


Equação de onda de Schrödinger independente do tempo

Vamos considerar $|\alpha\rangle = |a'\rangle$ um autoestado de um operador A que comuta com $H(t) = H$. Como já vimos, nestas condições, a equação de Schrödinger:


sem dependência
explícita no tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a', t_0; t\rangle = H |a', t_0; t\rangle$$

 para facilitar

tem solução simples e igual a: $|a', t_0 = 0; t\rangle = \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) |a'\rangle$. Substituindo esta solução na equação de Schrödinger na representação das coordenadas

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | a', t_0 = 0; t \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | a', t_0 = 0; t \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | a', t_0 = 0; t \rangle,$$

temos: $E_{a'} \langle \mathbf{x}' | a' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | a' \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | a' \rangle$, uma equação diferencial

que define autoestados simultâneos de A e H . Poderíamos ter feito isso sem o auxílio da observável A . Bastaria ter tomado $A = H$. Com isso, obteríamos a equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}') u_E(\mathbf{x}') = E u_E(\mathbf{x}'), \text{ com } u_E(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}' | E \rangle,$$

ou seja, $H|E\rangle = E|E\rangle$ na representação das coordenadas.

Equação de onda de Schrödinger independente do tempo

Para resolver a equação $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}')u_E(\mathbf{x}') = Eu_E(\mathbf{x}')$ é necessário estabelecer condições de contorno. Se $E < \lim_{|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty} V(\mathbf{x}')$, \forall direção de \mathbf{x}' , então $u_E(\mathbf{x}') \rightarrow 0$, quando $|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty$. Fisicamente, isto significa que a partícula está confinada (ligada) em uma região finita do espaço.

Importante

- 1) É conhecido da teoria de equações diferenciais que só existem soluções da equação acima para certos valores de $E \rightarrow$ nasce aqui a quantização dos níveis de energia.
- 2) O problema se reduz a resolver equações diferenciais com condição de contorno: problema similar ao existente em mecânica de molas e membranas.
- 3) Neste curso consideramos que o aluno tem experiência em resolver a equação acima, especificamente: a) tenha resolvido problemas unidimensionais, caixa e barreira \rightarrow discreto e contínuo, com reflexão e transmissão; b) familiar com soluções do oscilador harmônico simples; e c) átomo de hidrogênio; e d) familiar com o conceito de espectro discreto e contínuo.

Interpretações da função de onda

Já vimos que $|\alpha, t_0; t\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\rangle$ define uma densidade de probabilidade igual a $\rho(\mathbf{x}', t) = |\psi(\mathbf{x}', t)|^2 = |\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t\rangle|^2$.

Especificamente, se queremos encontrar a partícula dentro de um elemento de volume d^3x' ao redor de \mathbf{x}' , a probabilidade de um resultado positivo no instante t é $\rho(\mathbf{x}', t)d^3x'$.

Se a probabilidade muda em um determinado volume - cresce ou decresce - ela deve mudar de forma inversa fora dele - decresce ou cresce, pois a probabilidade de encontrar a partícula no espaço todo deve se manter igual à 1. Isto sugere que deva existir uma equação de continuidade similar à de diversos problemas de física clássica:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}', t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = 0.$$

↳ { daqui para frente,
é com respeito à \mathbf{x}'

Interpretações da função de onda

A da equação de continuidade $\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}', t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = 0$, quando integrada em um dado volume nos leva a:

$$\int_{\text{Volume}} d^3x' \frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}', t) + \int_{\text{Volume}} d^3x' \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = 0$$

que, por meio do teorema do divergente, permite escrever a expressão:

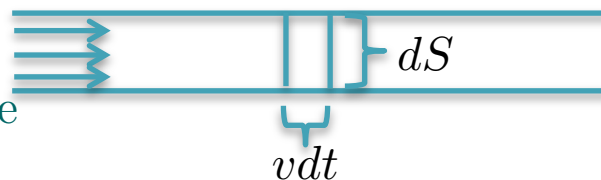
$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\text{Volume}} d^3x' \rho(\mathbf{x}', t) = - \int_{\text{Superfície}} \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) \cdot d\mathbf{S}$$

e que é interpretada como: a taxa de probabilidade (ou carga, ou fluído, etc.) que entra ou sai do volume, é igual a taxa que passa pela superfície que envolve este volume.

Note as unidades:
$$\begin{cases} \rho(\mathbf{x}', t) \rightarrow \frac{\text{probabilidade}}{\text{volume}} \\ \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) \rightarrow \frac{\text{probabilidade}}{\text{área} \times \text{tempo}} \end{cases}$$

Em mecânica de fluídos, vocês já viram:

Fluído com
velocidade v e
densidade ρ



$$j = \frac{\rho dS v dt}{dS dt} = \rho v$$

Interpretações da função de onda

Quanto vale a densidade de corrente de probabilidade $\mathbf{j}(\mathbf{x}', t)$ na mecânica quântica? Para isso, calcule primeiro

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}', t) = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*(\mathbf{x}', t)\psi(\mathbf{x}', t)) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{x}', t)\right)\psi(\mathbf{x}', t) + \psi^*(\mathbf{x}', t)\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}', t)\right)$$

$$\text{e depois } \left\{ \begin{array}{l} \text{use } i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}', t), \\ \text{lembrando que } V(\mathbf{x}')^* = V(\mathbf{x}') \\ \text{e compare com } \frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}', t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = 0, \end{array} \right.$$

para finalmente obter $\mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi] = \frac{\hbar}{m}\text{Im}(\psi^*\nabla\psi)$

O $\mathbf{j}(\mathbf{x}', t)$ deve estar relacionado com o momento \mathbf{p} . Para ver isso, calcule

$$\int d^3x' \mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = \frac{1}{2m} \int d^3x' [\psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi + (\frac{\hbar}{i} \nabla \psi)^* \psi] = \frac{1}{2m} [\langle \mathbf{p} \rangle + \langle \mathbf{p} \rangle] = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle}{m}$$

Interpretações da função de onda

No início, Schrödinger foi levado a interpretar $|\psi(\mathbf{x}', t)|^2$ como uma densidade real da matéria, ou ainda $e|\psi(\mathbf{x}', t)|^2$ como densidade da carga elétrica. A idéia era que a matéria (ou carga) ficava espalhada e quando se fazia uma medida, ela colapsava para um ponto. A interpretação estatística de $|\psi(\mathbf{x}', t)|^2$ como uma densidade de probabilidade foi dada por M. Born. Para melhor compreender o significado da função de onda, vamos escrevê-la da seguinte forma:

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right), \text{ onde } S(\mathbf{x}', t) \text{ é real e } \rho(\mathbf{x}', t) > 0 \quad \text{lousa}$$

Isso vale, pois qualquer número complexo pode ser escrito desta forma. Sabemos o significado de ρ . E o de $S(\mathbf{x}', t)$? Para ver isso, substitua a expressão acima em

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \text{ e obtenha}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left\{ \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(-\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right) \nabla \left[\sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right) \right] \right\},$$

este termo é $\left\{ \nabla \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \right\} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right) + \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right) \frac{i}{\hbar} \nabla S(\mathbf{x}', t)$

Com sua substituição, temos: $\mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = \rho(\mathbf{x}', t) \frac{\nabla S(\mathbf{x}', t)}{m}$

Interpretações da função de onda

$\frac{S(\mathbf{x}', t)}{\hbar}$ é uma fase em $\psi(\mathbf{x}', t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right)$. Fase que tem informação essencial para $\mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = \rho(\mathbf{x}', t) \frac{\nabla S(\mathbf{x}', t)}{m}$, pois, se constante com respeito à \mathbf{x}' , $\mathbf{j}(\mathbf{x}', t) = 0$. Comparação direta com o resultado para fluido clássico, induz a idéia de que $\frac{\nabla S(\mathbf{x}', t)}{m}$ é uma espécie de velocidade. É tentador escrever a equação da continuidade exatamente como a de fluido clássico, isto é:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}', t) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \text{ com } \mathbf{v} = \frac{\nabla S(\mathbf{x}', t)}{m}$$

Considere um exemplo simples: uma partícula livre. Neste caso a função de onda é dada por:

$$\psi(\mathbf{x}', t) \propto \exp\left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}'}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right),$$

onde \mathbf{p} é o autovalor do operador momento. Note que, neste caso,

$$S(\mathbf{x}', t) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}' - Et \quad \text{e} \quad \nabla S(\mathbf{x}', t) = \mathbf{p}.$$

○ limite clássico

Comece substituindo a expressão $\psi(\mathbf{x}', t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right)$ na equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t)$$

e obtenha a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right] &= \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 \sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar} \right) (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar} \right) \sqrt{\rho} \nabla^2 S \right] + \sqrt{\rho} V \end{aligned}$$

No limite clássico, \hbar é considerado muito pequeno. Observe que temos termos em \hbar^0 , \hbar^1 , e \hbar^2 . O limite clássico é obtido mantendo os termos em \hbar^0 e desprezando todos os termos que dependem de \hbar e \hbar^2 . Isso dá

$$\frac{1}{2m} |\nabla S(\mathbf{x}', t)|^2 + V(\mathbf{x}') + \frac{\partial S(\mathbf{x}', t)}{\partial t} = 0$$

Esta é a equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica, onde $S(\mathbf{x}', t)$ é a função principal de Hamilton. Veja “Classical Mechanics”, H. Goldstein, 2a edição, pág. 445.

○ limite clássico

No caso de um estado estacionário, H não depende do tempo e classicamente a função principal de Hamilton é separável e pode ser escrita por:

$S(\mathbf{x}', t) = W(\mathbf{x}') - Et$, onde $W(\mathbf{x}')$ é a função característica de Hamilton.

O momento na teoria de Hamilton-Jacobi é dado por: $\mathbf{P}_{\text{clássico}} = \nabla S = \nabla W$.

Como pode ser visto em “Classical Mechanics”, H. Goldstein, 2a ed., pág. 448.

Soluções elementares da equação de onda de Schrödinger

É instrutivo e útil olhar para algumas das soluções mais simples da equação de Schrödinger independente do tempo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}') u_E(\mathbf{x}') = E u_E(\mathbf{x}')$$

Passaremos rapidamente por :

- 3 casos: $\left\{ \begin{array}{l} 1) \text{ Partícula livre em 3 dimensões} \\ 2) \text{ Oscilador Harmônico simples} \\ 3) \text{ Potencial Linear} \end{array} \right.$

Partícula livre em 3 dimensões

Neste caso $V(\mathbf{x}) = 0$. Consideraremos soluções no espaço tridimensional e em coordenadas cartesianas. O problema em coordenadas esféricas será tratado no capítulo 3. A equação de Schrödinger independente do tempo, fica

tirei a linha
do x para facilitar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u_E(\mathbf{x}) = E u_E(\mathbf{x}) \quad \longrightarrow \quad \nabla^2 u_E(\mathbf{x}) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_E(\mathbf{x})$$

onde definimos $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$, tal que $\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} = \mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$

Usando a estratégia de separação de variáveis com $u_E(\mathbf{x}) = u_x(x)u_y(y)u_z(z)$,

$$\text{chegamos em } \left[\frac{1}{u_x} \frac{d^2 u_x}{dx^2} + k_x^2 \right] + \left[\frac{1}{u_y} \frac{d^2 u_y}{dy^2} + k_y^2 \right] + \left[\frac{1}{u_z} \frac{d^2 u_z}{dz^2} + k_z^2 \right] = 0$$

Como são coordenadas independentes, separamos em 3 equações com soluções do tipo $u_w(w) = c_w \exp(ik_w w)$, para $w = x, y, z$. A solução geral fica

$$u_E(\mathbf{x}) = c_x c_y c_z \exp(ik_x x + ik_y y + ik_z z) = C \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$$

sem perda de generalidade,
considere C real

a constante de normalização apresenta as dificuldades usuais resolvidas com as funções deltas de Dirac. Usaremos aqui a normalização da caixa grande, onde o espaço é considerando um grande cubo de aresta L .

Partícula livre em 3 dimensões

Impondo condições periódicas de contorno em $u_w(w) = c_w \exp(ik_w w)$

$$u_w(w + L) = c_w \exp(ik_w(w + L)) = u_w(w) = c_w \exp(ik_w w),$$

para $w = x, y$, e z , temos $k_x = \frac{2\pi}{L}n_x$, $k_y = \frac{2\pi}{L}n_y$, $k_z = \frac{2\pi}{L}n_z$,

com n_x, n_y , e n_z inteiros. A constante de normalização C pode ser obtida pela condição

$$1 = \int_{-L/2}^{+L/2} dx \int_{-L/2}^{+L/2} dy \int_{-L/2}^{+L/2} dz u_E^*(\mathbf{x}) u_E(\mathbf{x}) = L^3 C^2 \longrightarrow C = 1/L^{3/2}$$

que permite escrever $u_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ com

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

Degenerescência? Múltipla. A óbvia seria $\pm n_x, \pm n_y, \pm n_z$. É interessante calcular o número de estados N entre E e $E + dE$.

Melhor ainda, é calcular a chamada densidade de estados $\rho(E) = \frac{dN}{dE}$,

usada para somar um contínuo de estados, quando fizemos a troca

$$\sum_{a'} \rightarrow \int dN \rightarrow \int dE \rho(E) \quad (\text{ver slide 11 da aula } \gamma)$$

Partícula livre em 3 dimensões

Casca esférica com $\begin{cases} 1) \text{ raio } |\mathbf{k}| = \frac{2\pi|\mathbf{n}|}{L} \text{ e largura } d|\mathbf{k}| = \frac{2\pi d|\mathbf{n}|}{L} \\ 2) \text{ todos os estados nesta casca tem } E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \end{cases}$

Assim, $d|N| = 4\pi n^2 d|n|$ e $dE = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}| d|\mathbf{k}|}{m}$ nos leva à

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{d|N|}{dE} = \frac{4\pi n^2 d|n|}{\frac{\hbar^2 |\mathbf{k}| d|\mathbf{k}|}{m}} = \frac{4\pi m n^2}{\hbar^2 |\mathbf{k}|} \frac{d|n|}{d|\mathbf{k}|} = \frac{4\pi m}{\hbar^2 |\mathbf{k}|} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 |\mathbf{k}|^2 \frac{d|n|}{d|\mathbf{k}|} \\ &= \frac{4\pi m}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 |\mathbf{k}| \frac{d|n|}{d|\mathbf{k}|} = \frac{4\pi m}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{d|n|}{d|\mathbf{k}|} \\ &= \frac{4\pi m}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \frac{L}{2\pi} = \frac{m^{3/2} E^{1/2} L^3}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \end{aligned}$$

Em um cálculo real típico, a densidade de estados será multiplicada pela probabilidade, que envolve $u_E^*(\mathbf{x})u_E(\mathbf{x})$. Como, já vimos

$$u_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \text{ e a dependência com } L \text{ desaparece.}$$

Para a partícula livre, temos: $\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \frac{iEt}{\hbar})$

$$\text{e } \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{1}{L^3} \quad \text{com} \quad "v" = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \text{ e } \rho = \frac{1}{L^3}$$

Oscilador Harmônico Simples

Considere o problema de um oscilador harmônico simples em uma dimensão. A equação de onda a ser resolvida é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_E(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 u_E(x) = E u_E(x)$$

A estratégia para resolver o problema é usar o conceito de funções geradoras.

Para isso, reescreva a equação, usando $\begin{cases} 1) y \equiv \frac{x}{x_0}, \text{ com } x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ 2) \varepsilon \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \end{cases}$

e obtenha a nova equação $\frac{d^2}{dy^2} u(y) + (\varepsilon - y^2) u(y) = 0$

Para $y \rightarrow \pm\infty$ a solução $u(y)$ precisa tender a zero, caso contrário não será normalizável e perderá o sentido físico. É possível definir o comportamento assintótico, desprezando o termo em ε e mantendo o em y^2 . Isso feito, temos:

u se comporta como $w \rightarrow \frac{d^2}{dy^2} w(y) - y^2 w(y) = 0 \rightarrow w(y) \propto \exp(\pm y^2/2)$ e $u(y)$

pode ser redefinido por $u(y) = h(y) \underbrace{\exp(-y^2/2)}_{\text{a solução com sinal negativo é fisicamente aceitável.}}$ $\rightarrow \frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1)h = 0$

a solução com sinal negativo
é fisicamente aceitável.

Oscilador Harmônico Simples

Tradicionalmente, neste ponto escolhemos uma expansão polinomial para $h(y)$

que deve satisfazer a equação:
$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1)h = 0$$

Igualando coeficientes de monômios de mesma ordem, encontra-se uma fórmula de recorrência entre os coeficientes de monômios de diferentes ordens e ao notar que o polinômio de ordem infinita explodiria mais rapidamente que $w(y)$, exige-se que a série seja terminada. Isso define soluções com polinômios de ordem finita (polinômios de Hermite) e quantiza a energia.

O texto usa uma função geradora $g(x, t)$, definida por:

$$g(x, t) \equiv \exp(-t^2 + 2tx) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}$$

e mostra que os polinômios H_n satisfazem a desejada equação de Schrödinger.

um resumo:
$$\begin{cases} 1) \varepsilon - 1 = 2n \text{ com } n, \text{ inteiro não negativo} \\ 2) u_n(x) = c_n H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \\ 3) \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) H_m(x) \exp(-x^2) = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm} \end{cases}$$

As lacunas ficam para vocês preencherem.

slide 6

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}', t)} \exp\left(\frac{iS(\mathbf{x}', t)}{\hbar}\right), \text{ onde } S(\mathbf{x}', t) \text{ é real e } \rho(\mathbf{x}', t) > 0$$

Um número complexo c pode ser escrito por $c = a + ib$, onde a é sua parte real e b sua parte imaginária. Nessa expressão a e b são números reais. A norma ao quadrado de um número complexo é definida por $\rho = |c|^2 = c.c^* = a^2 + b^2$, uma vez que $c.c^* = (a + ib)(a - ib) = a^2 + i(ba - ab) + b^2 = a^2 + b^2$ (números comutam). Isso faz ρ um número real positivo, assim como $\sqrt{\rho}$. Dividindo e multiplicando c por $\sqrt{\rho}$, temos: $c = \sqrt{\rho}\left(\frac{a}{\sqrt{\rho}} + i\frac{b}{\sqrt{\rho}}\right)$, onde $\left(\frac{a}{\sqrt{\rho}}\right)^2 + \left(\frac{b}{\sqrt{\rho}}\right)^2 = 1$. Essa propriedade permite escrever $\frac{a}{\sqrt{\rho}} = \cos \varphi$ e $\frac{b}{\sqrt{\rho}} = \sin \varphi$ e $c = \sqrt{\rho}(\cos \varphi + i \sin \varphi) = \sqrt{\rho}e^{i\varphi}$,
No caso, tomamos $\varphi = \frac{S}{\hbar}$. As quantidades ρ e S dependem de \mathbf{x}' e t para a expressão valer para todos os valores de $\psi(\mathbf{x}', t)$.