EBENE WELLEN UND KUGELWELLEN

In der Vorlesung wurden im Rahmen der Zerlegung in Partialwellen eine neue Basis für Eigenzustände des freien Hamilton-Operators $H_0 = \mathbf{p}^2/2m$ eingeführt. Statt der ebenen Wellen wurden sphärisch symmetrische Kugelwellen verwendet, die für die Behandlung sphärisch symmetrischer Streuzentren, d.h. rotationsinvarianter Potentiale V, besser geeinget sind. Die ebenen Wellen $|\mathbf{k}\rangle$ sind die Eigenzustände des freien Hamilton-Operators H_0, die gleichzeitig auch Eigenzustände des Impulsoperators mit Eigenwert $\hbar\mathbf{k}$ sind. Dies ist möglich, da offensichtlich $[H_0, \mathbf{p}] = \mathbf{0}$. Nun kommutiert der freie Hamilton-Operator allerdings auch mit $\mathbf{L}^2$ und L_z. Man kann also auch simultane Eigenzustände zu $H_0, \mathbf{L}^2$ und L_z konstruieren. Ignoriert man mögliche Spin-Quantenzahlen, so wird so ein Zustand im allgemeinen mit $|E, \ell, m\rangle$ bezeichnet und Kugelwellen-Zustand (*spherical wave state*) genannt.

Basiswechsel. Genau wie bei der Drehimpulskopplung geht es zunächst um das Umrechnen der Basis der ebenen Wellen in die Basis der Kugelwellen. Beide Sätze von Eingenzuständen spannen den gleichen Hilbertraum auf. Wir verwenden für die Kugelwellen die Normierungsbedingung

$$\langle E', \ell', m'|E, \ell, m\rangle = \delta_{\ell'\ell}\delta_{m'm}\delta(E' - E)$$

mit der daraus folgenden Vollständigkeitsrelation. Aus unseren Betrachtungen zum Drehimpuls folgt, dass diese Eigenzustände, die ja auch Eigenzustände zur Drehimpulsalgebra sind, im Ortsraum die folgende Form haben müssen:

$$\langle \mathbf{x}|E, \ell, m\rangle = f_\ell(E, r) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{x}})\,.$$

Entsprechend folgt für die Darstellung im Impulsraum

$$\langle \mathbf{k}|E, \ell, m\rangle = g_{\ell E}(k) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}})\,.$$

Diese Funktionen sind die gesuchten Koeffizienten zur Umrechnung der Basis der ebenen Wellen in die Basis der Kugelwellen (und umgekehrt), ganz analog zu den Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

Wir wollen uns zunächst klar machen, dass in der Tat die Impulsraum-Darstellung diese Form haben muss. Dazu beginnt man mit einem Impuls-Eigenzustand in z-Richtung, $|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$. Dieser Zustand hat die besondere Eigenschaft, dass er keine Drehimpulskomponente in z-Richtung besitzt,

$$L_z|k\hat{\mathbf{z}}\rangle = (xp_y - yp_x)|k\hat{\mathbf{z}}\rangle = 0\,.$$

Dies ist auch intuitiv klar, wie man bei klassischer Betrachtung sieht, denn der Drehimpuls muss in Fortbewegungsrichtung verschwinden, da $\mathbf{L}\cdot\mathbf{p} = (\mathbf{x}\times\mathbf{p})\cdot\mathbf{p} = \mathbf{0}$. Da weiterhin $\langle E', \ell', m'|k\hat{\mathbf{z}}\rangle = 0$ für $m' \neq 0$ sein muss (sonst entstünde ein Widerspruch, wenn wir $\langle E', \ell', m'|L_z|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ betrachteten), hat $|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ eine Entwicklung der folgenden Form:

$$|k\hat{\mathbf{z}}\rangle = \sum_{\ell'} \int \mathrm{d}E' |E', \ell', m'{=}0\rangle\langle E', \ell', m'{=}0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle\,,$$

wobei also nicht über m' summiert wird. Um nun die Entwicklung eines beliebigen Impuls-Eigenzustandes $|\mathbf{k}\rangle$ zu erhalten, müssen wir dieses Resultat einfach nur durch Drehung von $|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ auf $|\mathbf{k}\rangle$ umformen, nämlich einfach $|\mathbf{k}\rangle = \rho(\alpha{=}\phi, \beta{=}\theta, \gamma{=}0)|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ mit α, β, γ den drei Euler-Winkeln. Multipliziert man das noch mit $\langle E, \ell, m|$ von links, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
\langle E, \ell, m|\mathbf{k}\rangle &= \sum_{\ell'} \int \mathrm{d}E' \langle E, \ell, m|\rho(\alpha{=}\phi, \beta{=}\theta, \gamma{=}0)|E', \ell', m'{=}0\rangle\langle E', \ell', m'{=}0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle \\
&= \sum_{\ell'} \int \mathrm{d}E' \rho^{(\ell')}_{m,0}(\alpha{=}\phi, \beta{=}\theta, \gamma{=}0)\delta_{\ell\ell'}\delta(E - E')\langle E', \ell', m'{=}0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle \\
&= \rho^{(\ell')}_{m,0}(\alpha{=}\phi, \beta{=}\theta, \gamma{=}0)\langle E, \ell, m{=}0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle
\end{aligned}$$

Der entscheidende Punkt ist, dass $\langle E, \ell, m{=}0|k\hat{\mathbf{z}}\rangle$ nicht von der Orientierung von $\mathbf{k}$ abhängt, also nicht von θ, ϕ. Wir nennen dieses Skalarprodukt daher einfach $g^*_{\ell E}(k)$, um diese Tatsache explizit kenntlich zu machen. Drehen wir obige Formel nun einfach um, so erhalten wir

$$\langle \mathbf{k}|E, \ell, m\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} g_{\ell E}(k) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}})\,,$$

wobei wir von der Darstellung der Drehmatrizen durch Kugelflächenfunktionen Gebrauch gemacht haben (siehe Handout II). Nun wollen wir die Funktionen $g_{\ell E}(k)$ noch explizit ausrechnen. Offensichtlich muss per constructionem $(H_0 - E)|E, \ell, m\rangle = 0$ gelten. Wenn wir aber nun $(H_0 - E)$ nach links auf $\langle \mathbf{k}|$ wirken lassen, so erhalten wir natürlich $\langle \mathbf{k}|(E - H_0) = (\hbar^2 k^2/2m - E)\langle \mathbf{k}|$. Also muss

$$\langle \mathbf{k}|(E - H_0)|E, \ell, m\rangle = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \langle \mathbf{k}|E, \ell, m\rangle = 0$$

sein. Dies impliziert, dass die Energie $E = \hbar^2 k^2/2m$ sein muss, wie zu erwarten war. Also ist

$$g_{\ell E}(k) = N_k \delta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$$

mit N_k einer noch unbekannten Normierungskonstanten. Diese läßt sich aber aus der Normierungsbedingung bestimmen, die wir für die Kugelwellen-Zustände $|E, \ell, m\rangle$ gefordert haben. Wir finden

$$\begin{aligned}
\langle E', \ell', m'|E, \ell, m\rangle &= \int \mathrm{d}^3 k'' \langle E', \ell', m'|\mathbf{k}''\rangle\langle \mathbf{k}''|E, \ell, m\rangle \\
&= \int \mathrm{d}k'' k''^2 \int \mathrm{d}\Omega_{k''} |N_{k''}|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) Y_{\ell'}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}'') Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}}'') \\
&= \int k''^2 \frac{\mathrm{d}k''}{\mathrm{d}E''} \mathrm{d}E'' \int \mathrm{d}\Omega_{k''} |N_{k''}|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) Y_{\ell'}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}'') Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}}'') \\
&= |N_{k'}|^2 \frac{mk'}{\hbar^2} \delta(E' - E)\delta_{\ell'\ell}\delta_{m'm}\,,
\end{aligned}$$

wobei wir $E'' = \hbar^2 k''^2/2m$ gesetzt haben, um die k''-Integration in eine E''-Intergration umzuformen. Vergleichen mit der Normierungsbedingung ergibt sofort $N_k = \hbar/\sqrt{mk}$ bis auf eine Phase, die wir so natürlich nicht festlegen können, die aber auch nicht relevant ist. Damit sind die Koeffizienten $g_{\ell E}(k) = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$ bestimmt, und wir erhalten das gesuchte Ergebnis

$$\langle \mathbf{k}|E, \ell, m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}})\,.$$

Mit dieser Formel können wir nun eine gegebene freie ebene Welle als eine Überlagerung (Linerakombination) freier Kugelwellen asudrücken, wobei sämtliche Drehimpulse ℓ vorkommen,

$$\begin{aligned}
|\mathbf{k}\rangle &= \sum_{\ell,m} \int \mathrm{d}E |E, \ell, m\rangle\langle E, \ell, m|\mathbf{k}\rangle \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |E, \ell, m\rangle\Big|_{E=\hbar^2 k^2/2m} \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} Y_\ell^{m^*}(\hat{\mathbf{k}})\,.
\end{aligned}$$

Man kann semi-klassisch verstehen, dass eine ebene Welle alle Drehimpulse ℓ enthält: Eine ebene Welle ist räumlich unendlich ausgedehnt, so dass jeder Streuparameter b möglich ist. Dieser ist jedoch semi-klassisch über die Relation $b \simeq \hbar\ell/p$ mit dem Drehimpuls verknüpft.

Kugelwellen im Ortsraum. Wir wollen nun noch die Zustände für Kugelwellen im Ortsraum darstellen. Man lernt meist in der Elektrodynamik, wenn man Wellengleichungen kennenlernt, dass die Wellenfunktion eines freien Teilchens durch $j_\ell(kr)Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})$ gegeben ist, wobei die $j_\ell(kr)$ die sogenannten sphärischen Bessel-Funktionen der Ordnung ℓ sind. Die Wellengleichung ist natürlich eine Differentialgleichung zweiter Ordnung, und die zweite Lösung sind die sogenannten sphärischen von-Neumann-Funktionen $n_\ell(kr)$. Diese sind allerdings im Ursprung singulär und können daher bei der Beschreibung freier Kugelwellen, die im Ursprung ihren Augangspunkt haben, nicht auftreten. Wir können damit ansetzen:

$$\langle \mathbf{r}|E, \ell, m\rangle = c_\ell j_\ell(kr) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})\,.$$

Den noch unbekannten Koeffizienten c_ℓ erhalten wir sehr einfach durch Vergleich mit der Impulsraum-Darstellung, nämlich

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_{\ell,m} \int \mathrm{d}E \langle \mathbf{r}|E, \ell, m\rangle\langle E, \ell, m|\mathbf{k}\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{\ell,m} \int \mathrm{d}E c_\ell j_\ell(kr) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}}) \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_\ell^{m^*}(\hat{\mathbf{k}}) \\
&= \sum_\ell \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}}) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} c_\ell j_\ell(kr)\,,
\end{aligned}
$$

wobei wir beim letzten Schritt vom Additionstheorem für die Kugelflächenfunktionen,

$$
\sum_m Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_\ell^{m^*}(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}})\,,
$$

Gebrauch gemacht haben. Das Argument der Legendre-Polynome ist natürlich nichts anderes als $\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}} = \cos\theta$ mit θ dem Winkel, den **k** und **r** miteinander einschließen. Nun können wir die Ortsraumdarstellung der ebenen Welle bekanntermaßen auch wie folgt schreiben,

$$
\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\ell (2\ell+1)\mathrm{i}^\ell j_\ell P_\ell(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}})\,,
$$

indem wir folgende Integralformel für die Besselfunktionen ausnutzen:

$$
j_\ell(kr) = \frac{1}{2\mathrm{i}^\ell} \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}(\cos\theta) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} P_\ell(\cos\theta)\,.
$$

Vergleichen wir die Koeffizienten der beiden Formeln für die Ortsraumdarstellung der ebenen Wellen, so lesen wir einfach ab:

$$
c_\ell = \frac{\mathrm{i}^\ell}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}}\,.
$$

Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen. Die Zustände der Kugelwellen, bzw. sphärisch symmetrischen Wellen, sind simultane Eigenzustände des freien Hamilton-Operators H_0 sowie von $\mathbf{L}^2$ und L_z. Ihre Darstellung im Impuls- und Ortraum sind gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}|E,\ell,m\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}}) \\
\langle \mathbf{r}|E,\ell,m\rangle &= \frac{\mathrm{i}^\ell}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_\ell(kr) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})\,.
\end{aligned}
$$

Man beachte, dass das Argument der Bessel-Funktionen immer die dimensionslose Größe kr ist.

Radiale Schrödinger-Gleichung

Aus Quantenmechanik I wissen wir, dass bei Vorliegen sphärischer Symmetrie (Rotationsinvarianz), z.B. wenn das Potential nur vom Abstand abhängt, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, die Schrödinger-Gleichung in einen radialen Anteil und einen Drehimpuls-Anteil für die Winkelkoordinaten faktorisiert. Genauer heißt das, dass die Schrödinger-Gleichung $H\Psi_E(r,\theta,\phi) = E\Psi_E(r,\theta,\phi)$ in sphärischen Koordinaten die Form

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\partial_r\left(r^2\partial_r\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_\theta\left(\sin\theta\partial_\theta\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\phi^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)\right]\Psi_E = E\Psi_E
$$

annimmt. Vorausgesetzt wird ferner, dass das Potential am Ursprung nicht zu singulär ist, d.h., es soll asymptotisch $\lim_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$ gelten. Der entscheidende Punkt ist, dass man die Lösung durch Separation der Variablen faktorisieren kann, d.h. $\Psi_E(\mathbf{r}) = R(r) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{r}})$. Der zweite Faktor ist durch die schon bekannten Kugelflächenfunktionen gegeben, die Lösungen des Drehimpulsanteils der Schrödinger-Gleichung,

$$
-\left[\frac{1}{r^2\sin\theta}\partial_\theta\left(\sin\theta\partial_\theta\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right] Y_\ell^m = \ell(\ell+1) Y_\ell^m
$$

sind (siehe auch Handout II). Der erste Faktor muss eine Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung sein, die ein ein-dimensionales Problem ist. Man führt die sich als nützlich erweisende Notation $u_E(r) = rR(r)$ ein, mit der die radiale Schrödinger-Gleichung die Form

$$
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right] u_E = E u_E
$$

annimmt. Die Lösung muss der Randbedingung $u_E(r=0) = 0$ genügen.

Freies Teilchen und Bessel-Funktionen. Im Falle eines freien Teilchens, d.h. $V(r) \equiv 0$, wird die radial Schrödinger-Gleichung durch die sogenannten sphärischen Bessel- und von-Neumann-Funktionen gelöst, $R(r) = c^{(1)} j_\ell(\rho) + c^{(2)} n_\ell(\rho)$, wobei $c^{(2)} = 0$ ist, wenn die Lösung auch am Ursprung gültig sein soll. Die Variable ρ ist dimensionslos und gegeben durch $\rho = kr$ mit $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Die Bessel-Funktionen stellen einen von vielen Sätzen wichtiger spezieller Funktionen dar, die in der theoretischen Physik und der Mathematik eine Rolle spielen.

Die ursprüngliche Bessel-Gleichung ist eine Differential-Gleichung zweiter Ordnung mit einem einzigen freien Paramter ν, nämlich die Gleichung

$$\left[z\partial_z(z\partial_z) + (z^2 - \nu^2)\right] J_\nu(z) = 0\,.$$

Die Lösung wird durch die Bessel-Funktionen gegeben, die wie folgt definiert sind:

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &= \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{(\frac{1}{2}z)^{2m+\nu}}{m!\Gamma(m+\nu+1)} \\ &= \frac{(\frac{1}{2}z)^\nu \mathrm{e}^{-\mathrm{i}z}}{\Gamma(\nu+1)}\, {}_1F_1(\nu + \tfrac{1}{2}; 2\nu+1; 2\mathrm{i}z)\,. \end{aligned}$$

Hierbei ist $\Gamma(x)$ die Gamma-Funktion und ${}_1F_1(a;c;x)$ die konfluente hypergeometrische Funktion. Man erhält dieses Ergebnis durch einen Potenzreihenansatz zur Lösung der Bessel-Gleichung. Nun kann man die radiale Schrödinger-Gleichung im freien Fall auf die Bessel-Gleichung zurückführen. Ihre Lösungen lassen sich demnach durch die $J_\nu(\rho)$ ausdrücken, und zwar wie folgt:

$$\begin{aligned} j_\ell(\rho) &= \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{+\ell+1/2}(\rho)\,, & n_\ell(\rho) &= (-1)^{\ell+1}\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-\ell-1/2}(\rho)\,, \\ j_0(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho}\,, & n_0(\rho) &= -\frac{\cos\rho}{\rho}\,, \\ j_1(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}\,, & n_1(\rho) &= -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}\,, \\ j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho\,, & n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^2} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\rho\,. \end{aligned}$$

Das asymptotische Verhalten für $\rho \to 0$ ist in führender Ordnung gegeben als

$$j_\ell(\rho) \overset{\rho\to 0}{\longrightarrow} \frac{\rho^\ell}{(2\ell+1)!!}\,, \qquad n_\ell(\rho) \overset{\rho\to 0}{\longrightarrow} -\frac{(2\ell+1)!!}{\rho^{\ell+1}}\,,$$

wobei $(2\ell+1)!! = (2\ell+1)(2\ell-1)\cdots 5\cdot 3\cdot 1$ das Produkt über die ungeraden Zahlen ist. Für große Argumente $\rho \to \infty$ erhalten wir die Asymptotik

$$j_\ell(\rho) \overset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right), \qquad n_\ell(\rho) \overset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right).$$

Sphärische Hankel-Funktionen. Die Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung muss am Ursprung regulär sein. Daher treten in $R(r)$ die von-Neumann-Funktionen $n_\ell(\rho)$ nicht auf. Bei der Partialwellen-Analyse ist daher notwendigerweise die Funktion $A_\ell(r) = R(r) = c_\ell j_\ell(\rho)$ im Innern des Wirkungsbereiches des Potentials, d.h. für $r < R$ mit R dem Wirkungsbereich des Potentials. Für das sphärische Kastenpotential der Tiefe $-V_0$ ist $\rho = \alpha r$ mit $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - |E|)}/\hbar$ für $r < R$. Für die Lösung, die außerhalb von R gültig ist, ist Regularität am Ursprung aber keine Bedingung, und die von-Neumann-Funktionen können auftreten. Es erweist sich dann als praktischer, für $r > R$ die Linearkombinationen

$$h_\ell^{(1)}(\rho) = j_\ell(\rho) + \mathrm{i}n_\ell(\rho) \quad \text{und} \quad h_\ell^{(2)}(\rho) = j_\ell(\rho) - \mathrm{i}n_\ell(\rho) = h_\ell^{(1)*}$$

zu verwenden, die sphärische Hankel-Funktionen genannt werden. Dies ist deshalb vorteilhaft, weil das asymptotische Verhalten für große Abstände besser das Ablesen der Streuphasen erlaubt, da

$$h_\ell^{(1)}(\rho) \overset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\rho-(\ell+1)\pi/2]}\,, \qquad h_\ell^{(1)*}(\rho) \overset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\rho-(\ell+1)\pi/2]}$$

gilt. Wir bemerken abschließend, dass man für gebundene Zustände die Bessel-Funktionen ebenfalls verwenden kann, jedoch mit rein imaginären Argumenten. Genauer findet man für die radiale Partialamplitude im gebundenen Fall $A_\ell(r) = const\, h_\ell^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r) = const\,[j_\ell(\mathrm{i}\kappa r) + \mathrm{i}n_\ell(\mathrm{i}\kappa r)]$. Zum Beispiel ist $h_0^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r) = -\frac{1}{\kappa r}\mathrm{e}^{-\kappa r}$, $h_1^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r) = \mathrm{i}\left(\frac{1}{\kappa r} + \frac{1}{\kappa^2 r^2}\right)\mathrm{e}^{-\kappa r}$, $h_2^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r) = \left(\frac{1}{\kappa r} + \frac{3}{\kappa^2 r^2} + \frac{3}{\kappa^3 r^3}\right)\mathrm{e}^{-\kappa r}$ usw. Betrachtet man ein sphärisches Kastenpotential, so ist natürlich $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ außerhalb ($r > R$) des Potentials.