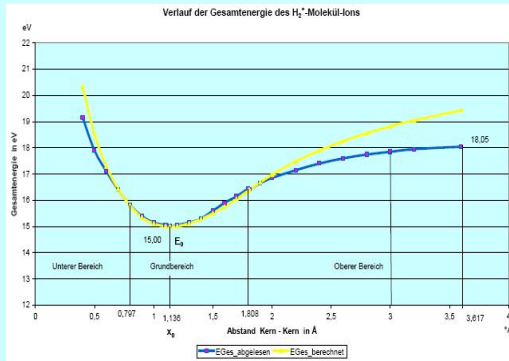


## Elementar-physikalische Struktur Wasserstoff-Molekülon ( $H_2^+$ )

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

#### TEIL 3 Untersuchung des Oberen Bereichs <sup>1)</sup>



- 1) Der Obere Bereich umfasst die  $x$ -Abstände von  $x = x_{max}$  bis  $x = x_{ende}$  mit  $x_{max} = x_0 + 1/2 \cdot x_0 / \varphi^{5/2}$  und  $x_{ende} < 2 \cdot x_{max}$ .

Die vollständige Untersuchung über alle Bereiche ist unter [www.physik-theologie.de](http://www.physik-theologie.de) angegeben.

Die Berechnungsformeln des Grundbereichs (gelbe Kurve) liefern für den Oberen Bereich nicht die „Messwerte“.

**Bearbeiter:**  
Dipl. Ing. Martin Bock  
Diefflen, 28.10.2007

Da mit den Berechnungsformeln des Grundbereichs die „Messwerte“ im Oberen und Unteren Bereich nicht getroffen werden, sind weitergehende Untersuchungen erforderlich.

Teil 3 beschäftigt sich mit dem Oberen Bereich.

## Modifikation des Bahnwirkungs vielfachen (z)

Nach Teil 1, Gl.(6) gilt für die Bahnenergie:

$$(6) \dots E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r_2^2} \cdot x + E_0 - \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} = \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot f_{z2}$$

Im Grundbereich ist die Gleichheit der linken und rechten Seite allein durch die Abhängigkeit des Orbitalwinkels  $\gamma_B$  vom x-Abstand der beiden Kerne gegeben.

Im Oberen Bereich beträgt der Orbitalwinkel konstant  $\gamma_B = 180^\circ$  und das Orbital hat die Gestalt zweier Kugeln. Da Gleichheit zu fordern ist, aber  $\gamma_B$  sich nicht mehr ändern kann und zudem die Energien aus Kern-Kern-Abstoßung und Kern-Elektron-Anziehung eindeutig sind, muss sich das Bahnwirkungs-Vielfache ( $z = 9/\varphi^{7/2}$ ) ändern (einzige sinnvolle Möglichkeit). Daher wird auf der rechten Gleichungsseite der Faktor  $f_{z2}$  eingeführt (im Grundbereich ist  $f_{z0} = 1$ ).

So wie z für den gesamten Grundbereich gilt, so auch  $f_{z2}$ . Mit  $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$  ( $r_B$  ist invariant gegenüber x) sowie mit Kern-Elektron-Abstand von  $r_2(x) = x_0 \cdot x / x_{max}$  (Herleitung von  $r_2(x)$  aus Lauflinienbild, siehe Backup-Folie 1,  $E_{H1}$  und  $r_{H1}$  siehe Teil 1, Backup-Folie 4) ergibt sich:

$$7 \dots f_{z2}(x) = \left(\frac{2}{3}\right) \cdot \left[ \frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0 \cdot x}{r_2^2} \right] \cdot j^{5/2}$$

Verlauf von  $f_{z2}(x)$  s. Backup-Folie 2

Der Geometriefaktor  $f_{z2}(x)$  wirkt auf das Bahnwirkungs vielfache (z) und damit auf die Bahnenergie-Erzeugung.

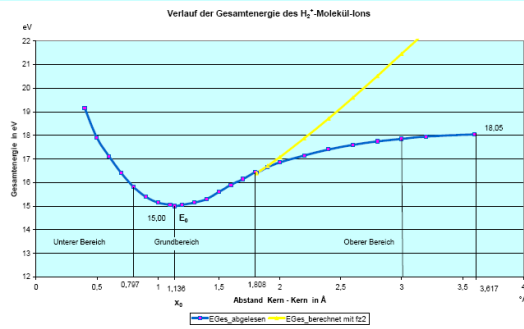
Es wird  $f_{z2}(x)$  über die Formel für den Abstand Kern-Elektron  $r_2(x)$  entscheidend vom Lauflinienbild der Protonen mitbestimmt.

## Geometriefaktor ( $f_{z2}$ ) der Bahnenergie

Einsetzen von Gl. (6) und Gl. (7) in Gl. (1) führt zur Gesamtenergie  $E_{Ges}(x)$ :

$$(8) \dots E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r_2^2} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360-180} \cdot f_{z2}$$

Gl. (8) ist nur gültig für den Oberen Bereich. Es lässt sich nun der Verlauf der Gesamtenergie  $E_{Ges}(x)$  mit Einbezug von  $f_{z2}$  und berechnen, im Grundbereich ist  $f_{z0}=1$ .



x Å	EGes_berechnet eV
3,61656749	
3,6	24,49041516
3,2	22,42594374
3	21,46030182
2,8	20,51608386
2,6	19,59823383
2,4	18,71334374
2,2	17,87040265
2	17,08199526
1,9	16,71362332
1,80828374	16,39416779

**Fazit:**  
Die berechneten Werte weichen auch mit  $f_{z2}$  von den „Messwerten“ ab.

Es muss eine weitere Korrektur bei der Bahnenergie angenommen werden.

Genau genommen weichen die Rechenwerte mit Einbezug von  $f_{z2}$  drastisch stärker von den Messwerten ab, als mit  $f_{z2}=1$ .

Es muss also die Untersuchung weiter geführt werden.

## Bereichfaktor ( $f_{K2}$ ) der Bahnenergie

Diese weitere Korrektur erfolgt durch Einführung des **Bereichfaktors  $f_{K2}$** .  
Damit wird Gl. (8) zu:

$$(9) \dots E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360-0} \cdot f_{z2} \cdot f_{K2}$$

Es lässt sich nun  $f_{K2}$  für jeden  $x$ -Abstand gerade so wählen, dass die „Messwerte“ von  $E_{Ges}(x)$  exakt eingestellt werden. Damit haben wir an dieser Stelle ein mathematisches Verfahren, um den Verlauf der Gesamtenergie im Oberen Bereich zu berechnen.

**Auch die Herleitung von  $f_{K2}(x)$  basiert auf Laufflinien der Protonen, s. Backup-Folie 3.**

Es ergibt sich:

$$(10) \dots f_{K2}(x) = (1-U) \frac{x^3}{x_{max}} \cdot f'_e + (-5+5U) \frac{x^2}{x_{max}} \cdot f'_e + (7-8U)x \cdot f'_e + (3W-2+4U(1-W))$$

mit  $U = \left[ \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left( 1 - \frac{x_0}{x_{max}} \right) \right]$   $f'_e = \frac{W}{(x_{ende} - x_{max})}$  und  $W = \frac{1-Y_{max}}{\frac{1}{2}x_{max}}$

**Gl. (9) und (10) sind nur gültig für den Oberen Bereich. Es lässt sich nun der exakte Verlauf der Gesamtenergie  $E_{Ges}(x)$  mit Einbezug von  $f_{z2}$  und  $f_{K2}$  berechnen.**

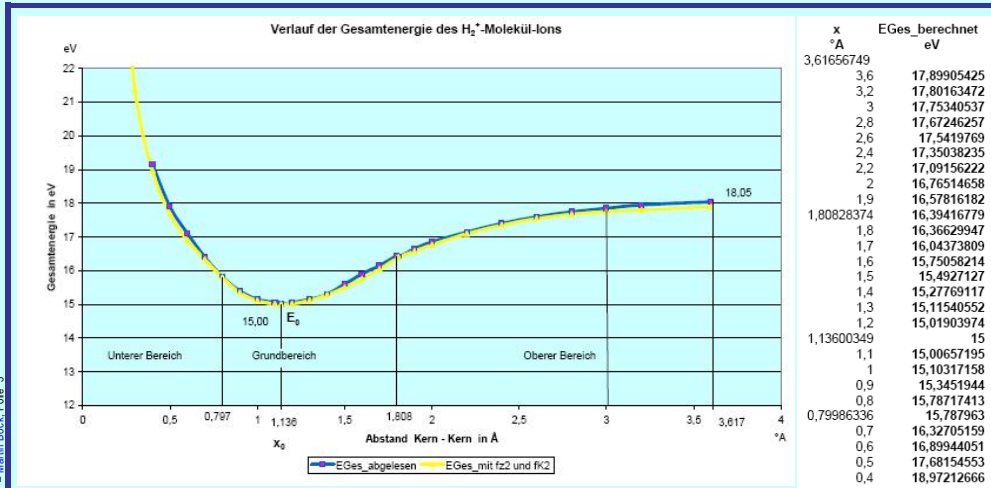
Auch der Geometriefaktor  $f_{K2}(x)$  wirkt auf das Bahnwirkungs Vielfache ( $z$ ) und damit auf die Bahnenergie-Erzeugung.

Auch in der Formel für die Gesamtenergie geht das Laufflinienbild über den Abstand  $r_2(x)$  ein.

Die nach Einbezug von  $f_{z2}(x)$  weiterhin noch erforderliche Angleichung an den Verlauf der „Messwerte“ der Gesamtenergie erfolgt über den Bereichfaktor  $f_{K2}(x)$ . Hier sind über die Definition des des Bereichfaktors (s. Backup-Folie 3) ebenfalls Verhältnisse eingegangen, die sich unmittelbar aus dem Laufflinienbild ergeben.

Das Laufflinienbild ist maßgebend für diese beiden Faktoren.

## Vergleich berechnete Gesamtenergie und „Messwerte“



**Fazit:**

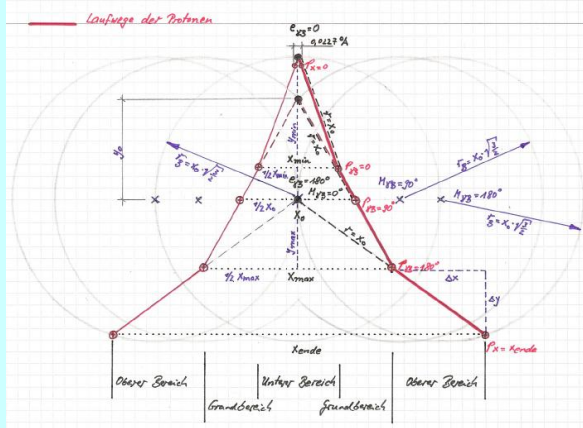
Die Rechenwerte (gelbe Kurve, fettgedruckte Zahlen) stimmen mit den „Messwerten“ (blaue Kurve) im Oberen Bereich gut überein. Dies ist ein Beleg für das Lauflinienbild.

Vortrag 28.10.2007 - Martin Bock, Folie 5

Die Rechnung zeigt eine gute Übereinstimmung mit den „Messwerten“. Dies bedeutet, dass die zugrunde liegenden Strukturen der Realität entsprechen, insbesondere das Lauflinienbild.

## Lauflinienbild der Protonen und des Elektrons

Bei  $\gamma_B=180^\circ$  fallen die beiden Orbitalmittelpunkte (M) auseinander und bilden zwei Vollkugeln. Da an der Stelle  $x=x_{\max}$  der Abstand (r) vom Proton (p) zum Elektron (e)  $r=x_0$  beträgt, befindet sich die Lage der Protonen unterhalb der Achse M - M.



Für  $x_{\max} > x \leq x_{\text{ende}}$  bewegen sich die Protonen auf Lauflinie e-p. Daher ist

$$\frac{r_2(x)}{\frac{1}{2}x} = \frac{r = x_0}{\frac{1}{2}x_{\max}} \quad (\text{Strahlensatz})$$

An der Stelle  $x=x_{\max}$  gilt

$$y_{\max}^2 = x_0^2 - \frac{1}{4} \cdot x_{\max}^2 \quad \text{mit}$$

$$x_{\max} = x_0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{j^{5/2}}$$

Vortrag 28.10.2007 - Martin Bock, Folie 6

Mit guter Näherung gilt:  $y_{\text{ende}} \cong 2 \cdot y_{\max}$  und  $x_{\text{ende}} \cong 2 \cdot x_{\max}$

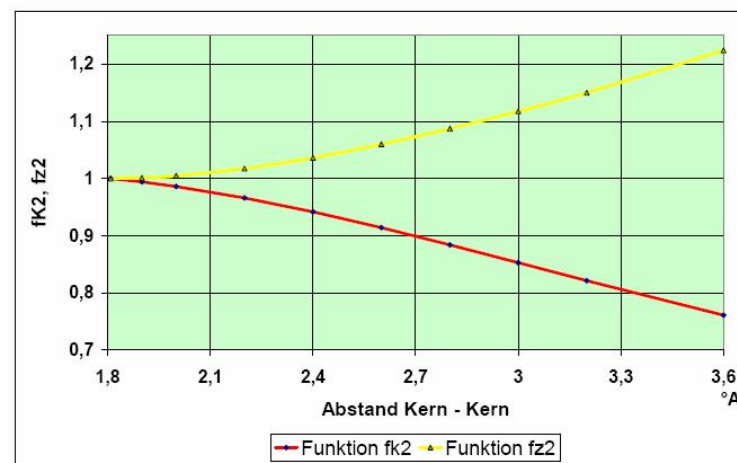
**Backup-Folie 1**

Gemäß diesem Lauflinienbild wandert das Elektron in Abhängigkeit vom x-Abstand der beiden Kerne auf der senkrechten Linie  $e\gamma_B=0^\circ$  bis  $e\gamma_B=180^\circ$ .

Der Laufweg der Protonen ist „rot“ dargestellt.

Das Bild verdeutlicht augenscheinlich den stabilen Existenzbereich des Moleküls.

## Verlauf Geometriefaktor $f_{z2}(x)$ und Bereichfaktor $f_{k2}(x)$



Vortrag 28.10.2007 - Martin Bock, Folie 7

Beide Faktoren wirken unabhängig von einander nur auf die Erzeugung von Bahnenergie ( $E_B$ ) und beeinflussen dadurch auch die Gesamtenergie ( $E_{Ges}$ ). **Backup-Folie 2**

In dieser Untersuchung wurde mit guter Annäherung (Zeichnungsgenauigkeit) angenommen, dass im Kernabstand  $x = x_{ende}$   $r_{2max} = 2 \cdot x_0$  wird. Diese Annahme führt dazu, dass  $x_{ende} = 2 \cdot x_{max} = 3,616 \text{ \AA}$  ist.

Aufgrund dieser Annahme ergibt sich ein Wert für die Gesamtenergie von rd. 17,90 eV anstelle des „Messwertes“ (Ablesewertes) von 18,05 eV.

**Wie eine einfache Kontrollrechnung zeigt, ergibt sich mit dem Ansatz  $x_{ende} = 1,98569433 \cdot x_{max} = 3,59069878 \text{ \AA}$  exakt der zugehörige Ablesewert von 18,05 eV.**

Diese Feinkorrektur kann man wie folgt interpretieren:

Das Molekül stößt bereits „weit“, d. h. hier  $0,0258 \text{ \AA}$ , vor Erreichen des theoretisch größten möglichen  $x$ -Abstandes an seine obere Existenzgrenze. Das Molekülinnere ist in Kugelschalen mit der Schalendicke  $s = 2 \cdot r_m$  gequantelt. Die letzte Kugelschale endet bei  $r_B$ . Das Orbital selbst erstreckt sich von  $r_B \pm r_m$ , ragt also um  $r_m$  aus dem Molekülraum heraus und taucht um  $r_m$  in den Molekülraum ein. Im größten  $x$ -Abstand nähern sich die Protonen von innen kommend dem Orbital bis auf eine Abstandschalendicke. Die 2.letzte Schale bleibt frei, das Orbital selbst ist unerreichbar. Die Protonen befinden sich dabei im  $\lambda$ -Abstand (harte Kugel) zur oberen Grenze der 3.letzten Kugelschale (äußerster Laufweg) und damit im Abstand  $\Delta r$  zu  $r_B$  von:

$$\Delta r = l + 2 \cdot s = l + 4 \cdot r_m = 0,0155 \text{ \AA}$$

Man sieht an diesen Ausführungen, dass auch dieser Feinkorrektur eine nicht zu vernachlässigende physikalische Bedeutung zukommt.

## Physikalische Struktur des Bereichsfaktors ( $f_{K2}$ )

Mit  $f_{K2}=1$  steigt die berechnete Gesamtenergie schneller an, als die „Messwerte“ (s. Folie 3). Der Bereichsfaktor  $f_{K2}(x)$  muss also eine Angleichung bewirken. Dies geschieht durch Reduzierung der Bahnenergie-Erzeugung.

Es ist  $f_{K2}(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$  Lösung ist Folie 4 zu entnehmen, Verlauf s. Backup-Folie 2.

a) ...  $f_{K2}(x = x_{\max}) = 1$

b) ...  $f_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = + \frac{Y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\text{ende}}}$

c) ...  $f'_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = - \frac{1 - \frac{Y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\text{ende}}}}{(x_{\text{ende}} - x_{\max})}$

d) ...  $\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} \cdot x_{\max}} \cdot \frac{1}{\frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}(x_{\max} - x_0)}} = -U$

Beim Übergang vom Grundbereich in den Oberen Bereich treten keine Energiesprünge auf. Der Verlauf der Gesamtenergie ist stetig.

Mit Gl. b) wird ein neuer Parameter eingeführt. Er dient zum Einstellen der Energie (18,05eV). Ein solcher Ansatz ist am unteren Ende des unteren Bereichs ( $x=0$ ) entbehrlich, hier jedoch zu fordern. Dies ist die Ursache des Verlaufs von  $f_{K2}(x)$  als Funktion 3. Ordnung.

Gl. c) ergibt sich direkt aus Gl. a) und b) als Differenz der y-Werte dividiert durch Differenz der x-Werte. Damit bedeutet Gl. c) aus physikalischer Sicht nichts Neues, sondern ist nur mathematische Konsequenz.

Gl. d) zeigt, dass das Gradientenverhältnis von  $f'_{K2}(x)$  an der Stelle  $x_{\max}$  und  $x_{\text{ende}}$  maßgebend ist und dafür ein Ausdruck gilt, der sich unmittelbar einsichtig aus dem Lauflinienbild ergibt. Hinzu kommt der Faktor  $1/j^{5/2}$  zum Ansatz. Diese Struktur war nicht leicht aufzudecken.

Die Ansätze gemäß Gl. b), Gl. c) und Gl. d) zeigen, dass die Bahnenergie-Erzeugung durch den Laufweg der Protonen maßgeblich beeinflusst ist!

Backup-Folie 3

Die Gl. b), c) und d) sind unmittelbar dem Lauflinienbild entnommen und stellen die physikalisch motivierten Ansätze dar. Gl. a) hat eher mathematischen Charakter.

Die Berechnung des Verlaufs der Gesamtenergie mit  $fz2(x)$  und  $fK2(x)$  stimmt sehr genau mit den „Messwerten“ überein. Dies ist ein starker Beleg dafür, dass das Lauflinienbild tatsächlich existiert!

Zudem sind, bis auf den Ansatz eines Gradientenverhältnisses in Gl. d), die übrigen Definitionen des Bereichsfaktors unmittelbar einsichtig, was bedeutet, dass die Struktur des Bereichsfaktors nicht zufällig, sondern systematisch richtig ist.

Die Obere Stabilitätsgrenze des Moleküls liegt an der x-Abstandsstelle vor, an der die Protonen gerade den Orbitalrand erreichen abzüglich  $\Delta r$ .



## Ausblick und Schlusswort

v **Ausblick:**

Das hier dargelegte Verfahren lässt sich auch auf das H<sub>2</sub>-Molekül anwenden. Hierzu muss die Energie aus der Elektron–Elektron–Abstoßung und die mit Vorfaktor  $4\pi\phi\alpha/2$  (anstelle von  $1/2$ ) auftretende kleine **magnetische** Anziehungs-Energie der beiden Elektronen in das Rechenverfahren einbezogen werden.

Als nächstes noch zu lösendes Problem der hier vorgelegten Berechnungsmethode steht die „Klärung der Struktur der zwischen zwei Orbitalen herrschenden Kraft bzw. Energie“ an. Hierzu könnte eine Untersuchung des Lithiumatoms vorgenommen werden, bei dem zwei Orbitale besetzt sind.

v **Schlusswort:**

Alle Erkenntnis des Guten wird vom Dreifaltigen Gott geschenkt. Die Inspiration dazu erfolgt „von oben“ durch den Heiligen Geist. Kein Mensch vermag nämlich aus sich selbst heraus irgend etwas Neues zu erkennen. Es bedarf alles Erkennen der Zulassung Gottes.

Allerdings muss man IHM das Opfer des Bittens und des Dankens darbringen, das Opfer des Bemühens und der Ausdauer und oft auch das Opfer der Vergeblichkeit oder gar des Scheiterns. Alles Zuteilen erfolgt eben nach der Denkweise Gottes und in dessen Zeit.

**Unser Gott, der einzige Gott, den es gibt, der YHShWH (Yeshouah) erwartet uns.  
Beeilen wir uns!**

Damit ist die Untersuchung des einfachsten aller Moleküle abgeschlossen. Es wurde ein neuer Denkansatz zugrunde gelegt.

Quantenmechanik ist dazu nicht erforderlich. Aber die hier gewonnenen Erkenntnisse sollten dahingehend überprüft werden, ob sie in den Ansätzen zur QM Berücksichtigung finden können.