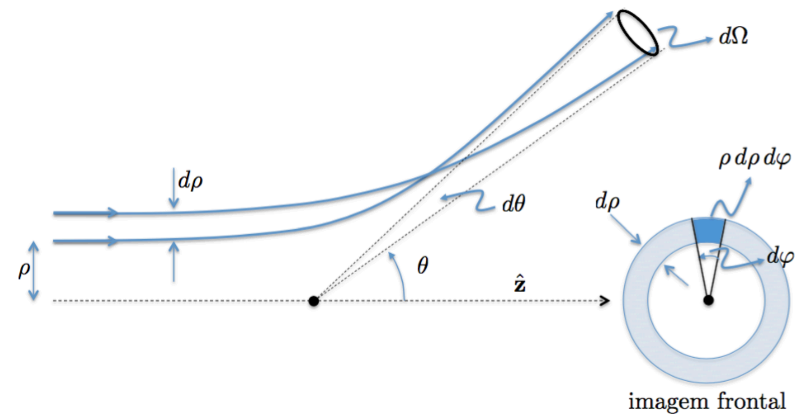
VI) Espalhamento

Como vimos no capítulo de potenciais esfericamente simétricos, os problemas de estados ligados seguem uma estratégia de solução análoga aos problemas em 1-D. Também no caso do potencial coulombiano (longo alcance) esta analogia continua presente na equação radial. Os únicos problemas que ainda não abordamos em 3-D são aqueles que envolvem estados no contínuo, ou seja, os problemas de colisões ou espalhamento. A fim de formular o problema de espalhamento vamos, inicialmente, relembrar (ou definir) alguns conceitos clássicos que serão úteis mais tarde.

- Seção de choque: diferencial e total



Imaginemos que um feixe clássico de partículas que incidem dentro de uma certa área $\rho d\rho d\varphi$ seja espalhado dentro de um ângulo sólido $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = |d(\cos\theta)|\, d\varphi$. O número de partículas incidentes por unidade de área por unidade de tempo é dado por $\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{s}}$ onde $\mathbf{J}$ é a densidade de corrente e $\hat{\mathbf{s}}$ o unitário da área considerada. Assim o número de partículas a serem espalhadas dentro de $d\Omega$ por unidade de tempo é

$$dn = J\,\rho\, d\varphi\, d\rho.$$

Conhecendo $\rho = \rho(\theta)$ temos ainda

$$\begin{aligned} dn &= J\rho\, d\varphi \left|\frac{d\rho}{d(\cos\theta)}\right| |d(\cos\theta)| \\ &= J\rho \left|\frac{d\rho}{d(\cos\theta)}\right| d\Omega \\ &= \frac{J\rho}{\sin\theta}\left|\frac{d\rho}{d\theta}\right| d\Omega. \end{aligned}$$

Então o número de partículas espalhadas em $d\Omega$ por unidade de tempo é proporcional ao fluxo incidente J com constante de proporcionalidade

$$d\Omega \frac{\rho}{\sin\theta}\left|\frac{d\rho}{d\theta}\right|,$$

ou ainda

$$\frac{dn}{J} = \frac{\rho}{\sin\theta}\left|\frac{d\rho}{d\theta}\right| d\Omega \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega.$$

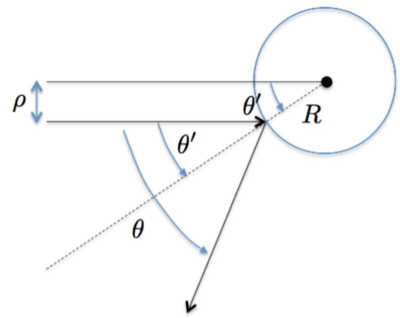
A combinação $\frac{\rho}{\sin\theta}\left|\frac{d\rho}{d\theta}\right|$ é ainda denotada $\sigma(\theta)$ que é a chamada *seção de choque diferencial.*

Esta grandeza tem dimensões de área e é tal que

$$\int_\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \sigma,$$

que é a *seção de choque total.*

Um exemplo trivial é do espalhamento clássico por uma esfera rígida de raio R:



$$\begin{aligned}
\rho &= R\sin\theta' \\
&= R\sin\frac{\theta}{2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\rho}{\sin\theta}\left|\frac{d\rho}{d\theta}\right| \\
&= \frac{R^2}{2}\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\sin\theta}\cos\frac{\theta}{2} \\
&= \frac{R^2}{4} \\
\Rightarrow \sigma &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\frac{R^2}{4} \\
&= \pi R^2
\end{aligned}$$

Vemos, então, que a seção de choque total é a área máxima do centro espalhador vista pelo feixe incidente.

Estes conceitos podem ser levados diretamente para a mecânica quântica através das suas definições gerais.

Por exemplo, $d\sigma/d\Omega$ é o número de partículas espalhadas em $d\Omega$ por unidade de tempo dividido pela intensidade do feixe incidente. Consequentemente, $d\sigma/d\Omega$ pode ser calculado se conhecermos $\psi(\mathbf{r},t)$, ou seja, as densidades de corrente, $\mathbf{J}_{inc}$ e $\mathbf{J}_{esp}$, a este estado associadas. Adiante veremos como este conceito nos será útil em mecânica quântica.

VI.1) Espalhamento de um pacote de onda

Suponha que queremos resolver o problema de uma partícula descrita pela hamiltoniana

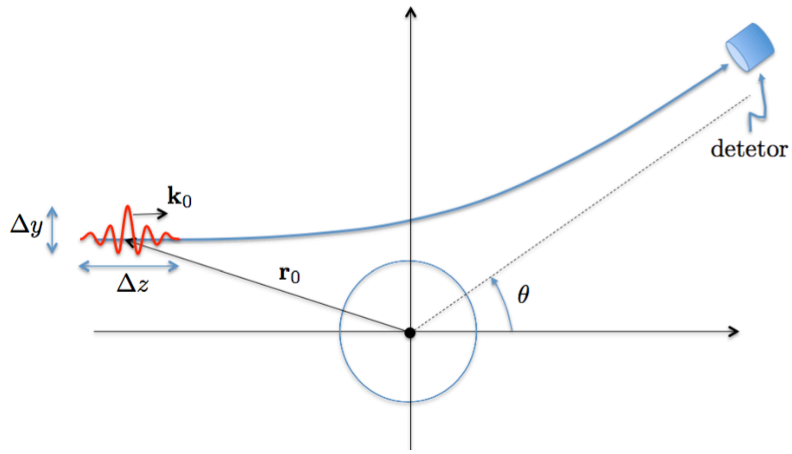
$$H = \frac{p^2}{2m} + V = H_0 + V \quad \text{(VI.1.1)}$$

onde $V \neq 0$ apenas dentro de uma esfera de raio a. Convém notar que H pode estar descrevendo uma colisão de 2 corpos vista no C.M. do sistema. Neste caso m seria a massa reduzida do sistema.

Em $t = 0$ a partícula é representada por um pacote

$$\psi(\mathbf{r},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \varphi(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} d^3k, \quad \text{(VI.1.2)}$$

onde $|\mathbf{r}_0| \gg a$ e $\varphi(\mathbf{k})$ está centrada em $\mathbf{k}_0$ com largura $\Delta\mathbf{k}$. Então, $\psi(\mathbf{r},0)$ está centrada em $\mathbf{r}_0$ com largura $\Delta\mathbf{r} = \Delta x\Delta y\Delta z$.



Queremos saber a forma de $\psi(\mathbf{r},t)$. Se expandirmos $\psi(\mathbf{r},0)$ em autoestados de H, $\psi_n(\mathbf{r})$, teremos

$$\psi(\mathbf{r},0)=\sum c_n\psi_n(\mathbf{r}), \quad \text{(VI.1.3)}$$

e consequentemente:

$$\psi(\mathbf{r},t)=\sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(\mathbf{r}). \quad \text{(VI.1.4)}$$

Mas, a nossa expansão inicial foi feita em ondas planas (Eq. (VI.1.2)) e não em $\psi_n(\mathbf{r})$ e, portanto, (VI.1.4) não seria diretamente aplicável pois as ondas planas não são autoestados de H . Entretanto, o problema pode ser resolvido da seguinte forma:

i) Vamos assumir (1ª hipótese) que os auto estados de H possam ser escritos como

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\sim\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}})\frac{e^{ikr}}{r}\right)\quad(r\to\infty)$$

$$\Rightarrow H\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})=E_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}). \quad \text{(VI.1.5)}$$

ii) Vamos ainda assumir (2ª hipótese) que $\psi(\mathbf{r},0)$ possa ser expandido como

$$\psi(\mathbf{r},0)=\int d^3k\,\varphi(\mathbf{k})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}), \quad \text{(VI.1.6)}$$

com os mesmos coeficientes $\varphi(\mathbf{k})$ de (V.1.2), o que implica em

$$\int d^3k\,\varphi(\mathbf{k})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}})\frac{e^{ikr}}{r}\sim 0. \quad \text{(VI.1.7)}$$

Desta forma devemos desenvolver a integral

$$\psi(\mathbf{r},t)=\int d^3k\varphi(\mathbf{k})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}), \quad \text{(VI.1.8)}$$

a fim de acompanhar a evolução temporal do pacote de onda, o que será feito em seguida. Entretanto, cabe-nos enfatizar que ainda devemos demonstrar as hipóteses 1 e 2 que fizemos acima, o que faremos posteriormente.

Na integral (VI.1.8) temos

$$\begin{aligned}
\hbar\omega_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2k^2}{2m}\\
\Rightarrow\omega_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar}{2m}\left[(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)+\mathbf{k}_0\right]^2\\
&= \frac{\hbar}{2m}\left[(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2+2\mathbf{k}_0\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)+k_0^2\right]\\
&= \frac{\hbar}{2m}\left[(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2+2\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{k}-k_0^2\right]\\
&= \frac{\hbar(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2}{2m}-\omega_0+\mathbf{v}_0\cdot\mathbf{k}, \quad \text{(VI.1.9)}
\end{aligned}$$

onde $\omega_0 \equiv \hbar k_0^2/2m$ e $\mathbf{v}_0 = \hbar\mathbf{k_0}/m$.

No instante da detecção, t_d, teremos a fase de ψ dada por

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_0+\mathbf{v}_0 t_d)} e^{i\omega_0 t_d} e^{i\frac{(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2}{2m}t_d}.$$

Mas, se os detetores estiverem a uma distância da ordem de r_0 do centro espalhador, t_d deve ser da ordem de $2mr_0/\hbar k_0$ e

$$e^{i\hbar(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2 t_d/2m} \approx e^{i(\Delta\mathbf{k})^2 r_0/k_0} \approx 1,$$

onde usamos que o pacote não irá se alargar apreciavelmente neste intervalo e, consequentemente, $(\Delta k)^2\, r_0/k_0 \ll 1$.

Assim podemos escrever $\psi(\mathbf{r},t)$ como

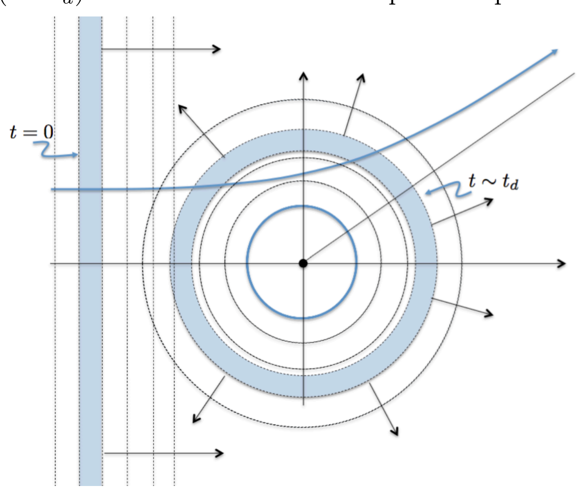
$$\psi(\mathbf{r},t) = \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_0+\mathbf{v}_0 t)} e^{i\omega_0 t} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \right) d^3k. \quad \text{(VI.1.10)}$$

Assumindo que f seja uma função suave de $\mathbf{k}$ e $\varphi(\mathbf{k}) \neq 0$ se $\hat{\mathbf{k}} \cong \hat{\mathbf{k}}_0$ $\left(\Rightarrow kr = \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}}r \cong \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}}_0 r\right)$ podemos reescrever $\psi(\mathbf{r},t)$ em (VI.1.10) como

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{v}_0 t, 0)\, e^{i\omega_0 t} + \frac{f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})}{r} \psi\left(r\hat{\mathbf{k}}_0 - \mathbf{v}_0 t, 0\right) e^{i\omega_0 t}, \quad \text{(VI.1.11)}$$

que representa o pacote inicial transladado de $\mathbf{v}_0 t$ somado a uma onda esférica cuja amplitude depende da distância ao centro espalhador e da direção de espalhamento. A função $f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})$ é a chamada *amplitude de espalhamento*.

Note que (VI.1.11) só faz sentido para tempos muito longos $\sim t_d$. O seu 1º termo tem a forma do pacote inicial e, portanto, está centrado em $\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t = \mathbf{r}_0$ ou $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t$. Isto significa que o pacote está se movendo com velocidade constante $\mathbf{v}_0$. O 2º termo de (VI.1.11) contém o mesmo pacote que deve estar centrado em $r\hat{\mathbf{k}}_0 - v_0 t\mathbf{k}_0 = \mathbf{r}_0$, ou seja, $r = \mathbf{r}_0 \cdot \hat{\mathbf{k}}_0 + v_0 t = \alpha r_0 + v_0 t$ onde $\alpha \equiv \hat{\mathbf{k}}_0 \cdot \hat{\mathbf{r}}_0 < 0$. Portanto, o pacote no 2º termo está centrado a uma distância $v_0 t - |\alpha|\, r_0$ da origem $(t \sim t_d)$ além de estar ainda multiplicando pela amplitude de espalhamento $f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})$.



Portanto, se há N partículas distinguíveis no feixe, cada uma representada por um pacote, podemos dizer que a razão do número de partículas detetadas em $d\Omega$ pelo número de particulas incidentes por unidade de area pode ser calculada como

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega &= \frac{\sum_{i=1}^{N} v_0 \frac{|f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})|^2}{r^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \psi_i\left((r - v_0 t)\, \hat{\mathbf{k}}_0, 0 \right) \right|^2 r^2\, d\Omega\, dt}{\sum_{i=1}^{N} v_0 \int_{-\infty}^{\infty} \left| \psi_i\left((r - v_0 t)\, \hat{\mathbf{k}}_0, 0 \right) \right|^2 dt} \\ \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})|^2 . \quad \text{(VI.1.12)} \end{aligned}$$

Apesar de o numerador estar centrado em $t \approx t_d$ e o denominador em $t \approx 0$, estendemos as integrais de $-\infty$ a $+\infty$ porque, nos dois casos, a forma funcional de ψ é a mesma e, além do mais, de largura finita. A hipótese de mesma forma de ψ implica que estamos longe de ressonâncias do potencial, o que será abordado na seção seguinte.

Vamos agora justificar as hipóteses (i) e (ii) que fizemos anteriormente.

i) Justificativa para a forma $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$.
Queremos resolver

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi,$$

ou

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = U\psi,$$

onde

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

e

$$U = \frac{2mV}{\hbar^2}.$$

Assim,

$$\begin{aligned}\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi &= U(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r}) \\ &= \int U(\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\psi(\mathbf{r}')\,d^3r'. \quad \text{(VI.1.13)}\end{aligned}$$

Portanto se soubermos a solução de $\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ podemos encontrar a de $\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi = U\psi$ por superposição das respostas a cada excitação deltiforme.
Então podemos escrever

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{1}{4\pi}\int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,U(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\,d^3r', \quad \text{(VI.1.14)}$$

onde

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Seja

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \int g(\mathbf{k}')\,e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d^3k'.$$

Atuando com ∇^2 nesta expressão temos

$$\nabla^2 G = \int g(\mathbf{k}')\left(-k'^2\right)e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d^3k'.$$

Usando ainda que

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d^3k'$$

podemos escrever que $\left(\nabla^2 + k^2\right)G = -4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ é equivalente a

$$\int\left(k^2 - k'^2\right)g(\mathbf{k}')\,e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d^3k' = \int\frac{-4\pi}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d^3k'$$

ou ainda

$$g(\mathbf{k}') = \frac{1}{2\pi^2}\frac{1}{k'^2 - k^2}$$

e

$$G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi^2}\int\frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k'^2 - k^2}d^3k'. \quad \text{(VI.1.15)}$$

Integrando a parte angular de (VI.1.15) chega-se a

$$G\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)=-\frac{i}{\pi\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}\frac{d}{d\left(\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|\right)}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ik'\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}}{k'^2-k^2}dk',$$

cuja integral ainda presente pode ser resolvida por resíduos. Como os polos são $k'=\pm k$ sobre o eixo real e $\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|>0$ devemos fechar o contorno pelo plano imaginário superior e algumas soluções distintas podem resultar da diferente escolha do contorno de integração. Por exemplo:

a)

$$\Rightarrow G_I=\frac{\cos k\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}$$

que representa uma onda estacionária.

b)

$$\Rightarrow G^{(+)}=\frac{e^{ik\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}$$

que é a chamada solução retardada (outgoing wave).

c)

$$\Rightarrow G^{(-)}=\frac{e^{-ik\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}$$

que é a chamada solução avançada (incoming wave)

Assim, para $G=G^{(\pm)}$ temos

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\left(\mathbf{r}\right)=\frac{1}{\left(2\pi\right)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{\pm ik\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|}U\left(\mathbf{r}'\right)\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\left(\mathbf{r}'\right)d^3r'. \quad \text{(VI.1.16)}$$

Mas

$$k\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|\cong kr-k\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'+\frac{k\left(\hat{\mathbf{r}}\times\mathbf{r}'\right)}{2r}+\ldots$$

e, portanto, assumindo que $r\gg r'$ (lembre-se que $U\approx 0$ se $r'>a$) podemos desprezar o 3º termo da soma e

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\left(\mathbf{r}\right)\approx\frac{1}{\left(2\pi\right)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}\int e^{\mp i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}U\left(\mathbf{r}'\right)\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\left(\mathbf{r}'\right)d^3r', \quad \text{(VI.1.17)}$$

onde definimos $\mathbf{k}'\equiv k\hat{\mathbf{r}}$. Portanto,

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\left(\mathbf{r}\right)\approx\frac{1}{\left(2\pi\right)^{3/2}}\left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+\frac{e^{\pm ikr}}{r}f_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\left(\hat{r}\right)\right),$$

onde

$$f_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi}\int e^{\mp i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}')\,d^3r' \quad \text{(VI.1.18)}$$

é a amplitude de espalhamento.

ii) Justificativa para o mesmo $\varphi(\mathbf{k})$.
Como vimos em (VI.1.7) esta hipótese é equivalente a

$$\int \varphi(\mathbf{k})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}d^3k\int\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')\,d^3r' \approx 0,$$

onde usamos a fórmula geral (VI.1.17) para $\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r})$. Como para $r' > a$, $U \approx 0$, devemos nos preocupar apenas com $r' \lesssim a$. Desta forma devemos mostrar que

$$\int \varphi(\mathbf{k})\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0+ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')\,d^3k \approx 0.$$

Usando que $k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx \hat{\mathbf{k}}_0\cdot\mathbf{k}\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ e que $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}') \approx \psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}')$ temos

$$\psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}')\int\varphi(\mathbf{k})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\left(\hat{\mathbf{k}}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-\mathbf{r}_0\right)}d^3k = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r}')\,\psi\left(\hat{\mathbf{k}}_0\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\,,0\right),$$

que é nulo devido ao fato de $\hat{\mathbf{k}}_0\,|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ ser um ponto bem atrás do centro espalhador onde ψ é, por construção, nulo em $t=0$.
Desta forma, conseguimos justificar as duas hipóteses anteriores.

A aproximação de Born

A aplicação da função de Green ao problema de espalhamento permitiu que escrevêssemos a amplitude de espalhamento como

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}') = -\frac{\sqrt{2\pi}}{\hbar^2}m\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}')\,d^3r',$$

onde $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$ e $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ obedece a (VI.1.16).

Esta equação pode ser resolvida iterativamente. Em ordem mais baixa temos

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) &\approx \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')\,\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}d^3r' \\
\Rightarrow f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}') &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}d^3r, \quad \text{(V1.19)}
\end{aligned}$$

que é a chamada aproximação de Born.

A fim de estimar a validade desta aproximação devemos usar a expressão exata da equação integral (VI.1.16). Ao fazermos $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ estamos desprezando temos da ordem de

$$-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ikr'}}{r'}U(r')\,\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}d^3r',$$

onde fizemos $\mathbf{r} = 0$ pois $\psi^{(+)}$ aparece multiplicada por $U(\mathbf{r}) \neq 0$ se $|\mathbf{r}| \lesssim a$. Efetuando as integrais algulares devemos ter

$$\frac{2m}{k\hbar^2}\left|\int_0^\infty e^{ikr'}\sin(kr')\,V(r')\,dr'\right| \ll 1$$

$\Rightarrow$ altas energias do feixe ou potenciais fracos.

Exemplo:

Potencial de Yukawa: Seja $V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-\alpha r}/\alpha r$ ($a = \frac{1}{\alpha}$ é o alcance do potencial).

Na aproximação de Born temos

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\, d^3r'.$$

Efetuando-se as integrais angulares tem-se

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}') &= -\frac{2mV_0}{\alpha\hbar^2}\int_0^\infty dr' e^{-\alpha r'} \frac{\sin|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|\, r'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} \\ &= -\frac{2mV_0}{\alpha\hbar^2}\frac{1}{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2 + \alpha^2}. \end{aligned}$$

Como em um espalhamento elástico $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ teremos

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}') = -\frac{2mV_0}{\alpha\hbar^2}\frac{1}{4k^2\sin^2\frac{\theta}{2} + \alpha^2},$$

onde θ é o ângulo entre $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$. No caso particular do potencial Coulombiano $V_0 \to 0$ e $\alpha \to 0$ de forma que $V_0\alpha^{-1} = q_1 q_2$ (produto das cargas de duas partículas).

Então,

$$\begin{aligned} \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\text{Coulomb}} &= \frac{m^2 q_1^2 q_2^2}{4p^4\sin^4\frac{\theta}{2}} \\ &= \frac{q_1^2 q_2^2}{16E^2\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}, \end{aligned}$$

que é o resultado clássico de Rutherford que, por sua vez, também coincide com o resultado exato obtido através do espalhamento por um potencial Coulombiano.