

LÖSUNGSVORSCHLAG ZUM ÜBUNGSBLATT NR.7

Aufgabe 19

a.)

Der Hamiltonoperator ist ein Operator, der sowohl im Ortsraum $\mathcal{H}^{(x)}$ als auch im Spinraum $\mathcal{H}^{(s=1/2)}$ lebt. Er besteht nämlich zum einem aus dem Impulsoperator \mathbf{p} , der im Ortsraum ein Differentialoperator ist und zum anderen aus dem Spinoperator $\boldsymbol{\sigma}$ für Spin 1/2. Eigenvektoren müssen somit ein direktes Produkt sein, bei dem ein Teil des direkten Produkts im Ortsraum lebt und der andere Teil im Spinraum. Die Eigenvektoren im Ortsraum sind die Impulseigenfunktionen

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}\right) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}). \quad (1)$$

Diese produzieren den Eigenwert $\hbar\mathbf{k}$, sofern H auf sie wirkt. Damit lautet der Hamiltonoperator im Impulsraum:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \alpha_p \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (2)$$

H kann nun als Matrix geschrieben und diagonalisiert werden. Dies ist möglich, mit der bekannten SU(2)-Rotationsmatrix

$$U = \exp\left(-i\frac{\alpha}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right) = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right), \quad (3)$$

und zwar so, dass \mathbf{p} in Richtung der z -Achse zeigt. Dann geht nämlich das Produkt $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}$ über in $\sigma_z|\mathbf{p}|$, wobei σ_z die dritte Pauli-Matrix ist. Diese ist bekanntlich diagonal und somit ist es dann auch H :-). Sei $|\psi'\rangle$ ein Eigenvektor zu H' . Dann erhalten wir die Eigenvektoren zu H aus folgender Betrachtungsweise.

$$H' = UH U^\dagger \Rightarrow H'|\psi'\rangle = h|\psi'\rangle, \quad UH U^\dagger|\psi'\rangle = UH(U^\dagger|\psi'\rangle) = h|\psi'\rangle \Leftrightarrow H(U^\dagger|\psi'\rangle) = h(U^\dagger|\psi'\rangle). \quad (4)$$

Damit sind die Eigenvektoren von H zum Eigenwert h gegeben durch $U^\dagger|\pm\rangle$. Die Bestimmung der Eigenwerte ist jedoch einfach zu Fuß als unter Benutzung der Transformationsmatrix U . Betrachten wir eine allgemeine hermitesche 2×2 -Matrix:

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12}^* & H_{22} \end{pmatrix}, \quad H_{11}, H_{22} \in \mathbb{R} \quad H_{12} \in \mathbb{C}. \quad (5)$$

Deren Eigenwerte können einfacher mittels des charakteristischen Polynoms berechnet werden:

$$\begin{aligned} \det(\lambda\mathbb{1}_2 - H) &= \det\begin{pmatrix} \lambda - H_{11} & -H_{12} \\ -H_{12}^* & \lambda - H_{22} \end{pmatrix} = (\lambda - H_{11})(\lambda - H_{22}) - |H_{12}|^2 = \\ &= \lambda^2 - \lambda(H_{11} + H_{22}) + H_{11}H_{22} - |H_{12}|^2 \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Daraus folgt dann:

$$\begin{aligned} \lambda_{1/2} &= \frac{(H_{11} + H_{22}) \pm \sqrt{(H_{11} + H_{22})^2 - 4(H_{11}H_{22} - |H_{12}|^2)}}{2} = \\ &= \boxed{\frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Der Hamiltonoperator H ist hier gegeben durch

$$H = \begin{pmatrix} \mathbf{p}^2/(2m) + \alpha_p p_z & \alpha_p(p_x - ip_y) \\ \alpha_p(p_x + ip_y) & \mathbf{p}^2/(2m) - \alpha_p p_z \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Damit folgen die Eigenwerte

$$\begin{aligned} E_{1/2} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \alpha_p p_z + \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \alpha_p p_z \right) \right\} + \frac{1}{2} \sqrt{\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \alpha_p p_z - \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \alpha_p p_z \right) \right\}^2 + 4\alpha_p^2(p_x^2 + p_y^2)} = \\ &= \boxed{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \pm \alpha_p |\mathbf{p}|}. \end{aligned} \quad (9)$$

b.)

Ebenso kann man hier die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators aufstellen:

$$H = \begin{pmatrix} \mathbf{p}^2/(2m) & \alpha_p(ip_x + p_y) \\ \alpha_p(-ip_x + p_y) & \mathbf{p}^2/(2m) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Damit gilt:

$$E_{1/2} = \frac{1}{2} \left(2 \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{4\alpha_p^2(p_x^2 + p_y^2)} = \boxed{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \pm \alpha_p |\mathbf{p}_\perp|, \quad \mathbf{p}_\perp = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ 0 \end{pmatrix}}. \quad (11)$$

Eine direkte Berechnung der Eigenwerte erweist sich hier also als einfacher. (Das muss jedoch nicht immer so sein.)

Aufgabe 20

a.)

Wir bezeichnen die Ket-Vektoren $|\phi_n\rangle$ in der Spaltenvektordarstellung als $e^{(n)}$ für $n = 1, \dots, 6$. Es gilt dann für die k -te Komponente (in der ersten Spalte): $e_{k,1}^{(n)} = \delta_{k,n}$. Aus $R|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle$ ergibt sich dann

$$\sum_{j=1}^6 R_{i,j} e_{j,1}^{(1)} = \sum_{j=1}^6 R_{i,j} \delta_{j,1} = R_{i,1} \stackrel{!}{=} e_{i,1}^{(2)} = \delta_{i,2}, \quad (12)$$

und somit $R_{2,1} = 1$ und $R_{i,1} = 0$ für $i \neq 2$. Aus $R|\phi_2\rangle = |\phi_3\rangle$ folgt

$$\sum_{j=1}^6 R_{i,j} e_{j,1}^{(2)} = \sum_{j=1}^6 R_{i,j} \delta_{j,2} = R_{i,2} \stackrel{!}{=} e_{i,2}^{(3)} = \delta_{i,3}, \quad (13)$$

also $R_{3,2} = 1$ und $R_{i,2} = 0$ für $i \neq 3$. Dieses Vorgehen setzt sich so fort und es folgt daraus $R_{4,3} = 1$, $R_{5,4} = 1$ und $R_{6,5} = 1$, wobei alle anderen Elemente in den Spalten verschwinden. Abschließend kommen wir dann zu $R|\phi_6\rangle = |\phi_1\rangle$, das wir nochmal ausführlicher auswerten:

$$\sum_{j=1}^6 R_{i,j} e_{j,1}^{(6)} = \sum_{j=1}^6 R_{i,j} \delta_{j,6} = R_{i,6} \stackrel{!}{=} e_{i,1}^{(1)} = \delta_{i,1}, \quad (14)$$

also resultiert $R_{1,6} = 1$ und $R_{i,6} = 0$ für $i \neq 1$. Wir wissen nun, wie die Matrixdarstellung von R explizit aussieht:

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Zur Berechnung der Eigenwerte haben wir die Nullstellen des charakteristischen Polynoms zu finden:

$$\begin{aligned} \det(\lambda \mathbf{1}_6 - R) &= \det \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & \lambda \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & -1/\lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & -1/\lambda^2 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & -1/\lambda^3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -1/\lambda^4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda - 1/\lambda^5 \end{pmatrix} = \\ &= \lambda^5 \left(\lambda - \frac{1}{\lambda^5} \right) \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Hieraus folgt also die Gleichung $\lambda^6 - 1 = 0$ und somit

$$\lambda = \exp\left(i\frac{\pi}{3}n\right) \equiv r_n, \quad (17)$$

für $n \in \{0, 1, \dots, 5\}$, also die sechsten Einheitswurzeln. Die Einheitsvektoren müssen eine Linearkombination der Basisvektoren $|\phi_i\rangle$ sein:

$$R \sum_{i=1}^6 a_{n,i} |\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^6 a_{n,i} |\phi_{i+1}\rangle = \sum_{i=2}^7 a_{n,i-1} |\phi_i\rangle \stackrel{!}{=} r_n \sum_{i=1}^6 a_{n,i} |\phi_i\rangle. \quad (18)$$

Damit können die einzelnen Komponenten der Eigenvektoren über die Rekursionsbeziehung

$$a_{n,i} = \frac{a_{n,i-1}}{r_n} = \exp\left(-\frac{i\pi}{3}n\right) a_{n,i-1}, \quad (19)$$

mit $n \in \{0, 1, \dots, 6\}$ und $i \in \{2, 3, \dots, 7\}$ berechnet werden. Dabei ist die Wahl von $a_{n,i-1}$ beliebig. Der Betrag von $a_{n,i-1}$ wird dann über die Normierung der Eigenvektoren festgelegt; es besteht jedoch immer noch die Freiheit, eine beliebige komplexe Phase zu wählen. Wir treffen für alle Eigenvektoren die Wahl $a_{n,i-1} = 1$ (für $n \in \{0, 1, \dots, 5\}$). Damit folgt dann:

$$a_{n,i} = \frac{a_{n,1}}{r_n^{i-1}}, \quad (20)$$

was wir exemplarisch für $n = 0$ durchführen:

$$a_{0,i} = \frac{a_{0,1}}{r_0^{i-1}} = \frac{1}{1^{i-1}} = 1, \quad (21)$$

für $i \in \{2, \dots, 7\}$. Der erste Einheitsvektor besitzt also lauter Einsen und ist auf $1/\sqrt{6}$ zu normieren. Für den zweiten Einheitsvektor gilt:

$$a_{1,i} = \frac{a_{1,1}}{r_1^{i-1}} = \exp\left(-i\frac{\pi}{3}(i-1)\right). \quad (22)$$

Analog funktioniert das Ganze für die restlichen Einheitsvektoren:

$$a_{2,i} = \frac{a_{2,1}}{r_2^{i-1}} = \exp\left(-i\frac{2\pi}{3}(i-1)\right), \quad a_{3,i} = \frac{a_{3,1}}{r_3^{i-1}} = \exp(-i\pi(i-1)), \quad (23a)$$

$$a_{4,i} = \frac{a_{4,1}}{r_4^{i-1}} = \exp\left(-i\frac{4\pi}{3}(i-1)\right), \quad a_{5,i} = \frac{a_{5,1}}{r_5^{i-1}} = \exp\left(-i\frac{5\pi}{3}(i-1)\right), \quad (23b)$$

woraus dann schließlich die Einheitsvektoren aus der Musterlösung folgen.

b.)

Wir leiten nun ebenso eine Matrixdarstellung für den Operator W her:

$$W|\phi_1\rangle = -t(|\phi_6\rangle + |\phi_2\rangle) \Rightarrow \sum_{j=1}^6 W_{i,j} e_{j,1}^{(1)} = \sum_{j=1}^6 W_{i,j} \delta_{j,1} = W_{i,1} \stackrel{!}{=} -t(\delta_{i,6} + \delta_{i,2}), \quad (24)$$

also folgt $W_{6,1} = W_{2,1} = -t$.

$$W|\phi_2\rangle = -t(|\phi_1\rangle + |\phi-3\rangle) \Rightarrow \sum_{j=1}^6 W_{i,j} e_{j,1}^{(2)} = \sum_{j=1}^6 W_{i,j} \delta_{j,2} = W_{i,2} \stackrel{!}{=} -t(\delta_{i,1} + \delta_{i,3}), \quad (25)$$

somit $W_{1,2} = W_{3,2} = -t$. Es folgt dann weiterhin

$$W_{2,3} = W_{4,3} = -t, \quad W_{3,4} = W_{5,4} = -t, \quad W_{4,5} = W_{6,5} = -t, \quad W_{5,6} = W_{1,6} = -t. \quad (26)$$

Alle anderen $W_{i,j}$ verschwinden und es gilt also:

$$W = -t \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

H_0 ist eine Diagonalmatrix und besitzt die Form

$$H_0 = E_0 \mathbf{1}_6. \quad (28)$$

H_0 vertauscht somit mit R . Ebenso kann man leicht nachrechnen, dass W und R vertauschen:

$$[W, R] = WR - RW = 0. \quad (29)$$

Damit vertauscht R mit $H = H_0 + W$, was bedeutet, dass R und H ein gemeinsames System von Eigenvektoren besitzen. Die Eigenwerte und Eigenvektoren von R haben wir bereits bestimmt. Jeder einzelne Eigenwert ist einfach entartet und besitzt einen eindimensionalen Eigenraum. Linearkombinationen dieser Eigenvektoren (zu verschiedenen Eigenwerten) sind also keine Eigenvektoren. Damit muss jeder dieser Eigenvektoren, die wir für R berechnet haben, auch Eigenvektor von H sein. Die Eigenwerte können wir also dadurch berechnen, indem wir H auf jeden einzelnen Eigenvektor anwenden (wobei wir dabei den Normierungsfaktor weglassen können, da er im Prinzip auf beiden Seiten der Gleichung steht):

$$H|1\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & -t & 0 & 0 & 0 & -t \\ -t & E_0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = (E_0 - 2t) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (30)$$

$$H|4\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & -t & 0 & 0 & 0 & -t \\ -t & E_0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = (E_0 + 2t) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Um H geschickt auf die anderen Eigenvektoren anwenden zu können, schreibt man die vorkommenden komplexen Zahlen am Besten in der kartesischen Darstellung (über den Zwischenschritt der Polardarstellung):

$$\exp(i\varphi) = \cos(\varphi) + i\sin(\varphi) = x + iy. \quad (32)$$

Es gilt also

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2(1 - i\sqrt{3}) \\ -1/2(1 + i\sqrt{3}) \\ -1 \\ -1/2(1 - i\sqrt{3}) \\ 1/2(1 + i\sqrt{3}) \end{pmatrix}, \quad (33)$$

und somit:

$$H|2\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & -t & 0 & 0 & 0 & -t \\ -t & E_0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2(1 - i\sqrt{3}) \\ -1/2(1 + i\sqrt{3}) \\ -1 \\ -1/2(1 - i\sqrt{3}) \\ 1/2(1 + i\sqrt{3}) \end{pmatrix} = (E_0 - t) \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2(1 - i\sqrt{3}) \\ -1/2(1 + i\sqrt{3}) \\ -1 \\ -1/2(1 - i\sqrt{3}) \\ 1/2(1 + i\sqrt{3}) \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Zeigen wir noch ein weiteres Beispiel:

$$|3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -1/2(1+i\sqrt{3}) \\ -1/2(1-i\sqrt{3}) \\ 1 \\ -1/2(1-i\sqrt{3}) \\ 1/2(1+i\sqrt{3}) \end{pmatrix}, \quad (35)$$

woraus dann folgt:

$$H|3\rangle = \begin{pmatrix} E_0 & -t & 0 & 0 & 0 & -t \\ -t & E_0 & -t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t & 0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t & 0 & -t \\ -t & 0 & 0 & 0 & -t & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -1/2(1+i\sqrt{3}) \\ -1/2(1-i\sqrt{3}) \\ 1 \\ -1/2(1-i\sqrt{3}) \\ 1/2(1+i\sqrt{3}) \end{pmatrix} = (E_0 + t) \begin{pmatrix} 1 \\ -1/2(1+i\sqrt{3}) \\ -1/2(1-i\sqrt{3}) \\ 1 \\ -1/2(1-i\sqrt{3}) \\ 1/2(1+i\sqrt{3}) \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Analog ergibt sich

$$H|5\rangle = (E_0 + t)|5\rangle, \quad H|6\rangle = (E_0 - t)|6\rangle. \quad (37)$$

Es gibt somit die einfach entarteten Eigenwerte $E_0 + 2t$ und $E_0 - 2t$ (wobei der erste die größte und der zweite die kleine Energie ist) und die zweifach entarteten Eigenwerte $E_0 + t$ bzw. $E_0 - t$.

Zu den zweifach entarteten Energieniveaus kann man auch schönere Eigenvektoren aus Linearkombination der angegebenen bilden. (Jede Linearkombination von Eigenvektoren, die zu einem entarteten Eigenwert gehören, ist wieder Eigenvektor zu diesem Eigenwert.) Mit der Wahl

$$c_1|2\rangle + c_2|6\rangle, \quad c_2 = -c_1 = \frac{i}{\sqrt{3}}; \quad d_1|2\rangle + d_2|6\rangle, \quad d_2 = d_1^* = \frac{1}{6}(3 + i\sqrt{3}), \quad (38)$$

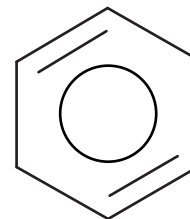
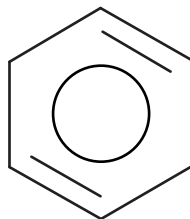
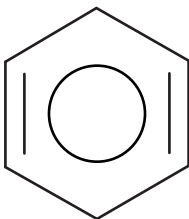
erhält man die beiden in der Musterlösung angegebenen Eigenvektoren zu $E_0 - t$. Zu $E_0 + t$ folgen die angegebenen Eigenvektoren mit der Wahl

$$e_1|3\rangle + e_2|5\rangle, \quad e_1 = -e_2 = \frac{i}{\sqrt{3}}; \quad f_1|3\rangle + f_2|5\rangle, \quad f_1 = f_2^* = \frac{1}{6}(3 + i\sqrt{3}). \quad (39)$$

Die Konfiguration niedrigster Energie ergibt sich, indem man die niedrigsten Energieniveau jeweils zweifach besitzt (wegen des Pauliprinzips mit zwei Elektronen mit entgegengesetzter Spineinstellung in z -Richtung). Wir können also das einfach entartete Energieniveau $E_0 - 2t$ mit zwei Elektronen besetzen. Das nächst höhere Niveau $E_0 - t$ ist zweifach entartet und kann daher vier Elektronen aufnehmen. Damit folgt die Energie dieser Konfiguration:

$$2(E_0 - 2t) + 4(E_0 - t) = 6E_0 - 8t. \quad (40)$$

Nun wieder zur physikalischen Interpretation. Benzen ist die offizielle (nach der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)) Bezeichnung, der im „Volksmund“ besser als Benzol bekannten chemischen Substanz, welche durch die Summenformel C_6H_6 gegeben ist. Die Kohlenstoffatome ordnen sich entlang eines sechseckigen Rings an, während an jedem Kohlenstoffatom ein weiteres Wasserstoffatom einfach gebunden ist. Die beiden Elektronen, welche wir in das Energieniveau $E_0 - 2t$ gesteckt haben, sind an keines der Atomrümpfe fest gebunden, sondern können sich in einem Orbital bewegen, das sich über den kompletten Ring erstreckt. Je zwei der vier Elektronen im nächsthöheren Niveau $E_0 - t$ bilden eine Doppelbindung, wobei es drei mögliche Konfigurationen gibt. Jede Konfiguration enthält zwei Doppelbindungen, die sich im sechseckigen Ring gegenüber liegen:



Hierbei bedeuten einfache Linien Einfachbindungen und doppelte Linien Doppelbindungen. Der Kreis steht symbolisch für das Molekülorbital über den vollständigen Ring. Alle drei dieser Konfigurationen sind gleichberechtigt.

Berücksichtigt man zusätzlich die Wechselwirkung zwischen den Elektronen, so kommt man auf folgende zwei Konfigurationen:



Hier wechseln also Einfach- und Doppelbindungen einander ab. (Dabei handelt es sich um die Strukturformel von dem Chemiker Kekulé im Schlaf entdeckt worden sein soll.) Das Benzolmolekül könnte man sich dann als quantenmechanische Überlagerung dieser beiden Zustände vorstellen. In „Wirklichkeit“ ist es so, dass jedes Kohlenstoffatom zwei Einfachbindungen mit benachbarten Kohlenstoffatomen und einem Wasserstoffatom eingeht. Kohlenstoff befindet sich jedoch in der vierten Hauptgruppe des Periodensystems der Elemente und besitzt daher vier äußere Elektronen (Valenzelektronen), die chemische Bindungen eingehen können. Die restlichen sechs Elektronen (eines von jedem Kohlenstoffatom) sind delokalisiert und können sich in einem großen Molekülorbital aufhalten, das über den kompletten sechseckigen Ring verläuft.