

# 1. Derivative discontinuity

לידת KS-DFT עבור האנרגיה Koopman's זריחה כי אנרגיית אורביטל ה-HOMO שנה בנוסף לפוטנציאל היוניזציה והפופר בסיומת:

$$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{KS}} = -I$$

עבור מדרכת הלקח N אלקטרונים נקדם כי  $\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{KS}}(N) = -I(N)$ . כעת אם ננסה למדרכת פיקציה קטנה של אלקטרון ה הוא האנרגיה של אורביטל ה-LUMO ולכן:

$$\epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{KS}}(N+1) \approx \epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{KS}}(N) = -I(N+1) \approx -A(N)$$

מכאן שאם ננסה פיקציה (קטנה של אלקטרון) של אלקטרון למדרכת אורביטל ה-HOMO ונראה האנרגיה של האנרגיה של אלקטרון נקדם  $-I(N) - I(N+1) - A(N)$ . עם פוטנציאל KS תיבניות אורביטל כושר האנרגיה עם עם של אלקטרונים N - (N-1) - I - (N+1). האנרגיה של אורביטל ה-LUMO תיבניות  $V_{xc}$  (היא רכיב *by construction*) ואם הרכיב האנרגיה  $\Delta_{xc}$  אמון שבו נשנים את ה-  $\Delta_{xc}$  שמתקן את ה-KS-DFT למדרכת נסיונית ושלוקחת בהשגון את אורביטל כק:  $I - A = E_g^{\text{exp}} = E_g^{\text{KS}} + \Delta_{xc} = \epsilon_{\text{LUMO}}^{\text{KS}} - \epsilon_{\text{HOMO}}^{\text{KS}} + \Delta_{xc}$

# 2. Fundamental gap

$$E_g = I - A$$

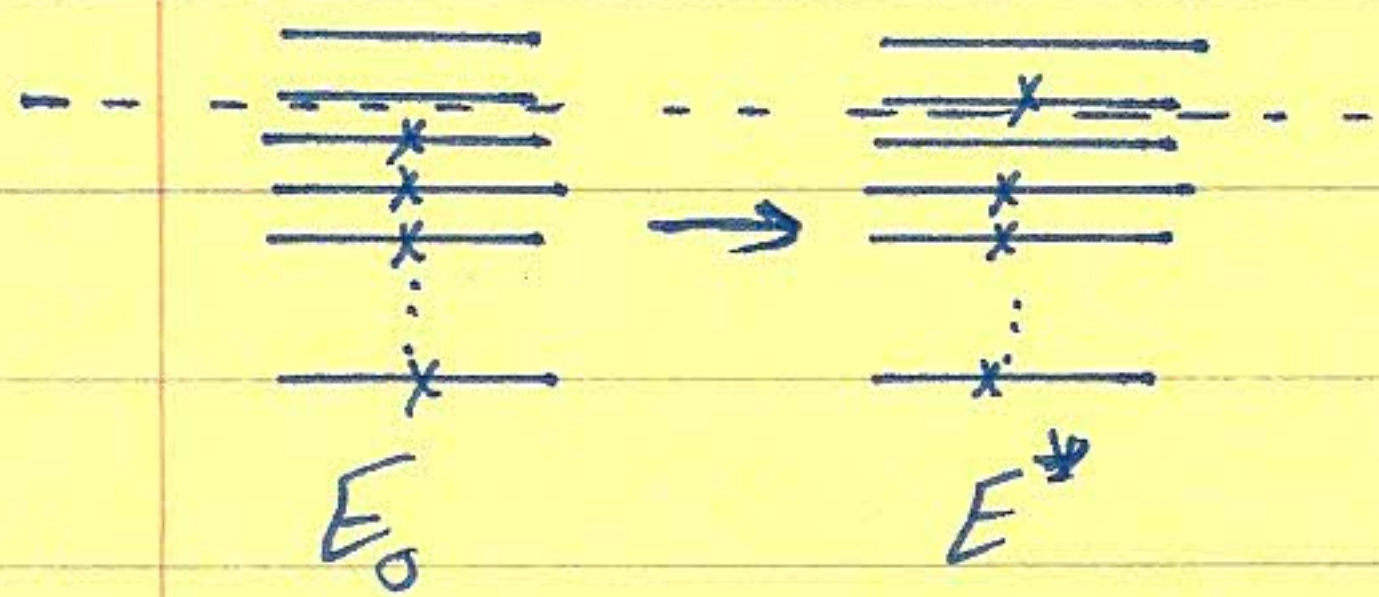
I - פוטנציאל היוניזציה - האנרגיה של האורביטל HOMO מוצא האלקטרון (HOMO) בתום אנרגיה של המדרכת הנוכחית.

A - האנרגיה האלקטרונה - מוצאת את האנרגיה של האורביטל LUMO מוכנס האלקטרון (LUMO) בתום אנרגיה של המדרכת הנוכחית.

$$\begin{aligned} E_g = I - A &= (E[N-1] - E[N]) - (E[N] - E[N+1]) = \\ &= E[N-1] + E[N+1] - 2E[N] \end{aligned}$$



3. optical gap



$$E_g = E^* - E_0$$

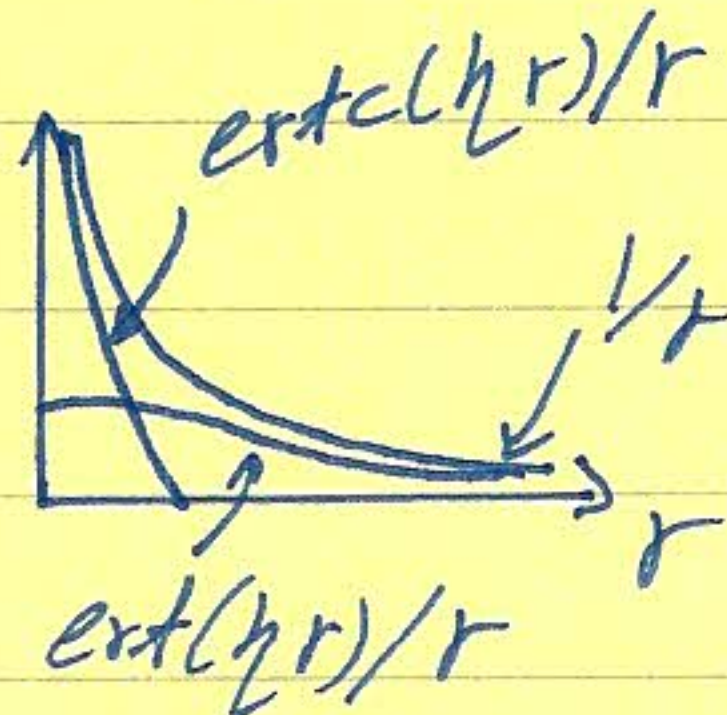
מה זה gap - זה הפרש האנרגיה בין מצב היסוד למצב המעורר. האנרגיה המינימלית הדרושה כדי להעביר את המערכת למצב המעורר היא האנרגיה של ה-gap. זהו ה-Fundamental gap. זהו ה-gap המינימלי הדרוש להעברת אלקטרון ממצב היסוד למצב המעורר. זהו ה-gap המינימלי הדרוש להעברת אלקטרון ממצב היסוד למצב המעורר.

4. Hybrid Functionals

a. Regular Hybrid:  $E_{xc} = \alpha E_x^{HF} + (1-\alpha) E_x^{DFT} + E_c^{DFT}$

b. range separated hybrids:

$$\frac{1}{r} = \frac{erfc(\alpha r)}{r} + \frac{erfc(\beta r)}{r}$$



הפרק הזה עוסק במיקום של האנרגיה של מצב היסוד ושל מצב המעורר. זהו ה-Fundamental gap. זהו ה-gap המינימלי הדרוש להעברת אלקטרון ממצב היסוד למצב המעורר. זהו ה-gap המינימלי הדרוש להעברת אלקטרון ממצב היסוד למצב המעורר.

$$E_{xc} = \alpha E_x^{SR, HF} + (1-\alpha) E_x^{SR, DFT} + \beta E_x^{LR, HF} + (1-\beta) E_x^{LR, DFT} + E_c^{DFT}$$

כך שאם אנחנו רוצים שיהיה זהו ה-Fundamental gap, אנחנו צריכים להשתמש ב-LR. זהו ה-Fundamental gap. זהו ה-gap המינימלי הדרוש להעברת אלקטרון ממצב היסוד למצב המעורר.

$\beta=1, \alpha=0$  : BNL