

Aggregatzustände und Entropie im Würfel-Teilchenmodell

Entropie wird als Verteilung, «Unordnung» oder Anzahl möglicher Anordnungen auf der Teilchenebene verstanden. Die Anordnungen werden auch Konfigurationen oder Mikrozustände genannt. Die Anzahl Anordnungen wird mit dem Symbol Ω bezeichnet.

Unser Würfelmodell stellt Teilchen (Atome, Ionen, Moleküle usw.) dar. Es zeigt in drei Zuständen, wie Teilchenanordnung, Aggregatzustände und Entropie zusammenhängen und wie das mathematisch formuliert werden kann.



Starte mit vier Holzwürfeln und lege sie so, dass sie folgende Zustände darstellen:

Zustand 1

Die Würfel/Teilchen bewegen sich wenig und ziehen sich so stark an, durch Metallbindung, Ionenbindung, ZMK usw., dass sie zusammenbleiben und möglichst viel Kontakt untereinander haben.

1.
 - a. Ordne die Würfel so an, dass sie möglichst viel Kontakt untereinander haben, und zeichne die Anordnung. Welchen Aggregatzustand stellt diese Anordnung dar?
 - b. Auf wie viele Arten können die Würfel so angeordnet werden?

Zustand 2

Die Würfel/Teilchen bewegen sich mehr und ziehen sich immer noch genügend stark an, dass sie locker verbunden sind, sich aber gegenseitig verschieben können.

2.
 - a. Ordne die Würfel so an, dass alle über mindestens ein Oberflächenquadrat Kontakt mit einem zweiten Würfel haben. Zeichne die Anordnung. Welchen Aggregatzustand stellt sie dar?
 - b. Wie viele Möglichkeiten Ω gibt es, drei Würfel so anzuordnen, dass sie über mindestens ein Oberflächenquadrat Kontakt mit einem zweiten Würfel haben?
 - c. Wie viele Möglichkeiten Ω gibt es, vier, fünf... oder alle acht Würfel so anzuordnen?

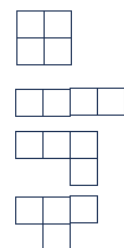
Zustand 3

Die Würfel/Teilchen bewegen sich sehr schnell und sind untereinander nicht mehr verbunden, sie bewegen sich geradlinig, bis sie mit einem zweiten Würfel oder mit einem Teilchen des Behälters zusammenprallen und reflektiert werden. Sie haben einen durchschnittlichen Abstand von ca. 10 cm.

3. Ordne die Würfel gemäss den Angaben oben an und zeichne ein Bild einer möglichen Anordnung. Welchen Aggregatzustand stellt diese Anordnung dar?

Aggregatzustände und Entropie im Überblick

4. Die Anzahl Anordnungen (Konfigurationen) Ω bestimmt die Entropie S . Wie könnte der Zusammenhang aussehen?
5. Es gibt $\Omega = 4$ Möglichkeiten, vier nicht unterscheidbare Würfel zweidimensional so anzuordnen, dass sie mindestens über eine Oberfläche Kontakt mit einem zweiten Würfel haben.
 - a. Wie viele Möglichkeiten gibt es, *zwei* Gruppen A und B von je vier Würfeln so anzuordnen?
 - b. Wie viele Möglichkeiten gibt es, *drei* Gruppen A, B und C von je vier Würfeln so anzuordnen?



Eine kleinere oder grössere Gruppe von Teilchen heisst in der Thermodynamik System, zum Beispiel:

- ein Atom oder Molekül, wenn es z. B. um Lichtabsorption geht,
- ein Stoffgemisch einer chemischen Reaktion, wenn es z. B. um Energieabgabe geht,
- der Mensch, wenn es z. B. um seinen Energiehaushalt geht.

Ein System und seine Umgebung bilden zusammen das Universum.

Eine Entropieänderung ΔS wird auf der Stoffebene gemäss CLAUSIUS mit der übertragenen Wärme ΔQ (in Joule), die bei einer bestimmten Temperatur (T in Kelvin) reversibel fliesst, definiert: $\Delta S = \Delta Q/T$.

Beispiel: Eis schmilzt bei 273 Kelvin und 1 g braucht dazu 2257 J Wärme. Die Entropieänderung beim Schmelzen ist $\Delta S = 2257 \text{ J} / 273 \text{ K} = 8.27 \text{ J/K}$.

Wie hängt diese Entropie (-Änderung) mit den Anordnungen auf der Teilchenebene zusammen?

Je **mehr Anordnungen (Konfiguration, Mikrozustände) Ω** der Teilchen möglich sind, desto grösser ist die **Entropie S** des Systems mit diesen Teilchen. Wie hängen Ω und S zusammen?

Natur lässt sich gut mathematisch beschreiben. Mathematik scheint die Sprache der Natur zu sein. An uns ist es, den richtigen mathematischen Zusammenhang zu finden. Die folgende Tabelle hilft:

Entropie auf Stoffebene und Teilchenebene im Vergleich

	Entropie im Kristall bei 0 K	Entropie mehrerer oder grösserer Systeme
Teilchen	Es gibt eine einfachste Anordnung: $\Omega = 1$	Die gesamte Anzahl Anordnungen bei mehreren Systemen ist das Produkt der Anzahl Anordnungen in den Teilsystemen. $\Omega_{\text{total}} = \Omega_{\text{Teilsystem1}} \cdot \Omega_{\text{Teilsystem2}} \cdot \Omega_{\text{Teilsystem3}} \text{ etc.}$
Stoff	Ein Kristall hat bei 0 K die minimale Entropie. (3. Hauptsatz der Thermodynamik) $S = 0 \text{ J/K}$	Besteht ein System aus mehreren Systemen, ist die Gesamtentropie die Summe aller Entropien der Teilsysteme. $S_{\text{total}} = S_{\text{Teilsystem1}} + S_{\text{Teilsystem2}} + S_{\text{Teilsystem3}} \text{ etc.}$

- Welche mathematische Funktion kann diesen Zusammenhang zwischen Ω und S darstellen, so dass aus einer 1 ($\Omega_{0\text{Kelvin}}$) eine 0 ($S_{0\text{Kelvin}}$) «wird» und aus einem Produkt ($\Omega = \Omega_1 \cdot \Omega_2$) eine Summe ($S = S_1 + S_2$)?
- Welches von beiden hat mehr Entropie?
 - 1 Mol Gas oder 2 Mol Gas? Wie gross ist der Unterschied? Erkläre die Antwort.
 - 1 Mol einer Flüssigkeit oder ein Mol eines Gases? Erkläre die Antwort.
- Nimmt die Entropie zu oder ab, wenn aus gasförmigem Wasserstoff und Sauerstoff gasförmiges Wasser entsteht? Kommentiere die Antwort mit der Reaktionsgleichung.
 - Ändert es etwas, wenn das synthetisierte Wasser in flüssigem Zustand entsteht? Erläutere.

Quelle: Material der American Association of Chemistry Teachers (AAPT)

<https://teachchemistry.org/classroom-resources/connecting-states-to-entropy> (17.12.22)