

Ueber einen schülergerechten Zugang zum Entropiebegriff

Aegidius Plüss, Universität Bern, KL/Gymnasium Bern-Neufeld

1 Die Entropie, eine didaktische Knacknuss

In den letzten Jahrzehnten erschienen im Bereich der Naturwissenschaftsdidaktik zahlreiche methodische Anleitungen zur Einführung des Entropiebegriffes [3][4][5], ein Beweis dafür, dass unter den Naturwissenschaftlern ein Konsens darüber besteht, dass die Entropie ein wichtiges Thema eines modernen Physikunterrichts sein sollte. Immer wieder wird darauf hingewiesen, dass dem Entropiebegriff ebenso grosse Bedeutung zukommt wie anderen, üblicherweise im Physikunterricht behandelten Grössen (Energie, Masse, Kraft, Temperatur, usw.). Es ist aber eine didaktische Herausforderung besonderer Art, ein Unterrichtskonzept zur Einführung des Entropiebegriffs auszuarbeiten, das sich in erster Linie für den höheren Mittel-schulunterricht eignet, sich aber, etwas abgemagert, auch in der Volksschule und, etwas angereichert, auch in der Hochschule anwenden lässt.

Bekanntlich gibt es grundsätzlich zwei verschiedene Zugänge zur Entropie: den thermodynamischen über die Definition $\delta S = \delta Q/T$ und den statistischen über die Definition $S = k \log W$. Beide Ansätze besitzen methodische Vor- und Nachteile: der thermodynamische eröffnet einen einfacheren Zugang zur quantitativen Behandlung von thermodynamischen Prozessen (Wärmekraftmaschinen, chemische Reaktionen); der statistische hingegen ist begrifflich leichter verständlich, lässt sich aber weniger direkt auf quantitative Problemstellungen anwenden. Im Grundlagenunterricht geht es aber vor allem um das tiefere Verständnis als um die rechnerische Umsetzung. Aus diesem Grund ist der hier vorgeschlagene Einstieg über die statistische Definition legitim. Wie sich zeigt, besitzt dieser Zugang zudem fächerübergreifende Aspekte, was in den heutigen Unterrichtsstrukturen als besonders wertvoll eingestuft wird.

2 Der Einstieg

Zu Beginn sollen Schülerinnen und Schüler für die Problematik sensibilisiert und motiviert werden. Dazu wird, wie üblich, an die Vorkenntnisse, insbesondere auch solche aus dem täglichen Leben angeschlossen. Zuerst wird in einem sokratischen Schülergespräch das Begriffspaar „Ordnung-Unordnung“ diskutiert. Gemäss einer Umfrage [1] werden dabei folgende Assoziationen geweckt:

Ordnung
Familie
Musik
Schule
Ruhe
Pflanzen
Sonnensystem

Tod
Gott

Unordnung
Krieg
Manifestation
Zwölftonmusik
Spielzeugkiste

Ruine
Eisbahn

Bienenhaus

3 Beobachtungen zum Zeitpfeil

Die Erfahrungen aus dem täglichen Leben belegen, dass sich viele Systeme im Laufe der Zeit von einem geordneten in einen ungeordneten Zustand begeben. (In moderner Terminologie kann man statt von einem ungeordnetem auch von einem chaotischen Zustand sprechen. Der Chaosbegriff besitzt aber noch andere Aspekte.) Es gibt aber auch zu Ordnung führende Prozesse. Hier stichwortartig einige Beispiele, die sich teilweise auch im Unterricht demonstrieren lassen:

Von Ordnung zu Unordnung (Chaos)

- a) Tintenklecks verteilt sich im Wasserglas.
- b) Zigarettenrauch verteilt sich im Zimmer.
- c) Temperaturunterschied zwischen Kaffee und Tasse gleich sich aus.
- d) Luft in einer Pressluftflasche verteilt sich beim Öffnen im Raum.
- e) Die kinetische Energie eines Fahrzeugs geht beim Zusammenstoß in ungeordnete Wärmeenergie (= kinetische Energie der Atome) über.
- f) Erhitzt man einen Magneten (Ordnung der Elementarmagnete), so verliert er seinen Magnetismus bei einer bestimmten Temperatur (Curie-Temperatur).
- g) Passagiere verteilen sich in der Regel über einen ganzen Eisenbahnwagen.

Von Unordnung (Chaos) zu Ordnung

- a) Musiker formieren sich zu einer Marschmusik-Kapelle.
- b) Die Materie des Kosmos bildet Sterne, Galaxien und Planetensysteme.
- c) Das Leben entstand aus toter Materie.
- d) Aufräumen der Unordnung in einer Küche, im Schulzimmer.
- e) Bei einer Gruppenreise treffen sich alle in demselben Eisenbahnwagenabteil.
- f) Beim Abkühlen von Wasserdampf (Gas) entstehen zuerst Wolken (Flüssigkeit), dann Eis (Festkörper). Offenbar ändern Phasenübergänge den Grad der Ordnung.
- g) In einer viskösen Strömung bilden sich Konvektionszellen (Bénard-Zellen) [2]

Die Diskussion führt zu folgenden Schlussfolgerungen:

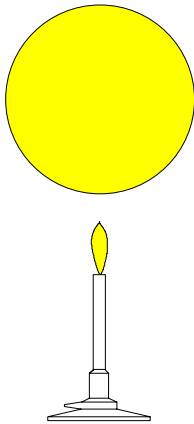
- 1) Prozesse, „die sich selbst überlassen sind“, haben die Tendenz, sich im Laufe der Zeit von Ordnung zu Unordnung zu entwickeln. Die Zeitumkehrung des Prozesses (Rückwärtslaufen des Filmes) scheint nicht möglich zu sein. Solche Prozesse nennen wir **irreversibel**.
- 2) Um Ordnung zu erzeugen, braucht es einen „ordnenden Zwang“. Dieser kann beispielsweise durch eine geeignete Wechselwirkung zwischen den Teilen des Systems oder aber durch einen von Aussen auf das System einwirkenden „Ordnungsführer“ zustande kommen. Man spricht von einer „**Versklavung**“ des Systems.
- 3) Elementare physikalische Prozesse (etwa ein schiefer Wurf), sind zeitumkehrbar.

4) Phasenübergänge können als dramatische Veränderung der Ordnung eines Systems aufgefasst werden.

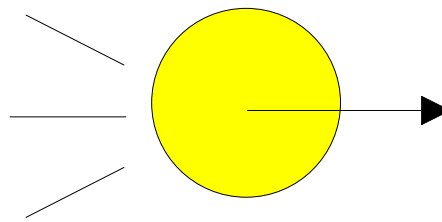
3 Die Ordnung als Qualitätsmerkmal der Energie

Wir betrachten zwei Systeme, in die wir gleich viel Energie hineinstecken:

Plastilinkugel ($c = 50 \text{ J/kgK}$, $m = 0.1 \text{ kg}$)

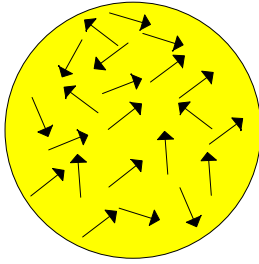


Um $\Delta T = 1 \text{ K}$ erwärmt:
 $\Delta Q = cm\Delta T = 5 \text{ J}$

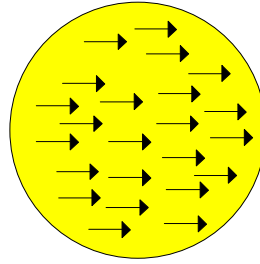


Auf $v = 10 \text{ m/s}$ beschleunigt:
 $W_{\text{kin}} = mv^2/2 = 5 \text{ J}$

Laut einer verbreiteten Schulmeinung wird die Energie als Fähigkeit, Arbeit zu verrichten, aufgefasst. Diese Definition ist jedoch problematisch, da die beiden Systeme mit gleicher Energie ganz unterschiedliche Fähigkeiten besitzen, diese in Arbeit umzuwandeln. (Die bewegte Kugel kann beispielsweise mittels einer noch oben gekrümmten Bahn ihre kinetische Energie in potentielle Energie umwandeln, bei der erwärmten Kugel ist eine Art Dampfmaschine nötig.) Auch ist offensichtlich, dass sich die beiden Energieformen unterschiedlich leicht ineinander umwandeln lassen. So kann die kinetische Energie der bewegten Kugel ohne Schwierigkeiten in Wärmeenergie umgewandelt werden (etwa indem wir die Kugel gegen eine Wand werfen). Das Umgekehrte ist aber offensichtlich nicht leicht und wie sich zeigt, nie vollständig, zu bewerkstelligen. Die Energie besitzt also noch ein „Qualitätsmerkmal“: die kinetische Energie besitzt grosse, die Wärmeenergie kleine Qualität. Dieses Qualitätsmerkmal hängt offenbar mit der Ordnung zusammen. Die Wärmeenergie steckt nämlich in der ungeordneten Bewegung der Atome, die kinetische Energie der Kugel aber in einer geordneten Bewegung der Atome. Noch einmal zeigt sich, dass es leicht ist, ein System von einem Zustand der Ordnung in einen Zustand der Unordnung zu bringen, der umgekehrte Prozess aber grundsätzliche Schwierigkeiten bereitet.



Warmes Plastilin
Kleine Qualität der Energie



Bewegtes Plastilin
Grosse Qualität der Energie

4 Das Wissen des Boltzmannschen Dämons

Im folgenden wird versucht, die beschriebenen Phänomene in Naturgesetze zu fassen. Es handelt sich durchwegs um Aussagen über Vielteilchensysteme, wobei die Teilchenzahl sehr gross (Grössenordnung 10^{23}) ist. Solche Systeme verhalten sich offenbar andersartig als man durch simple Extrapolation der Elementargesetze, welche bei kleinen Systemen gelten, erwartet. (Insbesondere führen zeitumkehrbare Elementargesetze auf ein irreversibles Verhalten grosser Systeme!) Wie sich zeigen wird, hat dies mit fehlender Kenntnis über grosse Systeme zu tun. Um ein Vielteilchensystem exakt zu beschreiben, benötigen wir die Kenntnis seines „Mikrozustandes“, beispielsweise den Ort, die Geschwindigkeit, den internen Energiezustand, usw. jedes einzelnen Teilchens. Wegen der grossen Teilchenzahl ist dies praktisch (und wegen der Unbestimmtheitsrelation sogar grundsätzlich) unmöglich. Wir müssen uns mit einer „makroskopischen“ Beschreibung zufrieden geben. Diese umfasst gewöhnlich die Zustandgrössen Druck, Volumen, Temperatur, und Teilchenzahl. Gehen wir in Gedanken davon aus, dass ein „Boltzmannscher Dämon“ den Mikrozustand kennt, so fehlt uns bei der makroskopischen Beschreibung Information, d.h. wir besitzen gegenüber dem Dämon einen **Informationsmangel**. Dieser lässt sich quantitativ fassen. Wir definieren:

Unter dem Informationsmangel I (in bit) über eine System verstehen wir die Anzahl Fragen mit Ja/Nein-Antwort, die wir (im Mittel und bei optimaler Fragestrategie) stellen müssen, um den Zustand des Systems exakt zu kennen.

Es ist anschaulich einleuchtend, dass der Informationsmangel etwas mit der Unordnung eines Systems zu tun hat: bei einem ungeordneten System benötigen wir sicher mehr Fragen, um seinen Zustand exakt zu kennen als bei einem geordneten.

Wie sich zeigt (siehe Anhang), ist es zweckmässig, einen Proportionalitätsfaktor $k \ln 2$ (Boltzmannkonstante $k = 1.380658 \cdot 10^{-23}$ J/K,) einzuführen. Wir definieren:

Unter der Entropie (in bit) verstehen wir den Informationsmangel I , den wir bei einer makroskopischen Beschreibung des Systems gegenüber jemandem besitzen, der den mikroskopischen Zustand kennt. Für die Entropie in (J/K) setzen wir $S = k \ln 2 i$.

Wir stellen bereits hier fest, dass die Entropie für ungeordnete Systeme grösser als für geordnete ist. Wie wir festgestellt haben, besitzen sich selbst überlassene

Systeme die Eigenschaft, von Ordnung zu Unordnung überzugehen. Wir formulieren daher ein Naturgesetz (**2. Hauptsatz der Thermodynamik**):

In einem abgeschlossenen System nimmt die Entropie zu oder bleibt gleich, nimmt aber nie ab.

5 Die Boltzmannsche Definition der Entropie

Zur Illustration und Auflockerung können wir im Unterricht folgendes Spiel inszenieren: Wir schicken ein Kind A vor die Türe und geben einem von 16 verbleibenden Kindern (numeriert mit 0-15) ein „begehrliches“ Objekt. Welches ist der Informationsmangel, den das ausgesperrte und nun wieder in die Klasse eintretende Kind A gegenüber einem Kind B hat, das weiss, welches die Nummer des Kindes ist, welches das Objekt besitzt. Dabei darf A dem „Dämon“ B gezielte Fragen mit Ja/Nein-Antworten stellen.

Es ist wichtig einzusehen, dass die optimale Fragestrategie nicht darin besteht zu fragen: „Ist es Nummer 0, ist es Nummer 1, usw.“. Vielmehr lässt man die 16 Kinder in eine Reihe stehen und fragt: „Liegt die Karte in der oberen Hälfte, ist die Nummer also 8-15?“ Falls die Antwort „ja“ lautet, so teilt man die obere Hälfte wieder in zwei Teile und fragt mit derselben Strategie weiter. Sonst teilt man die untere Hälfte in zwei Teile und fragt weiter. Diese „binäre“ Suche erfordert genau 4 Fragen. (Dies ist leicht zu beweisen: eigentlich fasst man die gesuchte Zahl als binäre Zahl auf. Diese besitzt 4 binäre Ziffern. Die Strategie besteht darin, die einzelnen Ziffern abzufragen.)

Wir erkennen: Falls ein System W gleichwahrscheinliche Zustände besitzt (wobei W eine Zweierpotenz ist), so gilt für den Informationsmangel I , der jemand besitzt, der nicht weiss, welcher der Zustände realisiert ist (I : logarithmus dualis): $I = \log_2 W$

Dieses Resultat lässt sich mit einer etwas heiklen Ueberlegung auf beliebige natürliche W erweitern. Besitzt ein System also W (gleichwahrscheinliche) Zustände, so gilt $S = k \ln 2^I = k \ln 2 \cdot \log_2 W$, oder

$$S = k \log W$$

Diese fundamentale Beziehung stammt vom grossen Physiker Ludwig Boltzmann (1844-1900) und steht auf seiner Grabinschrift.

Grab von L. Boltzmann

7 Eine Computersimulation zur Entropie

Wir untersuchen exemplarisch das Verhalten eines extrem einfachen eindimensionalen Systems. Dieses besteht aus 80 wechselwirkenden Teilchen, die entweder im Zustand „heiss“ mit der Energie 1 (in irgendeiner Einheit) oder „kalt“ mit der Energie 0 sein können. Das System zerfällt in zwei Teilsysteme 1 und 2 mit je 20 bzw. 60 Teilchen. Zur Zeit $t = 0$ sind alle Teilchen von System 1 heiss und alle von System 2 kalt (Anfangsbedingung). (Man könnte das System als ein Modell eines Stabes zur Untersuchung der Wärmeausbreitung auffassen.) Die Wechselwirkung soll nur zwischen benachbarten Teilchenpaaren erfolgen und wird wie folgt simuliert: zu jedem Zeitschritt wird zufällig ein Teilchenpaar ausgewählt. Sind die beiden Teilchen im gleichen Zustand, so geschieht nichts, sind sie in verschiedenen Zuständen, so werden die Zustände ausgetauscht.

Zur Berechnung der Entropie machen wir folgende Überlegung: Von System 1 oder 2 haben wir die (makroskopische) Kenntnis, dass es n Teilchen besitzt und die Totalenergie k beträgt. Daraus schliessen wir, dass k Teilchen heiss, $n-k$ Teilchen kalt sind. Allerdings besitzen wir keine Kenntnis darüber, welche k der n Teilchen mit den Nummern $1..n$ heiss bzw. kalt sind (mikroskopische Kenntnis des Systems). Unter der Entropie (in bit) versteht man gerade diese uns fehlende Information, d.h. den Informationsmangel, der uns bei nur makroskopischer Betrachtung von der genauen mikroskopischen Kenntnis „trennt“.

Die optimale Fragestrategie besteht nicht darin, der Reihe nach für alle Teilchen $1..n$ zu fragen, ob es heiss sei, da man bereits die Kenntnis besitzt, dass k Teilchen heiss sind. Das folgende Vorgehen ist angebracht:

Jeder Mikrozustand ist eine Realisation, wie man k heisse Teilchen in total n Teilchen anordnen kann. Denkt man sich die n Teilchen von $1..n$ numeriert, so besteht ein Zustand aus der Aufzählung von k Zahlen im Bereich $1..n$ (Beispiel: "heiss sind 2,3,5,7").

Kombinatorisch handelt sich um die Frage, wie oft man k Zahlen aus n Zahlen ohne Berücksichtigung der Anordnung auswählen kann (Kombinationen). Die Kombinatorik liefert dafür: $W = \binom{n}{k}$.

Um den mikroskopischen Zustand zu erfahren, müssen wir herausfinden, welcher der W (gleichwahrscheinlichen¹) Fälle realisiert ist. Daher beträgt die Entropie

$$S = \text{Id } W \quad (\text{in bit})$$

Laut Anhang 2 bestimmt die Temperatur die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Auftretens der verschiedenen Energiezustände im thermodynamischen Gleichgewicht. Nach der Boltzmannverteilung gilt für die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen die Energie E besitzt: $p = 1/Z \cdot \exp(-E/kT)$. Ist die Energie der heißen Teilchen E und die der kalten 0 , so folgt: $p_{\text{hot}} = 1/Z \cdot \exp(-E/kT)$, $p_{\text{cold}} = 1/Z$, bzw. für die (mittlere) Anzahl Teilchen $n_{\text{hot}} = p_{\text{hot}} \cdot n_{\text{tot}}$, $n_{\text{cold}} = p_{\text{cold}} \cdot n_{\text{tot}}$, bzw. $n_{\text{cold}}/n_{\text{hot}} = w_{\text{cold}}/w_{\text{hot}} = \exp(E/kT)$. Die Temperatur lässt sich daher aus

$$T = E / (k \cdot \log(n_{\text{cold}}/n_{\text{hot}}))$$

berechnen. Ist n_{hot} grösser als n_{cold} , so wird die Temperatur negativ, was darauf hinweist, dass das System sich nicht im thermodynamischen Gleichgewicht befindet (beispielsweise ein gepumpter Laser).

Für zwei Systeme 1 und 2, welche Teil eines zusammengesetzten Systems sind, sollen (bei je bekannter Teilchenzahl und Anzahl heißer Teilchen, d.h. ihrer totalen Energien), die Anzahl Realisationen W_1 bzw. W_2 betragen. Die Anzahl Realisationen des zusammengesetzten Systems beträgt dann $W = W_1 \cdot W_2$ (für jede Realisation von System 1 gibt es W_2 Realisationen von System 2).

Für die Entropie des zusammengesetzten Systems gilt also

$$S = \text{Id } W = \text{Id } (W_1 \cdot W_2) = \text{Id } W_1 + \text{Id } W_2 = S_1 + S_2$$

In 3 Fenstern sind während der Simulation das System, die berechneten Werte und die graphische Darstellung der Entropien sichtbar.

Das Rechenfenster

Die Beobachtung der Simulation führt zu folgenden Schlüssen:

- Die heißen Teilchen verteilen sich mehr oder weniger gleichmässig, d.h. das System nähert sich der „Gleichverteilung“. Im Gleichgewichtszustand sind die Temperaturen gleich gross.
- Aus Ordnung wird Unordnung; es gibt aber statistische „Schwankungen“. Es ist offenbar nicht undenkbar, dass sich der geordnete Anfangszustand im Laufe einer sehr langen Simulation wieder herstellt. Der geordnete Zustand ist nicht unmöglich, sondern nur extrem unwahrscheinlich.
- Die Entropie von System 1 nimmt (bis auf statistische Schwankungen) zu und dann wieder ab. Die Entropie des Gesamtsystems nimmt aber (bis

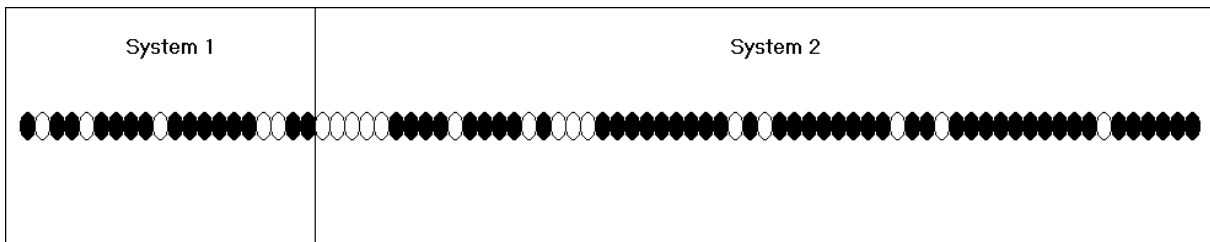
¹ Genau genommen sind im Modell nicht alle Realisationen gleichwahrscheinlich. Die Paarauswahl erfolgt durch zufällige Wahl eines Teilchens und durch zufällige Wahl seines linken oder rechten Nachbarn. Befindet sich das Teilchen am Rand, so wird immer sein im Innern liegender Nachbar ausgewählt, was zu einem - hier vernachlässigten - „Randeffekt“ führt.

Time steps:	98800
Energy system 1:	5
Energy system 2:	15
Entropy system 1:	13.92 bit
Entropy system 2:	45.60 bit
Total entropy:	59.52 bit
Temp. system 1:	25.00
Temp. system 2:	25.00

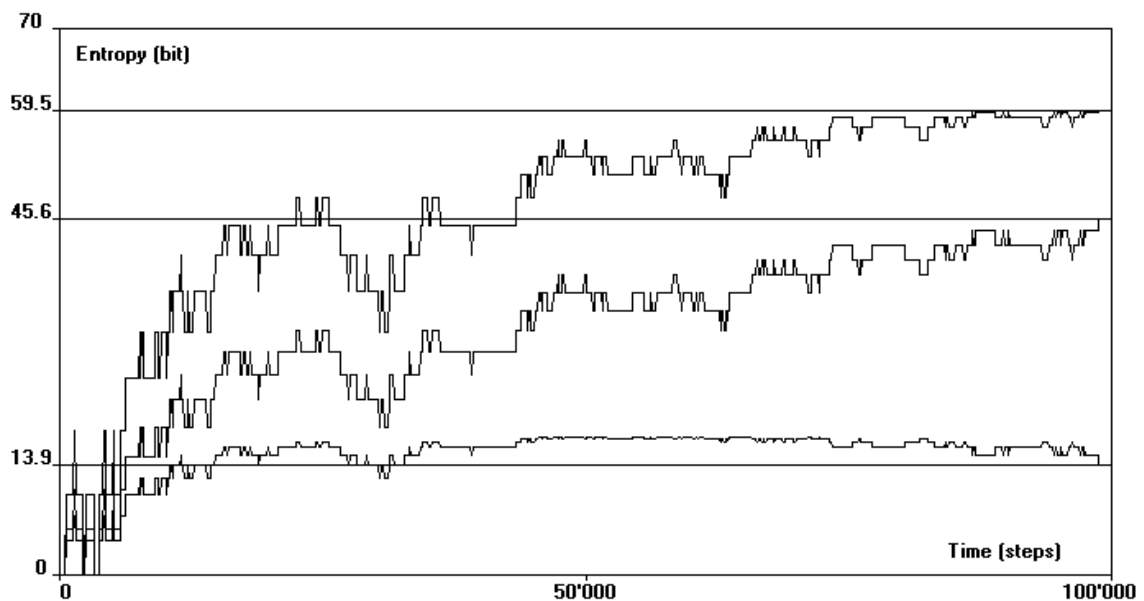
auf statistische Schwankungen) immer zu (2. Hauptsatz).

- Ein „Dämon“, der den mikroskopischen Zustand kennt, könnte das System derart „versklaven“, dass aus Unordnung wieder Ordnung entsteht. In der Simulation wird der Tausch für kalt-heiss-Paare immer zugelassen, in 30% der heiss-kalt-Paare entscheidet sich aber der Dämon, den Tausch nicht auszuführen.

Das Systemfenster



Das Graphikfenster

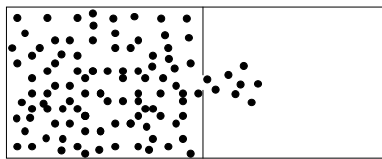


7 Eine Computersimulation zur Boltzmannschen Energieverteilung

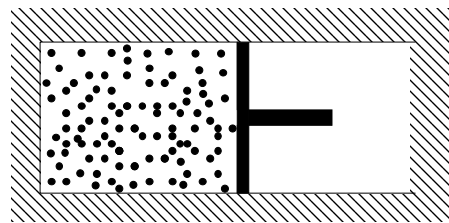
Verallgemeinert man das System mit 80 Teilchen derart, dass man annimmt, dass die Teilchen auf den äquidistanten Energieniveaus E_0, E_1, E_2, \dots liegen können ($E_0 = 0, E_1 = E, E_2 = 2E, \dots$), so lässt sich mittels der folgenden Wechselwirkungsregel die Boltzmannsche Verteilung simulieren: Man wählt - wie vorhin - zufällig ein Teilchen und seinen Nachbarn aus. Falls sich das Teilchen nicht im Grundzustand E_0 befindet, gibt es dem Nachbarn die Energie E ab und fällt damit eine Energiestufe hinunter, währenddem der Nachbar um eine Stufe steigt. Nach wenigen hundert Simulationsschritten wird eine exponentielle Verteilung sichtbar.

Anhang 1: Der Zusammenhang zwischen Statistik und Thermodynamik

Ein ideales Gas besitze die Zustandsgrößen p, V, T, N , wobei $pV = NkT$ gelte. Das Gasvolumen soll einmal durch Ausströmen der Gasteilchen (Prozess A) und einmal durch eine isotherme Expansion in einem Wasserbad (Prozess B) auf das Doppelte vergrößert werden. Anfangs- und Endzustand sind also bei beiden Prozessen dieselben. Der Prozess A ist irreversibel, während Prozess B reversibel ist.



Prozess A



Prozess B

Beim Prozess A verlieren wir Information über die Gasteilchen. Nach dem Prozess kann sich jedes Teilchen mit gleicher Wahrscheinlichkeit in der linken oder rechten Behälterseite befinden, der Informationsmangel steigt daher um N bit. Die damit verbundene Entropiezunahme ist daher $\Delta S = (k \ln 2)N$.

Bei Prozess B wird die Wärmeenergie ΔQ an das Wasserbad abgegeben. Da der Prozess reversibel ist, schreiben wir ΔQ_{rev} und berechnen sie aus der Fläche unter dem p - V -Diagramm:

$$\Delta Q_{\text{rev}} = \int_{V_0}^{2V_0} p dV = NkT \int_{V_0}^{2V_0} \frac{dV}{V} = NkT \ln 2$$

Wegen der günstig gewählten Proportionalitätskonstanten zwischen I und S gilt daher:

$$\frac{\Delta Q_{\text{rev}}}{T} = \Delta S$$

Diese Beziehung besitzt sogar allgemeine Gültigkeit.

Anhang 2: Die Boltzmannsche Energieverteilung

Ein System besitze die Energieniveaux E_0, E_1, E_2, \dots und stehe in Wechselwirkung mit einem Wärmebad. Für die statistische Mechanik - klassisch wie quantenmechanisch - von zentraler Bedeutung ist die Frage, mit welcher Wahrscheinlichkeit sich das System im Energiezustand E_i befindet. Unter sehr allgemeinen Bedingungen zeigt sich, dass diese Energieverteilung exponentiell verläuft, d.h. dass für die Wahrscheinlichkeit p_i , das System im Energiezustand E_i zu finden, die Boltzmannverteilung gilt:

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

(Z ist eine Normierungskonstante). Man kann diese Beziehung auch als die statistische Definition der absoluten Temperatur T auffassen.

Literatur

- [1] G. Schaefer (Hsg.), Information und Ordnung, Aulis (1984)
- [2] Physik und Didaktik, 3, (1989)
- [3] A. Bartels, Zur Begriffsbildung und Bedeutung der Entropie, Praxis der Naturwissenschaften, 1 (1995)
- [4] H.J. Schlichting, Energie, Entropie, Synergie, MNU 46 (1993)
- [5] F. Bader, Entropie - Herrin über Energie und Zeit, MNU 46 (1993)

Bezugsquelle für das Simulationsprogramm (Entropie und Boltzmannverteilung):

Uni Bern, Computerlabor KL, Muesmattstrasse 29, 3012 Bern
Systemanforderungen: Windows 3.1 oder 95, mind. 40486-Prozessor

Anschrift des Autors:

Prof. Dr. Aegidius Plüss, Fährstrasse 16, 3004 Bern
Internet PLUESS@KL.UNIBE.CH