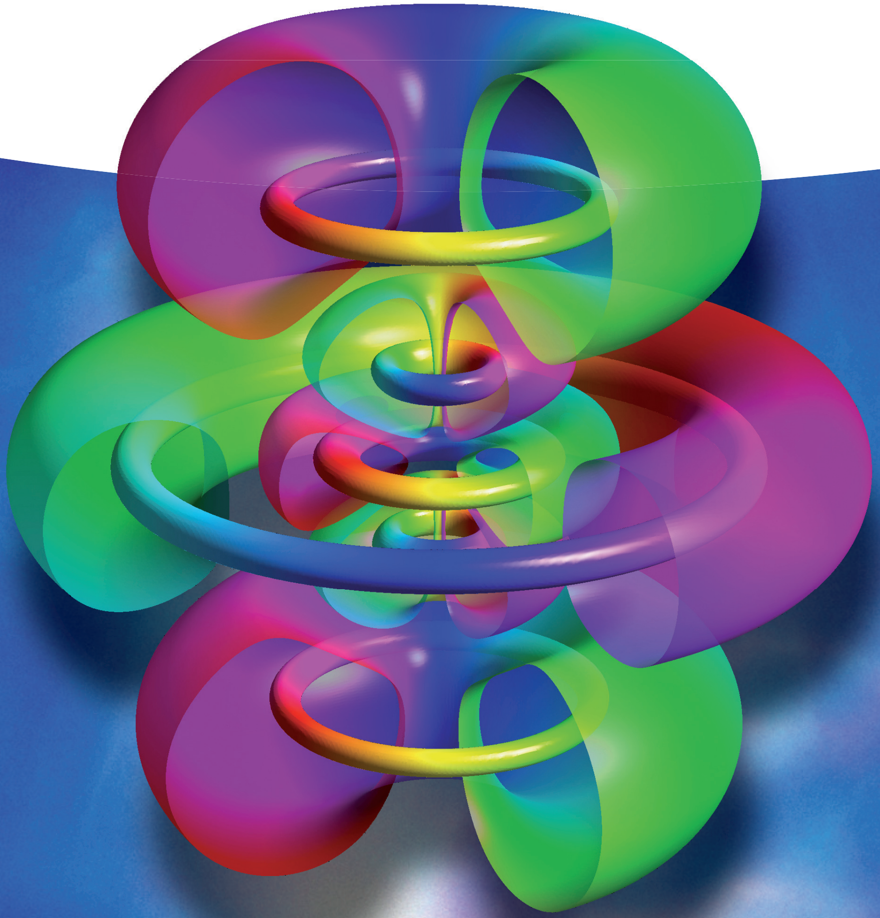
WILEY-VCH

Ansgar Jüngel, Hans Zachmann

# Mathematik für Chemiker

Siebte Auflage



*Ansgar Jüngel*
*Hans G. Zachmann*

**Mathematatik 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 Jüngel*
*Hans G. Zachmann*

# Mathematik für Chemiker

7. aktualisierte und erweiterte Auflage

WILEY-VCH
Verlag GmbH & Co. KGaA

**Autoren**

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

7. Auflage 2014



**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** 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

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 MATLAB[1] 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. Jüngel*

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 niedergeschlagen.

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 Differenzialgleichungen 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 Mattray 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. Jüngel*

## 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 konkrete 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 zustandegekommen. 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.

*Mathematik für Chemiker*, 7. Auflage. Ansgar Jüngel und Hans G. Zachmann.

**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 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 $M_2$:

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

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* $M_1 \backslash M_2$ (gelesen: „$M_1$ ohne $M_2$") enthält alle Elemente aus der Menge $M_1$, die nicht Element aus $M_2$ sind:

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

Das *kartesische Produkt* der beiden Mengen wird durch alle Elemente gebildet, die man durch Zusammenfassung je eines 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 $M_1 \backslash M_2 = \{1, 2\}$ 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.

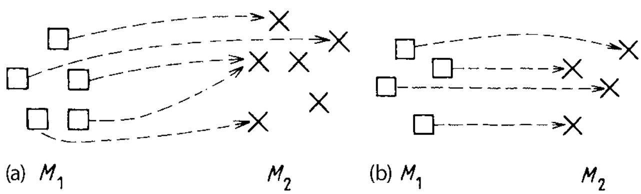



**Abb. 1.1** (a) Beispiel für eine Abbildung der Elemente der Menge $M_1$ auf die Elemente der Menge $M_2$. (b) Beispiel für zwei gleichmächtige Mengen $M_1$ und $M_2$.

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

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

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

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

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 … 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 und e (Euler'sche Zahl) reelle Zahlen. Reelle Zahlen können stets durch rationale Zahlen bzw. durch Dezimalbrüche approximiert werden. So ist etwa

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

Das Zeichen „≈" 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:

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