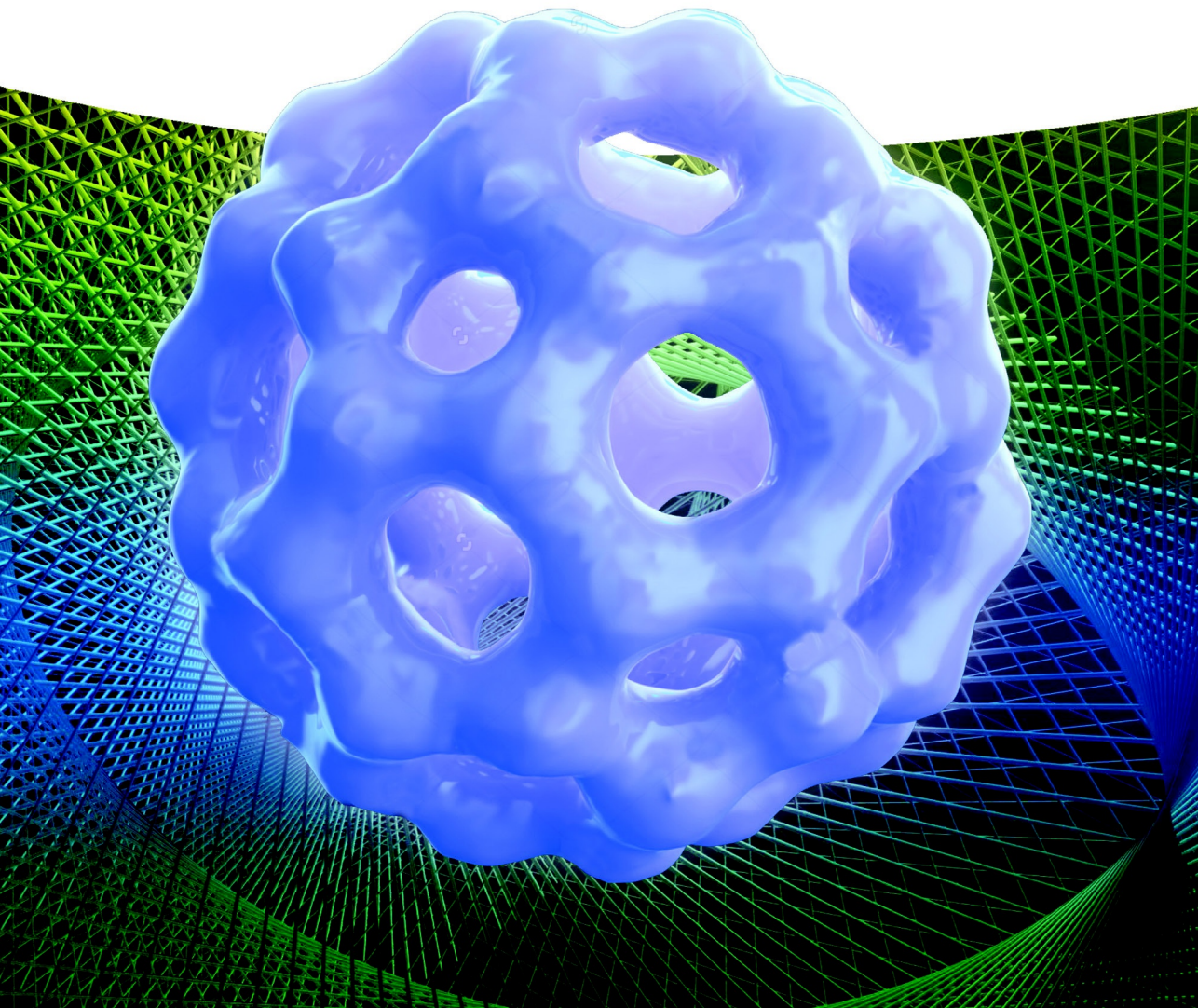


Ansgar Jünger und Hans G. Zachmann

 **Mathematik für  
Chemiker**

Achte Auflage





## **Mathematik für Chemiker**



# **Mathematik für Chemiker**

*Ansgar Jüngel und Hans Zachmann*

8. Auflage

**WILEY-VCH**

## Autoren

### **Prof. Dr. Ansgar Jüngerl**

Institut für Analysis und  
Scientific Computing  
Technische Universität Wien  
Wiedner Hauptstraße 8–10  
1040 Wien  
Austria

### **Prof. Dr. Hans Zachmann†**

Institut für Technische und  
Makromolekulare Chemie  
Universität Hamburg  
Bundesstraße 45  
20146 Hamburg  
Germany

**Coverbild** © Shutterstock/Mopic  
(3D model abstract of a fullerene molecule).

## 8. Auflage

Alle Bücher von WILEY-VCH werden sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren, Herausgeber und Verlag in keinem Fall, einschließlich des vorliegenden Werkes, für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler irgendeine Haftung.

### **Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

© 2023 WILEY-VCH GmbH, Boschstr. 12,  
69469 Weinheim, Germany.

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in andere Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikroverfilmung oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. Die Wiedergabe von Warenbezeichnungen, Handelsnamen oder sonstigen Kennzeichen in diesem Buch berechtigt nicht zu der Annahme, dass diese von jedermann frei benutzt werden dürfen. Vielmehr kann es sich auch dann um eingetragene Warenzeichen oder sonstige gesetzlich geschützte Kennzeichen handeln, wenn sie nicht eigens als solche markiert sind.

**Umschlaggestaltung** Adam-Design, Weinheim  
**Satz** le-tex publishing services GmbH, Leipzig

**Print ISBN** 978-3-527-34919-7

**ePDF ISBN** 978-3-527-83523-2

**ePub ISBN** 978-3-527-83524-9

Gedruckt auf säurefreiem Papier.

## Inhaltsverzeichnis

**Autorenverzeichnis** XIII

**Vorwort zur achten Auflage** XV

<b>1</b>	<b>Mathematische Grundlagen</b>	<b>1</b>
1.1	Die Sprache der Mathematik	1
1.2	Mengenlehre	3
1.3	Zahlen	6
1.4	Einige Rechenregeln	12
1.5	Kombinatorik	15
<b>2</b>	<b>Lineare Algebra</b>	<b>23</b>
2.1	Matrizen	23
2.2	Lineare Gleichungssysteme und Gauß-Algorithmus	31
2.3	Determinanten	38
2.3.1	Definition	38
2.3.2	Rechenregeln	42
2.3.3	Berechnung von Determinanten	45
2.4	Lineare Unabhängigkeit und Rang einer Matrix	48
2.4.1	Lineare Unabhängigkeit	48
2.4.2	Rang einer Matrix	50
2.5	Lösungstheorie linearer Gleichungssysteme	52
2.5.1	Lösbarkeit linearer Gleichungssysteme	52
2.5.2	Berechnung der Inversen einer Matrix	57
<b>3</b>	<b>Unendliche Zahlenfolgen und Reihen</b>	<b>61</b>
3.1	Unendliche Zahlenfolgen	61
3.1.1	Definitionen und Beispiele	61
3.1.2	Konvergenz einer Zahlenfolge	63
3.1.3	Das Rechnen mit Grenzwerten	65
3.2	Unendliche Reihen	69
3.2.1	Definitionen und Beispiele	69
3.2.2	Konvergenzkriterien	72
3.2.3	Das Rechnen mit unendlichen Reihen	75
3.2.4	Potenzreihen	77

<b>4</b>	<b>Funktionen</b>	<b>81</b>
4.1	Erläuterung des Funktionsbegriffes	81
4.2	Funktionen einer Variablen	82
4.2.1	Darstellung	82
4.2.2	Umkehrung und implizite Darstellung einer Funktion	84
4.2.3	Wichtige Begriffe zur Charakterisierung von Funktionen	85
4.2.4	Einige spezielle Funktionen	87
4.2.5	Stetigkeit	98
4.2.6	Funktionsfolgen	100
4.3	Funktionen mehrerer Variablen	103
4.3.1	Darstellung	103
4.3.2	Definitionsbereiche	108
4.3.3	Stetigkeit	109
<b>5</b>	<b>Vektoralgebra</b>	<b>113</b>
5.1	Rechnen mit Vektoren	113
5.1.1	Definition eines Vektors	113
5.1.2	Rechenregeln für Vektoren	116
5.1.3	Skalarprodukt	119
5.1.4	Vektorprodukt	121
5.1.5	Spatprodukt	124
5.2	Darstellung von Vektoren in verschiedenen Basen	127
5.2.1	Lineare Unabhängigkeit von Vektoren	127
5.2.2	Basis im $\mathbb{R}^3$ und Basiswechsel	131
5.2.3	Orthonormalbasis	135
<b>6</b>	<b>Analytische Geometrie</b>	<b>139</b>
6.1	Analytische Darstellung von Kurven und Flächen	139
6.1.1	Darstellung durch Gleichungen in $x$ , $y$ und $z$	139
6.1.2	Parameterdarstellung	148
6.2	Lineare Abbildungen	151
6.2.1	Definitionen	151
6.2.2	Eigenwerte und Eigenvektoren	153
6.2.3	Drehungen und Spiegelungen	157
6.3	Koordinatentransformationen	164
6.3.1	Lineare Transformationen	164
6.3.2	Transformation auf krummlinige Koordinaten	171
<b>7</b>	<b>Differenziation und Integration einer Funktion einer Variablen</b>	<b>177</b>
7.1	Differenziation	177
7.1.1	Die erste Ableitung einer Funktion	177
7.1.2	Rechenregeln für das Differenzieren	181
7.1.3	Differenziation einiger Funktionen	185
7.1.4	Differenziation komplexwertiger Funktionen	188
7.1.5	Höhere Ableitungen	193



- 7.1.6 Mittelwertsatz der Differenzialrechnung 194
- 7.1.7 Anwendungen 195
- 7.2 Integration von Funktionen 198
  - 7.2.1 Das bestimmte Integral 198
  - 7.2.2 Das unbestimmte Integral 204
  - 7.2.3 Integrationsmethoden 208
  - 7.2.4 Uneigentliche Integrale 217
  - 7.2.5 Anwendungen 221
- 7.3 Differenziation und Integration von Funktionenfolgen 227
- 7.4 Die Taylor-Formel 230
- 7.5 Unbestimmte Ausdrücke: Regel von de l'Hospital 238
- 7.6 Kurvendiskussion 244
  - 7.6.1 Definitionen 244
  - 7.6.2 Bestimmung von Nullstellen 245
  - 7.6.3 Bestimmung von Extrema 248
  - 7.6.4 Bestimmung von Wendepunkten und Sattelpunkten 250
- 8 Differenziation und Integration von Funktionen mehrerer Variablen 253**
  - 8.1 Differenziation 253
    - 8.1.1 Die partielle Ableitung 253
    - 8.1.2 Höhere Ableitungen und der Satz von Schwarz 257
    - 8.1.3 Existenz einer Tangentialebene 259
    - 8.1.4 Das totale Differenzial 261
    - 8.1.5 Die Kettenregel 263
    - 8.1.6 Differenziation impliziter Funktionen 266
    - 8.1.7 Partielle Ableitungen in der Thermodynamik 269
  - 8.2 Einfache Integrale 273
  - 8.3 Bereichsintegrale 277
    - 8.3.1 Definition des zweidimensionalen Bereichsintegrals 277
    - 8.3.2 Berechnung des zweidimensionalen Bereichsintegrals 279
    - 8.3.3 Allgemeine Bereichsintegrale 283
    - 8.3.4 Transformationsformel 284
    - 8.3.5 Berechnung von Volumina und Oberflächen 291
  - 8.4 Kurvenintegrale 300
    - 8.4.1 Definition und Berechnung 300
    - 8.4.2 Wegunabhängigkeit des allgemeinen Kurvenintegrals 305
    - 8.4.3 Vollständiges und unvollständiges Differenzial 308
    - 8.4.4 Satz von Gauß im  $\mathbb{R}^2$  311
  - 8.5 Oberflächenintegrale 314
  - 8.6 Die Taylor-Formel 317
  - 8.7 Extremwerte 321
    - 8.7.1 Definitionen 321
    - 8.7.2 Bestimmung von Extremwerten und Sattelpunkten 322
    - 8.7.3 Bestimmung von Extremwerten unter Nebenbedingungen 325

<b>9</b>	<b>Vektoranalysis und Tensorrechnung</b>	<b>333</b>
9.1	Vektoranalysis	333
9.1.1	Vektor- und Skalarfelder	333
9.1.2	Der Gradient	335
9.1.3	Konservative Vektorfelder	338
9.1.4	Die Divergenz und der Satz von Gauß im $\mathbb{R}^3$	340
9.1.5	Die Rotation und der Satz von Stokes	343
9.1.6	Rechenregeln	347
9.1.7	Krummlinige Koordinaten	348
9.2	Tensorrechnung	354
9.2.1	Tensoren zweiter Stufe	354
9.2.2	Tensoren höherer Stufe	357
<b>10</b>	<b>Fourier-Reihen und Fourier-Transformation</b>	<b>361</b>
10.1	Fourier-Reihen	361
10.1.1	Reelle Fourier-Reihen	361
10.1.2	Komplexe Fourier-Reihen	367
10.1.3	Fourier-Reihe einer Funktion in mehreren Variablen	370
10.2	Fourier-Transformation	373
10.2.1	Definitionen	373
10.2.2	Beispiele	377
10.2.3	Eigenschaften	381
10.2.4	Anwendungen in der Chemie	392
10.3	Orthonormalsysteme	399
<b>11</b>	<b>Gewöhnliche Differenzialgleichungen</b>	<b>405</b>
11.1	Beispiele und Definitionen	405
11.2	Differenzialgleichungen erster Ordnung	412
11.2.1	Richtungsfeld, Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen	412
11.2.2	Trennung der Variablen	415
11.2.3	Lineare Differenzialgleichungen	417
11.2.4	Systeme homogener linearer Differenzialgleichungen	421
11.2.5	Systeme inhomogener linearer Differenzialgleichungen	430
11.2.6	Exakte Differenzialgleichungen	433
11.3	Lineare Differenzialgleichungen höherer Ordnung	439
11.3.1	Allgemeines über die Existenz von Lösungen	439
11.3.2	Die ungedämpfte freie Schwingung	443
11.3.3	Die gedämpfte freie Schwingung	448
11.3.4	Die erzwungene Schwingung	451
11.3.5	Systeme von Differenzialgleichungen zweiter Ordnung	454
11.4	Spezielle lineare Differenzialgleichungen zweiter Ordnung	460
11.4.1	Potenzreihenansatz	460
11.4.2	Die Legendre-Differenzialgleichung	464
11.4.3	Die Laguerre-Differenzialgleichung	470
11.4.4	Die Bessel-Differenzialgleichung	473

- 12 Partielle Differenzialgleichungen 479**
  - 12.1 Definition und Beispiele 479
  - 12.2 Die Potenzialgleichung 483
    - 12.2.1 Lösung durch Fourier-Transformation 483
    - 12.2.2 Lösung durch Fourier-Reihenansatz 484
    - 12.2.3 Lösung in Polarkoordinaten 487
  - 12.3 Die Wärmeleitungsgleichung 489
    - 12.3.1 Lösung durch Fourier-Transformation 489
    - 12.3.2 Lösung durch Separationsansatz 491
  - 12.4 Die Wellengleichung 493
    - 12.4.1 Lösung durch Separationsansatz 493
    - 12.4.2 Allgemeine Lösungsformel 496
    - 12.4.3 Die schwingende Membran 498
  - 12.5 Die Schrödinger-Gleichung 503
    - 12.5.1 Die stationäre Gleichung 503
    - 12.5.2 Der harmonische Oszillator 504
    - 12.5.3 Das Wasserstoffatom 507
  
- 13 Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik 519**
  - 13.1 Einführung 519
    - 13.1.1 Quantenmechanische Begriffe 519
    - 13.1.2 Axiomatik der Quantenmechanik 523
  - 13.2 Hilbert-Räume 526
    - 13.2.1 Sobolev-Räume 526
    - 13.2.2 Vollständige Orthonormalsysteme 531
    - 13.2.3 Lineare Operatoren 535
    - 13.2.4 Dualräume und Dirac-Notation 536
  - 13.3 Beschränkte lineare Operatoren 541
    - 13.3.1 Definition und Beispiele 541
    - 13.3.2 Projektoren 544
    - 13.3.3 Symmetrische Operatoren 546
  - 13.4 Unbeschränkte lineare Operatoren 554
    - 13.4.1 Selbstadjungierte Operatoren 554
    - 13.4.2 Die heisenbergsche Unschärferelation 559
    - 13.4.3 Spektraldarstellung selbstadjungierter Operatoren 561
  - 13.5 Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme 570
  
- 14 Wahrscheinlichkeitsrechnung 575**
  - 14.1 Einleitung 575
    - 14.1.1 Aufgaben der Wahrscheinlichkeitsrechnung 575
    - 14.1.2 Der Ereignisraum 576
    - 14.1.3 Zufallsgrößen 578
  - 14.2 Diskrete Zufallsgrößen 580
    - 14.2.1 Statistische Definition der Wahrscheinlichkeit 580
    - 14.2.2 Summe von Ereignissen 581

14.2.3	Bedingte Wahrscheinlichkeit	584
14.2.4	Produkt von Ereignissen	586
14.2.5	Totale Wahrscheinlichkeit	587
14.3	Kontinuierliche Zufallsgrößen	590
14.3.1	Wahrscheinlichkeitsdichte	590
14.3.2	Verteilungsfunktion	592
14.4	Kette von unabhängigen Versuchen	598
14.4.1	Herleitung der exakten Gleichungen	598
14.4.2	Diskussion der Funktion $P_n(m)$	600
14.4.3	Näherungsgesetze für große $n$	602
14.4.4	Markowsche Ketten	607
14.5	Stochastische Prozesse	614
14.5.1	Definitionen	614
14.5.2	Der Poisson-Prozess	615
<b>15</b>	<b>Fehler- und Ausgleichsrechnung</b>	<b>619</b>
15.1	Zufällige und systematische Fehler	619
15.2	Mittelwert und Fehler der Einzelmessungen	620
15.2.1	Verteilung der Messwerte und Mittelwert	620
15.2.2	Mittlerer Fehler der Einzelmessungen	621
15.2.3	Wahrscheinlicher Fehler der Einzelmessung	623
15.2.4	Praktische Durchführung der Rechnungen	624
15.3	Fehlerfortpflanzung	626
15.3.1	Maximaler Fehler	626
15.3.2	Fortpflanzung des mittleren Fehlers	628
15.3.3	Mittlerer Fehler des Mittelwertes	630
<b>16</b>	<b>Numerische Methoden</b>	<b>633</b>
16.1	Lineare Gleichungssysteme	633
16.1.1	Gauß-Algorithmus	633
16.1.2	Thomas-Algorithmus	637
16.1.3	Iterative Lösungsmethoden	639
16.1.4	Ausgleichsrechnung	642
16.2	Nichtlineare Gleichungen	645
16.2.1	Newton-Verfahren im Eindimensionalen	645
16.2.2	Newton-Verfahren im Mehrdimensionalen	646
16.3	Eigenwertprobleme	650
16.3.1	Potenzmethode	650
16.3.2	QR-Verfahren	652
16.4	Gewöhnliche Differenzialgleichungen	655
16.4.1	Euler-Verfahren	655
16.4.2	Runge-Kutta-Verfahren	659
16.4.3	Steife Differenzialgleichungen	661
16.5	Computational Chemistry	664
16.5.1	Dichtefunktionaltheorie	664

- 16.5.2 Maschinenlernen [670](#)
- 16.5.3 Softwarepakete [677](#)

**Antworten und Lösungen** [679](#)

**Literatur** [729](#)

**Weiterführende Literatur** [731](#)

**Stichwortverzeichnis** [735](#)



## Autorenverzeichnis

### Prof. Dr. Ansgar Jünger

Technische Universität Wien  
Institut für Analysis und  
Scientific Computing  
Wiedner Hauptstraße 8–10  
1040 Wien  
Austria

### Prof. Dr. Hans G. Zachmann<sup>†</sup>

Universität Hamburg  
Institut für Technische und  
Makromolekulare Chemie  
Bundesstraße 45  
20146 Hamburg  
Germany





## **Vorwort zur achten Auflage**

In dieser Auflage wurde das Kapitel über Computerchemie durch kurze Einführungen in die Dichtefunktionaltheorie und das Maschinenlernen erweitert, um der rasanten Entwicklung in computergestützten Verfahren in der Chemie Rechnung zu tragen. Außerdem wurde der Text an die neuen Rechtschreibregeln angepasst und einige Tippfehler, die unbemerkt mitzuwachsen scheinen, wurden beseitigt.

Wien, Februar 2021

*A. Jüngerl*



# 1

## Mathematische Grundlagen

### 1.1 Die Sprache der Mathematik

Die Aussagen der Umgangssprache sind häufig nicht eindeutig. So wird beispielsweise das Wort „oder“ in sehr unterschiedlichem Sinne gebraucht. Im Satz „Schwimm, oder du ertrinkst“ verbindet es zwei alternative Möglichkeiten, von denen nur eine zutreffen kann. Wenn dagegen auf einem Schild in einem Büro zu lesen ist: „Wer stiehlt oder betrügt, wird entlassen“, so wird hier das Wort „oder“ nicht im Sinne des Ausschließens gebraucht; wenn jemand stiehlt *und* betrügt, so wird er natürlich auch entlassen.

Für die Mathematik sind derartige Unsicherheiten untragbar und müssen daher vermieden werden. Am konsequentesten lässt sich das mithilfe der *Aussagenlogik* erreichen. In dieser werden den grundlegenden Verknüpfungen bestimmte Symbole zugeordnet. Beispielsweise stehen das Symbol „ $\wedge$ “ für die Verknüpfung „und“ im Sinne von „sowohl als auch“ und das Zeichen „ $\vee$ “ für die Verknüpfung „oder“ im oben als Zweites genannten Sinne. Auf diese Art erhält man eine sehr kompakte, völlig eindeutige Zeichensprache. Da aber diese Sprache nur mit erheblicher Mühe gelesen werden kann und sich nicht allgemein eingebürgert hat, soll sie im vorliegenden Buch nicht verwendet werden. Wir wollen uns vielmehr bemühen, die gewöhnliche Sprache in möglichst eindeutiger Weise zu benutzen.

Um das zu erreichen, müssen wir vor allem auf die Formulierung mathematischer Sätze eingehen. Sie wird gewöhnlich nach dem folgenden Schema vorgenommen: Man legt zunächst die *Voraussetzungen* dar, unter denen der Satz gilt, und gibt dann den Satz in Form einer *Behauptung* an. Natürlich muss die Richtigkeit der Behauptung mit einem *Beweis* sichergestellt werden, doch in diesem Buch verzichten wir weitestgehend auf Beweise und verweisen hierfür auf die mathematische Literatur.

**Beispiel 1.1** Betrachten wir als Beispiel den Satz: Wenn  $a$  und  $b$  ungerade Zahlen sind, so ist die Summe  $a + b$  immer eine gerade Zahl. Im angegebenen Schema lautet dieser Satz wie folgt:

*Voraussetzung:*  $a$  und  $b$  sind ungerade Zahlen.

*Behauptung:*  $a + b$  ist eine gerade Zahl.

Von besonderem Interesse ist die Frage, ob die Umkehrung eines gegebenen Satzes, die man durch eine Vertauschung der Behauptung und Voraussetzung erhält, richtig ist. Damit dies der Fall ist, muss im ursprünglichen Satz aus dem Zutreffen der Behauptung das Zutreffen der Voraussetzung folgen. Mathematische Sätze, für die das gilt, nennt man *umkehrbar*. Nicht alle mathematischen Aussagen sind umkehrbar.

**Beispiel 1.2** Betrachten wir als Beispiel den eben angeführten Satz:

„Wenn  $a$  und  $b$  ungerade Zahlen sind, dann ist  $a + b$  eine gerade Zahl.“

Wir sagen auch: Die Aussage „ $a$  und  $b$  sind ungerade Zahlen“ *impliziert* die Aussage „ $a + b$  ist eine ungerade Zahl“. Die Umkehrung würde lauten:

„Wenn  $a + b$  eine gerade Zahl ist, dann sind  $a$  und  $b$  ungerade Zahlen.“

Diese Aussage gilt nicht, da beispielsweise die Summe aus 2 und 4, nämlich 6, eine gerade Zahl ist, obwohl 2 und 4 keine ungeraden Zahlen sind. Anders liegen die Verhältnisse beim folgenden Satz:

„Wenn in einem Dreieck die Winkel gleich sind, so sind auch die Seiten gleich.“

Die Umkehrung lautet hier:

„Wenn in einem Dreieck die Seiten gleich sind, so sind auch die Winkel gleich.“

Diese Aussage ist ebenfalls richtig, sodass der Satz über die Winkel und Seiten im Dreieck umkehrbar ist.

Wenn auch die Umkehrung eines Satzes richtig ist, so nennt man dessen Voraussetzung eine *hinreichende und notwendige* Bedingung für die Behauptung. Man sagt z. B.: „Die Bedingung, dass die Winkel in einem Dreieck gleich sind, ist hinreichend und notwendig dafür, dass auch die Seiten gleich sind.“ Kürzer kann man das auch in folgender Weise formulieren: „Die Seiten eines Dreiecks sind *genau dann* gleich, *wenn* die Winkel gleich sind.“ Ist ein Satz nicht umkehrbar, so nennt man die Voraussetzung nur eine *hinreichende* Bedingung. Man sagt z. B.: „Die Bedingung, dass  $a$  und  $b$  ungerade sind, ist hinreichend dafür, dass  $a + b$  gerade ist.“ (Sie ist nicht notwendig, denn auch bei geraden Zahlen  $a$  und  $b$  ist die Summe geradzahlig.) Schließlich gibt es auch Bedingungen, die nur *notwendig* sind.

Man sieht daraus: Aus dem zu Beginn dieses Abschnitts angegebenen Schema „Voraussetzung und Behauptung“ kann man jeweils nur entnehmen, dass die Voraussetzung hinreichend ist. Will man angeben, ob die Voraussetzung auch eine not-

wendige Bedingung ist, muss man den Satz ausführlicher formulieren, so wie das eben angedeutet wurde.

**Beispiel 1.3** Anschließend wollen wir noch einige weitere Beispiele für die verschiedenen Arten von Bedingungen angeben. Im Satz „Wenn Eis unter Atmosphärendruck über  $0^\circ\text{C}$  erhitzt wird, so schmilzt es“ ist die Bedingung „erhitzen“ notwendig und hinreichend für das Schmelzen. In der Aussage „Wenn die Sonne scheint, so ist es hell“ ist die angeführte Bedingung nur hinreichend, aber nicht notwendig, denn es kann auch hell aufgrund von künstlichem Licht sein. Im Satz „Wenn es kalt ist, schneit es“ handelt es sich demgegenüber nur um eine notwendige Bedingung; Kälte allein reicht noch nicht für den Schneefall aus, es muss auch noch zu einem Niederschlag kommen.

## 1.2 Mengenlehre

Was ist eine Menge? *Eine Menge erhält man durch die Zusammenfassung von irgendwelchen Objekten unserer Anschauung.* Die entsprechenden Objekte nennt man *Elemente der Menge*. Die Objekte „Haus, Katze und Schornstein“ z. B. bilden eine Menge von drei Elementen. Ebenso bilden die ganzen Zahlen oder die Gesamtheit aller chemischen Reaktionen, bei denen Sauerstoff frei wird, jeweils eine Menge. Die Elemente einer bestimmten Menge kann man entweder durch Aufzählung angeben, wie das im ersten Beispiel getan wurde, oder durch Angabe irgendwelcher Merkmale, an denen man die Zugehörigkeit eines Elements zur Menge erkennen kann, wie beim zweiten und dritten Beispiel. Bei der Aufzählung pflegt man die Elemente zwischen geschweifte Klammern zu setzen. Wenn z. B. die Menge  $M$  aus den Elementen  $a$  und  $b$  besteht, so schreibt man:

$$M = \{a, b\}.$$

Enthält die Menge kein einziges Element, so spricht man von einer *leeren Menge* und bezeichnet diese mit dem Symbol  $\emptyset$ . Elemente einer Menge werden nur einmal aufgelistet, d. h., es gibt keine Mengen der Form  $\{a, a, b\}$ . Außerdem spielt die Reihenfolge der Elemente keine Rolle, d. h., die Menge  $\{a, b\}$  kann auch als  $\{b, a\}$  geschrieben werden.

Mengen von Zahlen, die bestimmten Eigenschaften genügen, schreibt man in der Form  $\{x : x \dots\}$ , wobei die Punkte die Eigenschaften angeben. So lautet beispielsweise die Menge aller Zahlen  $1, 2, 3, \dots$ , die gerade sind,  $x : x$  ist eine gerade Zahl; diese Menge kann natürlich auch als  $\{2, 4, 6, \dots\}$  geschrieben werden.

Wir betrachten nun zwei Mengen  $M_1$  und  $M_2$ . Unter der *Vereinigung* von  $M_1$  und  $M_2$  versteht man diejenige Menge, die durch Vereinigung aller Elemente aus  $M_1$  und  $M_2$  entsteht. Man bezeichnet die Vereinigung mit  $M_1 \cup M_2$ . Die Elemente aus  $M_1 \cup M_2$  sind also Elemente aus  $M_1$  oder aus  $M_2$ :

$$M_1 \cup M_2 = \{x : x \in M_1 \text{ oder } x \in M_2\}.$$

Der *Durchschnitt* von  $M_1$  und  $M_2$  wird durch diejenigen Elemente gebildet, die beiden Mengen gemeinsam angehören. Man bezeichnet ihn mit  $M_1 \cap M_2$ . Es gilt also:

$$M_1 \cap M_2 = \{x : x \in M_1 \text{ und } x \in M_2\}.$$

Die *Restmenge*  $M_1 \setminus M_2$  (gelesen: „ $M_1$  ohne  $M_2$ “) enthält alle Elemente aus der Menge  $M_1$ , die nicht Element aus  $M_2$  sind:

$$M_1 \setminus M_2 = \{x : x \in M_1 \text{ und } x \notin M_2\}.$$

Das *kartesische Produkt* der beiden Mengen wird durch alle Elemente gebildet, die man durch Zusammenfassung je eines Elements aus  $M_1$  mit einem Element aus  $M_2$  erhält. Man bezeichnet es mit  $M_1 \times M_2$ :

$$M_1 \times M_2 = \{(x, y) : x \in M_1, y \in M_2\}.$$

**Beispiel 1.4** Betrachte beispielsweise die Mengen  $M_1 = \{1, 2, 3\}$  und  $M_2 = \{3, 4\}$ . Dann sind der Durchschnitt  $M_1 \cap M_2 = \{3\}$ , die Vereinigung  $M_1 \cup M_2 = \{1, 2, 3, 4\}$  (beachte, dass die Elemente einer Menge nicht mehrfach aufgelistet werden), die Restmenge  $M_1 \setminus M_2 = \{1, 2\}$  und das kartesische Produkt

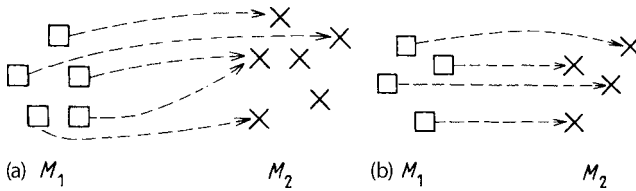
$$M_1 \times M_2 = \{(1, 3), (1, 4), (2, 3), (2, 4), (3, 3), (3, 4)\}.$$

Die Elemente der letzten Menge sind geordnete Paare, und es kommt hier auf die Reihenfolge an: Die Elemente  $(1, 2)$  und  $(2, 1)$  sind verschieden.

Sind alle Elemente der Menge  $M_1$  in  $M_2$  enthalten, so sagt man, dass  $M_1$  eine *Teilmenge* von  $M_2$  sei und schreibt  $M_1 \subset M_2$ . Besitzen zwei Mengen die gleichen Elemente, so sagt man, die Mengen seien *gleich*, in Zeichen  $M_1 = M_2$ . Dies ist genau dann der Fall, wenn sowohl  $M_1 \subset M_2$  als auch  $M_2 \subset M_1$  gelten. Eine Menge heißt *endlich*, wenn sie endlich viele (und nicht unendlich viele) Elemente enthält.

Ein wichtiger Begriff bei der Betrachtung zweier Mengen ist der der *Abbildung*. Gegeben seien z. B. die zwei in Abb. 1.1 angegebenen Mengen  $M_1$  und  $M_2$ . Wir wollen jedem Element der Menge  $M_1$  genau eines aus der Menge  $M_2$  zuordnen, wie das in Abb. 1.1 durch die Pfeile geschehen ist. Eine solche Zuordnung bezeichnet man als *Abbildung* der Elemente aus  $M_1$  auf die Elemente aus  $M_2$ . Wenn nun bei der Abbildung jedem Element der Menge  $M_1$  ein anderes Element der Menge  $M_2$  zugeordnet wird und wenn dabei alle Elemente der Menge  $M_2$  erfasst werden, so nennt man die beiden Mengengleichmächtig. Dies ist in Abb. 1.1b der Fall.

Wir wollen nun die Elemente einer einzigen Menge betrachten. Zwischen diesen Elementen können bestimmte Beziehungen oder, wie man auch sagt, Relationen bestehen. Eine wichtige Relation ist die *Gleichheitsbeziehung*, für die man das Zeichen „ $=$ “ verwendet. Man sagt, dass zwei Elemente  $a$  und  $b$  gleich sind, wenn sie hinsichtlich eines bestimmten Gesichtspunktes übereinstimmen. So gilt beispielsweise innerhalb der Menge der natürlichen Zahlen  $2 = 2$ , weil mit jeder Zwei die gleiche Anzahl von Dingen gemeint ist. Innerhalb der Menge der Brüche ist  $\frac{2}{3} = \frac{4}{6}$ , weil



**Abb. 1.1** (a) Beispiel für eine Abbildung der Elemente der Menge  $M_1$  auf die Elemente der Menge  $M_2$ . (b) Beispiel für zwei gleichmächtige Mengen  $M_1$  und  $M_2$ .

beide Symbole die gleiche Quantität eines Stoffes darstellen. Zu einer Gleichheit, die sich nicht auf Zahlen bezieht, kommt man, wenn man die Menge aller Menschen auf der Erde betrachtet. Man kann dann definieren: „Zwei Menschen  $a$  und  $b$  sollen gleich sein, wenn einer der beiden Elternteile von  $a$  die gleiche Muttersprache wie einer der beiden Elternteile von  $b$  spricht.“ Der Begriff der Gleichheit drückt nicht notwendig eine *Identität* aus, sondern allgemeiner eine Beziehung, die man als *Äquivalenz* bezeichnet.

Weitere wichtige Relationen stellen die *Ordnungsbeziehungen* „größer“ und „kleiner“ dar. Diese Beziehungen lassen sich immer dann einführen, wenn die Elemente einer Menge in einer bestimmten Reihenfolge angeordnet sind. Sie sind wie folgt definiert: *Wenn von zwei Elementen  $a$  und  $b$  einer geordneten Menge das Element  $b$  in einer festgelegten Reihenfolge hinter  $a$  steht, so sagen wir, dass  $b$  größer ist als  $a$ , und schreiben dafür  $b > a$ . Steht umgekehrt  $b$  vor  $a$ , so sagen wir, dass  $b$  kleiner ist als  $a$ , und schreiben  $b < a$ .* Wenn wir also z. B. schreiben  $2 < 5$ , was sich in die Worte „zwei ist kleiner als fünf“ kleiden lässt, so meinen wir damit, dass in der Zahlenreihenfolge zwei vor fünf steht.

Man kann verschiedene Relationszeichen auch gleichzeitig verwenden. Die Aussage  $x \geq 2$  z. B. bedeutet, dass  $x$  größer oder gleich 2 sein soll.

Die Zeichen „ $\ll$ “ bzw. „ $\gg$ “ werden angewendet, um anzudeuten, dass eine Zahl „sehr viel kleiner“ bzw. „sehr viel größer“ als eine andere sein soll. Beispielsweise ist  $1 \ll 100$  und  $1 \gg 0,001$ . Diese Schreibweise ist nicht ganz eindeutig, denn ob z. B.  $1 \gg 0,2$  gilt, hängt sehr von der physikalischen oder chemischen Fragestellung ab.

## Fragen und Aufgaben

### Aufgabe 1.1

Zähle diejenigen Elemente der Menge auf, die von den geraden Zahlen zwischen 15 und 25 gebildet werden. Welche Elemente dieser Mengen enthalten mindestens eine Ziffer „2“, welche genau eine Ziffer „2“?

### Aufgabe 1.2

Bestimme für  $M_1 = \{2, 4, 6\}$ ,  $M_2 = \{1, 3, 5\}$  und  $M_3 = \{1, 2, 3\}$  die folgenden Mengen:  $M_1 \cap M_2$ ,  $M_1 \cap M_3$ ,  $M_1 \cup M_3$ .

**Aufgabe 1.3**

Die Menge  $M_1$  wird aus den einzelnen chemischen Reaktionen, bei denen Wasserstoff abgegeben wird, gebildet. Die Menge  $M_2$  besteht aus den chemischen Reaktionen, bei denen in einem Kohlenwasserstoff ein H-Atom durch ein Cl-Atom ersetzt wird. Gib einige Beispiele für die Elemente dieser Mengen an. Sind die beiden Mengen gleichmächtig?

**1.3 Zahlen****Natürliche Zahlen**

Die Anzahl von Elementen einer endlichen Menge wird durch die Zahlen 0, 1, 2 usw. repräsentiert. Genau genommen werden alle natürlichen Zahlen durch die Ziffern 0, 1, 2 usw. bis 9 symbolisiert und im *Dezimalsystem* dargestellt. Zum Beispiel lässt sich die Anzahl 365 der Tage eines Jahres schreiben als  $3 \cdot 10^2 + 6 \cdot 10^1 + 5 \cdot 10^0$ . In der Informatik wird auch ein anderes Zahlensystem verwendet, nämlich das *Dualsystem*. Dieses Zahlensystem besteht aus den Ziffern 0 und 1, und alle Zahlen werden nur mit diesen Ziffern dargestellt. Zum Beispiel bedeutet die Dualzahl 10011 in diesem System  $1 \cdot 2^4 + 0 \cdot 2^3 + 0 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0$ , und das ergibt  $16 + 2 + 1 = 19$ .

Die Menge aller *natürlichen Zahlen* wird mit dem Symbol

$$\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$$

bezeichnet. Soll die Null enthalten sein, schreiben wir  $\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, 3, \dots\} = \mathbb{N} \cup \{0\}$ . Auf dieser Menge sind die bekannten Operationen der Addition „+“, Subtraktion oder Differenz „-“, Multiplikation „·“ und Division „:“ bzw. „/“ definiert. Die Menge der natürlichen Zahlen enthält *abzählbar unendlich* viele Elemente. Dies bedeutet einfach, dass es *unendlich* viele natürliche Zahlen gibt und dass sie *abgezählt* werden können.

**Ganze Zahlen**

Die Rechenoperationen können aus der Menge der natürlichen Zahlen hinausführen: Das Ergebnis der Rechenoperation  $2 - 4$  ist *keine* natürliche Zahl mehr. Daher wird der Zahlenbereich auf die negativen Zahlen erweitert. Die Menge aller *ganzen Zahlen* wird mit dem Symbol

$$\mathbb{Z} = \{0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots\}$$

bezeichnet. Sie enthält also alle natürlichen Zahlen, alle entsprechenden negativen Zahlen und die Null. Ein wichtiger Begriff ist der *Betrag*  $|a|$  einer Zahl  $a$ , definiert durch  $|a| = a$ , falls  $a \geq 0$ , und  $|a| = -a$ , falls  $a < 0$ . Der Betrag definiert hier eine Abbildung von der Menge der ganzen Zahlen  $\mathbb{Z}$  auf die Menge der natürlichen Zahlen einschließlich null  $\mathbb{N}_0$ .

**Rationale Zahlen**

Die Division zweier ganzer Zahlen kann wieder aus dem Zahlenbereich hinausführen, z. B. ist  $2/3$  keine ganze Zahl mehr. Dies führt auf die Definition der *Brüche*. Die



Menge aller Brüche wird als die Menge der *rationalen Zahlen* und mit

$$\mathbb{Q} = \left\{ \frac{p}{q} : p \in \mathbb{Z}, q \in \mathbb{N} \right\}$$

bezeichnet. Für einen Bruch sind die Schreibweisen  $\frac{p}{q}$ ,  $p/q$  und  $p : q$  gleichbedeutend. Man nennt  $p$  den *Zähler* des Bruches und  $q$  den *Nenner*. Die Brüche  $p/0$  und  $0/0$  sind nicht definiert.

Brüche können verschieden dargestellt werden: Die Brüche  $2/3$ ,  $4/6$ ,  $6/9$  usw. bedeuten ein und dieselbe Zahl. Der Übergang von  $4/6$  zu  $2/3$  wird *Kürzen* des Bruches genannt, der Übergang von  $2/3$  zu  $(2 \cdot 2)/(2 \cdot 3) = 4/6$  *Erweitern* des Bruches.

Wir benötigen noch Rechengesetze für die Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division von Brüchen:

1. Addition bzw. Subtraktion:

$$\frac{a}{b} \pm \frac{c}{d} = \frac{ad \pm bc}{bd};$$

2. Multiplikation:

$$\frac{a}{b} \cdot \frac{c}{d} = \frac{ac}{bd};$$

3. Division:

$$\frac{a}{b} : \frac{c}{d} = \frac{a}{b} \cdot \frac{d}{c} = \frac{ad}{bc}.$$

Wir unterscheiden zwischen den Notationen  $1/ab$  und  $1/a \cdot b$ . Ersteres bedeutet  $1/(ab)$ , Letzteres  $(1/a)b = b/a$ . Zum Beispiel ist  $1/2a^2b = 1/(2a^2b)$  und *nicht*  $0,5 \cdot a^2b$ .

Eine besondere Bedeutung haben Brüche mit den Nennern 10, 100, 1000 usw. Man bezeichnet sie als *Dezimalbrüche*. Im Dezimalsystem hat man dafür eine besondere Schreibweise vereinbart: Man setzt fest, dass die erste Ziffer hinter dem Komma innerhalb einer Zahl der Zähler eines Bruches mit dem Nenner 10 ist, die zweite Ziffer der eines Bruches mit dem Nenner 100 usw. Es gilt daher z. B.:

$$2,438 = 2 + \frac{4}{10} + \frac{3}{100} + \frac{8}{1000}.$$

Eine solche aus Dezimalbrüchen zusammengesetzte Zahl nennt man *Dezimalzahl*. Eine Dezimalzahl kann endlich viele Stellen oder unendlich viele besitzen. Eine Dezimalzahl heißt *periodisch*, wenn sich eine gewisse Zahlenfolge immer wieder ohne Ende wiederholt. Beispiele für periodische Dezimalzahlen sind die Zahlen  $2,737\ 373\ 737\ 3 \dots$  oder  $35,366\ 666\ 666\ 6 \dots$ . Es lässt sich zeigen, dass sich jeder Bruch in eine endliche oder in eine periodisch unendliche Dezimalzahl umwandeln lässt und dass umgekehrt jede endliche oder periodisch unendliche Dezimalzahl einem Bruch entspricht. Beispielsweise gilt für die beiden obigen Zahlen:

$$2,737\ 373\ 737\ 3 \dots = \frac{271}{99} \quad \text{und} \quad 35,366\ 666\ 666\ 6 \dots = \frac{1061}{30}.$$

Unendliche *nicht* periodische Dezimalzahlen gehören daher nicht mehr in den Bereich der rationalen Zahlen.

**Reelle Zahlen**

Man kann beweisen, dass die Lösung der quadratischen Gleichung  $x^2 = 2$  keine rationale Zahl ist, d. h., sie kann nicht durch eine periodisch unendliche Dezimalzahl geschrieben werden. Das Lösen der Gleichung führt also aus dem Zahlensystem hinaus. Wir erweitern das Zahlensystem, indem wir alle unendlichen nicht periodischen Dezimalzahlen zu den Brüchen hinzufügen. Dies führt auf die *reellen Zahlen*

$$\mathbb{R} = \left\{ g + r : g \in \mathbb{Z}, \quad r = \frac{a_1}{10} + \frac{a_2}{100} + \dots, \quad a_i \in \{0, 1, 2, \dots, 9\} \right\}.$$

Die reellen Zahlen umfassen alle bekannten Zahlen des Zahlenstrahls. Beispielsweise sind auch die Zahlen  $\pi$  (Kreiszahl) und  $e$  (eulersche Zahl) reelle Zahlen. Reelle Zahlen können stets durch rationale Zahlen bzw. durch Dezimalbrüche approximiert werden. So sind etwa

$$\pi \approx 3,141\,59 \quad \text{und} \quad e \approx 2,718\,28.$$

Das Zeichen „ $\approx$ “ bedeutet, dass die rechte Seite eine Approximation der linken Seite darstellt. Reelle Zahlen, die keine rationalen Zahlen sind, werden auch als *irrationale Zahlen* bezeichnet. Die Zahlen  $\sqrt{2}$ ,  $\pi$  und  $e$  sind irrational. Eine reelle Zahl ist entweder rational oder irrational.

Ein wichtiger Begriff ist das *Intervall* zwischen zwei Zahlen  $a$  und  $b$ . Man versteht darunter alle reellen Zahlen, die zwischen  $a$  und  $b$  liegen. Je nachdem, ob die Zahlen  $a$  und  $b$  zum Intervall dazuzählen, spricht man von *abgeschlossenen* oder *offenen* Intervallen. Genauer führt man die folgenden Begriffe ein:

- abgeschlossenes Intervall:  $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} : a \leq x \leq b\}$ ;
- rechts halboffenes Intervall:  $[a, b) = \{x \in \mathbb{R} : a \leq x < b\}$ ;
- links halboffenes Intervall:  $(a, b] = \{x \in \mathbb{R} : a < x \leq b\}$ ;
- offenes Intervall:  $(a, b) = \{x \in \mathbb{R} : a < x < b\}$ .

Man schreibt auch:

$$\begin{aligned} [a, \infty) &= \{x \in \mathbb{R} : a \leq x < \infty\}, \\ (-\infty, b) &= \{x \in \mathbb{R} : -\infty < x < b\}, \\ (-\infty, \infty) &= \{x \in \mathbb{R} : -\infty < x < \infty\} = \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Die Menge der reellen Zahlen ist im Gegensatz zu den Mengen der natürlichen, ganzen oder rationalen Zahlen nicht abzählbar unendlich, sondern *überabzählbar unendlich*. Dies bedeutet, dass es unendlich viele reellen Zahlen gibt, diese aber nicht mehr abgezählt werden können.

**Komplexe Zahlen**

Beim Lösen quadratischer Gleichungen stellt es sich heraus, dass nicht jede Gleichung eine Lösung im Bereich der reellen Zahlen besitzt. Die Gleichung  $x^2 = -2$  kann keine reelle Lösung besitzen, da die linke Seite eine nicht negative Zahl ist, während die rechte Seite negativ ist. Um derartige Gleichungen dennoch lösen zu können, wird wiederum der Zahlenbereich erweitert.

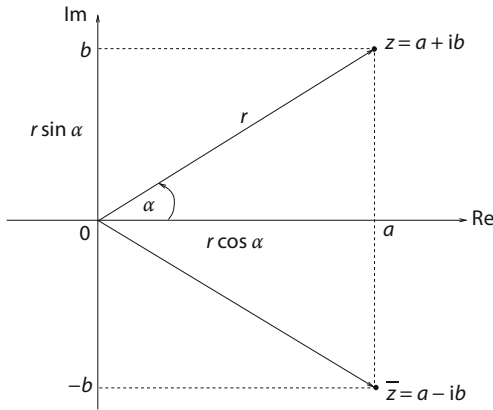


Abb. 1.2 Die gaußsche Zahlenebene.

Zieht man formal die Wurzel aus der Gleichung  $x^2 = -2$ , so würde man die beiden Lösungen  $x = \pm\sqrt{-2}$  erhalten. Das Symbol „ $\sqrt{-2}$ “ macht keinen Sinn als reelle Zahl, daher definiert man eine neue Zahl, die die reellen Zahlen erweitert, nämlich  $i = \sqrt{-1}$ . Streng genommen ist diese Definition nicht ganz korrekt, denn wir haben die Abbildung  $\sqrt{\cdot}$  für negative Zahlen nicht definiert, sodass das Symbol „ $\sqrt{-1}$ “ keinen Sinn macht. Anstelle dessen definiert man die *komplexe Einheit* als diejenige Zahl, für die

$$i^2 = -1$$

gilt. Die Lösungen von  $x^2 = -2$  lauten in dieser Notation  $x = \pm\sqrt{2}i$ , denn  $x^2 = (\pm\sqrt{2}i)^2 = (\sqrt{2})^2 \cdot i^2 = -2$ . Allgemein können wir Zahlen der Form  $a + ib$  mit reellen Zahlen  $a$  und  $b$  definieren. Wir nennen die Gesamtheit solcher Zahlen die Menge der *komplexen Zahlen*

$$\mathbb{C} = \{a + ib : a, b \in \mathbb{R}\}.$$

Ist eine komplexe Zahl  $z = a + ib$  gegeben, so nennen wir  $a$  den *Realteil* und  $b$  den *Imaginärteil*, geschrieben als  $a = \operatorname{Re}(z)$  und  $b = \operatorname{Im}(z)$ . Eine komplexe Zahl  $z$ , deren Realteil gleich null ist ( $\operatorname{Re}(z) = 0$ ), nennen wir *rein imaginär*. Die Zahl  $\bar{z} = a - ib$  heißt die zu  $z$  *konjugiert komplexe Zahl* und  $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$  ist der *Betrag* von  $z$ .

Komplexe Zahlen können nicht mehr auf der reellen Zahlenachse untergebracht werden. Repräsentieren wir jedoch die Zahl  $z = a + ib$  durch das Paar  $(a, b)$ , so ist eine Darstellung in der *gaußschen Zahlenebene* möglich. Hierbei stellen die  $x$ -Achse (oder Abszisse) die Realteilachse und die  $y$ -Achse (oder Ordinate) die Imaginärteilachse dar. Die Zahl  $z$  wird dabei als Ortsvektor eingezeichnet (siehe Abb. 1.2). Insbesondere ist  $|z|$  die Länge des Ortsvektors, gegeben durch  $(a, b)$ , und  $\bar{z}$  ist der an der Realteilachse gespiegelte Vektor  $z$ .

Für die komplexen Zahlen müssen wir nun Rechenregeln einführen. Wir nennen zwei komplexe Zahlen  $z_1 = a_1 + ib_1$  und  $z_2 = a_2 + ib_2$  *gleich*, wenn die Real- und Imaginärteile übereinstimmen:  $z_1 = z_2$  genau dann, wenn  $a_1 = a_2$  und  $b_1 = b_2$ . Die *Summe* zweier komplexer Zahlen wird durch die getrennte Summe der Real- und

Imaginärteile definiert:

$$z_1 + z_2 = (a_1 + a_2) + i(b_1 + b_2).$$

Analog wird die Subtraktion erklärt.

Wir können komplexe Zahlen mit den gewohnten Rechenregeln *multiplizieren*, wenn wir die Definition  $i^2 = -1$  beachten:

$$z_1 \cdot z_2 = (a_1 + ib_1)(a_2 + ib_2) = a_1a_2 - b_1b_2 + i(a_1b_2 + a_2b_1).$$

Ein bemerkenswertes Ergebnis folgt aus der Multiplikation einer komplexen Zahl  $z$  mit ihrer konjugiert komplexen Zahl  $\bar{z}$ :

$$z \cdot \bar{z} = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2 + i(ab - ab) = a^2 + b^2 = |z|^2.$$

Der Betrag einer komplexen Zahl  $z$  ist also gleich der Wurzel aus dem Produkt  $z \cdot \bar{z}$ .

Die *Division* zweier komplexer Zahlen führen wir durch, indem wir zunächst den vorliegenden Bruch mit dem konjugiert komplexen Nenner erweitern. Dadurch wird der Nenner reell, und wir können den ganzen Ausdruck in einen Realteil und einen Imaginärteil aufspalten:


$$\begin{aligned} \frac{a_1 + ib_1}{a_2 + ib_2} &= \frac{(a_1 + ib_1)(a_2 - ib_2)}{(a_2 + ib_2)(a_2 - ib_2)} = \frac{a_1a_2 + b_1b_2 + i(a_2b_1 - a_1b_2)}{a_2^2 + b_2^2} \\ &= \frac{a_1a_2 + b_1b_2}{a_2^2 + b_2^2} + i \frac{a_2b_1 - a_1b_2}{a_2^2 + b_2^2}. \end{aligned}$$

**Beispiel 1.5** Betrachte als Beispiel die komplexen Zahlen  $z_1 = 2 + 3i$  und  $z_2 = 1 - 2i$ . Dann lauten die Summe  $z_1 + z_2 = 3 + i$ , die Differenz  $z_1 - z_2 = 1 + 5i$ , das Produkt  $z_1z_2 = 2 + 3i - 4i - 6i^2 = 8 - i$  und der Quotient

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{(2 + 3i)(1 + 2i)}{(1 - 2i)(1 + 2i)} = \frac{-4 + 7i}{1 + 4} = -\frac{4}{5} + \frac{7}{5}i.$$

Die Lage eines Ortsvektors in der gaußschen Zahlenebene ist durch die Abschnitte auf der  $x$ - und  $y$ -Achse definiert. Ein Ortsvektor kann auch eindeutig durch seine Länge und dem Winkel zwischen  $x$ -Achse und Vektor beschrieben werden. Eine derartige Darstellung in *Polarkoordinaten* ist auch für komplexe Zahlen möglich. Mit der Notation in Abb. 1.2 folgen die Beziehungen  $a = r \cos \alpha$  und  $b = r \sin \alpha$ ,<sup>1)</sup> wobei  $r = |z| = \sqrt{a^2 + b^2}$ , also

$$z = a + ib = r(\cos \alpha + i \sin \alpha).$$

 Eine dritte Darstellungsform erhalten wir durch die *eulersche Formel*

$$e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha. \quad (1.1)$$

1) Die trigonometrischen Funktionen werden in Abschn. 4.2.4 genauer untersucht.

Dann kann eine komplexe Zahl geschrieben werden als

$$z = re^{i\alpha}.$$

Der Vorteil dieser Formulierung ist, dass komplexe Zahlen damit einfach potenziert werden können:

$$z^n = (re^{i\alpha})^n = r^n e^{in\alpha} = r^n (\cos(n\alpha) + i \sin(n\alpha)).$$

Insbesondere können wir einfach *Wurzeln ziehen*, denn es folgt

$$w_1 = \sqrt{z} = (re^{i\alpha})^{1/2} = \sqrt{r} e^{i\alpha/2}.$$

Allerdings gibt es noch eine zweite Wurzel. Um dies einzusehen, bemerken wir zunächst, dass sich aus der Periodizität der trigonometrischen Funktionen die Formel

$$1 = e^{i \cdot 0} = \cos 0 + i \sin 0 = \cos 2\pi + i \sin 2\pi = e^{2\pi i}$$

ergibt. Dann ist

$$w_2 = \sqrt{r} e^{i(\alpha/2 + \pi)}$$

eine zweite Wurzel, denn  $w_2^2 = re^{i(\alpha+2\pi)} = re^{i\alpha} e^{2\pi i} = re^{i\alpha}$ . Allgemein gilt: Sei  $z = re^{i\alpha} \in \mathbb{C}$ . Dann gibt es genau  $n$  verschiedene komplexe Zahlen  $w_0, \dots, w_{n-1}$ , die die Gleichung  $w^n = z$  lösen. Sie lauten:

$$w_k = \sqrt[n]{r} e^{i(\alpha+2\pi k)/n}, \quad k = 0, \dots, n-1.$$

**Beispiel 1.6** Als Beispiel berechnen wir die komplexen Lösungen der Gleichung  $w^3 = -1$ . Diese lauten wegen  $-1 = e^{i\pi}$  gemäß der obigen Formel  $w_0 = e^{\pi i/3}$ ,  $w_1 = e^{3\pi i/3}$  und  $w_2 = e^{5\pi i/3}$ .

Die Erweiterung der reellen zu den komplexen Zahlen wirkt wie ein mathematischer Kunstgriff. Tatsächlich erlauben komplexe Zahlen eine bequeme Darstellung verschiedener Naturvorgänge (z. B. Schwingungen; siehe Abschn. 11.3). Komplexe Zahlen spielen allerdings auch eine entscheidende Rolle in der Quantenmechanik, in der Zustände eines physikalischen oder chemischen Systems durch komplexwertige Abbildungen repräsentiert werden (siehe Kap. 13).

## Fragen und Aufgaben

### Aufgabe 1.4

Stelle die Zahl Vierundzwanzig im Dezimalsystem und im Dualsystem dar.

### Aufgabe 1.5

Zu welchem Zweck werden die negativen Zahlen, die Brüche, die irrationalen Zahlen und die komplexen Zahlen eingeführt?

**Aufgabe 1.6**

Was sind ein offenes, ein halboffenes und ein geschlossenes Intervall?

**Aufgabe 1.7**

Bilde Summe, Differenz, Produkt und Quotient der Zahlen  $x$  und  $y$  für: (i)  $x = 2 + 4i$ ,  $y = 3 - i$ ; (ii)  $x = -2i$ ,  $y = -5$ .

**Aufgabe 1.8**

Bestimme den Betrag, den Realteil, den Imaginärteil, das Quadrat und die fünfte Potenz der folgenden Zahlen: (i)  $2 + 4i$ , (ii)  $-5$ , (iii)  $5$ , (iv)  $-i$ .

**Aufgabe 1.9**

Stelle die folgenden Zahlen in der Form  $a + ib$  dar: (i)  $5/(1 + 2i)$ , (ii)  $(1 + i)/(1 - i)$ .

**Aufgabe 1.10**

Bestimme alle Lösungen der Gleichung  $w^4 = -16$ .

## 1.4 Einige Rechenregeln

### Summen- und Produktzeichen

Um eine Summe über eine größere Anzahl von Summanden in abgekürzter Form schreiben zu können, hat man das *Summenzeichen*  $\sum$  eingeführt. Für die Summe aus  $n$  Summanden schreibt man abkürzend

$$\sum_{k=1}^n a_k = a_1 + a_2 + a_3 + \cdots + a_{n-1} + a_n,$$

wobei die linke Seite der Gleichung gelesen wird als „Summe über alle  $a_k$  von  $k$  gleich 1 bis  $n$ “. Die Zahl  $k$  nennt man den *Summationsindex*. Die Summanden  $a_k$  können beliebige Ausdrücke sein, die irgendwie von  $k$  abhängen. Es gilt z. B.:

$$\sum_{k=2}^4 (k^2 + 7) = (4 + 7) + (9 + 7) + (16 + 7) = 50.$$

Kommt der Summationsindex im Ausdruck hinter dem Summenzeichen nicht vor, so muss man für jeden Wert von  $k$  jeweils den gleichen Ausdruck als Summand schreiben. Wir haben z. B.:

$$\sum_{k=2}^4 a^2 = a^2 + a^2 + a^2 = 3a^2.$$

Für das Rechnen mit Summenzeichen gilt eine Reihe von Regeln, deren Richtigkeit sich einfach dadurch einsehen lässt, dass man den Ausdruck mit dem Summenzeichen durch die Summe, die er darstellt, ersetzt. Sie lauten: Man kann jederzeit den Buchstaben für den Summationsindex austauschen. Darüber hinaus darf man den