

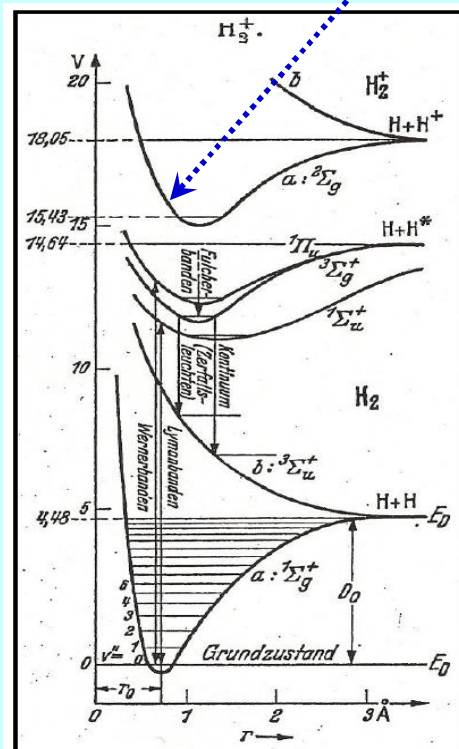
Elementar-physikalische Struktur Wasserstoff-Molekülion (H_2^+)¹⁾

Erklärung des Verlaufs der Gesamtenergie (E_{Ges}) für den $^2\Sigma_g$ – Zustand des H_2 -Moleküls

TEIL 1 Untersuchung des Grundbereichs ²⁾

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

Bearbeiter:
Dipl. Ing. Martin Bock
Diefflen, 28.10.2007

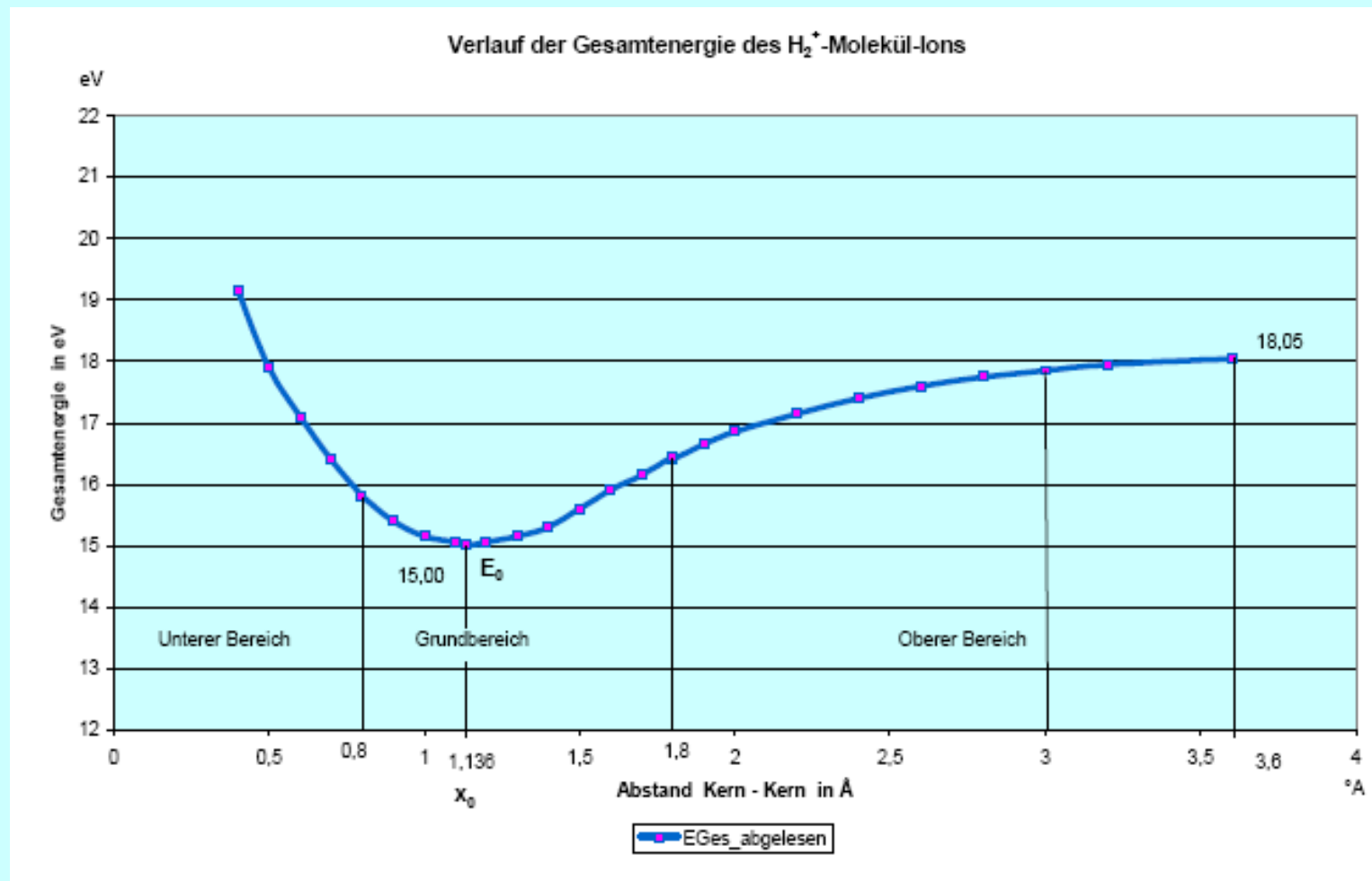


- 1) Gemeint ist das im Innern des angeregten H_2 -Moleküls befindliche H_2^+ -Ion
- 2) Der Grundbereich befindet sich in der Nähe des Energieminimums.

Die vollständige Untersuchung über alle Bereiche ist unter www.physiktheologie.de angegeben.

Vorgehensweise zur Aufnahme der „Messdaten“:
Dieses Bild wurde stark vergrößert, dann die $^2\Sigma_g$ - Kurve sorgfältig ausgemessen und die erzielten „Messwerte“ der hier vorgelegten Untersuchung zugrunde gelegt (s. [Backup-Folie 5](#)).

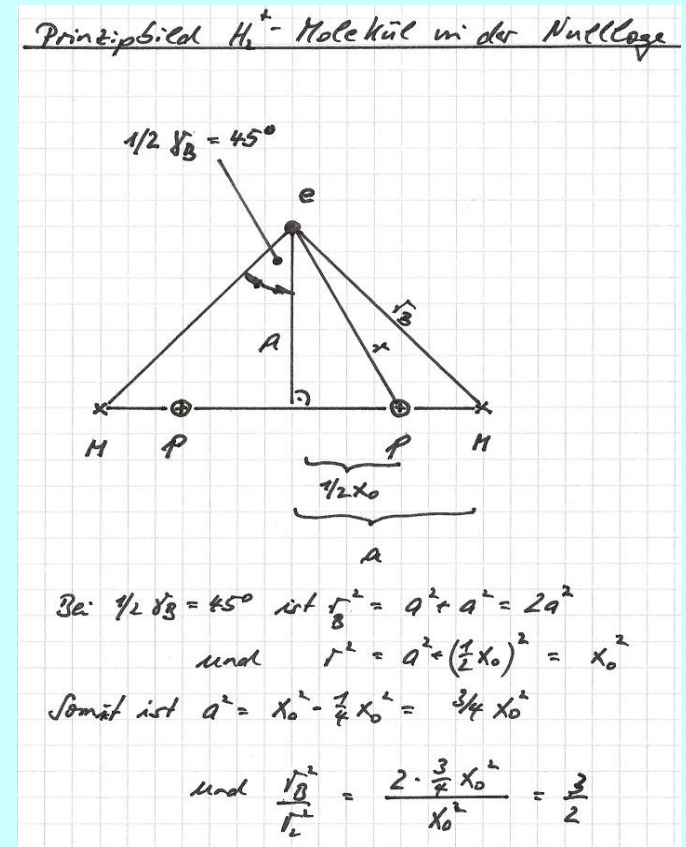
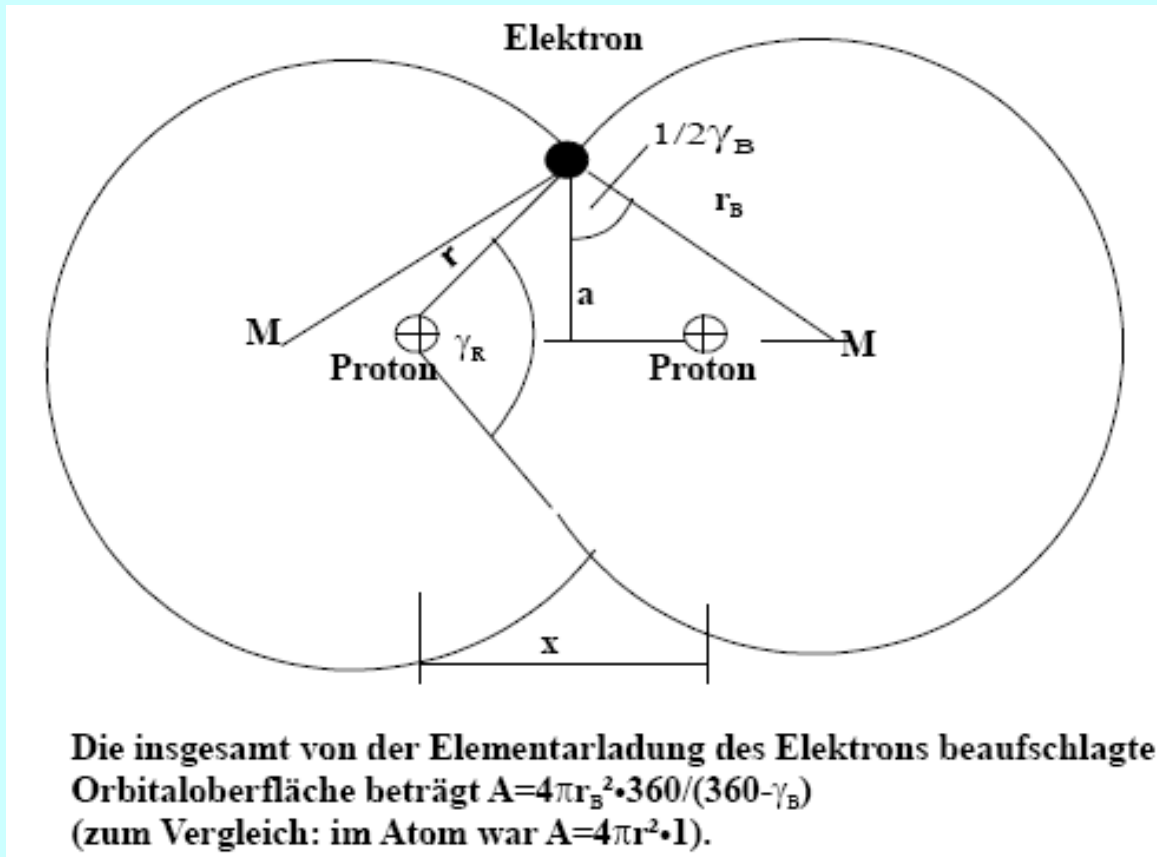
„Messwerte“ und Verlauf der Gesamtenergie (E_{Ges})



x °Å	EGes_gemessen eV
3,6	18,05
3,2	17,95
3	17,85
2,8	17,75
2,6	17,6
2,4	17,4
2,2	17,15
2	16,85
1,9	16,65
1,8	16,45
1,7	16,15
1,6	15,9
1,5	15,6
1,4	15,3
1,3	15,15
1,2	15,05
1,136	15
1,1	15,05
1	15,15
0,9	15,4
0,8	15,8
0,8	15,8
0,7	16,4
0,6	17,1
0,5	17,9
0,4	19,15

Die als „Messwerte“ aufgenommenen Daten und der zugehörige Verlauf der Gesamtenergie sind hier dargestellt. Die Mess-Ungenauigkeit liegt innerhalb der Strichstärke der vergrößerten Kurve und beeinträchtigt nicht die Erkenntnis der strukturellen Zusammenhänge.

Molekül-Geometrie im Grundbereich ($0^\circ \leq \gamma_B \leq 180^\circ$)



Gegenüber dem H-Atom beträgt der **Orbital-Vergrößerungsfaktor** $360/(360-\lambda_B)$. Es ist x der Abstand Kern–Kern, r der Abstand Kern–Elektron und r_B der Bahnradius. r und r_B sind im Grundbereich invariant. Es betragen $r^2 = x_0^2$ und $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$. Es ändert sich nur γ_B mit x und nimmt Werte von 0° bis 180° an. An der Stelle $x = x_0$ ist $\gamma_B = 90^\circ$.

Herleitung Bahnenergie (E_B) und Gesamtenergie (E_{Ges})

Die Gesamtenergie (E_{Ges}) setzt sich aus drei Phänomenen zusammen:

$$(1) \dots E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + E_B(x)$$

1. Kern – Kern 2. Kern – Elektron 3. Bahn-
Abstoßung Anziehung Energie

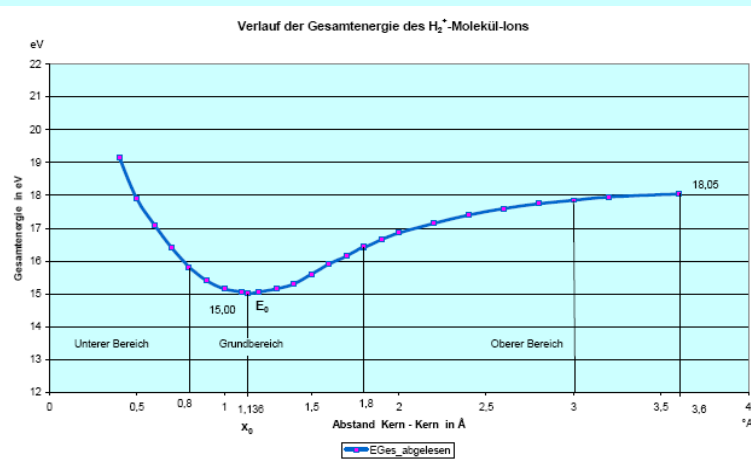
Es bedeuten:

E_{H1} Energie Wasserstoffatom Grundzustand
 r_{H1} Radius Wasserstoffatom Grundzustand

zu E_{H1} und r_{H1} siehe Backup-Folie 4.

Zur Herleitung von 1. und 2. (Ladungsenergien) siehe Backup-Folien 1 und 2.

Zur Herleitung von 3. (Bahnenergie) siehe den nun folgenden Abschnitt.



Aus dem Verlauf der Gesamtenergie ergibt sich:

$$a) \dots E'_{Ges}(x = x_0) = 0$$

$$b) \dots E_{Ges}(x = x_0) = E_0$$

Herleitung Bahnenergie (E_B) und Gesamtenergie (E_{Ges})

Aus Gl. (1) ergibt sich die Ableitung zu: $E'_{Ges}(x) = -\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x^2} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} + E'_B(x)$

Für $x=x_0$ ist $E'_{Ges}=0$ und damit: $E'_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2}$

Durch Integration über x ergibt sich: $E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + C$

$E_B(x)$ eingesetzt in Gl. (1) führt zur Zwischenlösung, C ist die Integrationskonstante

$$E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \cancel{\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2}} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \cancel{\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2}} \cdot x + C$$

Für $x=x_0$ ist $E_{Ges}=E_0$ und damit:

$$C = E_0 - \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

Herleitung Bahnenergie (E_B) und Gesamtenergie (E_{Ges})

Es ergibt sich die Bahnenergie in „mathematischer“ Schreibweise zu:

$$(2)...E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + E_0 - \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

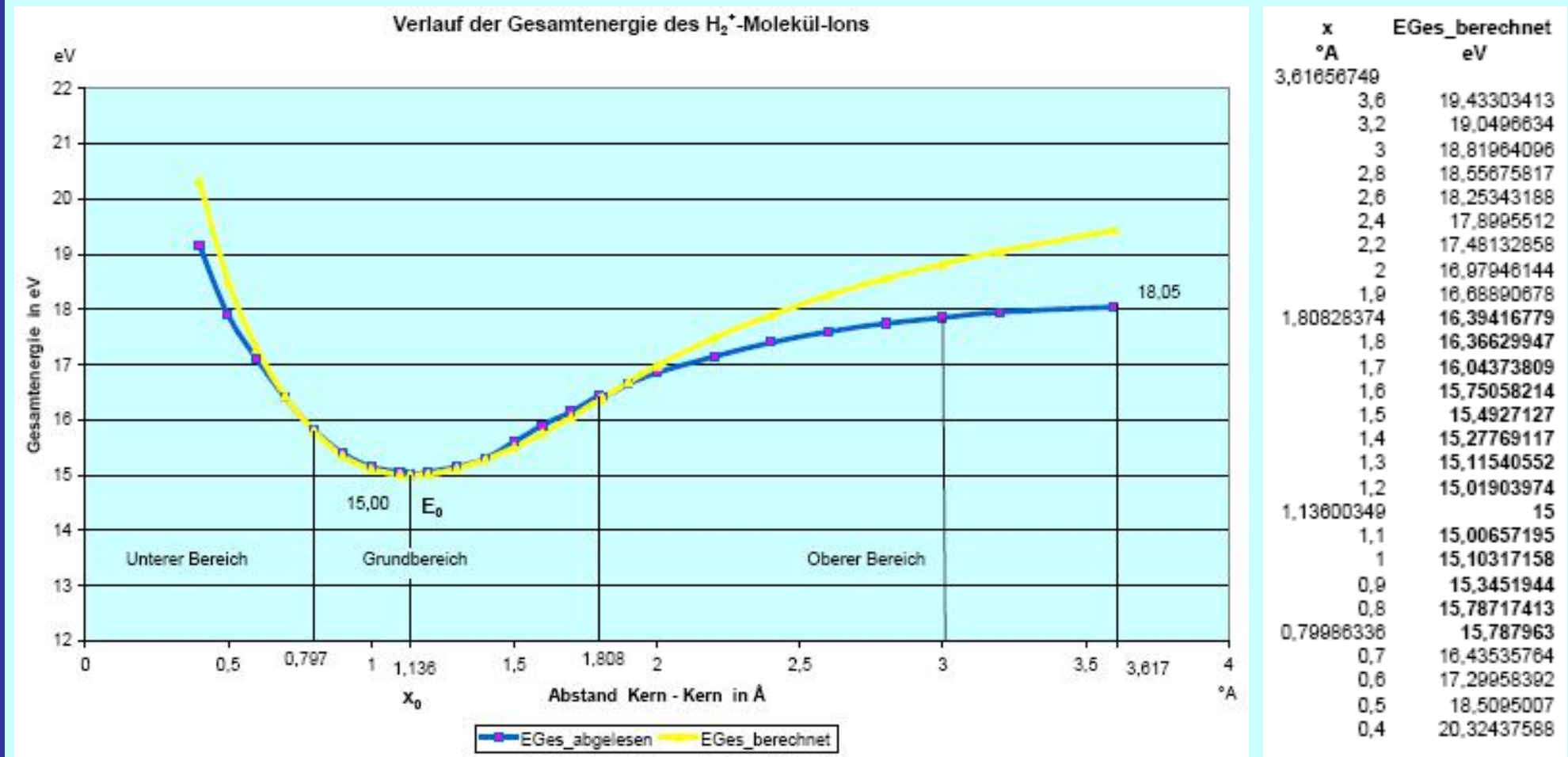
Mit $r^2=x_0^2$ und an der Stelle $x=x_0$ ist $E_B(x=x_0)=E_0$.

Einsetzen von Gl. (2) in Gl. (1) führt zur Gesamtenergie $E_{Ges}(x)$:

$$(3)...E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + E_0 - \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

Gl. (2) und (3) sind nur gültig für den Grundbereich. Es lässt sich nun der Verlauf der Gesamtenergie $E_{Ges}(x)$ berechnen.

Vergleich berechnete Gesamtenergie und „Messwerte“



Fazit:

Die Rechenwerte (gelbe Kurve, fettgedruckte Zahlen) stimmen mit den „Messwerten“ (blaue Kurve) im Grundbereich gut überein.

Bestimmung des Bahnenergie-Vielfachen (z)

Das Bahnenergie-Vielfache der Bahnen des Wasserstoffatoms ist ganzzahlig. Zur Bestimmung des im H_2^+ -Ion herrschenden Vielfachen (z) wird die Bahnenergie (E_B) in „physikalischer“ Schreibweise benötigt. Sie lautet:

$$(4) \dots E_B = \left(\frac{1}{2}\right) \cdot z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

**Vorfaktor ($\frac{1}{2}$)
aus doppelter
Umlaufdauer**

**aus Bahn-
Quanten-
bedingung**

**Orbital-
Faktor**

Mit sehr guter Näherung gilt:

$$E_{H1} \cong E_0 \cdot j^{3/2}$$
$$r_{H1} \cong x_0 \cdot \frac{j}{2}$$

Zur Herleitung von E_{H1} und r_{H1} siehe Backup-Folie 4.

Zur Herleitung von Gl. (4) siehe Backup-Folie 3.

An der Stelle $x=x_0$ ist $\gamma_B=90^\circ$ und ist $E_B=E_0$, s. Gl.(2). Mit $r_B^2=3/2 \cdot x_0^2$ ergibt sich aus Gl. (4) das Bahnenergie-Vielfache (z) explizit zu:

$$(5) \dots z = \frac{9}{j^{7/2}}$$

**z ist invariant gegenüber x-Abstand und nicht ganzzahlig.
Damit ist Gl. (4) vollständig und kann Gl.(2) gegenübergestellt werden.**

Bestimmung der Grenzen des Grundbereichs

Die Bestimmung der oberen und unteren Grenze des Grundbereichs erfolgt durch Gleichsetzen der beiden Gleichungen für die Bahnenergie $E_B(x)$ gemäß Gl. (2) und Gl (4). Es ergibt sich:

$$(6) \dots E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + E_0 - \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} = \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

Mit $r^2 = x_0^2$, $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$, $E_{H1} = E_0 \cdot \varphi^{3/2}$, $r_{H1} = x_0 \cdot \varphi/2$ und mit $x = x_0 + \Delta x$ ergibt sich nach kurzer Rechnung:

$$\Delta x = \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right) \cdot \frac{x_0}{j^{5/2}}$$

Fazit:

Auch die berechneten Grundbereichs-Grenzen stimmen mit den „Messwerten“ sehr genau überein.

Ergebnistabelle:

γ_B	Δx	Δx °A	$x_0 + \Delta x$ °A	E_{Ges} eV
0°	$-\frac{1}{4} \cdot \frac{x_0}{\varphi^{5/2}}$	-0,336	0,800	15,79
90°	0	0,000	1,136	15,00
180°	$+\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{\varphi^{5/2}}$	+0,672	1,808	16,39

Damit bilden die hier getroffenen Ansätze die Struktur des H2+-Molekül zutreffend ab.

Herleitung Energie (E_{ab}) aus **Kern-Kern-Abstoßung**

$$K_{ab} = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \left[\frac{h_s}{l \cdot t} \right] \cdot \frac{1}{j} \cdot \left(\frac{l}{x} \right)^2 \cdot \left(\frac{a^2}{a^2} \right)$$

Mit $h_s = h \cdot \frac{1}{2p} \cdot \frac{j a}{2}$ ergibt sich

$$K_{ab} = h \cdot \left[\frac{1}{t} \cdot \frac{j a^3}{8p} \right] \cdot \left(l \cdot \frac{2}{j a^2} \right) \cdot \frac{1}{x^2}$$

Rydberg-Frequenz, R_t r_{H1}

$$E_{ab} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \int x^{-2} \cdot dx = +\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x}$$

$$E_{ab} = +\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x}$$

Dies ist die 1. Formel in Gl. (1)

K_{ab} Abstoßungskraft im Abstand x

Ausdruck für K_{ab} ist adäquat zu:

$$-\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x^2}$$

Es bedeuten:

$\frac{1}{2}$ Vorfaktor bei K_{ab} wegen Entstehungsfeld

α Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante

h Plank'sches Wirkungsquantum

ϕ Feldsummenfaktor $(1/2 \cdot \pi^2 - 4) = 0,9348022$

λ Elementarlänge: $1,321569 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

$\tau = \lambda/c$ mit c Vakuum-Lichtgeschwindigkeit

r_{H1} Bohr'scher Radius Wasserstoffatom: $0,529 \text{ \AA}$

E_{H1} Energie Wasserstoffatom im Grundzustand: $13,56 \text{ eV}$

x Abstand Kern – Kern

mit $\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}$

Backup-Folie 1

Herleitung Energie (E_{an}) aus **Kern-Elektron-Anziehung**

$$K_{an} = +\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \left[\frac{h_s}{l \cdot t} \right] \cdot \frac{1}{j} \cdot \left(\frac{l}{r} \right)^2 \cdot \left(\frac{a^2}{a^2} \right) \cdot \frac{x}{r}$$

Mit $h_s = \frac{h}{2p} \cdot \frac{j a}{2}$ ergibt sich

$$K_{an} = h \cdot \left[\frac{1}{t} \cdot \frac{j a^3}{8p} \right] \cdot \left(l \cdot \frac{2}{j a^2} \right) \cdot \frac{1}{r^2}$$

Rydberg-Frequenz, R_t

r_{H1}

Zwei Kerne

$$E_{an} = +\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot x \cdot \int r^{-3} \cdot dr = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot x \cdot -\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right)$$

$$E_{ab} = -\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x$$

mit $r_1 = r_2 = r$ Dies ist die 2. Formel in Gl. (1)

K_{an} Anziehungskraft im Abstand r

Ausdruck für K_{ab} ist adäquat zu:

$$+\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \frac{x}{r}$$

Es bedeuten:

$\frac{1}{2}$ Vorfaktor bei K_{ab} wegen Entstehungsfeld

α Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante

h Plank'sches Wirkungsquantum

ϕ Feldsummenfaktor $(1/2 \cdot \pi^2 - 4) = 0,9348022$

λ Elementarlänge: $1,321569 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

$\tau = \lambda/c$ mit c Vakuum-Lichtgeschwindigkeit

r_{H1} Bohr'scher Radius Wasserstoffatom: $0,529 \text{ \AA}$

E_{H1} Energie Wasserstoffatom im Grundzustand: $13,56 \text{ eV}$

x Abstand Kern – Kern

mit $\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}$

Backup-Folie 2

Herleitung Bahnenergie (E_B) in „physikalischer“ Schreibweise

Bahnkraft

bzw.

Bahnenergie

$$K_B = \frac{z \cdot \frac{1}{2} h}{2T_B \cdot r_B}$$

$$E_B = \frac{z \cdot \frac{1}{2} h}{2T_B \cdot r_B} \cdot r_B$$

$$2T_B = 2 \cdot \frac{2\pi r_B}{v_B} = \frac{2\pi r_B}{\frac{1}{2} v_B}$$

$2T_B$ ist die Dauer der Erschließung, da im Entstehungsfeld nur $\frac{1}{2} v_B$ wirkt

$$r_m \cdot \frac{1}{2} c = r_B \cdot \frac{1}{2} v_B = r_{H1} \cdot \frac{1}{2} v_{H1}$$

Bahnquantenbedingung¹⁾

$$r_m = l \cdot \frac{2}{j a} \quad v_B = \frac{h}{m_e \cdot r_B} \quad r_m \text{ Radius „großes“ Elektron}$$

$$K_B = \frac{z \cdot \frac{1}{2} \cdot h}{r_B^3} \cdot \left(l \cdot \frac{2}{j a^2} \right) \cdot \left(r_m \cdot \frac{1}{a} \right) \cdot \left[\frac{1}{t} \cdot \frac{j a^3}{8 p} \right]$$

$r_{H1} \qquad r_{H1} \qquad \text{Rydberg-Frequenz, } R_t$

$\frac{1}{2}$ Vorfaktor bei h wegen Entstehungsfeld

α Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante

h Plank'sches Wirkungsquantum

ϕ Feldsummenfaktor $(1/2 \cdot \pi^2 - 4) = 0,9348022$

λ Elementarlänge: $1,321569 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

$\tau = \lambda/c$ mit c Vakuum-Lichtgeschwindigkeit

r_{H1} Bohr'scher Radius Wasserstoffatom: $0,529 \text{ \AA}$

E_{H1} Energie Wasserstoffatom im Grundzustand: $13,56 \text{ eV}$

z Bahnenergie-Vielaches im Grundzustand ($x=x_0$)

Mit $E_B = K_B \cdot r_B$ (hier kein Intergral über r_B , da K_B kein Potenzialfeld hat) ergibt sich

$$E_B = \frac{1}{2} \cdot z \cdot h \cdot R_t \cdot \frac{r_{H1}^2}{r_B^3} \cdot r_B \quad \text{bzw.}$$

$$E_B = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \quad \text{Teil der Formel in Gl. (4)}$$

$$1) \frac{1}{2} h = m_{\text{Proton}} \cdot \left(l \cdot \frac{1}{2} c \right) = m_{\text{Elektron}} \cdot 2p \cdot \left(r_m \cdot \frac{1}{2} c \right)$$

Backup-Folie 3

Energie (E_0) und Abstand (x_0) im Grundzustand

$$E_0 \cong E_{H1} \cdot \frac{1}{j^{3/2}} = 13,56eV \cdot \frac{1}{0,9038151} = 15,00eV$$

$$x_0 \cong r_{H1} \cdot \frac{2}{j} = 0,529 \text{ \AA} \cdot \frac{2}{0,9348022} = 1,18956 \text{ \AA}$$

Mit $r_{H1} = l \cdot \frac{2}{j a^2}$ ergibt sich

für x_0 der Ausdruck $x_0 = l \cdot \left(\frac{2}{j a}\right)^2$

Es bedeuten:

α Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante

ϕ Feldsummenfaktor ($1/2 \cdot \pi^2 - 4$) = 0,9348022

λ Elementarlänge: $1,321569 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

r_{H1} Bohr'scher Radius Wasserstoffatom: 0,529 \AA

E_{H1} Energie Wasserstoffatom im Grundzustand: 13,56 eV

z Bahnenergie-Vielfaches im Grundzustand ($x=x_0$)

Diese geradezu wundervoll einfache Struktur von x_0 ist ein wichtiger Beleg für die Richtigkeit von $x_0 = r_{H1} \cdot 2/\phi$.

Darüber hinaus hat die Anwendung der vg. sehr genauen „Näherungsformeln“ den unschätzbaren Vorteil, dass die für das einfachste aller Moleküle gesuchten elementaren Strukturen, gerade nicht verdeckt werden! Bedingt durch diesen Ansatz erscheint das Bahnenergie-Vielfache (z) über $E_{H1} \cdot r_{H1}^2$ und über den Faktor $(3/2)^2$, der gem. Gl. (4) aus Orbital-Vergrößerungsfaktor $3/2$ bei $\gamma_B=90^\circ$ und aus $r_B = 3/2 \cdot x_0^2$ stammt, mit dem Ausdruck:

$$z = \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \left(\frac{2}{j}\right)^2 \cdot \left(\frac{3}{2}\right)^2 = \frac{4}{j^{7/2}} \cdot \frac{9}{4} = \frac{9}{j^{7/2}}$$

Backup-Folie 4

Vergrößerte Original-Kurve

