Grundlagen

1 Elemente der Logik

1.1 Aussagen und ihre Verknüpfungen

Definition: Eine **Aussage** A ist ein Satz, dem sinnvoll eine der Eigenschaften **wahr** oder **falsch** zugeordnet werden kann.

Anmerkung: Dies ist auch bekannt als „*Satz vom ausgeschlossenen Dritten*“ (Aristoteles, Ἀριστοτέλης, 4. Jh. v. Chr.): Eine Aussage ist entweder wahr oder falsch.

Beispiele: „5 ist eine Primzahl“ [1] (wahr); „3 ist Teiler von 8“ (falsch).

Zur Bezeichnung der **Wahrheitswerte** werden neben dem Paar „wahr/falsch“ (W/F) auch häufig die Paare „true/false“ (T/F), oder „Eins/Null“ (1/0) verwendet.

Wichtige Aussageformen sind die Negation, die Konjunktion und die Disjunktion:

$\neg A$	„nicht A“	**Negation** (Verneinung)
$A \wedge B$	„A und B“	**Konjunktion**
$A \vee B$	„A oder auch B“	**Disjunktion** („einschließendes oder“)

Die folgende **Wahrheitstafel** zeigt die zugehörigen Wahrheitswerte:

A	B	$\neg A$	$A \wedge B$	$A \vee B$
W	W	F	W	W
W	F	F	F	W
F	W	W	F	W
F	F	W	F	F

Ist A wahr, so ist $\neg A$ falsch, und $\neg A$ ist wahr, wenn A falsch ist.
$A \wedge B$ ist nur wahr, wenn sowohl A als auch B wahr sind.
$A \vee B$ ist wahr, außer wenn sowohl A als auch B falsch sind.

1.2 Logische Folgerungen

Zwei Aussagen (A und B) können zueinander gleichwertig (äquivalent) sein, oder es kann von einer Aussage (A) auf eine andere Aussage (B) geschlossen werden.

$A \Leftrightarrow B$ A ist **äquivalent** zu B;
A und B sind gleichwertige / gleichbedeutende Aussagen;
A gilt genau dann (dann und nur dann), wenn B gilt
(logische Äquivalenz)

[1] Eine Primzahl p ($p > 1$) ist eine natürliche Zahl mit Teilersumme $p + 1$.

$A \Rightarrow B$ A ist eine **hinreichende** Bedingung für B;
aus A folgt B; wenn A gilt, dann gilt auch B
(logische Implikation)

Allgemein gilt: $(A \Rightarrow B) \Leftrightarrow (\neg B \Rightarrow \neg A)$
d. h. B ist eine **notwendige** Bedingung für A (damit A wahr sein kann, muß B wahr sein).

Beispiel: A : „6 teilt n"; B : „2 teilt n".
$A \Rightarrow B$: „Wenn n durch 6 teilbar ist, dann ist n auch durch 2 teilbar."
$\neg B \Rightarrow \neg A$: „Wenn n durch 2 nicht teilbar ist, so kann n auch nicht durch 6 teilbar sein."

Ein wichtiges Ergebnis dieser Überlegungen sind die folgenden zwei verschiedenen Arten des Beweises mathematischer Aussagen:

- **Direkter Beweis**: $A \Rightarrow B$
  Die Aussage B wird bewiesen, indem man zeigt, daß aus der (wahren) Aussage A die Aussage B folgt.

- **Indirekter Beweis**, **Beweis durch Widerspruch**: $\neg B \Rightarrow \neg A$
  (lat. 'reductio ad absurdum')
  Anstatt die Aussage B zu beweisen, nimmt man an, daß die Verneinung von B wahr ist, und zeigt, daß daraus die Verneinung von A folgt (ist B falsch, muß also auch A falsch sein). Da aber, im Widerspruch dazu, A wahr ist, kann B nicht falsch sein, sondern muß wahr sein.

Anmerkung: Kurt Gödel (1906–1978) hat die Existenz nichtentscheidbarer Probleme in mathematischen Theorien allgemein nachgewiesen („*Gödelscher Unvollständigkeitssatz*", 1931)[2]. Danach lassen sich in einem als widerspruchsfrei angesehenen Axiomensystem[3] Sätze formulieren, die weder beweisbar noch widerlegbar sind (unentscheidbare Aussagen). Erst nach Erweiterung des Axiomensystems wird eine Entscheidung möglich.

[2] Siehe auch: (a) G. Chaitin: Die Grenzen der Gewissheit. *Spektrum der Wissenschaft*, Sept. 2006, 54; (b) E. Nagel, J. R. Newman: Der Gödelsche Beweis, 3. Aufl., Oldenbourg, München, 1984; (c) D. R. Hofstadter: Gödel, Escher, Bach, ein Endloses Geflochtenes Band, 4. Aufl., Klett-Cotta, Stuttgart, 1985.

[3] Ein Axiom ist eine als wahr *vorausgesetzte*(!) Aussage (eine „offensichtliche Tatsache").

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

2 Elemente der Mengenlehre

Definition: Eine **Menge** M ist eine Zusammenfassung von bestimmten, wohlunterscheidbaren Objekten unserer Anschauung oder unseres Denkens (welche die Elemente von M genannt werden) zu einem Ganzen („naive Definition“, 1895, nach Georg Cantor, 1845–1918).

$$\begin{array}{ll} a \in M & a \text{ ist ein Element der Menge } M \\ a \notin M \Leftrightarrow \neg(a \in M) & a \text{ ist kein Element der Menge } M \end{array}$$

Eine Menge kann definiert werden durch ...

1. ... Aufzählen der zur Menge gehörenden Elemente:

$$\begin{aligned} &A = \{a, b, c\}\ , \quad B = \{c, d\}\ , \quad C = \{\text{Terra}\} \\ &D = \{\text{Ala(A)}, \text{Arg(R)}, \text{Asn(N)}, \text{Asp(D)}, \text{Cys(C)}, \text{Gln(Q)}, \text{Glu(E)}, \text{Gly(G)}, \\ &\qquad \text{His(H)}, \text{Ile(I)}, \text{Leu(L)}, \text{Lys(K)}, \text{Met(M)}, \text{Phe(F)}, \text{Pro(P)}, \text{Ser(S)}, \\ &\qquad \text{Thr(T)}, \text{Trp(W)}, \text{Tyr(Y)}, \text{Val(V)}\} \\ &M = \{\text{Wasser}, \text{Malz}, \text{Hopfen}, \text{Hefe}\} \\ &\mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, \ldots\} \\ &P = \{2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29, 31, \ldots\} \end{aligned}$$

Hier sind A und B zwei einfache abstrakte Mengen, C ist die Menge der bewohnbaren Planeten, die den Menschen derzeit zur Verfügung stehen (z. B. um Chemie zu betreiben), D ist die Menge der zwanzig proteinogenen L-α-Aminosäuren[1] (angegeben mit ihren Drei- und Einbuchstabensymbolen), M ist die Menge der Zutaten für ein gutes Bier, $\mathbb{N}$ ist die Menge der natürlichen Zahlen und P ist die Menge der Primzahlen.

2. ... Angabe einer die Elemente definierenden Eigenschaft:

$$\begin{aligned} G &= \{n \mid n \in \mathbb{N} \ \wedge\ n = 2\,k\} = \{0, 2, 4, 6, \ldots\} \\ U &= \{n \mid n \in \mathbb{N} \ \wedge\ n = 2\,k + 1\} = \{1, 3, 5, 7, \ldots\} \\ K &= \{\mathrm{C}_n\mathrm{H}_{2n+2} \mid n \in \mathbb{N}\} \end{aligned}$$

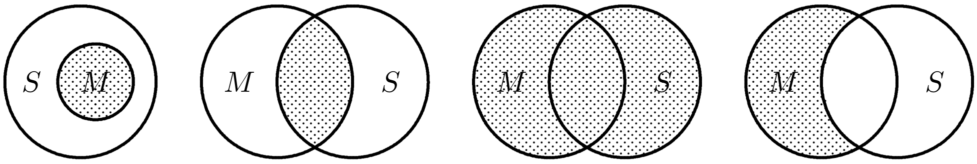
Hier ist G die Menge der geraden natürlichen Zahlen, und U ist die Menge der ungeraden natürlichen Zahlen. Die Menge K enthält alle gesättigten aliphatischen Kohlenwasserstoffe (Alkane), aber auch den molekularen Wasserstoff H_2 (für $n = 0$).

Leere Menge: Die leere Menge enthält **kein** Element: $\emptyset = \{\} \neq \{0\}$.

Mächtigkeit von Mengen: Eine Menge M mit n Elementen ($n \in \mathbb{N}$, $n < \infty$) heißt **endlich**. Jede nicht endliche Menge heißt **unendlich**. Wenn sich die Elemente zweier Mengen M und S eineindeutig (umkehrbar eindeutig) einander zuordnen lassen, so heißen die beiden Mengen **gleichmächtig**.

[1] Zwei weitere Aminosäuren sind als proteinogen erkannt worden: Selenocystein (Sec) und Pyrrolysin. Beide werden unter bestimmten Bedingungen an solchen Stellen in die Peptidkette eingebaut, an welchen normalerweise Kettenabbruch erfolgt.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)



(a) $M \subset S$ (b) $M \bigcap S$ (c) $M \bigcup S$ (d) $M \setminus S$

Fig. 1: Venn-Diagramme (nach John Venn, 1834–1923) zur Darstellung von Relationen zwischen Mengen. (a) Teilmenge $M \subset S$, (b) Schnittmenge $M \bigcap S$, (c) Vereinigungsmenge $M \bigcup S$, und (d) Differenzmenge $M \setminus S$.

Beispiele: Von den oben genannten Mengen sind die Mengen A, B, C, D und M endlich; alle anderen dagegen unendlich und gleichmächtig.

Gleichheit von Mengen:
$M = S \Leftrightarrow$ (Für alle $x \in M$ oder $x \in S$ gilt: $x \in M \Leftrightarrow x \in S$).

Teilmenge: M ist Teilmenge (Untermenge) von S (S ist Obermenge von M)
$M \subset S \Leftrightarrow$ (Für alle x gilt: $x \in M \Rightarrow x \in S$) (echte Teilmenge, s. Fig. 1)

Schnittmenge (Durchschnitt): „M geschnitten mit S“
$M \bigcap S = S \bigcap M = \{x \mid x \in M \ \wedge \ x \in S\}$ (s. Fig. 1)

Vereinigungsmenge (Vereinigung, Summe): „M vereinigt mit S“
$M \bigcup S = S \bigcup M = \{x \mid x \in M \ \vee \ x \in S\}$ (s. Fig. 1)

Differenzmenge (Differenz): „M ohne S“
$M \setminus S = \{x \mid x \in M \ \wedge \ x \notin S\}$ (s. Fig. 1)

Komplementmenge: Komplementmenge der Menge M bzgl. der Obermenge S
$\overline{M} = S \setminus M$

Beispiel: Für die oben genannten Mengen G und U gilt: $\overline{G} = U$ und $\overline{U} = G$ ($G \bigcup U = \mathbb{N}$).

Kartesisches Produkt: „M Kreuz S“ (die Menge aller **geordneten** Paare)
$M \times S = \{(x, y) \mid x \in M \ \wedge \ y \in S\} \neq S \times M$
Nur für $M = S$ ergibt sich speziell $M \times M = M^2$.

Beispiel: Die Menge aller Punkte in einer Ebene $\mathbb{R}^2 = \mathbb{R} \times \mathbb{R} = \{(x, y) \mid x, y \in \mathbb{R}\}$.

Eine Menge ist zunächst nur ein „unstrukturierter Haufen von Elementen“. Lassen sich Beziehungen zwischen den Elementen einer Menge finden, so können daraus **Strukturen** entstehen. Oft lassen sich solche Beziehungen gezielt erzeugen, z. B. durch Einführung von Verknüpfungen zwischen Elementen mit Hilfe von **Operatoren** (mathematischen Arbeitsvorschriften, Vorschriften für mathematische Operationen):

$$\textbf{Menge} \ + \ \textbf{Operator(en)} \ \longrightarrow \ \textbf{algebraische Struktur}$$

Einige sehr wichtige Mengen sind die Zahlenmengen $\mathbb{N}$, $\mathbb{Z}$, $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$ (die Mengen der natürlichen, ganzen, rationalen, reellen und komplexen Zahlen). Durch Verbindung mit den Operationen „Addition“ und „Multiplikation“ entstehen auf dem Weg von $\mathbb{N}$ zu $\mathbb{C}$ die algebraischen Strukturen der Gruppe und des Körpers.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Zahlenmengen

3 Zahlenmengen von $\mathbb{N}$ bis $\mathbb{C}$

3.1 Natürliche Zahlen

$\mathbb{N} = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, \dots\}$[1]

Die Menge der natürlichen Zahlen, $\mathbb{N}$, ist **abzählbar unendlich** (im Ggs. zur Menge der reellen Zahlen, $\mathbb{R}$, die „überabzählbar unendlich" ist). Eine natürliche Zahl n hat die Zahl $n + 1$ als Nachfolger.

Anmerkung: Chemiker zählen manchmal anders: ${}_0$n (Neutron), ${}_1$H, ${}_2$He, ${}_3$Li, ${}_4$Be, ${}_5$B, ${}_6$C, ${}_7$N, ${}_8$O, ${}_9$F, ${}_{10}$Ne, ..., ${}_{92}$U, ..., doch diese Folge endet (zur Zeit vor $Z = 120$).

Die natürlichen Zahlen sind **geordnet**, d. h. sie lassen sich nach ihrer Größe in einer Reihenfolge anordnen.

Ordnungsrelationen:

$k = l$	k ist gleich l
$k \neq l$	k ist ungleich l
$k < l$	k ist kleiner als l
$k > l$	k ist größer als l
$k \leq l$	k ist kleiner als oder gleich l
$k \geq l$	k ist größer als oder gleich l

Für alle Paare natürlicher Zahlen, $k \in \mathbb{N}$, $l \in \mathbb{N}$, gilt: $k < l \vee k = l \vee k > l$.

Eine für die Chemie sehr wichtige natürliche Zahl ist die Maßzahl der Avogadro-Konstanten[2] N_{A} (nach Amedeo Avogadro, 1776–1856): $\{N_{\mathrm{A}}\} = 6,0221415 \cdot 10^{23}$. Dies ist die Anzahl von Atomen in 1 mol Kohlenstoff-12, d. h. in 12 g des Kohlenstoffisotops ^{12}C. Die meisten Stellen dieser natürlichen Zahl sind unbekannt.

Grundrechenoperationen (und Operatoren) auf der Menge $\mathbb{N}$:
Addition (+) und **Multiplikation** ($\cdot$ oder $\times$), sowie — mit Einschränkungen — auch Subtraktion ($-$) und Division (nicht durch Null; / oder : oder $\div$). Für die Subtraktion muß $k - l \geq 0$ erfüllt sein, die Division $k/l = m$ ist nur ausführbar wenn die „Teilbarkeitsbedingung" $k = l \cdot m$ erfüllt ist ($k, l, m \in \mathbb{N}$). Die genannten

[1] Unsere Zahlzeichen („Buchstaben für Zahlen") sind die indisch-arabischen Ziffern. Das dt. 'Ziffer', das engl. 'cipher', das frz. 'chiffre' sowie das russ. 'Цифра' gehen zunächst auf das lateinische 'zephirum' und schließlich auf das arabische صفر (tl.: ṣifr) für 'Null' oder 'leer' zurück. Letzteres ist seinerseits die Übersetzung des bedeutungsgleichen Sanskrit-Wortes शून्य (tl.: śūnya) (G. Ifrah: Universalgeschichte der Zahlen, 2. Aufl., Campus, Frankfurt, 1991, S. 534ff).

[2] Jede physikalische Größe G läßt sich als Produkt aus einer Maßzahl $\{G\}$ und einer dazugehörigen Einheit (dem dazugehörigen „Maß") $[G]$ schreiben: $G = \{G\}\,[G]$, hier nun also: $N_{\mathrm{A}} = 6,0221415 \cdot 10^{23}\ \mathrm{mol}^{-1}$ [URL: `http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html`, Fundamental Physical Constants, letzter (2002) empfohlener Wert, ohne Fehlerangabe].

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Rechenoperationen verknüpfen stets zwei Elemente (hier: von $\mathbb{N}$), sie gehören daher zu den **binären Operationen** (binären Verknüpfungen).

Verknüpfung	Name	k heißt	l heißt	n heißt
$k + l = n$	Addition	Summand	Summand	Summe
$k - l = n$	Subtraktion	Minuend	Subtrahend	Differenz
$k \cdot l = n$	Multiplikation	Faktor	Faktor	Produkt
$k/l = n$ $(l \neq 0)$	Division	Dividend	Divisor	Quotient

3.1.1 Addition

Abgeschlossenheit: $k \in \mathbb{N}$, $l \in \mathbb{N} \Rightarrow k + l \in \mathbb{N}$, **speziell**: $k + 0 = k$.
Die Summe von zwei natürlichen Zahlen ist wiederum eine natürliche Zahl.
Kommutativgesetz: $k + l = l + k$ (Vertauschbarkeit von Summanden).
Assoziativgesetz: $(k+l)+m = k+(l+m)$ (Verbindung mehrerer Summanden).

Mehrfache Additionen lassen sich mit Hilfe des Summenzeichens kürzer schreiben:

$$\begin{aligned} 1 + 2 + 3 + \ldots + n &= \sum_{i=1}^{n} i = \sum_{j=1}^{n} j = \sum_{k=0}^{n-1} (k+1) \\ a_1 + a_2 + \ldots + a_n &= \sum_{k=1}^{n} a_k \end{aligned}$$

Addition von zwei Summen:

$$\begin{aligned} \sum_{i=l}^{m} a_i + \sum_{j=m+1}^{n} a_j &= (a_l + a_{l+1} + \ldots + a_m) + (a_{m+1} + a_{m+2} + \ldots + a_n) \\ &= a_l + a_{l+1} + \ldots + a_n = \sum_{k=l}^{n} a_k \end{aligned}$$

Eine allgemein übliche Vereinbarung ist:

$$\sum_{k=l}^{n} a_k = \begin{cases} a_l + a_{l+1} + \ldots + a_n & n \geq l \\ 0 & n < l \quad (\text{„leere“ Summe}) \end{cases}$$

Mehrfache Addition identischer Summanden führt zur **Multiplikation**:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{3} 2 &= 2 + 2 + 2 = 3 \cdot 2 \\ \sum_{i=1}^{n} k &= \underbrace{k + k + \ldots + k}_{n \text{ Summanden}} = n \cdot k \end{aligned}$$

3.1.2 Multiplikation

Abgeschlossenheit: $k \in \mathbb{N}, l \in \mathbb{N} \Rightarrow k \cdot l \in \mathbb{N}$, **speziell**: $1 \cdot k = k$.
Das Produkt von zwei natürlichen Zahlen ist wiederum eine natürliche Zahl.
Kommutativgesetz: $k \cdot l = l \cdot k$ (Vertauschbarkeit von Faktoren).
Assoziativgesetz: $(k \cdot l) \cdot m = k \cdot (l \cdot m)$ (Verbindung mehrerer Faktoren).

Mehrfache Multiplikationen lassen sich mit dem Produktzeichen kürzer schreiben:

$$\begin{aligned} n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot n &= \prod_{i=1}^{n} i = \prod_{j=1}^{n} j = \prod_{k=0}^{n-1} (k+1) \\ a_1 \cdot a_2 \cdot \ldots \cdot a_n &= \prod_{k=1}^{n} a_k \\ a_m \cdot a_{m+1} \cdot \ldots \cdot a_n &= \prod_{k=m}^{n} a_k \end{aligned}$$

Anmerkung: Das Symbol $n!$ („n Fakultät“) bezeichnet für $n > 0$ das Produkt aller natürlichen Zahlen von 1 bis n. Es gilt auch $n! = n \cdot (n-1)!$, so daß $0! = 1$ sinnvoll ist.

Multiplikation von zwei Produkten:

$$\begin{aligned} \prod_{i=l}^{m} a_i \cdot \prod_{j=m+1}^{n} a_j &= (a_l \cdot a_{l+1} \cdot \ldots \cdot a_m) \cdot (a_{m+1} \cdot a_{m+2} \cdot \ldots \cdot a_n) \\ &= a_l \cdot a_{l+1} \cdot \ldots \cdot a_n = \prod_{k=l}^{n} a_k \end{aligned}$$

Eine allgemein übliche Vereinbarung ist:

$$\prod_{k=m}^{n} a_k = \begin{cases} a_m \cdot a_{m+1} \cdot \ldots \cdot a_n & n \geq m \\ 1 & n < m \quad \text{(„leeres“ Produkt)} \end{cases}$$

Treten Addition und Multiplikation gemeinsam auf, so ist die Verteilung der miteinander zu verknüpfenden Zahlen durch das **Distributivgesetz** festgelegt („**Ausmultiplizieren**“, „**Ausklammern**“):

$$k \cdot (l + m) = k \cdot l + k \cdot m$$

Zusammen mit dem Summensymbol gilt entsprechend:

$$k \sum_{i=1}^{n} a_i = \sum_{i=1}^{n} k \cdot a_i$$

Es gilt **speziell**:

$$\sum_{i=l}^{n} k = k \sum_{i=l}^{n} 1 = k\,[\; n - (l-1) \;] = k(n - l + 1)$$

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Mehrfache Multiplikation identischer Faktoren führt auf **Potenzen**:

$$\prod_{i=1}^{3} 2 = 2 \cdot 2 \cdot 2 = 2^3$$
$$\prod_{i=1}^{n} k = \underbrace{k \cdot k \cdot \ldots \cdot k}_{n \text{ Faktoren}} = k^n$$

Ein Ausdruck der Form k^n („k hoch n“) heißt **Potenz** zur **Basis** (Grundzahl) k mit **Exponent** (Hochzahl) n. Es gilt **speziell** $k^0 = 1$ ($k \neq 0$), sowie $0^n = 0$ ($n \neq 0$). Der Ausdruck „0^0“ ist unbestimmt (nicht definiert).

Rechengesetze für Potenzen:

1. Multiplikation und Division von verschiedenen Potenzen zur gleichen Basis (Zurückführung einer Multiplikation [Division] auf eine Addition [Subtraktion]):

$$n^k \cdot n^l = n^{k+l} \qquad 10^2 \cdot 10^3 = 10^{2+3} = 10^5$$
$$n^k / n^l = n^{k-l} \qquad 10^3/10^2 = 10^{3-2} = 10$$

2. Multiplikation und Division von gleichen Potenzen zu verschiedener Basis:

$$k^n \cdot l^n = (k \cdot l)^n \qquad 3^2 \cdot 5^2 = (3 \cdot 5)^2 = 15^2 = 225$$
$$k^n / l^n = (k/l)^n \qquad 10^2/5^2 = (10/5)^2 = 2^2 = 4$$

3. Wiederholtes Potenzieren (Zurückführung des Potenzierens auf eine Multiplikation):

$$(n^k)^l = n^{(k \cdot l)} = (n^l)^k \qquad (10^2)^3 = 10^{(2 \cdot 3)} = (10^3)^2$$

Für das Potenzieren gilt aber **kein Kommutativgesetz** ($k^n \neq n^k$, $2^3 \neq 3^2$), und auch **kein Assoziativgesetz** ($k^{(l^m)} \neq (k^l)^m = k^{l \cdot m}$, $10^8 = 10^{(2^3)} \neq (10^2)^3 = 10^6$).

Primfaktorzerlegung: Jede natürliche Zahl $n > 1$ läßt sich **eindeutig** als Produkt von Primzahlen schreiben („*Fundamentalsatz der Arithmetik*“).

Beispiel: $504 = 14 \cdot 36 = 7 \cdot 8 \cdot 9 = 2^3 \cdot 3^2 \cdot 7 = 2^3 \cdot 3^2 \cdot 5^0 \cdot 7^1$

Anmerkungen:
(1) Es gibt unendlich viele Primzahlen (Euklid von Alexandria, Εὐκλείδης, 4. Jh. v. Chr.).
(2) Die Eindeutigkeit der Primfaktorzerlegung in ℕ ist **nicht** selbstverständlich, so gilt in erweiterten Zahlenmengen z. B. $6 = 2 \cdot 3 = (3 + \sqrt{3})(3 - \sqrt{3}) = (1 + \sqrt{-5})(1 - \sqrt{-5})$.
(3) Eine Zerlegung einer natürlichen Zahl n in (positive) Summanden heißt **Partition**, und ist im allgemeinen nicht eindeutig. Eine einfache Formel zur direkten Berechnung der Anzahl möglicher Partitionen von n, $p(n)$, ist nicht bekannt. Wegen $3 = 2 + 1 = 1 + 1 + 1$ ist $p(3) = 3$, und daher gibt es genau 3 Klassen 3-atomiger Moleküle (A_3, AB_2, ABC). Wegen $p(6) = 11$ folgt, daß es genau 11 Klassen verschieden substituierter Benzene (C_6H_6) oder oktaedrischer Komplexe ($[ML_6]^{q\pm}$) gibt.

3.1.3 Vollständige Induktion

Die Nachfolger-Eigenschaft der natürlichen Zahlen läßt sich für ein wichtiges Beweisverfahren nutzen, den

Beweis durch vollständige Induktion: Beweis einer Aussage $A(n)$, $n \in \mathbb{N}$, durch Schluß von $A(n)$ auf $A(n+1)$, $A(n) \Rightarrow A(n+1)$, nachdem zuvor gezeigt wurde, daß die Aussage $A(n_0)$ für ein kleinstes $n = n_0$ wahr ist (häufig: $n_0 = 0$ oder $n_0 = 1$). In Einzelschritten:

1. **Induktionsanfang**: Zeige, daß $A(n_0)$ wahr ist.
2. **Induktionsschritt**: Zeige, daß $A(n) \Rightarrow A(n+1)$ für alle $n \geq n_0$ wahr ist („*Schluß von n auf $n+1$*"). Dies läßt sich in drei Teilschritten erreichen:
   (a) Induktionsannahme: Für ein gewisses $n \in \mathbb{N}$ ist $A(n)$ wahr.
   (b) Induktionsbehauptung: Für dieses n ist dann auch $A(n+1)$ wahr.
   (c) Induktionsschluß: Für alle $n \in \mathbb{N}$ $(n \geq n_0)$ ist $A(n) \Rightarrow A(n+1)$ nachzuweisen.

Damit ist dann die Aussage $A(n)$ für alle $n \geq n_0$ bewiesen.

Anmerkung: Das Verfahren der vollständigen Induktion ist erst anwendbar, wenn ein zu prüfender Ausdruck für $A(n)$ vorliegt. Dieser muß zuvor mit anderen Mitteln erhalten worden sein, evtl. auch nur als zu prüfende Hypothese.

Beispiel: Gesucht ist die Summe S_n aller natürlichen Zahlen von Null (oder Eins) bis zu einer vorgegebenen größten Zahl, n, einschließlich:

$$S_n = 0 + 1 + \ldots + n = \sum_{k=0}^{n} k = \sum_{k=1}^{n} k$$

Den Fall $n = 100$ berechnete der 7jährige Carl Friedrich Gauß (1777–1855) wie folgt:

$$\begin{array}{rcrcrcccrcccc} S_{100} & = & 1 & + & 2 & + & \ldots & + & 50 \\ & + & 100 & + & 99 & + & \ldots & + & 51 \\ & = & 101 & + & 101 & + & \ldots & + & 101 & = & 50 \cdot 101 & = & \frac{100}{2}(100+1) \end{array}$$

Für den allgemeinen Fall läßt sich daher nun folgende Formel vorschlagen:

$$A(n): \qquad S_n = \sum_{k=0}^{n} k = n(n+1)/2$$

Der **Beweis** dieser Aussage gelingt durch vollständige Induktion:

1. Induktionsanfang: Mit $n_0 = 0$ ist $A(0)$: $S_0 = 0$ offensichtlich wahr.
2. Induktionsschritt:
   (a) Induktionsannahme: Für ein gewisses $n \in \mathbb{N}$ sei $A(n)$ wahr.
   (b) Induktionsbehauptung: Für dieses n gilt dann auch:

$$A(n+1): \qquad S_{n+1} = \sum_{k=0}^{n+1} k = (n+1)(n+2)/2$$

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

(c) Induktionsschluß: Zeige, daß jetzt $A(n+1)$ aus $A(n)$ folgt:

$$A(n+1): \qquad S_{n+1} = S_n + (n+1) = n(n+1)/2 + (n+1) = (n+1)(n+2)/2$$

Damit ist gezeigt: $A(0) \Rightarrow A(1) \Rightarrow A(2) \Rightarrow \ldots \Rightarrow A(k) \Rightarrow A(k+1) \Rightarrow \ldots$
Die Aussage $A(n)$ gilt also für alle $n \in \mathbb{N}$ — q. e. d.[3] ∎

3.2 Ganze Zahlen

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

Die Menge der ganzen Zahlen, $\mathbb{Z}$, ist **abzählbar unendlich** (wie $\mathbb{N}$), obwohl $\mathbb{N} \subset \mathbb{Z}$ gilt. Die ganzen Zahlen sind ebenfalls **geordnet**.

Grundrechenoperationen auf der Menge $\mathbb{Z}$:
Addition und Multiplikation, sowie Subtraktion und Division (nicht durch Null), letztere jedoch immer noch nur mit Einschränkungen.

Durch Aufheben der Einschränkung $n-k \geq 0$ bei der Subtraktion gelangt man von $\mathbb{N}$ zu $\mathbb{Z}$. Wegen $n - k = n + (-k)$ ist die Subtraktion nunmehr aber nichts weiter als die Addition einer entsprechenden negativen Zahl, so daß die Subtraktion als unabhängige Rechenoperation überflüssig wird.

Das Potenzieren, das in $\mathbb{N}$ ohne Einschränkungen ausführbar war (Ausnahme: „0^0“), ist nun in $\mathbb{Z}$ nur noch mit wesentlichen Einschränkungen möglich ($2^{-1} = ?$).

Warum ist „minus mal minus gleich plus“? Diese Rechenregel, die hier bei den ganzen Zahlen zum ersten Mal anwendbar wird, folgt aus den allgemeinen Rechenregeln **(1)** $(-n) \cdot 0 = 0$ und **(2)** $(-n) \cdot (k-k) = (-n) \cdot k + (-n) \cdot (-k)$ (Distributivgesetz). Verknüpfung beider Regeln ergibt zunächst $(-n) \cdot k + (-n) \cdot (-k) = 0$, woraus $(-n) \cdot (-k) = +n \cdot k$ für alle n, k folgt. Damit gilt **speziell**: $-(-k) = (-1) \cdot (-k) = k$.

3.3 Rationale Zahlen

$\mathbb{Q} = \{x \mid x = p/q \ \wedge\ p \in \mathbb{Z} \ \wedge\ q \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}\}$

Die Menge der rationalen Zahlen, $\mathbb{Q}$, ist ebenfalls **abzählbar unendlich** (wie $\mathbb{N}$), obwohl $\mathbb{N} \subset \mathbb{Z} \subset \mathbb{Q}$ gilt. Auch die rationalen Zahlen sind **geordnet**.

Eine rationale Zahl x läßt sich verstehen als **Bruch**, $x = p/q$ mit **Zähler** p und **Nenner** q, oder als **geordnetes Paar ganzer Zahlen**, $x = (p, q)$. Mit $q = 1$ wird die Teilmenge der ganzen Zahlen erhalten. Weitere wichtige Teilmengen sind:
– die (positiven) **Stammbrüche:** $\{x \in \mathbb{Q} \mid x = 1/n \wedge n \geq 1\}$;
– die (positiven) **echten Brüche:** $\{x \in \mathbb{Q} \mid 0 < x < 1\}$.

Die rationalen Zahlen sind **dicht**, d. h. zwischen zwei beliebigen(!) rationalen Zahlen x_1 und x_2 ($x_1 < x_2$) liegen stets unendlich viele weitere, so gilt z. B. $x_1 < x_1 + (x_2 - x_1)/n < x_2$ ($n \in \mathbb{N}$, $n > 1$).

[3] lat. ‘quod erat demonstrandum’, dt. ‘was zu beweisen war’.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Grundrechenoperationen auf der Menge $\mathbb{Q}$:
Alle Grundrechenoperationen (Addition, Multiplikation, Subtraktion und Division [nicht durch Null]) sind **ohne** Einschränkungen ausführbar. Die Menge $\mathbb{Q}$ ist also diesbezüglich abgeschlossen.

Das Aufheben der „Teilbarkeitsbedingung“ bei der Division ($k/l = n \Leftrightarrow k = n \cdot l$, mit $k, l, n \in \mathbb{Z}$) führt von $\mathbb{Z}$ zu $\mathbb{Q}$. Wegen $k/l = k \cdot (1/l)$ ist die Division durch l nunmehr aber nichts weiter als die Multiplikation mit dem entsprechenden Kehrwert, $1/l$. Damit ist die Division als unabhängige Rechenoperation nun ebenfalls überflüssig geworden.

Grundrechenregeln für rationale Zahlen („Bruchrechnen“), formuliert mit Brüchen, $x = p/q$, und geordneten Paaren ganzer Zahlen, $x = (p, q)$:

1. Gleichheit rationaler Zahlen:
$$\frac{p}{q} = \frac{r}{s} \Leftrightarrow p \cdot s = q \cdot r \qquad (p, q) = (r, s) \Leftrightarrow p \cdot s = q \cdot r$$
Beispiel: $6/21 = 10/35$.
2. Äquivalenz (Gleichwertigkeit) rationaler Zahlen (Operationen: „**Kürzen**“ bzw. „**Erweitern**“):
$$\frac{p}{q} = \frac{c \cdot p}{c \cdot q} \qquad (p, q) = (c \cdot p, c \cdot q)$$
Beispiel: $2/7 = 6/21 = 10/35$.
3. Summation rationaler Zahlen (Operationen: „**auf den Hauptnenner bringen**“ bzw. „**in Partialbrüche zerlegen**“):
$$\frac{p}{q} \pm \frac{r}{s} = \frac{p \cdot s}{q \cdot s} \pm \frac{q \cdot r}{q \cdot s} = \frac{p \cdot s \pm q \cdot r}{q \cdot s} \qquad (p, q) \pm (r, s) = (p \cdot s \pm q \cdot r, q \cdot s)$$
Beispiel: $2/7 + 3/5 = 31/35$, $2/7 - 3/5 = -11/21$.
4. Multiplikation und Division rationaler Zahlen:
$$\frac{p}{q} \cdot \frac{r}{s} = \frac{p \cdot r}{q \cdot s} \qquad (p, q) \cdot (r, s) = (p \cdot r, q \cdot s)$$
$$\frac{p}{q} : \frac{r}{s} = \frac{p}{q} \cdot \left(\frac{r}{s}\right)^{-1} = \frac{p \cdot s}{q \cdot r} \qquad (p, q) : (r, s) = (p, q) \cdot (r, s)^{-1} = (p \cdot s, q \cdot r)$$
Beispiel: $(2/7) \cdot (3/5) = 6/35$, $(2/7) : (3/5) = 10/21$.

Die Einschränkungen beim Potenzieren, die in $\mathbb{Z}$ noch galten, sind nun aufgehoben ($n^{-l} = 1/n^l$, $2^{-1} = 1/2$, $10^{-2} = 1/100$). Allerdings treten neue Einschränkungen auf ($2^{1/2} = ?$, $(-1)^{1/2} = ?$). Diese lassen sich schrittweise aufheben, durch Erweiterung zunächst zu den reellen Zahlen, $\mathbb{R}$, und dann weiter zu den komplexen Zahlen, $\mathbb{C}$.

Obwohl die rationalen Zahlen dicht liegen, gibt es Zahlen, die keine rationalen Zahlen sind. Diese heißen **irrationale Zahlen** $\overline{\mathbb{Q}} = \{x \mid x \notin \mathbb{Q}\}$. Das Längenverhältnis d/a von Diagonale zu Seite im Quadrat ist solch eine Zahl: $d/a = 2^{1/2} = \sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$ (Anwendung des Satzes des Pythagoras[4] führt zu: $d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$).

[4] Pythagoras von Samos, Πυθαγόρας, 6./5. Jh. v. Chr.

Indirekter Beweis: **(1)** Annahme des Gegenteils: $\sqrt{2} = n/m \in \mathbb{Q}$ (n, m teilerfremd) $\Leftrightarrow$ $n^2 = 2m^2 \Rightarrow$ **(2)** $n = 2k$ (nur das Quadrat einer geraden Zahl ist gerade) $\wedge$ $m = 2l + 1$ (m muß ungerade sein, da n und m teilerfremd sein sollen) $\Rightarrow$ **(3)** $n^2 = 4k^2 = 2m^2 \Leftrightarrow$ $m^2 = 2k^2 \Rightarrow$ **(4)** $m = 2l$, Widerspruch! Die Annahme „$\sqrt{2} \in \mathbb{Q}$" war also falsch! Es gilt also: $\sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$ — q. e. d. ■

Die Vereinigungsmenge der rationalen Zahlen und der irrationalen Zahlen ist die Menge der reellen Zahlen, $\mathbb{R}$. Es gilt daher: $\overline{\mathbb{Q}} = \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$.

3.4 Reelle Zahlen

$\mathbb{R} = \mathbb{Q} \bigcup \overline{\mathbb{Q}} = \{x \mid -\infty < x < \infty\}$ (**das eindimensionale Kontinuum**)

Die Menge der reellen Zahlen, $\mathbb{R}$, ist **überabzählbar unendlich** (d. h. zwischen den natürlichen Zahlen und den reellen Zahlen gibt es keine eineindeutige Zuordnung mehr). Es gilt $\mathbb{N} \subset \mathbb{Z} \subset \mathbb{Q} \subset \mathbb{R}$. Die reellen Zahlen sind **geordnet**.

Teilbereiche der reellen Zahlen lassen sich durch **Intervalle** bezeichnen:

$x \in (a, b) \Leftrightarrow a < x < b$	offenes Intervall
$x \in (a, b] \Leftrightarrow a < x \le b$	linksseitig offenes Intervall
$x \in [a, b) \Leftrightarrow a \le x < b$	rechtsseitig offenes Intervall
$x \in [a, b] \Leftrightarrow a \le x \le b$	geschlossenes Intervall

Eine **strenge Definition** der reellen Zahlen, die wir hier nicht ausführen, gelingt nur mit Hilfe von **Intervallschachtelungen** auf der Grundlage des Postulates[5]: „*Zu jeder (unendlichen) Intervallschachtelung gibt es genau einen Punkt auf der Zahlengeraden, der in allen Intervallen enthalten ist.*"

$$a_0 < a_1 < \ldots < a_n < \ldots < x < \ldots < b_n < \ldots < b_1 < b_0$$

Hierbei ist die Kenntnis des Begriffes „Grenzwert einer monotonen beschränkten Folge" (s. später) erforderlich. Es folgt dann, daß sich jede(!) reelle Zahl x beliebig genau durch rationale Zahlen (z. B. Dezimalbrüche) annähern läßt:

i	a_i	$<$	x	$<$	b_i	a_i	$<$	x	$<$	b_i
0	0	$<$	1/3	$<$	1	1	$<$	$\sqrt{2}$	$<$	2
1	0.3	$<$	1/3	$<$	0.4	1.4	$<$	$\sqrt{2}$	$<$	1.5
2	0.33	$<$	1/3	$<$	0.34	1.41	$<$	$\sqrt{2}$	$<$	1.42
3	0.333	$<$	1/3	$<$	0.334	1.414	$<$	$\sqrt{2}$	$<$	1.415
4	0.3333	$<$	1/3	$<$	0.3334	1.4142	$<$	$\sqrt{2}$	$<$	1.4143
$\vdots$			$\vdots$					$\vdots$		

$$\lim_{i\to\infty} a_i = x\,, \qquad \lim_{i\to\infty} b_i = x$$

Der Grenzwert einer unendlichen Folge rationaler Zahlen kann also auch eine irrationale Zahl sein (rechtes Beispiel), und somit außerhalb der Menge $\mathbb{Q}$ liegen!

[5] R. Courant, H. Robbins: Was ist Mathematik?, Springer, Berlin, 1992, Kap. 2, §2.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Grundrechenoperationen auf der Menge $\mathbb{R}$:
Alle Grundrechenoperationen (Addition, Multiplikation, Subtraktion und Division [nicht durch Null]) sind **ohne** Einschränkungen ausführbar. Die Menge $\mathbb{R}$ ist also diesbezüglich ebenfalls abgeschlossen, wie die Menge $\mathbb{Q}$.

Das Potenzieren gelingt nun auch für rationale Exponenten. Allerdings lassen sich die so definierten **Wurzeln** im allgemeinen nur für nichtnegative reelle Zahlen a berechnen:

$$x^n = a \geq 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad x = a^{1/n} = \sqrt[n]{a} \quad (\text{„}n\text{-te Wurzel von } a\text{“})$$

Spezialfälle sind: $\sqrt[1]{a} = a$, $\sqrt[2]{a} = \sqrt{a}$. Die Rechengesetze für Potenzen (s. o.) gelten jetzt auch für rationale Exponenten, die „Wurzelgesetze“ sind nichts weiter als Potenzgesetze für rationale Exponenten. Auch die Bildung von Potenzen mit beliebigen reellen Exponenten, a^r $(a, r \in \mathbb{R},\ a \geq 0,\ r > 0)$, z. B. $a^{\sqrt{2}}$, ist jetzt möglich. Für negative reelle Zahlen, $a < 0$, sind Potenzen mit rationalen Exponenten jedoch nur in Ausnahmefällen definiert, so ist z. B. $\sqrt{-8} \notin \mathbb{R}$, aber $\sqrt[3]{-8} = -2$.

3.4.1 Die Darstellung reeller Zahlen

Eine reelle Zahl kann auf verschiedene Weise dargestellt werden. Zwischen der Zahl und ihrer Darstellung ist dabei streng zu unterscheiden.

Zur Zahlendarstellung werden heute (fast ausschließlich) **Positions-** oder **Stellenwertsysteme**[6] verwendet. Nach der Wahl einer Basiszahl b $(b \in \mathbb{N},\ b \geq 2)$ stehen dann die Ziffern $\{0, 1, \ldots, b-1\}$ zur Verfügung. Häufiger anzutreffende Fälle sind (mit den jeweils dazu verwendeten Ziffern):

$b = 2$:	Dualsystem	$\{0, 1\}$
$b = 8$:	Oktalsystem	$\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$
$b = 10$:	Dezimalsystem	$\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$
$b = 16$:	Hexadezimalsystem	$\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, \mathrm{A}, \mathrm{B}, \mathrm{C}, \mathrm{D}, \mathrm{E}, \mathrm{F}\}$

Die Zahlendarstellung in einem Stellenwertsystem hat die allgemeine Form

$$x = \pm\, a_0.a_1a_2a_3a_4\ldots_{(b)} \cdot b^n = \pm\, b^n \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, b^{-k}\,,$$

mit den Ziffern a_k und dem Exponenten $n \in \mathbb{Z}$ (dieser legt die Größenordnung der Zahl fest).

[6] Im Verlauf der Geschichte der Menschheit wurden nur viermal Positionssysteme als Zahlschriften entwickelt: In Babylon um 2000 v. Chr. (Basis $b = 60$), in China kurz vor Beginn unserer Zeitrechnung (Basis $b = 10$), bei den Maya um 300 n. Chr. (Basis $b = 20$) und schließlich in Indien um 500 n. Chr. (Basis $b = 10$). Verglichen mit dem indischen System waren alle drei Vorläufersysteme unvollkommen (G. Ifrah: Universalgeschichte der Zahlen, 2. Aufl., Campus, Frankfurt, 1991, S. 534ff).

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Rationale Zahlen ($x \in \mathbb{Q}$) weisen **periodische** Zahlendarstellungen auf, d. h. in der Folge der Ziffern $\{a_k\}$ tritt früher oder später ein sich wiederholendes Muster auf (evtl. auch Null, falls die Stellenwertdarstellung „abbricht"). Die „unendliche Summe" läßt sich in diesen Fällen tatsächlich ausführen, und damit eliminieren. Einige Beispiele, die sich leicht in die obige Form bringen lassen, sind:

$$10_{(2)} = 2_{(10)} = 2_{(16)}\,, \quad 1010_{(2)} = 10_{(10)} = \mathrm{A}_{(16)}$$
$$10000_{(2)} = 16_{(10)} = 10_{(16)}\,, \quad 100111000100000_{(2)} = 20000_{(10)} = 4\mathrm{E}20_{(16)}$$
$$\frac{1}{2} = 0.1_{(2)} = 0.5_{(10)} = 0.8_{(16)}\,, \quad \frac{1}{3} = 0.\overline{01}_{(2)} = 0.\overline{3}_{(10)} = 0.\overline{5}_{(16)}$$
$$\frac{1}{5} = 0.\overline{0011}_{(2)} = 0.2_{(10)} = 0.\overline{3}_{(16)}\,, \quad \frac{1}{24} = 0.000\overline{01}_{(2)} = 0.041\overline{6}_{(10)} = 0.0\overline{\mathrm{A}}_{(16)}$$

Irrationale Zahlen ($x \in \overline{\mathbb{Q}}$) sind dagegen **nicht periodisch**, d. h. es gibt kein sich wiederholendes Muster in der Folge der Ziffern $\{a_k\}$. **Algebraische irrationale Zahlen** lassen sich noch durch Anwendung einer endlichen Zahl von Grundrechenoperationen und Wurzeln exakt berechnen. **Transzendente irrationale Zahlen** erfordern dagegen unendlich viele dieser Rechenoperationen (ihre exakte Berechnung übersteigt [transzendiert] unsere Fähigkeiten). Fast alle Zahlen sind transzendent.

Einige bekanntere reelle Zahlen[7]:

- die Kreiszahl oder Archimedes-Zahl π (nach Archimedes von Syrakus, Ἀρχιμήδης, 3. Jh. v. Chr.; irrational, transzendent)

$$\pi = 4\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} = 3.14159265\ldots$$

- die Euler-Zahl e (nach Leonhard Euler, 1707–1783; irrational, transzendent)

$$\mathrm{e} = \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{1}{n}\right)^n = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!} = 2.718281828\ldots$$

- das Verhältnis des goldenen Schnittes, τ, oder die Quadratwurzel von 2 (beide irrational und algebraisch)

$$\tau = 1 + \frac{1}{\tau} = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = \frac{1}{2} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}(2k-1)!!}{2^{3k}(2k-1)k!} = 1.61803398\ldots$$

$$\sqrt{2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}(2k-1)!!}{2^{k}(2k-1)k!} = 1.41421356\ldots$$

Anmerkung: Das Symbol $n!!$ bezeichnet die Doppelfakultät von n. Dabei gilt $n!! = n \cdot (n-2)!!$, mit $(-1)!! = 0!! = 1$.

[7] Siehe auch: (a) D. Wells: Das Lexikon der Zahlen, Fischer, Frankfurt, 1990; (b) J.-P. Delahaye: Pi — Die Story, Birkhäuser, Basel, 1999; (c) E. Maor: Die Zahl e — Geschichte und Geschichten, Birkhäuser, Basel, 1996.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

- Logarithmen, z. B. der natürliche Logarithmus von 2 (irrational, transzendent)

$$\ln(2) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} = 0.69314718\ldots$$

- die Euler-Mascheroni-Konstante γ (nach Leonhard Euler und Lorenzo Mascheroni [ital. maskero:ni], 1750–1800; irrational?, transzendent?)

$$\gamma = \lim_{n\to\infty}\left(\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k} - \int_1^n \frac{\mathrm{d}x}{x}\right) = \lim_{n\to\infty}\left(\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k} - \ln(n)\right) = 0.57721566\ldots$$

In der Regel ist die Kenntnis einiger führender Ziffern einer Zahlendarstellung völlig ausreichend. Zur Beschränkung der Ziffernzahl in der Stellenwertdarstellung (s. o.) auf N Nachkommastellen, also $\max(k) = N$, dienen im Dezimalsystem die folgenden einfachen **Rundungsregeln**:
– Falls $a_{N+1} \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$, bleibt a_N unverändert („Abrunden“).
– Falls $a_{N+1} \in \{5, 6, 7, 8, 9\}$, wird a_N durch $a_N + 1$ ersetzt („Aufrunden“).

Beispiele: Für den Fall $N = 4$ ergibt sich so

$$\begin{aligned}
\pi &= 3.1415\mathbf{9}265\ldots \approx 3.141\mathbf{6} &&\text{(aufgerundet)}\\
\mathrm{e} &= 2.7182\mathbf{8}182\ldots \approx 2.718\mathbf{3} &&\text{(aufgerundet)}\\
\sqrt{2} &= 1.4142\mathbf{1}356\ldots \approx 1.414\mathbf{2} &&\text{(abgerundet)}\\
\ln(2) &= 0.6931\mathbf{4}718\ldots \approx 0.693\mathbf{1} &&\text{(abgerundet)}
\end{aligned}$$

3.4.2 Absolutbetrag und Ungleichungen

Der **Absolutbetrag** einer reellen Zahl x, $|x|$ („Betrag von x“), gibt den Abstand des Punktes, der diese Zahl auf der Zahlengeraden repräsentiert, vom Nullpunkt (Ursprung, Punkt O) an. Allgemein gilt:

$$|x| = \begin{cases} x & \text{für } x \geq 0 \\ -x & \text{für } x < 0 \end{cases}$$

Es gelten weiter die folgenden allgemeinen Rechenregeln ($x, y \in \mathbb{R}$):

$$\begin{aligned}
|x| &\geq 0 \qquad \text{(Gleichheit nur für } x = 0\text{)}\\
|x| &= \sqrt{x^2} \neq (\sqrt{x})^2\\
|x\,y| &= |x| \cdot |y|
\end{aligned}$$

Aus der letzten Regel, welche die Multiplikation mit dem Bilden des Betrages verbindet, folgt speziell:

$$\begin{aligned}
|-x| &= |(-1)\cdot x| = |x|\\
|x/y| &= |x| \;/\; |y| \qquad (y \neq 0)
\end{aligned}$$

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Dagegen führt der Versuch, die Addition mit dem Bilden des Betrages zu verbinden, nicht auf eine Gleichung, sondern auf eine Ungleichung, die sogenannte **Dreiecksungleichung**:

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

Beweis: Untersuchung der verschiedenen möglichen Fälle, die sich dann zum gesuchten Endergebnis zusammenfassen lassen:

$$\left.\begin{array}{l} \left.\begin{array}{r} x \leq |x| \\ y \leq |y| \end{array}\right\} \Rightarrow \quad x+y \leq |x|+|y| \\[2ex] \left.\begin{array}{r} -x \leq |x| \\ -y \leq |y| \end{array}\right\} \Rightarrow \quad -(x+y) \leq |x|+|y| \end{array}\right\} \Rightarrow \quad |x+y| \leq |x|+|y|$$

Aus der Dreiecksungleichung lassen sich noch einige weitere Beziehungen ableiten, die sich wie folgt zusammenfassen lassen:

$$|x| - |y| \leq |x \pm y| \leq |x| + |y|$$

Verallgemeinerte Dreiecksungleichung (mehr als zwei Summanden):

$$|x_1 + x_2 + \ldots + x_n| = \left|\sum_{i=1}^{n} x_i\right| \leq \sum_{i=1}^{n} |x_i| = |x_1| + |x_2| + \ldots + |x_n|$$

Rechenregeln für Ungleichungen: Es gelten allgemein die folgenden Regeln ($x, y, z \in \mathbb{R}$):

$$x < y \quad \Rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{rcll} x+z & < & y+z & \\ x \cdot z & < & y \cdot z & (\text{für } z > 0) \\ x \cdot z & > & y \cdot z & (\text{für } z < 0) \end{array} \right.$$

Aus den Regeln für die Multiplikation einer Ungleichung mit einem Faktor z ergeben sich insbesondere die folgenden Aussagen:

$$x < y \quad \Rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{rcll} -x & > & -y & (\text{mit } z = -1) \\ 1/x & > & 1/y & (\text{mit } z = 1/(xy) > 0) \\ 1/x & < & 1/y & (\text{mit } z = 1/(xy) < 0) \end{array} \right.$$

3.4.3 Mittelwerte

Aus mehreren positiven reellen Zahlen $x_k > 0$ ($k = 1, \ldots, n$) lassen sich auf verschiedene Weise Mittelwerte berechnen. Häufiger treten auf:

$$m_{\mathrm{A}} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k \qquad \text{(das \textbf{arithmetische} Mittel, der „Mittelwert“)}$$

$$m_{\mathrm{G}} = \left(\prod_{k=1}^{n} x_k\right)^{1/n} \qquad \text{(das \textbf{geometrische} Mittel)}$$

$$m_{\mathrm{H}} = n\left(\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{x_k}\right)^{-1} \qquad \text{(das \textbf{harmonische} Mittel)}$$

$$m_{\mathrm{Q}} = \left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k^2\right)^{1/2} \qquad \text{(das \textbf{quadratische} Mittel)}$$

Für diese Mittelwerte gilt allgemein die folgende Ungleichung:

$$\min(x_1, \ldots, x_n) \leq m_\mathrm{H} \leq m_\mathrm{G} \leq m_\mathrm{A} \leq m_\mathrm{Q} \leq \max(x_1, \ldots, x_n)$$

Speziell für $n = 2$ also:

$$\min(x_1, x_2) \leq \frac{2}{\dfrac{1}{x_1} + \dfrac{1}{x_2}} \leq \sqrt{x_1 x_2} \leq \frac{x_1 + x_2}{2} \leq \sqrt{\frac{x_1^2 + x_2^2}{2}} \leq \max(x_1, x_2)$$

3.5 Komplexe Zahlen

> There are certainly many people who regard $\sqrt{2}$ as something perfectly obvious, but jib at $\sqrt{(-1)}$. This is because they think they can visualize the former as something in physical space, but not the latter. Actually, $\sqrt{(-1)}$ is a much simpler concept. (E. C. Titchmarsh: Mathematics for the General Reader, Dover, New York, 1981, p. 122)

$\mathbb{C} = \left\{ z \mid z = x + \mathrm{i}\, y \,\wedge\, x, y \in \mathbb{R} \,\wedge\, \mathrm{i}^2 = -1 \right\}$

Die Menge der komplexen Zahlen, $\mathbb{C}$, ist **überabzählbar unendlich**. Es gilt $\mathbb{N} \subset \mathbb{Z} \subset \mathbb{Q} \subset \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$. Die komplexen Zahlen lassen sich jedoch nicht mehr eindimensional veranschaulichen, und sind deshalb auch **nicht mehr geordnet**.

Durch Einführung der **imaginären Einheit** $\mathrm{i} = \sqrt{-1} \notin \mathbb{R}$ lassen sich zunächst Quadratwurzeln von negativen reellen Zahlen bilden:

$$x^2 = -a \quad (a \in \mathbb{R},\; a > 0) \qquad \Leftrightarrow \qquad x_{1,2} = \pm\sqrt{-a} = \pm\,\mathrm{i}\,\sqrt{a}$$

Für den Kehrwert der imaginären Einheit erhält man („Nenner reell machen“): $\mathrm{i}^{-1} = 1/\mathrm{i} = \mathrm{i}/\mathrm{i}^2 = -\mathrm{i}$, und damit für ganzzahlige Potenzen von i:

$$\ldots,\; \mathrm{i}^{-3} = \mathrm{i},\; \mathrm{i}^{-2} = -1,\; \mathrm{i}^{-1} = -\mathrm{i},\; \mathrm{i}^0 = 1,\; \mathrm{i}^1 = \mathrm{i},\; \mathrm{i}^2 = -1,\; \mathrm{i}^3 = -\mathrm{i},\; \mathrm{i}^4 = 1,\; \ldots$$

zusammengefaßt also ($n, k \in \mathbb{Z}$):

$$\mathrm{i}^n = \begin{cases} 1 & \text{für } n = 4k \\ \mathrm{i} & \text{für } n = 4k+1 \\ -1 & \text{für } n = 4k+2 \\ -\mathrm{i} & \text{für } n = 4k+3 \end{cases}$$

Der Ausdruck $z = x + \mathrm{i}\, y = x + y\,\mathrm{i}$ heißt **kartesische**[8] **Form** der komplexen Zahl z. Hier ist $x = \mathrm{Re}(z)$ der **Realteil** von z, und $y = \mathrm{Im}(z)$ der **Imaginärteil** von z.

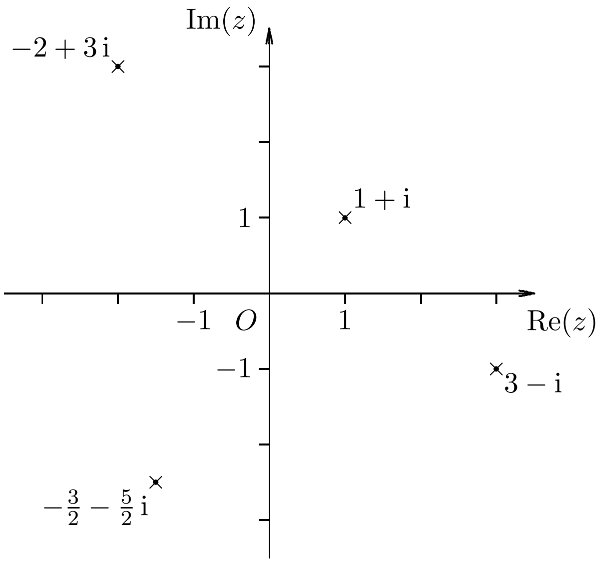
Wichtige Teilmengen von $\mathbb{C}$ sind die **reellen Zahlen** $\mathbb{R}$ ($y = 0$: $z = x$) und die **imaginären Zahlen** ($x = 0$: $z = \mathrm{i}\, y$).

Da sich bereits die reellen Zahlen eineindeutig den Punkten der Zahlengeraden (eindimensionales Kontinuum) zuordnen lassen, ist es fast natürlich, daß sich die

[8] Nach René Descartes [frz. deˈkart], latin. Renatus Cartesius, 1596–1650.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

komplexen Zahlen eineindeutig den Punkten einer Ebene (zweidimensionales Kontinuum) zuordnen lassen. Diese Ebene heißt **Ebene der komplexen Zahlen**, komplexe Zahlenebene, **gaußsche Zahlenebene**, oder Argand-Ebene (nach Jean Robert Argand [frz. arˈgã], 1768–1822):



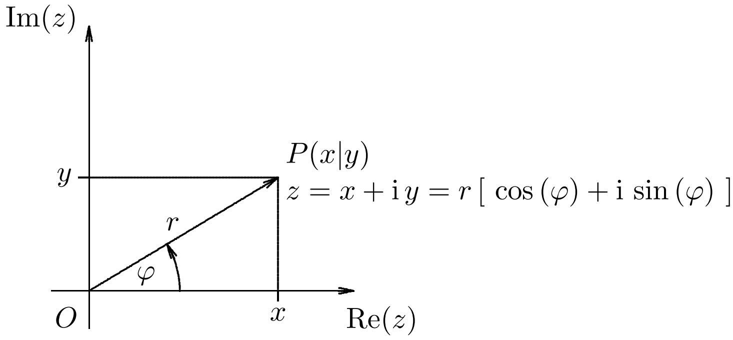
Eine komplexe Zahl $z = x + \mathrm{i}\,y$ läßt sich also verstehen als **Summe einer reellen und einer imaginären Zahl**, oder auch als **geordnetes Paar reeller Zahlen**, $z = (x, y)$ (als Paar kartesischer Koordinaten). Ihr läßt sich statt des Punktes $P(x|y)$ der komplexen Zahlenebene auch der Ortsvektor (Zeiger) $\overrightarrow{OP}$ zuordnen. Neben kartesischen Koordinaten (x, y) werden auch zweidimensionale Polarkoordinaten (r, φ) zur eindeutigen Kennzeichnung eines Punktes P in einer Ebene verwendet. Die beiden Koordinaten sind der Radius r (Abstand des Punktes P von einem Ursprung O) und der in Bogenmaß[9] gemessene Winkel φ zwischen einer Bezugsrichtung (üblicherweise die Richtung der positiven x-Achse) und dem Ortsvektor $\overrightarrow{OP}$ (in mathematisch positivem Sinn, d. h. gegen den Uhrzeigersinn, genommen). Zur Umrechnung zwischen kartesischen Koordinaten und zweidimensionalen Polarkoordinaten dienen die aus der Trigonometrie und der Kreisberechnung bekannten Beziehungen:

$$x = r\,\cos(\varphi)\,, \qquad y = r\,\sin(\varphi)$$
$$r = +\sqrt{x^2 + y^2} \geq 0\,, \qquad \tan(\varphi) = \frac{y}{x}$$

Bei der Bestimmung des Winkels φ aus den kartesischen Koordinaten sind deren Vorzeichen zu beachten. Für die Wahl $0 \leq \varphi < 2\pi$ gilt:

[9] Das Bogenmaß ist dimensionslos, als SI-Einheit wird Radiant verwendet ($1\,\mathrm{rad} = 1\,\mathrm{m/m}$). Das Bogenmaß ist definiert als das Verhältnis b/r der Länge b des Bogens, den die Schenkel des Winkels aus dem Kreisumfang U trennen, zum Kreisradius r. Ist $\varphi_\mathrm{R} = b/r$ der Winkel in Radiant und φ_G derselbe Winkel in Grad, so dient die Beziehung $b/U = \varphi_\mathrm{R}/(2\pi) = \varphi_\mathrm{G}/360°$ zur Umrechnung.

$x > 0,\ y \geq 0$ (Positive x-Achse und I. Quadrant):	$0 \leq \varphi < \pi/2$
$x = 0,\ y > 0$ (positive y-Achse):	$\varphi = \pi/2$
$x < 0,\ y \geq 0$ (II. Quadrant und negative x-Achse):	$\pi/2 < \varphi \leq \pi$
$x < 0,\ y < 0$ (III. Quadrant):	$\pi < \varphi < 3\pi/2$
$x = 0,\ y < 0$ (negative y-Achse):	$\varphi = 3\pi/2$
$x > 0,\ y < 0$ (IV. Quadrant):	$3\pi/2 < \varphi < 2\pi$



Die Übertragung dieser Zusammenhänge auf die komplexen Zahlen führt zur **trigonometrischen Form** einer komplexen Zahlen z:

$$\begin{aligned} z &= x + \mathrm{i}\, y = r\cos(\varphi) + \mathrm{i}\, r \sin(\varphi) \\ &= r\, [\, \cos(\varphi + k \cdot 2\pi) + \mathrm{i}\, \sin(\varphi + k \cdot 2\pi)\,] \qquad (k \in \mathbb{Z}) \end{aligned}$$

Der Radius r heißt in diesem Zusammenhang **Betrag** (oder **Modul**) von z: $|z| = r \geq 0$. Der Winkel φ wird auch als **Argument** (oder **Phase**) von z bezeichnet: $\arg(z) = \varphi$. Er ist offenbar gar nicht eindeutig bestimmt (wegen der Periodizität der Winkelfunktionen). Eine komplexe Zahl z bleibt also unverändert, wenn beliebige ganzzahlige Vielfache von 2π zum Winkel φ addiert werden. Für den Ortsvektors $\overrightarrow{OP}$ bedeutet dies eine beliebige Zahl ganzer Drehungen (im oder gegen den Uhrzeigersinn) in der komplexen Zahlenebene.

Zu jeder komplexen Zahl z gehört eine **konjugiert komplexe Zahl** z^* (alternative Notation: $\overline{z}$). Diese entsteht aus z dadurch, daß jedes i in z durch ein $-$i ersetzt wird. Allgemein gelten die folgenden Beziehungen:

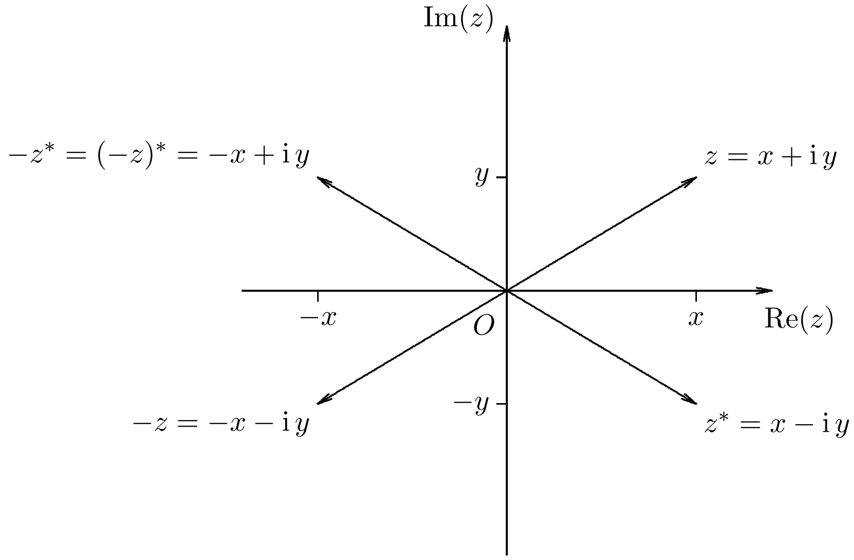
$$\begin{aligned} z^* &= x - \mathrm{i}\, y = x + \mathrm{i}\,(-y) \\ &= r\, [\, \cos(\varphi) - \mathrm{i}\, \sin(\varphi)\,] = r\, [\, \cos(-\varphi) + \mathrm{i}\, \sin(-\varphi)\,] \end{aligned}$$

Weiter gilt allgemein:

$$\begin{aligned} (z^*)^* &= (x - \mathrm{i}\, y)^* = x + \mathrm{i}\, y = z \\ |z^*| &= |-z^*| = |-z| = |z| = r \end{aligned}$$

Grundrechenoperationen auf der Menge $\mathbb{C}$:
Alle Grundrechenoperationen (Addition, Multiplikation, Subtraktion und Division [nicht durch Null]) sind **ohne** Einschränkungen ausführbar. Die Menge $\mathbb{C}$ ist also diesbezüglich ebenfalls abgeschlossen, wie die Menge $\mathbb{R}$.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)



Grundrechenregeln für komplexe Zahlen, formuliert mit komplexen Zahlen in kartesischer oder trigonometrischer Form, $z = x + \mathrm{i}\,y = r\,[\,\cos(\varphi) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi)\,]$, und als geordneten Paaren reeller Zahlen, $z = (x, y)$:

1. Gleichheit komplexer Zahlen:

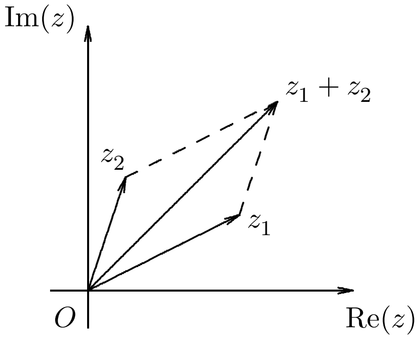
$$\begin{aligned} z_1 = z_2 \quad &\Leftrightarrow \quad (\ \mathrm{Re}(z_1) = \mathrm{Re}(z_2)\ \wedge\ \mathrm{Im}(z_1) = \mathrm{Im}(z_2)\ ) \\ z_1 = z_2 \quad &\Leftrightarrow \quad (\ r_1 = r_2\ \wedge\ \varphi_2 - \varphi_1 = 2k\pi\,,\ k \in \mathbb{Z}\ ) \\ (x_1, y_1) = (x_2, y_2) \quad &\Leftrightarrow \quad (\ x_1 = x_2\ \wedge\ y_1 = y_2\ ) \end{aligned}$$

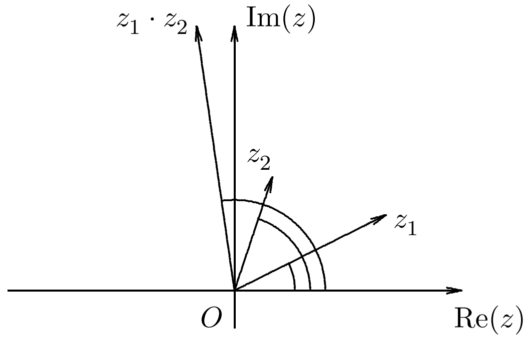
   Speziell: $z = 0 \Leftrightarrow (\ x = 0\ \wedge\ y = 0\ )$; $z = z^* \Leftrightarrow y = 0 \Rightarrow z \in \mathbb{R}$.

2. Summation komplexer Zahlen:

$$\begin{aligned} z_1 \pm z_2 &= (x_1 + \mathrm{i}\,y_1) \pm (x_2 + \mathrm{i}\,y_2) = (x_1 \pm x_2) + \mathrm{i}\,(y_1 \pm y_2) \\ z_1 \pm z_2 &= (x_1, y_1) \pm (x_2, y_2) = (x_1 \pm x_2, y_1 \pm y_2) \end{aligned}$$

   Speziell: $z + z^* = 2\,\mathrm{Re}(z) = 2x$, $z - z^* = 2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}(z) = \mathrm{i}\,2y$.
   Zwei komplexe Zahlen werden addiert (subtrahiert), indem man jeweils ihre Realteile und ihre Imaginärteile addiert (subtrahiert), wie bei der Vektoraddition in zwei Dimensionen, aber komplexe Zahlen sind keine Vektoren! Die trigonometrische Form bietet bei der Addition oder Subtraktion keinerlei Vorteile.





© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

3. Multiplikation komplexer Zahlen[10]:

$$\begin{aligned}
z_1 \cdot z_2 &= (x_1 + \mathrm{i}\,y_1)(x_2 + \mathrm{i}\,y_2) = x_1 x_2 + \mathrm{i}\,x_1 y_2 + \mathrm{i}\,y_1 x_2 + \mathrm{i}^2\,y_1 y_2 \\
&= (x_1 x_2 - y_1 y_2) + \mathrm{i}\,(x_1 y_2 + y_1 x_2) \\
z_1 \cdot z_2 &= r_1\,[\,\cos(\varphi_1) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_1)\,]\;r_2\,[\,\cos(\varphi_2) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_2)\,] \\
&= r_1 r_2\,[\,(\cos\varphi_1\cos\varphi_2 - \sin\varphi_1\sin\varphi_2) + \mathrm{i}\,(\cos\varphi_1\sin\varphi_2 + \sin\varphi_1\cos\varphi_2)\,] \\
&= r_1 r_2\,[\,\cos(\varphi_1 + \varphi_2) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_1 + \varphi_2)\,] \\
z_1 \cdot z_2 &= (x_1, y_1) \cdot (x_2, y_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2, x_1 y_2 + y_1 x_2)
\end{aligned}$$

Speziell: $z \cdot z^* = x^2 + y^2 = r^2 = |z|^2$ ist stets reell! $\Rightarrow |z| = \sqrt{z \cdot z^*} \neq \sqrt{z^2}$.

4. Division komplexer Zahlen[10] ($z_2 \neq 0$):

$$\begin{aligned}
\frac{z_1}{z_2} &= \frac{z_1 \cdot z_2^*}{z_2 \cdot z_2^*} = \frac{(x_1 + \mathrm{i}\,y_1)(x_2 - \mathrm{i}\,y_2)}{(x_2 + \mathrm{i}\,y_2)(x_2 - \mathrm{i}\,y_2)} \\
&= \frac{x_1 x_2 + y_1 y_2}{x_2^2 + y_2^2} + \mathrm{i}\left(-\frac{x_1 y_2 - y_1 x_2}{x_2^2 + y_2^2}\right) \\
\frac{z_1}{z_2} &= \frac{r_1\,[\,\cos(\varphi_1) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_1)\,]}{r_2\,[\,\cos(\varphi_2) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_2)\,]} \\
&= \frac{r_1}{r_2}\,[\,\cos(\varphi_1) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_1)\,]\,[\,\cos(\varphi_2) - \mathrm{i}\,\sin(\varphi_2)\,] \\
&= \frac{r_1}{r_2}\,[\,(\cos\varphi_1\cos\varphi_2 + \sin\varphi_1\sin\varphi_2) + \mathrm{i}\,(-\cos\varphi_1\sin\varphi_2 + \sin\varphi_1\cos\varphi_2)\,] \\
&= \frac{r_1}{r_2}\,[\,\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_1 - \varphi_2)\,] \\
\frac{z_1}{z_2} &= \frac{(x_1, y_1)}{(x_2, y_2)} = \left(\frac{x_1 x_2 + y_1 y_2}{x_2^2 + y_2^2}, -\frac{x_1 y_2 - y_1 x_2}{x_2^2 + y_2^2}\right)
\end{aligned}$$

Speziell: $\dfrac{1}{z} = \dfrac{z^*}{z \cdot z^*} = \dfrac{x}{x^2 + y^2} - \mathrm{i}\,\dfrac{y}{x^2 + y^2} = \dfrac{1}{r}\,[\,\cos(\varphi) - \mathrm{i}\,\sin(\varphi)\,]$ (Kehrwert von z).

Die trigonometrische Form zeigt, daß zwei komplexe Zahlen multipliziert (dividiert) werden, indem man ihre Beträge multipliziert (dividiert) und ihre Phasen addiert (subtrahiert). Multiplikation und Division lassen sich daher (je nach den auftretenden Beträgen und Phasen) als Drehstreckung, Drehstauchung oder einfach nur Drehung in der komplexen Zahlenebene veranschaulichen. Werden mehrere komplexe Zahlen, $z_k = r_k\,[\,\cos(\varphi_k) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi_k)\,]$ $(k = 1, \ldots, n)$ und $w_l = s_l\,[\,\cos(\psi_l) + \mathrm{i}\,\sin(\psi_l)\,]$ $(l = 1, \ldots, m)$, durch Multiplikation bzw. Division verknüpft, so gilt demnach:

$$\frac{\prod_{k=1}^{n} z_k}{\prod_{l=1}^{m} w_l} = \frac{\prod_{k=1}^{n} r_k}{\prod_{l=1}^{m} s_l}\left[\cos\left(\sum_{k=1}^{n}\varphi_k - \sum_{l=1}^{m}\psi_l\right) + \mathrm{i}\,\sin\left(\sum_{k=1}^{n}\varphi_k - \sum_{l=1}^{m}\psi_l\right)\right]$$

[10] Hier verwenden wir die Additionstheoreme der Winkelfunktionen:
$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin\alpha\cos\beta \pm \cos\alpha\sin\beta$; $\cos(\alpha \pm \beta) = \cos\alpha\cos\beta \mp \sin\alpha\sin\beta$.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Daraus folgt **speziell** für beliebige ganzzahlige Potenzen einer komplexen Zahl z der verallgemeinerte „*Satz von Moivre*“ (1707, nach Abraham de Moivre [frz. mwaːvr], 1667–1754):

$$z^n = \Big(r\,[\,\cos(\varphi) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi)\,]\Big)^n = r^n\,[\,\cos(n\varphi) + \mathrm{i}\,\sin(n\varphi)\,] \qquad (n \in \mathbb{Z})$$

Das bemerkenswerte Verhalten der Phasen komplexer Zahlen bei Multiplikation und Division erinnert an die Potenzrechengesetze, die ebenfalls Multiplikation (Division) [von Faktoren] auf Addition (Subtraktion) [der Exponenten] zurückführen. Aus dieser Beobachtung schloß Leonhard Euler auf die Beziehung:

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = \cos(\varphi) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi)$$

Diese **eulersche Beziehung**[11] (1748) führt auf die **Exponentialform** der komplexen Zahlen:

$$z = x + \mathrm{i}\,y = r\,[\,\cos(\varphi + 2k\pi) + \mathrm{i}\,\sin(\varphi + 2k\pi)\,] = r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+2k\pi)} \qquad (k \in \mathbb{Z})$$

Die Unbestimmtheit des Winkels φ muß auch für die Exponentialform gelten. Multiplikation, Division und das Bilden ganzzahliger Potenzen lassen sich nun noch kürzer schreiben:

$$\begin{aligned} z_1 \cdot z_2 &= r_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1} \cdot r_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2} = r_1 r_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(\varphi_1+\varphi_2)} \\ \frac{z_1}{z_2} &= \frac{r_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}}{r_2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2}} = \frac{r_1}{r_2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(\varphi_1-\varphi_2)} \\ z^n &= \left(r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\right)^n = r^n\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\varphi} \qquad\qquad (n \in \mathbb{Z}) \end{aligned}$$

Die Grundrechenoperationen sind mit dem Bilden der konjugiert komplexen Zahl vertauschbar, z. B.

$$\begin{aligned} z_1^* + z_2^* &= (x_1 - \mathrm{i}\,y_1) + (x_2 - \mathrm{i}\,y_2) \\ &= (x_1 + x_2) - \mathrm{i}\,(y_1 + y_2) \\ &= (z_1 + z_2)^* \\ z_1^* \cdot z_2^* &= (x_1 - \mathrm{i}\,y_1)(x_2 - \mathrm{i}\,y_2) = x_1 x_2 - \mathrm{i}\,x_1 y_2 - \mathrm{i}\,y_1 x_2 + \mathrm{i}^2\,y_1 y_2 \\ &= (x_1 x_2 - y_1 y_2) - \mathrm{i}\,(x_1 y_2 + y_1 x_2) \\ &= (z_1 \cdot z_2)^* \end{aligned}$$

Für das Rechnen mit Beträgen gilt, wie in der Menge $\mathbb{R}$, $|z_1 \cdot z_2| = |z_1| \cdot |z_2|$, und $|z_1 + z_2| \le |z_1| + |z_2|$ (**Dreiecksungleichung**).

Beweise:
(1) $|z_1 \cdot z_2| = \sqrt{(z_1 z_2) \cdot (z_1 z_2)^*} = \sqrt{z_1 z_1^* z_2 z_2^*} = \sqrt{z_1 z_1^*} \cdot \sqrt{z_2 z_2^*} = |z_1| \cdot |z_2|$ — q. e. d. ■
(2) $|z_1 + z_2|^2 = (z_1 + z_2)(z_1 + z_2)^* = z_1 z_1^* + z_1 z_2^* + (z_1 z_2^*)^* + z_2 z_2^* = |z_1|^2 + 2\,\mathrm{Re}(z_1 z_2^*) + |z_2|^2 = |z_1|^2 + 2\,|z_1|\,|z_2|\,\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + |z_2|^2 \le |z_1|^2 + 2\,|z_1|\,|z_2| + |z_2|^2 = (|z_1| + |z_2|)^2 \Rightarrow |z_1 + z_2| \le |z_1| + |z_2|$ — q. e. d. ■

[11] ‘the most remarkable formula in mathematics’ (R. P. Feynman: The Feynman Lectures on Physics, Volume I, Chapter 22, Addison-Wesley, Reading, MA, 1963, p. 22-10).

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Anmerkungen:
(1) Zu jeder(!) quadratischen Gleichung $ax^2 + bx + c = 0$ $(a \neq 0)$ lassen sich jetzt, mit Kenntnis von $\mathbb{C}$, immer zwei Lösungen x_1 und x_2 finden, denn aus $0 = ax^2 + bx + c = a(x^2 + px + q) = a(x - x_1)(x - x_2)$ $(p = b/a,\ q = c/a)$ folgt wegen $x_1 + x_2 = -p$ und $x_1 x_2 = q$ („*Satz von Vieta*"[12]) zunächst $(x_1 - x_2)^2 = (x_1 + x_2)^2 - 4\,x_1 x_2 = p^2 - 4\,q = D$ (Diskriminante), und damit $x_{1,2} = \frac{1}{2}\,(-p \pm \sqrt{D})$. Hieran ändert sich nichts, wenn statt x (reell?) überall z (komplex!) geschrieben wird. Auch die Koeffizienten a, b, c dürften sogar komplex sein. Sind a, b, c reell, so ist auch D reell. Dann ergeben sich für $D > 0$ zwei verschiedene reelle Lösungen $(x_1, x_2 \in \mathbb{R},\ x_1 \neq x_2)$, für $D = 0$ ergibt sich eine reelle Doppellösung $(x_1 = x_2 \in \mathbb{R})$, und für $D < 0$ ein Paar konjugiert komplexer Lösungen $(x_1, x_2 \in \mathbb{C},\ x_1 = x_2{}^*)$.
(2) Komplexe Zahlen treten z. B. als Funktionswerte quantenmechanischer Zustandsfunktionen auf. Für die Zustandsfunktionen $|\,\psi_i\,\rangle$ zu gebundenen stationären Zuständen des Ein-Elektronen-Atoms mit Kernladungszahl Z (H, He^+, Li^{2+}, ..., U^{91+}, ...; nichtrelativistisch) gilt (in ortsabhängiger, statt impulsabhängiger, Darstellung):

$$|\,\psi_i\,\rangle \to \psi_i(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\,\Theta_{lm}(\vartheta)\,\Phi_m(\varphi) \left\{ \begin{array}{c} \alpha \\ \beta \end{array} \right. , \quad \text{mit} \;\; \Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$$

Der Problemstellung entsprechend wurden hier dreidimensionale Polarkoordinaten (Kugelkoordinaten: Radius r, Poldistanzwinkel ϑ, Azimutwinkel φ) verwendet. Jede Zustandsfunktion läßt sich dann als Produkt von Radialteil, Winkelteilen und Spinteil schreiben. Der Index i steht für den Quantenzahlensatz (n, l, m, m_s), der den Zustand vollständig charakterisiert. Ist die quantenmechanische Zustandsfunktion zu einem stationären Zustand eines Systems (Atom, Molekül, Kristall) bekannt, dann lassen sich sämtliche physikalischen Eigenschaften dieses Zustands (z. B. Energie, Dipolmoment) berechnen.

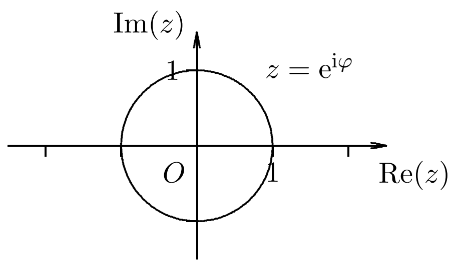
3.5.1 Spezielle komplexe Zahlen

Komplexe Zahlen vom Modul Eins sind die Zahlen:

$$z = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \qquad (r = 1)$$

Sie liegen in der komplexen Zahlenebene auf dem **Einheitskreis**.
Einige spezielle Werte[13]:

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}0} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2k\pi} &= \;\; 1 \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/2} &= \;\; \mathrm{i} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi} &= -1 \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}3\pi/2} &= -\mathrm{i} \end{aligned}$$



Die Multiplikation einer komplexen Zahl $z_1 = r_1\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}$ mit einer Zahl vom Modul Eins, $z_2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2}$, bedeutet eine Drehung von z_1 um den Winkel φ_2. Insbesondere

[12] Nach François Viète [frz. vjɛt], latin. Franciscus Vieta, 1540–1603.
[13] Die Beziehung $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi} + 1 = 0$ bzw. $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi} = -1$ (spöttisch: „Wenn man sich umdreht, schaut man in die andere Richtung.") zeigt einen bemerkenswerten Zusammenhang zwischen den Zahlen Eins, e, π und der imaginären Einheit. Diese Beziehung wurde einmal zum „allerschönsten mathematischen Theorem" gewählt (D. Wells, *Mathematical Intelligencer*, **12** (3) (1990) 37).

bedeutet eine Multiplikation mit der imaginären Einheit i eine Drehung um $\pi/2$ gegen den Uhrzeigersinn.

Einheitswurzeln: Die Lösungen der Gleichung

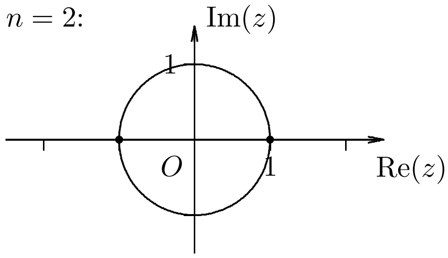
$$z^n = 1 \qquad (n \in \mathbb{N},\ n \geq 2)$$

heißen n-te Einheitswurzeln:

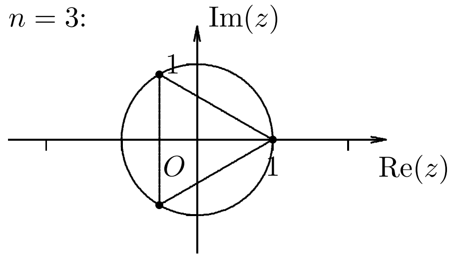
$$z_{k+1} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2k\pi/n} = \cos\left(\frac{2k\pi}{n}\right) + \mathrm{i}\,\sin\left(\frac{2k\pi}{n}\right) \qquad (k = 0, \ldots, n-1)$$

Die n-ten Einheitswurzeln für $n > 2$ bilden in der komplexen Zahlenebene die Eckpunkte eines regelmäßigen n-Ecks mit einer Ecke bei $z = 1$:

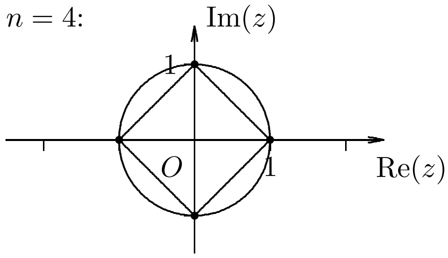
$n = 2$:



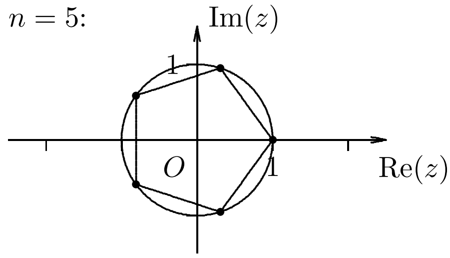
$n = 3$:



$n = 4$:



$n = 5$:



Für gerades n ($n = 2l$) gibt es zwei reelle Lösungen ($z_1 = 1$, $z_{\frac{n}{2}+1} = -1$) und $\frac{n}{2} - 1$ Paare konjugiert komplexer Lösungen. Für ungerades n ($n = 2l + 1$) gibt es nur eine reelle Lösung ($z_1 = 1$), und $\frac{n-1}{2}$ Paare konjugiert komplexer Lösungen. Die Berechnung von n-ten Wurzeln beliebiger komplexer Zahlen w erfolgt ganz analog. Die Gleichung

$$z^n = w = r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi_0 + 2k\pi)}$$

hat stets genau n Lösungen ($k = 0, \ldots, n-1$):

$$z_{k+1} = \sqrt[n]{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi_0 + 2k\pi)/n} = \sqrt[n]{r}\left[\cos\left(\frac{\varphi_0 + 2k\pi}{n}\right) + \mathrm{i}\,\sin\left(\frac{\varphi_0 + 2k\pi}{n}\right)\right]$$

Die Lösung $z_1 = \sqrt[n]{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_0/n}$ ($k = 0$) heißt **Hauptwert** der n-ten Wurzel von w.

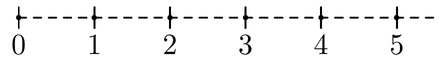
3.5.2 Die Zahlenmengen im Überblick

Mit der Einführung der komplexen Zahlen ℂ ist in mehrfacher Hinsicht eine sinnvolle Erweiterung (wenn nicht sogar ein sinnvoller Abschluß) der zuvor behandelten Zahlenmengen erreicht.

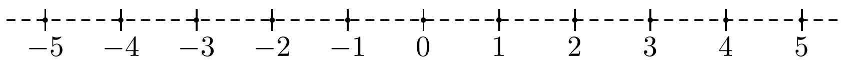
© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Geometrische Darstellung der Zahlenmengen

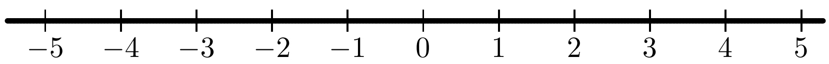
$\mathbb{N}$ – äquidistante Punkte auf dem Zahlen**strahl**



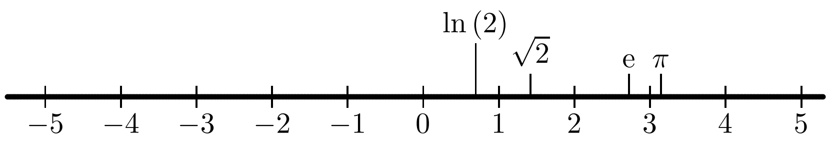
$\mathbb{Z}$ – äquidistante Punkte auf der Zahlen**geraden**



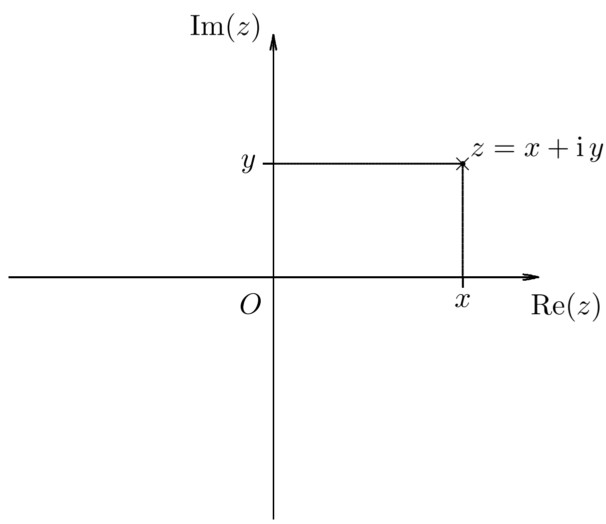
$\mathbb{Q}$ – dicht liegende Punkte auf der Zahlengeraden (nur **scheinbar** vollständig)



$\mathbb{R}$ – **alle** Punkte der Zahlengeraden (**eindimensionales Kontinuum**)



$\mathbb{C}$ – die **gaußsche Zahlenebene** (**zweidimensionales Kontinuum**)



Ausführbarkeit von Rechenoperationen

Operation[a]	$\mathbb{N}$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Q}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{C}$
Addition	✓	✓	✓	✓	✓
Subtraktion	(✓)	✓	✓	✓	✓
Multiplikation	✓	✓	✓	✓	✓
Division	(✓)	(✓)	✓	✓	✓
Potenzieren	✓	(✓)	(✓)	(✓)	✓

[a] Frei ausführbar: ✓; nur eingeschränkt ausführbar: (✓)

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Lösbarkeit algebraischer Gleichungen

Gleichung[a]	$\mathbb{N}$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Q}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{C}$	Lösung(en)
$x-1=0$	✓	✓	✓	✓	✓	$x=1$
$x+1=0$	–	✓	✓	✓	✓	$x=\,-1$
$3x-1=0$	–	–	✓	✓	✓	$x=1/3$
$x^2-1=0$	–	–	–	✓	✓	$x_{1,2}=\,\pm 1$
$x^2+1=0$	–	–	–	–	✓	$x_{1,2}=\,\pm\,\mathrm{i}$

[a] Lösbar: ✓; nicht lösbar: –

3.6 Gruppe und Körper

Ein Rückblick auf die Zahlenmengen gibt auch Gelegenheit, zwei wichtige algebraische Strukturen vorzustellen: die **Gruppe** und den **Körper**.

Anmerkung: Die Bedeutung von Begriffen wie „Gruppe“ oder „Körper“ in der Mathematik ist vergleichbar der Bedeutung von Begriffen wie „Element“, „Metall“ oder „Enzym“ in der Chemie.

3.6.1 Gruppe

Aus einer nichtleeren Menge M und einer Verknüpfung (binären Operation) $\circ$ entsteht eine **Gruppe** $G = (M, \circ)$, wenn die folgenden Kriterien (Gruppenaxiome) erfüllt sind:

(G1) **Abgeschlossenheit**: Für alle $a, b \in M$ gilt $a \circ b = c$ mit $c \in M$.
(G2) Gültigkeit des **Assoziativgesetzes**: Für alle $a, b, c \in M$ gilt $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$.
(G3) Existenz eines **neutralen Elements** (Singular!): Es gibt genau ein $e \in M$, so daß $a \circ e = e \circ a = a$ für alle $a \in M$ gilt.
(G4) Existenz **inverser Elemente** (Plural!): Für jedes $a \in M$ existiert ein $a^{-1} \in M$, so daß $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$ gilt.

Im allgemeinen ist $a \circ b \neq b \circ a$! Bei zusätzlicher(!)

(G5) Gültigkeit des **Kommutativgesetzes**: Für alle $a, b \in M$ gilt $a \circ b = b \circ a$;

heißt G eine **kommutative oder abelsche Gruppe** (nach Niels Henrik Abel [norweg. ˈaːbəl], 1802–1829).

Anmerkungen:
(1) Ist die Gültigkeit der Gruppenaxiome nachgewiesen, so wird zwischen der Menge M und der Gruppe G oft nicht mehr unterschieden.
(2) Die Verknüpfung wird selten als allgemeine Operation ($\circ$) geschrieben, sondern entweder als Addition ($\circ \mathrel{\widehat{=}} +$) oder als Multiplikation ($\circ \mathrel{\widehat{=}} \cdot$). Schreibt man die Gruppenaxiome additiv (Verknüpfung als Summe: $a + b = c$), so gilt $e = 0$ („Null“) und $a^{-1} = -a$. Die multiplikative Schreibweise (Verknüpfung als Produkt: $a \cdot b = c$, oder kurz $a\,b = c$; dies ist die bei weitem häufigste Schreibweise) führt auf $e = 1$ („Eins“) und $a^{-1} = 1/a$.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Ordnung einer Gruppe G: Die Mächtigkeit der Menge M, die die Gruppe $G = (M, \circ)$ bildet. Notation: $|G|$ oder g. Ist $|G|$ endlich, so heißt G eine **endliche Gruppe**, andernfalls eine **unendliche Gruppe**.

Ordnung (oder Periode) des Elementes a **einer Gruppe** G: Kleinste positive natürliche Zahl n, für welche $a^n = e$ gilt.

Untergruppe H **einer Gruppe** G: Ist eine Teilmenge T von M ($T \subset M$) bezüglich der Verknüpfung $\circ$ bereits selbst ein Gruppe, so heißt $H = (T, \circ)$ eine Untergruppe der Gruppe $G = (M, \circ)$, und man schreibt $H \subset G$.

Anmerkungen:
(1) Jede Gruppe $G = (M, \circ)$ enthält $(\{e\}, \circ)$ und sich selbst als triviale Untergruppen.
(2) Die Ordnung der Untergruppe H einer Gruppe G ist Teiler der Ordnung von G: $|G| = k \cdot |H|$, $k \in \mathbb{N}$ („*Satz von Lagrange*“[14]).

Erzeugende Elemente (Generator-Elemente) der Gruppe G: Eine Menge von Gruppenelementen, aus welchen sich sämtliche Elemente der Gruppe erzeugen lassen.

Isomorphie: Zwei Gruppen $G = (\{e, g_2, \ldots, g_l\}, \circ)$ und $H = (\{n, h_2, \ldots, h_l\}, *)$ heißen isomorph (symbolisch: $G \cong H$), wenn eine eineindeutige Abbildung f zwischen den Elementen von G und den Elementen von H existiert, so daß die Bedeutung der jeweiligen Verknüpfungen unter der Abbildung f erhalten bleibt:

$$f\colon\; g_i \in G,\, g_i \to f(g_i) = h_i \in H \Rightarrow f(g_i \circ g_j) = f(g_i) * f(g_j) = h_i * h_j$$

Isomorphe Gruppen sind also im wesentlichen verschiedene Realisierungen derselben abstrakten Gruppe (und daher „von gleicher Gestalt“).

Beispiele:
(1) $(\mathbb{Z}, +)$ ist eine abelsche Gruppe von abzählbar unendlicher Ordnung. Neutrales Element ist die 0, die Elemente 1 und -1 sind erzeugende Elemente.
(2) $Z_n = (\{a, a^2, \ldots, a^{n-1}, a^n = e\}, \circ)$ ist für jedes natürliche $n > 1$ eine abelsche Gruppe. Sie heißt **zyklische Gruppe** der Ordnung n. Das Element a ist erzeugendes Element. Die Gruppe der Drehungen in der Ebene um Vielfache des Winkels $\varphi = 2\pi/n$ (Verknüpfung: Nacheinanderausführung von Drehungen) und die Gruppe der n-ten komplexen Einheitswurzeln (Verknüpfung: Multiplikation) sind isomorph zu Z_n.
(3) Die Menge aller Permutationen (Umordnungen) von n Objekten ($n > 1$) bildet bzgl. Nacheinanderausführung die **symmetrische Gruppe** (oder vollständige Permutationsgruppe) vom Grad n, S_n, mit Ordnung $n!$. Neutrales Element ist die Identität, die keine Umordnung der Objekte vornimmt. Nur S_2 ist abelsch.
(4) Die Menge aller Symmetrie-Operationen $\widehat{R}_i$, die sich an einem Objekt ausführen lassen, bildet bzgl. Nacheinanderausführung die Symmetriegruppe des Objekts. Abhängig von der Art des Objekts, kann die Ordnung der Symmetriegruppe endlich (nicht-lineares Molekül), abzählbar unendlich (Kristallgitter), oder sogar überabzählbar unendlich (Atom, lineares Molekül) sein. Neutrales Element ist stets die Identität, die das Objekt unverändert läßt. Symmetriegruppen sind im allgemeinen nicht-abelsch.

Anmerkung: Jede endliche Gruppe der Ordnung g ist isomorph zu einer Untergruppe der symmetrischen Gruppe S_g („*Satz von Cayley*“[15]). Daher hat die Theorie der Permu-

[14] Nach Joseph Louis de Lagrange [frz. laˈgrɑ̃ːʒ], 1736–1813.
[15] Nach Arthur Cayley [engl. ˈkɛɪlɪ], 1821–1895.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

tationsgruppen sehr große Bedeutung innerhalb der Gruppentheorie.

Gruppentafel, Cayley-Tafel oder Multiplikationstafel: Quadratische Tafel, die sämtliche Verknüpfungen der Elemente einer Gruppe G angibt. Sind $a_i, a_j \in G$, so findet sich die Verknüpfung $a_i \circ a_j$ in Zeile i und Spalte j. Jedes Element der Gruppe tritt genau einmal in jeder Reihe (Zeile, Spalte) auf. Nur abelsche Gruppen haben eine zur Hauptdiagonale symmetrische Gruppentafel. Die Gruppentafeln isomorpher Gruppen lassen sich durch geeignete Umbenennung (der Elemente und der Verknüpfung) ineinander überführen.

Beispiele:
Gruppentafeln für alle endlichen Gruppen mit niedriger Ordnung g $(1 \leq g \leq 6)$:
Die endlichen Gruppen mit den niedrigsten Ordnungen sind zyklisch. Die kleinste nicht-zyklische Gruppe ist die Kleinsche Vierergruppe[16] V $(g = 4)$. Die kleinste nicht-abelsche Gruppe ist die symmetrische Gruppe S_3 $(g = 6)$.

Z_1	e
e	e

Z_2	e	a
e	e	a
a	a	e

$Z_2 \cong S_2$

Z_3	e	a	a^2
e	e	a	a^2
a	a	a^2	e
a^2	a^2	e	a

Z_4	e	a	a^2	a^3
e	e	a	a^2	a^3
a	a	a^2	a^3	e
a^2	a^2	a^3	e	a
a^3	a^3	e	a	a^2

V	e	a	b	c
e	e	a	b	c
a	a	e	c	b
b	b	c	e	a
c	c	b	a	e

Z_5	e	a	a^2	a^3	a^4
e	e	a	a^2	a^3	a^4
a	a	a^2	a^3	a^4	e
a^2	a^2	a^3	a^4	e	a
a^3	a^3	a^4	e	a	a^2
a^4	a^4	e	a	a^2	a^3

Z_6	e	a	a^2	a^3	a^4	a^5
e	e	a	a^2	a^3	a^4	a^5
a	a	a^2	a^3	a^4	a^5	e
a^2	a^2	a^3	a^4	a^5	e	a
a^3	a^3	a^4	a^5	e	a	a^2
a^4	a^4	a^5	e	a	a^2	a^3
a^5	a^5	e	a	a^2	a^3	a^4

S_3	e	a	a^2	b	ba	ba^2
e	e	a	a^2	b	ba	ba^2
a	a	a^2	e	ba^2	b	ba
a^2	a^2	e	a	ba	ba^2	a
b	b	ba	ba^2	e	a	a^2
ba	ba	ba^2	b	a^2	e	a
ba^2	ba^2	b	ba	a	a^2	e

Anmerkung: Sogenannte *einfache* endliche Gruppen sind für die Theorie der endlichen Gruppen ähnlich wichtig wie die Primzahlen (diese könnten „einfache Zahlen“ genannt werden) für die natürlichen Zahlen. Zyklische Gruppen von Primzahlordnung, Z_p (p prim), gehören zu den einfachen endlichen Gruppen. Nach über fünfzig Jahren Arbeit wurde im Jahr 1982 der Beweis des „*Klassifikationssatzes*“ für abgeschlossen erklärt. Dieser Satz gibt eine vollständige Klassifizierung der einfachen endlichen Gruppen an[17].

3.6.2 Körper

Der Begriff des Körpers ist später für die Definition des Vektorraumes notwendig. Aus einer Menge M und zwei Verknüpfungen (binären Operationen) $\circ$ und $*$

[16] Nach Felix Klein, 1849–1925.
[17] D. Gorenstein: Die Klassifikation der endlichen einfachen Gruppen, *Spektrum der Wissenschaft*, Feb. 1986, 98.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

entsteht ein **Körper** $K = (M, \circ, *)$, wenn folgende drei Kriterien erfüllt sind:

(K1) $(M, \circ)$ ist eine **abelsche Gruppe** (neutrales Element n [„Null“]).
(K2) $(M \setminus \{n\}, *)$ ist eine **abelsche Gruppe** (neutrales Element e [„Eins“]).
(K3) Gültigkeit des **Distributivgesetzes**: $a * (b \circ c) = (a * b) \circ (a * c)$.

Beispiele: $(\mathbb{Q}, +, \cdot)$, $(\mathbb{R}, +, \cdot)$, $(\mathbb{C}, +, \cdot)$ sind Körper.

3.6.3 Exkurs: Symmetriegruppen (Punktgruppen, Raumgruppen)

Symmetrie[18] (griech. ἡ συμμετρία, dt. Ebenmaß): Objekte unserer Anschauung oder unseres Denkens, die Symmetrie besitzen, lassen sich in eine Lage bringen, die von der Ausgangslage nicht unterscheidbar ist. Dies geschieht durch Ausführung geeigneter **Symmetrie-Operationen**. Falls es sich bei diesen Objekten um reale physikalische Objekte handelt (z. B. Moleküle, Kristalle), können die Symmetrie-Operationen auch als Deckoperationen bezeichnet werden.

Symmetrie-Operationen: Für die Untersuchung der Symmetrie physikalischer Objekte sind folgende Symmetrie-Operationen von Bedeutung (Schönflies-Symbole[19] $\widehat{R}$ für Symmetrie-Operationen ohne Verschiebung, Seitz-Symbole[20] $\{\widehat{R}\,|\,\mathbf{t}\}$ für Symmetrie-Operationen mit Verschiebung um $\mathbf{t}$):
- Eigentliche Drehungen (Rotationen) $\widehat{C}_n$ (tatsächlich ausführbar; Drehwinkel $\varphi = 2\pi/n$).
- Uneigentliche Drehungen (Drehspiegelungen) $\widehat{S}_n = \widehat{C}_n\,\widehat{\sigma} = \widehat{\sigma}\,\widehat{C}_n$ ($C_n \perp \sigma$) (nicht tatsächlich ausführbar; Spiegelung $\widehat{\sigma}$ und Inversion $\widehat{i}$ sind als Spezialfälle für $n = 1$ und $n = 2$ enthalten).
- Verschiebungen (Translationen) $\{\widehat{E}\,|\,\mathbf{t}\}$.
- Schraubungen $\{\widehat{C}_n\,|\,\mathbf{t}\}$.
- Gleitspiegelungen $\{\widehat{\sigma}\,|\,\mathbf{t}\}$.

Symmetriegruppe: Menge von Symmetrie-Operationen, die bezüglich der Nacheinanderausführung eine Gruppe bilden. Die Reihenfolge der Ausführung von Symmetrie-Operationen ist in der Regel sehr wichtig, d. h. Symmetriegruppen sind im allgemeinen nicht-abelsch. Symmetriegruppen ohne Verschiebungen heißen **Punktgruppen**, solche mit Verschiebungen heißen **Raumgruppen**. In Punktgruppen bleibt bei der Ausführung von Symmetrie-Operationen mindestens ein Punkt raumfest.

Symmetrie-Elemente: Geometrische Objekte (Punkte, Geraden, Ebenen), die den Symmetrie-Operationen zugeordnet werden können. In einfachen Fällen ist nur ein einziges geometrisches Objekt zuzuordnen (Drehachse C_n, Spiegelebene σ, Inversionszentrum i), es können aber auch mehrere geometrische Objekte gemeinsam zugeordnet werden (Drehspiegelachsen S_n, oder Drehinversionsachsen).

[18] Siehe auch: (a) H. Weyl: Symmetrie, Birkhäuser, Stuttgart, 1955; (b) I. Hargittai, M. Hargittai: Symmetry through the Eyes of a Chemist, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1986; (c) I. Hargittai, M. Hargittai: Symmetrie, Rowohlt, Reinbek, 1998.
[19] Nach Arthur Schönflies, 1853–1928.
[20] Nach Frederick Seitz, * 1911.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Übersicht über Punktgruppen (Arten von Punktgruppen, wichtigste Eigenschaften von Punktgruppen) sowie **Bestimmung der Punktgruppe eines Objekts** aus den vorhandenen Symmetrie-Elementen[21].

[21] Siehe hierzu: (a) Material aus 'Foundations and Applications of Quantum Chemistry, Part 3', `http://www.uni-bielefeld.de/chemie/tc/Andrae/index.html`; (b) J. A. Salthouse, M. J. Ware: Point group character tables and related data, Cambridge University Press, Cambridge, 1972.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Kombinatorik

4 Elemente der Kombinatorik

Die Kombinatorik untersucht unter anderem die verschiedenen möglichen Anordnungen von Objekten (Elementen). Die Bestimmung der Anzahl möglicher Anordnungen sowie das systematische und effiziente Erzeugen dieser Anordnungen sind häufige Aufgabenstellungen. Die auftretenden Zahlen können rasch sehr groß werden.

Beispiele:
(1) Der „Zauberwürfel" (Rubik's Cube, 1974 von Ernő Rubik erfunden) hat

$$N = \tfrac{1}{12} \cdot 8! \cdot 3^8 \cdot 12! \cdot 2^{12} = 43.252.003.274.489.856.000$$

durch Drehungen ineinander überführbare Zustände. Diese bilden eine Gruppe.
(2) Die Gesamtzahl zulässiger 9×9-Sudokus[1] ist, ohne Berücksichtigung der Symmetrien:

$$N_1 = 9! \cdot 72^2 \cdot 2^7 \cdot 27.704.267.971 = 6.670.903.752.021.072.936.960$$

Diese Zahl reduziert sich bei Berücksichtigung der Symmetrien auf

$$N_2 = 2 \cdot 11^2 \cdot 23 \cdot 983.243 = 5.472.730.538$$

Im folgenden wird es hauptsächlich um die Bestimmung der gesuchten Anzahl von Anordnungen gehen. Dabei sind die folgenden zwei Fragen wichtig:

- Ist die **Reihenfolge** der Objekte (Elemente) in den Anordnungen zu beachten oder nicht?
  Wenn die Reihenfolge wesentlich ist, dann ergibt eine Vertauschung von Objekten (Elementen) eine neue Anordnung. Ist die Reihenfolge dagegen unwesentlich ist, dann führt eine Vertauschung nicht zu einer neuen Anordnung.
- Tritt eine **Wiederholung** von Objekten (Elementen) auf oder nicht? Sind alle Objekte (Elemente) verschieden, oder sind welche dabei, die nicht voneinander unterscheidbar sind?
  Bei Anordnungen mit Wiederholung tritt mindestens ein Objekt (Element) mehr als einmal auf, bei Anordnungen ohne Wiederholung kommt jedes Objekt (Element) dagegen höchstens einmal vor.

4.1 Fakultät und Gammafunktion

Für jede natürliche Zahl $n > 0$ kann die **Fakultät von** n, $n!$ („n Fakultät"), rekursiv berechnen werden:

$$0! = 1\,, \qquad n! = n \cdot (n-1)! \qquad (n \in \mathbb{N},\, n > 0)$$

[1] J.-P. Delahaye: Sudoku oder die einsamen Zahlen, *Spektrum der Wissenschaft*, März 2006, 100.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Stirling-Formeln (nach James Stirling, 1692–1770):

$$\left.\begin{aligned} n! &\approx \left(\frac{n}{\mathrm{e}}\right)^n \sqrt{2\pi\, n} \\ \log_b(n!) &\approx (n+\tfrac{1}{2})\log_b(n) - n\log_b(\mathrm{e}) + \tfrac{1}{2}\log_b(2\pi) \end{aligned}\right\} \qquad (n \to \infty)$$

Der Ursprung dieser Näherungsformeln ist die **Gammafunktion** $\Gamma(x)$ (zweites Eulersches Integral), welche die Fakultät für beliebiges reelles Argument verallgemeinert, und zwar als $x! = \Gamma(x+1)$. Eine für positives reelles Argument x gültige Definition ist:

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1}\mathrm{e}^{-t}\,\mathrm{d}t \qquad (x > 0)$$

Dies ist ein bestimmtes Integral, dessen Integrand vom Parameter x abhängt. Einige wichtige Eigenschaften und Funktionswerte der Gammafunktion:

$$\begin{aligned} \Gamma(x+1) &= x\,\Gamma(x) \qquad (x \in \mathbb{R}) \\ \Gamma(n+1) &= \int_0^\infty t^n \mathrm{e}^{-t}\,\mathrm{d}t = n! \qquad (n > -1) \\ \Gamma(2) &= \Gamma(1) = 1 \\ \Gamma(\tfrac{3}{2}) &= \tfrac{1}{2}\,\Gamma(\tfrac{1}{2}) = \tfrac{1}{2}\sqrt{\pi} \\ \Gamma(-\tfrac{1}{2}) &= -2\sqrt{\pi} \end{aligned}$$

4.2 Permutationen, Variationen und Kombinationen

4.2.1 Permutationen

Als **Permutationen** von n Elementen werden einerseits die Anordnungen aller n Elemente in jeder möglichen Reihenfolge bezeichnet, andererseits aber auch die Operationen des Umordnens der n Elemente, die also von einer Anordnung zu einer nächsten führen.

Bei Permutationen ist die **Reihenfolge** der Objekte (Elemente) in den Anordnungen **wesentlich**!

Permutationen ohne Wiederholung:
Die anzuordnenden n Elemente sind alle **verschieden**. Die Anzahl P_n der Permutationen von n verschiedenen Elementen ist

$$P_n = n \cdot P_{n-1} = n!$$

Beispiel: Permutationen von n verschiedenen Buchstaben (in lexikographischer Reihenfolge): $n = 2$: ab, ba $\to P_2 = 2! = 2$; $n = 3$: abc, acb, bac, bca, cab, cba $\to P_3 = 3! = 6$.

Anmerkung: Die Permutationen von n Elementen bilden zusammen eine Gruppe, die **symmetrische Gruppe** vom Grad n, S_n (Gruppenordnung: $g = n!$).

Permutationen mit Wiederholung:
Unter den n Elementen sind manche **gleich** (ununterscheidbar), so daß l Gruppen

mit jeweils k_i gleichen Elementen auftreten ($1 \leq i \leq l$, $0 \leq k_i \leq n$)[2]. Die Anzahl $P_n^{(k_1,\ldots,k_l)}$ der möglichen Permutationen ist jetzt

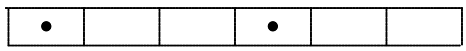
$$P_n^{(k_1,\ldots,k_l)} = \frac{P_n}{P_{k_1} \cdot P_{k_2} \cdot \ldots \cdot P_{k_l}} = \frac{n!}{k_1! \cdot k_2! \cdot \ldots \cdot k_l!} \qquad \left(0 \leq k_i \leq n\,,\ \sum_{i=1}^{l} k_i = n \right)$$

denn die Anzahl der Permutationen aller Elemente, P_n, ist jeweils durch die Anzahl der Permutationen innerhalb der einzelnen Gruppen gleicher Elemente, P_{k_i}, zu teilen. Für den Fall $l = 2$ ist eine spezielle Schreibweise üblich:

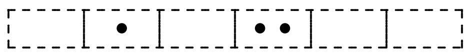
$$P_n^{(k,n-k)} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k}\,,$$

und dies wird **Binomialkoeffizient** „n über k" genannt (mehr dazu s. u.).

Beispiele:
(1) Permutationen von 3 Buchstaben, unter denen 2 gleich sind ($n = 3$, $l = 2$, $k_1 = 2$, $k_2 = 1$): aac, aca, caa (lexikographische Reihenfolge) $\rightarrow P_3^{(2,1)} = 3!/(2! \cdot 1!) = \binom{3}{2} = 3$.
(2) Die Anzahl der Anordnungsmöglichkeiten von k Kugeln in n Schachteln unter der Nebenbedingung, daß jede Schachtel höchstens eine Kugel enthalten darf, ist $P_n^{(k,n-k)} = \binom{n}{k}$, denn es gibt unter den n Schachteln genau zwei Gruppen gleicher Elemente: k Schachteln mit einer Kugel, und $n - k$ leere Schachteln. Für den Fall $n = 6$, $k = 2$ zeigt das folgende Bild eine von $\binom{6}{2} = 15$ Anordnungsmöglichkeiten:



Dasselbe kombinatorische Problem stellt sich beim Aufbau gültiger Zustandsfunktionen für ein System aus **Fermionen**[3] (Teilchen mit halbzahligem Spin, z. B. Elektronen, Protonen, Neutronen [alle mit Spinquantenzahl[4] $s = \frac{1}{2}$]). Der Grundzustand des Kohlenstoff-Atoms ($Z = 6$) gehört zur Elektronenkonfiguration $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$. Hier sind also neben den Spinorbitalen $1s\alpha$, $1s\beta$, $2s\alpha$ und $2s\beta$ auch noch zwei Spinorbitale für die 2p-Schale zu wählen. Dafür gibt es $\binom{6}{2} = 15$ Möglichkeiten [die Elektronenkonfiguration nl^q bietet $\binom{4l+2}{q}$ Möglichkeiten zur Auswahl von q Spinorbitalen für die nl-Schale]. Daraus lassen sich drei LS-Zustände ^{2S+1}L bilden (s. Lehrbücher der Atomspektroskopie): ^{1}S ($L = 0$, $S = 0$), ^{3}P ($L = 1$, $S = 1$) und ^{1}D ($L = 2$, $S = 0$). Von diesen ist der ^{3}P-Zustand der Grundzustand (Hundsche Regeln[5], 1925).
(3) Die Anzahl der Anordnungsmöglichkeiten von k Kugeln in n Schachteln unter der Nebenbedingung, daß jede Schachtel beliebig viele Kugeln enthalten darf, ist $P_{n+k-1}^{(k,n-1)} = \binom{n+k-1}{k}$. Wieder gibt es zwei Gruppen gleicher Elemente, k Kugeln und $n-1$ Trennwände, zusammen $n+k-1$ Elemente. Für den Fall $n = 6$, $k = 3$ zeigt das folgende Bild eine von $\binom{8}{3} = 56$ Anordnungsmöglichkeiten:



Dasselbe kombinatorische Problem stellt sich beim Aufbau gültiger Zustandsfunktionen für ein System aus **Bosonen**[6] (Teilchen mit ganzzahligem Spin, z. B. Photonen [$s = 1$],

[2] Einschluß der Möglichkeit $k_i = 0$ scheint unsinnig, denn damit ist die Anzahl l von Gruppen gleicher Elemente unbestimmt. Im folgenden wird sich zeigen, daß diese Wahl sinnvoll ist.
[3] Nach Enrico Fermi, 1901–1954, Nobelpreis für Physik 1938.
[4] Quantenzahlen für einzelne Teilchen werden mit Kleinbuchstaben, für Mehrteilchensysteme mit Großbuchstaben bezeichnet.
[5] Nach Friedrich Hund, 1896–1997.
[6] Nach Satyendra Nath Bose, 1894–1974.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

α-Teilchen [^{4}He-Kerne, $S = 0$], ^{4}He-Atome [$S = 0$], Cooper-Paare[7] [Elektronenpaare im supraleitenden Zustand, $S = 0$]).

4.2.2 Variationen

Auch bei Variationen ist die **Reihenfolge** der Objekte (Elemente) in den Anordnungen **wesentlich**!

Variationen ohne Wiederholung:
Von n verschiedenen Elementen werden k Elemente ausgewählt, wobei $0 \leq k \leq n$ gilt[8]. Die Anzahl $V_{n,k}$ der Möglichkeiten bei dieser Auswahl ist

$$V_{n,k} = \frac{P_n}{P_{n-k}} = \frac{n!}{(n-k)!} = k!\binom{n}{k} \qquad (0 \leq k \leq n)$$

Beispiel: Variationen von 3 Buchstaben zur 2-ten Klasse ohne Wiederholung ($n = 3$, $k = 2$): ab, ac, ba, bc, ca, cb (lexikographische Reihenfolge) $\rightarrow V_{3,2} = 3!/1! = 6$.

Variationen mit Wiederholung:
Aus einer unendlichen Menge von n verschiedenen Elementen werden k Elemente ausgewählt[9]. Die Anzahl $\overline{V}_{n,k}$ der Möglichkeiten bei dieser Auswahl ist

$$\overline{V}_{n,k} = n^k$$

Beispiele:
(1) Variationen von 3 Buchstaben zur 2-ten Klasse mit Wiederholung ($n = 3$, $k = 2$): aa, ab, ac, ba, bb, bc, ca, cb, cc (lexikographische Reihenfolge) $\rightarrow \overline{V}_{3,2} = 3^2 = 9$.
(2) Anzahl möglicher Bitsequenzen ($n = 2$) in einem Byte ($k = 8$): $\overline{V}_{2,8} = 2^8 = 256$.
(3) Anzahl möglicher Basentripletts ($n = 4$ Basen, $k = 3$) im **genetischen Code**: $\overline{V}_{4,3} = 4^3 = 64$. Mit diesem Code wird die Sequenz der $N = 20$ Aminosäuren bei der Proteinbiosynthese (Translation) aus der Sequenz der Nukleinbasen festgelegt. Der genetische Code muß Redundanzen aufweisen, weil $N < \overline{V}_{4,3}$ ist (und tut dies auch).
(4) Anzahl möglicher Aminosäuresequenzen der Länge l, die sich aus den proteinogenen L-α-Aminosäuren ($n = 20$) bilden lassen: $\overline{V}_{20,l} = 20^l$.
(5) Anzahl stereoisomerer Aldosen der Form CH_2OH–$(C^*HOH)_k$–CHO ($n = 2$ mögliche Konfigurationen an jedem optisch aktiven Kohlenstoffatom C^*): $\overline{V}_{2,k} = 2^k$. Daraus lassen sich 2^{k-1} Enantiomerenpaare bilden. Das Enantiomerenpaar D-Glucose/L-Glucose findet sich unter den Aldohexosen ($k = 4$).

4.2.3 Kombinationen

Bei Kombinationen ist die **Reihenfolge** der Objekte (Elemente) in den Anordnungen **unwesentlich**!

Kombinationen ohne Wiederholung:
Diese entstehen aus den Variationen ohne Wiederholung dadurch, daß auf die

[7] Nach Leon Neil Cooper, * 1930, Nobelpreis für Physik 1972.
[8] Es entstehen so „Variationen von n Elementen zur k-ten Klasse ohne Wiederholung“.
[9] Es entstehen so „Variationen von n Elementen zur k-ten Klasse mit Wiederholung“.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Reihenfolge der ausgewählten k Elemente nicht mehr geachtet wird[10]. Ihre Anzahl $C_{n,k}$ ergibt sich daher als

$$C_{n,k} = \frac{V_{n,k}}{P_k} = P_n^{(k,n-k)} = \frac{P_n}{P_k \cdot P_{n-k}} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \binom{n}{k} \qquad (0 \leq k \leq n)$$

Beispiele:
(1) Kombinationen von 3 Buchstaben zur 2-ten Klasse ohne Wiederholung ($n = 3$, $k = 2$): ab, ac, bc (lexikographische Reihenfolge) $\rightarrow C_{3,2} = \binom{3}{2} = 3$.
(2) Für ein System von k **Fermionen** (Teilchen mit halbzahligem Spin) ist die Anzahl der Möglichkeiten zur Auswahl von k Spinorbitalen aus einem Satz von n entarteten Spinorbitalen $C_{n,k} = \binom{n}{k}$ (s. auch oben: Permutationen mit Wiederholung).

Kombinationen mit Wiederholung:
Bei diesen dürfen nun unter den k ausgewählten Elementen gleiche (ununterscheidbare) Elemente auftreten[11]. Ihre Anzahl $\overline{C}_{n,k}$ ergibt sich zu

$$\overline{C}_{n,k} = \binom{n+k-1}{k} = C_{n+k-1,k} = P_{n+k-1}^{(k,n-1)}$$

Beispiele:
(1) Kombinationen von 3 Buchstaben zur 2-ten Klasse mit Wiederholung ($n = 3$, $k = 2$): aa, ab, ac, bb, bc, cc (lexikographische Reihenfolge) $\rightarrow \overline{C}_{3,2} = \binom{4}{2} = 6$.
(2) Für ein System von k **Bosonen** (Teilchen mit ganzzahligem Spin) ist die Anzahl der Möglichkeiten zur Auswahl von k Spinorbitalen aus einem Satz von n entarteten Spinorbitalen $\overline{C}_{n,k} = \binom{n+k-1}{k}$ (s. auch oben: Permutationen mit Wiederholung).

4.3 Binomial- und Multinomialtheoreme

Diese Theoreme erklären die Bildung von Potenzen von Summen ($n \in \mathbb{N}$):

(Monome: a^n) — Binome: $(a+b)^n$ — Trinome: $(a+b+c)^n$ — ...

Das **Binomialtheorem** gibt an, wie sich die n-te Potenz eines Binoms $a + b$ als Summe von (Produkten von) Potenzen von a und b berechnen läßt:

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^{n} C_{n,k}\, a^{n-k} b^k \qquad (n \in \mathbb{N})$$

Der **Binomialkoeffizient** $C_{n,k}$ gibt an, wie oft dabei das Produkt $a^{n-k}b^k$ auftritt:

$$C_{n,k} = \binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \frac{n \cdot (n-1) \cdot \ldots \cdot (n-k+1)}{1 \cdot 2 \cdot \ldots \cdot k} = \prod_{j=1}^{k} \frac{n-j+1}{j}$$

Zwei wichtige Beziehungen sind:

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}, \qquad \binom{n}{k-1} + \binom{n}{k} = \binom{n+1}{k}$$

[10] Es entstehen so „Kombinationen von n Elementen zur k-ten Klasse ohne Wiederholung“.
[11] Es entstehen so „Kombinationen von n Elementen zur k-ten Klasse mit Wiederholung“.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Der Aufbau des **Pascalschen Dreiecks**[12] folgt aus der zweiten Beziehung, seine Symmetrie aus der ersten:

$$\begin{array}{lccccccccc}
n=0: & & & & & 1 & & & & \\
n=1: & & & & 1 & & 1 & & & \\
n=2: & & & 1 & & 2 & & 1 & & \\
n=3: & & 1 & & 3 & & 3 & & 1 & \\
n=4: & 1 & & 4 & & 6 & & 4 & & 1 \\
\vdots & & & & & \vdots & & & &
\end{array}$$

Beweis des Binomialtheorems durch vollständige Induktion:

1. Induktionsanfang: Für kleine Werte von n $(0 \leq n \leq 3)$ läßt sich die Richtigkeit des Binomialtheorems durch Ausmultiplizieren und Vergleich der Koeffizienten mit jenen im Pascalschen Dreieck leicht überprüfen:

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

2. Induktionsschritt:
(a) Induktionsannahme: Für ein gewisses n sei das Binomialtheorem wahr, also:

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

(b) Induktionsbehauptung: Für dieses n gilt dann auch:

$$(a+b)^{n+1} = \sum_{k=0}^{n+1} \binom{n+1}{k} a^{n+1-k} b^k$$

(c) Induktionsschluß:

$$\begin{aligned}
(a+b)^{n+1} &= (a+b)(a+b)^n = (a+b)\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}a^{n-k}b^k \\
&= a\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}a^{n-k}b^k + b\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}a^{n-k}b^k = \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}a^{n-k+1}b^k + \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}a^{n-k}b^{k+1} \\
&= a^{n+1} + \sum_{k=1}^{n}\binom{n}{k}a^{n-k+1}b^k + \sum_{k=0}^{n-1}\binom{n}{k}a^{n-k}b^{k+1} + b^{n+1} \\
&= a^{n+1} + \sum_{k=1}^{n}\binom{n}{k}a^{n+1-k}b^k + \sum_{l=1}^{n}\binom{n}{l-1}a^{n-l+1}b^l + b^{n+1} \\
&= a^{n+1} + \sum_{k=1}^{n}\left[\binom{n}{k} + \binom{n}{k-1}\right]a^{n+1-k}b^k + b^{n+1} \\
&= a^{n+1} + \sum_{k=1}^{n}\binom{n+1}{k}a^{n+1-k}b^k + b^{n+1} = \sum_{k=0}^{n+1}\binom{n+1}{k}a^{n+1-k}b^k
\end{aligned}$$

[12] Nach Blaise Pascal, 1623–1662; in China bereits im 13./14. Jh. bekannt.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

Damit ist das Binomialtheorem für alle $n \in \mathbb{N}$ bewiesen — q. e. d. ∎

Die **Bernoullische Ungleichung**[13]

$$(1+x)^n \geq 1 + nx \qquad (n \in \mathbb{N},\, x > -1)$$

ist oft zur Abschätzung von Potenzen nützlich.

Beweis durch vollständige Induktion:

1. Induktionsanfang: Für kleine Werte von n ($0 \leq n \leq 2$) läßt sich die Gültigkeit der Bernoullischen Ungleichung leicht zeigen:

$$\begin{aligned}(1+x)^0 &= 1 \geq 1 \quad \checkmark\\ (1+x)^1 &= 1+x \geq 1+x \quad \checkmark\\ (1+x)^2 &= 1+2x+x^2 \geq 1+2x \quad \checkmark\end{aligned}$$

2. Induktionsschritt:
(a) Induktionsannahme: Für ein gewisses n sei die Bernoullische Ungleichung wahr, also:

$$(1+x)^n \geq 1+nx$$

(b) Induktionsbehauptung: Für dieses n gilt dann auch:

$$(1+x)^{n+1} \geq 1+(n+1)x$$

(c) Induktionsschluß: Multiplikation der Bernoullischen Ungleichung mit $1+x$ (hier muß $1+x>0$, oder $x>-1$, gelten) liefert:

$$(1+x)^{n+1} = (1+x)(1+x)^n \geq (1+x)(1+nx) = 1+(n+1)x+nx^2 \geq 1+(n+1)x$$

Damit ist die Bernoullische Ungleichung für $x > -1$ und alle $n \in \mathbb{N}$ bewiesen — q. e. d. ∎

Das **Multinomialtheorem** ist:

$$\begin{aligned}(a_1+a_2+\ldots+a_l)^n = \left(\sum_{i=1}^{l} a_i\right)^n &= \sum_{k_1+k_2+\ldots+k_l=n} P_n^{(k_1,k_2,\ldots,k_l)} a_1^{k_1} a_2^{k_2} \ldots a_l^{k_l}\\ &= \sum_{k_1+k_2+\ldots+k_l=n} \frac{n!}{k_1!\cdot k_2!\cdot\ldots\cdot k_l!}\, a_1^{k_1} a_2^{k_2} \ldots a_l^{k_l}\end{aligned}$$

Der Koeffizient $P_n^{(k_1,k_2,\ldots,k_l)}$ heißt auch **Multinomialkoeffizient**. Die Summation erfolgt dabei über alle Werte der Exponenten k_i, die der Bedingung $\sum_{i=1}^{l} k_i = k_1+k_2+\ldots+k_l = n$ genügen. Die Anzahl $N(n,l)$ der so entstehenden Summanden ist im allgemeinen (d. h. wenn sich in der Summe keine Terme zusammenfassen lassen) gleich der Anzahl der Partitionen von n in l Teile, und diese ist $N(n,l) = \overline{C}_{l,n} = \binom{n+l-1}{n}$. Das Binomialtheorem ist hier als Spezialfall für $l=2$ enthalten.

Beispiele:
(1) In der **Massenspektrometrie** werden aus Atomen oder Molekülen (mit Masse m) Ionen erzeugt und dann nach ihrer spezifischen Ladung q/m analysiert. Die Positionen und (relativen) Intensitäten der Signale im Massenspektrum eines Ions lassen sich mit Hilfe des

[13] Nach Jakob I. Bernoulli [bɛrnʊli], 1655–1705.

Multinomialtheorems aus den Häufigkeiten $p_{Z,A}$ der im Ion enthaltenen Isotope (Kernladungszahl Z, Massenzahl A) berechnen. Zur massenspektrometrischen Analyse von Chlorkohlenwasserstoffen $C_nH_mCl_k$ sind die Häufigkeiten[14] der Isotope von Wasserstoff, Kohlenstoff und Chlor erforderlich, zur Untersuchung von Stickstoff-Sauerstoff-Verbindungen NO_x jene für Stickstoff und Sauerstoff (s. Tabelle).

	$^{1}_{1}$H	$^{2}_{1}$H	$^{12}_{6}$C	$^{13}_{6}$C	$^{14}_{7}$N	$^{15}_{7}$N
$p_{Z,A}$	0.999885	0.000115	0.9893	0.0107	0.99632	0.00368

	$^{16}_{8}$O	$^{17}_{8}$O	$^{18}_{8}$O	$^{35}_{17}$Cl	$^{37}_{17}$Cl
$p_{Z,A}$	0.99757	0.00038	0.00205	0.7578	0.2422

Die relativen Häufigkeiten der Isotopomeren von CH_2Cl_2 (und damit ihre relativen Intensitäten im Massenspektrum) ergeben sich nun durch Ausmultiplizieren von

$$1 = (\ p_{1,1} + p_{1,2}\ )^2(\ p_{6,12} + p_{6,13}\ )(\ p_{17,35} + p_{17,37}\ )^2\ .$$

Dabei entstehen $3 \cdot 2 \cdot 3 = 18$ Summanden im Massenzahlenbereich $84 \leq \sum A \leq 91$. Für NO_2 ergibt sich die gewünschte Information aus

$$1 = (\ p_{7,14} + p_{7,15}\ )(\ p_{8,16} + p_{8,17} + p_{8,18}\ )^2\ .$$

Hier entstehen $2 \cdot 6 = 12$ Summanden im Massenzahlenbereich $46 \leq \sum A \leq 51$. Das tatsächlich zu beobachtende Massenspektrum eines Ions ist allerdings auch noch von Geräteparametern des Massenspektrometers, wie der relativen Auflösung $\Delta m/m$, abhängig.

(2) Der Ausdruck

$$(1+x)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} x^k$$

kann als **erzeugende Funktion (Generatorfunktion)** der Binomialkoeffizienten verstanden werden. Eine erzeugende Funktion liefert alle interessierenden Koeffizienten, von denen jeder einzelne eine Antwort auf eine gestellte Frage liefert (hier die Binomialkoeffizienten auf ein gestelltes Abzählproblem), auf einmal. Diese Sicht des Sachverhaltes erweist sich als außerordentlich fruchtbar. So eignet sich der Ausdruck

$$(1 + x + \ldots + x^{2I})^n = \left(\sum_{i=0}^{2I} x^i \right)^n = \sum_{k=0}^{2nI} a_k x^k$$

zur Abzählung primitiver Spinfunktionen für n Atomkerne mit Kernspin(quantenzahl) I: Der Koeffizient a_k gibt die Anzahl primitiver Spinfunktionen mit $M_S = nI - k$ an. Diese Information ist unter anderem für die **NMR-Spektroskopie** sehr nützlich[15]. Der Fall mit n Protonen ($I = \frac{1}{2}$) führt auf das Binomialtheorem zurück, für $n = 2$ also $(1 + x)^2 = 1 + 2x + x^2$. Die hierzu gehörenden primitiven Spinfunktionen sind $\alpha\alpha$ ($M_S = 1$, $a_0 = 1$), $\alpha\beta$ und $\beta\alpha$ ($M_S = 0$, $a_1 = 2$), sowie $\beta\beta$ ($M_S = -1$, $a_2 = 1$). Aus diesen lassen sich dann eine Singulett-Funktion, $(\alpha\beta - \beta\alpha)/\sqrt{2}$ ($S = 0$, $M_S = 0$), und drei Triplett-Funktionen, $\alpha\alpha$, $(\alpha\beta + \beta\alpha)/\sqrt{2}$, $\beta\beta$ ($S = 1$, $M_S = -1, 0, 1$), bilden. Für Deuteronen ($I = 1$) sind Potenzen des Trinoms $1 + x + x^2$ zu bilden, für $n = 2$ also $(1 + x + x^2)^2 = 1 + 2x + 3x^2 + 2x^3 + x^4$, und es gibt hier z. B. $a_2 = 3$ primitive Spinfunktionen zu $M_S = 0$. Das **systematische Abzählen von Isomeren** ist ein weiteres

[14] URL: `http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html`, Atomic Weights and Isotopic Compositions.

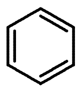
[15] Siehe z. B.: Th. A. Shaler: Generalization of Pascal's Triangle to Nuclei of Any Spin, *Journal of Chemical Education* **68** (1991) 853.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)

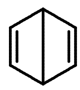
Anwendungsfeld für erzeugende Funktionen. So läßt sich die Anzahl isomerer Substitutionsderivate einer vorgegebenen (organischen oder anorganischen) Stammverbindung für alle Substitutionsarten systematisch bestimmen[16]. Zur Bestimmung der Anzahl stereoisomerer Substitutionsderivate mit Summenformel $C_6H_{6-k}X_k$ (X sei ein einwertiger Substituent, wie z. B. Cl) liefert dieses Verfahren für jede Stammverbindung (mit Summenformel C_6H_6) einen Ausdruck der Form

$$G(x) = \sum_{k=0}^{6} a_k x^k \qquad (a_{6-k} = a_k)$$

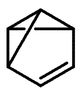
wobei der Koeffizient a_k die gewünschte Information angibt. Einige Beispiele sind (Enantiomerenpaare sind nur einfach gezählt):



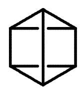
Benzen
1 ($\mathbf{D}_{6h}$)



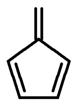
DEWAR-Benzen
2 ($\mathbf{C}_{2v}$)



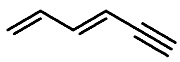
Benzvalen
3 ($\mathbf{C}_{2v}$)



Prisman
4 ($\mathbf{D}_{3h}$)



Fulven
5 ($\mathbf{C}_{2v}$)



Hexa-1,3-dien-5-in
6 ($\mathbf{C}_s$)

Koeffizienten a_k im Abzählpolynom $G(x)$ für verschiedene Isomere von C_6H_6.

	k						
	0	1	2	3	4	5	6
1	1	1	3	3	3	1	1
2	1	2	6	6	6	2	1
3	1	3	7	8	7	3	1
4	1	1	3	3	3	1	1
5	1	3	9	10	9	3	1
6	1	6	15	20	15	6	1

Das Binomialtheorem liefert den Ausdruck $G(x)$ genau dann, wenn substituierbare Plätze der Stammverbindung bei keiner Symmetrieoperation vertauscht (permutiert) werden (wie bei Verbindung **6**).

[16] Siehe hierzu: (a) G. Pólya: Algebraische Berechnung der Anzahl der Isomeren einiger organischer Verbindungen, *Zeitschrift für Kristallographie* **93** (1936) 415; (b) B. E. Douglas, Ch. A. Hollingsworth: Symmetry in Bonding and Spectra, Academic Press, Orlando, 1985, Sect. 5.3.2.

© D. Andrae 2001–2006 (27. November 2006)