

Mat.-wiss. u. Werkstofftech. (Materials Science and Engineering Technology) **45**(3), 137-168
(2014)

Entropie und Mischungsentropie

5

Hans-Juergen Hoffmann

Adresse:

Institut für Werkstoffwissenschaften und –technologien: Glaswerkstoffe

10

Technische Universität Berlin,

Hardenbergstraße 40, 10623 Berlin

Tel: 030/314-22352 **Email:** hoffmann.glas@tu-berlin.de

15

Schlüsselworte: Entropie, Mischungsentropie, Entropie von Boson- und Fermion-Systemen,
Glastransformation, Definition von Glas, Entropie im Fall des Nichtgleichgewichts

Zusammenfassung

Die Entropie bei konstantem Volumen als Funktion der Temperatur $S(T)$ kann durch *Integration* der molaren spezifischen Entropiekapazität C_V/T bestimmt werden (C_V : molare spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen). Auf einem zweiten Weg kann $S(T)$ für konstantes Volumen als *Ableitung* der Freien Energie nach der Temperatur T bestimmt werden. Vor kurzem wurde gezeigt, dass für ein System, das der Boltzmann-Statistik gehorcht, die Ergebnisse beider Wege äquivalent zur *Mischungsentropie* sind, wenn man den Grund- und die angeregten Zustände der jeweiligen Subsysteme oder Elementarsysteme als mischende Komponenten oder Quantenkomponenten betrachtet. Dieses Ergebnis erweitert den Anwendungsbereich der bekannten Formel für die Mischungsentropie beträchtlich, die in Lehrbüchern nur für die Mischung von realen indifferenten Komponenten hergeleitet wird.

In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass mit der Formel für die Mischungsentropie ebenfalls die Entropie von Bose- und Fermi-Systemen berechnet werden kann. Somit kann jede Entropie als Mischungsentropie unterschiedlicher realer Komponenten und Quantenkomponenten berechnet und gedeutet werden. Umgekehrt darf man Übergänge zwischen Grund- und angeregten Zuständen jedes Systems als Mischungsprozess ansehen. Auf diese Weise wird der Schmelzübergang chemisch gebundener Festkörper und insbesondere der Glasübergang, bei dem infolge der Kühlung die Mischungsentropie der Schmelze teilweise in der Konfiguration eingefroren wird, gedeutet. Diese Ergebnisse führen zu einer neuen Deutung der Glastransformation bzw. des Glasübergangs und einer neuen Definition struktureller Gläser.