



Folge 044 - Entropie (S) & Reaktionsentropie (ΔS) | SW Teil 3

Inhalt der Folge:

- Wie wir bereits in Folge 042 gelernt haben, versteht man unter Stoffwechsel die chemischen Reaktionen in einem Organismus.
- Im Hinblick darauf ist es interessant zu wissen, wie man ganz allgemein beschreiben kann, ob eine chemische Reaktion freiwillig (ohne äußeren Zwang) ablaufen kann.
- Das Ganze lässt sich mit Hilfe der freien Enthalpie (G) beschreiben, die sich wiederum aus der Enthalpie (H) und der Entropie (S) zusammensetzt.
- In dieser Podcastfolge geht es speziell um die Entropie (S).

Thermodynamik - Die Lehre von Energie und Arbeit

- Die Thermodynamik ist ein Teil der klassischen Physik und beschäftigt sich mit den Zusammenhängen von Energie, Arbeit und Temperatur.
- Die Thermodynamik erlaubt auf Grundlage von ein paar Hauptsätzen und Zustandsgleichungen Aussagen darüber zu treffen, ob chemische Reaktionen aus energetischen Gründen möglich sind oder nicht.
- Ob eine chemischen Reaktionen aus energetischen Gründen freiwillig ablaufen kann oder nicht, wird in der Thermodynamik mit der freien Enthalpie (G) beschrieben.

Freie Enthalpie (G) bzw. Freie Reaktionsenthalpie (ΔG)

- Die freie Enthalpie (G) ist ein Maß für die Triebkraft einer chemische Reaktion und liefert Informationen darüber, ob eine Reaktion freiwillig (ohne äußeren Zwang) ablaufen kann.
- Allerdings kann man die freie Enthalpie (G) eines Zustandes nicht messen, sondern nur die Änderung der freien Enthalpie zwischen zwei Zuständen, auch freie Reaktionsenthalpie (ΔG) genannt.
- Die sogenannte Gibbs-Helmholtz-Gleichung zeigt uns, dass die Änderung der freien Enthalpie (ΔG) von der Änderung der Enthalpie (ΔH) und der Änderung der Entropie (ΔS) im Verlauf einer chemischen Reaktion abhängt.

Gibbs-Helmholtz-Gleichung:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

ΔG : Änderung der freien Enthalpie im Verlauf einer Reaktion (= freie Reaktionsenthalpie)

ΔH : Änderung der Enthalpie im Verlauf einer Reaktion (= Reaktionsenthalpie)

T: Temperatur

ΔS : Änderung der Entropie im Verlauf einer Reaktion (= Reaktionsentropie)

- In Folge 043 haben wir die Enthalpie (H) und die Reaktionsenthalpie (ΔH) bereits besprochen.
- Und in der heutigen Podcastfolge gucken wir uns den zweiten Teil der Gibbs-Helmholtz-Gleichung, also die Reaktionsentropie (ΔS) genauer an!

Was ist Entropie (S) und wie berechnet man sie?

- Umgangssprachlich wird gesagt, dass die Entropie (S) ein Maß für die Unordnung in einem System ist.
- Je höher der Wert der Entropie (S) ist, desto mehr Unordnung herrscht.
- Allerdings kann man das Ganze noch etwas genauer definieren, um es wirklich zu verstehen.
- Die konkrete mathematische Formel für die Entropie (S) lautet:

$$S = k \cdot w$$

S: Entropie
k: Boltzmannkonstante
w: Wahrscheinlichkeit für die Realisierung eines bestimmten Makrozustandes

$$w = \frac{1}{\Omega} = \frac{1}{\sum_i p_i}$$

i: Index i beschreibt den zu betrachtenden Makrozustand
p_i: Anzahl der Mikrozustände die zu i gehören
p: Summe aller Mikrozustände über alle Makrozustände ($p = \sum_i p_i$)

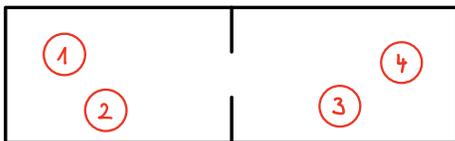
- Im Prinzip geht es bei der Entropie (S) um die Bewegungen von Teilchen in einem System und um die Wahrscheinlichkeiten von möglichen Zuständen durch die Bewegungen von Teilchen.
- Diese möglichen Zustände, die ein System einnehmen kann, können wir mit Hilfe der Begriffe Makrozustand und Mikrozustand genau definieren.
 - Der Makrozustand eines Systems ist die Beschreibung des Systems durch wenige Zustandsvariablen wie zum Beispiel die chemische Zusammensetzung.
 - Der Mikrozustand eines Systems ist die vollständige mikroskopische Beschreibung des Systems, also die vollständige Beschreibung welches Teilchen sich wo befindet.
- Vielleicht leuchten die Begriffe Makro- und Mikrozustand noch etwas mehr ein, wenn wir das Ganze anhand eines Beispiels durchgehen.

Ein einfaches Beispiel für Makrozustände und Mikrozustände

- Grundlage unseres Beispiels sind vier Teilchen, die sich auf zwei verbundene Räume verteilen:

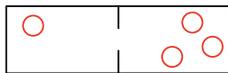


- In diesem Beispiel ist unser Makrozustand die Anzahl der Teilchen in den jeweiligen Räumen.
 - Der aktuelle Makrozustand ist also 2 Teilchen links und 2 rechts.
- Der Mikrozustand ist die vollständige Beschreibung, welches Teilchen sich in welchem Raum befindet.
 - Dafür muss man alle Teilchen durchnummerieren:

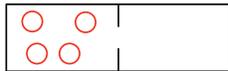


- Der aktuelle Mikrozustand ist also LLRR (Teilchen 1 & 2 links (L) und Teilchen 3 & 4 rechts (R)).

- Anhand unseres Beispiels lässt sich gut erkennen, dass ein System mehrere Makrozustände einnehmen kann:



Makrozustand: 1 links und 3 rechts



Makrozustand: 4 links und 0 rechts

- Und Makrozustände können wiederum durch mehrere Mikrozustände realisiert werden:



Makrozustand: 1 links und 3 rechts

Mikrozustand: LRRR



Makrozustand: 1 links und 3 rechts

Mikrozustand: RRLR

- Welchen Makrozustand ein sich selbst überlassenes System einnimmt, ist eine einfache Frage der Wahrscheinlichkeit.
 - Je höher die Anzahl der Mikrozustände ist, die einen Makrozustand realisieren können, desto wahrscheinlicher ist es, dass das System diesen Makrozustand einnimmt.
 - In unserem Beispiel sieht es also so aus:

Makrozustände	Mikrozustände
0 links & 4 rechts	RRRR (1 Möglichkeit)
1 links & 3 rechts	LRRR, RLRR, RRLR, RRRL (4 Möglichkeiten)
2 links & 2 rechts	LLRR, LRLR, LRRL, RLLR, RLRL, RLLL (6 Möglichkeiten)
3 links & 1 rechts	RLLL, LRLR, LLRL, LLLR (4 Möglichkeiten)
4 links & 0 rechts	LLLL (1 Möglichkeit)

- Der Makrozustand [2 links & 2 rechts] kann durch die meisten Mikrozustände realisiert werden und ist deshalb auch am wahrscheinlichsten.
- Und damit kommen wir wieder zur Entropie (S).
- Denn die Entropie (S) ist genau genommen ein Maß für die Wahrscheinlichkeit der Realisierung eines Makrozustandes eines Systems.
- Je höher die Wahrscheinlichkeit eines Makrozustandes ist, desto höher ist dessen Entropie (S).
- Und der Makrozustand, der durch die meisten Mikrozuständen realisiert werden kann, ist am wahrscheinlichsten.
- Deswegen bezeichnet man die Entropie (S) umgangssprachlich auch als ein Maß für Unordnung.
 - Denn je höher die Entropie (S) ist, desto größer ist die Anzahl der Mikrozustände, die den Makrozustand realisieren können.
 - Und je mehr Mikrozustände es gibt, desto „unordentlicher“ muss das System sein.

Was ist Reaktionsentropie (ΔS) und wie berechnet man sie?

- Die Reaktionsentropie (ΔS) ist eine Bezeichnung für die Änderung des Ordnungsgrades im Verlauf einer chemischen Reaktion:

$$\Delta S = S_{\text{Endzustand}} - S_{\text{Anfangszustand}}$$

- $\Delta S < 0$ = Reaktionen bei denen Ordnung erzeugt wird!
- $\Delta S > 0$ = Reaktionen bei denen die Unordnung zunimmt!

Und damit ist aus meiner Sicht auch das Wichtigste gesagt, um Entropie (S) zu verstehen.

Wer noch genauer in die Details der Physik und die mathematischen Berechnungen eintauchen möchte, kann gerne an anderer Stelle noch etwas weiter recherchieren!