Entmystifizierung eines schwierig zu vermittelnden Begriffs

Entropie als Informationsmaß

HAYE HINRICHSEN

Entropie gilt als eine schwierig zu vermittelnde physikalische Größe, da sie sich einer direkten Anschaulichkeit zu entziehen scheint. Wenn man sich diesem Begriff jedoch von einer informations-theoretischen Perspektive nähert, werden viele Zusammenhänge leichter verständlich.

Wohl kaum ein physikalischer Begriff ist so schwierig zu vermitteln wie der der Entropie. Im Gegensatz zu Größen wie z.B. Energie und Impuls, die an Einzel-systemen messbar sind und eine gewisse Anschaulichkeit besitzen, ist Entropie als „Maß für Unordnung" komplexer Systeme sehr viel schwerer fassbar. Der bisweilen sogar mystifizierte Begriff der Entropie ist in der Anfangszeit selbst von Physikern nur zögerlich akzeptiert worden. Als Claude Shannon 1948 einen theoretischen Grenzwert für den Informationsverlust in Telefonleitungen fand und nach einer passenden Bezeichnung für diese Größe suchte, soll ihm John von Neumann geraten haben:

> *„You should call it entropy. […] Nobody knows what entropy really is, so in a debate you will always have the advantage."* [1]

Entropie wird in der Physik traditionell als thermodynamische Größe eingeführt, womit sich aber gerade Anfänger häufig schwer tun. In der heutigen Welt, die von der Informationstechnologie geprägt ist und in der Begriffe wie „Gigabyte" zur Alltagssprache gehören, ist es aber möglicherweise leichter, den Entropiebegriff zunächst informationstheoretisch zu motivieren und erst darauf aufbauend die Verbindung zur Physik herzustellen. In der Tat ist nämlich Entropie nichts anderes als ein Informationsmaß, und diese Perspektive kann erheblich dazu beitragen, den Entropiebegriff leichter zugänglich zu machen [2]. Dieser Artikel setzt sich mit der Frage auseinander, wie ein solcher didaktischer Zugang aussehen könnte.

Qualitative Definition der Entropie

Im folgenden betrachten wir Systeme im Rahmen der klassischen Physik, deren Mikrozustand unabhängig vom Beobachter eindeutig charakterisiert werden kann. Der Einfachheit halber wollen wir annehmen, dass die Menge der möglichen Zustände eines solchen Systems, der sogenannte *Zustandsraum* Ω, endlich ist, wobei $|\Omega|$ die Anzahl der Zustände bezeichnet. Ein Lichtschalter besitzt beispielsweise den Zustandsraum $\Omega=\{aus, ein\}$ mit $|\Omega|=2$ Zuständen, ein Würfel dagegen den Zustandsraum $\Omega=\{1,2,3,4,5,6\}$ mit $|\Omega|=6$ Zuständen. In diesem abgesteckten Rahmen beginnen wir mit der folgenden verbalen Definition:

> ***Die Information bzw. Entropie H eines Systems ist die minimale Anzahl von Bits, die man benötigt, um dessen Zustand vollständig zu charakterisieren.***

Anschaulich ausgedrückt ist also die Information bzw. Entropie nichts anders als die minimale Länge einer Datei, die benötigt wird, um ein System oder einen Sachverhalt vollständig zu beschreiben. Es ist dabei wesentlich, dass die Länge der Beschreibungsdatei *minimal* ist, dass man also zuvor alle möglichen Redundanzen der Zustandsbeschreibung eliminiert, indem man die Datei durch ideale Kompression auf kürzeste Länge bringt. Alternativ formuliert ist die Entropie die minimale Anzahl binärer ja-nein-Fragen, die notwendig sind, um den aktuellen Zustand des Systems in Erfahrung zu bringen.

Ein zusammengesetztes System kann beschrieben werden, indem man zunächst seine Teile beschreibt und dann die entsprechenden Dateien aneinander hängt. Wenn die Teilsysteme unabhängig voneinander sind, wird man diese zusammengesetzte Datei nicht weiter komprimieren können. Damit ist intuitiv klar, dass die Information *H* eine *extensive*, d.h. additive Größe ist.

Man sollte darauf hinweisen, dass die so definierte Information bzw. Entropie nichts mit dem alltäglichen Informationsbegriff zu tun hat, mit dem die individuell wahrgenommene Bedeutung einer Nachricht umschrieben wird. Eine sinnlose Folge zufälliger Wörter besitzt beispielsweise eine hohe Information gemäß der obigen Definition, da eine große Datenmenge erforderlich ist, um sie zu beschreiben, doch sie besitzt für uns keine Bedeutung und damit keine verwertbare Information im landläufigen Sinne.

Quantifizierung der Entropie in Bit

Ein System, das in nur einem einzigen Zustand sein kann, ist bereits vollständig charakterisiert und besitzt demzufolge die Entropie $H=0$. Ein binäres System mit zwei möglichen Zuständen wie z.B. ein Lichtschalter wird dagegen bekanntlich durch ein einzelnes Bit (*binary digit*) charakterisiert. Das Bit als elementares Informationsquantum spielt die Rolle einer fundamentalen „Maßeinheit“ für Information, von der die in der Informationstechnologie gebräuchlichen Einheiten abgeleitet sind (siehe Kasten). Die Entropie wird also grundsätzlich in Bit gemessen. Da diese Einheit universell ist, also nicht durch ein in Paris hinterlegtes „Ur-Bit“ festgelegt werden muss, lässt man diese Einheit auch häufig weg und behandelt die Entropie als dimensionslose Größe.

Gebräuchliche Informationseinheiten				
Byte (B)	8 Bit			
Kilobyte (kB)	10^3 B		Kibibyte (KiB)	2^{10} B
Megabyte (MB)	10^6 B		Mebibyte (MiB)	2^{20} B
Gigabyte (GB)	10^9 B		Gibibyte (GiB)	2^{30} B
Terabyte (TB)	10^{12} B		Tebibyte (TiB)	2^{40} B

Ungeradzahlige Entropie

Da man mit n Bits bekanntlich 2^n verschiedene Bitmuster bilden kann, ist sofort klar, dass ein System mit 2^n Zuständen mit einer n-Bit-Datei vollständig beschrieben werden kann, so dass in diesem Fall $H=n$ ist. Was aber passiert, wenn die Anzahl der Zustände keine Zweierpotenz ist? Um beispielsweise die sechs möglichen Zustände eines Würfels zu beschreiben, wären 3 Bit erforderlich, wobei aber zwei der $2^3=8$ möglichen Bitmuster gar nicht verwendet werden. Der Informationsgehalt sollte in diesem Fall also einen nicht-ganzzahligen Wert zwischen 2 und 3 annehmen.

Um diesen Wert zu berechnen, betrachten wir ein zusammengesetztes System bestehend aus N unterscheidbaren Würfeln, das in 6^N möglichen Zuständen sein kann (siehe Abb. 1). Zu seiner Beschreibung sind n Bit erforderlich, wobei n die kleinste ganze Zahl ist, für die $2^n \geq 6^N$ bzw. $n \log 2 \geq N \log 6$ ist. Die mittlere Anzahl der erforderlichen Bits pro Würfel n/N ist also für gegebenes N die kleinste rationale Zahl mit der Eigenschaft

$$\frac{n}{N} \geq \frac{\log 6}{\log 2} = \log_2 6.$$

Abbildung 1: Fünf Würfel befinden sich in einem der 7776 möglichen Zustände. Dieser Zustand kann durch die Angabe von 13 Bit vollständig charakterisiert werden. Damit entfallen auf jeden Würfel im Mittel 2.6 Bit.

Für große N lässt sich diese Ungleichung immer schärfer abschätzen, die Redundanz also immer weiter reduzieren, so dass n/N für $N \to \infty$ gegen die mittlere Entropie pro Würfel $H = \log_2 6 \approx 2.585$ konvergiert.

Zahl der Würfel N	Anzahl der Zustände 6^N	erforderliche Bits n	Bits pro Würfel n/N
1	6	3	3
2	36	6	3
3	216	8	2.666
4	1296	11	2.75
5	7776	13	2.6
∞	∞	∞	~2.585

Auf diese Weise lässt sich gut motivieren, dass die Information bzw. Entropie eines Systems durch

$$H = \log_2 |\Omega|$$

gegeben ist. Mit dieser Formel lässt sich die Additivität der Entropie sofort verifizieren: Da man beim Zusammensetzen von Teilsystemen zu einem Gesamtsystem die Anzahl der möglichen Zustände miteinander multiplizieren muss, setzt sich die Gesamtentropie wegen des Logarithmus additiv aus den Einzelentropien zusammen.

Die in der Physik gebräuchliche Entropiedefinition

$$S = k_B \ln |\Omega|$$

unterscheidet sich von der obigen Definition nur durch einen konstanten Faktor $k_B \ln 2$, durch den die Entropie die Einheit J/K erhält, – ein historisch bedingter Unfall, auf den wir später bei der Diskussion des Temperaturbegriffs zurückkommen werden.

Wie viele Gigabyte stecken in einem Heliumballon?

In der chemischen Literatur findet man, dass ein Mol Helium (22.4 Liter) bei Zimmertemperatur die Entropie S=126 J/K besitzt [3]. Mit der Boltzmann-Konstante $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/K lässt sich diese Angabe umrechnen in einen Informationsgehalt von

$$H = \frac{1}{k_B \ln 2} S \approx 1.3 \cdot 10^{25} \text{ Bit.}$$

Das ist ca. 5.000 mal mehr als die Kapazität aller bislang weltweit produzierten Speichermedien! Die Entropie pro Teilchen ist allerdings überraschend gering und beträgt nur etwa

$$\frac{H}{N_A} \approx 22 \text{ Bit.}$$

Abschätzung der Entropie eines Gases

Die Entropie eines Gases ist nach den obigen Überlegungen die Informationsmenge, die benötigt wird, um den mikroskopischen Zustand des Gases, also sämtliche Positionen und die Geschwindigkeiten der Teilchen zu einem gegebenen Zeitpunkt, vollständig zu beschreiben. Im Rahmen der klassischen Physik ist dies allerdings unmöglich, da diese Größen reelle Zahlen mit unendlich vielen Nachkommastellen sind, die von sich aus bereits unendlich viel Information beinhalten. Dieses Problem konnte erst im Rahmen der Quantentheorie gelöst werden, in der die Genauigkeit von Ort und Impuls durch die Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq h$ begrenzt wird. Näherungsweise kann man sich deshalb den Phasenraum des Systems in Zellen der Größe h^3 unterteilt vorstellen, wobei jede Zelle einen Zustand repräsentiert. Die Anzahl der möglichen Zustände eines Teilchens erhält man also, indem man das vom System beanspruchte Phasenraumvolumen Φ durch h^3 teilt.

Die tatsächliche Entropie pro Teilchen in einem Gas ist aber sehr viel geringer (siehe Kasten). Ursache dafür ist ein weiterer quantenmechanischer Effekt: Anders als in der klassischen Physik sind quantenmechanische Teilchen nämlich nicht unterscheidbar, sondern können umgeordnet werden, ohne das sich dabei der physikalische Zustand des Systems ändert. Die kombinatorische Anzahl der Zustände des Gesamtsystems ist also noch durch die Anzahl der möglichen Permutationen zu dividieren.

Abschätzung der Entropie von einem Mol Helium

Helium ist ein einatomiges Gas, in dem die Teilchen bei Raumtemperatur typische Impulse von der Grössenordnung $p \approx \sqrt{2mE} = \sqrt{3mk_BT} \approx 9 \cdot 10^{-24}\,\mathrm{kg\,m/s}$ besitzen. Stellt man sich nun den Impulsraum als Würfel vor, in dem sich jede Komponente zwischen *-p* und *+p* bewegt, erhält man das Phasenraumvolumen

$$\Phi \;\approx\; V_{\mathrm{mol}}(2\mathrm{p})^3 \;\approx\; 1.3 \cdot 10^{-70}(\mathrm{Js})^3 .$$

Um den Quantenzustand eines *einzelnen* Teilchens anzugeben, wäre also eine Information von etwa $\log_2(\Phi/h^3) \approx 99$ Bit erforderlich. Der tatsächliche Wert ist aber sehr viel geringer, da die Teilchen quantenmechanisch ununterscheidbar sind, die kombinatorische Anzahl der Zustände also noch durch die Anzahl der möglichen Permutationen der $N_A = 6.023 \cdot 10^{23}$ Teilchen zu dividieren ist:

$$|\Omega| \;\approx\; \frac{1}{N_A!}\left(\frac{\Phi}{h^3}\right)^{N_A} .$$

Die Entropie pro Teilchen lässt sich mit der Stirlingschen Formel $n! \approx n^n/e^n$ abschätzen:

$$\frac{H}{N_A} \;\approx\; \log_2\frac{\Phi}{h^3} - \log_2 N_A + \log_2 e \;\approx\; 21\,\mathrm{Bit}$$

Dieses Ergebnis stimmt recht gut mit dem obigen Umrechnungsresultat $H/N_A \approx 22\,\mathrm{Bit}$ überein, obwohl die Rechnung stark vereinfacht ist und der Impulsraum eine kompliziertere Struktur besitzt.

Informationsreduktion durch Vorkenntnis

Bislang sind wir davon ausgegangen, dass der Systemzustand vor der Charakterisierung gänzlich unbekannt ist, der Beobachter also über keinerlei Vorkenntnisse verfügt. Ist er dagegen schon im Besitz einer Teilinformation über das System, reduziert sich die Entropie, da nun zur Charakterisierung des Zustands eine geringere Datenmenge ausreicht.

Ein solches Vorwissen kann in einer *Einschränkung* des Zustandsraums bestehen. Wenn z.B. bereits bekannt sein sollte, dass ein Würfelwurf eine gerade Augenanzahl ergeben hat, halbiert sich die Anzahl der noch verbleibenden Möglichkeiten, womit sich die Entropie um 1 Bit reduziert.

Eine partielle Vorkenntnis kann aber auch in Form einer *Wahrscheinlichkeitsverteilung* vorliegen. Dieser Fall tritt immer dann auf, wenn eine große Anzahl gleichartiger Systeme zu charakterisieren ist. So ist z.B. die Häufigkeit der Zeichen in einem Text oftmals vorher bekannt. Schon Samuel Morse erkannte, dass Buchstaben wie 'E' und 'T' häufiger vorkommen als beispielsweise 'X' und 'Q', so dass es effizienter ist, die häufig auftretenden Zeichen durch besonders kurze Codes zu repräsentieren (siehe Tabelle). Je seltener ein Buchstabe auftritt, umso mehr Information wird also in solchen „entropieoptimierten“ Codes benötigt, um diesen zu charakterisieren.

Die drei am häufigsten und die drei am seltensten auftretenden Buchstaben in der englischen Sprache mit dem dazugehörigen Morsecode

E	12.702%	•		X	0.150%	– • • –
T	9.056%	–		Q	0.095%	– – • –
A	8.167%	• –		Z	0.074%	– – • •

Individuelle Entropie

Um diesen Effekt quantitativ zu verstehen, kehren wir zum abstrakten Zustandsraum Ω zurück, von dem wir nun annehmen wollen, dass die Zustände $i \in \Omega$ mit bestimmten Wahrscheinlichkeiten $p_i \in [0,1]$ auftreten, deren Summe gleich 1 ist. Da jede reelle Zahl beliebig genau durch einen Bruch approximiert werden kann, wollen wir zudem annehmen, dass die Wahrscheinlichkeiten *rationale* Zahlen sind, die wir auf einen gemeinsamen Hauptnenner *m* bringen, so dass $p_i = m_i/m$ ist. Wir stellen uns nun eine fiktive

Individuelle und mittlere Entropie – ein Beispiel

Zustandsraum $\Omega = \{$ A B C $\}$

Wahrscheinlichkeiten: $p_A = \frac{1}{2},\ p_B = \frac{1}{3},\ p_C = \frac{1}{6}$

Fiktive Menge mit entsprechenden Häufigkeiten: A A A B B C

Individuelle Entropien:
$H_A = -\log_2 1/2 = 1\,\mathrm{bit}$
$H_B = -\log_2 1/3 = 1.585\,\mathrm{bit}$
$H_C = -\log_2 1/6 = 2.585\,\mathrm{bit}$

Mittlere Entropie: $H = \sum_{i=A,B,C} p_i H_i = 1.459\,\mathrm{bit}$

Menge mit m Elementen vor, in dem der Zustand i genau m_i mal vorkommt (siehe Kasten). In dieser fiktiven Menge entsprechen die Häufigkeiten der Zustände exakt den vorgegebenen Wahrscheinlichkeiten.

Wir wählen nun ein Element dieser fiktiven Menge zufällig aus. Um anzugeben, um welches der m Elemente es sich handelt, wären nach den obigen Überlegungen $\log_2 m$ Bit notwendig. Da aber nur der Zustand i von Interesse ist, kann auf die Information zur Identifizierung des Elements innerhalb der Teilmenge von m_i Elementen verzichtet werden, so dass $\log_2 m_i$ Bit überflüssig sind. Für die Charakterisierung des Zustands i ist also eine Information von $H_i = \log_2 m - \log_2 m_i = \log_2(m/m_i)$ Bit notwendig. Wegen $p_i = m_i/m$ ist daher der *individuelle* Informationsgehalt eines bestimmten Zustandes bzw. Zeichens gegeben durch

$$H_i \;=\; -\log_2 p_i .$$

So sind beispielsweise zur Charakterisierung des Buchstabens 'E', der mit der Wahrscheinlichkeit $p_E = 0.127$ häufig auftritt, nur etwa 3 Bit erforderlich, für das seltene 'Z' dagegen ungefähr 10 Bit.

Mittlere Entropie

Oft ist man nicht an der individuellen Entropie eines einzelnen Zustandes, sondern an dem Mittelwert

$$H \;=\; \sum_{i\in\Omega} p_i H_i \;=\; -\sum_{i\in\Omega} p_i \log_2 p_i$$

interessiert. Diese sogenannte *Shannon-Entropie* gibt an, wie viele Bit im Durchschnitt notwendig sind, um ein Zeichen bzw. einen Zustand zu charakterisieren (siehe Beispiel im Kasten). In der Informationstheorie dient dieser Wert als untere Schranke für die erforderliche Bandbreite eines Übertragungskanals.

Der obige Ausdruck ist undefiniert, sobald eine der Wahrscheinlichkeiten gleich Null ist, weil dann der Logarithmus divergiert. Da aber solche Zustände nicht auftreten, tragen sie nicht zur Summe bei. Wir können deshalb solche Zustände bei der Summation ausschließen oder die Konvention $0 \log_2 0 = 0$ benutzen.

Numerische Abschätzung der Entropie

Die Entropie eines Systems kann numerisch abgeschätzt werden, indem man eine Stichprobe von n zufälligen Zuständen nimmt, von denen sich n_i im Zustand i befinden. Mit Hilfe eines solchen *Samplings* können die Wahrscheinlichkeiten p_i durch die relativen Häufigkeiten n_i/n approximiert werden, so dass man für die mittlere Entropie die Abschätzung

$$H \;\approx\; -\sum_{i\in\Omega} \frac{n_i}{n} \log_2 \frac{n_i}{n}$$

erhält. Diese Abschätzung wird im Limes $n \to \infty$ exakt, während man für eine endliche Anzahl von Versuchen statistische Abweichungen erwartet. In Abb. 2 wird dies am Beispiel eines Würfels demonstriert. Die abgeschätzte Entropie nach n Würfen ist durch rote Punkte dargestellt. Wie man sehen kann, nähert sich die Abschätzung für große n dem theoretischen Wert $H = \log_2 6 \approx 2.585$ (grüne Line). Bei Wiederholung dieses Experiments würden die roten Punkte anders verteilt sein, die entsprechenden Mittelwerte sind in der Abbildung als gestrichelte rote Linie visualisiert.

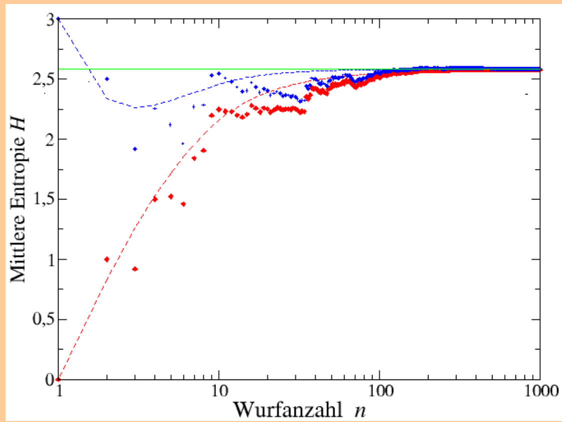


Abbildung 2: Numerische Abschätzung der Entropie eines Würfels (siehe Text).

Auffällig ist, dass sich die roten Punkte dem Grenzwert von unten nähern, dass die tatsächliche Entropie also stests systematisch unterschätzt wird. Für eine einzige Stichprobe n=1 ist die abgeschätzte Entropie sogar immer exakt gleich Null. Dieser systematische Fehler wird hervorgerufen durch die Nichtlinearität des Logarithmus.

Auch Fachleuten ist oft nicht bekannt, dass sich dieser systematische Fehler durch einfache Korrekturterme in der Abschätzung erheblich reduzieren lässt. Mit der von Miller [4] eingeführten Abschätzungsformel

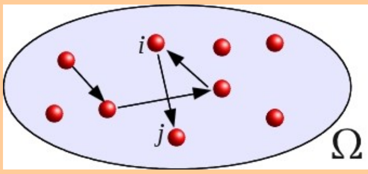


Abbildung 3: Dynamik eines komplexen Systems durch zufällige Sprünge im Zustandsraum.

$$H \approx \frac{|\Omega|}{2n\ln 2} - \sum_{i\in\Omega} \frac{n_i}{n}\log_2\frac{n_i}{n}$$

lassen sich so bereits erheblich bessere Ergebnisse erzielen, die in der Abbildung blau dargestellt sind.

Entropie in der statistischen Physik

Entropie als Maß für die Information, die zur Beschreibung eines Systems notwendig ist, hat zunächst keine direkte physikalische Bedeutung. Zu einem physikalischen Konzept wird die Entropie erst durch die chaotische und damit zufällige Dynamik komplexer Systeme. Im Zustandsraum Ω kann man sich eine solche Dynamik als zufälliges spontanes Springen von Zustand zu Zustand vorstellen (siehe Abbildung 3). Befindet sich das System beispielsweise im Zustand *i*, springt es spontan mit einer bestimmten *Übergangsrate* $w_{i\to j}\geq 0$, also einer gewissen Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, in den Zustand *j*. Ein komplexes physikalisches System ist folglich durch seinen Zustandsraum und seine Übergangsraten bestimmt. Wie man diese Vorstellung mit Hilfe der Chaostheorie und Quantenmechanik begründen kann, ist Gegenstand aktueller Forschung.

Zweiter Hauptsatz und Gibbssches Postulat

Die Übergangsraten unterliegen einer wesentlichen quantenmechanisch begründbaren Einschränkung, auf der im Prinzip die gesamte Thermodynamik beruht:

In einem abgeschlossenen System sind die Übergangsraten symmetrisch:

$$w_{i\to j} = w_{j\to i}.$$

Wegen dieser Symmetrie sind Übergänge in beide Richtungen gleich wahrscheinlich, es gibt also keine Vorzugsrichtung, vielmehr diffundiert das System orientierungslos durch seinen eigenen Zustandsraum. Bei bekanntem Anfangszustand wird so durch jeden zufälligen Sprung der aktuelle Aufenthaltsort des Systems unklarer, die notwendige Information zur Lokalisierung also immer umfangreicher, und damit ist es intuitiv klar (wenn auch nicht so einfach zu beweisen), dass die mittlere Entropie bei einem solchen „random walk" im Zustandsraum nur zunehmen kann. Dies ist die zentrale Aussage des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik:

In einem abgeschlossenen System kann die mittlere Entropie nicht abnehmen.

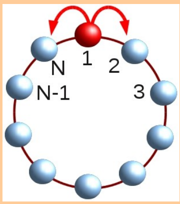
Das immer geringer werdende Wissen über den aktuellen Zustand des System manifestiert sich in einer zeitabhängigen Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_i(t)$, die immer unschärfer wird. Deren Zeitentwicklung folgt dabei der sogenannten *Mastergleichung*

$$\frac{d}{dt}p_i(t) = \sum_{j\in\Omega}\left(w_{j\to i}p_j(t) - w_{i\to j}p_i(t)\right).$$

Nach sehr langer Zeit werden die Wahrscheinlichkeiten zeitunabhängig und erreichen einen stationären Gleichgewichtszustand, in dem die linke Seite der Mastergleichung gleich Null ist. Damit die rechte Seite ebenfalls gleich Null ist, müssen bei symmetrischen Raten alle Wahrscheinlichkeiten gleich groß sein. Unter der Voraussetzung, dass das System ergodisch ist, dass also Netz der möglichen Sprünge so dicht geknüpft ist, dass alle Zustände tatsächlich erreicht werden können, wird man damit auf das *Gibbssche Postulat* geführt:

In einem abgeschlossenen System im Gleichgewicht sind alle Zustände gleich wahrscheinlich und demzufolge ist die Entropie $H = \log_2|\Omega|$ maximal.

Computerexperiment:



Auf einem Ring mit *N* Plätzen *i*=1...*N* springt ein Teilchen (rot) in jedem Zeitschritt *t*=1,2,... zufällig nach rechts oder links. Man schätze durch wiederholte Simulation dieses Vorgangs die Wahrscheinlichkeiten $p_i(t)$ ab, dass sich das Teilchen zur Zeit *t* auf dem Platz *i* befindet, berechne damit die mittlere Entropie und überprüfe den zweiten Hauptsatz.

Erhaltungsgrößen

Der zweite Hauptsatz wäre so gut wie bedeutungslos, wenn es keine Erhaltungsgrößen gäbe. Wie in allen Bereichen der Physik spielen nämlich Symmetrien und die dazugehörigen Erhaltungsgrößen auch hier eine zentrale Rolle.

Als Beispiel betrachten wir ein abgeschlossenes System mit Energieerhaltung. Da jedem Zustand eine bestimmte Energie *E* zugeordnet ist, zerfällt der Zustandsraum Ω nun in Sektoren Ω_E von Zuständen gleicher Energie *E* (siehe Abb. 4). In jedem dieser Sektoren ist der zweite Hauptsatz weiterhin gültig, d.h.

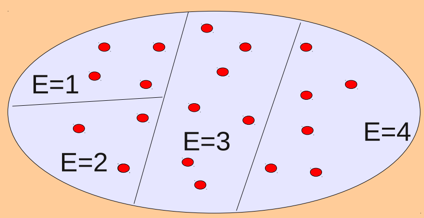


Abbildung 4: Erhaltungsgrößen: Zustandsraum mit vier Energiesektoren (siehe Text).

im Gleichgewicht erreicht das System dort die maximal möglich Entropie

$$H_E = \log_2 |\Omega_E| .$$

Was ist Temperatur ?

Durch die Erhaltungsgröße E wird die Entropie des Systems energieabhängig und bekommt erst dadurch eine physikalische Bedeutung. Durch Zufuhr von Energie erhöht sich nämlich die Anzahl der Zustände des Vielteilchensystems und damit auch die zu seiner Charakterisierung benötigte Information. Die Energiemenge, die zugeführt werden muss, um die Information um 1 Bit zu erhöhen, wird als *Temperatur* bezeichnet:

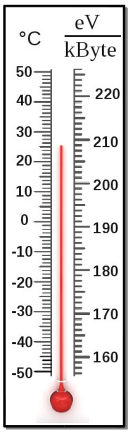


Abbildung 5

$$T = \frac{\Delta E}{\Delta H}$$

Streng genommen müsste die Temperatur in Joule/Bit gemessen werden, doch wohl kaum jemand würde wie in Abb. 5 die Raumtemperatur mit $4 \cdot 10^{-21}$ J/Bit oder 200 eV/kB angeben.

Ein System, das durch Energiezufuhr seine Entropie stark erhöhen kann, wird Energie gerne aufnehmen aber nur sehr ungern wieder abgeben. Solche Systeme nennen wir *kalt*. Im Gegensatz dazu wird ein System, dessen Entropie bei Energiezufuhr nur wenig ansteigt, Energie bereitwilliger abgeben. Solche Systeme empfinden wir als *heiß*.

Entropie als treibende Kraft

Man stelle sich eine Fliege vor, die im Zimmer ziellos umher fliegt. Wenn sie durch das offene Fenster nach draußen gelangt, ist es sehr unwahrscheinlich, dass sie in den Raum zurückkehrt, - nicht etwa, weil sie das Fenster von nun an meiden würde, sondern weil es draußen einfach so viel mehr mögliche Aufenthaltsorte gibt als drinnen. Dieser statistische Effekt scheint die Fliege wie eine Kraft aus dem Raum nach draußen zu ziehen, obwohl es keine konkrete physikalische Kraft gibt, die auf die Fliege in dieser Weise wirkt.

Alle thermodynamischen Vorgänge sind von solchen entropischen Kräften getrieben und bewegen sich folglich immer in diejenige Richtung, in der das Gesamtsystem seine Entropie erhöhen kann. Als Beispiel betrachten wir zwei Systeme A und B, die über eine Wärmebrücke Energie austauschen können. Der Energieaustausch fluktuiert und ist prinzipiell in beiden Richtungen möglich, jedoch wird im Mittel diejenige Richtung bevorzugt sein, in der sich die Entropie des Gesamtsystems erhöhen lässt. So kommt es zu einem makroskopisch sichtbaren Energiefluss.

Abbildung 6: Zwei thermisch gekoppelte Systeme

Thermisches Gleichgewicht

Der gerichtete Energiefluss kann nur aufrecht erhalten werden, solange sich dabei die Entropie des Gesamtsystems erhöht. Der Vorgang endet also, wenn beim Transport einer kleinen Energiemenge ΔE von A nach B der Entropiegewinn ΔH^B auf der einen Seite durch einen Entropieverlust $\Delta H^A = -\Delta H^B$ auf der anderen Seite kompensiert wird. Da andereseites aber auch $\Delta E^A = -\Delta E^B$ ist, erhalten wir

$$\frac{\Delta E}{\Delta H^A} = \frac{\Delta E}{\Delta H^B} \quad \Leftrightarrow \quad T_A = T_B \ .$$

Der gerichtete Wärmeaustausch endet also, wenn beide Systeme die gleiche Temperatur erreichen.

Wärmebad

Eine besondere Situation entsteht, wenn eines der beiden Systeme, beispielsweise B, sehr groß ist. Bei Energieaustausch mit einem solchen Wärmebad wird sich dessen Entropie ändern, nicht jedoch dessen Temperatur. Damit wird es möglich, die differentielle Beziehung $\Delta E_A = -\Delta E_B = -T_B \Delta H_B$ zu integrieren:

$$E_A = const - T_B H_B$$

Damit definiert man die sogenannte *freie Energie*

$$F_A = E_A - T_B H_A = const - T_B (H_A + H_B)$$

und kann leicht erkennen, dass eine Maximierung der Entropie des Gesamtsystems $H_A + H_B$ mit einer Minimierung von F gleichbedeutend ist. Mit diesem Trick integriert man den Effekt des Wärmereservoirs in einem thermodynamischen Potential F.

Zusammenfassung

Entropie ist eine thermodynamische Größe, die gerade Anfängern schwierig zu vermitteln ist. Es bietet sich deshalb an, den Begriff der Entropie zunächst informationstheoretisch zu motivieren und sich erst dann physikalischen Fragestellungen vom Blickwinkel der statistischen Mechanik zu nähern.

Literatur

[1] M. Tribus, E.C. McIrvine, Scientific American, 224 (1971).

[2] Siehe z.B.: T. M. Cover and J. A. Thomas, Elements of Information Theory“, Wiley (2006).

[3] chemistrytable.webs.com/enthalpyentropyandgibbs.htm .

[4] weitere Literaturhinweise in arxiv.org/abs/0804.4561

Der Autor

Haye Hinrichsen ist seit 2003 Professor für Theoretische Physik an der Universität Würzburg. Sein Hauptinteresse gilt der statistischen Physik im Nichtgleichgewicht.

Anschrift:
Prof. Dr. Haye Hinrichsen
Fakultät für Physik und Astronomie
Universität Würzburg – Campus Süd
97074 Würzburg