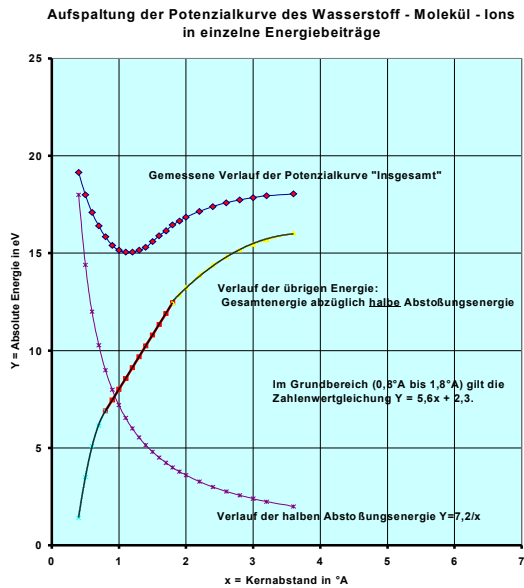
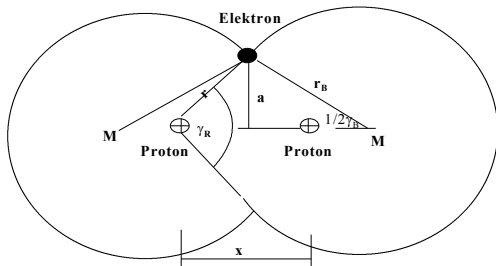


Das Wasserstoffmolekül – Ion (H_2^+) aus elementarphysikalischer Sicht



| Rechenschema | Ladungsenergie an der Stelle x | Ladungsenergie an der Stelle $x=x_0$ |
|-----------------------------------|--|--|
| Funktion | $E(x)$ | $E(x_0)$ |
| Kern-Kern | $+E_{H1} \cdot r_{H1} / x \cdot N$ | $+E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot N$ |
| Kern-Elektron | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / r^2 \cdot x \cdot N \cdot 1$ | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / (r^2 \cdot x_0^2) \cdot x_0 \cdot N \cdot 1$ |
| Energie ist von x abhängig | | |
| Elektron-Elektron | Null | Null |
| Summe | | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2) \cdot N$ |
| 1. Ableitung | $E'(x)$ | $E'(x_0)$ |
| Kern-Kern | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x^2 \cdot N$ | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0^2 \cdot N$ |
| Kern-Elektron | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / r^2 \cdot N \cdot 1$ | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / (r^2 \cdot x_0^2) \cdot N \cdot 1$ |
| Elektron-Elektron | Null | Null |
| Summe | | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2) \cdot N$ |

Prinzipbild zum Wasserstoff - Molekül - Ion



Die insgesamt von der Bahnwirkung des Elektrons beaufschlagte Orbitaloberfläche beträgt $A = 4\pi r_B^2 \cdot (360 - \gamma_B) / 360 \cdot 2$ (zum Vergleich: im Atom war $A = 4\pi r_B^2 \cdot 1$).

Entsprechend diesem Prinzipbild fällt die Lage der Protonen nicht mit den Orbital-Mittelpunkten zusammen. Dies ist zulässig, weil nicht das Elektron auf Bahnradius r_B umläuft, sondern die vom Elektron gegebene Bahnwirkung, die sich dadurch in Gestalt der Elektronhülle manifestiert.

In der Nulllage ($x = x_0$) gilt:

$$\begin{aligned} r &= x_0 \\ r_B &= [3/2]^{1/2} \cdot r \\ E_B &= z \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}^2 / r_B^2 \cdot [360 / (360 - \gamma_B)] \cdot 1/2 = E_0 \\ z / r_B^2 &= 3/2 \cdot 1 / \varphi^{3/2} \cdot 1 / r_{H1}^2 \\ \gamma_B &= 90^\circ \\ \gamma_r &= 120^\circ \end{aligned}$$

Angaben zum Autor

Dipl. Ing. Martin Bock

Düppenweilerstraße 62

66763 Dillingen Diefflen

Email: martin-bock@t-online.de

Homepage: <http://home.t-online.de/home/martin-bock/index.htm>

Widmung

Unser Mitgefühl gilt dem amerikanischen Volk, das am heutigen Tag von einem terroristischen Anschlag getroffen wurde. Diese hasserfüllte Tat ist nicht zu rechtfertigen. Die Verantwortlichen stehen außerhalb jeder Ordnung!

Mehr denn je widmen wir diese Arbeit dem, der uns, die mit „Staub“ bekleideten, zum Guten anhält. Dem, der die Inspiration „von oben“ auf geheimnisvolle Weise, wie ER will, eingibt. Dem, der die Schöpfung aus Nichts hervorgebracht hat. Dem Allerhöchsten, der nicht überwunden werden kann. Dem Dreieinigen GOTT.

Diefflen, 11.09.2001

Vorwort

Mit dieser Arbeit wird versucht, die Unterschiede herauszustellen, die zwischen der Existenzweise der Elementarteilchen in einem Atom und in einem Molekül bestehen. Seit über 70 Jahren dient nur die Schrödinger'sche Wellengleichung den Physikern als Fackel der Wahrheit, um Licht in den ansonsten finsternen Elementarbereich zu bringen.

Zwar gelang es mit der Wellengleichung die im Elementarbereich herrschenden Phänomene mathematisch korrekt zu beschreiben, jedoch wird zu der Existenzweise der Elementarteilchen keine Aussage getroffen. Dies liegt an der mathematischen Natur der Wellengleichung, der nicht schon deswegen physikalische Realität zukommt, nur weil es mathematisch korrekte Lösungen gibt. Dies ist aufgrund der „rechenwertorientierten“ Lösungen leicht einzusehen.

Wir wollen aber hier diesen aus mathematischer Sicht bestens bewährten Formalismus nicht wiederholen, sondern unseren eigenen Weg einschlagen. Ein Weg, der uns schon bei den Betrachtungen über die Ursachen der Schwerkraft und über die Natur der Atomhülle die elementaren Zusammenhänge in anschaulicher und der Realität entsprechenden Weise näher gebracht hat. Auch bei unseren hier angestellten Betrachtungen zum Molekül erwarten wir aufgrund physikalisch begründeter Ansätze gezwungenermaßen phänomenorientierte Lösungen. Wir erhoffen, dadurch einen unmittelbaren Einblick in die Seins – Gestaltung eines Moleküls zu erhalten.

Verlagsrechte

Das vorliegende Werk ist gemäß UrhG urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf fotomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung für gewerbliche Zwecke ist nur im Einvernehmen mit dem Autor gestattet. Zitate sind nur bei genauer Quellenangabe gestattet.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|----|
| Angaben zum Autor | 2 |
| Widmung | 2 |
| Vorwort | 3 |
| Verlagsrechte | 3 |
| Inhaltsverzeichnis | 4 |
| 1. Beschreibung der Untersuchungsmethode | 5 |
| 2. Datenbasis ist die Potenzialkurve | 6 |
| 3. Ursache der hälftigen Ladungskraft | 6 |
| 4. Aufspaltung der Potenzialkurve in einzelne Energiebeiträge | 7 |
| 5. Erster Baustein ist die Ladungsenergie | 7 |
| a) Allgemeine Normierung der Ladungsenergie | 7 |
| b) Normierte Abstoßungsenergie | 9 |
| c) Normierte Anziehungsenergie | 9 |
| 6. Zweiter Baustein ist das Rechenschema zum H_2^+ - Molekül | 10 |
| a) 1. Ansatz: Ladungsenergie zwischen Kern und Elektron ist von x - abhängig | 10 |
| b) 2. Ansatz: Ladungsenergie zwischen Kern und Elektron nicht von x -abhängig | 12 |
| 7. Dritter Baustein ist die Geometrie des Molekül - Orbitales | 14 |
| 8. Vierter Baustein ist die Bahnenergie | 15 |
| a) Allgemein | 15 |
| b) Normierte Bahnenergie | 16 |
| 9. Bestimmung des Orbitalradius | 16 |
| a) Allgemein | 16 |
| b) Modell 1: Energieabsorption führt zur Veränderung des Überlappungswinkels | 17 |
| c) Bestimmung der Grenzen des Grundbereiches | 18 |
| d) Modell 2: Energieabsorption führt zur Veränderung des Orbitalradius | 19 |
| e) Modell 1/2: Ursache der Bahnwirkung | 19 |
| 10. Zusammenfassung der Ergebnisse für den Bereich des Grundzustandes | 20 |
| 11. Schlusswort | 20 |

1. Beschreibung der Untersuchungsmethode

Diese Betrachtung umfasst die Beschreibung einiger wesentlicher Aspekte der Natur des Moleküls aus elementarphysikalischer Sicht. Dazu werden wir die aus unseren Betrachtungen zum Wasserstoff- und Heliumatom gewonnenen Erkenntnisse über die dort herrschenden Phänomene auf das Molekül übertragen. Dies sind die Einschließungskraft des Elektrons bei der Wirkungserzeugung (oft als Fliehkraft durch „Bahnumlauf“ missverstanden), die elektrische Ladungskraft zwischen Elektron und Kern, die als Anziehungskraft wirkt, sowie die elektrische Ladungskraft zwischen den beiden Kernen, die als Abstoßungskraft wirkt.

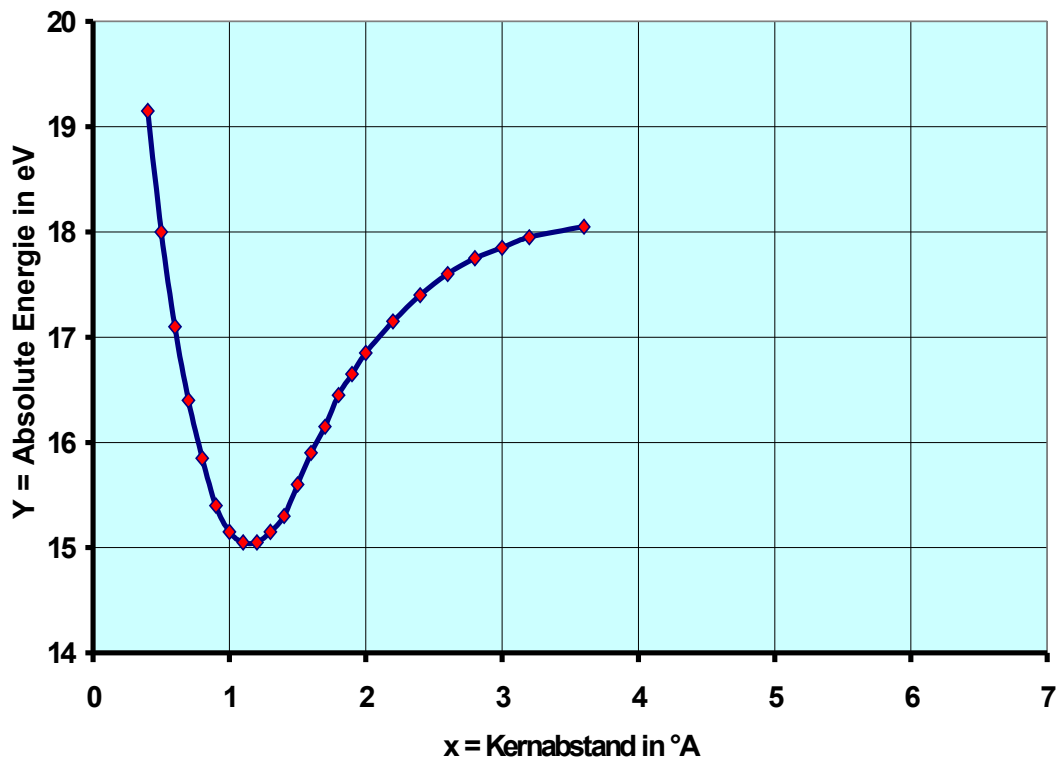
Wir gehen also einerseits davon aus, dass im Molekül keine neuen Phänomene auftreten, andererseits müssen dennoch fundamentale Unterschiede in der Existenzweise der Elementarteilchen im Vergleich zu einem Atom bestehen. Diese Unterschiede können **nur** mit der Anwesenheit eines zweiten, eigenständigen Kerns innerhalb des vom Elektron – Orbital umschlossenen Raums erklärt werden, eben weil dieser Umstand die einzige Veränderung ist.

Die hier angewandte Untersuchungsmethode kommt zwar ohne komplizierte Mathematik aus, erfordert dafür aber physikalisch begründete Ansätze. Hierzu gehen wir von den für das Atom gefundenen Formeln aus, die anschaulich die Entstehung der einzelnen Phänomene beschreiben. Wir verwenden also unsere bisherigen Formeln für die vg. Ladungskräfte und Bahnenergien. Im 1.Schritt schreiben wir diese so um, dass sie einen direkten Bezug zu den Größen des Wasserstoffatoms (Energie und Bahnradius) aufweisen. Diesen 1.Schritt bezeichnen wir als **Normierung**. Wir erhalten dadurch Rechenausdrücke, die sehr einfach zu handhaben sind, **ohne** dass die Genauigkeit in irgendeinem Grade darunter leidet. Wir bezeichnen diese Ausdrücke als die **Normalform** des betreffenden Phänomens. Im 2.Schritt versuchen wir dann, mit diesen Normalformen, die Zusammenhänge, also das Zusammenwirken der Elementarteilchen in einem Molekül, zu beschreiben. Dabei bietet uns die normierte Kurzschreibweise auch Gewähr für eine **effektive** Bearbeitung, da unnötiger Formelballast von vorneherein vermieden wird. Im 3.Schritt wollen wir dann versuchen, mit den so gewonnenen Bausteinen das H_2^+ - Ion nachzubauen!

2. Datenbasis ist die Potenzialkurve

Natürlich muss sich auch unsere Ausarbeitung auf Messwerte stützen. Wir verwenden den aus Messwerten sich ergebenden Verlauf der Potenzialkurve des H_2^+ -Ions. Diese sogenannte Potenzialkurve ist eine Darstellung der absoluten Energie in Elektronenvolt (Y –Wert in eV) über dem Abstand der beiden Kerne (x –Wert in $^{\circ}A$ bzw. $10^{-8}m$).

Bild 1
Potenzialkurve des Wasserstoff - Molekül - Ions



Bildquelle: Taschenbuch für Chemiker und Physiker, 3.Band, Springer-Verlag 1970, Seite 3-228.

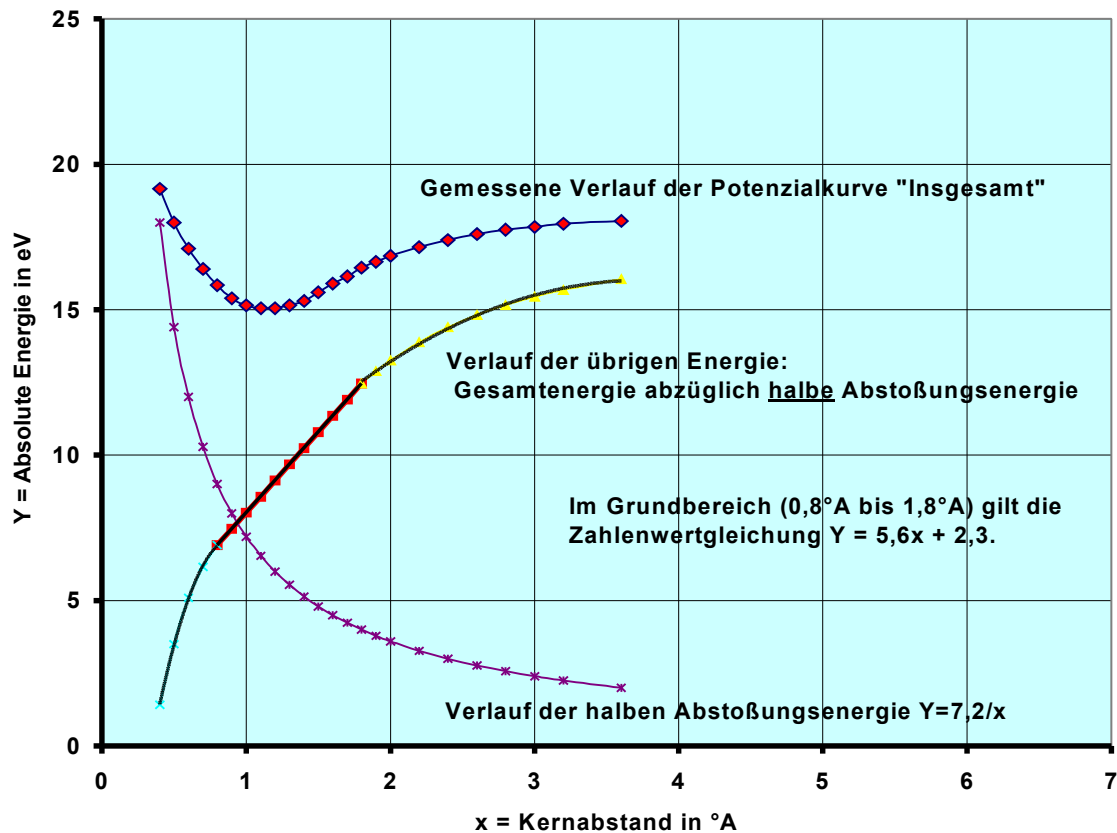
Der in Bild 1 dargestellte Verlauf ist die Summe aller im H_2^+ -Ion gegebenen Energien. Diese Gesamtenergie beinhaltet somit auch die zwischen den Kernen herrschende Abstoßungsenergie. Da diese letzte Energie bzw. Kraft aber eindeutig vom Kernabstand abhängig ist, können wir die in Bild 2 dargestellte Gesamtenergie um die Abstoßungsenergie reduzieren, eben weil letztere eindeutig ist. Allerdings erlauben wir uns, nur die Hälfte der üblichen Größe einzusetzen, was bedeutet, dass im Molekül nur die Hälfte der im Atom wirksamen Ladungskraft auftritt!

3. Ursache der hälftigen Ladungskraft

Ursache des Auftretens hälftiger Ladungskraft ist, dass das gesamte Feld (Raum) innerhalb des H_2^+ -Moleküls als „Elementarfeld“ existent ist. In diesem Elementarfeld wird pro jeder neuen Elementardauer (τ) immer nur eine **halbe** Erschließungswirkung des Elektrons wirksam (zu Beginn einer neuen Elementardauer, also bei $T=0$, ist $H=0$ und am Ende dieser Elementardauer, also bei $T=\tau$, ist $H=h_s$, so dass im Mittel $\frac{1}{2}h_s$, das ist die elektrische Wirkung des Elektrons, wirksam wurde). Folglich ergibt sich -im Gegensatz zum radialen Außenfeld- für das elementare Innenfeld nur **hälftige** elektrische Ladungsenergie, die in jeder λ -dicken Kugelschale dieses Feldes existent ist. Es kommt $H=1h_s$ nicht zur Existenz, sondern es wird $H=\frac{1}{2}h_s$ in Gestalt der Ladungskraft bzw. -energie manifestiert! Mit diesem Ansatz ergeben sich dann die im folgenden Bild 2 angegebenen Zusammenhänge.

4. Aufspaltung der Potenzialkurve in einzelne Energiebeiträge

Bild 2



Im vorliegenden Bild 2 erscheint der Verlauf der Potenzialkurve etwas flacher als in Bild 1, was aber nur durch die hier andere Skalierung bewirkt wird. Demnach weisen die nach Abzug der halben Abstoßungsenergie ($7,2/x$) vorliegenden übrigen Energien in der Nähe des Energieminimums, also im Nahbereich der Nulllage, –sowohl links als auch rechts– eine lineare Abhängigkeit vom Kernabstand (x) auf, die sich anschließenden Übergangszonen jedoch eine quadratische Abhängigkeit. Allein durch die Unterstellung nur hälftig wirksamer Abstoßungskräfte erreichen wir die Aufspaltung der Potenzialkurve des Wasserstoff - Molekül – Ions bzw. die in Bild 2 dargestellten einzelnen Verläufe.

Da wir aber aus unseren Untersuchungen zum Atom wissen, dass die auch hier auftretenden beiden Phänomene Ladungskraft und Bahnenergie mit Sicherheit nirgendwo eine Abhängigkeit von der Exponential(e)–Funktion aufweisen, kann auch beim Zusammenwirken der die vgl. Verläufe verursachenden Phänomene eine solche Abhängigkeit nicht gegeben sein. Somit hebt sich unser Ergebnis bereits an dieser Stelle grundlegend von den über die Wellengleichung erzielten Ergebnissen ab! Vielmehr deutet das Auftreten linearer Abhängigkeit auf einfache Strukturen hin. Dies wiederum ermutigt geradezu unseren begonnenen Weg weiter zu beschreiten. Wir müssen daher unsere Untersuchungen mit der Beschreibung des Grundzustandes des Ions beginnen. Dies ist sinnvoll, denn erst wenn dieser „einfachste“ Bereich des Moleküls soweit geklärt ist, lohnt sich ein Blick in die angrenzenden Übergangsbereiche des energetisch stärker angeregten Zustandes.

5. Erster Baustein ist die Ladungsenergie

a) Allgemeine Normierung der Ladungsenergie

Im Artikel „Über die Natur der Atomhülle“ haben wir für das radiale Feld die elektrische Ladungskraft (Coulombkraft) kennengelernt, die zwischen je einer Elementarladung auftritt. Diese Kraft ergibt sich gemäß der Formel:

$$\underline{K_e = 2 \cdot [h_s / \lambda \tau] \cdot 1 / (\varphi \cdot (\lambda / x)^2)}$$

Hierbei bedeuten:

2 der Wechselwirkungsfaktor

h_s die elektrische Wirkung des Elektron, wobei $h_s = \frac{1}{2} \alpha h \cdot \varphi \cdot 1 / 2\pi$

α die sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante

h das Plank'sche Wirkungsquantum

φ der Feldsummenfaktor ($\varphi = \frac{1}{2} \pi^2 - 4$)

λ die Elementarlänge (zugleich Radius der Massekugel des Elektrons)

τ die Elementardauer $\tau = \lambda / c$, wobei c die Invarianzgeschwindigkeit ist

x der Abstand der Teilchen

Der Ausdruck in den eckigen Klammern ist die Elementarkraft des Elektrons und gibt die Dimension der Kraft. Es ist diese Formel adäquat zu der in der Literatur für die Coulombkraft gängigen Schreibweise $K_e = e^2 / 4\pi\epsilon_0 \cdot 1 / x^2$, wobei wir jedoch für diesen letzten Ausdruck die genauere Schreibweise $K_e = [2 \cdot (\frac{1}{2} e)^2 / \epsilon_0 \cdot 1 / (\frac{1}{2} \cdot 4\pi x^2)]$ bevorzugen. Wir wollen nun die vg. Ausgangsformel für die elektrische Ladungskraft umformen, d. h. auf die Größen des Wasserstoffatoms normieren. Hierzu setzen wir anstelle h_s die gleichwertige Formel mit Bezug auf das Plank'sche Wirkungsquantum (h) ein und erweitern zusätzlich die Formel mit dem Ausdruck α^2 / α^2 . Es ergibt sich dann über $K_e = 2 \cdot [(\frac{1}{2} \alpha h \cdot \varphi \cdot 1 / 2\pi) / \lambda \tau] \cdot 1 / \varphi \cdot \lambda^2 / x^2 \cdot \alpha^2 / \alpha^2$ die Formel $K_e = 2 \cdot h \cdot [1 / \tau \cdot \varphi \alpha^3 / 8\pi] \cdot (\lambda \cdot 2 / \varphi \alpha^2) \cdot 1 / x^2$. Der Ausdruck in der eckigen Klammer stellt die **Rydberg-Frequenz** (R_i) dar und der Ausdruck in der runden Klammer den Radius der energieärmsten (also der innersten) Bahn des Wasserstoffatoms (r_{H1}). Somit erhalten wir für die elektrische Ladungskraft den einfachen Ausdruck $K_e = 2 \cdot h \cdot R_i \cdot r_{H1} / x^2$. Da aber das Produkt $h \cdot R_i$ gleich der Energie (E_{H1}) des Wasserstoffatoms im Grundzustand ist, erhalten wir für die Normalform der Ladungskraft den Ausdruck:

$$\underline{K_e = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1 / x^2}$$

Da sich die beiden Kerne des H₂⁺ - Moleküls im Abstand „x“ voneinander befinden, bezieht sich die der elektrischen Abstoßungskraft zugehörige elektrische Abstoßungsenergie auf diesen Abstand „x“. Dies ist analog zum Wasserstoffatom, wo sich die Ladungsenergie ebenfalls auf den Abstand zwischen Elektron (Atomhülle) und Proton (Atomkern) bezog, also $x = r_{H1}$ beträgt. Die der elektrischen Ladungskraft adäquate elektrische Ladungsenergie (das ist die im elektrischen Ladungsfeld gespeicherte Energie) ergibt sich also durch den eindeutig vorliegenden Bezug auf den Kernabstand (x) gemäß der Formel $E_{ab} = K_{ab} \cdot x$. Folglich ergibt sich für zwei Protonen im Abstand x im Radialfeld für die Abstoßungsenergie der Ausdruck:

$$\underline{E_{ab} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1 / x}$$

Der Vorfaktor „2“ bedeutet, dass zwei Teilchen in Wechselwirkung stehen, wobei im Radialfeld jedes Teilchen $1 \cdot E_{H1}$ aufbringt.

b) Normierte Abstoßungsenergie

Wie im Kapitel „Ursache der hälftigen Ladungskraft“ dargelegt, gilt im Elementarfeld jedoch nur die hälftige Abstoßungsenergie (E_{ab}) gemäß

$$\underline{E_{ab} = 2 \cdot \frac{1}{2} E_{HI} \cdot r_{HI} \cdot 1/x}$$

In dieser Formel tritt der Feldsummenfaktor (φ) natürlich nicht auf, weil nur die sich berührenden n.Schalen der beiden Teilchen die elektrische Ladungskraft bedingen und nicht etwa eine Summen - Energie über alle n Schalen. Mit $E_{HI}=13,56 \text{ eV}$ und $r_{HI}=0,529 \text{ \AA}$, erhalten wir für die Abstoßungsenergie die Zahlenwertgleichung $7,173/x$. Genau diesen Energieverlauf haben wir von dem Verlauf der gesamten Potenzialenergie abgezogen und sind dann auf die in Bild 2 dargestellte Aufspaltung gestoßen. Wir werden im folgenden darlegen, dass der Ansatz der **hälftigen** Elektron – Erschließungswirkung eine fundamentale Eigenschaft des Moleküls ist! Wir werden zeigen, dass sich der Verlauf der Potenzialkurve mit unseren Ansätzen rechnerisch und physikalisch nachvollziehen lässt.

c) Normierte Anziehungsenergie

Zwischen dem Elektron und den beiden Kernen des H_2^+ - Moleküls herrscht jeweils eine elektrische Anziehungskraft. Diese ist ebenfalls abhängig vom Abstand der Teilchen (r). Analog zur Abstoßungsenergie ergibt sich für ein radiales Außenfeld die Formel $K_{an} = 2 \cdot E_{HI} \cdot r_{HI} \cdot 1/r^2$. Während im Wasserstoffatom die elektrische Ladungskraft sich immer nur auf den Abstand $r=r_{HI}$ zwischen Elektron und Proton bezieht, sind jedoch im H_2^+ - Molekül zwei im Abstand (x) voneinander befindliche Kerne zu gegen. Es kann sich also die Anziehungsenergie (E_{an}) nicht wie beim Atom nur auf einen Kern beziehen, sondern zugleich auf beide Kerne. Dieser Orientierung wird durch den Kernabstand (x) im Ausdruck $E_{an} = K_{an} \cdot x$ Rechnung getragen. Somit ergibt sich der Ausdruck:

$$\underline{E_{an} = 2 \cdot \frac{1}{2} E_{HI} \cdot r_{HI} \cdot 1/r^2 \cdot x}$$

Obwohl zwei Kerne präsent sind, ist eine Überlagerung (Addition oder Verdopplung) der Anziehungskraft nicht gerechtfertigt. Dies rührt daher, dass beide Kerne das gleiche Potenzialniveau entfalten. Beim Heliumatom mit seinen zwei Protonen in einem Atomkern sind die Verhältnisse dagegen anders. Dort wirkt natürlich das doppelt so hohe Potenzialniveau, weil der Kern elektrisch doppelt wirksam ist. Auch in vg. Formel haben wir (wie bei der Abstoßungsenergie) nur die **hälftige** Elektron – Erschließungswirkung angesetzt!

Naheliegender erscheint jedoch der Ansatz, dass der Kernabstand (x) keinen Einfluss auf die Anziehungskraft hat, sondern dass diese allein durch den Abstand Kern - Elektron (r) bestimmt wird. Wir werden jedoch im folgenden Kapitel „Rechenschema“ zeigen, dass der Verlauf der Potenzialkurve keinen Aufschluss darüber gibt, welcher Ansatz für die Anziehungsenergie vorzuziehen ist, da die Kurve in beiden Ansätzen gleich bleibt. Lediglich die Tatsache, dass die linke und rechte Grenze des Grundbereichs asymmetrisch zur Nulllage liegen, was bereits aus Bild 2 deutlich zu erkennen ist, wird einen Rückschluss zulassen. Bis dahin rechnen wir gleichberechtigt mit beiden Ansätzen.

6. Zweiter Baustein ist das Rechenschema zum H2+ - Molekül

a) 1. Ansatz: Ladungsenergie zwischen Kern und Elektron ist von x - abhängig

Anhand der obigen Diagramme haben wir festgestellt, dass im Grundbereich ein numerischer Verlauf der Energie gemäß $Y(x)=7,2/x+5,6x+2,3$ vorliegt. Diese Funktion besitzt - wie wir aus unserer Schulzeit (hoffentlich) noch wissen - eine erste Ableitung gemäß $Y'=-7,2/x^2+5,6+0$. Aus dem Verlauf der Kurve (Y) sehen wir, dass an der Stelle $x=x_0$ ein Minimum vorliegt ($E=E_0$). Folglich ist die Ableitung an dieser Stelle Null, also $E'(x_0)=0$. Diesen Rechengang wollen wir nun mit dem folgenden Rechenschema ausführen. Damit wir zu den gewollten phänomenorientierten Ergebnissen kommen, verwenden wir die vg. normierten Kurzschreibweisen für die Ladungsenergie.

| | Ladungsenergie an der Stelle x | Ladungsenergie an der Stelle $x=x_0$ |
|--------------------------|---|--|
| Funktion | E (x) | E (x₀) |
| Kern-Kern | $+E_{H1} \cdot r_{H1} / x \cdot N$ | $+E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot N$ |
| Kern-Elektron | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / r^2 \cdot x \cdot N \cdot 1$ Energie ist von x abhängig | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / (f^2 \cdot x_0^2) \cdot x_0 \cdot N \cdot 1$ |
| Elektron-Elektron | Null | Null |
| Summe | | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2) \cdot N$ |
| 1.Ableitung | E'(x) | E'(x₀) |
| Kern-Kern | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x^2 \cdot N$ | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0^2 \cdot N$ |
| Kern-Elektron | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / r^2 \cdot N \cdot 1$ | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / (f^2 \cdot x_0^2) \cdot N \cdot 1$ |
| Elektron-Elektron | Null | Null |
| Summe | | $-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2) \cdot N$ |

Zu diesem Rechenschema ist noch anzumerken, dass im Elementarfeld generell $N = 1$ gilt (weil nur die halbe Erschließungswirkung existiert). Der vg. Faktor "1" in der Zeile „Kern-Elektron“ drückt aus, dass trotz Anwesenheit zweier Kerne sich die Anziehungskraft nicht verdoppelt. Die Bezeichnung „Ladungsenergie“ in der Überschriftzeile rührt daher, dass die „Bahnenergie“ in dieser Tabelle fehlt, da diese hier noch nicht bekannt ist bzw. mit diesem Schema ja gerade ermittelt werden soll. Zudem gilt die Definition $f = r/x_0$. Wie wir aus dem Diagramm der Potenzialkurve sehen können, ist an der Stelle $x = x_0$ die Steigung der Kurve gleich Null. Die Summe der 1.Ableitungen der Ladungsenergien (E') ist aber ungleich Null. Dies bedeutet, dass noch ein weiterer Term als 1.Ableitung existieren muss, damit es zur beobachteten Nullergänzung kommt. Da in vg. Tabelle aber nur noch die Bahnenergie fehlt, ist die Bahnenergie (ob insgesamt oder nur ein Teil hiervon, wird sich noch herausstellen) zwingend auch vom Kernabstand „x“ abhängig. Anderenfalls würde ja deren

1. Ableitung nicht existieren! Diesen x -abhängigen Bahnenergieanteil ordnen wir der Anwesenheit des zweiten Kerns zu und bezeichnen ihn mit „ $E'_{2.Bahn}$ “. Damit lässt sich nun die x -Abhängigkeit der Bahnenergie berechnen. Da also $E'_{Lad} + E'_{2.Bahn} = 0$ gilt, ist $E'_{2.Bahn} = -E'_{Lad}$ und damit $E'_{2.Bahn} = +E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2)$. Durch **Integration** erhalten wir den folgenden rechnerischen Ausdruck für die 2. Bahnenergie:

$$\underline{E_{2.Bahn}(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2)}$$

Wir müssen hier beachten, dass in diesem Rechenschema die Anziehungsenergie (E_{an}) auf den Kernabstand (x) orientiert ist (1. Ansatz), womit auch für diese Energie eine erste Ableitung existiert. Daher tritt in v.g. Formel der Faktor $1/f^2$ auf. Ferner fehlt die mit der Integration einhergehende Integrationskonstante. Diese Energiekonstante ist zwingend der Bahnenergie zuzuordnen, weil anderweitige Phänomene nicht existieren. Wir bezeichnen diese Integrationskonstante mit $E_{1.Bahn}$. Die Energiekonstante lässt sich berechnen, indem wir den an der Stelle $x = x_0$ geltenden **Messwert** der absoluten Energie ($E = E_0$) in unsere Überlegungen einbeziehen. An der Stelle $x = x_0$ gilt $E_0 = E_{Bahn} + E_{Lad}$, wobei der Messwert für $E_0 = \text{rd. } 15,0 \text{ eV}$ beträgt. Interessanterweise entspricht dieser Wert ziemlich genau dem Ausdruck $E_0 \cong E_{H1} / \varphi^{3/2}$. Eine Erklärung für diese Schreibweise wird im Kapitel „Ursache der Bahnwirkung“ gegeben. Ebenso können wir dem Messwert für $x_0 = \text{rd. } 1,132 \text{ \AA}$ eine adäquate Formel zuordnen. Es entspricht diese Größe ziemlich genau dem Ausdruck $x_0 = 2 / (\varphi \cdot r_{H1}) = (2 / (\varphi \alpha))^2 \cdot \lambda$. Folglich gilt $E_{1.Bahn} + E_{2.Bahn} + E_{Lad} = E_0$. Es ist also $E_{1.Bahn} = E_0 - E_{Lad} - E_{2.Bahn}$. Wir setzen nun die im v.g. Rechenschema stehenden Ausdrücke ein und erhalten die Gleichung $E_{1.Bahn} = E_0 - [-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2)] - [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2)]$. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir für $x = x_0$ über den Ausdruck $E_{1.Bahn} = E_0 + [E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2)] + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 \cdot (-1 - 1/f^2)$ die Formel $E_{1.Bahn} = E_0 + [E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2)] + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1 / x_0 \cdot (-1 - 1/f^2)$ und damit die Gleichung

$$\underline{E_{1.Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0}$$

Diese über das Rechenschema zwingend ermittelte Formel für die 1. Bahnenergie zeigt, dass der Faktor f und damit auch der Elektronabstand vom Kern, für die 1. Bahnenergie unerheblich ist. Damit sind wir in der Lage, die Potenzialkurve im Grundbereich mit unseren Formeln zu beschreiben! Es ist $Y(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x - (E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/r^2 \cdot x) + [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / r^2] + [E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0]$. Hieraus erhalten wir $Y(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + [E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0]$. Wir können diesen Ausdruck in eine Zahlenwertgleichung überführen. Hierzu setzen wir $E_{H1} = 13,56 \text{ eV}$, $r_{H1} = 0,529 \text{ \AA}$, $x_0 = 1,132 \text{ \AA}$. Es ergibt sich dann $Y(x) = 7,173/x + 5,600x + 2,324$, womit wir über den gesamten Grundbereich den beobachteten Verlauf der Potenzialkurve exakt getroffen haben. Da wir aber nur von einer Übereinstimmung mit der Kurve in 2 Punkten ausgegangen sind, nämlich $E'(x_0) = 0$ und $E(x_0) = E_0$, bedeutet die nun vorliegende Übereinstimmung über den gesamten Grundbereich des Kurvenverlaufs, also über alle Punkte, dass die in unserem Rechenschema angesetzten Formeln nicht zufällig zutreffend sind. Es bedeutet die Übereinstimmung also nicht, dass der Kurvenverlauf auf mathematischem Wege erzwungen wurde. Damit haben wir eindeutig die Richtigkeit unserer Ansätze bewiesen. Es ist daher das Auftreten hälftiger Ladungsenergie als real anzusehen. Demnach sind auch die über das Rechenschema sich ergebenden Größen für die Bahnenergie als wesentliche Merkmale eines Moleküls anzusehen. Bevor wir unseren Weg nun weiter beschreiten, wollen wir doch dieses Ergebnis vergegenwärtigen und zusammenfassen: „**Unsere Untersuchungsmethode spiegelt die Realität!**“ Es liefern also auch die beiden Formeln für die Bahnenergie das rechnerisch exakt richtige Ergebnis. Aber Vorsicht, dies bedeutet noch lange nicht, dass mathematisch richtige Formeln auch die physikalischen Zusammenhänge richtig darstellen. Da Integrationsenergie und konstante Energie nur dem Phänomen Bahnlauf zugeordnet werden können, fassen wir beide Energieanteile nun zusammen. Demnach ist $E_{Bahn} = E_{1.Bahn} + E_{2.Bahn}$ und es ergibt sich über $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / r^2$ mit $f = r/x_0$ der Ausdruck $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / (f \cdot x_0)^2$ bzw. $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2)$ und damit für den 1. Ansatz der x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie die allgemein gültige Energiegleichung gemäß $E_{Bahn} = E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1 / x_0^2 \cdot [(1 + 1/f^2) \cdot x - 2x_0]$.

b) 2. Ansatz: Ladungsenergie zwischen Kern und Elektron nicht von x –abhängig

Wir wollen nun, wie angekündigt, zunächst das alternative Rechenschema ohne die x –Abhängigkeit der Anziehungsenergie anwenden. Es ist ja zu klären, welchem Ansatz für die Anziehungsenergie Realität zukommt.

| | Ladungsenergie an der Stelle x | Ladungsenergie an der Stelle $x=x_0$ |
|--------------------------|--|---|
| Funktion | E (x) | E (x₀) |
| Kern-Kern | +E_{H1}•r_{H1}/x•N | -E_{H1}•r_{H1}/x₀•N |
| Kern-Elektron | -E_{H1}•r_{H1}/r•N•1 Energie nicht von x abhängig | Null |
| Elektron-Elektron | Null | Null |
| Summe | | -E_{H1}•r_{H1}/x₀•N |
| 1.Ableitung | E'(x) | E'(x₀) |
| Kern-Kern | -E_{H1}•r_{H1}/x²•N | -E_{H1}•r_{H1}/x₀²•N |
| Kern-Elektron | Null | Null |
| Elektron-Elektron | Null | Null |
| Summe | | -E_{H1}•r_{H1}/x₀²•N |

Auch zu dem Rechenschema ist noch folgendes anzumerken:

Auch hier gilt in gleicher Weise im Elementarfeld generell $N = 1$ (weil nur die halbe Erschließungswirkung existiert). Der vg. Faktor "1" in der Zeile „Kern-Elektron“ drückt auch hier aus, dass trotz Anwesenheit zweier Kerne sich die Anziehungskraft nicht verdoppelt. Die Bezeichnung „Ladungsenergie“ in der Überschriftzeile rührt daher, dass die „Bahnenergie“ in dieser Tabelle fehlt, da diese hier ebenfalls noch nicht bekannt ist bzw. mit diesem Schema ja gerade ermittelt werden soll. Zudem gilt auch hier die Definition $\mathbf{f} = \mathbf{r}/x_0$.

Wie wir aus Bild 1 der gemessenen Potenzialkurve sehen können, ist an der Stelle $x = x_0$ die Steigung der Kurve gleich Null. Die Summe der 1.Ableitungen der vg. Ladungsenergien (E') ist aber ungleich Null. Dies bedeutet, dass auch hier noch ein weiterer Term als 1.Ableitung existieren muss, damit es zur erforderlichen Nullergänzung kommt. Da in vg. Tabelle aber nur noch die Bahnenergie fehlt, ist die Bahnenergie (ob insgesamt oder nur ein Teil hiervon wird sich noch herausstellen) zwingend auch vom Kernabstand „x“ abhängig. Anderenfalls würde ja deren 1.Ableitung nicht existieren! Diesen x –abhängigen Bahnenergieanteil ordnen wir auch hier der Anwesenheit des zweiten Kerns zu und bezeichnen ihn mit „E'_{2.Bahn}“. Damit lässt sich nun auch hier die x –Abhängigkeit der Bahnenergie berechnen. Da also $E'_{Lad} + E'_{2.Bahn} = 0$ gilt, ist $E'_{2.Bahn} = -E'_{Lad}$ und damit $E'_{2.Bahn} = +E_{H1}•r_{H1}/x_0^2$. Durch **Integration** erhalten wir hier den folgenden rechnerischen Ausdruck für die 2.Bahnenergie:

$$\underline{E_{2.Bahn}(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2}$$

Wir müssen hier beachten, dass in diesem Rechenschema die Anziehungsenergie (E_{an}) nicht auf den Kernabstand (x) orientiert ist (2. Ansatz), womit für diese Energie eine erste Ableitung nicht existiert. Daher erscheint in v.g. Formel der Faktor $1/f^2$ nicht. Auch hier fehlt noch die mit Integration einhergehende Integrationskonstante. Diese Energiekonstante ist auch hier zwingend der Bahnenergie zuzuordnen, weil anderweitige Phänomene nicht existieren. Wir bezeichnen diese Integrationskonstante daher auch hier mit $E_{1.Bahn}$. Die Energiekonstante lässt sich berechnen, indem wir auch hier den an der Stelle $x = x_0$ geltenden *Messwert* der absoluten Energie ($E = E_0$) in unsere Überlegungen einbeziehen. An der Stelle $x = x_0$ gilt $E_0 = E_{Bahn} + E_{Lad}$, wobei der Messwert für $E_0 = \text{rd. } 15,0 \text{ eV}$ beträgt bzw. $E_0 \cong E_{H1}/\varphi^{3/2}$. Ebenso können wir dem Messwert für $x_0 = \text{rd. } 1,132 \text{ \AA}$ eine adäquate Formel zuordnen. Es entspricht diese Größe ziemlich genau dem Ausdruck $x_0 = 2/\varphi \cdot r_{H1} = (2/\varphi\alpha)^2 \cdot \lambda$. Folglich gilt $E_{1.Bahn} + E_{2.Bahn} + E_{Lad} = E_0$. Es ist also $E_{1.Bahn} = E_0 - E_{Lad} - E_{2.Bahn}$. Wir setzen nun die im v.g. Rechenschema stehenden Ausdrücke ein und erhalten die Gleichung $E_{1.Bahn} = E_0 - [E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0] + [E_{H1} \cdot r_{H1} / r] - [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2]$. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir für $x = x_0$ über den Ausdruck $E_{1.Bahn} = E_0 - 2E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 - E_{H1} \cdot r_{H1} / r$ und die damit Gleichung

$$\underline{E_{1.Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} / r}$$

Diese über das Rechenschema ebenfalls zwingend ermittelte Formel für die 1. Bahnenergie zeigt, dass hier der Elektronabstand vom Kern nicht unerheblich ist. Damit sind wir auch hier in der Lage, die Potenzialkurve im Grundbereich mit unseren Formeln allgemein zu beschreiben! Es ergibt sich die Gleichung $Y(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x - (E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/r) + [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2] + [E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / r]$. Hieraus erhalten wir $Y(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + [E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0]$. Dies ist exakt der gleiche Ausdruck wie beim ersten Ansatz der x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie, womit wir auch hier den im Grundbereich beobachteten Verlauf der Potenzialkurve exakt getroffen haben.

Da auch hier Integrationsenergie und konstante Energie nur dem Phänomen Bahnumlauf zugeordnet werden können, fassen wir nun beide Energieanteile zusammen. Demnach ist $E_{Bahn} = E_{1.Bahn} + E_{2.Bahn}$ und es ergibt sich über $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} / r + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2$ mit $f = r/x_0$ bzw. $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} / (f \cdot x_0) + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2$ bzw. $E_{Bahn} = E_0 - (2 - 1/f) \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2$ und damit die für den 2. Ansatz der Nicht $-x$ -Abhängigkeit der Anziehungsenergie allgemein gültige Energiegleichung $E_{Bahn} = E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x_0^2 \cdot [x - (2 - 1/f) \cdot x_0]$.

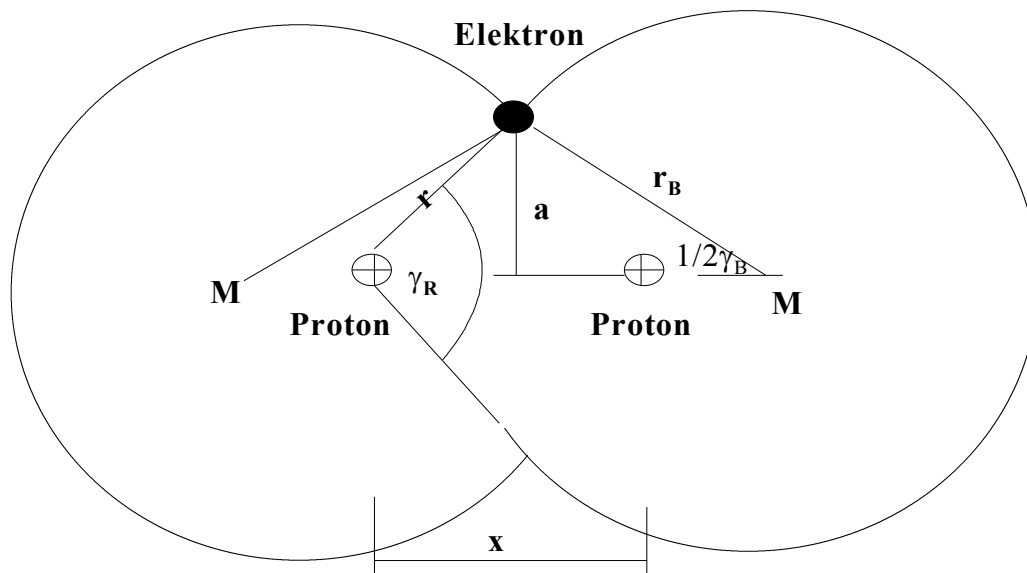
Wegen der mit beiden Ansätzen für die Anziehungsenergie erzielten Übereinstimmung mit dem Verlauf der Potenzialkurve, liefert diese und damit auch die Messwerte, keinen Aufschluss darüber, welcher der beiden Ansätze zutrifft. Die diesbezügliche Untersuchung bedarf also weitergehender Bedingungen. Zudem wollen wir versuchen, eine bisher in der Literatur überhaupt noch nicht untersuchte Größe zu bestimmen, nämlich den Orbitalradius (Bahnradius, r_B) des Wasserstoff-Molekül-Ions. Da der Abstand zwischen Kern und Elektron (r) beliebige Abmessungen annehmen kann, ohne dass dies Einfluss auf den Verlauf der Potenzialkurve hat, haben wir für die nun anstehenden diesbezüglichen Untersuchungen einen wichtigen Freiheitsgrad in unseren Händen!

Im folgenden nehmen wir die physikalische Form der normierten Bahnenergie und die Geometrie des Elektron-Orbitales als weitere im Molekül existierenden Phänomene in unsere Überlegungen auf.

7. Dritter Baustein ist die Geometrie des Molekül - Orbitales

Hier ist zu beachten, dass das Elektron – Orbital des Moleküls nicht als *eine* Kugeloberfläche (wie beim Atom) auftritt, sondern als *zwei* Kugeloberflächen, die ineinander übergehen, d.h. sich *überlappen*. Dabei bildet sich eine kreisförmige Schnittfläche aus, wobei zwei auf dem Umfang dieser Fläche gegenüberliegende Punkte mit einem Kern jeweils einen bestimmten Winkel einschließen. Wir verwenden für unsere diesbezüglichen Überlegungen im folgenden das ng. Prinzipbild:

Prinzipbild zum Wasserstoff - Molekül - Ion



Die insgesamt von der Bahnwirkung des Elektrons beaufschlagte Orbitaloberfläche beträgt $A=4\pi r_B^2 \cdot (360-\gamma_B)/360 \cdot 2$
(zum Vergleich: im Atom war $A=4\pi r_B^2 \cdot 1$).

Entsprechend diesem Prinzipbild fällt die Lage der Protonen nicht mit den Orbital-Mittelpunkten zusammen. Dies ist zulässig, weil nicht das Elektron auf Bahnradius r_B umläuft, sondern die vom Elektron gegebene Bahnwirkung, die sich dadurch in Gestalt der Elektronenhülle manifestiert.

Demnach ergibt sich gegenüber der Orbitaloberfläche des Atoms eine Vergrößerung der Bahnlänge um den Faktor $f = (360 - \gamma_B) / 360 \cdot 2$. Wir sehen, dass bei $\gamma_B = 0^\circ$ zwei getrennte Kugeloberflächen vorliegen, die bei $\gamma_B = 180^\circ$ in eine einzige Kugeloberfläche übergehen. Im ersten Fall berühren sich die Oberflächen in einem Punkt, so dass an dieser Stelle ($x = 2r_B$) sich das Molekül möglicherweise noch nicht gebildet hat bzw. erst im Begriff ist zu entstehen bzw. der Grundbereich endet. Im zweiten Fall liegen die beiden Kerne sehr dicht aneinander, so dass wegen der dann gegen unendlich laufenden Abstoßungskraft dieser Fall in der Natur nicht vorkommt. Diese Aussage ist nicht zu verwechseln mit dem im Heliumatom vorliegenden Atomkern, der aus zwei Protonen besteht, die in eine existenzielle Einheit übergegangen sind (also nicht mehr beliebig dicht aneinander liegen). In diesem Fall wurde nämlich irgendwann die (im Kosmos vorhandene stärkste Kraft in Gestalt der Kernbindungskraft existent (wird durch „Umlauf“ von Pionen gegeben), so dass innerhalb des Kerns die elektrische Protonabstoßungskraft nicht mehr existiert (die ja fast unendlich groß sein müsste) und folglich auch nicht zu einer Trennung der Protonen führen kann. Jedenfalls wollen wir uns mit diesen Anmerkungen vergegenwärtigen, dass unsere Betrachtungen zum Grundbereich nur für einen bestimmten Kernabstand zwischen $\gamma_B = 0^\circ$ und $\gamma_B = 180^\circ$ gültig sind. Die genauen Grenzen sollen uns vorerst noch nicht interessieren, ebenso die Frage, welche Winkel (γ_B, γ_i) im Wasserstoff – Molekül – Ion gegeben sind. Diese Fragen können wir nur zusammen mit der Bahnenergie beantworten.

8. Vierter Baustein ist die Bahnenergie

a) Allgemein

In einem radial orientierten Feld, das ist die Feldstruktur, die mit unserer Messapparatur bis in mikroskopische Bereiche direkt beobachtbar ist, ergibt sich in Analogie zum Wasserstoffatom bei einem „Umlauf“ des Elektrons auf Radius r_B die zugehörige Erschließungskraft gemäß $K_B = \frac{1}{2}h / (T_B \cdot r_B)$. Hierbei ist die Umlaufdauer $T_B = 2\pi r_B / v_B$, wobei v_B die Bahngeschwindigkeit bedeutet. Aufgrund der Bahnquantenbedingung gilt die Gleichung $v_B = c \cdot r_m / r_B$, wobei $r_m = \lambda \cdot 2 / \varphi \alpha$ der Radius des sogenannten "großen" Elektrons ist, so dass sich $K_B = \frac{1}{2}h / 2\pi r_B \cdot (c \cdot r_m / r_B \cdot 1 / r_B)$ ergibt. Diese Ausgangsformel normieren wir nun auf die Wasserstoffgrößen. Hierzu setzen wir für $c = \lambda / \tau$ und erweitern die Formel um $2\varphi \alpha^3 / 2\varphi \alpha^3$. Es ergibt sich dann über den Ausdruck $K_B = \frac{1}{2}h / 2\pi r_B \cdot \lambda / \tau \cdot r_m \cdot 2\varphi \alpha^3 / 2\varphi \alpha^3$ die Formel $K_B = h / r_B^3 \cdot (\lambda \cdot 2 / \varphi \alpha^2) \cdot (r_m \cdot 1 / \alpha) \cdot [1 / \tau \cdot \varphi \alpha^3 / 8\pi]$. Der Ausdruck in der eckigen Klammer stellt die **Rydbergfrequenz** (R_t) dar und der Ausdruck in den runden Klammern jeweils den Radius der energieärmsten (also der innersten) Bahn des Wasserstoffatoms (r_{H1}). Somit erhalten wir für die Bahnkraft den Ausdruck $K_{H2} = (h \cdot R_t) \cdot r_{H1}^2 / r_B^3$. Da aber das Produkt $h \cdot R_t$ gleich der Energie (E_{H1}) des Wasserstoffatoms im Grundzustand ist, können wir für die Erschließungskraft (Bahnkraft) endgültig schreiben $K_B = E_{H1} \cdot r_{H1}^2 / r_B^3$. Damit ergibt sich die Normalform der Bahnenergie mit $K_B \cdot r_B$ bei beliebiger z – facher Erzeugung zu

$$\underline{E_B = z \cdot E_{H1} \cdot (r_{H1} / r_B)^2}$$

Diese einfach aufgebaute Formel bringt zum Ausdruck, wie sich die Bahnenergie in Abhängigkeit des Bahnradius r_B verändert. Diese Bahnenergie wird zwar durch Umlauf über das gesamte Molekülorbital erzeugt, jedoch müssen wir beachten, dass wir bisher (d. h. beim Wasserstoff- und Heliumatom) so getan haben, als sei nur das Elektron selbst für die Erzeugung von Bahnwirkung maßgebend. Wir können aber ohne Beeinträchtigung unser bisherigen Erkenntnisse annehmen, dass auch der Atomkern Einfluss hat (ohne Atomkern keine Bahnwirkung). Dem entsprechend haben wir bei der Herleitung des obigen Ausdruckes nur den Einfluss eines einzigen Kerns auf die Erzeugung von Bahnwirkung berücksichtigt. Es ist also obiger Ausdruck nur auf **einen** Kern hin orientiert. Der Ausdruck zeigt, dass diese Form der Bahnenergie unabhängig vom Kernabstand (x) ist. Tatsächlich ist aber im H_2^+ - Ion ein zweiter Kern anwesend. Auch diesem Kern müssen wir einen irgendwie gearteten Einfluss zuordnen. Diese Zuordnung wird durch die im Rechenschema abgeleitete x – Abhängigkeit der Bahnenergie ausgedrückt.

b) Normierte Bahnenergie

Es ergibt sich mit Einbeziehung des Prinzipbildes zum Molekül -Orbital für die beliebige z –fache Bahnenergie der normierte Ausdruck gemäß:

$$\underline{E_B = z \cdot E_{H1} \cdot (r_{H1}/r_B)^2 \cdot [360/(360-\gamma_B) \cdot 1/2]}$$

Die Formel drückt aus, dass sich z. B. bei $\gamma_B=90^\circ$ die Umlaufdauer (T_B) um das 3/2 – fache verlängert bzw. sich die Bahnenergie entsprechend um das 2/3 – fache reduziert (da sich die Wirkungserzeugung (z =konstant) nicht vergrößert hat). Der Ausdruck geht deswegen reziprok ein, weil die Umlaufdauer in der vg. Ausgangsformel für die Bahnenergie ($E_B = K_B \cdot r_B = \frac{1}{2}h/(T_B)$) unter dem Bruchstrich steht.

9. Bestimmung des Orbitalradius

a) Allgemein

Die einzige Möglichkeit zur Bestimmung des Orbitalradius (r_B) besteht in der Gleichsetzung des rechnerischen Wertes der Bahnenergie, die den realen Wert der Energie liefert, mit der abgeleiteten normierten Form der Bahnenergie, die als reales physikalisches Phänomen gegeben ist. In soweit ist dies ein Versuch, den Radius des Molekülorbitales theoretisch vorherzusagen. Im Falle der x – Abhängigkeit der Anziehungsenergie gilt die Energiegleichung $E_B = E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0^2 \cdot 2 \cdot [(1+x_0^2/r^2) \cdot x - 2x_0] = z \cdot E_{H1} \cdot (r_{H1}/r_B)^2 \cdot [360/(360-\gamma_B) \cdot 1/2]$. Im anderen Falle der Nicht –x –Abhängigkeit der Anziehungsenergie lautet die Gleichung $E_{Bahn} = E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x_0^2 \cdot [x - (2-1/f) \cdot x_0] = z \cdot E_{H1} \cdot (r_{H1}/r_B)^2 \cdot [360/(360-\gamma_B) \cdot 1/2]$. Demnach unterscheiden sich beide Ansätze nur durch die jeweils auf der linken Seite stehende eckige Klammer.

Diese Energiegleichungen beinhalten mit Überlappungswinkel, Bahnradius und Bahnwirkungsvielfaches (z) jeweils noch Unbekannte. Zur Bestimmung dieser Unbekannten verfügen wir nur über diese Gleichungen sowie über die gegebenen Grenzen des Grundbereiches. Zudem bestehen noch Abhängigkeiten aus dem Kräftegleichgewicht der Elementarteilchen. Da wir hier über weniger Lösungsgleichungen verfügen, als Unbekannte vorhanden sind, muss zur Bestimmung des Orbitalradius eine Annahme getroffen werden. Diese Annahme wäre ggf. entbehrlich, wenn wir Untersuchungen zum Kräftegleichgewicht anstellen und hier einbeziehen würden. Auf diese Abhängigkeiten wird in dieser Arbeit nicht eingegangen.

Wir definieren daher, dass sich der Überlappungswinkel (γ_B) – in der Nulllage der beiden Kerne ($x = x_0$) – ebenfalls in der Nulllage befindet, also genau in der Mitte zwischen den Grenzwerten 0° und 180° . Wir rechnen also mit $\gamma_B=90^\circ$. Dies ist unsere erste Annahme (von zwei) zur Bestimmung des Orbitalradius. Alles weitere ergibt sich dann, wie wir gleich sehen werden, mehr oder weniger zwangsläufig. Mit der vg. Energiegleichung können wir den Abstand zwischen Kern und Elektron bestimmen. Es gilt mit $\gamma_B=90^\circ$ für alle x , also auch für die Nulllage, die Formel $E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0^2 \cdot 2 \cdot [(1+x_0^2/r^2) \cdot x - 2x_0] = z \cdot E_{H1} \cdot (r_{H1}/r_B)^2 \cdot [360/(360-90) \cdot 1/2]$ bzw. mit $r_B=f_B \cdot r$ ist $E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0^2 \cdot 2 \cdot [(1+x_0^2/r^2) \cdot x - 2x_0] = z \cdot E_{H1} \cdot 1/f_B^2 \cdot r_{H1}^2/r^2 \cdot [2/3]$. Aus diesen beiden Formel ergibt sich r in Abhängigkeit vom Kernabstand (x). Durch Ausmultiplizieren, was wir hier (ausnahmsweise) nicht angeben, erhalten wir für den 1.Fall der x –Abhängigkeit der Anziehungsenergie den Ausdruck

$$\underline{r(x) = x_0 \cdot [(2/\varphi^{5/2} \cdot \{3/2 \cdot 1/f_B^2\} - x/x_0) / (2/\varphi^{5/2} + x/x_0 - 2)]^{1/2}}$$

Es ist sofort zu sehen, dass diese Formel sich erheblich vereinfacht, wenn $f_B^2=3/2$ wäre. In diesem Fall würde sich in der Nulllage, also an der Stelle $x = x_0$ der Ausdruck in der eckigen Klammer zu 1 ergeben und wir würden erhalten

$$\underline{r(x_0) = x_0}$$

Mit dieser 2. Annahme besteht zwischen einem Proton und den auf dem Umfang des von beiden Orbitalen gebildeten Schnittkreises gegenüberliegenden Punkten ein Winkel von $\gamma_r = 120^\circ$ (diese drei Punkte bilden ein gleichseitiges Dreieck). Damit unterscheidet sich dieser Winkel von unserem gerade eben definierten Überlappungswinkel ($\gamma_B = 90^\circ$). Uns ist bewusst, dass mit dieser (nicht unbedingt naheliegenden) Annahme für den Überlappungswinkel der Mittelpunkt eines Orbitales mit der Lage des zugehörigen Kerns nicht mehr zusammenfällt! In unserer Vorstellung, die wir bereits bei den Untersuchungen zum Wasserstoffatom dargelegt haben, stellt dies aber kein Problem dar, da nicht das Elektron auf einer Bahn umläuft, sondern nur die vom Elektron erzeugte Wirkung, die sich im Phänomen der Elektronenhülle manifestiert. Es ist eben ein klassischer Irrtum, die Bahnwirkung auf einen mechanischen (materiellen) Drehimpuls der Elektronenmasse zurückführen zu wollen, womit das Elektron sich nicht mehr im Abstand r vom Kern aufhalten würde. Aber dies würde trotzdem nicht bedeuten, dass unsere normierten Formeln falsch wären, denn wir haben festgestellt, dass der Verlauf der Potenzialkurve unabhängig von r ist. Aus unserer Sicht jedenfalls können sich aus prinzipiellen Gründen gar keine Einwände gegen den Ansatz verschiedener Winkel ergeben. Da also in der Nulllage $r = x_0$ gilt, befindet sich das Elektron in einem senkrechten Abstand gemäß $\mathbf{a} = \frac{1}{2}(3)^{1/2} \cdot \mathbf{x}_0$ über der Kernverbindungsachse (siehe Prinzipbild). Da wir in der Nulllage zur Bestimmung von r_B jedoch mit $\frac{1}{2}\gamma_B = 45^\circ$ rechnen, ist $r_B^2 = 2a^2$ (da hier ein gleichschenkliges Dreieck vorliegt). Somit ist für den Bahnradius die Formel anzusetzen:

$$\underline{r_B(x_0) = (3/2)^{1/2} \cdot x_0}$$

Damit liegt der Bahnradius fest und wir sehen unsere 2. Annahme $f_B^2 = 3/2$ wieder. Im folgenden rechnen wir mit $\gamma_r = 120^\circ$ und $\gamma_B = 90^\circ$, da sich nur mit diesen Ansätzen die einfachst möglichen Strukturen ergeben. Es stellt sich nun die Frage, welche Auswirkungen eine durch Energieabsorption bewirkte Auslenkung des Kernabstandes aus der Nulllage ($\mathbf{x}_0 = \mathbf{x} \pm \Delta\mathbf{x}$) auf die Elektronenhülle hat. Hierzu bestehen zwei Möglichkeiten:

1. Die Abstandsveränderung führt bei gleichem Orbitalradius (r_B) zu einer Veränderung des Überlappungswinkels (γ_B). Diese Gegebenheiten werden mit ng. Modell 1 untersucht.
2. Die Abstandsveränderung führt bei gleichem Überlappungswinkel (γ_B) zu einer Veränderung des Orbitalradius (r_B), siehe hierzu Modell 2.

Beide Ansätze führen in der Nulllage definitionsgemäß zum gleichen Ergebnis.

b) Modell 1: Energieabsorption führt zur Veränderung des Überlappungswinkels

Bei diesem Ansatz zur Bestimmung des Orbitalradius gehen wir davon aus, dass sich in der Nulllage ein Radius r_B einstellt, der auch bei Auslenkung aus der Nulllage unverändert bleibt. Da Energieveränderungen jedoch auftreten, bedeutet dies, dass jede Auslenkung eine adäquate Veränderung des Überlappungswinkels (γ_B) nach sich ziehen muss. Dies wiederum hat zur Folge, dass sich der Grundbereich durch die möglichen Grenzwerte der Winkel 0 und 180° bestimmt. Dieser Ansatz berücksichtigt somit auch mögliche Übergänge in die angrenzenden Übergangsbereiche. Es wäre z. B. denkbar, dass es kurz vor Überschreiten der Grenzwinkel zu einer Veränderung des Bahnradius (r_B) kommt, wodurch sich wieder „normale“ Überlappungswinkel (γ_B) einstellen könnten. Allerdings besteht gegen dieses Modell ein Einwand. Da die beiden Kerne bereits dicht aneinander liegen, noch bevor der Überlappungswinkel (γ_B) den Grenzwert 180° erreicht, müssten die Kerne bei 180° einander sogar überlaufen haben. Dieses hier angesprochene Problem eines Einwandes ist jedoch für den Elementarbereich nicht ungewöhnlich. In diesem Bereich werden regelmäßig Feststellungen getroffen, die zwar dem selben Phänomen zugeordnet werden, das aber zugleich „so“ (in diesem Fall als variabler Überlappungswinkel) als auch „anders“ (im anderen Fall als variabler Bahnradius) in Erscheinung tritt. Dies sind eben die Spielräume der Natur, welche die reale Existenz ausmachen.

Da wir mit $f = 1$, also mit $\mathbf{r} = \mathbf{x}_0$ rechnen, setzen wir zur Beschreibung des Modells 1 diesen Wert in die vg. Ausgangsformel der Energiegleichung ein, wodurch diese sich erheblich vereinfacht. Im Falle der x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie wird sie zu $E_{\text{Bahn}} = E_0 + E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}} \cdot 1/x_0^2 \cdot [x-x_0] \cdot 2$, im anderen Falle zu $E_{\text{Bahn}} = E_0 + E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}} \cdot 1/x_0^2 \cdot [x-x_0] \cdot 1$. Wie leicht zu sehen ist, unterscheiden sich die Bahnenergien, der beiden Ansätze nur durch den Faktor nach der eckigen Klammer. Wir stellen nun vg. Formel nach diesem Klammersausdruck um. Es ergibt sich dann im ersten Falle die Ausgangsformel $2 \cdot [x-x_0] = \{z \cdot E_{\text{H1}} \cdot (r_{\text{H1}}/r_{\text{B}})^2 \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - E_0\} / (E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}} \cdot 1/x_0^2)$. Somit führt dieser Rechengang zu dem Ausdruck $x-x_0$, den wir als Auslenkung (Δx) der Kerne aus der Nulllage (\mathbf{x}_0) auffassen können, so dass $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = \pm \Delta \mathbf{x}$ gilt.

Es verursacht also nur die Energieabsorption Unterschiede, die wir zur Beurteilung heranziehen können, welcher Fall bzgl. der Anziehungsenergie zutrifft. Maßgabe für diese Entscheidung ist, dass die gleiche Energieabsorption im zweiten Falle eine nur halb so große Auslenkung nach sich zieht, wie im ersten Falle. Demnach gilt $\Delta x_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot \Delta x_{\text{Fall2}}$. Zu beachten ist, dass dieser Unterschied an der Stelle $x = x_0$ definitionsgemäß keine Bedeutung entfaltet. Aufgrund dieses Unterschiedes werden wir (weiter unten) die beobachteten Grenzen des Grundbereiches (s. Bild 2) zwingend ableiten. Damit sind wir in der Lage, zu entscheiden, welcher Fall bzgl. der Anziehungsenergie zutrifft. Wir halten daher dieses Modell für anlegbar! Mit $\gamma_{\text{B}} = 90^\circ$ erhalten wir den Ausdruck $2 \cdot [x-x_0] = \{z/r_{\text{B}}^2 \cdot E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot 2/3 - E_0\} / (E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}} \cdot 1/x_0^2)$ und damit die Formel $\pm \Delta x = 1/2 \cdot \{z/r_{\text{B}}^2 \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot 2/3 - E_0/E_{\text{H1}}\} \cdot x_0^2 / r_{\text{H1}}$. In dieser Formel ist der Bahnwirkungsfaktor (z) die letzte noch zu suchende Größe. An der Stelle $x = x_0$, also bei $\Delta x = 0$ geht die Formel über in die Gleichung $z/r_{\text{B}}^2 \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot 2/3 = E_0/E_{\text{H1}}$ bzw. $z = E_0/E_{\text{H1}} \cdot 3/2 \cdot r_{\text{B}}^2 / r_{\text{H1}}^2$. Damit erhalten wir den Ausdruck $z = E_0/E_{\text{H1}} \cdot 3/2 \cdot (3/2 \cdot x_0^2) / r_{\text{H1}}^2$ bzw. $z = 1/\varphi^{3/2} \cdot 9/\varphi^2$ bzw.

$$\underline{z = 9/\varphi^{7/2}}$$

Dieser Ausdruck ist eine Konstante, die unabhängig von Orbitalradius, Überlappungswinkel und vom Kernabstand ist. Da wir uns immer noch an der Stelle $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ befinden, gilt auch dieses Ergebnis natürlich für beide Fälle bzgl. der Anziehungsenergie. Damit entscheidet tatsächlich nur die Größe der bei gleicher Energieabsorption auftretenden Auslenkung (Δx) über die Frage, welcher Ansatz auf die Anziehungsenergie zutrifft.

c) Bestimmung der Grenzen des Grundbereiches

In diesem Kapitel wollen nun ableiten, welcher Ansatz mit den beobachteten Grenzen des Grundbereichs am besten vereinbar ist. Bei genauem Ausmessen des vg. 2.Bildes können wir als untere Grenze rd. $0,8^\circ \text{A}$ und als obere Grenze rd. $1,8^\circ \text{A}$ ablesen. Der Grundbereich wird durch diese maximal zulässige Auslenkung aus der Nulllage begrenzt. Über die Ausgangsformel $2 \cdot [x-x_0] = \{z \cdot E_{\text{H1}} \cdot (r_{\text{H1}}/r_{\text{B}})^2 \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - E_0\} / (E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}} \cdot 1/x_0^2)$ ergibt sich mit $r_{\text{B}}^2 = 3/2 \cdot x_0^2$ die Auslenkung ($\pm \Delta x$) in Abhängigkeit des Überlappungswinkels (γ_{B}) gemäß der allgemeinen Formel $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot \{z/r_{\text{B}}^2 \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - E_0/E_{\text{H1}}\} \cdot x_0^2 / r_{\text{H1}}$ und damit der Ausdruck $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot \{2/3 \cdot z \cdot r_{\text{H1}}^2 / x_0^2 \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - E_0/E_{\text{H1}}\} \cdot x_0^2 / r_{\text{H1}}$. Wir setzen nun $z = 9/\varphi^{7/2}$ ein und erhalten den Ausdruck $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot \{2/3 \cdot 9/\varphi^{7/2} \cdot (r_{\text{H1}}/x_0)^2 \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - E_0/E_{\text{H1}}\} \cdot x_0^2 / r_{\text{H1}}$ bzw. $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot \{3/2 \cdot 1/\varphi^{3/2} \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - 1/\varphi^{3/2}\} \cdot 4/\varphi^2 \cdot r_{\text{H1}}$. Damit ergibt sich $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot \{6/\varphi^{7/2} \cdot [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 1/2] - 4/\varphi^{7/2}\} \cdot r_{\text{H1}}$ bzw.

$$\underline{\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = [360/(360-\gamma_{\text{B}}) \cdot 3/2 - 2] \cdot r_{\text{H1}} / \varphi^{7/2} = (\gamma_{\text{B}} - 90) / (360 - \gamma_{\text{B}}) \cdot 2 \cdot r_{\text{H1}} / \varphi^{7/2}}$$

Hier wurde im rechten Teil der Gleichung auf $\gamma_{\text{B}} = 90^\circ$ Bezug genommen. Dieser rechte Teil bringt anschaulich die Symmetrie - Eigenschaft des Überlappungswinkels zum Ausdruck. Entsprechend dieser Formel erhalten wir mit $\gamma_{\text{B}} = 0^\circ$ für $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = -0,335^\circ \text{A}$ und damit $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \Delta \mathbf{x} = 0,797^\circ \text{A}$ bzw. mit $\gamma_{\text{B}} = 180^\circ$ für $\pm \Delta x_{\text{Fall1}} = +0,670^\circ \text{A}$ und damit $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \Delta \mathbf{x} = 1,802^\circ \text{A}$. Wir sehen, dass die Auslenkung (Δx) asymmetrisch ist, der Überlappungswinkel (γ) dagegen symmetrisch. Wir sehen, dass diese Ergebnisse mit den aus Bild 2 abgelesenen Grenzen übereinstimmen. Damit sind sowohl

unsere Überlegungen bzgl. variablem Überlappungswinkel als auch die definitionsgemäß vorgenommene Festlegung $\gamma_B = 90^\circ$ von den vg. Ablesewerten abgedeckt! Da $\Delta x_{Fall1} = \frac{1}{2} \cdot \Delta x_{Fall2}$ ist, ergibt sich umgekehrt $\Delta x_{Fall2} = 2 \cdot \Delta x_{Fall1}$. Um auch im Falle der nicht gegebenen x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie die gleichen beobachteten Grenzen zu erzielen, müssen die Überlappungswinkel mit der Formel $\pm \Delta x_{Fall2} = 2 \cdot [360 / (360 - \gamma_B) \cdot 3/2 - 2] \cdot r_{H1} / \varphi^{7/2}$ berechnet werden. Entsprechend dieser Formel erhalten wir mit $\gamma_B = 51,4145^\circ$ für $\pm \Delta x_{Fall2} = -0,335^\circ \text{Å}$ bzw. mit $\gamma_B = 144,0137^\circ$ für $\pm \Delta x_{Fall2} = +0,670^\circ \text{Å}$. Zwar existiert damit eine rechnerisch zulässige Lösung, jedoch sind die zur Lösung erforderlichen Überlappungswinkel nicht zugleich auch als Grenzwinkel besonders ausgezeichnet. Damit ist endgültig entschieden, dass die Anziehungsenergie vom Kernabstand (x) abhängig ist!

d) Modell 2: Energieabsorption führt zur Veränderung des Orbitalradius

In dem Falle, dass der Überlappungswinkel über alle Kernabstände (x) konstant 90° beträgt, führt jede Veränderung des Kernabstandes unmittelbar zu eine Veränderung des Abstandes $r(x)$ zwischen Elektron und Kern, sowie über das vg. konstante $3/2$ -Verhältnis zugleich auch zu einer Veränderung des Orbitalradius (r_B). Dass sich Orbitalradien durch Energieabsorption ändern, ist nichts Neues und uns schon aus unseren Untersuchungen zum Wasserstoffatom bekannt. Entsprechend der im Kapitel „Allgemein“ aufgeführten Formel gilt $r(x) = x_0 \cdot [(2/\varphi^{5/2} - x/x_0) / (2/\varphi^{5/2} + x/x_0) - 2]^{1/2}$. Gegen dieses Modell besteht der Einwand, dass sich die Grenzen des Grundbereiches mit dieser Formel nicht bestimmen lassen. Wir halten trotz des Einwandes auch dieses Modell für anlegbar, da zumindest beim Erreichen der Grenzwinkel ein Bahnsprung stattfinden muss! Für den 2.Fall der Nicht- x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie erhalten wir einen erheblich komplizierteren Ausdruck für $r(x)$, den wir hier nicht angeben, weil dieser Umstand nicht gerade für diesen Ansatz spricht. Der Vollständigkeit halber sei erwähnt, dass sich an der Stelle $x = x_0$ dann $r \cong x_0 \cdot 3/2 \cdot (2/\varphi^{5/2} - 1) = 1,097 \cdot x_0$ ergibt.

e) Modell 1/2: Ursache der Bahnwirkung

Die hier durchgeführte Untersuchung zur Ursache der Bahnwirkung gilt für beide vg. Modelle. Das Vielfache (z) der Bahnwirkung ergab sich im Modell 1 zu $z = 9/\varphi^{7/2}$. Dieser Ausdruck bezieht sich auf die eingangs verwandte Normierungsgröße $E_{H1} = h \cdot R_t$ und gilt an der Stelle $x = x_0$, bezieht sich also auf den Bahnradius $r_B = 3/2^{1/2} \cdot x_0$. Dem entsprechend ist an dieser Stelle $z/r_B^2 = 9/\varphi^{7/2} \cdot (2/3 \cdot 1/x_0^2) = 6/\varphi^{7/2} \cdot 1/x_0^2$. Es ergibt sich über $z/r_B^2 = 6/\varphi^{7/2} \cdot (1/r_{H1}^2 \cdot \varphi^{4/2}/4)$ die Formel $z/r_B^2 = 3/2 \cdot 1/\varphi^{3/2} \cdot 1/r_{H1}^2$. Da $E_0/E_{H1} = 1/\varphi^{3/2}$ ist, können wir diesen Ausdruck in die letzte Formel einsetzen und erhalten über $z/r_B^2 = 3/2 \cdot E_0/E_{H1} \cdot 1/r_{H1}^2$ bzw. umgestellt nach E_0 , die Formel $E_0 = z \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}^2 / r_B^2 \cdot (4/3 \cdot 1/2)$ bzw. den Ausdruck

$$\underline{E_0 = z \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}^2 / r_B^2 \cdot [360 / (360 - \gamma_B) \cdot 1/2]}$$

Hier ist unser Definitionswert $\gamma_B = 90^\circ$ einzusetzen. Mit dieser Formel erscheint also wieder die Normalform der Bahnenergie (E_B), wobei diese jedoch hier gleich der Nulllage - Energie (E_0) ist. In der Nulllage ($x = x_0$) gilt also die überraschend einfache Beziehung

$$\underline{E_B = E_0}$$

Demnach stellen sich z und r_B im H_2^+ -Molekül gerade so ein, dass die Bahnwirkung in der Nulllage exakt der Nulllage - Energie (Messwert rd. 15,0 eV) entspricht. Demnach müssen sich an dieser Stelle alle anderen Energien gegenseitig aufheben. Diese Aussage wiederum ist eindeutig durch die in das vg. Rechenschema eingegangenen normierten Formeln belegt, die nachweislich uneingeschränkt gültig sind, da sie sich aus den allgemein bekannten und gültigen Formeln für Ladungskräfte und -energien ergaben. Gerade diese Übereinstimmung mit unserer normierten Form der Bahnenergie ist ein weiteres Argument für die Richtigkeit der zur Bestimmung des Orbitalradius vorgetragenen Ansätze!

10. Zusammenfassung der Ergebnisse für den Bereich des Grundzustandes

Damit haben wir, für den Bereich des Grundzustandes, der in Umgebung des Energie - Minimums vorherrscht, durch begründete physikalische Formeln sowie allein durch die beiden Annahmen „hälftige Ladungsenergie“ und „Überlappungswinkel in der Nulllage gleich 90° bzw. 120° “ die Potenzialkurve zwingend hergeleitet. Es sind sicherlich nicht alle Fragen beantwortet, aber es zeigt das Ergebnis doch die Tragfähigkeit unserer Methode. Vor allem haben wir hiermit erstmals ein physikalisch begründetes Verständnis für die elementaren Zusammenhänge in einem *Molekül* erarbeitet. Demnach setzt sich die Potenzialkurve im Grundbereich aus *vier* unterschiedlich zu begründenden Energieanteilen zusammen, die sich rechnerisch auf drei Terme verdichten lassen. Unsere Betrachtungen liefern, im Gegensatz zur Näherungslösung über die Schrödinger – Gleichung, allerdings (praktisch) *exakte* Werte. Damit sind wir prinzipiell in der Lage, in analoger Vorgehensweise, auch die an diesen Grundbereich angrenzenden Übergangsbereiche oder die im Wasserstoff – Molekül herrschenden Gegebenheiten zu analysieren. Das Wasserstoff – Molekül könnte dahin gehend untersucht werden, ob sich auch hier in der Nulllage alle „übrigen“ Energien gegenseitig aufheben, ob hier die Bahnenergie in der Nulllage Null ist und ob hier die gemessene kleine negative Energie (rd. $-0,3$ eV) einer magnetischen Anziehungsenergie zuzuordnen ist. Auch können die aus der Spektralanalyse des Wasserstoff – Molekül – Ions vorliegenden Messungen aus einer ganz neuen Sicht beurteilt werden oder es kann das zwischen den Elementarteilchen herrschende Kräftegleichgewicht definiert werden. Die Beantwortung all dieser sicherlich sehr interessanten Fragen würde jedoch den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

11. Schlusswort

Wir haben, nun zum Schluss gekommen, die herzliche Bitte um Nachsicht, dass die hier vorgelegte Arbeit unvollständig ist. Die Arbeitskraft eines einzelnen ist naturgemäß zu gering, auf alle Aspekte dieses Themas umfassend eingehen zu können. Zwar erscheinen die hier vorgetragenen Zusammenhänge als naheliegend oder als gar nicht schwierig aufzudecken, so dass manch einer sich im Nachhinein, ob seiner „guten“ Bildung, sogar wundert, dies alles nicht selbst und nicht schon früher erkannt zu haben. Wir wollen aber diesen Zweifeln keine all zu große Bedeutung beimessen, da wir feststellen müssen, dass solche Überlegungen zur Elementarphysik eines Moleküls bislang überhaupt noch nicht angestellt bzw. publiziert wurden, weshalb wir dazu auch keine Literaturquelle angeben können. Nur das Bild 1 stammt aus einer Literaturquelle. Dass dies so ist, hat einen besonderen Grund.

Wir hatten uns mit dem Thema „Elementarbereich Molekül“, als Fortsetzung bzw. Weiterentwicklung unseres Verständnisses über die Existenzweise der klassischen Elementarteilchen, schon eine geraume Zeit beschäftigt. Insbesondere das im Molekül herrschende Kräftegleichgewicht stand im Mittelpunkt unseres Interesses. Allerdings kamen wir im Thema nicht recht weiter und trotz aller Anstrengungen war diese Phase durch Vergeblichkeit der Bemühungen gekennzeichnet. Da eine Lösung sich einfach ergeben wollte, machte sich Resignation breit. Schon hielten wir uns nicht mehr für fähig, das Thema „Molekül“ zu bearbeiten oder war unser Verständnis über das Atom etwa nicht auf ein Molekül übertragbar? Es häuften sich die Gedanken, die Untersuchungen einzustellen. Dann kam in einer der nächtlichen Arbeitssitzungen plötzlich der Gedanke, es mit einem ganz anderen und überhaupt nicht abstrakten Ansatz noch einmal zu versuchen.

Die Idee bestand darin, die Untersuchungen zum Molekül von einer bekannten Datenbasis aus zu beginnen. Als Datenquelle könnte der Verlauf der Potenzialkurve dienen. Es könnte das uns aus der vg. Literaturstelle bekannte Bild eingescannt, vergrößert und mit Hilfe eines Zeichenbretts, über das jeder Ingenieur seit seiner Lehrzeit verfügt, genau vermessen werden. Die so gewonnenen „Messdaten“ würden im Rahmen der Strichstärke der Kurve liegen und könnten dann mit modernen Tabellenkalkulations-Programmen leicht ausgewertet werden. Die Datenaufnahme müsste mindestens so sorgfältig geschehen, dass die wesentlichen Zusammenhänge noch erkennbar blieben. Nachdem die Daten vorlägen, könnte die Abstoßungsenergie, deren Höhe ja zweifellos vom Kernabstand abhängt, abgezogen werden. Der „verbleibende“ Kurvenlauf könnte dann untersucht werden.

Dieser Ansatz war von Anfang an erfolgreich. Trotz aller Sorgfalt unterlief aber bei der Ermittlung der Ladungsenergie, was ja wohl keine besondere Kunst ist, wegen der Anspannung, was für ein

„verbleibender“ Kurvenverlauf sich denn wohl ergeben wird, ein schlichter Rechenfehler. Aufgrund dieses Fehlers wurde in unseren Untersuchungen nur mit halber Ladungsenergie gerechnet. Als dann die in Bild 2 dargestellten wundervoll einfachen Strukturen erstmals als Diagramm vor uns lagen, war die Freude groß und als dann der „Fehler“ bzgl. der Ladungsenergie bemerkt wurde, war das Erstaunen noch größer.

Aus diesen Anfängen wurde dann die hier vorliegende Arbeit systematisch entwickelt. Unseres Erachtens ist es gerade die Einfachheit, die für unsere Methode spricht. Wir hoffen daher, dass sie viele Nachahmer findet, die nicht verächtlich auf die Einfachheit herabschauen, die obige Fragen klären bzw. weiter in den Elementarbereich vorstoßen wollen. Natürlich zählen hierzu auch alle diejenigen, die mit der Schrödinger'schen Wellengleichung vertrauten Umgang haben. Diesen können wir sagen, dass der von uns hier als Bahnenergie (E_B) angegebene Ausdruck genau der sogenannten elektronischen Energie entspricht, die mit dieser Wellengleichung beschrieben werden kann.

Nun, am Schluss angekommen, möchten wir den geneigten Leser noch Anteil an unserer Freude nehmen lassen, eine Freude, die allerdings unserer christlichen Überzeugung entspringt. Sie kommt aus der Gewissheit, dass wir mit dieser Arbeit „durch Inspiration von oben“ gewürdigt wurden, das Prinzip der „Anschaulichkeit der Schöpfung Gottes“ offenkundig machen zu dürfen.