

TÍNH TOÁN CÁC TÍNH CHẤT ĐIỆN TỬ CỦA CHẤT ĐA HÌNH BORON NITRIC DỰA TRÊN LÝ THUYẾT PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ

Nhận bài:

07 – 02 – 2016

Chấp nhận đăng:

20 – 06 – 2016

<http://jshe.ued.udn.vn/>

Nguyễn Quý Tuấn

Tóm tắt: Trong nghiên cứu này, dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi khảo sát các tính chất điện tử của chất đa hình Boron Nitric (BN), bao gồm các tinh thể dạng graphit (h-BN), dạng wurtzite (w-BN), và dạng zincblende (c-BN). Cấu trúc vùng năng lượng, khe năng lượng, mật độ trạng thái toàn phần của h-BN, w-BN và c-BN đã được nghiên cứu và tính toán. Để đạt được mục đích nghiên cứu, chúng tôi sử dụng các phép tính xấp xỉ mật độ địa phương (LDA) và xấp xỉ biến đổi liên tục tổng quát (GGA), những phép tính này được hỗ trợ trong phần mềm mô phỏng tính chất vật liệu Material Studio. Kết quả tính toán cho thấy các chất h-BN, w-BN và c-BN có khe năng lượng gián tiếp và có độ rộng vùng dẫn là $-4,4$ eV, $-5,4$ eV, và $-4,8$ eV. Các kết quả này phù hợp với các báo cáo lý thuyết trước đây. Tuy nhiên, độ rộng khe năng lượng thu được có giá trị nhỏ hơn giá trị thực nghiệm. Nguyên nhân của hiện tượng này là do sự hạn chế của các phép tính gần đúng LDA và GGA.

Từ khóa: Boron Nitric; h-BN; w-BN; c-BN; tính chất điện tử; khe năng lượng.

1. Giới thiệu chung

Boron Nitric (BN) là chủ đề của rất nhiều nghiên cứu trong những năm gần đây, cả lý thuyết và thực nghiệm. Nó là một chất có cấu trúc tinh thể đa hình, bao gồm các cấu trúc tinh thể dạng graphit (h-BN), dạng wurtzite (w-BN), và dạng zincblende (c-BN).

Chất h-BN có cấu trúc mạng tinh thể tương tự như cấu trúc của graphit với các liên kết B-N lai hoá sp^2 . Ngược với graphit có tính chất nửa kim loại, h-BN là một chất bán dẫn có khe năng lượng rộng [1]. Khe năng lượng rộng và khả năng tổng hợp đơn lớp của h-BN làm cho nó được quan tâm nhiều trong các cấu trúc điện tử 2 chiều (2D) và dùng làm đế cho nuôi cấy graphene [2]. Chất h-BN còn có độ dẫn nhiệt cao ~ 600 W/m·K và nhiệt dung cao [3].

Chất w-BN, với các liên kết B-N lai hoá sp^3 , là một chất nửa bèn ở hầu hết các nhiệt độ và có độ giãn nở lớn

khi chuyển từ cấu trúc wurtzite sang các cấu trúc khác [4].

Chất c-BN có sự sắp xếp các nguyên tử tương tự như cấu trúc mạng tinh thể kim cương với các liên kết B-N lai hoá sp^3 . Nó có rất nhiều các tính chất thú vị như rất cứng, có nhiệt độ nóng chảy cao $\sim 3000^\circ\text{C}$ [5], có hằng số điện môi k cao ($k \sim 7$) [6], hệ số dẫn nhiệt cao ~ 1300 W/m·K [7] (~ 4 lần cao hơn AlN), và cường độ điện trường đánh thủng lớn ~ 10 MV/cm.

Do có những tính chất thuận lợi như trên, BN có thể được sử dụng như một chất cách điện cực công nhiều triển vọng trong các transistor trường, ứng dụng cho các linh kiện điện tử hoạt động ở tần số cao, công suất lớn và nhiệt độ cao [8, 9]. Đặc biệt, BN còn cho thấy tính cách điện rất tốt khi kết hợp với cấu trúc dị thể AlGaIn/GaN để tạo ra các tranzitor trường dị thể kim loại-cách điện-bán dẫn BN/AlGaIn/GaN (MIS-HFETs) [10, 11].

Để mở rộng các ứng dụng của BN như là một chất cách điện trong các transistor, diode,... chúng ta cần hiểu sâu hơn các cơ chế vật lý xảy ra bên trong BN. Vì vậy, việc xác định cấu trúc điện tử và độ rộng khe năng lượng của BN là rất cần thiết. Đã có nhiều nghiên cứu lý thuyết về cấu trúc điện tử của chất đa hình BN [12–17].

* Liên hệ tác giả

Nguyễn Quý Tuấn

Trường Đại học Sư phạm - Đại học Đà Nẵng

Email: nqtuan@ued.udn.vn

Tuy nhiên, các kết quả tính toán khác nhau có sự khác biệt khá lớn và khác nhiều so với các kết quả đo đạc được từ thực nghiệm [5, 20]. Do đó, việc sử dụng các phương pháp khác nhau để tính toán và so sánh kết quả thu được có ý nghĩa quan trọng.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) để tính toán các tính chất điện tử như cấu trúc vùng năng lượng, mật độ trạng thái, và độ rộng khe năng lượng của chất đa hình BN gồm h-BN, w-BN và c-BN. Để đạt được các mục đích đó, chúng tôi sử dụng các phương pháp xấp xỉ mật độ địa phương (LDA) và xấp xỉ biến đổi liên tục tổng quát (GGA). Đây là các phương pháp tính toán DFT được hỗ trợ trong phần mềm mô phỏng tính chất vật liệu Material Studio.

2. Phương pháp tính toán và dữ liệu đầu vào

2.1. Phương pháp tính toán

DFT là một trong những cách tiếp cận thành công nhất trong việc tính toán cấu trúc điện tử của vật chất. Nó tính toán và cung cấp các tính chất trạng thái nền và mật độ electron của một hệ.

Rất khó để đạt được một kết quả chính xác tuyệt đối. Vì vậy, các phương pháp xấp xỉ, gần đúng như LDA và GGA được sử dụng để thu về cấu trúc vùng năng lượng, mật độ trạng thái và độ rộng khe năng lượng của chất đa hình BN.

LDA là một phương pháp cơ bản của các hàm xấp xỉ trao đổi tương quan. Hạt nhân của phương pháp này là ý tưởng xem các electron như là các phân tử khí đồng nhất và di chuyển xung quanh các điện tích dương. Khi đó, tổng điện tích của hệ bằng không, hay hệ ở trạng thái cân bằng. Từ ý tưởng đó, chúng ta có thể viết được biểu thức năng lượng trao đổi tương quan $E_{ex}^{LDA}(\rho)$ dưới dạng:

$$E_{ex}^{LDA}(\rho(\vec{r})) = \int \rho(\vec{r}) [\epsilon_x(\rho(\vec{r})) + \epsilon_c(\rho(\vec{r}))] d\vec{r}$$

trong đó $\epsilon_x(\rho(\vec{r}))$ là năng lượng trao đổi tương quan trên một hạt của khí electron đồng nhất có mật độ $\rho(\vec{r})$.

Theo một hướng khác, để thu được độ chính xác cao hơn, các phép tính toán không những sử dụng các thông tin về mật độ hạt $\rho(\vec{r})$ ở một điểm có bán kính

vector \vec{r} riêng biệt mà còn nên sử dụng các thông tin về sự biến đổi liên tục của mật độ điện tích $\nabla\rho(\vec{r})$ và có tính đến sự bất đồng nhất của mật độ electron thực tế. Cách tính toán này được gọi là phương pháp xấp xỉ biến đổi liên tục tổng quát (GGA).

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng công cụ tính Dmol3 trong phần mềm mô phỏng vật liệu Material Studio. Công cụ này đã được tích hợp các phương pháp tính LDA và GGA và còn cho phép tùy biến, thay đổi một số thông số để việc tính toán mô phỏng sát với thực tế.

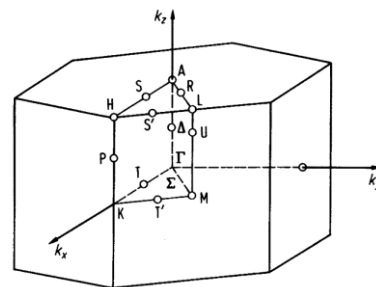
2.2. Dữ liệu đầu vào cho quá trình tính toán

Chúng tôi đã tiến hành tính toán, mô phỏng các tính chất điện tử cho các cấu trúc tinh thể h-BN, w-BN và c-BN. Trong đó, chúng tôi đã sử dụng các thông số của các cấu trúc trên như liệt kê trong Bảng 1.

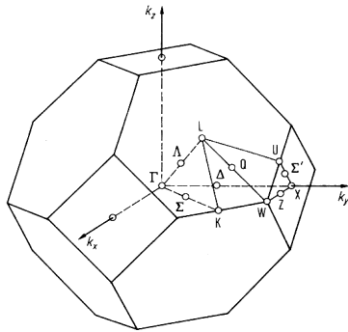
Hình 1 biểu diễn cấu trúc vùng Brillouin thứ nhất của các mạng tinh thể h-BN và w-BN. Hai chất này có cấu trúc vùng Brillouin thứ nhất giống nhau. Để khảo sát cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái của h-BN và w-BN, quá trình tính toán, khảo sát được bắt đầu tại điểm Γ (tâm vùng Brillouin), đi đến các điểm A, L, M, Γ , K, H, và kết thúc tại điểm L.

Bảng 1. Các thông số các dạng tinh thể của BN [1]

	h-BN	w-BN	c-BN
Nhóm không gian	$D_{6c} - P6_3mmc$	$C4_{6v} - P6_3mc$	$T_d^2 - F43m$
Hằng số mạng (Å)	$a = 2.494$ $c = 6.66$	$a = 2.536$ $c = 4.199$	$a = 3.615$
Chiều dài liên kết B-N (Å)	1.440	1.555	1.565



Hình 1. Vùng Brillouin thứ nhất của mạng tinh thể h-BN và w-BN



Hình 2. Vùng Brillouin thứ nhất của mạng tinh thể c-BN

Cấu trúc vùng Brillouin thứ nhất của mạng tinh thể c-BN được chỉ ra trong Hình 2. Đối với c-BN, quá trình tính toán được bắt đầu tại điểm L, đi đến các điểm Γ , X, W, K và kết thúc tại Γ . Để thuận tiện cho việc biểu diễn các kí hiệu, trong kết quả tính toán về cấu trúc vùng năng lượng, điểm Γ được kí hiệu bằng chữ G.

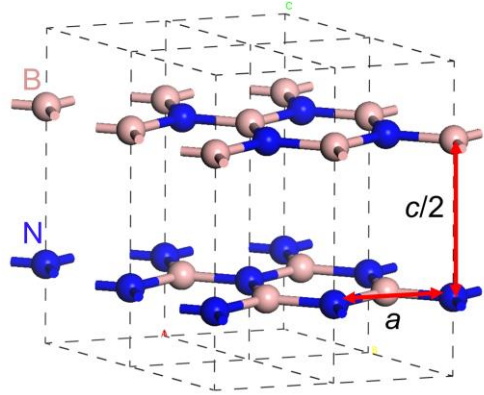
Trong phần mềm mô phỏng Material Studio, năng lượng tính được biểu diễn theo đơn vị Hartree (Ha), trong đó: $1 \text{ Ha} \approx 27.2 \text{ eV}$.

3. Các kết quả và thảo luận

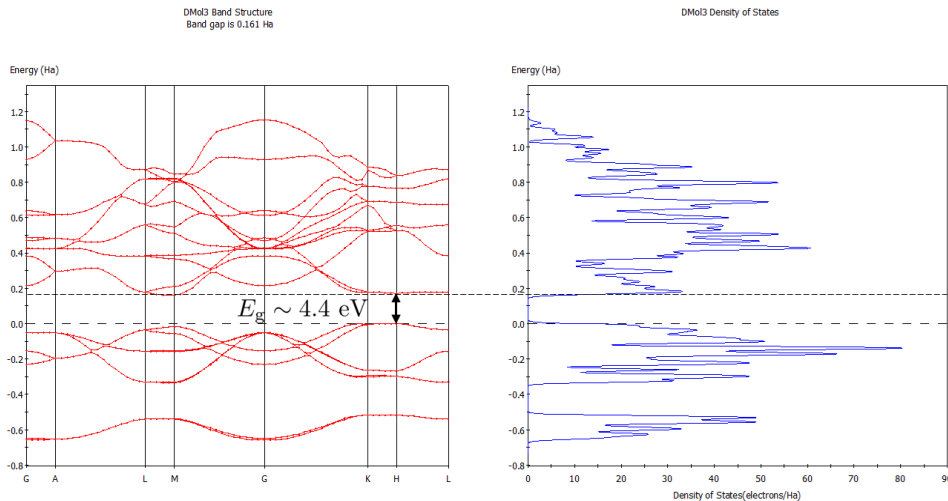
3.1. Các tính toán cho h-BN

Hình 3 đưa ra cấu trúc mạng tinh thể của h-BN được xây dựng trong Material Studio. Mạng tinh thể h-BN có liên kết B-N lai hoá sp^2 , trong đó một nguyên tử B (hoặc

N) liên kết cộng hoá trị với ba nguyên tử N (hoặc B) liên kề trên cùng một mặt phẳng để tạo nên một tam giác đều có tâm là nguyên tử B (hoặc N). Góc hợp bởi hai liên kết lai hoá sp^2 liên kề là 120° . Các hằng số mạng a và c của cấu trúc này được cho trong Bảng 1.

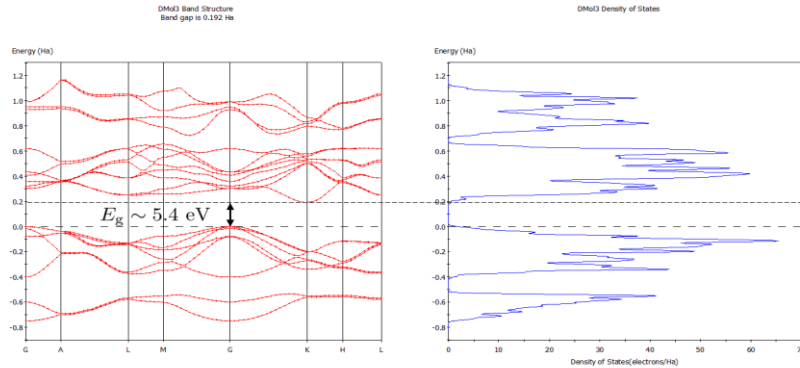


Hình 3. Cấu trúc mạng tinh thể của h-BN. Các hằng số mạng a và c được cho trong Bảng 1



Hình 4. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái toàn phần ở trạng thái cân bằng của h-BN thu được qua phương pháp GGA.

Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái toàn phần ở trạng thái cân bằng của h-BN thu được qua phương pháp GGA được đưa ra trong Hình 4. Trong các tính toán cấu trúc vùng năng lượng trong bài báo này, mức năng lượng Fermi được chọn nằm ở đỉnh vùng hoá trị (VBM). Kết quả tính toán cho thấy h-BN có khe năng lượng gián tiếp với đáy vùng dẫn (CBM) nằm tại điểm M và VBM nằm tại gần điểm H. Độ rộng khe năng lượng gián tiếp $E_g \sim 4.4$ eV. Bên cạnh đó, khe năng lượng trực tiếp quan sát được tại điểm H và có độ rộng ~ 4.6 eV. Tuy nhiên, theo phương pháp tính LDA, khe năng lượng gián tiếp và trực tiếp của h-BN nằm tại các điểm tương tự như trong phương pháp tính GGA, nhưng có giá trị nhỏ hơn, lần lượt là ~ 4.1 eV và ~ 4.5 eV. Các kết quả thu được này phù hợp với các tính toán lý thuyết đã nêu trước đó [12, 13, 17].



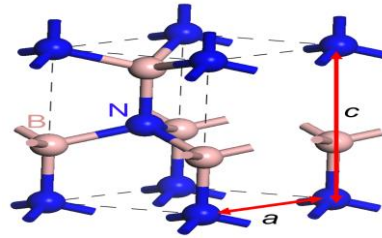
Hình 6. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái toàn phần ở trạng thái cân bằng của w-BN thu được bằng phương pháp GGA.

Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái toàn phần ở trạng thái cân bằng của w-BN thu được qua phương pháp GGA được đưa ra trong Hình 6. Kết quả tính toán cho thấy các mạng tinh thể w-BN có khe năng lượng gián tiếp với CBM nằm tại điểm K và VBM nằm tại điểm G. Độ rộng khe năng lượng gián tiếp $1.1 \sim 5.4$ eV. Ngoài ra, Hình 6 còn cho thấy w-BN có khe năng lượng trực tiếp nằm tại điểm G, với độ rộng khe $\sim 8,1$ eV. Khe năng lượng gián tiếp và trực tiếp thu được trong phương pháp tính LDA xảy ra tại cùng vị trí so với GGA và có độ rộng lần lượt là $\sim 5,0$ eV và $\sim 7,8$ eV.

3.3. Các tính toán cho c-BN

Hình 7 cho thấy cấu trúc mạng tinh thể của c-BN. Tương tự như cấu trúc w-BN, c-BN có các liên kết B-N

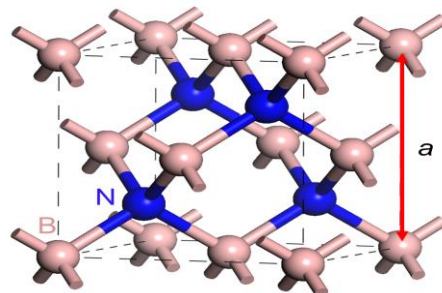
3.2. Các tính toán cho w-BN



Hình 5. Cấu trúc mạng tinh thể của w-BN. Các hằng số mạng a và c của w-BN được cho trong Bảng 1

Hình 5 cho thấy cấu trúc mạng tinh thể của w-BN. Tinh thể w-BN có các liên kết B-N lai hoá sp^3 , trong đó một nguyên tử B (hoặc N) gắn với bốn nguyên tử N (hoặc B) khác để tạo nên một hình tứ diện đều; góc giữa hai liên kết liền kề là $109,5^\circ$. Các hằng số mạng tinh thể của w-BN được hiển thị trong Bảng 1.

lai hoá sp^3 , trong đó một nguyên tử B (hoặc N) gắn với bốn nguyên tử N (hoặc B) khác để tạo nên một hình tứ diện đều. Các hằng số mạng tinh thể của c-BN được cho trong Bảng 1.



Hình 7. Cấu trúc mạng tinh thể của c-BN. Hằng số mạng a của c-BN được cho trong Bảng 1

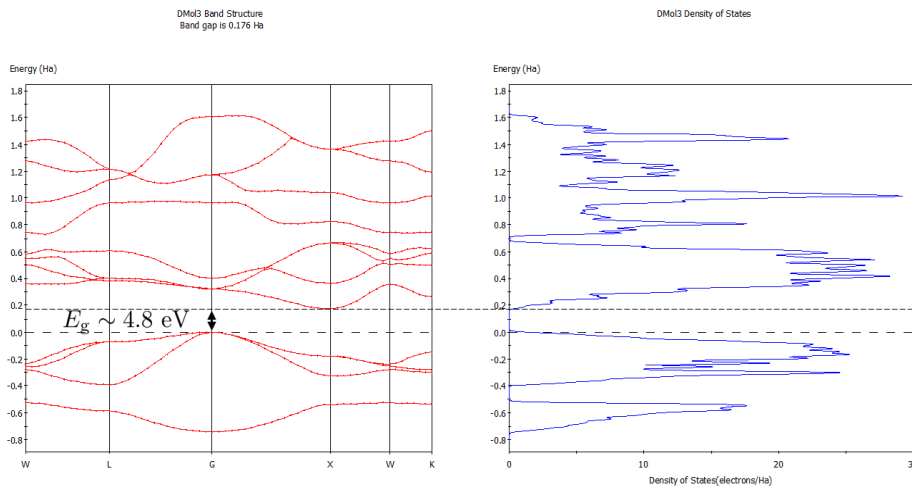
Hình 8 mô tả cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái toàn phần ở trạng thái cân bằng của c-BN thu được qua phương pháp GGA. Như được chỉ ra trong Hình 8, c-BN có khe năng lượng gián tiếp với CBM nằm tại điểm X và VBM nằm tại điểm G. Độ rộng khe năng lượng gián tiếp $1.1 \sim 4,8\text{eV}$. Bên cạnh đó, Hình 8 còn cho thấy c-BN có khe năng lượng trực tiếp nằm tại điểm G, với độ rộng khe $\sim 8,7\text{eV}$. Đối với c-BN, các phương pháp tính GGA và LDA cho cùng một kết quả về vị trí và độ rộng của các khe năng lượng gián tiếp và trực tiếp.

3.4. Tổng hợp và so sánh kết quả

Bảng 2 trình bày tóm tắt các kết quả các tính toán mô phỏng thu được khi sử dụng các phương pháp LDA và GGA trong bài báo này ($LDA^{(*)}$ và $GGA^{(*)}$) và so sánh, đối chiếu với các báo cáo lý thuyết và thực nghiệm khác. Độ rộng khe năng lượng của h-, w-, c-BN thu được trong bài báo này khá phù hợp với tính toán lý thuyết trước đây của Y.-N. Xu [12], C. E. Dreyer [17], và S.-P. Gao [19]. Tuy nhiên, các kết quả tính toán lý thuyết độ rộng khe năng lượng thường có giá trị nhỏ hơn các giá trị thực nghiệm [5, 20]. Điều này cho thấy các phương pháp LDA và GGA đã đánh giá không đầy đủ các đại lượng tính toán. Chúng tôi thu được cùng một xu hướng trong việc ước lượng khoảng cách năng lượng cho BN đa hình cho cả hai phương pháp LDA và GGA: độ rộng khe năng lượng nhỏ nhất cho h-BN, trung bình cho c-BN, và lớn nhất cho w-BN.

Bảng 2. Tổng hợp kết quả tính toán độ rộng khe năng lượng sử dụng các phương pháp tính $LDA^{(*)}$ và $GGA^{(*)}$ cho BN đa hình và so sánh với các giá trị tính toán, thực nghiệm khác.

Chất đa hình	Phương pháp tính	Khe năng lượng gián tiếp [eV] (VBM \rightarrow CBM)	Khe năng lượng trực tiếp [eV]
h-BN	$LDA^{(*)}$	4.1 (H \rightarrow M)	4.5 (H)
	$GGA^{(*)}$	4.4 (H \rightarrow M)	4.6 (H)
	OLCAO [12]	4.07 (H \rightarrow M)	4.6 (M)
	LDA [19]	5.5 ($\Gamma \rightarrow$ M)	8.0 (Γ)
	HSE [17]	5.7 (\sim H \rightarrow M)	6.1 (K)
	Exp. [5]	5.2	
w-BN	$LDA^{(*)}$	5.0 ($\Gamma \rightarrow$ K)	7.8 (Γ)
	$GGA^{(*)}$	5.4 ($\Gamma \rightarrow$ K)	8.1 (Γ)
	OLCAO [12]	5.8 ($\Gamma \rightarrow$ X)	8.0 (Γ)
	LDA [19]	5.0 ($\Gamma \rightarrow$ K)	7.6 (Γ)
	HSE [17]	6.5 ($\Gamma \rightarrow$ K)	10.1 (gần Γ)
c-BN	$LDA^{(*)}$	4.7 ($\Gamma \rightarrow$ X)	8.7 (Γ)
	$GGA^{(*)}$	4.8 ($\Gamma \rightarrow$ X)	8.7 (Γ)
	OLCAO [12]	5.2 ($\Gamma \rightarrow$ X)	8.7 (Γ)
	LDA [19]	4.45 ($\Gamma \rightarrow$ M)	8.6 (Γ)
	HSE [17]	5.8 ($\Gamma \rightarrow$ X)	10.7 (Γ)
	Exp. [20]	6.4	



Hình 8. Cấu trúc vùng năng lượng và mật độ trạng thái toàn phần ở trạng thái cân bằng của c-BN thu được qua phương pháp GGA.

4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ, chúng tôi nghiên cứu các tính chất điện tử của chất đa hình BN. Các cấu trúc vùng năng lượng, độ rộng khe năng lượng, và tổng số mật độ các trạng thái của h-BN, w-BN và c-BN đã được tính toán dựa trên các phương pháp LDA và GGA. Các kết quả tính toán thu được trong nghiên cứu này phù hợp với tính toán đã công bố trước đây. Điều này chứng tỏ chúng tôi đã xây dựng chính xác cấu trúc tinh thể của chất BN đa hình và lựa chọn chính xác phương pháp tính toán. Tuy nhiên, các giá trị tính toán về độ rộng khe năng lượng thu được có giá trị nhỏ hơn các kết quả thực nghiệm. Đây là kết quả thường gặp cho tất cả các tính toán sử dụng các phương pháp LDA và GGA.

Từ các kết quả tính toán này, chúng tôi có cơ sở để áp dụng cho các tính toán phức tạp hơn cho các hệ có số nguyên tử lớn và mở rộng sang cho các cấu trúc tinh thể và vô định hình khác.

Tài liệu tham khảo

- [1] S. Adachi, Properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductors, (Wiley, England, 2005).
- [2] H. Wang, T. Taychatanapat, A. Hsu, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, and T. Palacios, "BN/graphene/BN transistors for RF applications," *IEEE Electron Device Lett.* 32, 1209 (2011).
- [3] E. K. Sichel, R. E. Miller, M. S. Abrahams, and C. J. Buiocchi, "Heat capacity and thermal conductivity of hexagonal pyrolytic Boron Nitride," *Phys. Rev. B* 13, 4607 (1976).
- [4] R. Wills, "Wurtzitic Boron Nitride - a review," *International Journal of High Technology Ceramics* 1, 139 (1985).
- [5] S. N. Mohammad, "Electrical characteristics of thin film cubic Boron Nitride," *Solid-State Electron.* 46, 203 (2002).
- [6] O. Madelung, *Data in Science and Technology - Semiconductors Group IV Elements and III-V Compound*, (Springer-Verlag, 1991).
- [7] M. Karim, D. Cameron, and M. Hashmi, "Characterization of mixed-phase BN thin films deposited by plasma CVD," *Surf. Coat. Technol.* 60, 502 (1993).
- [8] A. Bath, P. J. van der Put, J. Schoonman, and B. Lopley, "Study of Boron Nitride gate insulators grown by low temperature plasma enhanced chemical vapor deposition on InP," *Appl. Surf. Sci.* 39, 135 (1989).
- [9] A. Koukab, A. Bath, and O. Baehr, "Simple method for accurate determination of the mean interface state density of MIS (Metal/BN/InP) structures," *Microelectron. Eng.* 49, 211 (1999).
- [10] J.-C. Gerbedoen, A. Soltani, M. Mattalah, M. Moreau, P. Thevenin, and J.-C. D. Jaeger, "AlGaIn/GaMISHEMT with h-BN as gate dielectric," *Diamond Relat. Mater.* 18, 1039 (2009).
- [11] T. Q. Nguyen, H.-A. Shih, M. Kudo, and T. Suzuki, "Fabrication and characterization of BN/AlGaIn/GaN metal-insulator-semiconductor heterojunction field-effect transistors with sputtering-deposited BN gate dielectric," *Phys. Status Solidi C* 10, 1401 (2013).
- [12] Y.-N. Xu and W. Y. Ching, "Calculation of ground-state and optical properties of Boron Nitrides in the hexagonal, cubic, and wurtzite structures," *Phys. Rev. B* 44, 7787 (1991).
- [13] N. E. Christensen and I. Gorczyca, "Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure," *Phys. Rev. B* 50, 4397 (1994).
- [14] J. Furthmüller, J. Hafner, and G. Kresse, "Ab initio calculation of the structural and electronic properties of Carbon and Boron Nitride using ultrasoft pseudopotentials," *Phys. Rev. B* 50, 15606 (1994).
- [15] G. Kern, G. Kresse, and J. Hafner, "Ab initio calculation of the lattice dynamics and phase diagram of Boron Nitride," *Phys. Rev. B* 59, 8551 (1999).
- [16] R. Ahmed, F. e Aleem, S. J. Hashemifar, and H. Akbarzadeh, "First principles study of structural and electronic properties of different phases of Boron Nitride," *Physica B* 400, 297 (2007).
- [17] C. E. Dreyer, J. L. Lyons, A. Janotti, and C. G. V. de Walle, "Band alignments and polarization properties of BN polymorphs," *Appl. Phys. Express* 7, 031001 (2014).
- [18] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/BN/index.html>, (10-08-2014).
- [19] S.-P. Gao, "Cubic, wurtzite, and 4h-BN band structures calculated using GW methods and maximally localized wannier functions interpolation," *Comput. Mater. Sci.* 61, 266 (2012).
- [20] D. A. Evans, A. G. McGlynn, B. M. Towson, M. Gunn, D. Jones, T. E. Jenkins, R. Winter, and N. R. J. Poolton, "Determination of the optical band-gap energy of cubic and hexagonal Boron Nitride using luminescence excitation spectroscopy," *J. Phys. Condens. Matter* 20, 075233 (2008).

CALCULATING ELECTRONIC PROPERTIES OF BORON NITRIDE POLYMORPHS BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Abstract: In this study, based on the density functional theory, we have investigated the electronic properties of Boron Nitride (BN) polymorphs, including white-graphite (h-), wurtzite (w-) and zinblend (c-) BN. The band structures, energy gaps, and the total density of states of the crystal structures were examined and calculated. To achieve the research aim, we used local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) operations which were supported in the software Material Studio. The calculation results show that h-BN, w-BN and c-BN have indirect energy gaps with their widths of ~4,4 eV, ~5,4 eV and ~4,8 eV respectively, which are well consistent with previous theoretical reports. However, the widths of the energy gaps have smaller values compared to experimental ones, which is attributed to LDA and GGA operations.

Key words: Boron Nitride; h-BN; w-BN; c-BN; electronic properties; energy gap.