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 mit Hilfe 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.

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, 6. Auflage. H. G. Zachmann und A. Jüngel

ISBN: 978-3-527-30315-1

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.

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, so daß 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.

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 $\{x : x \ \ldots\}$, wobei die Punkte die Eigenschaften angeben. So lautet beispielsweise die Menge aller Zahlen $1, 2, 3, \ldots$, die gerade sind, $\{x : x \text{ ist eine gerade Zahl}\}$; 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:

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

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

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

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 $M_1 \times M_2$:

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

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. 1.1 (rechts) der Fall.

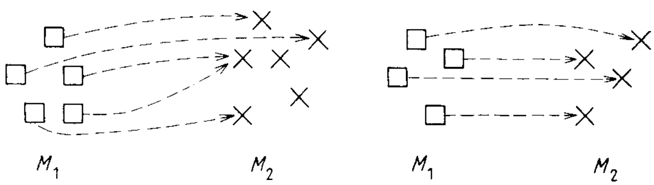

Abb. 1.1 Links: Beispiel für eine Abbildung der Elemente der Menge M_1 auf die Elemente der Menge M_2. Rechts: Beispiel für zwei gleichmächtige Mengen M_1 und M_2.

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

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

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

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 $2{,}7373737373\ldots$ oder $35{,}3666666666\ldots$ 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

$$2{,}7373737373\ldots = \frac{271}{99} \quad \text{und} \quad 35{,}3666666666\ldots = \frac{1061}{30}.$$

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 nichtperiodischen Dezimalzahlen zu den Brüchen hinzufügen. Dies führt auf die *reellen Zahlen*

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

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

$$\pi \approx 3{,}14159 \quad \text{und} \quad \mathrm{e} \approx 2{,}71828.$$

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 nichtnegative Zahl ist, während die rechte Seite negativ ist. Um derartige Gleichungen dennoch lösen zu können, wird wiederum der Zahlenbereich erweitert.

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, so daß 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*

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

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 $\overline{z} = a - \mathrm{i}b$ 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 stellt die x-Achse (oder Abzisse) die Realteilachse dar und die y-Achse (oder Ordinate) die Imaginärteilachse. Die Zahl z wird dabei als Ortsvektor eingezeichnet (siehe Abb. 1.2). Insbesondere ist $|z|$ die Länge des Ortsvektors, gegeben durch (a, b), und $\overline{z}$ ist der an der Realteilachse gespiegelte Vektor z.

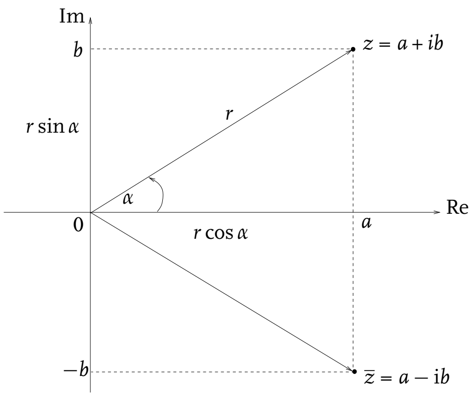

Abb. 1.2 Die Gaußsche Zahlenebene.

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:

$$z_1 \cdot z_2 = (a_1 + \mathrm{i}b_1)(a_2 + \mathrm{i}b_2) = a_1a_2 - b_1b_2 + \mathrm{i}(a_1b_2 + a_2b_1).$$

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

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

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

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:

$$\begin{aligned}\frac{a_1 + \mathrm{i}b_1}{a_2 + \mathrm{i}b_2} &= \frac{(a_1 + \mathrm{i}b_1)(a_2 - \mathrm{i}b_2)}{(a_2 + \mathrm{i}b_2)(a_2 - \mathrm{i}b_2)} = \frac{a_1a_2 + b_1b_2 + \mathrm{i}(a_2b_1 - a_1b_2)}{a_2^2 + b_2^2} \\ &= \frac{a_1a_2 + b_1b_2}{a_2^2 + b_2^2} + \mathrm{i}\frac{a_2b_1 - a_1b_2}{a_2^2 + b_2^2}.\end{aligned}$$

Betrachte als Beispiel die komplexen Zahlen $z_1 = 2 + 3\mathrm{i}$ und $z_2 = 1 - 2\mathrm{i}$. Dann lautet die Summe $z_1 + z_2 = 3 + \mathrm{i}$, die Differenz $z_1 - z_2 = 1 + 5\mathrm{i}$, das Produkt $z_1z_2 = 2 + 3\mathrm{i} - 4\mathrm{i} - 6\mathrm{i}^2 = 8 - \mathrm{i}$ 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*

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

Dann kann eine komplexe Zahl geschrieben werden als

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

1) Die trigonometrischen Funktionen werden in Abschnitt 4.2.5 genauer untersucht.

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

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

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

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

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

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

ergibt. Dann ist

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

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

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

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

Die Erweiterung der reellen zu den komplexen Zahlen wirkt wie ein mathematischer Kunstgriff. Tatsächlich erlauben komplexe Zahlen eine bequeme Darstellung verschiedener Naturvorgänge (z. B. Schwingungen; siehe Abschnitt 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 Kapitel 13).

Fragen und Aufgaben

1. Stelle die Zahl Vierundzwanzig im Dezimalsystem und im Dualsystem dar.
2. Zu welchem Zweck werden die negativen Zahlen, die Brüche, die irrationalen Zahlen und die komplexen Zahlen eingeführt?
3. Was ist ein offenes, ein halboffenes und ein geschlossenes Intervall?
4. Bilde Summe, Differenz, Produkt und Quotient der Zahlen x und y für: (i) $x = 2 + 4i$, $y = 3 - i$; (ii) $x = -2i$, $y = -5$.
5. Bestimme den Betrag, den Realteil, den Imaginärteil, das Quadrat und die fünfte Potenz der folgenden Zahlen: (i) $2 + 4i$, (ii) -5, (iii) 5, (iv) $-i$.
6. Stelle die folgenden Zahlen in der Form $a + ib$ dar: (i) $5/(1 + 2i)$, (ii) $(1 + i)/(1 - i)$.
7. 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. Es gilt z. B.

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

Für das Rechnen mit Summenzeichen gelten 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 Index k etwa durch $k+3$ ersetzen, wenn man die Summationsgrenzen entsprechend abändert. Wir können also z. B. schreiben

$$\sum_{j=2}^{5} a_j = \sum_{k=2}^{5} a_k = \sum_{k=-1}^{2} a_{k+3},$$

da jeder der drei Ausdrücke die Summe $a_2 + a_3 + a_4 + a_5$ darstellt. Des weiteren gilt, wie man sich leicht überzeugen kann,

$$\sum_{k=n_0}^{n} a_k + \sum_{j=n_0}^{n} b_j = \sum_{k=n_0}^{n} (a_k + b_k) \quad \text{und} \quad c \cdot \sum_{k=n_0}^{n} a_k = \sum_{k=n_0}^{n} c a_k.$$

Außer der einfachen Summe ist es bisweilen auch von Vorteil, mehrfache Summen zu verwenden. Der Ausdruck

$$\sum_{k=1}^{2}\sum_{j=1}^{3} a_k b_j$$

z. B. bedeutet: Durchlaufe zunächst mit dem Index j alle Werte von 1 bis 3 und schreibe die Summanden hin. Anschließend durchlaufe mit dem Index k alle

Werte von 1 bis 2 und vervielfache so die Anzahl der Summanden. Ausgeführt ergibt das

$$\sum_{k=1}^{2}\sum_{j=1}^{3} a_k b_j = \sum_{k=1}^{2}(a_k b_1 + a_k b_2 + a_k b_3)$$
$$= a_1 b_1 + a_1 b_2 + a_1 b_3 + a_2 b_1 + a_2 b_2 + a_2 b_3.$$

Mit Hilfe einer solchen Doppelsumme läßt sich auch das Produkt zweier Summen umformen. Es gilt

$$\sum_{k=n_0}^{n} x_k \sum_{j=m_0}^{m} y_j = \sum_{k=n_0}^{n}\sum_{j=m_0}^{m} x_k y_j.$$

Sollte das Produkt in der Form $\sum_{k=n_0}^{n} x_k \sum_{k=m_0}^{m} y_k$ gegeben sein, bei der in beiden Summen der gleiche Summationsindex auftritt, so muß man vor Bildung der Doppelsumme einen der beiden Summationsindizes umbenennen. Das angegebene Produkt ist *nicht* gleich $\sum_{k=n_0}^{n}\sum_{k=m_0}^{m} x_k y_k$, wie man sich leicht durch ein spezielles Beispiel überzeugen kann. Die gleichen Rechengesetze gelten auch für Ausdrücke mit mehr als zwei Einzelsummen.

Ebenso wie eine Summe kann man auch ein Produkt über mehrere Faktoren in abgekürzter Weise formulieren. Man verwendet hierzu das *Produktzeichen* $\prod$, definiert durch

$$\prod_{k=1}^{n} a_k = a_1 a_2 a_3 \cdots a_{n-1} a_n.$$

So ist beispielsweise

$$\prod_{k=1}^{5} k = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 5 = 120.$$

Das Rechnen mit Ungleichungen. In Abschnitt 1.2 haben wir das „größer"- und „kleiner"-Zeichen eingeführt. Diese Zeichen lassen sich dazu verwenden, Relationen zwischen verschiedenen Ausdrücken anzugeben. Es gilt beispielsweise, wie wir hier ohne Beweis anführen wollen, für alle ganzen Zahlen a und b, die größer als 2 sind, die Beziehung $a \cdot b > a + b$. Man kann auch Relationen aufstellen, bei denen gleichzeitig ein Gleichheitszeichen und ein Ungleichheitszeichen auftritt. Die Relation $a \geq b$ besagt, daß a entweder größer oder gleich b ist. Entsprechend definiert man die Relation $a \leq b$. Die obigen Ausdrücke bezeichnet man als *Ungleichungen*.

Es gelten die folgenden Eigenschaften:

1. Ist $a > b$, so folgt auch $a + c > b + c$ für jede reelle Zahl c sowie

$$ac > bc, \quad \text{falls } c > 0, \quad \text{und} \quad ac < bc, \quad \text{falls } c < 0.$$

Aus $a > b$ folgt insbesondere (wähle $c = -1$) $-b > -a$. Wenn man bei einer Ungleichung die Seiten vertauscht, muß man daher im Unterschied zu einer

Gleichung auch die Vorzeichen vertauschen! Was hier für das „größer“-Zeichen angegeben wurde, gilt in analoger Weise auch für das „kleiner“-Zeichen.

2. Gilt außer der Ungleichung $a > b$ noch eine zweite Ungleichung $x > y$, so kann man daraus schließen, daß $a + x > b + y$ gilt, *nicht* aber, daß $a - x > b - y$ gilt.
3. Eine wichtige Beziehung stellt die *Bernoulli-Ungleichung* dar. Sie besagt, daß für alle $x > 0$ und alle natürlichen Zahlen $n > 1$ gilt

$$(1 + x)^n > 1 + nx. \tag{1.2}$$

Einige bemerkenswerte Formeln erhält man, wenn man Ungleichungen betrachtet, in denen die Beträge von Zahlen vorkommen. Aus $|x| \leq a$ folgt, falls x eine reelle Zahl ist, $-a \leq x \leq a$. Ferner gilt noch für reelle und komplexe Zahlen x die sogenannte *Dreiecksungleichung*

$$|x + y| \leq |x| + |y|.$$

Sie beruht darauf, daß eine Seite eines Dreiecks immer kleiner als die Summe der beiden anderen ist.

Fragen und Aufgaben

1. Berechne:

$$\text{(i)} \sum_{n=2}^{4}(n^2 + 1), \quad \text{(ii)} \sum_{n=1}^{2}(n + 1)(n - 1), \quad \text{(iii)} \sum_{n=1}^{3}(n + 1) \sum_{n=1}^{3}(n - 1),$$
$$\text{(iv)} \prod_{k=1}^{3}(a + k), \quad \text{(v)} \sum_{k=1}^{3} k \sum_{k=1}^{3} k, \quad \text{(vi)} \sum_{j=0}^{4}(-1)^j(j + 1).$$

2. Vereinfache:

$$\text{(i)} \sum_{k=1}^{5} a_k + \sum_{i=3}^{7} a_{i-2}, \quad \text{(ii)} \sum_{i=1}^{3}(a_i + 1) \sum_{i=1}^{3}(a_i + 1).$$

3. Für welche x gilt: (i) $(x - 1)(x + 1) > 1$, (ii) $|x - 1| > 1$, (iii) $|(x - 1)/(x + 1)| > 1$?

1.5 Kombinatorik

In der Kombinatorik wird die Anzahl der Anordnungen bestimmt, die eine Reihe von Elementen unter bestimmten Gesichtspunkten einnehmen kann. Aufgaben dieser Art treten in verschiedenen Zweigen der Chemie häufig auf. Je nach der Art der Anordnungen unterscheiden wir zwischen *Permutationen*, *Variationen* und *Kombinationen*, die wir im folgenden vorstellen.

Permutationen. Als erstes betrachten wir das folgende Problem: Gegeben sind n verschiedene Elemente. Auf wie viele Arten kann man diese Elemente in einer Reihe anordnen? Eine Umstellung der Elemente, die zu einer neuen Anordnung führt, bezeichnet man als *Permutation*. Gefragt ist also nach der Anzahl P_n der Permutationen von n Elementen.

Beispielsweise können wir die drei Elemente a, b und c auf sechs verschiedene Arten anordnen (siehe Tabelle 1.1). Diese Zahl läßt sich durch die folgende Überlegung erhalten: Wir haben drei Plätze, die wir durch drei Elemente besetzen müssen. Wenn wir den ersten Platz besetzen, so stehen uns hierfür drei Elemente zur Verfügung, nämlich a, b oder c. Es gibt also drei Möglichkeiten. Zur Besetzung des zweiten Platzes gibt es jeweils nur noch zwei Möglichkeiten, da ein Element bereits plaziert ist. Für den dritten Platz gibt es schließlich nur noch eine Möglichkeit. Insgesamt erhält man somit $3 \cdot 2 \cdot 1 = 6$ Möglichkeiten.

Tabelle 1.1 Permutationen von drei Elementen a, b und c.

a	b	c
a	c	b
b	a	c
b	c	a
c	a	b
c	b	a

Liegen allgemein n Elemente zur Verteilung auf n Plätze vor, so können auf den ersten Platz n verschiedene Elemente kommen, auf den zweiten Platz jeweils $n-1$ Elemente, auf den dritten Platz jeweils $n-2$ Elemente usw., bis für den n-ten Platz genau ein Element übrigbleibt. Die Zahl der Permutationen ist daher durch $n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots 2 \cdot 1$ gegeben. Hierfür führt man die *Fakultät* als Abkürzung ein:

$$n! = n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots 2 \cdot 1 \quad \text{für } n \in \mathbb{N}.$$

Man liest $n!$ als „n Fakultät". Für $n = 0$ definiert man $0! = 1$. Wir erhalten das Resultat: *Die Zahl P_n der Permutationen von n Elementen lautet*

$$P_n = n!\,.$$

Sind einige Elemente gleich, so wird die Anzahl der Permutationen kleiner als bei ausschließlich verschiedenen Elementen. Nehmen wir beispielsweise an, daß die zu permutierenden Elemente a, b, b lauten, dann sind drei verschiedene Permutationen möglich (siehe Tabelle 1.2).

Tabelle 1.2 Permutationen von drei Elementen a, b und b.

a	b	b
b	a	b
b	b	a

Sind allgemein von n Elementen n_1 Elemente gleich, so fallen alle diejenigen Permutationen zusammen, die sich durch Vertauschung der n_1 gleichen Elemente untereinander ergeben. Dies sind genau $n_1!$ Permutationen, die aus der Anzahl der Permutationen $n!$ herausdividiert werden müssen. Die Anzahl der Permutationen von n Elementen, von denen n_1 Elemente gleich sind, ist also gegeben durch $P_{n,n_1} = n!/n_1!$. In unserem Beispiel erhalten wir $3!/2! = 6/2 = 3$ Permutationen. *Allgemein lautet die Anzahl der Permutationen von n Elementen, von denen jeweils $n_1, n_2, \dots, n_k$ gleich sind,*

$$P_{n,n_1,\dots,n_k} = \frac{n!}{n_1! \cdot n_2! \cdots n_k!}. \tag{1.3}$$

Wir wollen diese Ausführungen durch ein Beispiel aus der Chemie ergänzen. Betrachten wir einen linearen Kohlenwasserstoff aus acht Kohlenstoffatomen, bei dem an einem Ende ein Chloratom und am anderen Ende ein Jodatom substituiert ist. Es sollen in der Kohlenstoffkette drei Doppelbindungen auftreten, während die restlichen vier Bindungen Einfachbindungen sind (siehe Abb. 1.3). Wir fragen, wie viele verschiedene Isomere es hinsichtlich der Anordnungen der Doppelbindungen gibt ohne Rücksicht darauf, ob diese Isomere chemisch stabil sind. Um das Problem zu lösen, betrachten wir die insgesamt auftretenden sieben Bindungen, von denen je drei und je vier gleich sind. Die Anzahl der Isomere ist dann durch die Zahl der Permutationen von sieben Elementen, von denen drei und vier jeweils gleich sind, gegeben. Wir erhalten dafür mit Hilfe von (1.3)

$$P_{7,3,4} = \frac{7!}{3! \cdot 4!} = \frac{7 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot 4} = 35.$$

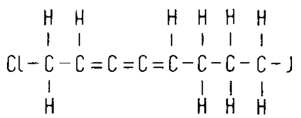

Abb. 1.3 Beispiel für ein Isomer des betrachteten Moleküls.

Variationen. Das zweite Problem, das wir im Rahmen der Kombinatorik behandeln, läßt sich in folgender Weise formulieren: Wie viele Möglichkeiten gibt es, aus n gegebenen Elementen k Elemente herauszugreifen und in verschiedener Weise anzuordnen? Wir bilden also geordnete Gruppen von k Elementen. Die verschiedenen Möglichkeiten bezeichnet man als *Variationen k-ter Ordnung*. Zu unterscheiden ist, ob die k Elemente beliebig häufig verwendet werden dürfen oder nicht, und man spricht hier von Variationen *ohne* oder *mit Wiederholung*. Im ersten Fall verwenden wir das Symbol $V_{n,k}$, im zweiten Fall $V_{n,k}^{w}$.

Betrachten wir zunächst als Beispiel den Fall von $n = 4$ Elementen a, b, c, d, aus denen wir $k = 2$ Elemente ohne Wiederholung herausgreifen. Die verschiedenen Variationen sind für diesen Fall in Tabelle 1.3 angegeben. Man sieht, daß es zwölf verschiedene Variationen gibt, daß also $V_{4,2} = 12$ ist.

Eine allgemeine Formel für $V_{n,k}$ erhalten wir mit Hilfe der folgenden Überlegung. Wir haben n verschiedene Elemente und sollen diese auf k Plätze verteilen.

Tabelle 1.3 Variationen zweiter Ordnung von vier Elementen a, b, c, d ohne Wiederholung.

a	b	b	a
a	c	c	a
a	d	d	a
b	c	c	b
b	d	d	b
c	d	d	c

Zur Besetzung des ersten Platzes gibt es n Möglichkeiten. Zur Besetzung des zweiten Platzes gibt es jeweils noch $n-1$ Möglichkeiten, für den dritten Platz $n-2$ Möglichkeiten usw., bis schließlich der k-te Platz auf $n-k+1$ Arten besetzt werden kann. Dadurch erhalten wir insgesamt $n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots (n-k+1)$ Möglichkeiten:

$$V_{n,k} = n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdots (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!}.$$

In unserem Beispiel gilt $V_{4,2} = 4!/(4-2)! = 24/2 = 12$.

Falls Wiederholungen möglich sind, kommen in dem obigen Beispiel die Variationen aa, bb, cc und dd hinzu, so daß wir insgesamt 16 Möglichkeiten erhalten. Allgemein gibt es für jeden Platz n Möglichkeiten, die n Elemente zu verteilen, da jedes Element beliebig oft vorkommen kann. Die Anzahl der Variationen $V_{n,k}^w$ mit Wiederholung ist also das k-fache Produkt mit der Anzahl der n Elemente:

$$V_{n,k}^w = n^k.$$

Tatsächlich erhalten wir für das obige Beispiel $V_{4,2}^w = 4^2 = 16$.

Wie viele dreistellige Zahlen lassen sich aus den Ziffern eins bis neun schreiben, wenn jede Ziffer nur einmal vorkommen soll? Es handelt sich hier um Variationen dritter Ordnung ohne Wiederholung mit $V_{9,3} = 9!/(9-3)! = 9!/6! = 9 \cdot 8 \cdot 7 = 504$. Falls jede Ziffer beliebig häufig vorkommen darf, liegen Variationen dritter Ordnung mit Wiederholung vor, und ihre Anzahl lautet $V_{9,3}^w = 9^3 = 729$.

Kombinationen. Das dritte und letzte Problem ist das folgende: Auf wie viele Arten lassen sich aus n gegebenen Elementen k Elemente herausgreifen, wenn es auf die Reihenfolge der herausgegriffenen Elemente nicht ankommt? Wir bilden also ungeordnete Gruppen von k Elementen. Man nennt solche Gruppen *Kombinationen k-ter Ordnung*. Darf jedes Element nur einmal oder beliebig häufig verwendet werden, so sprechen wir wie bei den Variationen von Kombinationen *ohne* bzw. *mit Wiederholung* und bezeichnen ihre Anzahl mit $C_{n,k}$ bzw. $C_{n,k}^w$.

Betrachten wir wieder den Fall von vier Elementen a, b, c und d. Gesucht ist die Anzahl der Kombinationen zweiter Ordnung ohne Wiederholung. Es gibt genau sechs Möglichkeiten, die durch die linke Spalte von Tabelle 1.3 gegeben sind. Seien nun allgemein n Elemente gegeben, aus denen k Elemente herausgegriffen werden. Dann ist die Anzahl der Kombinationen gleich der Anzahl der Variationen

$V_{n,k}$, aber dividiert durch die Anzahl $P_k = k!$ der Permutationen, da es auf ihre Reihenfolge ja nicht ankommt:

$$C_{n,k} = \frac{V_{n,k}}{P_k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}.$$

Für diesen Quotienten schreibt man gewöhnlich

$$\binom{n}{k} := \frac{n!}{k!(n-k)!}, \tag{1.4}$$

gelesen als „n über k" und bezeichnet ihn als *Binomialkoeffizient*. Das Zeichen „:=" ist ein Gleichheitszeichen, das den auf der linken Seite der Gleichung stehenden Ausdruck definiert. Wir sagen: „nach Definition gleich".

Im Zahlenlotto „6 aus 49" werden sechs numerierte Kugeln aus einer Menge von 49 numerierten Kugeln ohne Beachtung der Reihenfolge gezogen. Wieviele Möglichkeiten gibt es, die Kugeln zu ziehen? Es handelt sich um Kombinationen ohne Wiederholung mit

$$V_{49,6} = \binom{49}{6} = \frac{49!}{6!43!} = \frac{49 \cdot 48 \cdot 47 \cdot 46 \cdot 45 \cdot 44}{6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1} = 13\,983\,816.$$

Sind nun Wiederholungen zugelassen, so ergeben sich in unserem Beispiel die in Tabelle 1.4 angegebenen zehn Kombinationen. Es läßt sich zeigen, daß die allgemeine Formel für Kombinationen k-ter Ordnung aus n Elementen mit Wiederholung lautet:

$$C^w_{n,k} = \binom{n+k-1}{k}.$$

Tabelle 1.4 Kombinationen zweiter Ordnung von vier Elementen *a*, *b*, *c*, *d* mit Wiederholung.

a	*a*	*b*	*c*
a	*b*	*b*	*d*
a	*c*	*c*	*c*
a	*d*	*c*	*d*
b	*b*	*d*	*d*

Wie viele verschiedene Augenzahlen kann man beim Würfeln mit drei Würfeln erhalten? Wir greifen aus der Menge von sechs Augenzahlen drei Augenzahlen mit Wiederholung heraus, wobei die Reihenfolge keine Rolle spielt. Damit handelt es sich um Kombinationen mit Wiederholung, und wir erhalten

$$C^w_{6,3} = \binom{6+3-1}{3} = \binom{8}{3} = \frac{8!}{3!5!} = \frac{8 \cdot 7 \cdot 6}{3 \cdot 2 \cdot 1} = 56.$$

Wir fassen die Formeln in Tabelle 1.5 zusammen.

Tabelle 1.5 Formeln für Variationen und Kombinationen.

	Variationen *k*-ter Ordnung (Reihenfolge wesentlich)	**Kombinationen *k*-ter Ordnung (Reihenfolge unwesentlich)**
ohne Wiederholung	$V_{n,k} = \dfrac{n!}{(n-k)!}$	$C_{n,k} = \dbinom{n}{k}$
mit Wiederholung	$V^w_{n,k} = n^k$	$C^w_{n,k} = \dbinom{n+k-1}{k}$

Binomialkoeffizient. Abschließend wollen wir uns eingehender mit dem in (1.4) definierten Binomialkoeffizienten befassen. Es gibt ein wichtiges Additionstheorem:

$$\binom{n}{k-1} + \binom{n}{k} = \binom{n+1}{k}.$$

Dies können wir direkt mit der Definition einsehen:

$$\begin{aligned}\binom{n}{k-1} + \binom{n}{k} &= \frac{k \cdot n!}{k \cdot (k-1)!(n-k+1)!} + \frac{(n-k+1) \cdot n!}{(n-k+1) \cdot k!(n-k)!} \\ &= \frac{k \cdot n! + (n-k+1) \cdot n!}{k!(n-k+1)!} = \frac{(n+1)!}{k!(n-k+1)!} = \binom{n+1}{k}.\end{aligned}$$

Die Berechnung der Binomialkoeffizienten aus der Definition (1.4) ist für größere Werte von n umständlich. Das obige Additionstheorem erlaubt eine bequeme, rekursive Berechnung mit Hilfe des *Pascalschen Dreiecks*:

$$\begin{array}{ccccccccccc} & & & & & 1 & & & & & \\ & & & & 1 & & 1 & & & & \\ & & & 1 & & 2 & & 1 & & & \\ & & 1 & & 3 & & 3 & & 1 & & \\ & 1 & & 4 & & 6 & & 4 & & 1 & \\ 1 & & 5 & & 10 & & 10 & & 5 & & 1 \end{array}$$

Die erste und letzte Zahl einer Reihe des Dreiecks ist gleich eins, und die restlichen Zahlen sind jeweils die Summe der direkt links und rechts darüberliegenden Werte. Beispielsweise ist die Zahl 10 in der sechsten Reihe und dritten Stelle die Summe der Zahlen 4 und 6 in der darüberliegenden Reihe. Interessanterweise sind diese Zahlen gerade die Binomialkoeffizienten: *Der Wert in der* $(n+1)$*-ten Reihe und* $(k+1)$*-ten Stelle ist gleich dem Binomialkoeffizient* $\binom{n}{k}$. Zum Beispiel ist $\binom{5}{2} = 5!/(2!\,3!) = 10$.

Die Binomialkoeffizienten treten auch beim Ausmultiplizieren des Produktes $(a+b)^n$ auf. Es gilt etwa

$$\begin{aligned}(a+b)^1 &= 1\cdot a + 1\cdot b,\\ (a+b)^2 &= 1\cdot a^2 + 2\cdot ab + 1\cdot b^2,\\ (a+b)^3 &= 1\cdot a^3 + 3\cdot a^2b + 3\cdot ab^2 + 1\cdot b^3;\end{aligned}$$

vergleiche die Koeffizienten mit der zweiten bis vierten Reihe des Pascalschen Dreiecks. Dies motiviert den *Binomialsatz* oder *Binomischen Lehrsatz*: Für $a, b \in \mathbb{R}$ und $n \in \mathbb{N}$ gilt

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} a^{n-k} b^k. \tag{1.5}$$

Der Binomialsatz ergibt beispielsweise für $n = 4$:

$$\begin{aligned}(a+b)^4 &= \binom{4}{0} a^4 + \binom{4}{1} a^3b + \binom{4}{2} a^2b^2 + \binom{4}{3} ab^3 + \binom{4}{4} b^4\\ &= a^4 + 4a^3b + 6a^2b^2 + 4ab^3 + b^4.\end{aligned}$$

Die Koeffizienten 1, 4, 6, 4, 1 hätten wir natürlich auch direkt am Pascalschen Dreieck ablesen können.

Fragen und Aufgaben

1. Wird die Anzahl der möglichen Permutationen größer oder kleiner, wenn einige der permutierten Elemente gleich werden?
2. Erläutere den Unterschied zwischen Kombinationen und Variationen sowie den zwischen Kombinationen mit Wiederholung und Kombinationen ohne Wiederholung.
3. Was versteht man unter einem Binomialkoeffizienten und wie ist er definiert?
4. Wie viele verschiedene zweiziffrige Zahlen lassen sich aus den Ziffern 3, 4 und 7 bilden, wenn man (i) jede Ziffer nur einmal, (ii) jede Ziffer auch mehrmals verwenden darf?
5. Wie viele Anordnungsmöglichkeiten gibt es für die Elemente $abdf$ sowie für die Elemente $abdd$?
6. Teile ein Rechteck durch r senkrechte und s waagrechte Geraden in kleinere, jeweils gleiche Rechtecke. Auf wie viele Arten kann man von einer Ecke zur diagonal gegenüberliegenden Ecke gelangen, wenn man sich ohne Umweg immer auf Rechteckseiten bewegt?
7. Gegeben sei ein linearer Kohlenwasserstoff aus neun C-Atomen, an dessen Ende sich eine OH-Gruppe befindet. (i) Wie viele verschiedene Isomere kann man durch Substitution von zwei Chlor-Atomen erhalten, wenn an jedes C-Atom nur ein Chlor-Atom gesetzt werden darf? (ii) Wie viele Isomere

erhält man, wenn man statt der zwei Chlor-Atome ein Chlor-Atom und ein Brom-Atom verwendet? (Bei der Lösung der Aufgabe soll keine Rücksicht auf die chemische Stabilität der betrachteten Verbindungen genommen werden.)

8. Gegeben sind N Atome, von denen n_1 die Energie ε_1, n_2 die Energie ε_2 usw. und n_s die Energie ε_s besitzen sollen. Wie viele Möglichkeiten gibt es, die Atome auf die einzelnen Energiewerte zu verteilen, wenn die Atome (i) unterscheidbar bzw. (ii) ununterscheidbar sind?
9. Berechne: (i) $\binom{5}{3}$, (ii) $\binom{7}{4}$.