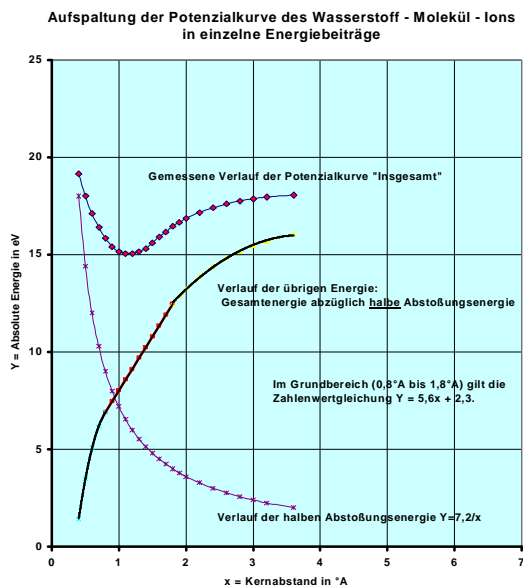
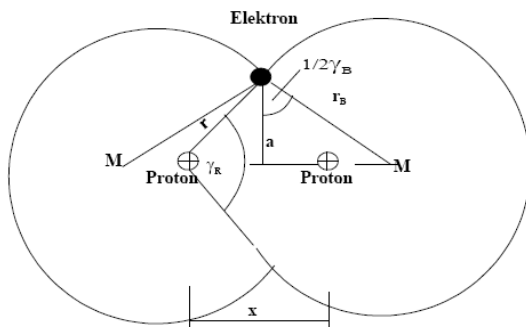


Das innere Wasserstoffmolekül – Ion (H_2^+) im $^2\Sigma_g$ Zustand des angeregten Wasserstoffmoleküls (H_2) aus elementarphysikalischer Sicht

Ergänzte Fassung



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



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 $A=4\pi r^2 \cdot 1$).

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

$$\begin{aligned} r &= x_0 = 2/\varphi \cdot r_{H1} \\ r_B &= [3/2]^{1/2} \cdot x_0 \\ z &= 9/j^{7/2} \\ g_B &= 90^\circ \\ g_C &= 120^\circ \\ E_0 &= 1/j^{3/2} \cdot E_{H1} \end{aligned}$$

Im Bereich $0^\circ \leq g_B \leq 180^\circ$ gilt:

$$\begin{aligned} E_{ges} &= E_{H1} \cdot j/2 \cdot [x_0/x + 2/j^{5/2} + x/x_0 - 2] \\ x(g_B) &= r_{H1}/j^{7/2} \cdot [360/(360-g_B) \cdot 3/2 - 2] \end{aligned}$$

Angaben zum Autor

Dipl. Ing. Martin Bock

Düppenweilerstraße 62

66763 Dillingen Diefflen

Email: martin-bock@t-online.de

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

Widmung

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

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

Diefflen, 11.09.2001

Vorwort

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

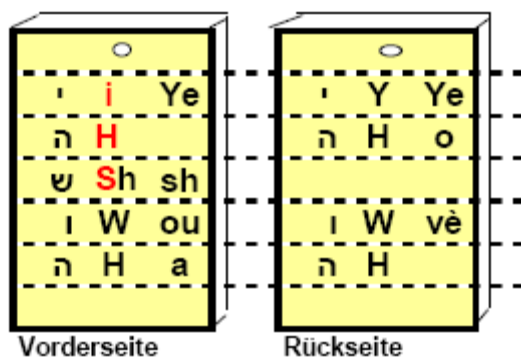
Zwar gelang es mit der Wellengleichung die im Elementarbereich herrschenden Phänomene mathematisch korrekt zu beschreiben, jedoch wird zu der Existenzweise der Elementarteilchen keine Aussage getroffen. Dies liegt an der mathematischen Natur der Wellengleichung, der nicht schon deswegen physikalische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

Ich will aber diesen aus mathematischer Sicht bestens bewährten Formalismus nicht wiederholen, sondern meinen eigenen Weg einschlagen. Einen Weg, der mir bei den Betrachtungen über die Ursachen der Schwerkraft und über die Natur der Atomhülle die elementaren Zusammenhänge in anschaulicher und der Realität entsprechenden Weise näher gebracht hat. Auch bei meinen hier angestellten Betrachtungen zum Molekül werden aufgrund physikalisch begründeter Ansätze gezwungenermaßen phänomenorientierte Lösungen erzielt. Ees wird dadurch ein unmittelbarer Einblick in die Seins – Gestaltung eines Moleküls erhalten.

Vorwort zum Kapitel Ergänzungen

Zur Festigung der hier vorgebrachten Theorien wurde zwischenzeitlich das Kapitel „Ergänzungen“ eingefügt. Hier werden neben der Wiederholung der Grundlagen insbesondere die noch fehlenden Bereiche oberhalb und unterhalb des Grundbereichs ergänzt. Der Vergleich mit dem gemessenen Verlauf der Gesamtenergie zeigt eine exakte Übereinstimmung für alle x-Abstände.

Diese Ergänzung ist dem gewidmet, dessen Name auf dem ng. symbolischen Goldtäfelchen eingraviert ist. Möge jeder Mensch „Yeshoua“ als den Gesandten Gottes anerkennen.



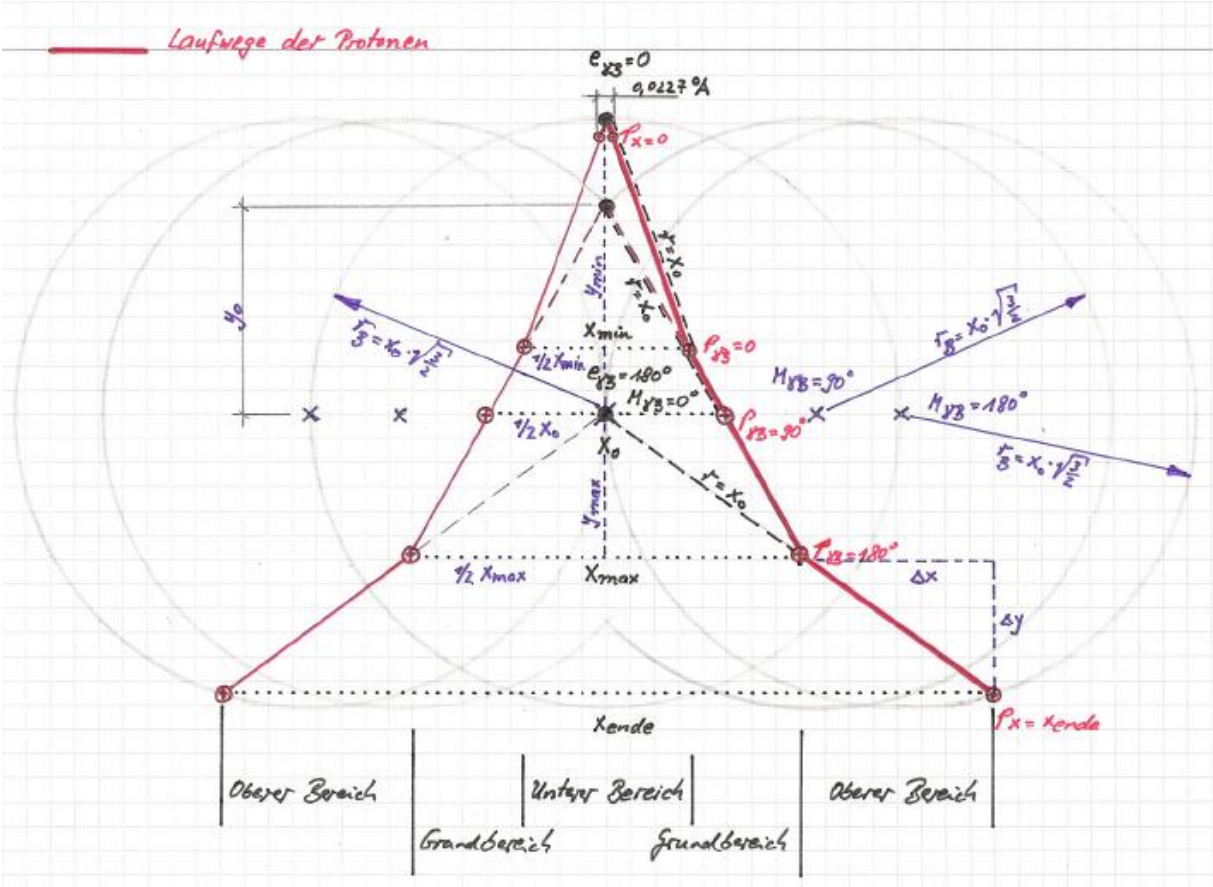
Möge jeder Wissenschaftler einsehen, dass er aus sich selbst heraus überhaupt nichts vermag, dass alles Gelingen von Gott gegeben wird, dass die benötigte Inspiration durch den Heiligen Geist geschenkt wird, wenn man IHN darum bittet. Hier ist Bemühen und Ausdauer gefragt, denn alles Zuteilen erfolgt nach der Denkweise Gottes und in dessen Zeit.

Diefflen, Pfingsten 27.05.2007

Verlagsrechte

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

Blick in das Innere des H_2^+ -Moleküls mit Laufweg der beiden Protonen (rot), des Elektrons (gestrichelt) und des Orbital-Mittelpunkts (M):



Inhaltsverzeichnis

Angaben zum Autor	2
Widmung	2
Verlagsrechte	3
Inhaltsverzeichnis	5
1. Beschreibung der Untersuchungsmethode	6
2. Datenbasis ist die Potenzialkurve	7
3. Ursache der hälftigen Ladungskraft	8
4. Aufspaltung der Potenzialkurve in einzelne Energiebeiträge	8
5. Erster Baustein ist die Ladungsenergie.....	9
a) Allgemeine Normierung der Ladungsenergie	9
b) Normierte Abstoßungsenergie	10
c) Normierte Anziehungsenergie.....	10
6. Zweiter Baustein ist das Rechenschema zum H_2^+ - Molekül.....	11
a) 1. Ansatz: Ladungsenergie zwischen Kern und Elektron ist von x - abhängig	11
b) 2. Ansatz: Ladungsenergie zwischen Kern und Elektron nicht von x -abhängig.....	13
7. Dritter Baustein ist die Geometrie des Molekül - Orbitales.....	15
8. Vierter Baustein ist die Bahnenergie.....	16
a) Allgemein.....	16
b) Normierte Bahnenergie.....	16
9. Bestimmung des Orbitalradius	17
a) Allgemein.....	17
b) Modell 1: Energieabsorption führt zur Veränderung des Überlappungswinkels	19
c) Bestimmung der Grenzen des Grundbereiches	20
d) Modell 2: Energieabsorption führt zur Veränderung des Orbitalradius	20
e) Modell 1/2: Ursache der Bahnwirkung.....	20
10. Zusammenfassung der Ergebnisse für den Bereich des Grundzustandes	21
11. Ergänzungen.....	22
a) Aufstellen der allgemein gültigen Formel für Bahnenergie:	23
b) Aufstellen der allgemein gültigen Formel für die Gesamtenergie E_{ges} :	24
c) Untersuchungen zum Grundbereich ($x_{min} \leq x \leq x_{max}$):.....	25
d) Untersuchungen zum unteren Bereich ($0 \leq x \leq x_{min}$):	30
e) Untersuchungen zum oberen Bereich ($x_{max} \leq x \leq x_{ende}$) (Stelle mit Molekül-Zerfall):.....	41
f) Ergebnisse:	67
12. Schlusswort.....	71

1. Beschreibung der Untersuchungsmethode

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

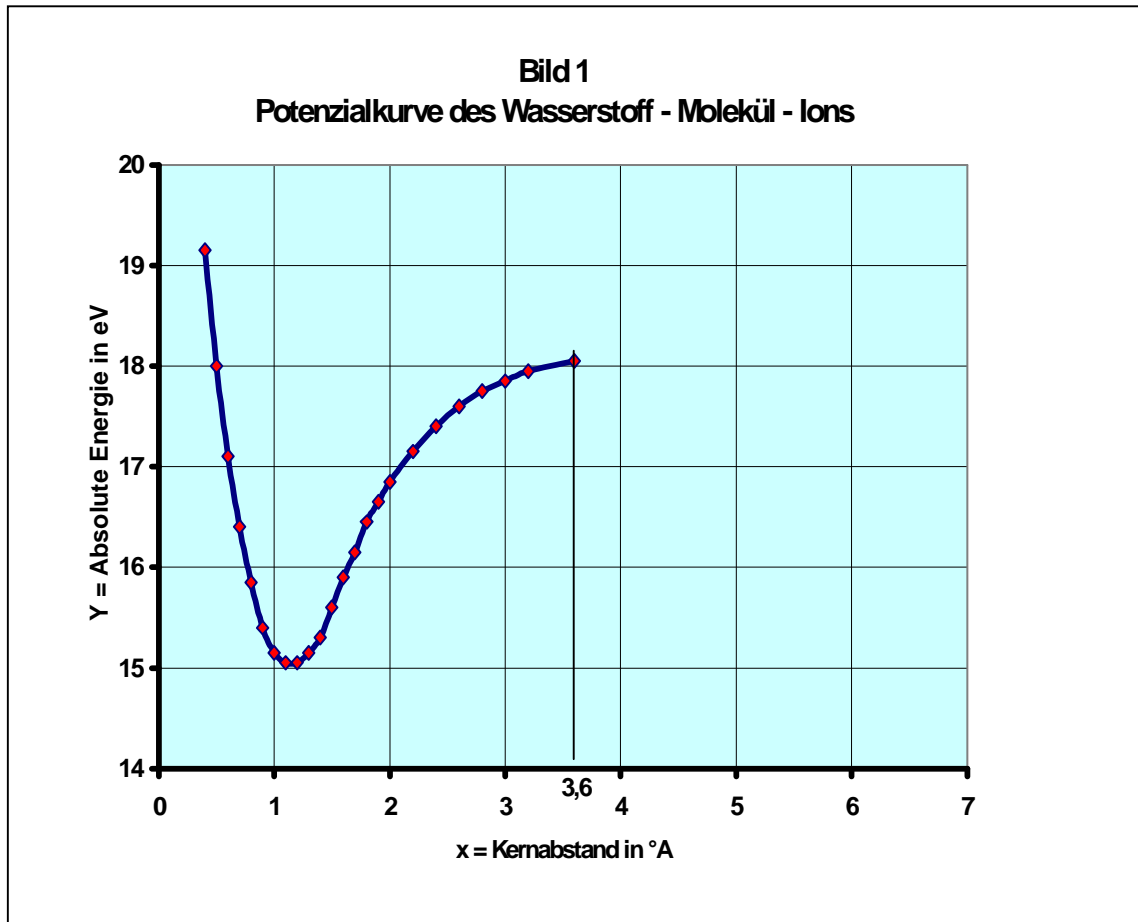
Es wird also einerseits davon ausgegangen, dass im Molekül keine neuen Phänomene auftreten, andererseits müssen dennoch fundamentale Unterschiede in der Existenzweise der Elementarteilchen im Vergleich zu einem Atom bestehen. Diese Unterschiede können *nur* mit der Anwesenheit eines zweiten, eigenständigen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

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

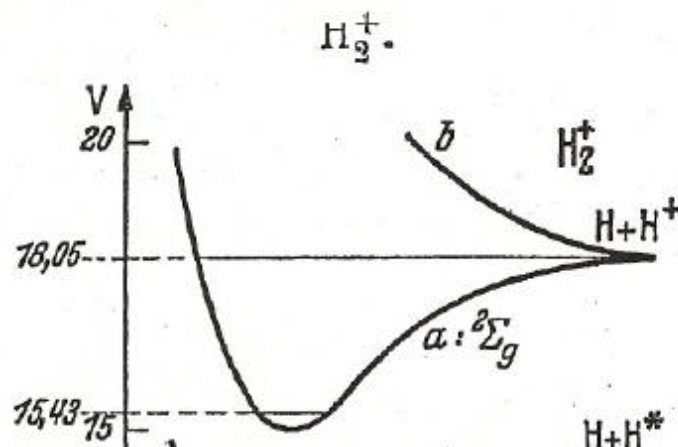
Die hier untersuchte Potenzialkurve ist der $^2\Sigma_g$ Zustand des angeregten Wasserstoff(H_2)moleküls. In dieser Kurve wird die Anregungsspannung dargestellt, die erforderlich ist, um aus einem H_2 -Molekül ein im Inneren des angeregten H_2 -Moleküls befindliches H_2^+ -Ion und ein dieses innere H_2^+ -Ion umgebende angeregtes Elektron entstehen zu lassen. Dabei wird angenommen, dass das angeregte Elektron hinreichend weit vom inneren H_2^+ -Ion entfernt ist, so dass die Störungsenergie, die das angeregte Elektron auf das innere H_2^+ -Ion ausübt vernachlässigt werden kann.

2. Datenbasis ist die Potenzialkurve

Natürlich muss sich auch unsere Ausarbeitung auf Messwerte stützen. Es wird der aus Messwerten sich ergebende ng. Verlauf der Potenzialkurve des **inneren** H_2^+ - Ions zugrundegelegt. Diese sogenannte Potenzialkurve ist eine Darstellung der absoluten Energie in Elektronenvolt (Y –Wert in eV) über dem Abstand der beiden Kerne (x –Wert in Å bzw. 10^{-10}m).



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



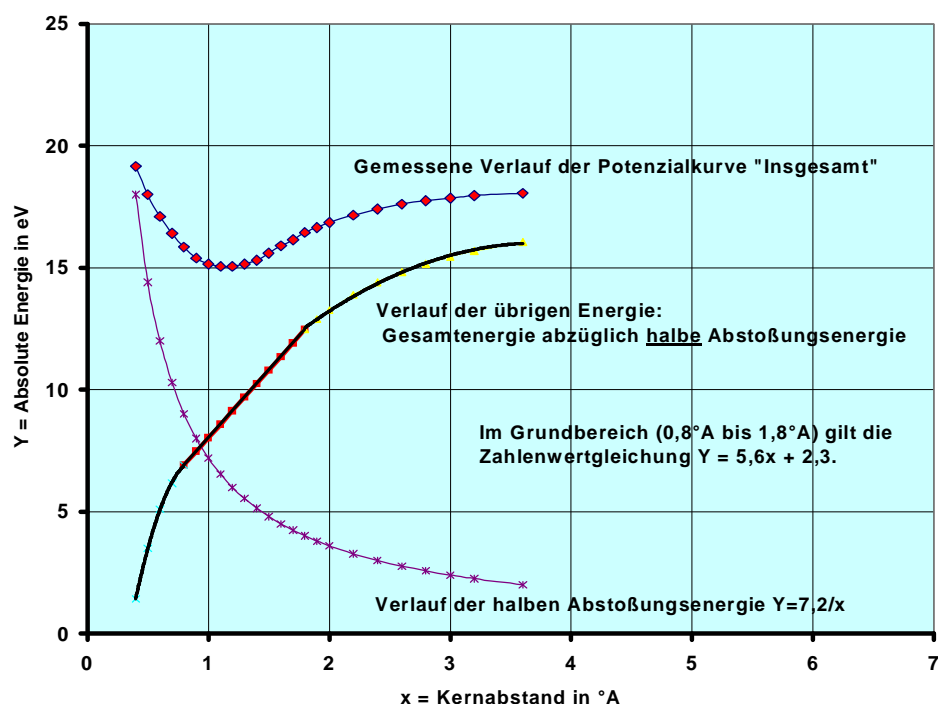
Der in Bild 1 dargestellte Verlauf ist die Summe aller im **inneren** H_2^+ - Ion gegebenen Energien. Diese Gesamtenergie beinhaltet somit auch die zwischen den Kernen herrschende Abstoßungsenergie. Da diese letzte Energie bzw. Kraft aber eindeutig vom Kernabstand abhängig ist, kann die in Bild 2 dargestellte Gesamtenergie um die Abstoßungsenergie reduziert werden, eben weil letztere eindeutig ist. Allerdings wird nur die Hälfte der üblichen Größe angesetzt, was bedeutet, dass im Molekül nur die Hälfte der Ladungskraft auftritt!

3. Ursache der hälftigen Ladungskraft

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

4. Aufspaltung der Potenzialkurve in einzelne Energiebeiträge

Bild 2



Im

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

Da wir aber aus unseren Untersuchungen zum Atom wissen, dass die auch hier auftretenden beiden Phänomene Ladungskraft und Bahnenergie mit Sicherheit nirgendwo eine Abhängigkeit von der Exponential(e) – Funktion aufweisen, kann auch beim Zusammenwirken der die vg. Verläufe verursachenden Phänomene eine solche Abhängigkeit nicht gegeben sein. Somit hebt sich unser Ergebnis bereits an dieser Stelle grundlegend von den über die Wellengleichung erzielten Ergebnissen ab! Vielmehr deutet das Auftreten linearer Abhängigkeit auf einfache Strukturen hin. Dies wiederum ermutigt geradezu unseren begonnenen Weg weiter zu beschreiten. Wir müssen daher unsere Untersuchungen mit der Beschreibung des Grundzustandes des Ions beginnen. Dies ist sinnvoll, denn erst wenn dieser „einfachste“ Bereich des Moleküls soweit geklärt ist, lohnt sich ein Blick in die angrenzenden Übergangsbereiche des energetisch stärker angeregten Zustandes. Im folgenden ist mit H_2^+ -Ion stets das **innere** H_2^+ -Ion gemeint.

5. Erster Baustein ist die Ladungsenergie

a) Allgemeine Normierung der Ladungsenergie

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

$$\underline{K_e = 2 \cdot [h_s / l t] \cdot 1/j \cdot (1/x)^2}$$

Hierbei bedeuten:

2 der Wechselwirkungsfaktor

h_s die elektrische Wirkung des Elektron, wobei $h_s = \frac{1}{2} a h \cdot j \cdot 1/2p$

a die sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante $1/137,0359$

h das Plank'sche Wirkungsquantum

j der Feldsummenfaktor ($j = \frac{1}{2} p^2 - 4 = 0,934802201$)

l die Elementarlänge (zugleich Radius der Massekugel des Elektrons, $1,321569 \cdot 10^{-15} \text{m}$)

t die Elementardauer $t = l/c$, wobei c die Invarianzgeschwindigkeit ist

x der Abstand der Teilchen

Der Ausdruck in den eckigen Klammern ist die Elementarkraft des Elektrons und gibt die Dimension der Kraft. Es ist diese Formel adäquat zu der in der Literatur für die Coulombkraft gängigen Schreibweise $K_e = e^2/4\pi\epsilon_0 \cdot 1/x^2$, wobei jedoch für diesen letzten Ausdruck die genauere Schreibweise $K_e = [2 \cdot (\frac{1}{2}e)^2/e_0 \cdot 1/(\frac{1}{2} \cdot 4\pi x^2)]$ zu bevorzugen ist. Wir wollen nun die v.g. Ausgangsformel für die elektrische Ladungskraft umformen, d. h. auf die Größen des Wasserstoffatoms normieren. Hierzu setzen wir anstelle h_s die gleichwertige Formel mit Bezug auf das Plank'sche Wirkungsquantum (h) ein und erweitern zusätzlich die Formel mit dem Ausdruck α^2/α^2 . Es ergibt sich dann über $K_e = 2 \cdot [(\frac{1}{2} a h \cdot j \cdot 1/2p)/l t] \cdot 1/j \cdot 1/x^2 \cdot a^2/a^2$ die Formel $K_e = 2 \cdot h \cdot [1/t \cdot j \cdot a^3/8p] \cdot (1 \cdot 2/j \cdot a^2) \cdot 1/x^2$. Der Ausdruck in der eckigen Klammer stellt die **Rydberg-Frequenz** (R_t) dar und der Ausdruck in der runden Klammer den Radius der energieärmsten (also der innersten) Bahn des Wasserstoffatoms (r_{H1}). Somit erhalten wir für die elektrische Ladungskraft den einfachen Ausdruck $K_e = 2 \cdot h \cdot R_t \cdot r_{H1}/x^2$. Da aber das Produkt $h \cdot R_t$ gleich der Energie (E_{H1}) des Wasserstoffatoms im Grundzustand ist, erhalten wir für die Normalform der Ladungskraft den Ausdruck:

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

Da sich die beiden Kerne des H_2^+ - Moleküls im Abstand „x“ voneinander befinden, bezieht sich die der elektrischen Abstoßungskraft zugehörige elektrische Abstoßungsenergie auf diesen Abstand „x“. Dies ist analog zum Wasserstoffatom, wo sich die Ladungsenergie ebenfalls auf den Abstand zwischen Elektron (Atomhülle) und Proton (Atomkern) bezog, also $x=r_{H1}$ beträgt. Die der elektrischen Ladungskraft adäquate elektrische Ladungsenergie (das ist die im elektrischen Ladungsfeld gespeicherte Energie) ergibt sich also durch den eindeutig vorliegenden Bezug auf den Kernabstand (x) gemäß der Formel $E_{ab} = K_{ab} \cdot x$. Folglich ergibt sich für zwei Protonen im Abstand x im Radialfeld für die Abstoßungsenergie der Ausdruck:

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

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

b) Normierte Abstoßungsenergie

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

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

In dieser Formel tritt der Feldsummenfaktor (j) natürlich nicht auf, weil nur die sich berührenden n -Schalen der beiden Teilchen die elektrische Ladungskraft bedingen und nicht etwa eine Summen-Energie über alle n Schalen. Mit $E_{H1}=13,56 \text{ eV}$ und $r_{H1}=0,529 \text{ \AA}$, erhalten wir für die Abstoßungsenergie die Zahlenwertgleichung $7,173/x$. Genau diesen Energieverlauf haben wir von dem Verlauf der gesamten Potenzialenergie abgezogen und sind dann auf die in Bild 2 dargestellte Aufspaltung gestoßen. Es wird im folgenden dargelegt, dass der Ansatz der *hälftigen* Elektron – Erschließungswirkung eine fundamentale Eigenschaft des Moleküls ist! Es wird gezeigt, dass sich der Verlauf der Potenzialkurve mit den hier vorgelegten Ansätzen rechnerisch und physikalisch nachvollziehen lässt.

c) Normierte Anziehungsenergie

Zwischen dem Elektron und den beiden Kernen des H_2^+ - Moleküls herrscht jeweils eine elektrische Anziehungskraft. Diese ist ebenfalls abhängig vom Abstand der Teilchen (r). Analog zur Abstoßungsenergie ergibt sich für ein radiales Außenfeld die Formel $K_{an} = 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{r^2}$. Während im Wasserstoffatom die elektrische Ladungskraft sich immer nur auf den Abstand $r=r_{H1}$ zwischen Elektron und Proton bezieht, sind jedoch im H_2^+ - Molekül zwei im Abstand (x) voneinander befindliche Kerne zu gegen. Es kann sich also die Anziehungsenergie (E_{an}) nicht wie beim Atom nur auf einen Kern beziehen, sondern zugleich auf beide Kerne. Dieser Orientierung wird durch den Kernabstand (x) im Ausdruck $E_{an} = K_{an} \cdot x$ Rechnung getragen. Somit ergibt sich der Ausdruck:

$$\underline{E_{an} = \frac{1}{2} \cdot 2E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{r^2} \cdot x}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Wir müssen hier beachten, dass in diesem Rechenschema die Anziehungsenergie (E_{an}) auf den Kernabstand (x) orientiert ist (1.Ansatz), womit auch für diese Energie eine erste Ableitung existiert. Daher tritt in vg. Formel der Faktor $1/f^2$ auf. Ferner fehlt die mit der Integration einhergehende Integrationskonstante. Diese Energiekonstante ist zwingend der Bahnenergie zuzuordnen, weil anderweitige Phänomene nicht existieren. Wir bezeichnen diese Integrationskonstante mit $E_{1,Bahn}$. Die Energiekonstante lässt sich berechnen, indem wir den an der Stelle $x = x_0$ geltenden *Messwert* der absoluten Energie ($E = E_0$) in unsere Überlegungen einbeziehen. An der Stelle $x = x_0$ gilt $E_0 = E_{Bahn} + E_{Lad}$, wobei der Messwert für $E_0 = \text{rd. } 15,0 \text{ eV}$ beträgt. Interessanterweise entspricht dieser Wert ziemlich genau dem Ausdruck $E_0 @ E_{H1}/j^{3/2}$. Eine Erklärung für diese Schreibweise wird im Kapitel „Ursache der Bahnwirkung“ gegeben. Ebenso können wir dem Ablesewert für $x_0 = \text{rd. } 1,132 \text{ \AA}$ eine adäquate Formel zuordnen. Es entspricht diese Größe ziemlich genau dem Ausdruck $x_0 = 2/j \cdot r_{H1} = (2/j \text{ \AA})^2 \cdot l = 1,136003 \text{ \AA}$. Folglich gilt $E_{1,Bahn} + E_{2,Bahn} + E_{Lad} = E_0$. Es ist also $E_{1,Bahn} = E_0 - E_{Lad} - E_{2,Bahn}$. Wir setzen nun die im vg. Rechenschema stehenden Ausdrücke ein und erhalten die Gleichung $E_{1,Bahn} = E_0 - [-E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (1 + 1/f^2)] - [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2)]$. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir für $x = x_0$ über den Ausdruck $E_{1,Bahn} = E_0 + [E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2)] + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x_0 / x_0^2 \cdot (-1 - 1/f^2)$ die Formel $E_{1,Bahn} = E_0 + [E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 \cdot (-1 + 1/f^2)] + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1 / x_0 \cdot (-1 - 1/f^2)$ und damit die Gleichung

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

Diese über das Rechenschema zwingend ermittelte Formel für die 1.Bahnenergie zeigt, dass der Faktor f und damit auch der Elektronabstand vom Kern, für die 1.Bahnenergie unerheblich ist. Damit sind wir in der Lage, die Potenzialkurve im Grundbereich mit unseren Formeln zu beschreiben! Es ist $Y(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x - (E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/r^2 \cdot x) + [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / r^2] + [E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0]$. Hieraus erhalten wir $Y(x) = E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + [E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0]$. Wir können diesen Ausdruck in eine Zahlenwertgleichung überführen. Hierzu setzen wir $E_{H1} = 13,56 \text{ eV}$, $r_{H1} = 0,529 \text{ \AA}$, $x_0 = 1,136 \text{ \AA}$. Es ergibt sich dann $Y(x) = 7,173/x + 5,5585x + 2,371$, womit wir über den gesamten Grundbereich den beobachteten Verlauf der Potenzialkurve praktisch exakt getroffen haben. Da wir aber nur von einer Übereinstimmung mit der Kurve in 2 Punkten ausgegangen sind, nämlich $E'(x_0) = 0$ und $E(x_0) = E_0$, bedeutet die nun vorliegende Übereinstimmung über den gesamten Grundbereich des Kurvenverlaufs, also über alle Punkte, dass die in unserem Rechenschema angesetzten Formeln nicht zufällig zutreffend sind. Es bedeutet die Übereinstimmung also nicht, dass der Kurvenverlauf auf mathematischem Wege erzwungen wurde. Damit haben wir eindeutig die Richtigkeit unserer Ansätze bewiesen. Es ist daher das Auftreten hälftiger Ladungsenergie als real anzusehen. Demnach sind auch die über das Rechenschema sich ergebenden Größen für die Bahnenergie als wesentliche Merkmale eines Moleküls anzusehen. Bevor wir unseren Weg nun weiter beschreiten, wollen wir doch dieses Ergebnis vergegenwärtigen und zusammenfassen: „**Unsere Untersuchungsmethode spiegelt die Realität!**“ Es liefern also auch die beiden Formeln für die Bahnenergie das rechnerisch exakt richtige Ergebnis. Aber Vorsicht, dies bedeutet noch lange nicht, dass mathematisch richtige Formeln auch die physikalischen Zusammenhänge richtig darstellen. Da Integrationsenergie und konstante Energie nur dem Phänomen Bahnlauf zugeordnet werden können, fassen wir beide Energieanteile nun zusammen. Demnach ist $E_{Bahn} = (E_{1,Bahn}) + (E_{2,Bahn})$ und es ergibt sich über $E_{Bahn} = (E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0) + (E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / r^2)$ mit $f = r / x_0$ der Ausdruck $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / (f \cdot x_0)^2$ bzw. $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1} / x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x / x_0^2 \cdot (1 + 1/f^2)$ und damit für den 1.Ansatz der x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie die allgemein gültige Energiegleichung gemäß $E_{Bahn} = E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1 / x_0^2 \cdot [(1 + 1/f^2) \cdot x - 2x_0]$.

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

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

	Ladungsenergie an der Stelle x	Ladungsenergie an der Stelle x=x ₀
Funktion	E (x)	E (x₀)
Kern-Kern	+E_{H1}•r_{H1}/x•N	-E_{H1}•r_{H1}/x₀•N
Kern-Elektron	-E_{H1}•r_{H1}/r•N•1 Energie nicht von x abhängig	Null
Elektron-Elektron	Null	Null
Summe		-E_{H1}•r_{H1}/x₀•N
1.Ableitung	E'(x)	E'(x₀)
Kern-Kern	-E_{H1}•r_{H1}/x²•N	-E_{H1}•r_{H1}/x₀²•N
Kern-Elektron	Null	Null
Elektron-Elektron	Null	Null
Summe		-E_{H1}•r_{H1}/x₀²•N

Auch zu dem Rechenschema ist noch folgendes anzumerken:

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

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

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

Wir müssen hier beachten, dass in diesem Rechenschema die Anziehungsenergie (E_{an}) nicht auf den Kernabstand (x) orientiert ist (2. Ansatz), womit für diese Energie eine erste Ableitung nicht existiert. Daher erscheint in vg. Formel der Faktor $1/r^2$ nicht. Auch hier fehlt noch die mit Integration einhergehende Integrationskonstante. Diese Energiekonstante ist auch hier zwingend der Bahnenergie zuzuordnen, weil anderweitige Phänomene nicht existieren. Wir bezeichnen diese Integrationskonstante daher auch hier mit $E_{1,Bahn}$. Die Energiekonstante lässt sich berechnen, indem wir auch hier den an der Stelle $x = x_0$ geltenden **Messwert** der absoluten Energie ($E = E_0$) in unsere Überlegungen einbeziehen. An der Stelle $x = x_0$ gilt $E_0 = E_{Bahn} + E_{Lad}$, wobei der Messwert für $E_0 = \text{rd. } 15,0 \text{ eV}$ beträgt bzw. $E_0 @ E_{H1}/j^{3/2}$. Ebenso können wir dem Messwert für $x_0 = \text{rd. } 1,132 \text{ \AA}$ eine adäquate Formel zuordnen. Es entspricht diese Größe ziemlich genau dem Ausdruck $x_0 = 2/j \cdot r_{H1} = (2/j \text{ a})^2 \cdot 1 = 1,136003 \text{ \AA}$. Folglich gilt $E_{1,Bahn} + E_{2,Bahn} + E_{Lad} = E_0$. Es ist also $E_{1,Bahn} = E_0 - E_{Lad} - E_{2,Bahn}$. Wir setzen nun die im vg. Rechenschema stehenden Ausdrücke ein und erhalten die Gleichung $E_{1,Bahn} = E_0 - [E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0] + [E_{H1} \cdot r_{H1}/r] - [E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot x/x_0^2]$. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir für $x = x_0$ über den Ausdruck $E_{1,Bahn} = E_0 - 2E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0 - E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/r$ und die damit Gleichung

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

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

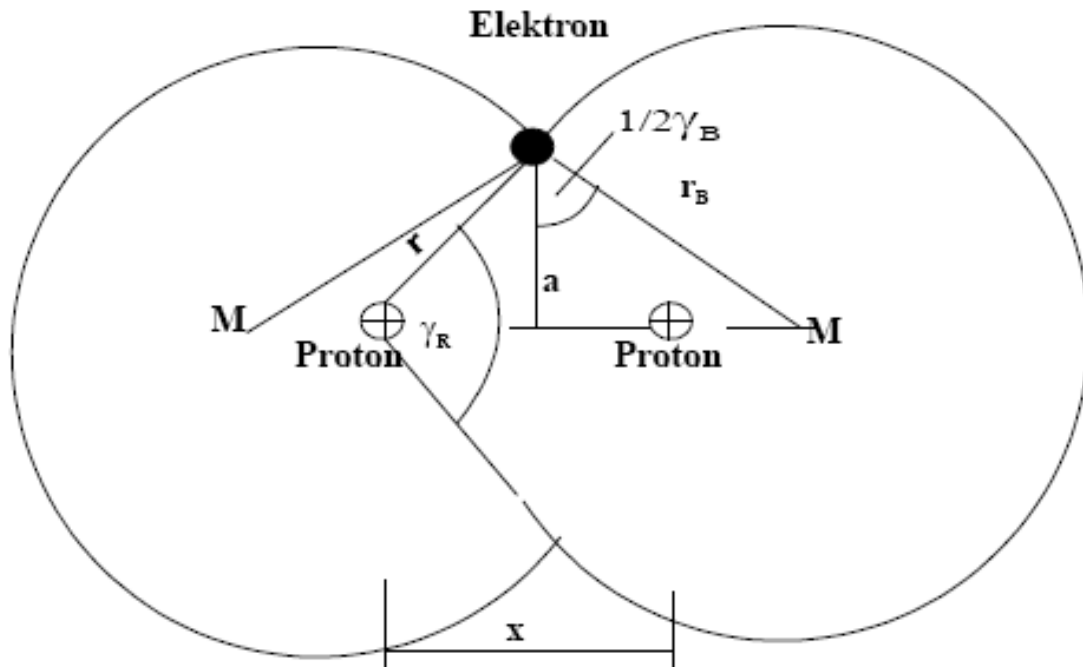
Da auch hier Integrationsenergie und konstante Energie nur dem Phänomen Bahnlauf zugeordnet werden können, fassen wir nun beide Energieanteile zusammen. Demnach ist $E_{Bahn} = E_{1,Bahn} + E_{2,Bahn}$ und es ergibt sich über $E_{Bahn} = E_0 - 2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0 + E_{H1} \cdot r_{H1}/r +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

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

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

7. Dritter Baustein ist die Geometrie des Molekül - Orbitales

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



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 $A=4\pi r^2 \cdot 1$).

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

8. Vierter Baustein ist die Bahnenergie

a) Allgemein

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

$$\underline{E_B = z \cdot E_{H1} \cdot (r_{H1}/r_B)^2 \cdot \frac{1}{2}}$$

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

b) Normierte Bahnenergie

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

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

Die Formel drückt aus, dass sich z. B. bei $\gamma_B=90^\circ$ die Umlaufdauer (T_B) um das $3/2$ - fache verlängert bzw. sich die Bahnenergie entsprechend um das $2/3$ - fache reduziert (da sich die Wirkungserzeugung (z =konstant) nicht vergrößert hat). Der Ausdruck geht deswegen reziprok ein, weil die Umlaufdauer in der vg. Ausgangsformel für die Bahnenergie ($E_B = K_B \cdot r_B = \frac{1}{2}h/(2T_B)$) unter dem Bruchstrich steht. **Die doppelte Umlaufdauer „ $2T_B$ “ resultiert aus $\frac{1}{2}v_B$. Der Faktor 2 vor T_B steht nicht für die beiden Orbitale (s. Prinzipbild Seite 14).**

9. Bestimmung des Orbitalradius

a) Allgemein

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

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

Wir definieren daher, dass sich der Überlappungswinkel (γ_B) – in der Nulllage der beiden Kerne ($x = x_0$) – ebenfalls in der Nulllage befindet, also genau in der Mitte zwischen den Grenzwerten 0° und 180° . Wir rechnen also mit $g_B=90^\circ$.

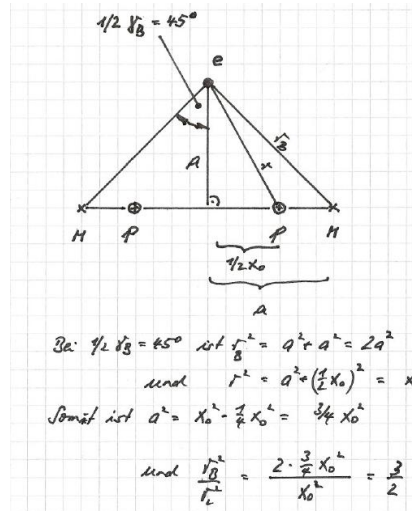
Mit der vg. Energiegleichung können wir nun den Abstand zwischen Kern und Elektron bestimmen. Es gilt mit $g_B=90^\circ$ für alle x , also auch für die Nulllage, die Formel $E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0^2 \cdot [(1+x_0^2/r^2) \cdot x - 2x_0] = z \cdot E_{H1} \cdot [(r_{H1}/r_B)^2] \cdot [360/(360-90)] \cdot 1/2$ bzw. mit $r_B=f_B \cdot r$ ist $E_0 + E_{H1} \cdot r_{H1}/x_0^2 \cdot [(1+x_0^2/r^2) \cdot x - 2x_0] = z \cdot E_{H1} \cdot 1/f_B^2 \cdot r_{H1}^2/r^2 \cdot [2/3]$. Aus diesen beiden Formel ergibt sich r in Abhängigkeit vom Kernabstand (x). Durch Ausmultiplizieren, es wird hierzu auf das **Kapitel „Ergänzung“** (s. Seite 26) verwiesen, erhalten wir für den 1.Fall der x -Abhängigkeit der Anziehungsenergie den Ausdruck

$$\frac{r^2}{x_0^2} = \frac{\left(\frac{z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{9} \right) - \frac{1}{2} \cdot j^{5/2}}{1 - \frac{1}{2} \cdot j^{5/2}}$$

Es ist sofort zu sehen, dass diese Formel sich erheblich vereinfacht, wenn der Ausdruck in der runden Klammer „1“ wäre. In diesem Fall würde sich in der Nulllage, also an der Stelle $x = x_0$, der Ausdruck

$$\left(z \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{9} \right) \cdot \left(-\frac{1}{f_B^2} \cdot \frac{3}{2} \right) = 1 \text{ ergeben, wobei } \underline{\underline{r(x=x_0) = x_0}} \text{ wäre.}$$

Es ist naheliegend diese Vereinfachung als Realität anzunehmen und mit diesem Ausdruck weiter zu rechnen. Es bezieht sich f_B^2 auf die Geometrie des H_2^+ -Moleküls in der Nulllage und es ist „ z “ das Bahnwirkungs Vielfache. Beide Faktoren haben aber von einander unabhängige, d. h. verschiedene Ursachen. Daher wird jede Klammer für sich zu „1“. Diese Bedingung ist nur dann erfüllt, wenn der jeweilige Faktor den Kehrwert der Klammerwertes einnimmt, also z. B. $f_B^2=3/2$ bzw. $z=9/\varphi^{7/2}$ ist. Die Zuordnung des Faktors $3/2$ zu f_B^2 ist nicht willkürlich. Sie ergibt sich eindeutig aus der Geometrie des H_2^+ -Moleküls in der Nulllage (s. ng. Prinzipbild).



Es ist sofort zu erkennen, dass $r < r_B$ womit $f_B = r_B/r > 1$ sein muss, so dass $f_B^2 = 1/9$ keine Lösung ist, ebenso wie $z=1$, eben weil der Faktor $\varphi^{7/2}$ nicht der Molekülgeometrie zugeordnet werden kann, wie die folgenden Ausführungen zeigen.

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

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

Damit liegt der Bahnradius fest und wir sehen unsere 2. Annahme $f_B^2 = 3/2$ wieder. Im folgenden rechnen wir mit $g_r = 120^\circ$ und $g_B = 90^\circ$, da sich nur mit diesen Ansätzen die einfachst möglichen Strukturen ergeben. Es stellt sich nun die Frage, welche Auswirkungen eine durch Energieabsorption bewirkte Auslenkung des Kernabstandes aus der Nulllage ($x_0 = x \pm \Delta x$) auf die Elektronenhülle hat. Hierzu bestehen zwei Möglichkeiten:

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

Beide Ansätze führen in der Nulllage definitionsgemäß zum gleichen Ergebnis.

b) Modell 1: Energieabsorption führt zur Veränderung des Überlappungswinkels

Bei diesem Ansatz zur Bestimmung des Orbitalradius gehen wir davon aus, dass sich in der Nulllage ein Radius r_B einstellt, der auch bei Auslenkung aus der Nulllage unverändert bleibt. Da Energieveränderungen jedoch auftreten, bedeutet dies, dass jede Auslenkung eine adäquate Veränderung des Überlappungswinkels (γ_B) nach sich ziehen muss. Dies wiederum hat zur Folge, dass sich der Grundbereich durch die möglichen Grenzwerte der Winkel 0 und 180° bestimmt. Dieser Ansatz berücksichtigt somit auch mögliche Übergänge in die angrenzenden Übergangsbereiche. Es wäre z. B. denkbar, dass es kurz vor Überschreiten der Grenzwinkel zu einer Veränderung des Bahnradius (r_B) kommt, wodurch sich wieder „normale“ Überlappungswinkel (γ_B) einstellen könnten.

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

Es verursacht also nur die Energieabsorption Unterschiede, die wir zur Beurteilung heranziehen können, welcher Fall bzgl. der Anziehungsenergie zutrifft. Maßgabe für diese Entscheidung ist, dass die gleiche Energieabsorption im zweiten Falle eine nur halb so große Auslenkung nach sich zieht, wie im ersten Falle. Demnach gilt $Dx_{\text{Fall1}} = 1/2 \cdot Dx_{\text{Fall2}}$. Zu beachten ist, dass dieser Unterschied an der Stelle $x = x_0$ definitionsgemäß keine Bedeutung entfaltet. Aufgrund dieses Unterschiedes werden wir (weiter unten) die beobachteten Grenzen des Grundbereiches (s. Bild 2) zwingend ableiten. Damit sind wir in der Lage, zu entscheiden, welcher Fall bzgl. der Anziehungsenergie zutrifft. Wir halten daher dieses Modell für anlegbar! Mit $g_B = 90^\circ$ erhalten wir den Ausdruck $2 \cdot [x-x_0] = \{z/r_B^2 \cdot E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot 2/3 - E_0\} / (E_{\text{H1}} \cdot r_{\text{H1}} \cdot 1/x_0^2)$ und damit die Formel $\pm Dx = 1/2 \cdot \{z/r_B^2 \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot 2/3 - E_0/E_{\text{H1}}\} \cdot x_0^2/r_{\text{H1}}$. In dieser Formel ist der Bahnwirkungsfaktor (z) die letzte noch zu suchende Größe. An der Stelle $x = x_0$, also bei $\Delta x = 0$ geht die Formel über in die Gleichung $z/r_B^2 \cdot r_{\text{H1}}^2 \cdot 2/3 = E_0/E_{\text{H1}}$ bzw. $z = E_0/E_{\text{H1}} \cdot 3/2 \cdot r_B^2/r_{\text{H1}}^2$. Damit erhalten wir den Ausdruck $z = E_0/E_{\text{H1}} \cdot 3/2 \cdot (3/2 \cdot x_0^2)/r_{\text{H1}}^2$ bzw. mit $E_{\text{H1}} = E_0 \cdot j^{3/2}$ und $r_{\text{H1}} = x_0 \cdot j/2$ (s. Seite 12) $z = 1/j^{3/2} \cdot 9/j^2$ bzw.

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

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

c) Bestimmung der Grenzen des Grundbereiches

In diesem Kapitel wollen nun ableiten, welcher Ansatz mit den beobachteten Grenzen des Grundbereichs am besten vereinbar ist. Bei genauem Ausmessen des vg. 2. Bildes können wir als untere Grenze rd. $0,8^\circ\text{A}$ und als obere Grenze rd. $1,8^\circ\text{A}$ ablesen. Der Grundbereich wird durch diese maximal zulässige Auslenkung aus der Nulllage begrenzt. Über die Ausgangsformel $2 \cdot [x - x_0] = \{z \cdot E_{\text{HI}} \cdot (r_{\text{HI}}/r_{\text{B}})^2 \cdot [360/(360-g_{\text{B}})] \cdot 1/2 - E_0\} / (E_{\text{HI}} \cdot r_{\text{HI}} \cdot 1/x_0^2)$ ergibt sich mit $r_{\text{B}}^2 = 3/2 \cdot x_0^2$ die Auslenkung ($\pm \Delta x$) in Abhängigkeit des Überlappungswinkels (γ_{B}) gemäß der allgemeinen Formel $\pm D_{\text{XFall1}} = 1/2 \cdot \{z/r_{\text{B}}^2 \cdot r_{\text{HI}}^2 \cdot [360/(360-g_{\text{B}})] \cdot 1/2 - E_0/E_{\text{HI}}\} \cdot x_0^2/r_{\text{HI}}$ und damit der Ausdruck $\pm D_{\text{XFall1}} = 1/2 \cdot \{2/3 \cdot z \cdot r_{\text{HI}}^2/x_0^2 \cdot [360/(360-g_{\text{B}})] \cdot 1/2 - E_0/E_{\text{HI}}\} \cdot x_0^2/r_{\text{HI}}$. Wir setzen nun $z = 9/j^{7/2}$ ein und erhalten den Ausdruck $\pm D_{\text{XFall1}} = 1/2 \cdot \{2/3 \cdot 9/j^{7/2} \cdot (r_{\text{HI}}/x_0)^2 \cdot [360/(360-g_{\text{B}})] \cdot 1/2 - E_0/E_{\text{HI}}\} \cdot x_0^2/r_{\text{HI}}$ bzw. $\pm D_{\text{XFall1}} = 1/2 \cdot \{3/2 \cdot 1/j^{3/2} \cdot [360/(360-g_{\text{B}})] \cdot 1/2 - 1/j^{3/2}\} \cdot 4/j^2 \cdot r_{\text{HI}}$. Damit ergibt sich $\pm D_{\text{XFall1}} = 1/2 \cdot \{6/j^{7/2} \cdot [360/(360-g_{\text{B}})] \cdot 1/2 - 4/j^{7/2}\} \cdot r_{\text{HI}}$ bzw.

$$\pm D_{\text{XFall1}} = [360/(360-g_{\text{B}}) \cdot 3/2 - 2] \cdot r_{\text{HI}}/j^{7/2} = (g_{\text{B}}-90)/(360-g_{\text{B}}) \cdot 2 \cdot r_{\text{HI}}/j^{7/2}$$

Hier wurde im rechten Teil der Gleichung auf $g_{\text{B}} = 90^\circ$ Bezug genommen. Dieser rechte Teil bringt anschaulich die Symmetrie - Eigenschaft des Überlappungswinkels zum Ausdruck. Entsprechend dieser Formel erhalten wir mit $g_{\text{B}} = 0^\circ$ für $\pm D_{\text{XFall1}} = -0,335^\circ\text{A}$ und damit $x = x_0 + Dx = 0,800^\circ\text{A}$ bzw. mit $g_{\text{B}} = 180^\circ$ für $\pm D_{\text{XFall1}} = +0,670^\circ\text{A}$ und damit $x = x_0 + Dx = 1,808^\circ\text{A}$. Wir sehen, dass die Auslenkung (Δx) asymmetrisch ist, der Überlappungswinkel (γ) dagegen symmetrisch. Wir sehen, dass diese Ergebnisse mit den aus Bild 2 abgelesenen Grenzen übereinstimmen. Damit sind sowohl unsere Überlegungen bzgl. variablem Überlappungswinkel als auch die definitionsgemäß vorgenommene Festlegung $g_{\text{B}} = 90^\circ$ von den vg. Ablesewerten abgedeckt! Da $D_{\text{XFall1}} = 1/2 \cdot D_{\text{XFall2}}$ ist, ergibt sich umgekehrt $D_{\text{XFall2}} = 2 \cdot D_{\text{XFall1}}$. Um auch im Falle der nicht gegebenen x - Abhängigkeit der Anziehungsenergie die gleichen beobachteten Grenzen zu erzielen, müssen die Überlappungswinkel mit der Formel $\pm D_{\text{XFall2}} = 2 \cdot [360/(360-g_{\text{B}}) \cdot 3/2 - 2] \cdot r_{\text{HI}}/j^{7/2}$ berechnet werden. Entsprechend dieser Formel erhalten wir mit $g_{\text{B}} = 51,4145^\circ$ für $\pm D_{\text{XFall2}} = -0,335^\circ\text{A}$ bzw. mit $g_{\text{B}} = 144,0137^\circ$ für $\pm D_{\text{XFall2}} = +0,670^\circ\text{A}$. Zwar existiert damit eine rechnerisch zulässige Lösung, jedoch sind die zur Lösung erforderlichen Überlappungswinkel nicht zugleich auch als Grenzwinkel besonders ausgezeichnet. Damit ist endgültig entschieden, dass die Anziehungsenergie vom Kernabstand (x) abhängig ist!

d) Modell 2: Energieabsorption führt zur Veränderung des Orbitalradius

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

e) Modell 1/2: Ursache der Bahnwirkung

Die hier durchgeführte Untersuchung zur Ursache der Bahnwirkung gilt für beide vg. Modelle. Das Vielfache (z) der Bahnwirkung ergab sich im Modell 1 zu $z = 9/j^{7/2}$. Dieser Ausdruck bezieht sich auf die eingangs verwandte Normierungsgröße $E_{\text{HI}} = h \cdot R_{\text{t}}$ und gilt an der Stelle $x = x_0$, bezieht sich also auf den Bahnradius $r_{\text{B}} = 3/2^{1/2} \cdot x_0$. Dem entsprechend ist an dieser Stelle $z/r_{\text{B}}^2 = 9/j^{7/2} \cdot (2/3 \cdot 1/x_0^2) = 6/j^{7/2} \cdot 1/x_0^2$. Es ergibt sich über $z/r_{\text{B}}^2 = 6/j^{7/2} \cdot (1/r_{\text{HI}}^2 \cdot j^{4/2}/4)$ die Formel

$z/r_B^2 = 3/2 \cdot 1/j^{3/2} \cdot 1/r_{HI}^2$. Da $E_0/E_{HI} = 1/j^{3/2}$ ist, können wir diesen Ausdruck in die letzte Formel einsetzen und erhalten über $z/r_B^2 = 3/2 \cdot E_0/E_{HI} \cdot 1/r_{HI}^2$ bzw. umgestellt nach E_0 , die Formel $E_0 = z \cdot E_{HI} \cdot r_{HI}^2 / r_B^2 \cdot (4/3 \cdot 1/2)$ bzw. den Ausdruck

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

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

$$\underline{E_B = E_0}$$

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

10. Zusammenfassung der Ergebnisse für den Bereich des Grundzustandes

Damit haben wir, für den Bereich des Grundzustandes, der in Umgebung des Energie - Minimums vorherrscht, durch begründete physikalische Formeln sowie allein durch die beiden Annahmen „hälftige Ladungsenergie“ und „Überlappungswinkel in der Nulllage gleich 90° “ die Potenzialkurve zwingend hergeleitet. Es sind sicherlich nicht alle Fragen beantwortet, aber es zeigt das Ergebnis doch die Tragfähigkeit unserer Methode. Vor allem haben wir hiermit erstmals ein physikalisch begründetes Verständnis für die elementaren Zusammenhänge in einem *Molekül* erarbeitet. Demnach setzt sich die Potenzialkurve im Grundbereich aus *vier* unterschiedlich zu begründenden Energieanteilen zusammen, die sich rechnerisch auf drei Terme verdichten lassen. Unsere Betrachtungen liefern, im Gegensatz zur Näherungslösung über die Schrödinger – Gleichung, allerdings (praktisch) *exakte* Werte.

Damit sind wir prinzipiell in der Lage, in analoger Vorgehensweise, auch die an diesen Grundbereich angrenzenden Übergangsbereiche zu analysieren, was im folgenden Kapitel geschieht.

Wir sind auch in der Lage, die im Wasserstoff – Molekül herrschenden Gegebenheiten zu analysieren. Das Wasserstoff – Molekül könnte dahin gehend untersucht werden, ob sich auch hier in der Nulllage alle „übrigen“ Energien gegenseitig aufheben, ob hier die Bahnenergie in der Nulllage Null ist und ob hier die gemessene kleine negative Energie (rd. -0,3 eV) einer magnetischen Anziehungsenergie zuzuordnen ist. Auch können die aus der Spektralanalyse des Wasserstoff – Molekül – Ions vorliegenden Messungen aus einer ganz neuen Sicht beurteilt werden oder es kann das zwischen den Elementarteilchen herrschende Kräftegleichgewicht definiert werden. Die Beantwortung all dieser sicherlich sehr interessanten Fragen würde jedoch den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

11. Ergänzungen

In diesem Kapitel werden die Ursachen für den Verlauf der Gesamtenergie im $^2\Sigma_g^-$ -Zustand in allen drei Bereichen (Grundbereich, Oberer Bereich und Unterer Bereich) des H_2^+ -Moleküls beschrieben. Die Richtigkeit der den Phänomenen zugeordneten Formeln bzw. die Zulässigkeit der getroffenen Ansätze lässt sich daran erkennen, wie genau die Rechenwerte mit den abgelesenen Messwerten übereinstimmen und daran, ob diese Ansätze ungezwungen aufeinander aufbauen.

Das Bahnenergie-Erzeugungs-Vielfache (z) ist über alle x -Abstände konstant. Es beträgt $z = \frac{9}{j^{7/2}}$.

Dieser Wert lässt sich an der Stelle mit dem tiefsten Wert der Gesamtenergie (Nulllage mit $x=x_0$) identifizieren. Das Vielfache (z) repräsentiert das eigenständige Phänomen der Bahnenergie-Erzeugung, die sich als Elektronenhülle manifestiert.

Im Grundbereich ist die Erzeugung von Bahnenergie neben dem Bahnwirkungs Vielfachen (z) auch von der Größe des Winkels (s. Prinzipskizze) abhängig. Der Orbitalfaktor beträgt $f_{gB} = \frac{360}{360-g_B} \cdot \frac{1}{2}$. Der

Grundbereich endet somit ganz zwanglos bei $0^\circ \leq \nu_B \leq 180^\circ$ bzw. an den zugehörigen Stellen $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$. Der Orbitalfaktor wirkt nur auf das Bahnenergie-Vielfache (z) gemäß $z \cdot f_{gB}$. Er hat auf die Ladungsenergien keinen Einfluss, da diese von gänzlich anderer Natur sind. Der Orbitalfaktor ist aus mathematischer Sicht erforderlich, um den Verlauf der Gesamtenergie ($E_{\text{Ges}}(x)$) für jeden x -Abstand der Kerne innerhalb des Grundbereichs richtig anzugeben. Aus physikalischer Sicht repräsentiert er die Größe der Orbital-Oberfläche. Je größer die Fläche wird, umso größer wird die zusätzliche Bahnenergie-Erzeugung. Das in Kapitel 6a (s. Seite 11) dargestellte Rechenverfahren, um eine Formel für die Bahnenergie herzuleiten -insbesondere die x -Abhängigkeit der Elektron-Kern-Anziehung- ist so aufgebaut, dass es sowohl den Verlauf der Gesamtenergie als auch die Grenzen des Grundbereichs wiedergibt. Dazu genügt es schon, einen Orbitalfaktor in vg. Gestalt anzunehmen.

Im oberen Bereich ab $x_{\max} \leq x \leq x_{\text{ende}}$ (x_{ende} ist die Stelle, an der das Molekül zerfällt), erfolgt die Erzeugung von Bahnenergie gemäß $\nu_B=180^\circ$ (das ist bei max. möglichem Auseinanderziehen (Streckung) der beiden Orbitale zu zwei Vollkugeln). Da aber die Streckung über den Grundbereich hinausgeht, wird angenommen, dass dieser Bereich durch eine im Vergleich zum Grundbereich modifizierte Erzeugung der Bahnenergie charakterisiert ist (Zunahme der Gesamtenergie läuft ja gegen Null). Es tritt der Abstandsfaktor $f_{z2}(x)$ als selbständige Größe in Erscheinung. Weil aber damit der Gesamtenergieverlauf nicht annähernd genau bzw. völlig abweichend wieder gegeben wird, muss für den oberen Bereich eine weitere selbständige Größe, der Bereichsfaktor $f_{K2}(x)$ eingeführt werden. Es tritt also kein neues Phänomen in Erscheinung sondern immer nur die Bahnenergieerzeugung (z) allerdings nun, wie hier behauptet, modifiziert. Insgesamt gilt $z \cdot \frac{360}{360-180} \cdot \frac{1}{2} \cdot f_{z2}(x) \cdot f_{K2}(x)$.

Im unteren Bereich von $0^\circ \leq x \leq x_{\min}$ ist $\nu_B=0^\circ$ (das ist max. mögliches Ineinanderlaufen (Stauchung) der beiden Orbitale zu einer Vollkugel), wir angenommen -da die Stauchung über den Grundbereich hinausgeht, dass hier als zusätzliches Phänomen eine verminderte Bahnenergieerzeugung stattfindet. Es tritt hier der Abstandsfaktor $f_{z1}(x)$ als selbständige Größe in Erscheinung und der Bereichsfaktor $f_{K1}(x)$. Insgesamt wirkt hier $z \cdot \frac{360}{360-0} \cdot \frac{1}{2} \cdot f_{z1}(x) \cdot f_{K1}(x)$.

Die Lösung wird nach Aufstellen der für alle Kern-Kern-Abstände „ x “ und für alle $r(x)$ -Abstände Elektron-Kern gültigen Formeln für Bahn- und Gesamtenergie, für jeden einzelnen der vg. Bereiche mit folgendem Schema durchgeführt:

- Erstens, Ermittlung von r (Abstand Elektron-Kern) und r_B aus der Molekül-Geometrie.
- Zweitens, Ermittlung von f_z (**Abstandsfaktor**) aus der Gleichung für die Bahnenergie.
- Drittens, Ermittlung von f_k (Bereichsfaktor) aus der Formel für die Gesamtenergie.

a) Aufstellen der allgemein gültigen Formel für Bahnenergie:

Hierzu greifen wir zurück auf die in Kapitel 6a, letzter Absatz (s. Seite 12) und Kapitel 6b, erster Absatz (s. Seite 18) aufgeführten Formel für die Bahnenergie. Demnach gilt folgende Gleichung:

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

Es ist wichtig gleich zu Anfang darauf hinzuweisen, dass auf der linken Gleichungsseite Ausdrücke stehen, die aus dem Rechenverfahren (s. Kapitel 6a, Seite 10) hergeleitet wurden. Dieses Rechenverfahren beschränkte sich dort jedoch nur auf den Grundbereich (**zur Begründung s. Nebenrechnung auf S.24 unten**). Im Grundbereich ist $f_z=1$.

Im Rahmen dieser Ergänzung ist nunmehr eine allgemeine Einführung von f_z erforderlich, da wir auch den unteren und oberen Abstandsbereich betrachten wollen. Der Faktor $f_z \cdot z$ (Bahnwirkungsvielfache) ist erforderlich bzw. so zu wählen, dass die Gleichung für jeden x-Abstand erfüllt ist. In der ersten Klammer steht der gemäß Rechenverfahren (s. Kapitel 6a, Seite 11) hergeleitete mathematische Ausdruck (liefert die Größe des Wertes) für die 1. Bahnenergie, in der zweiten Klammer steht der mathematische Ausdruck für die 2. Bahnenergie, und auf der rechten Seite steht der allgemein gültige physikalische Ausdruck für das tatsächlich herrschende Phänomen der Bahnenergie, die sich als Elektronenhülle manifestiert. Demnach sind zu berechnen, r_B (Orbitalradius), z (Bahnwirkungsvielfaches), r (Abstand Kern-Elektron), f_z (Abstandsfaktor) und f_k (Bereichsfaktor). Um strukturbezogen weiter zu rechnen verwenden wir die beiden Formeln gemäß Kapitel 6a letzter Absatz (s. Seite 12) $E_{H1} = E_0 \cdot j^{3/2}$ und $r_{H1} = r_0 \cdot \frac{j}{2}$ wobei $j = \frac{1}{2} \cdot p^2 - 4$ ist, sowie $f_B^2 = \frac{r_B^2}{r^2}$. Der Ansatz dieser „sehr genauen Annäherungsformeln“ mit Bezug auf die Grundgrößen des Wasserstoffatoms ist gerechtfertigt. Zum einen ergeben sich praktisch exakt die Messwerte wieder (z. B.: Nulllage $x_0=1,132^\circ A$ und Nulllage-Energie 15,0 eV), zum anderen und das ist der eigentliche Grund, ist zu erwarten, dass wir durch diesen Ansatz Rückschlüsse insbesondere auf Struktur und Wesenbezüge der elementaren Phänomene innerhalb des Moleküls ziehen können. Es ergibt sich für E_B die Gleichung:

1. Term 1. Bahnenergie	1. Term 2. Bahnenergie	reales Bahnenergie-Phänomen adäquate Bahnenergie
$\left(E_0 - 2 \cdot \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot \frac{j}{2}}{x_0} \right)$	$+ \left(\frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot \frac{j}{2}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot \frac{j}{2}}{r^2} \cdot x \cdot \frac{x_0}{x_0} \right)$	$= f_z \cdot z \cdot E_0 \cdot j^{3/2} \cdot \frac{x_0^2 \cdot \frac{j^2}{4}}{f_B^2 \cdot r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$
2.Term 1. Bahnenergie	2. Term 2. Bahnenergie	

Sowohl die linke als auch die rechte Seite der Gleichung ergeben jeweils die Größe der Bahnenergie. Nach Division durch E_0 erhalten wir

$$E_B = E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = \frac{f_z \cdot z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot E_0$$

Mit der Einführung von $A = \frac{f_z \cdot z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$ vereinfacht sich der auf der rechten Gleichungsseite stehende vg. Ausdruck für die Bahnenergie zu

$$(1) \dots E_B = E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = A \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot E_0$$

Die rechte Seite der Gleichung ist gültig für alle x bzw. alle drei Bereiche, die linke Seite jedoch nur für den Grundbereich.

b) Aufstellen der allgemein gültigen Formel für die Gesamtenergie Eges:

Hierzu greifen wir zurück auf die in Kapitel 5b, erster Absatz (s. Seite 10) aufgeführte Formel für die häufig angesetzte Abstoßungsenergie „Kern-Kern“ $E_{ab} = 1/2 \cdot 2E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/x$, auf die in Kapitel 5c (s. Seite 10) aufgeführte Formel für die ebenfalls nur häufig angesetzte Anziehungsenergie „Kern-Elektron“ $E_{an} = 1/2 \cdot 2E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot 1/r^2 \cdot x$ und auf die in diesem Kapitel „Ergänzungen“ eine Seite zuvor aufgeführte Formel für die Bahnenergie. Gemäß Kapitel 6a „Rechenschema“ (s. Seite 11) gilt für die Gesamtenergie $E_{ges} = E_{ab} - E_{an} + E_B$. Mit den vg. Ausdrücken für E_{H1} , r_{H1} und mit der rechten Seite der vg. Gl. (1) für die Bahnenergie $E_B = A \cdot E_0 \cdot x_0^2/r^2$ ergibt sich:

$$(2)... E_{ges} = \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot \frac{j}{2}}{x} - \frac{E_0 \cdot j^{3/2} \cdot x_0 \cdot \frac{j}{2}}{r^2} \cdot x \cdot \left(\frac{x_0}{x}\right) + A \cdot E_0 \cdot \frac{x_0^2}{r^2}$$

$$E_{ges} = E_0 \cdot j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} - E_0 \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + A \cdot E_0 \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \left(\frac{j^{5/2}}{j^{5/2}}\right)$$

Wir ziehen E_0 und $\varphi^{5/2}$ auf die linke Seite und erhalten die für alle x gültige Gesamtenergie:

$$(3)... \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{A}{j^{5/2}}\right) \text{ wobei } A = \frac{fz \cdot z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

Diese allgemeingültige Formel für die Gesamtenergie wird in den ng. Rechenverfahren verwendet.

Nebenrechnung:

Zum Vergleich wollen wir nun eine Formel für die Gesamtenergie angeben, wobei wir die linke Seite der vg. Gl. (1) für die Bahnenergie verwenden gemäß

$$E_B = E_0 \cdot (1 - \varphi^{5/2} + 1/2 \varphi^{5/2} \cdot x/x_0 + 1/2 \varphi^{5/2} \cdot x_0^2/r^2 \cdot x/x_0). \text{ Es ergibt sich dann s. Gl. (2)}$$

$$E_{ges} = E_0 \cdot \left(j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} - j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) + E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right)$$

Die linke Klammer stammt aus den Ladungsenergien, die rechte Klammer aus der Bahnenergie. Wie zu sehen, hebt sich hier der Ausdruck mit x_0^2/r^2 auf und wir erhalten für den Verlauf der Gesamtenergie des Grundbereichs

$$E_{ges} = E_0 \cdot \left(j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} \right) + E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} \right)$$

Wir ziehen auch hier E_0 und $\varphi^{5/2}$ auf die linke Seite und erhalten für die Gesamtenergie:

$$(4)... \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} \right) + \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right), \text{ gültig nur für den Grundbereich.}$$

Da sich die Ausdrücke mit x_0^2/r^2 herauskürzt haben, hat im Grundbereich der Abstand Elektron-Kern (r) keinen Einfluss auf die Gesamtenergie. Insbesondere geht die Abstoßungsenergie (s. linke Klammer) nur häufig ein. Da aber diese Formel über alle x-Abstände des Grundbereichs Rechenwerte liefert, die mit den Ablesewerten aus der Potenzialkurve praktisch übereinstimmen, ist der Ansatz häufiger Abstoßungsenergie berechtigt. Man sieht sofort, dass bei Ansatz voller Ladungsenergie für jeden x-Abstand eine viel zu hohe Energie errechnet würde. Im folgenden Kapitel „Grundbereich“ werden wir unter Abschnitt „Drittens“ vg. Gl. (4) nochmals herleiten, jedoch unter Verwendung der vg. für alle x-Abstände gültigen Formel.

c) Untersuchungen zum Grundbereich ($x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$):

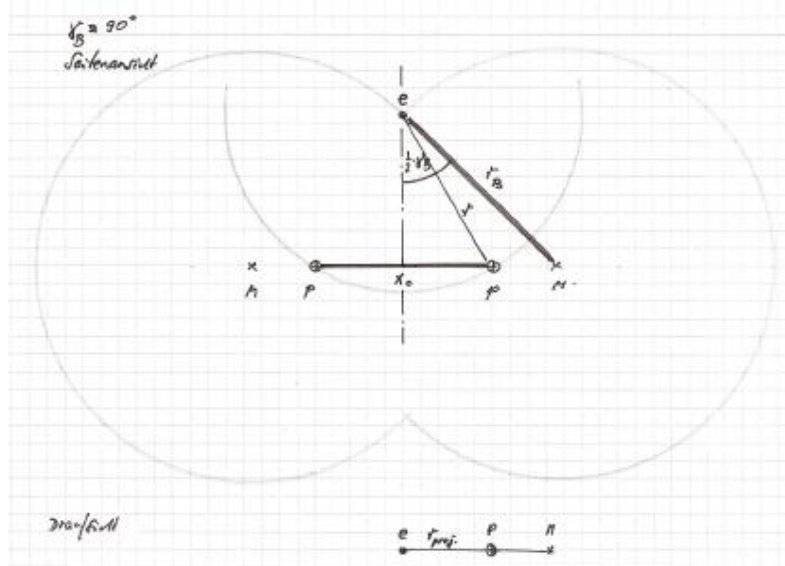
Es wird auf dieser Seite entsprechend des Hinweises in Kapitel 9a (s. Seite 17) die Herleitung der dort aufgeführten Formel für r^2/x_0^2 durchgeführt. Im Grundbereich ist das Bahnwirkungsquantum durch den Ausdruck $\frac{1}{2} \cdot 360 / (360 - \gamma_B) \cdot f_{Z0} \cdot f_{K0}$ mit $f_{Z0}=1$ und $f_{K0}=1$ gegeben. Die Veränderung der Bahnenergieerzeugung wird im Grundbereich ausschließlich durch die Änderung des Orbital-Winkels γ_B verursacht, der Bahnradius r_B bleibt konstant.

Erstens, Ermittlung r (Abstand Elektron-Kern) und r_B (Bahnradius) aus Molekül-Geometrie:

Als Molekül-Geometrie für den Grundbereich nehmen wir an, dass in der Nulllage (also bei $x=x_0$) sich γ_B mit 90° als Mittelwert zwischen den Grenzwinkeln 0° und 180° einstellt. Damit beschränken wir uns auf den Bereich $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$. Andere x -Werte sind hier nicht zulässig. Es ergibt sich $r_B^2 = 3/2 \cdot r^2$ und $r = x_0$, wie in Kapitel 9a bereits gezeigt wurde.

Nulllage, Status bei $\gamma_B=90^\circ$:

Mit der Veränderung von γ_B hebt oder senkt sich das Elektron auf der Mittelsenkrechten der Achse M – M. Bei dieser Bewegung bleiben die Abstände r und r_B unverändert erhalten. Dadurch verändert sich die Lage der beiden Kerne $p+$ als auch die Lage der beiden Orbitalmittelpunkte M (s.u.).



Zur Bestimmung von „ r “ verwenden die vg. Gleichung für die Bahnenergie gemäß

$$(1) \dots E_B = E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = A \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot E_0$$

Wir ziehen aus dieser Formel die Ausdrücke mit den Abhängigkeiten von „ r “ auf die linke Seite, klammern den Ausdruck $-\frac{E_0 \cdot x_0^2}{r^2}$ aus und erhalten, uns von rechts nach links durcharbeitend:

$$-\frac{E_0 \cdot x_0^2}{r^2} \cdot \left(A - j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = -E_0 \cdot \left(j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} - j^{5/2} + 1 \right) \text{ bzw.}$$

$$(5) \dots \frac{x_0^2}{r^2} = \frac{j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} - j^{5/2} + 1}{A - j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0}} = \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} - 1 + \frac{1}{j^{5/2}}}{\left(\frac{A}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right)}, \text{ gültig für den Grundbereich.}$$

In Hinblick auf die Interpretation der Formel für die Gesamtenergie, halten wir zunächst die Herkunft der Elemente im Zähler auf der rechten Seite fest. Wir beginnen von rechts nach links. Der erste Ausdruck, also der Zahlenwert $\frac{1}{j^{5/2}}$ resultiert aus dem 1. Term der 1. Bahnenergie. Der zweite Ausdruck,

also der Zahlenwert „-1“ resultiert aus dem 2. Term der 1. Bahnenergie. Der dritte Ausdruck also $\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0}$ resultiert aus dem 1. Term der 2. Bahnenergie. Der 2. Term der 2. Bahnenergie ist wegen dessen

Abhängigkeit von „r“ (Abstand „Kern-Elektron“) im Faktor „A“ enthalten, als dem realen Bahnenergiephänomen. Wie wir bei der Formel für die Gesamtenergie gleich sehen werden, kürzt sich jedoch im Grundbereich der Nenner-Ausdruck der rechten Seite heraus, so dass dieser Ausdruck für die Gesamtenergie unerheblich ist. Der Ausdruck mit „A“ repräsentiert das Bahnenergiephänomen und der Faktor

$\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0}$ resultiert aus dem 1. Term der 2. Bahnenergie.

In der Nulllage ($x=x_0$) und mit $\gamma_B=90^\circ$ gilt:

$$\frac{x_0^2}{r^2} = \frac{j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x_0} - j^{5/2} + 1}{-j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x_0} + A} = \frac{j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} - j^{5/2} + 1}{-j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} + A} = \frac{1 - j^{5/2} \cdot \frac{1}{2}}{-j^{5/2} \cdot \frac{1}{2} + A} \text{ bzw.}$$

$$\frac{x_0^2}{r^2} = \frac{1 - j^{5/2} \cdot \frac{1}{2}}{A - j^{5/2} \cdot \frac{1}{2}}, \text{ gültig nur für } x=x_0.$$

An dieser besonderen Stelle steigen wir nun in den elementaren Bereich hinab. Wir sehen sofort, dass sich in der Nulllage die einfachsten Verhältnisse ergeben, nämlich $r=x_0$, wenn $A=1$ wäre. Da wir in der Nulllage, als dem Ausgangspunkt unserer Überlegungen, auf möglichst einfache Verhältnisse aufsetzen möchten, legen wir diese hier zugrunde.

Wir erhalten mit $f_K = \frac{360}{360-90}$ für $A = \frac{1 \cdot z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360-90}$ bzw. $A = \frac{z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{4}{3} \cdot \left(\frac{3}{3}\right)$

bzw. $A = \frac{z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{9} \cdot \frac{3}{2}$.

Dies eingesetzt in vg. Gleichung für x_0^2/r^2 ergibt

$$(5a) \dots \frac{r^2}{x_0^2} = \frac{\left(\frac{z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{9} \cdot \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \cdot j^{5/2}}{1 - \frac{1}{2} \cdot j^{5/2}}$$

Da der Wert der runden Klammer (A) in der Nulllage, also an der Stelle $x = x_0$, „1“ ergeben soll, muss auch der Ausdruck $\left(z \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{9} \right) \cdot \left(\frac{1}{f_B^2} \cdot \frac{3}{2} \right) = 1$ sein. Da aber z und f_B^2 von einander unabhängig

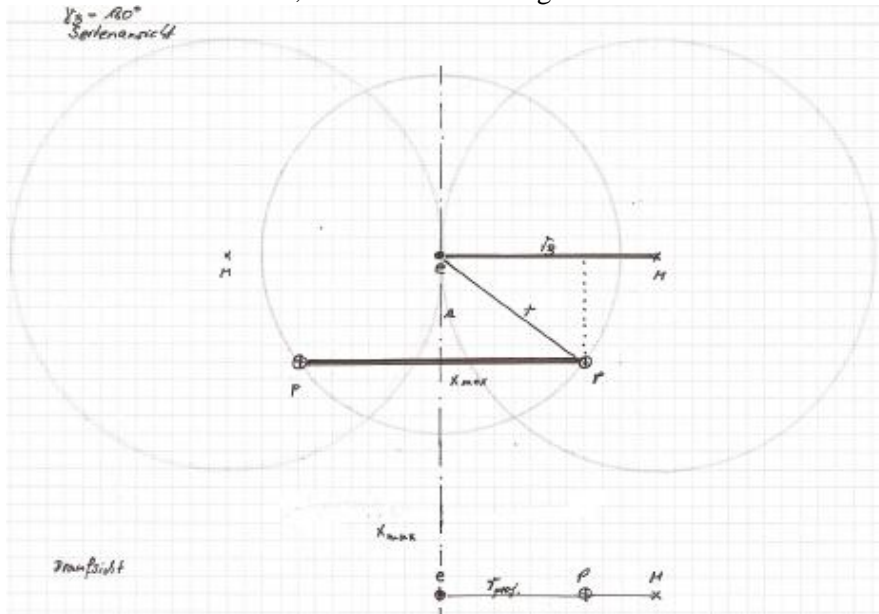
sind, muss jede runde Klammer für sich den Wert „1“ ergeben.

(Diese Gleichung dient in Kapitel 9a (s. Seite 17) als Ausgangsbasis für die dort ohne weitere Annahmen durchgeführte Untersuchung, die dann im Grundbereich zu einer vollständig richtigen Wiedergabe des Verlaufs der Gesamtenergie führt. Dass dies kein Zufall ist, kann man daran erkennen, dass sich auch die Grenzen des Grundbereichs hieraus ableiten.)

Es sind also, ohne zu rechnen, die Werte für z und f_B^2 als Reziprokwerte sofort abzulesen. Es ist $f_B^2 = \frac{3}{2}$ und $z = \frac{9}{j^{7/2}}$. Die erste Verhältniszahl ($3/2$) ergibt sich unmittelbar der Molekülgeometrie an der Stelle $x=x_0$, die zweite Verhältniszahl bleibt somit übrig und kann nur noch dem Bahnwirkungsquantenzahl zugehörig sein.

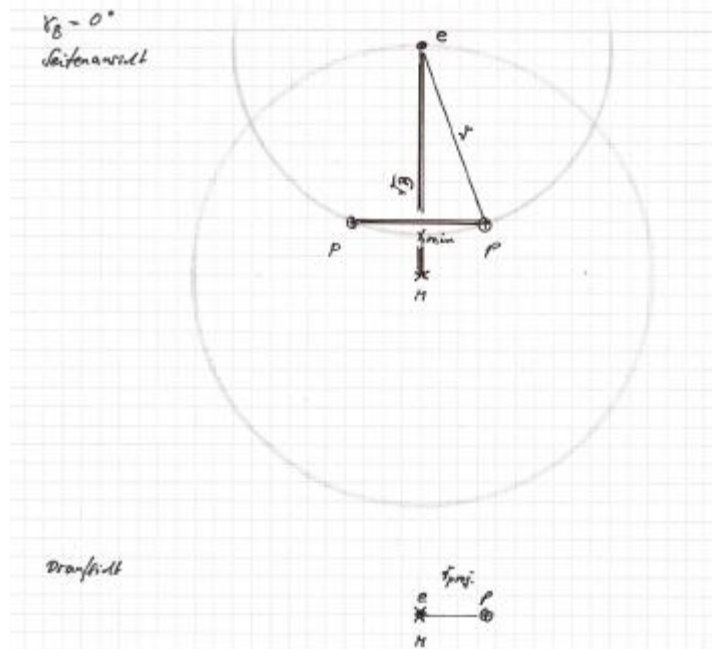
Status bei $\gamma_B=180^\circ$:

Bei $\gamma_B=180^\circ$ liegen die Orbitalmittelpunkte so, dass sich zwei Vollkugeln ausbilden. Damit jedoch der Abstand r zum Elektron erhalten bleibt, befindet sich die Lage der Kerne unterhalb der Achse $M - M$.



Status bei $\gamma_B=0^\circ$:

Bei $\gamma_B=0^\circ$ fallen die Orbitalmittelpunkte zusammen und bilden eine Vollkugel. Damit jedoch der Abstand r zum Elektron erhalten bleibt, befindet sich die Lage der Kerne oberhalb der Achse $M - M$.



Zweitens, Ermittlung von z aus der Gleichung für die Bahnenergie:

Im Kapitel 9b wurde bereits gezeigt, dass im Grundbereich $z = \frac{9}{j^{7/2}}$ gilt und eine Konstante ist.

Drittens, Ermittlung der Formel für die Gesamtenergie $E_{ges}(x)$:

In diesem Abschnitt wollen wir die Formel für die Gesamtenergie herleiten. Dazu setzen wir den für den

Grundbereich gültigen v.g. Ausdruck für x_0^2/r^2 , gemäß $\frac{x_0^2}{r^2} = \frac{\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} - 1 + \frac{1}{j^{5/2}}}{\left(\frac{A}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right)}$ in die erste der bei-

den Formeln (Formel mit „A“) für die Gesamtenergie ein, gemäß

$$(3) \dots \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \left(\frac{A}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \right).$$

Der Ausdruck in der runden Klammer kürzt sich heraus. Um dies sofort erkennen zu können, hatten wir Eingangs den Faktor „A“ eingeführt. Es vereinfacht sich nunmehr die Formel für die Gesamtenergie ganz erheblich. Es gilt:

$$(4) \dots \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} - 1 + \frac{1}{j^{5/2}} \right), \text{ gültig nur für den Grundbereich.}$$

Dieser Energieverlauf $E_{ges}(x)$ ist innerhalb des Grundbereiches uneingeschränkt gültig. Die Formel liefert praktisch exakt die abgelesenen Messwerte. Aufgrund dieser präzisen Übereinstimmung kann davon ausgegangen werden, dass die im Grundbereich auftretenden Phänomene deren Realität entsprechend hier beschrieben werden.

Auch in dieser Formel sind die zugrundeliegenden einzelnen Phänomene den Elementen auf der rechten Gleichungsseite eindeutig zugeordnet. Wir beginnen wieder von rechts nach links.

Der erste Ausdruck, also der Zahlenwert $\frac{1}{j^{5/2}}$ resultiert aus dem 1. Term der 1. Bahnenergie. Der

zweite Ausdruck, also der Zahlenwert 1 resultiert aus dem 2. Term der 1. Bahnenergie. Der dritte Ausdruck also $\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0}$ resultiert aus dem 1. Term der 2. Bahnenergie. Der 2. Term der 2. Bahnenergie ist

wegen dessen Abhängigkeit von „r“ (Abstand „Kern-Elektron“) im Faktor „A“ enthalten, als dem realen Bahnenergiephänomen. Er tritt hier nicht mehr in Erscheinung, ebenso wie das reale Phänomen der

Bahnenergie. Der vierte Ausdruck also $\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x}$ repräsentiert die „Kern-Kern-Abstoßung“.

Das v.g. Herauskürzen von „A“ bedeutet, dass im Grundbereich zwei gleichwertige Darstellungen möglich sind, einmal Bezug von E_{ges} auf den x-Abstand und zum anderen Bezug von E_{ges} auf den Orbitalwinkel φ_B . Es besteht also eine eindeutige Abhängigkeit zwischen x und φ_B . Diese Abhängigkeit werden wir nun im folgenden Abschnitt mit Hilfe der Bahnenergiegleichung herleiten.

Im Grundbereich gilt $f_z=1$, $f_k=1$, $f_B^2=3/2$, $z=9/\varphi^{7/2}$, $0^\circ \leq \gamma_B \leq 180^\circ$ (s. o.).

Diese Werte setzen wir in die Formel für die Bahnenergie $E_B = A \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot E_0$ ein und erhalten mit

$$A = \frac{1 \cdot z}{f_B^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} f_K \quad \text{für die Bahnenergie den Ausdruck}$$

$$E_B = E_0 \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \quad \text{bzw.} \quad E_B = \frac{3}{4} \cdot E_0 \cdot \frac{360}{360 - g_B}$$

Somit gilt im Grundbereich die Bahnenergie-Gleichung:

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

Diese Gleichung liefert für $r=x_0$ und mit $\gamma_B=180^\circ$ bis $\gamma_B=0^\circ$ die in Kapitel 9c (s. Seite 20) berechneten Grenzen des Grundbereichs und der maximalen Auslenkung $\Delta x = x - x_0$ um den Nullpunkt ($x=x_0$).

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

$$\text{Nach Division durch } \varphi^{5/2} \text{ ergibt sich } \frac{x}{x_0} = \frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{j^{5/2}} + 1$$

$$\text{Mit } x = x_0 + \Delta x \text{ und ausklammern von } \varphi^{5/2} \text{ erhalten wir } 1 + \frac{\Delta x}{x_0} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right) + 1 \text{ bzw.}$$

$$(6) \dots \Delta x = x_0 \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{360}{360 - g_B} - 1 \right)$$

Mit $\gamma_B=180^\circ$ und $\gamma_B=0^\circ$ ergeben sich die Grenzen des Grundbereichs zu

$$(7a) \dots x_{\max} = x_0 \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) \text{ bei } \gamma_B=180^\circ \text{ und } (7b) \dots x_{\min} = x_0 \cdot \left(1 - \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) \text{ bei } \gamma_B=0^\circ$$

Ergebnistabelle für den Grundbereich:

γ_B	Δx in °A	$x=x_0+\Delta x$; $x_0=1,136^\circ A$	E_{ges} in eV
0°	-0,336	0,800 (exakt)	15,79 (15,8)
45°	-0,192	0,944	15,22 (15,2)
90°	0	1,136 (exakt)	15,00 (15,0)
135°	+0,269	1,405	15,29 (15,3)
180°	+0,672	1,808 (exakt)	16,40 (16,4)

(In Klammern die Ablesewerte aus der gemessenen Potenzialkurve, s. Seite 7.)

Als nächstes steht die Untersuchung des unteren und des oberen Bereiches an. Dabei können wir uns auf die für den Grundbereich geltenden Zusammenhänge, sowie auf die allgemeingültigen Formeln für Bahn- und Gesamtenergie stützen.

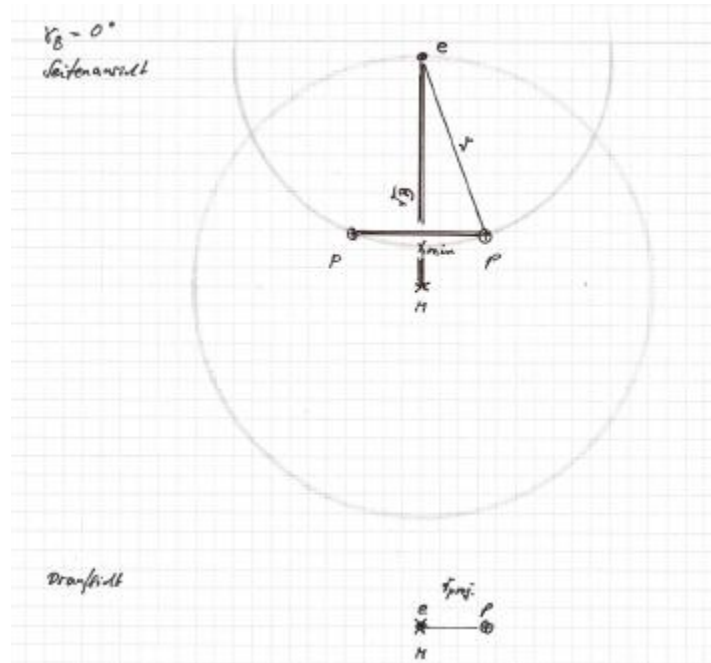
Aus didaktischen Gründen werden wir mit dem unteren Bereich beginnen, obwohl die Ablesewerte nur den halben Bereich x_{\min} bis $x=0$ abdecken. Es wird sich zeigen, dass der untere Bereich leichter zu lösen ist, als der obere Bereich.

d) Untersuchungen zum unteren Bereich ($0 \leq x \leq x_{\min}$):

Wir nehmen bzgl. der Molekül-Geometrie an, dass -ebenso wie für den Grundbereich- der Bahnradius r_B konstant bleibt, d. h., der Orbital-Mittelpunkt M verbleibt an der gleichen Stelle, wie im Abstand $x = x_{\min}$. Es gilt $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$. Im unteren Bereich ist das Bahnwirkungsvefachte durch den Ausdruck $1/2 \cdot 360 / (360 - 0) \cdot f_{Z1} \cdot f_{K1}$ gegeben.

Erstens, Ermittlung von r_1 (Abstand Elektron-Kern) und r_B aus der Molekül-Geometrie:

Wir nehmen bzgl. der Verkürzung von r_1 (Abstand Kern-Elektron) auf kleinere Werte als x_0 an, dass diese Verkürzung auf der im Abstand $x = x_{\min}$ vorliegenden Lauflinie „e-p“ der Protonen erfolgt.



Gemäß dieser Molekül-Geometrie gilt $\frac{r_1}{\frac{1}{2}x} = \frac{(r = x_0)}{\frac{1}{2}x_{\min}}$ (Strahlensatz) bzw.

(8)... $r_1 = \frac{x_0}{x_{\min}} \cdot x$ und

(8a)... $r_B = \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot x_0$.

Des Weiteren ist

(8b)... $y_{\min}^2 = x_0^2 - \left(\frac{1}{2} \cdot x_{\min}\right)^2$.

Zweitens, Explizite Ermittlung von f_{z1} aus der Gleichung für die Bahnenergie:

Mit $A_1 = \frac{z_1}{f_{B1}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_{B1}}$ und

$$E_B = E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = A_1 \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot E_0 \text{ ergibt sich nach Division durch } E_0$$

und mit $\psi_{B1} = 0^\circ$ und $r = r_1$

$$\left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = \frac{z_1}{f_{B1}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - 0}$$

Wir setzen wieder ein $f_{B1}^2 \cdot r_1^2 = r_{B1}^2$ und erhalten mit $z_1 = f_{z1} \cdot z$, wobei $z = \frac{9}{j^{7/2}}$

$$\left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = z_1 \cdot j^{7/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_{B1}^2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot 1 = f_{z1} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{x_0^2}{r_{B1}^2}$$

$$\left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = f_{z1} \cdot \frac{9}{8} \cdot \frac{x_0^2}{r_{B1}^2}$$

Wir stellen nach „f“ um und erhalten

$$f_{z1} = \left(\frac{4}{3} \cdot \frac{r_{B1}^2}{x_0^2} \cdot \frac{2}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) \cdot j^{5/2}$$

Auch im unteren Bereich soll $r_{B1}^2 = \frac{3}{2} \cdot x_0^2$ konstant bleiben.

$$f_{z1} = \left(\frac{4}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) \cdot j^{5/2}$$

Mit $r_1 = \frac{x_0}{x_{\min}} \cdot x$ ergibt sich dann $f_{z1} = \left(\frac{4}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) \cdot j^{5/2}$ bzw.

(9)... $f_{z1} = \left(\frac{4}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot j^{5/2}$

Diesen Ausdruck setzen wir in A_1 ein und erhalten mit $z_1 = f_{z1} \cdot z$, wobei $z = \frac{9}{j^{7/2}}$ und mit

$$f_{B1}^2 = \frac{r_{B1}^2}{r_1^2} = \frac{3}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x^2} \text{ sowie } \psi_B = 0^\circ \text{ aus}$$

$$A_1 = \frac{f_{z1} \cdot z}{f_{B1}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_{B1}}$$

$$A_1 = \left(\frac{4}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot j^{5/2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{x^2}{x_{\min}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - 0} \text{ bzw.}$$

$$\frac{A_1}{j^{5/2}} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \frac{x^2}{x_{\min}^2}$$

Nun führen wir den speziellen Bereichsfaktor (f_{K1}) ein (im Grundbereich war $f_{K0}=1$). Dies erfolgt einfach dadurch, dass im Ausdruck für A_1 beide Seiten mit f_{K1} erweitert werden. Es ergibt sich

$$\frac{A_1}{j^{5/2}} \cdot f_{K1} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \frac{x^2}{x_{\min}^2} \cdot f_{K1}$$

Diesen Ausdruck setzen wir in die Formel für

die Gesamtenergie ein gemäß $\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{A_1}{j^{5/2}} \cdot f_{K1} \right)$. Damit ist f_{z1}

nicht in f_{K1} enthalten. In der Basisformel für die Gesamtenergie ist f_{K1} aber nicht erwähnt, was bedeutet, dass dort mit dem Wert 1 gerechnet wurde. Da nun aber f_{K1} eingeführt wurde und nur auf A_1 wirken soll, musste diese Vorgabe in der Basisformel auch umgesetzt werden. Es zeigt sich, dass mit diesem Ansatz von f_{K1} der abgelesene jeweilige Gesamtenergiewert $E_{ges}(x)$ exakt getroffen wird. Mit vg. Ausdruck für A_1

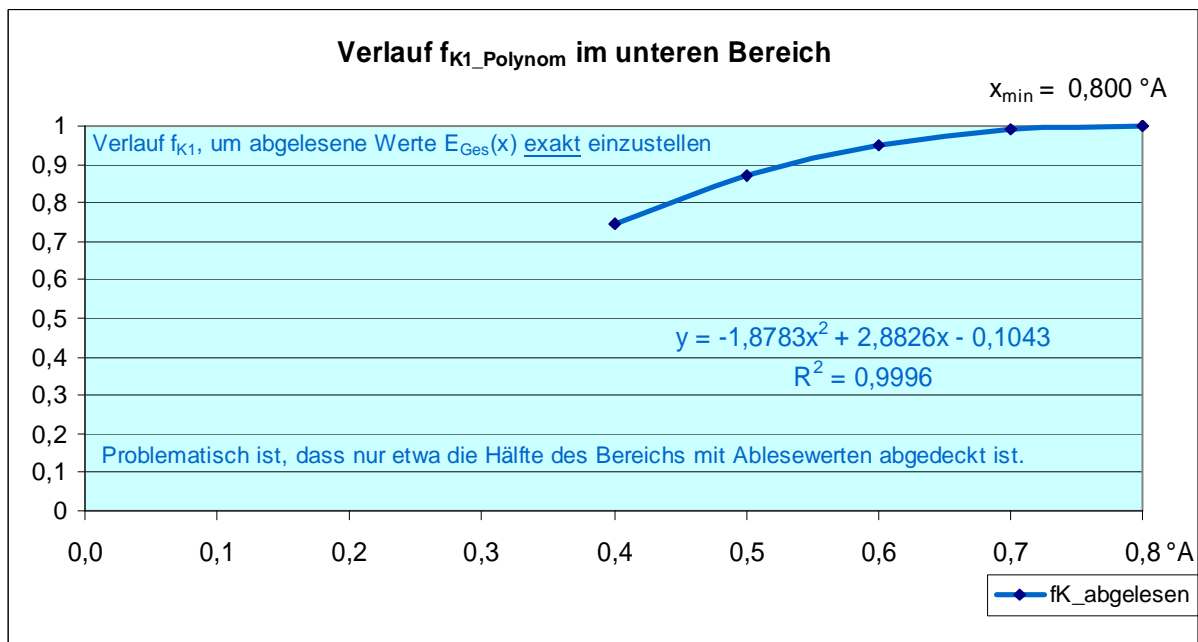
und mit $\frac{x_0^2}{r_1^2} = \frac{x_{\min}^2}{x^2}$ ergibt sich

$$\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} = \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x^2} + \frac{x_{\min}^2}{x^2} \cdot \frac{A_1}{j^{5/2}} \cdot f_{K1} \right) \text{ bzw.}$$

$$\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} + \frac{x_{\min}^2}{x^2} \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \frac{x^2}{x_{\min}^2} \cdot f_{K1}$$

$$(10) \dots \frac{E_{ges}(x)}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot f_{K1}(x)$$

Mit dem Bereichsfaktor des unteren Bereichs $f_{K1}(x)$ haben wir ein mathematisches Verfahren (der „physikalisch“ begründete Ansatz wird später daraus entwickelt), um die zu jedem x-Abstand gehörende Gesamtenergie (hier sind es die jeweiligen Ablesewerte, s. Diagramm) **exakt** einstellen zu können. Dazu geben wir als $E_{Ges}(x)$ den zu x-Abstand gehörenden Wert der Gesamtenergie ein und berechnen $f_{K1}(x)$ entsprechend. Nach Vorliegen der „physikalisch“ motivierten Ansätze kann dann $f_{K1_berechnet}$ bestimmt werden. Diese berechneten Werte sollten dann die Messwerte exakt wiedergeben. In so weit dürfen sie durchaus etwas von den Ablesewerten abweichen.



Aus vg. Verlauf geht hervor, dass der Bereichsfaktor sich wie ein Polynom 2.Grades verhält. Die Ablesewerte der Messdaten decken nur den halben Bereich ab.

Ergebnistabelle für den unteren Bereich (x, r₁ und r_B in °A, E in eV):

x	z ₁ =z·f _z ·f _K	f _B ²	fz·f _K _berechne t	r ₁ ²	r _B ²	E _{Ges} I berechnet mit f _K	E _{Ges} I abgelese- ner Wert *)
0,799861	11,407432	1,500000	1,001070	1,290496	1,935744	15,8000	15,80
0,7	11,359442	1,958502	0,996859	0,988380	1,935744	16,4000	16,40
0,6	11,193098	2,665739	0,982261	0,726156	1,935744	17,1000	17,10
0,5	10,777893	3,838665	0,945824	0,504275	1,935744	17,9000	17,90
0,4	10,205731	5,997914	0,895614	0,322736	1,935744	19,1500	19,15

*) Abgelesen wurden die Werte auf Basis des Potenzialverlaufs nach Original-Bildquelle, s. Seite 7. Dazu wurde die dortige Kurve stark vergrößert und genau ausgemessen. Der abgelesene Wert kann jedoch kleine Ungenauigkeiten infolge von Verzerrungen durch die Bildvergrößerung enthalten. Es besteht keine Abweichung zwischen berechnetem und abgelesenem Wert, da der Bereichsfaktor explizit angegeben werden kann.

Wir suchen den Verlauf von f_{K1}(x) und den Verlauf der 1.Ableitung f'_{K1}(x). In obiger Formel (Gl.10) ist E_{Ges} nicht als Variable aufzufassen, sondern als bekannter Messwert, der für den jeweiligen x-Abstand eingesetzt werden kann. Funktionscharakter hat somit nur der Bereichsfaktor f_{K1}(x). Wir können schreiben

$$f_{K1}(x) = \frac{f(x)}{g(x)} \text{ und zur Bildung der Ableitung die Quotientenregel anwenden gemäß}$$

$$f'_{K1} = \frac{f' \cdot g - f \cdot g'}{g^2} = \frac{f'}{g} - \frac{f \cdot g'}{g^2} \text{ wobei}$$

$$f = \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x \cdot x_0} \text{ und } g = \frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x \cdot x_0} \text{ ist.}$$

Wie zu sehen, liefert g(x) für kleine x immer größere Werte, während f(x) für kleine x gegen null geht.

$$\text{Im Grenzfall gilt } f(x) = \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x \cdot x_0} = 0 \text{ bzw.}$$

$$\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \frac{1}{x} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot x_0 - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x_0} \right) \text{ bzw. } x = \frac{1}{2} \cdot \left(x_0 - \frac{x_{min}^2}{x_0} \right) \cdot \frac{E_0}{E_{Ges}} \cdot j^{5/2} \text{ bzw.}$$

$$x = \frac{1}{2} \cdot \left(1,136 - \frac{0,800^2}{1,136} \right) \cdot \frac{15,00}{150,21} \cdot j^{5/2} = 0,024156^\circ A \text{ (berechneter kleinst möglicher Abstand).}$$

Der für die Gesamtenergie angegebene Wert (150,21 eV) ergibt sich mit Hilfe der vg. explizit ermittelten Gl.10 für f_{K1}. Allerdings ist f_{K1}=0, weil f=0 (g=11,8474385). Dieses Ergebnis bedeutet, dass bei diesem minimal möglichen x-Abstand überhaupt keine Bahnenergie mehr nach außen wirksam erscheint. Es treten nur noch die Ladungsenergien in Erscheinung. Mathematisch gesehen ergibt sich für x=0 die Gesamtenergie E_{Ges} = ∞. Damit sind, mathematisch gesehen, alle Werte einschließlich von x=0 zulässig. Dieses Ergebnis steht im Einklang damit, dass sich in der Realität die Massekugel beider Kerne nur bis auf den 2-fachen Kernradius annähern können. Dieser beträgt I = 1,321569 · 10⁻¹⁵ m (sog. Elementarlänge, s. „Das All, Bernhard und Karl Philbert, Christiana Verlag Stein am Rhein, Seite 342). Demnach beträgt der theoretisch kleinst mögliche Abstand

x = 2I = 2,643138 · 10⁻¹⁵ m = 0,00002643° A . Wir haben aber über die Bahnquantenbedingung angenommen (s. Seite 16), dass das Elektron Bahnenergie bei c-Umlauf der statischen Elektronmasse (m_{es}) auf Radius des großen Elektrons r_m erzeugt, gemäß (1/2h = 1/2m_{es} · c · 2p · r_m), wobei

$$r_m = I \cdot \frac{2}{j a} = 1,321569 \cdot 10^{-15} m \cdot \frac{2}{0,934802201} \cdot \frac{137,358}{1} \text{ bzw. } r_m = 0,003884^\circ A \text{ ist. Nehmen}$$

wir also an, dass der kleinstmögliche Abstand Elektron-Kern r_{1_kleinst} = 1 · r_m + I sei, so ergäbe sich

über $x = r_{1_kleinst} \cdot x_{min} / x_0$ der **theoretisch kleinst mögliche x-Abstand** zu

$$x_{1_kleinst} = (0,003884 + 0,000013215) \cdot 0,800 / 1,136 \text{ bzw. zu } x_{1_kleinst} = 0,002745^\circ \text{A}.$$

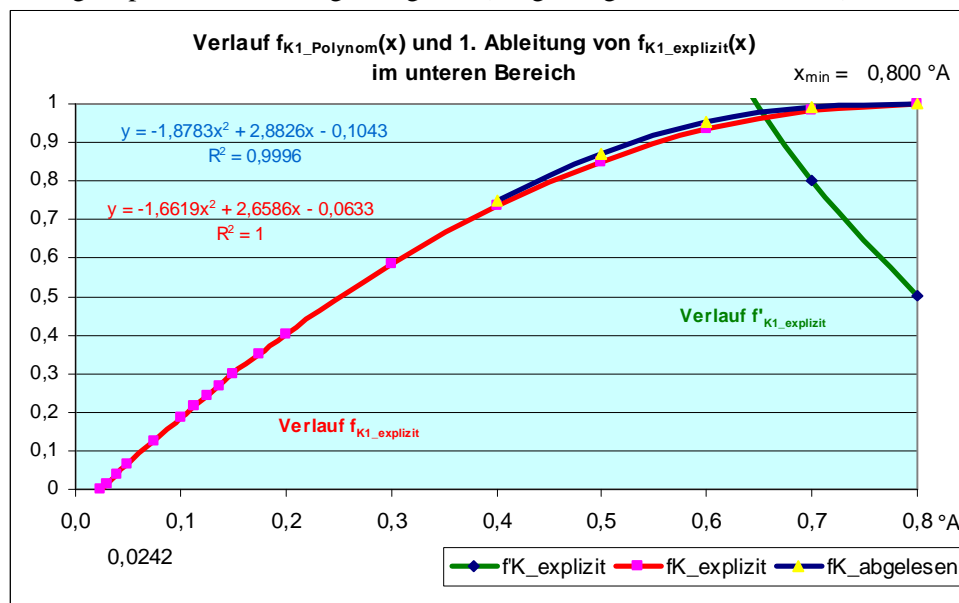
Eine bessere Übereinstimmung kann nun nicht dadurch erreicht werden, dass „genauere“ Eingangsdaten in die Berechnung eingegeben werden. Der vg. um rd. 10-fach kleinere x-Wert wäre nur zu erreichen, wenn eine unplausibel große Anpassung der Eingangsdaten ($x_0, x_{min}, E_0, E_{Ges}$) angesetzt würde. So müsste z. B. E_{Ges} rd. 1.500 eV betragen, was aber nicht der Fall ist, denn es wurde für $f_{K1}(x)$ der gleiche Formalismus verwendet, der im Bereich x_{min} bis $x=0,4^\circ \text{A}$ noch sehr genau die Ablesewerte abbildete oder es müsste x_{min} knapp 40% höher liegen als beobachtet (um den Differenzwert in der runden Klammer entsprechend zu verkleinern) und x_0 und E_0 sind ohnehin ziemlich eindeutig und können daher nicht in der erforderlichen Größenordnung variiert werden. Der vg. 10-fach kleinere x-Wert beruht aber auf einer falschen Definition von $r_{1_kleinst}$. Tatsächlich gilt $r_{1_kleinst} = 4 \cdot r_m + \lambda = 0,015548362^\circ \text{A}$ (s. Seite 49), womit sich $x_{1_kleinst} = 0,010949^\circ \text{A}$ ergibt, also ein nur noch um rd. 2-fach kleinerer Wert ergibt. Allerdings gelten die vg. Anmerkungen bzgl. Anpassung der Eingabedaten auch in diesem Falle. Der Formalismus für $f_{K1}(x)$ ist auch für kleinere x-Abstände uneingeschränkt gültig und liefert für $x=0,024516^\circ \text{A}$ für die Bahnenergie den Wert null. Das bedeutet, dass an dieser Stelle nur noch die Ladungsenergien aus Kern-Kern-Abstoßung und Elektron-Kern-Anziehung wirksam sind. Bei kleineren x-Abständen würde die Bahnenergie negativ werden (was nicht möglich ist) und das Molekül seinen Zusammenhalt verlieren (Existenzvernichtung, weil die Einschließungsenergie fehlt). Daher stößt das Molekül bereits „weit“, d. h. hier rd. $0,024516^\circ \text{A}$, vor Erreichen des theoretisch kleinst möglichen x-Abstandes an seine untere Existenzgrenze. Um diese Verhältnisse zu erhärten, sollte die größtmögliche Annäherung und die zugehörige Gesamtenergie experimentell ermittelt werden. Es könnte dann anhand der Experimente auch entschieden werden, in welcher Weise das Elektron in einem Molekül neben dem v_B -Umlauf der Elektronmasse auf r_B -Radius existiert (Massekugel mit λ -Radius oder c-Umlauf der Elektronmasse auf r_m -Radius).

Bzgl. der 1.Ableitung ergibt sich

$$(11) \dots \frac{f'}{g} = \frac{\left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x^2 \cdot x_0} \right)}{\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}}{x \cdot x_0}} \text{ und}$$

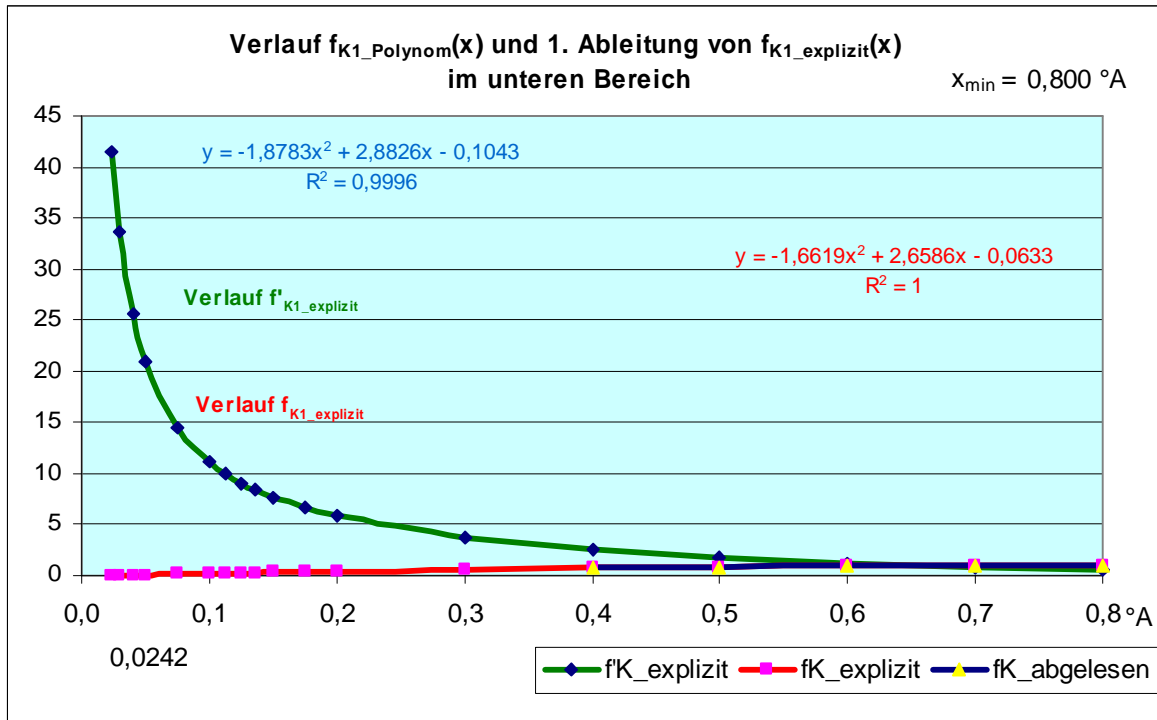
$$(12) \dots \frac{f \cdot g'}{g^2} = \frac{\left(\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{x_0} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x^2 \cdot x_0} \right)}{\left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{min}^2}{x \cdot x_0} \right)^2}$$

Damit sind wir in der Lage den Verlauf des Bereichsfaktors $f_{K1}(x)$ und dessen 1.Ableitung auf der Grundlage der vg. expliziten Herleitung anzugeben (s. ng. Diagramme und Tabelle).

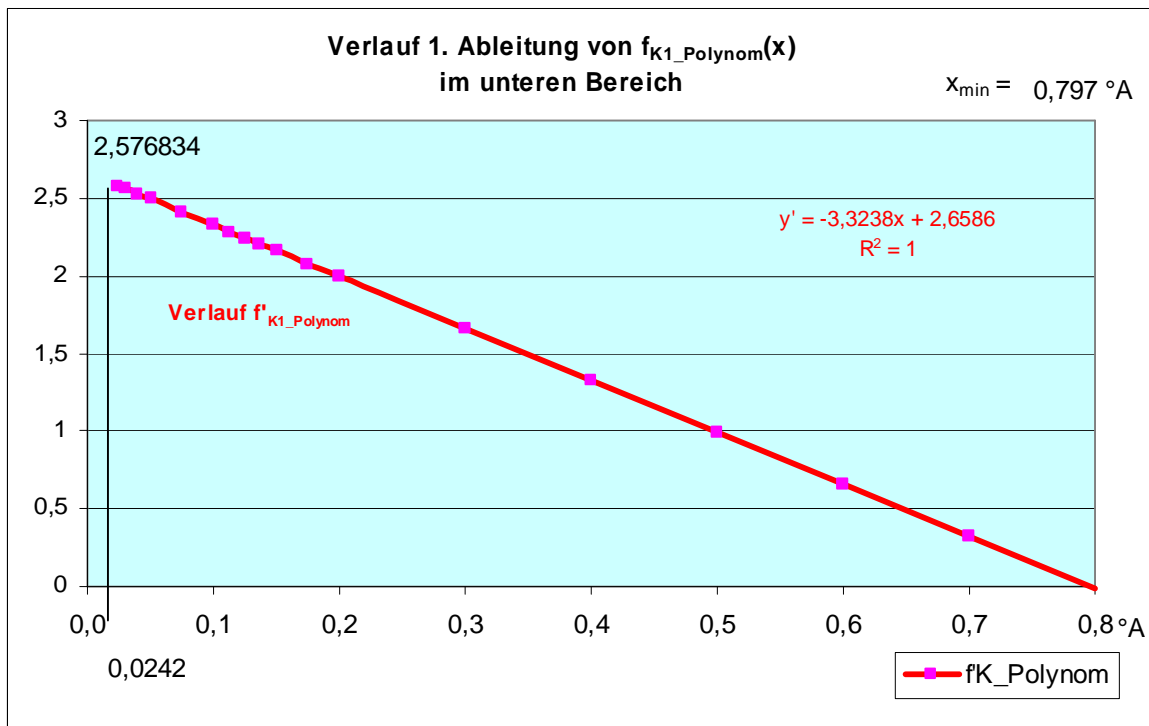


Damit haben wir den Verlauf des Bereichsfaktors und der 1.Ableitung eindeutig identifiziert. Der Bereichsfaktor verhält sich wie ein Polynom 2. Grades mit $f'_{K1_Polynom}(x=0,0242)=2,576834$, $f'_{K1_Polynom}(x=x_{min})=0$ (**nicht zu verwechseln mit der 1.Ableitung $f'_{K1_explizit}(x=x_{min})=0,5$**) und $f_{K1_Polynom}(x=x_{min})=1$.

Gleiches Diagramm, Y-Achse anders skaliert, um $f'_{K1}(x)$ besser erkennen zu können



Am Verlauf von $f'_{K1_explizit}(x)$ ist zu erkennen, dass die Bahnenergieerzeugung sich am unteren Bereiche in einem bis auf äußerste „gespannten“ Zustand befindet. Der Gradient der Bahnenergieerzeugung ist an der Stelle $x=0$ nicht definiert. Innerhalb von nur $0,05^\circ\text{A}$ fällt er von 45 auf 10, um dann über den restlichen Bereich (rd. $0,7^\circ\text{A}$) nochmals um 9,5 abzufallen und so am oberen Ende den Wert 0,5 zu erreichen (s. obiges Diagramm).



Die Ableitung an der Stelle $x=x_{min}$ ist null. Die Ableitung an der Stelle $x=0$ ergibt mathematisch 2,6586. In der Realität ist die Stelle $x=0$ zwar nicht erreichbar, aber die Ableitung ist mit diesem Wert formal gültig.

Tabellenwerte zu vg. Diagramm

x	f	g	$f_{K1}(x)=f/g$	f'	g'	$f'_{K1}(x)= f'/g - fg'/g^2$
0,79986091	0,88769127	0,88769127	1	0,44766785	0	0,504305794
0,7	0,87914568	0,89396152	0,98342677	0,58450572	-0,13453711	0,801838895
0,6	0,85611832	0,91699319	0,93361469	0,79557723	-0,3420597	1,215853296
0,5	0,82236176	0,96684317	0,85056375	1,14563122	-0,68622794	1,78861668
0,4	0,78099225	1,06362519	0,73427394	1,79004878	-1,31981038	2,594100982
0,3	0,73342917	1,25427127	0,58474526	3,18230893	-2,68866133	3,790640049
0,2	0,67515271	1,67957751	0,4019777	7,1601951	-6,59966405	5,842607946
0,175	0,65644112	1,86971127	0,35109224	9,35209156	-8,75470637	6,645839513
0,15	0,63408857	2,12689079	0,29812935	12,7292357	-12,0750679	7,67748298
0,136	0,61913432	2,31397837	0,26756271	15,484851	-14,7843507	8,401371509
0,125	0,60561828	2,49134353	0,24308903	18,3300995	-17,5817597	9,073029089
0,1125	0,58769633	2,73614595	0,21478983	22,6297524	-21,8091191	9,982701939
0,1	0,56600812	3,0435244	0,18597128	28,6407804	-27,7190788	11,10414389
0,075	0,50344837	3,97116154	0,1267761	50,9169429	-49,620694	14,40577535
0,05	0,38237265	5,83743932	0,06550349	114,563122	-112,196738	20,88456818
0,04	0,2926288	7,24099889	0,04041277	179,004878	-175,554982	25,70081044
0,03	0,14364884	9,58319912	0,01498965	318,230893	-312,440077	33,69587316
0,02416434	0	11,8474386	0	490,495584	-481,808341	41,40098119

x in °A (mit f_{K1} berechnete Energiewerte s. Wertetabelle Seite 39)

Nebenrechnung:

In der folgenden Nebenrechnung wollen wir die Ableitung an der Stelle $x=x_{\min}$ durchführen. Einsetzen

von x_{\min} führt dazu, dass $\frac{f \cdot g'}{g^2} = 0$ null wird, weil die rechte Klammer auf dem Bruchstrich null wird.

Damit ist für diesen x-Abstand nur noch der Ausdruck f'/g wirksam. Dies bedeutet, dass die Gesamtenergie auf die Steigung und damit auf den Bereichsfaktor keinen Einfluss hat. Dies ist deswegen so, weil diese Nahtstelle zugleich auch zum Grundbereich gehört, in dem neben dem Orbitalfaktor (f_{γ_B}) kein weiterer Bereichsfaktor auftritt bzw. $f_z=1$ und $f_{K0}=1$ ist. Im Grundbereich ist allein der Orbitalfaktor maßgebend für die zusätzliche Bahnenergie und damit auch für die zusätzliche Gesamtenergie. Erst in den Bereichen, in denen der Orbitalfaktor ausgeschöpft ist, treten die besonderen „Spielräume“ in Gestalt von Abstands- und Bereichsfaktoren auf.

Nachdem der Orbitalwinkel γ_B den Wert 0° erreicht hat und somit der Orbitalfaktor den Wert eins erreicht hat und damit keinen weiteren Beitrag zur Bahnenergieerzeugung mehr leisten kann, ist die Lageänderung der Kerne in Richtung Orbitalrand (in Ermangelung anderer Ursachen) als Ursache der Minderung der Bahnwirkung in Gestalt des Bereichsfaktors f_{K1} anzusehen. Es ergibt sich nach unserer Rechnung ein kleinst möglicher Abstand der beiden Protonen von $0,0246^\circ A$ bei einer Gesamtenergie von $E_{\text{Ges}}=150,21$ eV.

Zwar ist der Bezug auf $x=0$ entfallen, stattdessen nehmen wir Bezug auf den Mindestabstand.

$x=0,0246^\circ A$. Daher ist die Ableitung an Stellen $x<0,0246^\circ A$ nicht definiert, d.h. wir dürfen nicht die Ableitung an der Stelle $x=0$ durchführen. Dies ist sinnlos.

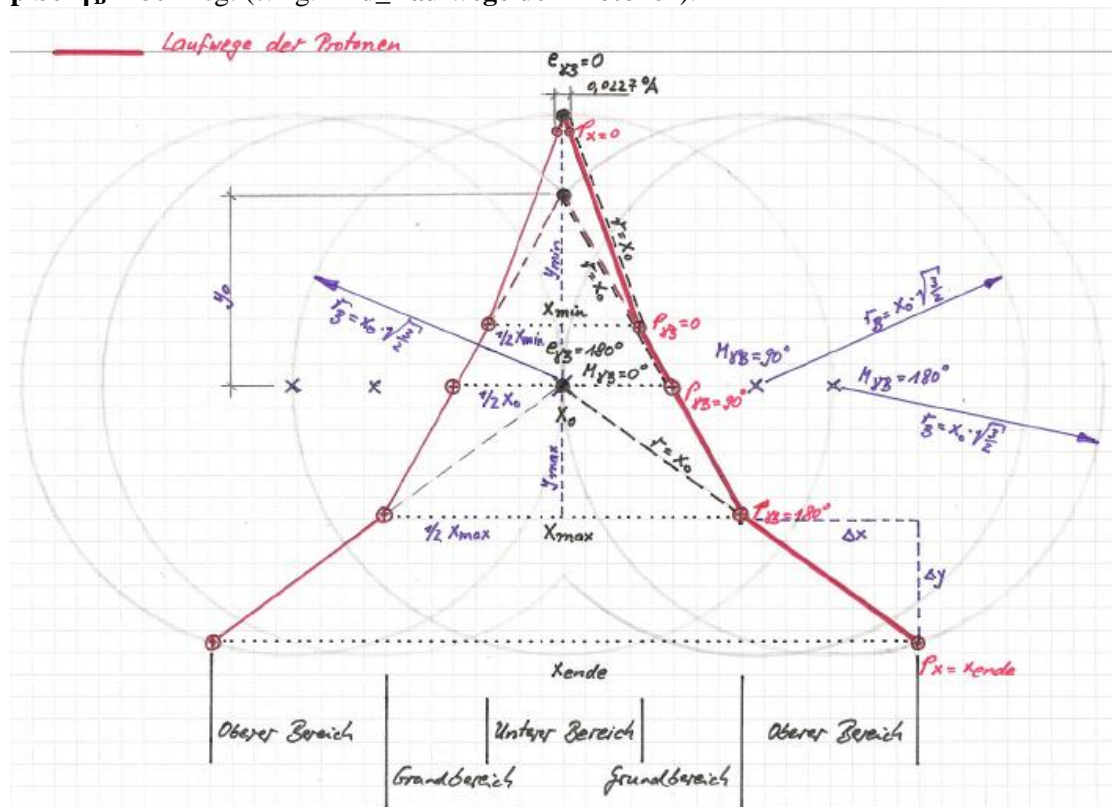
Drittens, Untersuchung der physikalischen Struktur Bereichsfaktors f_{K1}

Das folgende Kapitel dient dazu, dem expliziten Bereichsfaktor als Polynom 2. Grades eine „physikalische“ Struktur zuzuordnen. Es ist

$f_{K1}(x) = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$ bzw. $f'_{K1}(x) = 2a \cdot x + b$ (1.Ableitung). Die Ableitung dieses Polynoms ist nicht zu verwechseln mit der Ableitung nach expliziter Herleitung. Die Gleichung beinhaltet drei Parameter. Die Bestimmung der einzelnen Parameter gelingt nur, wenn drei Randbedingungen festgelegt werden können, die für das besondere Verhalten der Bahnenergieerzeugung maßgeblich sind.

1.)... $f_{K1}(x = x_{\min}) = 1$, beim Bereichsübergang soll keine Unstetigkeit auftreten.

2.)... $f'_{K1}(x = x_{\min}) = 0$, Steigung des Polynoms ist null. Zur Begründung greifen wir auf den vg. Verlauf von f_{K1} zurück (s. Diagramm mit Polynom). Es ist sofort zu sehen, dass die 1.Ableitung des Polynoms (dieses suchen wir ja zu bestimmen) an der Stelle $x = x_{\min}$ Null ist. Dieser Ansatz bedeutet, dass beim Übergang vom Grundbereich in den unteren Bereich es unerheblich ist, dass sich die Protonen mit veränderter Richtung auf der Verbindungslinie „e-p“ bewegen, die zwischen den Punkten **e** bei $x=0$ und **p** bei $\gamma_B=180^\circ$ liegt (s. ng. **Bild_Laufwege der Protonen**):



Um zu erkennen, dass sich die Richtung des Laufwegs von Bereich zu Bereich verändert, wurden die drei Molekül-Zustände –wie dargestellt– übereinandergelegt. Demnach knickt (wie wir später sehen werden) auch mit Eintritt in den oberen Bereich ($x > x_{\max}$) der Laufweg etwas ab und verläuft dann weiter bis zum Orbitalrand. Es wird sich zeigen, dass dieses Abknicken der Laufrichtung sich auf den Bereichsfaktor für den oberen Bereich auswirkt und die eigentliche Schwierigkeit bei dessen Definition des ausmacht.

3.)... $f'_{K1}(x = 0) = + \frac{Y_{\min}}{1} \cdot \frac{1}{2} \cdot x_{\min}$, positive Steigung am Ende des unteren Bereichs ($x=0$).

Die positive Steigung an der Stelle $x=0$ ist am Verlauf von f_{K1} zu erkennen (s. vg. Diagramm). In der Realität werden keine x -Abstände kleiner als $x = rd. 0,0242^\circ \text{A}$ erzielt (theoretisch $x \geq 2l$).

Die Regressionskurve des Polynoms von $f_{K1}(x)$ liefert $f'_{K1}(x=0) = 2,6586$. Dieser Zahlenwert entspricht genau dem Verhältnis $\frac{Y_{\min}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\min}} = \frac{1,063274016}{0,800} \cdot 2 = 2,6582$. Dies ist der theoretische Gra-

dient des Bereichsfaktors an der Stelle $x=0$. Diese Verhältniszahl definiert sich an der Stelle $x=x_{\min}$. Bei kleineren x -Abständen bleibt diese Verhältniszahl entsprechend der Ausrichtung des Laufwegs der Protonen in Bezug auf die Mittelsenkrechte der Kernverbindungsline erhalten (s. Bild Laufweg der Protonen). In Konsequenz davon definiert sich der Elektron-Kern-Abstand $r_1(x)$. Da der Orbitalfaktor seinen Minimalwert eins angenommen hat (eine Vollkugel), tritt nun der Einfluss der beiden Protonen (indirekt, weil über den Gradienten) der Gestalt in Erscheinung, dass die Kern-Kern-Abstoßung die Protonen weiterhin auf der Laufrichtung neben bzw. schräg zur Mittelsenkrechten hält. Dieses Verhalten bleibt, bis die beiden Protonen wie „harte“ Kugeln aneinander stoßen mit $x = 2l$. Es stellt sich dann der für diese theoretisch größtmögliche Annäherung zugehörige Wert der Gesamtenergie entsprechend ein.

Daher ist eine weitere Gleichung, um die an der Stelle $x=0$ auftretende Gesamtenergie einzustellen, entbehrlich, da an dieser Stelle ein definierter Energiewert nicht existiert. Im oberen Bereich ist das jedoch anders. Dort ist das Molekül bis zur Stelle $x=x_{\text{ende}}$ stabil und besitzt einen endlichen Wert (18,05 eV), weshalb dort ein entsprechender Ansatz zu treffen ist. Aus diesem Grunde verläuft der Bereichsfaktor im oberen Bereich als Polynom 3.Grades und im unteren Bereich als Polynom 2.Grades.

Die Gl. $f_{K1}(x=0) = 0$ kommt nicht in Betracht. Mit ihr sollte erreicht werden, dass der Bereichsfaktor bis zur Stelle $x=0$ auf die Bahnenergie-Erzeugung einwirken kann. Wie die explizite Herleitung von $f_{K1}(x)$ jedoch zeigt, lässt es der mathematische Formalismus zu, dass der Bereichsfaktor bis zur Stelle $x=0$ auf die Bahnenergieerzeugung einwirken kann. In diesem Falle müsste mathematisch gesehen eine unendlich hohe Gesamtenergie angenommen werden. Vg. Ansatz entfällt daher.

Nach diesen Erläuterungen der Ansätze führen wir die Berechnung der Parameter für ein Polynom 2.Grades durch. Aus der 3.Gleichung folgt, dass

$$b = \frac{Y_{\min}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\min}} \text{ ist.}$$

Somit ergibt sich aus der 2. Gleichung

$$0 = 2a \cdot x_{\min} + \frac{Y_{\min}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\min}} \text{ bzw. } a = -\frac{Y_{\min}}{x_{\min} \cdot 2}.$$

Damit erhalten wir aus der 1. Gleichung

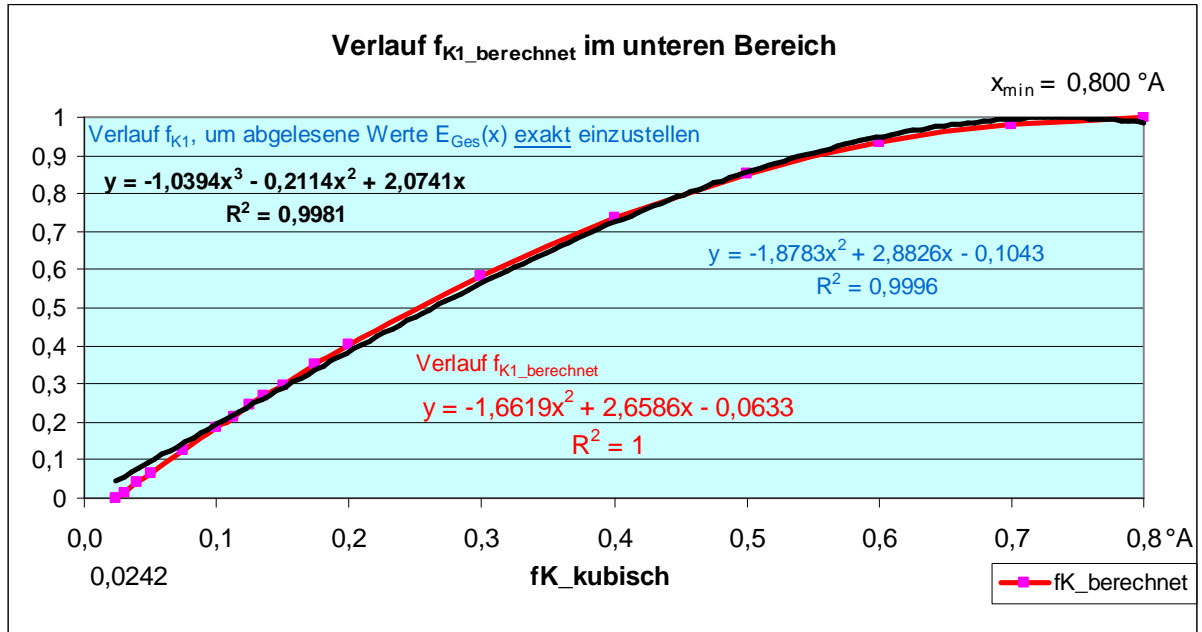
$$1 = -\frac{Y_{\min}}{x_{\min} \cdot 2} \cdot x_{\min}^2 + \frac{Y_{\min}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\min}} \cdot x_{\min} + c \text{ bzw. } c = 1 - Y_{\min}$$

Der Bereichsfaktor (quadratisch) ergibt sich zu

$$(13)... f_{K1_berechnet} = -\frac{Y_{\min}}{x_{\min} \cdot 2} \cdot x^2 + \frac{Y_{\min}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\min}} \cdot x + (1 - Y_{\min}) \text{ mit}$$

$$(13a)... Y_{\min} = \sqrt{x_0^2 - \frac{1}{4} \cdot x_{\min}^2}$$

Es ergibt sich folgender Verlauf für $f_{K1_berechnet}$:



Für den unteren Bereich führt der Ansatz eines Polynoms ersten Grades zu unplausiblen Werten. Es müsste $r_{B1}^2 = 3/2 \cdot r_1^2(x)$ sein, also variabel. In diesem Falle könnte zwar $f_{E1} = Y_{\min}/1/2x_{\min}$ sein, was der Molekülgeometrie entspricht, aber ab $x < r_d$. $0,3^\circ A$ wäre f_E zu null geworden und es wäre die bei $0,4^\circ A$ abgelesene Energie kleiner als die bei $0,5^\circ A$, was aber nicht der Fall ist.

Ergebnistabelle für den unteren Bereich:

x	$z_1 = z \cdot f_z \cdot f_K$	f_B^2	$fz \cdot f_{K_berechnet}$	r_1^2	r_B^2	$E_{Ges} I$ berechnet mit f_{K1}	$E_{Ges} I$ abgelesener Wert *)
0,79986091	11,395240	1,500000	1,000000	1,290496	1,935744	15,7880	15,80
0,7	11,285541	1,958502	0,990373	0,988380	1,935744	16,3270	16,40
0,6	10,989940	2,665739	0,964433	0,726156	1,935744	16,8994	17,10
0,5	10,556609	3,838665	0,926405	0,504275	1,935744	17,6815	17,90
0,4	10,025551	5,997914	0,879802	0,322736	1,935744	18,9721	19,15
0,3	9,414986	10,662958	0,826221	0,181539	1,935744	21,3941	
0,2	8,666895	23,991655	0,760572	0,080684	1,935744	26,7051	
0,1	7,265812	95,966620	0,637618	0,020171	1,935744	43,4706	
0,05	4,908495	383,866482	0,430750	0,005043	1,935744	77,4407	
0,024164337	0,000000	1643,502802	0,000000	0,001178	1,935744	150,2106	**)

x , r_1 und r_B in $^\circ A$, E in eV; f_K siehe nächste Tabelle

*) Abgelesen wurden die Werte auf Basis des Potenzialverlaufs nach Original-Bildquelle, s. Seite 7. Dazu wurde die dortige Kurve stark vergrößert und genau ausgemessen. Der abgelesene Wert kann jedoch kleine Ungenauigkeiten infolge von Verzerrungen durch die Bildvergrößerung enthalten. Die max. Abweichung zwischen mit vg. mit der expliziten Herleitung übereinstimmenden Ansätzen zum quadratischen Verlauf und dem mit Ablesefehlern behafteten Ablesewert liegt an der Stelle $x = 0,5^\circ A$ mit 1,87%.

***) letzte Zeile aus vg. explizite Berechnung von f_{K1}

Ergebnistabelle für den unteren Bereich ohne Ansatz des Bereichsfaktors f_{K1} :

x	z₁	f_B²	fz ohne f_{K1}	E_{Ges I} berechnet ohne f_{K1}	E_{Ges I} abgelesener Wert *)	abgelesen f_{K1} abgelesen	quadratisch f_{K1} quadratisch
0,799861	11,395240	1,500000	1,000000	15,7880	15,80	1,00106996	1
0,7	11,475731	1,958502	1,007064	16,5148	16,40	0,98986655	0,983426766
0,6	11,771387	2,665739	1,033009	17,6709	17,10	0,95087335	0,933614694
0,5	12,411308	3,838665	1,089166	19,5126	17,90	0,86839299	0,850563751
0,4	13,653693	5,997914	1,198193	22,5540	19,15	0,74747035	0,734273938
0,3	16,101005	10,662958	1,412959	27,9949	28,00	0,58474526	0,584745255
0,2	21,560636	23,991655	1,892074	39,4345	39,45	0,40197777	0,401977702
0,1	39,069541	95,966620	3,428584	74,8690	74,85	0,18597128	0,185971278
0,05	74,934860	383,866482	6,575979	146,5745	146,50	0,06550349	0,06550349

x in °A, E in eV

Die Regressionsformel für den abgelesenen Verlauf liefert $f'_{K1_abgelesen}(x = x_{\min}) = -2 \cdot 1,8783 \cdot 0,800 + 2,8826 = -0,12268$

Das Auftreten der negativen Steigung bedeutet, dass f_{K1} ab einem bestimmten Abstand vor x_{\min} rückläufig wird. So ist die Steigung bereits bei $x=0,767^\circ\text{A}$ zu null geworden und nicht erst bei $x=0,800^\circ\text{A}$. Dies kann nicht sein. Das bedeutet, dass die Ablesewerte nicht ganz exakt abgelesen wurden.

Die Regressionsformel für den physikalisch begründeten Verlauf liefert

$f'_{K1_berechnet}(x = x_{\min}) = -2 \cdot 1,6619 \cdot 0,800 + 2,6586 = 0$ und stetig fallende Steigung. **Dieser Verlauf ist anzunehmen.**

Die Regressionsformel für einen kubischen Verlauf liefert $f'_{K1_kubisch}(x = x_{\min}) = -0,24358$. Es gilt das gleiche, wie für die Ablesewerte, so dass dieser Verlauf ausscheidet.

Fazit:

Wie vg. Wertetabelle und Diagramm zeigen, liegt eine sehr gute Übereinstimmung vor zwischen dem Verlauf von $f_{K_berechnet}$ und $f_{K_abgelesen}$ (Ablesewerte enden bei $0,4^\circ\text{A}$). Die berechneten Werte konnten physikalisch bzw. phänomenorientiert begründet werden. Damit erfasst unsere Untersuchungsmethode die elementaren Strukturen des unteren Bereichs sowohl qualitativ als auch quantitativ zutreffend. Die im unteren Bereich für den Bereichsfaktor geltenden Parameter konnten eindeutig identifiziert werden. Damit ist für den unteren Bereich die Struktur erkannt und damit auch die Natur des Bereichsfaktors.

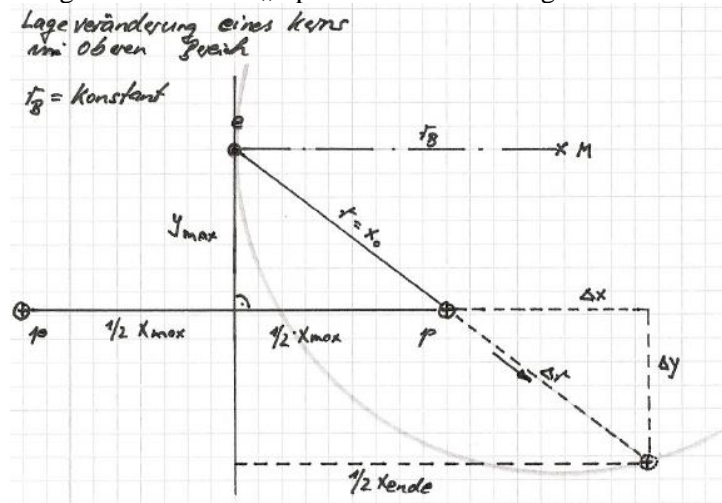
Es ist nun noch der obere Bereich zu betrachten. Hierzu stützen wir uns auf die bisherigen Ergebnisse aus der Untersuchung des unteren Bereichs.

e) Untersuchungen zum oberen Bereich ($x_{\max} \leq x \leq x_{\text{ende}}$) (Stelle mit Molekül-Zerfall):

Bzgl. der Molekül-Geometrie nehmen wir an, dass der Orbital-Mittelpunkt M an der gleichen Stelle verbleibt, wie im Abstand $x=x_{\max}$. und $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$ beträgt, also auch hier konstant bleibt. Im oberen Bereich ist das Bahnwirkungsvelefache durch den Ausdruck $1/2 \cdot 360/(360-180) \cdot f_{z2} \cdot f_{k2}$ gegeben.

Erstens, Ermittlung von r_2 (Abstand Elektron-Kern) aus der Molekül-Geometrie:

Bzgl. der Verlängerung von r_2 (Abstand Kern-Elektron) größer als x_0 setzen wir an, dass diese auf der im Abstand $x=x_{\max}$ vorliegenden Lauflinie „e-p“ der Protonen erfolgt.



Gemäß dieser Molekül-Geometrie gilt $r_2 = x_0 + \Delta r$ und $\Delta r_2^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2$. Des Weiteren ist

$$y_{\max}^2 + \left(\frac{1}{2} \cdot x_{\max}\right)^2 = x_0^2 \text{ bzw. } y_{\max}^2 = x_0^2 - \frac{1}{4} \cdot x_{\max}^2 \text{ bzw. } \frac{y_{\max}^2}{\frac{1}{4} \cdot x_{\max}^2} = \frac{x_0^2}{\frac{1}{4} \cdot x_{\max}^2} - 1 = \frac{\Delta y^2}{\Delta x^2}$$

$$\Delta y^2 = \Delta x^2 \cdot \left(\frac{x_0^2}{\frac{1}{4} \cdot x_{\max}^2} - 1 \right) \text{ und } \Delta r^2 = \Delta x^2 \cdot \left(1 + \frac{x_0^2}{\frac{1}{4} \cdot x_{\max}^2} - 1 \right) \text{ bzw. (14)... } \Delta r = \Delta x \cdot \frac{2 \cdot x_0}{x_{\max}}$$

Im Kernabstand $x=x_{\text{ende}}$ gilt mit guter Näherung $\Delta x = 1/2 \cdot x_{\max}$, womit $\Delta r_{\text{ende}} = x_0$ bzw. $r_{2\text{max}} = 2 \cdot x_0$ wird. Der Kern liegt dann genau auf dem Orbitalrand. Allein schon dieses besondere Merkmal rechtfertigt den vg. Ansatz für Δr . Aus diesem Grunde ist ein größerer Kern-Kern-Abstand nicht möglich. Das Molekül zerfällt. Die Tatsache, dass die Kerne an der Stelle $x=x_{\text{ende}}$ genau den Orbitalrand treffen, ist – wie die Berechnungsmethode zeigt- nicht als zufälliges Ergebnis einzustufen. So führt z. B. eine Lageänderung mit $r_2 = x_0 + \Delta x$ zu einem Δy , das exakt nur $1/2$ so groß ist wie das vorgenannte. Da aber das neue r_2 die Gesamtenergie nur geringfügig verändert (weil $r_{2\text{neu}}$ nur wenig verschieden von $r_{2\text{vorher}}$ ist), bleibt auch der Term $f_E = \Delta y / \Delta x$ (anschließendes Kapitel „Drittens“) praktisch unverändert, was jedoch bei $r_2 = x_0 + \Delta x$, wegen $f_E = 1/2 \cdot \Delta y / \Delta x$ aber nicht mehr der Fall ist. Allein die als Lösung ausgewählte Lageänderung weist zugleich beide besonderen Merkmale auf: $f_E = \Delta y / \Delta x$ ist auch tatsächlich so und die Kerne erreichen exakt den Orbitalrand!

Mit $x_{\max} = x_0 \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right)$ ergibt sich $\Delta r = \Delta x \cdot \frac{2}{1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}}}$ mit $\Delta x = \frac{1}{2} \cdot x_0 - \frac{1}{2} \cdot x_{\max}$

Damit ist $f_{B2}^2 = \frac{3/2 \cdot x_0^2}{r_2^2}$ eine Funktion von x , wobei jedoch $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$ konstant bleibt.

Zweitens, Explizite Ermittlung von f_{z2} aus der Gleichung für die Bahnenergie:

Mit $A_2 = \frac{f_{z2}}{f_{B2}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_{B2}}$

$$E_B = E_0 \cdot \left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = A_2 \cdot \frac{x_0^2}{r^2} \cdot E_0$$

ergibt sich nach Division durch E_0 und mit $\varphi_{B1}=180^\circ$ und $r=r_2$

$$\left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_2^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = \frac{z_2^2}{f_{B2}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_2^2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360-180}$$

Wir setzen wieder ein $f_{B2}^2 \cdot r_2^2 = r_{B2}^2$ und erhalten mit $z_2 = f_{z2} \cdot z$, wobei $z = \frac{9}{j^{7/2}}$

$$\left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_1^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = z_2 \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{x_0^2}{r_{B2}^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot 2 = f_{z2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{x_0^2}{r_{B2}^2} \cdot 2$$

$$\left(1 - j^{5/2} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot j^{5/2} \cdot \frac{x_0^2}{r_2^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) = f_{z2} \cdot \frac{9}{4} \cdot \frac{x_0^2}{r_{B2}^2}$$

Wir stellen nach „f“ um und erhalten

$$f_{z2} = \left(\frac{2}{3} \cdot \frac{r_{B2}^2}{x_0^2} \cdot \frac{2}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0^2}{r_2^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) \cdot j^{5/2}$$

Im oberen Bereich soll (wie im Grundbereich und im unteren Bereich) $r_{B2}^2 = \frac{3}{2} \cdot x_0^2$ konstant bleiben.

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

Mit $r_2^2 = \left[x_0 + \left(\frac{1}{2} x - \frac{1}{2} x_{\max} \right) \cdot \frac{2x_0}{x_{\max}} \right]^2 = \left(x_0 + \frac{x \cdot x_0}{x_{\max}} - \frac{x_{\max} \cdot x_0}{x_{\max}} \right)^2 = \left(\frac{x \cdot x_0}{x_{\max}} \right)^2$ bzw.

(15)... $r_2^2 = \left(\frac{x \cdot x_0}{x_{\max}} \right)^2$ ergibt sich dann $f_{z2} = \left(\frac{2}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0^2 \cdot x_{\max}^2}{x^2 \cdot x_0^2} \cdot \frac{x}{x_0} \right) \cdot j^{5/2}$ bzw.

(16)... $f_{z2} = \left(\frac{2}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot j^{5/2}$

Diesen Ausdruck setzen wir in A_2 ein und erhalten mit $z_2 = f_{z2} \cdot z$, wobei $z = \frac{9}{j^{7/2}}$ und mit

$$f_{B2}^2 = \frac{r_{B2}^2}{r_2^2} = \frac{\frac{3}{2} x_0^2 \cdot x_{\max}^2}{x^2 \cdot x_0^2} = \frac{3}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x^2} \quad \text{und } \varphi_B=180^\circ \text{ aus } A_2 = \frac{z_2}{f_{B2}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360 - g_{B2}}$$

$$A_2 = \left(\frac{2}{3} \right) \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot j^{5/2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{x^2}{x_{\max}^2} \cdot j^{7/2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{360}{360-180} \text{ bzw.}$$

$$\frac{A_2}{j^{5/2}} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \frac{x^2}{x_{\max}^2}$$

Nun führen wir –in analoger Vorgehensweise zum unteren Bereich- auch hier einen speziellen Bereichsfaktor (f_{K2}) ein (im Grundbereich war $f_{K0}=1$). Dies erfolgt dadurch, dass im Ausdruck für A_2 beide Seiten einfach mit f_{K2} erweitert werden. Es ergibt sich

$$\frac{A_2}{j^{5/2}} \cdot f_{K2} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \frac{x^2}{x_{\max}^2} \cdot f_{K2}$$

Diesen Ausdruck setzen wir in die Formel (Gl.3) für die Gesamtenergie ein gemäß

$$(3) \dots \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{x_0^2}{r_2^2} \cdot \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{A_2}{j^{5/2}} \cdot f_{K2} \right)$$

Damit ist f_{z2} nicht in f_{K2} enthalten. In der Basisformel ist f_{K2} nicht erwähnt, was bedeutet, dass dort mit dem Wert 1 gerechnet wurde. Da nun aber f_{K2} eingeführt wurde und nur auf A_2 wirken soll, musste diese Vorgabe in der Basisformel auch umgesetzt werden.

Mit vg. Ausdruck für A_2 und mit $\frac{x_0^2}{r_2^2} = \frac{x_{\max}^2 \cdot x_0^2}{x^2 \cdot x_0^2} = \frac{x_{\max}^2}{x^2}$ ergibt sich

$$\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} = \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x^2} + \frac{x_{\max}^2}{x^2} \cdot \frac{A_2}{j^{5/2}} \cdot f_{K2} \right) \text{ bzw.}$$

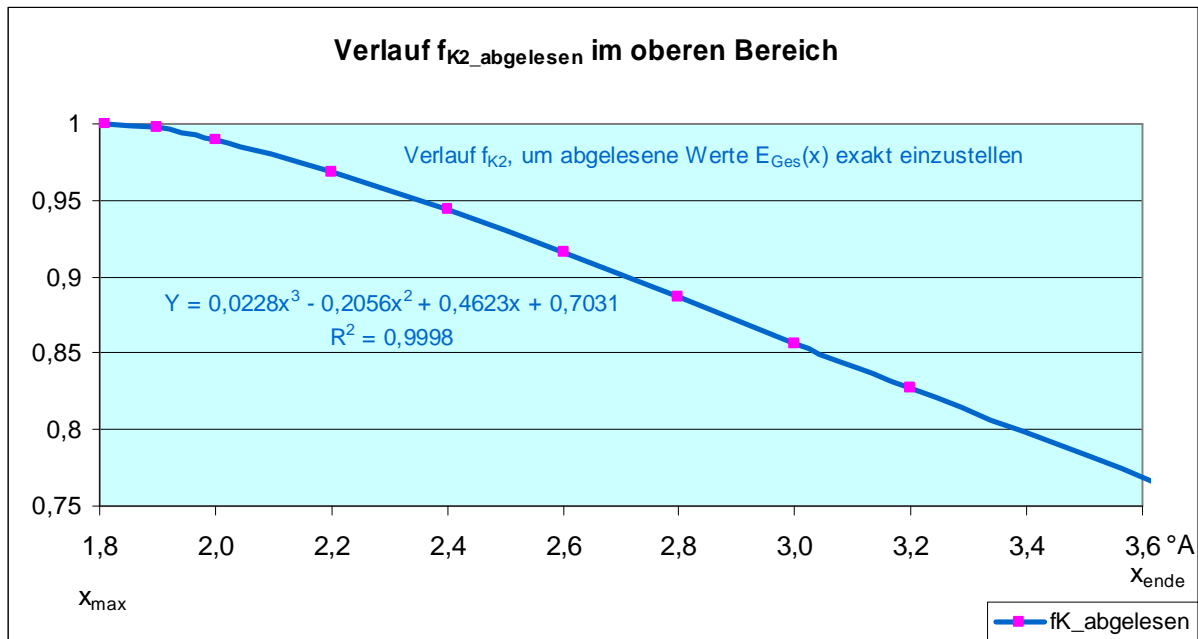
$$\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} + \frac{x_{\max}^2}{x^2} \cdot \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \frac{x^2}{x_{\max}^2} \cdot f_{K2}$$

$$(17) \dots \frac{E_{ges}(x)}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot f_{K2}(x)$$

Es ist bemerkenswert, wie sehr das Rechenverhalten des oberen Bereichs mit dem des unteren Bereichs übereinstimmt. Letztlich hätte es genügt einfach Gl.(10) zu nehmen und anstelle von x_{\max} mit x_{\min} zu rechnen. Dies werten wir als ein Beleg für die Richtigkeit des Lauflinienbildes der beiden Protonen und damit auch des Ansatzes von $r_1(x)$ und $r_2(x)$. Da die Elementarteilchen nicht „wissen“ in welchem Bereich sie sich gerade aufhalten, darf es hier gar keine Unterschiede geben.

Ebenso wie für den vg. Bereichsfaktor des unteren Bereichs $f_{K1}(x)$ haben wir für den Bereichsfaktor $f_{K2}(x)$ des oberen Bereichs ein mathematisches Verfahren (der „physikalisch“ motivierte Ansatz wird später daraus entwickelt), um die zu jedem x-Abstand gehörende Gesamtenergie (auch hier sind es die jeweiligen Ablesewerte, s. Diagramm) exakt einzustellen. Dazu geben wir als $E_{Ges}(x)$ den zum x-Abstand gehörenden Wert der Gesamtenergie ein und berechnen $f_{K2}(x)$ entsprechend.

Nach Vorliegen der „physikalisch“ motivierten Ansätze kann $f_{K2, \text{berechnet}}$ bestimmt werden. Diese berechneten Werte sollten dann die Messwerte exakt wiedergeben. In so weit dürfen sie durchaus etwas von den Ablesewerten abweichen. Damit sind wir in der Lage den Verlauf des Bereichsfaktors $f_{K2}(x)$ des oberen Bereichs darzustellen (s. Diagramm):



Aus v.g. Verlauf geht ziemlich sicher hervor, dass der Bereichsfaktor sich wie ein Polynom 3.Grades verhält, weil die Messdaten den ganzen Bereich abdecken und $R^2=0,9998$ beträgt.

Ergebnistabelle für den oberen Bereich:

x	$z_2 = z \cdot f_z \cdot f_K$	f_{B2}^2	$f_z \cdot f_K$ berechn	r_2^2	r_{B2}^2	E_{Ges} I berechnet mit f_{K2}	E_{Ges} I abgelesener Wert *)
1,808278	11,398194	1,500000	1,000259	1,290496	1,935744	16,4000	16,40
1,9	11,375526	1,358672	0,998270	1,424733	1,935744	16,6500	16,65
2	11,329665	1,226201	0,994245	1,578651	1,935744	16,8500	16,85
2,2	11,227429	1,013389	0,985274	1,910168	1,935744	17,1500	17,15
2,4	11,142232	0,851529	0,977797	2,273258	1,935744	17,4000	17,40
2,6	11,064299	0,725563	0,970958	2,667920	1,935744	17,6000	17,60
2,8	10,986647	0,625613	0,964144	3,094156	1,935744	17,7500	17,75
3	10,904154	0,544978	0,956904	3,551965	1,935744	17,8500	17,85
3,2	10,838304	0,478985	0,951126	4,041347	1,935744	17,9500	17,95
3,61655638	10,687680	0,375000	0,937907	5,161984	1,935744	18,0500	18,05

x, r₁ und r_B in °A, E in eV; f_K siehe nächste Tabelle

*) Abgelesen wurden die Werte auf Basis des Potenzialverlaufs nach Original-Bildquelle, s. Seite 7. Dazu wurde die dortige Kurve stark vergrößert und genau ausgemessen. Der abgelesene Wert kann jedoch kleine Ungenauigkeiten infolge von Verzerrungen durch die Bildvergrößerung enthalten. Es besteht keine Abweichung zwischen berechnetem und abgelesenem Wert, da der Bereichsfaktor explizit angegeben werden kann.

Begründung zur Einführung der Bereichsfaktoren:

Auch bei der Berechnung mit Hilfe der Schrödinger'schen Wellengleichung führt man zur Annäherung der Rechenwerte an die gemessenen Werte eine Näherung durch (LCAO) und zudem noch weitergehende besondere Funktionen ein, sog. „modifizierte Funktionen“, bei denen die Parameter für jeden Kernabstand gerade so optimiert werden, dass die Gesamtenergie den minimalen Wert einnimmt. Mit der Annahme des Bereichsfaktors sind wir jedoch in der Lage, den Verlauf der Gesamtenergie über den unteren und oberen Bereich exakt(!) nachzuvollziehen und zudem ohne komplizierte Mathematik. Allerdings sind auch wir bis hierhin nur genau so weit, wie die Berechnung über die Schrödingergleichung. Aufgrund der in dieser Ausarbeitung verwendeten einfachen Strukturen zur Beschreibung der Wirkungsweise der Elementarteilchen können wir es aber wagen, einen Schritt weiter zu gehen, nämlich physikalische Ursachen für die Bereichsfaktoren zu ergründen, um dadurch ein besseres Verständnis des Phänomens „Bahnenergie“ zu erzielen und der übrigen Energien, die durch das Zusammenwirken der Elementarteilchen hervorgerufen werden. Dazu fassen wir die Bereichsfaktoren als ein eigenständiges Phänomen innerhalb der Erzeugung von Bahnenergie auf und schreiben dieses zusätzliche Phänomen dem Lauflinienbild der Protonen zu.

Nun wollen wir die 1.Ableitung suchen.

In v.g. Formel ist E_{Ges} nicht als Variable aufzufassen, sondern als bekannter Messwert, den man für den jeweiligen x -Abstand einsetzen kann. Funktionscharakter hat somit nur der Bereichsfaktor $f_{K2}(x)$. Wir

können schreiben $f_{K2}(x) = \frac{f(x)}{g(x)}$ und zur Bildung der Ableitung die Quotientenregel anwenden ge-

mäß $f'_{K2} = \frac{f' \cdot g - f \cdot g'}{g^2} = \frac{f'}{g} - \frac{f \cdot g'}{g^2}$ wobei

$$f = \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0} \quad \text{und} \quad g = \frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0} \text{ ist.}$$

Es ergibt sich (18)...
$$\frac{f'}{g} = \frac{\left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x^2 \cdot x_0} \right)}{\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0}}$$
 und

$$(19)... \frac{f \cdot g'}{g^2} = \frac{\left(\frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot \left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{x_0} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x^2 \cdot x_0} \right)}{\left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0} \right)^2}$$

Nebenrechnung:

In der folgenden Nebenrechnung wollen wir die Ableitung an der Stelle $x=x_{max}$ durchführen. Einsetzen von x_{max} führt dazu, dass $\frac{f \cdot g'}{g^2} = 0$ null wird, weil die rechte Klammer auf dem Bruchstrich null wird.

Damit ist für diesen x -Abstand nur noch der Ausdruck f'/g wirksam. Dies bedeutet, dass die Gesamtenergie auf die Steigung und damit auf den Bereichsfaktor keinen Einfluss hat. Dies ist deswegen so, weil diese Nahtstelle auch zum Grundbereich gehört, in dem neben dem Orbitalfaktor ($f_{\gamma B}$) kein Bereichsfaktor auftritt. Im Grundbereich ist allein der Orbitalfaktor maßgebend für die zusätzliche Bahnenergie. Erst in den Bereichen, in denen der Orbitalwinkel ausgeschöpft ist, treten die besonderen „Spielräume“ in Gestalt von Abstands- und Bereichsfaktoren auf.

Wir rechnen nun weiter und erhalten mit $x=x_{max}$:

$$\frac{f'}{g} = \frac{\left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x_{max}^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x_{max}^2 \cdot x_0} \right)}{\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x_{max} \cdot x_0}} = f'_{K2}(x = x_{max}) \text{ bzw.}$$

$$(20)... f'_{K2}(x = x_{max}) = \frac{\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{x_0}{x_{max}^2} - \frac{1}{x_0} \right)}{\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{x_{max}}{x_0}} = \frac{-0,266434}{1,775382} = -0,150071$$

Wir fahren fort mit der Ableitung an der Stelle $x=x_{\text{ende}}$. Mit $x_{\text{ende}} \cong 2 \cdot x_{\text{max}}$ (s. Seite 41):

$$\frac{f'}{g} = \frac{\left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{4x_{\text{max}}^2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\text{max}}^2}{4x_{\text{max}}^2 \cdot x_0} \right)}{\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{2x_{\text{max}}}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\text{max}}^2}{2x_{\text{max}} \cdot x_0}} \quad (21) \dots \quad \frac{f'}{g} = \frac{\frac{1}{8} \left(\frac{x_0}{x_{\text{max}}^2} - \frac{1}{x_0} \right)}{\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{5}{4} \frac{x_{\text{max}}}{x_0}} = \frac{-0,0666084}{2,173331}$$

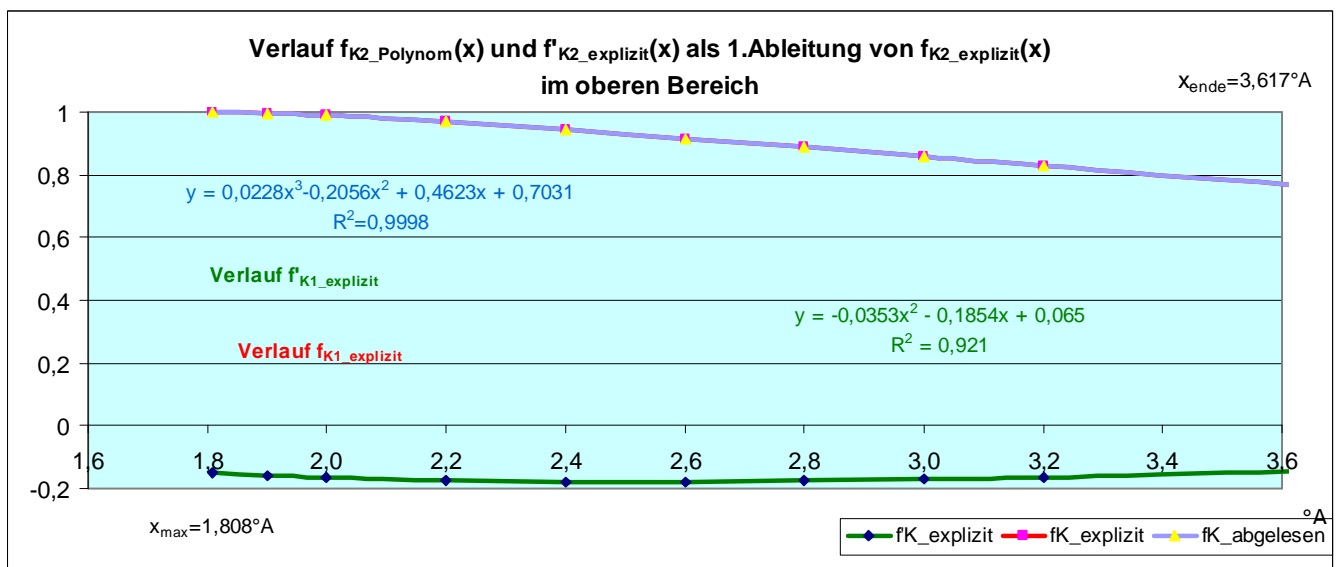
und es ist

$$\frac{f \cdot g'}{g^2} = \frac{\left(\frac{E_{\text{ges}}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{2x_{\text{max}}} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\text{max}}^2}{2x_{\text{max}} \cdot x_0} \right) \cdot \left(+\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{x_0} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\text{max}}^2}{4x_{\text{max}}^2 \cdot x_0} \right)}{\left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{2x_{\text{max}}}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{\text{max}}^2}{2x_{\text{max}} \cdot x_0} \right)^2}$$

$$(22) \dots \frac{f \cdot g'}{g^2} = \frac{\left(\frac{E_{\text{ges}}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{4} \cdot \frac{x_0}{x_{\text{max}}} + \frac{1}{4} \cdot \frac{x_{\text{max}}}{x_0} \right) \cdot \left(\frac{3}{8} \cdot \frac{1}{x_0} \right)}{\left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{5}{4} \cdot \frac{x_{\text{max}}}{x_0} \right)^2} = \frac{0,54967}{4,723367}. \text{ Somit ist}$$

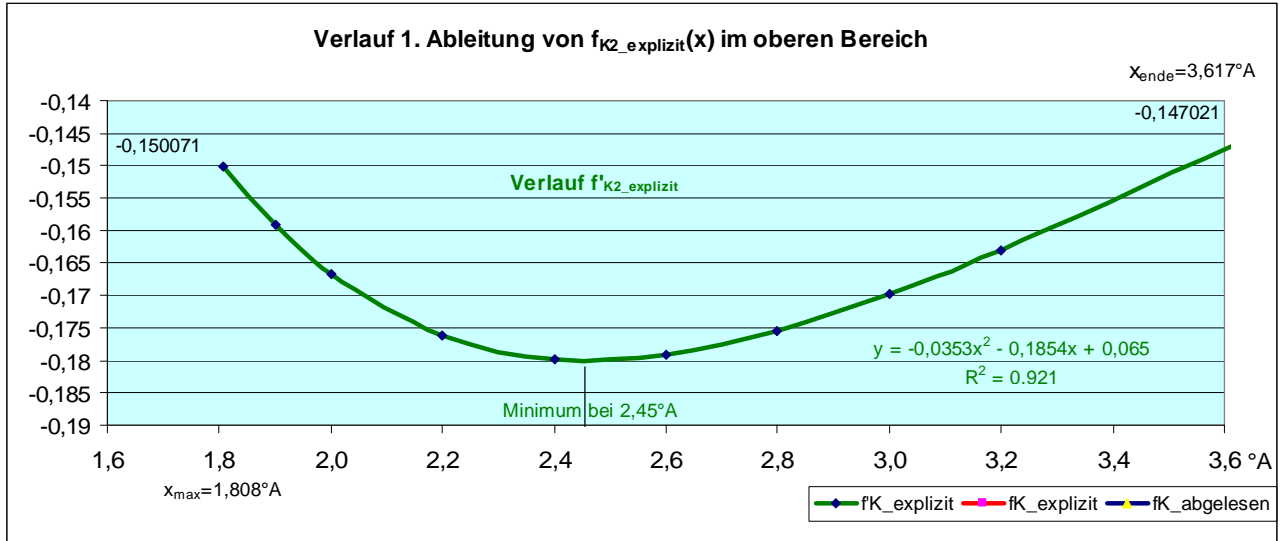
$$f_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = \frac{-0,0666084}{2,173331} - \frac{0,54967}{4,723367} = -0,147021$$

Damit sind wir in der Lage den Verlauf des Bereichsfaktors $f_{K2}(x)$ und dessen 1. Ableitung auf der Grundlage der vg. expliziten Herleitung anzugeben (s. ng. Diagramm und Tabelle):



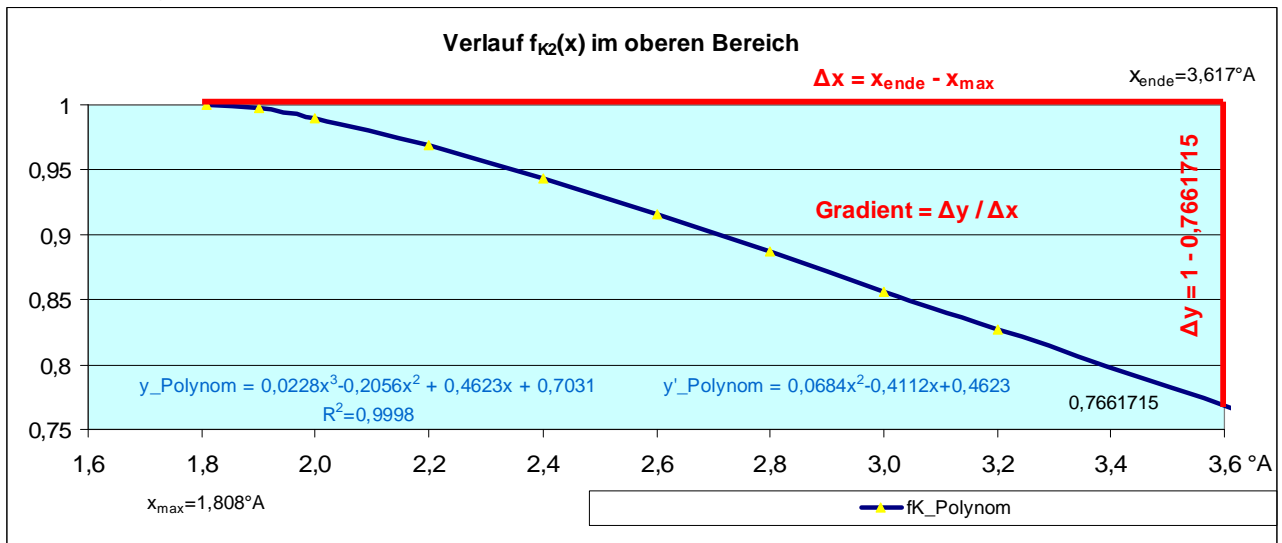
Fußnote: Wie zu sehen, stimmen der explizite Verlauf und der abgelesene Verlauf hier exakt überein. Dies muss so sein, da sich der explizite Verlauf auf die abgelesenen Energiewerte bezieht. Die Ermittlung des kubischen Verlaufs erfolgt auf Basis noch zu definierender Parameter. Es wird dann der kubische Verlauf zugrunde gelegt, um Energiewerte zu berechnen, die dann ggf. von den abgelesenen Werten abweichen können. Im nachfolgenden Diagramm ist der Verlauf der 1. Ableitung in einem anderen Maßstab dargestellt.

Gleiches Diagramm, Y-Achse anders skaliert, um $f'_{K2}(x)$ besser erkennen zu können



Der Verlauf von $f'_{K2_explizit}(x)$ folgt einer Parabel 2.Grades mit flachem Minimum bei $x=2,45^\circ\text{A}$. Im Bereich $1,8$ bis $2,45^\circ\text{A}$ fällt der Gradient von $-0,15$ auf $-0,18$. Im Bereich von $2,45$ bis $3,6^\circ\text{A}$ steigt er an von $-0,18$ auf $-0,1475^\circ\text{A}$. Ursache hierfür ist, dass die beiden Protonen, die in diesem Falle weit auseinander sind, sich dem Orbital annähern. (Im unteren Bereich wird aufgrund der Nähe der beiden Kern zueinander und der gleichzeitig gegebenen Nähe zum Orbital eine enorme Erhöhung der Bahnenergieerzeugung verursacht.) **Der Gradient von $f'_{K2_explizit}(x)$ ist nicht zu verwechseln mit dem Gradienten $f'_{K2_Polynom}(x)$.**

Gleiches Diagramm, Y-Achse anders skaliert, um $f_{K2}(x)$ besser erkennen zu können



Bzgl. der Übereinstimmung der beiden Funktionswerte s. vg. Fußnote. Aus dem hier dargestellten Verlauf geht hervor, dass mit guter Annäherung $f'_{K2_Polynom}(x=x_{\text{max}})=0$ ist. Für diesen Ansatz gilt dann, in Analogie zum unteren Bereich, die gleiche Begründung. An der Stelle $x=x_{\text{ende}}$ gilt

$$f'_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = -\frac{1 - 0,7661715}{3,617 - 1,808} = -0,129259.$$

Dieser Wert ergibt sich direkt als Verhältniszahl zwischen der Differenz der Funktionswerte (Δy) von $y(x_{\text{max}})$ und $y(x_{\text{ende}})$ und dem zugehörigen Abstand (Δx) $x_{\text{max}}-x_{\text{ende}}$.

Drittens, Untersuchung der physikalischen Struktur des Bereichsfaktors f_{K2} :

Trotz der mit f_{K1} identisch erscheinenden Formel für die explizite Berechnung von f_{K2} gemäß

$$(17)... \frac{E_{ges}}{E_0} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} - \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0}{x} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0} = \left(\frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_{max}^2}{x \cdot x_0} \right) \cdot f_{K2}(x)$$

ist dieser Bereichsfaktor um eine Stufe komplizierter im Aufbau als f_{K1} . Die Regressionsformel zeigt mit $R^2=0,9998$ das Auftreten eines Polynoms 3. Grades.

Es ist $Y(x) = +0,0228x^3 - 0,2056x^2 + 0,4623x + 0,7031$ und

Und $Y'(x) = +0,0684x^2 - 0,4112x + 0,4623$

Einsetzen von $x=x_{max}$ (rd. $1,8083^\circ A$) in f_{K2} liefert den Wert 1,001593, was praktisch 1 bedeutet.

Einsetzen von $x=x_{ende}$ (rd. $3,6166A$) in f_{K2} liefert den Wert 0,7643388.

Einsetzen von $x=x_{max}$ (rd. $1,8083^\circ A$) in f'_{K2} liefert den Wert -0,057608, was eventuell 0 bedeutet.

Einsetzen von $x=x_{ende}$ (rd. $3,6166^\circ A$) in f'_{K2} liefert den Wert -0,130188.

Die Gradienten des Polynoms sind nicht zu verwechseln mit dem Gradienten $f'_{K2_explizit}(x)$!

Obwohl der kubische Verlauf von f_{K2} feststeht, sollen zunächst die einfacheren Verläufe betrachtet werden, um diese definitiv auszuschließen. Zugleich lernen wir mit der Annäherung an die gesuchte Lösung umzugehen.

Untersuchung „Linearer Verlauf“:

Wir beginnen mit der linearen Abhängigkeit $f_{K2}(x)$. Dazu nehmen wir an, dass an der Stelle $x=x_{max}$ (rd. $1,8^\circ A$) der Faktor $f_{K2}=1$ sein soll. Damit wird erreicht, dass keine Energiesprünge an der Nahtstelle zweier Bereiche auftreten. Des Weiteren nehmen wir an, dass sich an der Stelle $x=x_{ende}$ (rd. $3,6^\circ A$) die dort gemessene Gesamtenergie $E_{Ges}(x=x_{ende}) = 18,05eV$ ergibt (s. Potenzialkurve, Seite 7). Somit ist

$$1.)... a \cdot x_{max} + b = 1, \text{ mit } x_{max} = x_0 \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right)$$

2.)... $a \cdot x_{ende} + b = f_E$ Der Term f_E ist so zu wählen, dass er die vg. Energie-Bedingung erfüllt.

Es ist sehr genau $x_{ende} \cong 2 \cdot x_{max}$. Wir rechnen damit weiter und erhalten über

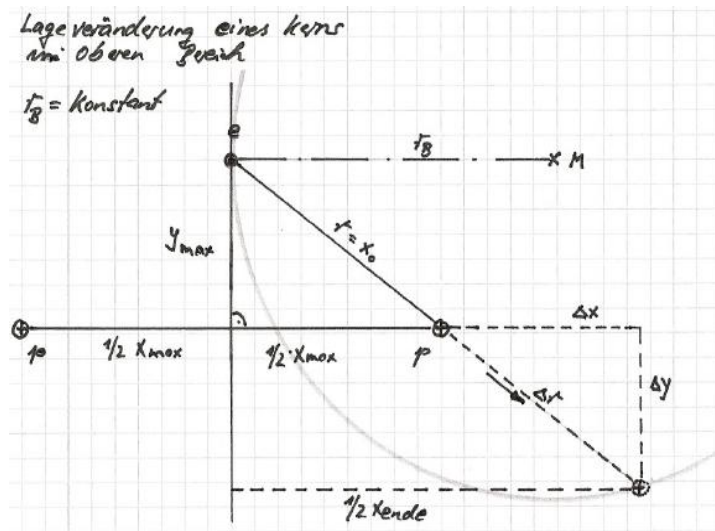
$$+ a \cdot 2x_{max} + b = f_E \text{ und Addition von } -a \cdot x_{max} - b = -1 \text{ die Ausdrücke } a = \frac{f_E - 1}{x_{max}} \text{ und}$$

$$b = 2 - f_E.$$

Damit haben wir dem Bereichsfaktor eine lineare Abhängigkeit vom x-Abstand zugewiesen. Es gilt

$$f_K = (f_E - 1) \cdot \frac{x}{x_{max}} + (2 - f_E).$$

Nun bleibt noch f_E zu bestimmen. f_E soll den im Abstand $x=x_{ende}$ beobachteten Energiewert von 18,05 eV einstellen. Um diesen Ablesewert mit vg. Energieformel zu treffen, müsste $f_E=0,7661715$ betragen. f_E sollte aber nicht nur einfach ein Zahlenwert sein, sondern aufgrund seiner Struktur Aufschluss über die Ursache für diese besondere Veränderung der Bahnenergie geben (d. h. hier: Verminderung). Wir unterstellen, dass sich jeder der beiden Kerne, wie in ng. Bild gezeigt, mit der Steigung, wie sie an der Stelle $x=x_{max}$ vorliegt, in Richtung Orbitalrand bewegt.



Wir nehmen an, dass genau diese Lageänderung der Kerne in Richtung Orbitalrand auch Ursache für die besondere Bahnenergieminderung ist und definieren daher

$$f_E = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_{\max}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\max}} = \frac{y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\text{ende}}} = \frac{0,687771}{\frac{1}{2} \cdot 1,808278} = 0,76069144.$$

Im Kernabstand $x=x_{\text{ende}}$ gilt mit guter Annäherung $\Delta x = \frac{1}{2} \cdot x_{\max}$, womit $\Delta r_{\text{ende}} = x_0$ bzw. $r_{2\max} = 2 \cdot x_0$ wird (s. Seite 41 und s. auch Seite 61). Diese Annahme führt dazu, dass $x_{\text{ende}} = 2 \cdot x_{\max} = 3,61656749^\circ \text{A}$ ist. Wie die ng. Wertetabelle zeigt, ergibt sich ein Wert für die Gesamtenergie von rd. 17,90 eV. anstelle des Ablesewertes von 18,05 eV. **Wie eine einfache Kontrollrechnung zeigt, ergibt sich mit dem Ansatz $x_{\text{ende}} = 1,98569433 \cdot x_{\max} = 3,59069878^\circ \text{A}$ exakt der zugehörige Ablesewert von 18,05 eV.**

Dies bedeutet, dass das Molekül bereits „weit“, d. h. hier $0,0258687^\circ \text{A}$ vor Erreichen des theoretisch größten möglichen x-Abstandes an seine obere Existenzgrenze stößt. Wir stellen hier den Formalismus zur Berechnung von f_{K2} und die Eingangsdaten nicht mehr in Frage. Demnach können wir uns das Molekülinnere auch (vgl. Seite 8) als mit der Dicke $s = 2 \cdot r_m$ gequantelte Kugelschalen vorstellen, wobei die letzte Kugelschale bei r_B endet. Das Orbital selbst erstreckt sich von $r_B \pm r_m$, ragt also um r_m aus dem Molekülraum heraus und taucht um r_m in den Molekülraum ein. Im größten x-Abstand nähern sich die Protonen von innen kommend dem Orbital bis auf eine Abstandschalendicke. Die 2.letzte Schale bleibt frei, das Orbital selbst ist unerreichbar. Die Protonen befinden sich dabei im λ -Abstand (harte Kugel) zur oberen Grenze der 3.letzten Kugelschale (äußerster Laufweg) und damit im Abstand zu r_B von $\Delta r = l + 2 \cdot s = l + 4 \cdot r_m$ bzw.

$\Delta r = 1,321569 \cdot 10^{-15} \text{ m} + 4 \cdot 0,003883775^\circ \text{A}$ bzw. $\Delta r = 0,015548316^\circ \text{A}$. Aus Gl. (14) auf Seite 41 ergibt sich

$\Delta x = \left(\Delta r \cdot \frac{x_{\max}}{2 \cdot x_0} \right) \cdot 2$, (Klammerwert 2-fach, da Δx für jedes der beiden Protonen gilt). Mit Gl. (7a) von Seite 29 gemäß

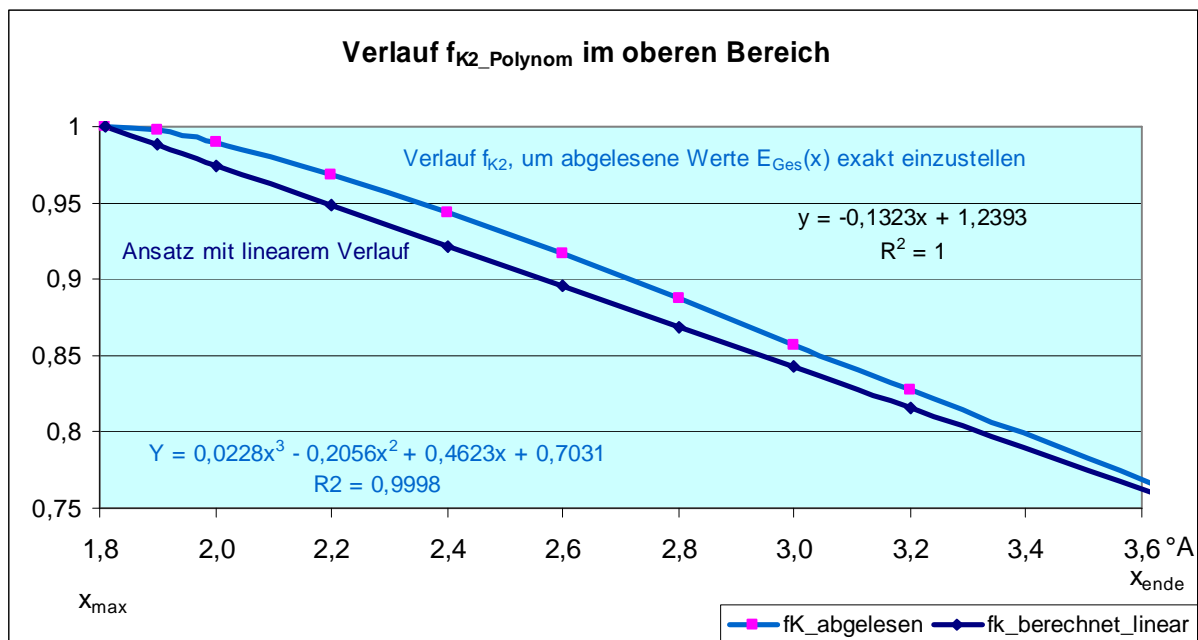
$x_{\max} = x_0 \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right)$ können wir schreiben $\Delta x = \Delta r \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right)$ bzw. $\Delta x = 0,02474972^\circ \text{A}$. Die Abweichung

dieses Ansatzes vom vg. Rechenwert beträgt $0,001119^\circ \text{A}$. Bezogen auf den Rechenwert für den größten möglichen Abstand von $3,59069878^\circ \text{A}$ beträgt die Abweichung 0,03%.

Aufgrund dieser Erkenntnis rechnen wir mit der vg. guten Annäherung weiter, denn diese eignet sich nicht als Argument gegen unser Molekülmodell, erleichtert aber die Berechnung.

Der Definitionswert weicht nur um 0,7% vom Ablesewert ab. Damit ist dieser Ansatz für f_E gerechtfertigt. Hinzu kommt, dass nur dieser Ansatz zugleich auch mit dem geometrischen Ansatz für Δr korrespondiert. Der Funktionswert des Bereichsfaktors (nicht dessen Gradient, wie im unteren Bereich) an der Stelle $x=x_{\text{ende}}$ definiert sich als die vg. Verhältniszahl an der Stelle $x=x_{\max}$. Bei größeren x-Abständen bleibt diese Verhältniszahl entsprechend der Ausrichtung des Laufwegs der Protonen in Bezug auf die Mittelsenkrechte der Kernverbindungsline erhalten (s. Lauflinienbild der Protonen). In Konsequenz davon definiert sich der Elektron-Kern-Abstand $r_2(x)$. Da der Orbitalfaktor seinen Maxi-

malwert zwei angenommen hat (zwei Vollkugeln), tritt nun der direkte Einfluss der beiden Protonen der Gestalt in Erscheinung, dass die Kern-Kern-Abstoßung die Protonen auf eine geänderte Laufrichtung schräg zur Mittelsenkrechten zwingt. Dieses Verhalten bleibt, bis die beiden Protonen den Orbitalrand erreichen, so dass das Molekül bei $x > \text{rd. } 3,6^\circ\text{A}$ und einer endlichen Gesamtenergie von 18,05 eV zerfällt. Daher ist diese Gleichung erforderlich, um die an der Stelle $x=x_{\text{ende}}$ auftretende Gesamtenergie einzustellen (im unteren Bereich ist sie, wie gezeigt, entbehrlich), da an dieser Stelle ein endlicher Energiewert existiert. Aus diesem Grunde verläuft der Bereichsfaktor im oberen Bereich als Polynom 3. Grades und im unteren Bereich als Polynom 2. Grades. Es stellt sich dann der für diese größtmögliche Entfernung zugehörige Wert der Gesamtenergie entsprechend ein.



Ergebnistabelle für den oberen Bereich:

x	$Z_2 = z \cdot f_z \cdot f_K$	f_B^2	$f_z \cdot f_{K_{\text{berechnete}}}$	r_2^2	r_B^2	$E_{\text{Ges II}}$ berechnet mit f_K	$E_{\text{Ges II}}$ abgelesener Wert *)
1,808278	11,395240	1,500000	1,000000	1,290496	1,935744	16,3942	16,40
1,9	11,269275	1,358672	0,988946	1,424733	1,935744	16,4402	16,65
2	11,156716	1,226201	0,979068	1,578651	1,935744	16,5085	16,85
2,2	10,991328	1,013389	0,964554	1,910168	1,935744	16,6838	17,15
2,4	10,882759	0,851529	0,955027	2,273258	1,935744	16,8877	17,40
2,6	10,810995	0,725563	0,948729	2,667920	1,935744	17,0998	17,60
2,8	10,761739	0,625613	0,944407	3,094156	1,935744	17,3059	17,75
3	10,724508	0,544978	0,941139	3,551965	1,935744	17,4953	17,85
3,2	10,691440	0,478985	0,938237	4,041347	1,935744	17,6600	17,95
3,61655638	10,611232	0,375000	0,931199	5,161984	1,935744	17,8991	18,05

x, r₂ und r_B in °A, E in eV; f_K siehe nächste Tabelle

*) Abgelesen wurden die Werte auf Basis des Potenzialverlaufs nach Original-Bildquelle, s. Seite 7. Dazu wurde die dortige Kurve stark vergrößert und genau ausgemessen. Der abgelesene Wert kann jedoch kleine Ungenauigkeiten infolge von Verzerrungen durch die Bildvergrößerung enthalten. Die max. Abweichung zwischen berechnetem und abgelesenem Wert liegt an der Stelle $x = 2,4^\circ\text{A}$ mit 2,20% bedingt durch den linearen Ansatz.

Fazit:

Es liegt bereits eine durchaus praktikable Übereinstimmung vor zwischen dem Verlauf von $f_{K_{\text{berechnet}}}$ und $f_{K_{\text{abgelesen}}}$ vor (Messwerte enden bei $3,6^\circ\text{A}$). Insbesondere wurden die beiden Endpunkte mit großer Genauigkeit getroffen. Damit kennen wir in Hinblick auf den kubischen Verlauf bereits zwei Randbedingungen.

Untersuchung „Quadratischer Verlauf“:

Als nächstes untersuchen wir den Verlauf des Bereichsfaktors f_{K2} als Polynom 2. Grades, um die Genauigkeit der Zwischenwerte weiter zu erhöhen. Dazu muss eine Ableitungsbedingung als 3.Gl. definiert werden. Es gilt:

$$f_{K1} = a \cdot x^2 + b \cdot x + c \text{ bzw. } f'_{K1} = 2a \cdot x + b \text{ (1.Ableitung)}$$

Diese Gleichung beinhaltet drei Parameter. Die Bestimmung der einzelnen Parameter gelingt nur, wenn drei Randbedingungen festgelegt werden können, die für dieses besondere Verhalten der Bahnenergieerzeugung maßgeblich sind. Dazu greifen wir zurück auf die vg. Untersuchung des linearen Verlaufs, demnach die ng. beiden ersten Gleichungen gelten:

1.)... $f_{K2}(x = x_{\max}) = 1$, beim Bereichsübergang tritt keine Unstetigkeit auf

2.)... $f_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = + \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\max}}$, es soll $E_{\text{Ges}}(x=x_{\text{ende}})=18,05$ eV eingestellt werden. Im unteren

Bereich trat diese Randbedingung nicht auf. Da wir die hier zusätzlich benötigte Ableitungsbedingung nicht kennen, rechnen wir im folgenden zunächst allgemein mit

3.)... $f'_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = -W$. Dies hat den Vorteil, dass wir alle möglichen Werte (W) einsetzen können. Da Gefälle auftritt, wurde ein Minuszeichen eingeführt. Auch hier sind die Gradienten des Polynoms nicht zu verwechseln mit dem Gradienten $f'_{K2_explizit}(x)$! Wir nutzen für den weiteren Rechengang aus, dass $x_{\text{ende}} \cong 2 \cdot x_{\max}$ ist.

Aus 3.): $-W = 2a \cdot 2x_{\max} + b$ bzw. $b = -(W + 4a \cdot x_{\max})$

Aus 2.): $\frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = 4a \cdot x_{\max}^2 + 2b \cdot x_{\max} + c$ bzw. nach Erweitern mit $-W$

$$\frac{Y_{\max} \cdot W}{\frac{1}{2}x_{\max}} = 4a \cdot x_{\max}^2 \cdot W + 2b \cdot x_{\max} \cdot W + c \cdot W$$

3.) Erweitern mit $-\frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}}$ ergibt $-W \cdot \frac{-Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = -4a \cdot x_{\max} \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} - b \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}}$ bzw.

$$\frac{Y_{\max} \cdot W}{\frac{1}{2}x_{\max}} = -4 \cdot a \cdot 2 \cdot Y_{\max} - b \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}}$$

Aus 1.): $1 = a \cdot x_{\max}^2 + b \cdot x_{\max} + c$ bzw. $c = 1 - a \cdot x_{\max}^2 - b \cdot x_{\max}$

3.) und 2.) Gleichsetzen und mit c:

$$-4a \cdot 2Y_{\max} - b \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = 4a \cdot x_{\max}^2 \cdot W + 2b \cdot x_{\max} \cdot W + (W - a \cdot x_{\max}^2 \cdot W - b \cdot x_{\max} \cdot W)$$

$$-4a \cdot 2Y_{\max} - b \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = 3a \cdot x_{\max}^2 \cdot W + b \cdot x_{\max} \cdot W + W$$

Einsetzen des aus 3.) abgeleiteten Ausdruck für b:

$$-4a \cdot 2Y_{\max} + (W + 4a \cdot x_{\max}) \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = 3a \cdot x_{\max}^2 \cdot W - (W + 4a \cdot x_{\max}) \cdot x_{\max} \cdot W + W$$

$$-4a \cdot 2Y_{\max} + W \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} + 4a \cdot x_{\max} \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = 3a \cdot x_{\max}^2 \cdot W - W^2 \cdot x_{\max} - 4a \cdot x_{\max}^2 \cdot W + W$$

$$W \cdot \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = -a \cdot x_{\max}^2 \cdot W - W^2 \cdot x_{\max} + W$$

$$\frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} = -a \cdot x_{\max}^2 - W \cdot x_{\max} + 1$$

$$a = -\frac{1}{x_{\max}^2} \cdot \left(\frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} + W \cdot x_{\max} - 1 \right)$$

Eine gute Annäherung ergibt sich z.B. für $f'_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = W = -\left(\frac{Y_0}{x_{\max}} - \frac{Y_{\max}}{x_{\max}} \right)$. Dieser Aus-

druck liefert den Wert **W=-0,165658**. Die Regressionsformel für das Polynom 3.Grades fordert den Wert von **-0,130188**. Dazwischen liegt ein Korrekturfaktor von rd. 1,27.

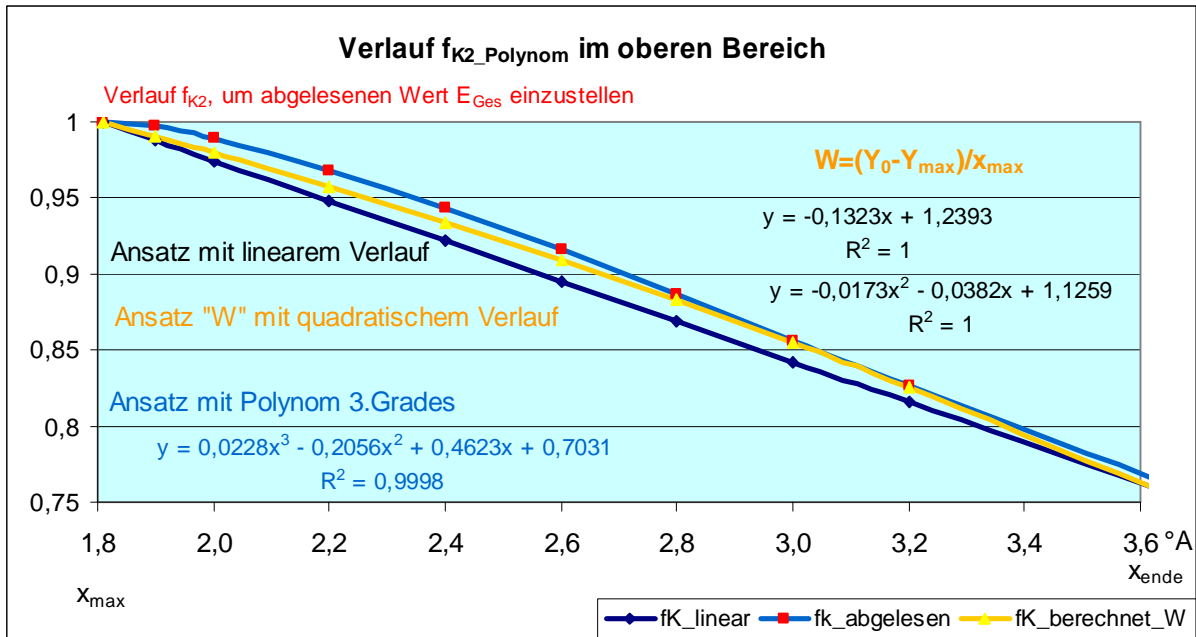
Ganz gleich, welche Werte für W eingesetzt werden, stets zeigt sich, dass der Bereichsfaktor mit einem Polynom 2.Grades nicht beschrieben werden kann. Für den Fall der Berechnung mit W erhalten wir folgende **Wertetabelle W**:

x	fK_explicit	fK_W	Eges II berechnet	Eges II abgelesen
1,808278188	1,000259209	1	16,3942	16,40
1,9	0,997175398	0,99059283	16,5017	16,65
2	0,989735866	0,98000403	16,6300	16,85
2,2	0,968526331	0,95778555	16,9042	17,15
2,4	0,943666628	0,93417925	17,1788	17,40
2,6	0,916198301	0,90918511	17,4328	17,60
2,8	0,886910814	0,88280314	17,6495	17,75
3	0,856395842	0,85503333	17,8157	17,85
3,2	0,827025155	0,82587569	17,9203	17,95
3,616556375	0,766171525	0,76069122	17,8991	18,05

Fazit:

Wie zu sehen, sind nunmehr die Werte des Zwischenbereichs grundsätzlich zulässig. Da der Energiewert bei $x=3,6^\circ\text{A}$ aber nicht mehr größer ist als der Energiewert bei $x=3,2^\circ\text{A}$ liegt, ist dies die dortige Auswirkung eines zu starken Gefälles (W ist zu negativ). Zudem ist festzuhalten, dass noch keine Verbesserung der Annäherung des Gradienten an der Stelle $x=x_{\max}$ erreicht wurde. Dennoch liegt eine durchaus gute Übereinstimmung vor zwischen dem Verlauf von $f_{K_berechnet}$ und $f_{K_abgelesen}$ (Messwerte enden bei $3,6^\circ\text{A}$). Weiterhin werden die beiden Endpunkte mit großer Genauigkeit getroffen. Hinzu gekommen ist, dass auch die Steigung an der Stelle $x=x_{\text{ende}}$ weiter angenähert werden konnte.

Zur besseren Übersicht über die bisherigen Ergebnisse der Untersuchungen zum quadratischen Verlauf dient folgende grafische Darstellung der vg. Tabellenwerte.



Ergebnistabelle für den oberen Bereich ohne Ansatz des Bereichsfaktors f_{K2} :

x	Eges II berechnet ohne f_K	Eges II abgelese- ner Wert
1,808278	16,3942	16,40
1,9	16,7136	16,65
2	17,0820	16,85
2,2	17,8704	17,15
2,4	18,7133	17,40
2,6	19,5982	17,60
2,8	20,5161	17,75
3	21,4603	17,85
3,2	22,4259	17,95
3,61655638	24,4904	18,05

x in °A, E in eV

Das Phänomen des Bereichsfaktors kann damit erklärt werden, dass auch die beiden Protonen Einfluss auf die Umlaufdauer des Elektrons und damit auf die Bahnwirkungserzeugung haben. In einem Atom tritt dieser Faktor nicht auf. Nachdem der Orbitalfaktor f_{yB} keinen zusätzlichen Beitrag mehr leisten kann, ist die Lageänderung der Kerne in Richtung Orbitalrand -in Ermangelung anderer Ursachen- als die alleinige Ursache der Minderung der Bahnwirkung um den Faktor f_{K2} anzusehen.

Beim Wasserstoffatom erfolgte in jedem „Umlauf“ $\frac{1}{2} \cdot h$ als Wirkungserzeugung (s. Seite 16) auf der Grundbahn (s. auch „Wasserstoffatom, Kapitel „Über die Ursache der Bohr’schen Quantenbedingung“). Zu prüfen wäre, ob im H_2^+ -Molekül $z \cdot \frac{1}{2} \cdot h$ an Wirkungserzeugung auf der Grundbahn vorliegt. Es wäre dann die Bahngeschwindigkeit (Umlaufdauer des Elektrons) aufgrund der Anwesenheit des

zweiten Kerns mit z verlangsamt gemäß $v_{H_2^+} = (a \cdot c) \cdot \left(\frac{j}{2} \cdot \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{1}{z} \right)$, so dass die Aufsummierungs-

dauer während der Bahnenergie-Entstehung je Umlauf länger ist, was zu dem höheren Wert $\frac{1}{2} \cdot h \cdot z$ führt. Eine Nebenrechnung hat ergeben, dass die Annahme eines variablen Bahnradius gemäß $r_{B2} = x_0 + \Delta x$ ($\Delta y = 0$) zum identischen Ergebnis für f_{K2} führt. Die Annahme eines variablen Bahnradius ist abzulehnen, weil dann die Kerne an der Stelle $x = x_{ende}$ bei weitem nicht mehr den Orbitalrand erreichen würden, womit die Begründung dafür, dass das Molekül bei größeren Abständen nicht existiert, nicht mehr erkennbar wäre.

Untersuchungen zum „Kubischen Verlauf“:

Zum Schluss suchen wir nach den beiden noch fehlenden Randbedingungen (s. ng. Gl.3 und 4), die den Verlauf des Bereichsfaktors f_{K2} als Polynom 3. Grades exakt bestimmen. Es gilt:

$$f_{K2} = a \cdot x^3 + b \cdot x^2 + c \cdot x + d \quad \text{bzw.} \quad f'_{K2} = 3a \cdot x^2 + 2b \cdot x + c \quad (1.\text{Ableitung})$$

Diese Gleichung beinhaltet vier Parameter.

1.)... $f_{K2}(x = x_{\max}) = 1$. Es tritt beim Bereichsübergang tritt keine Unstetigkeit auf.

$$2.)...f_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = \frac{\Delta Y}{\Delta x} = \frac{Y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\text{ende}}} = \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\max}} = W \quad (\text{s. Seite 41, 49 und 60}).$$

Es soll $E_{\text{Ges}}(x=x_{\text{ende}})=18,05 \text{ eV}$ eingestellt werden.

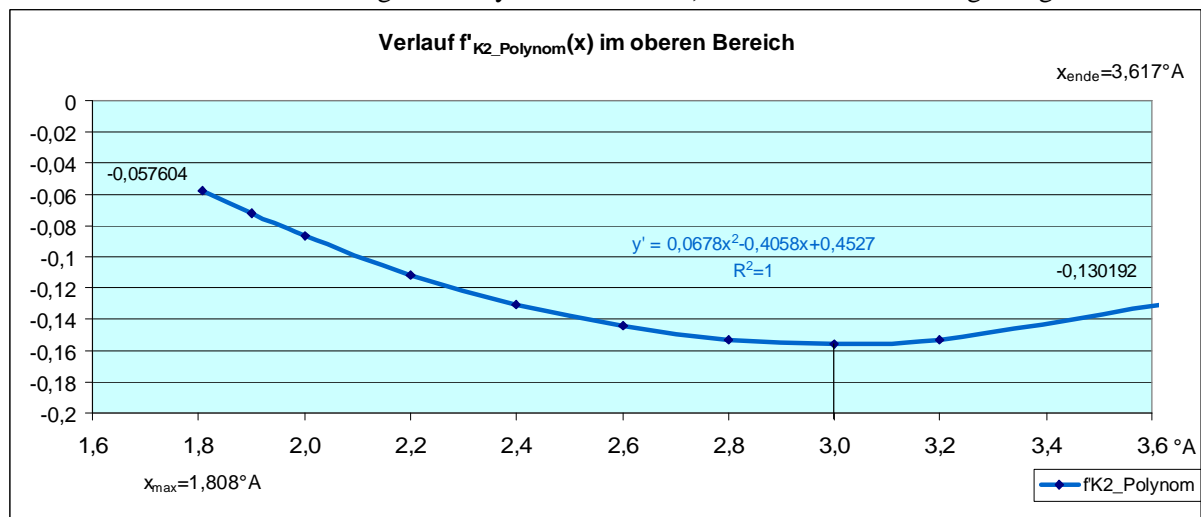
$$3.)...f'_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = -\frac{1 - \frac{Y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} x_{\text{ende}}}}{(x_{\text{ende}} - x_{\max})} = -\frac{1 - \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2} x_{\max}}}{(x_{\text{ende}} - x_{\max})} = -0,132339 = -V = \frac{1 - W}{m}$$

Die Struktur der Gl.3.) bzw. dieser Ansatz ergibt sich direkt aus Gl.1.) und 2.) als Differenz der y-Werte dividiert durch Differenz der x-Werte (s. vg. Diagramm Verlauf $f_{K2_Polynom}$). Daher die exakte Übereinstimmung. Damit bedeutet Gl.3.) aus physikalischer Sicht nichts Neues, sondern ist lediglich mathematische Konsequenz aus Gl.1 und Gl.2. Aus diesem Grunde wird dieser Parameter als Gl.3.) aufgeführt. Wohl aber wurde über Gl.2.) ein neuer Parameter eingeführt, da ein solcher Sachverhalt (Einstellen der Energie) am unteren Ende des unteren Bereichs ($x=0$) entbehrlich war.

Da der Orbitalfaktor ab $x \geq x_{\max}$ seinen Maximalwert zwei angenommen hat (zwei Vollkugeln), tritt nun der Einfluss der beiden Protonen –zum einen direkt, weil über die Funktion $f_{K2}(x = x_{\text{ende}})$ und zum anderen indirekt, weil über den Gradienten $f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})$ - der Gestalt in Erscheinung, dass das Zusammenwirken aus Bahnenergieerzeugung und Kern-Kern-Abstoßung, die beiden Protonen auf eine Laufrichtung noch schräger zur Mittelsenkrechten hält. Damit hat die nach Übergang vom Grundbereich in den oberen Bereich erfolgende Änderung der Richtung des Laufwegs der beiden Protonen zweifachen Einfluss auf die Höhe der Gesamtenergie (im unteren Bereich herrscht wie gezeigt einfacher Einfluss).

4.)... $f'_{K2}(x = x_{\max}) = 0$

Es wird in Analogie zum unteren Bereich vorläufig „null“ angenommen, da an dieser Stelle die Richtung des Laufwegs des Protons gerade noch unverändert ist. Die Richtungsänderung auf den Laufweg im oberen Bereich beginnt erst bei infinitesimaler Erhöhung des x-Abstandes über x_{\max} hinaus. Allerdings besteht dadurch eine Abweichung zum Polynomwert von **-0,057608**. Siehe hierzu ng. Diagramm.



Ab $x \approx 3,0^\circ \text{A}$ macht sich neben der Richtungsänderung des Laufwegs der Protonen ein weiterer Effekt bemerkbar, nämlich die Annäherung der Protonen an das Orbital. Dies führt dazu, dass der Gradient des Bereichsfaktors etwas zunimmt. Im unteren Bereich wurde aufgrund der Nähe der beiden Kerne zueinander und der gleichzeitigen Nähe zum Elektron eine lineare Erhöhung des Gradienten verursacht.

Nun muss ein wenig gerechnet werden.

Ermittlung $f_{K2_berechnet_vorläufig}$ mit Hilfe des Gauß'scher Algorithmus

1.)... $f(x = m) = 1$; 2.)... $f(x = 2m) = W$; 3.)... $f'(x = m) = 0$; 4.)... $f'(x = 2m) = V$

Hierbei ist $m = x_{\max}$ und $2m = x_{\text{ende}}$; $V = (W-1)/m = -f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})$ und $W = Y_{\max}/1/2x_{\max}$.

$$\text{I... } am^3 + bm^2 + cm + d = 1$$

$$\text{II... } 8am^3 + 4bm^2 + 2cm + d = W$$

$$\text{III... } 3am^2 + 2bm + c + 0 = 0$$

$$\text{IV... } 12am^2 + 4bm + c + 0 = V$$

Diagonalisieren jeder Zeile; Faktoren a, b, c und d „1“ gesetzt; II/8; IV/4;

$$\begin{array}{cccc|c} m^3 & m^2 & m & 1 & +1 \\ m^3 & m^2 & m & 1 & +\frac{W}{8} \\ 3m^2 & 2m & 1 & 0 & 0 \\ 3m^2 & m & \frac{1}{4} & 0 & +\frac{V}{4} \end{array}$$

I/ m^3 ; I-II; III/ $3m^2$; III-IV

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & \frac{1}{2}m^2 & \frac{3}{4}m & \frac{7}{8} & 1 - \frac{W}{8} \\ 1 & \frac{2}{3m} & \frac{1}{3m^2} & 0 & 0 \\ 0 & m & \frac{3}{4} & 0 & -\frac{V}{4} \end{array}$$

II• $2/m^2$; I-III; IV/m

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{2m}{3} & \frac{4m^2}{7} & \frac{2}{m^2} - \frac{W}{4m^2} \\ 0 & \frac{1}{3m} & \frac{2}{3m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} \end{array}$$

II<-->IV vertauschen

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} \\ 0 & \frac{1}{3m} & \frac{2}{3m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{2m} & \frac{7}{4m^2} & \frac{2}{m^2} - \frac{W}{4m^2} \end{array}$$

III-II/3m; IV-II

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} \\ 0 & 0 & \frac{5}{12m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} + \frac{V}{12m^2} \\ 0 & 0 & \frac{3}{4m} & \frac{7}{4m^2} & \frac{2}{m^2} - \frac{W}{4m^2} + \frac{V}{4m} \end{array}$$

III•12m²/5; IV•4m/3

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12}{5m} & +\frac{12}{5m} + \frac{V}{5} = \frac{12+mV}{5} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{7}{3m} & \frac{8}{3m} - \frac{W}{3m} + \frac{V}{3} = \frac{8-W+mV}{3m} \end{array}$$

IV-III

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12}{5m} & +\frac{12}{5m} + \frac{V}{5} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{15m} & \frac{40-5W+5mV-36-3mV}{15m} = \frac{4-5W+2mV}{15m} \end{array}$$

IV•(-15m)

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12}{5m} & +\frac{12}{5m} + \frac{V}{5} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4+5W-2m(V) = -4+5W-2m \cdot \left(\frac{W-1}{m}\right) \end{array}$$

Somit ist: $d = -4 + 5W - 2W + 2$ bzw. $d = 3W - 2$

$$c = \frac{12}{5m} \cdot 1 + \frac{1}{5}(V) - \frac{12}{5m} \cdot (3W - 2) = -\frac{12}{5m} \cdot (3W - 2 - 1) + \frac{1}{5} \cdot \left(\frac{W-1}{m}\right) = -\frac{36}{5m} \cdot (W-1) + \frac{1}{5m} \cdot (W-1)$$

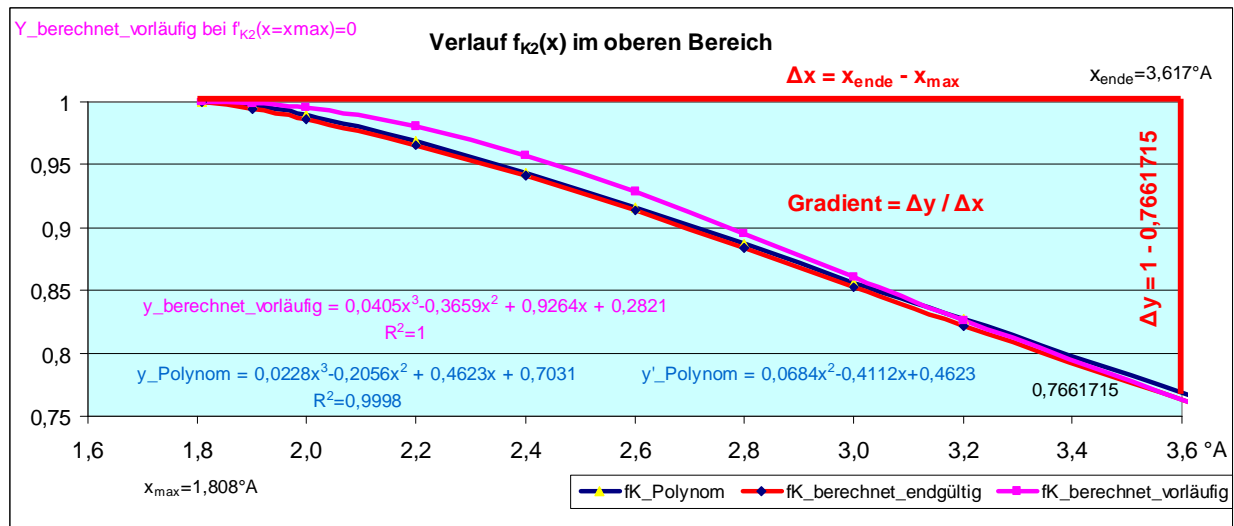
$$c = -\frac{35}{5m} \cdot (W-1) \text{ bzw. } c = +\frac{7}{m} \cdot (1-W)$$

$$b = -\frac{V}{4m} - \frac{3}{4m} \cdot \frac{7}{m} \cdot (1-W) = -\frac{W-1}{4m^2} + \frac{21}{4m^2} (W-1) \text{ bzw. } b = -\frac{5}{m^2} \cdot (1-W)$$

$$a = \frac{1}{m^3} - \frac{1}{m^3} \cdot (3W - 2) - \frac{1}{m^2} \cdot \frac{7}{m} \cdot (1-W) - \frac{1}{m} \cdot \frac{5}{m^2} \cdot (W-1) = -\frac{1}{m^3} \cdot (3W - 2 - 1) + \frac{7}{m^3} (W-1) - \frac{5}{m^3} (W-1)$$

$$a = -\frac{3}{m^3} (W-1) + \frac{7}{m^3} (W-1) - \frac{5}{m^3} (W-1) \text{ bzw. } a = \frac{1}{m^3} (1-W)$$

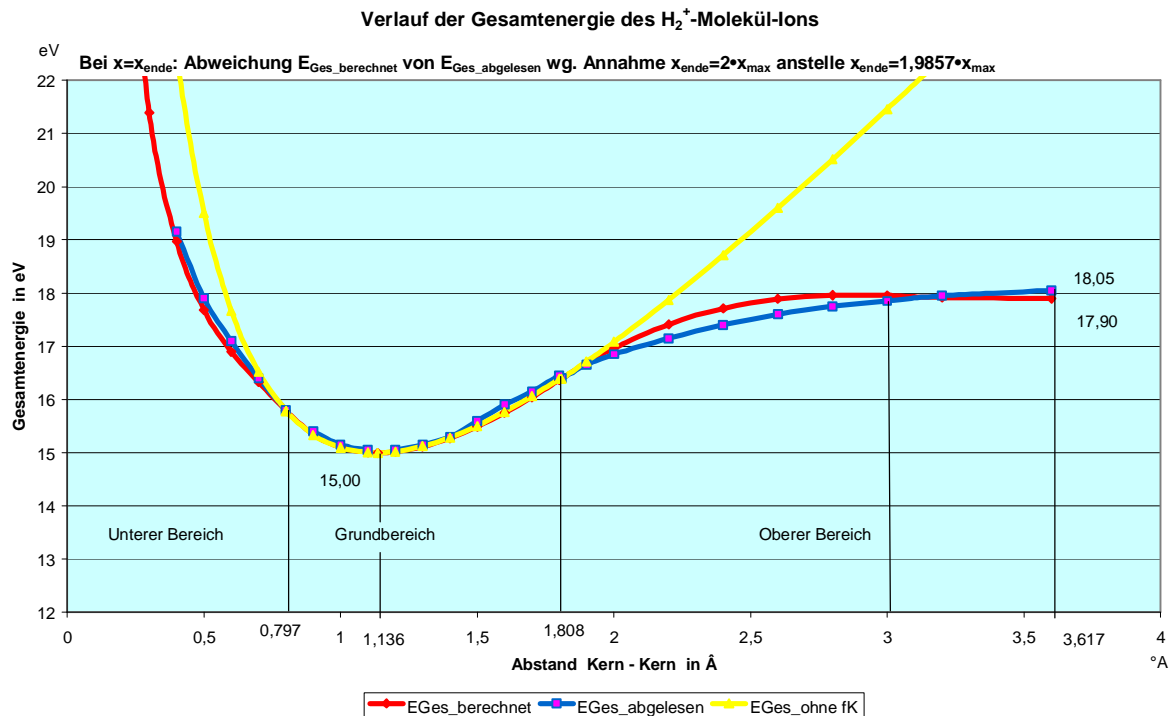
Aufgrund unserer Annahme 4.) $f'_{K2}(x = x_{\max}) = 0$ ergibt sich ng. Verlauf für $Y_{\text{berechnet}}$:



Wertetabelle für $f_{K_berechnet_vorläufig}$ mit $f'_{K2}(x=x_{\max})=0$

x	Eges II		$f_{K_berechnet}$
	berechnet mit	abgelesener Wert	
1,808278188	16,3942	16,40	1
1,9	16,6866	16,65	0,99879997
2	16,9668	16,85	0,9949053
2,2	17,4120	17,15	0,97997319
2,4	17,7140	17,40	0,95713627
2,6	17,8894	17,60	0,92833723
2,8	17,9605	17,75	0,89551873
3,0	17,9562	17,85	0,86062345
3,2	17,9129	17,95	0,82559406
3,616556375	17,8991	18,05	0,76069122

x in °A, E in eV



Wie zu sehen, führt dieser Ansatz im Bereich 2,0 bis 3,0°A zwar zu einer „schönen“ Wölbung des Verlaufs der Gesamtenergie aber auch zu einer unakzeptablen Abweichung von den Ablesewerten der Gesamtenergie. Zudem ist festzuhalten, dass ab $x > rd. 2,8^\circ A$ die Gesamtenergie sogar leicht rückläufig ist, was nicht beobachtet wird und daher nicht sein kann. Der Ablesewert 18,05 eV an der Stelle $x = x_{\text{ende}} = 3,6^\circ A$ wird mit 17,90 eV aus den vg. Gründen (s. Seite 49) nicht ganz erreicht. Aufgrund dieses Ergebnisses steht fest, dass $f'_{K2}(x = x_{\text{max}}) = 0$ nicht angesetzt werden kann. Es bleibt daher nichts anderes übrig, als nach der richtigen Ableitungsbedingung für $f'_{K2}(x = x_{\text{max}})$ zu suchen. **Wie sieht diese aus?**

Wie der vg. Verlauf der Gesamtenergie zeigt, nähern sich unsere Ansätze immer weiter an die Ablesewerte an. Wir können daher mit Hilfe des letzten Ansatzes versuchen, Rückschlüsse auf die noch unbekannte Struktur von $f'_{K2}(x = x_{\text{max}})$ ziehen. Dazu setzen wir $-V = f'(x = x_{\text{ende}}) = f'_e = \frac{1-W}{m}$

in die vg. Ausdrücke für die Parameter d, c, b und a ein und erhalten $d = 3W - 2$,

$$c = 7 \cdot \frac{1-W}{m} = 7 \cdot f'_e, \quad b = -\frac{5}{m} \cdot f'_e \quad \text{und} \quad a = \frac{1}{m^2} \cdot f'_e \quad \text{also insgesamt}$$

$$f_{K2}(x) = \frac{x^3}{x_{\text{max}}^2} \cdot f'_e - \frac{5x^2}{x_{\text{max}}} \cdot f'_e + 7x \cdot f'_e + (3W - 2). \quad \text{Wir suchen hiervon die 1. Ableitung:}$$

$$f'_{K2}(x) = \frac{3x^2}{x_{\text{max}}^2} \cdot f'_e - \frac{10x}{x_{\text{max}}} \cdot f'_e + 7 \cdot f'_e. \quad \text{Damit existieren nur noch Ableitungen und zwar}$$

$f'_{K2}(x)$ und $f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})$. **Dies ist der gesuchte Hinweis: Es zeigt sich, dass zwischen diesen beiden Ableitungen ein direkter Zusammenhang besteht.**

Wir schreiben daher $\frac{f'_{K2}(x)}{f'_e} = \frac{3x^2}{x_{\text{max}}^2} - \frac{10x}{x_{\text{max}}} + 7$ und erhalten für $x = x_{\text{max}}$:

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_e} = \frac{3x_{\max}^2}{x_{\max}^2} - \frac{10x_{\max}}{x_{\max}} + 7 = 3 - 10 + 7 = 0.$$

Offenbar liefert das Verhältnis der beiden Ableitung gerade die gesuchte Struktur (hier an der Stelle $x=x_{\max}$ den Wert null, weil wir ja null angesetzt haben. Würde aber ein anderer Wert als null angesetzt, so würde sich eben dieser andere Wert als Verhältniszahl ergeben). **Damit haben wir die gesuchte Struktur gefunden.**

Wir setzen die Regressionswerte des Polynoms ein und erhalten

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})} = \frac{-0,057608}{-0,130188} = +0,442499.$$

Diesem Gradientenverhältnis ordnen wir in Ermangelung anderer Ursachen als physikalische Ursache die ab $x > x_{\max}$ im Vergleich zum Grundbereich auftretende Richtungsänderung des Laufwegs der Protonen zu. Nach unseren bisherigen Berechnungen gelten im Grundbereich folgende Laufweg-Gradienten:

$$\text{An der Stelle } \nu_B=90^\circ: \frac{Y_0}{\frac{1}{2}x_0} = \frac{\sqrt{x_0^2 - \left(\frac{1}{2}x_0\right)^2}}{\frac{1}{2}x_0} = \sqrt{3} = 1,7320508$$

und für den Teilbereich $\nu_B=90^\circ$ bis $\nu_B=180^\circ$

$$\frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}(x_{\max} - x_0)} = \frac{\sqrt{x_0^2 - \left(\frac{1}{2}x_{\max}\right)^2}}{\frac{1}{2}(x_{\max} - x_0)} = \frac{0,6877708}{\frac{1}{2} \cdot (1,8083 - 1,136)} = 2,04608951.$$

Weitere Angaben enthält die ng. Wertetabelle (s. Seite 61). Dieser Unterschied der Neigung der beiden Gradienten ist gering, so dass er auf ng. Lauflinienbild kaum zu erkennen ist.

Der Neigungs-Unterschied ist vorhanden und beträgt $\frac{1,7320508}{2,04608951} = 0,84655176$. Dieser Wert ent-

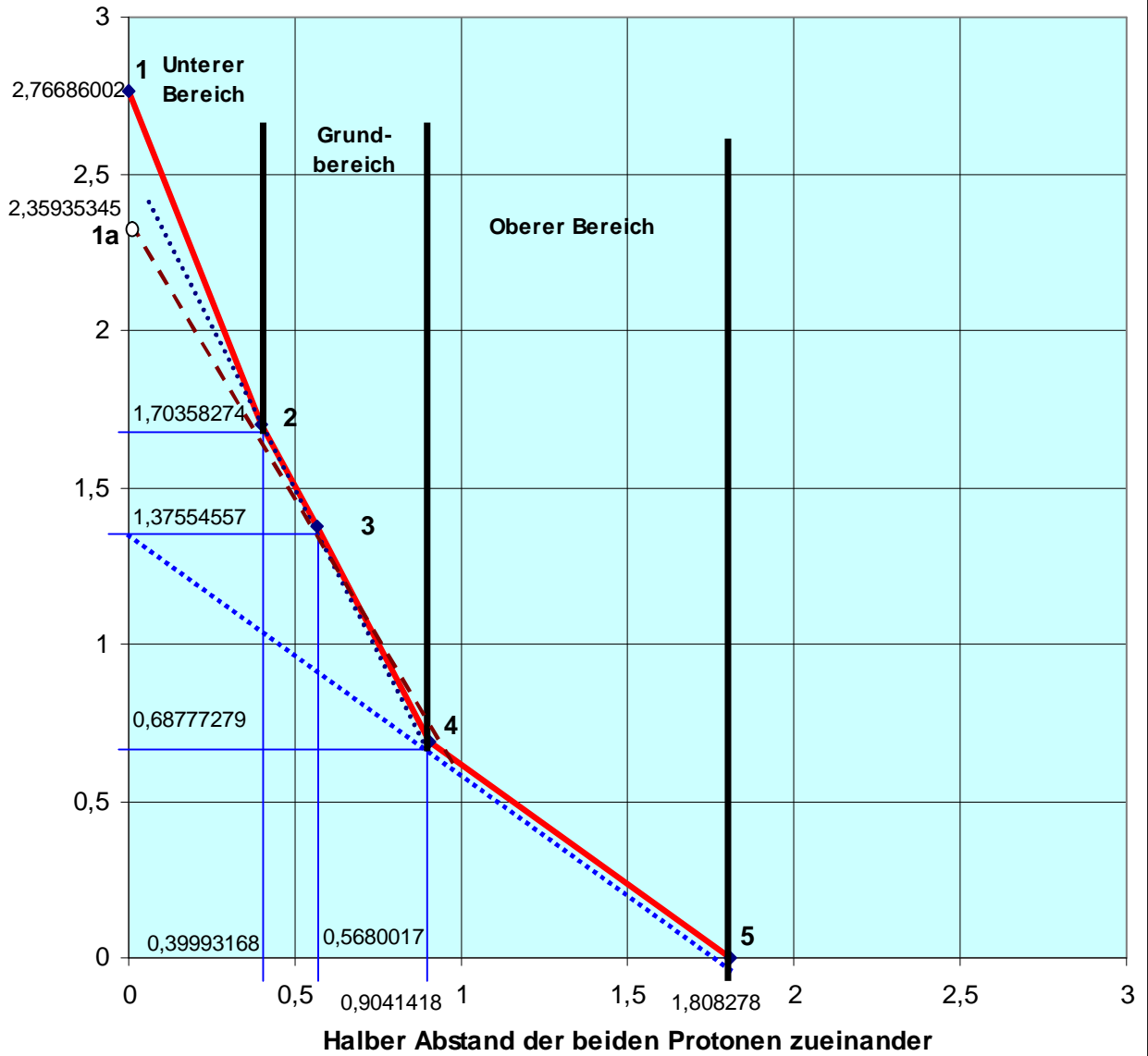
spricht mit einer Abweichung von nur 0,24% dem Ausdruck $j^{5/2} = 0,8444888337$. Der Neigungs-Unterschied wäre null, wenn Y_{\max} um 15,35% kleiner wäre. Allerdings kann eine solch enorme Korrektur nicht auf Ungenauigkeiten der abgelesenen Zahlenpaare x -Abstand und zugehörige Gesamtenergie zurückgeführt werden. **Damit ist klar, dass vg. Neigungs-Unterschied der Gradienten im Grundbereich existiert.**

Die vorherrschenden Verhältnisse sind dem folgenden Lauflinienbild zu entnehmen.

Maßstäbliches Lauflinienbild eines Protons

Y in °A

Jeder Bereich zwischen den Punkten hat einen eigenen Gradienten.



Zweites Proton läuft spiegelbildlich.

—◆— Lauflinie

$\frac{1}{2} \cdot x$ in °A

Wertetabelle zum Lauflinienbild

Punkt	$\frac{1}{2} \cdot x$	Y(x)
1	0	2,76686002
2	0,39993168	1,70358274
3	0,56800174	1,37554557
4	0,90414187	0,68777279
5	1,80828374	0
1a	0	2,35935345
Grundgrößen in °A	x_{\min}	0,79986336
	x_0	1,13600349
	x_{\max}	1,80828374
	x_{ende}	3,61656748
	Y_{\min}	1,06327728
	Y_0	0,98380788
	Y_{\max}	0,68777279
	Y_{ende}	1,37554557
	r_B	1,39131445
	r_0	1,13600349
Gradienten	1-2:	-2,65864729
	1a-3:	-1,73205081
	2-3:	-1,9517882
	3-4:	-2,04608951
	4-5:	-0,76069122
$\frac{\Delta_B \text{ in } ^\circ}{0-90}$		
$\frac{\Delta_B \text{ in } ^\circ}{90-180}$		

Es stellt sich nun die Frage, auf welchen der beiden Gradienten des Grundbereichs Bezug zu nehmen ist.

$$\text{Hierzu setzen wir an: } \frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})} = \left(\frac{Y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} x_{\text{ende}}} \cdot \frac{1}{j^{5/2}} \right) \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} (x_{\max} - x_0)} \cdot \frac{1}{Y_{\max}}$$

Aus der Molekülgeometrie ergibt sich $Y_{\text{ende}}^2 + \left(\frac{1}{2} x_{\text{ende}}\right)^2 = (2x_0)^2$, wobei $x_{\text{ende}} \cong 2 \cdot x_{\max}$ und damit $Y_{\text{ende}}^2 + x_{\max}^2 = 4x_0^2$ bzw. $Y_{\text{ende}}^2 = 4x_0^2 - x_{\max}^2 = 1,375542^\circ A = 2 \cdot Y_{\max}$. Dies kann man auch sofort aus dem Lauflinienbild entnehmen, denn wir haben ja $x_{\text{ende}} \cong 2 \cdot x_{\max}$ angesetzt.

$$\text{Damit gilt: } \frac{Y_{\text{ende}}}{\frac{1}{2} x_{\text{ende}}} = \frac{2 \cdot Y_{\max}}{\frac{1}{2} \cdot 2 \cdot x_{\max}} = \frac{2 \cdot Y_{\max}}{x_{\max}} = \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2} x_{\max}}$$

Der in der runden Klammer in obiger Formel enthaltene Faktor $\frac{1}{j^{5/2}}$ ist uns im Verlauf dieser Ausarbeitung schon des Öfteren begegnet, ja er durchzieht sozusagen das ganze Molekülgeschehen. **Er resultiert jedoch nicht aus der Molekülgeometrie.** Wir setzen diesen Faktor hier an und erhalten:

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

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})} = \frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(1 - \frac{x_0}{x_{\max}}\right) = 0,440032.$$

Dieser Ansatz ist unmittelbar einsichtig, soweit Bezug auf das Lauflinienbild genommen wurde. Der Faktor $1/\varphi^{5/2}$ erklärt sich wohlmöglich durch eine Beeinflussung bedingt durch die Annäherung an die Molekülgrenze, die dazu führt, dass Y_{\max} entsprechend erhöht wirksam ist. Gegenüber dem Polynomwert von **0,442499** beträgt die Abweichung nur 0,56% und hat damit keinen nennenswerten Einfluss mehr auf den Verlauf der Gesamtenergie.

Bei praktisch gleicher Rechengenauigkeit kann auch folgender Ansatz gewählt werden:

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})} = \frac{Y_{\max}}{\frac{1}{2}x_{\max}} \cdot \frac{1}{\frac{1}{2}x_0} = \frac{Y_{\max}}{Y_0} \cdot \frac{x_0}{x_{\max}}.$$

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{\text{ende}})} = \frac{Y_{\max}}{Y_0} \cdot \frac{x_0}{x_{\max}} = 0,439186$$

Damit ist die im oberen Bereich vorherrschende Änderung der Richtung des Laufwegs der beiden Protonen (s. vg. Bild Laufweg der Protonen) als physikalische Ursache einer dreifachen Beeinflussung der Gesamtenergie identifiziert. Dagegen repräsentiert Gl.1.) den (mathematischen) Ansatz zur Erzielung des beobachteten stetigen Verlaufs der Gesamtenergie. Wir verwenden als Gradientenverhältnis aber

nicht den Ausdruck $\left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{4}{9} = 0,444444$, obwohl sich dadurch augenscheinlich eine noch bessere

Annäherung an die Ablesewerte ergäbe, weil mit diesem Ansatz eine physikalische Begründung nicht verbunden ist.

Damit ergibt sich $f'_{K2}(x = x_{\max}) = -0,440032 \cdot 0,132339 = -0,058233$. Die Abweichung vom Polynomwert **-0,057608** beträgt 1,09%. Wir halten daher als Gl.4.) folgendes Ergebnis fest:

$$4.) \dots f'_{K2}(x = x_{\max}) = - \left[\frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(1 - \frac{x_0}{x_{\max}}\right) \right] \cdot f'_{K2}(x = x_{\text{ende}}) = - \left[\frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(1 - \frac{x_0}{x_{\max}}\right) \right] \cdot -V = (U) \cdot V = U \cdot V$$

Damit sind wir in der Lage, auch für den oberen Bereich die endgültige Struktur des Bereichsfaktors $f_{K2}(x)$ anzugeben. Wieder verwenden wir den Gauß'schen Algorithmus.

Ermittlung f_{K2} berechnet endgültig mit Hilfe des Gauß'scher Algorithmus

1.)... $f(x = m) = 1$; 2.)... $f(x = 2m) = W$; 3.)... $f'(x = m) = U \cdot V$; 4.)... $f'(x = 2m) = V$

Hierbei ist $m=x_{\max}$ und $2m=x_{\text{ende}}$; $V=(W-1)/m=-f'_{K2}(x=x_{\text{ende}})$ und $W=Y_{\max}/^{1/2}x_{\max}$.

I... $am^3 + bm^2 + cm + d = 1$

II... $8am^3 + 4bm^2 + 2cm + d = W$

III... $3am^2 + 2bm + c + 0 = U \cdot V$

IV... $12am^2 + 4bm + c + 0 = V$

Diagonalisieren jeder Zeile; Faktoren a, b, c und d „1“ gesetzt; II=II/8; IV=IV/4;

$$\begin{array}{cccc|c} m^3 & m^2 & m & 1 & +1 \\ m^3 & \frac{m^2}{2} & \frac{m}{4} & \frac{1}{8} & +\frac{W}{8} \\ 3m^2 & 2m & 1 & 0 & UV \\ 3m^2 & m & \frac{1}{4} & 0 & +\frac{V}{4} \end{array}$$

I/m³; I-II; III/3m²; III-IV

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & \frac{1}{2}m^2 & \frac{3}{4}m & \frac{7}{8} & 1-\frac{W}{8} \\ 1 & \frac{2}{3m} & \frac{1}{3m^2} & 0 & \frac{UV}{3m^2} \\ 0 & m & \frac{3}{4} & 0 & -\frac{V}{4}+UV \end{array}$$

II•2/m²; I-III; IV/m

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{2m} & \frac{7}{4m^2} & \frac{2}{m^2}-\frac{W}{4m^2} \\ 0 & \frac{1}{3m} & \frac{2}{3m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3}-\frac{UV}{3m^2} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m}+\frac{UV}{m} \end{array}$$

II<-->IV vertauschen

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m}+\frac{UV}{m} \\ 0 & \frac{1}{3m} & \frac{2}{3m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3}-\frac{UV}{3m^2} \\ 0 & 1 & \frac{3}{2m} & \frac{7}{4m^2} & \frac{2}{m^2}-\frac{W}{4m^2} \end{array}$$

$$\text{III-II}/3m; \text{IV-II}; \text{mit II}/3m=0 \quad \frac{1}{3m} \quad \frac{3}{4m} \cdot \frac{1}{3m} = \frac{3}{12m^2} \quad \frac{-V}{4m} \cdot \frac{1}{3m} + \frac{UV}{m} \cdot \frac{1}{3m} = -\frac{V}{12m^2} + \frac{UV}{3m^2}$$

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} + \frac{UV}{m} \\ 0 & 0 & \frac{5}{12m^2} & \frac{1}{m^3} & +\frac{1}{m^3} + \frac{V}{12m^2} - \frac{2UV}{3m^2} \\ 0 & 0 & \frac{3}{4m} & \frac{7}{4m^2} & \frac{2}{m^2} - \frac{W}{4m^2} + \frac{V}{4m} - \frac{UV}{m} \end{array}$$

$$\text{III} \cdot 12m^2/5; \text{IV} \cdot 4m/3$$

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} + \frac{UV}{m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12}{5m} & +\frac{12}{5m} + \frac{V}{5} - \frac{24UV}{3m} = \frac{12+mV-8mUV}{3m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{7}{3m} & \frac{8}{3m} - \frac{W}{3m} + \frac{V}{3} - \frac{4mUV}{3m} = \frac{8-W+mV-4mUV}{3m} \end{array}$$

$$\text{IV-III}$$

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} + \frac{UV}{m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12}{5m} & +\frac{12+mV-8mUV}{5m} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{15m} & \frac{40-5W+5mV-20mUV-36-3mV+24mUV}{15m} = \frac{4-5W+2mV+4mUV}{15m} \end{array}$$

$$\text{IV} \cdot (-15m)$$

$$\begin{array}{cccc|c} 1 & \frac{1}{m} & \frac{1}{m^2} & \frac{1}{m^3} & \frac{1}{m^3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{4m} & 0 & -\frac{V}{4m} + \frac{UV}{m} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{12}{5m} & +\frac{12+mV-8mUV}{5m} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4+5W-2m(V)-4mU(V) = -4+5W-2m \cdot \left(\frac{W-1}{m}\right) - 4mU \cdot \left(\frac{W-1}{m}\right) \end{array}$$

Somit ist

$$d = -4 + 5W - 2W + 2 - 4UW + 4U = (3W - 2) - 4U(W - 1)$$

$d = 3W - 2 + 4U(1 - W)$. Mit $U=0$ ergibt sich der gleiche Ausdruck wie bisher.

$$c = \frac{12}{5m} \cdot 1 + \frac{1}{5}(V) - \frac{8mU(V)}{5m} - \frac{12}{5m} \cdot (3W - 2 - 4U(W - 1))$$

$$c = -\frac{12}{5m} \cdot (3W - 2 - 1) + \frac{1}{5} \cdot \left(\frac{W-1}{m}\right) - \frac{8mU}{5m} \cdot \left(\frac{W-1}{m}\right) - \frac{12}{5m} \cdot -4U(W - 1)$$

$$c = -\frac{36}{5m} \cdot (W - 1) + \frac{1}{5m} \cdot (W - 1) + \left(\frac{-8U + 48U}{5m}\right) \cdot (W - 1)$$

$$c = -\frac{35}{5m} \cdot (W-1) + \frac{40U}{5m} \cdot (W-1) = +\frac{7}{m} \cdot (1-W) - \frac{8U}{m} \cdot (1-W)$$

$$c = \left(\frac{7}{m} - \frac{8U}{m} \right) \cdot (1-W). \text{ Mit } U=0 \text{ ergibt sich auch hier der gleiche Ausdruck wie bisher.}$$

$$b = -\frac{(V)}{4m} + \frac{U(V)}{m} - \frac{3}{4m} \cdot \left(\frac{7}{m} - \frac{8U}{m} \right) \cdot (1-W) = -\frac{(W-1)}{4m^2} + \frac{U}{m} \cdot \frac{(W-1)}{m} - \frac{21}{4m^2} (1-W) + \frac{24U}{4m^2} (1-W)$$

$$b = -\frac{5}{m^2} \cdot (1-W) - \frac{U}{m^2} (1-W) + \frac{6U}{m^2} (1-W)$$

$$b = \left(-\frac{5}{m^2} + \frac{5U}{m^2} \right) \cdot (1-W). \text{ Mit } U=0 \text{ ergibt sich wiederum der gleiche Ausdruck wie bisher.}$$

$$a = \frac{1}{m^3} - \frac{1}{m^3} \cdot (3W-2+4U(1-W)) - \frac{1}{m^2} \cdot \left(\frac{7}{m} - \frac{8U}{m} \right) \cdot (1-W) - \frac{1}{m} \cdot \left(-\frac{5}{m^2} + \frac{5U}{m^2} \right) \cdot (1-W)$$

$$a = \frac{1}{m^3} - \frac{1}{m^3} \cdot (3W-2) - \frac{1}{m^2} \cdot \frac{7}{m} \cdot (1-W) + \frac{1}{m} \cdot \frac{5}{m^2} \cdot (1-W) - \frac{1}{m^3} 4U(1-W) + \frac{1}{m^3} 8U(1-W) - \frac{1}{m^3} 5U(1-W)$$

$$a = -\frac{1}{m^3} \cdot (3W-2-1) - \frac{7}{m^3} (1-W) + \frac{5}{m^3} (1-W) - \frac{4U}{m^3} (1-W) + \frac{8U}{m^3} (1-W) - \frac{5U}{m^3} (1-W)$$

$$a = +\frac{3}{m^3} (1-W) - \frac{7}{m^3} (1-W) + \frac{5}{m^3} (1-W) - \frac{U}{m^3} (1-W) = +\frac{1}{m^3} (1-W) - \frac{U}{m^3} (1-W)$$

$$a = \left(\frac{1}{m^3} - \frac{U}{m^3} \right) \cdot (1-W). \text{ Mit } U=0 \text{ ergibt sich für den Parameter a der gleiche Ausdruck wie bisher.}$$

Probe:

Wir setzen auch hier $-V = f'(x = x_{ende}) = f'_e = \frac{1-W}{m}$ in die vgl. Ausdrücke für die Parameter d, c,

$$b \text{ und } a \text{ ein und erhalten } d = 3W - 2 + 4U(1-W), c = (7-8U) \cdot \frac{1-W}{m} = (7-8U) \cdot f'_e,$$

$$b = \left(-\frac{5}{m} + \frac{5U}{m} \right) \cdot f'_e \text{ und } a = \left(\frac{1}{m^2} - \frac{U}{m^2} \right) \cdot f'_e \text{ also insgesamt}$$

$$(18)... f_{K2}(x) = (1-U) \frac{x^3}{x_{\max}} \cdot f'_e + (-5+5U) \frac{x^2}{x_{\max}} \cdot f'_e + (7-8U)x \cdot f'_e + (3W-2+4U(1-W)).$$

Hieraus die 1. Ableitung

$$f'_{K2}(x) = 3 \cdot (1-U) \frac{x^2}{x_{\max}} \cdot f'_e + 2 \cdot (-5+5U) \frac{x}{x_{\max}} \cdot f'_e + (7-8U) \cdot f'_e \text{ und das Gradientenverhältnis ergibt sich an der Stelle } x=x_{\max} \text{ zu}$$

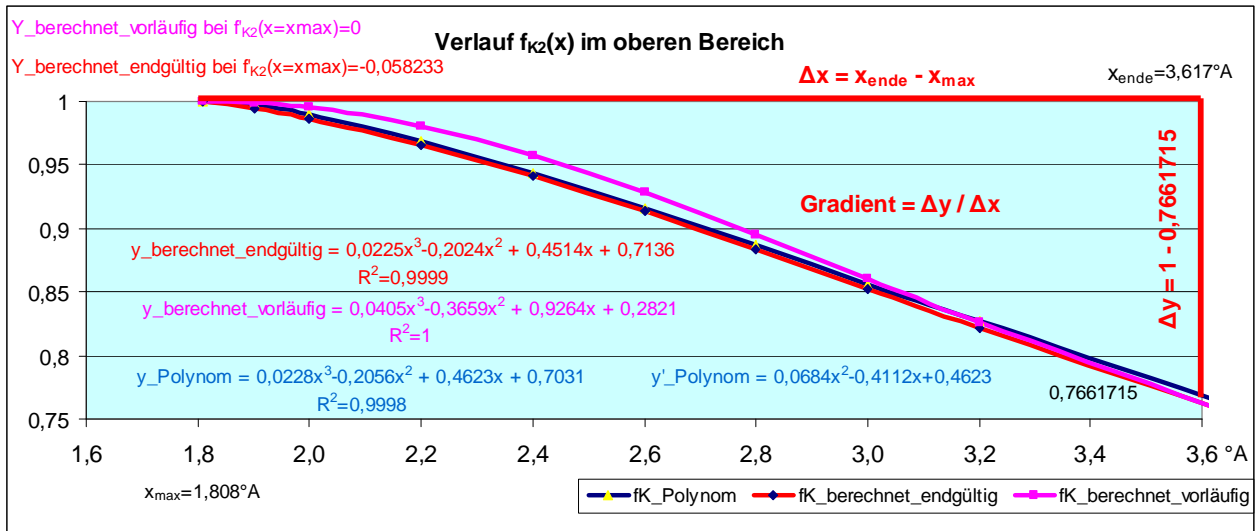
nis ergibt sich an der Stelle $x=x_{\max}$ zu

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{ende})} = 3 \cdot (1-U) + 2 \cdot (-5+5U) + (7-8U) = 3 - 3U - 10 + 10U + 7 - 8U = -U$$

$$\frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{f'_{K2}(x = x_{ende})} = -U \text{ bzw. } \frac{f'_{K2}(x = x_{\max})}{-V} = -U \text{ bzw.}$$

$$f'_{K2}(x = x_{\max}) = +UV, \text{ womit ist Ausgangs Gl. III wieder erreicht ist.}$$

Der endgültige Verlauf des Bereichsfaktors $f_{K2}(x)$ ist ng. Diagramm zu entnehmen.



Der Verlauf der mit $f'_{K2}(x=x_{\text{max}})=U \cdot V$ endgültig berechneten Gesamtenergie zeigt die beste Annäherung an die Ablesewerte.

Wertetabelle für $f_{K_berechnet_endgültig}$ mit $f'_{K2}(x=x_{\text{max}})=U \cdot V$

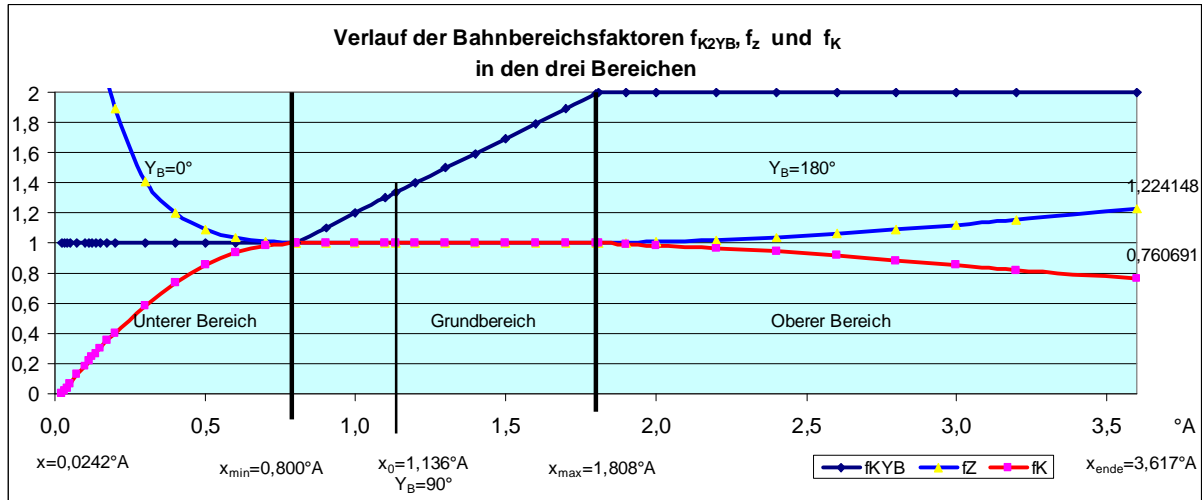
x	Eges II		$f_{K_berechnet}$
	berechnet mit $f_{K_berechnet}$	abgelesener Wert	
1,808278188	16,3942	16,40	1
1,9	16,5782	16,65	0,99398659
2	16,7652	16,85	0,9859822
2,2	17,0916	17,15	0,96597368
2,4	17,3504	17,40	0,94153873
2,6	17,5420	17,60	0,9137652
2,8	17,6725	17,75	0,88374094
3	17,7534	17,85	0,85255378
3,2	17,8016	17,95	0,82129159
3,616556375	17,8991	18,05	0,76069122

x in °A, E in eV

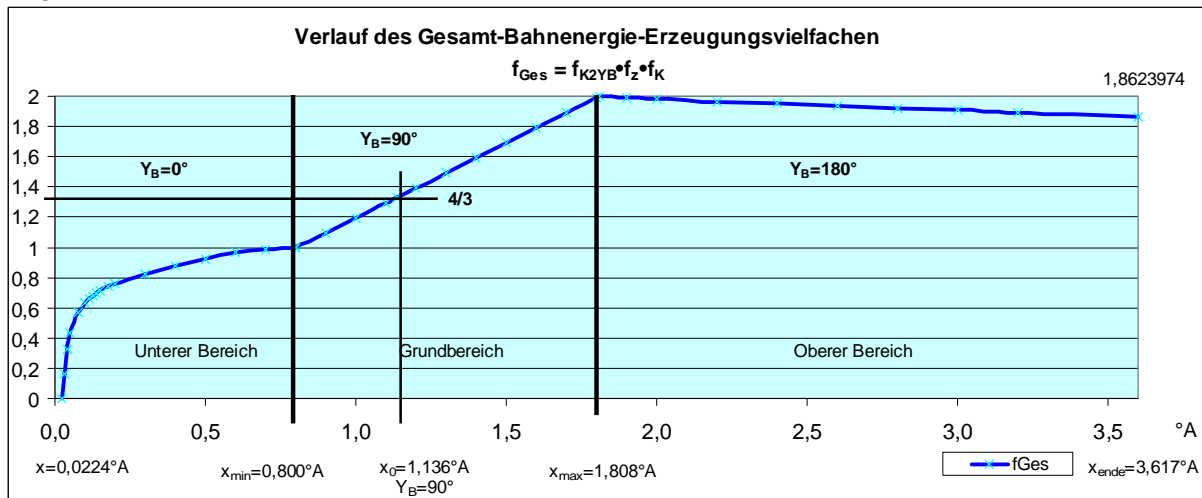
f) Ergebnisse:

Es konnte gezeigt werden, dass die Bahnenergieerzeugung Orbitalfaktor, Abstandsfaktor und Bereichsfaktor modifiziert ist gemäß (19)... $\frac{9}{j^{7/2}} \cdot (f_{KgB} \cdot f_Z \cdot f_K)$.

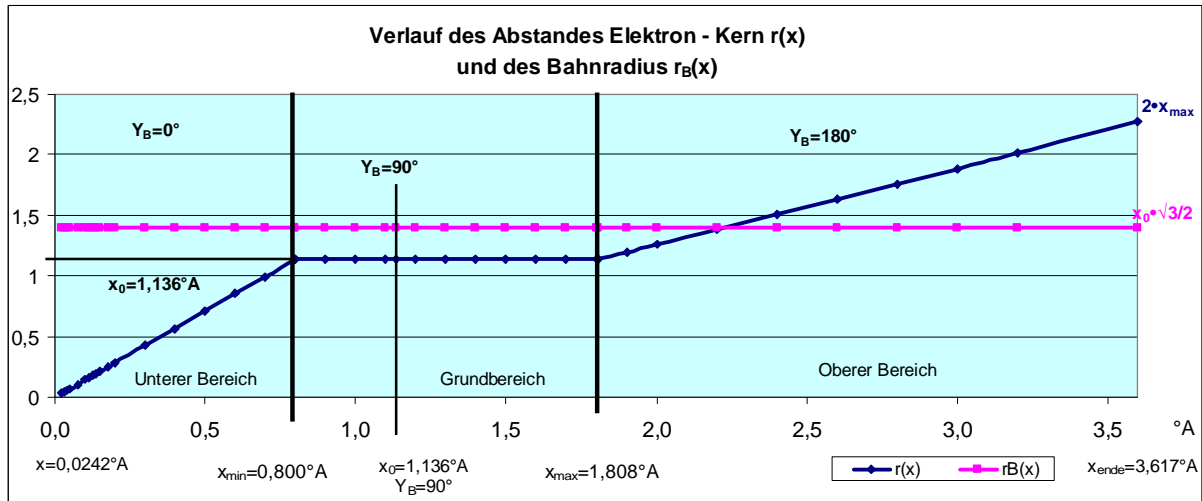
Die für die Bereichsfaktoren geltenden Parameter konnten eindeutig identifiziert werden und damit auch deren Struktur und Natur. Jeder einzelne Faktor hat eine andere Ursache. Die einzelnen Verläufe sind im Diagramm zu entnehmen.



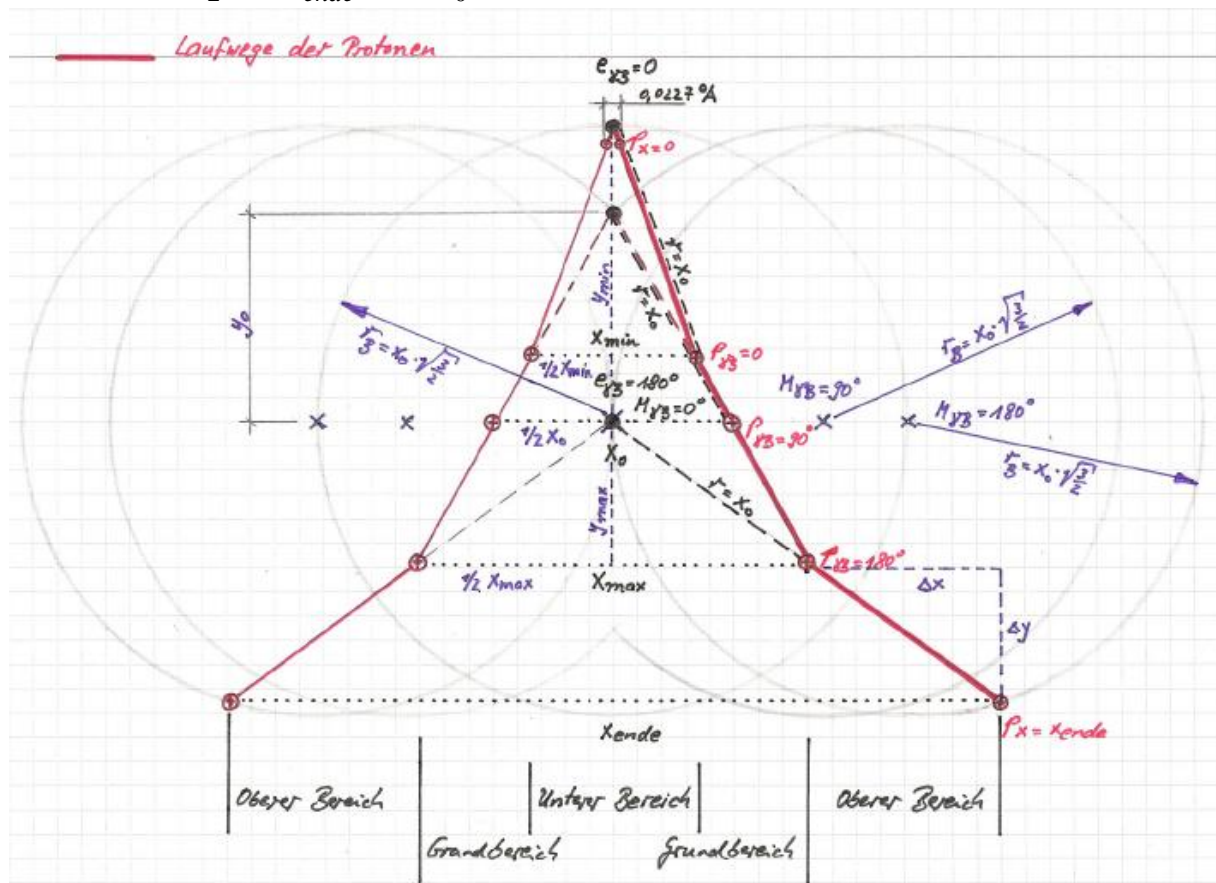
Erst mit Einführung des Bereichsfaktors können beliebige Werte für die Gesamtenergie exakt gestellt werden. Legt man anstelle beliebiger Werte die abgelesenen Werte zugrunde, zeigt sich schließlich die gesetzmäßige Ordnung. Dazu wird der Bereichsfaktor im 1. Schritt explizit hergeleitet (fK_explicit). In dieser Gestalt ist er aber nur eine mathematische Korrekturgröße. Im 2. Schritt wird das wertgleiche Polynom 2. oder 3. Grades als Regressionskurve ermittelt (fK_quadratisch oder fK_kubisch). Die Polynome liefern praktisch identische Werte wie fK_explicit. Es handelt sich also weiterhin nur um eine mathematische Korrekturgröße. Um die gesetzmäßige Ordnung des Polynomverlaufs zu ergründen, werden im 3. Schritt Parameter eingeführt. Das so „physikalisch“ begründete Polynom (fK_berechnet) sollte dann die Messwerte der Gesamtenergie exakt treffen (nicht notwendigerweise die Ablesewerte). Der Verlauf des Gesamt-Bahnenergie-Erzeugungsvielfachen ($f_{KgB} \cdot f_Z \cdot f_K$) ist in dem Diagramm dargestellt.



Die Bahnenergie an der Stelle $x=x_0$ beträgt $E_0=15,0$ eV. An dieser Stelle heben sich die Ladungsenergie aus Kern-Kern-Abstoßung und Elektron-Kern-Anziehung gegenseitig auf, so dass allein die Bahnenergie die Gesamtenergie darstellt. An dieser Stelle beträgt das Bahnenergie-Erzeugungsvielfache $\frac{4}{3} = \frac{360}{360-90} \cdot 1 \cdot 1$.



Der Bahnradius ist konstant. Der Abstand Kern – Elektron ist vom x -Abstand der Kerne abhängig. Aus dem ng. Lauflinienbild ist zu erkennen, dass im oberen Bereich der Abstand Elektron-Kern größer ist als der Bahnradius ($r_2 > r_B$). Wenn jedoch der Abstand so groß wird, dass die Protonen der Orbitalrand erreichen ($r_2(x = x_{ende}) \cong 2 \cdot x_0$), reißt das Molekül auseinander.



Das vg. Lauflinienbild bietet einen Blick in das Innere des Moleküls. Die Lage der Mittelpunkte des Bahnradius und der Protonen fallen nicht zusammen. Um zu erkennen, dass sich der Laufweg beim Übergang in einen anderen Bereich verändert, wurden die drei Molekül-Grenzzustandsbilder übereinandergelegt.

Es konnte gezeigt werden, dass die berechneten Ladungsenergien aus Kern-Kern-Abstoßung und Elektron-Kern-Anziehung) eben auf diese Molekül-Geometrie bezogen sind.

Modifizieren des Operators der Schrödingergleichung

Es wurde gezeigt, dass sich die untere bzw. obere Grenze des Grundbereichs durch den Orbitalwinkel ($\gamma_B=0^\circ$ bzw. 180°) bestimmen. Dies führt in Konsequenz dazu, auch der Elektron-Kern-Anziehungsenergie eine x-Komponente zuzuordnen ist, gemäß

$$(20)... \underline{E_{Elektron_Kern}(x) = \frac{1}{2} \cdot 2E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{r(x)^2} \cdot x}. \text{ Diese Zuordnung der x-Komponente ist neu.}$$

Hierbei ist $r(x)$ der x-abhängige Abstand zwischen Elektron und Kern.

Die x-Abhängigkeit der Kern-Kern-Abstoßungsenergie gemäß

$$(21)... \underline{E_{Kern_Kern}(x) = \frac{1}{2} \cdot 2E_{H1} \cdot r_{H1} \cdot \frac{1}{x}} \text{ ist bekannt. Sie ergibt sich aus dem Abstandsquadrat.}$$

Eine weitere Neuerung ist das Auftreten nur hälftiger Ladungsenergie (s. Gl.20 und Gl.21).

Es wurde die x-Abhängigkeit des Abstands Elektron-Kern $r(x)$ gezeigt gemäß $\underline{r_0(x) = x_0}$ sowie

$$(8)... \underline{r_1(x) = \frac{x_0}{x_{\min}} \cdot x} \quad (15)... \underline{r_2(x) = \frac{x_0}{x_{\max}} \cdot x}. \text{ Sie ergibt sich unmittelbar aus dem Lauflinienbild.}$$

Nur mit den hier getroffenen Ansätzen für $r(x)$ bleiben in der expliziten Herleitung von f_K die Rechenausdrücke identisch bis auf die Indizes von x (min, max).

Die Bereichsfaktoren lauten:

$$(13)... \underline{f_{K1_berechnet} = -\frac{Y_{\min}}{x_{\min}^2} \cdot x^2 + \frac{Y_{\min}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\min}} \cdot x + (1 - Y_{\min})} \text{ mit}$$

$$(13a)... \underline{Y_{\min} = \sqrt{x_0^2 - \frac{1}{4} \cdot x_{\min}^2}}$$

$$(18)... \underline{f_{K2}(x) = (1-U) \frac{x^3}{x_{\max}^2} \cdot f'_e + (-5+5U) \frac{x^2}{x_{\max}} \cdot f'_e + (7-8U)x \cdot f'_e + (3W-2+4U(1-W))}$$

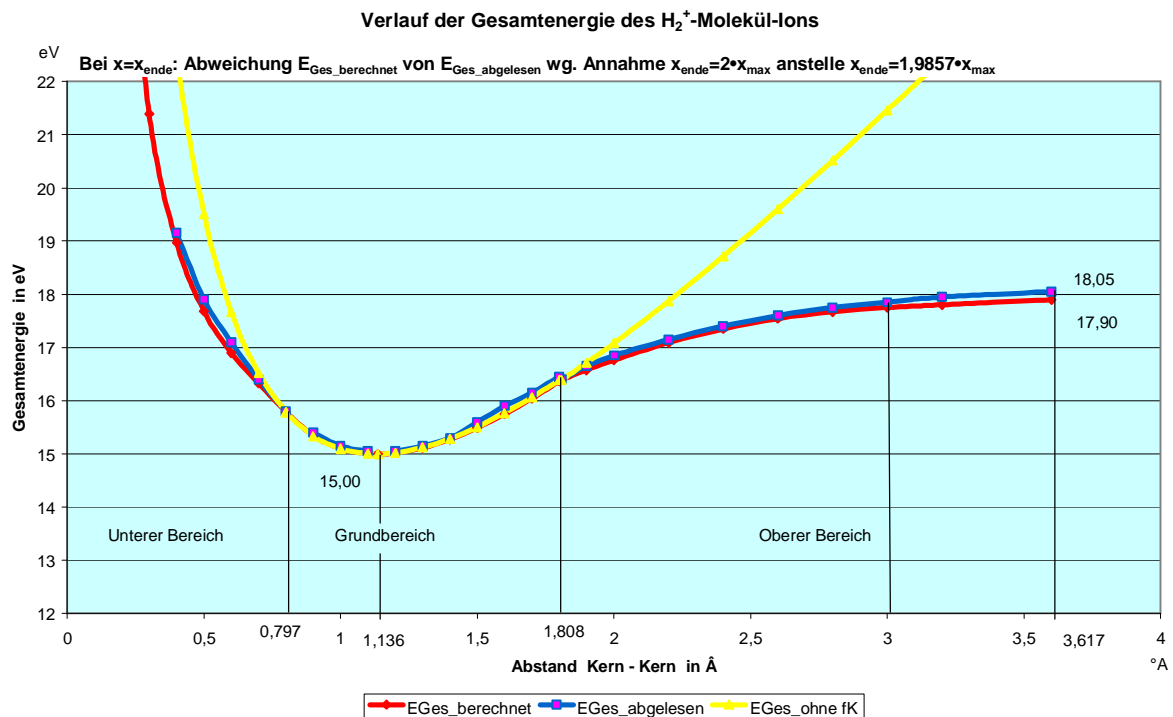
$$\text{Mit } \underline{U = -\left[\frac{1}{j^{5/2}} \cdot \left(1 - \frac{x_0}{x_{\max}} \right) \right]} \text{ oder } \underline{U = \frac{Y_{\max}}{Y_0} \cdot \frac{x_0}{x_{\max}}}; \quad \underline{f'_e = \frac{W}{(x_{\text{ende}} - x_{\max})}} \text{ und } \underline{W = \frac{1 - Y_{\max}}{\frac{1}{2} \cdot x_{\max}}}$$

Diese explizit hergeleiteten Ergebnisse sollten herangezogen werden, um den Operator der Schrödingergleichung entsprechend zu modifizieren.

Es wurde gezeigt, dass durch den Bezug auf die Grundgrößen des Wasserstoffatoms (Grundbahn r_{H1} und Gesamtenergie E_{H1}) das Rechnen mit einfachsten Ausdrücken bei unverändert präzisen Werten möglich ist. Damit werden physikalische Strukturen nicht verdeckt. Wie die Ergebnisse zeigen, liegt für alle x-Abstände der beiden Protonen zueinander eine sehr gute Übereinstimmung des berechneten Verlaufs der Gesamtenergie mit den Ablesewerte vor. Dies bedeutet, dass die berechneten Werte physikalisch bzw. phänomenorientiert begründet sind. Die vorliegende Untersuchungsmethode erfasst die elementaren Strukturen über alle Bereiche sowohl qualitativ als auch quantitativ zutreffend.

Am Ende der Ausarbeitung angekommen, erfolgt noch als Anhang eine leicht vergrößerte Bildkopie der Originaldatenquelle und ein Ausblick auf die Anwendbarkeit dieser Untersuchungsmethode auf das Wasserstoffmolekül.

Verlauf der Gesamtenergie für abgelesene und berechnete Werte



Tabellenwerte zum Verlauf der Gesamtenergien

x °Å	Eges_berechnet eV	Eges_gemessen eV
3,61656749		
3,6	17,89905425	18,05
3,2	17,80163472	17,95
3	17,75340537	17,85
2,8	17,67246257	17,75
2,6	17,5419769	17,6
2,4	17,35038235	17,4
2,2	17,09156222	17,15
2	16,76514658	16,85
1,9	16,57816182	16,65
1,80828374	16,39416779	16,4
1,8	16,36629947	16,45
1,7	16,04373809	16,15
1,6	15,75058214	15,9
1,5	15,4927127	15,6
1,4	15,27769117	15,3
1,3	15,11540552	15,15
1,2	15,01903974	15,05
1,13600349	15	
1,1	15,00657195	15,05
1	15,10317158	15,15
0,9	15,3451944	15,4
0,8	15,78717413	
0,79986336	15,787963	15,8
0,7	16,32705159	16,4
0,6	16,89944051	17,1
0,5	17,68154553	17,9
0,4	18,97212666	19,15
0,3	21,39412787	

12. Schlusswort

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

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

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

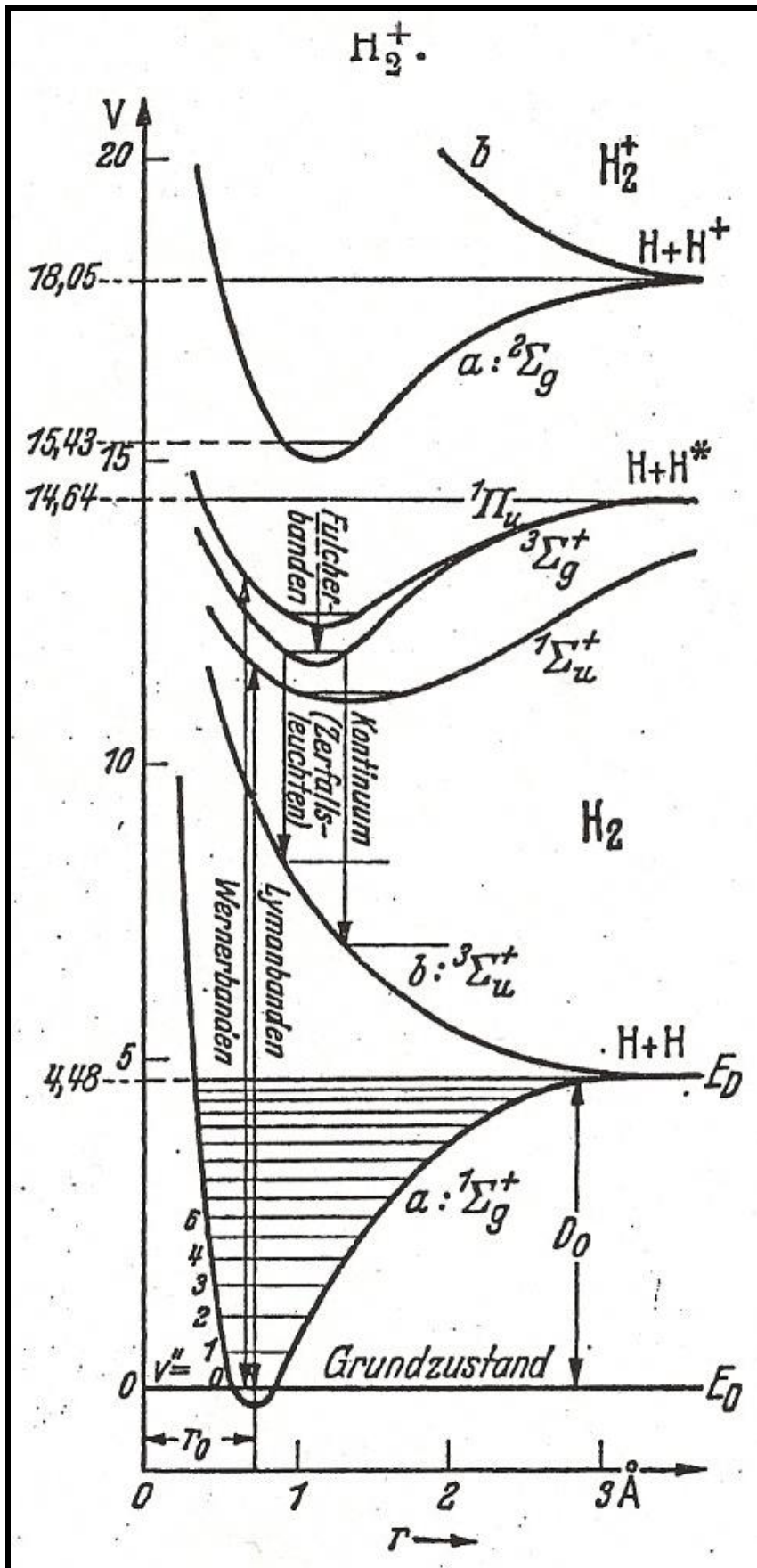
Dieser Ansatz war von Anfang an erfolgreich. Trotz aller Sorgfalt unterlief aber bei der Ermittlung der Ladungsenergie, was ja wohl keine besondere Kunst ist, wegen der Anspannung, was für ein „verbleibender“ Kurvenverlauf sich denn wohl ergeben wird, ein schlichter Rechenfehler. Aufgrund dessen wurde in meinen Untersuchungen nur mit halber Ladungsenergie (aus Kernabstoßung und Kern-Elektron-Anziehung) gerechnet. Als dann die in Bild 2 dargestellten wundervoll einfachen Strukturen (d. h. linearer Verlauf im Grundbereich) erstmals als Diagramm vor mir lag, war die Freude groß und als dann der „Fehler“ bzgl. der Ladungsenergie bemerkt wurde, war das Erstaunen noch größer.

Aus diesen Anfängen wurde dann die hier vorliegende Arbeit systematisch entwickelt. Meines Erachtens ist es gerade die Einfachheit, die für diese Methode spricht. Ich hoffe daher, dass sie viele Nachahmer findet, die nicht verächtlich auf die Einfachheit herabschauen und mit diesem Verfahren weiter in den Elementarbereich vorstoßen wollen. Natürlich zähle ich hierzu auch alle diejenigen, die mit der Schrödinger'schen Wellengleichung vertrauten Umgang haben. Diese möchte ich bitten, zu versuchen, die Wellengleichung für das H_2^+ -Molekül auf Basis dieser meiner Ausarbeitung zu modifizieren.

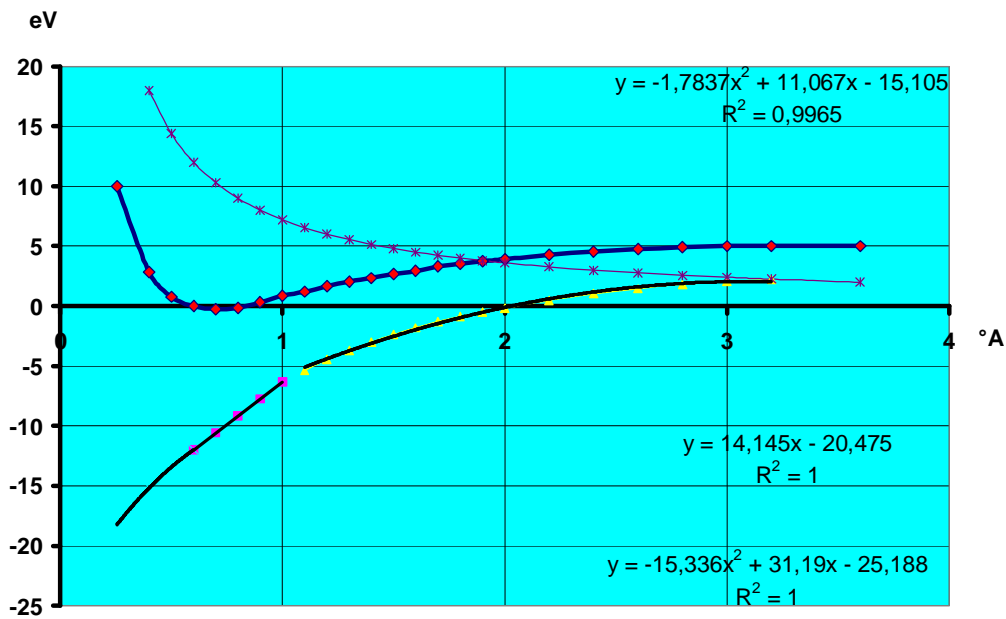
Nun, am Schluss angekommen, möchte ich dem geneigten Leser noch Anteil an meiner Freude nehmen lassen, eine Freude, die allerdings meiner christlichen Überzeugung entspringt. Sie kommt aus der Gewissheit, dass ich mit dieser Arbeit „durch Inspiration von oben“ gewürdigt wurde, das Prinzip der „Anschaulichkeit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

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.



Potenzialverlauf Wasserstoff - Molekül



Wie bei H_2^+ -Molekül existiert auch bei H_2 -Molekül ein Grundbereich mit linearem Verlauf der Gesamtenergie.

Damit lässt sich das hier dargelegte Verfahren auch auf das H_2 -Molekül anwenden. Hierzu muss lediglich die im Rechenverfahren auf Seite 10 angegebene Zeile mit Null für die Energie aus der Elektron-Elektron-Anziehung vorzeichenrichtig mit dem entsprechenden Ausdruck versehen werden (analog zur Abstoßungsenergie der beiden Protonen). Es wird sich dann herausstellen, dass der kleine negative Betrag der Gesamtenergie in der Nulllage des H_2 -Moleküls durch die kleine magnetische Anziehungsenergie der beiden Elektronen verursacht ist.