

MUSTERLÖSUNG 11

Aufgabe 1: In einem äußeren elektrischen Feld werden in allen Materialien elektrische Dipole ausgebildet. Jedoch ist jedes andere Material unterschiedlich fähig zu diesem Dipolausbildungsprozess, den man elektrische Polarisation nennt. Zu der elektrischen Polarisation tragen drei verschiedene Mechanismen, die nicht bei allen Materialien zur Verfügung stehen, ~~worauf die Polarisation~~ was eins von den Gründen der unterschiedlichen Fähigkeiten zur Polarisation, also ~~Polarisierbarkeit~~ verschiedener Materialien ist. Andere Gründe sind natürlich unterschiedliche Fähigkeiten die einzelnen Mechanismen zu folgen. Der erste Mechanismus beruht auf die Polarisation einzelner Atome durch die Verschiebung der Elektronenhülle um den Atomkern, was zu einer unsymmetrischen Verteilung der Elektronen um den Atomkern und damit zu einem Dipolmoment führt. Dieser heißt elektronische Polarisation und tritt in allen Materialien auf. Der zweite Mechanismus beruht auf die Verschiebung der Ionen in einem Material gegeneinander wegen eines äußeren E-Feldes. Natürlich kommt dieser nur in Materialien, die aus Ionen zusammengesetzt sind, vor und heißt ionische Polarisation. Der dritte Mechanismus beruht auf die Ausrichtung der bereits vorhandenen Dipole in Richtung des angelegten äußeren E-Feldes und heißt Orientierungspolarisation. Für diesen ist natürlich die Existenz permanenter Dipole im Material die Voraussetzung. Außerdem ist ein externes E-Feld für alle drei Typen immer erforderlich, sonst liegt keine Polarisation vor.

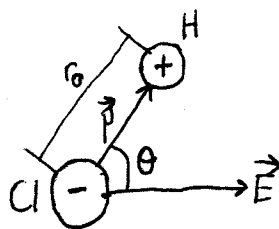
In dieser Aufgabe ~~ist~~ ist ein HCl-Gas, unter der Einwirkung eines äußeren E-Feldes zu untersuchen. Da die HCl-Moleküle ~~in Wasser~~ ^{sich im Wasser} ~~dissoziieren~~, ist die ionische Polarisation bei HCl vorhanden. Außerdem sind HCl-Moleküle stark polar, da für die Elektronegativitätswerte $E_H = 2,1$ und $E_{Cl} = 3,0$ gelten, und man dadurch mithilfe der Pauling-Skala auf das Vorhandensein permanenter Dipole schließen kann, weil man für $\Delta E > 0,4$ meistens von Dipolen ausgeht. Deshalb ist bei HCl auch die Orientierungspolarisation und damit alle drei Mechanismen vorhanden. Die ionische Polarisation und die Orientierungspolarisation sollen im folgenden näher untersucht werden.

a) Nun soll der Verlauf der statischen Orientierungspolarisation in Abhängigkeit der elektrischen Feldstärke E ermittelt werden, für $0 \leq E < \infty$.

Wenn man ein äußeres E-Feld auf das HCl-Gas legt, hat das einen polarisierenden Effekt, die Dipole möchten wegen des E-Feldes sich in Richtung dieses E-Feldes ausrichten. Dagegen wirkt aber die statistische ~~Wärmebewegung~~ ^{Wärmebewegung}, verursacht von der thermischen Energie, $k_B T$. Da diese Wärmebewegung statistisch in eine beliebige Richtung erfolgt, stört sie i.A. die Polarisation durch das E-Feld.

Wenn kein E-Feld angelegt wird, d.h. für $E=0$, werden alle Dipole durch die Wärmebewegung statistisch ausgerichtet. Deshalb ist für $E=0$, keine statische Orientierungspolarisation vorhanden, weil im Mittel die Richtungen sich vektoriell zu Null addieren.

Für $E > 0$ ergibt sich eine Polarisation P , die sich mit der Moleküldichte N , mit dem Dipolmoment p und dem Winkel θ zwischen dem Dipolmomentvektor \vec{p} und elektrischem Feld \vec{E} wie folgt berechnen lässt: $P = Np \langle \cos\theta \rangle$.



$\langle \cos\theta \rangle$ ist dabei der Mittelwert von $\cos\theta$ für alle Atome im HCl-Gas, wobei θ einfach durch die Temperaturbewegung ~~bei allen Atomen~~ ^{bei allen Atomen} statistisch bestimmt ist. Man berechnet also P mit dem Produkt aus dem Dipolmoment für HCl-Moleküle, der Dichte dieser Moleküle und der Abweichung der Richtungen der jeweiligen Dipole von der Richtung des E-Feldes, die durchschnittlich von $\langle \cos\theta \rangle$ ermittelt wird.

$\langle \cos\theta \rangle$ kann man berechnen mit $\langle \cos\theta \rangle = \frac{\int W(\theta) \cos\theta d\theta}{\int W(\theta) d\theta}$, wobei $W(\theta)$ die Wahrscheinlichkeit darstellt, dass ein Dipol den Winkel θ zwischen seinem Dipolmoment \vec{p} und \vec{E} hat. Der Querstrich deutet wieder auf eine Mittelwertbildung hin.

Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung $W(\theta)$ beschreibt den Ausrichtungsprozess der Dipole, der durch die Temperaturbewegung verursacht wird. Die Teilchen möchten dabei wie immer ihre ~~freie Enthalpie~~ innere Energie (eigentlich ihre freie Enthalpie, die auch die Entropie berücksichtigt, aber hier zur Vereinfachung nicht weiter erklärt werden soll, da es für diese Aufgabe keinen Unterschied macht) minimieren und gehorchen, deshalb der Boltzmann-Verteilung. Deshalb gilt:

$$W(\theta) = A \cdot e^{-\frac{U(\theta)}{k_B T}}$$

Dabei ist $U(\theta)$ die innere Energie eines Dipols mit dem Dipolmoment um θ ausgelenkt von \vec{E} und $e^{-\frac{U(\theta)}{k_B T}}$ die Boltzmann-Verteilung. A ist eine Proportionalitätskonstante, die hier als $A=1$ o.B.d.A. gesetzt werden kann, da die Wahl von A (außer $A=0$) keinen Unterschied für das Ergebnis dieser Aufgabe macht.

$$\Rightarrow W(\theta) = e^{-\frac{U(\theta)}{k_B T}}$$

Die innere Energie $U(\theta)$ kann mit $U(\theta) = -\vec{p} \cdot \vec{E}$ berechnet werden. Statt dem Skalarprodukt kann man mit folgender Formel arbeiten, wobei $|\vec{E}| = E$ und $|\vec{p}| = p$ gelten:

$$U(\theta) = -p \cdot E \cdot \cos\theta \Rightarrow W(\theta) = e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}}$$

Nun kann man $\langle \cos\theta \rangle$ rechnen. Die Rechnung erfolgt in Kugelkoordinaten. Die Mittelwerte $\overline{\cos\theta}$ und \overline{W} werden dabei mit Flächenintegralen in θ und φ Richtungen unter Ausnutzung des entsprechenden Flächenelements $r^2 \sin\theta d\theta d\varphi$ (siehe Mathe 3) berechnet.

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{\overline{W \cos\theta}}{\overline{W}} = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi W(\theta) \cos\theta r^2 \sin\theta d\theta d\varphi}{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi W(\theta) r^2 \sin\theta d\theta d\varphi} = \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \int_0^\pi W(\theta) \cos\theta \sin\theta d\theta}{\int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \int_0^\pi W(\theta) \sin\theta d\theta} = \frac{2\pi \int_0^\pi W(\theta) \cos\theta \sin\theta d\theta}{2\pi \int_0^\pi W(\theta) \sin\theta d\theta} = \frac{\int_0^\pi \cos\theta W(\theta) \sin\theta d\theta}{\int_0^\pi W(\theta) \sin\theta d\theta}$$

alles unabh. von φ

Als Nebenrechnung berechnen wir den Nennerterm:

$$\int_0^\pi W(\theta) \sin\theta d\theta = \int_0^\pi e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}} \sin\theta d\theta = \left[\frac{-k_B T}{pE} e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}} \right]_0^\pi = \frac{-k_B T}{pE} e^{\frac{pE \cos\pi}{k_B T}} - \frac{-k_B T}{pE} e^{\frac{pE \cos 0}{k_B T}} = \frac{-k_B T}{pE} e^{-\frac{pE}{k_B T}} + \frac{k_B T}{pE} e^{\frac{pE}{k_B T}}$$

Korrekturterm

Die Richtigkeit der Stammfunktion für $W(\theta) \sin\theta$ wird im folgenden wieder benutzt. Ihre Richtigkeit können Sie durch Ableiten überprüfen. Jetzt soll als zweite Nebenrechnung der Zählerterm berechnet werden, wobei partielle Integration mit der Formel $\int u \cdot v' = u \cdot v - \int u' \cdot v$ angewendet wird:

$$\int_0^\pi \cos\theta W(\theta) \sin\theta d\theta = \int_0^\pi \underbrace{\cos\theta \cdot \frac{k_B T}{pE} e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}}}_{u(\theta)} \cdot \underbrace{\frac{1}{pE} e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}}}_{v'(\theta)} d\theta = \frac{-k_B T}{pE} \cos\theta \cdot e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}} \Big|_0^\pi - \int_0^\pi \sin\theta \cdot \frac{k_B T}{pE} e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}} d\theta = \frac{-k_B T}{pE} \cos\pi \cdot e^{\frac{pE \cos\pi}{k_B T}} + \frac{k_B T}{pE} \cos 0 \cdot e^{\frac{pE \cos 0}{k_B T}} - \frac{k_B T}{pE} \int_0^\pi e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}} \sin\theta d\theta$$

NR: $u'(\theta) = -\sin\theta$, $v(\theta) = \frac{k_B T}{pE} e^{\frac{pE \cos\theta}{k_B T}}$ siehe oben

$$= \frac{-k_B T}{pE} \cdot \cos\pi \cdot e^{\frac{pE \cos\pi}{k_B T}} + \frac{k_B T}{pE} \cos 0 \cdot e^{\frac{pE \cos 0}{k_B T}} - \frac{k_B T}{pE} \cdot \frac{k_B T}{pE} \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right) = \frac{-k_B T}{pE} (-1) e^{-\frac{pE}{k_B T}} + \frac{k_B T}{pE} e^{\frac{pE}{k_B T}} - \left(\frac{k_B T}{pE} \right)^2 \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right)$$

(1) ist schon oben berechnet (2)

$$= \frac{k_B T}{pE} \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} + e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right) - \left(\frac{k_B T}{pE} \right)^2 \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right)$$

coth x = $\frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}$

Diese kann man nun einsetzen:

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{\frac{k_B T}{pE} \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} + e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right) - \left(\frac{k_B T}{pE} \right)^2 \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right)}{\frac{k_B T}{pE} \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} + e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right)} = \frac{e^{\frac{pE}{k_B T}} + e^{-\frac{pE}{k_B T}}}{e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}}} - \frac{\frac{k_B T}{pE} \left(e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}} \right)}{e^{\frac{pE}{k_B T}} - e^{-\frac{pE}{k_B T}}} = \coth\left(\frac{pE}{k_B T}\right) - \frac{k_B T}{pE}$$

Dieser Ausdruck für $\langle \cos\theta \rangle$ kann mit der sogenannten Langevin-Funktion $L(v) = \coth v - \frac{1}{v}$ mit $v = \frac{pE}{k_B T}$ ausgedrückt werden. Um die Polarisation ermitteln zu können, soll man eine Fallunterscheidung für \coth -Funktion machen.

Fall 1: Für kleine E-Felder, d.h. für $\frac{pE}{k_B T} \ll 1$ kann man die Reihendarstellung von $\coth(x)$ benutzen (siehe Mathe), die wie folgt lautet:

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} \dots$$

Bringt man $\frac{1}{x}$ auf die linke Seite, so kann man $\langle \cos\theta \rangle$ direkt ermitteln, wobei nur die Terme von erster Ordnung berücksichtigt werden, da die Terme $\frac{x^3}{45}$ oder mit größerer Ordnung für $x = \frac{pE}{k_B T} \ll 1$ vernachlässigbar klein werden. Es gilt:

$$\langle \cos\theta \rangle = \coth x - \frac{1}{x} = \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} \dots \approx \frac{x}{3} \quad \text{mit } x = \frac{pE}{k_B T} \Rightarrow \langle \cos\theta \rangle \approx \frac{pE}{3k_B T}$$

Damit folgt für die Polarisation bei niedrigen E-Feldern eine lineare Abhängigkeit von E, weil:

$$P = Np \langle \cos\theta \rangle \approx \frac{Np \cdot pE}{3k_B T} = \frac{Np^2}{3k_B T} E$$

Fall 2: Für große E-Felder, d.h. für $\frac{pE}{k_B T} \gg 1$ oder $\frac{pE}{k_B T} \rightarrow \infty$, kann man eine Limesbildung unter Ausnutzung der Definition der $\coth(x)$ als $\coth(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}$ benutzen, um $\langle \cos\theta \rangle$ zu berechnen, wobei $x = \frac{pE}{k_B T}$ definiert wird.

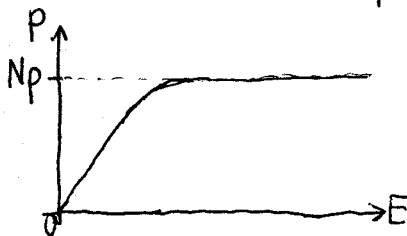
$$\lim_{x \rightarrow \infty} \langle \cos\theta \rangle = \lim_{x \rightarrow \infty} \coth(x) - \frac{1}{x} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{e^x} = 1$$

$\frac{k_B T}{pE} = \frac{1}{\frac{pE}{k_B T}}$

Damit gilt für die Polarisation bei hohen E-Feldern eine Sättigung:

$$P = Np \langle \cos\theta \rangle = Np$$

Letztendlich kann der Verlauf $P(E)$ skizziert werden:



b) Im Rahmen dieser Teilaufgabe soll für ein gegebenes E-Feld zahlenmäßig die Orientierungspolarisation P berechnet werden. Da es erstmal nicht bekannt ist, in welcher der oben unterschiedenen Fälle das E-Feld betrachtet werden soll, berechnen wir den Ausdruck $\frac{pE}{k_B T}$ und schauen ob $\frac{pE}{k_B T} \ll 1$ oder $\frac{pE}{k_B T} \gg 1$ gilt. Das Dipolmoment der solchen Moleküle und damit von HCl berechnet man mit $p = e \cdot r_0$, wobei e die Elementarladung und r_0 der Abstand zwischen H und Cl-Atomen in einem HCl-Molekül bezeichnen. Die gegebenen Werte lauten:

$E = 10 \frac{\text{kV}}{\text{cm}} \rightarrow 10^3 \frac{\text{V}}{10^{-2} \text{m}} = 1 \cdot 10^5 \frac{\text{V}}{\text{m}}$, $r_0 = 0,18 \text{ nm}$, $N = 2,687 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$ und $T = 300 \text{ K}$ (da es Normaltemperatur, bzw. Raumtemperatur in der Angabe steht).

$$\frac{pE}{k_B T} = \frac{e \cdot r_0 \cdot E}{k_B T} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 1,8 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 1 \cdot 10^5 \frac{\text{V}}{\text{m}}}{1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot 300 \text{ K}} \approx 0,007 \ll 1$$

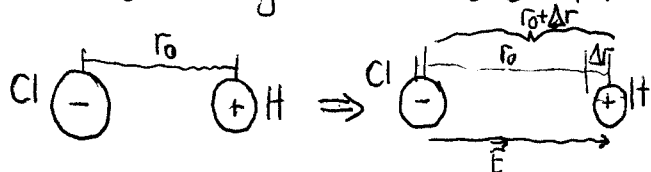
Wie man an dem obigen Zahlenwert merken kann, ist der Ausdruck $\frac{pE}{k_B T}$ viel kleiner als 1. Deshalb ist E ein kleines E-Feld und die Formel $P = N \cdot p \cdot \frac{pE}{3k_B T}$ ist dem ersten Fall gültig. Damit kann man nun P berechnen:

$$P = \frac{N \cdot p \cdot pE}{3k_B T} = \frac{2,687 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 1,8 \cdot 10^{-10} \text{ m} \cdot 7 \cdot 10^{-3}}{3} \approx 1,8 \cdot 10^{-6} \frac{\text{As}}{\text{m}^2}$$

c) Jetzt ist die Aufgabe den Beitrag der ionischen Polarisation (nennen wir wieder P) an der Gesamtpolarisation zu bestimmen. Die ionische Polarisation kann mit der folgenden und da wir nun keinen Winkel zwischen \vec{p} und \vec{E} berücksichtigen sollen (Ionen sind fest gebunden, ändern ihre Richtung mit Temperaturbewegung i.d.R. nicht) einfachen Formel:

$$P = N \cdot p$$

Dabei ist N wieder die Dichte der HCl-Moleküle und p ihr Dipolmoment. Da die Ionen ohne ein äußeres Feld sich so anordnen, dass $p=0$ gilt, ist hier nicht der interatomare Abstand r_0 zwischen H und Cl-Atome, sondern die Auslenkung Δr von diesem Abstand r_0 , die durch das E -Feld verursacht wird und zur Polarisation beiträgt entscheidend. Das Bild unten illustriert dieses:



Deshalb lautet die Formel nicht mehr $p = e \cdot r_0$ sondern $p = q \cdot \Delta r$, wobei q die Ladung der Ionen ist, d.h. es gilt $q = z \cdot e$, wobei $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As}$ die Elementarladung und z die Nettoladung der Verbindungsionen H^+, Cl^- ist. Die beiden Ionen haben eine einfache Ladung, daher gilt $z=1$ für HCl und damit $q = 1 \cdot e = e$, bzw. $p = e \cdot \Delta r$. Und es gilt:

$$P = N \cdot q \cdot \Delta r = N \cdot e \cdot \Delta r$$

Jetzt soll Δr berechnet werden. Zu dieser Auslenkung tragen zwei entgegengerichtete Kräfte bei, einmal die auslenkende Kraft durch das elektrische Feld:

• Auslenkende Kraft: $\vec{F}_E = q \cdot \vec{E}$ (Formel aus Physik)

Die zweite Kraft ist die Rückstellkraft $\vec{F}(r)$, die von dem Lennard-Jones-Potential verursacht wird. Diese wird beschrieben mit $U(r)$ (siehe auch Übungen 5&6) und zusammengesetzt aus der anziehenden ~~und abstoßenden~~ und abstoßenden interatomaren Kräften, oder konkreter aus der Energie dieser Kraftfelder. Das Lennard-Jones-Potential sieht für diese Aufgabe wie folgt aus:

$$U(r) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^{12}}$$

Dabei kann man merken, dass der erste anziehende Term in diesem Fall auf Coulombanziehung beruht.

Die Rückstellkraft berechnet man nun mit folgender Formel, wobei \vec{e}_r den Einheitsvektor in Richtung des E -feldes darstellt:

• Rückstellkraft: $\vec{F}(r) = -\text{grad}U(r) = \frac{-dU(r)}{dr} \cdot \vec{e}_r$ da $U(r)$ nur von r abhängt.

Damit kann man das Kräftegleichgewicht an der Anordnung der Ionen ~~mit~~ mit $r = r_0 + \Delta r$ betrachten, wo die beiden Kräfte \vec{F}_E und $\vec{F}(r)$ entgegengesetzt gleich sind. Es gilt:

$$-\vec{F}_E \stackrel{!}{=} \vec{F}(r) = \vec{F}(r_0 + \Delta r) \quad (\text{Vorsicht, Minuszeichen})$$

Bevor man mit dieser Gleichung rechnen kann, soll aber erstmal die Unbekannte B in $U(r)$ mithilfe der Gleichgewichtsbedingung berechnet werden. Es gilt ja:

$$\vec{F}(r) \Big|_{r=r_0} = \frac{-dU(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \frac{-dU(r)}{dr} = \frac{-d}{dr} \left[\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^{12}} \right] = - \left(\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + B \cdot \frac{-12}{r^{13}} \right) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} + \frac{12B}{r^{13}}$$

$$\Rightarrow \frac{-dU(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} + \frac{12B}{r_0^{13}} \stackrel{!}{=} 0 \Leftrightarrow \frac{12B}{r_0^{13}} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \Leftrightarrow B = \frac{q^2 r_0^{13}}{48\pi\epsilon_0 r_0^2} = \frac{q^2 r_0^{11}}{48\pi\epsilon_0}$$

Damit lautet $U(r)$:

$$U(r) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{q^2 r_0^{11}}{48\pi\epsilon_0 r^{12}} = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{r_0^{11}}{48} \cdot \frac{1}{r^{12}} \right)$$

Jetzt kann mit dem Kräftegleichgewicht berechnet werden:

$$\vec{F}_E = -\vec{F}(r) \Big|_{r=r_0+\Delta r} \Leftrightarrow qE = r \left(\frac{dU(r)}{dr} \right) = \frac{d}{dr} \left[\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{r_0^{11}}{12 r^{12}} \right) \right] \Big|_{r=r_0+\Delta r} = \left[\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d}{dr} \left(\frac{-r_0^{11}}{12 r^{12}} \right) \right] \Big|_{r=r_0+\Delta r}$$

nur \vec{r} , d.h. Richtung von E wichtig

$$= \left[\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) + \frac{q^2 r_0^{11}}{48\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r^{12}} \right) \right] \Big|_{r=r_0+\Delta r} = \left[\frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{-1}{r^2} + \frac{q^2 r_0^{11}}{48\pi\epsilon_0} \cdot \frac{-12}{r^{13}} \right] \Big|_{r=r_0+\Delta r} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{(r_0+\Delta r)^2} - \frac{q^2 r_0^{11}}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{(r_0+\Delta r)^{13}}$$

Um einen Trick anwenden zu können, führen wir folgende Schritte durch:

$$\Leftrightarrow qE = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{(r_0+\Delta r)^2} - r_0^{11} \cdot \frac{1}{(r_0+\Delta r)^{13}} \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{\left(r_0 \left(1 + \frac{\Delta r}{r_0} \right) \right)^2} - r_0^{11} \cdot \frac{1}{\left(r_0 \left(1 + \frac{\Delta r}{r_0} \right) \right)^{13}} \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_0^2 \left(1 + \frac{\Delta r}{r_0} \right)^2} - r_0^{11} \cdot \frac{1}{r_0^{13} \left(1 + \frac{\Delta r}{r_0} \right)^{13}} \right)$$

$$\Leftrightarrow qE = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(\frac{1}{\left(1 + \frac{\Delta r}{r_0} \right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{\Delta r}{r_0} \right)^{13}} \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(\frac{1}{\left(\frac{r_0+\Delta r}{r_0} \right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{r_0+\Delta r}{r_0} \right)^{13}} \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(\frac{1}{\left(\frac{r}{r_0} \right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{r}{r_0} \right)^{13}} \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{13} \right)$$

Um nun Δr berechnen zu können, machen wir eine Approximation mittels der Taylorreihenentwicklung, ihre Formel wie folgt lautet:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k \quad (f^{(k)}(a) \text{ ist die } k\text{-te Ableitung von } f(x) \text{ an der Stelle } x=a)$$

Dabei wird x natürlich als r gewählt und die Entwicklung findet um den Gleichgewichtsabstand r_0 statt, d.h. es gilt $a=r_0$. Da bei der Taylor-Reihe alle Summenterme mit $(x-a)^k$, d.h. mit $(r-r_0)^k = (\Delta r)^k$ multipliziert werden und da Δr laut Angabe relativ klein ist, werden die Terme mit größeren Summenindizes k sehr klein werden. Deshalb sind die Terme ab zweiter Ordnung, d.h. $k=2$ vernachlässigbar klein, also kommt man auf folgende ab dem zweiten Term abgebrochene Reihe:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(r_0)}{k!} (r-r_0)^k \approx \sum_{k=0}^1 \frac{f^{(k)}(r_0)}{k!} (r-r_0)^k = f(r_0) \cdot (r-r_0)^0 + f'(r_0) (r-r_0)^1 = f(r_0) + f'(r_0) \cdot \Delta r$$

Diese Taylorentwicklung wird nun an den beiden $^{11=1}$ Termen in den Klammern, d.h. an den Funktionen $f_1(r) = \left(\frac{r_0}{r} \right)^2$ und $f_2(r) = \left(\frac{r_0}{r} \right)^{13}$ durchgeführt. Es gilt:

$$f_1(r) \approx f_1(r_0) + f_1'(r_0) \Delta r = \left(\frac{r_0}{r} \right)^2 \Big|_{r=r_0} + \left(\frac{-2r_0^2}{r^3} \right) \Big|_{r=r_0} \cdot \Delta r = \left(\frac{r_0}{r_0} \right)^2 + \left(\frac{-2r_0^2}{r_0^3} \cdot \Delta r \right) = 1 - \frac{2\Delta r}{r_0}$$

$$\left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 \right)' = r_0^2 \left(\frac{1}{r^2} \right)' = r_0^2 \cdot \frac{-2}{r^3}$$

$$f_2(r) \approx f_2(r_0) + f_2'(r_0) \Delta r = \left(\frac{r_0}{r} \right)^{13} \Big|_{r=r_0} + \left(\frac{-13r_0^{13}}{r^{14}} \right) \Big|_{r=r_0} \cdot \Delta r = \left(\frac{r_0}{r_0} \right)^{13} + \left(\frac{-13r_0^{13}}{r_0^{14}} \cdot \Delta r \right) = 1 - \frac{13\Delta r}{r_0}$$

$$\left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^{13} \right)' = r_0^{13} \left(\frac{1}{r^{13}} \right)' = r_0^{13} \cdot \frac{-13}{r^{14}}$$

Setzt man diese Approximationen in die obige Gleichung ein, so kann Δr letztendlich berechnet werden:

$$\Leftrightarrow qE = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{13} \right) \approx \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(1 - \frac{2\Delta r}{r_0} - \left(1 - \frac{13\Delta r}{r_0} \right) \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \left(1 - \frac{2\Delta r}{r_0} + 1 + \frac{13\Delta r}{r_0} \right) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \cdot \frac{11\Delta r}{r_0} = \frac{11q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^3} \cdot \Delta r$$

$$\Leftrightarrow \Delta r \approx \frac{4\pi\epsilon_0 r_0^3}{11q^2} \cdot qE = \frac{4\pi\epsilon_0 r_0^3 E}{11q} = \frac{4\pi \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{As}{Vm} \cdot (0,18 \cdot 10^{-9})^3 \cdot 1 \cdot 10^6 \frac{V}{m}}{11 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} As} = 3,68 \cdot 10^{-16} m = 0,368 fm$$

$$E = 10^6 \frac{V}{m} = 1 \cdot 10^6 \frac{V}{m} \text{ (gilt hier auch)}$$

$$q = 2e = 1 \cdot e = 1,6 \cdot 10^{-19} As \text{ (wie oben)}$$

Damit gilt für ionische Polarisation:

$$P = N \cdot p = N \cdot q \cdot \Delta r = N \cdot e \cdot \Delta r = 2,687 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ As} \cdot 0,368 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 1,58 \cdot 10^{-9} \frac{\text{As}}{\text{m}^2}$$

Man kann hier merken, dass die Polarisation durch die ionische ^{Abt.} viel kleiner als die Orientierungspolarisation. Außerdem ist hier nicht berechnete elektronische Polarisation ~~etwa~~ i.d.R. noch kleiner, deshalb man die Gesamtpolarisation des HCl-Gases näherungsweise zu der statischen Orientierungspolarisation gleichsetzen kann. Es gilt:

$$P_{\text{ges}} \approx 1,8 \cdot 10^{-6} \frac{\text{As}}{\text{m}^2}$$