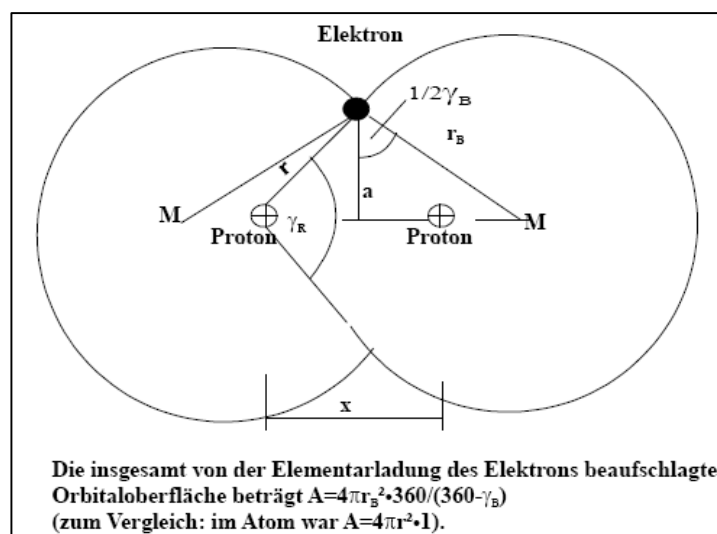


Das Molekülmodell

des

Wasserstoffmolekül – Ions (H_2^+)

Prinzipbild des H_2^+ -Ions in Ruhelage mit $I_B = 90^\circ$



Wird ein H_2 -Molekül das angeregte hinreichend weit sich im Inneren des Moleküls ein H_2^+ -Anregung im $g_B = 180^\circ$ mit zwei einem Punkt Orbitalen vorliegt im inneren H_2^+ -Ion Elektron wirkt allein Das Elektron seiner Orbitale Das angeregte

angeregt und ist Elektron entfernt, so befindet angeregten H_2 -Ion, das infolge der gestreckten Status sich nur noch in berührenden (s. Prinzipbild). Das verbliebene auf zwei Orbitale. verspürt im Innern jeweils einen Kern. äußere Elektron

verhält sich gleichartig zum H-Atom. Das innere H_2^+ -Ion bleibt unangeregt und im Status $g_B = 180^\circ$. Wird das äußere Elektron entfernt, so bleibt ein unangeregtes H_2^+ -Ion in Ruhelage d.h. mit Status $g_B = 90^\circ$ zurück. Dieses Ion hat jedoch im Vergleich zum H_2^+ -Ion, das sich zuvor im

Inneren des angeregten H_2 -Moleküls befand, eine um den linearen Faktor $\frac{1}{\sqrt{c_1}} = \frac{1}{1,043636}$ redu-

zierte Größe. Dies ist deswegen so, weil der Vorgang der Elektron-Abspaltung **im H_2^+ -Ion unter Energieerhaltung** erfolgt, denn es wird ja gerade unterstellt, dass das angeregte Elektron hinreichend weit entfernt sein soll, so dass eben Störungsenergie vernachlässigbar ist. Daher stellt sich als Ruhelageenergie des unangeregten nun aber freien H_2^+ -Ions der (bis auf die vernachlässigbare Störungsenergie $16,394 - 16,334 = 0,06 \text{ eV}$) gleiche Energiewert ein, wie für das gestreckte innere H_2^+ -Ion.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort.....	3
Einleitung.....	4
Literatur.....	6
1. Grundlagen, wichtige Substitutionen.....	7
2. Ansätze zum Molekülmodell	12
2.1. Coulomb-Energie aus elektrischer Abstoßung	12
2.2. Coulomb-Energie aus elektrischer Anziehung.....	13
2.3. Kinetische oder Bahnenergie des Elektrons	14
2.4. Gesamtenergie	18
2.5. Kontrolle der oberen und unteren Grenze im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$	20
3. Anregungszustände.....	24
3.1. Theoretische Grundlagen	24
3.2. Einbezug der Messwerte	26
3.3. Anregung mit Bezug auf Molekülstatus bei $I_B = 90^\circ$	28
3.4. Verlauf der Potenzialkurve des H_2^+ -Ions im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$	32
3.5. Ablauf der Anregung bezogen auf Messwert_Gl.(40):.....	36
3.6. Ablauf der Anregung bezogen auf Messwert_Gl.(39):.....	38
Anhang.....	41

Vorwort

Das hier vorgestellte Molekülmodell zum H_2^+ -Ion liefert Ergebnisse, die mit den Messwerten mit hinreichender Genauigkeit übereinstimmen. So konnte mit Hilfe des Modells der $^2\Sigma_g$ -Anregungszustand des H_2 -Moleküls nachvollzogen werden. Zudem konnte geklärt werden, dass die Messwertformel für die Anregungsspannung Gl.(39) gemäß
$$V = j^{3/2} \cdot \frac{4}{n^2} \cdot E_{H1} - E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2}$$
 dem H_2 -Molekül zuzuordnen ist und die Messwertformel
$$\mathbf{1\ 442\ 44B} \equiv \text{Gl.}(23c)$$

Gl.(40) gemäß
$$V = j^{3/2} \cdot \frac{4}{n^2} \cdot E_{H1} \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$
 dem H_2^+ -Ion. Mit diesen Ergebnissen werden $^1E_{Ges}=16,30\dots eV$

zugleich auch die umfangreichen Vorbereitungen bestätigt.

Mit Hilfe der aus dem Modell gewonnenen Einblicke in die Existenzweise der Elementarteilchen im einfachsten aller Moleküle, besteht die Möglichkeit, die Wellenmechanik des H_2^+ -Ions zu überprüfen und ggf. die in unserem Modell vorgetragenen neuen Ansätze („Halbe Quantenzahlen“, „Vom Kernabstand abhängige Energie aus elektrischer Anziehung zwischen Elektron und Kernen Gl.(17)“, „Lauflinienbild (Anhang)“ und „Exzentrizität der Kerne wie im Prinzipbild“ einzuführen.

Widmung:

Zur Ehre des Sohnes Gottes und den Wissenschaftlern, die nach dem Studium der während der letzten Jahrzehnte entdeckten wunderbaren Gesetze, die die ganze Dynamik des Universums regeln, verstehen, dass solche Gesetze notwendigerweise einen Geist voraussetzen und die wissen, dass dieser Geist, der sie erschaffen hat, kein anderer sein kann, als der Heilige Geist. ⁰⁾

Angaben zum Verfasser

Dipl. Ing. Martin Bock
Düppenweilerstraße 62
66763 Dillingen / Diefflen

Email: martin-bock@t-online.de

Homepage: <http://www.physik-theologie.de>

Diefflen, Ostern 2008

Dipl. Ing. Martin Bock

Verlagsrechte

Alle Rechte vorbehalten.

Einleitung

1. Diese Ausarbeitung schließt die Betrachtungen zum Molekülmodell des H_2^+ -Ions ab.
2. Mit dem Einbezug halber Quantenzahlen wird einem Vorschlag von **K.F.Niessen**³, Utrecht, 1927 gefolgt. Er berechnete eine Ionisationsspannung von 15 eV, bei einem Kernabstand des 2,77-fachen Bohr'schen Radius (r_{H1} im Normalzustand des H-Atoms), mit der ein Wasserstoffmolekül in ein Wasserstoffmolekülion und ein angeregtes Elektron ionisiert wird. Daher und aufgrund der einheitlichen Feldstruktur im Innenraum des Moleküls berechnet sich mit dem hier vorgelegten Molekülmodell die Coulomb-Energien aus Kern-Kern-Abstoßung (im Abstand x) und Elektron-Kern-Anziehung (im Abstand r_1, r_2) mit der Formel

$$V = +\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{x^2}\right) \cdot x - \frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) \cdot x, \text{ s. Gl. (15b) und Gl.(16b).}$$

Es wird gezeigt dass sich mit diesem Ansatz im Kernabstand $x = x_0 = 1,136^\circ A$ die Minimalenergie $E(x = x_0) = E_0 = 15,00 eV \dots b.z.w. \dots 16,334 \dots eV$ einstellt und dass sich nur an dieser Stelle die Anziehungsenergie

$$-\frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) \cdot x$$

gerade aufheben (Stationaritäts-Bedingung). Es gilt dann

$$-\frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) \cdot x_0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x_0} = 0, \text{ womit } r_1 = r_2 = r = x_0 \text{ ist.}$$

Es wird gezeigt, dass bei diesem Kernabstand $x = x_0$ die Minimalenergie allein durch die kinetische Energie V_{Kin} des Elektrons verursacht ist.

Es wird gezeigt, dass beim Elektron-Drehimpuls J wie im H-Atom die Hauptquantenzahl $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ anzusetzen ist, dass zusätzlich das Bahnwirkungs Vielfache $z = \frac{9}{j^{7/2}}$ auftritt und dass wegen des im Vergleich zum H-Atom größeren Molekül-Orbitales ein

Bahnwirkungs Vielfaches in Gestalt des Orbitalfaktors $\frac{360^\circ}{360^\circ - l_B}$ besteht. Es wird also

die **kinetische Energie** mit $V_{kin} = z \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{h^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{r_B^2} \cdot \frac{360^\circ}{360^\circ - g_B}$ berechnet, wobei der

Bahnradius des Elektrons entsprechend der Molekül-Geometrie $r_B^2 = \frac{3}{2} \cdot x_0^2$ beträgt und damit verschieden ist vom Elektronabstand $r_1 = r_2 = x_0$ zum Kern.

3. **K.F.Niessen**³ untersuchte, ob es sich bei dem Zustand mit einer Anregungsspannung (Ionisierungsenergie) des H_2 -Moleküls von 15 eV um ein angeregtes Elektron handelt, das ein H_2^+ -Ion umkreist und berechnete, in welche energieärmeren Konfiguration derart angeregte Wasserstoffmoleküle zurückfallen müssen. Er berechnete die Ionisationsenergie dieser energieärmeren Konfiguration zu 11,4 eV, was den Frequenzen der ultravioletten Lymanbanden entspricht und verweist dazu auf eine Untersuchung von Die-

ke und Hopfield. Schließlich zeigt er auf, dass diese Energie auch von dem im Inneren befindlichen H_2^+ -Ion eines angeregten H_2 -Moleküls abgegeben werden kann, wenn das umkreisende äußere Elektron als nicht störend angenommen wird.

O. Burrau², Kopenhagen, 1926, berechnete den Energiewert für den Normalzustand des H_2^+ -Ions nach der (damals noch recht neuen) Wellenmechanik durch ein Näherungsverfahren und ermittelte als Ionisationsenergie des H_2 -Moleküls den Wert 15,3 eV bei einem Kernabstand vom 1,205-fachen Bohr'schen Radius.

Vor diesem Hintergrund an Erkenntnissen wird die Ionisationsspannung von 15 eV, die im **Taschenbuch für Chemiker und Physiker**⁵ als $^2\Sigma_g$ -Zustand des Wasserstoffmoleküls angegeben ist, wie bei Niessen und Burrau, dem Normalzustand des H_2^+ -Ions zu ($n=1$) zugeordnet. Es errechnet sich ein Kernabstand vom 1,0697-fachen Bohr'schen Radius, was mit den Angaben im vg. Taschenbuch übereinstimmt.

Um beurteilen zu können, wie die Anregungszustände des H_2^+ -Ions mit $n > 1$ die kinetische Energie des Elektrons beeinflussen, werden die Ergebnisse aus unserem Molekülmodell mit den Messwerten für die Anregung von **H.C.Urey**¹, 1926, Baltimore verglichen.

- Die Potenzialkurve des H_2^+ -Ions wird durch Überführung des hier vorgestellten Modells von der Anregungsspannung in die Potenzialenergie des H_2^+ -Ions selbst ermittelt. Dazu wird die zur Ruhelage des unangeregten Grundzustandes H_2^+ -Ions zugehörige Gesamtenergie (Messwert ca. 16,3 eV) eingestellt und nicht mehr die Anregungsspannung (Messwert 15,0 eV), bei der ein H_2 -Molekül in ein inneres H_2^+ -Ion und ein angeregtes Elektron übergeht. Damit das Molekülmodell uneingeschränkt gültig bleibt, wurde der für den Ruhezustand berechnete Kernabstand modifiziert. Es ergibt sich für den Kernabstand das 2,0500-fache des Bohr'schen Radius des H-Atoms, was dem Rechenwert gem. Wellenmechanik von 2,0 Radius-Einheiten genügend nahe kommt. Damit konnten sowohl die Messwerte des Verlaufs der Anregungsspannung für den $^2\Sigma_g$ -Zustand des Wasserstoffmoleküls als auch die Teller'schen Rechenwerte für die Potenzialenergie gem. Wellenmechanik für den Normalzustand ($n=1$) des H_2^+ -Ions im Bereich von $0 \leq g_B \approx 90^\circ$ praktisch exakt nachvollzogen werden.
- Es wurde folgendes herausgefunden: Wird ein H_2 -Molekül angeregt und ist das angeregte Elektron hinreichend weit entfernt, so befindet sich im Inneren des angeregten H_2 -Moleküls ein H_2^+ -Ion, das infolge der Anregung im Status $g_B = 180^\circ$ mit zwei Orbitalen vorliegt. Das dort verbliebene Elektron wirkt allein auf zwei Orbitale. Das Elektron verspürt im Innern seiner Orbitale jeweils einen Kern. Das angeregte äußere Elektron verhält sich gleichartig zum H-Atom. Das innere H_2^+ -Ion bleibt unangeregt und im Status $g_B = 180^\circ$. Wird das äußere Elektron entfernt, so bleibt ein unangeregtes H_2^+ -Ion in Ruhelage, d.h. mit Status $g_B = 90^\circ$ zurück. Dieses Ion hat jedoch im Vergleich zum H_2^+ -Ion, das sich zuvor im Inneren des angeregten H_2 -Moleküls befand, eine um den linearen Faktor $\frac{1}{\sqrt{c_1}} = \frac{1}{1,043636}$ reduzierte Größe. Dies ist deswegen so, weil der Vorgang der Elektron-Abspaltung im **H_2^+ -Ion unter Energieerhaltung** erfolgt, denn es wird ja gerade unterstellt, dass das angeregte Elektron hinreichend weit entfernt sein soll, so dass eben Störungsenergie vernachlässigbar ist. Daher stellt sich als Ruhelageenergie des unangeregten H_2^+ -Ions auch (bis auf die vernachlässigbare Störungsenergie von rd. $16,394 - 16,334 = 0,06 \text{ eV}$) der gleiche Energiewert ein.

Literatur

- 0) Die Menschheit an der Schwelle ihrer Befreiung, Parvis-Verlag, 2.Auflage, Okt. 1992, Seite 291
- 1) The Structure Of The Hydrogen Molecule Ion, **H.C.Urey**, Baltimore, 1926
- 2) Berechnung des Energiewertes des Wasserstoffmolekel-Ions (H_2^+) im Normalzustand, **O.Burrau**, Kopenhagen, 1926
- 3) Über die Ionisierungsspannung im Viellinienspektrum von Wasserstoff, **K.F.Niessen**, Utrecht, 1927
- 4) Über das Wasserstoffmolekülion, **E.Teller**, Leipzig 1937
- 5) **Taschenbuch** für Chemiker und Physiker, 3.Band, Springer-Verlag 1970, Seite 3-228
- 6) Physikbuch Demtröder, Experimentalphysik 3, 3. Auflage, Springer-Verlag
- 7) <http://www.physik-theologie>, s. Downloadbereich: Artikel „Molekül ergänzte Fassung“
- 8) Lauflinienbild, siehe Anhang (vorletzte Seite)

1. Grundlagen, wichtige Substitutionen

Wir beginnen die Überlegungen mit der Herleitung einiger wichtiger Substitutionen mit Bezug auf Energie und Bahnradius des H-Atoms im Normalzustand E_{H1}, r_{H1} .

Es gilt folgender elementarer Zusammenhang:

$$(1) \dots \boxed{h = m_e \cdot c \cdot 2p \cdot r_m} \text{ mit } r_m = l \cdot \frac{2}{j a}$$

Hierbei bedeuten:

h Plank'sches Wirkungsquantum: **6,6260693•10⁻³⁴ Js**

m_e Elektronmasse, total: **9,1093826•10⁻³¹ kg**

r_m Radius des sogen. „großen“ Elektrons

l Elementarlänge, Radius Proton, Radius Elektron: **1,321569•10⁻¹⁵ m**

c Lichtgeschwindigkeit im Vakuum: 299.792.458 m/s

$$c = \frac{l}{t} \quad \text{mit } t \text{ als Elementardauer: } 4,408281 \cdot 10^{-24} \text{ s}$$

$$j = \frac{1}{2} p^2 - 4, \text{ sogen. Feldsummenfaktor aus } \sum_1^{\infty} \left(z + \frac{1}{2} \right)^{-2} \dots \text{mit } z = 1, 2, 3, \dots$$

a Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante: **1/137,035999**

z Anzahl der l – dicken Kugelschalen des Raumes: $z = \infty$

Einsetzen von r_m in Gl.(1) ergibt:

$$(2) \dots \boxed{h = m_e \cdot c \cdot 2p \cdot l \cdot \frac{2}{j a} \cdot \frac{a}{a} = m_e \cdot \underbrace{(c \cdot a)}_{v_{H1}} \cdot 2p \cdot \left(l \cdot \frac{2}{\underbrace{j a^2}_{r_{H1}}} \right)}$$

Hierbei ist

r_{H1} Radius des Elektrons im Normalzustand (n=1) des H-Atoms: **0,529177°A**

v_{H1} Bahn-Geschwindigkeit des Elektrons im Normalzustand des H-Atoms

E_{H1} Betrag der Ionisationsenergie des H-Atoms im Normalzustand: **13,6056 eV**

Somit gilt: $h = m_e \cdot v_{H1} \cdot 2p \cdot r_{H1}$ bzw. $\frac{h}{2p} = m_e \cdot v_{H1} \cdot r_{H1} = \mathbf{h}$ bzw.

$$(3) \dots \boxed{v_{H1} = \frac{\mathbf{h}}{m_e \cdot r_{H1}}}$$

Gl.(3) ist uns als Gl.(38) in QM Teil 3, Seite 21 bereits begegnet. Damit ist die Richtigkeit von Gl.(1) bewiesen.

Quadrieren und Multiplizieren mit $\frac{1}{2}$ ergibt

$$\frac{1}{2} \mathbf{h}^2 = \frac{1}{2} m_e^2 \cdot v_{H1}^2 \cdot r_{H1}^2 \text{ bzw.}$$

$$(4) \dots \boxed{\frac{\mathbf{h}^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{r_{H1}^2} = \frac{1}{2} m_e \cdot v_{H1}^2 = E_{H1}}$$

Der linke Teil dieses Ausdrucks ist uns in QM Teil 3, Seite 22, Gl.(43) bereits begegnet und war gleich E_{H1} . Damit haben wir eine erste wichtige Substitutionsmöglichkeit bestimmt.

Nach QM Teil 3, Seite 22, Gl.(39) gilt für den Normalzustand ($n=1$) des H-Atoms

$$\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = \frac{\mathbf{h}^2}{m_e} \cdot \frac{1}{r_{H1}} \text{ womit}$$

$$(5) \dots \boxed{\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}$$

Nun beziehen wir die Rydberg-Konstante Rt in unsere Überlegungen ein.

$$E = h \cdot Rt$$

$$E = h \cdot \left(\frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot e_0^2 \cdot h^3} \right) = \left(\frac{e^2}{4p \cdot e_0} \right) \cdot \frac{m_e \cdot e^2 \cdot p}{2 \cdot e_0 \cdot h^2}$$

$$E = \left(\frac{\mathbf{h}^2}{m_e} \cdot \frac{1}{r_{H1}} \right) \cdot \frac{m_e \cdot e^2 \cdot p}{2 \cdot e_0 \cdot h^2} = \frac{h^2}{2p \cdot 2p} \cdot \frac{1}{r_{H1}} \cdot \frac{e^2 \cdot p}{2 \cdot e_0 \cdot h^2}$$

$$E = \frac{h^2}{2p \cdot 2p} \cdot \frac{1}{r_{H1}} \cdot \frac{e^2 \cdot p}{2 \cdot e_0 \cdot h^2} = \left(\frac{e^2}{4p \cdot e_0} \right) \cdot \frac{1}{r_{H1}} \cdot \frac{1}{2} = \left(\frac{\mathbf{h}^2}{m_e} \cdot \frac{1}{r_{H1}} \right) \cdot \frac{1}{r_{H1}} \cdot \frac{1}{2}$$

$$E = \left(\frac{\mathbf{h}^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{r_{H1}^2} \right) = E_{H1} \text{ was mit Gl.(3) übereinstimmt. Es ist also}$$

$$(6) \dots \boxed{E_{H1} = h \cdot Rt}$$

Gl.(6) ist an sich nichts Neues, sondern bestätigt lediglich unsere bisherigen Substitutionsregeln. Nun können wir aber eine etwas einfachere Schreibweise für die Rydberg-Frequenz angeben, in dem wir Gl.(4) und Gl.(6) gleichsetzen. Wir erhalten

$$(6a) \dots \boxed{h \cdot Rt = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_{H1}^2 = E_{H1}} \text{ mit } v_{H1} = a \cdot c \text{ nach Gl.(2)}$$

Dieser Ausdruck ergibt sich unmittelbar aus Gl.(1) und Gl.(2), die als **Bahnquantenbedingung** aufzufassen ist. Sie ist von elementarer Bedeutung und allgemein gültig. Es ist

$$(7) \dots \boxed{h = m_e \cdot c \cdot r_m = m_e \cdot v_B \cdot r_B = m_e \cdot v_{H1} \cdot r_{H1}} \text{ Bahnquantenbedingung}$$

So gilt für den Normalzustand des H-Atoms für v bzw. r der Index $H1$ anstelle B ansonsten später für das H_2^+ -Ion eben der allgemeine Index $B = \text{Bahn}$.

Wir schreiben also

$$h \cdot Rt = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot (a^2 \cdot c^2), \text{ erweitern mit } \frac{2j a^3}{2j a^3} \cdot \frac{1}{1} \text{ und nach etwas umordnen}$$

$$h \cdot Rt = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot c^2 \cdot 1 \cdot \frac{2}{j a} \cdot \frac{j a^3}{2} \cdot \frac{1}{1}$$

Mit $c = \frac{l}{t}$ können schreiben

$$h \cdot Rt = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot c \cdot \frac{2}{j a} \cdot \left(\frac{l}{t}\right) \cdot \frac{j a^3}{2} \text{ erweitern mit } \frac{2p}{2p} \text{ ergibt}$$

$$h \cdot Rt = \left(\frac{m_e \cdot c \cdot 2p \cdot 1 \cdot \frac{2}{j a}}{h} \right) \cdot \left[\frac{1 \cdot j a^3}{\frac{t}{8p}} \right]_{Rt}$$

Der Ausdruck in den runden Klammern ist uns in Gl.(1) als h begegnet, folglich muss der Ausdruck in den eckigen Klammer die Rydberg-Frequenz sein. Es ist also:

$$(8) \dots \boxed{Rt = \frac{1 \cdot j a^3}{t \cdot 8p}}$$

Es wird nun noch gezeigt, dass für die Coulombkraft zwei adäquate Schreibweisen existieren, gemäß

$$F_{Coulomb} = \frac{e^2}{4p \cdot e_0 \cdot x^2} = 2 \cdot \frac{h_s}{l \cdot t} \cdot \frac{1}{j} \cdot \frac{l^2}{x^2}$$

Hierbei ist

$$(9) \dots \boxed{h_s = h \cdot \frac{j a}{4p}} \text{ das Elektron-Wirkungsquantum}$$

Man sehe: $h = m \cdot c \cdot l$ mit m als statische Protonmasse. Analog dazu gilt für das Elektron $h_s = m_{es} \cdot c \cdot l$, wobei $m_{es} = m_e \cdot \left(1 - \frac{j a}{2}\right)$ die „statische“ Elektronmasse bedeutet (m_e ohne die Elektron-Magnetfeldmasse). Diese im Prinzip wichtige Feinkorrektur mit Separierung des Magnetfeldmasseanteils wird ab hier außer acht gelassen und weiter gerechnet mit $m_{es} = m_e$.

Somit können wir schreiben:

$$\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot \frac{1}{l \cdot t} \cdot \frac{1}{j} \cdot I^2 \cdot h \cdot \frac{ja}{4p} \quad \text{Erweitern mit } \frac{2a^2}{2a^2} \text{ ergibt}$$

$$(10) \dots \frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot h \cdot I \cdot \frac{2}{r_{H1}} \cdot \frac{1}{Rt} \cdot \frac{ja^3}{4p} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} \quad \text{was mit Gl.(5) und Gl.(6) über-}$$

einstimmt. Damit ist bewiesen, dass zwei adäquate Schreibweisen für die Coulombkraft existieren. Zugleich wurde aber eine Strukturformel für die elektrostatische Feldkonstante gefunden, die sich unmittelbar aus der Formel für die Coulombkraft ergibt. Es ist nämlich

$$(10a) \dots F_{Coulomb} = \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x^2} = 2 \cdot \frac{h_s}{l \cdot t} \cdot \frac{1}{j} \cdot \frac{I^2}{x^2} \quad \text{und wir erhalten}$$

$$(11) \dots \frac{1}{e_0} = 1 \cdot \frac{h_s}{l \cdot t} \cdot \frac{1}{j} \cdot \frac{2p \cdot I^2}{\left(\frac{1}{2}e\right)^2} \quad \text{womit } \underline{\text{halbe}} \text{ Elementarladungen auftreten.}$$

Zum Schluss wird noch der Ausdruck für die **Bahnenergie** $\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B}$ untersucht mit T_B als Umlaufdauer des Elektrons auf beliebigem Bahnradius r_B . Mit

$$(12) \dots T_B = \frac{2p \cdot r_B}{v_B} \quad \text{und der Bahnquantenbedingung aus Gl.(7) mit}$$

$$v_B = \frac{c \cdot r_m}{r_B} \quad \text{bzw.} \quad v_B = \frac{v_{H1} \cdot r_{H1}}{r_B} \quad \text{ergibt sich } T_B = \frac{2p \cdot r_B^2}{v_{H1} \cdot r_{H1}}$$

Damit erhalten wir für die Bahnenergie den Ausdruck:

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} = \frac{1}{2} h \cdot \frac{v_{H1} \cdot r_{H1}}{2p \cdot r_B^2} = \frac{1}{2} \mathbf{h} \cdot \frac{v_{H1} \cdot r_{H1}}{r_B^2}$$

Nach Gl.(1) und Gl.(7) gilt $\frac{h}{2p} = \mathbf{h} = m_e \cdot c \cdot r_m = m_e \cdot v_{H1} \cdot r_{H1}$ und wir erhalten

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} = \frac{1}{2} \cdot \underbrace{(m_e \cdot v_{H1} \cdot r_{H1})}_{=\mathbf{h}} \cdot \frac{v_{H1} \cdot r_{H1}}{r_B^2} = \frac{1}{2} \cdot \underbrace{m_e \cdot v_{H1}^2}_{E_{H1}} \cdot \frac{r_{H1}^2}{r_B^2} \quad \text{bzw.}$$

$$(12a) \dots \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2}$$

Im H-Atom ist im Normalzustand $r_B \equiv r_{H1}$ (eben für v, r bzw. T Index $H1$ anstelle B). Im H-Atom gilt also

$$(13)... \boxed{\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_{H1}} = E_{H1} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_{H1}^2}, \text{ was mit Gl.(6a) \u00fcbereinstimmt.}$$

Damit ist bewiesen, dass der Faktor $\frac{1}{2}$ sich aus der kinetischen Energie $E_{H1} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_{H1}^2$ ergibt, wobei der Faktor $\frac{1}{2}$ der kinetischen Energie aus halben Quantenzahlen $\frac{1}{2}h$ der Bahn-Wirkungserzeugung herr\u00fchrt (siehe Unterlage „Was ist Ladung“, Kapitel „Erschlie\u00dfungs-Wirkung“, Seite 20). Der Ansatz zweifach halbierter (**geviertelter!**) Wirkungserzeugung in Gl.(13) ergibt **halbe Bahnenergie**

$$(13a)... \boxed{\frac{\frac{1}{2} \cdot h}{2 \cdot T_B} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_B^2 \right)} \text{ mit Index } B \cdot \text{anstelle} \cdot H1 \text{ f\u00fcr das } H_2^+ \text{-Ion.}$$

Die vom Elektron im Orbital erzeugte Wirkung (vg. Erschlie\u00dfungs-Wirkung) ist bereits halbiert, daher stammt n\u00e4mlich der Faktor $\frac{1}{2}$ der kinetischen Energie in der runden Klammer von Gl.(13a). Faktor $\frac{1}{2}$ vor der runden Klammer ergibt sich dadurch, dass sich das eine Elektron auf zwei Orbitale h\u00e4ftig aufteilt. In Folge dieser Aufteilung erbringt es in jedem der beiden Orbitale des H_2^+ -Ions anstelle ganzer nur noch halbierte Umlaufgeschwindigkeit und daher nur halbierte Erzeugung von Bahn-Wirkungsquanten, wie in den Erl\u00e4uterungen zu Gl.(20), S.15/16 dargelegt. Diese weitere Halbierung f\u00fchrt dann zu Faktor $\frac{1}{4}$ in Gl.(13a). Dennoch gilt Gl.(13a) auch f\u00fcr den Fall, dass das H_2^+ -Ion mit nur einem Orbital vorliegt ($g_B = 0^\circ$), denn es bleibt dieser Faktor erhalten, wie die Rechnungen in der Unterlage „Molek\u00fcl_erg\u00e4nzt“ zeigen. Es wird in diesem Molek\u00fclstatus ($g_B = 0^\circ$) die halbe Bahnenergie-Erzeugung (mit geviertelten Quanten) über den Orbitalfaktor $f_{gB} = 1$ beibehalten bzw. im Status $g_B = 180^\circ$, das ist der Fall, dass das H_2^+ -Ion mit zwei vollst\u00e4ndigen Orbitalen vorliegt, wg. $f_{gB} = 2$, verdoppelt, was zu Gl.(13) mit ganzer Bahnenergie-Erzeugung (bei halben Quanten) entspricht.

Division von Gl.(13) durch r_{H1} ergibt die „**ganze**“ (wegen nur halbierter Quantenzahlen nicht halbierte) **Bahnkraft** (Zentrifugalkraft) im H-Atom gem\u00e4\u00df:

$$(13b)... \boxed{\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_{H1} \cdot r_{H1}} = \frac{E_{H1}}{r_{H1}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{m_e \cdot v_{H1}^2}{r_{H1}} = F_{Zentr}} \text{ bzw. aus Gl.(12a)}$$

$$(13c)... \boxed{\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B \cdot r_B} = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^3}} \text{ mit Index } B \cdot \text{anstelle} \cdot H1 \text{ f\u00fcr das } H_2^+ \text{-Ion.}$$

Damit k\u00f6nnen wir folgende Substitutionsregeln festhalten:

$$(14)... \boxed{\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot h \cdot \frac{j a^3}{Rt} \cdot l \cdot \frac{2}{r_{H1}^2} = 2 \cdot h \cdot Rt \cdot r_{H1} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} = \frac{h^2}{m_e} \cdot \frac{1}{r_{H1}}}$$

Hierbei ist nach Gl.(3) $v_{H1} = \frac{h}{m_e \cdot r_{H1}}$ und nach Gl.(4) $E_{H1} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_{H1}^2$.

Mit Hilfe der vg. Substitutionsregeln sind wir in der Lage mit einfach strukturierten und zugleich hoch genauen Ausdr\u00fccken zu arbeiten.

2. Ansätze zum Molekülmodell

2.1. Coulomb-Energie aus elektrischer Abstoßung

Wir wenden uns zuerst der elektrischen Abstoßung zu. Im H-Atom trat dieses Phänomen nicht auf. Es wird durch die Anwesenheit eines zweiten einfach positiv geladenen Protons hervorgerufen. Analog zu QM Teil 3, Seite 20, Gl.(34) ergibt sich

$$(15) \dots \boxed{F_{Kern-Kern} = -\frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x^2} \cdot \frac{\mathbf{r}}{x}}$$

Hierbei ist x der Abstand der beiden Teilchen (Kerne). Da $\overset{\cdot}{F}$ aus QM Teil 3, Seite 20, Gl.(34) gewonnen wurde und dort dieser Ausdruck als Anziehungskraft positives Vorzeichen hatte, wird hier negatives Vorzeichen angesetzt.

Damit bewegen wir uns noch auf dem Boden der allgemeinen Lehre, der nun aber verlassen und K. F. Niessen folgend, mit halben Quantenzahlen weitergerechnet wird. Nur mit diesem Ansatz werden die Messwerte des Energieverlaufs für den $^2\Sigma_g$ -Zustandes des Wasserstoffmoleküls getroffen. Es wird also angesetzt

$$(15a) \dots \boxed{F_{Kern-Kern} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x^2} \cdot \frac{\mathbf{r}}{x}}$$

Es ist dann das elektrostatische Potenzial

$$V_{Kern-Kern} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \int x^{-2} \cdot dx = -\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot (-1) \cdot \frac{1}{x} \text{ bzw.}$$

$$(15b) \dots \boxed{V_{Kern-Kern} = +\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{x}}$$

Mit Hilfe von Gl.(14) substituieren wir $\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}$ und erhalten

$$(15c) \dots \boxed{V_{Kern-Kern} = \frac{1}{2} \cdot \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x}}$$

Das Auftreten häftiger Quantenzahlen bedeutet mit Bezug auf Gl.(10a), dass jede der l -dicken Kugelschalen des vom Orbital umschlossenen Innenraums des Moleküls nur mit halben Wirkungsquanten $\left(\frac{1}{2} h_s\right)$ beaufschlagt ist s. Gl. (10a). Dem-

nach handelt es sich hierbei um einen sogen. „**Entstehungsraum**“. Das ist der Raum, der das Phänomen der Wirkung (hier $1h_s$) innerhalb der Zeit von einer Elementardauer $1t$ „gleichsam wie von selbst“ von null auf eins erst ins Dasein bringt, womit im Mittel dieser Elementardauer in diesem speziellen Raum eben nur häftige Wirkung wirksam ist. Setzt jedoch diese Erzeugung durch den „Schöpfer-Gott“ auch nur ein einziges Mal aus, so endet schlagartig die Existenz des Phänomens der Wirkungs- und Zeit-Erzeugung, so endet schlagartig von innen heraus auch die Existenz des gesamten Weltalls in diesem dann letzten „Augenblick“ allen physikalischen Seins. Der Schöpfer-Gott hat so zu sagen den letzten Augenblick in Ewigkeit angehalten.

2.2. Coulomb-Energie aus elektrischer Anziehung

In QM Teil 3, Seite 20, Gl.(36) ergab sich die elektrische Anziehungskraft zwischen einem Elektron und einem einfach positiv geladenen Proton (Kern) zu

$$(16) \dots \boxed{\vec{F}_{\text{Elektron-Kern}} = + \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \vec{r}}$$

Es ist jedoch zu beachten, dass die Feldstruktur des elektrostatischen Potentials durch die Anwesenheit zweier Kerne bereits festgelegt ist! Es treten auch hier half-tige Quantenzahlen auf, aber da es sich um das identisch gleiche elektrische Feld handelt, **mussen wir den Ausdruck zudem noch mit „(x/r)“ erweitern**. Somit ist

$$(16a) \dots \boxed{\vec{F}_{\text{Elektron-Kern}} = + \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot \left(\frac{x}{r}\right) \cdot \vec{r}}$$

Fur $r \equiv x$ ergibt sich wieder Gl.(15a), was ja auch bis auf das Vorzeichen so sein muss. Um die Coulomb-Energie zu ermitteln muss hier uber r integriert werden.

$$V_{\text{Elektron-Kern}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot x \cdot \int r^{-3} \cdot dr = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot x \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot r^{-2} = -\frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{x}{r^2}$$

Beachte: Im H-Atom ist die Struktur des elektrischen Feldes allein durch die Elektron-Kern-Anziehung also durch $x \equiv r$ bestimmt. Daher ist obiger Ansatz im H-Atom nicht moglich.

Da zwei Kerne existieren addieren sich die Krafte und es wird weiter gerechnet mit

$$(16b) \dots \boxed{V_{\text{Elektron-Kern}} = -\frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) \cdot x} \text{ mit } r_1, r_2 \text{ als Elektronabstand}$$

vom jeweiligen Kern. Zum Vergleich: Allgemeiner Konsens ist der Ansatz

$$V_{\text{Elektron-Kern}} = -1 \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) \text{ (s. Physikbuch, Demtroder}^6, \text{ Bd.3, S. 281,}$$

Gl.9.6.a). Mit dieser ublichen Formel und bei $r_1 = r_2 = r$ ergibt sich

$$V_{\text{Elektron-Kern}} = -\frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r}\right) \text{ bzw. } V_{\text{Elektron-Kern}} = -\frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{2}{r}.$$

Damit unterscheidet sich unser Ansatz in Gl.(16b) ganz erheblich von dem heute ublichen. Nur an der Stelle $x = r$ wird die Form zwar gleich aber unser Ausdruck liefert dort nur $\frac{1}{4}$ so groe Werte. **In soweit wird behauptet, dass der Ansatz der Atomphysik bzgl. der Coulomb-Energien im Inneren eines Atoms oder**

Molekuls seit jeher falsch ist! Wir substituieren $\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}$ und erhalten mit $r_1 = r_2 = r$ (wg. Symmetrie)

$$(17) \dots \boxed{V_{\text{Elektron-Kern}} = -\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot x}$$

Der Vergleich mit Gl.(15) zeigt, dass sich die beiden elektrostatischen Potentiale gerade aufheben, wenn $r = x$ ist. Es wird im Kapitel 2.4 „Gesamtenergie“ gezeigt, dass diese Stationaritatsbedingung nur an der Abstandsstelle

$x = x_0 = 1,136^\circ A = x_0^1$ (Index „1“ hoch gesetzt bedeutet Zustand $n=1$ also Normalzustand) mit dem Energie-Minimum $E = E_0 = 15eV$ gilt und nicht über alle x -Abstände, was wohlmöglich K. F. Niessen seinerzeit annahm. **Damit wird schon jetzt deutlich, dass aufgrund dieser Stationaritätsbedingung die Anregungszustände „n“ nur an der Abstandsstelle $x = x_0^n$ (Ruhelage) zu untersuchen sind.**

An dieser Abstandsstelle wird die Gesamtenergie (gemeint ist die Ionisationsenergie) allein gegeben durch ein Phänomen, das von Nils Bohr als kinetische Energie aufgefasst wurde. Es wird diese Energie als Bahnenergie des Elektrons bezeichnet und gelegentlich auch von Bahnenergie-Erzeugung gesprochen. Es werden die Entstehungsmechanismen aufgezeigt, die sich hinter diesem Phänomen verbergen. Es birgt gerade die Bahnenergie immer noch viele Geheimnisse in der an sich „einfachen“ Welt der Elementarteilchen. **Da –wie hier gezeigt wird- die Messwerte mit hinreichender Genauigkeit nachvollzogen werden können, ist der Ansatz in Gl.(16a) gerechtfertigt (mit dem üblichen Ansatz ist dies nicht möglich)!**

2.3. Kinetische oder Bahnenergie des Elektrons

Bei der Herleitung der kinetischen Energie wird auch hier der gleiche Weg beschritten wie beim H-Atom, s. QM, Teil 2, Seite 35, Gl.(69) und QM Teil 3, Seite 21, Gl.(37) und Gl.(37a). Dort war der Drehimpuls J eines Teilchens mit der Masse m_e und der Geschwindigkeit v_B auf einer Kreisbahn mit Bahnradius r_B : $J = m_e \cdot v_B \cdot r_B$ wobei $J = n \cdot \hbar$ mit $n = 1,2,3,4, \dots$ (Es wird damit die Hauptquantenzahl „n“ so eingeführt, wie beim H-Atom.)

Es wird nun hier mit halbiertes Bahn-Wirkungserzeugung also geviertelten Quantenzahlen gerechnet! Auf das Teilchen wirkt dann nach Gl.(13a) nur die

halbe Zentrifugalkraft mit $F_{Zentr} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{m_e \cdot v_B^2}{r_B} \right)$. Im H_2^+ -Molekül bewegt sich

das Elektron im elektrostatischen Potenzial zweier Protonen mit jeweils $1 \cdot e$ (im Unterschied zu einem Kern aus z -fach Protonen mit $z \cdot e$ Elementarladung). Es wird als Abstandsquadrat der Anziehungskraft aus Gl.(16b) mit $r_1 = r_2 = r$ der Ausdruck $\frac{1}{4} \cdot \frac{2}{r^2} \cdot \frac{x}{r}$

mit $x = r$ angesetzt (**nur Stelle der Ruhelage wird für die Anregungszustände untersucht, s o.**), also ebenfalls mit halber Anziehungskraft bzw. halben Quantenzahlen gerechnet.

Analog zu QM Teil 3, Gl.(34) bzw. zu Gl.(16b) ergibt das Kräfte-Gleichgewicht:

$$(18) \dots \boxed{\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{r^2} = \frac{1}{4} \cdot \frac{m_e \cdot v_B^2}{r_B}} \text{ mit } v_B = \frac{n \cdot \hbar}{m_e \cdot r_B} \text{ aus QM Teil 3, Gl.(38).}$$

$$\text{Einsetzen führt zu } 1 \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{r^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{m_e}{r_B} \cdot \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m_e^2 \cdot r_B^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{m_e \cdot r_B^3}.$$

Damit erscheint das Quadrat der Hauptquantenzahl. Im H-Atom war der Bahnradius r_B des Elektrons gleich dem Abstand r Elektron-Kern, weil sich der Kern im Mittelpunkt der Bahn befindet. Im H_2^+ -Ion ist dies nicht mehr so.

Es wird daher r_B als eigenständiger Parameter eingeführt und wir erhalten:

~~64748~~

$$\frac{r_B^3}{r^2} = \frac{1}{2} \cdot n^2 \cdot \frac{4p \cdot e_0}{e^2} \cdot \frac{h^2}{m_e} = \frac{1}{2} \cdot n^2 \cdot r_{H1} \quad \text{und daraus (19)...} \quad \boxed{\frac{r_B^3}{r^2} = \frac{1}{2} \cdot n^2 \cdot r_{H1}}$$

Es wird weiterhin analog zum H-Atom vorgegangen, jedoch werden wiederum geviertelte Quantenzahlen angesetzt und mit der kinetischen Energie aus Gl.(13a)

gerechnet gemäß $E_{Kin} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_B^2$. Erweitern mit $\frac{r_B}{r_B}$ führt dann zu

$$E_{Kin} = \left(\frac{1}{4} \cdot m_e \cdot \frac{v_B^2}{r_B} \right) \cdot r_B, \quad \text{was nach Gl.(18) } E_{Kin} = \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{r^2} \right) \cdot r_B \quad \text{ergibt, wo-}$$

bei $r^2 = 2 \cdot \frac{r_B^3}{n^2 \cdot r_{H1}}$ aus Gl.(19) stammt.

$$\text{Einsetzen ergibt } E_{Kin} = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{1}{2 \cdot \frac{r_B^3}{n^2 \cdot r_{H1}}} \cdot r_B = \frac{1}{4} \cdot \frac{e^2}{4p \cdot e_0} \cdot \frac{n^2 \cdot r_{H1}}{r_B^2}.$$

Wir substituieren $\frac{e^2}{4p \cdot e_0} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}$ und erhalten $E_{Kin} = \frac{1}{4} \cdot 2 \cdot \frac{n^2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2}$ bzw.

$$(20) \dots \boxed{E_{Kin} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \right) \cdot n^2} \quad \text{mit Ansatz geviertelter Quantenzahlen über Gl.(13a).}$$

Was den Ausdruck in der runden Klammer von Gl.(20) angeht, ist auf Gl.(12a) zu

verweisen. Dort war $\frac{\frac{1}{2}h}{T_B} = 1 \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2}$. Nehmen wir den Vorfaktor $\frac{1}{2}$ mit hinzu,

so ergibt sich $\frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\frac{1}{2}h}{T_B}$. Damit erhalten wir den Ausdruck $\frac{\frac{1}{2}h}{2T_B}$, wo-

mit halbe Quantenzahlen und zugleich doppelte Umlaufdauer auftritt. Die Ursache dieser doppelten Umlaufdauer ist sofort einzusehen, wenn wir Gl.(7) mit $\mathbf{h} = m_e \cdot c \cdot r_m = m_e \cdot v_B \cdot r_B$ betrachten. Dazu multiplizieren wir beide Seiten mit $\frac{1}{2}$

und erhalten $\frac{1}{2}\mathbf{h} = m_e \cdot \frac{1}{2}c \cdot r_m = m_e \cdot \frac{1}{2}v_B \cdot r_B$, was nichts anderes bedeutet, als

dass halbe Quantenzahlen durch halbe Bahngeschwindigkeit bewirkt werden. Halbe Bahngeschwindigkeit erhalten wir aber auch direkt aus Gl.(12) gemäß

$T_B = \frac{2p \cdot r_B}{v_B}$ durch Multiplizieren beider Gleichungsseiten mit 2, womit sich die

doppelte Umlaufdauer $2T_B = \frac{2p \cdot r_B}{v_B} \cdot 2$ bzw. $2T_B = \frac{2p \cdot r_B}{\frac{1}{2}v_B}$ ergibt.

Wenn wir also halbe Quantenzahlen $\frac{1}{2}h$ verwenden, so ist dies nur mit hal-

ber Bahngeschwindigkeit $\frac{1}{2}v_B$ darzustellen. Dies wiederum führt wegen der

Bahnquantenbedingung $c \cdot r_m = v_B \cdot r_B = const$ zu doppelter Umlaufdauer. Dieses Verhalten ist elementare Grundlage der Entstehung und Erhaltung des Phänomens der Bahn-Wirkungserzeugung, die als „Orbital“ aufgefasst werden kann.

Nur der Rechenweg mit doppelter Umlaufdauer ist der richtige. Falsch wäre es

$v_B = \frac{v_{H1} \cdot r_{H1}}{r_B}$ aus Gl.(7) hälftig in $E_{Kin} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_B^2$ einzusetzen, weil sich dann

$$E_{Kin} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_{H1}^2 \cdot \frac{r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{4} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \text{ ergäbe. Falsch deswegen, weil}$$

dann die Bahnquantenbedingung nach Gl.(7) nicht eingehalten ist.

Damit wurden die Ergebnisse aus den Untersuchungen am H-Atom berücksichtigt.

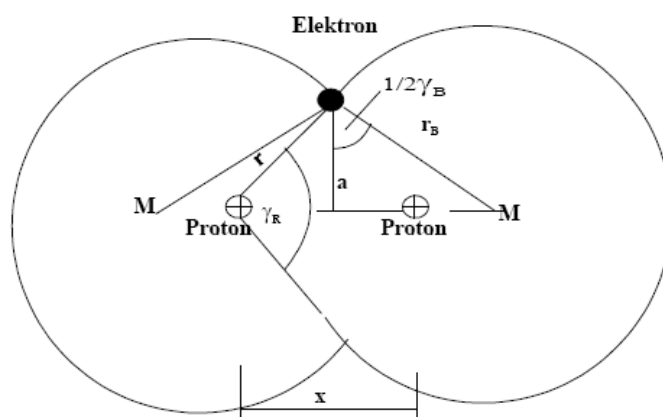
Nach Gl.(14) gilt $E_{H1} \cdot r_{H1}^2 = \frac{h^2}{2m_e}$ und somit können wir Gl.(20) auch schreiben

als $E_{Kin} = \frac{1}{2} \cdot \frac{h^2}{2m_e} \cdot \frac{1}{r_B^2} \cdot n^2$, was sich –bis auf Vorfaktor $\frac{1}{2}$ - in QM Teil 2, Seite 68,

Gl.(114) als Rotationsenergie des Elektrons auf Grundbahn im Normalzustand des H-Atoms ergeben hat.

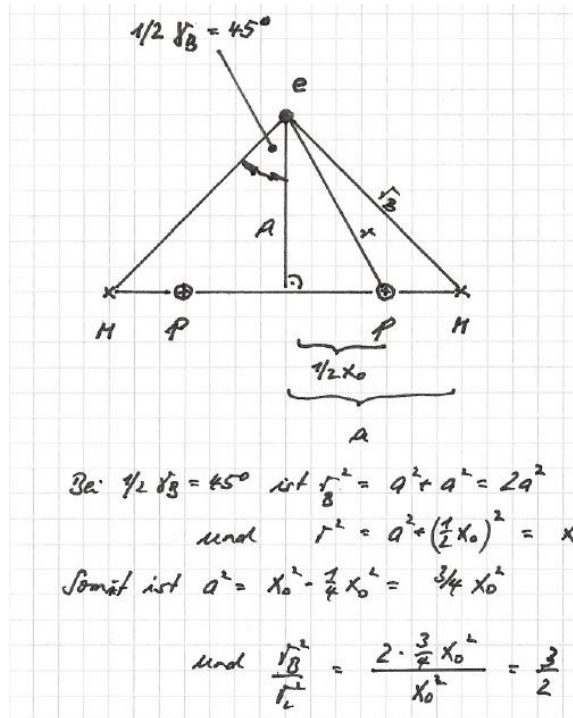
Während die Ganzzahligkeit des Drehimpulses J wesentliches Kennzeichen des H-Atoms war, ist dies beim H_2^+ -Ion an dieser Stelle nicht sicher. Daher verallgemeinern wir Gl.(20) und führen zusätzlich das Bahnwirkungs Vielfache (z) ein.

Nun wird noch die zum H-Atom unterschiedliche Orbitalform berücksichtigt. Dazu wird folgende Geometrie zugrundegelegt:



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

Aus Geometriegründen gilt:



Aufgrund des im Vergleich zum H-Atom größeren Gesamt-Orbitals vergrößert sich die Bahnwirkungserzeugung. Dem entsprechend wird der Orbitalfaktor $\frac{360}{360-g_B}$ einführt: Wenn $g_B = 0^\circ$ liegt nur ein Orbital vor, wie beim H-Atom. Bei $g_B = 180^\circ$ liegen zwei Orbitale vor, die sich gerade noch berühren. Damit erhalten wir für die kinetische Energie den Ausdruck

$$(21) \dots E_{Kin} = z \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \right) \cdot \frac{360}{360-g_B} \cdot n^2 \quad \text{Ansatz geviertelter Quantenzahlen ü. Gl.(13a).}$$

Weil das Feld der Bahnenergie sich nicht wie das radial auslaufende Potenzialfeld der Coulombkräfte verhält, sondern umlaufartig in sich geschlossen ist, ergibt sich die Bahnkraft auch nicht aus Differentiation der Bahnenergie in Gl.(21) nach r_B , sondern -wie die Herleitung von Gl.(20) zeigte- einfach aus Division von Gl.(12a)

mit $\frac{1}{2} \frac{h}{T_B} = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} = E_B$ durch r_B . Wir erhalten hieraus die „ganze“ (wegen halber

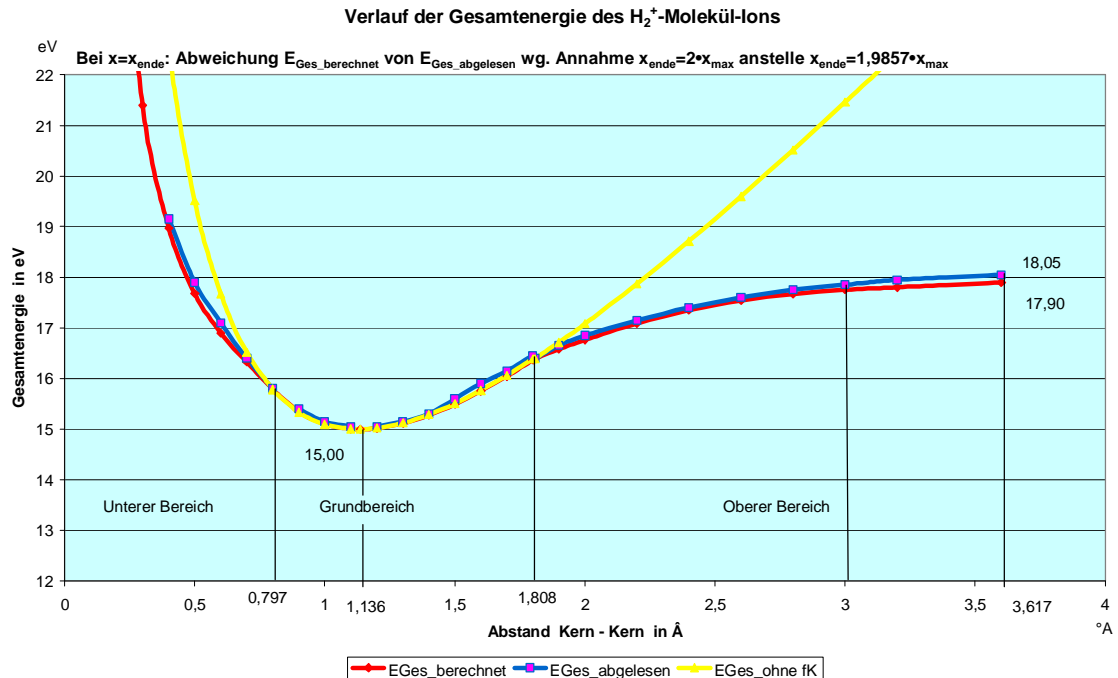
Quantenzahlen halbierte) **Bahnkraft** (Zentrifugalkraft) gemäß Gl.(13) zu

$$\frac{E_B}{r_B} = K_B = \frac{\frac{1}{2} h}{T_B \cdot r_B} = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^3}. \text{ Wie die Herleitung von Gl.(13) zeigte, resultiert}$$

der Faktor $\frac{1}{2}$ aus $\frac{1}{2}$ -Quantenzahlen, weil analog zu Gl.(6a) eben $E_B = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v_B^2$ eine kinetische Energie ist. Der Ansatz von $\frac{1}{4}$ -Quantenzahlen ist also in Gl.(13) noch nicht enthalten, er kommt in Gl.(13a) erst noch hinzu (ebenso wie z).

2.4. Gesamtenergie

Ng. Diagramm beinhaltet den Verlauf der gemessenen und berechneten Werte der Gesamtenergie für den Normalzustand des H_2^+ -Moleküls.



Die gelbe Kurve ($E_{\text{Ges_ohne_fk}}$) ergibt sich bei Anwendung der für den sogen. Grundbereich geltenden Ansätze zur „Bahnenergieerzeugung“. Das ist der Bereich, in dem der Orbitalwinkel zwischen $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ variabel ist. Die angrenzenden Bereiche sind unter <http://www.physik-theologie>⁷ im Download-Bereich ausführlich erklärt. Die Gesamtenergie (gemeint ist die Ionisations-Energie) ergibt sich analog zum H-Atom aus

$$E = +V_{\text{Kern-Kern}} - V_{\text{Elektron-Kern}} + \frac{V_{\text{Kinetisch}}}{14243} \quad \text{für den Normalzustand}$$

Rotation, ..Umlauf, ..Bahn

$$(22) \dots E_{\text{Ges}} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{14243} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1442443} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{144444442444443} \cdot n^2$$

$\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{14243}$ $\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1442443}$ $\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{144444442444443}$
 E_{ab} E_{an} Bahnenergie e

In Gl.(22) stellt $E_{\text{Ges}}(x)$ den Energieinhalt des H_2^+ -Ions in Abhängigkeit vom Kern-
 abstand dar, wobei hier mit $E_{H1} = +13,557 \text{ eV}$ gerechnet wird. Dadurch ergeben sich für die Gesamtenergie $E_{\text{Ges}}(x)$ stets positive Zahlenwerte. Üblicherweise wird als **Energienullpunkt** die Ionisationsenergie ($n \rightarrow \infty$) gewählt, bei der $r \rightarrow \infty$ geht. Dadurch ergeben sich für die Gesamtenergie $E_{\text{Ges}}(x)$ dann negative Zahlenwerte. Zur Umrechnung auf diese Definition, muss von den Ergebnissen der doppelte Betrag der Energie des Ruhezustands subtrahieren werden, also $E_{\text{Ges}}(x = x_0)$ bei $g_B = 90^\circ$. Dadurch wird lediglich die Y-Achse zu negativen Werten hin verschoben, wobei der eigentliche Verlauf der Energiekurve unverändert bleibt.

Es wird nun die Abstandsstelle $x = x_0$ betrachtet. Aufgrund der Stationaritätsbedingung gilt $r = x_0$ und aus der Molekülgeometrie ergibt sich $\frac{r_B^2}{r^2} = \frac{3}{2}$ und damit

$r_B^2 = \frac{3}{2} \cdot x_0^2$. In der Ruhelage ist $g_B = 90^\circ$ mit symmetrischer Auslenkung von

$\pm 90^\circ$. Es ist $x_0 = 1,106^\circ A \cong I \cdot \left(\frac{2}{j a}\right)^2 = r_{H1} \cdot \frac{2}{j}$, womit sich ein Ausdruck ergeben hat, der mit seiner Genauigkeit und Einfachheit gleichermaßen überzeugt. Ferner

ist mit gleicher Genauigkeit und Einfachheit $E(x = x_0) = 15eV = E_0 \cong E_{H1} \cdot \frac{1}{j^{3/2}}$

$$E = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x_0 + \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - 90} \text{ bzw.}$$

$$E = E_0 = + \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_0 \cdot j^{3/2}}{\frac{3}{2} x_0^2} \cdot \frac{x_0^2 \cdot j^2}{4} \cdot \frac{4}{3} \text{ und hieraus ... (23) ... } \boxed{z = \frac{9}{j^{7/2}}}$$

Damit wurde mit dem Bahnwirkungs Vielfachen z der letzte Parameter bestimmt.

Mit $z = \frac{9}{j^{7/2}}$ ergibt sich $E = E_0 = 15,0...eV$ bzw. $E = E_0 = -15,0...eV$, wenn mit dem

negativen Zahlenwert der Gesamtenergie des H-Atoms gerechnet wird.

Dies ist aber nicht die Gesamtenergie des H_2^+ -Ions, sondern nur der negative Zahlenwert der Anregungsspannung, die erforderlich ist, um aus einem H_2 -Molekül mit $-^1E_{Ges} = 2 \cdot 13,53 + 4,36 = 31,42...eV$ ein inneres H_2^+ -Ion mit

$-^1E_{Ges} = 16,45...eV$ und ein äußeres angeregtes Elektron entstehen zu lassen

(Niessen). Die Anregungsspannung von $15...eV$ entspricht also einem Potenzial von $-31,42 + 15 = -16,42...eV$ und genau dieser Betrag des Potenzials (eben der positive Zahlenwert) muss sich auch aus unserem Modell heraus ergeben.

Zur Überführung in dieses gesuchte Potenzial des H_2^+ -Ions wird unser Modell auf die der Ruhelage des unangeregten Grundzustandes des H_2^+ -Ions zugehörige Gesamtenergie (Messwert ca. 16,3 eV) eingestellt und nicht mehr auf den Wert der Anregungsspannung (Messwert 15,0 eV). Damit unser Molekülmodell uneingeschränkt gültig bleibt -insbesondere

das **Lauflinienbild**⁸ - ist die Annahme zwingend, dass der für den Ruhezustand mit Bezug auf die Anregungsspannung von 15,0 eV berechnete Kernabstand gemäß

$x_0 = \frac{2}{j} \cdot r_{H1} = 2,13949 \cdot r_{H1}$ um den Faktor $c_1 = \frac{4}{3} \cdot j^a \cdot j^{3/2}$ unter Bezugnahme auf das

Quadrat des Bahnradius der Bahnenergie(!) gemäß $r_B^2 = \frac{3}{2} \cdot x_0^2 = \frac{3}{2} \cdot \frac{4 \cdot r_{H1}^2}{j^2} \cdot \frac{1}{c_1}$ klei-

ner angesetzt wird. Mit $a = \frac{3}{2}$ ergibt sich dann

$$x_0^2 = \frac{4}{j^2} \cdot \frac{r_{H1}^2}{\frac{4}{3} \cdot j^{a=3/2} \cdot j^{3/2}} = (2,0500)^2 \cdot r_{H1}^2, \text{ was dem Rechenwert gem. Wellenme-}$$

chanik von $x_0 = 2,0 \cdot r_{H1}$ genügend nahe kommt.

Für den hier untersuchten Grundbereich $\leq 0^\circ g_B \leq 180^\circ$ des Normalzustands $n=1$ des H_2^+ -Ions muss, weil die Energieänderung in diesem Bereich allein durch Variation von g_B erfolgt, das Bahnwirkungsquantum z_1 unverändert bleiben. Zur Überführung in die Potenzialkurve bleibt uns also nur übrig, einen kleineren Kernabstand anzusetzen. Es ist

$$(23b) \dots x_0 = \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot r_{H1} = 2,0500 \cdot r_{H1} = \frac{2}{j} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}} \quad \text{berechnet mit } a=3/2 \text{ ergibt sich}$$

$$(23c) \dots E = E_0 = E_{H1} \cdot \frac{1}{j^{3/2}} \cdot j^a \cdot \frac{4}{2} \cdot j^{3/2} = 16,30 \dots eV$$

$\frac{13,53}{15 \dots eV} \quad \frac{14243}{c_1}$

2.5. Kontrolle der oberen und unteren Grenze im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$

Wie man am Verlauf der Anregungsenergie erkennt, endet am rechten Rand des Grundbereichs die positive Krümmung der Kurve und es schließt sich stetig an eine negative Krümmung. In soweit ist diese Stelle besonders ausgezeichnet, weil leicht zu identifizieren. Dies versetzt uns in die Lage unsere Ansätze dahin gehend zu kontrollieren, ob die bei Ansatz von $g_B = 180^\circ$ errechnete Abstandstelle mit den aus den Messwerten sich ergebende Stelle übereinstimmt.

Hierzu verwenden wir Gl.(22) mit $E_B(x)$ als Bahnenergie. Es ist:

$$E_{Ges}(x) = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + E_B(x). \text{ Ableiten ergibt}$$

$$E'_{Ges}(x) = - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x^2} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} + E'_B(x)$$

An der Stelle $x = x_0$ ist $E'_{Ges} = 0$. Somit erhalten wir

$$0 = - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} + E'_B(x) \text{ bzw.}$$

$$E'_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2}. \text{ Integration ergibt}$$

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

C ergibt sich aus $E_{Ges} = E_0$ an der Stelle $x = x_0$ aus

$$E_0 = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x_0 + \left(\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x_0 + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x_0 + C \right)$$

Damit ergibt sich $C = E_0 - \frac{2E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$ und die Bahnenergie zu:

$$(24) \dots E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + E_0 - \frac{2E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

Die Gesamtenergie beträgt

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

Wie zu sehen hebt sich der Term mit r gerade heraus. Der Abstand Kern-Elektron liefert also keinen Beitrag zur Gesamtenergie. Wir erhalten

$$(25) \dots E_{Ges}(x) = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + E_0 - \frac{2E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

Die Grenzen des Grundbereichs, das ist der Bereich mit variablem Orbitalwinkel $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$, ergeben sich durch Gleichsetzen von Gl.(24) und dem Ausdruck für die Bahnenergie aus Gl.(22).

$$E_B(x) = E_0 - \frac{2E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$E_0 - \frac{2E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot j}{x_0 \cdot 2} + \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot j}{x_0^2 \cdot 2} \cdot x + \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot j}{(r^2) \cdot 2} \cdot x = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0^2 \cdot j^2}{(r_B^2) \cdot 4} \cdot \frac{360}{360 - g}$$

$$E_0 - E_0 \cdot j^{5/2} + E_0 \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} + E_0 \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{(x_0^2)} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot [z] \cdot \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0^2 \cdot j^2}{\left(\frac{3}{2} x_0^2\right) \cdot 4} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$1 - j^{5/2} + j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} + j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{9}{j^{7/2}} \right] \cdot j^{7/2} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$1 - j^{5/2} + j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} + j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{x}{x_0} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \quad \text{bzw. (Gl.(26))} \dots \boxed{\frac{x}{x_0} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right) + 1}$$

Mit $x = x_0 + \Delta x$ ergibt sich

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

$$(27) \dots \boxed{x_{\max} = x_0 \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right)} = \frac{1,737^\circ \text{A}}{(1,808^\circ \text{A})} \quad \text{mit } x_0 = 2,055 \cdot r_{H1} \text{ und } r_{H1} = 0,531^\circ \text{A}$$

$$(28) \dots x_{\min} = x_0 \cdot \left(1 - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) = \frac{0,768^\circ A}{0,800^\circ A} \cdot 124$$

(Werte in runden Klammern dienen zum Vergleich mit dem Verlauf der Anregungsenergie) Damit ist zwar die Änderung des Orbitalwinkels I_B symmetrisch, jedoch liegt die obere Grenze doppelt so weit entfernt von der Ruhelage, wie die untere.

Bevor die Anregungszustände betrachtet werden, wird gezeigt, dass der bis heute übliche Ansatz für die Coulombenergie aus Elektron-Kern-Anziehung (anstelle der x-Abhängigkeit gilt die übliche r-Abhängigkeit) nicht mit den Messwerten vereinbar ist.

Anstelle $V_{\text{Elektron-Kern}} = -\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x$ ist beim üblichen Ansatz zu rechnen mit

$$V_{\text{Elektron-Kern}} = -\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot r.$$

Wir greifen zurück auf Gl.(22) nun mit dem üblichen Ansatz modifiziert. Dabei ist $E_B(x)$ die Bahnenergie, wobei die x-Abhängigkeit gegeben ist durch $g_B(x)$. Wir erhalten also:

$$E_{Ges}(x) = +\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot r + E_B(x). \text{ Ableiten ergibt}$$

$$E'_{Ges}(x) = -\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x^2} - 0 + E'_B(x)$$

Damit ist der Term mit Abhängigkeit von r verschwunden.

An der Stelle $x = x_0$ ist $E'_{Ges} = 0$. Somit erhalten wir

$$0 = -\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} + E'_B(x) \text{ bzw.}$$

$$E'_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2}. \text{ Integration ergibt } E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + C.$$

C ergibt sich aus $E_{Ges} = E_0$ an der Stelle $x = x_0$ aus

$$E_0 = +\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot r + \left(\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x_0 + C \right)$$

Mit $r = x_0$ bleibt nur noch der Ausdruck in den runden Klammern. Wir erhalten

$$C = E_0 - \frac{1E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} \text{ und die Bahnenergie ist:}$$

$$(28a) \dots E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + E_0 - \frac{1E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

Die Gesamtenergie beträgt also

$$E_{Ges}(x) = +\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot r + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + E_0 - \frac{1E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}$$

Wie zu sehen hebt sich der Term mit r nicht mehr heraus. Der Abstand Kern-Elektron liefert also nun einen Beitrag zur Gesamtenergie. Wir erhalten

$$(28b) \dots \boxed{E_{Ges}(x) = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot r + E_0 - \frac{2E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0}}$$

Die Grenzen des Grundbereichs, das ist der Bereich mit variablem Orbitalwinkel $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$, ergeben sich durch Gleichsetzen von Gl.(28a) und dem Ausdruck für die Bahnenergie aus Gl.(22).

$$E_B(x) = E_0 - \frac{1E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$E_0 - \frac{1E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot j}{x_0 \cdot 2} + \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot j}{x_0^2 \cdot 2} \cdot x = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0^2 \cdot j^2}{(r_B^2) \cdot 4} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$E_0 - E_0 \cdot j^{5/2} + E_0 \cdot j^{5/2} \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot [z] \cdot \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0^2 \cdot j^2}{\left(\frac{3}{2}x_0^2\right) \cdot 4} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$1 - j^{5/2} + j^{5/2} \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{9}{j^{7/2}} \right] \cdot j^{7/2} \cdot \frac{3}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$$1 - j^{5/2} + j^{5/2} \frac{x}{x_0} \cdot \frac{1}{2} = \frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \quad \text{bzw.} \quad \frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

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

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

$$(28c) \dots \boxed{\Delta x = 2 \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right) \cdot x_0}$$

Gl.(28c) unterscheidet sich von Gl.(26) durch den Vorfaktor 2. Damit würden die Grenzen doppelt soweit von der Stelle $x = x_0$ (Ruhezustand) entfernt liegen als nach Gl.(24). Dies ist offensichtlich falsch. Insbesondere lässt sich diese Feststellung für die obere Grenze schon durch nur oberflächliches Betrachten der Kurve für die Anregungsspannung sofort bestätigen. Damit ist die Richtigkeit der hier vorgelegten Ansätze bewiesen. Es ist natürlich ganz einfach, mit dem üblichen Ansatz für E_{an} das Molekülmodell durchzurechnen. Allerdings ergäbe sich dann eine Energiekurve, die zwar die gleiche Ruhelage-Energie hat, jedoch wäre die Kurve ohne Stelle mit Energieminimum. **Es ist also die Struktur von E_{an} in Gl.(16) eine wesentliche Voraussetzung für das Molekülmodell.**

3. Anregungszustände

3.1. Theoretische Grundlagen

Es wird Gleichartigkeit des Moleküls im Normalzustand und im angeregten Zustand n unterstellt. Um dies auszudrücken, wird ab hier die Schreibweise mit Hochindex $n=1,2,3,4...$ eingeführt. Dies bedeutet, dass an den Abstandsstellen $x=^n x$ die dem angeregten Zustände n zugehörige jeweilige Energie $E=^n E$ herrscht. Wir können daher Gl.(22) wie folgt verallgemeinern:

$$(29) \dots \boxed{{}^n E_{Ges}(x) = E_{ab}(x) + E_{an}(x) + {}^n E_B(x)} \text{ mit der Bahnenergie}$$

~~1442443~~
=..Null..für.. $g_B=90^\circ$

$$(30) \dots \boxed{{}^n E_B = \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \left(\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{n r_B^2} \right) \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot n^2}$$

Diese Gleichungen gelten für den Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$. Was den Ausdruck in der runden Klammer von Gl.(30) angeht, ist nach Gl.(12a):

$$(31) \dots \boxed{\frac{\frac{1}{2} h}{n T_B} = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{n r_B^2}}$$

Analog zum H-Atom wird angenommen, dass sich im Anregungsfall das H_2^+ -Ion um das n^2 -fache vergrößert.

Es gilt also: (32) ... $\boxed{{}^n r_B = n^2 \cdot r_B}$ und (33) ... $\boxed{{}^n x_0 = n^2 \cdot x_0}$ wobei gemäß Herleitung zu Gl.(23a) ${}^1 x_0 = \frac{2}{j} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}} \cdot r_{H1}$ ist mit $c_1 = \frac{4}{3} \cdot j^a \cdot j^{3/2}$ und nach Gl.(2)

$r_{H1} = l \cdot \frac{2}{j a^2}$ gilt. Damit können wir Gl.(30) mit ${}^1 E_0$ nach Gl.(23c)

$${}^1 E_0 = E_{H1} \cdot \frac{1}{j^{3/2}} \cdot j^a \cdot \frac{4}{3} \cdot j^{3/2} = 16,338 \dots eV \text{ schreiben als}$$

~~14243~~ ~~1442443~~
15...eV c_1

$${}^n E_B = \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \frac{{}^1 E_0 \cdot j^{3/2}}{E_{H1}} \cdot \frac{{}^1 x_0^2 \cdot j^2 \cdot c_1}{r_{H1}^2} \cdot \frac{1}{\frac{3}{2} \cdot n^4 \cdot {}^1 x_0^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot n^2$$

$${}^n E_B = \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot {}^1 E_0 \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3 \cdot n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot \frac{3}{3} = n_z \cdot {}^1 E_0 \cdot \frac{j^{7/2}}{123} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$= 1/z$

$$(34) \dots \boxed{{}^n E_B = \frac{n_z \cdot {}^1 E_0}{1_z} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}}$$

Mit ${}^1E_B = \frac{1}{2} \cdot {}^1z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{1r_B^2} \cdot \frac{4}{3}$ nach Gl.(21), $\frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{1r_B^2} = \frac{1/2 h}{1T_B}$ nach Gl.(12a)

und 1E_0 nach Gl.(23c) können wir schreiben

(35)... ${}^1E_B = {}^1E_0 = {}^1z \cdot \frac{\frac{1}{2} h}{2 \cdot {}^1T_B} \cdot \frac{4}{3}$. Dies eingesetzt in Gl.(34) ergibt

${}^nE_B = \frac{{}^nz \cdot {}^1z}{1z} \cdot \frac{\frac{1}{2} h}{2 \cdot {}^1T_B} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$ bzw. (36)... ${}^nE_B = {}^nz \cdot \frac{\frac{1}{2} h}{2 \cdot {}^1T_B} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$

Gl.(36) gibt die Struktur der Bahnenergie des H_2^+ -Ions im angeregten Zustande n an und ist der Ausgangspunkt für unsere weiteren Untersuchungen insbesondere der Größe von nz . Der Ausdruck ist analog zum H-Atom. Dort gilt

$T_{H1} = \frac{2pr_{H1}}{v_{H1}} = 2p \cdot l \cdot \frac{2}{j a^2} \cdot \frac{1}{ac} = \frac{4p}{j a^3} \cdot l \cdot \frac{t}{c} \cdot \frac{2}{2}$ bzw.

$T_{H1} = \frac{8p}{j a^3} \cdot t \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{R_t} \cdot \frac{1}{2} = \frac{h}{R_t \cdot h} \cdot \frac{1}{2} = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{1}{2}$ und diese ergibt wieder Gl.(13):

..... $2T_{H1} = \frac{h}{E_{H1}}$ und somit für die Bahnenergie $E_{BH1} = \frac{h}{2T_{H1}}$ bzw.

(37)... ${}^nE_{BH1} = 1 \cdot \frac{h}{2T_{H1}} \cdot (1) \cdot \frac{1}{n^2}$ was zu ${}^nE_{BH1} = 1 \cdot \frac{h}{h} \cdot E_{H1} \frac{1}{n^2} = \frac{E_{H1}}{n^2}$ führt.

Mit ${}^1T_B = \frac{2p \cdot {}^1r_B}{1v_B}$ und ${}^1v_B = \frac{c \cdot r_m}{1r_B} = \frac{v_{H1} \cdot r_{H1}}{1r_B}$ erhalten wir die Substitution
 ~~$1r_B = \frac{2p \cdot {}^1x_0^2}{ac} \cdot \frac{1}{1x_0 \cdot \frac{j}{2} \cdot \sqrt{c_1}}$~~
Bahnquantenbedingung

${}^1T_B = \frac{2p \cdot {}^1r_B^2}{v_{H1} \cdot r_{H1}}$ bzw. ${}^1T_B = \frac{2p \cdot \frac{3}{2} \cdot {}^1x_0^2}{ac} \cdot \frac{1}{1x_0 \cdot \frac{j}{2} \cdot \sqrt{c_1}}$ bzw. ${}^1T_B = \frac{2}{j} \cdot \frac{2p \cdot \frac{3}{2}}{ac \cdot \sqrt{c_1}} \cdot {}^1x_0$

Mit Gl.(23b) gemäß ${}^1x_0 = \frac{2}{j} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}}$ ergibt sich

${}^1T_B = \frac{4p}{j a} \cdot \frac{t}{c} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}} \cdot \frac{2}{j} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}} = \frac{8p}{j a} \cdot \frac{t}{l} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{c_1} \cdot \frac{1}{j} \cdot l \cdot \frac{2}{r_{H1}} = \frac{8p}{j a^3} \cdot t \cdot \frac{1}{c_1} \cdot \frac{3}{j^2}$
 ~~$\frac{1}{j} \cdot \frac{2}{r_{H1}} = \frac{1}{j} \cdot \frac{2}{\frac{2}{j} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}}} = \frac{1}{j} \cdot \frac{2}{2} \cdot \frac{j}{r_{H1}} \cdot \sqrt{c_1} = \frac{j}{r_{H1}} \cdot \sqrt{c_1} = \frac{j}{\frac{h}{R_t}} \cdot \sqrt{c_1} = \frac{j R_t}{h} \cdot \sqrt{c_1}$~~

(38)... ${}^1T_B = \frac{1}{R_t} \cdot \frac{1}{c_1} \cdot \frac{3}{j^2} = \frac{h}{h \cdot R_t} \cdot \frac{1}{c_1} \cdot \frac{3}{j^2} = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{3}{j^2} \cdot \frac{1}{c_1}$

Damit wurden die aus dem hier vorgelegten Molekülmodell sich ergebenden Grundlagen gelegt. Nun werden die Messergebnisse einbezogen.

3.2. Einbezug der Messwerte

Dazu wird auf die Ausarbeitungen von **H.C.Urey**¹, **Burrau**², **Niessen**³ und **E.Teller**⁴ zurückgegriffen. Urey nennt auf Seite 229/230 unter Bezugnahme auf Messungen der Ionisationsenergie und Atomresonanz den von Olson und Glockler

experimentell gefundenen Zusammenhang $V = const. + E_{H1} \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$ für

$n = 3, 4, 5, 6, 7, \dots, \infty$ mit $const. = 3,12 \dots bis \dots 3,15 eV$ und $E_{H1} = 13,53 \dots eV$. Olson und Glockler ordnen diese Formel den Anregungszuständen des H_2 -Moleküls zu, Urey jedoch dem H_2^+ -Ion selbst. Zwei dieser Potentiale werden durch die Formel

$V = 16,65 \dots 16,68 \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$ für $n = 2, 3, \dots$ repräsentiert. Urey ordnet diese zweite

Formel dem Resonanzpotential des H_2^+ -Ions zu. Somit ist im ersten Falle

$V = const. + E_{H1} - E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2}$ bzw. $V = 16,65 \dots 16,68 - E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2}$ und im zweiten Falle

$$V = {}^1E_{Ges} \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right).$$

Burrau berechnet mit Hilfe der (damals noch recht neuen) Wellenmechanik die Energie des H_2^+ -Ions zu 16,29 eV nach Abzug von 0,2 eV für Kernschwingungen.

Niessen berechnet eine Spannung von $(2,323 - 1,216) \cdot 13,53 = 15,0 \dots eV$, um aus dem Wasserstoffmolekül ein H_2^+ -Ion entstehen zu lassen. Bei einer Ionisationsenergie von $2,323 \cdot 13,53 = 31,43 \dots eV$ des Wasserstoffmoleküls beträgt die Energie des H_2^+ -Ions dann $1,216 \cdot 13,53 = 16,45 \dots eV$.

Teller berechnet mit Hilfe der Wellenmechanik den Energie-Eigenwert des H_2^+ -Ions zu $1,204 \cdot 13,53 = 16,29 \dots eV$ und bestätigt die Burrau'sche Berechnung.

Für $\frac{const. + E_{H1}}{16,29 \dots 16,68 \dots eV}$ wird der Ausdruck

$$j^a \cdot \frac{4}{2} \cdot E_{H1} = \frac{16,86 \dots eV}{18,04 \dots eV} = \frac{16,30 \dots eV}{142,43} \text{ angesetzt. In Gl.(23c) war } j^a \cdot \frac{4}{3} \cdot {}^1E_0 \cdot j^{3/2},$$

~~142,43~~ für...a=1 ~~142,43~~ für...a=3/2

was bei $a = 3/2$ mit $16,305 \dots eV$ praktisch den gleichen Wert liefert. Wir erhalten

$$(39) \dots \boxed{V = j^a \cdot \frac{4}{2} \cdot E_{H1} - E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2}} \text{ bzw. } (40) \dots \boxed{V = j^a \cdot \frac{4}{3} \cdot E_{H1} \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)} \text{ mit } a = 3/2$$

~~142,43~~ $\equiv Gl.(23c)$ ${}^1E_{Ges} = 16,30 \dots eV$

Die Abweichung von Urey beträgt bei $a = 1$: $\frac{16,86 - 16,65}{16,65} = +1,2\%$ womit auch die-

ser Ansatz von der Genauigkeit her gesehen noch brauchbar ist. Wird in Gl.(40) anstelle mit j^1 mit $j^{3/2}$ gerechnet, so ergibt sich anstelle von 16,86 eV der Wert

16,30 eV. In diesem Falle würde der Betrag der Abweichung zu Urey mit $\frac{16,30 - 16,65}{16,65} = -2,0\%$ zwar höher liegen, jedoch wäre dieser Ansatz wohlmöglich

durchaus nicht unbefriedigend, weil der mit Gl.(40) berechnete Wert etwas tiefer liegt als die von Urey beobachtete Ionisierungsspannung. Dies trägt dem Umstand

Rechnung, dass vermutlich ein Ion niemals ohne Kernschwingungen entsteht. Burrau gibt für diese Kernschwingungen den Wert 0,2 eV an (s.o.). Wird also der Urey'schen Messwert um die Burrau'sche Kernschwingungsenergie bereinigt angesetzt, so ergibt sich der theoretische Wert 16,45 eV, was mit dem von Niessen genannten Wert übereinstimmt. Es beträgt die Abweichung zu dem hier berechneten Wert bei Ansatz von j^1 : $\frac{16,86 - 16,45}{16,45} = +2,5\%$ und bei Ansatz von $j^{3/2}$:

$\frac{16,30 - 16,45}{16,45} = -0,9\%$. Diese gute Übereinstimmung bedeutet, dass sich der Ansatz mit $j^{a=3/2}$ im weiteren Verlauf unserer Untersuchung der Anregung nicht mehr besonders rechtfertigen muss. Der Faktor 4/3 stellt offenbar den Orbitalfaktor dar, der sich bei $\frac{360}{360 - I_B} = \frac{360}{360 - 90} = \frac{4}{3}$ ergibt (im H-Atom existiert nur ein Orbital, daher die Verstärkung). Die Modifikation der Energie E_{H1} mit $j^{a=3/2}$ ist wohlmöglich als wesentliches Merkmal eines Moleküls einzustufen.

Unsere folgenden Untersuchungen basieren darauf, dass die Gesamtenergie nach Gl.(29) identische Ergebnisse liefern muss wie die Messwert-Gleichung für die Energie nach Gl.(40). Es gilt also:

Unsere folgenden Untersuchungen basieren darauf, dass die Gesamtenergie nach Gl.(29) identische Ergebnisse liefern muss wie die Messwert-Gleichung für die Energie nach Gl.(40). Es gilt also:

Unsere folgenden Untersuchungen basieren darauf, dass die Gesamtenergie nach Gl.(29) identische Ergebnisse liefern muss wie die Messwert-Gleichung für die Energie nach Gl.(40). Es gilt also:

$$(41) \dots \boxed{{}^n E_{Ges}(x) = E_{ab} - E_{an} + {}^n E_B(x) = \frac{{}^1 E_{Ges}}{n^2}}$$

Theoretisch sind drei verschiedene Anregungsfälle zu untersuchen, also Bezug auf Molekülstatus: $I_B = 90^\circ$, $I_B = 180^\circ$ und $I_B = 0^\circ$ zu nehmen. Die Methode hat den Vorteil, dass sich in jedem Untersuchungsfalle die Messwerte ergeben.

3.3. Anregung mit Bezug auf Molekülstatus bei $I_B = 90^\circ$

Bestimmung des Bahnwirkungs Vielfachen ${}^n z_{90}$

Der Einfachheit halber wird zuerst den Fall betrachtet, dass die Anregung im Molekülstatus $I_B = 90^\circ$ erfolgt. Aufgrund der Stationaritätsbedingung ist in diesem Fall $E_{ab} - E_{an} = 0$, es ist also die Ionisationsenergie V allein gegeben durch die Bahnenergie ${}^n E_B(x)$. Dazu benutzen wir folgende Gleichungen:

$$\text{Gl.(22)... } {}^n E_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x(g_B)} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{n^2} \cdot x(g_B) + \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot n^2$$

$\frac{E_{ab}(x)}{E_{an}(x)}$
 $Bahnenergie... {}^n E_B(x)$

$$\text{Gl.(33)... } {}^n r = {}^n x_0 = n^2 \cdot {}^1 x_0 \text{ und Gl.(32)... } {}^n r_B^2 = n^4 \cdot {}^1 r_B^2 \text{ mit } ... {}^1 r_B^2 = \frac{3}{2} \cdot {}^1 x_0^2$$

Zudem ist zu beachten, dass der Kernabstand x in dem hier untersuchten Bereich von $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ nicht beliebig gewählt werden kann, sondern eine Funktion des Orbitalwinkels g_B ist gemäß $x = x(g_B)$. In diesem Bereich ändert sich die Gesamtenergie nur in Abhängigkeit des Orbitalwinkels:

$$\text{Gl.(26)... } x(g_B) = \left[\frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right) + 1 \right] \cdot {}^n x_0 \text{ gültig für } 0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$$

$= f(g_B)$

$$\text{aus Gl.(27)... } f_{g_B=180^\circ} = \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) \text{ bzw. } ... f_{g_B=90^\circ} = 1$$

$$\text{aus Gl.(28)... } f_{g_B=0^\circ} = \left(1 - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right). \text{ Einsetzen von Gl.(26) in Gl.(22) ergibt}$$

$${}^n E_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B) \cdot {}^1 x_0 \cdot n^2} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{{}^1 x_0^2 \cdot n^4} \cdot f(g_B) \cdot {}^1 x_0 \cdot n^2 + \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot {}^1 x_0^2 \cdot n^4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot n^2$$

$$(42)... {}^n E_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B) \cdot {}^1 x_0 \cdot n^2} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{{}^1 x_0^2 \cdot n^2} \cdot f(g_B) \cdot {}^1 x_0 + \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot {}^1 x_0^2 \cdot n^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

Es wird nun die Stelle $g_B = 90^\circ$ untersucht mit $f(g_B) = 1$ und $n = 1$ und wir erhalten

$$(43)... {}^1 E_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{{}^1 x_0 \cdot 1^2} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1^2 \cdot {}^1 x_0^2} \cdot 1 \cdot {}^1 x_0 + \frac{1}{2} \cdot 1_z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot {}^1 x_0^2 \cdot 1^2} \cdot \frac{360}{360 - 90}$$

$= 0$

Mit Gl.(23a)... $\boxed{{}^1x_0 = \frac{2}{j} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}} \cdot r_{H1}}$, $c_1 = \frac{4}{3} \cdot j^a \cdot j^{3/2}$ und $a = \frac{3}{2}$ ist ${}^1x_0 = \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot r_{H1}$

${}^1E_{Ges} = 0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1}}{3/2 \cdot \frac{3}{j^5}} \cdot \frac{4}{3}$ ist ${}^1E_{Ges} = j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} \cdot E_{H1}$ in Übereinstimmung mit

Gl.(40). **Damit wurde die Form der Gesamtenergie des H_2^+ -Ions nach erfolgter Anregung intrinsisch, d.h. selbständig aus unserem Molekülmodell heraus bestimmt. Intrinsisch deswegen, weil sich die Potenzialkurve des H_2^+ -Ions aus der Überleitung von der Anregungsenergie (inneres H_2^+ -Ion eines angeregten H_2 -Moleküls) zur Potenzialenergie des (nach Abtrennung des angeregten Elektrons des H_2 -Moleküls) verbliebenem H_2^+ -Ion ergab (siehe Herleitung von Gl.(23b)).** Die letzte Formel für ${}^1E_{Ges}$ stimmt mit der Urey'schen Messwert-Formel Gl.(40) überein. Diese Übereinstimmung zeigt, dass unser Molekülmodell die Realität repräsentiert. Damit ist zugleich auch die Richtigkeit des Ansatzes ${}^n x = f(g_B) \cdot {}^1x_0 \cdot n^2$ bewiesen.

Aufgrund der Übereinstimmung zu Gl.(40) ist in Übereinstimmung mit der Auffassung von Olson und Glockler Gl.(39) dem H_2 -Molekül zuzuordnen und Gl.(40), wie von Urey festgestellt, dem H_2^+ -Ion. Demnach ist Gl.(39) für das H_2 -Molekül und Gl.(40) für das H_2^+ -Ion anzusetzen. Nunmehr kann mit Gl.(42) der Anregungszustand weiter untersuchen bzw. die Frage der Zuordnung geklärt werden. Dazu wird analog zum H-Atom angesetzt:

(44)... $\boxed{{}^{1,n}\Delta E = {}^1E_{Ges} - {}^nE_{Ges} \equiv V}$

Wir erhalten mit Gl.(42) und Gl.(43) den Ausdruck

$${}^1E_{Ges} - {}^nE_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B) \cdot {}^1x_0} \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{{}^1x_0^2} \cdot f(g_B) \cdot {}^1x_0 \cdot \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{3/2 \cdot {}^1x_0^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot \left(1_z - \frac{n_z}{n^2}\right)$$

Hierbei ist wie erwartet n_z die noch zu suchende Größe. Für $n = \infty$ ergibt sich dann definitionsgemäß die Ionisationsenergie ausgehend vom Normalzustand ${}^1E_{Ges}$, da ${}^nE_{Ges}$ gemäß Gl.(44) für große n zu null wird.

Nun wird die Rechnung weiter ausgeführt, subtrahieren ${}^1E_{Ges}$ auf jeder Seite

(45)... $\boxed{{}^nE_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B) \cdot {}^1x_0} \cdot \left(-\frac{1}{n^2}\right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{{}^1x_0^2} \cdot f(g_B) \cdot {}^1x_0 \cdot \left(-\frac{1}{n^2}\right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{3/2 \cdot {}^1x_0^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot \left(-\frac{n_z}{n^2}\right)}$

und können die Form von ${}^nE_{Ges}$ bestimmen. Dazu wird die Stelle $g_B = 90^\circ$ für $n = 1$ untersucht. Mit Gl.(23)... ${}^n z = 1_z = \frac{9}{j^{7/2}}$, ${}^1x_0^2 = \frac{3}{j^5} \cdot r_{H1}^2$ und mit der Kurzform

${}^n x = f(g_B) \cdot {}^1x_0 \cdot n^2 = 1 \cdot {}^1x_0 \cdot 1^2$ ergibt sich

$$-{}^n E_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1 \cdot x_0} \cdot \left(-\frac{1}{1^2} \right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x_0}{1 \cdot x_0^2} \cdot \left(-\frac{1}{1^2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot x_0^2} \cdot \frac{360}{360-90} \cdot \left(-\frac{1}{1^2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \right)$$

$$+{}^n E_{Ges} = + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1}}{\frac{3}{2} \cdot \frac{3}{j^5}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \left(+\frac{1}{1^2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \right) \text{ bzw. allgemein mit } n$$

$$(46) \dots \boxed{{}^n E_{Ges} = j^{3/2} \cdot \frac{4}{n^2} \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2}} \text{ wiederum in Übereinstimmung mit Gl.(40).}$$

${}^1 E_{Ges} = 16,30 \dots eV$

Es bleibt nun in der Tat noch das Bahnwirkungs Vielfache ${}^n z$ im Anregungszustand zu bestimmen. Es wird analoges Verhalten des H_2^+ -Ions zum Normalzustand unterstellt, d.h. im Grundbereich von $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ ändert sich nur der Orbitalwinkel. Dies ist eine wichtige Feststellung, denn es kommt aufgrund dieser Änderung zur entsprechend dem Verlauf der Anregungsspannung beobachteten Änderung der Gesamtenergie ${}^n E_{Ges}(g_B)$. Damit Gl.(46) sich einstellt, muss also gelten

$$(47) \dots \boxed{{}^n z = 1} \dots$$

Zudem gilt noch Gl.(23c) ... $E_{H1} = 13,53 \dots eV$ und Gl.(2) ... $r_{H1} = l \cdot \frac{2}{j a^2} = 0,531^\circ A$.

Damit kann der Verlauf der Gesamtenergie im Normalzustand und im Anregungszustand im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ explizit berechnet werden.

Nebenrechnung Beginn: Sofern die Gesamtenergie ${}^n E_{Ges}(g_B)$ im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ konstant gehalten werden soll, so könnte dies durch Einsetzen von Gl.(46) in Gl.(45) erreicht werden. Es ergibt sich dann

$$-j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B)^1 x_0} \cdot \left(-\frac{1}{n^2} \right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1 x_0^2} \cdot f(g_B)^1 x_0 \cdot \left(-\frac{1}{n^2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot x_0^2} \cdot \frac{360}{360-g_B} \cdot \left(-\frac{n_z}{n^2} \right)$$

Nach Division durch E_{H1} sowie Multiplikation mit n^2 und -1 erhalten wir

$$+j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} = + \frac{r_{H1}}{f(g_B)^1 x_0} - \frac{r_{H1}}{\frac{3}{j^5} \cdot r_{H1}^2} \cdot f(g_B)^1 x_0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot \frac{3}{j^5} \cdot r_{H1}^2} \cdot \frac{360}{360-g_B} \cdot n_z$$

$$+j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} = + \frac{r_{H1}}{f(g_B)^1 x_0} - \frac{j^5 \cdot f(g_B)^1 x_0}{3 \cdot r_{H1}} + \frac{j^5}{9} \cdot \frac{360}{360-g_B} \cdot n_z$$

$$+j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} - \frac{r_{H1}}{f(g_B)^1 x_0} + \frac{j^5 \cdot f(g_B)^1 x_0}{3 \cdot r_{H1}} = \frac{j^5}{9} \cdot \frac{360}{360-g_B} \cdot n_z$$

$\frac{14243}{\text{vgl...Messwert}}$
 $\frac{14243}{\text{aus...}E_{ab}}$
 $\frac{142443}{\text{aus...}E_{an}}$
 $\frac{9}{\text{aus...Bahn}}$
 $\frac{360}{14243} \cdot n_z$
 $\frac{360}{\text{Orbitalfaktor}}$

$$\begin{aligned}
n_z &= \left(\frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{4}{3} - \frac{9}{j^5} \cdot \frac{r_{H1}}{f(g_B)^1 x_0} + 3 \cdot \frac{f(g_B)^1 x_0}{r_{H1}} \right) \cdot \frac{360 - g_B}{360} \\
n_z &= \left(\frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{4}{3} - \frac{9}{j^5} \cdot \frac{r_{H1}}{f(g_B)^1 x_0} + 3 \cdot \frac{f(g_B)^1 x_0}{r_{H1}} \right) \cdot \frac{360 - g_B}{360} \text{ bzw.} \\
n_z &= \left(\frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{4}{3} - \frac{9}{j^5} \cdot \frac{r_{H1}}{f(g_B) \cdot \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot r_{H1}} + 3 \cdot \frac{f(g_B) \cdot \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot r_{H1}}{r_{H1}} \right) \cdot \frac{360 - g_B}{360} \\
n_z &= \left(\frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{4}{3} - \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot 3 \cdot \frac{1}{f(g_B)} + \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot 3 \cdot f(g_B) \right) \cdot \frac{360 - g_B}{360} \\
(47a) \dots & \boxed{n_z = \left[\frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{4}{3} - \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot 3 \cdot \left(\frac{1}{f(g_B)} - f(g_B) \right) \right] \cdot \frac{360 - g_B}{360}} \text{ mit } f(g_B) \text{ aus Gl.(26)}
\end{aligned}$$

Dieses Bahnwirkungsvielfache nach Gl.(47) müsste sich einstellen, damit im Falle der Anregung die Gesamtenergie ${}^n E_{Ges}(g_B)$ im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ konstant bliebe gemäß ${}^n E_{Ges}(g_B) = const$. Es ist offensichtlich, dass dieser Sachverhalt unzutreffend ist, weil die Messwertformel Gl.(40) nur für $g_B = 90^\circ$ gilt, entsprechend dem beobachteten Verlauf der Anregungsspannung auch die Gesamtenergie ${}^n E_{Ges}(g_B)$ in Abhängig vom Orbitalwinkel variiert und überhaupt die in Gl.(47) gezeigt Struktur, mit den einfachen Strukturen der Existenzweise von Elementarteilchen, nicht in Einklang zu bringen sind, wie im übernächsten Kapitel sehen ist. **Nebenrechnung Ende.**

3.4. Verlauf der Potenzialkurve des H₂⁺-Ions im Bereich 0° ≤ g_B ≤ 180°

Es wird hier nur den Bereich: 0° ≤ g_B ≤ 180° betrachtet. Ng. Wertetabelle beinhaltet die aus unserem Modell sich ergebenden Eigenwerte der Gesamtenergie des H₂⁺-Ions und zum Vergleich die nach der Wellenmechanik durch E. Teller berechneten Werte. Dazu benutzen wir folgende Formelsammlung:

$$\text{Gl.(22)... } {}^n E_{Ges} = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{14243} \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{144243} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{n^2 r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot n^2$$

E_{ab}(x) *E_{an}(x)* *Bahnenergie...ⁿE_B(x)*

$$\text{Gl.(23c)... } E_{H1} = 13,53 \dots eV \dots \text{ bzw. ... Gl.(2)... } r_{H1} = l \cdot \frac{2}{j a^2} = 0,531^\circ A$$

$$\text{Gl.(23a)... } {}^1 x_0 = \frac{2}{j} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}} \cdot r_{H1} \text{ mit } c_1 = \frac{4}{3} \cdot j^a \cdot j^{3/2} \text{ und } a = \frac{3}{2} \text{ ist } {}^1 x_0 = \frac{\sqrt{3}}{j^{5/2}} \cdot r_{H1}$$

$$\text{Gl.(33)... } {}^n r = {}^n x_0 = {}^1 x_0 \cdot n^2$$

$$\text{Gl.(32)... } {}^n r_B^2 = {}^1 r_B^2 \cdot n^4 \text{ mit } {}^1 r_B^2 = \frac{3}{2} \cdot {}^1 x_0^2 \dots \text{ Gl.(26)... } x = f(g_B) \cdot {}^1 x_0 \cdot n^2$$

$$\text{Gl.(26)... } f_{g_B} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right) + 1, \text{ gültig für } 0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$$

$$\text{Gl.(27)... } f_{g_B=180^\circ} = \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) = 1,591794$$

$$\text{Gl.(27)... } {}^n x_{\max} = {}^1 x_0 \cdot n^2 \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) = 1,737^\circ A \cdot n^2$$

$$\dots \dots \dots f_{g_B=90^\circ} = 1 \dots \dots \dots {}^n x_0 = {}^1 x_0 \cdot n^2 = 1,091^\circ A \cdot n^2$$

$$\text{Gl.(28)... } f_{g_B=0^\circ} = \left(1 - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) = 0,704103$$

$$\text{Gl.(28)... } {}^n x_{\min} = {}^1 x_0 \cdot n^2 \cdot \left(1 - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) = 0,768^\circ A \cdot n^2$$

$$\text{Gl.(47)... } {}^n z = {}^1 z = \frac{9}{j^{7/2}} = 11,396240$$

Es ergibt sich aus vg. Formeln folgende Zahlenwert-Gleichung mit E in eV:

$${}^n E_{Ges} = + \frac{13,557 \cdot 0,531}{144243} \dots \dots \frac{13,557 \cdot 0,531 \cdot n^x}{(2,055 \cdot 0,531 \cdot n^2)^2} + \frac{1}{2} \cdot n_z \cdot \frac{13,557 \cdot 0,531^2}{\frac{3}{2} \cdot (2,055 \cdot 0,531)^2 \cdot n^4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot n^2$$

E_{ab}(x) *E_{an}(x)* *Bahnenergie...ⁿE_B(x)*

$${}^n E_{Ges} = + \frac{13,557 \cdot 0,531}{f(g_B) \cdot {}^1 x_0 \cdot n^2} \dots \dots \frac{13,557 \cdot 0,531 \cdot f(g_B) \cdot {}^1 x_0 \cdot n^2}{n^4 \cdot (2,055 \cdot 0,531)^2} + \frac{13,557}{n^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{n_z}{\frac{3}{2} \cdot 2,055^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$${}^n E_{Ges} = + \frac{13,557}{f(g_B) \cdot 2,055 \cdot n^2} \dots \frac{13,557 \cdot f(g_B)}{2,055 \cdot n^2} + \frac{13,557}{n^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{n_z}{3} \cdot \frac{360}{2,055^2 \cdot 360 - g_B}$$

=0.bei.g_B.=.90°,weil.dort.fg_B=1

$${}^n E_{Ges} = + \frac{13,557}{2,055 \cdot n^2} \cdot \left(\frac{1}{f(g_B)} - f(g_B) \right) + \frac{13,557}{2,055^2 \cdot n^2} \cdot \frac{n_z}{3} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

$n = \infty$

Orbitalwinkel g_B in Grad	Kernabstand x in °A im Normalzustand	Gesamtenergie ${}^n E_{Ges}(g_B)$ in eV = $(E_{ab} - E_{an}) + E_B$
0	0,766 [1,45]	(4,73)+12,26=+16,99 {-15,51*}
90	1,089 [2,05] {2,0*}	(0,00)+16,33=+16,33 {-16,29*}
180	1,733 [3,27]	(-6,37)+24,50=+18,13 {-15,31*}

Werte in eckigen Klammern sind unsere Rechenwerte bezogen auf Grundbahn H-Atom im Normalzustand.

* Werte in geschweiften Klammern nach E.Teller, bei abweichenden x-Abständen wurden die Rechenwerte linear interpoliert, Normierung auf +16,29 eV ergibt folgende Vergleichswerte: -15,51+2x16,29=+17,07 eV bzw. -16,29+2x16,29=+16,29 eV bzw. -15,31+2x16,29=+17,27 eV. Signifikante Abweichungen zu unserem Molekülmodell ergeben sich für Orbitalwinkel >90° (s. Diagramm auf der nächsten Seite).

$n = 3$

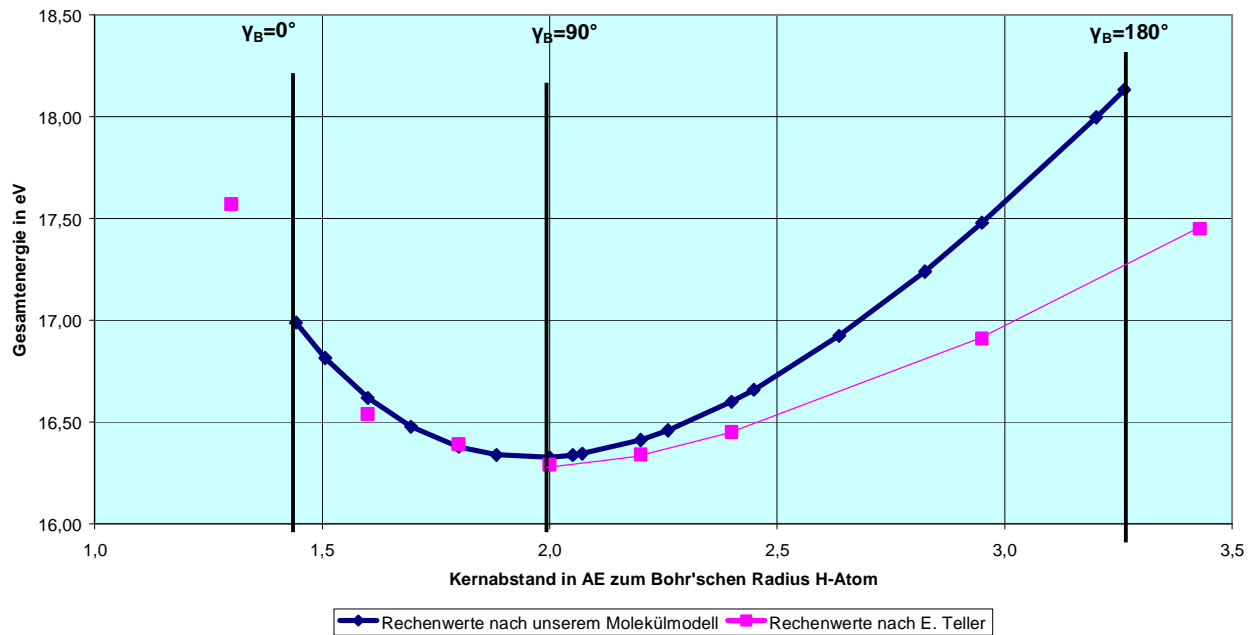
Orbitalwinkel g_B Grad	Kernabstand x in °A im angeregten Zustand	Gesamtenergie ${}^n E_{Ges}(g_B)$ in eV = $(E_{ab} - E_{an}) + E_B$
0	6,898 [13,0]	(+0,53)+1,36=+1,89 {-4,35*}
90	9,797** {4,895**} [18,5]	(+0,00)+1,82=+1,82 {-4,73*}
180	15,595 [29,4]	(-0,71)+2,72=+2,01 {-3,49*}

Werte in eckigen Klammern sind unsere Rechenwerte bezogen auf Grundbahn H-Atom im Normalzustand.

* Werte in geschweiften Klammern nach E.Teller, bei abweichenden x-Abständen wurden die Rechenwerte linear interpoliert, Normierung auf +4,73 eV ergibt folgende Vergleichswerte: -4,35+2x4,73=+5,11 eV bzw. -4,73+2x4,73=+4,73 eV bzw. -3,49+2x4,73=+5,97 eV. Nach unserem Molekülmodell sind die Energiewerte für den angeregten Zustand etwas mehr als ein Drittel so groß, wie von E.Teller berechnet (*bei.g_B = 90°..gilt : ...1,82 / 4,73 = 0,38477 = 0,33624 / j²*).

** Nach unserem Molekülmodell ist das H₂⁺-Ion im angeregten Zustand genau doppelt so groß, wie von E.Teller berechnet (*bei.g_B = 90°..gilt : ..9,797 / 4,895 = 2,001430*).

Potenzialkurve des H_2^+ -Ions
im Bereich $0^\circ \leq \gamma_B \leq 180^\circ$
im Normalzustand ($n=1$)



Wertetabelle „Gesamtenergie im Normalzustand“:

		n=1		
		Normiert	Original	
$x(\gamma_B)$	γ_B	E_{Ges}	$E_{Ges}-E.Teller$	$E_{Ges}-E.Teller$
AE	Grad	eV	eV	eV
1,300			17,57	-15,01
1,443	0,000	16,99		
1,507	12,223	16,82		
1,600	28,527	16,62	16,54	-16,04
1,695	43,606	16,48		
1,800	58,956	16,38	16,39	-16,19
1,883	70,026	16,34		
2,000	84,303	16,33	+16,29	-16,29
2,051	90,000	16,34		
2,072	92,409	16,34		
2,200	105,669	16,41	16,34	-16,24
2,260	111,469	16,46		
2,400	124,020	16,60	16,45	-16,13
2,448	128,090	16,66		
2,637	142,582	16,92		
2,825	155,312	17,24		
2,950	163,125	17,48	16,91	-15,67
3,202	176,872	18,00		
3,264	180,000	18,13		
3,429			17,45	-15,13

Normierungs-Beispiel: $-16,19 + 2 \times 16,29 = +16,39$

Wertetabelle „Gesamtenergie im angeregten Zustand“:

Es gilt nach Gl.(40), Gl.(41) und Gl.(44):

$$\dots \left[{}^{1,n}\Delta E = {}^1E_{Ges} - {}^nE_{Ges} \equiv V = {}^1E_{Ges}(g_B) - \frac{{}^1E_{Ges}(g_B)}{n^2} \right]$$

n	Dissoziationsenergie		${}^{1,n}\Delta E_{Ges}(Y_B)$	
	Eab180-Ean180	E_Bahn180	E_180	${}^nX_{0,180}$
1	0,000	0,000	0,000	1,733
2	-4,779	18,380	13,601	6,931
3	-5,664	21,784	16,120	15,595
4	-5,974	22,975	17,001	27,724
5	-6,117	23,527	17,409	43,319
6	-6,195	23,826	17,631	62,379
7	-6,242	24,007	17,765	84,905
8	-6,273	24,124	17,851	110,896
${}^1E_{Ges}(Y_B)$	-6,372	24,507	18,135	

n	Dissoziationsenergie		${}^{1,n}\Delta E_{Ges}(Y_B)$	
	Eab90-Ean90	E_Bahn90	E_90	${}^nX_{0,90}$
1	0,000	0,000	0,000	1,089
2	0,000	12,253	12,253	4,354
3	0,000	14,523	14,523	9,797
4	0,000	15,317	15,317	17,417
5	0,000	15,684	15,684	27,214
6	0,000	15,884	15,884	39,188
7	0,000	16,004	16,004	53,339
8	0,000	16,083	16,083	69,667
${}^1E_{Ges}(Y_B)$	0,000	16,338	16,338	

n	Dissoziationsenergie		${}^{1,n}\Delta E_{Ges}(Y_B)$	
	Eab0-Ean0	E_Bahn0	E_0	${}^nX_{0,0}$
1	0,000	0,000	0,000	0,766
2	3,552	9,190	12,742	3,066
3	4,210	10,892	15,102	6,898
4	4,440	11,488	15,928	12,263
5	4,547	11,763	16,310	19,161
6	4,604	11,913	16,517	27,592
7	4,639	12,003	16,643	37,556
8	4,662	12,062	16,724	49,053
${}^1E_{Ges}(Y_B)$	4,736	12,253	16,989	

3.5. Ablauf der Anregung bezogen auf Messwert_Gl.(40):

Nachdem feststeht, dass unser Molekülmodell mit der Urey'schen Messwertformel nach Gl.(40) übereinstimmt und mit den Teller'schen Rechenwerten für den Normalzustand im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq ca.90^\circ$ nicht in Widerspruch steht, kann die Existenzweise des H_2^+ -Ions weiter untersucht werden. Es soll herausgefunden werden, wie die Anregung strukturiert ist. Dazu wird die Gesamtenergie im angeregten Zustand ${}^n E_{Ges}$ an der Stelle ${}^n x_0$ also in der Ruhelage des Ions mit $g_B = 90^\circ$ betrachtet. Gleichsetzen von Gl.(40) $j^a \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot E_{H1}$ und Gl.(36) ergibt

$$j^a \cdot E_{H1} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{n^2} = E_{Ges} + n z \cdot \frac{1/2 h}{2 \cdot T_B} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360-90} \quad \text{Einsetzen von Gl.(47) mit}$$

$${}^n z = {}^1 z \quad \text{führt mit } a = \frac{3}{2} \quad \text{zu... (48)... } j^{3/2} \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = {}^1 z \cdot \frac{1/2 h}{2 \cdot T_B} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{und Gl.(38) gemäß}$$

$${}^1 T_B = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{3}{j^2} \cdot \frac{1}{c_1} = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{3}{j^2} \cdot \frac{1}{\frac{4}{3} \cdot j^{3/2} \cdot j^{3/2}} \quad \text{bzw.} \quad {}^1 T_B = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{3}{j^5} \cdot \frac{3}{4} \quad \text{führt mit}$$

$$\text{Gl.(23a) gemäß } \frac{3}{j^5} = \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} = 2,0500^2 \quad \text{zu } {}^2 T_B = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} \cdot \frac{3}{2} \quad \text{bzw.}$$

$$\text{... (49)... } {}^2 T_B = \frac{h}{E_{H1}} \cdot \frac{{}^1 r_B^2}{r_{H1}^2}$$

Kontrollrechnung:

Es wird Bezug auf ${}^1 T_{H1}$ (das ist die Elektron-Umlaufdauer auf der Grundbahn des H-Atoms) genommen, um den Sachverhalt zu klären. Mit Gl.(37) gemäß $2 T_{H1} = \frac{h}{E_{H1}}$ erhalten wir

$$(49a)... {}^2 T_B = 2 T_{H1} \cdot \frac{{}^1 r_B^2}{r_{H1}^2} \quad \text{bzw.} \quad {}^2 T_B = 2 T_{H1} \cdot \frac{{}^1 r_B^2}{r_{H1}^2} = 2 T_{H1} \cdot \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} \cdot \frac{3}{2} \quad \text{eingesetzt in Gl.(48)}$$

$$j^{3/2} \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{1/2 h}{2 T_{H1} \cdot \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} \cdot \frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{bzw.} \quad \frac{j^5}{9} \cdot \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} \cdot \frac{3}{2} \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{1/2 h}{2 T_{H1}} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$\text{Wieder mit Gl.(23a) gemäß } \frac{j^5}{3} = \frac{r_{H1}^2}{{}^1 x_0^2} \quad \text{führt zu } \frac{r_{H1}^2}{{}^1 x_0^2} \cdot \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{1/2 h}{2 T_{H1}} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Damit vereinfacht sich der Ausdruck und führt zum richtigen Kontrollergebnis:

$$(50)... \left(1 \cdot \frac{1}{2}\right) \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{1/2 h}{2 T_{H1}} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{in Übereinstimmung mit Gl.(13)} \quad 1 \cdot E_{H1} = \frac{1 h}{2 T_{H1}}$$

Im Falle der Anregung gilt also folgender Zusammenhang:

$$(51) \dots j^{a=3/2} \cdot E_{H1} \cdot \frac{4}{n^2} \cdot \frac{1}{n^2} = E_{H1} \cdot \frac{4}{n^2} \cdot \frac{1}{n^2} + z \cdot \frac{\frac{1}{2}h}{\left[\frac{r_B}{r_{H1}}\right]^2} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360-90}$$

$=0..für..g_B=90^\circ$

Der Vergleich zwischen Gl.(51) und Gl.(13) zeigt wie die Bahn-Wirkungserzeugung des Elektrons abläuft: Im H-Atom führt bei Bezug auf Gl.(40) die doppelte Umlaufdauer $2T_{H1}$ bei ganzen Quantenzahlen $1h$ zu einer Bahn-energieerzeugung von $1E_{H1}$. Im H_2^+ -Molekül führt die gleiche Umlaufdauer $2T_{H1}$

bei halben Quantenzahlen $\frac{1}{2}h$ und einer dem Lauflängenverhältnis $\frac{(2p \cdot r_B)^2}{(2p \cdot r_{H1})^2}$

erhöhten Bahnenergieerzeugung. Da pro Elektron-Bahnumlauf Wirkungsquanten ins Dasein gebracht bzw. erzeugt werden und nicht die Energie, ist die Energie auch kein ursächliches Phänomen, sondern nur Folgeerscheinung von innerhalb einer Zeit entstandener Wirkung. Und weil Quantenzahlen nicht beliebig teilbar sind, ergibt sich keine andere Wahl, als das Lauflängenverhältnis der Umlaufdauer zuzuordnen, die sich dadurch verkürzt. Während im H-Atom nur 1 Orbital zur Wirkungserzeugung zur Verfügung steht, im H_2^+ -Ion zwei Orbitale, die zwar bei $I_B = 90^\circ$ nur mit $\frac{360}{360-90} = \frac{4}{3}$ wirksam sind, was jedoch bei Anregung offenbar keine Rolle spielt. Wir erhalten also folgenden Ausdruck:

$$(52) \dots 1 \cdot E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{\frac{1}{2} \cdot h}{\left[\frac{2p \cdot (n^2 \cdot r_B)}{2p \cdot r_{H1}}\right]^2} \cdot 2T_{H1} = \frac{\frac{r_{H1}}{n^2 \cdot r_B} \cdot 1/2 \cdot h}{\frac{n^2 \cdot r_B}{r_{H1}} \cdot 2T_{H1}} \cdot 4^2 \quad \text{aus Gl.(19)}$$

Der rechte Teil von Gl.(51) zeigt an, wie sich das H_2^+ -Ion im Vergleich zum H-Atom verhält. Infolge Anregung wird die Wirkung h aufgrund der Bahnquantenbedingung, wie in der Herleitung zu Gl.(7) ausführlich dargelegt, in Abhängigkeit von $\frac{2p \cdot r_{H1}}{2p \cdot (n^2 \cdot r_B)}$ gequantelt. Diese Interpretation ist durch den quadratischen Ausdruck und die damit ermöglichte Kehrwertbildung naheliegend.

Gl.(51) zeigt auch, dass die Wirkung selbst nicht durch die Hauptquantenzahl n gequantelt ist, sondern dass sich infolge Anregung der Radius der Umlaufbahn, im H-Atom entsprechend $n^2 \cdot r_{H1} = r_{Hn}$ und im H_2^+ -Ion entsprechend $n^2 \cdot r_B = r_B$ vergrößert hat.

Es wird nun die Situation bei Bezug auf Gl.(39) untersucht.

3.6. Ablauf der Anregung bezogen auf Messwert_Gl.(39):

(52)... $\boxed{{}^1n\Delta E = {}^1E_{Ges} - {}^nE}$ und erhalten mit Gl.(42) und Gl.(43) sowie mit

$${}^nE = \frac{E_{H1}}{n^2} \text{ bzw. } E_{H1} = \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot {}^1E_{Ges} \text{ bzw. } {}^nE = \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot {}^1E_{Ges} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ den Ausdruck}$$

$${}^1E_{Ges} - {}^nE = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B)^1x_0} \cdot \left(1 - \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1x_0^2} \cdot f(g_B)^1x_0 \cdot \left(1 - \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{3/2 \cdot 1x_0^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot \left(1z - \frac{{}^nz}{n^2} \right)$$

Auch hierbei ist nz die noch zu suchende Größe. Für $n = \infty$ ergibt sich dann definitionsgemäß die Ionisationsenergie ${}^1E_{Ges}$, da nE gemäß Gl.(44) zu null wird.

Nun führen wir die Rechnung weiter aus, subtrahieren ${}^1E_{Ges}$ auf jeder Seite

$$(53)... \boxed{-{}^nE = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{f(g_B)^1x_0} \cdot \left(-\frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1x_0^2} \cdot f(g_B)^1x_0 \cdot \left(-\frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{n^2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{3/2 \cdot 1x_0^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot \left(-\frac{{}^nz}{n^2} \right)}$$

und können die Form von nE bestimmen. Dazu wird die Stelle untersucht

$$g_B = 90^\circ \text{ für } n=1. \text{ Mit Gl.(23)... } {}^nz = 1z = \frac{9}{j^{7/2}}, \quad 1x_0^2 = \frac{3}{j^5} \cdot r_{H1}^2 \text{ und mit der Kurzform}$$

$${}^nx = f(g_B)^1x_0 \cdot n^2 = 1 \cdot 1x_0 \cdot 1^2 \text{ ergibt sich}$$

$$-{}^nE = + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1x_0} \cdot \left(-\frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{1^2} \right) - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{1x_0^2} \cdot 1x_0 \cdot \left(-\frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{1^2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{\frac{3}{2} \cdot 1x_0^2} \cdot \frac{360}{360 - 90} \cdot \left(-\frac{1}{1^2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \right)$$

$$+{}^nE = + \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1}}{\frac{3}{2} \cdot \frac{3}{j^5}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \left(+\frac{1}{1^2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \right) \text{ bzw. allgemein } {}^nE = j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{E_{H1}}{n^2} \cdot \frac{1}{E_{Ges} = 16,30...eV}$$

Damit besteht keine Übereinstimmung mit Gl.(39). Diese kann jedoch leicht erzielt werden. Hierzu muss Gl.(23) lediglich so modifiziert werden, dass sich

$${}^nE = E_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ gerade einstellt. Daher ergibt sich}$$

$$(54)... \boxed{{}^nz = \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} = \frac{9}{j^5} \cdot \frac{3}{4}}$$

Damit kann auch hier der Verlauf der Gesamtenergie im Normalzustand und im Anregungszustand im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ explizit berechnet werden. Nachdem fest steht, dass unser Molekülmodell auch mit der Urey'schen Messwertformel nach Gl.(39) in Übereinstimmung gebracht werden kann und mit den Teller'schen Rechenwerten für den Normalzustand im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq ca.90^\circ$ nicht in Widerspruch steht, kann die Existenzweise des H_2^+ -Ions auch hier untersucht werden. Es soll also auch hier herausgefunden werden, wie die Anregung strukturiert ist.

Dazu wird die Gesamtenergie im angeregten Zustand ${}^n E_{Ges}$ an der Stelle ${}^n x_0$ also in der Ruhelage des Ions mit $g_B = 90^\circ$ betrachtet. Gleichsetzen von Gl.(39)

$$\left(j^a \cdot \frac{4}{3} - \frac{1}{n^2} \right) \cdot E_{H1} \text{ und Gl.(36) sowie mit } a = \frac{3}{2} \text{ ergibt}$$

$$\left(j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} - \frac{1}{n^2} \right) \cdot E_{H1} = \underset{=0}{\cancel{14243}} E_{Ges} + n_z \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{360}{360-90}$$

Damit erhalten wir mit dem Minuszeichen(!) einen grundlegenden Unterschied im Vergleich zum Ansatz mit Gl.(40). Vg. Gleichung zeigt, das im Falle des Bezugs auf Gl.(39) das Bahnwirkungs Vielfache selbst von der Hauptquantenzahl n abhängig wäre. Einsetzen von Gl.(54) gemäß $n_z = \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4}$ führt zu

$$\left(j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} - \frac{1}{n^2} \right) \cdot E_{H1} = \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{1}{j^{3/2}} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$\left(j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} - \frac{1}{n^2} \right) \cdot E_{H1} = \frac{9}{j^5} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Wieder mit Gl.(23a) gemäß $\frac{3}{j^5} = \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2}$ erhalten wir mit $j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} \cdot E_{H1} = {}^1 E_{Ges}$

$$\left(j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} - \frac{1}{n^2} \right) \cdot E_{H1} = 3 \cdot \frac{{}^1 x_0^2}{r_{H1}^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{T_B} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ mit Gl.(13) } \frac{1h}{E_{H1}} = 2T_{H1}$$

$$2 \cdot T_B \cdot \left(j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{{}^1 r_B^2}{r_{H1}^2} \cdot 2T_{H1} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ bzw. mit } j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} = \frac{{}^1 E_{Ges}}{E_{H1}}$$

~~6447448~~
-1 bei Gl.(40)

$$(55) \dots 2 \cdot T_B = \frac{{}^1 r_B^2}{r_{H1}^2} \cdot 2T_{H1} \cdot \left(\frac{{}^1 E_{Ges}}{E_{H1}} - 1 \right)^{-1}$$

~~14243~~
wie...Gl.(52)

Der in Gl.(55) enthaltene Ausdruck in den runden Klammern ergibt sich direkt aus der Bezugnahme auf Gl.(39). Bei Bezug auf Gl.(40) ist dieser Ausdruck gleich eins. Zwar ist verständlich, dass die Energie E_{H1} mit dem Quadrat der Hauptquantenzahl gequantelt ist, jedoch fehlen hier die zur Interpretation von Gl.(52) schlüssigen Erklärungen, eben gerade weil das Verhältnis der Energien auftritt und nicht auf die eigentlichen physikalischen Grundgrößen Wirkung und Zeit Bezug genommen werden konnte. Vielmehr hat sich lediglich das Messergebnis bis an diese Stelle durchgezogen ohne dass dies durch eine passende Substitution vermeidbar gewesen wäre. Da Rechenfehler nicht vorliegen ist zu konstatieren, dass die Zuordnung zum H_2^+ -Ion offenbar nicht gegeben ist.

Wenn dem aber so ist, dann muss Gl.(39) zwingend dem H₂-Molekül und damit dessen Anregungsspannung zugeordnet werden. In diesem Falle kann wieder auf das Molekülmodell mit Bezug auf die Anregungsspannung zurückgegriffen werden. Dies bedeutet, dass Gl.(23b) gemäß $x_0 = \frac{2}{j} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{\sqrt{c_1}}$ nicht mehr mit

$c_1 = j^{3/2} \cdot \frac{4}{3} \cdot j^{3/2}$ anzusetzen ist, um die Gesamtenergie des H₂⁺-Ions selbst einzustellen, sondern nun mit $c_1 = 1$ zu rechnen ist, um wieder die Anregungsenergie des H₂-Moleküls für den ²Σ_g-Zustand einzustellen. Es gilt dadurch an der Stelle ¹x₀ der Minimalenergie ¹E₀ nicht mehr Gl.(23c) gemäß

$$E = E_0 = \overset{13,53}{E_{H1}} \cdot \frac{1}{\underset{15...eV}{j^{3/2}}} \cdot \underset{c_1}{\frac{4}{3} \cdot j^{3/2}} = 16,30...eV, \text{ sondern } E = E_0 = \overset{13,53}{E_{H1}} \cdot \frac{1}{\underset{15...eV}{j^{3/2}}} \cdot \underset{c_1}{1} = 15,0...eV$$

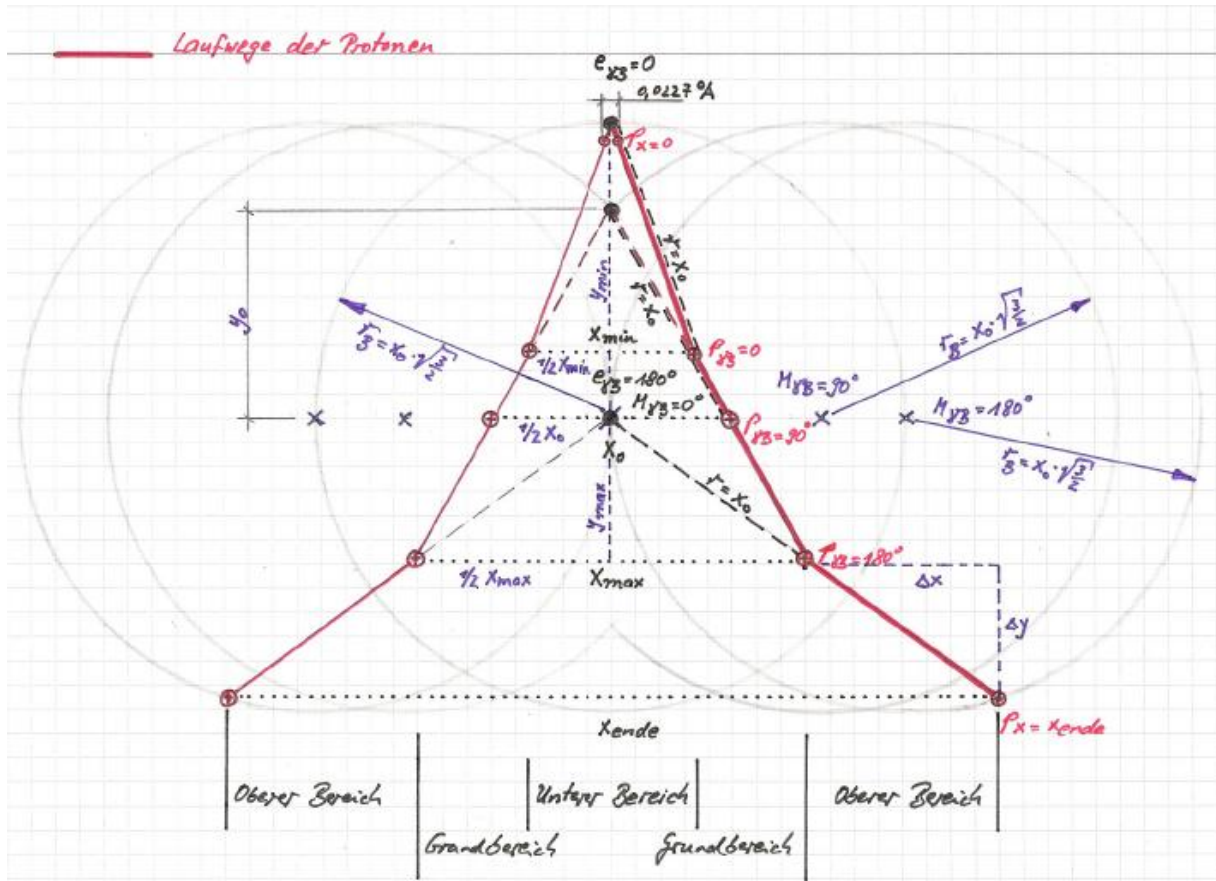
Der Idee von Niessen folgend wird hier so getan, als ob die Anregungsenergie einem im Inneren eines angeregten H₂-Moleküls befindlichen H₂⁺-Ions zukommt, wobei die Störungsenergie zwischen Ion und angeregtem Elektron vernachlässigt wird. Diese Situation haben wurde in einer anderen **eigenen Ausarbeitung**⁷ bereits eingehend untersucht. Es wurde dort die Anregungsenergie für das im Innern des angeregten H₂-Moleküls befindliche H₂⁺-Ion mit Orbital-Status $g_B = 180^\circ$ zu 16,394..eV berechnet. Dies ist ziemlich genau die von Urey und Niessen beobachtete Anregungsspannung von 16,45..eV. E.Teller berechnete bei $E_{H1} = 13,53...eV$ mit der Wellenmechanik 16,29..eV. Mit vg. Ausarbeitung wurde mit $E_{H1} = 13,557...eV$ der Wert 16,338..eV ermittelt.

Damit sind wir in der Lage Gl.(39) zu interpretieren: Wird ein H₂-Molekül angeregt und ist das angeregte Elektron hinreichend weit entfernt, so befindet sich Im Inneren des angeregten H₂-Moleküls ein H₂⁺-Ion, das infolge der Anregung im gestreckten Status $g_B = 180^\circ$ mit zwei sich nur noch in einem Punkt berührenden Orbitalen vorliegt (s. Prinzipbild). Das im inneren H₂⁺-Ion verbliebene Elektron wirkt allein auf zwei Orbitale. Das Elektron verspürt im Innern seiner Orbitale jeweils einen Kern. Das angeregte äußere Elektron verhält sich gleichartig zum H-Atom. Das innere H₂⁺-Ion bleibt unangeregt im Status $g_B = 180^\circ$. Wird das äußere Elektron entfernt, so bleibt ein unangeregtes H₂⁺-Ion in Ruhelage, d.h. im Status $g_B = 180^\circ$ zurück. Dieses Ion hat jedoch im Vergleich zum H₂⁺-Ion, das sich im Inneren des angeregten H₂-Moleküls befindet, eine um den linearen Faktor $\frac{1}{\sqrt{c_1}} = \frac{1}{1,043636}$ reduzierte Größe. Dies ist deswegen so, weil dieser Vorgang der

Elektron-Abspaltung **im H₂⁺-Ion unter Energieerhaltung** erfolgt, denn es wird ja gerade unterstellt, dass das angeregte Elektron hinreichend weit entfernt sein soll, so dass eben Störungsenergie vernachlässigbar ist. Daher stellt sich als Ruhelageenergie des unangeregten nun aber freien H₂⁺-Ions der (bis auf die vernachlässigbare Störungsenergie von 16,394 – 16,334 = 0,06..eV) der gleiche Energiewert ein, wie für das gestreckte innere H₂⁺-Ion. Damit sind wir am Ende des Einbezugs der Ergebnisse aus unserem Molekülmodell angekommen.

Anhang

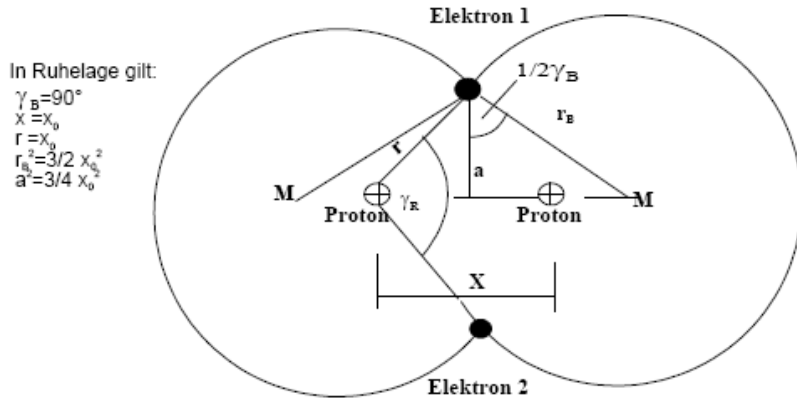
Lauflinienbild H_2^+ -Ion



Die Herleitung des Lauflinienbildes ist dem Artikel „**Molekül ergänzte Fassung**“ im Downloadbereich unter <http://www.physik-theologie> zu entnehmen.

Zum Wasserstoff-Molekül:

Prinzipbild Wasserstoff - Molekül (H₂)



In Ruhelage gilt:
 $\gamma_B = 90^\circ$
 $x = x_0$
 $r = x_0$
 $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$
 $a^2 = 3/4 \cdot x_0^2$

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

$$E_{Ges} = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - 2 \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{(2a)^2} \cdot x - 4p \cdot \frac{j a}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{(2a)^2} \cdot x + z \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

1 4 4 2 4 4 B
1 4 4 2 4 4 4 B

elektrische Elektron-Elektron Abstoßung
magnetische Elektron-Elektron-Anziehung

Es stellt $E_{Ges}(x)$ den Energieinhalt des H₂-Moleküls dar. Normierung auf Energienullpunkt erfolgt wie in den Erläuterungen zu Gl.(22) beim H₂⁺-Ion beschrieben.

Hierbei ist $z = \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \mathbf{123}$ und $x_0 \cong \frac{r_{H1}}{j^5} = \mathbf{1.41243} \cdot 10^{-10} \text{ m}$ mit $r_{H1} = 0,529177 \text{ \AA}$

Elektron..1 wie..H₂⁺-Ion
Elektron..2 wie..H-Atom

1.41243
1.41243

n...Fußnote..6
Seite..303

Es berechnet sich mit $E_{H1} = 13,6056 \text{ eV}$ die Ruhelageenergie des H₂-Moleküls zu:

$$E_{Ges} = -\frac{2}{3} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} - 4p \cdot \frac{j a}{2} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} + \left(\frac{9}{j^{7/2}} + 1 \right) \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{x_0^2} \cdot \frac{4}{3}$$

1 4 4 2 4 4 4 B
1 4 4 2 4 4 4 B

-0,1388.eV

$$E_{Ges} = E_{H1} \cdot \left[-\frac{2}{3} \cdot j^{-5} - 4p \cdot \frac{j a}{2} \cdot \frac{1}{3} \cdot j^{-5} + \left(\frac{9}{j^{7/2}} + 1 \right) \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} \cdot j^{10} \cdot \frac{4}{3} \right] = 2,321087 \cdot 13,6056 = \underline{\underline{31,5798 \text{ eV}}}$$

Zum Vergleich: Die Ionisationsenergie des H₂-Moleküls ist: $2 \cdot 13,6056 \text{ eV} + \mathbf{4,476} \text{ eV} = \underline{\underline{31,6872 \text{ eV}}}$

1 4 4 2 4 3
1 4 4 2 4 3

n...Fußnote..6
Seite..291

Bildquelle:

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

Aus diesem Bild wurde der Verlauf $^2\Sigma_g$ des H_2 stark vergrößert und möglichst genau vermessen. In der Bildquelle ist der Grundzustand des H_2 -Moleküls als Energie-Nulllinie ($^1E_{H_2} = 0$) gewählt. Aus den angegebenen Zahlenwerten geht hervor, dass $E_{Ges_H1} = -13,57.eV$ und $^1E_{Ges_H2} = -31,62.eV$ zugrunde liegen. Heute rechnet man mit $^1E_{Ges_H2} = -31,6056.eV$, früher rechnete man mit $2 \cdot 13,53 + 4,36 = 31,42.eV$ (Niessen).

