

1. Derivative discontinuity

ליחס KS-DFT עבור האנרגיה E_{KS} לזו של האנרגיה האטומית E_{atom} (הקשר בין שתי האנרגיות):

$$E_{HOMO} = -I$$

עבור המערכת N אלקטרונים נקבע כי $E_{HOMO}(N) = -I(N)$. כעת אם נוסף אלקטרון אחד למערכת $N+1$ אלקטרונים, האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

$$E_{HOMO}(N+1) \approx E_{LUMO}(N) = -I(N+1) \approx -A(N)$$

מכאן שאם נוסף אלקטרון אחד למערכת N אלקטרונים, האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

$$-A(N) = -I(N+1) = E_{HOMO}(N+1)$$

אין הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת N אלקטרונים, ולכן המערכת N אלקטרונים היא במצב היסודי.

עם כוונתו של E_{HOMO} תהיה צריכה להיות E_{LUMO} כשנפרד. האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

$$V_x$$
 (היא רכיב $by construction$) ואין הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת N אלקטרונים, ולכן המערכת N אלקטרונים היא במצב היסודי.

מכאן שיש הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת $N+1$ אלקטרונים, ולכן המערכת $N+1$ אלקטרונים היא במצב היסודי.

לסיכום, יש הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת $N+1$ אלקטרונים, ולכן המערכת $N+1$ אלקטרונים היא במצב היסודי.

$$I - A = E_g^{KS} = E_g^{KS} + \Delta_{xc} = E_{LUMO}^{KS} - E_{HOMO}^{KS} + \Delta_{xc}$$

מכאן שאם נוסף אלקטרון אחד למערכת N אלקטרונים, האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

2. Fundamental gap

ההפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת N אלקטרונים, ולכן המערכת N אלקטרונים היא במצב היסודי. ההפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת $N+1$ אלקטרונים, ולכן המערכת $N+1$ אלקטרונים היא במצב היסודי.

$$E_g = I - A$$

$I - A$ פוטנציאל היוניזציה - האנרגיה של האלקטרון החופשי (HOMO) במצב היסודי.

האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

A - האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

האנרגיה האטומית E_{atom} היא $E_{HOMO}(N+1)$ והקשר בין שתי האנרגיות:

$$E_g = I - A = (E[N+1] - E[N]) - (E[N] - E[N+1]) =$$

$$= E[N+1] + E[N+1] - 2E[N] = E_{LUMO}^{KS} - E_{HOMO}^{KS}$$

לדעתנו, הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת N אלקטרונים, ולכן המערכת N אלקטרונים היא במצב היסודי.

הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת $N+1$ אלקטרונים, ולכן המערכת $N+1$ אלקטרונים היא במצב היסודי.

הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת $N+1$ אלקטרונים, ולכן המערכת $N+1$ אלקטרונים היא במצב היסודי.

הפרדה בין E_{HOMO} ל- E_{LUMO} במערכת $N+1$ אלקטרונים, ולכן המערכת $N+1$ אלקטרונים היא במצב היסודי.

③ Derivative Discontinuity

ניתן להסתכל על מצבת שטחים כמחצית של מרחק בין נקודות מסתובבות סובייטיות.
סורסו (ensemble) של מצבות הסדרות במרחק של 100 מטר.

8. יהיה $E(N)$ אקספוננט של N אקטיוויות. יהיה $E(N+1)$ אקספוננט של $N+1$ אקטיוויות. יהיה $E(N+1)$ אקספוננט של $N+1$ אקטיוויות. יהיה $E(N+1)$ אקספוננט של $N+1$ אקטיוויות.

$$\bar{E} = \frac{mE(N) + lE(N+1)}{m+l}$$

הבית הקברות של המזכרות
העתיקה וזו אלה המזכרות.

$$\frac{m}{m+l} = \frac{m+l-l}{m+l} = 1 - \frac{l}{m+l} \equiv 1 - w^c$$

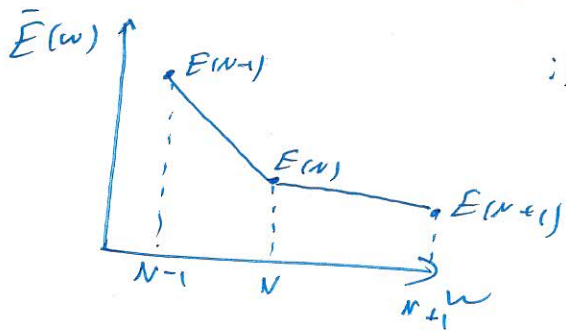
יו"ר ועד קהילה:

$$\begin{aligned}\bar{E}(w) &= (1-w)E(n) + wE(n+1) = \\ &= [E(n+1) - E(n)]w + E(n)\end{aligned}$$

15. $\frac{1}{2} \log 2$

5. מה קו ישר הממנה את הקוביות $E(N) - E(N+1)$ כך ש:

$$\bar{E}(w=0) = E(N) \quad - \quad \bar{E}(w=1) = E(N+1)$$



נרמל כחצי פונקציה $E(\omega)$ גאומטריה הבאה:

אנחנו פראגה ב' ק"מ א-דקוסט
באוגוסט.

$$\epsilon_i = \frac{\partial E}{\partial w_i}$$

Janak הוא כו עכור מדינת KS בסיקטור של מתקנים

מכאן, נקט ϵ האור χ כולו וקבל $\sum_{Hom_0}^{K_0} \epsilon$ של המכת χ של N שלקטיונר

שמואל מאמנוניט אונזער $E_{\text{HOMO}}^{\text{KS}}$ ערזי מרכיב פאר HOMO^{KS} אונזער שמואל:

$$\Sigma_{\text{Homo}}^{KS}(N - \sqrt{q}) \neq \Sigma_{\text{Homo}}^{KS}(N + \sqrt{q})$$

אנדרגיסטר צו חובות רבנות, זעצן אפ אונזער חשבון און Eg זעטק דעם

[illegible]

$Eg = I - A$ המרחב Eg הוא המרחב $Eg = I - A$ המרחב Eg הוא המרחב $Eg = I - A$ המרחב Eg הוא המרחב $Eg = I - A$