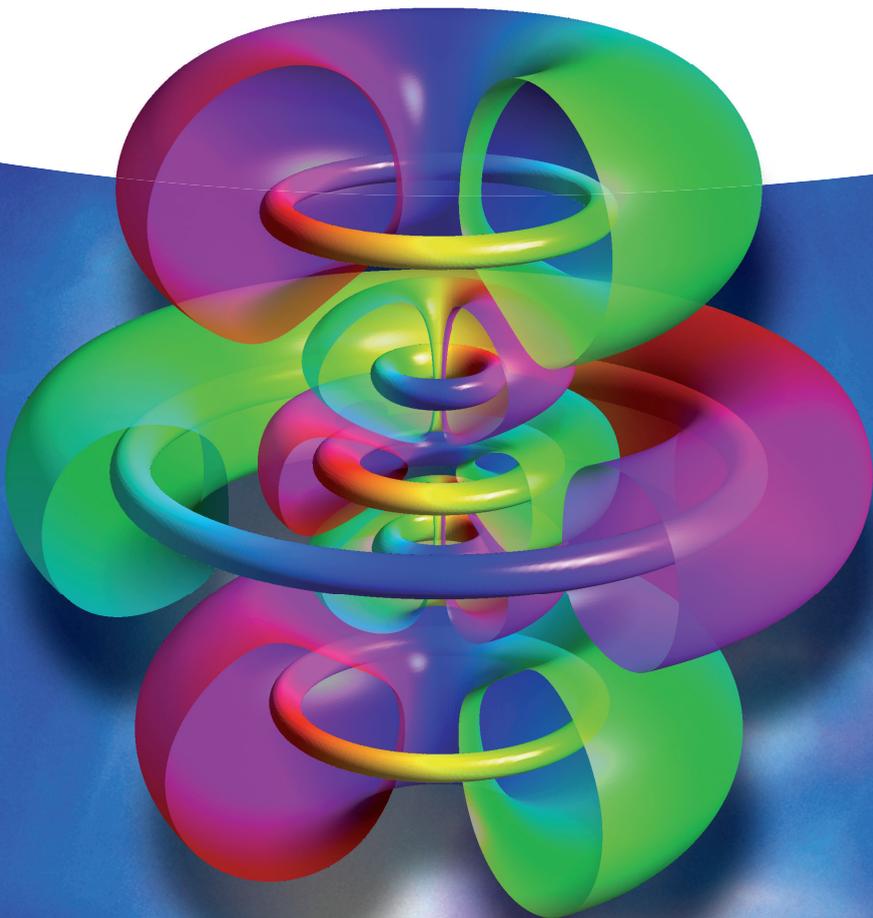


Ansgar Jüngel, Hans Zachmann

Mathematik für Chemiker

Siebte Auflage



Ansgar Jüngel
Hans G. Zachmann

Mathematik für Chemiker

***Beachten Sie bitte auch weitere interessante Titel
zu diesem Thema***

Ansorge, R., Oberle, H.J., Rothe, K., Sonar, T.

Mathematik Deluxe 1

Lehrbuch Mathematik für Ingenieure 1 inkl. Aufgaben und Lösungen 1, 4. Auflage

2010

Print ISBN: 978-3-527-41061-3

Ansorge, R., Oberle, H.J., Rothe, K., Sonar, T.

Mathematik Deluxe 2

Lehrbuch Mathematik für Ingenieure 2 inkl. Aufgaben und Lösungen 2, 4. Auflage

2011

Print ISBN: 978-3-527-41062-0

Räsch, T.

Mathematik für Naturwissenschaftler für Dummies

2009

Print ISBN: 978-3-527-70419-4,

ePub ISBN: 978-3-527-65789-6,

Adobe PDF ISBN: 978-3-527-65790-2,

eMobi ISBN: 978-3-527-65791-9

Ansgar Jünger
Hans G. Zachmann

Mathematik für Chemiker

7. aktualisierte und erweiterte Auflage

WILEY-VCH
Verlag GmbH & Co. KGaA

Autoren

Ansgar Jünger

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

7. Auflage 2014

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.

© 2014 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 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 Grafik-Design Schulz, Fußgönheim, Deutschland

Typesetting le-tex publishing services GmbH, Leipzig, Deutschland

Druck und Bindung Markono Print Media Pte Ltd, Singapore

Print ISBN 978-3-527-33622-7

ePDF ISBN 978-3-527-67551-7

ePub ISBN 978-3-527-67552-4

Mobi ISBN 978-3-527-67553-1

Gedruckt auf säurefreiem Papier

Inhaltsverzeichnis

Vorwort zur siebten Auflage *XIII*

Vorwort zur sechsten Auflage *XV*

Vorwort zur ersten Auflage *XVII*

- 1 Mathematische Grundlagen** *1*
 - 1.1 Die Sprache der Mathematik *1*
 - 1.2 Mengenlehre *3*
 - 1.3 Zahlen *6*
 - 1.4 Einige Rechenregeln *12*
 - 1.5 Kombinatorik *15*

- 2 Lineare Algebra** *23*
 - 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 *41*
 - 2.3.3 Berechnung von Determinanten *44*
 - 2.4 Lineare Unabhängigkeit und Rang einer Matrix *46*
 - 2.4.1 Lineare Unabhängigkeit *46*
 - 2.4.2 Rang einer Matrix *48*
 - 2.5 Lösungstheorie linearer Gleichungssysteme *50*
 - 2.5.1 Lösbarkeit linearer Gleichungssysteme *50*
 - 2.5.2 Berechnung der Inversen einer Matrix *55*

- 3 Unendliche Zahlenfolgen und Reihen** *59*
 - 3.1 Unendliche Zahlenfolgen *59*
 - 3.1.1 Definitionen und Beispiele *59*
 - 3.1.2 Konvergenz einer Zahlenfolge *61*
 - 3.1.3 Das Rechnen mit Grenzwerten *64*

3.2	Unendliche Reihen	68
3.2.1	Definitionen und Beispiele	68
3.2.2	Konvergenzkriterien	71
3.2.3	Das Rechnen mit unendlichen Reihen	74
3.2.4	Potenzreihen	76
4	Funktionen	79
4.1	Erläuterung des Funktionsbegriffes	79
4.2	Funktionen einer Variablen	80
4.2.1	Darstellung	80
4.2.2	Umkehrung und implizite Darstellung einer Funktion	82
4.2.3	Wichtige Begriffe zur Charakterisierung von Funktionen	84
4.2.4	Einige spezielle Funktionen	85
4.2.5	Stetigkeit	96
4.2.6	Funktionsfolgen	99
4.3	Funktionen mehrerer Variablen	102
4.3.1	Darstellung	102
4.3.2	Definitionsbereiche	107
4.3.3	Stetigkeit	108
5	Vektoralgebra	111
5.1	Rechnen mit Vektoren	111
5.1.1	Definition eines Vektors	111
5.1.2	Rechenregeln für Vektoren	114
5.1.3	Skalarprodukt	117
5.1.4	Vektorprodukt	119
5.1.5	Spatprodukt	122
5.2	Darstellung von Vektoren in verschiedenen Basen	125
5.2.1	Lineare Unabhängigkeit von Vektoren	125
5.2.2	Basis im \mathbb{R}^3 und Basiswechsel	128
5.2.3	Orthonormalbasis	132
6	Analytische Geometrie	137
6.1	Analytische Darstellung von Kurven und Flächen	137
6.1.1	Darstellung durch Gleichungen in x , y und z	137
6.1.2	Parameterdarstellung	146
6.2	Lineare Abbildungen	149
6.2.1	Definitionen	149
6.2.2	Eigenwerte und Eigenvektoren	151
6.2.3	Drehungen und Spiegelungen	155
6.3	Koordinatentransformationen	162
6.3.1	Lineare Transformationen	162
6.3.2	Transformation auf krummlinige Koordinaten	169

- 7 Differenziation und Integration einer Funktion einer Variablen 175**
- 7.1 Differenziation 175
- 7.1.1 Die erste Ableitung einer Funktion 175
- 7.1.2 Rechenregeln für das Differenzieren 179
- 7.1.3 Differenziation einiger Funktionen 183
- 7.1.4 Differenziation komplexwertiger Funktionen 187
- 7.1.5 Höhere Ableitungen 191
- 7.1.6 Mittelwertsatz der Differenzialrechnung 192
- 7.1.7 Anwendungen 193
- 7.2 Integration von Funktionen 196
- 7.2.1 Das bestimmte Integral 196
- 7.2.2 Das unbestimmte Integral 203
- 7.2.3 Integrationsmethoden 207
- 7.2.4 Uneigentliche Integrale 216
- 7.2.5 Anwendungen 220
- 7.3 Differenziation und Integration von Funktionenfolgen 226
- 7.4 Die Taylor-Formel 228
- 7.5 Unbestimmte Ausdrücke: Regel von de l'Hospital 236
- 7.6 Kurvendiskussion 242
- 7.6.1 Definitionen 242
- 7.6.2 Bestimmung von Nullstellen 244
- 7.6.3 Bestimmung von Extrema 247
- 7.6.4 Bestimmung von Wendepunkten und Sattelpunkten 249

- 8 Differenziation und Integration von Funktionen mehrerer Variablen 251**
- 8.1 Differenziation 251
- 8.1.1 Die partielle Ableitung 251
- 8.1.2 Höhere Ableitungen und der Satz von Schwarz 255
- 8.1.3 Existenz einer Tangentialebene 258
- 8.1.4 Das totale Differenzial 259
- 8.1.5 Die Kettenregel 262
- 8.1.6 Differenziation impliziter Funktionen 265
- 8.1.7 Partielle Ableitungen in der Thermodynamik 268
- 8.2 Einfache Integrale 271
- 8.3 Bereichsintegrale 275
- 8.3.1 Definition des zweidimensionalen Bereichsintegrals 275
- 8.3.2 Berechnung des zweidimensionalen Bereichsintegrals 278
- 8.3.3 Allgemeine Bereichsintegrale 282
- 8.3.4 Transformationsformel 283
- 8.3.5 Berechnung von Volumina und Oberflächen 290
- 8.4 Kurvenintegrale 299
- 8.4.1 Definition und Berechnung 299
- 8.4.2 Wegunabhängigkeit des allgemeinen Kurvenintegrals 304
- 8.4.3 Vollständiges und unvollständiges Differenzial 308

8.4.4	Satz von Gauß im \mathbb{R}^2	310
8.5	Oberflächenintegrale	313
8.6	Die Taylor-Formel	317
8.7	Extremwerte	320
8.7.1	Definitionen	320
8.7.2	Bestimmung von Extremwerten und Sattelpunkten	322
8.7.3	Bestimmung von Extremwerten unter Nebenbedingungen	325
9	Vektoranalysis und Tensorrechnung	333
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	344
9.1.6	Rechenregeln	347
9.1.7	Krummlinige Koordinaten	349
9.2	Tensorrechnung	354
9.2.1	Tensoren zweiter Stufe	354
9.2.2	Tensoren höherer Stufe	358
10	Fourier-Reihen und Fourier-Transformation	361
10.1	Fourier-Reihen	361
10.1.1	Reelle Fourier-Reihen	361
10.1.2	Komplexe Fourier-Reihen	368
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	378
10.2.3	Eigenschaften	382
10.2.4	Anwendungen in der Chemie	392
10.3	Orthonormalsysteme	399
11	Gewöhnliche Differenzialgleichungen	405
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	431
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 449
- 11.3.4 Die erzwungene Schwingung 451
- 11.3.5 Systeme von Differenzialgleichungen zweiter Ordnung 455
- 11.4 Spezielle lineare Differenzialgleichungen zweiter Ordnung 461
- 11.4.1 Potenzreihenansatz 461
- 11.4.2 Die Legendre-Differenzialgleichung 464
- 11.4.3 Die Laguerre-Differenzialgleichung 470
- 11.4.4 Die Bessel-Differenzialgleichung 474

- 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 494
- 12.4.1 Lösung durch Separationsansatz 494
- 12.4.2 Allgemeine Lösungsformel 497
- 12.4.3 Die schwingende Membran 499
- 12.5 Die Schrödinger-Gleichung 504
- 12.5.1 Die stationäre Gleichung 504
- 12.5.2 Der harmonische Oszillator 505
- 12.5.3 Das Wasserstoffatom 509

- 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 532
- 13.2.3 Lineare Operatoren 536
- 13.2.4 Dualräume und Dirac-Notation 537
- 13.3 Beschränkte lineare Operatoren 541
- 13.3.1 Definition und Beispiele 541
- 13.3.2 Projektoren 545
- 13.3.3 Symmetrische Operatoren 547
- 13.4 Unbeschränkte lineare Operatoren 555
- 13.4.1 Selbstadjungierte Operatoren 555
- 13.4.2 Die Heisenberg'sche Unschärferelation 560
- 13.4.3 Spektraldarstellung selbstadjungierter Operatoren 562
- 13.5 Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme 571

14	Wahrscheinlichkeitsrechnung	575
14.1	Einleitung	575
14.1.1	Aufgaben der Wahrscheinlichkeitsrechnung	575
14.1.2	Der Ereignisraum	577
14.1.3	Zufallsgrößen	578
14.2	Diskrete Zufallsgrößen	580
14.2.1	Statistische Definition der Wahrscheinlichkeit	580
14.2.2	Summe von Ereignissen	582
14.2.3	Bedingte Wahrscheinlichkeit	584
14.2.4	Produkt von Ereignissen	587
14.2.5	Totale Wahrscheinlichkeit	588
14.3	Kontinuierliche Zufallsgrößen	590
14.3.1	Wahrscheinlichkeitsdichte	590
14.3.2	Verteilungsfunktion	593
14.4	Kette von unabhängigen Versuchen	598
14.4.1	Herleitung der exakten Gleichungen	598
14.4.2	Diskussion der Funktion $P_n(m)$	601
14.4.3	Näherungsgesetze für große n	602
14.4.4	Markow'sche Ketten	607
14.5	Stochastische Prozesse	614
14.5.1	Definitionen	614
14.5.2	Der Poisson-Prozess	615
15	Fehler- und Ausgleichsrechnung	619
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	622
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	631
16	Numerische Methoden	633
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	646
16.2.1	Newton-Verfahren im Eindimensionalen	646
16.2.2	Newton-Verfahren im Mehrdimensionalen	647

16.3	Eigenwertprobleme	650
16.3.1	Potenzmethode	650
16.3.2	QR-Verfahren	653
16.4	Gewöhnliche Differenzialgleichungen	656
16.4.1	Euler-Verfahren	656
16.4.2	Runge-Kutta-Verfahren	659
16.4.3	Steife Differenzialgleichungen	662
16.5	Softwarepakete	665

Antworten und Lösungen	667
-------------------------------	-----

Literaturverzeichnis	701
-----------------------------	-----

Weiterführende Literatur	703
---------------------------------	-----

Stichwortverzeichnis	707
-----------------------------	-----

Vorwort zur siebten Auflage

Methoden der Computerchemie (Computational Chemistry) sind in den letzten Jahren infolge der enormen Leistungsfähigkeit moderner Computer zunehmend wichtiger geworden. Dieser Entwicklung habe ich Rechnung getragen, indem ich dieser Auflage ein Kapitel über ausgewählte numerische Verfahren hinzugefügt habe. Insbesondere werden Methoden vorgestellt, die in den chemischen Anwendungen von Bedeutung sind, wie numerische Verfahren zur Lösung von linearen und nichtlinearen Gleichungssystemen, Eigenwertproblemen und Anfangswertproblemen von Differenzialgleichungen. Insbesondere werden das Newton-Verfahren, die QR-Methode zur Berechnung von Eigenwerten und das Runge-Kutta-Verfahren behandelt. Auch die Approximation steifer Differenzialgleichungen wird angesprochen. Aus Platzgründen können viele Techniken nur angerissen werden, vermitteln aber einige grundlegende Ideen. Alle Algorithmen sind in der Skriptsprache MATLAB¹⁾ implementiert und durch Beispiele illustriert.

Die bewährte Struktur des Buches ist unverändert geblieben. Das Erscheinungsbild wurde behutsam modernisiert: Beispiele sind nun durch einen grauen Balken am Rand hervorgehoben, wichtige Sätze wurden eingerahmt. Außerdem wurden einige Tippfehler korrigiert und kleinere Textkürzungen vorgenommen.

Wien, Juni 2013

A. Jüngerl

1) Matlab® ist ein eingetragenes Warenzeichen von The MathWorks, Inc.

Vorwort zur sechsten Auflage

Das Lehrbuch von Prof. Zachmann ist seit seiner Ersterscheinung vor genau 35 Jahren zu einem Klassiker geworden. Umso mehr ist es mir eine Ehre, dass ich die Überarbeitung des Buches übernehmen durfte, nachdem Prof. Zachmann bedauerlicherweise verschieden ist.

Eine Überarbeitung war mittlerweile notwendig geworden, um den geänderten Erfordernissen in der Chemie Rechnung zu tragen. Hier spielen quantenmechanische Fragestellungen und Computersimulationen eine immer größer werdende Rolle, etwa um die Struktur großer Atome mit Näherungsmethoden zu berechnen. Diese Tatsache hat sich in der Themenauswahl dieser Neuauflage niederschlagen.

Eine ausführliche Darstellung der in der Chemie notwendigen numerischen Algorithmen hätte den Rahmen eines einführenden Lehrbuches gesprengt. Dennoch wurde ein gewisses Augenmerk auf algorithmische Techniken gelegt. So können viele Fragestellungen der linearen Algebra mithilfe des Gauß-Algorithmus bzw. dem Gauß'schen Eliminationsverfahren in bequemer Weise gelöst werden. Auch das wichtige Newton-Verfahren für die numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen und die Methode der kleinsten Quadrate werden ausführlicher als bisher dargestellt.

Neu hinzugekommen sind mathematische Fragestellungen aus der Quantenmechanik. Dies schließt eine gründliche mathematische Behandlung bestimmter gewöhnlicher Differenzialgleichungen, die bei der Separation der Schrödinger-Gleichung auftreten, ein. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das Coulomb-Potenzial ist ausführlich dargestellt. Neu ist weiterhin ein Kapitel über mathematische Methoden der Quantenmechanik (unbeschränkte Operatoren, Spektraltheorie). Die dort vorgestellten Fragestellungen sind mathematisch verhältnismäßig anspruchsvoll und werden sicherlich erst im letzten Studienabschnitt relevant. Ich habe versucht zu begründen, warum die dort definierten Begriffe notwendig sind und welche mathematischen Schwierigkeiten auftreten können. Das Hauptaugenmerk habe ich auf das Verständnis gelegt und habe dabei die eine oder andere mathematische Feinheit nicht in Betracht gezogen. Es ist meine Hoffnung, damit klarzumachen, dass quantenmechanische Probleme nur mit anspruchsvollen mathematischen Techniken zufriedenstellend gelöst werden können.

Einen größeren Raum haben auch die gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen erhalten, die in den chemischen Anwendungen von elementarer Bedeutung sind. Großer Wert wurde auf die Motivation der Gleichungen gelegt und viele Beispiele aus der Chemie (z. B. Belousov-Zhabotinsky-Reaktion) sind hinzugefügt worden.

Um den Umfang des Buches nicht zu vergrößern, musste an anderer Stelle gekürzt oder gestrichen werden. So sind im Vergleich zur letzten Auflage die Kapitel über Gleichungen höheren Grades, Funktionentheorie und Gruppentheorie gestrichen worden. Da die Quantenmechanik ohne komplexe Zahlen und komplexwertige Funktionen nicht denkbar ist, sind diese Themen in den entsprechenden Kapiteln über Zahlen und Funktionen erläutert; für den Residuensatz, der nur an einer Stelle benötigt wird, muss auf die Fachliteratur verwiesen werden. Gruppentheoretische Fragestellungen spielen zwar gleichfalls eine wichtige Rolle in der Chemie, doch muss auch hier auf die mathematische Literatur verwiesen werden.

Den heutigen Lesegewohnheiten entsprechend, wurden die Abschnitte neu sortiert und nummeriert, ohne zu stark die Struktur des bewährten Buches zu ändern. Insbesondere wurde die bewährte Regel eingehalten, dass die Ergebnisse längerer Überlegungen in *Kursivdruck* zusammengefasst werden, während Beispiele, die nach jeder allgemeinen Betrachtung folgen, in kleinerer Schrift und mit Einzug gesetzt sind. Um die Lesbarkeit zu erhöhen, werden bedeutende Sätze durch **Fettdruck** hervorgehoben. Besonders wichtige Definitionen und Aussagen sind am Textrand mit dem Symbol ☞ markiert.

Auch dieses Buch wäre ohne die Mithilfe anderer nicht entstanden. Insbesondere danke ich Frau Jutta Gonska für die unermüdliche Erstellung der \LaTeX -Vorlagen einiger Kapitel und vieler Abbildungen, Herrn Albrecht Seelmann für das sehr gründliche Korrekturlesen des Buches, Herrn Dr. Daniel Matthes für das Korrekturlesen von Kapitel 13, Herrn Udo Matray für die Erstellung einiger Abbildungen, und nicht zuletzt den Herren Dr. Frank Weinreich und Dr. Andreas Sendtko vom Verlag Wiley-VCH für die stets angenehme und unkomplizierte Zusammenarbeit.

Wien, Juni 2007

A. Jüngerl

Vorwort zur ersten Auflage

Die mathematischen Methoden, die in der Chemie angewendet werden, sind äußerst vielfältig: Die Behandlung reaktionskinetischer Fragen ist nur mithilfe von Differenzialgleichungen möglich. Verschiedene Probleme der makromolekularen Chemie gehören in das Gebiet der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Bei der Aufklärung von Molekülstrukturen muss man über Fouriertransformationen, Tensorrechnung und Gruppentheorie Bescheid wissen. Zur Erforschung der chemischen Bindung braucht man partielle Differenzialgleichungen und lineare Algebra. Bei der Auswertung von Versuchsergebnissen spielt die Statistik und Fehlerrechnung eine wichtige Rolle.

Vom einzelnen Chemiker kann man im Allgemeinen nicht eine vollkommene Beherrschung all dieser Gebiete verlangen. Er muss aber von jedem Bereich der Mathematik soviel wissen, dass er den mathematischen Ableitungen in chemischen Vorlesungen und Lehrbüchern folgen kann und darüber hinaus jederzeit in der Lage ist, seine Kenntnisse in irgendeinem speziellen Gebiet der Mathematik weiter zu vertiefen. Das vorliegende Buch versucht dieses Wissen zu vermitteln. Die grundlegenden mathematischen Betrachtungen und Gedankengänge sowie einige spezielle, besonders für die Chemie wichtige mathematische Methoden sind sehr ausführlich dargestellt. Zahlreiche weitere Ergebnisse der Mathematik sind in knapper Form mitgeteilt. An manchen Stellen fehlen die Beweise; um nicht zu unsauberem Schließen zu verleiten, wurde dies jedes Mal ausdrücklich vermerkt.

Um das Lesen des Buches und das Erlernen des Inhalts zu erleichtern, wurden folgende Regeln eingehalten: Die Ergebnisse längerer Überlegungen sind jeweils in einem Satz zusammengefasst, der durch Kursivdruck hervorgehoben wird. Jeder allgemeinen Betrachtung folgt ein konkretes, möglichst einfaches Beispiel, das in Petit gesetzt wurde. Am Ende eines jeden Abschnittes sind jeweils Kontrollfragen und leichte Aufgaben angegeben, deren Lösungen am Schluss des Buches zu finden sind. Wenn der Leser im Verlauf längerer Ausführungen das Ziel der Überlegungen aus den Augen verloren hat, so kann er dieses dem nächstfolgenden kursiv gedruckten Satz entnehmen. Wird es zu schwierig, den Überlegungen in allgemeiner Form zu folgen, so wird es eine Hilfe sein, das nachfolgende konkre-

te Beispiel (erkenntlich am Petit-Druck) zu studieren. Anhand der Kontrollfragen und Aufgaben kann man erkennen, ob der Stoff verstanden worden ist. Die Auswahl der Kontrollfragen zeigt auch, welche Ergebnisse im betreffenden Abschnitt besonders wichtig sind.

Zur Anordnung des Stoffes ist zu sagen, dass die einzelnen Gebiete der Mathematik soweit wie möglich geschlossen dargestellt wurden; das Buch ist somit auch als übersichtliches Nachschlagewerk verwendbar. Nach einer Einführung der Zahlen kommt die Kombinatorik, da diese bei der Definition von Determinanten benötigt wird, Übung im Rechnen mit Summenzeichen vermittelt, das abstrakte Denken schult und auch in der Chemie eine nicht unerhebliche Rolle spielt. Auf die Kombinatorik folgt die elementare lineare Algebra. Als Erstes werden dabei in unmittelbarem Anschluss an den Schulstoff Matrizen, Determinanten und Gleichungen behandelt, danach die Vektorrechnung und die analytische Geometrie. Dabei wird das Eigenwertproblem anhand der Abbildung, die die Richtung von Vektoren unverändert lässt, anschaulich eingeführt. Nach einigen Abschnitten über Differenzial- und Integralrechnung, elementare Funktionentheorie und Vektoranalysis wird auf die höhere lineare Algebra, d. h. den Hilbertraum, die Entwicklung nach Eigenfunktionen usw. eingegangen. Der Versuchung, die gesamte lineare Algebra geschlossen in axiomatischer Weise darzustellen, habe ich aus didaktischen Gründen widerstanden. Eine axiomatische Darstellung eignet sich vorzüglich für eine Rückschau, aber keineswegs für einen Einstieg. Am Ende des Buches stehen die Abschnitte über Gruppentheorie, Wahrscheinlichkeitsrechnung und Fehlerrechnung. Der Wahrscheinlichkeitsrechnung wurde relativ viel Raum gewidmet, da sie in der modernen Chemie eine immer größere Bedeutung gewinnt.

Bei den Vorlesungen, aus denen dieses Buch entstanden ist, habe ich die einzelnen Kapitel nicht in der gleichen Reihenfolge wie im Buch behandelt. Die analytische Geometrie z. B. wurde zunächst vollständig ausgelassen; die Polarkoordinaten und die Darstellung von Kurven in Parameterform wurden im Rahmen der Integralrechnung an den Stellen, wo dies erforderlich war, eingeführt. Das Kapitel über Wahrscheinlichkeitsrechnung folgte unmittelbar hinter der Integralrechnung, damit die Hörer den Stoff der Differenzial- und Integralrechnung verarbeiten konnten, bevor dieser weiter angewendet wurde. Einige Gebiete, wie die Funktionentheorie und die partiellen Differenzialgleichungen, konnten im Rahmen der zweisemestrigen, vierstündigen Vorlesung nur in stark gekürztem Umfang behandelt werden.

Das Buch wäre nicht ohne die Hilfe zahlreicher Mitarbeiter zustande gekommen. Den Herren Diplomphysikern A. Brather, P. Schmedding, K. Slusallek und K. Wangermann habe ich herzlich zu danken für die Korrektur je eines Teiles des Buches. Sie haben dabei nicht nur zahlreiche Druckfehler ausgemerzt, sondern auch verschiedene Unklarheiten bemerkt, die ich dann beseitigen konnte. Mein besonderer Dank gilt Herrn Dipl.-Ing. H.J. Biangardi, der das gesamte Manuskript

einer kritischen Prüfung unterzog und es durch viele wertvolle Ratschläge verbesserte. Dem Verlag Chemie bin ich für seine Bereitschaft, meinen zahlreichen Wünschen hinsichtlich der Ausstattung des Buches nachzukommen, sehr verbunden.

Mainz, Juli 1972

H.G. Zachmann

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 steht 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 gerade 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 Elementes zur Menge erkennen kann, wie beim zweiten und dritten Beispiel. Bei der Aufzählung pflegt man die Elemente zwischen geschweifte Klammern zu setzen. Wenn zum Beispiel 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, $\{x : x \text{ ist eine gerade Zahl}\}$; 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 Elementes 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 ist 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.

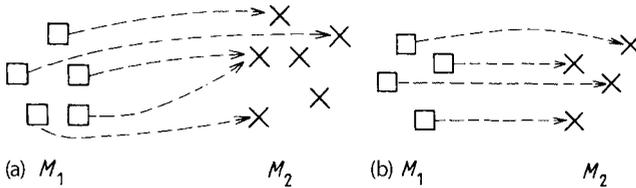


Abb. 1.1 (a) Beispiel für eine Abbildung der Elemente der Menge M_1 auf die Elemente der Menge M_2 . (b) Beispiel für zwei gleichmächtige Mengen M_1 und M_2 .

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 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 eines der beiden Elternteile von a die gleiche Muttersprache wie eines 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 „ \cdot “ 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* bezeichnet 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 $2,737\ 373\ 737\ 3\ \dots$ 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 π und e (Euler'sche Zahl) reelle Zahlen. Reelle Zahlen können stets durch rationale Zahlen bzw. durch Dezimalbrüche approximiert werden. So ist 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 $\sqrt{2}$, 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: $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} : a \leq x \leq b\}$;
- 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:

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