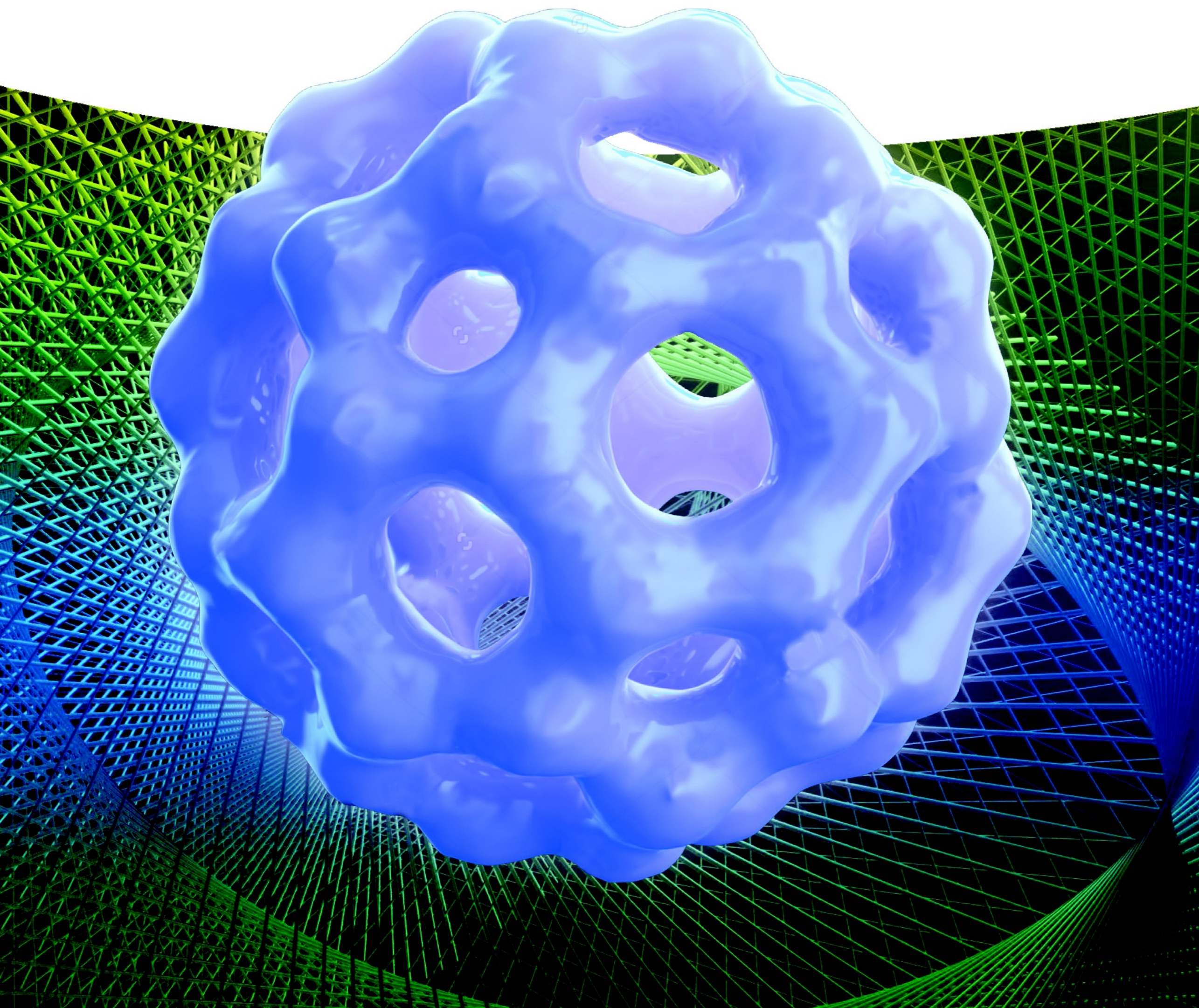
WILEY-VCH

Ansgar Jüngel 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 Jüngel
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

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.

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

Prof. Dr. Ansgar Jüngel

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

Prof. Dr. Hans G. Zachmann†

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. Jüngel*

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.

Mathematik für Chemiker, 8. Auflage. Ansgar Jüngel und Hans Zachmann.

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 notwendige 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 °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 $\{x : x \ \ldots\}$, wobei die Punkte die Eigenschaften angeben. So lautet beispielsweise die Menge aller Zahlen $1, 2, 3, \ldots$, die gerade sind, $x : x$ ist eine gerade Zahl; diese Menge kann natürlich auch als $\{2, 4, 6, \ldots\}$ 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:

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

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:

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

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:

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

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 Mengen*gleichmächtig*. 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

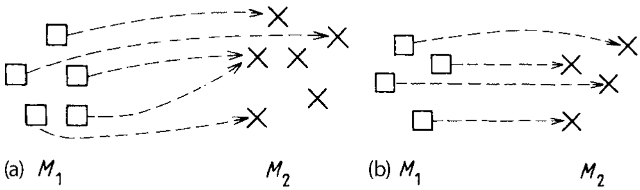


Abb. 1.1 (a) Beispiel für eine Abbildung der Elemente der Menge M_1 auf die Elemente der Menge M_2. (b) Beispiel für zwei gleichmächtige Mengen M_1 und M_2.

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

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

bezeichnet. Soll die Null enthalten sein, schreiben wir $\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, 3, ...\} = \mathbb{N} \cup \{0\}$. 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

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

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

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

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 ... oder 35,366 666 666 6 ... 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:

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

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*

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

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

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

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 $\sqrt{2}$, π 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: $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} \,:\, a \le x \le b\}$;
- rechts halboffenes Intervall: $[a, b) = \{x \in \mathbb{R} \,:\, a \le x < b\}$;
- links halboffenes Intervall: $(a, b] = \{x \in \mathbb{R} \,:\, a < x \le b\}$;
- offenes Intervall: $(a, b) = \{x \in \mathbb{R} \,:\, a < x < b\}$.

Man schreibt auch:

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

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.

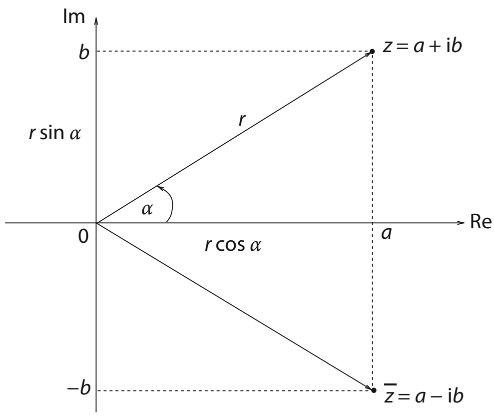


Abb. 1.2 Die gaußsche Zahlenebene.

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 $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$. 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

$$\mathrm{i}^2 = -1$$

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

$$\mathbb{C} = \{a + \mathrm{i}b \, : \, a\,, \quad b \in \mathbb{R}\}\,.$$

Ist eine komplexe Zahl $z = a + \mathrm{i}b$ gegeben, so nennen wir a den *Realteil* und b den *Imaginärteil*, geschrieben als $a = \mathrm{Re}(z)$ und $b = \mathrm{Im}(z)$. Eine komplexe Zahl z, deren Realteil gleich null ist ($\mathrm{Re}(z) = 0$), nennen wir *rein imaginär*. Die Zahl $\bar{z} = a - \mathrm{i}b$ 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 $z = a + \mathrm{i}b$ 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 $z_1 = a_1 + \mathrm{i}b_1$ und $z_2 = a_2 + \mathrm{i}b_2$ *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:

$$z_1 + z_2 = (a_1 + a_2) + \mathrm{i}(b_1 + b_2)\,.$$

Analog wird die Subtraktion erklärt.

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

$$z_1 \cdot z_2 = (a_1 + \mathrm{i}b_1)(a_2 + \mathrm{i}b_2) = a_1 a_2 - b_1 b_2 + \mathrm{i}(a_1 b_2 + a_2 b_1)\,.$$

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

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

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:

$$\begin{aligned}\frac{a_1 + \mathrm{i}b_1}{a_2 + \mathrm{i}b_2} &= \frac{(a_1 + \mathrm{i}b_1)(a_2 - \mathrm{i}b_2)}{(a_2 + \mathrm{i}b_2)(a_2 - \mathrm{i}b_2)} = \frac{a_1 a_2 + b_1 b_2 + \mathrm{i}(a_2 b_1 - a_1 b_2)}{a_2^2 + b_2^2} \\ &= \frac{a_1 a_2 + b_1 b_2}{a_2^2 + b_2^2} + \mathrm{i}\frac{a_2 b_1 - a_1 b_2}{a_2^2 + b_2^2}\,.\end{aligned}$$

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

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

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 $b = r\sin\alpha$,[1] wobei $r = |z| = \sqrt{a^2 + b^2}$, also

$$z = a + \mathrm{i}b = r(\cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha)\,.$$

✎ Eine dritte Darstellungsform erhalten wir durch die *eulersche Formel*

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = \cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha\,. \tag{1.1}$$

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

Dann kann eine komplexe Zahl geschrieben werden als

$$z = r\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} .$$

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

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

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

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

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

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

ergibt. Dann ist

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

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

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

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

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) $x = 2 + 4\mathrm{i}$, $y = 3 - \mathrm{i}$; (ii) $x = -2\mathrm{i}$, $y = -5$.

Aufgabe 1.8
Bestimme den Betrag, den Realteil, den Imaginärteil, das Quadrat und die fünfte Potenz der folgenden Zahlen: (i) $2 + 4\mathrm{i}$, (ii) -5, (iii) 5, (iv) $-\mathrm{i}$.

Aufgabe 1.9
Stelle die folgenden Zahlen in der Form $a + \mathrm{i}b$ dar: (i) $5/(1 + 2\mathrm{i})$, (ii) $(1 + \mathrm{i})/(1 - \mathrm{i})$.

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