

背景简介

性能指标

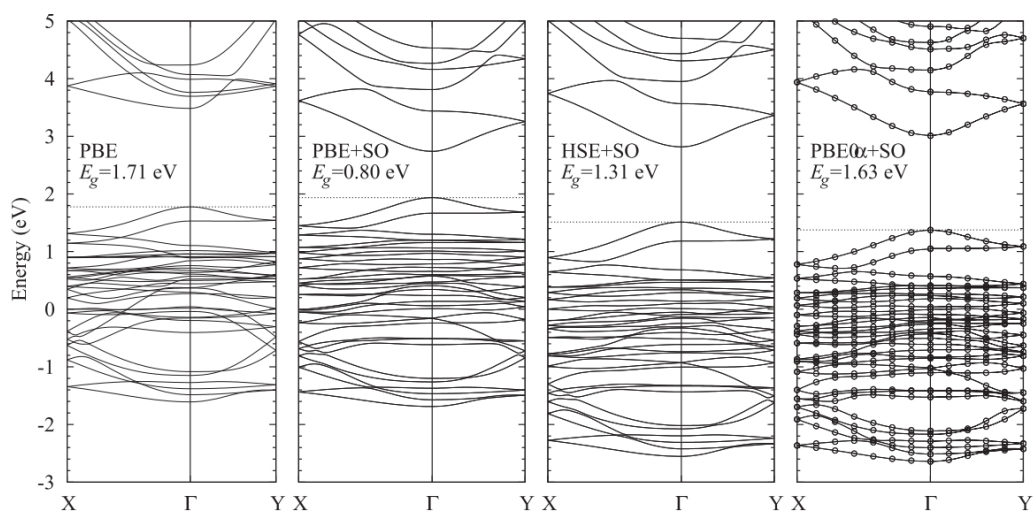
- 带隙
- 吸光性能
- 载流子寿命
- 迁移率

带隙

- 使用杂化泛函可以明显提升精度：PBE0, HSE06
- 需要考虑spin-orbital (SO) coupling
- 可以调整杂化泛函的exact exchange比例(称为PBE0 α): $\alpha = 1/\epsilon_\infty$ (ϵ_∞ 是介电常数)

例子: CH₃NH₃PbI₃

- 实验值1.68eV
- 计算值



(PBE看起来不错，实际上是缺少HF交换和缺少SO的误差抵消，并不可靠)