

Das Kellerregalmodell für Entropie und Enthalpie

A. Jungermann

1 Einleitung

Betrachtet man die neuere Entwicklung der Hochschul-lehrbücher, die sich thermodynamischen Fragen widmen, wie z. B. von *Ch. Kittel* u. *H. Krömer* [1] und *P. Atkins* [2], so gewinnt man den Eindruck, dass sich in der Behandlung der Thermodynamik ein Wandel anzubahnen scheint. Offensichtlich gewinnt die statistische Thermodynamik mehr Bedeutung. Bei *Atkins* wird im Teil der klassischen Thermodynamik immer wieder auf die mikroskopische Deutung Wert gelegt und zum Teil auch Abbildungen aus dem statistischen Teil eingestreut. Hand in Hand mit dieser Entwicklung ist zu beobachten, dass der Größe der Entropie mehr Beachtung geschenkt wird und die Gibbs-Helmholtz-Gleichung nicht mehr nur als Beziehung zwischen Energien, sondern nach Umformung als Entropiegleichung interpretiert wird.

Nun hat es auch bisher nicht an Versuchen gefehlt, die Entropie der Anschauung besser zugänglich zu machen: Sei es durch das *Ehrenfestsche Flöhe-und-Hunde-Spiel*, das man ausführlich bei *F. Bader* [3] beschrieben findet, sei es im Rahmen des *Karlsruher-Physikkurses* [4], der die Entropie als mengenartige Größe behandelt oder durch das weitverbreitete Begriffspaar „Ordnung-Unordnung“. Jedoch enthalten alle diese Ansätze immer noch unbefriedigende Aspekte in Bezug auf die anschauliche und schülergerechte Vermittlung. Wo „springen“ im Kochsalzkristall die „Flöhe“ umher, wo liegt bei der Nullpunksentropie des idealen Eiskristalls der „Hund“ (begraben)? Der *Karlsruher Physikkurs* bekennt selbstkritisch, dass die Molwärmen nicht gut erfasst werden. Helfen Kenntnisse über Mikrozustände unseren Schüler/innen, die Arbeitsweise der Dampfmaschine oder des Kühlschranks zu verstehen? *F. Bader* beschreibt in [3] das Begriffspaar „Ordnung-Unordnung“ völlig zu Recht als „vage“ und macht auf Widersprüche aufmerksam. *F. Schlögl* schreibt in einem 1999 erschienen Aufsatz in [5], dass die Gleichsetzung von Entropie mit Unordnung überhaupt nicht haltbar sei. Will man molare Entropien als Stoffeigenschaften verstehen, so helfen informationstheoretische Ansätze wie die von *Schlögl* oder *Salm* [6] kaum weiter. Im didaktischen Sinne erscheint das Entropieproblem immer noch ungelöst. Da dieses Thema zum Lehrplanstoff der gymnasialen Oberstufe gehört, erscheint es gerechtfertigt, einen neuen Weg zu suchen, auf dem diese Größe schülergerecht vermittelt werden kann. In den folgenden Darlegungen werden neben qualitativen, schülergerechten Beschreibungen der Phänomene mit dem Kellerregalmodell auch Überlegungen und Modellrechnungen präsentiert, die als Hintergrundinformationen für die Unterrichtenden und als Begründung für den Einsatz des Modells gedacht sind. Im laufenden Text wird an einigen Stellen explizit daraufhingewiesen.

2 Das Kellerregal als Modell

Die Entropie/Enthalpie-Phänomene sind zu komplex, als dass man sie ohne gezielte Reduktionen im Schulunterricht darstellen könnte. Im Kern geht es darum im Unterricht umzusetzen, dass innere Energie und Enthalpie gequantelt sind. Aufbauend auf dem naturwissenschaftlichen Kenntnisstand der Mittelstufe sind dabei Ergebnisse der Quantenphysik zu vermitteln, ohne im eigentlichen Sinne Quantenmechanik betreiben zu können. Mit einem solchen didaktischen Problem aber hat man als Chemielehrer bereits reichlich Erfahrung: Bespricht man z. B. die energetische Differenzierung der Atomhülle in Klasse 10, so macht man nichts anderes, als dass man erläutert, wie die Energie der Elektronen in der Atomhülle gequantelt ist.

Bei der Verdeutlichung des Entropiephänomens geht es jetzt darum aufzuzeigen, dass die Energiequantelung auch bei den verschiedenen Bewegungsmöglichkeiten der kleinsten Teilchen auftritt, also bei Translation, Rotation und Schwingungen. Als Kenntnisstand aus der Mittelstufe benötigt man, dass man Energie als gespeicherte Arbeit, bzw. dass man innere Energie als gespeicherte Arbeit und/oder gespeicherte Wärme verstehen kann. Wobei man hier Wärme ebenso wie Arbeit als Größe ansieht, die einen Vorgang beschreibt. Somit erscheint die Materie als ein Speichersystem für die innere Energie, und man kann nun das Interesse darauf lenken, wie die Natur diese Speicher strukturiert und wie sie den Energieaustausch organisiert. Dazu ist es hilfreich, auf ein geeignetes Modell zurückgreifen zu können. Ein Gegenstand, der jedem bekannt und vertraut ist, der dazu dient etwas aufzubewahren, also zu speichern, ist beispielsweise ein Regal. Die heute gebräuchlichen Kellerregale sind als Modelle für die Speicher der inneren Energie besonders gut geeignet und zwar wegen der zahlreichen Analogien zwischen Phänomen und Modell:

- Die senkrechten Wände stellen die Energieskala dar. Die Regalbretter entsprechen den Energieniveaus. Sie lassen sich mit variablem Abstand einbauen: äquidistant (analog zu den Niveaus der Schwingungen), bei hohen Energien näher zusammen (analog zu den Niveaus der Rotationen) oder bei höheren Energiewerten weiter auseinander (analog zu den Niveaus der Translationen).
- Es gibt ein kleinstes Rastermaß. In üblichen Kellerregalen lassen sich die Fachböden nicht stufenlos in der Höhe verstellen, d. h. es gibt einen kleinsten Quantensprung.
- Der unterste Fachboden kann auf unterschiedlichen Höhen eingesetzt werden.
- Die Kellerregale gibt es in verschiedenen Breiten. Damit lässt sich ein unterschiedliches Volumen darstellen. Unterschiedliche Volumina (d. h. Ortsunschärfen) führen zu unterschiedlich großen Abständen der Energieniveaus.

3 Die Anwendung des Kellerregalmodells

3.1 Die Entropien der Elemente

Für viele qualitative Darlegungen reicht es aus, wenn man sich der Einfachheit halber auf ein Regal mit äquidistanten Fachböden bezieht. Abb. 1 zeigt vier Anordnungsmöglichkeiten eines Systems aus 9 Teilchen mit einer Gesamtenergie von 18 Energieeinheiten.

Denken wir uns 9 Edelgasatome, so dass wir uns auf die Translationsenergie beschränken können. Gemäß $S = k \ln(W)$ wurde für diese vier Anordnungen der logarithmische Teil der Entropie berechnet, mit

$$W = \frac{N!}{\prod_i n_i!} \quad [1]$$

(W : (statistisches) Gewicht einer bestimmten Verteilung; N : Gesamtzahl der Teilchen; n_i Besetzungszahl des i -ten Niveaus).

Diese Darstellung zeigt eine Art Ehrenfest'sches Flöhe-Hunde-Spiel mit 9 Flöhen und vier verschieden-energiereichen Hunden. Obwohl alle Anordnungen möglich sind, realisiert die Natur nur die Anordnung d) (der energieärmste Hund kann sich am schlechtesten gegen die Flöhe wehren). Diese Anordnung hat das größte Gewicht, und nur diese Anordnung wäre für stoffliche Veränderungen des dargestellten Systems in thermodynamische Überlegungen einzubeziehen. Diese entspricht am ehesten einer exponentiellen Anordnung (z. B. nach der Boltzmann-Statistik), sie hat den größten Entropiewert. Je größer die Teilchenzahl eines Systems, desto unwahrscheinlicher sind Anordnungen, die von der exponentiellen Boltzmann-Verteilung abweichen. Offensichtlich versucht die Natur die vorhandene Energie auf möglichst viele und niedrige Energieniveaus zu verteilen. Hinter tabellierten Entropiewerten verbergen sich stets die Werte der wahrscheinlichsten Anordnungen, Anordnungen mit dem größten Gewicht, mit der größten Anzahl besetzter Niveaus. Da man in der Regel nur mit solchen wahrscheinlichsten Anordnungen zu tun hat, haben die Flöhe-Hunde-Überlegungen nur untergeordnete Bedeutung. Die statistische Thermodynamik hat mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren ein Verfahren entwickelt, mit dem man aus allen *möglichen* Anordnungen die mit dem größten Gewicht ermitteln kann. Das Kellerregalmodell baut auf den Ergebnissen dieser Methode auf und ist in der Lage, diese Ergebnisse in anschauliche Bilder und Vorstellungen umzusetzen:

Wird bei konstanter Teilchenzahl dem Stoff Wärme zugeführt, so wird seine Temperatur erhöht. Im Modell werden die Energiepakete im Regal von unten nach oben umverteilt. Die Abstände zwischen den Fachböden bleiben gleich, und der exponentielle Abfall wird flacher, wie in Abb. 2 dargestellt. Die Gesamtenergie wurde auf eine größere Zahl von Niveaus verteilt.

Bisher kann man festhalten:

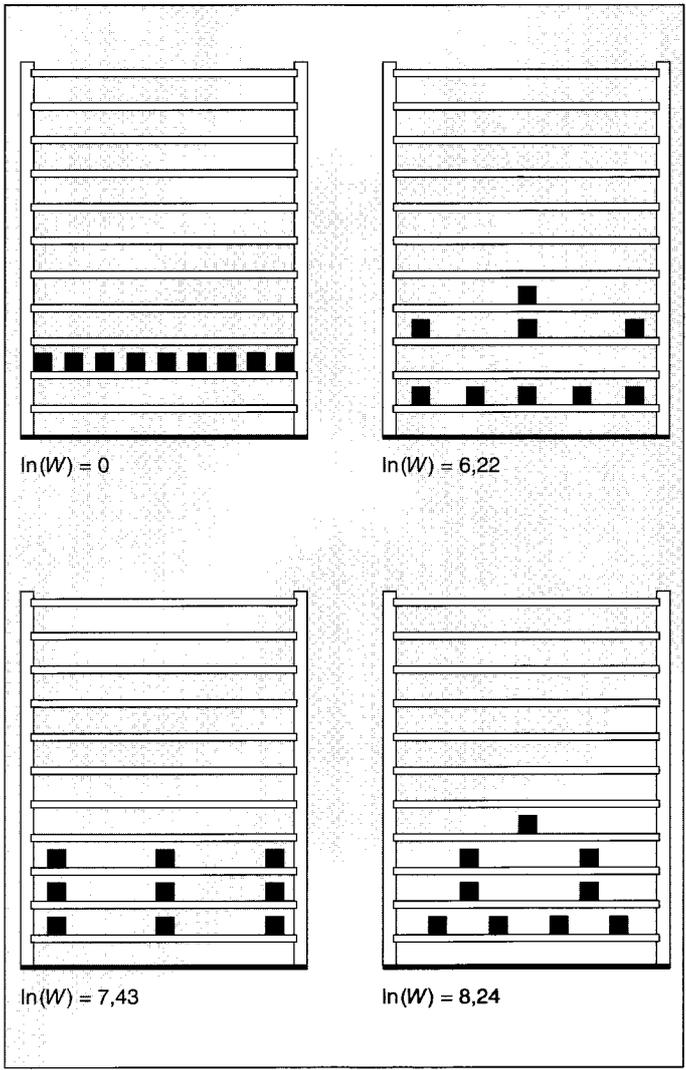
Große Entropiewerte deuten auf eine große Anzahl besetzter Energieniveaus hin. Bei gleicher Temperatur liegen bei einem Stoff mit hoher Entropie die Niveaus dichter beieinander als bei einem Stoff mit geringer Entropie. In manchen Büchern [2], [7] wird dies auch mit dem Begriff Zustandsdichte beschrieben (besser wäre der Begriff Niveaudichte).

• Man kann sich mehrere Regale hintereinandergestellt vorstellen und dann durch Vergleich feststellen, ob die Energieniveaus, die Fachböden, auf gleicher Höhe eingebaut sind. Dadurch kann man entartete Energieniveaus darstellen.

In dieses so beschriebene Speichersystem werden nun Energiepakete eingelagert. Die kleinsten Teilchen eines untersuchten Systems stellen diese Energiepakete dar. Die Erkenntnisse der Quantenmechanik über diese Speichersysteme lehren uns, dass beim Einlagern stets drei *Grundregeln* beachtet werden:

1. Die gesamte Energie, die in den kleinsten Teilchen des Systems gespeichert werden soll, verteilt die Natur stets so, dass möglichst viele, möglichst niedrige Energieniveaus besetzt werden. Eine andere Verteilung auf die Fachböden ist zwar nicht ausgeschlossen, aber extrem unwahrscheinlich.
2. Werden die kleinsten Teilchen durch starke Kräfte auf einem kleinen Raumbereich (kleine Ortsunschärfe) konzentriert, so bedeutet dies, dass die Fachbodenabstände zunehmen (große Energiequantensprünge von einem Fachboden zum anderen).
3. Haben die betrachteten kleinsten Teilchen eine große Masse, so liegen die Fachböden nah beieinander (kleine Energiequantensprünge von einem Fachboden zum anderen).

Abb. 1 a–d: Verschiedene Anordnungen von Energiepaketen im Kellerregal mit jeweils 18 Energieeinheiten bei 9 Teilchen; Abstand der Fachböden: 1 Energieeinheit



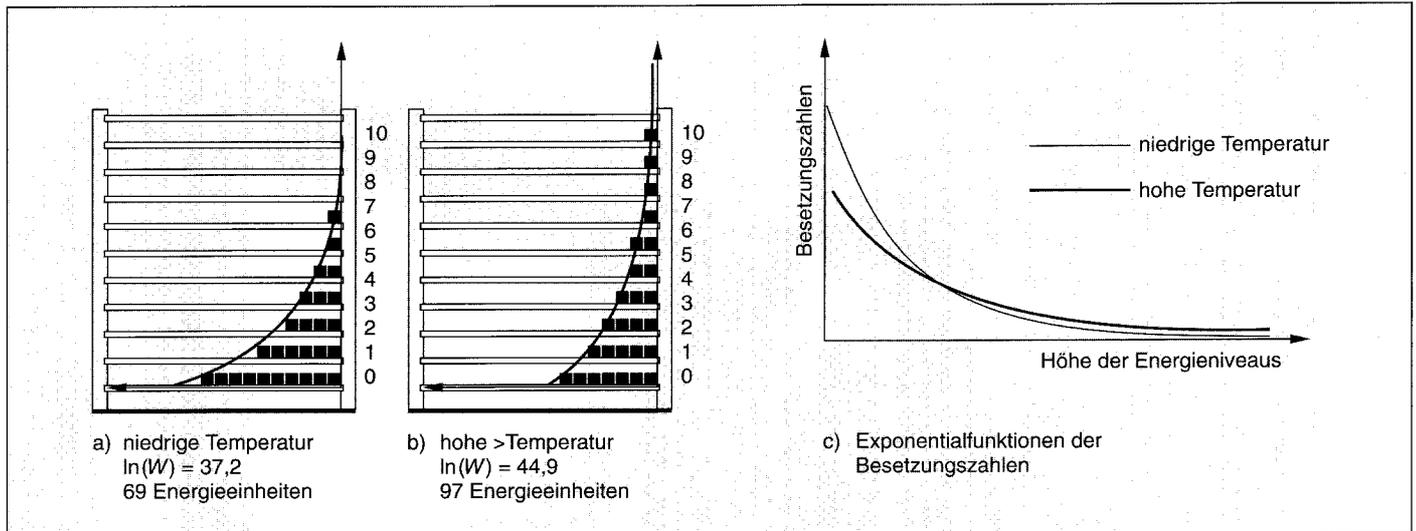


Abb. 2 a–c: Kellerregal mit 27 Teilchen bei zwei verschiedenen Temperaturen und Exponentialfunktion der Besetzungszahlen

Tab. 1: Entropie und Molwärme der Hauptgruppenelemente (links S_{298} , rechts C_{p298} jeweils in Vielfachen der Gaskonstanten R)

H₂ 15,72 3,47								He 15,17 2,50
Li 3,50 2,98	Be 1,15 2,14	B 0,79 1,44	C_{gr} 0,68 1,04	N₂ 23,05 3,50	O₂ 24,67 3,53	F₂(g) 24,31 3,76	F₂(g) 24,39 3,76	Ne 17,60 2,50
Na 6,16 3,40	Mg 3,93 2,99	Al 3,41 2,93	Si 2,26 2,38	P_{weiß} 5,34 2,79	S 3,85 2,72	Cl₂(g) 26,83 4,08	Cl₂(g) 26,83 4,08	Ar 18,62 2,50
K 7,72 3,56	Ca 5,01 3,16	Ga 5,13 3,14	Ge 5,13 3,14	As 4,22 3,00	Se 5,03 2,99	Br₂(l) 18,31 9,10	Br₂(g) 29,52 4,33	Kr 19,74 2,50
Rb 9,15 3,71	Sr 6,69 3,02	In 7,00 3,30	Sn 6,19 3,17	Sb 5,28 3,06	Te 5,99 3,10	I₂(s) 13,97 6,55	I₂(g) 31,36 4,44	Xe 20,45 2,50
Cs 9,96 3,77	Ba 8,05 3,18	Tl 7,75 3,20	Pb 7,80 3,18	Bi 6,84 3,07				

Tab. 1 [2], [8] zeigt ein Periodensystem, in dem für jedes Element der Standardentropiewert (in Vielfachen der Gaskonstanten) angegeben ist. In der *Edelgasgruppe* findet man monoton ansteigende Entropiewerte. Da wir sie (bei Normbedingungen) als ideale Gase ansehen können, gehen wir davon aus, dass keine Kräfte zwischen den Atomen wirken, also verstehen wir die Zunahme der Entropie als eine Abnahme der Abstände zwischen den Energie-, „fachböden“ allein auf Grund zunehmender Masse. (Grundregel 3, s. o.) Betrachtet man z. B. die Gruppe der *Alkalimetalle*, so stellt man fest, dass die Entropiewerte von oben nach unten zunehmen. Im Kellerregalmodell bietet sich folgende Deutung an: Von oben nach unten werden in der Gruppe die Abstände zwischen den Atomen größer, also die Kräfte kleiner, folglich nehmen auch die Abstände zwischen den Fachböden ab.

(Grundregel 2) Die Zunahme der Atommasse wirkt in dieselbe Richtung: die Energieniveaus kommen näher zusammen. Bei gleicher Temperatur besetzen gleichviele Teilchen, z. B. 1 Mol Kaliumatome, mehr Niveaus als 1 Mol Natriumatome. Da beide Effekte (Krafteinfluss und Masseinfluss) in gleicher Richtung wirken, ist in der 1. Haupt-

gruppe die Steigerung der Entropie von oben nach unten deutlich größer als in der Edelgasgruppe, in der nur ein Masseinfluss auftrat.

Die *Halogengruppe* ist in Tab. 1 zweimal dargestellt. In der ersten Version erkennt man am deutlich geringeren Entropiewert des flüssigen Broms, dass offensichtlich zwischen den Brommolekülen im flüssigen Zustand stärkere Kräfte wirken, also nach Grundregel 2 die Abstände zwischen den Niveaus größer sind und folglich sich die Gesamtenergie auf weniger Zustände verteilt (im Vergleich zu gasförmigem Chlor und Brom). Die weitere Abnahme der Entropie – trotz steigender Masse – bei festem Jod deutet auf eine steigende Kraft zwischen den Jodmolekülen im festen Zustand hin.

Die zweite Version dieser Gruppe zeigt alle gasförmigen Halogene im Vergleich. Die Zunahme ist monoton ansteigend und im Wesentlichen zu verstehen durch die zunehmende Masse – analog zu den Edelgasen. Die größeren Zahlenwerte im Vergleich zu den Edelgasen zeigen jedoch, dass die Halogenmoleküle noch zusätzlich an weiteren Kellerregalen beteiligt sind, nämlich Regalen, in denen sie ihre Schwingungs- und Rotationsenergie speichern, also mehr besetzte Niveaus, mehr Entropie haben.

3.2 Die Temperatur als intensive Größe

Grundsätzliches über intensive Größen ist in [9] ausführlich dargestellt. Deshalb sei hier in Kürze nur das Wichtigste zusammengefasst. Intensive Größen beschreiben eine extensive Eigenschaft eines Objekts so, dass entsprechende Größewerte nicht von dem Umfang, von der Extension, des betrachteten Objekts abhängen. Beispiel: Die extensive Eigenschaft „Masse“ des Objekts „Aluminiumportion“ wird durch die intensive Größe „Dichte“ (genauer: Massendichte) so beschrieben, dass der Größewert der Dichte nicht vom Umfang, von der Extension, des untersuchten Objekts „Aluminiumportion“ abhängt. Man erreicht dies dadurch, dass man den Quotienten (Differentialquotienten [9], [10]) aus extensiver Größe und Extension bildet:

Die Dichte gibt damit an, wie intensiv ein bestimmter Raum mit Masse angefüllt ist. Jede intensive Größe bezieht sich auf eine extensive Qualität und auf ein Definitionsgebiet, innerhalb dessen die entsprechende Intensität der betreffenden Qualität vorliegt.

$$\text{Dichte (Massenintensität)} = \frac{\text{Masse (extensive Größe)}}{\text{Volumen (Extension, Definitionsgebiet)}}$$

Analoge Überlegungen sind in Bezug auf die intensive Größe „Temperatur“ durchzuführen. Als thermodynamische Definition der Temperatur wird üblicherweise [2], [10] der Differentialquotient:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_v = \left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_p \quad [2]$$

angegeben.

Man erkennt leicht, dass die extensive Größe, auf die sich die Temperatur bezieht, die innere Energie ist. Schwieriger erscheint es zu verstehen, dass offensichtlich die Extension der inneren Energie durch die Entropie dargestellt wird. Da mit der Größe „Energie“ Zustände beschrieben werden, muss man also nach einer Größe suchen, die die Extension eines Zustandssystems beschreibt. Es bietet sich an, die Zustandsextension mit der Anzahl der besetzten quantenphysikalischen Zustände des Systems anzugeben, d. h. mit der Anzahl der besetzten Energieniveaus. Allerdings findet man dabei, dass nicht jedes besetzte Energieniveau gleichviel zur Extension beiträgt. Diesem Problem wird dadurch begegnet, dass man anstatt der Anzahl der Niveaus (der Zustände) die sogenannte molekulare Zustandssumme q angibt, bei der die energetisch niedrigeren Zustände mit höherer Gewichtung eingehen, da sie normalerweise stärker besetzt sind und damit mehr zur Extension beitragen. Die molekulare Zustandssumme hat die allgemeine Form:

$$q = \sum_i e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}$$

(ϵ_i : Energie des i -ten Niveaus; i : Quantenzahl; k : Boltzmann-Konstante; T : Temperatur) Mit Hilfe der so definierten Zustandssumme erhält man eine Angabe über die Anzahl der besetzten Energiezustände (Energieniveaus). Dies soll am Beispiel der Zustandssumme $q(x)$ für die eindimensionale Translation in x -Richtung näher ausgeführt werden:

$$q(x) = \sum_i e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}} \quad \text{mit } \epsilon_i (\text{Translation}) = \frac{h^2}{8m\Delta x^2} \cdot i^2$$

(Δx : Größe des Raums in x -Richtung für Translationsbewegungen des Teilchens mit der Masse m ; h : Plancksche Konstante)

$$q(x) = \sum_i e^{-\frac{(i^2-1)\epsilon_i}{kT}} \quad \text{mit } \epsilon = \frac{h^2}{8m\Delta x^2} \quad [3]$$

Bei dieser Schreibweise werden die Energien aller Niveaus auf das unterste Niveau ($i=1$) bezogen (zur Herleitung s. [2] S. 635). Aus Tab. 2 lassen sich (für ein Beispiel, auf das unten noch näher eingegangen wird) die einzelnen Summenterme und die Zustandssumme $q(x, T)$ ablesen.

Die Reihe konvergiert bei 300 K nach etwa 10–15 Niveaus beim Summenwert von 3,296. Teilt man den Zahlenwert für das Niveau mit $i = 3$ ($6,1622\text{E-}01$) durch den Summenwert 3,2960, so erhält man 0,187, was besagt, dass 18,7 % der Teilchen (Quantenobjekte) sich in diesem Niveau befinden. Auf analoge Weise errechnet man für das 6. Niveau 3,6 %, und es wird deutlich, dass die verschiedenen Niveaus unterschiedlich viel zur Extension beitragen. Ist die Anzahl der Quantenobjekte bekannt, so lassen sich alle Besetzungszahlen berechnen, und damit erhält man Informationen über die Extension der inneren Energie des untersuchten Systems.

Aus der obigen Beziehung [3] erkennt man, dass bei großer Masse die Energieniveaus dicht beieinander liegen (Grundregel 3), da die Masse bei ϵ im Nenner eingeht. Ohne das hier näher auszuführen, sei angemerkt, dass bei Rotationen und Schwingungen Grundregel 3 ebenfalls gilt, auch wenn

Tab. 2: Entropie von Silber berechnet aus der Translationszustandssumme

Konstanten		
Planck. Konst.	$h/[\text{Js}] =$	6,626E-34
Boltzmann K.	$k/[\text{J/K}] =$	1,3806E-23
Gaskonstante	$R/[\text{J/Kmol}] =$	8,31451
Atommasse	$m(\text{Ag})/[\text{kg}] =$	1,79127E-25
Variablen		
Temperatur	$T/[\text{K}] =$	300
Unschärfe(T)	$\Delta x(T)/[\text{m}] =$	3,4961E-11
	$\epsilon = h^2/(8m\Delta x^2)/[\text{J}] =$	2,5066E-22
	$\epsilon/kT =$	0,06052
i^2-1	Summenterm	$q(x,T)$
0	1,0000E+00	1,00000
3	8,3397E-01	1,83397
8	6,1622E-01	2,45019
5	4,0341 E-01	2,85360
24	2,3399E-01	3,08759
35	1,2025E-01	3,20784
48	5,4753E-02	3,26260
63	2,2088E-02	3,28468
80	7,8948E-03	3,29258
99	2,5001E-03	3,29508
120	7,0147E-04	3,29578
143	1,7438E-04	3,29596
168	3,8407E-05	3,29599
195	7,4949E-06	3,29600
224	1,2958E-06	3,29600

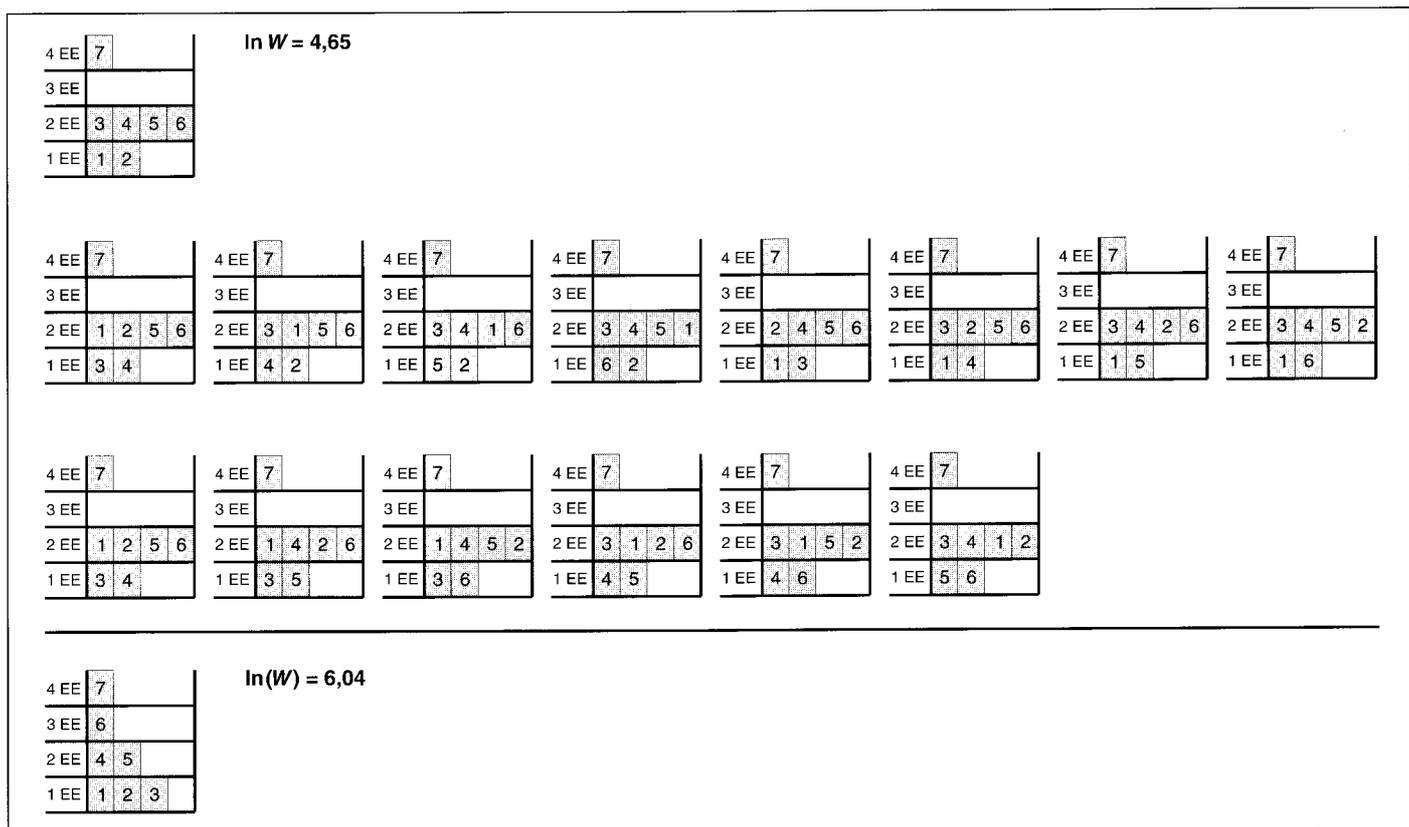


Abb. 3: Anzahl der besetzten Niveaus und Anzahl der erreichbaren Zustände; 7 Teilchen mit 14 Energieeinheiten

dort die Beziehungen für ϵ_i anders lauten. Weiterhin geht aus der Beziehung [3] hervor, dass der kleinstmögliche Wert für $q(x)$ 1 beträgt: alle Quantenobjekte sind im untersten Niveau ($i = 1$). Je größer die Zustandssumme desto größer die Anzahl der besetzten Niveaus, desto größer die Extension. Wird die Teilchenzahl vergrößert, so besetzen natürlich mehr Teilchen auch mehr Niveaus, aber die prozentuale Verteilung auf die Niveaus ist bei gleicher Zustandssumme gleich.

Um zu sehen, wie sich diese Extensions-Eigenschaft der Zustandssumme auf die Entropie überträgt, soll im Folgenden der Begriff der „erreichbaren Zustände“ erläutert werden (als Hintergrundwissen für die Unterrichtenden). Wir betrachten in Abb. 3 ein Kellerregal mit 7 (Edelgas)Teilchen, die einen Energieinhalt von 14 Energieeinheiten tragen. Die Verteilung ist hier nicht die optimale, sondern nur eine der möglichen Anordnungen, sie stellt einen möglichen Gesamtzustand dar. In der Abbildung sind die Teilchen durchnummeriert, um zu zeigen, dass bei Vertauschung eines oder mehrerer Teilchen wieder ein Gesamtzustand entstehen kann, der sich chemisch völlig gleich verhält, weil die Verteilung auf die einzelnen Niveaus gleich ist. In der ersten Zeile ist das Ausgangssystem dargestellt. In der Zeile darunter hat jeweils ein Teilchen seinen Platz gewechselt, in der Zeile darunter jeweils zwei Teilchen. Dies sind bisher gerade fünfzehn chemisch äquivalente Gesamtzustände. Im höchsten besetzten Niveau befindet sich Teilchen 7, aber es können an dieser Position auch alle andern Teilchen vorliegen, und dann kann man die obigen Vertauschungen wieder mit den restlichen Teilchen durchführen. So erhält man insgesamt $7 \text{ mal } 15 = 105$ chemisch identische Gesamtzustände. Dies bezeichnet man als die Anzahl der erreichbaren Zustände und gibt dieser Anzahl das Symbol W . Den Zahlenwert von 105 kann man natürlich auch mit der obigen Beziehung [1] errechnen, wenn

man 7 Teilchen auf drei Niveaus verteilt. Aus den bisherigen Darlegungen wird deutlich, dass es nicht geschickt ist, dass die Bezeichnung „Zustand“ für zwei verschiedene Sachverhalte angewendet wird: In der *Zustandssumme* q bezieht er sich auf die Energieniveaus, während bei den „erreichbaren *Zuständen*“ Gesamtanordnungen gemeint sind. Für die Anzahl der erreichbaren Zustände findet man in der Literatur auch Ausdrücke wie kanonische Zustandssumme oder Systemzustandssumme. Zur deutlichen Unterscheidung wird in dieser Arbeit für die molekulare Zustandssumme das Symbol q und für die kanonische Zustandssumme das Symbol Z verwendet. In der beschriebenen Anordnung sind nur drei Niveaus besetzt, und dies ist bei der vorgegebenen Gesamtenergie und der vorgegebenen Teilchenanzahl nicht die optimale Verteilung. Dieses System wäre nicht stabil, es würde sich umordnen zu dem in der untersten Zeile von Abb. 3 dargestellten Kellerregal. Dieses ist das optimale und damit stabile System mit vier besetzten Niveaus und 14 Energieeinheiten bei 7 Teilchen. Die Anzahl der erreichbaren Zustände für 7 Teilchen auf 4 Niveaus bei gleicher Gesamtenergie errechnet man nach Beziehung [1] zu 420. Die Besetzungszahlen im Kellerregal verlaufen (monoton) fallend, wie man es auch bei einer Boltzmann-Verteilung erwarten würde.

Halten wir fest: Mit der Zustandssumme q , der Teilchenanzahl und der Gesamtenergie erhält man die Anzahl der besetzten Energieniveaus der stabilen, optimalen Verteilung. In dieser Verteilung wird die Anzahl W der „erreichbaren Zustände“ maximal. Der natürliche Logarithmus dieser Zahl beschreibt die Entropie des Systems. Somit ist in der Entropie die Information über die Extension der inneren Energie enthalten.

Für den Unterricht in der gymnasialen Oberstufe reicht es nach allen Erfahrungen aus, wenn man sich darauf beschränkt, folgende Sachverhalte zu vermitteln:

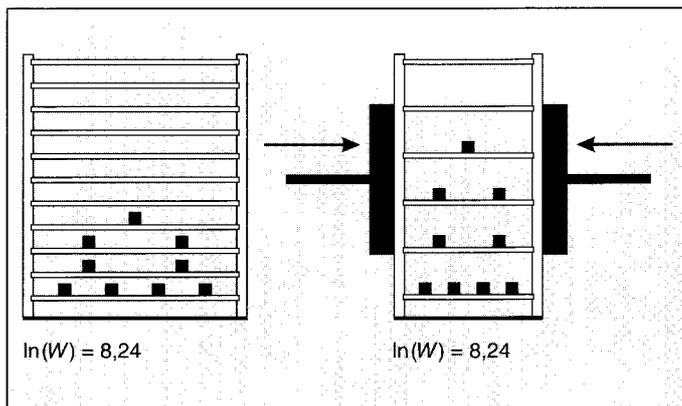


Abb. 4: Auswirkungen von Kompressionsarbeit dargestellt im Kellerregalmodell

Tab. 3: Entropie und Molwärme einfacher Verbindungen (links S_{298} , rechts $C_{p,298}$, jeweils in Vielfachen der Gaskonstanten R)

7,00	LiCl	6,13	10,82	BeCl ₂	34,88	7,55	BCl ₃ (g)
8,68	NaCl	6,07	10,87	MgCl ₂	8,59	13,31	AlCl ₃ (s)
9,93	KCl	6,17	12,58	CaCl ₂	8,73	20,38	GaCl ₃
11,06	RbCl	6,12	14,07	SrCl ₂	9,51		InCl ₃
12,08	CsCl	6,33	14,88	BaCl ₂	9,04		TlCl ₃

1. Innere Energie und Enthalpie sind gequantelt.
2. Die Natur versucht beim Speichern von innerer Energie diese stets auf möglichst viele, möglichst niedrige Niveaus zu verteilen.
3. Dabei bildet sich eine monoton (exponentiell) abfallende Funktion der Besetzungszahlen.
4. Die Entropie ist ein Maß für die Anzahl der besetzten Energieniveaus eines (stabilen) Systems.

Wenden wir diese Sichtweise auf zwei Beispiele an:

1. Die konstante Temperatur beim Sieden (konstanter Quotient in Beziehung [2]) deutet an, dass die innere Energie (Zähler) im gleichen Maß vergrößert wird wie die Entropie (Nenner). Die innere Energie nimmt zu, die Anzahl der besetzten Niveaus im Gaszustand ebenfalls. (Grundregel 2: keine Kräfte zwischen den Teilchen, also kleine Niveaubstände)
2. Beim Aufpumpen eines Fahrradreifens erwärmt sich die Luftpumpe. Die Luft im Hubraum der Pumpe wird komprimiert. Die mechanische Arbeit (Kompressionsarbeit), die dabei an der Luft verrichtet wird, erhöht die innere Energie dieser Luft. Der Raum für jedes Luftteilchen wird kleiner, also wird nach Grundregel 2 der Abstand der Fachböden im Kellerregal größer, aber die Besetzungszahlen der Niveaus und damit die Entropie bleiben gleich. Die größere innere Energie (Zähler) bei gleicher Entropie (Nenner) führt zu der höheren Temperatur. Dies wird in Abb. 4 verdeutlicht. Dass die höhere Temperatur nicht oder nur unwesentlich von der Reibung des Pumpenkolbens herrührt, kann man leicht dadurch überprüfen, dass man die gleiche Anzahl von Pumpenstößen in die freie Luft ausführt und dabei eine deutlich geringere Erwärmung feststellt.

3.3 Die Molwärmen

3.3.1 Die allgemeine Betrachtung

Welche Rolle die Molwärme bei einem Erwärmungsvorgang (Intensitätszunahme) spielt, soll hier zunächst an dem Analogiebeispiel Masse/Volumen/Dichte verdeutlicht und die zu erwartende Tendenz herausgearbeitet werden. Vergleichen wir zwei Stoffportionen gasförmigen Stickstoffs mit den unterschiedlichen Extensionen (Volumina) 5 l und 10 l bei 298 K und 1000 hPa. Beide haben eine Dichte von 1,13 g/l. Fügt man zu beiden eine jeweils gleich große Portion der extensiven Größe Masse (z. B. 1,00 g) hinzu, so erfolgt in beiden Systemen eine Intensitätszunahme. Aber in der Stoffportion mit der kleineren Extension steigt die Intensität auf 1,33 g/l, während im anderen Fall die Dichte nur auf 1,23 g/l wächst. Tendenziell wird man also erwarten, dass die Intensitätszunahme im System mit der größeren Extension kleiner ausfällt. Ein genau solches Verhalten aber finden wir bei einem Erwärmungsvorgang, wenn wir zu zwei gleich großen Stoffportionen mit unterschiedlichen Molwärmen einen jeweils gleich großen Betrag an extensiver Wärme δQ zuführen. Es gilt:

$$\frac{\delta Q}{n} = c \cdot \Delta T$$

Wenn die linke Seite konstant ist, so fällt die Temperaturzunahme ΔT , also die Intensitätszunahme, umso geringer aus, je größer die Molwärme c ist und umgekehrt. Ein Blick auf die Tab. 3 [2], [8] zeigt aber, dass bei großer Molwärme c auch die Entropie, also die Extension der inneren Energie groß ist. Die Chloride der Erdalkalimetalle haben eine größere Molwärme als die Chloride der Alkalimetalle und im Durchschnitt haben die Chloride der 2. Hauptgruppe auch eine größere Entropie als die der 1. Hauptgruppe. Im Stoff mit großer Molwärme, großer Entropie sind viele Energieniveaus, Fachböden im Kellerregal, besetzt. Zugeführte Energie muss auf viele Niveaus verteilt werden, damit auch bei größerer Gesamtenergie sich wieder der wahrscheinlichste Zustand mit exponentieller Verteilung einstellt, folglich ergibt sich nur eine geringe Intensitätszunahme. Soweit ergibt sich eine erste qualitative, schülergerechte Beschreibung. Eine detailliertere Deutung folgt weiter unter im Abschnitt 3.3.3.

Molwärme und Entropie sind in engem Zusammenhang zu betrachten und es ist zu berücksichtigen, wie beide von der Zustandsumme, bzw. von der Besetzung der Fachböden im Kellerregal, abhängen. Der enge Zusammenhang wird ersichtlich aus den Beziehungen:

$$\frac{S}{nR} = \ln(Z^{\frac{1}{N}}) + T \cdot \left(\frac{\partial \ln(Z^{\frac{1}{N}})}{\partial T} \right)_V \quad [4]$$

$$\frac{C_p}{nR} = T \cdot \left(\frac{\partial \left(\frac{S}{nR} \right)}{\partial T} \right)_p \quad [5]$$

(n : Stoffmenge; N : Teilchenanzahl; R : Gaskonstante; Z : kanonische Zustandssumme; V : Volumen; p : Druck) Erkennbar wird, dass in die Molwärme C_p die Änderung der Entropie eingeht, und dass sich beide auf die kanonische Zustandssumme Z [2] zurückführen, bzw. daraus errechnen lassen. Der Zusammenhang zwischen Zustandssumme q , kanonischer Zustandssumme Z und Entropie

wird im folgenden Beispiel näher ausgeführt. Allgemein sei dazu vorweggeschickt, dass man die Entropien, bzw. die Anzahl der besetzten Niveaus von realen Stoffportionen nicht mehr nach den oben geschilderten Abzählverfahren berechnen kann, sondern dass die statistische Thermodynamik Wege gefunden hat, wie man diese Anzahlen aus Atommassen, Bindungsabständen und den zwischen den Atomen wirkenden Kräften berechnet. Diese Rechenwege führen über die kanonische Zustandssumme. Der Bedeutungsinhalt der Größe Entropie bleibt aber, dass sie ein Maß für die Anzahl der besetzten Energieniveaus darstellt.

3.3.2 Die Molwärme von Silber

Im Rahmen dieser Arbeit wurde versucht, die Funktionen $S(T)$ und $C_p(T)$ aus einem einfachen und plausiblen Modellansatz zu berechnen, und zwar einmal für das Element Silber und weiterhin für die Ionenverbindung NaCl. (Die folgenden Rechnungen stellen wieder Hintergrundinforma-

tionen dar.) Dieser Ansatz geht von einer Vorstellung aus, die man in vielen Lehrfilmen und Unterrichtshilfen [11] in Bildern umgesetzt findet: Jedes Teilchen befindet sich in einem Käfig von umgebenden Atomen oder Ionen und bewegt sich dort in einem kleinen Bereich "zitternd hin und her". Quantenphysikalisch lässt sich das so umsetzen: die Atome bzw. Ionen haben im Kristall einen Ortsunschärfebereich, in dem sie sich wie Teilchen im Potentialkasten verhalten, also Translationen ausführen, die wegen der engen Kastengrenzen wie Hin- und Herbewegungen aussehen. Die Teilchen sind im Kristallgitter festgehalten, für jedes Teilchen könnte man im Prinzip individuelle Kristallkoordinaten angeben, man bezeichnet die Teilchen als unterscheidbar. In einem solchen Fall lautet der Zusammenhang zwischen kanonischer und molekularer Zustandssumme [2]:

$$Z = q^N \text{ bzw. } Z^N = q = q(x) \cdot q(y) \cdot q(z) = (q(x))^3 = q(V) \quad [6]$$

(V: Volumen des Unschärfebereichs; $q(x)$, $q(y)$, $q(z)$: eindimensionale molekulare Zustandssummen)

Da es sich beim Silber um ein kubisches Kristallsystem handelt, sind die eindimensionalen Zustandssummen in den drei Raumrichtungen gleich, so dass man die dreidimensionale Zustandssumme als dritte Potenz der eindimensionalen erhält, die hier mit $q(V)$ bezeichnet wird. Mit Beziehung [6] verändert sich Beziehung [4] zu:

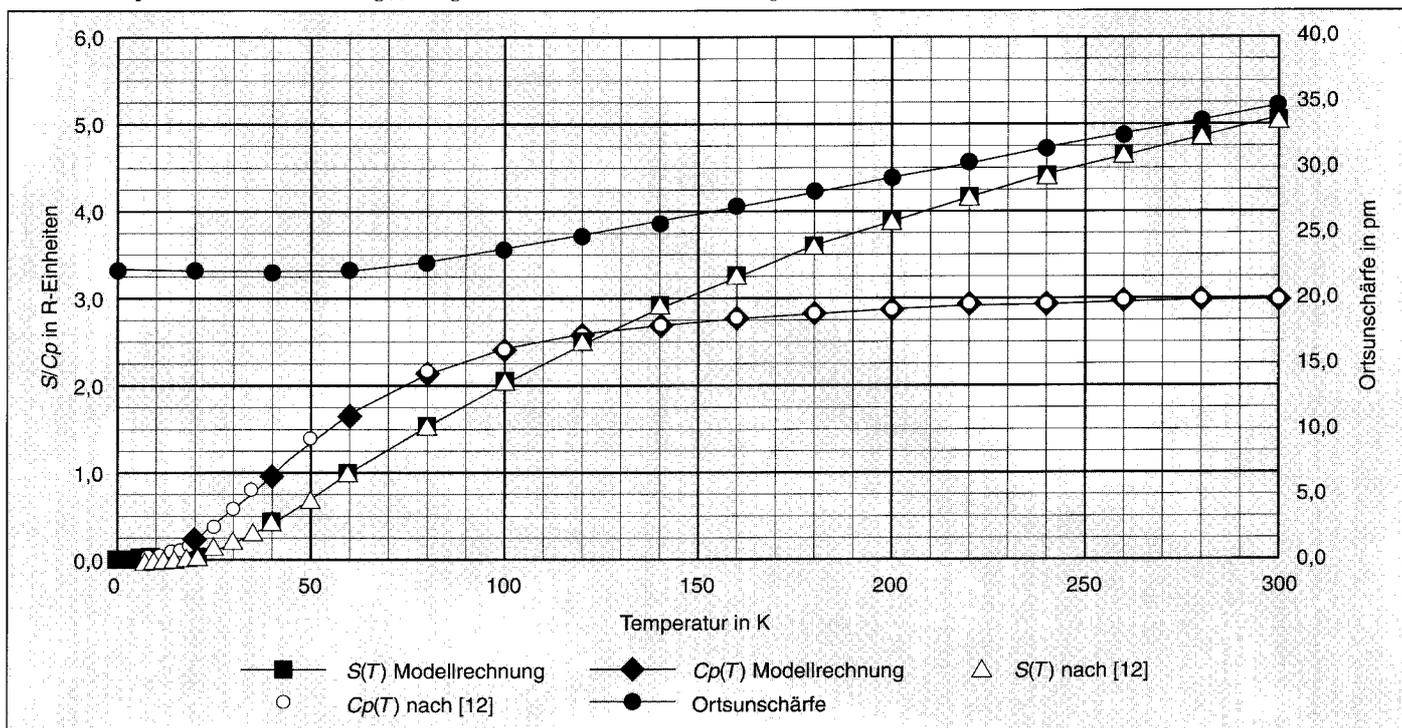
$$\frac{S}{nR} = \ln(q(V)) + T \cdot \left(\frac{\partial \ln(q(V))}{\partial T} \right)_V \quad [4.1]$$

Der Gang der Modellrechnung ist im Wesentlichen aus Tab. 2 nachvollziehbar. Da man zur Berechnung der Entropie außer der Zustandssumme (bzw. $\ln(q)$) auch noch den Differentialquotienten $d(\ln q)/dT$ benötigt, wurden zusätzlich die Zustandssummen bei zwei weiteren Temperaturen ($\Delta T = \pm 0,1K$) und der Differentialquotient durch den ent-

Tab. 4: Molwärme von Silber berechnet aus der Entropie der Modellrechnung

T/[K]	$\Delta x/[m]$	$S/(nR)$	$C_p/(nR)$
0	2,2128E-11	0,0000	0,00000
20	2,2150E-11	0,0264	0,21800
40	2,2172E-11	0,4360	0,96331
60	2,2203E-11	0,9897	1,66800
80	2,2872E-11	1,5480	2,13900
100	2,3828E-11	2,0592	2,42050
120	2,4907E-11	2,5162	2,59800
140	2,6042E-11	2,9252	2,71530
160	2,7188E-11	3,2920	2,80000
180	2,8342E-11	3,6252	2,86335
200	2,9479E-11	3,9283	2,91100
220	3,0609E-11	4,2074	2,95075
240	3,1718E-11	4,4648	2,98020
260	3,2811E-11	4,7041	3,00950
280	3,3890E-11	4,9278	3,03940
300	3,4961E-11	5,1383	5,27979

Abb. 5: Entropie und Molwärme von Ag(s) Vergleich: Messwerte/Modellrechnung



sprechenden Differenzenquotienten angenähert. Das Vorgehen im Einzelnen gestaltete sich so, dass eine Temperatur vorgegeben wurde und dann die Ortsunschärfe Δx solange variiert wurde, bis der Messwert der Entropie mit genügender Genauigkeit erreicht war. Dies wurde für alle Temperaturen von 0 bis 300 K im Abstand von 20 K wiederholt. Das Ergebnis dieser Rechnung ist eine Funktion $\Delta x(T)$, die mit abnehmender Temperatur weitgehend linear abnimmt und damit das Einfrieren der Teilchenbewegung nachvollzieht. Nachdem zunächst die $S(T)$ -Funktion aus der obigen Beziehung [4.1] berechnet wurde, konnte daraus die $C_p(T)$ -Funktion nach der obigen Beziehung [5] ermittelt werden. Tab. 4 macht diesen Rechengang deutlich: Der Differentialquotient wurde wieder durch den Differenzenquotienten ersetzt. So ergibt sich z. B. der C_p -Wert bei 100 K:

$$C_p(100\text{ K}) = 100\text{ K} \cdot \frac{2,5162 - 1,5480}{120\text{ K} - 80\text{ K}} = 2,4205$$

Die Abb. 5 zeigt die Funktionen für Silber und macht deutlich, dass dieser einfache Modellansatz offensichtlich die Messwerte [12] über einen weiten Temperaturbereich hin sehr gut reproduzieren kann. Besondere Aufmerksamkeit verdient dabei die Funktion $\Delta x(T)$. Sie stellt die Bewegungsamplitude der „zitternden Hin- und Herbewegung“ dar. Ihr Wert beträgt bei 300 K etwa $\pm 3\%$ des umgebenden Oktaederkäfigs. Dieser Wert ist zu vergleichen mit Werten, die man aus spektroskopischen Messungen erhält. Der Verlauf der Kurve für $T \rightarrow 0\text{ K}$ ist im weiten Bereich linear, wodurch das Einfrieren der Gitterschwingung zum Ausdruck kommt, und ihre Steigung flacht für $T \approx 0\text{ K}$ ab, was mit dem dritten Hauptsatz im Einklang ist.

3.3.3 Die Molwärme von Kochsalz

Die Modellrechnung zum Kochsalz wurde insofern variiert, dass für die Natrium-Ionen wegen ihrer geringeren Masse eine größere Ortsunschärfe angesetzt wurde als für die Chlorid-Ionen. Grundgedanke dabei war, dass im Kochsalzkristall Natrium und Chlor gegeneinander schwingen und dass – bei ortsfestem Gesamtkristall – der Massenmittelpunkt erhalten bleibt (Impulssatz). Deshalb wurde in den Modellansatz eingebracht, dass sich die Unschärfebereiche der beiden Ionensorten umgekehrt wie ihre Massen verhalten. So erbringt die Rechnung für beide Ionensorten eigene $\Delta x(T)$ - und $S(T)$ -Funktionen, aus denen auch zwei $C_p(T)$ -Funktionen ermittelt werden konnten. Die Ergebnisse der Modellrechnung und die Messwerte [13] sind in Abb. 6 a, b dargestellt.

Folgende qualitative, schülergerechte Interpretation bietet sich an: Im Kochsalz stellen Kationen- und Anionengitter zwei Kellerregale mit unterschiedlich dicht liegenden Fachböden dar. Die Grundregeln 2 und 3 sind im Zusammenhang zu betrachten: die Natrium-Ionen haben die kleinere Masse aber die größere Ortsunschärfe im Vergleich zu den Chlorid-Ionen. Kleinere Masse würde größere Niveauabstände bedeuten, während die größere Ortsunschärfe zu kleineren Abständen führen würde. Aus Beziehung [3] aber erkennt man, dass die Ortsunschärfe quadratisch in die Zustandssumme eingeht, also das stärkere Argument darstellt. Mit der größeren Ortsunschärfe versteht man die kleineren Niveauabstände und damit die größere Entropie im „Natriumkellerregal“ im Vergleich zum Chloridgitter. In beiden Gittern (in beiden Regalen) ist die *Dulong-Petitsche Regel*

($C_p \approx 3R$) erfüllt, also beide tragen gleichviel, nämlich $3R$, zur Gesamtmolwärme C_p bei. Extrapolierend deutet dies daraufhin, dass beim Vergleich der verschiedenen Metallhalogenide (s. Tab. 2) die Zunahme der C_p -Werte um jeweils ca. $3R$ mit der Wertigkeit der Metalle dadurch zu verstehen ist, dass mit jedem Chloratom ein weiteres Kellerregal mit einem Beitrag von $3R$ zur Molwärme hinzukommt.

Ergänzend lässt sich jetzt zu den Molwärmern der Elemente (s. Tab. 1) feststellen, dass die festen Metalle mehr oder weniger gut die *Dulong-Petitsche Regel* erfüllen, also sie im Wesentlichen nur über einen Energiespeicher, ein Kellerregal dieses Typs, verfügen. Bei den Edelgasen finden wir ebenfalls nur einen Speichertyp. Dieser Regaltyp „ideales Gas“ ist durch zwei Eigenschaften charakterisiert: $C_v = 3/2R$ (Gleichverteilung in drei Raumrichtungen) und $C_p = C_v + 2/2R = 5/2R$ (zusätzliche Volumenarbeit). Die gasförmigen Halogene haben größere C_p -Werte und zeigen dadurch, dass außer dem Typ „ideales Gas“ noch weitere Energiespeicher aktiv sind. Die Speicher der Molekülschwingungen und der Rotationen tragen aber weniger zur gesamten Energiespeicherung bei als die Translationen der Teilchen als ideales Gas.

4 Das Begriffspaar „Ordnung-Unordnung“

Aus Abb. 2 erkennt man, dass das Begriffspaar „Ordnung-Unordnung“ zur Beschreibung von Entropie-Phänomenen unbefriedigend bleibt. Wer kann nachvollziehen, dass die Anordnung c) mit jeweils drei Teilchen auf drei Fachböden „unordentlicher“ sein soll als Anordnung b), bei der sogar auf mittlerer Höhe ein Fachboden frei bleibt? Ziehen wir ein Alltagsbeispiel zu Rate:

Die Dateien einer Diskette/Festplatte kann man auf dem Monitor nach verschiedenen *Ordnungsprinzipien* anzeigen lassen, z. B. alphabetisch oder aber chronologisch geordnet. In beiden Fällen wird das jeweilige Ordnungsprinzip 100 %-ig umgesetzt und zwar unabhängig davon, ob es sich um 50 oder um 100 Dateien handelt. Hat man chronologisch geordnet, so ist das Alphabet in „Unordnung“ und umgekehrt. Trotzdem kann man nicht sagen, dass die eine Darstellungsweise „ordentlicher“ sei als die andere, beide sind auf ihre Art perfekt. In der Natur finden wir eine analoge Situation. Je nach Art der Quantenobjekte gibt es verschiedene Ordnungsprinzipien: Die *Boltzmann*-, die *Bose*- oder die *Fermi*-Statistik. Die Natur setzt beim Einlagern der energietragenden Objekte ins Kellerregal das jeweilige Ordnungsprinzip perfekt um, und es reagiert (von kinetischen Hemmungen abgesehen) sofort, wenn jemand von außen diese Ordnung stört. In der Regel versucht sie das thermische Gleichgewicht mit perfekter Umsetzung des jeweiligen Ordnungsprinzips (und mit maximaler Entropie) herzustellen. Das erweckt jetzt auf den ersten Blick den Anschein, dass man die Zuordnung nur umkehren müsse und hinter Entropie sei die maximale Ordnung (statt der maximalen Unordnung) zu vermuten. Bei näherer Betrachtung allerdings erkennt man, dass dies auch nicht der richtige Weg ist. Die Entropie ist nämlich stoffmengenabhängig. Während die Umsetzung des Ordnungsprinzips (exponentielle Verteilung auf den Niveaus) bei 10^{23} Objekten genauso perfekt erfolgt wie bei $2 \cdot 10^{23}$ Objekten, würde sich die Entropie verdoppeln. Das Begriffspaar „Ordnung – Unordnung“ erscheint folglich als untauglich, um den Entropiebegriff sachgemäß zu veranschaulichen.

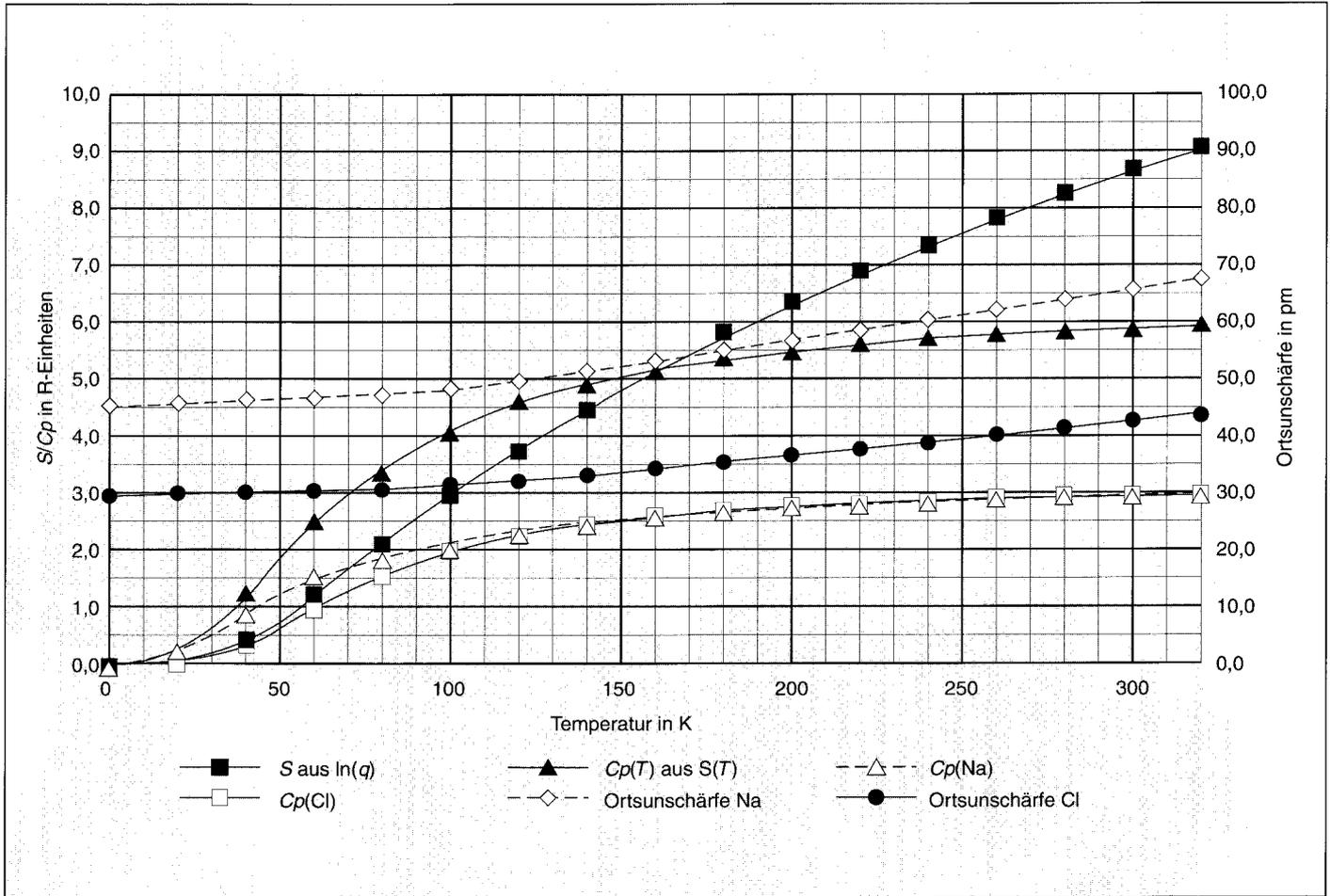
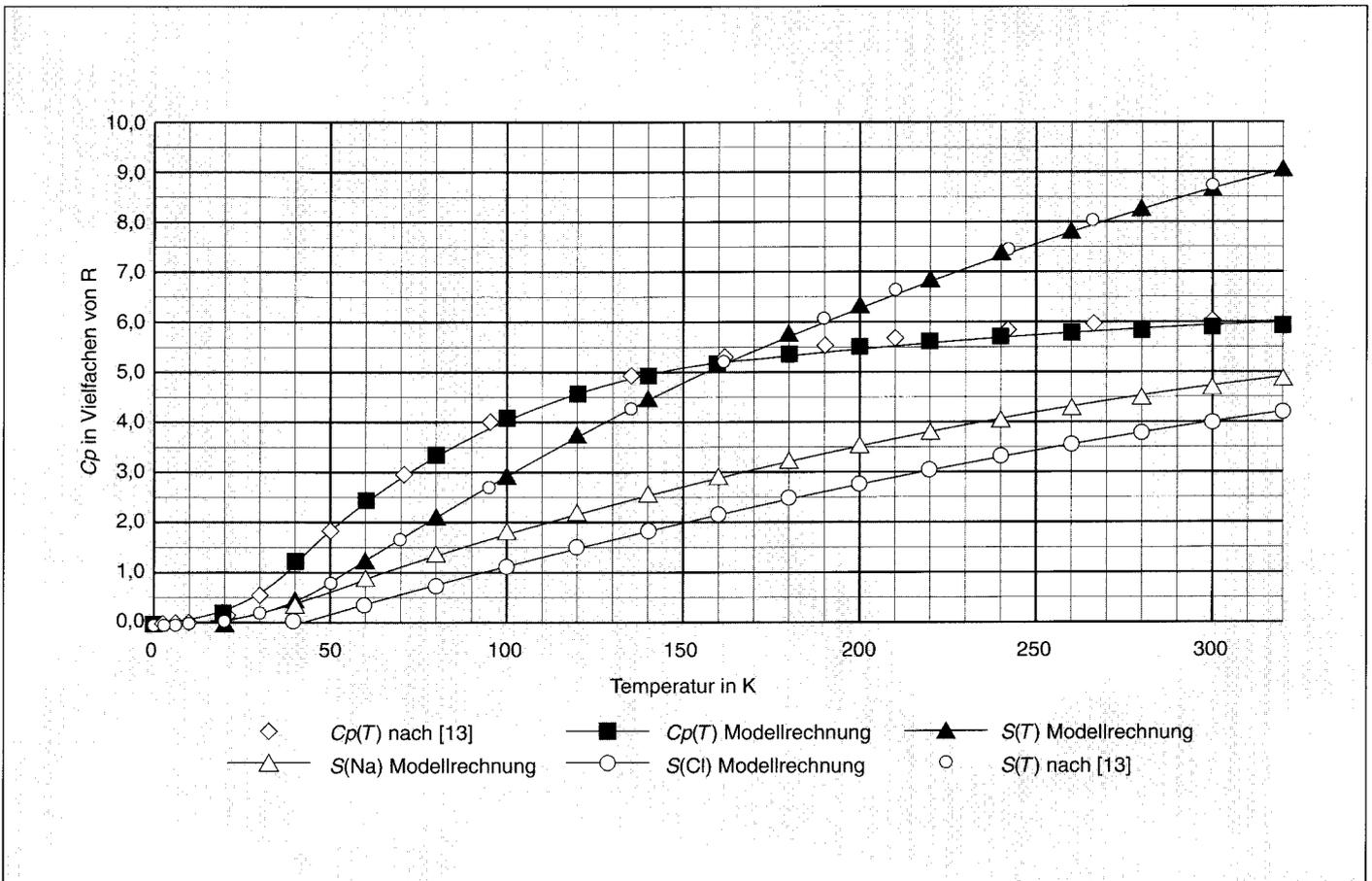


Abb. 6: Entropie und Molwärme von NaCl
 a) (oben): Ergebnisse der Modellrechnung
 b) (unten): Vergleich: Messwert/Modellrechnung



5 Die Vorteile und Grenzen des Kellerregalmodells

Das Kellerregalmodell stellt ein didaktisches Reduktionsmodell dar, das auf zahlreiche thermodynamische Phänomene schülergerecht in der gymnasialen Oberstufe anwendbar ist. Gegenüber dem einfachen Energiespeichermodell, das in der Mittelstufe unterrichtet wird, hat es den Vorteil, dass es die Quantisierung aller Formen der inneren Energie berücksichtigt und sich zugleich auf das Wesentliche beschränkt. Der Schüler muß nicht mit den verschiedenen Beziehungen zwischen Energie und Quantenzahlen konfrontiert werden, die für Translationen, Rotationen und Schwingungen jeweils unterschiedlich lauten. Das Wesentliche ist die Quantisierung der Energie, die von den Stoffen gespeichert wird, und diese Speicherung lässt sich im Prinzip für alle Energieformen am Modell eines Kellerregals qualitativ veranschaulichen. In dieser Arbeit wurde dies – stellvertretend für die anderen Energieformen – mit Hilfe der Beziehung für die Translationen dargelegt.

Das Modell beschränkt sich auf qualitative Aussagen. Absolutwerte von Entropien, Molwärmern der Zustandssummen sind damit nicht ableitbar. Allerdings lassen sich sehr gut Abschätzungen (größer als bzw. kleiner als) durchführen.

Es wird mit diesem Modell für den Schulunterricht ein neuer und angemessener Zugang zum Entropiephänomen eröffnet. Eine tragfähige und schülergerechte Beschreibung dieses Phänomens könnte lauten:

1. Die Entropie ist ein (logarithmisches) Maß für die Anzahl der besetzten Energieniveaus in einem System.
2. Sie stellt eine Extension der inneren Energie dar.
3. Das Entropieprinzip besagt, dass die Natur stets versucht, den vorhandenen Energievorrat auf möglichst viele Zustände zu verteilen, damit die Energie bei möglichst geringer Intensität gespeichert wird. (Energiedissipation [10])

6 Die Schlussbetrachtung

Das Entropiephänomen ist auch heute – ca. 150 Jahre nach seiner Entdeckung durch *Clausius* – immer noch schwierig zu verstehen und dafür gibt es einige handfeste Gründe. Entropie und Temperatur wurden lange vor der Quantenphysik als naturwissenschaftliche Begriffe eingeführt. Da beide nur quantenphysikalisch wirklich zu verstehen sind, kann man nicht erwarten, dass die ursprünglich eingeführten Definitionen optimal sind. Im Gegensatz beispielsweise zu Grammatom, Stoffmenge und Molmasse wurde aber an den ursprünglichen Definitionen nie gerüttelt.

Die Darlegungen in diesem Aufsatz setzen bei den quantenphysikalischen Grundlagen an und stellen mit den Rechengängen Hintergrundinformationen für die Lehrer/innen dar, die stets in Bilder umgesetzt werden, die man mit Hilfe des Kellerregalmodells in der Oberstufe auch schülergerecht vermitteln kann. Ebenso lassen sich die Tabellen Entropie und Molwärme schülergerecht mit diesem Modell deuten. Interessante Aspekte bietet dieses Modell auch bei der Beschreibung von chemischen Gleichgewichten und den Größen der Freien Enthalpie, des chemischen Potentials und bei der Mischungsentropie. Die Darlegungen dazu würden jedoch den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Die Entropie gründet auf der elementaren Qualität der Abzählbarkeit, und zwar der von quantenphysikalischen Niveaus, wie auch Gesamtzuständen. Als Maß für eine Anzahl sollte sie mit einer Zählereinheit, z. B. der Basiseinheit 1 Mol angegeben werden und nicht als Quotientengröße. Die Einheit 1 J/K ist verwirrend und wenig hilfreich, um die Qualität der Entropie zu erfassen.

Die Temperatur ist thermodynamisch als Quotientengröße definiert und als intensive Größe muss sie ihrer Natur nach auch eine Quotientengröße sein. Sie wird jedoch in unserem Begriffssystem als Basisgröße geführt. Dieses „Verwirrspiel“ ließe sich leicht entwirren, wenn man – wie bereits in [9] und in [1] vorgeschlagen – die Gaskonstante (bzw. Boltzmann-Konstante) von der Entropie „weg“ und zur Temperatur „hin“ definieren würde. Kittel und Krömer gehen einen solchen Weg sehr konsequent und nennen die so definierten Größen *fundamentale Temperatur* τ und *fundamentale Entropie* σ (im Gegensatz zur Entropie s). wäre nur noch die Zahl $\ln W$, während die Temperatur zum Quotienten Energie/Entropie mit der Einheit 1 kJ/mol umgestaltet wäre, wobei die Einheit Mol im Nenner aber keine Stoffmenge, sondern das Maß für die Zustandsmenge meint.

Klassische wie statistische Thermodynamik legen ein solches Vorgehen eigentlich nahe, denn nicht ohne sachlichen Grund gehen in thermodynamische Beziehungen stets die Produkte RT (bzw. kT) ein und nicht ohne Grund gibt man Entropien bzw. Entropieänderungen häufig in Vielfachen der Gaskonstanten, also als Zahlen an.

Literatur

- [1] *Ch. Kittel* und *H. Krömer*, Physik der Wärme. 4. Auflage, R. Oldenbourg Verlag, München 1993
- [2] *P. Atkins*, Physikalische Chemie. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1996
- [3] *F. Bader*, Entropie. Herrin der Energie. Schroedel Verlag 1993
- [4] *F. Herrmann*, Physik, Unterrichtshilfen. Universität Karlsruhe, März 1994
- [5] *F. Schlögl*, Wahrscheinlichkeit und Information in der Physik. PdN-Physik **48** (5), 1999
- [6] *W. Salm*, Entropie und Information – naturwissenschaftliche Schlüsselbegriffe. Aulis-Verlag, Köln 1997
- [7] *J. Falke* und *M. Regitz*, Römpp Chemie Lexikon. Georg-Thieme Verlag, Bd. 6, 9. Auflage, 1995
- [8] *C. Syniwietz* und *K. Schäfer*, Chemiker Kalender. Springer Verlag, Heidelberg 1984
- [9] *A. Jungermann*, Definition, Eigenschaften und Systematik intensiver Größen. PdN-Chemie **38** (7), 1989
- [10] *G. Falk* und *W. Ruppel*, Energie und Entropie. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1976
- [11] *G. Schwarz*, Handbuch Luftkissentisch. Phywe Schriftenreihe, Göttingen 1989
- [12] GMELIN-HANDBUCH der anorganischen Chemie, 61 (Silber) [A2], Verlag Chemie, Weinheim 1973
- [13] GMELIN-HANDBUCH der anorganischen Chemie, 21 (Natrium), Erg. 6, Verlag Chemie, Weinheim 1973

Anschrift des Verfassers:

StD Dr. Arnd Jungermann, Erzbergerstr. 7, 79379 Müllheim