

Universität Dortmund  
Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum

# V32 - Elektrische Dipolmomente organischer Moleküle

Christophe Cauet und Tobias Brambach \*

15. Mai 2007

## Zusammenfassung

Im folgenden Versuch soll über eine Messung der Dielektrizitätskonstanten  $\varepsilon$  das Dipolmoment  $\mu$  von organischen Molekülen bestimmt werden. Über diese Größe lassen sich Rückschlüsse über die räumliche Gestalt der Moleküle ziehen. Der Zusammenhang zwischen  $\varepsilon$  und  $\mu$  wird durch die Clausius-Mosotti-Gleichung dargestellt.

---

\*c.cauet@gmail.com oder t.brambach@gmail.com

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
1.1	Das elektrische Dipolmoment . . . . .	3
1.2	Orientierungs- und Verschiebungspolarisation . . . . .	3
1.3	Die Clausius-Mosotti-Gleichung . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Durchführung</b>	<b>5</b>
2.1	Messung der Dielektrizitätskonstanten . . . . .	5
2.2	Messung der Verschiebungspolarisierbarkeit . . . . .	5
2.3	Aufbau zur Messung des Brechungsindex . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Auswertung</b>	<b>7</b>
3.1	Vorbereitende Messungen . . . . .	7
3.2	Bestimmung der relativen Dielektrizitätskonstante und des mikroskopischen Dipolmoments . . . . .	8
3.3	Berechnung des Winkels zwischen den Dipolmomenten . . . . .	10
3.4	Berechnung der Polarisierbarkeiten $\alpha_O$ und $\alpha_V$ . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Diskussion</b>	<b>13</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>13</b>
A.1	Literaturangaben . . . . .	13

# 1 Theorie

## 1.1 Das elektrische Dipolmoment

Das elektrische Dipolmoment zweier entgegengesetzt gleicher Punktladungen  $ne$  an den Positionen  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  ist gegeben durch

$$\vec{\mu} = ne(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (1.1)$$

Für  $i$  verschiedene Ladungen  $n_i e$  bzw. eine Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$  ergibt sich ein Übergang zu einer Summe, bzw. zu einem Integral

$$\vec{\mu} = \sum_{i=1}^z n_i e \vec{r}_i \quad (1.2)$$

$$\vec{\mu} = \int \rho(\vec{r}) d^3r. \quad (1.3)$$

## 1.2 Orientierungs- und Verschiebungspolarisation

Bei der Polarisation von Molekülen gibt es im Wesentlichen zwei verschiedene Möglichkeiten. Zum Einen gibt es Moleküle, deren Dipolmoment nicht abhängig von äußeren Einflüssen ist. In einem elektrischen Feld zum Beispiel wirkt auf sie ein Drehmoment  $\vec{\mu} \times \vec{E}$ . Eigentlich würden sich nun alle Moleküle in Feldrichtung ausrichten, das wird jedoch durch ihre thermische Bewegung verhindert. Eine Probe, die insgesamt  $V \cdot N$  Moleküle enthält würde damit eine Polarisation  $\vec{P}$  von

$$\vec{P} = \frac{N}{V} \langle \vec{\mu} \rangle \quad (1.4)$$

aufweisen. Polarisation bedeutet hier, dass gemäß Abbildung 1 eine Oberflächenladung auf der Probe entsteht.  $\langle \vec{\mu} \rangle$  ist dabei das effektive Dipolmoment, welches für die hier betrachtete Orientierungspolarisation proportional zum Elektrischen Feld  $\vec{E}_r$  am Ort des Moleküls im Probenvolumen ist.

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \alpha_0 \epsilon_0 \vec{E}_r. \quad (1.5)$$

Die hier eingeführte Größe  $\alpha_0$  nennt man die Orientierungspolarisierbarkeit des Moleküls.

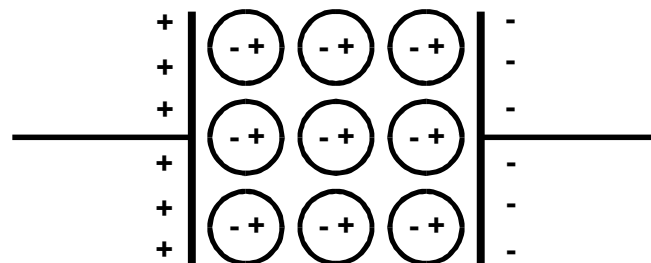


Abbildung 1: Darstellung der Oberflächenladung einer polarisierten Probe

Moleküle ohne permanentes Dipolmoment können durch elektrische Felder polarisiert werden. Gleichung (1.5) kann für diesen Fall dahingehend modifiziert werden, dass  $\alpha_O$  durch  $\alpha_V$ , die Verschiebungspolarisierbarkeit ersetzt wird.

$$\langle \vec{\mu} \rangle = \alpha_V \varepsilon_0 \vec{E}_r. \quad (1.6)$$

Unabhängig davon ob Stoffe aus polaren oder unpolaren Molekülen bestehen, besitzen sie immer eine endliche Verschiebungspolarisierbarkeit.

### 1.3 Die Clausius-Mosotti-Gleichung

Über die Betrachtung der Oberflächenladungsdichten in einem Kondensator mit einem zwischen den Platten eingebrachten Dielektrikum kann man mit den obigen Ergebnissen einen Zusammenhang zwischen  $\varepsilon$  und den Polarisierbarkeiten  $\alpha_O$  und  $\alpha_V$  herstellen:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{L D}{3 M} (\alpha_V + \alpha_O). \quad (1.7)$$

Wobei  $M$  das Molekulargewicht der polarisierten Substanz,  $D$  ihre Dichte und  $L$  die Loschmidt-Zahl ist und es gilt  $V/N = M/DL$ . Um nun einen Zusammenhang zwischen  $\varepsilon$  und  $\mu$  zu erhalten, muss noch  $\alpha_O$  durch  $\mu$  dargestellt werden.

Die potentielle Energie eines Dipols, der im Winkel  $\vartheta$  zum elektrischen Feld steht beträgt

$$U = -\vec{\mu} \vec{E} = -\mu E \cos \vartheta. \quad (1.8)$$

und es gilt

$$|\langle m \vec{u} \rangle| = \mu |\cos \vartheta|. \quad (1.9)$$

Der Mittelwert des Cosinus ergibt sich aus der Boltzmannverteilung zu

$$\langle \cos \vartheta \rangle = \frac{2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\frac{\mu E \cos \vartheta}{k_B T}} d\vartheta}{2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta e^{\frac{\mu E \cos \vartheta}{k_B T}} d\vartheta} \quad (1.10)$$

$$= \cot x - \frac{1}{x}, \quad (1.11)$$

der Langevin-Funktion mit  $x = \frac{\mu E}{k_B T}$ . Eine Reihenentwicklung für kleine  $x$  liefert schließlich

$$\alpha_O = \frac{\mu^2}{3\varepsilon_0 k_B T} \quad (1.12)$$

und damit erhält man die Clausius-Mosotti-Gleichung

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{L D}{3 M} \left( \alpha_V + \frac{\mu^2}{3\varepsilon_0 k_B T} \right) \quad (1.13)$$

## 2 Durchführung

### 2.1 Messung der Dielektrizitätskonstanten

Bringt man ein Dielektrikum zwischen die beiden Platten eines Kondensators, vergrößert sich seine Kapazität  $C$ , da durch die Polarisation des Dielektrikums virtuell der Abstand zwischen den beiden Kondensatorplatten verringert wird. Die Kapazität  $C$  eines mit einem Dielektrikum vollständig gefüllten Kondensators beträgt

$$C = \varepsilon C_{Vac}. \quad (2.1)$$

Da aber eine Füllung nicht an jeder Stelle des Kondensators möglich ist, muss man eine Restkapazität  $C_S$  berücksichtigen, die Vakuumkapazität  $C_{Vac}$  kann man dann bestimmen, wenn man die Kapazität  $C_L$  des leeren (mit Luft gefüllten, Kondensator misst und die Gerätekonstante  $C_S$  abzieht:

$$C = \varepsilon C_{Vac} + C_S \quad (2.2)$$

$$\Rightarrow \varepsilon = \frac{C - C_S}{C_{Vac}}. \quad (2.3)$$

### 2.2 Messung der Verschiebungspolarisierbarkeit

Um die Verschiebungspolarisierbarkeit zu messen, muss die Orientierungspolarisierbarkeit „ausgeschaltet“ werden. Das gelingt, wenn man die Messung in einem hochfrequenten elektrischen Wechselfeld durchführt, zum Beispiel mit sichtbarem Licht. Gemäß der Maxwell'schen Relation  $n^2 = \varepsilon$  gelingt das dann durch eine Messung des Brechungsindex. Unter Vernachlässigung der Orientierungspolarisierbarkeit wird die Clausius-Mosotti-Gleichung zu

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \approx \frac{LD}{3M} \alpha_V. \quad (2.4)$$

Es müssen nun noch zwei Probleme betrachtet werden. Zum Einen ist der Brechungsindex eine Funktion der Frequenz des einfallenden Lichts. Daher muss unter Umständen eine Korrektur  $K$  hinzuaddiert werden. Zum Anderen beeinflussen sich sehr nah beieinanderliegende Dipole gegenseitig. Dieser Effekt wird aber in der Clausius-Mosotti-Gleichung nicht berücksichtigt. Daher löst man den zu untersuchenden Stoff in einem unpolaren Lösungsmittel. Da die Dipolwechselwirkung mit  $1/r^6$  abfällt, kann durch diese Verdünnung der Störeffekt stark verringert werden. Für die beiden Molkonzentrationen  $x_L$  und  $x_S$  des Lösungsmittels und der zu untersuchenden Substanz gilt  $x_L + x_S = 1$ .  $M_i$  und  $\alpha_{V_i}$  sind die zugehörigen Molekulargewichte und Verschiebungspolarisierbarkeiten. Für eine Lösung mit der Dichte  $D$  und bei der Frequenz von sichtbarem Licht wird die Clausius-Mosotti-Gleichung dann zu

$$\mu^2 = \frac{9k_B T \varepsilon_0}{x_S L} \left( \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} - \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} - K \right) \frac{x_S M_S + x_L M_L}{D}. \quad (2.5)$$

Die unbekanntenen Größen sind alle leicht messbar. Die Dichte wird mit einer Tauchspindel ermittelt.

## 2.3 Aufbau zur Messung des Brechungsindex

Der Brechungsindex der zu untersuchenden Substanz soll über eine Messung des Totalreflexionswinkels  $\alpha_T$  zwischen der Substanz und einem Glasprisma geschehen. Dazu nutzt man ein sogenanntes Abbésches Refraktometer. In Abbildung 2 ist der Aufbau schematisch dargestellt. Zwischen zwei leicht versetzte rechtwinklige Prismen wird die Flüssigkeit eingefüllt. Das einfallende Licht kann nun nur dann durch den Versuchsaufbau hindurchlaufen, wenn es unter einem Winkel  $\alpha < \alpha_T$  einfällt. Daher erkennt man in der Bildebene einen dunklen Schatten, dort wo das Licht, welches unter einem größeren Winkel einfällt nicht ankommt.

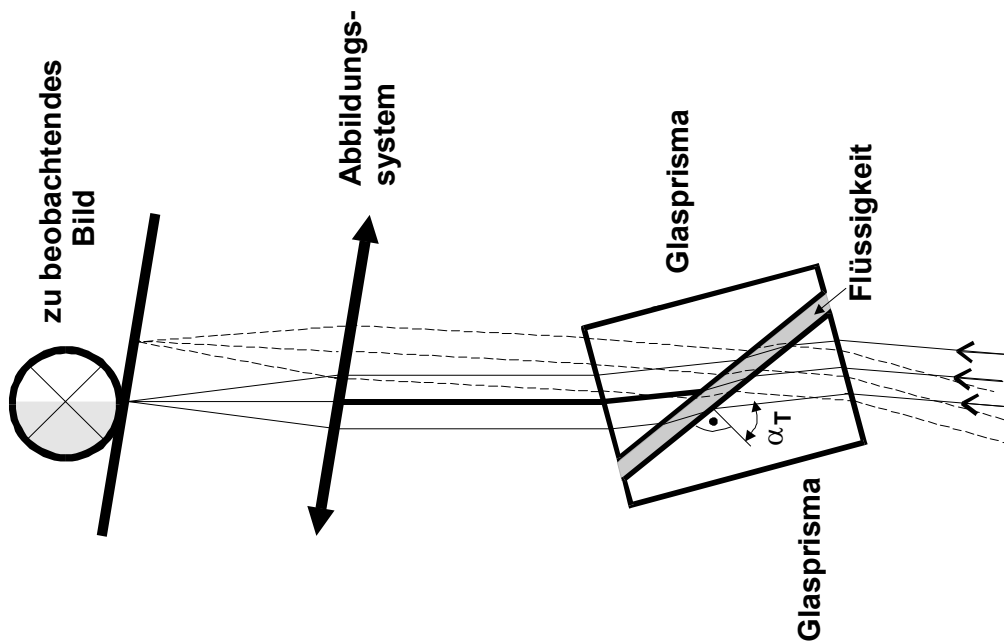


Abbildung 2: Schematische Darstellung des Abbéschen Refraktometers [1]

Mit Hilfe eines Fadenkreuzes kann man die Apparatur so einstellen, dass man  $\alpha_T$  ablesen kann. Da ein Dispersionskompensator eingebaut ist, ist bei dem verwendeten Aufbau auch eine Messung mit weißem, nicht monochromatischem, Licht möglich. Die mit dem Gerät gemessenen Brechungsindizes beziehen sich dann auf eine Wellenlänge von 589 nm (eine Umrechnung ist direkt an der Winkelskala angebracht).

### 3 Auswertung

#### 3.1 Vorbereitende Messungen

Bevor mit den Messungen begonnen werden kann, muss das Verhalten des Kondensators genauer untersucht werden. Wie in Formel (3.1) gezeigt, kann der Kondensator nicht als ideal angesehen werden. Die Kapazität ist insbesondere von der Füllhöhe des verwendeten Dielektrikums abhängig. Tabelle 1 beinhaltet die gemessenen Werte. Zu beachten ist ebenfalls die gemessene Leerkapazität  $C_{Leer}$  über die anschließend die Dielektrizitätskonstante bestimmt wird:

$$\varepsilon = \frac{C - C_S}{C_{Leer} - C_S} \quad (3.1)$$

Abbildung 3 zeigt die gemessene Kapazität des Kondensators in Abhängigkeit der Füllhöhe des Dielektrikums.

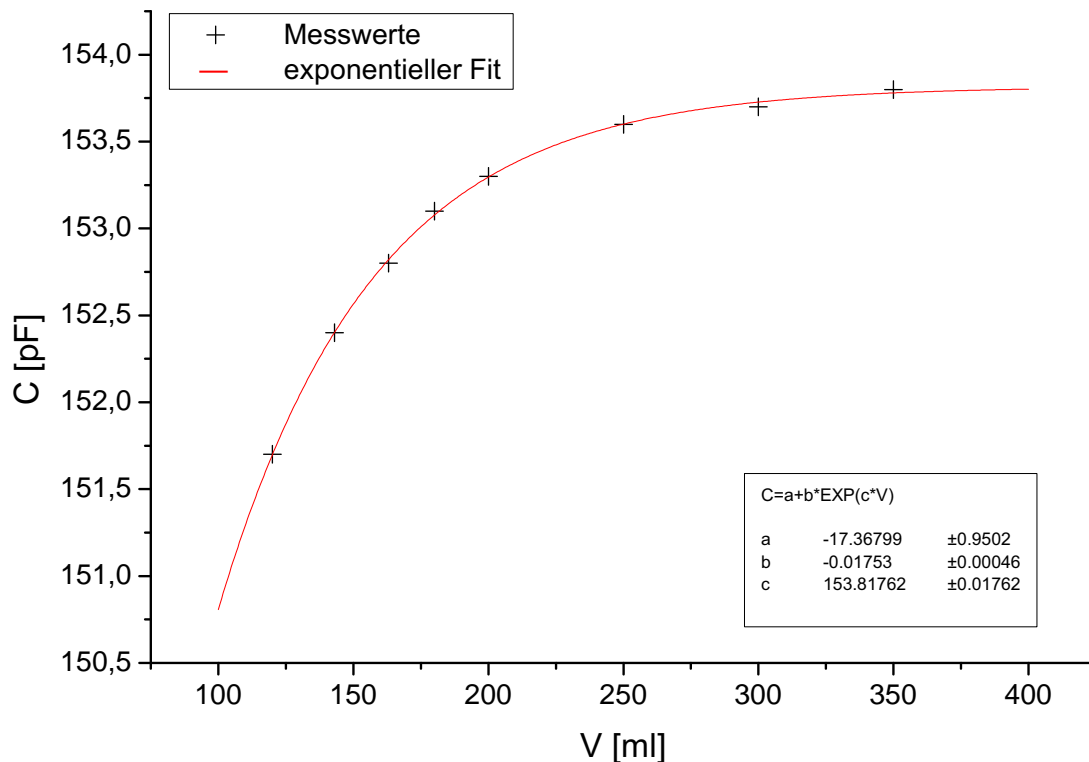


Abbildung 3: Kapazität des Kondensators in Abhängigkeit der Füllhöhe des Dielektrikums.

Der nicht-lineare Fit zeigt deutlich, dass die Kapazität einen Schwellenwert erreicht.

$$C_{Schwelle} = 153.82 \pm 0.02 \quad (3.2)$$

Die Abweichung hiervon zu dem gemessenen Wert für ein Füllvolumen von 120 ml beträgt 2.1 pF und liegt in der gleichen Größenordnung wie die im Skript angegebene Apparatekonstante  $C_S = 5.6$  pF, die im weiteren ihre Verwendung findet.

$C$ [pF]	$V$ [ml]	$T$ [°C]
83	0	22.6
151.7	120	22.6
152.4	143	22.6
152.8	163	22.5
153.1	180	22.5
153.3	200	22.6
153.6	250	22.4
153.7	300	22.6
153.8	350	22.6

Tabelle 1: Messwerte zur Bestimmung der Leerkapazität des Kondensators und der Abhängigkeit der Kapazität von der Füllhöhe.

### 3.2 Bestimmung der relativen Dielektrizitätskonstante und des mikroskopischen Dipolmoments

Tabelle 2 zeigt die gemessenen Werte des Brechungsindex und der Kapazität des mit dem Dielektrikum Monochlorbenzol gefüllten Kondensators in Abhängigkeit der Konzentration. Die relative Dielektrizitätskonstante wird über Formel (3.1) berechnet und anschließend zur Bestimmung des Dipolmoments über Formel (2.5) verwendet.

Konzentration $x_S$	$\rho$ [g/cm <sup>3</sup> ]	$C$ [pF]	$n$	$T$ [°C]	$\epsilon_{\text{ges}}$	$\mu$
0.05	0.698	160.4	1.3925	22.1	2	$4.25 \cdot 10^{-30}$
0.08	0.702	162.5	1.3938	22.2	2.03	$4.07 \cdot 10^{-30}$
0.10	0.712	168.5	1.3975	22.2	2.1	$4.64 \cdot 10^{-30}$
0.15	0.729	177.7	1.4022	22.3	2.22	$4.82 \cdot 10^{-30}$
0.20	0.750	187.5	1.4082	22.2	2.35	$4.85 \cdot 10^{-30}$
0.25	0.761	197.4	1.4140	22.6	2.48	$4.85 \cdot 10^{-30}$

Tabelle 2: Konzentrationsabhängige Messung des Brechungsindex und der Kapazität des Dielektrikums Monochlorbenzol

Für Dichlorbenzol verfährt man analog. Die Werte finden sich in Tabelle 3.

Konzentration $x_S$	$\rho$ [g/cm <sup>3</sup> ]	$C$ [pF]	$n$	$T$ [°C]	$\epsilon_{\text{ges}}$	$\mu$
0.05	0.711	158.2	1.3985	22.4	1.97	$2.17 \cdot 10^{-30}$
0.10	0.736	189.9	1.4020	22.3	2.38	$7.43 \cdot 10^{-30}$
0.15	0.762	208.1	1.4090	22.6	2.62	$7.22 \cdot 10^{-30}$
0.20	0.799	232.2	1.4180	22.7	2.93	$7.18 \cdot 10^{-30}$
0.25	0.821	253.2	1.4265	22.6	3.2	$7.00 \cdot 10^{-30}$

Tabelle 3: Konzentrationsabhängige Messung des Brechungsindex und der Kapazität des Dielektrikums Dichlorbenzol

Über eine lineare Ausgleichsrechnung kann jetzt das Dipolmoment für  $\mu(x_S = 0)$  ermittelt werden. Abbildung 4 zeigt die Messwerte und die Ausgleichsrechnung für Monochlorbenzol, Abbildung 5 für Dichlorbenzol. Es ergeben sich folgende Werte:

$$\mu_{\text{mono}}(x_S = 0) = (4.3 \pm 0.2) \cdot 10^{-30} \text{ Cm} \quad (3.3)$$

$$\mu_{\text{di}}(x_S = 0) = (7.67 \pm 0.08) \cdot 10^{-30} \text{ Cm} \quad (3.4)$$

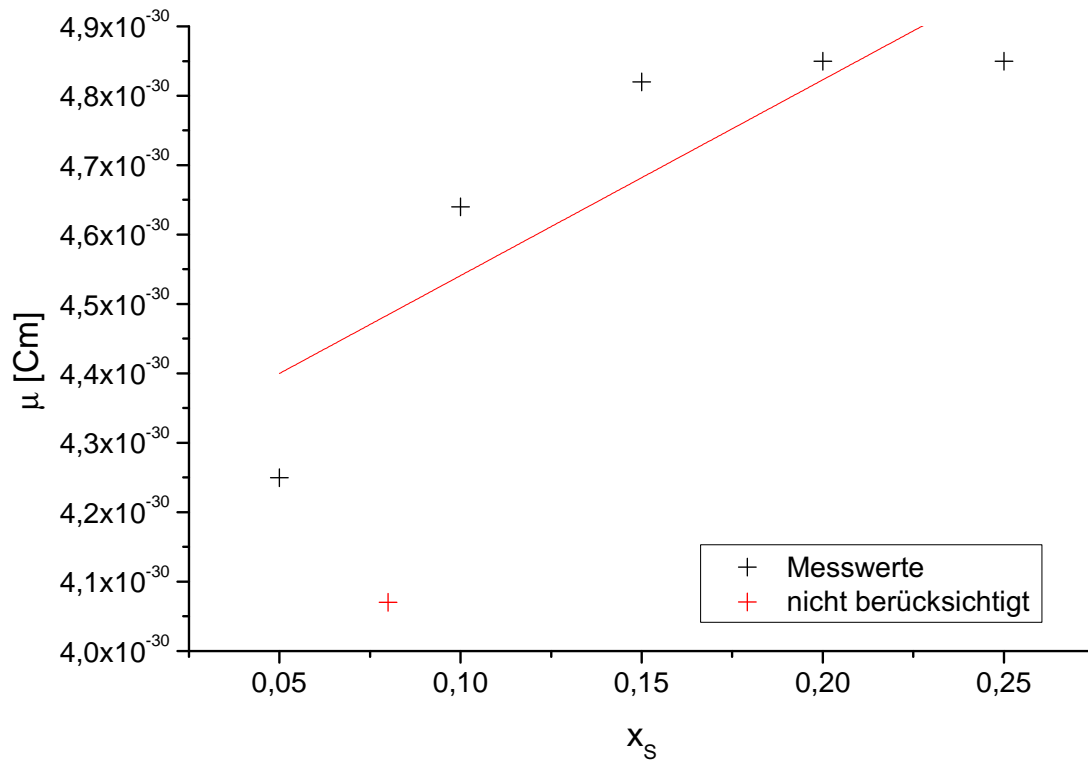


Abbildung 4: Messwerte und Ausgleichsgerade zur Bestimmung des Dipolmoments von Monochlorbenzol bei  $x_S = 0$ .

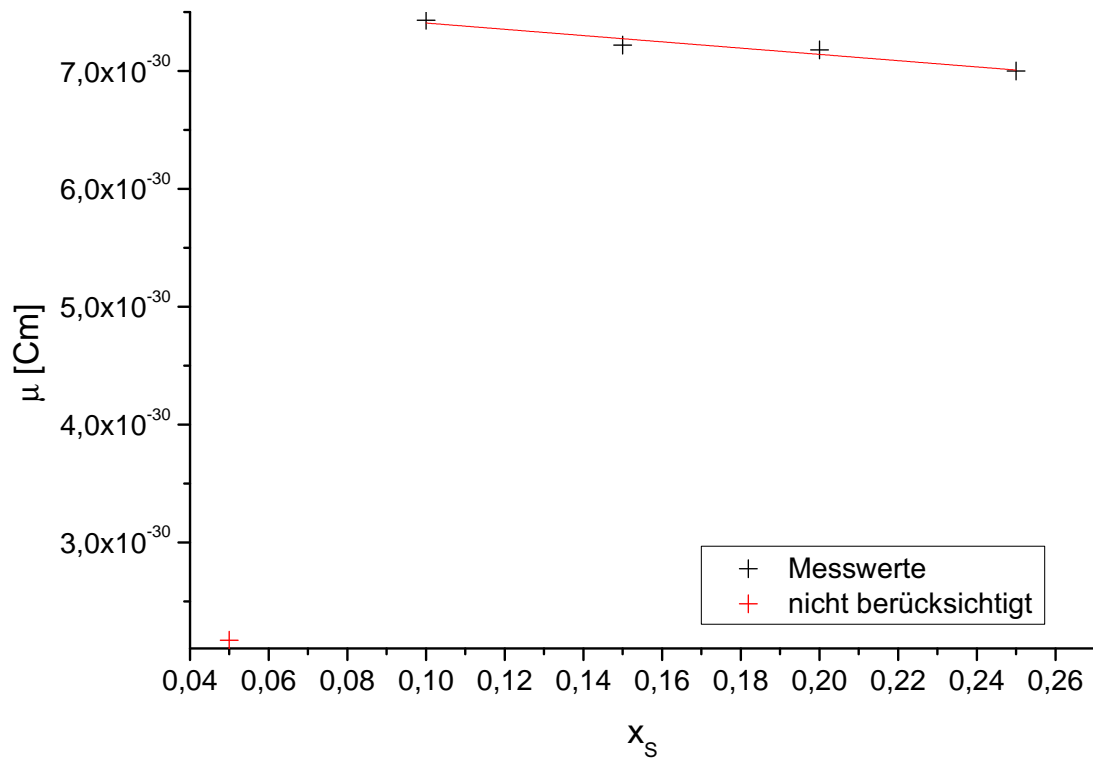


Abbildung 5: Messwerte und Ausgleichsgerade zur Bestimmung des Dipolmoments von Dichlorbenzol bei  $x_S = 0$ .

### 3.3 Berechnung des Winkels zwischen den Dipolmomenten

Der Winkel zwischen den Dipolmomenten errechnet sich aus

$$\cos \vartheta = \frac{\mu_{Di}^2}{2\mu_{Mono}^2} - 1 \quad (3.5)$$

$$\Rightarrow \vartheta = \arccos \left( \frac{\mu_{Di}^2}{2\mu_{Mono}^2} - 1 \right). \quad (3.6)$$

Durch Einsetzen der oben ermittelten Werte erhält man damit einen Winkel von  $\vartheta = 56.65^\circ$ .

### 3.4 Berechnung der Polarisierbarkeiten $\alpha_O$ und $\alpha_V$

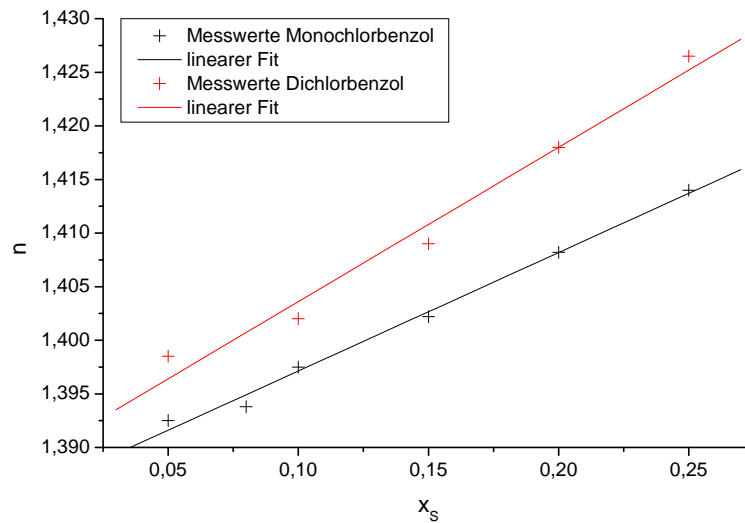


Abbildung 6: Darstellung der Messwerte und lineare Regression zur Bestimmung der Brechungsindizes der reinen Stoffe

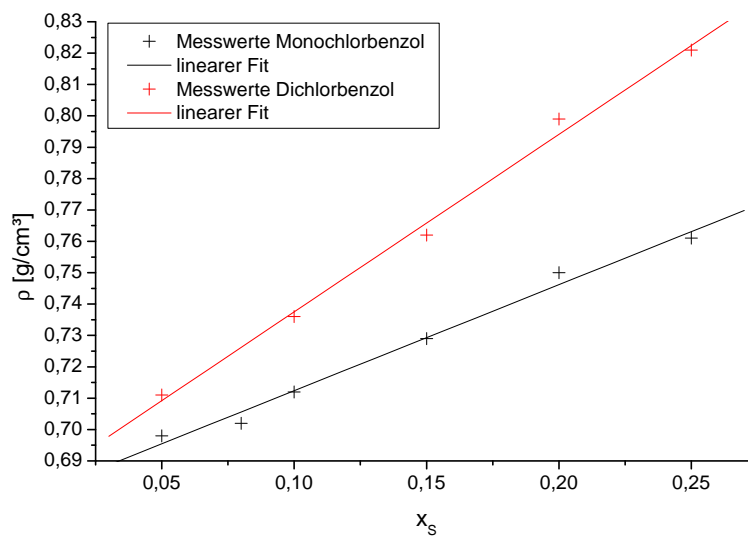


Abbildung 7: Darstellung der Messwerte und lineare Regression zur Bestimmung der Stoffdichten der reinen Stoffe

Zunächst muss aus den genommenen Daten die Dichte und der Brechungsindex der untersuchten Stoffe für die Konzentration  $x_s = 1$  bestimmt werden. Dazu führt man gemäß Abbildung 6 und

7 eine lineare Ausgleichsrechnung durch und erhält

$$\begin{aligned} n &= (1.388 \pm 0.002) + (0.19 \pm 0.01) \\ &= 1.58 \pm 0.01 \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} D &= (0.679 \pm 0.003) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} + (0.34 \pm 0.02) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \\ &= (1.02 \pm 0.02) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \end{aligned} \quad (3.8)$$

für Monochlorbenzol und

$$\begin{aligned} n &= (1.389 \pm 0.002) + (0.14 \pm 0.01) \\ &= 1.53 \pm 0.01 \\ D &= (0.681 \pm 0.004) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} + (0.57 \pm 0.02) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \\ &= (1.25 \pm 0.03) \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \end{aligned}$$

für Dichlorbenzol. Mit den so gewonnenen Werten können nun  $\alpha_O$  nach der Formel

$$\alpha_O = \frac{\mu^2}{3k_B T \epsilon_0} \quad (3.9)$$

und  $\alpha_V$  nach

$$\alpha_V = \frac{3M}{N_A D} \left( \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \right) \quad (3.10)$$

bestimmt werden. Die Fehler ergeben sich hier nach Gaußscher Fehlerfortpflanzung. Man erhält schließlich für Monochlorbenzol

$$\begin{aligned} \alpha_O &= (1.72 \pm 0.08) \cdot 10^{-28} \text{ m}^3 \\ \alpha_V &= (1.84 \pm 0.02) \cdot 10^{-28} \text{ m}^3 \end{aligned}$$

und für Dichlorbenzol

$$\begin{aligned} \alpha_O &= (5.47 \pm 0.06) \cdot 10^{-28} \text{ m}^3 \\ \alpha_V &= (1.40 \pm 0.01) \cdot 10^{-28} \text{ m}^3 \end{aligned}$$

## 4 Diskussion

Die Anfangs durchgeführte Messung bei verschiedenen Füllhöhen des Kondensators hat eine große Abhängigkeit von dieser aufgezeigt. Zwar erreichte die Kapazität einen oberen Grenzwert, jedoch wurden außer diesem Zusammenhang keine weiteren Fehlerquellen überprüft. Es ist also weiterhin ratsam auf die im Skript angegebene Restkapazität zurückzugreifen. Die Messungen der Kapazität und des Brechungsindex verliefen problemlos wobei jedoch einzelne Werte stark abwichen und nicht mit in der Auswertung berücksichtigt wurden. Die damit berechneten Dipolmomente nehmen realistische Werte an und liegen in der korrekten Größenordnung. Die Abweichungen erklären sich zum Einen dadurch, dass wohl die selbst hergestellte Konzentration nicht exakt bemessen wurde<sup>1</sup>, zum Anderen war von der dünnsten Dichlorbenzollösung nicht mehr genug vorhanden um damit den Kondensator zu füllen.

Zur Berechnung der Polarisierungen mussten wir auf zusätzliche lineare Ausgleichsrechnungen zurückgreifen, da wir es versäumt haben die Dichte der unverdünnten Chlorbenzole zu messen.

## A Anhang

### A.1 Literaturangaben

#### Literatur

- [1] Universität Dortmund, Praktikum Physik: Fortgeschrittenen-Praktikum, Anleitungen, Version vom 14.05.2007: V32: Elektrische Dipolmomente organischer Moleküle  
[http://berners-lee.physik.uni-dortmund.de/praktikum/F\\_Anleitungen/V32.pdf](http://berners-lee.physik.uni-dortmund.de/praktikum/F_Anleitungen/V32.pdf)
- [2] Werte der physikalischen Konstanten aus *Particle Data Group Booklet 2006*

---

<sup>1</sup> Es sollte eine Konzentration von 0.075 hergestellt werden, die Stoffmengen (Volumen) wurden nach der Formel  $x = \frac{D_1 V_1 / M_1}{D_2 V_2 / M_2}$  berechnet. Das Volumenverhältnis ergab sich danach zu  $V_1 / V_2 = 19.61$ .