ele próprio admitiu que não estava convencido, a de quantização, tinha uma concordância perfeita com o resultado experimental. Assim, Kirchhoff ascende ao panteão dos grandes cientistas que forneceram bases experimentais para o avanço de uma física disruptiva e revolucionária que surgia. Nessa linha, observe que o efeito fotoelétrico, cuja explicação dará a Einstein o Prêmio Nobel, surge dos experimentos de Hertz que, aos 30 anos de idade, em 1887, reporta que raios ultravioletas incidindo numa placa metálica, mantida evacuada, emitia elétrons. Em 1981, quase um século depois, Kai Siegbahn é laureado com o Prêmio Nobel, por seus trabalhos que mostram que a fotoionização de elétrons em camada profunda, servem como uma poderosa técnica para análise química de moléculas (ESCA: *Electron Spectroscopy for Chemical Analysis*). Kirchhoff e Hertz, são alguns nomes que ilustram a existência de vários físicos experimentais que deviam estar alinhados junto com os grandes nomes associados ao nascimento da física quântica. Não é incomum que alguns heróis sejam menos celebrados, em uma visão que sobrevaloriza o trabalho de gênios teóricos que estavam em ombros de gigantes anteriores.

A ciência não avança em linha reta e percalços existem e correção de rumos se mostram necessárias. Um exemplo interessante é o caso da descoberta do spin do elétron. Rica por conta própria, com deliciosas interpretações dos experimentos feitos por Stern e Gerlach que observaram a deflexão de átomos de Ag ao passar por uma região de campo magnético variável. A deflexão separa o feixe em duas componentes o que não poderia ser devido ao momento magnético orbital, uma vez que para o átomo de prata a configuração eletrônica é ... (4s)²(4p)⁶(4d)¹⁰ 5s¹ e assim temos $\ell = 0$. Eles observaram o efeito devido à existência do spin do elétron e achavam que estavam observando a quantização espacial postulada por Bohr. Gigantes também se confundem e a existência do spin atribuída a Goldsmith e Uhlenbeck é interessante por conter pelo menos uma ironia. Hoje o conceito é que o spin é uma propriedade intrínseca, um momento magnético característico, o que não significa que o elétron gira em torno de si próprio como anteriormente imaginado numa visão clássica, depois descartada. Essa ideia do “spinning elétron” cai totalmente, mas o conceito de spin como uma propriedade intrínseca da partícula,

como sabemos, é fundamental. E divide o universo das partículas em férmons e bósons. Os elétrons são férmons e satisfazem uma estatística apropriada que é universalmente aceita e determina o comportamento da estrutura eletrônica de átomos e moléculas. O princípio de Pauli é central na formulação da função de onda para elétrons. Mas, curiosamente, Pauli rejeitou a ideia de spinning elétrons. Pauli é outro entre os imensuráveis cientistas da época, com grandes contribuições e é também lembrado pelas Matrizes de Pauli, para o spin do elétron. Essas importantes matrizes são, por exemplo, essenciais na formulação da equação de Dirac para o caso relativístico. Ter o nome de Pauli associado a matrizes de spin é a ironia a que referimos acima. Consta que ele não somente não acreditou na ideia do “spinning electron” mas que chegou ao ponto de ridicularizar a ideia. Em 1926, Thomas escreveu uma carta para Goldsmith em que dizia (tradução livre de minha parte): “Eu acho que você e Uhlenbeck foram muito sortudos por terem seu “spinning electron” publicado antes de Pauli ouvir falar disso. Parece que mais de um ano atrás Krönig acreditava no “spinning electron” e trabalhou nisso e a primeira pessoa para quem ele mostrou foi Pauli. Pauli ridicularizou a coisa toda de tal forma que ele foi a primeira e última pessoa a ouvir isso e ninguém nunca mais ouviu falar.” Assim, Krönig ficou e Goldsmith e Uhlenbeck colheram os méritos.

Em um artigo histórico,¹ embora pouco mencionado, Felix Block relata o aparecimento da equação de Schrödinger após Debye incitá-lo para, a partir das ideias de De Broglie, obter uma equação de onda. Aceitando o desafio, Schrödinger fez sua formulação e a apresentou no final de 1925, publicando em 1926. Para muitos dá-se aqui o início da “Mecânica Quântica”. A equação mestre que permite estudar, com base na física quântica, a matéria microscópica. O sucesso foi imediato e extraordinário, dando a Schrödinger o Prêmio Nobel de 1933. Isso fez com que um muito animado Dirac proferisse sua famosa frase que, pelo menos, todo químico conhece (agora sem tradução): ... *the fundamental physical laws necessary for understanding chemistry are known, and the only difficulty lay in applying these laws to solve the complex equations involved.*

Essa afirmação que bem retrata a excitação da época e, em boa medida, é correta, ignora que boa parte da química é “molhada”. Muito da química se passa no estado líquido. E não se deve ignorar que um líquido é uma entidade estatística por natureza. Ignora também que propriedades de líquidos moleculares dependem da temperatura, dependem da pressão, ou melhor, dependem da condição termodinâmica. E a equação de Schrödinger não inclui condição termodinâmica. É correto dizer que a equação de Schrödinger para estados estacionários, $H\Psi = E\Psi$ determina todas as propriedades de um sistema atômico ou molecular. Nessa equação o sistema é caracterizado pelo operador hamiltoniano H . Como bem colocado por Dirac, a questão essencial é resolver essa equação, o que sabemos representa um esforço enorme devido às interações intereletrônicas. Por essa razão, ao

longo dos anos, logo após a formulação de Schrödinger, um grande esforço foi empreendido para desenvolver métodos e algoritmos para resolver, ainda que de forma aproximada, a equação de Schrödinger. Hoje existem métodos sofisticados, de diferente natureza que obtém resultados bastante satisfatórios. Esse desenvolvimento se deu graças a grandes nomes como Hückel, Mulliken, Hylleraas, Hartree, Fock, Slater, Pople, Parr, Löwdin, Roothaan, Cizek, Paldus, Kohn, Sham e tantos outros.² Em todos esses casos o sistema (átomo ou molécula, que é o interesse aqui) é considerado isolado e a equação de Schrödinger, *per se*, não pode tratar de uma molécula interagindo em um meio líquido.

2. Método: Extensão para Estudar Líquidos Moleculares

Para estudar a propriedade eletrônica de sistemas moleculares em meio líquido é necessário incluir a condição termodinâmica, inexistente na equação de Schrödinger, como um ingrediente adicional. A combinação de física estatística e mecânica quântica para estudar líquidos moleculares, efeitos de solvente em espectroscopia molecular e, também, átomos e moléculas em meio supercrítico em nosso grupo do Instituto de Física da USP foi iniciada, ainda no final do século passado.³ Essa combinação híbrida pode se dar gerando amostragens das estruturas do líquido obtidas através de simulação computacional para subsequentes cálculos de mecânica quântica, usando-se a equação de Schrödinger. A simulação computacional pode ser clássica ou quântica. Em nosso laboratório priorizamos a utilização de simulação clássica mais acessível computacionalmente, frequentemente Monte Carlo Metropolis sendo a escolha, mas em outras circunstâncias a simulação quântica é necessária ou mesmo a simulação clássica sendo feito com Dinâmica Molecular. Se a ênfase é obter as configurações representativas de um líquido, Monte Carlo é mais simples. No entanto, se há necessidade de uma sequência temporal, Dinâmica Molecular deve ser utilizada. O teorema ergódico garante que qualquer desses dois procedimentos gera as mesmas configurações do líquido. Tais métodos híbridos são chamados QM/MM, sugerindo o uso combinado de mecânica quântica e mecânica molecular. A inspiração inicial foi para uso em sistemas biomoleculares,⁴ por exemplo, uma reação enzimática, na qual o sítio ativo é tratado por mecânica quântica e aminoácidos mais distantes são tratados por mecânica molecular. Essa formulação deu o Prêmio Nobel de Química em 2013 para Arieh Warshel, Michael Levitt e Martin Karplus. No caso de sistemas líquidos essa partição não se mostra tão evidente e nós temos priorizado tratar todo o sistema inicialmente por modelagem molecular e, posteriormente, usar mecânica quântica nas estruturas amostradas. Por isso, chamamos de QM/MM Sequencial. Exemplos serão apresentados em seguida. Ressaltamos que em todos os casos mostrados abaixo temos convergência estatística. As ilustrações

e exemplos dados na sequência tratam de trabalhos publicados e as referências correspondentes podem ser consultadas para maiores detalhes. A formulação inicial do método QM/MM sequencial foi apresentada em 1997,⁵ sistematizando resultados obtidos anteriormente. Nossa primeira publicação nessa temática, data de 1993 e, com simplicidade, obtém uma boa descrição do benzeno em fase líquida, em condições normais, com a temperatura e a pressão incorporadas.³ Um exemplo é apresentado abaixo, selecionado entre muitas outras aplicações realizadas em nosso grupo, frequentemente em colaboração com outros colegas nacionais e internacionais. Para obter uma lista das diferentes aplicações pode ser acessado os sítios: 1) <https://portal.if.usp.br/gfmm/canuto>, e 2) <https://portal.if.usp.br/gfmm/kaline>. Nesse último é possível também acessar alguns softwares desenvolvidos, incluindo o programa DICE para simulação Monte Carlo Metropolis com interface para programas de cálculos de MQ. Um exemplo será dado abaixo onde analisaremos um espectro em sua plenitude considerando as transições e o alargamento inhomogêneo característico dos experimentos em meio solvente (líquido). Para uma descrição didática de diferentes aplicações desde o início da metodologia, sugerimos a tese de livre-docência de Kaline Coutinho em 2012⁶ e publicações de revisão apresentadas nas referências.⁷⁻⁸

3. Resultado: Aplicação do QM/MM Sequencial para Descrever o Espectro de Absorção de Clorofila-c₂

Vamos considerar, como exemplo para ilustrar essa combinação QM/MM, o espectro de absorção da clorofila-c₂, normalmente encontrada em algas. A molécula dessa clorofila é mostrada na Figura 1, com o seu átomo de Mg no centro coordenando com 4 átomos de N. Essa clorofila, embora mais simples que a mais abundante clorofila-a, mantém as características essenciais do espectro de clorofilas, a intensa banda de Soret na região do azul e as bandas Q, de baixa intensidade, na região do vermelho.

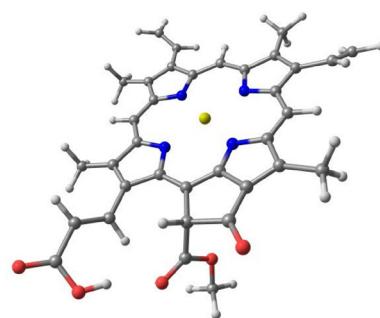


Figura 1. A molécula clorofila-c₂

Para comentar sobre resultados teóricos anteriores vamos focar inicialmente na banda de Soret. Como ela não

é solúvel em água, seu espectro foi medido em metanol e o resultado experimental⁹ é visto na Figura 2.

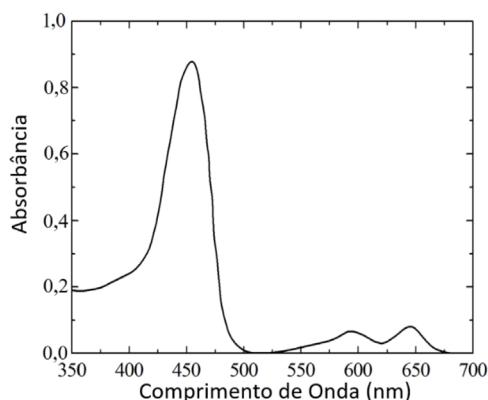


Figura 2. O espectro experimental da clorofila-c₂ medida em metanol e reproduzida a partir dos dados da referência.⁹ As bandas, do menor para o maior comprimento de onda são, respectivamente, as bandas de Soret, Qx e Qy

Aqui se nota a banda intensa, chamada de banda de Soret, em 451 nm e outras duas bandas de baixa intensidade conhecidas como bandas Qx e Qy, na região do vermelho (586 e 633 nm). Considerando a molécula isolada, um cálculo no nível TD-B3LYP/6-31G(d,p) obtém a banda de Soret em 414 nm, comparado ao experimental em metanol medida em 451 nm. Este resultado é típico e foi também obtido na referência.¹⁰ Portanto é de esperar que um cálculo realista nos dê o efeito do solvente como um deslocamento para maiores comprimentos de onda de cerca de 40 nm. O método mais utilizado para incluir efeitos de solvente, usando um modelo contínuo, é o método PCM (*polarizable continuum model*). Usando esse método no mesmo nível de cálculo, B3LYP/6-31G(d,p) obtém-se o valor de 433 nm, ou seja, metade do efeito de solvente necessário para se obter boa concordância. É evidente, nesse exemplo, que modelos simplificados não conseguem descrever bem a banda de Soret da clorofila-c₂, ou porfirinas, em geral.

Nesse estágio vamos agora mostrar os resultados obtidos usando-se o modelo QM/MM sequencial.¹¹ Após uma simulação de Monte Carlo Metropolis com 1500 moléculas de metanol foram geradas configurações das moléculas de metanol em torno da clorofila-c₂. Para os cálculos de MQ foram selecionadas 100 configurações estatisticamente descorrelacionadas composta de 1 molécula de clorofila-c₂ cercada por 12 moléculas de metanol. Isso é ilustrado na Figura 3. As moléculas adicionais são tratadas, apenas, como cargas pontuais centradas nos átomos, fornecendo assim o campo eletrostático que atua a longas distâncias da molécula central, nesse caso clorofila-c₂. Os detalhes de cálculo, tais como ensemble utilizado, parâmetros de campo de força, extensão da simulação, etc. podem ser encontrados na referência.¹¹

Usando uma combinação de Monte Carlo e cálculos de MQ no nível TD-B3LYP/6-31G(d,p) obteve-se o resultado teórico mostrado na Figura 4, onde pode ser

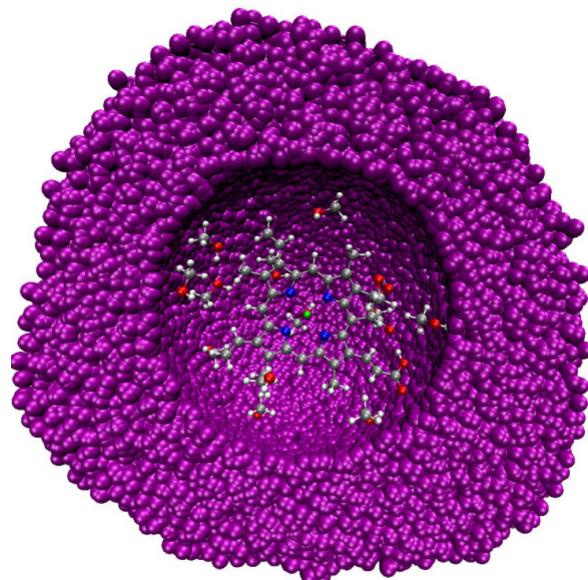


Figura 3. Ilustração de uma configuração da clorofila-c₂ com doze moléculas de metanol primeiros vizinhos e incluída num campo eletrostático das moléculas adicionais tratadas como cargas pontuais

visto que a concordância com o espectro experimental é marcante. A banda de Soret é obtida em 449 nm em excelente concordância. Note que a comparação mostra a similaridade dos dois espectros, experimental (Figura 2) e calculado (Figura 4). O resultado experimental mostra um ombro na região de 400 nm, também visto no espectro calculado. O resultado teórico mostra que a banda de Soret é complexa sendo composta de várias transições de diferentes intensidades e largura da banda é também bem reproduzida enfatizando uma boa descrição do alargamento inhomogêneo. É também de interesse mencionar que há várias transições de muita baixa intensidade (*dark states*). Essas transições não são vistas no espectro experimental, pois estão encobertas pela banda intensa de Soret. Mas são vistas no resultado

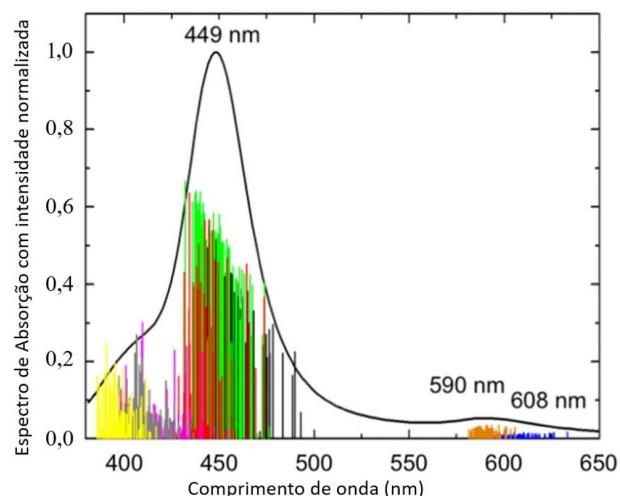


Figura 4. O espectro calculado para a clorofila-c₂, usando QM/MM sequencial com simulação de Monte Carlo gerando configurações estatisticamente descorrelacionadas para o cálculo TD-B3LYP/6-31G(d,p) das energias de transição

teórico e apresentam força do oscilador menor que 0,03. A existência desses estados escuros pode ser relevante em processos de transferência de energia.^{12,13} Esses estados escuros podem ser acessados experimentalmente a partir de excitações da banda Q.¹³

Antes de concluir vamos mencionar brevemente os resultados para as bandas Q. A primeira banda Q_y vista em 633 nm é calculada em 608 nm apresentando um erro de 25 nm, que corresponde nessa região do espectro a apenas 0,08 eV. A outra banda, Q_x, é observada em 586 nm e calculada em 590 nm, de novo, uma excelente concordância. Esses resultados são obtidos de uma modelagem molecular usando Monte Carlo e podem ser aprimoradas usando Dinâmica Molecular.¹⁴ Nesse caso, um aprimoramento importante é que o número de coordenação do Mg central é obtido corretamente, como cinco, enquanto no caso de Monte Carlo com a geometria da clorofila-c₂ fixa na simulação a coordenação é seis, tendo interação Mg-MeOH dos dois lados do plano da porfirina.

4. Conclusões

A disruptiva teoria quântica foi desenvolvida graças ao trabalho de cientistas de altíssimo calibre que revolucionaram a ciência como um todo e abriram as cortinas para o mundo microscópico com interpretações totalmente novas para o comportamento da matéria. Em meados do século passado a descoberta do transistor transformou a sociedade. Tal transformação prosseguiu modernizando o mundo com dispositivos e sensores que impactaram a vivência de um modo geral e modernizaram a medicina, para dar um exemplo marcante. Hoje estamos talvez no limiar de outra revolução envolvendo Inteligência Artificial e Tecnologias Quânticas.

Esta breve resenha se propôs a mostrar de forma coloquial alguns avanços recentes da mecânica quântica que permitem estudar sistemas moleculares interagindo com um meio. Para isso começamos louvando as grandes descobertas com heróis reconhecidos, mas também tentando lembrar alguns menos reconhecidos, hoje em dia, mas que construíram uma base experimental para as grandes teorias posteriores. Seu ápice com a equação de Schrödinger permitiu a criação de uma disciplina nova, também chamada de Química Quântica. Mas como essa equação não incorpora condições termodinâmicas ela é fundamental, mas incompleta, para estudar líquidos moleculares. E isso é importante em química pois a maioria dos experimentos são feitos em meio de solvente. Isso levou ao desenvolvimento de métodos híbridos combinando mecânica quântica e simulação computacional para incorporar a natureza estatística de um líquido. Nossa contribuição ao tema foi apresentada e ilustrada obtendo o espectro da clorofila-c₂ em metanol. É nossa modesta expectativa que essa resenha demonstre a sinergia importante entre duas disciplinas, mecânica quântica e física estatística, que permite avançar ao estudo realista de problemas de interesse em química.

Agradecimentos

Agradecemos ao apoio da USP e das agências CNPq, CAPES (código de financiamento 001) e FAPESP ao longo dos anos. Agradecemos também a todos os nossos colaboradores, em especial ao Prof. B. J. C. Cabral e Dr. P Jaramillo, coautores das contribuições mencionadas explicitamente aqui.

Referências Bibliográficas

1. Bloch, F.; Heisenberg and the early days of quantum mechanics. *Physics Today* **1976**, 29, 23. [\[Crossref\]](#)
2. (a) Dykstra, C. E.; Frenking, G.; Kim, K. S.; Scuseria, G. E.; (Editors); *Theory and Applications of Computational Chemistry: The first forty years*, Elsevier Science: Amsterdam, 2005. (b) Robert G. Parr, R. G.; *The Quantum Theory of Molecular Electronic Structure*, W. A. Benjamin Inc.: Massachusetts, 1963. (c) McWeeny, R.; Sutcliffe, T.; *Methods of Molecular Quantum Mechanics*, Acad. Press: London, 1969.
3. Coutinho, K.; Canuto, S.; Theoretical description of the absorption spectra of solid and liquid benzene. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* **1993**, 287, 99. [\[Crossref\]](#)
4. Warshel, A.; Levitt, M.; Theoretical studies of enzymic reactions: Dielectric, electrostatic and steric stabilization of the carbonium ion in the reaction of lysozyme. *Journal of Molecular Biology* **1976**, 103, 227. [\[Crossref\]](#)
5. Coutinho, K.; Canuto, S.; Solvent Effects from a Sequential Monte Carlo - Quantum Mechanical Approach. *Advances in Quantum Chemistry* **1997**, 28, 89. [\[Crossref\]](#)
6. Coutinho, K.; Tese de Livre-Docência, Universidade de São Paulo, 2012. [\[Link\]](#)
7. Canuto, S.; *Solvation Effects on Molecules and Biomolecules: Computational Methods and Applications*. Springer: Dordrecht, 2008.
8. Sabin, J. R.; Brändas, E.; Canuto, S.; *Advances in Quantum Chemistry: Combining Quantum Mechanics and Molecular Mechanics. Some Recent Progresses in QM/MM Methods*. Elsevier: Amsterdam, 2010.
9. Jeffrey, S. W.; Shibata, K.; Some spectral characteristics of chlorophyll c from *Tridacna crocea* zooxanthellae. *The Biological Bulletin* **1969**, 136, 54. [\[Link\]](#)
10. Vokáčová, Z.; Burda, J. V.; Computational Study on Spectral Properties of the Selected Pigments from Various Photosystems: Structure-Transition Energy Relationship. *The Journal of Physical Chemistry A* **2007**, 111, 5864. [\[Crossref\]](#)
11. Jaramillo, P.; Coutinho, K.; Cabral, B. J. C.; Canuto, S.; Explicit solvent effects on the visible absorption spectrum of a photosynthetic pigment: Chlorophyll-c₂ in metanol. *Chemical Physics Letters* **2011**, 516, 250. [\[Crossref\]](#)
12. Polívka, T.; Frank, H. A.; Molecular factors controlling photosynthetic light harvesting by carotenoids. *Accounts of Chemical Research* **2010**, 43, 1125. [\[Crossref\]](#)

13. Schalk, O.; Brands, H.; Balaban, T. S.; Unterreiner, A-N.; Near-Infrared Excitation of the Q Band in Free Base and Zinc Tetratolyl-porphyrins. *The Journal of Physical Chemistry A* **2008**, *112*, 1719. [\[Crossref\]](#)
14. Cabral, B. J. C.; Coutinho, K.; Canuto, S.; Born-Oppenheimer molecular dynamics and electronic properties of chlorophyll-c₂ in liquid methanol. *The Journal of Chemical Physics* **2013**, *138*, 225102. [\[Crossref\]](#)

Leitura Adicional

Naturalmente, existem incontáveis publicações ressaltando diferentes aspectos do desenvolvimento da Física Quântica. O texto aqui apresentado é uma breve resenha coloquial, mas alguns leitores podem se ressentir da inexistência de algumas referências complementares, ou mesmo da citação de alguns artigos originais. Não cabe aqui uma lista exaustiva de referências. Mas segue abaixo uma breve lista de possível interesse, iniciando com o artigo de Kirchhoff e os dois principais artigos originais que marcam o início da mecânica quântica:

1. Kirchhoff, G.; Über das Verhältnis zwischen dem Emissionsvermögen und dem Absorptionsvermögen der Körper für Wärme und Licht. *Gesammelte Abhandlungen*. Leipzig, J. A. Barth, 1882, p. 597 (§17). [\[Link\]](#)
2. Heisenberg, W.; Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik* **1925**, *33*, 879. [\[Link\]](#)

Esse artigo com tradução para o inglês está na página 261 da referência 7. Um bom texto explicativo escrito em inglês pode ser encontrado em: [\[Link\]](#)

Veja também: Aitchison, I. J. R.; MacManus, D. A.; Snyder, T. M.; Understanding Heisenberg's "magical" paper of July 1925: A new look at the calculational details. *American Journal of Physics* **2004**, *72*, 1370. [\[Crossref\]](#)

3. Schrödinger, E.; An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules. *The Physical Review* **1926**, *28*, 1049. [\[Link\]](#)

Veja também: Galler, A.; Canfield, J.; Freericks, J. K.; Schrödinger's original quantum-mechanical solution for Hydrogen. *European Journal of Physics* **2021**, *42*, 035405. [\[Crossref\]](#)

4. O trabalho de Niels Bohr está em: Born, N.; I. On the constitution of atoms and molecules. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **1913**, *26*, 1. [\[Crossref\]](#)
 5. O trabalho de Max Born pode ser visto em: Born, M.; Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Zeitschrift für Physik* **1926**, *37*, 863. [\[Link\]](#) É interessante sua apresentação, em inglês, ao ser laureado com o prêmio Nobel em 1954: [\[Link\]](#)
 6. Para quem pretende ir um pouco mais além, o trabalho de Dirac pode ser obtido em: Dirac, P. A. M.; The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London: Series A* **1928**, *117*, 610. [\[Link\]](#)
- Uma boa coleção de artigos originais de Dirac pode encontrada em: [\[Link\]](#)
7. Alguns artigos originais importantes são apresentados em inglês no livro: van der Waerden, B. L.; *Sources of Quantum Mechanics*, Dover Publications Inc.: New York, 1967. [\[Link\]](#)
 8. Um relato interessante e histórico feito por Planck e Bohr, está no recente livro: Planck, M.; Bohr, N.; *Quantum Theory, Fingerprint Publishing*, 2023.
 9. As *Nobel Lectures* de todos os laureados formam um material muito rico e podem ser acessadas em: [\[Link\]](#)
 10. É interessante o artigo recente de: Moreira, I.; Studart, N.; A introdução da física moderna e da teoria quântica no Brasil. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **2025**, *47*, suplemento 2, e20250297. [\[Crossref\]](#)

Como Complemento para os Métodos Híbridos QM/MM

11. Canuto, S.; *Solvation Effects on Molecules and Biomolecules: Computational Methods and Applications*. Springer, 2008.
12. Sabin, J. R.; Brändas, E.; Canuto, S.; *Advances in Quantum Chemistry: Combining Quantum Mechanics and Molecular Mechanics. Some Recent Progresses in QM/MM Methods*. Elsevier: Amsterdam, 2010.