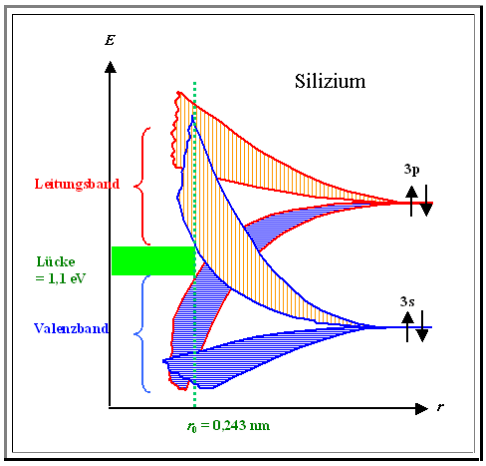
Entwicklung des Si Banddiagramms aus den Atomzuständen

Illustration

- Silizium hat die Elektronenkonfiguration **$3s^2 3p^2$**, das ist im rechten Teil des Diagramms angedeutet.
  - Das Diagramm zeigt, wie sich die Zustände entwickeln und aufspalten wenn ein **Si** Kristall geformt wird. Dabei bilden sich dann die **sp^3** - Hybridorbitale aus



  - Die Zustände müssen aufspalten und es bilden sich die **sp^3** - Hybridorbitale aus . Das ist schön zu sehen: Das vom **3p** Niveau sich entwickelnde blaue Teilband erlaubt Energieabsenkungen für die Elektronen und mischt sich mit dem blauschraffierten **3s** Teilband kurz vor dem Bindungsabstand r_0.
  - Valenz- und Leitungsband entstehen also aus der Überlagerung von **3s**- und **3p**-Zuständen. Nicht nur die Energielücke selbst ist sichtbar, sondern auch indirekt ihre Druckabhängigkeit, da der Bindungsabstand durch äußeren Druck ja etwas geändert werden kann.