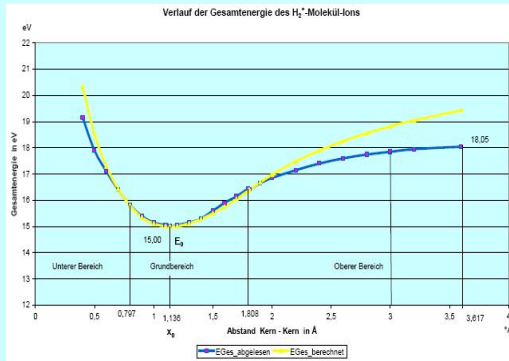


## Elementar-physikalische Struktur Wasserstoff-Molekülion ( $H_2^+$ )

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

#### TEIL 2 Untersuchung des Unteren Bereichs <sup>1)</sup>



- 1) Der Untere Bereich umfasst die  $x$ -Abstände von  $x = 0$  bis  $x = x_{min}$  mit  $x_{min} = x_0 - 1/4 \cdot x_0 / \varphi^{5/2}$ .

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

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

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

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

Teil 2 beschäftigt sich mit dem Unteren Bereich.

## Geometriefaktor ( $f_{z1}$ ) der Bahnenergie

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

$$(6) \dots E_B(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0^2} \cdot x + \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r_1^2} \cdot x + E_0 - \frac{2 \cdot E_{H1} \cdot r_{H1}}{x_0} = \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360 - g_B} \cdot f_{z1}$$

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

Im Unteren Bereich beträgt der Orbitalwinkel konstant  $\gamma_B = 0^\circ$  und das Orbital hat die Gestalt einer einzigen Kugel. Da Gleichheit zu fordern ist, aber  $\gamma_B$  sich nicht mehr ändern kann und zudem die Energien aus Kern-Kern-Abstoßung und Kern-Elektron-Anziehung eindeutig sind, muss sich das Bahnwirkungs-Vielfache ( $z = 9/\varphi^{7/2}$ ) ändern (einzige sinnvolle Möglichkeit). Daher wird auf der rechten Gleichungsseite der Faktor  $f_{z1}$  eingeführt (im Grundbereich ist  $f_{z0} = 1$ ).

So wie z für den gesamten Grundbereich gilt, so auch  $f_{z1}$ . Mit  $r_B^2 = 3/2 \cdot x_0^2$  ( $r_B$  ist invariant gegenüber x) sowie mit Kern-Elektron-Abstand von  $r = r_1(x) = x_0 \cdot x / x_{\min}$  (Herleitung von  $r_1(x)$  aus Lauflinienbild, siehe Backup-Folie 1,  $E_{H1}$  und  $r_{H1}$  siehe Teil 1, Backup-Folie 4) ergibt sich:

$$7 \dots f_{z1}(x) = \left( \frac{4}{3} \right) \cdot \left[ \frac{1}{j^{5/2}} - 1 + \frac{1}{2} \cdot \frac{x}{x_0} + \frac{1}{2} \cdot \frac{x_0 \cdot x}{r_1^2} \right] \cdot j^{5/2}$$

Verlauf von  $f_{z1}(x)$  s. Backup-Folie 2

Der Geometriefaktor  $f_{z1}(x)$  wirkt auf das Bahnwirkungs-Vielfache (z) und damit auf die Bahnenergie-Erzeugung.

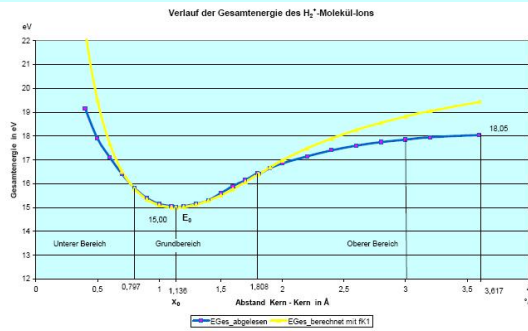
Es wird  $f_{z1}(x)$  über die Formel für den Abstand Kern-Elektron  $r_1(x)$  entscheidend vom Lauflinienbild der Protonen mitbestimmt.

## Vergleich berechnete Gesamtenergie und „Messwerte“

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

$$(8)...E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r_1^2} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360-0} \cdot f_{z1}$$

Gl. (8) ist nur gültig für den Unteren Bereich. Es lässt sich nun der Verlauf der Gesamtenergie  $E_{Ges}(x)$  mit Einbezug von  $f_{z1}$  und berechnen, im Grundbereich ist  $f_{z0}=1$ .



x Å	EGes_berechnet eV
1,80828374	16,39416779
1,8	16,36629947
1,7	16,04373809
1,6	15,75056214
1,5	15,4927127
1,4	15,27769117
1,3	15,11540552
1,2	15,01903974
1,13600349	15
1,1	15,00657195
1	15,10317158
0,9	15,3451944
0,8	15,78717413
0,79986336	15,787963
0,7	16,51482619
0,6	17,67094471
0,5	19,51263187
0,4	22,55406416

**Fazit:**  
Die berechneten Werte weichen auch mit  $f_{z1}$  noch von den „Messwerten“ ab.

Es muss eine weitere Korrektur bei der Bahnenergie angenommen werden.

Genau genommen weichen die Rechenwerte mit Einbezug von  $f_{z1}$  sogar noch etwas stärker von den Messwerten ab, als mit  $f_{z1}=1$ .

Es muss also die Untersuchung weiter geführt und eine weitere Beeinflussung der Bahnenergie angenommen werden.

## Bereichsfaktor ( $f_{K1}$ ) der Bahnenergie

Diese weitere Korrektur erfolgt durch Einführung des **Bereichsfaktors  $f_{K1}$** .  
Damit wird Gl. (8) zu:

$$(9) \dots E_{Ges}(x) = \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{x} - \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}}{r_1^2} \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \frac{9}{j^{7/2}} \cdot \frac{E_{H1} \cdot r_{H1}^2}{r_B^2} \cdot \frac{360}{360-0} \cdot f_{z1} \cdot f_{K1}$$

Es lässt sich nun  $f_{K1}$  für jeden  $x$ -Abstand gerade so wählen, dass die „Messwerte“ von  $E_{Ges}(x)$  exakt eingestellt werden. Damit haben wir an dieser Stelle ein mathematisches Verfahren, um den Verlauf der Gesamtenergie im Unteren Bereich zu berechnen.

**Auch die Herleitung von  $f_{K1}(x)$  basiert auf Laufflinien der Protonen, s. Backup-Folie 3.**

Es ergibt sich:

$$(10) \dots f_{K1}(x) = -\frac{y_{\min}}{x_{\min}^2} \cdot x^2 + \frac{y_{\min}}{\frac{1}{2}x_{\min}} \cdot x + (1 - y_{\min}) \quad \text{mit} \quad y_{\min}^2 = x_0^2 - \frac{1}{4} \cdot x_{\min}^2$$

und  $x_{\min} = x_0 - \frac{1}{4} \cdot \frac{x_0}{j^{5/2}}$

**Gl. (9) und (10) sind nur gültig für den Unteren Bereich. Es lässt sich nun der exakte Verlauf der Gesamtenergie  $E_{Ges}(x)$  mit Einbezug von  $f_{z1}$  und  $f_{K1}$  berechnen.**

Vortrag 28.10.2007 - Martin Bock, Folie 4

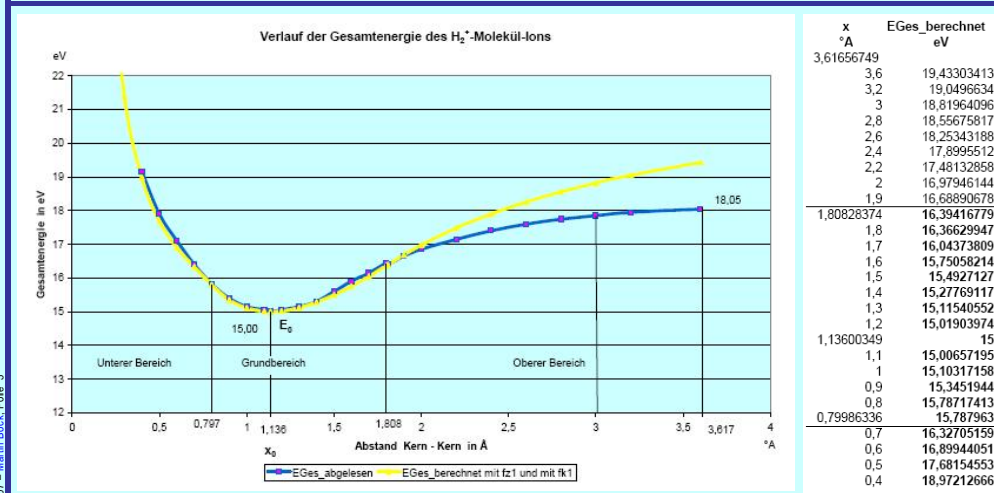
Auch der Geometriefaktor  $f_{K1}(x)$  wirkt auf das Bahnwirkungs Vielfache ( $z$ ) und damit auf die Bahnenergie-Erzeugung.

Auch in der Formel für die Gesamtenergie geht das Laufflinienbild über den Abstand  $r_1(x)$  ein.

Die nach Einbezug von  $f_{z1}(x)$  weiterhin noch erforderliche Angleichung an den Verlauf der „Messwerte“ der Gesamtenergie erfolgt über den Bereichsfaktor  $f_{K1}(x)$ . Hier sind in die Definition des des Bereichsfaktors (s. Backup-Folie 3) ebenfalls Verhältnisse eingegangen, die sich unmittelbar aus dem Laufflinienbild ergeben.

Das Laufflinienbild ist maßgebend für diese beiden Faktoren.

## Vergleich berechnete Gesamtenergie und „Messwerte“



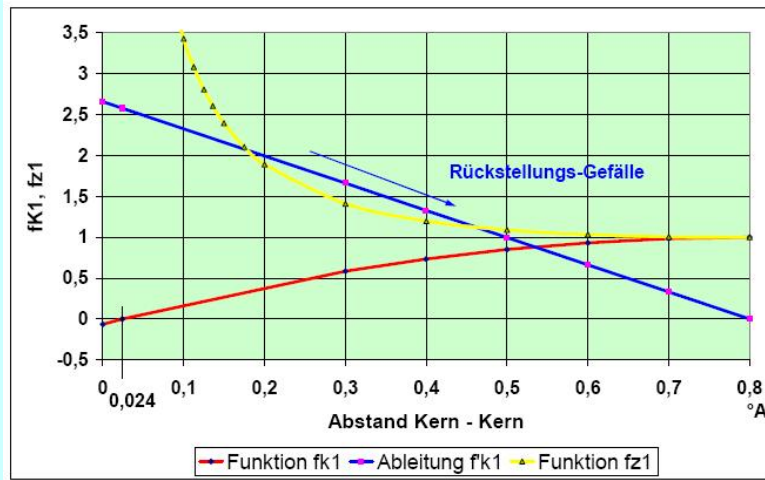
**Fazit:**

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

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



## Verlauf Geometriefaktor $f_{z1}(x)$ und Bereichfaktor $f_{k1}(x)$



Vortrag 28.10.2007 - Martin Bock, Folie 7

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

Man sieht den „1 zu x“ – Charakter von  $f_{z1}$  für kleine x-Abstände.

Man sieht, dass sich mit  $f_{k1}(x)$  die Untere Stabilitätsgrenze des Moleküls berechnen lässt. Diese liegt an der x-Abstandsstelle vor, an der die Bahnenergie gerade zu null wird (negative Werte sind für die Bahnenergie nicht erlaubt, weil nicht möglich). Es ergibt sich diese Grenze rechnerisch zu  $0,0242^\circ\text{A}$ . Theoretische wird erwartet:

$$x_{\text{Stabil\_unten}} = (4 \cdot r_m + l) \cdot x_{\text{min}} = 0,0155^\circ\text{A}$$

Es sollte versucht werden, diesen theoretischen Erwartungswert im Labor-Experiment zu bestätigen. Es wäre dann klar, ob das Elektron im Orbital mit c-Umlauf auf  $r_m$  existiert (feststellbar über Annäherungsversuche an der unteren Stabilitätsgrenze nahe  $x=0$ ).

Zudem ist noch zu prüfen, ob die vg. rechnerische Abweichung durch modifizierte Ansätze bei der Definition von  $f_{k1}(x)$  vermieden werden kann (s. Backup-Folie 3).

## Physikalische Struktur des Bereichsfaktors ( $f_{K1}$ )

Mit  $f_K=1$  steigt die berechnete Gesamtenergie schneller an, als die „Messwerte“ (s. Folie 3). Der Bereichsfaktor  $f_{K1}(x)$  muss also eine Angleichung bewirken. Dies geschieht durch Reduzierung der Bahnenergie-Erzeugung.

Es ist  $f_{K1}(x) = ax^2 + bx + c$  Lösung ist Folie 4 zu entnehmen, Verlauf s. [Backup-Folie 2](#).

a)... $f_{K1}(x = x_{\min}) = 1$

b)... $f'_{K1}(x = x_{\min}) = 0$

c)... $f'_{K1}(x = 0) = \frac{y_{\min}}{\frac{1}{2}x_{\min}}$

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

Im Grundbereich ist  $f_{K0}=1$  und somit der Gradient  $f'_{K0}=0$ . Beim Übergang vom Grundbereich in den Unteren Bereich ist der Gradient des Bereichsfaktors  $f_{K1}$  ebenfalls null, da die Stelle  $x=x_{\min}$  noch zum Grundbereich zählt.

Der Gradient des Bereichsfaktors wird für kleiner werdende  $x$ -Abstände linear größer. Er nimmt an der Stelle  $x=0$  den größten Wert an. Er ist dort auf die Verhältnisse orientiert, die beim Übergang vom Grundbereich in den Unteren Bereich vorliegen (wie eine Art von „Rückstellungs-Gefälle“).

Der Ansatz gemäß Gl. c) zeigt, dass die Bahnenergie-Erzeugung durch den Laufweg der Protonen direkt beeinflusst ist!

$f_{K1}(x = 0) = 0$

Dieser Ansatz soll bewirken, dass an der Stelle  $x=0$  der Bereichsfaktor (und damit auch die Bahnenergie) nicht negativ wird, sondern als Minimalwert null erreicht. Der Ansatz ist entbehrlich, da  $x=0$  nicht erreichbar ist (theoretischer Minimalabstand ist  $r_m + \lambda$ ).

**Backup-Folie 3**

Vortrag 28.10.2007 - Martin Bock, Folie 8

Über die vg. 3. Definition, nämlich die des Gradienten des Bereichsfaktors  $f'_{K1}(x)$  an der Stelle  $x=0$ , geht das Lauflinienbild ein. Daher stellt diese Definition einen physikalisch motivierten Ansatz dar. Die beiden anderen Definitionen haben eher mathematischen Charakter.

Die Berechnung des Verlaufs der Gesamtenergie mit  $fz1(x)$  und  $fK1(x)$  stimmt sehr genau mit den „Messwerten“ überein. Dies ist ein starker Beleg dafür, dass das Lauflinienbild tatsächlich existiert!

Zudem sind die drei Definitionen zum Bereichsfaktor unmittelbar einsichtig, was bedeutet, dass die Struktur des Bereichsfaktors nicht zufällig, sondern systematisch richtig ist.

Zur Vermeidung einer Abweichung des berechneten Mindestabstandes vom theoretischen Mindestabstand (s. Backup-Folie 2) wäre folgende Feinkorrektur zu prüfen:

1.  $f_{K1}(x)$  ist eine Funktion 2.Ordnung. In Gl. c) gilt der Y-Wert nicht an der Stelle  $x=0$  sondern bereits an der Stelle  $x = 4r_m + \lambda$ . Es wäre dann der theoretische Ansatz erzwungen.
2.  $f_{K1}(x)$  ist eine Funktion 3.Ordnung. Es tritt als 4.Bedingung hinzu, dass der Y-Wert von  $f_{K1}$  an der Stelle  $x = 4r_m + \lambda = 0$  ist. Dieser Ansatz ist zu bevorzugen.

Es ist zu erwarten, dass die Auswirkungen dieser Feinkorrekturen sich lediglich im Bereich sehr kleiner  $x$ -Werte nennenswert bemerkbar machen. Für diesen Bereich liegen hier Messwerte nicht vor. Daher wurde diese Prüfung hier nicht durchgeführt. Im Sinne der Struktur bzw. des theoretischen Verständnisses erscheint sie aber angebracht.