

УДК 538.915

ДЕФЕКТЫ В h -BN: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ

© 2024 г. Р. М. Латыпов^{а, *}, С. А. Созыкин^б, В. П. Бескачко^а

^аЛаборатория “Квантовая инженерия света”, Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет), Челябинск, 454080 Россия

^бКафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет), Челябинск, 454080 Россия

*e-mail: latypovrm@susu.ru

Поступила в редакцию 29.05.2023 г.

После доработки 10.06.2023 г.

Принята к публикации 10.06.2023 г.

Методами моделирования из первых принципов исследовано влияние размерных эффектов на свойства монослоя гексагонального нитрида бора (h -BN), содержащего дефекты типа $C_B V_N$, $N_B V_N$, и $O_B O_B V_N$. Они потенциально способны генерировать одиночные фотоны в устройствах квантовой оптики и информатики. Под размерными эффектами здесь понимают зависимость свойств изучаемой модели от размеров моделируемого фрагмента 2D структуры при периодических граничных условиях. Физически это означает зависимость свойств монослоя от расстояния между дефектами. Такая зависимость позволяет судить о том, насколько сильно дефекты взаимодействуют друг с другом и взаимодействуют ли вообще. Для технических приложений важны характеристики зонной структуры (ширина запрещенной зоны, спектр и плотность индуцированных дефектом электронных состояний в запрещенной зоне) и атомной структуры дефекта (энергия образования дефектов, геометрия в равновесной конфигурации), формирующие эту зонную картину. В настоящей работе эти свойства изучены в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базисов атомноподобных функций (пакет SIESTA) и плоских волн (пакет VASP). Полученные результаты согласуются друг с другом. Установлено, что при расстоянии между дефектами в 10 параметров элементарной ячейки их можно считать невзаимодействующими.

Ключевые слова: гексагональный нитрид бора, моделирование из первых принципов, дефекты, зонная структура, размерный эффект, энергия образования дефекта.

DOI: 10.31857/S1028096024010115, EDN: DIWNAD

ВВЕДЕНИЕ

Одной из ключевых проблем бурно развивающейся квантовой фотоники является создание стабильных, производительных источников одиночных фотонов. Большие надежды на создание таких источников стали возлагать на двумерные слоистые (ван-дер-ваальсовы) материалы, после того как в них была обнаружена способность к генерации однофотонного излучения [1–3]. Благодаря ряду уникальных оптических, электронных и других свойств этих материалов [4] открылись возможности создания в них источников одиночных фотонов, интегрированных с периферийными структурами интегральных схем – резонаторами [5, 6] и волноводами [7, 8].

Сейчас мало кто сомневается в том, что генерация одиночных фотонов в этих материалах связана с точечными дефектами и их комплексами, несмотря на то что атомная и электронная структуры этих дефектов до конца не изучены [9].

Гексагональный нитрид бора (h -BN) выделяется из более чем сотни ван-дер-ваальсовых систем способностью генерировать однофотонное излучение при комнатной температуре [3]. Этот материал имеет графеноподобную структуру, но в отличие от графена является диэлектриком с шириной запрещенной зоны порядка 6.0 эВ [10]. Благодаря этому в нем становится возможной генерация фотонов в широком диапазоне значений энергии: от 4.1 эВ (ультрафиолет) [11] до 1.6–2.2 эВ (видимый диапазон) [12–14].

В поисках дефектных структур, способных сыграть роль источников одиночных фотонов, большое значение имеют методы компьютерного моделирования из первых принципов, позволяющие если не найти эти структуры, то отсеять структуры, явно непригодные для этой роли. За последнее время таким способом были исследованы собственные точечные дефекты и их комплексы [15, 16], примеси углерода и их комплексы [17–20], а также примеси кислорода, водорода [15] и кремния [21]. Анализ этих данных показал, что наиболее вероятными источниками одиночных фотонов являются дефекты $C_B V_N$, $N_B V_N$ и $O_B O_B V_N$ [22] (запись $C_B V_N$ означает, что этот дефект получается заменой атома бора (B) на атом углерода (C) и атома азота (N) на вакансию (V); по тем же правилам именуются и оставшиеся дефекты).

Вычислительная сложность методов моделирования из первых принципов оценивается как $O(N^3)$ или выше, где N – число атомов в модели. Для пользователей, имеющих доступ только к не передовой вычислительной технике, верхняя граница числа атомов в модели находится на уровне двух–трех сотен атомов. Судя по публикациям, таких пользователей подавляющее большинство. Изучение моделей с $N \sim 10^3$ возможно на топовых вычислителях, но и в этом случае в 2D структурах на границе модели будет располагаться примерно 10% атомов, и сама граница будет представлять собой один большой дефект вдобавок к тем, которые подлежат исследованию. При моделировании протяженных структур от этого недостатка можно избавиться, вводя на границе модели периодические граничные условия. Однако этот подход имеет свои последствия в виде размерных эффектов иного рода: фактически будет моделироваться бесконечно большая периодическая структура, покрытая решеткой дефектов с постоянными решетки, равными размерам расчетной ячейки в соответствующих направлениях. Здесь под размерными эффектами понимают зависимость свойств изучаемой модели от размеров этой ячейки, или, что то же самое, от расстояний между дефектами. Очевидно, что такой подход имеет и свои преимущества, поскольку позволяет судить о том, насколько сильно дефекты взаимодействуют друг с другом и взаимодействуют ли вообще. Для разных целей нужны как независимые источники одиночных фотонов, так и связанные друг с другом, испускающие фотоны один за другим в некоторой последовательности или все сразу.

В настоящей работе не стоит цель описать свойства указанных выше дефектов как источников одиночных фотонов с необходимой для этого степенью точности, да и используемые методы моделирования в рамках теории функционала электронной плотности вряд ли способны на это [23]. Следует выяснить характер изменения этих свойств в зависимости от расстояния между дефектами и оценить, до какой степени можно заселить лист h -BN дефектами, чтобы они работали как независимые источники одиночных фотонов.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Моделирование проводилось в рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в пакетах SIESTA [24] и VASP [25] в приближении обобщенных градиентов (GGA) для обменно-корреляционного функционала с учетом спиновой поляризации. Базис плоских волн обрывался на энергии $E_{\text{cutoff}} = 600$ эВ, в SIESTA использовался базис DZP атомно-подобных функций. Обратное пространство было покрыто сеткой $8 \times 8 \times 1$ из k -точек для моделирования элементарной ячейки h -BN. Для суперъячеек использовали сетку обратного пространства аналогичной плотности. Расчетные ячейки (суперъячейки) получали трансляцией элементарной ячейки h -BN с параметрами $a = 2.515$ и $c = 25$ Å при общепринятых векторах трансляции для гексагональных структур. Параметр a является равновесным в обоих пакетах. Критерием достаточности параметра c для VASP было изменение полной энергии системы менее чем на 10^{-5} эВ при увеличении параметра на 1 Å. В случае VASP расчетная ячейка целиком заполняется плоскими волнами, что увеличивает вычислительную сложность, поэтому важно определить минимально возможный параметр c для моделирования листа h -BN. В случае SIESTA из-за атомноподобного базиса такой проблемы нет, поэтому $c = 90$ Å. Для выявления размерных эффектов рассматривали суперъячейки различных размеров – от $n \times n = 3 \times 3$ (18 атомов) до $n \times n = 14 \times 14$ (392 атома), где n – число элементарных ячеек в суперъячейке. Таким образом, расстояние между дефектами при моделировании суперъячейки $n \times n$ составляет na . Например, в случае модели 3×3 оно составляет $3a = 7.55$ Å. Внутри суперъячеек помещали один из дефектов типа $C_B V_N$ (комплекс из атома бора, замещенного атомом

углерода, и вакансии азота), $N_B V_N$ (комплекс из “антиузла” и вакансии азота), и $O_B O_B V_N$ (комплекс из атома бора, дважды замещенного атомом кислорода, и вакансии азота). Стартовые варианты геометрии суперъячеек с дефектами получали из оптимизированных суперъячеек листа *h*-BN замещением атома(ов) бора соответствующим(и) атомом(ами) и удалением атома азота для формирования вакансии V_N . Подготовку входных файлов, рисунков атомных и зонных структур, предварительную и постобработку результатов осуществляли с использованием графического интерфейса GUI4dft (Graphical User Interface for Density Functional Theory) [26].

Энергию образования дефектов вычисляли по формуле:

$$E_f[D] = E_{\text{tot}}[D] - E_{\text{tot}}[hBN] - \sum_i m_i E_i,$$

где $E_{\text{tot}}[D]$ — полная энергия суперъячейки, содержащей дефект D , $E_{\text{tot}}[hBN]$ — полная энергия бездефектной суперъячейки, m_i — число атомов i -го сорта, добавляемых ($m_i > 0$) или удаляемых ($m_i < 0$) при создании дефекта, а E_i — полная энергия изолированного атома i -го сорта, т.е. находящегося в газовой фазе. Возможны и другие сценарии образования дефектов, ведущие, возможно, к несколько иным оценкам $E_f[D]$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчетов атомной структуры и электронных свойств бездефектного листа *h*-BN, полученные с использованием базисов атомноподобных орбиталей (SIESTA) и плоских волн (VASP), полностью согласуются друг с другом качественно и незначительно отличаются количественно: средняя длина связей B–N составила 1.45 Å в обоих случаях, а ширина запрещенной зоны равна 4.6 эВ (SIESTA) и 4.5 эВ (VASP), тогда как ее экспериментальное значение составляет 5.995 эВ [10]. Это расхождение с опытом на 25% ожидаемо и является следствием использования приближения GGA для описания обменно-корреляционных эффектов [27].

Оптимизированные варианты геометрии рассматриваемых дефектов представлены на рис. 1. Атомы пронумерованы для удобства рассуждений. Из-за вакансии в позиции азота образуется пятиугольник, у которого длина ребра B_5-B_6 сокращается по сравнению с тем же расстоянием в бездефектном *h*-BN между вершинами шестиугольников на 18 и 22% в случаях дефектов

$C_B V_N$ и $N_B V_N$ соответственно. В дефекте $O_B O_B V_N$ расстояние O_5-O_6 между теми же узлами, занятыми атомом кислорода, изменяется незначительно, на 2%. В первом окружении дефекта $C_B V_N$ деформация длин связей B–N не превышает 1%, за исключением связей типа 4–5, которые увеличиваются на 4%, что ожидаемо, поскольку они ведут к пятиугольнику. Атомы на связи 3–4 на рисунке смещаются относительно друг друга в горизонтальном направлении — связь немного разворачивается. Длина связи C–B типа 1–2 составила 1.37 Å. В случае дефекта $N_B V_N$ деформация длин связей B–N в первом окружении не превышает 1.5%, однако смещение атомов относительно друг друга в горизонтальном (на рисунке) направлении наблюдается вплоть до 5 Å от центра дефекта, что можно заметить только, начиная с моделей размером 6×6. Длины связей 4–5 и 1–2 аналогичны наблюдаемым в дефекте $C_B V_N$. В случае дефекта $O_B O_B V_N$ деформация длин связей B–N в первом окружении также не превышает 1.5%. Размерный эффект для длин связей в первом окружении у всех дефектов проявляется вплоть до моделей размером 8×8, а затем эти величины не изменяются с точностью 0.001 Å. Исключение составляют связи B_5-B_6 в дефектах $C_B V_N$ и $N_B V_N$, где разница длин этих связей составляет 0.02 и 0.01 Å для моделей 8×8 и 14×14 соответственно.

Зонная структура бездефектного листа *h*-BN представлена на рис. 2а. Запрещенная

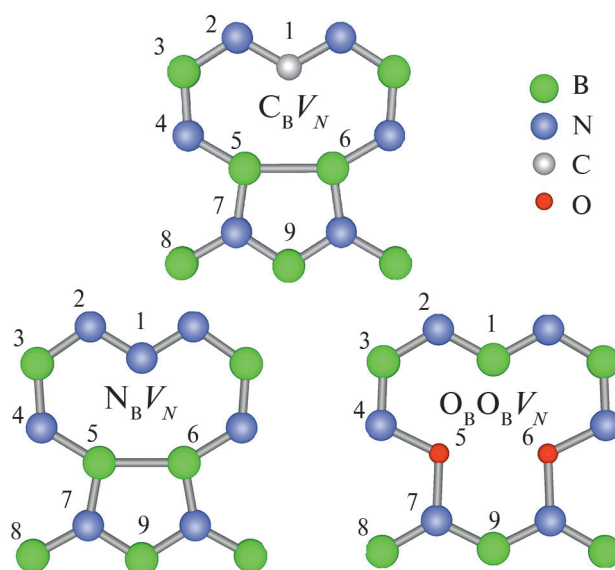


Рис. 1. Равновесные варианты геометрии исследуемых дефектов.

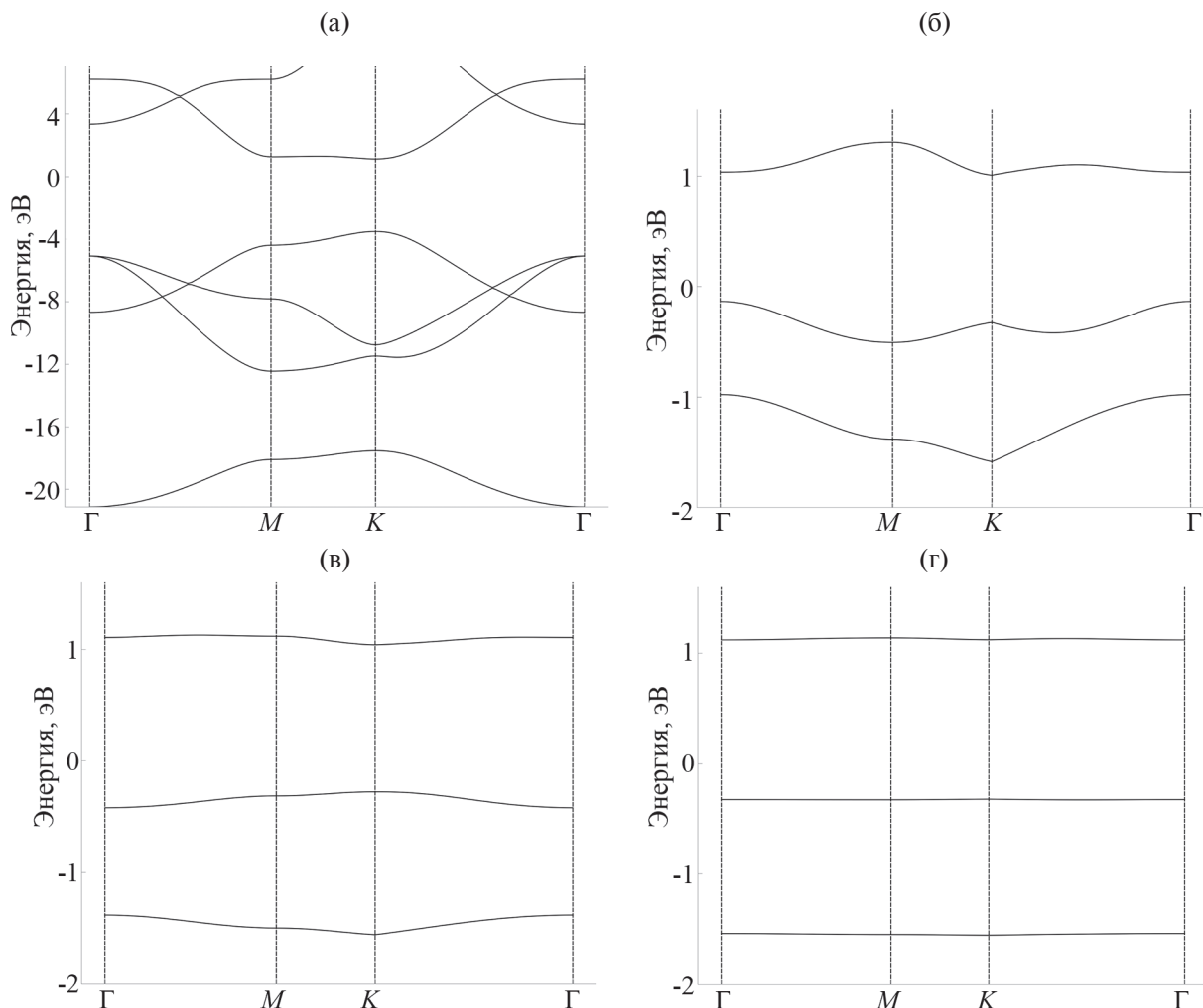


Рис. 2. Зонные структуры элементарной ячейки h -BN (а) и $C_B V_N$ при различных размерах модели: 3×3 (б); 4×4 (в); 6×6 (г). Спин вверх, SIESTA. Энергия отсчитывается от уровня Ферми.

зона располагается в интервале от -3 до 1.6 эВ (относительно уровня Ферми). Влияние размерного эффекта на электронную структуру листа h -BN с дефектом $C_B V_N$ продемонстрировано на рис. 2б–г, где показаны зоны, индуцированные дефектом внутри зонной щели бездефектного h -BN. В присутствии дефекта возникают три дополнительных уровня со спином “вверх” и два со спином “вниз”. Магнитный момент системы равен двум магнетонам Бора. Дефект $N_B V_N$ создает три, а дефект $O_B O_B V_N$ — четыре дополнительных уровня со спинами вверх и вниз, магнитные моменты этих систем равны единице. При увеличении размеров модели ширина дополнительных уровней, оцениваемая как разница между максимальным и минимальным значениями функции $E(\mathbf{k})$ в этой зоне, сужается при увеличении размера суперъячейки до ~ 1 мэВ в случае суперъячейки 6×6 и далее не изменяется.

Заметим, что 1 мэВ — это (оптимистическая) оценка погрешности метода при расчете энергии.

Интегральной характеристикой всех изменений в структуре, происходящих при возникновении дефекта, является энергия его образования. Зависимость этой энергии от размера модели (количества атомов в модели) представлена на рис. 3а, б, в для дефектов $C_B V_N$, $N_B V_N$ и $O_B O_B V_N$ соответственно. Расчеты были выполнены с использованием пакетов SIESTA и VASP. В отличие от результатов, полученных с помощью пакета SIESTA, результаты, полученные с использованием пакета VASP, вполне соответствуют ожиданиям существования непрерывной, гладкой и монотонной зависимости энергии образования дефектов от расстояния между ними. Если отвлечься от некоторых “выбросов” неизвестного пока происхождения на той же зависимости, предсказываемой

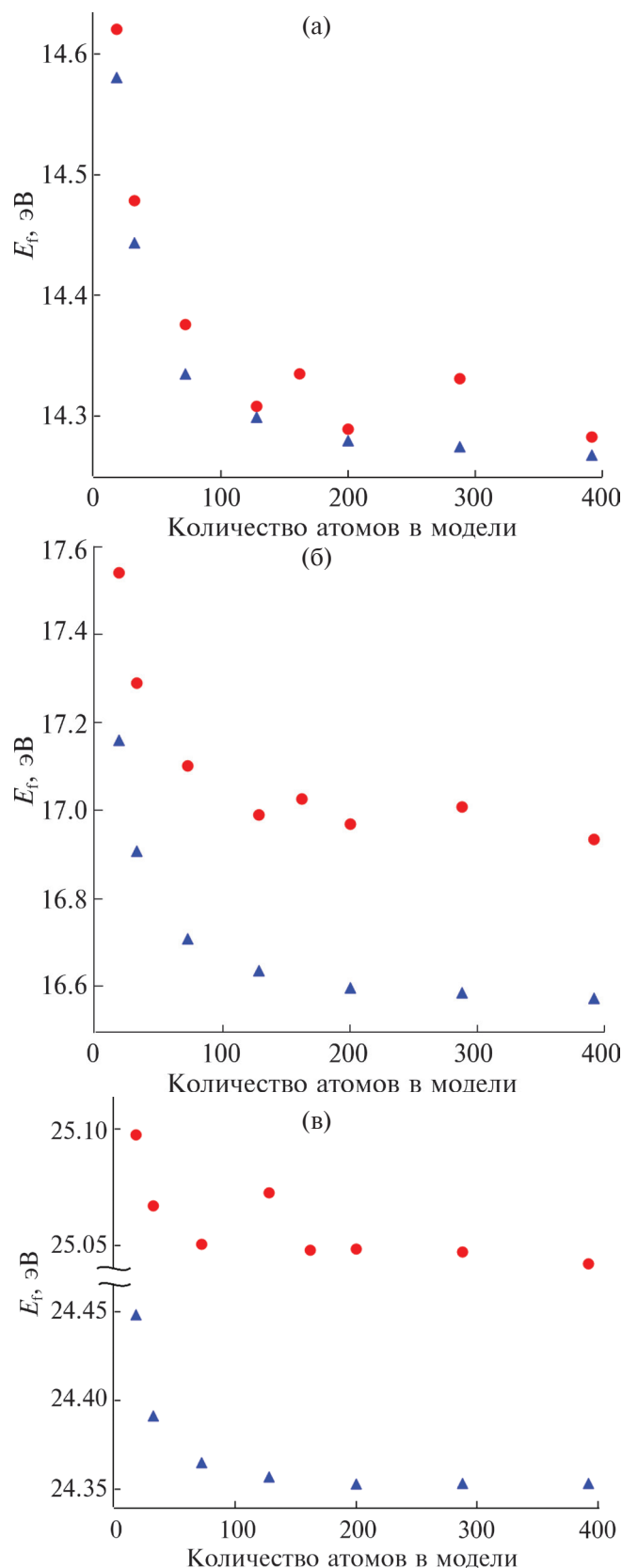


Рис. 3. Зависимость энергии образования дефекта $C_B V_N$ (а), $N_B V_N$ (б) и $O_B O_B V_N$ (в) от количества атомов в модели: кружками отмечены результаты SIESTA, треугольниками – VASP.

пакетом SIESTA, то качественно предсказания обоих пакетов вполне согласуются друг с другом. Во всяком случае они согласуются при ответе на вопрос, каков должен быть размер модели, чтобы дефекты перестали взаимодействовать друг с другом. Ответ: это справедливо для моделей размером не менее 10×10 элементарных ячеек и числом атомов не меньше 200. Отметим, что эффект взаимодействия дефектов, т.е. разница между значениями энергии их образования в малых (3×3) и больших (14×14) моделях, составляет 0.3, 0.6 и 0.1 эВ для дефектов $C_B V_N$, $N_B V_N$ и $O_B O_B V_N$ соответственно. Это величина, заметная по всем меркам. Она не может быть отнесена к погрешностям расчета, хотя это и так видно на рис. 3, особенно в результате расчетов с помощью пакета VASP. Энергия образования “невзаимодействующих” дефектов (модель 14×14) представлена в табл. 1. В случае дефектов $C_B V_N$ предсказания разных пакетов согласуются практически точно, в остальных случаях имеется разница в третьем знаке. Значения энергии находятся в отношении $E_f[C_B V_N] < E_f[N_B V_N] < E_f[O_B O_B V_N]$, что согласуется с результатами других исследований [15, 19]. Однако численные значения энергии дефектообразования отличаются от представленных в работе, возможно, из-за причин, упомянутых выше.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты выполненных расчетов можно суммировать следующим образом. Изученные размерные эффекты наблюдаемы, по крайней мере, в численных экспериментах. Они проявляются во всех рассмотренных свойствах дефектов: геометрических (длины связей и их ориентация), термодинамических (энергия образования), электронных (характер примесных зон и ширина уровней). Радиус взаимодействия дефектов (расстояние, начиная с которого дефекты становятся независимыми) зависит от наблюдаемого свойства и составляет $6a$, если речь идет

Таблица 1. Энергия образования дефектов $C_B V_N$, $N_B V_N$ и $O_B O_B V_N$ при $n = 14$

Дефект	E_f , эВ	
	SIESTA	VASP
$C_B V_N$	14.28	14.27
$N_B V_N$	16.93	16.57
$O_B O_B V_N$	25.04	24.35

о ширине примесного уровня, $8a$ для геометрии дефекта и $10a$ для энергии образования. Надежность представленных результатов обеспечивают согласующиеся предсказания, сделанные с помощью двух разных вычислительных пакетов SIESTA и VASP. Полученные в работе результаты могут служить ориентирами при проектировании устройств, включающих элементы, действие которых основано на свойствах дефектов, например, источников одиночных фотонов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа Латыпова Р.М. и Бескачко В.П. поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 075-15-2022-1116).

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Koperski M., Nogajewski K., Arora A., Cherkez V., Mallet P., Veuillen J.Y., Potemski M. // *Nat. Nanotech.* 2015. V. 10. № 6. P. 503. <https://doi.org/10.1038/nnano.2015.67>
2. Srivastava A., Sidler M., Allain A.V., Lembke D.S., Kis A., Imamoglu A. // *Nat. Nanotech.* 2015. V. 10. № 6. P. 491. <https://doi.org/10.1038/nnano.2015.60>
3. Tran T.T., Bray K., Ford M.J., Toth M., Aharonovich I. // *Nat. Nanotech.* 2016. V. 11. № 1. P. 37. <https://doi.org/10.1038/nnano.2015.242>
4. Wang G., Chernikov A., Glazov M.M., Heinz T.F., Marie X., Amand T., Urbaschek B. // *Rev. Mod. Phys.* 2018. V. 90. № 2. P. 021001. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.90.021001>
5. Luo Y., Shepard G.D., Ardelean J.V., Rhodes D.A., Kim B., Barmak K., Strauf S. // *Nat. Nanotech.* 2018. V. 13. № 12. P. 1137. <https://doi.org/10.1038/s41565-018-0275-z>
6. Flatten L.C., Weng L., Branny A., Johnson S., Dolan P.R., Trichet A.A.P., Smith J.M. // *Appl. Phys. Lett.* 2018. V. 112. № 19. P. 191105. <https://doi.org/10.1063/1.5026779>
7. White D., Branny A., Chapman R.J., Picard R., Brotons-Gisbert M., Boes A., Gerardot B.D. // *Opt. Mat. Exp.* 2019. V. 9. № 2. P. 441. <https://doi.org/10.1364/OME.9.000441>
8. Kim S., Duong N.M.H., Nguyen M., Lu, T.J., Kianiinia M., Mendelson N., Aharonovich I. // *Adv. Opt. Mat.* V. 7. № 23. P. 1901132. <https://doi.org/10.1002/adom.201901132>
9. Turunen M., Brotons-Gisbert M., Dai Y., Wang Y., Scerri E., Bonato C., Jöns D.K., Sun Z., Gerardot B.D. // *Nat. Rev. Phys.* 2022. V. 4. № 4. P. 219. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00408-0>
10. Cassabois G., Valvin P., Gil B. // *Nat. Photonics.* 2016. V. 10. № 4. P. 262. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2015.277>
11. Watanabe K., Taniguchi T., Kanda H. // *Nat. Mater.* 2004. V. 3. № 6. P. 404. <https://doi.org/10.1038/nmat1134>
12. Exarhos A.L., Hopper D.A., Grote R.R., Alkauskas A., Bassett L.C. // *ACS Nano.* 2017. V. 11. № 3. P. 3328. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b00665>
13. Chejanovsky N., Rezai M., Paolucci F., Kim Y., Rendler T., Rouabeh W., Wrachtrup J. // *Nano Lett.* 2016. V. 16. № 11. P. 7037. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b03268>
14. Jungwirth N.R., Fuchs G.D. // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 119. № 5. P. 057401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.057401>
15. Weston L., Wickramaratne D., Mackoito M., Alkauskas A., Van de Walle C.G. // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 97. № 21. P. 214104. Doi: 10.1103/PhysRevB.97.214104
16. Abdi M., Chou J.P., Gali A., Plenio M.B. // *ACS Phot.* 2018. V. 5. № 5. P. 1967. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.7b01442>
17. Jara C., Rauch T., Botti S., Marques M.A., Norambuena A., Coto R., Munoz F. // *J. Phys. Chem. A.* 2021. V. 125. № 6. P. 1325. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.0c07339>
18. Cheng G.D., Zhang Y.G., Yan L., Huang H.F., Huang Q., Song Y.X., Tang Z. // *Comput. Mater. Sci.* 2017. V. 129. P. 247. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.12.032>
19. Huang P., Grzeszczyk M., Vaklinova K., Watanabe K., Taniguchi T., Novoselov K. S., Koperski M. // *Phys. Rev. B.* 2022 V. 106. № 1. P. 014107. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.014107>
20. Mackoito-Sinkevičienė M., Maciaszek M., Van de Walle C.G., Alkauskas A. // *Appl. Phys. Lett.* 2019. V. 115. № 21. P. 212101. <https://doi.org/10.1063/1.5124153>
21. Ahmadpour Monazam M.R., Ludacka U., Komsa H.P., Kotakoski J. // *App. Phys. Lett.* 2019. V. 115. № 7. P. 071604. <https://doi.org/10.1063/1.5112375>
22. Tawfik S.A., Ali S., Fronzi M., Kianinia M., Trong T., Stampfl C., Aharonovich I., Toth M., Ford M.J. // *Nanoscale.* 2017. V. 9. № 36. P. 13575. <https://doi.org/10.1039/C7NR04270A>
23. Philbin J.P., Narang P. // *PRX Quantum.* 2021. V. 2. № 3. P. 030102. <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.2.030102>
24. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D. // *J. Phys.: Cond. Matter.* 2002. V. 14. № 11. P. 2745. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/302>
25. Kresse G., Furthmüller J. // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. № 16. P. 11169. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
26. Sozykin S.A. // *Comput. Phys. Commun.* 2021. V. 262. P. 107843. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.107843>
27. Morales-García Á., Valero R., Illas F. // *J. Phys. Chem. C.* 2017. V. 121. № 34. P. 18862. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b07421>

Defects in h -BN: Computer Simulation of Size Effects

R. M. Latypov^{1, *}, S. A. Sozykin², V. P. Beskachko¹

¹ *Laboratory of Quantum Engineering of Light, South Ural State University (national research university), Chelyabinsk, 454080 Russia*

² *Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University (national research university), Chelyabinsk, 454080 Russia*

**e-mail: latypovrm@susu.ru*

The influence of size effects on the properties of a hexagonal boron nitride (h -BN) monolayer containing $C_B V_N$, $N_B V_N$, and $O_B O_B V_N$ defects has been studied by first principles methods. These defects are potentially capable of generating single photons in quantum optics and quantum information devices. Size effects here mean the dependence of the studied model properties on the simulated fragment size of the 2D structure under periodic boundary conditions. Physically, this means that the properties of a monolayer depend on the distance between defects. This dependence allows us to judge how strongly the defects interact with each other and whether they interact at all. For technical applications, the characteristics of the band structure (band gap, spectrum and density of electron states induced by the defect in the band gap) and the atomic structure of the defect (defect formation energy, geometry in the equilibrium configuration), which form this band pattern, are important. In this work, these properties are studied by using the density functional theory with the basis of atom-like functions (SIESTA package) and plane waves (VASP package). The results obtained using both packages are consistent with each other. It has been established that the defects can be considered non-interacting, when the distance between them is ten unit cell parameters.

Keywords: hexagonal boron nitride, first principles calculation, defects, band structure, size effect, defect formation energy.